

现代科学
丛书



山西科学技术出版社

喀兴林
编著

量子力学

与原子世界



·现代科学理论丛书·

量子力学与原子世界

喀兴林 编著

山西科学技术出版社

图书在版编目(CIP)数据

量子力学与原子世界 / 喀兴林编著. - 太原: 山西科学技术出版社, 2000.2

(现代科学理论丛书)

ISBN 7-5377-1595-5

I. 量… II. 喀… III. ①量子力学②原子结构 IV.041
3.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (1999) 第 62623 号

·现代科学理论丛书·

量子力学与原子世界

喀兴林 著

*

山西科学技术出版社出版 (太原建设南路 15 号)

山西省新华书店经销 山西人民印刷厂印刷

*

开本: 850×1168 1/32 印张: 8 字数: 192 千字

2000 年 2 月第 1 版 2000 年 2 月山西第 1 次印刷

印数: 1—3 000 册

*

ISBN 7-5377-1595-5

0·63 定价: 11.80 元

如发现印、装质量问题, 影响阅读, 请与印刷厂联系调换。

前 言

本书将告诉你什么是量子力学。

本书是“现代科学理论丛书”中的一本。相对论和量子力学是 20 世纪现代物理学的两项重要理论，被称为现代物理的两大支柱。人们通过量子力学认识了微观世界，并且驾驭了微观世界，为 20 世纪的人类文明做出了很大贡献。

量子力学创立于 1925 年，短短几年之内，量子力学已发展成为一项严谨而系统性很强的理论，并且经大量实验的验证，证明是关于微观世界的正确的理论。此后，量子力学就作为一项成熟而可靠的物理理论活跃在人们科研和创造的舞台上，帮助人类了解已有的物质的性能并造出大量具有各种性能的新物质、新材料和新器件，大大增进了人类的物质文明。

有人认为，理论总是深奥难懂的，特别是有那么多数学公式的物理理论，更是如此。这种看法也不尽然。我不太懂相对论，也许相对论真的是深奥难懂的。至于量子力学则一点也不深奥，它十分实在，十分具体。难懂倒是有一点难懂。

量子力学难懂的原因有两条。第一是因为在微观世界中有很多事情同我们的宏观世界不同，因而同人们的生活经验和思想方法格格不入；第二是由于量子力学是一门定量的物理理论，表述规律、说明现象和进行逻辑推理，都离不开数学公式，数学公式一多，就显得难懂了。

目前，知道什么是量子力学的人还不太多。就连专门学物理的大学物理系的学生，也只是到了三年级才较系统地学习量子力

学课程。这一点太落后于时代的要求了。量子力学已经诞生七十多年了，在这七十多年中它为人类做了那么多的贡献，人类现在已经在量子力学和别的科学理论的帮助下进入高科技时代，可是人们又对量子力学那么陌生，这实在是不应该的。

我们已经进入 21 世纪。在 21 世纪里，不仅中学生应当知道什么是量子力学，知道量子力学中的几个主要概念，就是社会各界人士，不论是学理工科的还是学文科的，也都应当不同程度地知道一点什么是量子力学，量子力学有什么用和已经起了哪些作用。

本书就是为此目的而编写的。书中通过微观世界中与人类关系最密切的成员——原子和分子，通俗而准确地讲述了什么是量子力学以及量子力学在原子世界中起着什么样的作用。书中不可避免地要有一些数字公式和推演，我们尽量用曲线或图形给以具体的显示和说明。对于要求较高的读者，在不少节的后面还附有数学补充，对正文中没有讲透的地方加以补充。对于只想了解一下量子力学这个理论的概貌的读者，即使他只看正文，而且正文中的数学公式大部分都跳过不看，对量子力学也会获得一个概略而完整的印象。

我们开门见山，直接向读者展示量子力学本身，避免经院式的讲法。经院式的讲法对每件事都要讲清它的来龙去脉，讲清对它的认识过程和认识时所走过的弯路。这样做不仅费时，而且还需要许多这样那样的预备知识。这也就是以前的大学物理系到了三年级才能向学生讲授量子力学的原因。因此，本书也是改变经院式讲法的一种尝试。

在高科技的 21 世纪到来之际，作者希望本书能为各界广大读者了解量子力学理论起一点微薄的作用。

喀兴林

策 划 焦团平
 谢一兵
责任编辑 阎文凯
封面设计 朱 珠

作者简介

喀兴林 蒙古族人，祖籍甘肃敦煌一带（现肃北蒙古族自治县），1929年6月生于吉林市，北京师范大学教授。

1951年毕业于北京师范大学物理系本科，留校任教，毕生从事理论物理，特别是量子力学的教学工作。

任高等院校量子力学研究会名誉理事长，中国物理学会物理教学委员会副主任委员，名词委员会委员和《大学物理》杂志副主编。

代表作《高等量子力学》高等教育出版社1999年出版。

目 录

一 什么是量子力学	(1)
量子力学	(1)
原子的能级	(3)
电子的波性	(3)
殊途同归	(4)
量子力学和经典力学	(4)
量子力学和原子世界	(5)
二 微观世界	(6)
原子世界	(6)
高能微观世界	(8)
三 是波，还是粒子	(10)
肉眼能看到的微观粒子	(10)
光的波粒二象性	(10)
电子也有波性吗	(18)
量子力学的诞生	(21)
四 薛定谔方程	(23)
给自由电子找一个波方程	(23)
波函数	(26)

波函数的物理意义	(28)
五 谐振子——微观的振动	(31)
环境	(31)
薛定谔方程	(32)
化简	(33)
波函数	(34)
对于能量量子化的说明	(39)
量子理论的诞生	(44)
本节数学补充	(44)
六 算符进入了量子力学	(49)
位置平均值	(49)
动量平均值	(50)
算符来了	(53)
对易关系	(54)
其他物理量的算符	(55)
本征函数和本征值	(56)
本节数学补充	(58)
七 角动量量子化了	(60)
轨道角动量算符	(60)
本征函数和本征值	(63)
轨道角动量的量子化	(66)
本征函数的空间图像	(67)
叠加原理的作用	(72)
电子的自旋	(75)
本节数学补充	(77)

1. 角动量的三个分量互相不可对易的证明	(77)
2. $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 的递推公式	(77)
3. 自旋算符反对易关系 (7.16) 式的证明	(78)
4. $\hat{S}_x$ 、 $\hat{S}_y$ 对自旋态 $X_{\pm}$ 的作用	(78)
 八 氢原子	(81)
氢原子的构成	(81)
氢原子的物理模型	(82)
薛定谔方程	(83)
氢原子的不同状态	(85)
氢原子的能级	(87)
氢光谱	(90)
径向函数的图线	(93)
电子的全波函数	(96)
类氢原子	(97)
本节数学补充	(97)
1. (8.5) 式的证明	(97)
2. 径向函数的递推公式	(98)
 九 电子云	(100)
电子概率的空间分布	(101)
电子云在转动	(110)
氢原子的轨道磁矩	(112)
波函数的空间分布	(114)
网格图和等概率线图	(116)
本节数学补充	(120)

十 玻尔理论——历史的回顾	(124)
人们认识氢原子的历程	(124)
玻尔的假设	(126)
氢原子的玻尔模型	(127)
玻尔模型的进一步改进	(129)
玻尔的贡献	(131)
十一 太阳中发现的原子	(134)
粒子全同性原理	(135)
氦原子的波函数	(136)
泡利不相容原理	(139)
氦原子的能级	(140)
氦原子的光谱	(144)
本节数学补充	(145)
十二 原子是怎样构成的	(148)
原子	(148)
原子的构成	(149)
原子组态	(155)
惰性气体	(157)
碱金属原子	(158)
碱金属原子的自旋轨道相互作用	(164)
碱金属原子能级的分裂	(168)
碱金属原子的光谱	(171)
氢原子光谱的精细结构	(173)
玻尔理论对 l 简并解除的解释	(174)
本节数学补充	(175)
1. 壳层填满时电荷分布具有球对称性的证明	(175)

2. $\hat{H}$ 与 $\hat{J}_z$ 对易的证明	(176)
3. $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 对 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 的作用	(176)
4. 表 12.2 的证明	(181)
 十三 原子的家谱	(184)
电子组态与元素的性质	(184)
元素电子组态表	(187)
元素的周期性	(194)
元素周期表	(195)
最早的周期表	(197)
 十四 原子怎样结合成分子	(201)
能量最小原理	(202)
化学键	(202)
离子键	(203)
共价键	(204)
氢分子离子	(205)
系统能量随 r 的变化	(210)
氢分子	(213)
 十五 共价键	(215)
σ 键和 π 键	(217)
双原子分子	(223)
水和氨	(226)
 十六 神奇的碳原子	(229)
杂化状态	(229)
sp^3 杂化态	(230)

sp^2 杂化态	(235)
sp 杂化态	(240)
十七 结束语	(243)

一 什么是量子力学

许多人都曾经设想过，如果有一天，摩擦定律突然发了脾气，不起作用了，地面上将发生什么现象？如果有一天万有引力定律突然发了脾气，不起作用了，那么地面上将发生什么现象？我们也不妨设想一下，如果有一天量子力学突然发了脾气，不起作用了，那么将会发生什么现象？

如果真的量子力学突然不起作用，那么地面上的一切物体，从花草树木到人类，从棉花到最硬的金刚石，包括地球本身，都要解体变成一个个的分子，分子又要解体变成一个个原子，而原子的电子说不定一齐掉到原子核上……

量子力学

量子力学是微观世界的规律，特别是微观世界的成员如何组成宏观世界的规律。有了量子力学，才有我们周围的一切，才有我们人类本身，才有生命。现在人们已经在研究量子生物学了。

当然，量子力学是不会突然不起作用的。量子力学是微观世界的根本规律，正如牛顿定律和库仑定律等等是宏观世界的根本规律一样。量子力学是微观世界中能量不太高的微观粒子，特别是电子所服从的运动规律。不同的原子核和电子构成各种原子，其中有很复杂的规律。几种原子又能构成千百万种形形色色的分子，有很复杂的规律，原子或分子构成各种各样的固体物质，也有很复杂的规律，而这许多复杂的规律统统要受量子力学的支配。所以说量子力学是微观世界中低能量的微观粒子运动的根本

规律。

本书的任务就是讲解什么是量子力学，讲述不同的原子是怎样构成的，而这些原子又怎样结合成分子。从这些具体事例中认识量子力学在其中的支配作用。

量子力学是物理学的一个分支学科。物理学中在 20 世纪创立、发展并得到重要应用的两项重要理论，一个是相对论，一个是量子力学。

如果说天文学是最早发展起来的自然科学，那么物理学则是最早发展起来的定量的科学理论。在 17 世纪末叶，牛顿即已建立力学的定量理论，提出了运动三大定律和万有引力定律，并解决了行星运行问题。此后物理学不断发展，热学、流体力学、声学、光学和电磁学的定量理论相继建立。200 年后，到了 19 世纪末叶，有关宏观世界的运动发展规律的定量理论已经完全建成，这些理论现在被称为经典物理学。

到了 19 世纪末叶，宏观运动的规律该找的都已经找到，经典物理学已经形成一系列有系统的和完整的理论。于是有些物理学家认为：物理学已经到顶了，今后主要是如何运用物理学的问题了。

然而，正当有些物理学家满足于全部物理理论已经基本建成的喜悦时，在 19 世纪末期接连发现了许多现象，如黑体辐射的规律、原子发光的规律、光电效应的规律和原子的放射性等等。这些现象，或者已有的物理理论不能解释，或者虽能解释但理论的结论与实验现象的规律不符。这说明人们已经掌握的物理理论并非物理学的全部理论，还有很广阔的未知领域需要物理学家去探索。

在这一段时期中发现的经典物理不能解释的现象，对量子力学的诞生有直接影响的有两类：一类是原子的离散能级，另一类是电子的波性。

原子的能级

人们在还不知道原子究竟是什么的时候就已经开始研究原子的光谱了。单独一种原子发出的光，与太阳光和烛光有明显的不同。后者所发的光包含各种频率(亦即有各种波长)，在可见光波段通过三棱镜之后便分出红橙黄绿蓝紫等不同颜色，不同颜色的光频率不同(波长也不同)，而且颜色是连续分布的。这就是光谱。我们说太阳光和烛光具有连续光谱，其中各种频率(波长)的光都有。

纯粹原子发出的光与此不同，每一种原子所发的光，只包含特定的若干个频率，用三棱镜分析所得的光谱只在特定位置上有几条亮线，其余的位置全是黑的。而且不同的原子的光谱有明显的不同。1884年瑞士的巴尔末(J.J. Balmer)首先发现了最简单的氢原子的光谱的规律(详见本书第八节)。那时人们还没有发现电子。

原子发光就是放出一份能量；发出不同频率的光，放出的能量不同。人们根据巴尔末所发现的规律和能量守恒定律分析，发现氢原子的能量不是任意的，只能取一系列特定的值，称为能级。氢原子由高能级到低能级的变化是突然发生的(后来称为跃迁)，同时放出一个相应频率的光子。

这一现象是经典物理学无法理解的。在宏观世界，一个物体或系统，它的能量取什么值都是可能的，没有只能取几个特定数值、不能取别的数值的现象。而且在宏观世界中，一切变化都有一个过程，没有绝对突然发生的事情。

电子的波性

1887年发现电子之后，人们一直认为电子是有一定质量、带一定负电荷的一粒一粒的东西。但在20世纪初确定了光不仅有波动性，还具有粒子性(光子)之后(详见本书第三节)，法国物理学家德布罗意(L.V. de Broglie)在1924年提出，光子既然又有波

性又有粒子性,那么我们一直认为是粒子的东西,如电子,是否也会有波性呢?三年之后,果然在实验上证实了这一想法是正确的。实验用一束速度适当的电子流射在晶体上,得到了电子的衍射图样,其情况和X射线(一种高频率、短波长的光)射在晶体上所产生的衍射图样相类似(详见第三节)。电子具有波性,这当然也是经典物理学所无法解释的。

量子力学正是在原子的离散能级和电子的波粒二象性的基础上诞生和发展起来的。

殊途同归

量子力学诞生于1925年末和1926年初,是由两组物理学家相互独立地通过不同途径达到同一结果的。一组以德国的海森伯(W. Heisenberg)和泡利(W. Pauli)为代表,他们主要根据原子的离散能级,希望改造当时的经典力学找到一种新的力学,去解释能级离散的规律。另一组由奥地利人薛定谔(E. Schrödinger)为代表,他主要根据电子的波动性,给这种波找一个波动方程来表示电子运动的规律。结果两组几乎在同时达到了各自的目的。海森伯等人建立了矩阵力学,薛定谔建立了波动力学。但是这两种理论看起来完全不同,看不到有什么联系。他们分别用自己的理论去计算氢原子的能级,结果得到了完全一致的、符合实验的结果。这就是第一个关于微观世界的理论的诞生。

不久之后,薛定谔证明了这两种外貌很不相同的理论实际上是等价的,是同一种物理规律的两种不同的数学表现。又经过英国人狄拉克(P. A. M. Dirac)从理论上的整理加工,成为一门完整的、关于低能量的微观粒子的运动规律,这就是量子力学。

量子力学和经典力学

量子力学和经典力学并不矛盾。当微观粒子质量较大(如质子或整个原子)或能量较大时,量子力学给出的运动规律与经典力学(即牛顿定律)给出的规律是一致的,所以可以说经典力学是

量子力学的一种极限。

一般可以拿氢原子中的电子作标准。如质子的质量比电子大 1 836 倍，所以质子一般的运动用经典力学计算即足够准确，又如电视机显像管中的电子，其能量比氢原子中的电子大数千倍，所以设计显像管时用经典力学计算即可，完全用不着量子力学。

量子力学和原子世界

量子力学起作用的领域是原子世界，即电子在不同的原子核外如何组成各种原子以及不同的原子如何组成种类数不清的分子。可见量子力学是原子物理学、分子物理学和化学的理论基础。另外，由原子或分子组成的晶体，也是量子力学的用武之地，如金属物理学、半导体物理学等都要以量子力学为基础。电脑中的半导体芯片，是半导体物理学的高科技产物，离开了量子力学，它的诞生、设计和研制都是不可能的。所以量子力学支撑着当前最主要的高科技文明。