



普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材

# 材料物理基础

## Fundamentals of Materials Physics

吴铮 黄洁雯 唐国栋 编



國防工業出版社

National Defense Industry Press

普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材

# 材料物理基础

吴 锵 黄洁雯 唐国栋 编

国防工业出版社

·北京·

## 内 容 简 介

第1章简要介绍量子力学,第2章介绍晶体衍射与结合,第3章介绍晶格振动与统计物理学基础,第4章介绍热学性质,第5章介绍金属电子论,第6章介绍能带理论,第7章介绍半导体,第8章介绍固体磁性。

书中包括大量供学生思考的问题,并安排了一定量的计算题。

本书可以作为高等院校材料科学与工程专业“材料物理基础”、“固体物理”、“材料物理性能”课程的教材或教学参考书。

### 图书在版编目(CIP)数据

材料物理基础/吴镭,黄洁雯,唐国栋编. —北京:国防工业出版社,2014.10

普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材

ISBN 978-7-118-09719-1

I. ①材… II. ①吴… ②黄… ③唐… III. ①材料科学—物理学—高等学校—教材 IV. ①TB303

中国版本图书馆CIP数据核字(2014)第234767号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路23号 邮政编码100048)

北京奥鑫印刷厂印刷

新华书店经售

\*

开本 787×1092 1/16 印张 19 字数 428 千字

2014年10月第1版第1次印刷 印数 1—3000册 定价 36.00元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)88540777

发行邮购:(010)88540776

发行传真:(010)88540755

发行业务:(010)88540717

普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材  
编 委 会

主任委员 朱运田

副主任委员 崔 崇 吴 锵

委 员 (按姓氏拼音排序)

陈 光 丁锡锋 杜宇雷 黄洁雯

刘 瑛 王 雄 熊党生 颜银标

杨 森 张新平 赵 军 赵永好

朱和国 邹友生

# 代 序

学科基础课的重要性是不言而喻的。材料学科的基础课包括(材料)物理化学、材料科学基础、材料物理基础、材料物理性能、材料力学性能、固态相变、传输原理、材料分析方法等,其中(材料)物理化学、材料科学基础、材料物理基础(简称“三基”)是材料学科基础课群中的基础,因此最为重要。如何进一步强化“三基”,提升教学效果,完成它们的教育使命,既是重要的教学任务,也关乎材料学科建设,因为在西方发达国家,课程建设与教学改革本身就是学科建设的重要组成部分。

## 一、历史回顾

为了更加清晰地了解“三基”的现状,需要简要回顾它们的“形核与长大”过程。从发展历史看,材料学科源于传统的金属材料、陶瓷材料、高分子材料专业。在加强基础、拓宽专业的教育理念下,逐步融合成为材料科学与工程一级学科。因此,材料学科的基础课自然而然地选取了它们的“公因子”,如物理化学就是这3个专业的公共基础课,而材料科学基础则脱胎于经典的金属学,以金属学的结构框架为基,进一步融合了陶瓷与高分子。至于材料物理基础,则是由于现代材料研究以物理性能为主要诉求,故作为物理性能基础的固体物理在加以改造后变为材料物理基础,以弥补材料科学基础仅关照材料力学性能的缺陷。从时间上看,“三基”的发展历程都不长,其中较为成熟的材料科学基础,也不过十几年,以清华大学潘金生于1998年出版的《材料科学基础》教材为标志;而材料物理基础约为10年。至于材料物理化学,由于其内涵相对于传统的物理化学有明显变化,会在后面专门讨论。因此,“三基”都应该算是比较“年轻”的课程,其历史远不能与无机化学、化工原理、理论力学、机械原理、电工学、电磁场理论、信号与系统、控制理论等发展了几十甚至上百年的工科基础课相比。

历史的短暂与“形核”时拿来主义的操作策略,使得“三基”一方面迅速支撑起材料学科的知识主干,满足了学科发展初级阶段对理论知识的需求,但另一方面也带来了一些深层次问题。

## 二、面临的问题

### 1. 物理化学的对象与过程存在偏差

对于材料学科而言,以热力学第一、二定律为基础的经典物理化学,本来不应该存在问题,但实际情况却不尽然。现行的物理化学由于归属化工学科,因此课程体系中带有明显的化工特征。例如,绝大多数物理化学教材以气体为主要物质对象,同时特别重视化学反应。这些侧重对于化工学科是合情合理的,但对凝聚态为主要物质对象,且更为重视相

变过程的材料学科,就暴露出理论与应用的双重问题。首先说应用问题,以相图一章为例,现行物理化学都是以气液相图为重点,而对更为丰富多彩、情况更为复杂的凝聚态相图则较少涉及;再如动力学部分,现行物理化学主要介绍化学反应的动力学,而且是气相化学反应,但就是没有与相变有关、主要研究凝聚态的动力学。不难看出,现行物理化学应该称为化工物理化学,而材料学科需要的是材料物理化学。再说理论体系上的问题,物质对象由气体转移到凝聚态,会带来理论体系不小的变化,因为凝聚态具备一系列不同于气体的特殊性,特别是它对于常压的不敏感,使得通常具有二元函数性质的热力学量(如内能、焓、熵、自由能)变为一元函数,从而使理论大为简化,这对知识体系复杂、公式众多的物理化学意义重大。

综上所述,物理化学既是经典(古老)的课程,也是非常年轻的课程,其经典体现在化工物理化学,而年轻体现在材料物理化学,因为迄今为止还没有一部真正意义上的材料物理化学教材。

## 2. 材料科学基础面临融合的难度

尽管材料科学基础相对比较成熟,但脱胎于金属学的材料科学基础也面临两个方面的问题:首先,当金属知识扩大到陶瓷,特别是高分子时,由于高分子的结合键分原子键与分子键两个层次,而金属与陶瓷的结合键都是原子(离子)层次的,故带来一些根本性的差异,具体就是高分子材料中熵的作用很大,而金属与陶瓷主要受结合能影响,所以这两类材料的从结构到性质,无论在特点和分析方法上,都有很大差异,造成融合的困难。在教学中实践中,虽然3种材料的知识都编入了材料科学基础,但高分子与另外两种材料形同陌路而难以融会贯通。其次,近年来一些教材把能带理论等属于固体物理的知识也纳入其中,但由于传统金属学以弹性力学和热力学为基础,而能带理论以量子力学与统计物理为基础,两者相去甚远。同时,金属学以原子为最基本的物质层次,且对于原子的认识是几何钢球,而固体物理则以电子、离子、声子等量子为基本物质层次,这就使问题进一步加重。从实际效果看,材料科学基础中引入能带理论等并没有得到实际应用,故并不成功。这种状况警示我们在知识体系设计中,要进行充分的反思,而不能一味地贪多求全。

## 3. 材料物理基础的难度过大

不难看出,固体物理还是应该独立设课,部分高校因此开设了材料物理基础,即工科版的固体物理,但剔除固体物理中晶体学(部分)、扩散、晶体缺陷等已包含在材料科学基础中的内容。据我们考察,10年来国内材料物理基础的最大问题是:课程难度过大,学生理解非常困难,其原因是工科学生在量子力学、统计物理学和数学等方面知识的欠缺。

## 三、改革思路

明确了材料学科“三基”存在的问题,教学改革的思路变得清晰起来。

### 1. 知识体系重构

材料学科“三基”知识体系的重构必须内外结合。所谓“内”指从材料学科内部的视角看,知识的逻辑顺序合理、相互融合、体系完备,课程间相互协调,知识重叠较少。换言



之,应该把“三基”看成统一的整体,而不是相互独立的“独联体”。所谓“外”指材料知识体系具有外部合理性,因此“三基”不仅要与先修的高等数学、大学物理合理衔接,而且对后续的专业课切实有用。

“三基”的知识体系还应该坚持实事求是的原则,这是对当下流行的贪多求全、一味追逐学科新知识的反思。现在的学科基础课教材以吸收最新科技成果为潮流,似乎知识之新就等于教材的创新,而对传统知识、经典内容却不肯进行深入的教学探索。从知识结构发展的角度看,知识体系的坚实是第一位的,而新知识属于锦上添花,对于学科基础课而言更是如此!因此,我们主张调整知识体系构建的方向,使流行的新颖性导向回归到坚实性这一根本诉求上,使“三基”扎扎实实地完成奠定知识基础的使命。

最后,还要对知识体系进行创新性地重构,对重点、特别是难点知识进行创新性的阐释,使学生真正建立起能够理解、懂得运用的概念。

## 2. 认知方法改造

从教育的角度看,比知识体系更为重要的是认知方法,这就著名的鱼一渔之辩。经过十多年的努力,我们逐渐摸索出概念—问题—探究的认知方法,以改造传统的灌输—记忆—计算模式。认知方法的变化使教材中问题的提炼至关重要,它是概念—问题—探究模式中承上启下的关键。问题能够丰富概念认识过程,使学生在概念上花更多的时间、做更多的对比、形成更多的判断,从而使抽象、枯燥、艰涩的概念变得鲜活起来,概念因为大量问题的导引而与实际情况相关联,概念之间形成了有机整体。进一步讲,没有大量高水平的问题,是不可能真正理解概念的。

按着现代教育理论,教材中所提问题的价值不仅限于让学生知道答案、增加知识,更为重要的是这些问题能够产生激发作用,在学生头脑中形成个性化的、真正属于学生的新问题,这样的问题是学生最为关心的,因此最有价值。学生问题的普遍特点是一知半解,有时甚至是完全茫然,这既是学生状况的写照,也衬托出教师的真正作用,即引导学生展开分析、明确概念、剔除谬误、形成新概念,而这些就是思维意义下的探究了。不难看出,概念—问题—探究的教学模式与科学研究过程中人的思维模式极为相似,尽管科研中表面上以问题为开端,但科学问题的背后一定是科学概念。这样一来,教学与科研有了思维意义下的直接联系,强化教学就是强化科研中的思维部分。在互联网普及,信息获取方便,国内实验仪器水平大幅度提升的时代背景下,科学研究中思维的重要性与日俱增,因此概念—问题—探究的认知模式具有巨大的价值。

## 3. 教育理念落实

教育教学之复杂还在于,仅仅解决知识体系与认知方法的问题是远远不够的,还必须在教学过程中秉承先进的教育理念,如以人为本、探索创新、自主学习、速度与效率;对于工科学生,还要重视实践,在理论课中就要传递实践第一的理念。

教育理念的课程落实一直是难题,其难度首先在于理念众多、莫衷一是;其次是教育理念要落实到课程的具体要素之中,即落实到教材、教师与学生;而最为困难的可能是理念如何转化为操作与行动,以便让先进的理念发挥实际的效能。

教育内部问题的解决有时需要从教育学的外部(如哲学)入手。从哲学的高度看教育理念众多的问题,自然会联想到抓主要矛盾的哲学方法。如果始终坚持以人为本这一核心教育理念,同时借鉴实事求是、深入实际的哲学方法,则绝大多数问题都能得到解决。

例如,创新能力是现代教育理念的重要内容,而在实际操作中,如果能够很好地诠释人之“本”的教育教学含义,实事求是地在教学中体现这个根本,则创新能力培养会转化为创新意识强化,进而与问题意识挂钩,最终真正落实到教学过程。

综上所述,拿来主义的材料学科知识构建方式,已经不能适应学科发展与人才培养要求,因此需要通过教学改革,对材料学科“三基”的课程知识体系与认知方法进行改造,在秉承先进教育理念的基础上,使材料学科基础课在教学与教育两个层次上得到长足发展。



# 目 录

第 1 章 量子力学简介	1
1.1 波粒二象性与不确定关系	1
1.1.1 波粒二象性	1
1.1.2 不确定关系	3
1.2 薛定谔方程与波函数	6
1.2.1 薛定谔方程的形式	6
1.2.2 波函数的物理意义和数学性质	7
1.3 薛定谔方程的解	8
1.3.1 一维无限深势阱中的粒子	8
1.3.2 一维有限深势阱中的粒子与隧道效应	12
1.3.3 一维谐振子	16
1.3.4 氢原子中的电子	18
1.3.5 多电子原子结构	30
1.4 量子力学中的力学量	33
1.4.1 力学量的算符	33
1.4.2 算符的数学性质	36
1.4.3 力学量算符的性质	38
1.4.4 算符的应用	39
1.5 定态微扰论	41
1.5.1 非简并定态微扰论	42
1.5.2 简并定态微扰论	43
1.6 双原子分子	44
1.6.1 $H_2$ 分子与共价键	44
1.6.2 电子配对法与分子轨道法	50
1.7 波的补充知识	52
1.7.1 几个重要概念	53
1.7.2 三维平面波与波矢	54
1.7.3 弹性纵波与弹性横波	55
1.7.4 群速度	58
1.7.5 驻波与简正模式	60

<b>第 2 章 晶体的结构、衍射与结合</b> .....	63
2.1 基元、原胞与基矢.....	63
2.1.1 基元与布拉菲点阵.....	63
2.1.2 原胞与基矢.....	64
2.2 晶体的衍射.....	66
2.2.1 独立电子对 X 射线的散射.....	66
2.2.2 原子对 X 射线的相干散射.....	68
2.2.3 晶体对 X 射线的相干散射.....	71
2.2.4 非晶体对 X 射线的相干散射.....	79
2.3 倒易空间与傅里叶变换.....	83
2.3.1 倒易空间.....	83
2.3.2 傅里叶变换.....	87
2.4 晶体的结合.....	89
2.4.1 晶体结合能.....	89
2.4.2 离子晶体中的结合.....	92
2.4.3 共价晶体中的结合.....	94
2.4.4 金属晶体中的结合.....	97
2.4.5 范德瓦尔斯结合.....	97
2.4.6 氢键结合.....	98
2.4.7 混合键晶体.....	98
<b>第 3 章 晶格振动</b> .....	100
3.1 一维原子链的振动.....	100
3.1.1 一维单原子链的振动.....	100
3.1.2 一维双原子链的振动.....	104
3.2 三维晶格的振动与频谱.....	107
3.2.1 动力学矩阵方法简介.....	107
3.2.2 晶格振动的一般结论.....	109
3.2.3 晶格振动的频谱(模式密度).....	111
3.3 晶格振动的量子化与声子.....	114
3.3.1 简正坐标.....	114
3.3.2 耦合谐振子的运动方程与坐标变换.....	116
3.3.3 三维晶体中的情况.....	118
3.4 离子晶体中的长光学波.....	120
3.4.1 黄昆方程及其解.....	120
3.4.2 介电函数与待定系数的确定.....	123

3.4.3	极化激元 .....	125
3.5	统计物理简介 .....	125
3.5.1	经典统计理论 .....	126
3.5.2	量子统计简介 .....	138
<b>第4章</b>	<b>热学性质</b> .....	<b>143</b>
4.1	晶格热容 .....	143
4.1.1	简谐近似 .....	143
4.1.2	爱因斯坦模型 .....	144
4.1.3	德拜模型 .....	144
4.2	晶体物态方程与晶体热膨胀 .....	146
4.2.1	晶体物态方程 .....	146
4.2.2	晶体热膨胀 .....	147
4.3	晶格热传导 .....	148
4.3.1	热传导的物理图像 .....	148
4.3.2	正常过程与翻转过程 .....	151
<b>第5章</b>	<b>金属电子论</b> .....	<b>153</b>
5.1	金属自由电子的量子理论 .....	153
5.1.1	自由电子的能级与态密度 .....	153
5.1.2	费米分布与费米能 .....	155
5.1.3	电子气的比热容 .....	156
5.2	金属的导电过程 .....	158
5.2.1	玻耳兹曼方程 .....	158
5.2.2	金属电导率 .....	160
5.2.3	电阻率与温度的关系 .....	162
5.3	磁场中金属的输运性质 .....	163
5.3.1	同时存在电场、磁场的玻耳兹曼方程 .....	164
5.3.2	霍尔效应 .....	165
5.3.3	磁致电阻 .....	166
5.4	电子发射 .....	168
5.4.1	电子热发射 .....	168
5.4.2	光电效应 .....	170
5.4.3	场致发射 .....	171
<b>第6章</b>	<b>能带理论</b> .....	<b>175</b>
6.1	能带论基础 .....	175

6.1.1	绝热近似	176
6.1.2	单电子近似(哈特利-福克自洽场近似)	177
6.1.3	周期场近似	178
6.1.4	布洛赫定理	178
6.2	近自由电子近似	181
6.2.1	模型与推导	182
6.2.2	布里渊区与能带	187
6.3	紧束缚近似	191
6.3.1	模型与推导	191
6.3.2	能带理论在金属晶体中的应用	198
6.4	晶体电子的速度、准动量与有效质量	204
6.4.1	晶体电子的速度	204
6.4.2	准动量	205
6.4.3	加速度与有效质量	206
6.5	导体、绝缘体与半导体	209
6.5.1	满带电子不导电	209
6.5.2	不满带电子导电	210
6.5.3	导体、绝缘体与半导体的能带模型	211
6.5.4	空穴	212
6.6	晶体电子的态密度	213
<b>第7章</b>	<b>半导体</b>	<b>218</b>
7.1	半导体概述	218
7.1.1	半导体的一般性质	218
7.1.2	结合类型与晶格结构	218
7.1.3	能带结构	219
7.2	半导体中的杂质	222
7.2.1	锗、硅中的杂质	222
7.2.2	III-V族化合物中的杂质	226
7.2.3	杂质的补偿作用	226
7.3	平衡载流子	228
7.3.1	本征半导体的载流子浓度	228
7.3.2	杂质半导体的载流子浓度	232
7.4	非平衡载流子	241
7.5	p-n结	245
7.5.1	平衡p-n结的性质	245
7.5.2	p-n结的电流—电压特性	248

---

7.5.3	p-n 结的击穿 .....	250
7.5.4	p-n 结的光生伏特效应 .....	251
<b>第 8 章</b>	<b>固体磁性</b> .....	<b>253</b>
8.1	原子磁性 .....	253
8.1.1	轨道磁矩、自旋磁矩与原子磁矩 .....	253
8.1.2	洪特定则 .....	254
8.1.3	磁场中的原子(离子)拉摩进动 .....	255
8.1.4	原子磁性的量子力学解释 .....	257
8.2	固体磁性与逆磁体 .....	258
8.2.1	固体磁性分类 .....	258
8.2.2	固体的逆磁性与逆磁体 .....	259
8.3	导电电子的磁性 .....	261
8.3.1	半导体中传导电子的顺磁性 .....	262
8.3.2	金属中自由电子的泡利顺磁性 .....	262
8.4	磁性离子固体的顺磁性 .....	265
8.4.1	顺磁性的统计理论 .....	266
8.4.2	关于顺磁盐的讨论 .....	268
8.5	铁磁性与唯象理论 .....	270
8.5.1	自发磁化的外斯分子理论 .....	271
8.5.2	高温顺磁性的分子场解释 .....	273
8.5.3	磁畴与技术磁化 .....	274
8.6	铁磁性与交换作用 .....	277
8.6.1	交换作用 .....	277
8.6.2	自旋波与磁振子 .....	280
8.7	反铁磁性与亚铁磁性 .....	283
<b>附录</b>	<b>基本物理常数表</b> .....	<b>286</b>
	<b>参考文献</b> .....	<b>287</b>
	<b>后记</b> .....	<b>288</b>

# 第 1 章 量子力学简介

量子力学是物理学的庞大分支体系,全面介绍量子力学对于本课程是不现实的。本章选取那些与本课程紧密相关的量子力学知识,以便为后续的内容(以晶体中电子的量子理论为主)奠定基础。

## 1.1 波粒二象性与不确定关系

### 1.1.1 波粒二象性

#### 1. 经典物理中的波和粒子

波与粒子的概念在经典物理中非常重要。波与粒子是两种仅有的、又完全不同的能量传播的方式。例如,声音使耳膜感受到振动是声音以波的形式传播能量的结果;而用一块石头将玻璃击碎,则是以粒子的形式传递能量。经验指出这两个概念无法同时使用,即不能同时用波和粒子这两个概念去描写同一现象。

理想粒子具有完全的定域性,原则上可以无限精确地确定它的质量与动量。粒子可视为一质点,尽管“质点”概念是相对的。如气体分子可视为质点,虽然它有内部结构;而在银河系中,星球也可视为质点。对于质点,只要初始的位置和速度已知,就可以用牛顿力学完全描述它后续的状态。

波的特征量是波长和频率。理想的波具有确定的频率和波长。原则上,频率和波长可无限精确地测定,但这要求波不能被约束,而是在空间无限扩展。

因此,所谓的粒子的空间位置可无限精确地测定,意味着假定粒子是一无限小的质点;而要无限精确地测定一个波的频率或波长,则要求这个波在空间无限扩展。

实验中用“拍”的方法测量波长。如图 1.1.1 所示,取一振幅恒定、频率已知为  $\nu_1$  的波,与一频率未知、设为  $\nu_2$  的波发生干涉,就形成了拍(两波的振幅相同,仅频率不同)。从是否存在拍,可以判定  $\nu_1$  与  $\nu_2$  是否有差值。观察是否存在拍,至少要看到一个拍。从图 1.1.1 可知,观察一个拍所需时间是  $1/\Delta\nu$ ,因此,“至少要看到一个拍”所需时间为

$$\Delta t \geq \frac{1}{\Delta\nu} \quad \text{或} \quad \Delta t \Delta\nu \geq 1 \quad (1.1.1)$$

设波速为  $v$ ,则  $\Delta t$  内波所走过的路程为

$$\Delta x = v\Delta t$$

代入式(1.1.1),有

$$\frac{\Delta x}{v} \geq \frac{1}{\Delta\nu} \quad (1.1.2)$$

又因  $\nu = v/\lambda$ ,则  $\Delta\nu = \frac{v}{\lambda^2}\Delta\lambda$ ,代入式(1.1.2),得

$$\Delta x \Delta \lambda \geq \lambda^2 \quad (1.1.3)$$

式(1.1.1)表示,要无限精确地测准频率,就需要花费无限长的时间;式(1.1.3)表示,要无限精确地测准波长,就必须在无限空间中观察,量子力学中最重要的关系式之一(不确定关系)就源于此。

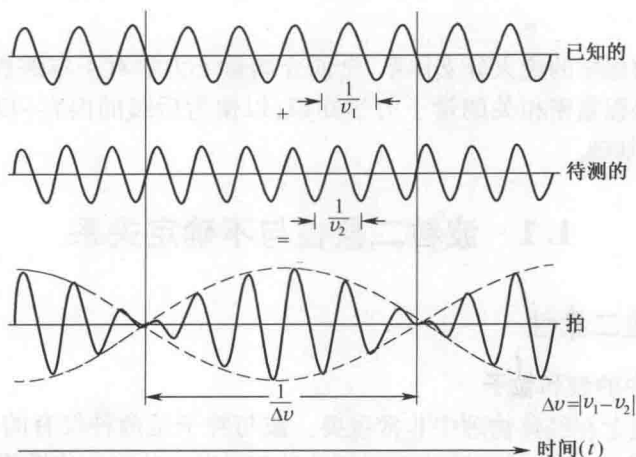


图 1.1.1 拍的形成

## 2. 光的波粒二象性

对于光的本质的认识,经历了复杂的历史过程。至 19 世纪末,麦克斯韦和赫兹肯定了光是电磁波,这时的光被普遍认为是一种波。但在 20 世纪初,对光的本性又有了新的认识。爱因斯坦在 1905 年用光的量子学说解释了光电效应,提出光子的能量为

$$E = h\nu \quad (1.1.4)$$

在 1917 年爱因斯坦又指出,光子不仅有能量,而且有动量

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{或者} \quad p = h k \quad (1.1.5)$$

式中:波矢  $k = 2\pi/\lambda$ , 从而把标志波动性质的  $\nu$  和  $\lambda(k)$ , 通过一个普适量(普朗克常量  $h$ ), 与标志粒子性质的  $E$  和  $p$  联系起来。光是粒子性和波动性的矛盾统一体。

光的这种特性在 1923 年的康普顿散射实验中得到了清晰的体现:在实验中,用晶体谱仪测定 X 射线波长,它的根据是波动的衍射现象;而散射对波长的影响又只能把 X 射线当作粒子来解释。可见,光在传播时显示出波动性,在转移能量时显示出粒子性。光既能显示出波的特性,又能显示出粒子的特性;但是在任何一个特定的事例中,光要么显出波动性,要么显出粒子性,二者绝不会同时出现。

1923 年,德布罗意将光的波粒二象性推广到任何物质,即“任何物体伴随以波,且不可能将物体的运动和波的传播分开”。德布罗意给出了与式(1.1.5)同样的表达式,以描述任意粒子(物体)的动量  $p$  与伴随着的波长  $\lambda$  之间的关系,即

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

**例 1.1.1** 如果普朗克常量  $h \rightarrow 0$ , 对波粒二象性会有什么影响? 如果光在真空中的速率  $c \rightarrow \infty$ , 对时间空间的相对性会有什么影响?

**解** 如果  $h \rightarrow 0$ , 则粒子的德布罗意波长  $\lambda = h/p \rightarrow 0$ , 粒子不会显示波动性;而光子的



能量  $E = h\nu \rightarrow 0$ , 质量  $m = E/c^2 \rightarrow 0$ , 光子将不复存在, 光将只显示波动性。这就是说,  $h \rightarrow 0$  时, 我们周围的世界将完全是“经典”的, 波是波, 粒子是粒子, 二者截然不同。

**例 1.1.2** 室温(300K)下的中子称为热中子, 求热中子的德布罗意波长。

**解** 在室温下中子的平均动能

$$E_k = \frac{3}{2}kT = \frac{3}{2} \times 1.38 \times 10^{-23} \times 300 = 6.21 \times 10^{-21} \text{J}$$

中子的静能为

$$E_0 = m_n c^2 = 1.67 \times 10^{-27} \times 9 \times 10^{16} = 1.50 \times 10^{-10} \text{J}$$

由于  $E_k \ll E_0$ , 可以不考虑相对论效应, 从而有

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_n E_k}} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 1.67 \times 10^{-27} \times 6.21 \times 10^{-21}}} = 1.46 \times 10^{-10} \text{m} = 0.146 \text{nm}$$

**例 1.1.3** 电子显微镜的加速电压为 40keV, 经过这一电压加速的电子的德布罗意波长是多少?

**解** 由于 40keV 比电子的静能 511keV 小许多, 可以不考虑相对论效应, 从而有

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_k}} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 0.91 \times 10^{-30} \times 4 \times 10^4 \times 1.6 \times 10^{-19}}} = 6.1 \times 10^{-12} \text{m}$$

**例 1.1.4** 卢瑟福的  $\alpha$  散射实验所用的  $\alpha$  粒子的能量是 7.7MeV。  $\alpha$  粒子的质量为  $6.7 \times 10^{-27} \text{kg}$ 。所用  $\alpha$  粒子的波长是多少? 对原子的线度  $10^{-10} \text{m}$  来说, 这种  $\alpha$  粒子能像卢瑟福做的那样按经典力学处理吗?

**解**  $\alpha$  粒子的静能为

$$E_0 = mc^2 = \frac{6.7 \times 10^{-27} \times 9 \times 10^{16}}{1.6 \times 10^{-19}} = 3.8 \times 10^3 \text{MeV}$$

由于  $E \ll E_0$ , 可按经典力学求其动量, 其波长为

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 6.7 \times 10^{-27} \times 7.7 \times 10^6 \times 1.6 \times 10^{-19}}} = 5.2 \times 10^{-15} \text{m}$$

由于  $\lambda \ll 10^{-10} \text{m}$ , 所以可以把  $\alpha$  粒子当做经典粒子处理。

**例 1.1.5** 为了探测质子和中子的内部结构, 曾在斯坦福直线加速器中用能量为 22GeV 的电子做探测粒子轰击质子。这样的电子的德布罗意波长是多少? 质子的线度为  $10^{-15} \text{m}$ 。这样的电子能用来探测质子内部的情况吗?

**解** 所用电子能量(22GeV)大大超过电子的静能(0.51MeV), 所以需用相对论计算其动量,  $p = E/c$ 。而其德布罗意波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{E} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{22 \times 10^9 \times 1.6 \times 10^{-19}} = 5.7 \times 10^{-17} \text{m}$$

由于  $\lambda \ll 10^{-15} \text{m}$ , 所以这种电子可以给出质子内部各处的信息, 即用来探测质子内部的情况。

## 1.1.2 不确定关系

### 1. 不确定关系的表述和含义

不确定关系, 有时又称为测不准关系, 是海森伯在 1927 年首次提出的。它反映了微

观粒子运动的基本规律,是物理学中极为重要的关系式。它包括多种表示式,其中两个是:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.1.6)$$

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.1.7)$$

式中:  $\hbar = h/2\pi$ 。

式(1.1.6)表明,当粒子被局限在  $x$  方向的一个有限范围  $\Delta x$  内时,它的动量分量  $p_x$  必然有一个不确定的数值范围  $\Delta p_x$ ,两者的乘积满足  $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ 。换言之,假如  $x$  的位置完全确定 ( $\Delta x \rightarrow 0$ ),那么粒子可以具有的动量  $p_x$  的数值就完全不确定 ( $\Delta p_x \rightarrow \infty$ );当粒子处于一个  $p_x$  数值完全确定的状态时 ( $\Delta p_x \rightarrow 0$ ),我们就无法在  $x$  方向把粒子固定住,即粒子在  $x$  方向的位置是完全不确定的。

式(1.1.7)表明,若粒子在能量状态  $E$  只能停留  $\Delta t$  时间,则在这段时间内粒子的能量状态并非完全确定,它有一个弥散  $\Delta E \geq \hbar/2\Delta t$ ;只有当粒子的停留时间为无限长时(稳态),它的能量状态才是完全确定的 ( $\Delta E = 0$ )。

应该指出,在不确定关系中,关键的量又是普朗克常量  $h$ ,它是一个小量,因此不确定关系在宏观世界并不能得到直接的体现;但它不等于零,从而使得不确定关系在微观世界成为一个重要的规律。

## 2. 应用举例

### 例 1.1.6 束缚粒子的最小平均动能。

解 假如粒子被束缚在线度为  $r$  的范围内,即假定  $\Delta x = r$ 。根据式(1.1.6),粒子动量的确定度至少为

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x} = \frac{\hbar}{2r}$$

$\Delta p_x$  的定义是

$$\Delta p_x = \sqrt{(p_x - \bar{p}_x)_{\text{平均}}^2}$$

对于束缚在空间的粒子,其动量在任何方向的平均分量必定为零,即  $\bar{p}_x = 0$ ,故  $\Delta p_x$  与均方动量的关系为

$$(\Delta p_x)^2 = (p_x^2)_{\text{平均}}$$

对于三维空间,有

$$(p_x^2)_{\text{平均}} = \frac{1}{3} (p^2)_{\text{平均}}$$

依照这些关系式,我们可以得到最小的平均动能

$$E_k = \frac{p_{\text{平均}}^2}{2m} = \frac{3\hbar^2}{8mr^2}$$

式中:  $m$  为粒子的质量。

由此可见,  $E$  决不为零。这一结论从不确定关系得到,与束缚形式无关,只要粒子被束缚在空间内(换言之,粒子在势阱内),粒子的最小动量就不能为零(粒子不能落到阱底)。

### 例 1.1.7 电子不能落入(被束缚在)原子核内。

解 玻尔的原子理论不能解释:作加速运动的电子,为什么既辐射能量而又不落入核