

高等学校理工科规划教材

量子力学

LIANGZI LIXUE

宋鹤山/主编

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t)$$



大连理工大学出版社
DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY PRESS

高等学校理工科规划教材

量子力学

主编 宋鹤山
主审 衣学喜
编著 周玲 王殿夫 宓东

大连理工大学出版社

© 大连理工大学出版社 2004

图书在版编目(CIP)数据

量子力学 / 宋鹤山主编. — 大连 :— 大连理工大学出版社, 2004.9
ISBN 7-5611-2602-6

I. 量… II. 宋… III. 量子力学 IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 021435 号

大连理工大学出版社出版

地址:大连市凌水河 邮政编码:116024

电话:0411-84708842 传真:0411-84701466 邮购:0411-84707961

E-mail: dulp@dulp.cn URL: http://www.dulp.cn

大连理工印刷有限公司印刷 大连理工大学出版社发行

幅面尺寸:185mm×260mm 印张:13.75 字数:316千字

印数:1~2000

2004年9月第1版

2004年9月第1次印刷

责任编辑:吴孝东

责任校对:扈焕江

封面设计:宋 蕾

定价:20.00元

本书由
大连市人民政府资助出版

**The published book is sponsored
by the Dalian Municipal Government**

前 言

1900年12月14日,德国物理学家 Planck 在柏林召开的德国物理学会年会上宣读了他的“论正常光谱能量分布定律”为题的划时代论文。在这篇论文中,Planck 引进了微观粒子能量的量子化概念,成功解释了黑体辐射问题,从而创立了量子论。利用 Planck 的量子论,经 Einstein、Bohr、de Broglie、Heisenberg、Schrödinger、Born、Dirac 等一批杰出物理学家的努力,在 1925 年到 1928 年间,量子力学便诞生了。量子力学与相对论一起构成近代物理学的两大支柱,量子力学和相对论的诞生,从根本上改变了人们关于时间、空间的传统观念,对物质的运动形式和规律有了崭新的认识。

量子力学自创立以来已取得了巨大的成功。量子力学不仅成功地解释了原子、原子核的结构,固体结构、元素周期表和化学键,超导电性和半导体的性质等,而且促成了现代微电子技术的创立,使人类进入了信息时代,促成了激光技术、新能源、新材料科学的出现。历史上,没有哪一种理论成就曾如此深刻地改变了人类的观念,人类社会的生产与生活。

但是,量子力学从诞生到现在,它的一些概念、原理,特别是像量子态的纠缠这种令人费解的特性困惑了几代人,并在 Einstein、Bohr 等科学巨人之间引起了长期的争论。Einstein、Schrödinger 等人基于量子态的叠加所导致的测量结果的不确定性,始终

认为量子力学理论不完备,而 Bohr Heisenberg 等一批人则坚持认为量子力学的基本原理是完备的和无可置疑的。争论的焦点在于:真实的物理世界是遵从 Einstein 的局域实在论还是 Bohr 主张的非局域性。由于实验技术的局限,直到 20 世纪 60 年代,围绕量子力学这些基本概念的争论还一直停留在哲学思辨上。随着实验技术的发展,人们开始通过实验直接检验和探讨量子态的基本概念和奇妙特性,特别是近 20 年来, Bell 不等式、量子态的纠缠性和非局域性等相继得到实验验证,量子力学有了突破性进展。如今,经几代人的努力,量子力学的完备性越来越清楚地被人们所理解,量子态的纠缠性和非局域性等奇妙特性已成为宝贵的物理资源,开始被人类所利用。量子力学的这些新进展为信息科学的进一步发展提供了新原理、新方法和新途径,导致了新的交叉学科——量子信息学的诞生。

基于这些背景,本书在系统阐述传统量子力学的基本概念和基本原理的同时,把量子态的纠缠性、非局域性等概念引入到量子力学的理论体系中,并介绍量子力学的新进展和量子通讯、量子计算及其物理实现、量子密码、量子测量等量子信息学的基本内容,以更新和丰富量子力学的内容,体现了量子力学的基础性和前沿性的关系。全书力求讲清量子力学的基本概念、基本假设,阐述对称性原理在量子力学中的重要作用和量子力学在数学方法上的特点等。量子力学是高校和科研单位的物理、材料、生命、化学等学科的部分专业本科生、研究生的必修课程之一。考虑到目前高校教学时数受局限的实际情况,本书在保证涵盖量子力学基本内容的前提下,力求删繁就简,讲述深入浅出,数学推导清楚而简洁,以便为广大读者提供好的参考书。本书既可以供高校教师和研究人員参考,也可以作为高校物理类本科生或非物理类相关专业研究生教材,用 64 学时,可授完全部内容。书中各章的练习题供学生做作业时参考,可不作为教学内容。书中习题的解答可参考宋鹤山主编《量子力学习题解》。

周世勋先生所著的《量子力学》是作者学习量子力学的启蒙教材,曾谨言教授所著《量子力学导论》,张永德教授编著的《量子力学》, Hisheng Song 的《Quantum Mechanics》, L. I Schiff 的《Quantum Mechanics》和 Fayyazuddin, Riazuddin 的《Quantum Mechanics》等书是作者学习和理解量子力学的主要参考书。曾谨言、裴寿镛、龙桂鲁等教授所编写的系列著作《量子力学的新进展》, J. Preskill 的《Quantum Information and Computation》和 M. A. Nielsen, I. L. Chuang 的《Quantum Computation and Quantum Information》等著作是作者学习和掌握量子力学新进展和量子信息论的最主要参考书。这些著作作为作者学习和研究量子场论、基本粒子理论和量子信息学等奠定了必要的基础,也为编写本书积累了必要的知识,

借此机会,向这些著作的作者表示诚挚的敬意和谢意。

在本书的编写过程中,大连理工大学物理系的宋昌烈教授、桂元星教授、刘宏亚教授、丛书林教授等参与了一些问题的讨论,提出了宝贵的意见,理论物理研究室的李崇、郭彦青、于长水、陈菁和苗向阳等也为本书的编写付出了大量的心血,作者向他们表示衷心的感谢。

量子力学是整个近代物理学的基础,是能否学好近代物理各类后继课程的关键课程。为了展示量子力学的基本图像,使读者理解量子力学的基本概念,掌握其基本原理和奇妙特性,我们对本书内容的选择与编排,每章例题和习题的选择,都进行了反复的推敲,并在大连理工大学物理系几年来教学实践的基础上完成了本书稿。但量子力学又是一门还在发展和完善的基础理论,也是一门比较难学的课程,在有限的篇幅内,概括出它的全貌,为读者提供满意的参考书,对作者来说是一件很困难的事情,加之作者的学识和水平有限,书中在内容的取舍与编排,基本概念和原理的叙述上不当之处甚至错误在所难免,诚恳希望读者批评与指正。

编著者

于大连理工大学

2004年2月

目 录

第 1 章 经典物理学的“危机”和量子力学的诞生	1
1.1 经典物理学的理论体系及其“危机”	1
1.2 黑体辐射和 Planck 的量子假说	2
1.2.1 热辐射	2
1.2.2 Rayleigh-Jeans 的黑体辐射理论	2
1.2.3 Planck 的量子假说	3
1.3 光电效应和 Einstein 的光量子假说	3
1.3.1 光电效应	3
1.3.2 Einstein 的光量子假说	4
1.4 原子的稳定性和 Bohr 的量子论	4
1.4.1 原子有核模型的困难	4
1.4.2 Bohr 量子论	5
1.5 de Broglie 物质波	6
习 题	7
第 2 章 波函数与 Schrödinger 方程	8
2.1 波函数及其统计诠释	8
2.1.1 波函数的统计诠释	8
2.1.2 波函数的数学性质	9
2.2 平面波与波包	10
2.2.1 平面波	10
2.2.2 波 包	11
2.3 量子态及其表象	13
2.4 量子态的相干叠加性和纠缠性	14
2.4.1 量子态的相干叠加性与量子测量	14
2.4.2 量子态的纠缠性和非局域性	16
2.5 不确定性关系	16
2.6 Schrödinger 方程	18
2.6.1 单粒子在坐标表象中的 Schrödinger 方程	19
2.6.2 动量表象中的 Schrödinger 方程	21
2.6.3 多粒子体系的 Schrödinger 方程	21

2.7 连续性方程,力学量的平均值	22
2.7.1 局域的几率守恒	22
2.7.2 力学量的平均值	23
习 题	25
第3章 不含时 Schrödinger 方程及其解法	27
3.1 不含时 Schrödinger 方程	27
3.2 定态问题的一般讨论	28
3.3 一维无限深方势阱,宇称	29
3.4 一维有限深对称方势阱	32
3.5 一维 δ 势阱	36
3.6 一维方势垒	38
3.7 一维 δ 势垒	41
3.8 二维方势阱	42
3.9 谐振子	43
3.9.1 一维谐振子	43
3.9.2 三维谐振子	49
习 题	50
第4章 力学量算符的本征值和本征函数	53
4.1 线性算符的性质及其运算法则	53
4.1.1 线性算符	53
4.1.2 算符的逆	54
4.1.3 算符的转置	55
4.1.4 算符的厄米共轭与厄米算符	55
4.1.5 幺正算符	56
4.2 量子力学的基本对易关系	57
4.2.1 坐标和动量的对易关系	57
4.2.2 角动量的基本对易关系	58
4.3 厄米算符的本征值和本征函数系	60
4.3.1 厄米算符的本征值方程	60
4.3.2 本征值方程的几种解法	61
4.3.3 量子涨落和不确定性关系的一般表达式	64
4.4 力学量算符在球坐标系中的表示	66
4.5 力学量算符的共同本征函数系	69
4.5.1 一维谐振子的能量本征函数	70
4.5.2 动量 $\{p_x, p_y, p_z\}$ 的共同本征函数	71
4.5.3 坐标 $\{x, y, z\}$ 的共同本征函数	71
4.5.4 角动量算符 (\hat{l}^2, \hat{l}_z) 的共同本征函数,球谐函数	71
4.6 连续谱本征函数的“归一化”和 Dirac 的 δ 函数	75
4.6.1 Dirac 的 δ 函数及其性质	75
4.6.2 连续谱本征函数的“归一化”	77
习 题	79

第 5 章 态矢量和力学量算符的表象变换	81
5.1 量子态的矢量表示及其表象变换	81
5.1.1 量子态的矢量表示	81
5.1.2 态矢量的表象变换	82
5.2 力学量算符的矩阵表示及其表象变换	84
5.2.1 力学量算符的矩阵表示	84
5.2.2 力学量算符的表象变换	85
5.3 量子力学的矩阵形式	86
5.3.1 平均值公式的矩阵形式	86
5.3.2 本征值方程的矩阵形式	87
5.3.3 Schrödinger 方程的矩阵形式	87
5.4 量子力学的 Dirac 描述	89
5.4.1 Dirac 符号	90
5.4.2 基本运算规则	90
5.4.3 量子力学公式的 Dirac 符号描述	92
5.4.4 表象变换	93
习 题	96
第 6 章 对称性和守恒定律	97
6.1 守恒量的平均值和几率分布	97
6.2 对称性和守恒定律	99
6.2.1 空间平移对称性和动量守恒	101
6.2.2 时间平移对称性与能量守恒	102
6.2.3 空间旋转对称性与角动量守恒	102
6.3 全同粒子系波函数的交换对称性	103
6.4 无相互作用全同粒子系的交换简并	106
6.5 量子力学的三种绘景	111
6.6 密度矩阵	112
习 题	115
第 7 章 粒子在势场中的运动	117
7.1 中心力场问题的一般讨论	117
7.2 球方势阱	119
7.3 类氢离子	121
7.3.1 类氢离子的能量本征值与本征函数	121
7.3.2 对氢原子的讨论	125
7.4 定域规范不变性	129
7.4.1 电磁场的矢势和标势	129
7.4.2 带电粒子的 Schrödinger 方程	129
7.4.3 定域规范不变性	130
7.5 外磁场中的原子、正常 Zeeman 效应	131
7.6 均匀磁场中非束缚电子的运动	134
7.7 规范场、Aharonov-Bohm 效应	137

7.7.1 规范场	137
7.7.2 $A-B$ 效应	138
习 题	140
第 8 章 角动量理论、粒子的自旋	142
8.1 角动量算符的矩阵表示	143
8.2 自旋角动量	147
8.2.1 自旋角动量算符	147
8.2.2 自旋角动量算符的本征值和本征矢量	148
8.3 角动量的耦合与 C-G 系数	150
8.3.1 角动量的耦合与 Clebsch-Gordon 系数	151
8.3.2 两个自旋角动量的耦合	155
8.3.3 自旋-轨道角动量的耦合	156
8.3.4 粒子自旋的纠缠	156
8.4 自旋磁矩与外磁场的相互作用	157
8.5 反常 Zeeman 效应	159
习 题	160
第 9 章 定态微扰论	162
9.1 非简并态微扰论	162
9.2 简并态微扰论	168
9.3 含时微扰与量子跃迁	173
9.4 Fermi 黄金定律和激光	177
习 题	180
第 10 章 散射理论	183
10.1 散射截面	183
10.2 Born 近似法	185
10.3 分波法	188
10.4 全同粒子的散射	191
习 题	194
第 11 章 量子信息论	195
11.1 经典信息科学的极限	195
11.2 突破经典信息科学极限的途径	196
11.3 量子力学的新进展	197
11.3.1 量子力学在数学方法上的特性	197
11.3.2 量子体系的奇妙特性	198
11.4 量子信息论	201
11.4.1 量子通讯	201
11.4.2 量子计算机与量子计算	205
习 题	206

第 1 章 经典物理学的“危机”和量子力学的诞生

1.1 经典物理学的理论体系及其“危机”

在进入量子力学理论体系之前,我们首先回顾一下在 19 世纪末完成的称为经典物理学(classical physics)的理论体系。经典物理学包括牛顿力学(Newton's mechanics),热力学与统计物理学(Thermodynamics and statistical physics),电动力学(Electrodynamics)。

牛顿力学描述宇宙中宏观物体机械运动的普遍规律。这一理论体系可归结为牛顿三定律。无论是各种星体,包括恒星、行星、卫星,还是地球上的各种物体,它们的运动无一不服从牛顿力学规律。到了 19 世纪末,牛顿力学发展到登峰造极的地步。海王星的发现就是一个最好的见证。19 世纪上半叶,人们发现天王星的运动与牛顿运动定律不符。1846 年 Adams 等人根据他们基于牛顿运动定律的计算结果提出:如果假定在天王星外面的某一轨道上有一颗一定质量的行星存在,就能解释天王星的运动。当时他们预言,在第二年的某月某日这颗星将出现在某地方。第二年,在他们预言的时间和地点,人们果然发现了一颗新星,这就是海王星。这一事实无可争辩地说明牛顿力学的巨大成功。

到了 19 世纪末,人们关于热现象的理论也形成了一个完整的理论体系,这就是热力学与统计物理学。热力学是关于热现象的宏观理论,而统计物理学是关于热现象的微观理论。热力学根据关于热现象的三个基本定律即热力学三定律,进行演绎推理解释各种物质系统的热平衡性质;统计物理学则从物质是由大量的分子和原子组成这一事实出发,把关于热现象的宏观性质作为微观量的统计平均值,成功地解释了各种物质系统的热特性。

关于电磁现象的理论——电动力学也是经典物理学的一个组成部分。1864 年,德国物理学家 Maxwell 将 Coulomb、Ampere、Faraday 等前人关于电磁现象的实验定律归纳成四个方程,建立了电磁场理论。Maxwell 的电磁场理论成功地解释了自然界里存在的各种电磁现象。Maxwell 的电磁场理论和关于电磁波的传播媒质——以太(ether)存在的假说一起构成了描述电磁现象的完整理论体系。

由牛顿力学、热力学与统计物理学、电动力学所构成的经典物理学,曾经对自然界里的众多物理现象给出了令人满意的描述。因此,人们曾认为人类对自然界物理现象本质的认识已基本完成,今后物理学家的任务只不过是对个别基本问题的修补和一些具体问题的研究。

尽管经典物理学的完整理论体系能够对大量的物理现象给出令人满意的描述,但是,也出现过一些难以克服的困难,有一些现象无法用经典物理学理论去解决。如黑体辐射问题,固体的比热问题,光电效应,原子的稳定性和原子光谱的起源,以太是否存在等问题。这些问题涉及统计物理学、电动力学等诸多领域,根源很深,威胁整个经典物理学的基础。因此,人们曾感觉经典物理学面临严重“危机”。尽管如此,大部分人还是认为,从整体来说,经典物理

学理论体系无可置疑,这些困难是暂时的,只不过是物理学蓝天中的几朵“乌云”,一切困难总会在经典物理学的框架内得到解决,经典物理学理论体系依然是不可动摇的。

然而,到了 20 世纪初,人们的这些期望终于落空,因为这些困难的根源比人们想像的深刻得多。物理学蓝天中的几朵“乌云”导致了物理学的一场大革命,最终促成了近代物理学的两大支柱——量子力学和相对论的诞生。

以下几节,我们将介绍在 19 世纪末曾经困扰物理学家的一些困难以及这些困难是怎样得到解决的。

1.2 黑体辐射和 Planck 的量子假说

1.2.1 热辐射

我们知道,灼热的物体能够发光,不同温度的物体发出不同频率(frequency)的光。例如,一个 10W 的白炽灯泡发光时,钨丝的温度可达 2130°C,灯光发黄,光线中长波(低频)光成分较多;一个 100W 灯泡的钨丝发光时,温度可达 2580°C 的高温,灯光发白,光线中的短波成分较多。由此可见,发光体的温度越高,辐射光的频率越大(波长越短)。这些物体发光是由于物体中的原子、分子的热振动引起的。温度越高,原子、分子的振动频率越大,发射光的频率也就越大。物体的这种发光过程叫做热辐射(thermo-radiation)。

并不是所有的发光过程都是热辐射。例如,日光灯、激光的发光过程并不是热辐射。这些光的波长与发光体的温度没有直接的关系。日光灯虽然发出耀眼的光,但灯管的温度并不高。这些发光过程是由于原子内部电子的能级跃迁引起的。

1.2.2 Rayleigh-Jeans 的黑体辐射理论

J. W. Rayleigh (1900 年)和 J. H. Jeans (1905 年)曾经研究过黑体热辐射过程的能谱。所谓黑体(black body)就是能够吸收照射到它上面全部光(电磁波)的理想物体。一个封闭的空腔(cavity)可近似地认为是黑体。

考虑一个黑体(见图 1-1)。黑体的内壁不断地发射和吸收电磁波(辐射波),最后达到热平衡。设热辐射达到平衡时的温度为 T ,在空腔单位体积中,频率在 $\nu \rightarrow \nu + d\nu$ 之间的热辐射能量用 $E_\nu d\nu$ 来表示。Rayleigh 曾根据经典电动力学和统计物理学的理论给出

$$E_\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^2 kT d\nu}{c^3} = dn_0 \cdot \bar{\epsilon} \quad (1-1)$$

$$\bar{\epsilon} = kT, \quad dn_0 = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu$$

其中, $\bar{\epsilon}$ 为振子的平均能量; dn_0 为频率在 $\nu \rightarrow \nu + d\nu$ 之间的振子(oscillator)数密度; $k = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$, 表示 Boltzmann 常数; $c = 2.998 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, 为光速; ν 为原子、分子等振子的振动频率。式(1-1)叫做 Rayleigh-Jeans 的黑体辐射(black body radiation)公式。1905 年 Jeans 证明了这个公式的正确性。

Rayleigh-Jeans 公式在低频区可与实验很好地符合,但在高频区,公式与实验不符,且

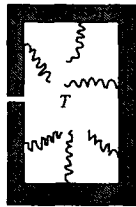


图 1-1

$E = \int_0^{\infty} E_{\nu} d\nu \rightarrow \infty$, 即单位体积的能量发散, 而在实验中测得黑体辐射的能量密度是

$$E = \sigma T^4 \quad (1-2)$$

这一公式叫做 Stefan-Boltzmann 公式, σ 叫做 Stefan-Boltzmann 常数。

1.2.3 Planck 的量子假说

为了克服 Rayleigh-Jeans 公式与实验事实不符的矛盾, 1900 年, 德国物理学家 M. Planck 提出了如下量子假说 (quantum assumption): 物体吸收或发射的热辐射能量不像经典理论所主张的那样取连续值, 而只能取一系列离散的值, 即辐射腔中振子的能量是“量子”化的, 每个振子的能量只能取

$$\epsilon = h\nu = \hbar\omega \quad (1-3)$$

的整数倍。式(1-3)中的常数 $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, $\hbar = h/2\pi = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, 后人称之为 Planck 常数。于是, 在温度为 T 时, 振子的平均能量

$$\bar{\epsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n e^{-\frac{\epsilon_n}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\epsilon_n}{kT}}} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \quad \epsilon_n = nh\nu \quad (1-4)$$

Planck 用式(1-4)代替经典统计物理中一维振子的平均能量 $\bar{\epsilon} = kT$, 给出了 Planck 黑体辐射公式

$$E_{\nu} d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu d\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (1-5)$$

由此可算出

$$E = \int_0^{\infty} E_{\nu} d\nu = \sigma T^4, \quad \sigma = \frac{\pi^2 k^4}{15c^3 \hbar^3}$$

这一结果不仅与实验值很好地符合, 而且为 Stefan-Boltzmann 常数 σ 提供了理论依据。

Planck 的能量量子化概念是经典物理学所没有的崭新概念, 这一概念的引进使经典黑体辐射公式与实验事实之间的矛盾得到圆满解决。量子化概念的建立是人类认识微观世界物理规律的开端, 是量子力学得以建立的基础, 也正是量子力学这一名称的来源。

1.3 光电效应和 Einstein 的光量子假说

1.3.1 光电效应

首先接受 Planck 量子假说的是 Einstein。1905 年, Einstein 利用 Planck 的量子假说成功地解释了当时在实验上发现的光电效应 (photoelectric effect), 并提出了光量子 (light-quantum) 概念。

当光线照射到金属表面时, 从金属表面逸出电子的现象叫光电效应。这一现象原则上并没有什么值得惊奇的地方, 因为金属表面上的电子吸收光以后, 电子的动能增加, 以致电子能够克服金属表面的位能 (脱出功) 而逸出表面。然而, 实验结果给出难以用经典物理学解释的现象。光电效应的实验装置如图 1-2 所示, K 是某种待测的金属制成的阴极, A 是阳极。实验表明, 当光通过光电管的石英窗口 M 照射到金属表面 K 时, 如果照射光的频率足够大,

电路中就有电流,但如果照射光的频率小,光强再大也无电流。这就是说,入射光波的能量决定于光波的频率。这一实验事实与经典波动力学理论相矛盾。按经典波动力学理论,波的能量决定于波的振幅,与波的频率无关。

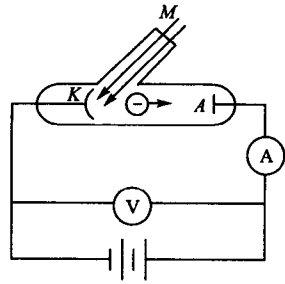


图 1-2

1.3.2 Einstein 的光量子假说

为了解释光电效应,1905 年 Einstein 提出光量子假说(light quantum assumption):辐射场是由光量子组成,每一个光量子的能量

$$E = h\nu \tag{1-6}$$

Einstein 提出,光量子不仅具有确定的能量 $h\nu$,而且还具有确定的动量。他用相对论知识给出光量子的动量

$$p = \frac{h}{\lambda} \tag{1-7}$$

其中, λ 为光的波长(wave length); h 为 Planck 常数。

引进光量子概念后,光电效应中出现的疑难问题立即得到解决。当光照射到金属表面时,金属中的自由电子吸收光,得到能量 $h\nu$ 。当这一能量大于脱出功 A 时,电子从金属表面逸出,逸出电子的动能为

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - A \tag{1-8}$$

这就是说,逸出电子(光电子)的动能只与入射光的频率 ν 有关,与光的振幅(amplitude)无关,光强(振幅)只影响电子的流强。只有当入射光的频率足够大,光的能量 $h\nu > A$ 时,光电子才能从金属表面逸出。

Einstein 的光量子假说不仅成功解释了光电效应,而且还揭示出光的波、粒二重性,即光不仅具有波动性,而且还具有粒子性。关于微观粒子的波、粒二重性我们将在第 2 章详细讨论。

Einstein、Debye 等人还利用能量量子化概念成功地解决了固体的比热等其他疑难问题。

1.4 原子的稳定性和 Bohr 的量子论

1.4.1 原子有核模型的困难

1911 年,E. Rutheford 通过 α 粒子散射实验建立了原子的有核模型。即原子由原子核(atomic nucleus)和电子(electron)组成,带负电的电子绕着带正电的原子核旋转。但是原子的有核模型却遇到了两大难题。

1. 原子的稳定性问题

根据经典电动力学,原子中作加速运动的电子要不断地辐射电磁波,因而电子的能量越来越小,轨道半径也越来越小,最后要落到原子核中去。这与原子的稳定性相矛盾。

2. 原子线光谱的起源问题

原子中的电子在圆周运动过程中由于其能量连续变化,发射光谱(spectrum)应该是连续谱,但实验所观察到的却是线光谱。例如,1885年 Balmer 发现氢原子的可见光谱线频率有以下规律:

$$\nu = Rc \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad n, m = 1, 2, 3, \dots \quad (1-9)$$

其中, $R = 109677.581 \text{ cm}^{-1}$, 为 Rydberg 常数。显然,由式(1-9)给出的光谱是线光谱。

1.4.2 Bohr 量子论

为了克服这些矛盾,1913年,年仅28岁的丹麦物理学家 Bohr 提出了原子的量子理论(quantum theory)。Bohr 的量子理论可概括如下:

(1) 原子只能稳定地存在于与离散(discrete)能量 E_1, E_2, \dots 相应的一系列状态中。这些状态叫定态(stationary state)。处于定态中的原子不辐射能量。

(2) 原子只有在两个定态之间跃迁时才发射或吸收电磁波。发射或吸收电磁波的频率由频率条件

$$\nu = \frac{E_m - E_n}{h} \quad (1-10)$$

所决定。

对应于各个定态的能量组成原子的能级(energy levels of atom),最低能级的状态叫基态(ground state)。处于基态的原子不能自发发射光,但可以吸收光而跃迁(transition)到高能级(激发态,excited state)上去。处于高能级的原子可以跃迁到低能级并发射光。

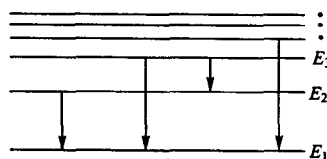


图 1-3

显然,Bohr 的原子论能够成功地解释原子的稳定性和原

子的线光谱起源。原子的分立能量以及能量状态(定态)概念是量子力学特有的概念。能量的分立性质叫做能量的量子化(energy quantization),这是经典力学所没有的新的概念。

当年 Bohr 提出原子理论时,从半经典理论出发,把原子的各种状态与原子中电子运动的一些特定轨道相联系,每个轨道上的电子具有确定能量。Bohr 对电子圆轨道运动提出了轨道角动量的量子化条件(quantization condition):

$$J = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-11)$$

根据式(1-11),Bohr 计算出电子的圆轨道运动的半径(见习题 1-7)

$$r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{m_e Z e^2} \quad (\text{对氢原子 } Z=1) \quad (1-12)$$

和各个能级的能量

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (1-13)$$

由式(1-12)可以算出氢原子的基态轨道半径

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.53 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (\text{Bohr 半径}) \quad (1-14)$$

由式(1-10)可以计算氢原子由能量为 E_m 的能级跃迁到能量为 E_n 的能级时所发射光的频

率,

$$\nu = \frac{E_m - E_n}{h} = \frac{m_e e^4}{2 \hbar^2 \cdot h} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = R c \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (m > n) \quad (1-15)$$

$$R \equiv \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^3 c} \quad (\text{Rydberg 常数}) \quad (1-16)$$

方程(1-15)就是前面提到的氢原子光谱线的频率规律式(1-9)。Bohr 量子论不仅成功地解释了当时实验上已发现的光谱线系,而且还预言了一些其他谱线系(如紫外区的谱线系)。

Bohr 理论是一个半经典理论,带有人为的性质。但这一理论(旧量子论)曾在历史上起到了非常重要的作用,现在已被量子力学所代替。

轨道角动量的更一般的量子化条件(A. Sommefeld 等)可表示为

$$\oint p dq = nh \quad (1-17)$$

其中, (p, q) 为正则动量和坐标, \oint 为对周期运动积分一个周期(见习题 1-3)。

1.5 de Broglie 物质波

前面已经讲过,光量子(又称光子,photon)的能量 $E = h\nu$, 动量 $p = \frac{h}{\lambda}$ 。光量子概念反映光子的粒子属性。但是,反映粒子属性的 E 和 p 又决定于反映波动性的频率(frequency)和波长(wavelength)。也就是说,这些关系式描述光子的波、粒二重性(duality)。这与经典物理学的传统概念相违背。看来,为了描述微观粒子的运动,我们必须对一些传统概念重新考虑,建立一种描述微观粒子运动的新理论体系。那么,光的波、粒二重性能否推广到其他微观粒子,如电子、原子等?基于这种考虑,1924年 de Broglie 提出了物质波(matter wave)的概念。de Broglie 假定:像电子、原子等微观粒子也像光子一样具有波动性,波、粒二重性是微观粒子的一个普遍性质,它们的能量和动量也像光子一样满足关系式

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (1-18)$$

一个质量为 m 的粒子,其波长

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (1-19)$$

其中, v 为粒子的运动速度。

de Broglie 解释,由于 h 是一个很小的量,实物粒子的波长是非常短的,因此,宏观粒子的波动性不易体现出来,粒子的运动可以用经典力学描述。例如,用 150 V 电压加速的电子的波长可以达到 $\lambda \sim 10^{-10}$ m, 是 X 射线波长的数量级,在宏观尺度范围内,物质波的波长太短,很难体现它的波动性。但在原子世界里($r \sim 10^{-10}$ m),其空间尺度与粒子的波长相当,物质(粒子)的波动性再也不能忽略。

de Broglie 物质波概念,赋予粒子以波动性质,阐明了粒子的波、粒二重性。例如考虑一个电子,电子的粒子模型可以用电子的动量 p 和能量 E 描述其运动,而波动模型则用电子的波长 λ 和频率 ν 描述其运动。de Broglie 关系式($E = h\nu, p = h/\lambda$)把同一粒子的粒子性和波动性统一在一起了。