



普通物理学

山东大学
余丰人

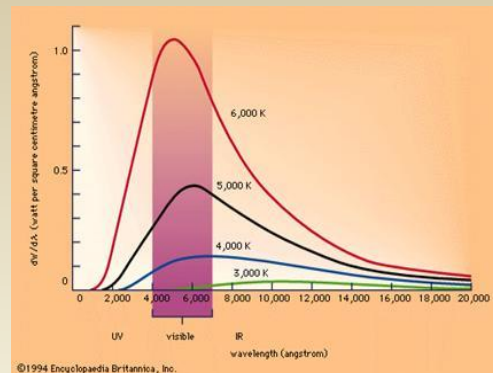
第20章 量子物理基础

§ 1 量子物理的实验背景

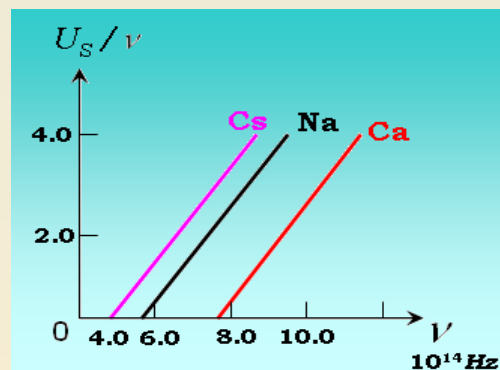
§ 2 薛定谔方程

§ 3 粒子的量子化运动

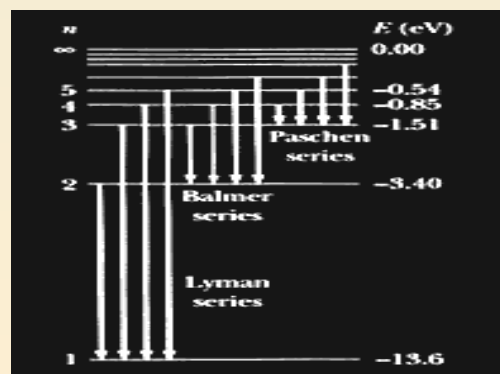
黑体辐射



光电效应



氢原子光谱



§ 1 量子物理的实验背景

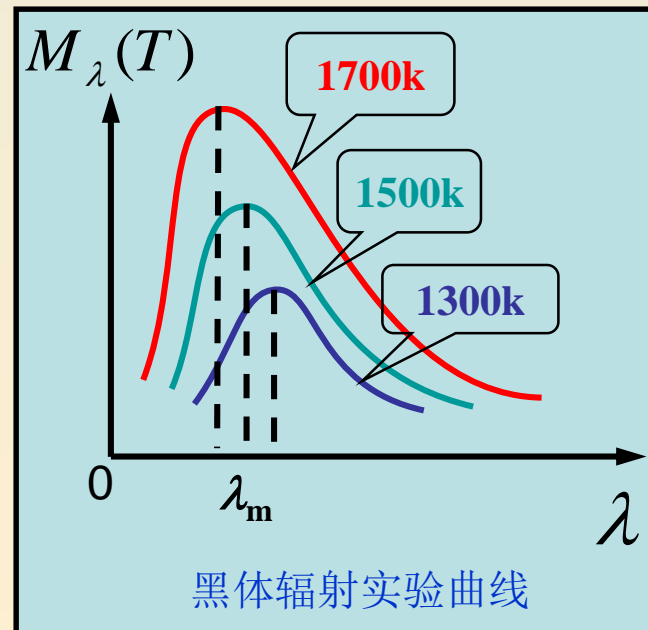
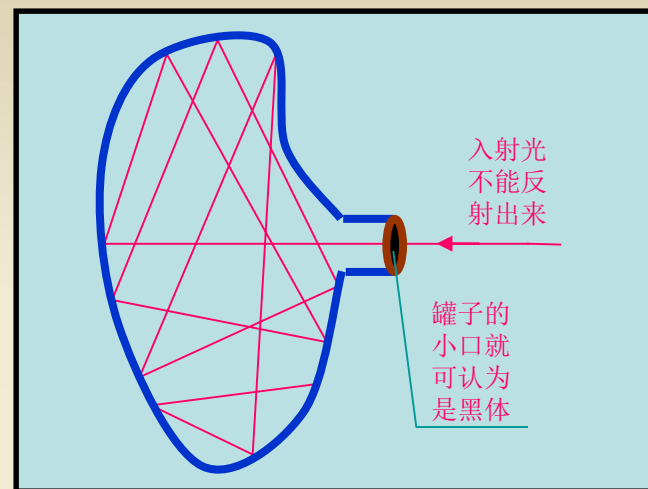
- 19世纪末20世纪初，黑体辐射、光电效应、氢原子辐射光谱、康普顿效应等实验，经典物理理论都无法解释。
- 1900年12月14日（被认为是量子论的诞生之日），普朗克提出了“能量子”的假设，神奇地解释了黑体辐射实验，获1918年诺贝尔物理学奖。
- 1905年，爱因斯坦提出了“光量子”的假设，完美地解释了光电效应实验，获1921年诺贝尔物理学奖。
- 1913年，波尔提出了角动量“量子化”的假设，圆满地解释了氢原子辐射光谱实验，获1922年诺贝尔物理学奖。
- 1923年，康普顿用爱因斯坦的“光量子”理论，很好地解释了康普顿效应实验，获1927年诺贝尔物理学奖。
- 1801年，杨氏双缝干涉实验证明了光的波动性，黑体辐射、光电效应、氢原子辐射光谱康普顿效应等实验又证明了光的粒子性，光的波-粒二象性是量子物理的基础。

1.黑体辐射-1

- 热辐射：一切物体分子都包含带电粒子，分子的热运动将导致电磁（光）辐射，该辐射称为热辐射。
- 热辐射能量：它与物体特性、辐射面积、物体温度、辐射波长有关。
- 黑体：它是没有反射的物体。它是研究热辐射的标准物体。
- 黑体辐射实验曲线：它是在一定温度下，单位面积，在单位波长范围辐射的能量（功率）的实验结果。

$$M_{\lambda}(T) = \frac{dM(T)}{d\lambda}$$

$$M(T) = \int_0^{+\infty} M_{\lambda}(T) d\lambda$$



1.黑体辐射-2

● 黑体辐射实验定律:

◆ 维恩位移定律:

$$T\lambda_m = b \quad b = 2.897 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$$

◆ 斯忒藩-玻耳兹曼定律:

$$M(T) = \sigma T^4 \quad \sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$$

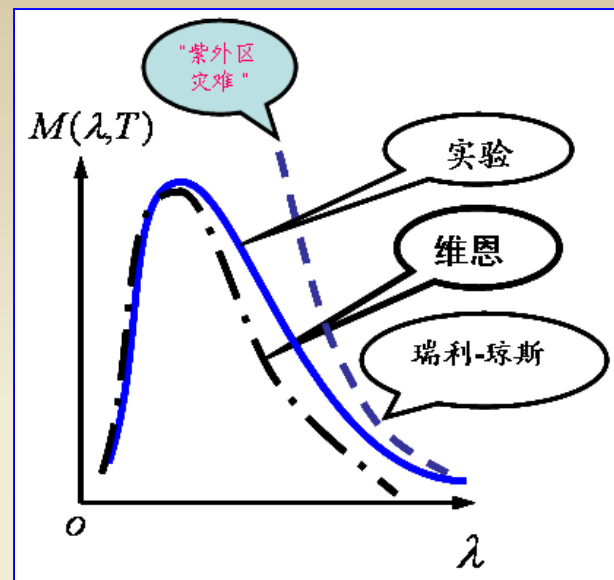
● 经典物理遇到的困难:

- ◆ **维恩理论:** 1896年, 维恩根据经典热力学, 得出了一个黑体辐射理论公式, 这个理论公式在短波段与实验曲线比较吻合, 但在长波段不吻合

$$M_\lambda(T) = C_1 \lambda^{-5} e^{-\frac{C_2}{\lambda T}} \quad C_1、C_2 \text{ 为常数}$$

- ◆ **瑞利-琼斯理论:** 1900年, 瑞利和琼斯根据经典电磁学, 得出了一个黑体辐射公式, 这个公式在长波段与实验曲线比较吻合, 但在短波段得出灾难性的结论, 开尔文称之为“紫外区灾难”

$$M_\lambda(T) = C_3 \lambda^{-4} T \quad C_3 \text{ 为常数}$$



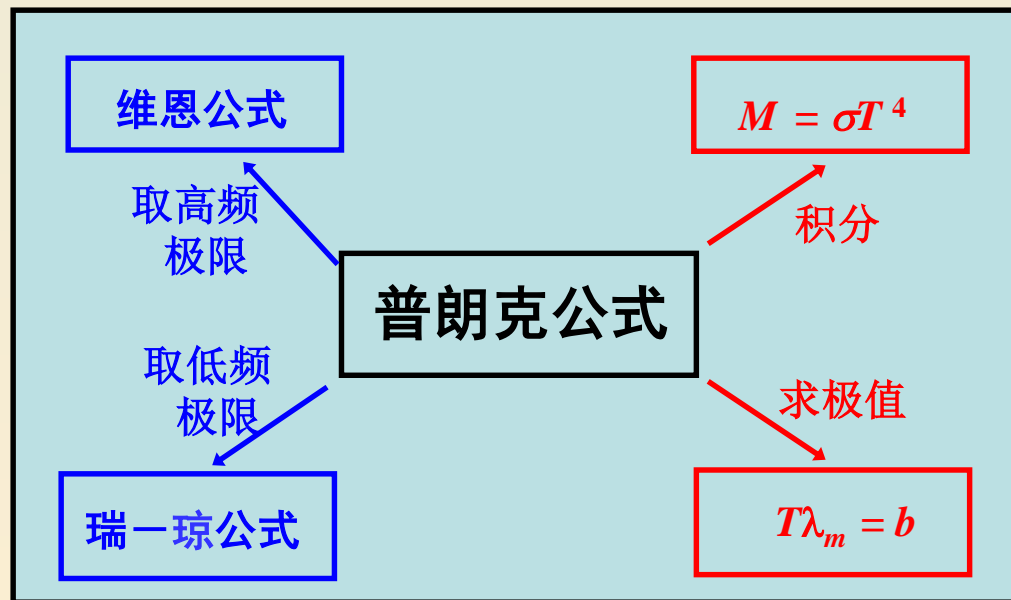
1.黑体辐射-3

- 普朗克公式：普朗克首先通过对维恩公式、瑞-琼斯公式、维恩位移定律、斯忒藩-玻耳兹曼定律的综合考虑，得到黑体辐射实验曲线拟合函数的形式，再通过拟合方法求出拟合函数中的待定常数，从而得普朗克公式，它完全与黑体辐射实验曲线吻合。

$$M_{\nu}(T) = \frac{2\pi h}{c^2} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

c : 光速

k : 玻尔兹曼常数

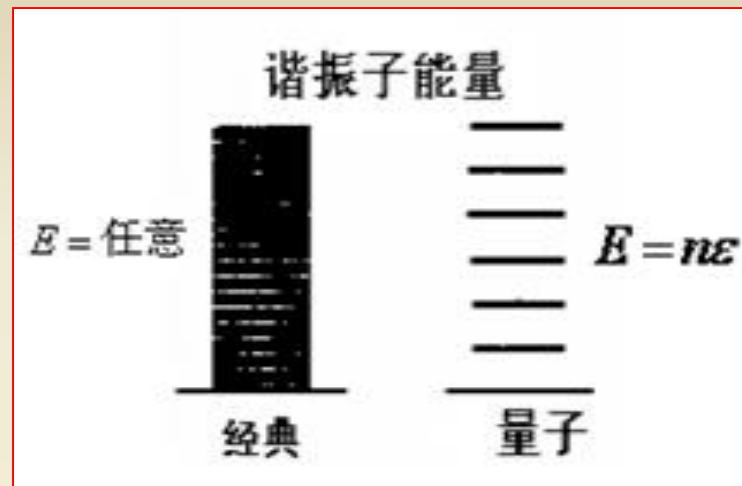


$h = 6.626068 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg} / \text{ s}$: 普朗克常数—通过拟合得到

1.黑体辐射-4

● 普朗克能量子假设（1900年）：

- ◆ 黑体中产生辐射或吸收电磁波的分子或原子，可看作是线性谐振子。
- ◆ 谐振子向外辐射（或吸收）电磁波时，其能量减少（或增加）。
- ◆ 每个谐振子能量的减少（或增加）是不连续的，其最小能量称为“能量子”，它为：

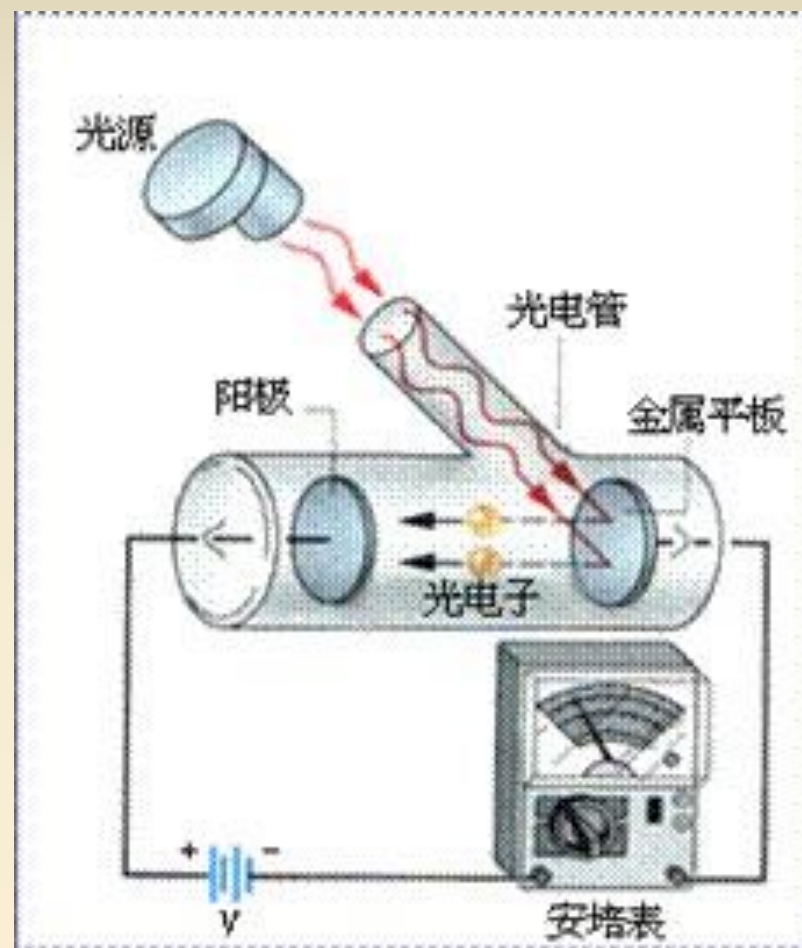


$$\varepsilon = h\nu \quad h = 6.626068 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg} / \text{s}$$

- 黑体辐射问题的解决：普朗克由量子假设和经典物理理论，从理论上推导出了普朗克公式，从而从理论上解决了黑体辐射问题。**连续性原理是经典物理学的一块基石**，普朗克是动摇这一基石的第一人。
- 1918年，普朗克由于这一工作而获诺贝尔物理学奖。

2.光电效应-1

- **光电效应**：光照射金属表面使之逸出电子的现象，称为光电效应。逸出的电子称为光电子
- **光电效应实验**：当紫外光照射到真空管的金属阴极K上时，就有光电子从表面逸出，逸出的光电子在加速阳极A电压 U_A 的作用下，从K到A，从而在电路中形成电流，称为光电流，光电流强度可由电流计G读出。



2.光电效应-2

光电效应伏-安曲线:

- ◆ 饱和光电流强度（光电子数目）与入射光强度成正比。
- ◆ 阳极加上反向截止电压，才能抵消光电子的初始动能，从而阻碍光电子达到阳极，即：

$$E_k = eU_s$$

截止电压-入射光频率特性:

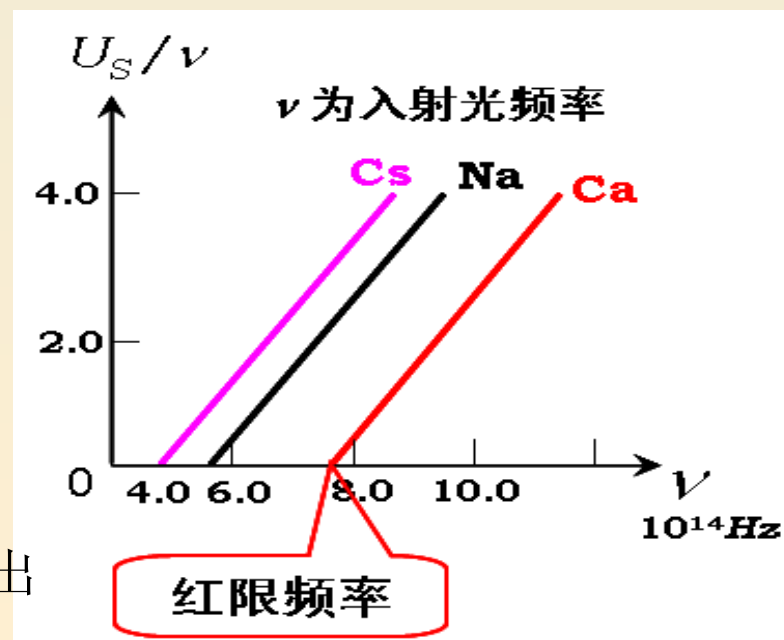
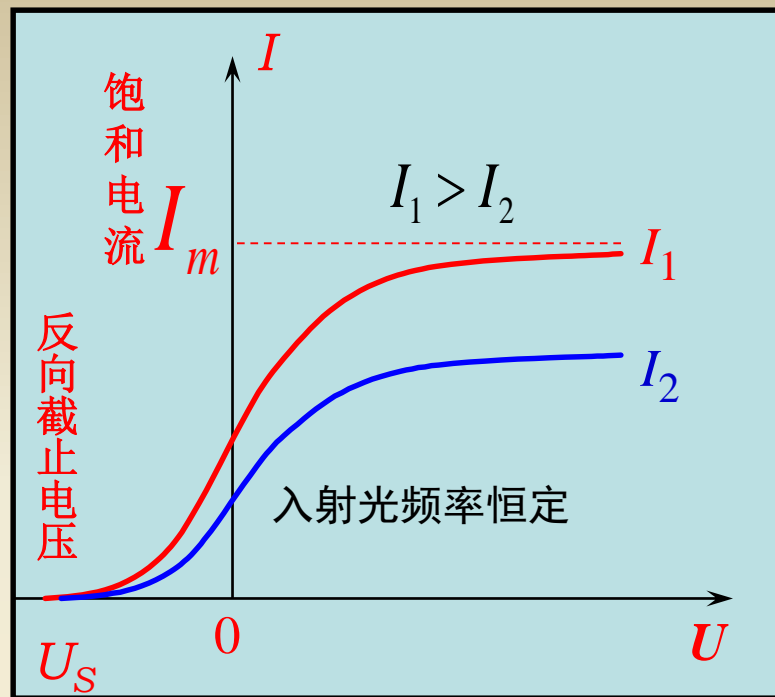
$$U_s = k(\nu - \nu_0)$$

k : 与阴极材料无关

ν_0 : 红限频率，只与阴极材料有关

$\nu < \nu_0$ 时, $E_k = U_s < 0$ 无光电子逸出

$\nu \geq \nu_0$ 时, $E_k = U_s \geq 0$ 才有光电子逸出



2.光电效应-3

● 光电效应实验总结：

- ◆ 光电子初动能与光频率 ν 成线性关系。
- ◆ 只有光的频率 $\nu \geq \nu_0$ 时，电子才会逸出。
- ◆ 光电子即时发射，滞后时间不超过 10^{-9} 秒。
- ◆ 逸出光电子的多少取决于光强。

● 经典物理与实验的矛盾：

- ◆ 光是电磁波，激发光电子逸出的原因是波的强度，而不是波的频率。
- ◆ 光电子初动能取决于光强，不能解释实验。
- ◆ 只要光强足够大，光电子就可以逸出，不能解释实验。
- ◆ 光强很小时，激发光电子的能量有一个积累过程，不能解释实验。
- ◆ 逸出光电子的多少取决于光强，可解释实验。

2.光电效应-4

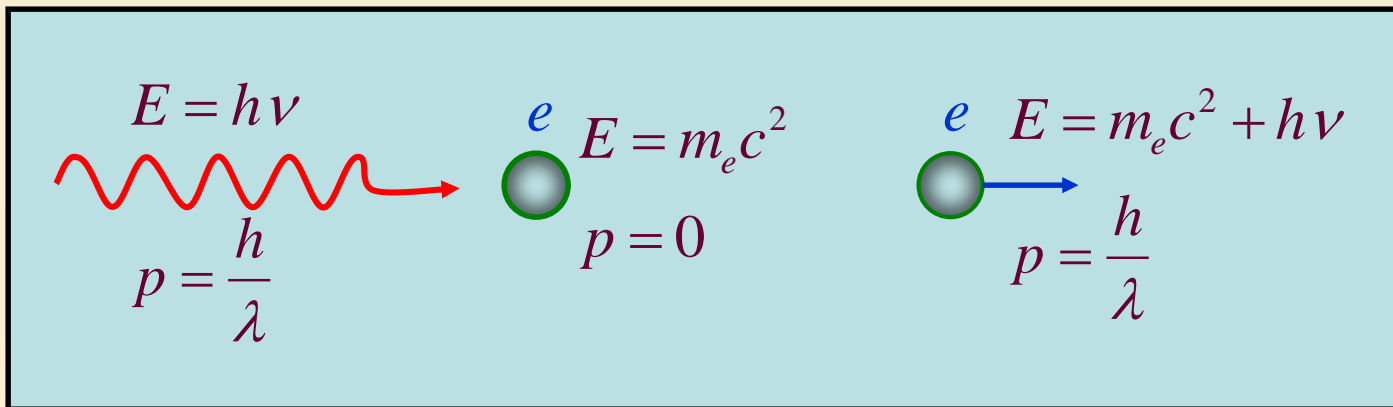
● 爱因斯坦的光量子假设（1905年）：

- ◆ 光具有波-粒二象性，光在传播过程中表现为波动性，如光的干涉和衍射，光在与物质相互作用时表现为粒子性，如光电效应。
- ◆ 一束光就是一束具有N个光量子（光子）的流，频率为 ν 的光，其光子的能量和动量分别为：

$$E = h\nu \quad h \text{ 为普朗克常数}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{由相对论得光子 } p = E/c = h\nu/c = h/\lambda)$$

- ◆ 光照射金属时，金属中的电子吸收一个光子，而获得能量 $h\nu$ 。



2.光电效应-5

● 爱因斯坦的光电效应的成功解释：

- ◆ 金属表面存在一阻止电子逸出的电势，电子要克服这一电势逸出所需的最低能量称为金属电子的逸出功**A**，它是与金属材料有关的常数。
- ◆ 光照射金属时，金属中的电子吸收一个光子，而获得能量 $h\nu$
- ◆ 金属中的电子吸收一个光子能量 $h\nu$ ，一部分用于克服逸出功**A**，一部分成了电子逸出的初始动能**E_k**，因此

$$h\nu = A + E_k \quad k = \frac{h}{e}: \text{与金属材料无关}$$

$$E_k = eU_s$$

$$h\nu = A + eU_s \quad \nu_0 = \frac{A}{h}: \text{红限频率与金属材料有关}$$

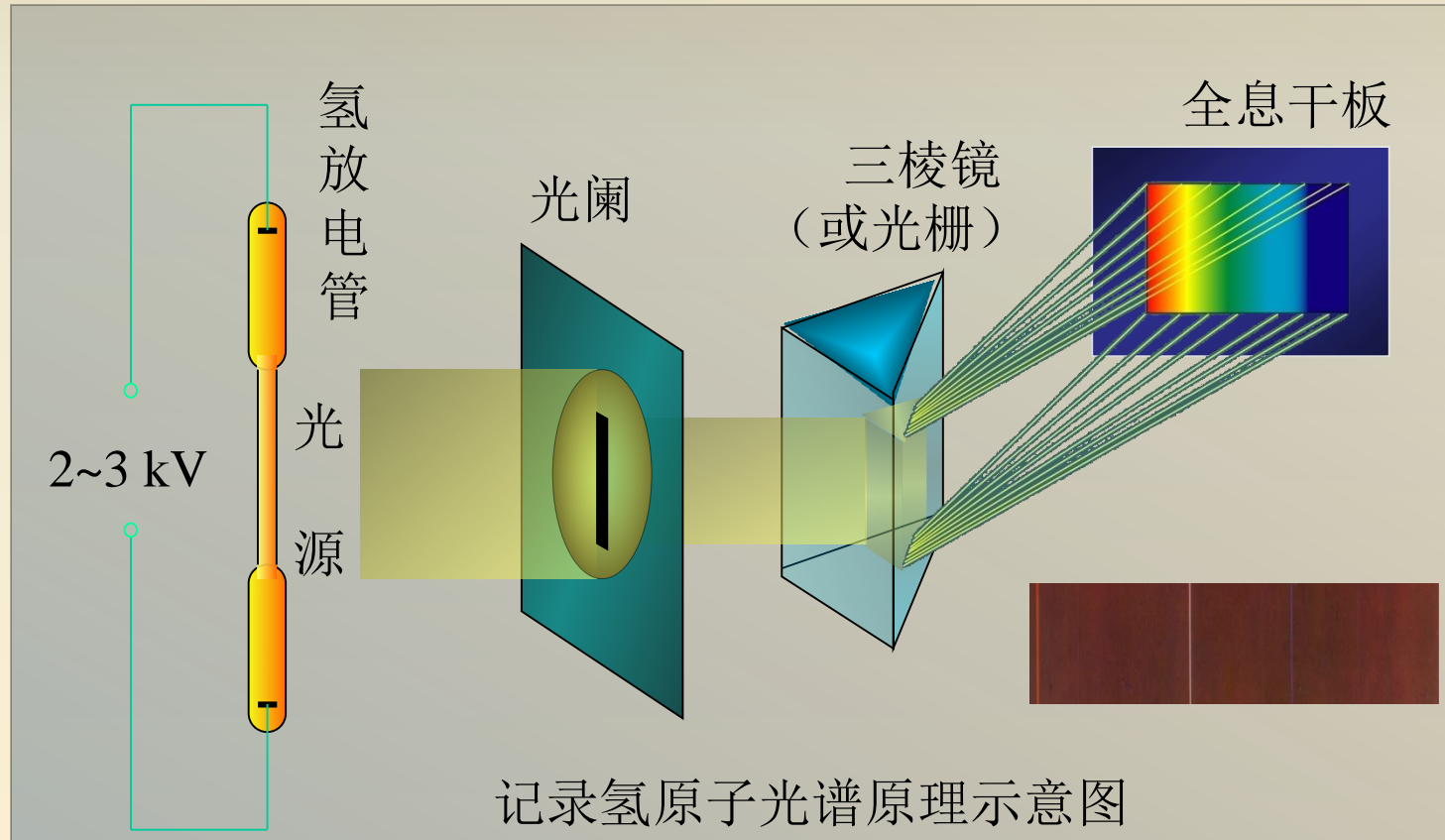
$$U_s = \frac{h}{e} \left(\nu - \frac{A}{h} \right) \quad U_s = k(\nu - \nu_0): \text{理论导出了光电效应公式}$$

- ◆ 光强越强，光子越多，激发光电子也越多。
- ◆ 光子打上电子，电子吸收光子能量是即时发生的，光电效应是即时的。

● 1921年，爱因斯坦由于这一工作而获诺贝尔物理学奖。

3.氢原子光谱 -1

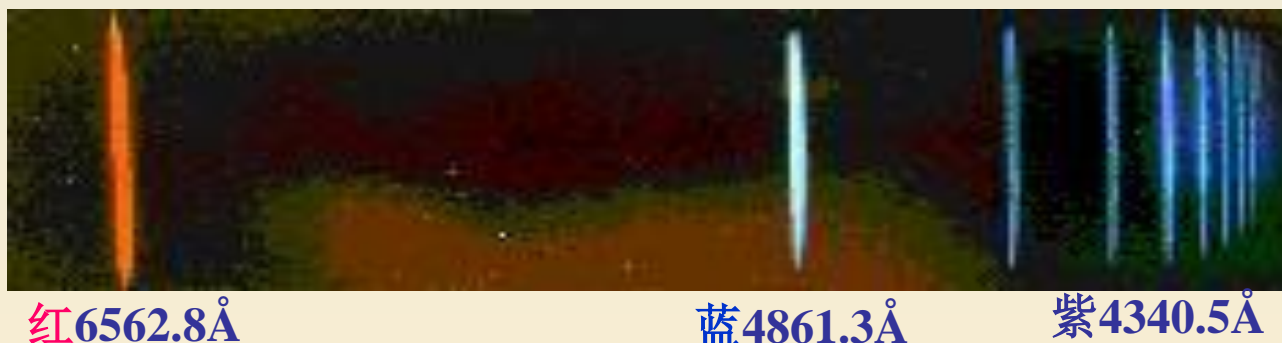
● 氢原子光谱实验：



3.氢原子光谱 -2

- **原子光谱：**实验发现，任何原子都会发光，其光谱都是由不连续的谱线组成，不同种类原子的光谱具有不同的谱线。

氢原子的可见光光谱：



- **原子光谱与原子结构：**不同种类原子的光谱具有不同的谱线，说明原子的光谱是由其原子的结构决定，谱线结构反映了其结构特征。

3.氢原子光谱 -3

- 氢原子光谱的规律：巴耳末和里德伯等总结出一个氢原子光谱按频率的经验公式，叫里德伯方程：

$$\nu = R \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \begin{matrix} k = 1, 2, \dots \\ n = k + 1, k + 2, \dots \end{matrix}$$

$R = 1.096776 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$: 里德伯常数

k=1 赖曼系（紫外）；
k=2 巴耳末系（可见光）；
k=3 帕邢系（红外）；
k=4 布喇开系（红外）；
k=5 普芳德系（红外）；

- 经典物理的困难：里德伯方程非常简洁，对氢原子光谱的描述非常准确，但经典物理长期以来都无法对其解释，不要说谱线规律，连谱线的不连续性都无法说明。

3.氢原子光谱 -4

玻尔量子化假设 (1913年):

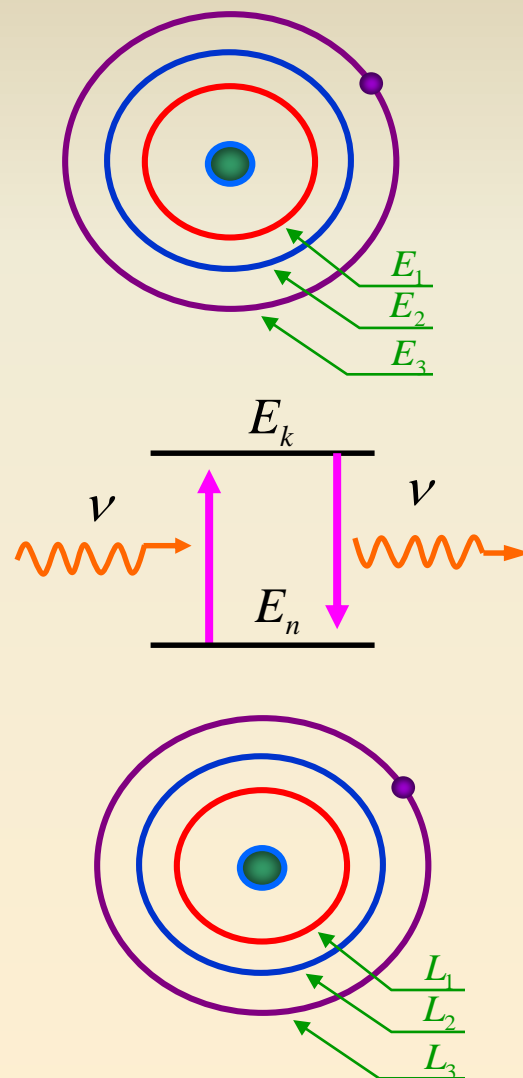
◆ **定态假设:** 氢原子的电子具有多种可能的稳定圆周运动状态, 叫定态, 一般电子总是运动在某个定态, 这时它不辐射电磁波, 它的能量是稳定的, 叫定态能, 各个定态能之间是分离不连续的。

◆ **跃迁假设:** 电子从一个定态跃迁到另一定态, 会发射或吸收一个光子, 频率为:

$$\nu = \frac{|E_k - E_n|}{h}$$

◆ **角动量量子化假设:** 电子运动的角动量是量子化的, 为:

$$L = mvr = n \left(\frac{h}{2\pi} \right)$$
$$n = 1, 2, 3 \dots$$



3. 氢原子光谱 -5

玻尔氢原子光谱规律解释:

- ◆ 氢原子电子圆周运动力学方程和角动量量子化假设:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_e \frac{u^2}{r} \quad L = mvr = n \left(\frac{h}{2\pi} \right) \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

- ◆ 解氢原子电子圆周运动半径和速度:

$$r_n = n^2 \left(\frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} \right) \quad u_n^2 = \frac{e^4 / 4\epsilon_0^2 h^2}{n^2} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

- ◆ 求氢原子电子圆周运动能量:

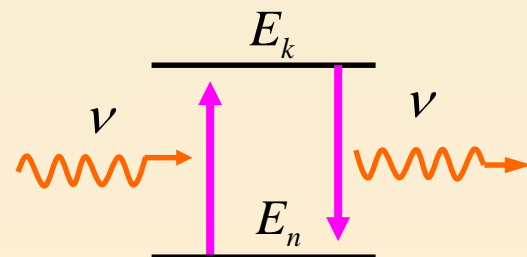
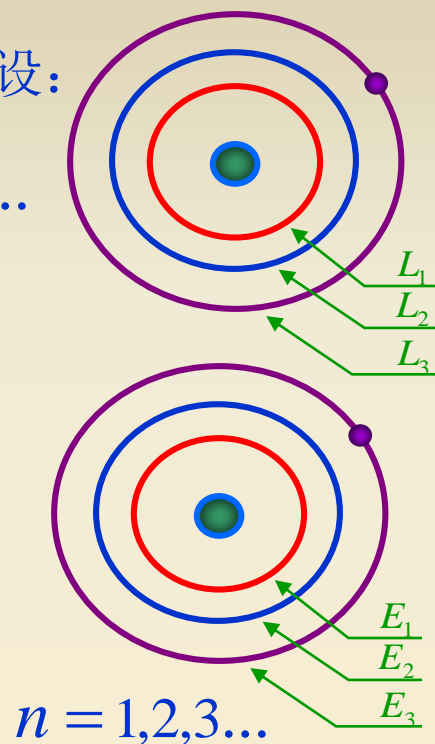
$$E_n = \frac{1}{2} m_e u_n^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = \frac{E_1}{n^2} \quad E_1 = -\frac{e^4 m_e}{8\epsilon_0^2 h^2} = -13.6 \text{ eV}$$

- ◆ 得氢原子电子跃迁频率:

$$\nu = \frac{|E_k - E_n|}{h} = R \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ 与里德伯方程一样}$$

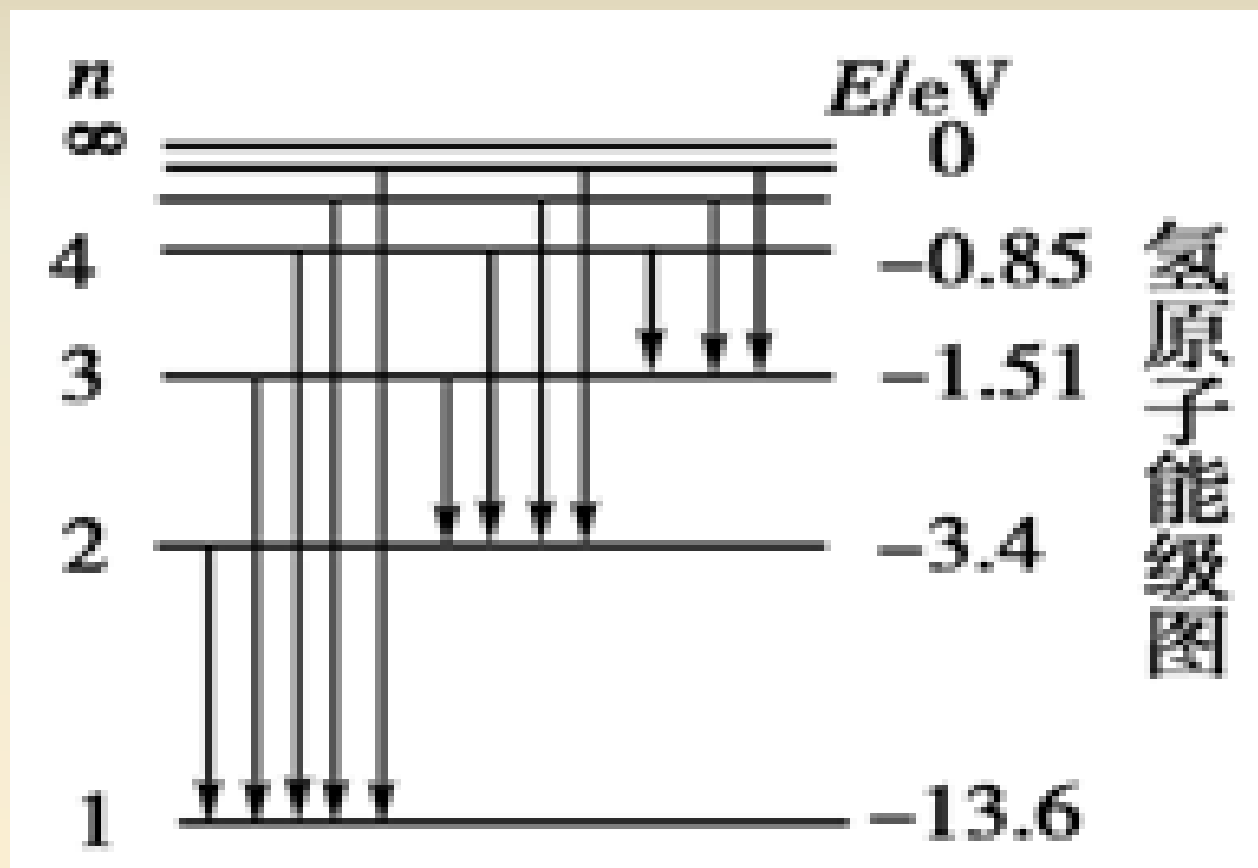
$$R = \frac{|E_1|}{h} = 1.0973731 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \text{ 与实验值几乎一样}$$

$$k = 1, 2, 3 \dots \quad n = k + 1, k + 2, k + 3 \dots$$



3.氢原子光谱 -6

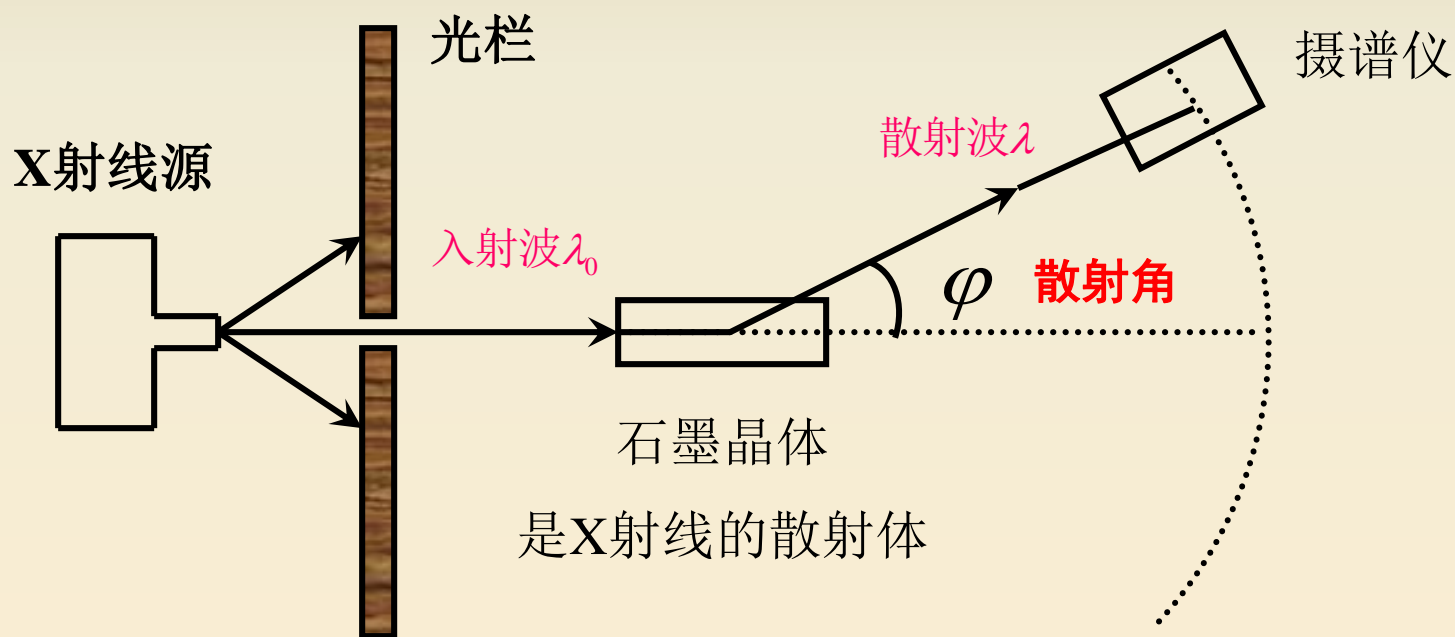
- 氢原子能级跃迁:



- 1922年，玻尔由于这一工作而获诺贝尔物理奖。

4.康普顿效应-1

- 康普顿散射实验：实验目的是入射波与散射波的波长比较。



4.康普顿效应-2

- 康普顿效应实验结果：**X射线**通过物质散射后波长变长了，并且散射波波长与散射角有关。

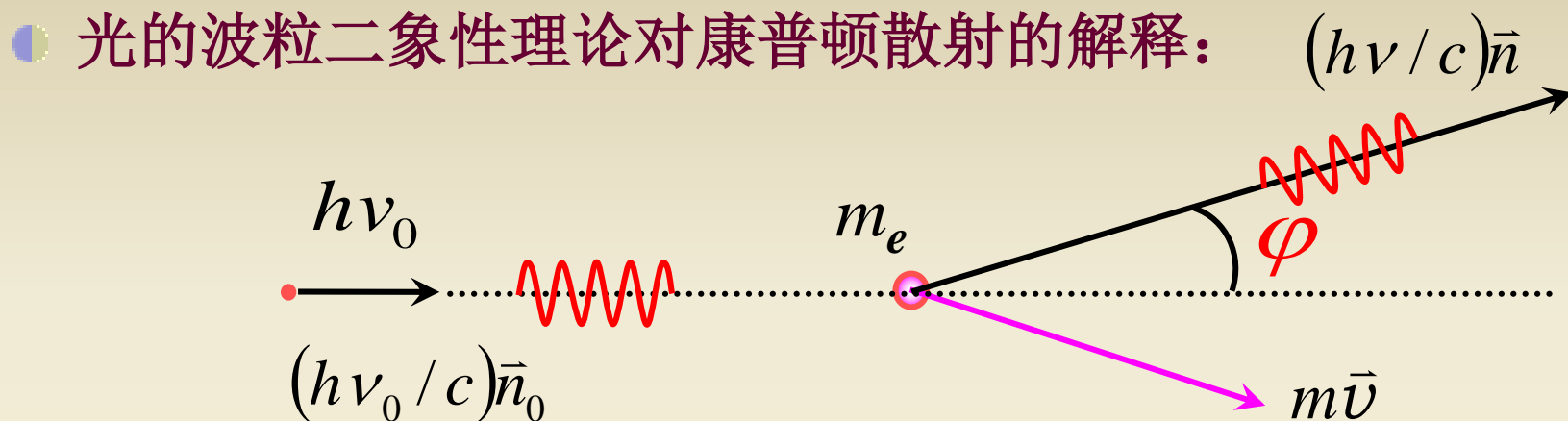
$$\lambda - \lambda_0 = \lambda_c (1 - \cos \varphi) = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\varphi}{2}$$

$\lambda_c = 0.00241\text{nm}$ ：康普顿常数，与散射物无关

- 康普顿效应的解释：

- ◆ 经典光的波动理论只能解释散射角为零，散射波波长不变的散射，而不能解释射角不为零，散射波波长变长的散射。
- ◆ **1923年**，康普顿用爱因斯坦的光量子理论圆满地解释了他的实验结果，从而又一次证实了光量子理论的正确性。
- **1927**，康普顿由于这一工作而获诺贝尔物理奖。

4.康普顿效应-3



根据能量和动量守恒：

$$h\nu_0 + m_e c^2 = h\nu + mc^2$$

$$(h\nu_0/c)\vec{n}_0 = (h\nu/c)\vec{n} + m\vec{v}$$

电子的相对论质量：

$$m = m_e / \sqrt{1 - v^2 / c^2}$$

解方程得：

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \varphi) = 2 \frac{h}{m_e c} \sin^2 \frac{\varphi}{2}$$

$$\lambda_c = h/m_e c = 0.00243 \text{ nm}$$

康普顿波长 λ_c 的理论值与实验值吻合得很好。

5.总结

- 黑体辐射实验支持普朗克理论：黑体辐射或吸收光的能量是一份一份不连续的，即能量是量子化的。
- 光电效应和康普顿效应实验支持爱因斯坦和康普顿理论：光的能量是一份一份不连续的，进一步认为光具有波-粒二象性。
- 氢原子光谱支持玻尔理论：肯定了爱因斯坦和康普顿的光子理论，进一步认为，电子的运动是量子化运动和能级跃迁运动。
- 结论1：光具有波-粒二象性，波动性由频率和波长描述，粒子性有能量和动量描述，它们之间的关系是：

$$E = h\nu \quad p = h / \lambda$$

- 结论2：电子的稳定运动状态是量子化的，电子可以从一种稳定运动状态跃迁到另一个稳定运动状态，并辐射或吸收一个光子的能量。

§ 2 薛定谔方程-1

- 1801年，杨氏双缝干涉实验说明光具有波动性，证明光是一种波。
- 1900年，普朗克用“能量子”解释了黑体辐射。1905年，用“光量子”解释了光电效应。1913年，波尔用“角动量量子化”和“光量子”解释了氢原子光谱。1923年，康普顿用爱因斯坦的“光量子”解释了康普顿效应。这些都证明光是一种粒子。
- 大量实验证明都证明光具有波-粒二象性，但在任何一个实验中，光只会显现出波动性和粒子性中的一种特性，不可能两种特性同时显现。
- 1923年，德布罗意假设实物粒子也具有波-粒二象性，提出了粒子波动性（德布罗意波）的新概念，并指出可用晶体对电子的衍射实验证明粒子波动性的存在，获1929年诺贝尔物理学奖。

§ 2 薛定谔方程-2

- 1926年，薛定谔提出了物质波和波函数概念，建立了波动力学方程-薛定谔方程，系统地回答了当时已知的实验现象，获1933年诺贝尔物理学奖。
- 1926年，玻恩提出了几率波概念，对波函数的物理意义作出了统计解释，获1954年诺贝尔物理学奖（迟到了的荣誉）
- 1927年，戴维逊和革末的晶体对电子的衍射实验证明了粒子波动性的存在。获1939年诺贝尔物理学奖。
- 1927年，海森伯提出不确定性原理，说明了粒子的波动性，获1932年诺贝尔物理学奖。
- 1923年-1927年，创建了量子力学，量子力学有两个理论，除了1926年薛定谔提出的波动力学，还有1925年海森伯提出的矩阵力学，这两个理论被薛定谔证明是等价的。

1. 德布罗意波

- 德布罗意假设：德布罗意认为波-粒二象性不是光独有的特性，一切实物粒子都有波-粒二象性。
- 德布罗意波：粒子以能量和动量表现其粒子性为，以频率和波长表现其波动性，其波-粒二象性关系为：

E : 粒子能量

$$E = h\nu$$

ν : 德布罗意波频率

P : 粒子动量

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

λ : 德布罗意波波长

h : 普朗克常数

- 波-粒二象性关系另一形式：

E : 粒子能量

$$E = \hbar\omega$$

$\omega = 2\pi\nu$: 角频率

P : 粒子动量

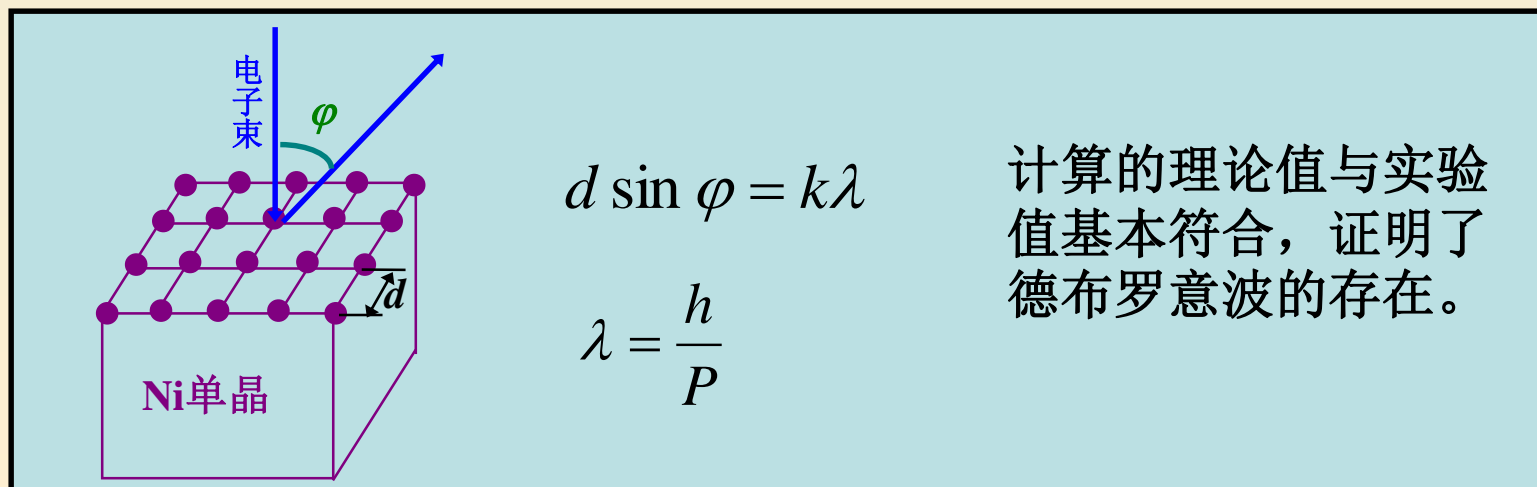
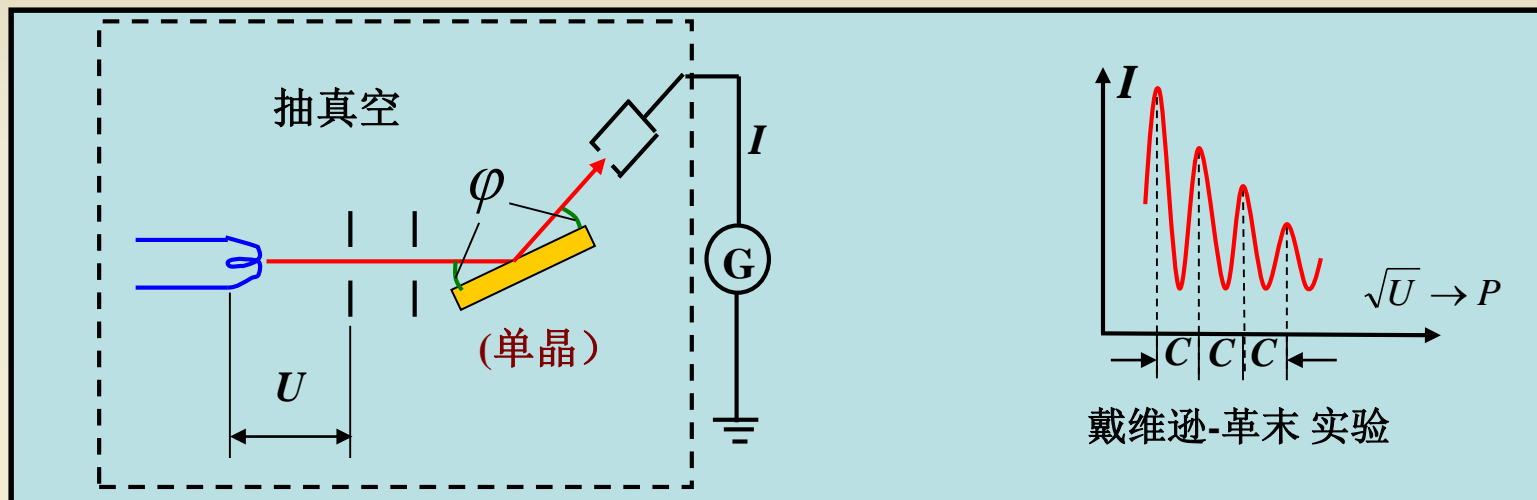
$$p = \hbar k$$

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$: 角波数

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

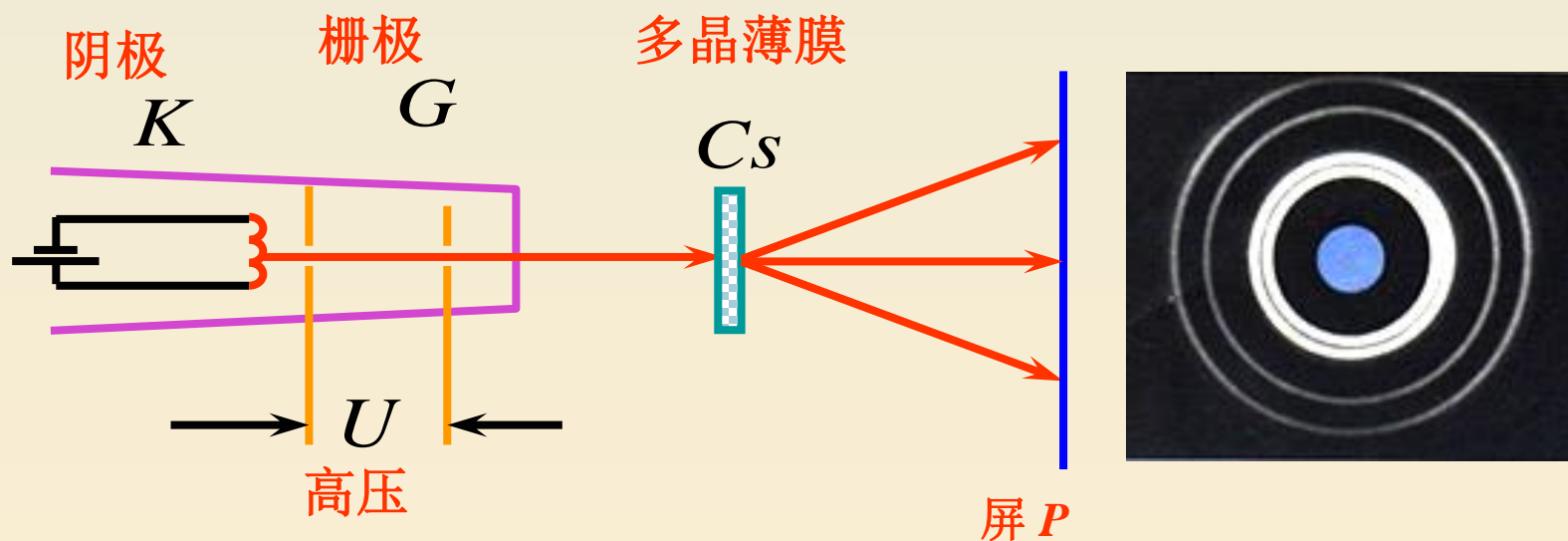
2. 戴维孙-革末实验

- 电子束在晶体表面上散射的实验：观察到和X射线衍射类似的电子衍射现象，首先证实了电子的波动性。



3. 汤姆逊电子衍射实验

- 电子衍射实验：观察到电子衍射现象，以后，大量实验事实证明，电子，原子甚至分子等实物粒子都具有波粒二象性。



4. 电子显微镜

● 显微镜的分辨率： $R \sim \frac{d}{\lambda}$ $\lambda \downarrow \Rightarrow R \uparrow$

● 电子的德布罗意波波长：它比光波长小得多，以电子束代替光束的电子显微镜的分辨率比光学显微镜要高得多。

◆ 自由电子的动能为：

$$E_k = 54eV$$

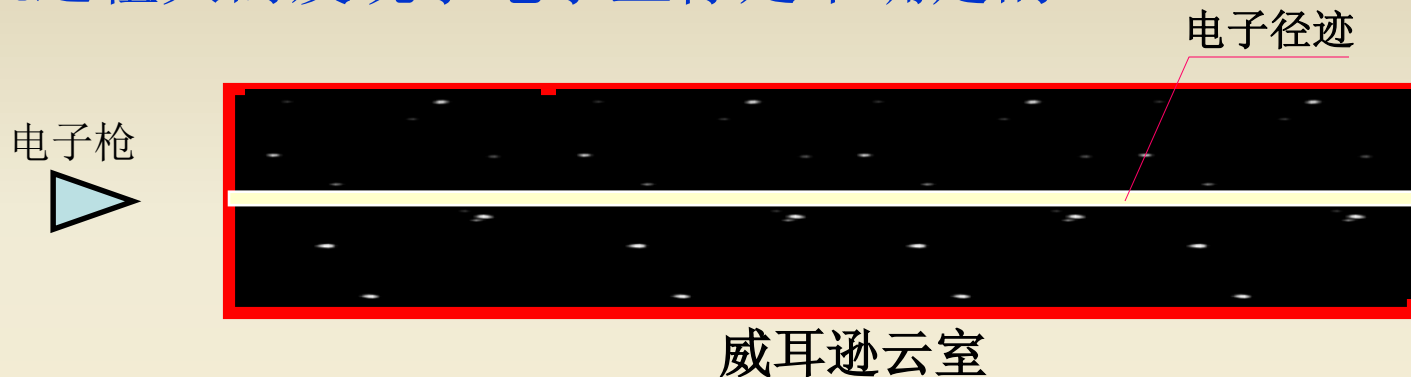
◆ 德布罗意波波长为：

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{P} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE_K}} \\ &= \frac{h}{\sqrt{2meU}} = \frac{12.2}{\sqrt{U}} = 1.65 \text{ \AA}\end{aligned}$$



5. 不确定度关系（测不准原理）

- 电子轨迹的不确定性：海森伯1927年从云室中观察到电子轨迹粗大而发现了电子坐标是不确定的。



- 不确定性关系：海森伯通过对电子单缝衍射等若干“理想”实验的分析研究后，提出了微观粒子的不确定关系：

$$\Delta x \cdot \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{粒子的位置和在该位置的动量不能同时确定}$$

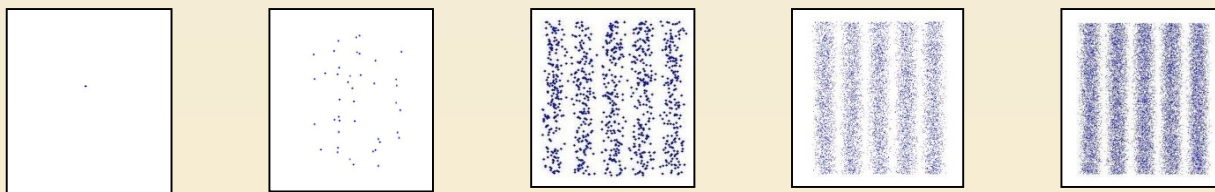
$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{粒子的能量和处于该能量的时间不能同时确定}$$

- 不确定性关系的意义：不确定关系说明粒子具有波动性，在宏观上，物体能量和动量都很大很大，普朗克常数可认为是零，所以在宏观上，物体运动是确定的无波动性。

6. 概率波

● 电子逐个穿过双缝的衍射实验：

- ◆ **实验条件：**如果减弱入射电子束的强度，使电子一个一个依次通过双缝。
- ◆ **粒子性：**当电子数很少时，呈现的是杂乱的点（无规律），说明电子确实是粒子。
- ◆ **波动性：**则随着电子的积累，将逐渐显示衍射图样(有规律)，说明电子的运动确实是具有波动性，但这种波动性是一个电子在许多次相同实验中的统计结果



- **概率波：**玻恩认为德布罗意波是一种概率波，概率波给出的结果服从统计规律性，它不能预言粒子必然在哪里出现，只能预言粒子出现的概率。通过统计性把波和粒子两个截然不同的经典概念联系了起来。

7.波函数

- 经典力学中的状态：是用质点位置和动量（速度）来描述。
- 微观粒子状态描述的困难：由于微观粒子具有波-粒二象性，其运动没有确定的位置和动量，不能用位置和动量来描述微观粒子的运动状态。

- 德布罗意波的表示：微观粒子具有波-粒二象性

波动性的复函数数表示： $\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$

粒子性的表示： $E = \hbar\omega$ $p = \hbar k$

波-粒二象性表示： $\psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$

- 量子力学中的状态：是用波函数来描述，它是空间和时间的实变复函数，它同时描述了粒子的波动性和粒子性。

$$\psi = \psi(\vec{r}, t)$$

8.波函数的解释

- 对波函数的解释：玻恩将德布罗意波（物质波）解释为几率波，波函数是对德布罗意波的表示，所以玻恩对波函数作出了如下几率解释：

$|\psi|^2 = \psi\psi^*$: 是粒子在空间出现的几率密度

$\iiint_V |\psi|^2 dV$: 是粒子在空间 V 出现的几率

$\iiint_{\infty} |\psi|^2 dV = 1$: 在整个空间粒子一定出现（波函数归一化条件）

- 微观粒子运动的非决定性：微观粒子运动没有确定的位置，在空间任何地方都可能出现，但是在空间不同位置出现的可能性是不一样的。

9.薛定谔方程-1

- 薛定谔的思想：薛定谔认为德布罗意的讨论方式过于简单，为了正确处理波，应当有一个波动方程，微观粒子的运动状态由波函数描写，薛定谔从波函数入手，通过“猜”加“凑”建立了微观粒子的波动微分方程，即薛定谔方程。
- 薛定谔方程的“猜”加“凑”过程：

对于一个能量为 E ，动量为 P 的自由粒子，其波函数是平面波：

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

波函数对 x 的一阶偏导数：

$$p = -\frac{i\hbar}{\psi} \frac{\partial}{\partial x} \psi \qquad p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

波函数对 x 的二阶偏导数：

$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{\psi} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \qquad p^2 \rightarrow (-i\hbar)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

9.薛定谔方程-2

波函数对 t 的一阶偏导数:

$$E = \frac{i\hbar}{\psi} \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

一个在势能场 $U(x,t)$ 中运动的粒子, 它的经典力学能量方程是

$$\frac{1}{2m} p^2 + U(x,t) = E$$

将偏导数结果代入经典方程得一维薛定谔方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x,t)\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

推广得三维薛定谔方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(x, y, z, t)\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

10.对应原理和算符

- 对应原理：薛定谔方程的“猜”加“凑”过程可得对应原理

$$\begin{aligned} p &\rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} p^2 + U(x, t) &= E : \text{经典力学方程} \\ \Downarrow \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \Downarrow \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x, t) \psi &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi : \text{量子力学方程} \end{aligned}$$

- 算符：量子力学的力学量用算符表示：

能量算符： $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ (形式)

坐标算符： $\hat{r} = \vec{r}$

动量算符： $\hat{p} = -i\hbar \nabla$

角动量算符： $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla$

哈密顿算符： $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \leftarrow$ 由具体体系决定

- 薛定谔方程的普遍形式：

$$E = H \quad \Rightarrow \quad \hat{E} = \hat{H} \quad \Rightarrow \quad \hat{E} \psi = \hat{H} \psi \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$$

11. 叠加原理和力学量平均值

● 叠加原理:

ψ_1 : 粒子存在状态1

ψ_2 : 粒子存在状态2

$\psi = \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$: 粒子也存在叠加态

粒子处在叠加态 ψ 时,
粒子可能处在状态1,
粒子也可能处在状态2.

● 力学量平均值:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi (\hat{x} \psi)^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi (x \psi)^* dx$$

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi (\hat{p} \psi)^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi \right)^* dx$$

12. 定态薛定谔方程

- **定态**：是指粒子的概率密度、能量不随时间变化的状态，自由粒子在稳定势场中运动是定态问题，微观粒子作定态运动，可对波函数分离变量。

$$\psi = \varphi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

- **定态薛定谔方程**：

$$\text{薛定谔方程: } -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U(x, y, z, t)\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

$$\psi = \varphi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Rightarrow \Downarrow$$

$$\text{定态薛定谔方程: } \nabla^2\varphi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\varphi = 0$$

§ 3 粒子的量子化运动

薛定谔方程：

- ◆ 薛定谔方程是线性微分方程。
- ◆ 作为方程解的波函数 Ψ 满足叠加原理。
- ◆ 从数学上来说，对于任何能量 E 的值，方程都有解，但不是对所有 E 值的解都能满足物理上的要求

波函数的标准条件：一般而言，作为有物理意义的波函数，方程的解必须是：单值的、有限的和连续的。

量子化条件：根据标准条件，从薛定谔方程自然而然就能得到微观粒子的重要特征—量子化条件

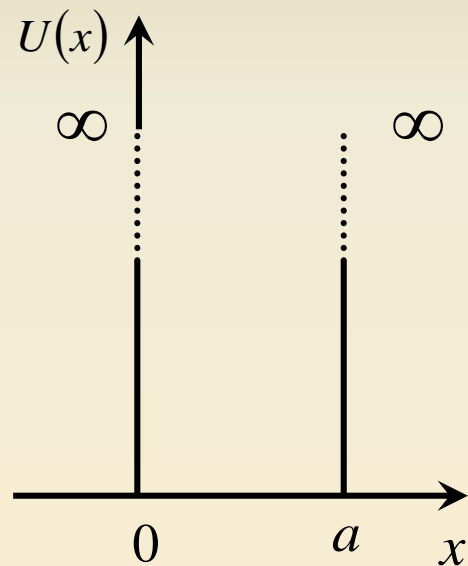
应用：在当今材料科学领域中，电子体系的薛定谔方程决定着材料的电导率、金属的热导率、超导电性、能带结构、磁学性能等等。

1.一维无限深势阱-1

- 粒子的运动方程：质量为 m 的粒子在一维无限深势阱中运动，满足

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \varphi = 0$$

$$U = \begin{cases} 0 & 0 < x < a & \text{阱内} \\ \infty & x \leq 0, x \geq a & \text{阱外} \end{cases}$$



- 粒子运动能量和波函数：

$$\text{势阱外: } \varphi = 0 \quad E = \infty$$

$$\text{势阱内: } \varphi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

$$E_n = E_1 n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots \text{叫能量量子数}$$

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

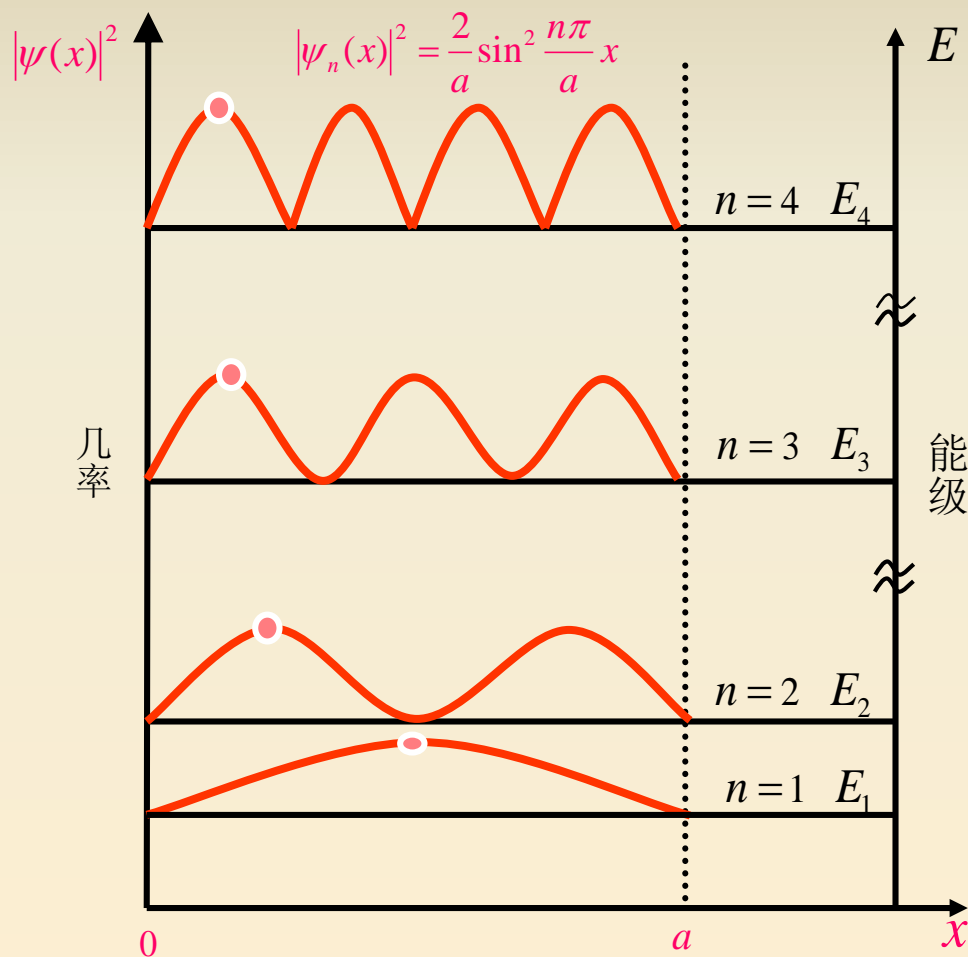
$$n = 1 \quad \text{叫基态能}$$

1.一维无限深势阱-2

● 粒子的运动是量子化的：

- ◆ 势阱外粒子不会出现。
- ◆ 势阱内粒子的运动能量是量子化的。
- ◆ 势阱内粒子的运动状态是离散状态，这些状态为驻波。
- ◆ 基态能不为零，存在零点能，不存在不运动的粒子状态。

● 几率和能级：粒子在各处几率不一样。当粒子能量到宏观值时，粒子在各处几率将一样。

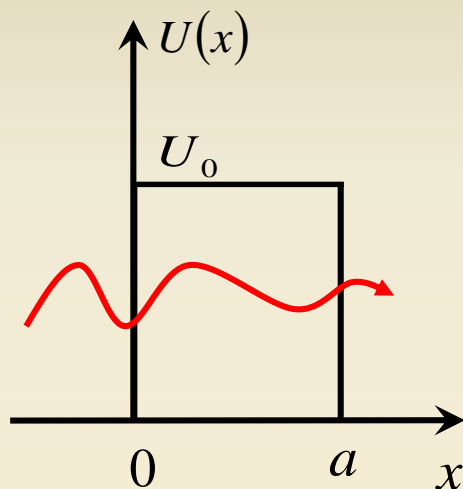


2. 一维势垒和隧道效应-1

- 粒子的运动方程：质量为 m 的粒子射向一维势垒时，满足

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \varphi = 0$$

$$U = \begin{cases} 0 & 0 \geq x & \text{1区} \\ U_0 & 0 < x < a & \text{2区势垒} \\ 0 & x \geq a & \text{3区} \end{cases}$$



- $E < U_0$ 时粒子的透射运动波函数：

$$\varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} : \text{入射波}$$

$$\varphi_2(x) = Ae^{-k_2x} : \text{衰减波}$$

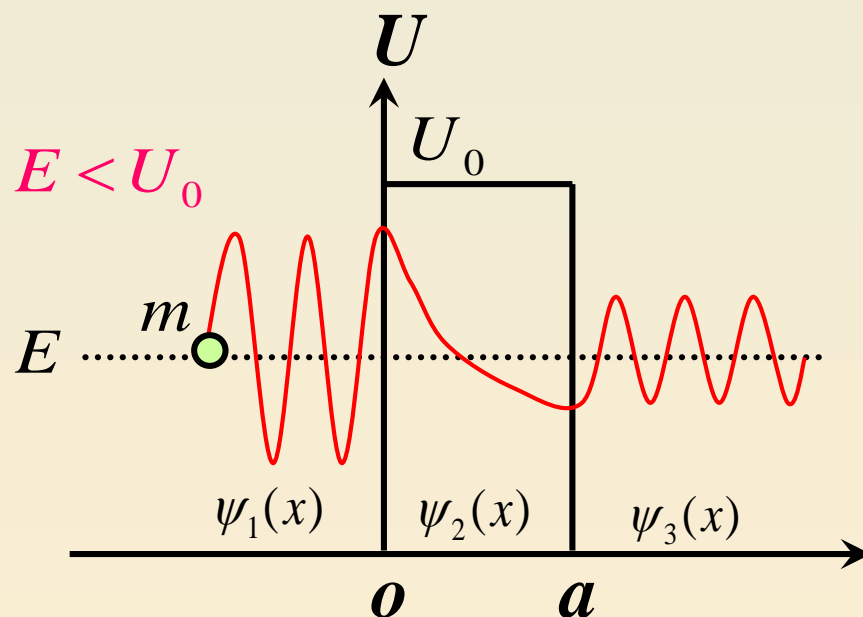
$$\varphi_3(x) = Ae^{-k_2a} e^{ik_1(x-a)} : \text{透射波}$$

$$k_1 = \sqrt{2mE / \hbar^2}$$

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E) / \hbar^2}$$

2. 一维势垒和隧道效应-2

- **隧道效应**：当入射粒子能量比势垒小时，粒子还是可以穿透势垒，穿透势垒的概率密度随势垒宽度增大按指数规律减小。



3.扫描隧道显微镜-1

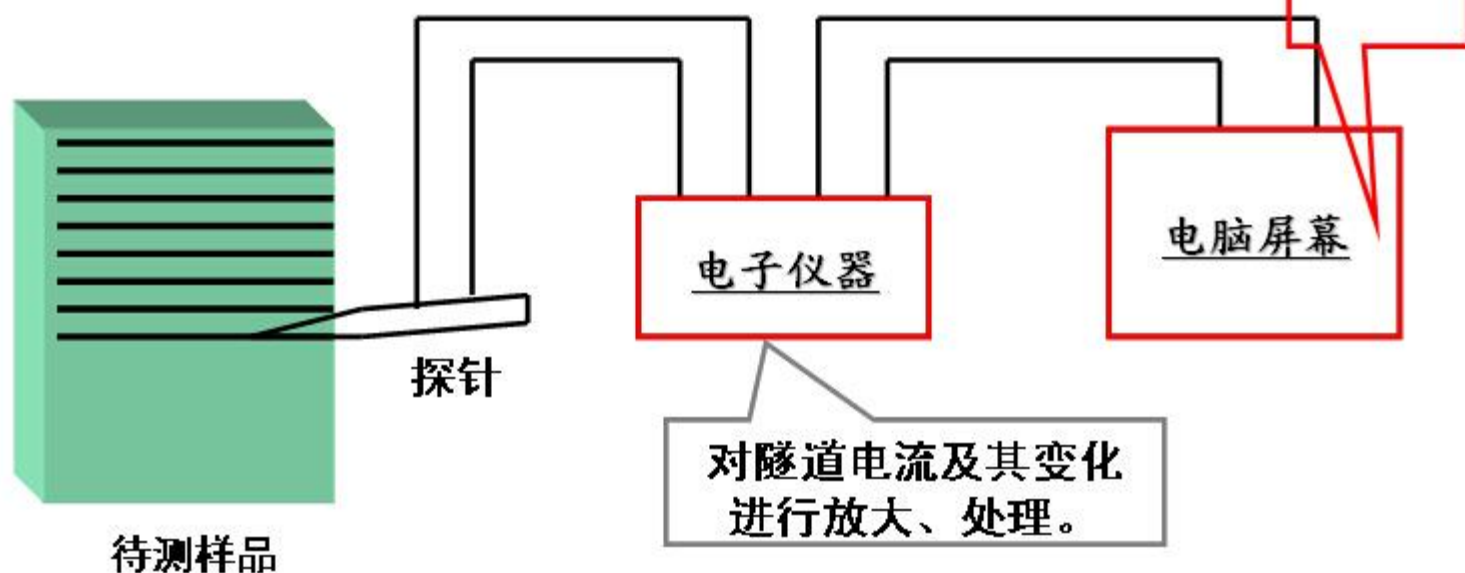
扫描隧道显微镜

特征：扫描隧道显微镜不使用光源和透镜。

工作原理：量子隧道效应。

显微部件：一枚细而尖的探针（如钨丝）

装置和工作原理如下图：



3.扫描隧道显微镜-2

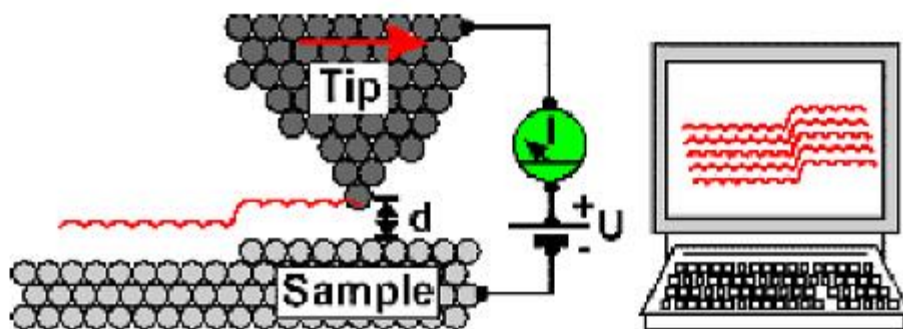
原理分析:

在样品的表面有一表面势垒阻止内部的电子向外运动。由于电子的隧道效应，这时，在样品与针尖之间加一微小电压，电子就会穿过电极间的势垒形成隧道电流。

为了显示表面的微观结构，要求探针在样品上方移动时，针尖与表面距离小于1nm.

隧道电流对针尖与样品间的距离十分敏感。距离改变一个原子的直径，隧道电流会变化1000倍。若控制隧道电流不变，则探针在垂直于样品方向上的高度变化就能反映样品表面的起伏。

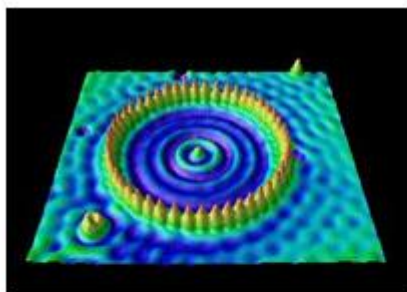
经过计算机处理后，荧光屏上的三维图象可比实际尺寸大一亿倍。



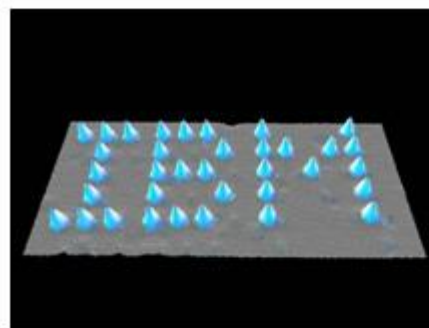
3.扫描隧道显微镜-3

利用隧道显微镜可以分辨表面上原子的台阶、平台和原子阵列。可以直接绘出表面的三维图象。

扫描隧道显微镜的发明，使人类第一次能够实时地观测到单个原子在物质表面上的排列状态以及与表面电子行为有关的性质。在表面科学、材料科学和生命科学等领域中有着重大的意义。



48个Fe原子形成“量子围栏”，围栏中的电子形成驻波。



1990年，IBM公司的研究小组借助扫描隧道显微镜（STM）首次实现了人类操作原子的梦想，他们用一个一个的氦原子，在镍表面排出了“IBM”字样，是人类的一大创举。

4.氢原子的量子力学处理-1

- 氢原子中的电子运动方程：假定氢原子核静止不动，势能不随时间变化，则氢原子中的电子运动满足：

$$\nabla^2 \varphi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \varphi = 0 \quad U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- 氢原子中的电子运动波函数：

$$\psi = R_n(r) \Theta_l(\theta) \Phi_m(\varphi) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

- 氢原子中的电子运动的量子化力学量和量子数：

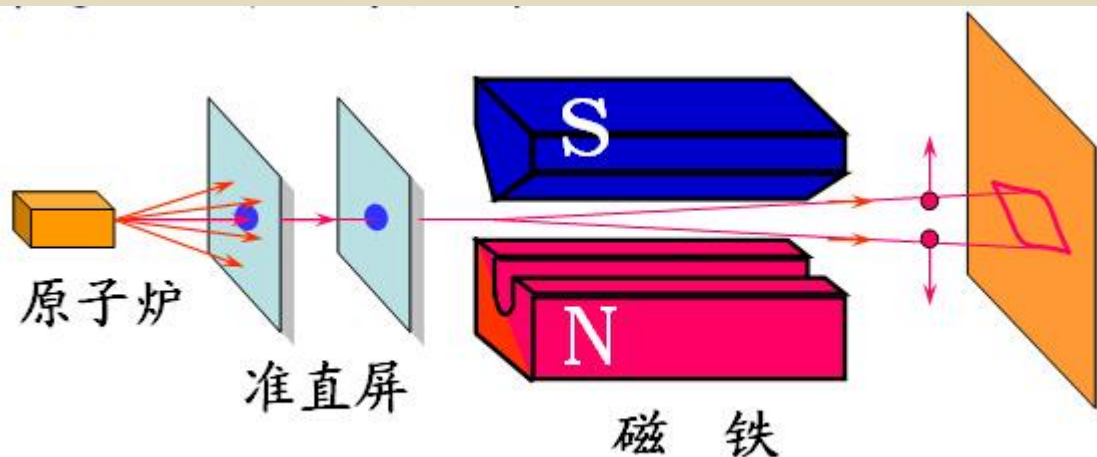
能量量子化： $E_n = \frac{E_1}{n^2}$ $E_1 = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2}$ $n = 1, 2, 3, \dots$ ：主量子数(能量量子数)

角动量量子化： $L_l = \sqrt{l(l+1)} \frac{\hbar}{2\pi}$ $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ ：副量子数（角量子数）

角动量空间量子化： $L_z = m_l \frac{\hbar}{2\pi}$ $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ ：磁量子数

4. 氢原子的量子力学处理-2

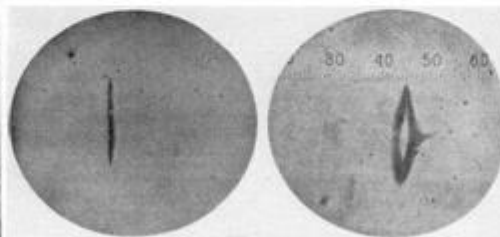
● 斯特恩—盖拉赫实验



史特恩正在观测

**银原子束通过非均匀
磁场时将分裂成两束**

1943年斯特恩
获诺贝尔物理奖。



史特恩和盖拉赫观察到在非均匀磁场中一些处于基态的原子射线束按磁场正反方向对称分立为两束 (偶数沉积) 的现象。

4.氢原子的量子力学处理-3

- 电子的自旋：斯特恩—盖拉赫实验说明电子有自旋，并且只有两种，一种叫左旋电子，一种叫右旋电子，电子自旋量子数也只有两个取值：

$$\text{自旋角动量: } S_z = m_s \frac{h}{2\pi} \quad m_s = \pm \frac{1}{2}: \text{ 自旋磁量子数}$$

- 电子的运动状态：它由四个量子数决定，每一组可能取值的量子数，对应一种稳定状态。

$$n = 1, 2, 3, \dots: \text{ 主量子数(能量量子数)}$$

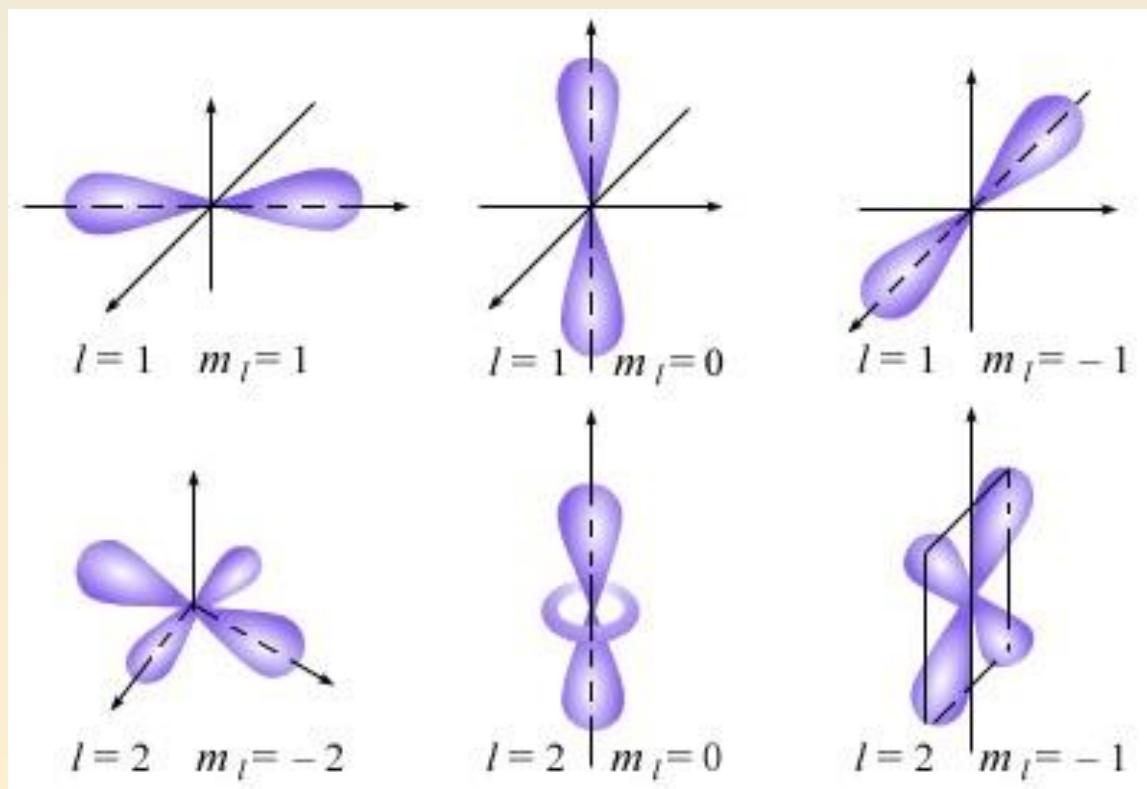
$$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1): \text{ 副量子数 (角量子数)}$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l: \text{ 磁量子数}$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}: \text{ 自旋磁量子数}$$

4.氢原子的量子力学处理-4

- 电子能级：电子的四个量子数不同，其能量也不同，能量是量子化的，这可以解释氢原子光谱，并还可解释其精细结构。
- 电子云：每一组可能取值的量子数，对应一种稳定状态，该状态的波函数决定了电子在空间出现的概率-电子云。



5-原子的壳层结构（元素周期表）-1

- 其他原子与氢原子：任何原子，其电子的可能稳定状态与氢原子的电子类似，不同的是原子的原子核不同，可能状态的能量和空间大小不同，在可能稳定状态具有的电子数目不同。
- 任何原子的电子状态由四个量子数决定

- ◆ 主量子数：主量子数大体上决定了原子中电子的能量。

$$n : n = 1, 2, 3 \dots$$

- ◆ 副量子数：副量子数可以决定电子轨道角动量，一般来说，处于同一主量子数而副量子数不同的状态的电子，其能量稍微不同。

$$l : l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

- ◆ 磁量子数：磁量子数可以决定轨道角动量在外磁场方向的分量。

$$m_l : m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$$

- ◆ 自旋磁量子数：自旋磁量子数可以决定电子自旋角动量在外磁场方向的分量。

$$m_s : m_s = \pm \frac{1}{2}$$

5-原子的壳层结构（元素周期表）-2

● 电子在原子中的分布遵从的两个原理

- ◆ 泡利不相容原理：在原子中每种状态只能有一个电子存在，即在原子中的电子，其量子数一定不相同。
- ◆ 最小能量原理：在原子中，每个电子趋向占有最低的能级。能级由主量子数和副量子数决定，电子填满低能级再填高能级，能级越低，一般电子离核越近，不过也有例外。

● 原子的电子壳层结构

- ◆ 主量子数决定壳层， $n=1,2,3,4,5,6,\dots$ ，的壳层分别用K，L，M，N，O，P，...来表示。
- ◆ 副量子数决定分壳层， $l=0,1,2,3,4,5,6,\dots$ ，的分壳层分别用s，p，d，f，g，h，i...来表示。

● 电子壳层表示：

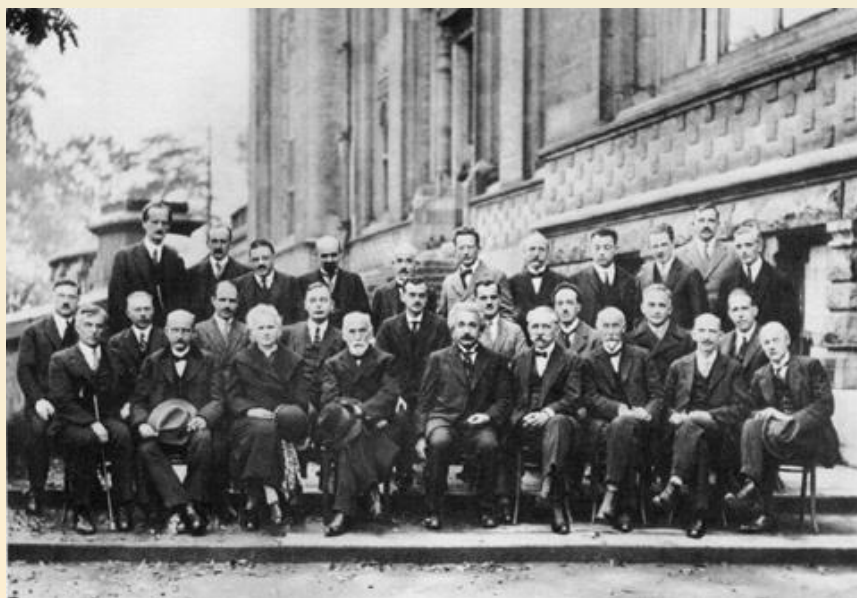
$n=1, l=0, m_l = \text{无}, m_s = \pm \frac{1}{2}$ ：有两个电子 $1s^2$

$n=2, l=1, m_l = 0, \pm 1, m_s = \pm \frac{1}{2}$ ：有6个电子 $2p^6$

后记

第一届索尔维会议（**女巫盛宴**）于1911年在布鲁塞尔召开，后来虽然一度被第一次世界大战所打断，但从1921年开始又重新恢复，定期3年举行一届。到了1927年，这已经是第五届索尔维会议了，也是最著名的一次索尔维会议。

1927年索尔维会议



第五届索尔维会议的主角是玻尔和爱因斯坦。

海森伯和玻恩当众宣布，“我们认为量子力学是一个**完备的理论**，它的基本物理和数学假设不再容许修正。”这一看法为与会的大多数物理学家所赞同。

哥本哈根学派是20世纪20年代初期形成的，为首的是丹麦著名物理学家玻尔。玻恩、海森伯、泡利以及狄拉克等是这个学派的主要成员。哥本哈根学派对量子力学的创立和发展作出了杰出贡献，并且它对量子力学的解释被称为量子力学的“**正统解释**”。

量子论的学派之争：

玻恩的量子力学统计解释，量子力学的随机解释，量子力学的经典波动解释，德布罗意的双解理论，流体动力学解释，量子力学的隐参量解释等等。

在会上，哥本哈根学派对量子力学的解释却遭到了爱因斯坦、薛定谔等人的强烈反对，开始了物理学史上前所未有的长达几十年之久的爱因斯坦-玻尔大论战。

爱因斯坦-玻尔关于量子力学的论战

爱因斯坦-玻尔的讨论与争论开始于1927年10月的索尔维（Solvay）会议。在那次会议期间，爱因斯坦不接受不确定性原理，并试图构思出一些思想实验，使之能超越不确定性关系的局限。

爱因斯坦也坚决反对量子力学的概率解释，不赞成抛弃因果性和决定性的概念。他坚信基本理论不应当是统计性的。他说，“上帝是不会掷骰子的。”

德布罗意和爱因斯坦站在一边。

事实上，爱因斯坦直到去世一直坚信量子力学不是完备的，量子论不是关于物质的最终描述。

到爱因斯坦逝世以后，玻尔还在内心继续同爱因斯坦论战。

玻尔虽和爱因斯坦经常争论，但是两人友谊极深，他每次到美国的普林斯顿讲学，并不住什么旅馆、饭店，而是干脆住在爱因斯坦家里。

玻尔和爱因斯坦无论怎样争论，双方都襟怀坦荡，谦虚地吸取对方的意见，发展自己的理论。

爱因斯坦称赞玻尔说：“他无疑是当代科学领域中最伟大的发现者之一。”

玻尔则深情地说：“在征服浩瀚的量子现象的斗争中，爱因斯坦是一位伟大的先驱者，但后来他却疑而远之。这是一个多么令我们伤心的悲剧啊，从此他在孤独中摸索前进，而我们则失去了一位领袖和旗手”。

以爱因斯坦和玻尔为代表的两方论战是科学史上持续最久、斗争最激烈、最富有哲学意义的论战之一，它一直持续到今天。现在物理学家们还不能作出谁是谁非的结论。因为物理学中不同哲学观点的争论不可能单靠争论自身来解决，它最终要靠物理学的理论和实践的进一步发展来裁决。

“我们以前问过，光是什么？它是一阵粒子还是一个波？现在我们要问，物质是什么，电子是什么？它是一个粒子还是一个波？电子在外电场或外磁场中运动时的行为像粒子，但在穿过晶体而衍射时的行为又像波。

毫无疑问，量子物理学解释了许多不同的事实，对大部分问题，理论和观察很一致。但是它的**理论基础**——物质的波粒二象性的本质问题并没有解决。

对量子力学的解释问题，实质上是对物质的波粒二象性的本质的认识问题，自量子力学创立以来，就一直是物理学界争论的中心问题之一。直到今天，争论还在继续，量子力学的本质是什么，物质波的本质是什么，仍是困扰着物理学家的根本问题。

实际上，物质的波粒二象性的本质的问题，或者说物质波的本质问题，已经直接触及到了物质的本质是什么的问题。不搞清物质的本质是什么，就无从认识物质波的本质。

近几年来，量子物理学的全部困难已经集中在几个主要点上，物理学正在焦急地等待着它们的解决。但是，我们没有办法预知这些困难将在何时何地得到澄清。”