

# 《原子物理学》

(文化经典，技术动力)

## 课程简介

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系



1913

INTERNATIONAL YEAR OF  
Quantum Science  
and Technology



1925

“在物理学晴朗天空的远处，还有两朵小小的、令人不安的乌云...”

—— 1900年4月27日：迎接新世纪的科学讲演

天体物理

以太漂移测量的零结果

$c, \hbar, k,$   
 $G, e/\alpha_{\text{em}} \dots$

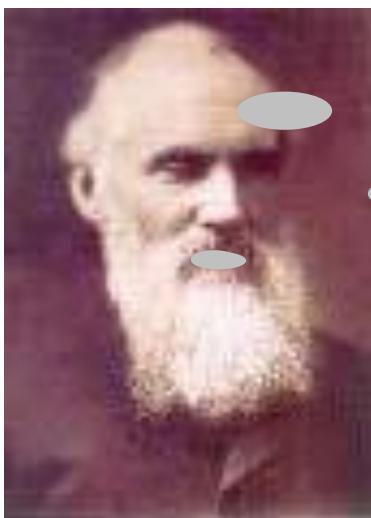
$$\hbar c = 197.33 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$$

高速:  $c = 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}$

强场:  $r_s = 2GM/c^2$   
 $\approx 3 \text{ km } (M/M_\odot)$

相对论

能均分定律用于黑  
体辐射研究时失败



Lord Kelvin  
1824~1907

阿基米德(前287-212)的支点  
拉普拉斯(1749-1827)的初条件

19世纪英国卓越的物理学家。原名 William Thomson, 1824年6月26日生于爱尔兰的贝尔法斯特, 1907年12月17日在苏格兰内瑟霍尔逝世。由于装设大西洋海底电缆有功, 英国政府于1866年封他为爵士, 后又于1892年封他为男爵, 称为开尔文男爵, 以后他就改名为开尔文。

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

原子:  
古人认为的  
“基本粒子”

量子论

单摆

经典力学一例

量子  
力学

{ 原子物理  
量子物理  
近代物理 }

理论物理  
普通物理

# 课程目的：

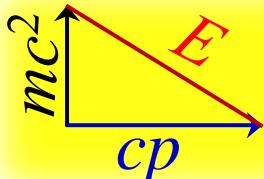
在**定性**、**半定量**的程度上理解（ $\hbar$ 不可以忽略情形的）物理过程。

例：在脉冲星磁层中运动的带电“光”——电子！

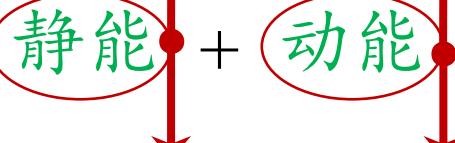
**注：** $\hbar$ 不可以忽略时往往涉及**微观世界**，微观粒子运动速度 $v \sim c$ （零静质量的**光子**最极端，真空中运动速度永远是 $c$ ）；故狭义相对论效应一般不应该忽略。

{量子论 $\hbar$  + 狹义相对论 $c$ }  $\Rightarrow$  量子场论  $\cdots \rightarrow$  粒子物理标准模型

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} \xrightarrow{p \ll mc} mc^2 + \frac{p^2}{2m} + \dots$$



粒子的总能量 $E$ 分解为：



$$E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} = \gamma m c^2 = m c^2 + (\gamma - 1) m c^2$$

# 教材：

赵凯华等《量子物理学》，高等教育出版社

# 参考书：

刘玉鑫《原子物理学》，高等教育出版社

徐克尊等《近代物理学》，高等教育出版社

杨福家《原子物理学》，高等教育出版社

王正行《近代物理学》，北京大学出版社

褚圣麟《原子物理学》，科学出版社

强烈建议：课后多阅读参考文献，

**开卷有益！**

# 课程内容

## \*\*\*\*\* 量子物理基础 \*\*\*\*\*

- 2月 20 日: 介绍, 热辐射与 Planck 假说  
2月 25 日: 光的粒子性与电子的波动性  
2月 27 日: 力学量用算符表示  
3月 6 日: 轨道角动量  
3月 11 日: Schroedinger 方程  
3月 13 日: 双态系统与氨分子  
3月 20 日: 电子与光子  
  

## \*\*\*\*\* 原子 \*\*\*\*\*

  
3月 25 日: 旧量子论简介  
3月 27 日: 氢原子与单价原子/周期表  
4月 3 日: 氦原子与交换效应

4月 10 日: 多电子原子

4月 17 日: 磁场中原子/分子能级

## \*\*\*\*\* 核与粒子 \*\*\*\*\*

4月 22 日: 原子核基本性质/放射性

4月 24 日: 核反应与核模型

5月 8 日: 核素起源: 核合成

5月 15 日: 奇异数与强子分类

5月 20 日: 规范场/粒子物理标准模型

5月 22 日: 夸克与轻子及其间作用

5月 29 日: 物质世界

6月 3 日: 讨论会 II: 原子、核与粒子

6月 5 日: 总复习

6月 12 日: 8:30-10:30 闭卷笔试

4月 8 日: 讨论会 I: 量子论基础与原子

# 2025 年春《原子物理学》授课提纲

## 教学过程

课堂教学 (20次)



平时作业 (~50题)



讨论会 (2次)

提纲下载：

<https://psr.pku.edu.cn/rxx/teach/atom/syllabus.pdf>

双周二 08:00-09:50, 周四 10:10-12:00; 三教 303 教室

(习题课单周二 08:00-09:50, 三教 303 教室; 助教一般在场)

参考书: 赵凯华等《量子物理》

主讲: 徐仁新

辅导: 祁昊洋

\*\*\*\*\* 量子物理基础 \*\*\*\*\*

- 2月 20 日: 介绍, 热辐射与 Planck 假说
- 2月 25 日: 光的粒子性与电子的波动性
- 2月 27 日: 力学量用算符表示
- 3月 6 日: 轨道角动量
- 3月 11 日: Schroedinger 方程
- 3月 13 日: 双态系统与氦分子
- 3月 20 日: 电子与光子
- \*\*\*\*\* 原子 \*\*\*\*\*
- 3月 25 日: 旧量子论简介
- 3月 27 日: 氢原子与单价原子/周期表
- 4月 3 日: 氦原子与交换效应

4月 8 日: 讨论会 I: 量子论基础与原子

4月 10 日: 多电子原子

4月 17 日: 磁场中原子/分子能级

\*\*\*\*\* 核与粒子 \*\*\*\*\*

4月 22 日: 原子核基本性质/放射性

4月 24 日: 核反应与核模型

5月 8 日: 核素起源: 核合成

5月 15 日: 奇异数与强子分类

5月 20 日: 规范场/粒子物理标准模型

5月 22 日: 夸克与轻子及其间作用

5月 29 日: 物质世界

6月 3 日: 讨论会 II: 原子、核与粒子

6月 5 日: 总复习

6月 12 日: 8:30-10:30 闭卷笔试

### 课程规划和成绩计算

课程由如下环节构成:

授课 (19 次)

按时完成作业 (约 50 题; 单周四交作业), 不接受延期两周以上的补交!

“开卷有益”; 课余“博览群书、文献”是学好本课程的“秘诀”。

同学总结或课题研究 2 次 (将请 8 位同学在“讨论会”上演讲; 每人演讲< 10 分钟, 并回答其他同学或老师提问< 5 分钟)

期终考试:

总成绩 = 平时作业×20% + 讨论会×10% + 期终考试×70%

特别提醒: 授课时随机提问。两次及以上点名未就答者最终成绩将被特别地、负面地考虑。

### 关于“讨论会”报告 (写作文件格式见 model.doc, 最后转换成 PDF 文件 email 给我)

所有同学的报告务必分别于 4 月 5 日 (“讨论会 I”) 和 5 月 31 日 (“讨论会 II”) 24:00 前通过 email 或直接交送老师 (Email 地址: r.x.xu@pku.edu.cn)。老师将分别于 4 月 6 日 (“讨论会 I”) 和 6 月 1 日 (“讨论会 II”) 24:00 前将公布每次上讲台报告的 8 位同学名单 (请点击: 演讲名单)。上台演讲的同学更可能得到“讨论会”成绩的高分。请先以论文形式递交报告, 选中上讲台报告后再准备演讲 ppt 或 pdf 文件。

所有电子版递交报告更新于: <https://psr.pku.edu.cn/rxx/teach/atom/submit.zip>。请同学们浏览该网址, 以达到“互相学习, 共享其他同学的学习心得、研究成果”之目的。

最后, 祝同学们在本学期开开心心地 “专研微观规律, 塑造量子素质”!

# 关于递交成绩的构成

总成绩 = 平时作业×20% + 讨论会×10% + 期终考试×70%

按时完成作业（约50题；**单周四交作业**），  
不接受延期两周以上的补交！

实际操作：

$$f[x, y] = f[x(\textcolor{red}{y}), y] \sim f[\textcolor{blue}{y}]$$

$f$ : 最终递交成绩

$x$ : 平时作业、报告及表现

$y$ : 期终笔试成绩

有任何疑问，欢迎email联系！

*r.x.xu@pku.edu.cn*

---

辅导：祁昊洋

*qhy021@pku.edu.cn*

# 请同学们加入微信群以便交流

群聊：原子物理 2025



# 《原子物理学》

## 热辐射与Planck假说

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

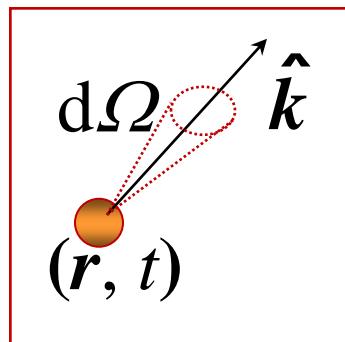
19世纪下半叶欧洲钢铁工业（特别是  
练钢技术）的发展大大促进了人们对  
**热辐射、黑体辐射**的研究.....

这种辐射是一种特殊的电磁波，它**能**  
**够在经典Maxwell理论框架理解吗？**

# 1, 辐射场的定量描述

描述辐射场的分布函数:  $f(\nu, \hat{k}, r, t)$

$\{r, t\}$ 处单位体积内  $\nu - \nu + d\nu$  内沿  $\hat{k}$  方向  $d\Omega$  立体角内能量



$\Rightarrow$  **能量密度:** 单位体积内能量  $u = \oint f(\nu, \hat{k}, \bar{r}, t) d\nu d\Omega$

对于各向同性、均匀、稳态辐射场:

$$u = \oint f(\nu, \hat{k}) d\nu d\Omega = 4\pi \int f(\nu) d\nu$$

**谱能量密度:**  $u(\nu)$  单位体积内  $\{r, t\}$  处  $\nu - \nu + d\nu$  内的能量

对于各向同性、均匀、稳态辐射场:

$$u(\nu) = 4\pi f(\nu) \quad \text{易知: } u = \int u(\nu) d\nu$$

# 1, 辐射场的定量描述

谱辐射通量:  $\psi(\nu)$

$\{r, t\}$ 处辐射通过单位面元的能流。

通过面元 $\Delta S$ 的谱辐射通量则为

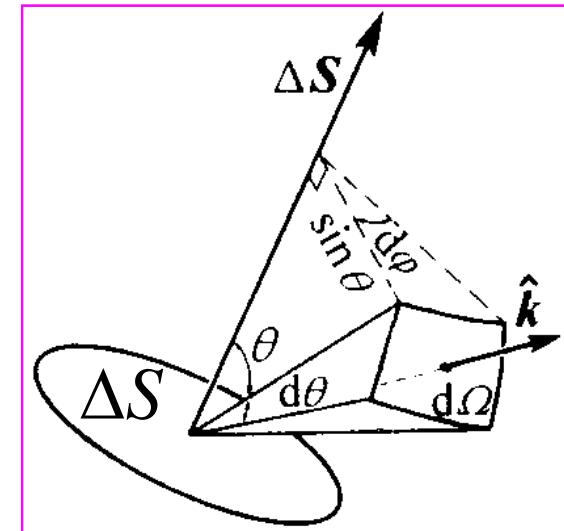
$$\begin{aligned}\Delta\psi(\nu) &= \psi(\nu) \times \Delta S \\ &= \int_{2\pi} cf(\nu, \hat{k}, \vec{r}, t) d\Omega (\hat{k} \cdot \Delta \bar{S})\end{aligned}$$

$= \pi c f(\nu) \cdot \Delta S$  (均匀、各向同性、稳态)

$$= \frac{c}{4} u(\nu) \cdot \Delta S$$

辐射通量:  $\psi = \int \psi(\nu) d\nu = \frac{c}{4} u$

能量密度



对于定向辐射场,  $k$ 只等于某特定值,  $\psi = cu$ 。易知, “1/4”为各向同性流动积分所致。

# 2, 热辐射, 黑体辐射, 腔辐射

**热辐射:** 处于热平衡的物体所发射的辐射

主要成分:  $mc^2 < \sim kT$  的粒子。  $m = 0$  光子是热辐射主要成分  
狭义的热辐射只指电磁辐射

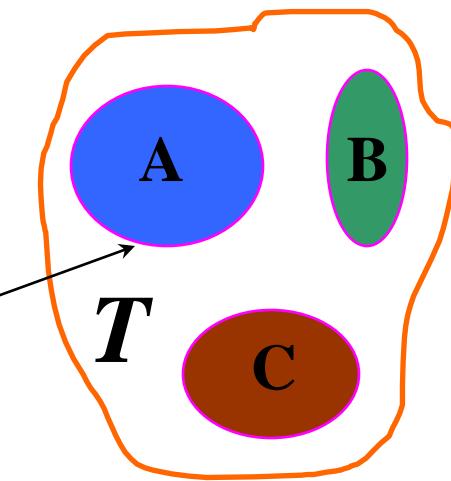
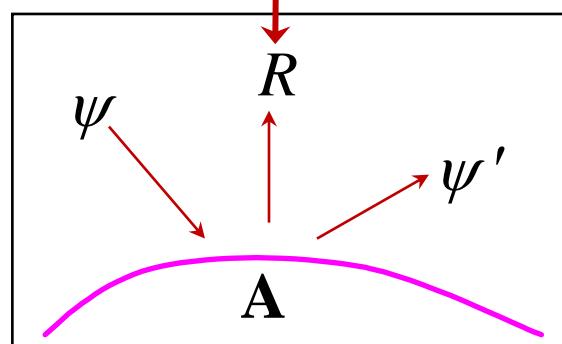
**非热辐射:** 未处于热平衡物体的辐射

比如磁场环境下非热高能电子辐射: 回旋辐射、同步辐射

**谱吸收系数:**  $\alpha(\nu, T)$

$$\alpha(\nu, T) = \frac{\psi - \psi'}{\psi} = \frac{R}{\psi}$$

**Emissivity:** 发射率



## 2, 热辐射, 黑体辐射, 腔辐射

Kirchhoff定律:  $R_i(\nu, T) = \alpha_i(\nu, T) \times B(\nu, T)$

$B(\nu, T)$ 是与材料无关的函数。此定律可用热力学定律证明:

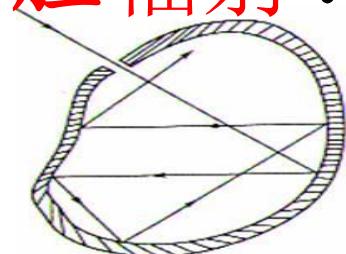
$$\boxed{\psi \text{与 } \{\hat{k}, r, t\} \text{ 无关}} \Rightarrow \frac{R_A}{\alpha_A} = \frac{R_B}{\alpha_B} = \frac{R_C}{\alpha_C} = \dots \equiv B_T(\nu) = \frac{c}{4} u_T(\nu)$$

**黑体辐射:** 吸收系数  $\alpha(\nu, T) = 1$  的热辐射

可见: 黑体辐射是辐射效率最高的热辐射

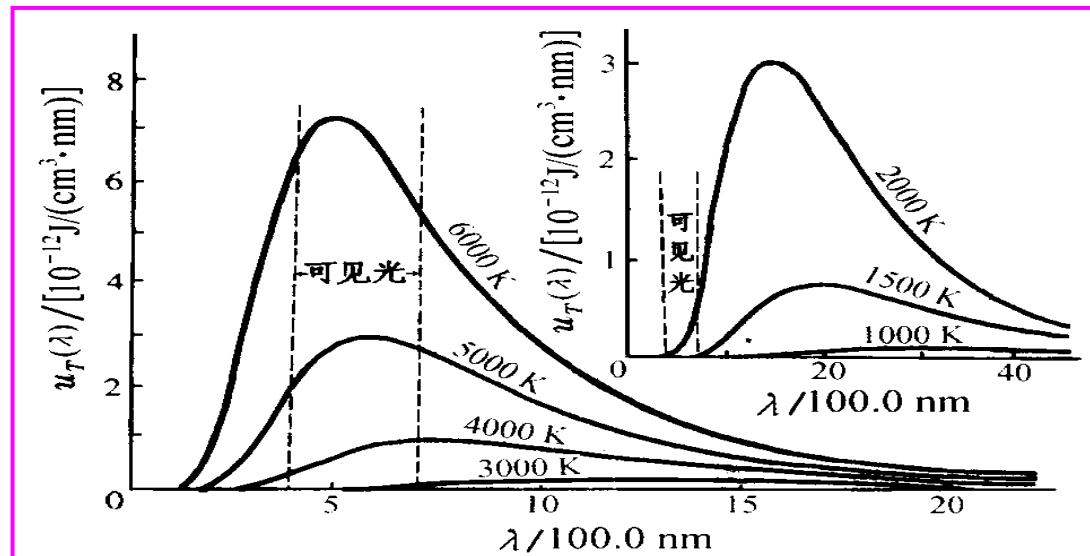
如何选择一个“好”的黑体? —— **腔辐射!**

优点 { 实验: 容易实现  
理论: 经典电动力学可方便地研究腔电磁场



# 3, 黑体辐射的实验规律

黑体辐射谱：



辐射通量： Stefan-Boltzmann 定律

$$B(T) = \frac{C}{4} \int_0^{+\infty} u(\nu, T) d\nu = \sigma T^4$$

Wien位移定律：  $\lambda_{\max} T = 0.29 \text{ cm K}$

# 3, 黑体辐射的实验规律

**黑体辐射应用一例：**测量恒星距离或半径

一般认为恒星表面的辐射可以近似为黑体辐射。已知北极星辐射主要波段在 $3500\text{\AA}$ 附近，又根据三角视差法等测出其距离地球 $200\text{pc}$ 。地球上测得此星的总辐射通量为 $7\times 10^{-9}\text{erg}/(\text{cm}^2 \text{s})$ 。试估计北极星的半径。

[解]  $1\text{pc} = 3.09 \times 10^{18}\text{cm}$ ,  $1\text{\AA} = 10^{-8}\text{cm}$

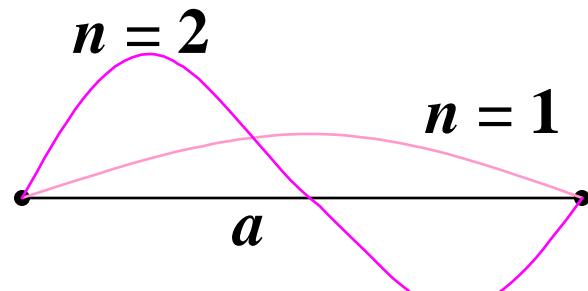
$$T = 0.29 \text{ cm K} / (3500 \times 10^{-8} \text{cm}) = 8300 \text{ K}$$

$$F = 4\pi R^2 \times \sigma T^4 / (4\pi D^2) \Rightarrow R = 10^{11} \text{ cm}$$

# 4, 腔辐射的经典理论

腔中辐射可以看作若干电磁波的**驻波**

先讨论**一维**情形：一维电磁驻波的计数

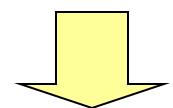


驻波条件： $a/n = \lambda/2$

$(n = 0, 1, 2, 3, \dots)$

$$\nu = c/\lambda$$

$$n = \frac{2a}{\lambda} = \frac{2a}{c}\nu$$



$$dn = \frac{2a}{c} d\nu$$

因每一驻波存在两种偏振模式，故：

单位长度在 $\nu - \nu + d\nu$ 内电磁波数目为

$$dN = \frac{2dn}{a} = \frac{4}{c} d\nu$$

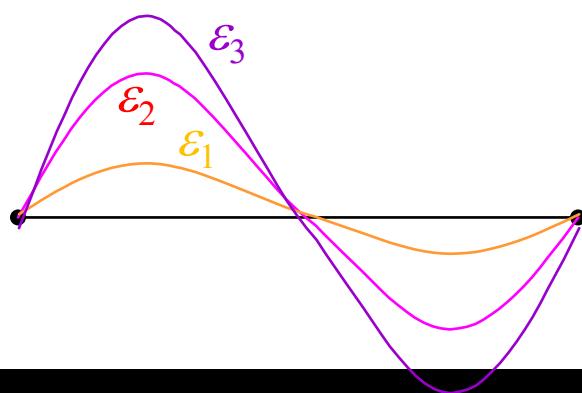
# 4, 腔辐射的经典理论

腔中辐射可以看作若干电磁波的**驻波**

**三维推广：**单位体积内在 $\nu - \nu + d\nu$ 内电磁波数目

$$dN = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu$$

{ 每一驻波模式平均能量：能量  $\varepsilon \propto E_0^2$   
经典 Boltzmann 分布率：能量  $\varepsilon$  的概率  $\propto \exp(-\varepsilon/kT)$



$$\Rightarrow \bar{\varepsilon} = \frac{\int_0^\infty \varepsilon \exp(-\varepsilon/k_B T) d\varepsilon}{\int_0^\infty \exp(-\varepsilon/k_B T) d\varepsilon} = k_B T$$

# 4, 腔辐射的经典理论

## Rayleigh-Jeans公式:

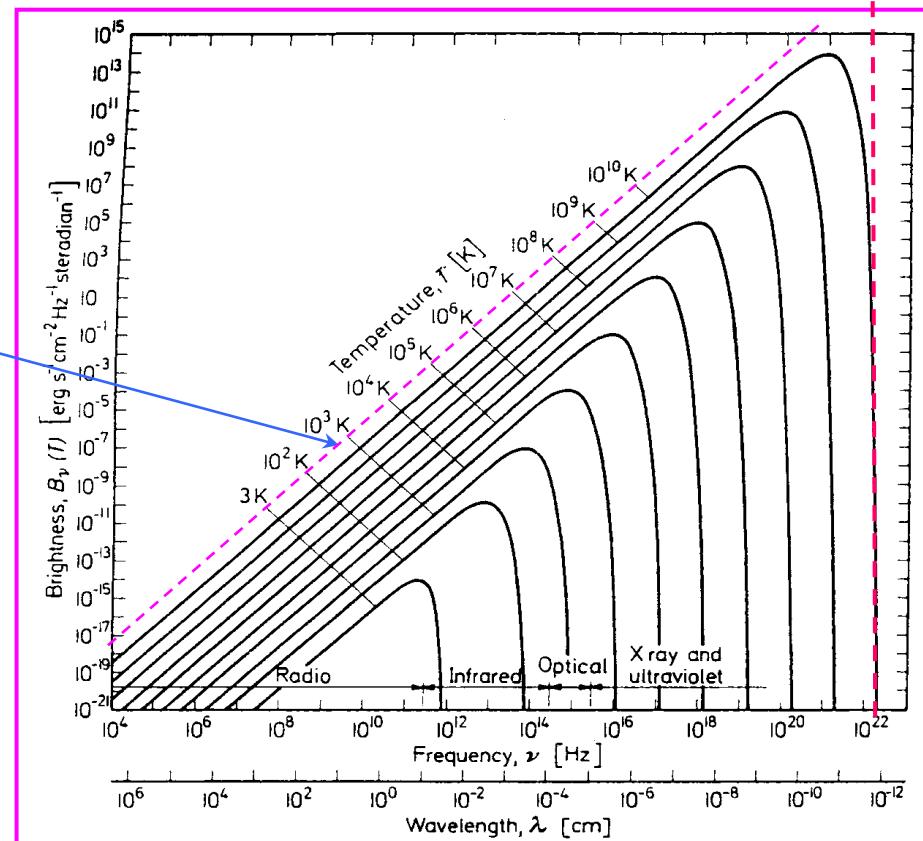
频率  $\nu - \nu + d\nu$  内电磁场的能量密度:

$$u(\nu) d\nu = dN \bar{\epsilon} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT d\nu$$

→  $u(\nu) \propto \nu^2$

紫外发散  
(紫外灾难)

Wien's Formula



# 4，腔辐射的经典理论

## 如何解决紫外发散（紫外灾难）难题？

Weinberg：科学研究的四点忠告

1. 没有人能够了解所有的知识，你也不必。
2. 到混乱的地方去，那里才是你该行动的地方。
3. 要原谅自己“虚度时光”。“乱世出英雄”
4. 学一点科学史，起码是你所研究学科的历史。

怎样解决这一难题？显然要“压低”高频模式获得能量的机会。  
你有什么解决之道...

让我们看看一百多年前的Planck是怎么考虑的！（量子论之父）

# 5, Planck假设与Planck公式

Planck为解决紫外灾难的出发点： **$E_0$ 不连续！**

**假定：**辐射体腔内振子的能量不能连续改变，腔与辐射体之间的能量交换激发辐射场能 $\propto E_0^2$ 不能连续变化：

$$\varepsilon = 0, \varepsilon_0, 2\varepsilon_0, 3\varepsilon_0, \dots;$$

其中 $\varepsilon_0$ 为基本能量单元，它正比于 $\nu$ ，写成等式：

$$\boxed{\varepsilon_0 = h\nu} \quad \text{旨在压低高频模式获得能量的机会！}$$

比例常数 $h$ 称为**Planck常数**。则每一驻波模式 $\bar{\varepsilon}$ ：

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\varepsilon_0 \exp(-n\varepsilon_0 / k_B T)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-n\varepsilon_0 / k_B T)} = \frac{h\nu}{\exp(h\nu / kT) - 1}.$$

# 5, Planck假设与Planck公式

这样就得到黑体辐射场的能量密度: Planck公式(1900年)

$$u_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \bar{\epsilon} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/(kT)} - 1}.$$

Bose(1924)画上句号!

此式与实验结果完全一致!



Nobel物理  
奖, 1918年

考虑Planck公式于  $h\nu/kT \ll 1$  的情形:

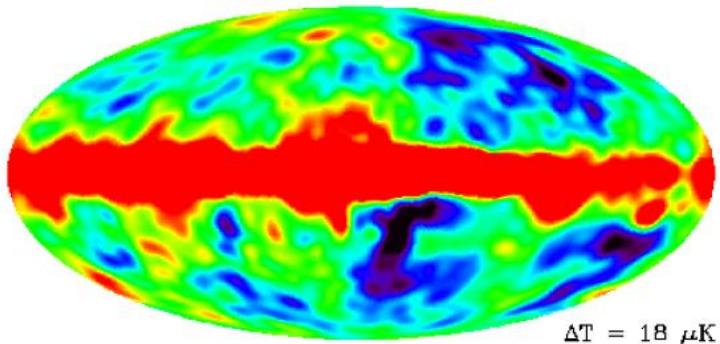
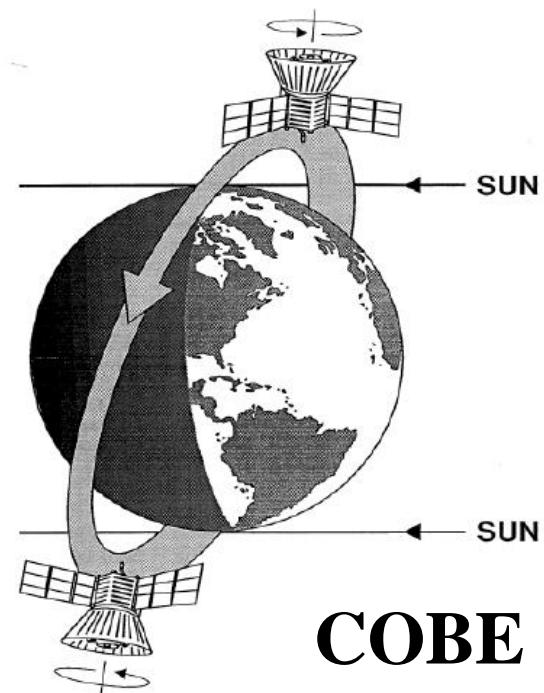
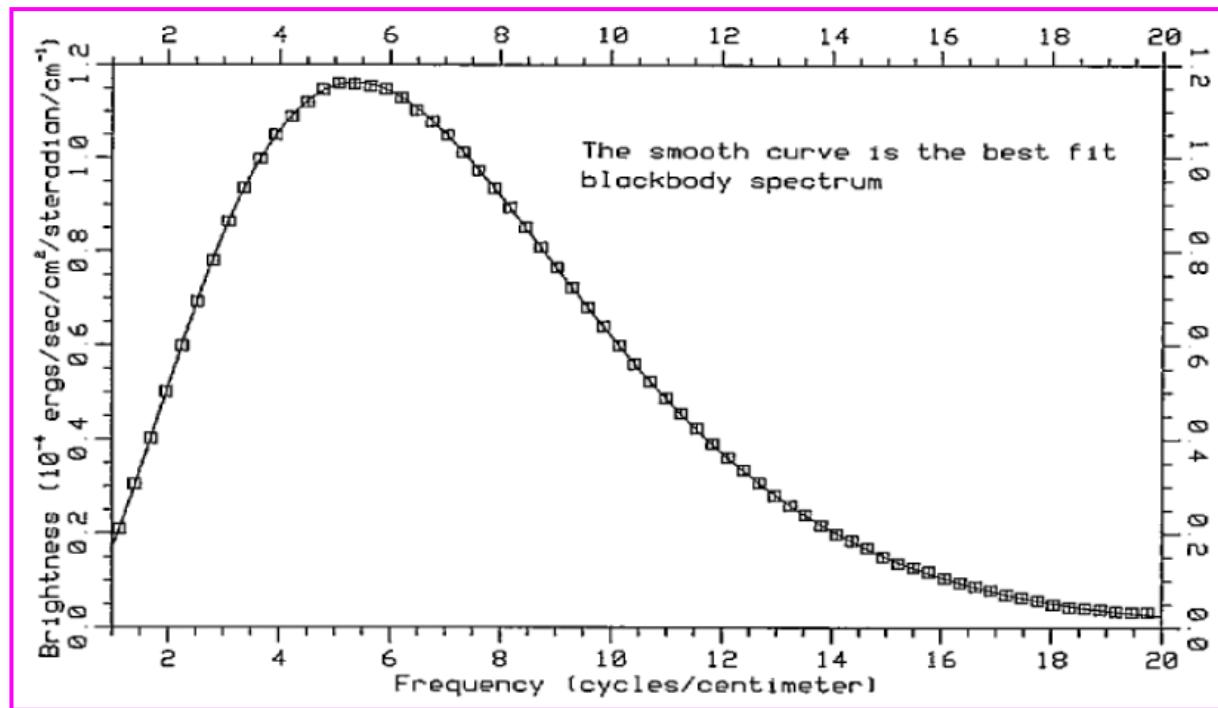
$$\exp(h\nu/kT) = 1 + h\nu/kT + \dots$$

$$u_\nu(T) \approx \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{kT}{h\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT.$$

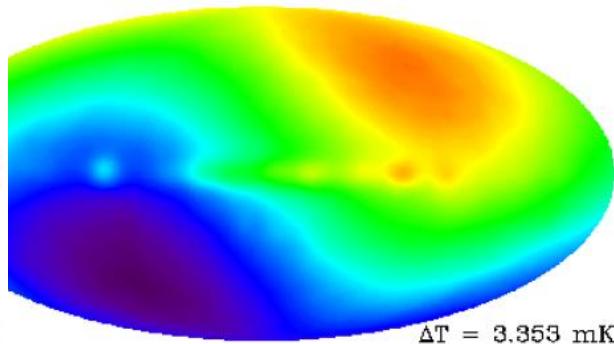
近似为  
**Rayleigh-Jeans**  
公式

# 5, Planck假设与Planck公式

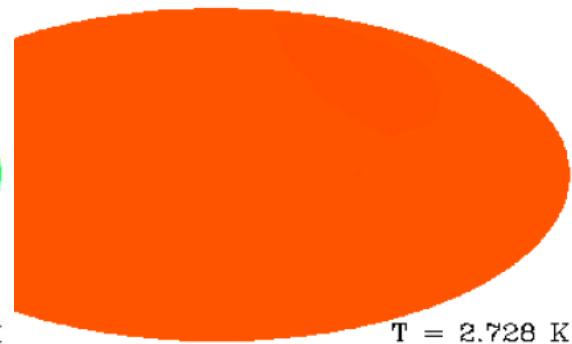
辐射场一例：宇宙微波背景辐射（CMB, Nobel物理奖2006）



$\Delta T = 18 \mu\text{K}$



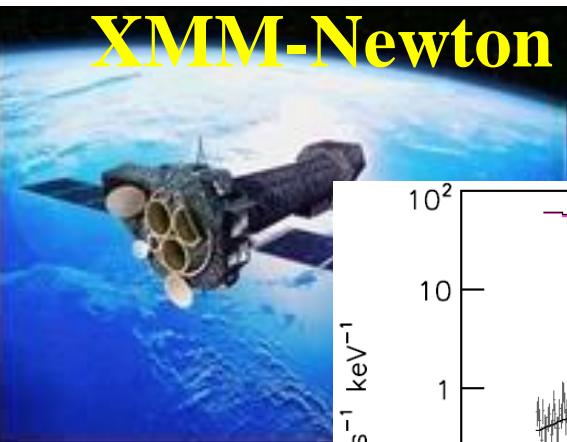
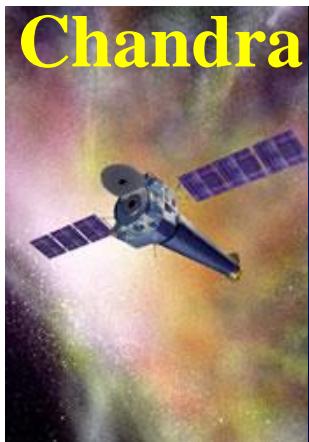
$\Delta T = 3.353 \text{ mK}$



$T = 2.728 \text{ K}$

# 5, Planck假设与Planck公式

“黑体”辐射另一例：中子星的X射线热辐射

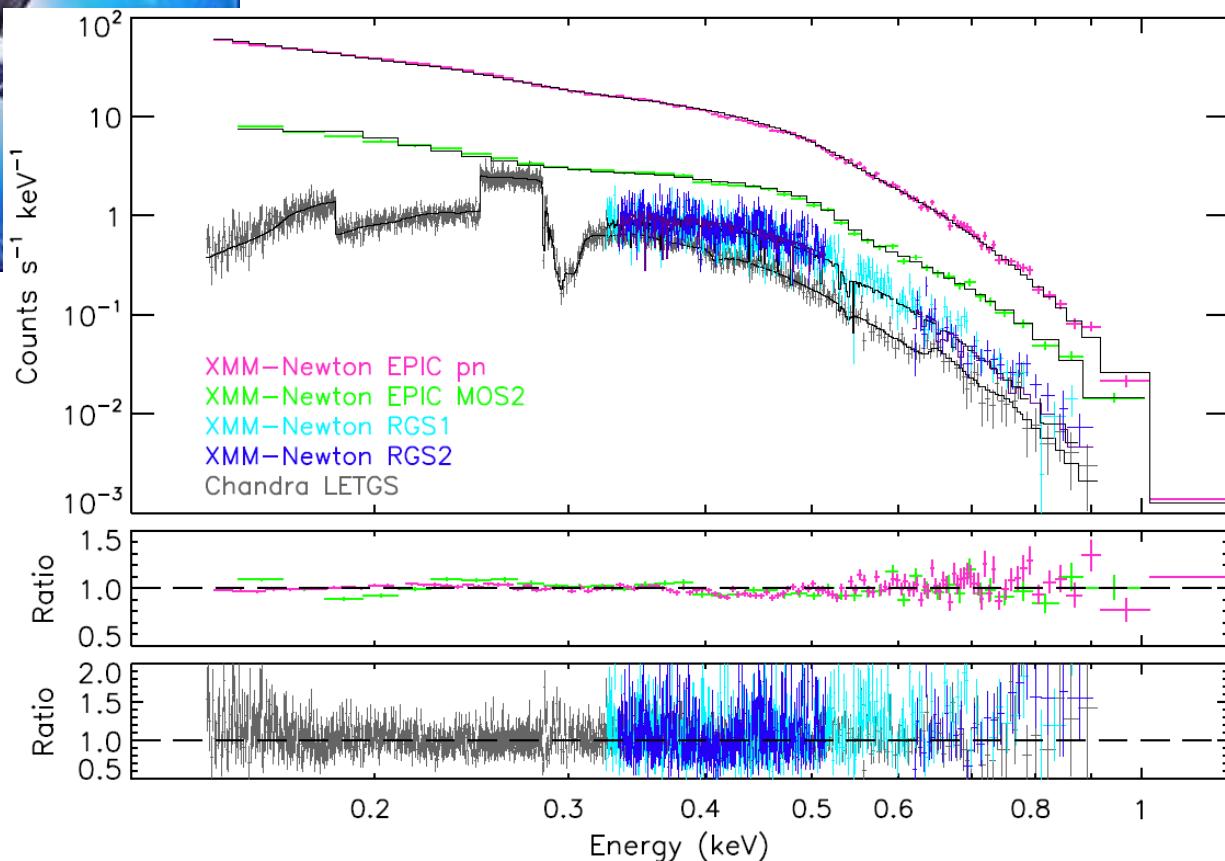


$$1\text{K} \approx 0.86 \times 10^{-4} \text{ eV} \sim 10^{-4} \text{ eV}$$

Chandra和Newton卫星测得谱



RX J1856.5-3754的X射线像  
(目前所知最靠近我们的中子星)



# 总 结

- 1, 辐射场的定量描述
- 2, 热辐射, 黑体辐射, 腔辐射
- 3, 黑体辐射的实验规律
- 4, 腔辐射的经典理论
- 5, Planck假设与Planck公式

# 作业

- 1,** 一块金属在1100K下发出红色光辉，而在同样温度下，一块石英却不发光。这是为什么？
- 2,** 如果计算一下不同温度下热辐射中可见光所占的百分比，就会发现在太阳表面温度 ( $\sim 6000$  K) 下比例最高。此外，太阳光谱中辐射能最大的波长与人眼最灵敏的波长大致相符。你认为这些都是偶然的巧合吗？其间有什么因果关系？
- 3,** 太阳常量（太阳在单位时间内垂直照射在地球表面单位面积上的能量）为  $1.94 \text{ cal}/(\text{cm}^2 * \text{min})$ ，日地距离约为  $1.50 \times 10^8 \text{ km}$ ，太阳的角半径为  $0.00465 \text{ rad}$ ，用这些数据来估算一下太阳的温度。
- 4,** 如果要使量子效应成为我们日常生活中普遍感觉到的现象，Planck常数  $h$  值至少应该在什么量级上？

# 《原子物理学》

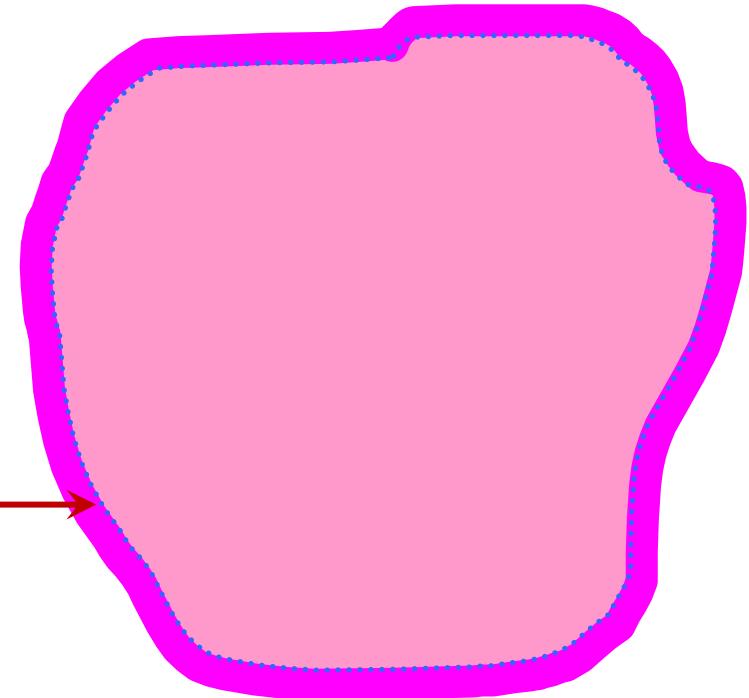
光的粒子性与电子的波动性

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

Planck 猜测(?)：

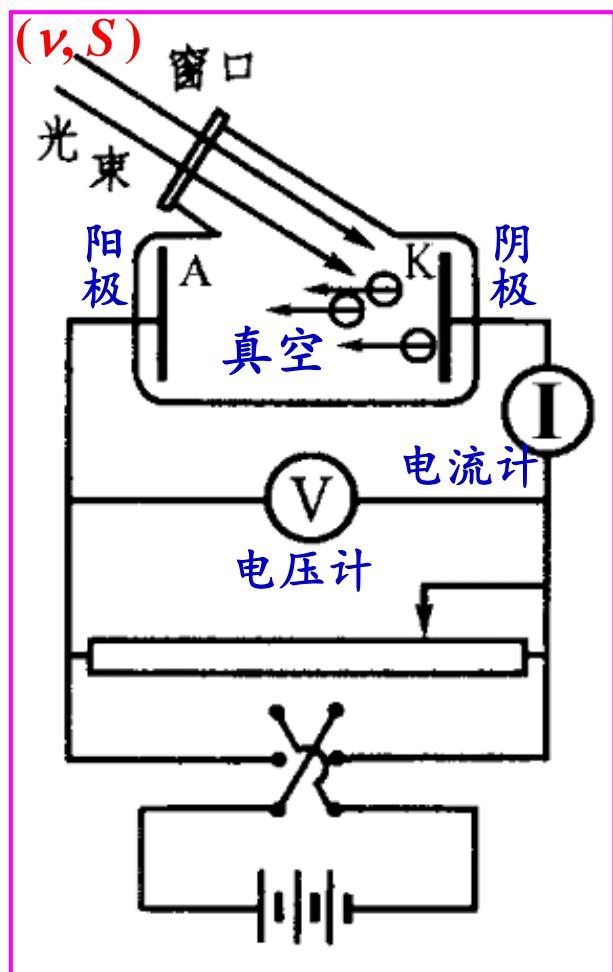
辐射体腔内振子  
的能量不能连续  
改变，即腔内振子  
能量量子化。



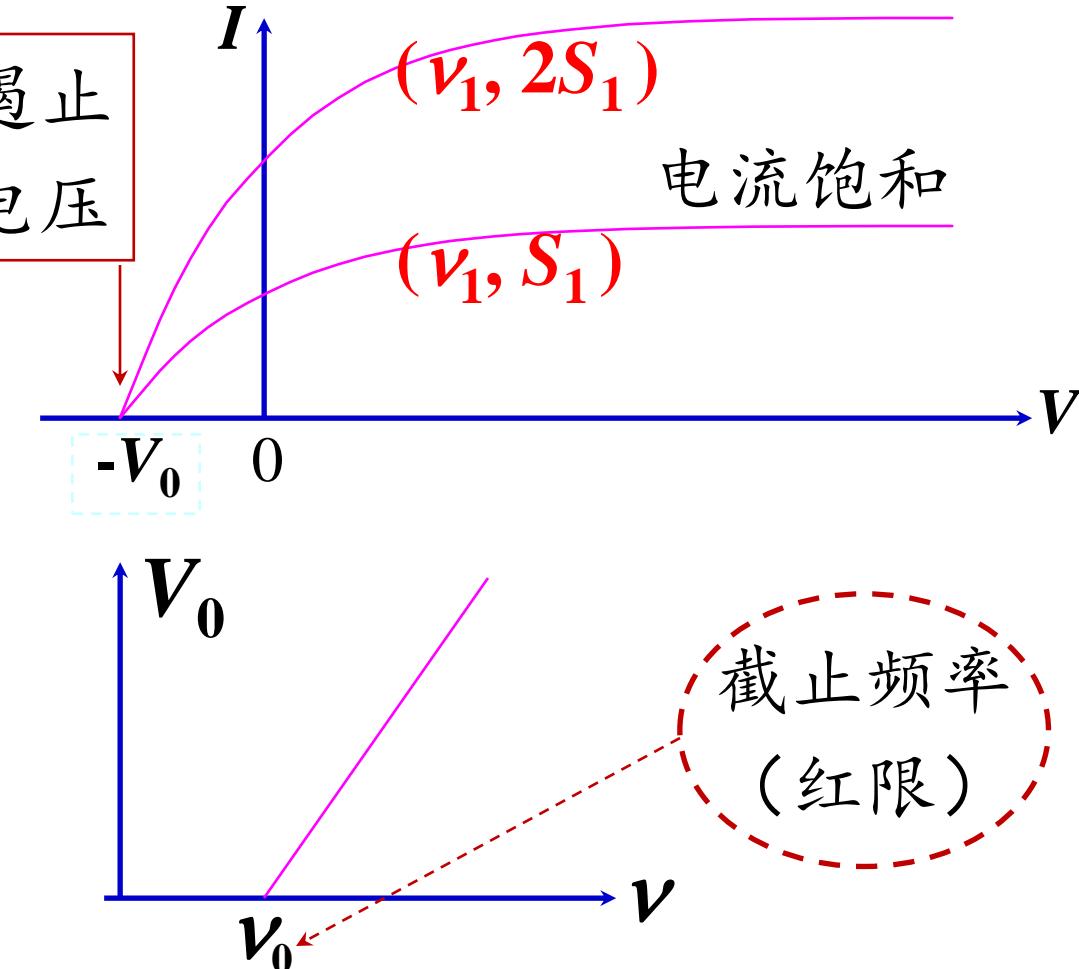
Einstein思考(?)：有无可能电磁场能量  
本身就是量子化的（无论是否腔内）？

# 1, 光电效应实验

实验装置 (1887):



实验结果:



# 1, 光电效应实验

**经典电磁理论：**在理解光电效应实验时失败

- 1, 应该  $V_0 \propto S$ , 但实际上只发现:  $I \propto S$
- 2, 遏止电势为何与光强无关?  $\cancel{V_0(S)}$
- 3, 为何存在截止频率  $v_0$ ?  $v_0$  为何与材料有关?
- 4, 为何几乎在光线入射同时 ( $< 10^{-9}s$ ) 就产生电流?

# 2, Einstein光子假说

Einstein: 电磁场能量本身就是量子化的 (1905)

对逸出功 $A$ 的金属内电子吸收一份能量 $h\nu$ 后具有速度 $v$ :

$$G = 8\pi T$$
$$E = mc^2$$

$$h\nu = A + mv^2/2 = A + eV_0$$

Nobel物理  
奖, 1921/2年

*“for his services to Theoretical Physics, and especially  
for his discovery of the law of the photoelectric effect”*

每一份能量子称为一光子。或: 光子具有能量  $\epsilon = h\nu$ 。

1, 单位时间光子流为 $S/(h\nu)$ , 故电流  $I \propto S$

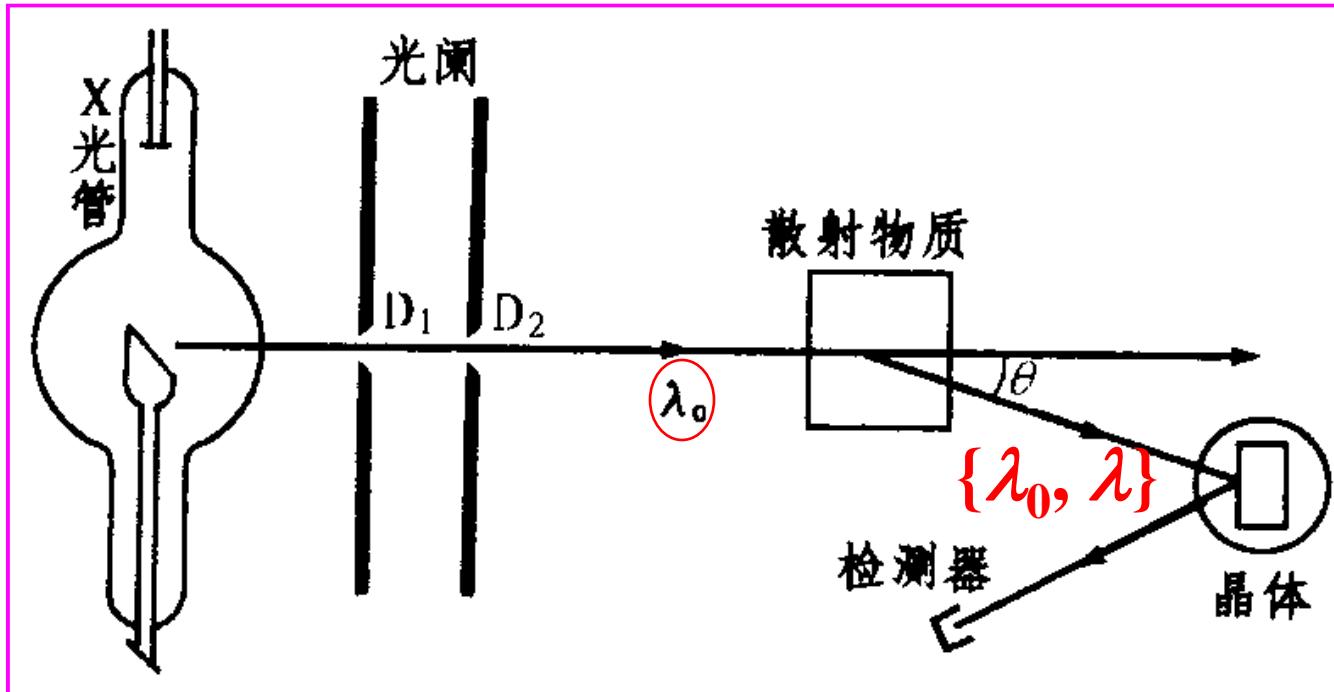
2, 遏止电势反映逸出功, 与光强无关

3, 截止频率是逸出功非零的表现, 与材料有关

4, 光子的能量为 $h\nu$ , 不需要时间积累

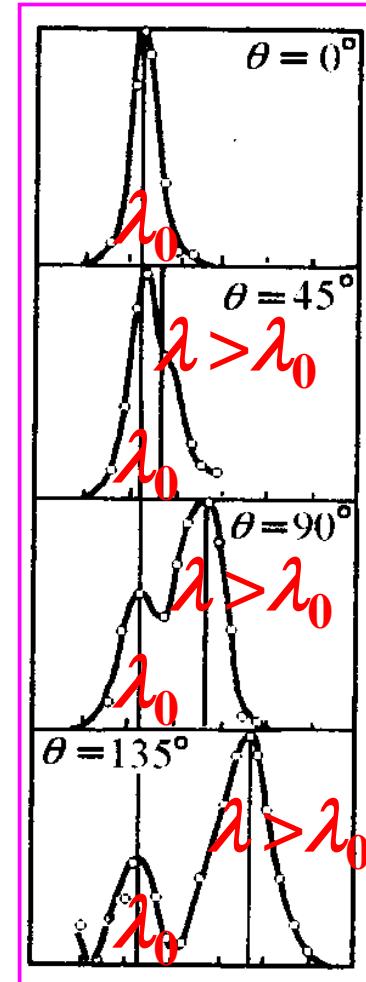
# 3, Compton效应

实验装置（1923年）：



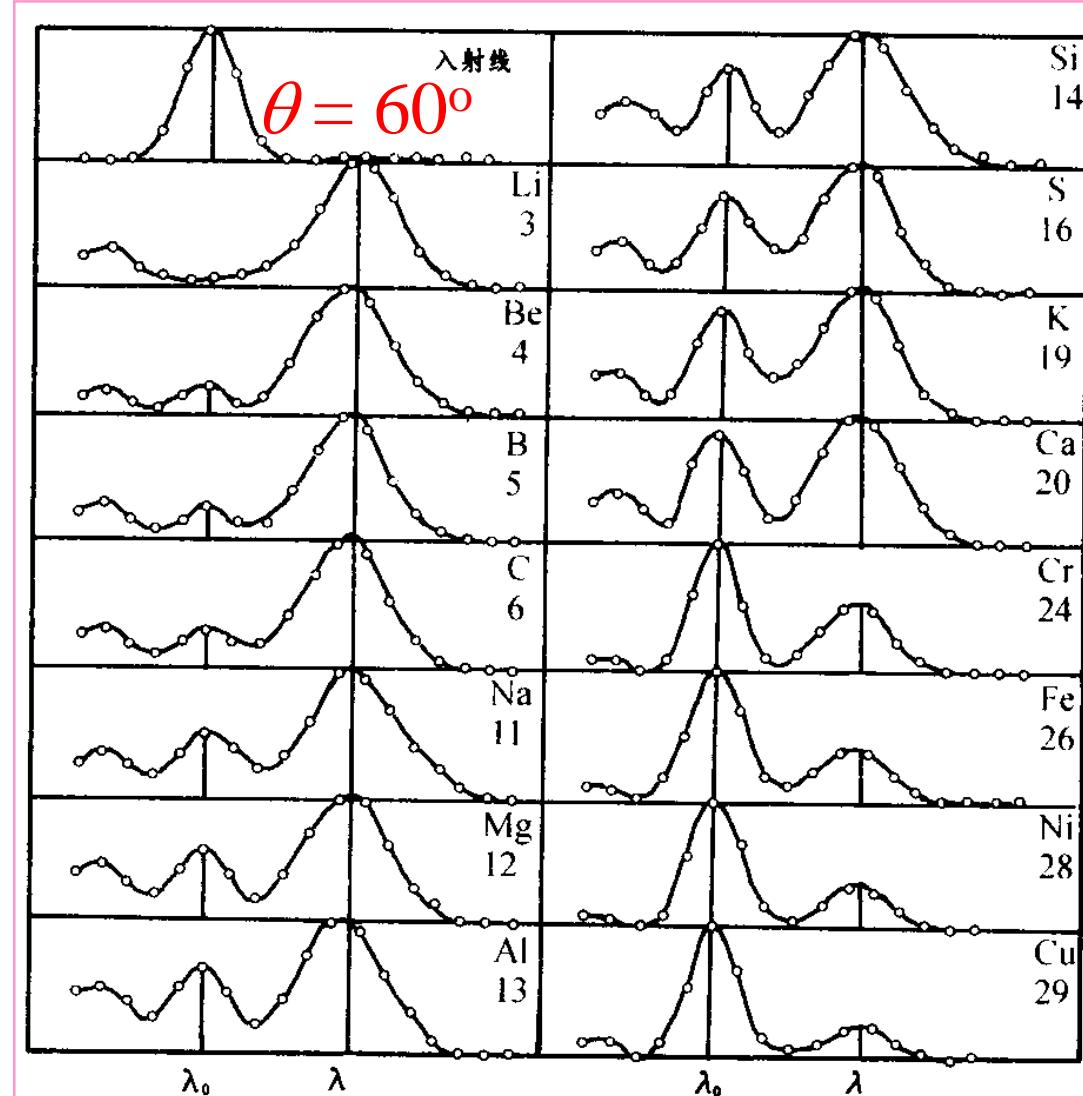
- 为什么出现 $\lambda > \lambda_0$ 成分的散射X射线成分？
- 为什么  $\lambda$  随  $\theta$  的增加而增加？
- $\lambda_0$  散射成分随  $Z$  增加而增加， $\lambda$  散射则反，为什么？

实验结果：



# 3, Compton效应

我国物理学家吴有训曾在1925到1926年间做了大量Compton散射实验。他以各种不同元素为散射物质，在同一散射角测量各种波长的散射光强度。吴有训教授对于散射光与入射光成 $60^\circ$ 角的实验结果如右图。这里以银原子发射的波长为 $0.56267\text{\AA}$ 的X射线为入射光做实验。



# 3, Compton效应

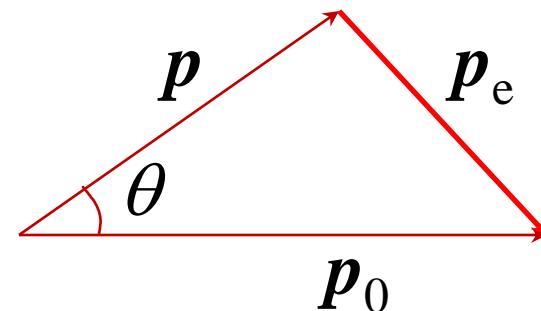
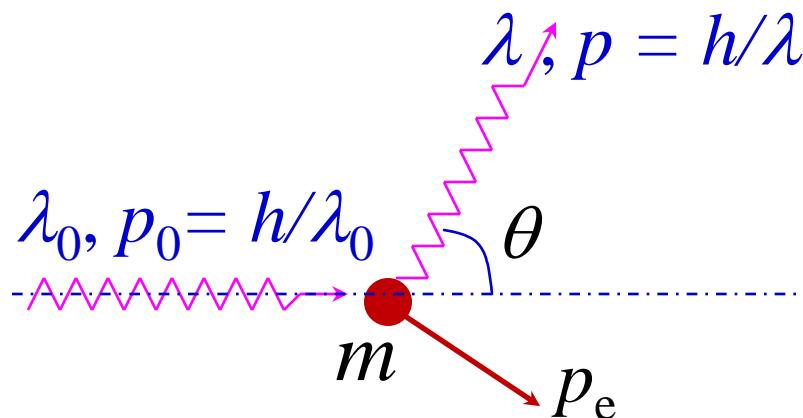
→ Dirac(1925) → Chandrasekhar(1929)

**Compton:** 自由电子与光子间的弹性**散射**过程

因光子能量远高于电子动能，将电子看作是**静止的**

电子:  $E = (c^2 p_e^2 + m^2 c^4)^{1/2}$  [ $= mc^2 + p_e^2/(2m) + \dots$ ]

光子:  $m_\gamma = 0, h\nu = cp$ , 或  $p = h\nu/c = h/\lambda$



$$cp_0 + mc^2 = cp + \sqrt{c^2 p_e^2 + m^2 c^4}$$

$$\cos \theta = \frac{p_0^2 + p^2 - p_e^2}{2p_0 p}$$

# 3, Compton效应

根据能量、动量守恒，消去 $p_e$ 并代 $p = h/\lambda$ ，得：

$$\Delta\lambda \equiv \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta)$$

Nobel物理  
奖, 1927年

定义电子Compton波长：

(局域电子至相对论性运动的特征尺度)

$$\lambda_c \equiv \frac{h}{mc} = 0.024 \text{ \AA}$$

波长 $\lambda_0$ 成分的起源：可看作X射线与内层电子散射所致

$$\Delta\lambda = \frac{h}{Mc} (1 - \cos \theta) \approx 0$$

(注意：原子质量  $M \gg m$ )

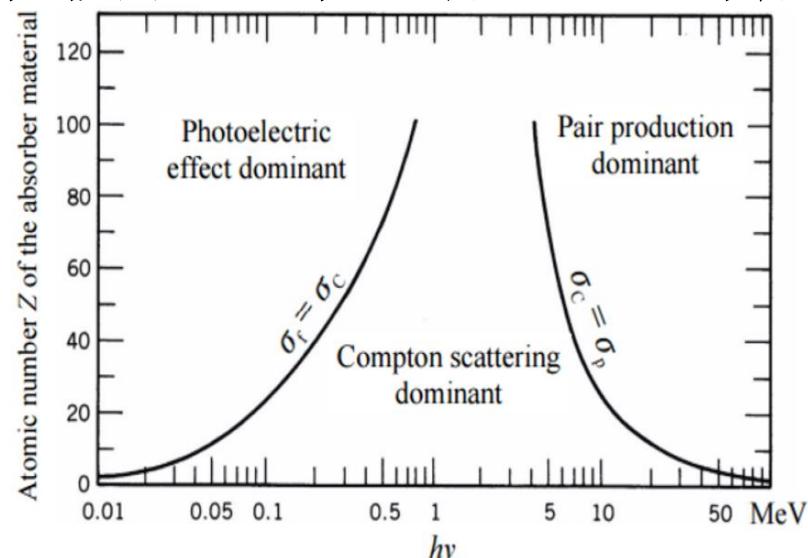
$\lambda_0$ 散射成分随  
Z增加而增加

# 4, 对比光电效应与Compton效应

**现代观点：**光电效应和Compton散射本质上描述了光子与原子之间的作用过程（关于“原子”后面还将详细讨论，但可简单理解成原子核和电子组成），外层电子结合得较松而内层电子紧。

**光电效应：**光子能量与电离能相当

**Compton散射：**光子能量远高于电离能



（为何不能用可见光做Compton散射？自由态电子能够吸收一个光子而产生“光电效应”吗？）

# 4, 对比光电效应与Compton效应

光电效应  $\Rightarrow$  光子具有能量  $h\nu$   
Compton散射  $\Rightarrow$  光子具有动量  $h/\lambda$  }  $\Rightarrow$  光的粒子性

而Maxwell方程描述了光确实具有波动性！

所以：光具有波粒二象性：

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon = h\nu \\ \downarrow \\ p = \frac{h}{\lambda} \end{array} \right. \xrightarrow{\begin{array}{c} \hbar = \frac{h}{2\pi} \\ k = \frac{2\pi}{\lambda} \end{array}} \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon = \hbar\omega \\ \vec{p} = \hbar\vec{k} \end{array} \right.$$

粒 波

为何光具有波粒二象性？

难道只有光应有波粒二象性？

原先认为的粒子（如电子）是否会有波动性？

# 5, 物质波 (de Broglie波)

**de Broglie** (1924年)：推广“光的波粒二象性”

一般微观粒子（如电子）也应有波动性！

波的数学描述：平面波 ( $k$ 为常矢)

人的一生获得伟大  
思想不会超过一次

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = A e^{-i(\varepsilon t - \vec{p} \cdot \vec{r})/\hbar} = \psi(\vec{r}) e^{-i\varepsilon t/\hbar}$$

复振幅

$i = \sqrt{-1}$  的故事

$$\begin{cases} m \neq 0 \\ \varepsilon = \hbar\omega \\ \vec{p} = \hbar\vec{k} \end{cases}$$

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

de Broglie  
波长

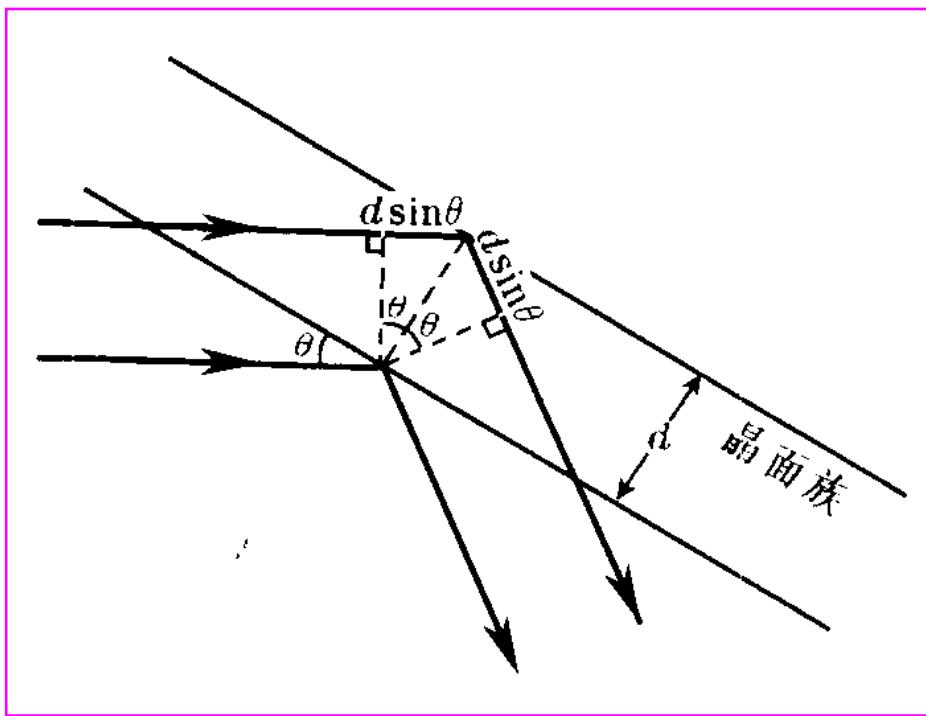
对于一般波， $k$ 并非常矢量 您的“波包”有多大？

# 5, 物质波 (de Broglie波)

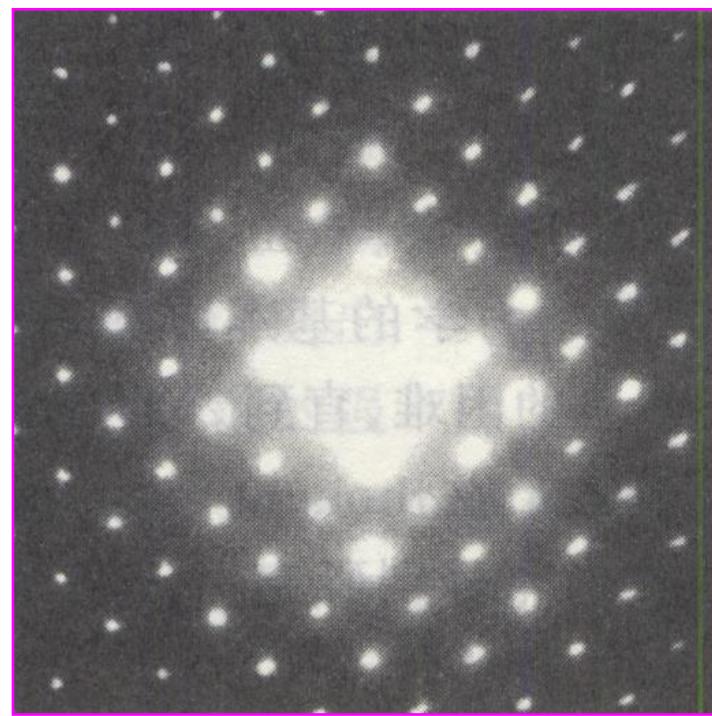
Davisson和Germer、Thomson (1927年)

Nobel物理  
奖, 1929年

获得电子在晶体上的衍射图案 (1937年Nobel物理奖)



Bragg条件:  $2 d \sin \theta = \lambda$

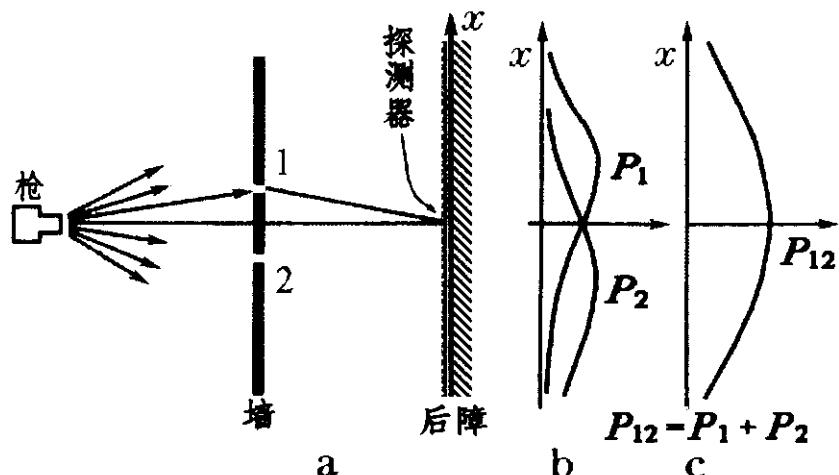


MoO<sub>3</sub>单晶的Laue斑

# 6, 电子双缝干涉实验

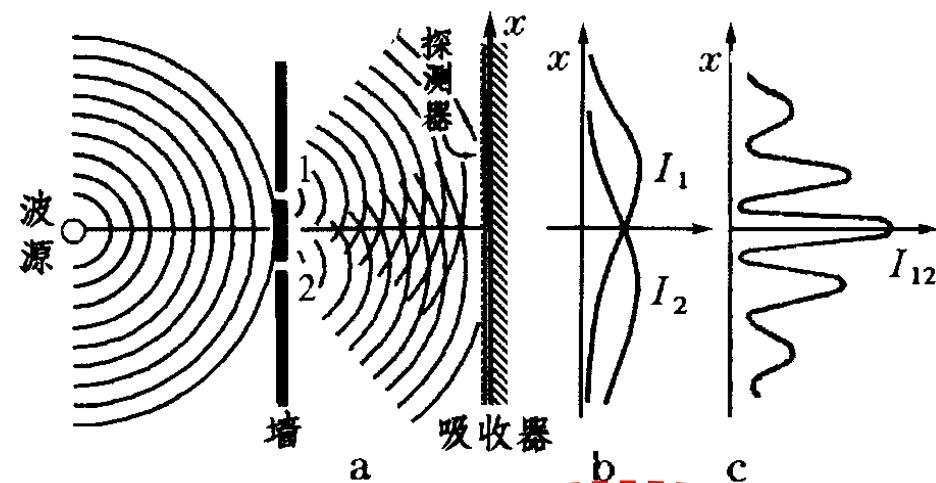
子弹双缝实验：

$$P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$$



水波/光波双缝干涉：

$$I_{12}(x) \neq I_1(x) + I_2(x)$$



波的描述：（类比电磁波）

回忆电动力学

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-i\omega t} = (|\psi(\vec{r})| e^{i\varphi(\vec{r})}) e^{-i\omega t}$$

复振幅

强度  $I = \Psi^* \cdot \Psi$

# 6, 电子双缝干涉实验

- 缝1波在屏上的复振幅： $\psi_1(x) = |\psi_1(x)|e^{i\varphi_1(x)}$

缝1单开的强度：

$$I_1 = \Psi_1(x, t)^* \Psi_1(x, t) = \psi_1(x)^* e^{i\omega t} \psi_1(x) e^{-i\omega t} = \psi_1(x)^* \psi_1(x) = |\psi_1(\vec{r})|^2$$

- 缝2波在屏上的复振幅： $\psi_2(x) = |\psi_2(x)|e^{i\varphi_2(x)}$

缝2单开的强度： $I_2 = \Psi_2(x, t)^* \Psi_2(x, t) = \psi_2(x)^* \psi_2(x) = |\psi_2(\vec{r})|^2$

- 缝1、2波在屏上的复振幅： $\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$

$$\begin{aligned} I(x) &= \psi(x)^* \psi(x) = (\psi_1 + \psi_2)^* (\psi_1 + \psi_2) \\ &= \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 + \psi_1^* \psi_2 + (\psi_1^* \psi_2)^* \\ &= I_1 + I_2 + 2(I_1 I_2)^{1/2} \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \neq I_1(x) + I_2(x) \end{aligned}$$

# 6, 电子双缝干涉实验

微观粒子的波动行为类似于水波，我们也用类似的**波函数**来描述它们： $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-i\omega t}$  带相位信息的函数！

**Born 诠释**：波强度表征粒子出现几率（概率幅）

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

电子双缝干涉：

$$P_1(x) = |\psi_1(\vec{r})|^2$$

$$P(x) = P_1 + P_2 + 2(P_1 P_2)^{1/2} \cos(\varphi_2 - \varphi_1)$$

$$P_2(x) = |\psi_2(\vec{r})|^2$$

$$\neq P_1(x) + P_2(x)$$

# 总 结

- 1, 光电效应实验
- 2, Einstein光子假说
- 3, Compton效应
- 4, 对比光电效应与Compton效应
- 5, 物质波 (de Broglie波)
- 6, 电子双缝干涉实验

# 作业

- 1,** 可以用可见光来做康普顿散射实验吗？
- 2,** 在光电效应中电子可以只吸收而不发射光子，在康普顿散射中的自由电子能这样吗？为什么？
- 3,** 波长为200.0nm的光照到铝的表面，对铝来说，移去一个电子所需的能量为4.2 eV，试问：
- (1)出射最快的光电子能量是多少？
  - (2)出射最慢的光电子能量是多少？
  - (3)遏止电压为多少？
  - (4)铝的截止波长为多少？
  - (5)如果入射光强度为 $2.0\text{W/m}^2$ ，单位时间打到单位面积上的平均光子数为多少？
- 4,** 单色电磁波的强度是 $N\hbar\nu$ ，其中 $N$ 是单位时间通过单位面积的光子数。垂直入射至全反射镜面上产生的压强是多少？
- 5,** 今有：①波长为0.100nm的X射线束；②从 $^{137}\text{Cs}$ 样品得到的波长为0.0188nm的 $\gamma$ 射线束，用两者分别去与自由电子碰撞，从与入射方向成 $90^\circ$ 角的方向去观察散射线。问每种情况的
- (1)康普顿散射后波长偏移了多少？
  - (2)给予反冲电子的动能为多少？
  - (3)入射光在碰撞时失去的能量占总能量的百分之几？

# 《原子物理学》

## 力学量用算符表示

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

如果微观客体的动力学状态  
不用  $r(t)$  而用 波函数  $\Psi(r, t)$  来  
描述，如何确定此状态下某  
力学量的大小？

# 1, Heisenberg不确定性关系

de Broglie波：

$\varepsilon$ 与 $r$ 、 $t$ 无关（定态）

$$\Psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}) e^{-i(\varepsilon t - \vec{p} \cdot \vec{r})/\hbar} = \psi(\vec{r}) e^{-i\varepsilon t/\hbar}$$

$r$ 处粒子出现的几率密度：  $P(r) = \Psi(r, t)^* \Psi(r, t) = \psi(r)^* \psi(r)$

故：一般讨论定态时忽略波函数 $\Psi(r, t)$ 的 $\exp(-i\varepsilon t)/\hbar$ 部分，将定态波函数简单地写作 $\psi(r)$ 。

对于一维平面波， $k$ 为常矢量（所以确定动量 $p$ ）：

几率 $P(x) \sim [\exp(ipx)/\hbar]^* \exp(ipx)/\hbar$ 与位置无关！

即：粒子在全空间等几率出现。

粒子动量完全确定时位置完全不确定！

# 1, Heisenberg不确定性关系

一维波包：粒子限于一定区域时动量不能完全确定

(电磁波： $\Delta\lambda < \Delta t \cdot c \Rightarrow \Delta\nu \cdot \Delta t > 1$ ;  $\hbar \Delta\nu \cdot \Delta t > \hbar \Rightarrow \Delta p \cdot \Delta x > \hbar$ )

对平面波乘以一高斯包络函数后，波函数成为：

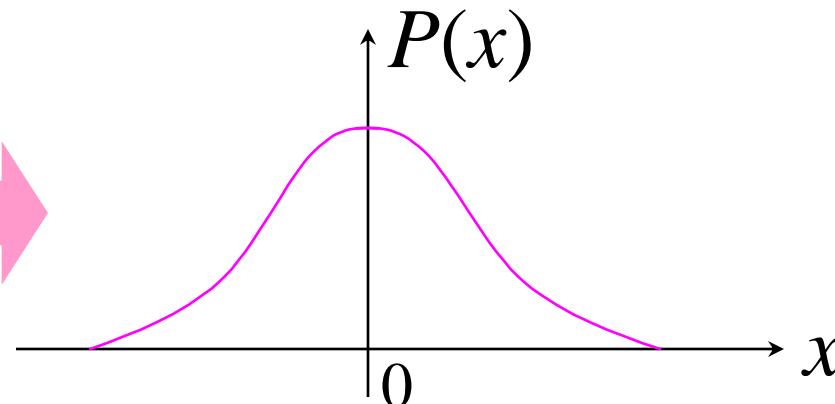
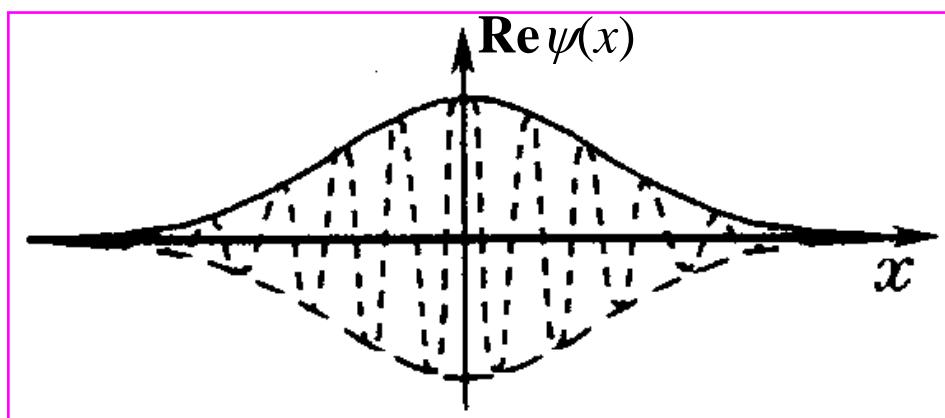
粒子 $x$ 处的几率密度为：

$$P(x) = \psi^* \psi = (\pi/a)^{-1/2} e^{-ax^2}$$

$$\psi(x) = (\pi/a)^{-1/4} e^{-ax^2/2} e^{ik_0 \cdot x}$$

归一化

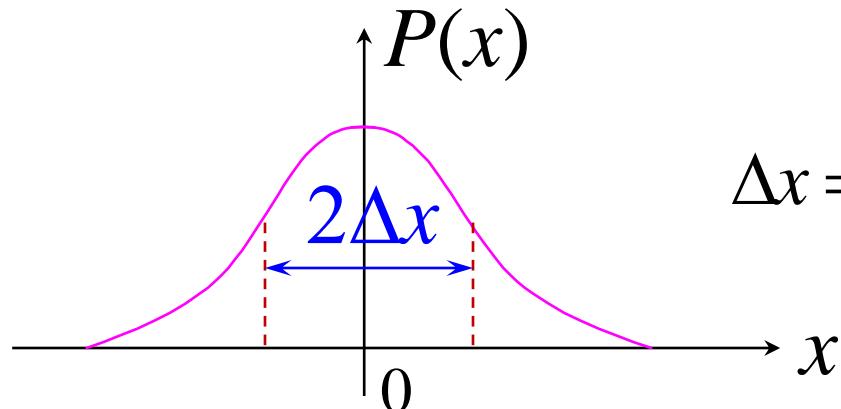
$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = 1$$



# 1, Heisenberg不确定性关系

一维波包：

也可以求出粒子位置不确定的范围 $\Delta x$ :



$$\Delta x = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* x^2 \psi(x) dx} = \sqrt{\frac{1}{2a}}$$

- 处于波函数  $\psi(x) \sim e^{-ax^2/2} e^{ik_0 x}$  态的动量还是  $\hbar k_0$  吗？
- 如何计算  $\psi(x) \sim e^{-ax^2/2} e^{ik_0 x}$  态的动量及其偏离程度？

频谱分解：傅里叶变换！

# 1, Heisenberg不确定性关系

傅里叶变换:

$$F(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} : f(\underline{x}) \rightarrow F(\underline{k})$$

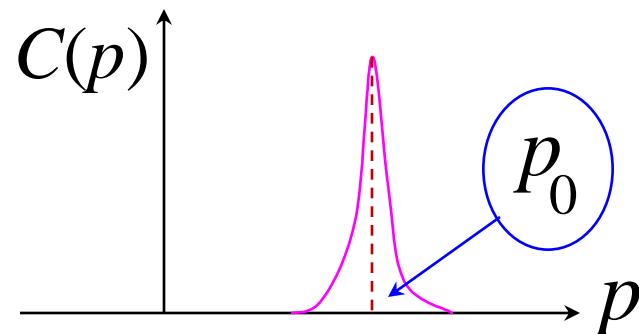
$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} : F(\underline{k}) \rightarrow f(\underline{x})$$

对波函数  $\psi(x) \sim e^{-ax^2/2} e^{ik_0 x}$  作频谱分解:

$$C(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\pi}{a}\right)^{-1/4} e^{-ax^2/2} e^{-i(k-k_0)x} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} = \left(\frac{1}{2a\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{4a}\right)$$

或写成 ( $p = \hbar k$ ) :

$$C(p) = \left(\frac{1}{2a\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{4a\hbar^2}\right)$$



# 1, Heisenberg不确定性关系

处于波函数  $\psi(x) \sim e^{-ax^2/2} e^{ik_0 x}$  态动量位于  $p-p+dp$  之间几率：

(类似于  $x-x+dx$  之间几率为  $\psi(x)^* \psi(x) dx$ )

$$C(p)^* C(p) dp = \left( \frac{1}{2a\pi} \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{(p-p_0)^2}{2a\hbar^2} \right) dp.$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C(p)^* C(p) dp = 1$$

同样求出粒子动量不确定的范围  $\Delta p$ :

$$\Delta p = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} C(p)^* (p-p_0)^2 C(p) dp} = \hbar \sqrt{\frac{a}{2}}$$

**结论:** 处于高斯包络平面波波函数状态粒子有如下关系

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}}$$

即：位置和动量不确定度之积为  $\sim \hbar$

# 1, Heisenberg不确定性关系

**Heisenbuerg不确定性关系：**

将高斯包络平面波结论推广至一般波函数可证明基态有：

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$$

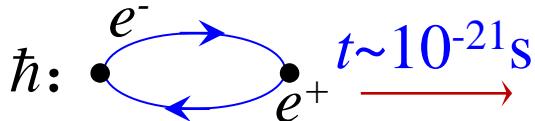
这表明：给定某一量子态，其**位置和动量不能同时具有确定值**；这与经典力学观点格格不入。

•此外，量子力学还可以证明：某一**激发态的能量和寿命也不能同时具有确定值**；即

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar$$

例如：某原子处于激发态的寿命为 $\tau$ ，则此态应该具有能级宽度 $\sim \hbar/\tau$ 。

再如：真空中**虚**电子对的产生与湮没， $mc^2 \cdot \tau \sim \hbar$ ：



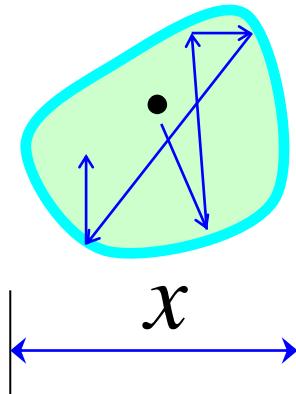
# 2, 应用: Compton波长与 $\alpha_{\text{em}}$

- 回顾Compton散射实验结论:

$$\Delta\lambda \equiv \lambda - \lambda_0 = \frac{\hbar}{mc} (1 - \cos \theta), \text{ 其中Compton波长 } \lambda_c \equiv \frac{\hbar}{mc}$$

也可以定义Compton波长:  $\lambda_c = \frac{\hbar}{mc}$ 。

- 考虑一个思想实验: 将电子限制在尺度 $x$ 的空间内运动。



因该空间没有运动, 故电子平均动量矢 $\mathbf{p}_0 = 0$ ,  
而动量的不确定度:  $\Delta p \sim p$ 。

根据Heisenberg关系得:  $p \cdot x \sim \hbar$ ; 若电子非相对论性运动, 则电子运动动能 $E \sim p^2/m \sim \hbar^2/(x^2 m)$ 。  
动能 $E \sim$ 静能 $mc^2 \Rightarrow x \sim \hbar/(mc) \sim \lambda_c$ !

**结论:** 限制在Compton波长范围内运动电子定是相对论性的 → 易现粒子产生与湮灭!

## 2, 应用: Compton波长与 $\alpha_{\text{em}}$

- 如何刻画荷电粒子间作用的强弱?

荷电粒子具有单位电荷  $e$ , 相距  $r$  的两荷电粒子作用能为:  $e^2/r$ 。

若设荷电粒子间距为Compton波长, 则作用能为

$$\mathcal{E}_{\text{em}} = \frac{e^2}{\lambda_c} = \frac{e^2}{\hbar/mc} = \frac{e^2}{\hbar c} \cdot mc^2 \equiv \alpha_{\text{em}} \cdot mc^2, \quad \alpha_{\text{em}} \cong \frac{1}{137}$$

其中  $\alpha_{\text{em}}$  称为 **电磁耦合常数**, 反映基本电磁作用的能力; 它是一个无量纲量, 为Compton波长尺度上作用能与静能之比。

(此外,  $\alpha_{\text{em}}$  也可以看作以  $(\hbar c)^{1/2}$  为单位对电荷的度量)

- 自然界基本粒子并非只能通过带电荷而导致电磁作用。

例如: 带色荷 **夸克** 间存在一种新的作用, 其作用能力也用一个无量纲量  $\alpha_s$  来刻画; 但低能标下  $\alpha_s \sim 1 \Rightarrow R_{\text{proton}} < \lambda_c(\text{quark}) \Rightarrow$  **海夸克!**

# 3, 表象的概念

对某一量子态的描述

- 一般用  $\psi(\mathbf{r})$  描述，但因存在傅里叶变换：

$$\left\{ \begin{array}{l} C(\vec{k}) = \iiint \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{d\vec{r}}{\sqrt{2\pi}} \\ \psi(\vec{r}) = \iiint C(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{d\vec{k}}{\sqrt{2\pi}} \end{array} \right.$$

因此  $\psi(\mathbf{r})$  和  $C(\mathbf{p})$  都可以等价地描述某一量子态！只是选择坐标不同（响应地， $\psi^*\psi$  和  $C^*C$  表示不同坐标下概率密度）

- 不同的表象：以不同力学量为基础来表示某一量子态。

$\psi(\mathbf{r})$ :  $\mathbf{r}$  表象的波函数；  $C(\mathbf{p})$ :  $\mathbf{p}$  表象的波函数。

# 4, 动量算符

力学量的平均值 (先考虑一维情形) :

- $\psi^*\psi$  为几率密度, 故位置平均值  $\bar{x}$  很容易求出

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \cdot x \cdot \psi(x) dx \equiv \langle \psi(x) | x | \psi(x) \rangle$$

- 类似地, 也可以求出动量平均值:

$$\begin{aligned}\bar{p} &= \int_{-\infty}^{+\infty} C(p)^* \cdot p \cdot C(p) dp = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} C(k)^* \cdot k \cdot C(k) dk \\ &= \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \right]^* \cdot k \cdot C(k) dk = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} k \cdot C(k) e^{ikx} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \right] \cdot dx \\ &= \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \left( -i \frac{d}{dx} \right) \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \right] \cdot dx = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \left( -i \frac{d}{dx} \right) \psi(x) \cdot dx\end{aligned}$$

左矢

右矢

$\bar{k}$

# 4, 动量算符

- 引进算符:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

称为在位置 $x$ 表象中  
动量算符

这样动量平均值就可以写成:

$$\bar{p} = \langle \psi(x) | \hat{p} | \psi(x) \rangle$$

- 类似引进位置表象中的位置算符  $\hat{x} = x$ , 则位置平均值

$$\bar{x} = \langle \psi(x) | \hat{x} | \psi(x) \rangle$$

- 三维情形 (位置表象中):

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla, \quad \hat{\vec{r}} = \vec{r}$$

# 5, 算符本征值与力学量平均值

## 一般力学量算符

- 一般力学量  $O$  是位矢和动量的函数  $O(\vec{r}, \vec{p})$ , 定义此力学量算符为:

$$\hat{O}(\vec{r}, \vec{p}) = O(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) \xrightarrow[\text{表象}]{\text{位置}} O(\vec{r}, -i\hbar\nabla)$$

例如: 非相对论情形下的动能算符  $\hat{E}_k = \frac{\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{p}}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$

- 算符的 **本征值** 与 **本征矢** (本征函数) / **矩阵的特征根**

若满足:  $\hat{O}|\varphi_o(x)\rangle = o|\varphi_o(x)\rangle$ , 则称

- (1)  $|\varphi_o(x)\rangle$  为  $\hat{O}$  的本征矢
- (2)  $o$  为  $\hat{O}$  的本征值

力学量算符均  
为厄米算符

- 若  $\hat{O}$  的所有本征值都为 **实数**, 称  $\hat{O}$  为 **厄米算符**

# 5, 算符本征值与力学量平均值

量子力学关于测量的基本假设：

- 数学上：任一力学量 $O$ 的所有本征矢的结合 $\{|\varphi_i(x)\rangle\}$ （正交归一化）构成完备的内积空间（即**Hilbert空间**），以保证任一量子态 $\psi(x)$ 可以在此空间中展开：

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle, \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle = \delta_{ij}$$

其中：  $\hat{O}|\varphi_i(x)\rangle = o_i|\varphi_i(x)\rangle$

- 测量对量子态的操作：**态矢塌缩**

对某量子态 $|\psi\rangle$ 测量力学量 $O$ ，则原 $|\psi\rangle$ 态将有 $c_i^*c_i$ 的几率被塌缩至 $\hat{O}$ 的本征态矢之一 $|\varphi_i\rangle$ ；此时 $O$ 的测量值为 $|\varphi_i\rangle$ 态所对应的本征值 $o_i$ 。

# 5, 算符本征值与力学量平均值

力学量的平均值：

- 做如下计算：

$$\langle \psi(x) | \hat{O} | \psi(x) \rangle = \sum_{i,j} \langle \varphi_j | c_j^* o_i \cdot c_i | \varphi_i \rangle = \sum_i (c_i^* c_i) o_i = \bar{O}$$

因此在位置表象中一般存在：

$$\bar{O} = \langle \psi(x) | \hat{O} | \psi(x) \rangle$$

这一形式跟  $\hat{r}$ 、 $\hat{p}$  得到算符而给出的结论**一致**！

# 6, 算符的运算

算符间的对易关系（运算）：

- 定义  $\hat{A}$  与  $\hat{B}$  之间的对易运算：  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$   
若  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , 则称  $\hat{A}$ 、 $\hat{B}$  是对易的；反之不对易。
- 例：求  $[\hat{p}_x, \hat{x}]$   
[解]  $[\hat{p}_x, \hat{x}] \psi(x) \equiv \hat{p}_x [\hat{x} \psi(x)] - \hat{x} [\hat{p}_x \psi(x)]$   
 $= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [x\psi(x)] + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = -i\hbar \psi(x) - i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = -i\hbar \psi(x)$   
所以有：  $[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$
- 可以证明： $[\hat{A}, \hat{B}_1 + \hat{B}_2] = [\hat{A}, \hat{B}_1] + [\hat{A}, \hat{B}_2]$   
 $[\hat{A}, \lambda \hat{B}] = \lambda [\hat{A}, \hat{B}], \quad \lambda \text{为常数}$   
 $[\hat{A}, \hat{B}_1 \hat{B}_2] = [\hat{A}, \hat{B}_1] \hat{B}_2 + B_1 [\hat{A}, \hat{B}_2]$

# 6, 算符的运算

什么条件下两算符 $\hat{A}$ 、 $\hat{B}$ 具有共同本征矢？

设 $\{|\varphi_a(x)\rangle\}$ 为 $\hat{A}$ 的本征矢集合： $\hat{A}|\varphi_a(x)\rangle = A_a |\varphi_a(x)\rangle$

若 $\hat{A}$ 、 $\hat{B}$ 对易： $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$ ；则有

$$\hat{A}(\hat{B}|\varphi_a(x)\rangle) = \hat{B}\hat{A}|\varphi_a(x)\rangle = A_a(\hat{B}|\varphi_a(x)\rangle)$$

这说明 $\hat{B}|\varphi_a(x)\rangle$ 可能也是 $\hat{A}$ 的、本征值为 $A_a$ 的本征矢，  
即可以写成： $\hat{B}|\varphi_a(x)\rangle = B_b |\varphi_a(x)\rangle$ （此证明不是严格的）

结论：

在 $\hat{A}$ 、 $\hat{B}$ 对易的情况下，它们可以具有共同的本征矢  
(在这些本征态可以同时具有确定的 $A$ 、 $B$ 力学量)

# 总 结

- 1, Heisenberg不确定性关系
- 2, 应用: Compton波长与 $\alpha_{\text{em}}$
- 3, 表象的概念
- 4, 动量算符
- 5, 算符本征值与力学量平均值
- 6, 算符的运算

# 作业

- 1, 试从海森伯不确定度关系的角度来发掘康普顿波长的物理意义：如果电子的活动范围局限于康普顿波长的限度以内，它的动量不确定度是相对论性的，还是非相对论性的？你知道吗，康普顿波长与原子或原子核的线度相比孰大孰小？
- 2, 试用海森伯不确定度关系说明：(1) 在原子中电子轨道的概念是没有意义的；  
(2) 汤姆孙用阴极射线测电子的荷质比时，电子的轨道概念还可以是有意义的。  
(阴极射线中电子束截面的线度 $10^{-4}$  m，加速电子的电压10 V.)
- 3, 按归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$$

求出

$$\psi(x) = A e^{-ax^2/2} e^{ip_0 x/\hbar}$$

中的高斯型波函数的归一化因子 $A=(\pi/a)^{-1/4}$ .

- 4, 试论证，在 $p$ 表象中位矢 $\mathbf{r} = x \mathbf{i} + y \mathbf{j} + z \mathbf{k}$ 对应下列算符：

$$\left. \begin{aligned} x &\rightarrow \hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}, \\ y &\rightarrow \hat{y} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_y}, \\ z &\rightarrow \hat{z} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_z}. \end{aligned} \right\} \quad \text{即} \quad \mathbf{r} \rightarrow \hat{\mathbf{r}} = i\hbar \nabla_p$$

# 《原子物理学》

## 轨道角动量

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

有心力系统（势能具有球对称性）的角动量是守恒的；角动量守恒律在研究原子时是基本而重要的。如何在量子论的框架中描述角动量？

（猜原子角动量是量子化的，因为波函数角向 $(\theta, \phi)$ 是局域分布的）

波函数 $(r, \theta, \phi)$ 定域  $\rightarrow$  量子数 $(n, l, m)$

# 复 习

- 算符:  $\hat{O}(\vec{r}, \vec{p}) = O(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) \xrightarrow[\text{表象}]{\text{位置}} O(\vec{r}, -i\hbar\nabla)$
- 平均值:  $\bar{O} = \langle \psi(x) | \hat{O} | \psi(x) \rangle = \iiint \psi^* \hat{O} \psi d\vec{r}$
- 测量: 对某量子态  $|\psi\rangle$  测量力学量  $O$ , 则原  $|\psi\rangle$  态将有  $c_i^* c_i$  的几率被塌缩至  $O$  的 本征态/矢 之一  $|\varphi_i\rangle$ ; 此时  $O$  的测量值为  $|\varphi_i\rangle$  态所对应的本征值  $o_i$ 。

$$\left\{ \begin{array}{l} |\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle, \quad \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle = \delta_{ij} \\ \hat{O} |\varphi_i(x)\rangle = o_i |\varphi_i(x)\rangle \end{array} \right.$$

# 1, 轨道角动量算符

轨道角动量及其算符：

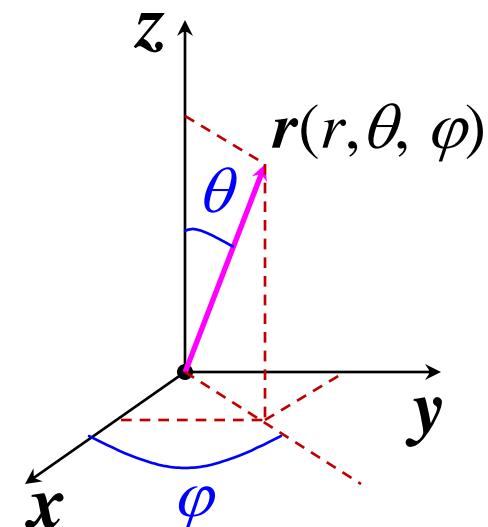
$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = \boldsymbol{r} \times \{p_x, p_y, p_z\}$$

$$\hat{\boldsymbol{l}} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \end{vmatrix} = -i\hbar \left\{ y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}, x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right\}$$

$$= \{y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, x\hat{p}_y - y\hat{p}_x\}$$

中心力场中，采用球坐标讨论比较方便：

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad \longleftrightarrow \quad \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta = \tan^{-1}(\sqrt{x^2 + y^2} / z) \\ \varphi = \tan^{-1}(y / x) \end{cases}$$



# 1, 轨道角动量算符

- 在球坐标系中表示  $\hat{l}$ :

分量

$$\begin{cases} \hat{l}_x = i\hbar(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}) \\ \hat{l}_y = i\hbar(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}) \\ \hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{cases}$$

总角动量平方

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$$

# 1, 轨道角动量算符

•例：验证  $\psi_1(\mathbf{r})$ 、 $\psi_2(\mathbf{r})$ 、 $\psi_3(\mathbf{r})$  分别为  $\hat{l}_x$ 、 $\hat{l}_y$ 、 $\hat{l}_z$  的本征态矢

$$\begin{cases} \psi_1(r, \theta, \varphi) = R(r) \sin \theta \cos \varphi \\ \psi_2(r, \theta, \varphi) = R(r) \sin \theta \sin \varphi \\ \psi_3(r, \theta, \varphi) = -R(r) \cos \theta \end{cases}$$

[解]

$$\begin{aligned} \hat{l}_x \psi_1(r, \theta, \varphi) &= i\hbar (\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}) R(r) \sin \theta \cos \varphi \\ &= i\hbar R(r) (\sin \varphi \cos \theta \cos \varphi - \cot \theta \cos \varphi \sin \theta \sin \varphi) = 0 \times \psi_1 \\ \hat{l}_y \psi_2(r, \theta, \varphi) &= i\hbar (-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}) R(r) \sin \theta \sin \varphi \\ &= i\hbar R(r) (-\cos \varphi \cos \theta \sin \varphi + \cot \theta \sin \varphi \sin \theta \cos \varphi) = 0 \times \psi_2 \\ \hat{l}_z \psi_3(r, \theta, \varphi) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} R(r) \cos \theta \\ &= 0 \times \psi_3 \end{aligned}$$

# 2, 角动量算符对易关系

计算对易关系:  $[\hat{l}_x, \hat{l}_y]$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z]$$

$$\begin{aligned} &= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - [y\hat{p}_z, x\hat{p}_z] - [z\hat{p}_y, z\hat{p}_x] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z] \\ &= -i\hbar y\hat{p}_x - 0 - 0 + i\hbar x\hat{p}_y = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_z) = i\hbar\hat{l}_z \end{aligned}$$

同理可以证明:  $[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar\hat{l}_x$ ,  $[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar\hat{l}_y$

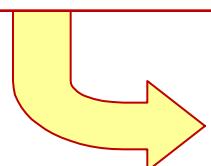
一般性地写作

或:  $\hat{\vec{l}} \times \hat{\vec{l}} = i\hbar\hat{\vec{l}}$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{l}_k$$

可看作一种代数运算  
 $\epsilon_{ijk} = 1$  (ijk正排列)  
 $= -1$  (kji正排列)  
 $= 0$  (其它)



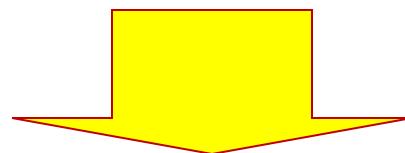
$$\hat{\vec{l}} \times \hat{\vec{l}} = \begin{vmatrix} \hat{\vec{e}}_x & \hat{\vec{e}}_y & \hat{\vec{e}}_z \\ \hat{\vec{l}}_x & \hat{\vec{l}}_y & \hat{\vec{l}}_z \\ \hat{\vec{l}}_x & \hat{\vec{l}}_y & \hat{\vec{l}}_z \end{vmatrix} = \{[\hat{l}_y, \hat{l}_z], [\hat{l}_z, \hat{l}_x], [\hat{l}_x, \hat{l}_y]\} = i\hbar\{\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z\}$$

# 2, 角动量算符对易关系

计算对易关系:  $[\hat{l}^2, \hat{l}_z]$

$$\begin{aligned} [\hat{l}^2, \hat{l}_z] &= [\hat{l}_x^2, \hat{l}_z] + [\hat{l}_y^2, \hat{l}_z] + [\hat{l}_z^2, \hat{l}_z] \\ &= \hat{l}_x [\hat{l}_x, \hat{l}_z] + [\hat{l}_x, \hat{l}_z] \hat{l}_x + \hat{l}_y [\hat{l}_y, \hat{l}_z] + [\hat{l}_y, \hat{l}_z] \hat{l}_y + 0 \\ &= -i\hbar l_x l_y - i\hbar l_y l_x + i\hbar l_y l_x + i\hbar l_x l_y = 0 \end{aligned}$$

同理可以证明:  $[\hat{l}^2, \hat{l}_x] = 0, [\hat{l}^2, \hat{l}_y] = 0$



$\hat{l}^2$  与  $\hat{l}_z$  (或  $\hat{l}_x$ 、 $\hat{l}_y$ ) 具有共同的本征态矢集合

这些本征态矢集合是什么呢?

# 3, 轨道角动量算符本征态矢

为对比起见，先计算动量算符  $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$  本征态矢：

设本征矢为  $|\psi(x)\rangle$ ，相应本征值为  $\hbar k$ ，则本征方程为

$$\hat{p}_x |\psi(x)\rangle = \hbar k |\psi(x)\rangle, \text{ 或: } -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = \hbar k \psi$$

解之：  $\frac{\partial \psi}{\psi} = ik \partial x \Rightarrow \ln \psi = ikx + \ln A \Rightarrow \psi(x) = Ae^{ikx}$

它正是平面波的波函数！

可见  $k$  可以连续取值，因此  $\hat{p}_x$  的本征态矢集合  $\{Ae^{ikx}\}$  中的元素是不可数无穷的。

# 3, 轨道角动量算符本征态矢

$\hat{l}_z = -i\hbar \partial/\partial\varphi$  本征态矢的计算：

设本征矢为  $|\psi_m(\varphi)\rangle$ , 相应的本征值为  $m\hbar$ , 解本征方程

$$\hat{l}_z |\psi_m(\varphi)\rangle = m\hbar |\psi_m(\varphi)\rangle, \text{ 或: } -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = m\hbar \psi$$

解之:  $\frac{\partial \psi}{\psi} = im\partial\varphi \Rightarrow \ln \psi = im\varphi + \ln A \Rightarrow \boxed{\psi(\varphi) = Ae^{im\varphi}}$

归一化:  $\int \psi^* \psi d\varphi = 1 \Rightarrow A = (2\pi)^{-1/2}$

波函数的单值性要求:  $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$

$$Ae^{im\varphi} = Ae^{im(\varphi+2\pi)} \Rightarrow e^{i2\pi m} = 1 \Rightarrow \boxed{m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots}$$

$m$  是量子化的, 称为 **磁量子数**。

本征态矢集合  $\{Ae^{im\varphi}\}$  中元素是可数的! (会无穷?)

# 3, 轨道角动量算符本征态矢

$\hat{l}^2$ 算符的本征态矢：

一般讨论 $\hat{l}^2$ 与 $\hat{l}_z$ 所具有共同本征态矢，记为 $|\psi_{lm}(\theta, \varphi)\rangle$ ；

本征方程： $\hat{l}^2|\psi_{lm}(\theta, \varphi)\rangle = ? |\psi_{lm}(\theta, \varphi)\rangle$ 。

其中： $\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$

数学上可以求出 $\hat{l}^2$ 本征态矢及相应本征值：

$$\psi(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

连带Legendre函数  
球谐函数

$\hat{l}^2$ 本征值 $l(l+1)\hbar^2$ ；故： $\hat{l}^2|\psi_{lm}(\theta, \varphi)\rangle = l(l+1)\hbar^2|\psi_{lm}(\theta, \varphi)\rangle$

### 3, 轨道角动量算符本征态矢

为满足波函数物理条件，本征值也不能连续取值，表现在 $l$ 和 $m$ 只能如下取值：

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots; m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$$

$l$ 称为**轨道量子数**，集合 $\{Y_{lm}(\theta, \varphi)\}$ 元素最多为可数无穷。

易知：  $\hat{l}_z|\psi_m(\varphi)\rangle = m\hbar|\psi_m(\varphi)\rangle$  ( $m$ 取有限值)

• 为书写方便，将本征矢 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 记为 $|lm\rangle$ ，且记 $\hat{l} = (\hat{l}^2)^{1/2}$

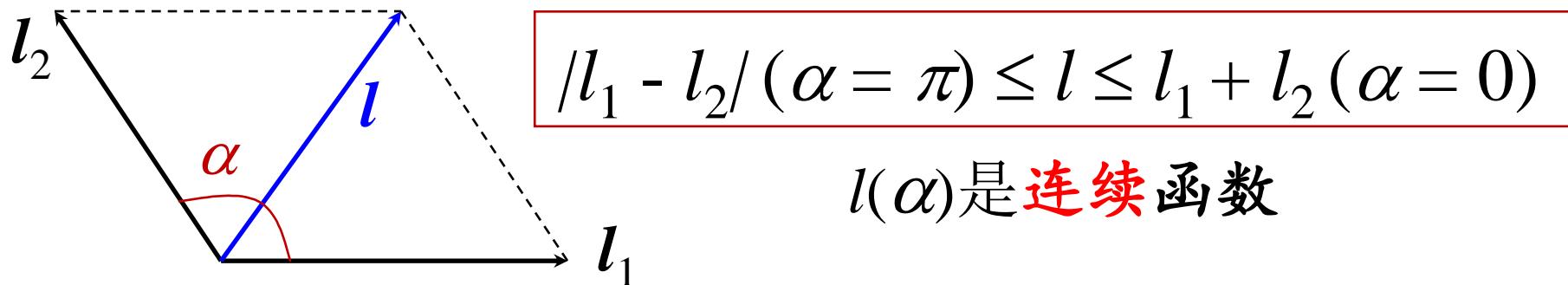
$$\hat{l}^2 |lm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle$$

$$\hat{l}_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle$$

# 4, 角动量合成的法则

- 经典力学中角动量合成：平行四边形法则

合成角动量矢量  $\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$  依赖于  $|\mathbf{l}_1|$ 、 $|\mathbf{l}_2|$  及夹角  $\alpha$ :



- 量子力学中角动量合成法则（不证明）：

总角动量  $\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$ , 算符  $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{l}}_1 + \hat{\mathbf{l}}_2$ 。

若  $\hat{\mathbf{l}}_1$ 、 $\hat{\mathbf{l}}_2$  本征矢分别为  $|\mathbf{l}_1 m_1\rangle$  和  $|\mathbf{l}_2 m_2\rangle$ , 则可以证明:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 |\mathbf{lm}\rangle = \hbar^2 \mathbf{l}(\mathbf{l}+1) |\mathbf{lm}\rangle,$$

$$\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2, \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 - 1, \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 - 2, \dots, |\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2|$$

$\mathbf{l}$  是不连续的

# 4, 角动量合成的法则

## •量子力学角动量合成一例

设两个电子的轨道角动量分别为 $\mathbf{l}_1$ 和 $\mathbf{l}_2$ , 相应的角动量量子数为 $l_1 = l_2 = 1$ , 故在 $z$ 方向投影的量子数 $m_{l1}$ 、 $m_{l2}$ 均可取{1,0,-1}之一。这俩电子总轨道角动量 $\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$ , 其在第三方向 $z$ 投影的量子数 $m_l$ 的可能取值如下:

$$\begin{array}{c} m_{l_1} \\ \left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ -1 \end{array} \right) \end{array} + \begin{array}{c} m_{l_2} \\ \left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ -1 \end{array} \right) \end{array} = \begin{array}{c} m_l \\ \left( \begin{array}{c} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{array} \right) \end{array}$$

即  $l=0$  的投影

即  $l=1$  的投影

即  $l=2$  的投影

易见, 总轨道角动量 $\mathbf{l}$ 的量子数 $l$ 可取{2,1,0}之一。

# 4, 角动量合成的法则

- 例：有两个电子在中心力场中运动；它们的轨道角动量大小分别为 $\sqrt{6}\hbar$ 和 $\sqrt{30}\hbar$ . 试分别以 $|lm\rangle$ 形式写出这两个电子的可能量子态，并写出双电子系统的量子态.

[解]  $l_1 = 2, l_2 = 5;$

$m_1 = 0, \pm 1, \pm 2$  ( $2l_1 + 1 = 5$ 种)

$m_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5$  ( $2l_2 + 1 = 11$ 种)

共 $5 \times 11 = 55$ 种

可能合成方式

总角动量量子数： $l = 7$  ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5, \pm 6, \pm 7$ ), 15

6 ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5, \pm 6$ ), 13

5 ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5$ ), 11

$$15+13+11+9+7=55$$

4 ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4$ ), 3 ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ )

# 4, 角动量合成的法则

将这55种量子态写出：

- **合成前**

$|l_1 m_1\rangle$ :  $|20\rangle, |2\pm 1\rangle, |2\pm 2\rangle,$

$|l_2 m_2\rangle$ :  $|50\rangle, |5\pm 1\rangle, |5\pm 2\rangle, |5\pm 3\rangle, |5\pm 4\rangle, |5\pm 5\rangle$

- **合成后**  $|lm\rangle$ :

$|70\rangle, |7\pm 1\rangle, |7\pm 2\rangle, |7\pm 3\rangle, |7\pm 4\rangle, |7\pm 5\rangle, |7\pm 6\rangle, |7\pm 7\rangle;$

$|60\rangle, |6\pm 1\rangle, |6\pm 2\rangle, |6\pm 3\rangle, |6\pm 4\rangle, |6\pm 5\rangle, |6\pm 6\rangle;$

$|50\rangle, |5\pm 1\rangle, |5\pm 2\rangle, |5\pm 3\rangle, |5\pm 4\rangle, |5\pm 5\rangle;$

$|40\rangle, |4\pm 1\rangle, |4\pm 2\rangle, |4\pm 3\rangle, |4\pm 4\rangle;$

$|30\rangle, |3\pm 1\rangle, |3\pm 2\rangle, |3\pm 3\rangle.$

# 总 结

- 1, 轨道角动量算符
- 2, 角动量算符对易关系
- 3, 轨道角动量算符本征态矢
- 4, 角动量合成的法则

# 作 业

- 1,** 数学中有个大家熟悉的恒等式  $(a + b)(a - b) = a^2 - b^2$ 。在量子力学中  $a$ 、 $b$  成为算符  $\hat{a}$  和  $\hat{b}$ , 上式仍普遍成立吗?
- 2,** 证明  $\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{p}} = 2i\hbar\hat{\mathbf{p}}$ .

# 《原子物理学》

## Schroedinger方程

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

量子态由波函数来描述。

如何动力学上找出描述某一物理状态的波函数呢？

即： 波函数由什么样的方程来确定？ (**Schroedinger 方程**)

# 1, 方程的形式

**Schroedinger方程:** 刻画非相对论粒子量子态的基本方程  
(原则上不能被逻辑地证明, 其正确性依赖于实验的检验)

- 要寻找的方程对于确定动量的平面波应该适用, 平面波函数

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

它随时间的演化满足:

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -i\omega A e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = \frac{1}{i\hbar} E \Psi(\vec{r}, t)$$

貌似存在这样的对应:

$$E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

# 1, 方程的形式

- 这一对应其实还可以从另一角度洞察

狭义相对论中光速与参考系无关，要求光的运动满足：

$$x^2 + y^2 + z^2 = (ct)^2, \text{ 或: } x^2 + y^2 + z^2 + (ict)^2 = 0$$

平移对称性导致四动量守恒： $(p_x, p_y, p_z; iE/c)$ ；存在对应关系：

$$\mathbf{r} \leftrightarrow \mathbf{p}; \quad ict \leftrightarrow iE/c$$

回顾动量算符， $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ ，也应该存在如下对应关系：

$$\frac{iE}{c} \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial(ict)}$$

即： $E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

- 系统总能量为动能与势能之和（非相对论情形）：

$$\tilde{E} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \rightarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$$

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 \rightarrow ? \text{ (Klein-Gordon)}$$

# 1, 方程的形式

- 这样我们就可以猜出量子态（波函数）随时间的演化：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t),$$

Schroedinger方程

其中：  $\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$

1926提出  
Nobel物理  
奖：1933年

Hamiltonian算符

- 物理上要求（波函数条件）：有限、单值、连续

- 定态情形：定态Schroedinger方程（能量 $E$ 确定、不随时间变化）

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}, \quad E = \text{const.}$$

为什么？

(Hamilton算符本征方程)

非定态两例：

定位( $\text{NH}_3$ )，定味  
(3月13日讲)

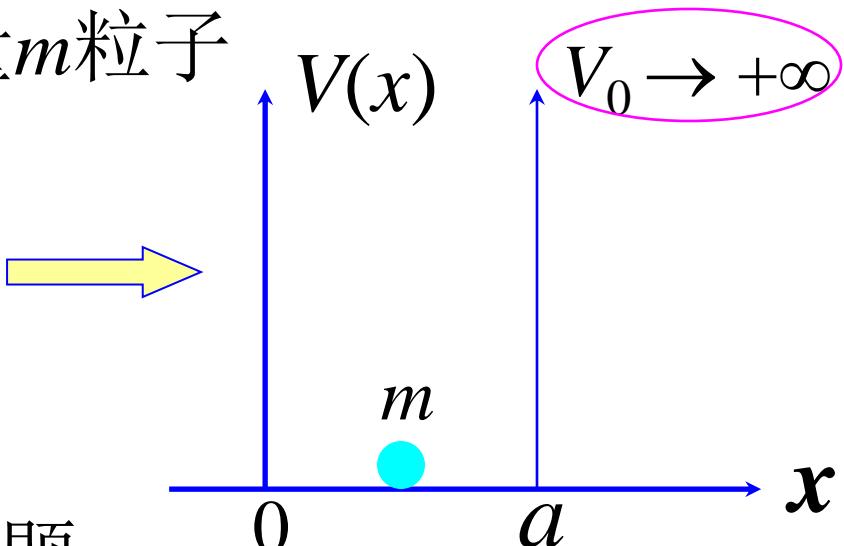
$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

$\psi(\vec{r})$ : 定态波函数

## 2, 一维无限深势阱

对于一维无限深势阱中质量 $m$ 粒子

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ +\infty, & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$



经典力学中的无深势阱问题：

- 处于最低能态（基态）的粒子能量为零；
- 粒子总能量 $E$ 连续变化， $E \geq 0$ （激发态 $E > 0$ ）；
- 粒子任一时刻的位置、动量完全确定；时间平均而言，粒子处于势阱 $0 < x < a$ 中任何一点的几率（密度）相等。

# 2, 一维无限深势阱

量子力学中的无限深势阱：

- 考虑定态情形，定态Schroedinger方程为：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ V_0, & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$

即： $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \begin{cases} -k^2\psi(x) & (k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}) \\ \lambda^2\psi(x) & (\lambda^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \rightarrow \infty) \end{cases} \quad \begin{matrix} 0 < x < a \\ x \leq 0, x \geq a \end{matrix}$

通解

$$\psi(x) = \begin{cases} A' \exp(ikx) + B' \exp(-ikx) = A \cos(kx) + B \sin(kx) & 0 < x < a \\ C \exp(\lambda x) + D \exp(-\lambda x) & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$

# 2, 一维无限深势阱

$$\psi(x) = \begin{cases} A' \exp(ikx) + B' \exp(-ikx) = A \cos(kx) + B \sin(kx) & 0 < x < a \\ C \exp(\lambda x) + D \exp(-\lambda x) & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$

• 如何确定通解中**四个常数**:  $A$ 、 $B$ 、 $C$ 、 $D$ ? —— **波函数条件!**

$$x \rightarrow \pm\infty \text{ 时 } \psi \text{ 有限: } \{C = 0, D = 0\} \Rightarrow \boxed{\psi(x) = 0 \ (x \leq 0, x \geq a)}$$

$$x = 0 \text{ 时 } \psi \text{ 连续: } \Rightarrow A = 0$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

$$x = a \text{ 时 } \psi \text{ 连续: } \Rightarrow 0 = B \sin(ka) \Rightarrow k^2 a^2 = n^2 \pi^2 \Rightarrow$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

• 归一化求常数  $B$ :

$$1 = \int_0^a \psi^* \psi dx = \int_0^a B^* B \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{a}} e^{i\theta}$$

• 当  $n = 0$  时,  $\psi = 0$ , 不能满足总几率为 1, 故舍去  $n = 0$ 。

# 2, 一维无限深势阱

•总结:

能量本征值

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

相应的本征量子态

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & 0 < x < a \\ 0 & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$

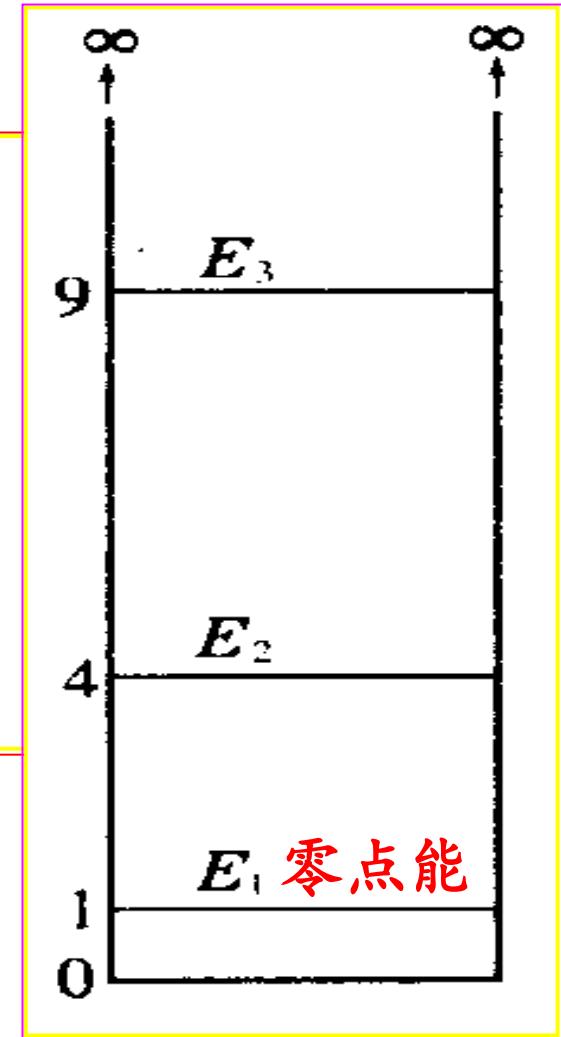
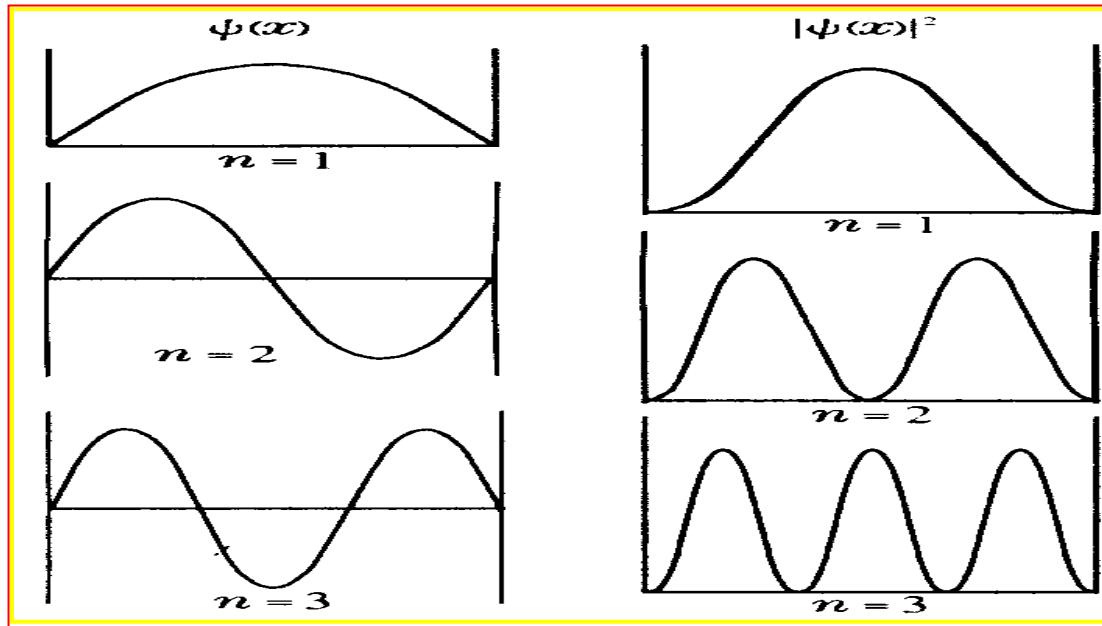
•零点能: 基态 ( $n = 1$ ) 能量  $\sim \hbar^2/(ma^2)$  非零!

零点能是一个普遍存在的现象。对于束缚态，其零点能也可以通过Heisenberg不确定性关系得到：

$$\Delta p \sim \hbar/a, \quad E \sim \Delta p^2 / (2m) \sim \hbar^2 / (ma^2)$$

# 2, 一维无限深势阱

无限深势阱解的图示：



量子力学中的无限深势阱问题结论：

- 处于基态的粒子能量非零；
- 粒子激发态能量不连续变化；
- 粒子某时刻位置、动量不完全确定，出现几率密度一般非均匀。

# 3, 一维谐振子

一维谐振子问题的代数解法

- 谐振子的 Hamilton 算符：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})$$

其中：

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \\ \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \end{array} \right.$$

解偏微分方程（**波动力学**）  
法与代数法（**矩阵力学**，利用对易关系求解）是等价的



验算

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

习题

$$[x, \hat{p}] = i\hbar$$

# 3, 一维谐振子

- 也可以计算如下对易关系：

$$[\hat{H}, \hat{a}] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger \hat{a}) = -\hbar\omega[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\hat{a} = -\hbar\omega\hat{a}.$$

- 设  $|\varphi_i\rangle$  为  $\hat{H}$  的某一本征态矢，即：  $\hat{H}|\varphi_i\rangle = E_i|\varphi_i\rangle$ ，则可演算出：

$$\hat{H}(\hat{a}|\varphi_i\rangle) = \hat{a}\hat{H}|\varphi_i\rangle - \hbar\omega\hat{a}|\varphi_i\rangle = (E_i - \hbar\omega)(\hat{a}|\varphi_i\rangle).$$

这说明  $\hat{a}|\varphi_i\rangle$  也是  $H$  的本征矢，只是相应的**本征值降低**  $\hbar\omega$  了。

显见：  $\hat{a}$  重复作用于  $|\varphi_i\rangle$  可得到  $\hat{H}$  的其它本征矢；但因谐振子能量必须大于零，一定存在一个基态本征矢  $|\varphi_0\rangle$  满足： $\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0$ 。

- 计算  $|\varphi_0\rangle$  的本征值：

若  $\hat{a}|\varphi_0\rangle$  非 0，  
则  $|\varphi_0\rangle$  并非基态！

$$\hat{H}|\varphi_0\rangle = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})|\varphi_0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|\varphi_0\rangle$$

即：  $|\varphi_0\rangle$  的**本征值** 为  $\hbar\omega/2$ 。

# 3, 一维谐振子

- 由此得到  $\hat{H}$  的本征值:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N$$

N是有限或无限正整数

- 将  $\hat{a}^+$  作用到基态  $|\varphi_0\rangle$  上, 得:  $|\varphi_1\rangle = \hat{a}^+ |\varphi_0\rangle$ , 并运算

$$\hat{H}(\hat{a}^+ |\varphi_0\rangle) = \hbar\omega(\hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ + 1/2 \hat{a}^+) |\varphi_0\rangle = (3/2) \hbar\omega (\hat{a}^+ |\varphi_0\rangle).$$

这说明  $\hat{a}^+ |\varphi_0\rangle$  也是  $\hat{H}$  的本征矢, 相应的本征值增加  $\hbar\omega$  了。也运算

$$\hat{H}(\hat{a}^+ |\varphi_1\rangle) = \hbar\omega(\hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ + 1/2 \hat{a}^+) \hat{a}^+ |\varphi_0\rangle = \dots = (5/2) \hbar\omega (\hat{a}^+ |\varphi_1\rangle).$$

显见:  $\hat{a}^+$  重复作用于  $|\varphi_0\rangle$  可得到本征值更高得本征矢; 无上限。

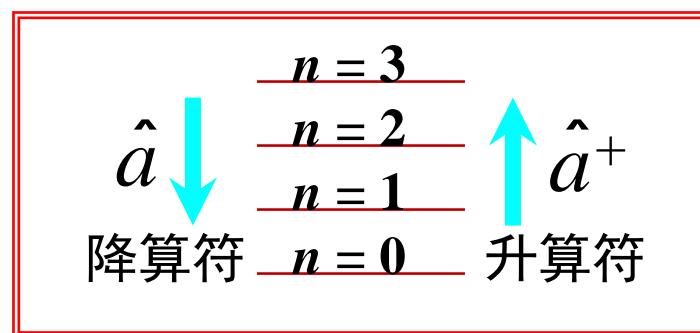
- 所以:  $\hat{H}$  的本征值:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

零点能

(n可为无限正整数)

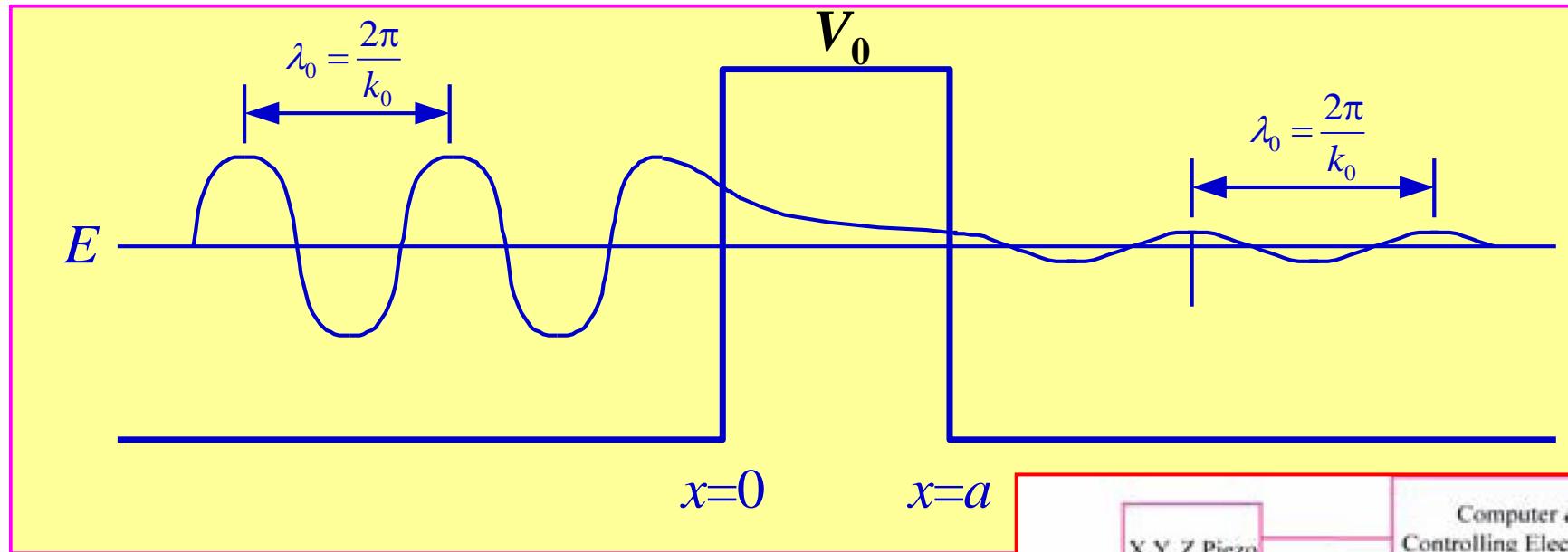
习题



# 4, 势垒贯穿

崂山道士

动能低于势垒高度的贯穿效应：

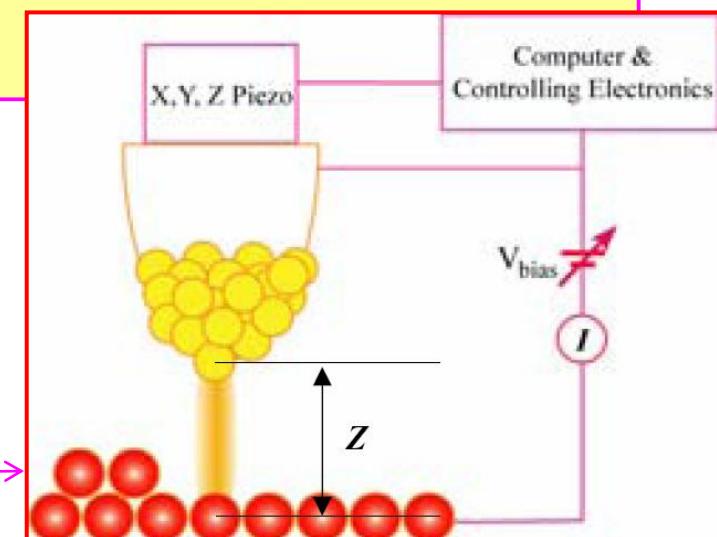


隧穿几率（通过求解Schroedinger方程）

$$P \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} a\right)$$

• 恒星发光

• Scanning Tunneling Microscope



# 总 结

1, 方程的形式

2, 一维无限深势阱

3, 一维谐振子

4, 势垒贯穿

# 作业

- 1, 证明谐振子升降算符对易关系:  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1.$
- 2, 利用Heisenburg关系估计谐振子的零点能.
- 3, 谐振子的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\kappa\hat{x}^2 = \frac{1}{2m}(\hat{p}^2 + m^2\omega_0^2\hat{x}^2),$$

式中  $\omega_0 = \sqrt{\kappa/m}$  为谐振子的经典固有角频率。已知它的前三个本征态波函数为

$$\begin{cases} \psi_0(\xi) = A_0 e^{-\xi^2/2}, \\ \psi_1(\xi) = 2A_1 \xi e^{-\xi^2/2}, \\ \psi_2(\xi) = 2A_2(2\xi^2 - 1)e^{-\xi^2/2}, \end{cases}$$

式中  $\xi = (\sqrt{m\omega_0/\hbar})x$ . 试确定归一化因子  $A_0$ 、 $A_1$  和  $A_2$ , 并计算能量的平均值

$$\overline{E_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\hat{H}\psi_n(x)dx, \quad (n = 0, 1, 2.)$$

- 4, 验证无限深势阱内粒子的波函数

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & 0 < x < a, \\ 0, & \text{其余地方。} \end{cases}$$

的正交归一性:  $\int \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn}.$

# 《原子物理学》

## 电子与光子

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

# 微观基本粒子“演员表”：

← 剧本

电子...?

光子...?

演员

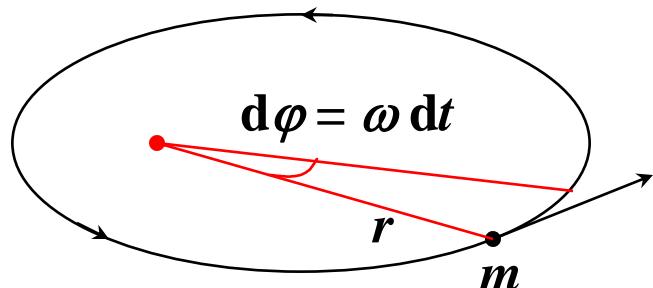
原子...? 亚原子... 亚原子核? ... 亚核子...?

电子是一带单位负电的、简单的点电荷吗？光子与电磁波又存在着什么样的关系？

# A. 电子自旋

# A1, 轨道角动量与轨道磁矩

- 经典力学中点电荷轨道运动产生轨道磁矩



角动量  $\vec{l} = mr^2\omega$  守恒

经典磁矩:  $\vec{\mu}_l = I \cdot \vec{S}$ ,  $I = -e/T$

其中  $S = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} r \cdot r d\varphi = \frac{1}{2m} \int_0^{2\pi} mr^2 d\varphi$   
 $= \frac{1}{2m} \int_0^T mr^2 \omega dt = \frac{lT}{2m}$



这样就得到经典轨道角动量与轨道磁矩之间关系 (对电子而言) :

$$\underline{\vec{\mu}_l} = -\frac{e}{T} \frac{T}{2m_e} \vec{l} = -\frac{e}{2m_e} \vec{l} \equiv -\mu_B \frac{\vec{l}}{\hbar} \propto \vec{l}$$

此关系在量子论中保留，只是角动量量子化了...

**Bhor 磁子**  
 $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.3 \times 10^{-24} \text{ J/T}$   
 $= 5.8 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$

# A1, 轨道角动量与轨道磁矩

•量子力学中轨道角动量与轨道磁矩之间的关系（对电子而言）：

$$\begin{aligned}\mu_l &= -\mu_B \frac{|\vec{l}|}{\hbar} \\ &= -\mu_B \sqrt{l(l+1)}\end{aligned}$$

$$|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

轨道角动量在第三方向（ $z$ 方向）的投影（即分量）：

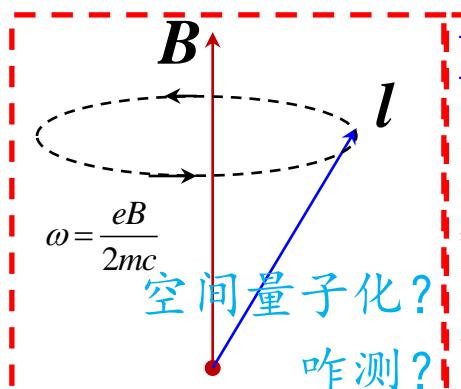
$$\mu_{l_z} = -\mu_B \frac{|\vec{l}_z|}{\hbar} = -\mu_B m$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

例：均匀 $\mathbf{B}$ 经典磁子受外力矩：

$$\tau = \vec{\mu}_l \times \vec{B} = \frac{d\vec{l}}{dt} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{l} \times \vec{B}$$

如何测量原子 $\mu_z$ ?  $\Rightarrow$  S-G实验!



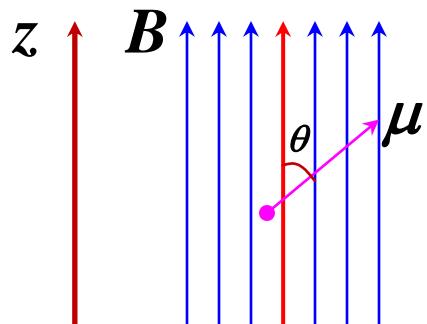
Larmor进动：  
垂直于 $\mathbf{B}$ 方向磁  
矩时间平均为0；

残留  $\mu_{l_z} = -\mu_B m$

# A2, Stern-Gerlach实验

- 原子在非均匀磁场中的受力

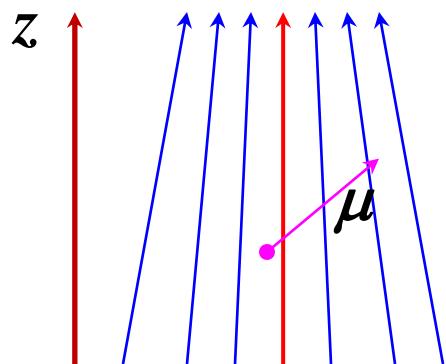
经典磁子与均匀磁场作用能 $\phi$ :



$$\phi(z) = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu B \cos \theta = -\mu_z B$$

$\phi$ 与位置( $z$ )无关, 磁子不受外力作用

经典磁子受非均匀磁场作用而受力 $f$ :



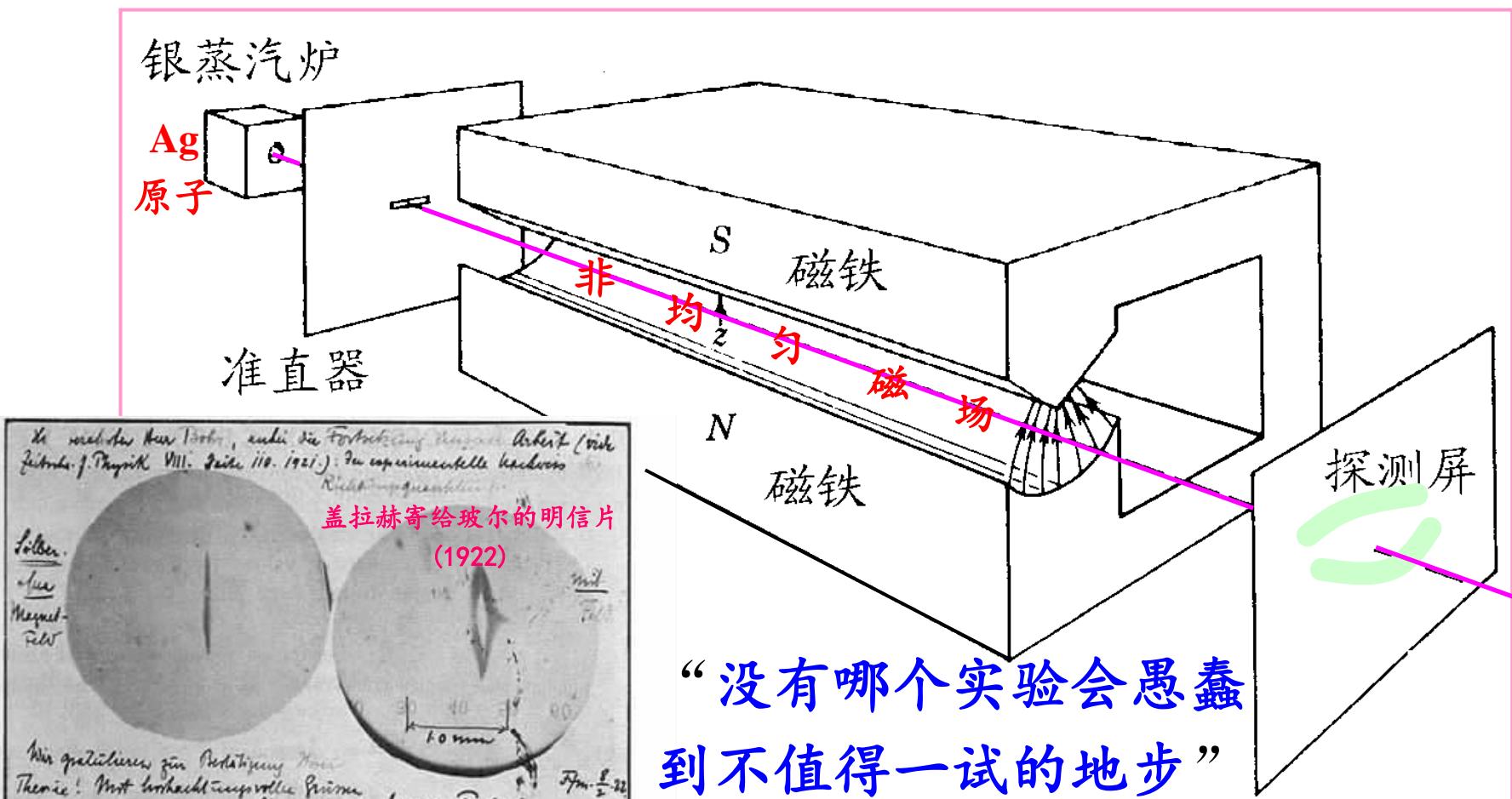
$$\vec{f} = -\nabla \phi \approx -\frac{d}{dz} \phi(z) \vec{e}_z \approx \mu_z \frac{dB}{dz} \vec{e}_z$$

- $\phi$ 与位置( $z$ )有关
- 磁子受外力而近似沿 $z$ 方向漂移
- 受力大小正比于 $\mu_z$

# A2, Stern-Gerlach实验

## 实验装置：

- 利用原子在非均匀磁场中受力偏转而筛选不同 $\mu_z$ 原子（1922年）



# A2, Stern-Gerlach实验

实验结果：

- 没有不偏转的原子
- 探测屏呈现**两束**原子
- 原子轨道力学计算表明，Ag原子带**总磁矩分量**  $\mu_z = \pm \mu_B$

原子中**电子轨道磁矩**对实验的理解

- 原子：质量较大的原子**核**和质量可忽略的若干**电子**构成
- 电子轨道运动贡献的总磁矩，其决定于总轨道角动量：

$$\mu_L = -\mu_B \sqrt{L(L+1)}, \quad |\vec{L}| = \left| \sum_{\text{电子}i} \vec{l}_i \right|, \quad L \in \text{整数}$$

**奇数束  
 $\neq 2 ?!$**

- 总磁矩  $\mu_L = -\mu_B M, \quad M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L$  ( $2L+1$ 种)

# A3, 电子自旋假设 $\equiv \vec{\mu}_S$

电子自旋假设：

- 电子不是简单的点电荷，而是还存在内禀的“自旋”空间
- 电子具有自旋角动量： $|s| = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ ,  $s = \frac{1}{2}$ ,  $s_z = m_s \hbar$
- 电子具有自旋磁矩： $\mu_s = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)}$ ,  $s = \frac{1}{2}$ ,  $\mu_{sz} = -2m_s \mu_B$

考虑电子自旋后电子总磁矩对实验的理解：

- Ag原子中电子可分成满壳层电子与一个价电子(?)
  - 原子实内电子总角动量之和为零； $L = 0$ 、 $S = 0$
  - 价电子轨道角动量为零，自旋角动量非零； $l = 0$ 、 $s = \frac{1}{2}$
- ⇒ Ag原子中电子总轨道磁矩为零，总自旋磁矩分量 $\mu_{sz} = \pm \mu_B$

Ag 价电子

原子实

历史上电子“自旋”这个自由度是怎么提出来的呢？

# A3, 电子自旋假设

产生电子自旋假设的一段历史：

Nobel奖

- 针对Zemcnn分裂和原子壳层模型研究中存在问题，Sommerfeld、Stoner、Pauli等人提出 $\{n,l,m\}$ 之外所谓的“第四量子数”概念
- 1925年：**Uhlenbeck**和**Goudsmit**（Ehrenfest之学生）提出**第四量子数**起源于电子“**自旋**”自由度。基于**Abraham(1902)**非相对论旋转均匀面电荷模型，他们发现：只要电子具有 $S = \hbar/2$ 的自旋角动量，就可具有 $\mu_{sz} = -2\mu_B(|S|/\hbar)$ 的磁矩；则“第四量子数”疑难迎刃而解
- UG二人成文并交Ehrenfest拟投稿，且希望征求已72岁Lorentz意见
- Lorentz：旋转电子的表面速度远超过光速（**违背相对论！**）
- Ehrenfest：“你们都还年轻，承担得起这样的愚蠢行为。”
- 发表后，**反响强烈**：Uhlenbeck & Goudsmit, *Naturwiss*, 1925, 13: 953-954

1928年：狄拉克证明电子自旋是相对论量子理论的必然结果

Kronig  
Pauli

# A4, 自旋算符矩阵表示：Pauli算符

轨道角动量的性质

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{l}_k$$

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_i] = 0$$

自旋角动量的性质 (类比)

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{s}_k$$

$$[\hat{s}^2, \hat{s}_i] = 0 \quad (\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2)$$

$$\hat{l}^2 |lm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle$$

$$\hat{l}_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle$$

$|lm\rangle$



$$\hat{s}^2 |\hat{s}^2 \text{本征态}\rangle = \hbar^2 s(s+1) |\hat{s}^2 \text{本征态}\rangle$$

$$\hat{s}_z |\hat{s}_z \text{本征态}\rangle = \hbar m_s |\hat{s}_z \text{本征态}\rangle$$

$|sm_s\rangle := \left\{ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right\}$

$$\hat{s}^2 |\uparrow\rangle = (3/4)\hbar^2 |\uparrow\rangle, \hat{s}^2 |\downarrow\rangle = (3/4)\hbar^2 |\downarrow\rangle$$

$$\hat{s}_z |\uparrow\rangle = (1/2)\hbar |\uparrow\rangle, \hat{s}_z |\downarrow\rangle = (-1/2)\hbar |\downarrow\rangle$$

$|\uparrow\rangle$

$|\downarrow\rangle$

完备  $\{\hat{s}^2, \hat{s}_z\}$  共同本征态

# A4, 自旋算符矩阵表示：Pauli算符

- 为了省写 $\hbar$ 、 $1/2$ 等，引入新的算符：

$$\hat{\sigma}_i = \frac{2}{\hbar} \hat{s}_i$$

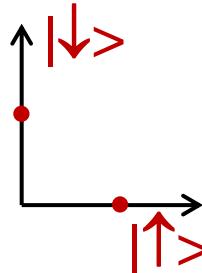
容易证明  $\left\{ \begin{array}{l} [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k \\ [\hat{\sigma}^2, \hat{\sigma}_i] = 0 \quad (\hat{\sigma}^2 = \hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) \end{array} \right.$

且 $\hat{\sigma}$ 算符的本征方程也简单化了：

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}^2 |\uparrow\rangle &= 3|\uparrow\rangle, \quad \hat{\sigma}^2 |\downarrow\rangle = 3|\downarrow\rangle \\ \hat{\sigma}_z |\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \quad \hat{\sigma}_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle \end{aligned}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- 将 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ 看作二维复空间中正交、归一、完备的基矢：



$$|\uparrow\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|\downarrow\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

这样就可以根据对易关系等将 $\hat{\sigma}_i$ 算符的具体矩阵形式表达出来...

# A4, 自旋算符矩阵表示：Pauli算符

- 这些矩阵的具体形式如下（证明略）：

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

它们称为**Pauli矩阵**。容易检验对易关系及本征方程。

- 例：求 $\hat{\sigma}_y$ 的本征值与本征矢。在这些态矢测量 $s_z$ 能得到什么值？得到这些值的几率如何？

[解] 求解本征值 $\lambda$ 方程： $\det \begin{pmatrix} 0-\lambda & -i \\ i & 0-\lambda \end{pmatrix} = 0 = \lambda^2 - 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$   
也容易求出相应本征矢：

$$|\lambda = \pm 1\rangle \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \pm \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

测量 $s_z$ 得到 $\pm \hbar/2$ 的几率各为 $1/2$

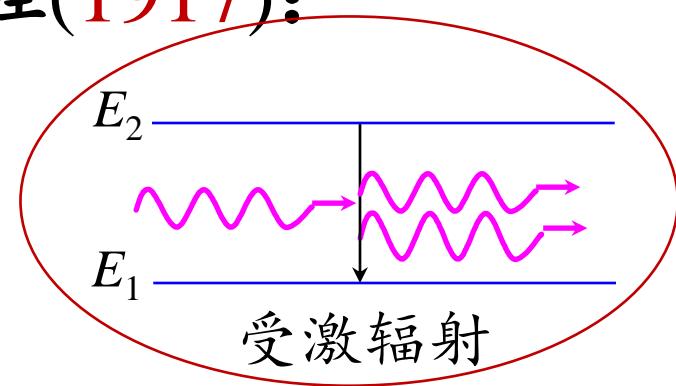
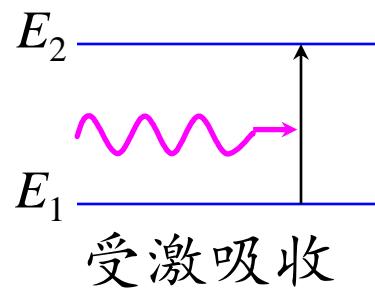
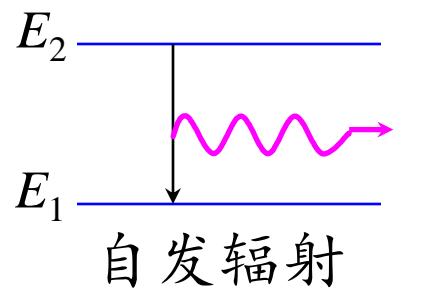
# B. 光的发射与吸收

# B1, Einstein对辐射场的描述

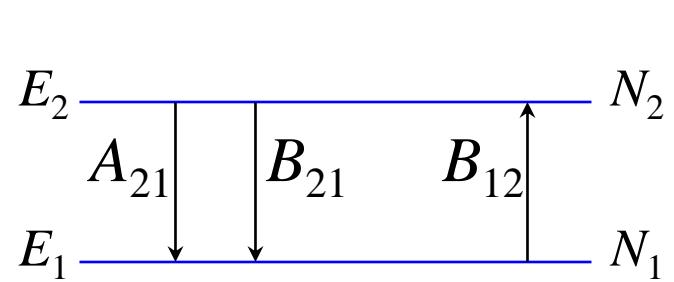
Bohr关于原子能级的假设(1913):

- 定态: 以回避原子塌缩疑难;  $E_i$  ( $i = 1, 2, 3, \dots$ )
- 跃迁: 吸收或发射频率为 $\nu$ 的光子;  $h\nu = |E_f - E_i|$

Einstein提出原子受激辐射过程(1917):



- Einstein引入 $A$ 、 $B$ 系数描述以上过程



$$\begin{cases} \frac{dN_1}{dt} = A_{21}N_2 + B_{21}N_2\rho_\nu - B_{12}N_1\rho_\nu \\ \frac{dN_2}{dt} = -A_{21}N_2 - B_{21}N_2\rho_\nu + B_{12}N_1\rho_\nu \end{cases}$$

# B1, Einstein对辐射场的描述

- Einstein受激辐射思想的理论意义：Planck公式

平衡  $d/dt = 0 \Rightarrow (B_{12} N_1 - B_{21} N_2) \rho_v = A_{21} N_2 \Rightarrow \rho_v = \frac{A_{21} N_2}{B_{12} N_1 - B_{21} N_2} = \frac{A_{21}}{B_{12} \frac{N_1}{N_2} - B_{21}}$

Boltzmann分布:  $\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-hv/kT} \Rightarrow \frac{N_1}{N_2} = \frac{g_1}{g_2} e^{hv/kT}$

$$\Rightarrow \rho_v = \frac{A_{21}}{B_{12} \frac{g_1}{g_2} e^{hv/kT} - B_{21}} = \frac{A_{21} g_2}{B_{12} g_1 e^{hv/kT} - B_{21} g_2}$$

考慮  $h\nu \ll kT$  的 Rayleigh-Jean 情形:

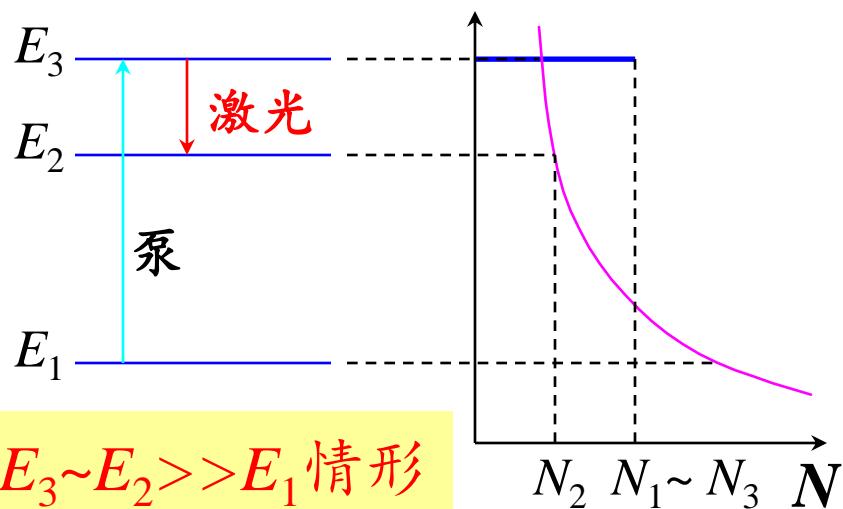
$$\rho_v = \frac{A_{21} g_2}{B_{12} g_1 (1 + \frac{hv}{kT} + \dots) - B_{21} g_2} \approx \frac{A_{21} g_2 kT}{(B_{12} g_1 - B_{21} g_2) kT + B_{12} g_1 h\nu} = \frac{8\pi v^2}{c^3} kT \Rightarrow \begin{cases} B_{12} g_1 = B_{21} g_2 \\ \frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \end{cases}$$

带入即得 Planck 公式:  $\rho_v = \frac{A_{21} g_2}{B_{21} g_2 e^{hv/kT} - B_{21} g_2} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{hv/kT} - 1}$

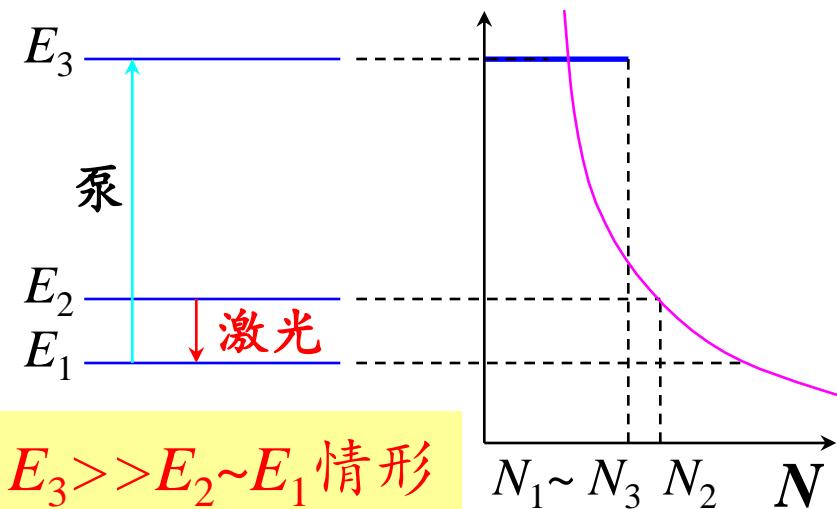
# B1, Einstein对辐射场的描述

Einstein受激辐射思想的应用意义：激光

- 平衡情况下高能级 $E_2$ 粒子少于低能级 $E_1$  ( $N_1 > N_2$ )，若 $g_1 = g_2$ 则 $B_{12} = B_{21}$ ；受激吸收大于受激辐射（或受激辐射不能被放大）
- 能级反转 ( $N_2 > N_1$ )：受激辐射可能大于受激吸收而产生相干光
- 这种光的方向、频率、相位一致，称为激光
- 以三能级系统为例介绍能级反转而导致激光的机制



$E_3 \sim E_2 \gg E_1$  情形

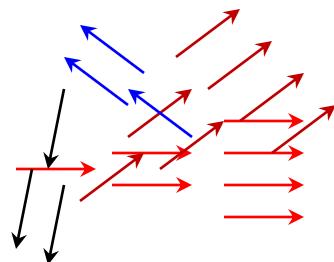


$E_3 >> E_2 \sim E_1$  情形

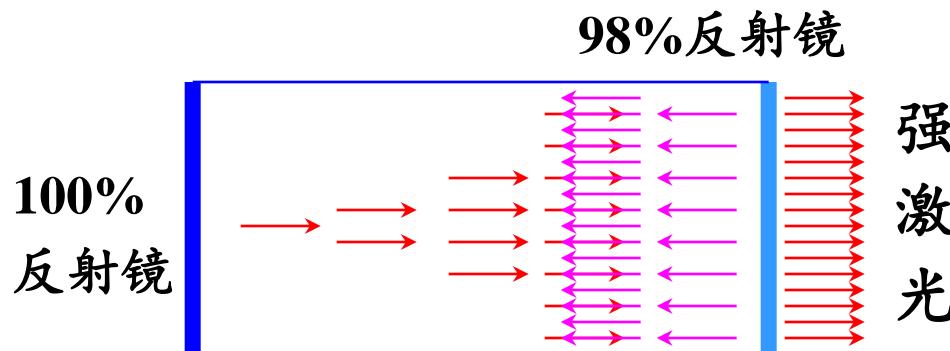
# B1, Einstein对辐射场的描述

## 激光的实现：谐振腔

- 具有能级反转的介质只是激光（Laser）产生的必要条件



无谐振腔



谐振腔有助于强激光的产生

- 无谐振腔“激光”：宇观尺度上出现的天体脉泽（*maser*, Microwave Amplification by Stimulation Emission of Radiation）

# B2, 光子：量子化电磁场单元

光子：量子化电磁场的能量子

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})$$

- 真空中经典Maxwell方程组（取 $\hbar = c = 1$ 讨论）

一维谐振子

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{E} = 0 \\ \nabla \cdot \vec{B} = 0 \\ \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{B} = \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{cases}$$

引入矢势 $A$ 、标势 $\varphi$ :  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla \varphi$

在Coulomb规范下，电磁场Hamilton量可写成：

$$H = \frac{1}{8\pi} \int (B^2 + E^2) d^3x = \sum_{\vec{k}, \alpha} \hbar\omega (\vec{a}_{\vec{k}\alpha}^* \vec{a}_{\vec{k}\alpha} + \frac{1}{2})$$

$a$ 为 $\alpha$ 偏振态平面波 $A$ 展开系数，且存在对易关系：

$$[\vec{a}_{\vec{k}\alpha}, \vec{a}_{\vec{k}\alpha}^*] = 1; \quad k \text{和} \alpha \text{不都相同时, 对易。}$$

- 电磁场Hamilton量类似于谐振子，  
量子化后得到电磁场能量本征值：

$$E = \sum_{\vec{k}, \alpha} \left( N_{\vec{k}\alpha} + \frac{1}{2} \right) \omega$$

# 总 结

- A1, 轨道角动量与轨道磁矩
- A2, Stern-Gerlach实验
- A3, 电子自旋假设
- A4, 自旋算符矩阵表示：Pauli算符
- B1, Einstein对辐射场的描述
- B2, 光子：量子化电磁场单元

# 作业

1, 光的受激发射与光子是玻色子有什么关系?

2, 1 - 39. 已知角量子数  $J=1$  的角动量  $\hat{\mathbf{J}}$  的三个分量  $\hat{J}_x$ 、 $\hat{J}_y$ 、 $\hat{J}_z$  的本征

矢为

$$\begin{cases} |x+\rangle \simeq \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, & |y+\rangle \simeq \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, & |z+\rangle \simeq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |x0\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & |y0\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, & |z0\rangle \simeq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |x-\rangle \simeq \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}. & |y-\rangle \simeq \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}. & |z-\rangle \simeq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{cases}$$

试以  $|x\pm\rangle$  和  $|x0\rangle$  为基矢将  $|y\pm\rangle$  和  $|y0\rangle$  展开。在  $|y\pm\rangle$  和  $|y0\rangle$  中测量  $\hat{J}_x$  分量可能获得哪些值, 它们各自的概率是多少? 平均值是多少?

# 作业

3, 对于自旋为1的粒子，自旋沿任何方向分量的本征值皆为+1、0、-1. 对于任何两个相互垂直的方向（譬如 $x$ 和 $y$ ），在第一个方向自旋分量的本征态中测量第二个方向自旋分量时，获得它的各个本征值的概率列于下表（见习题1-39）：

第一方向 $x$	+1			0			-1		
第二方向 $y$	+1	0	-1	+1	0	-1	+1	0	-1
概率	1/4	1/2	1/4	1/2	0	1/2	1/4	1/2	1/4

试问：

- (1)若先在 $x$ 方向测得自旋分量为+1，接着又在 $y$ 方向测得自旋分量为-1，再接着回过来在 $x$ 方向测量自旋分量，得到数值为+1的概率是多少？
- (2)若先在 $x$ 方向测得自旋分量为0，接着又在 $y$ 方向测得自旋分量为-1，再接着回过来在 $x$ 方向测量自旋分量，得到数值为+1的概率是多少？
- (3)若先在 $x$ 测得自旋分量为-1，接着又在 $y$ 方向测得自旋分量为-1，再接着回过来在 $x$ 方向测量自旋分量，得到数值为+1的概率是多少？

# 作业

4, 算符和态矢运算的代数关系不因表象而异。右表给出轨道角量子数 $l=1$ 的3个本征矢和角动量算符的两种表示：球坐标表示和矩阵表示。

试用这两种表示验算下列关系式：

$$\frac{\hat{l}_+}{\hbar} |p0\rangle = \sqrt{2} |p+\rangle$$

$ p+\rangle$	$\psi_{p+} = \frac{1}{\sqrt{2}} R(r) \sin\theta e^{+i\varphi}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$
$ p0\rangle$	$\psi_{p0} = -R(r) \cos\theta$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
$ p-\rangle$	$\psi_{p-} = -\frac{1}{\sqrt{2}} R(r) \sin\theta e^{-i\varphi}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
$\frac{\hat{l}_z}{\hbar}$	$-i \frac{\partial}{\partial \varphi}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
$\frac{\hat{l}_x}{\hbar}$	$i \left( \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\frac{\hat{l}_y}{\hbar}$	$i \left( -\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$
$\frac{\hat{l}_+}{\hbar}$	$e^{+i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$	$\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\frac{\hat{l}_-}{\hbar}$	$-e^{-i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$	$\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\frac{\hat{l}^2}{\hbar^2}$	$- \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$	$2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

# 《原子物理学》

## 双态系统与氨分子

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

一类简单的量子力学系统：

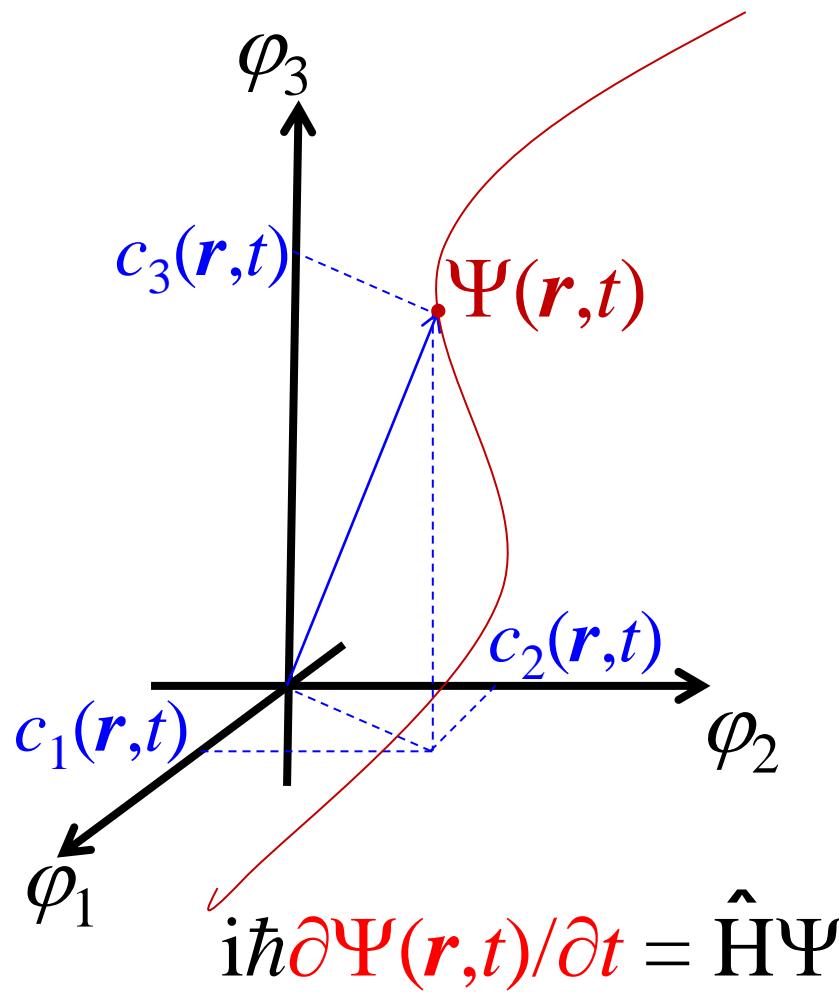
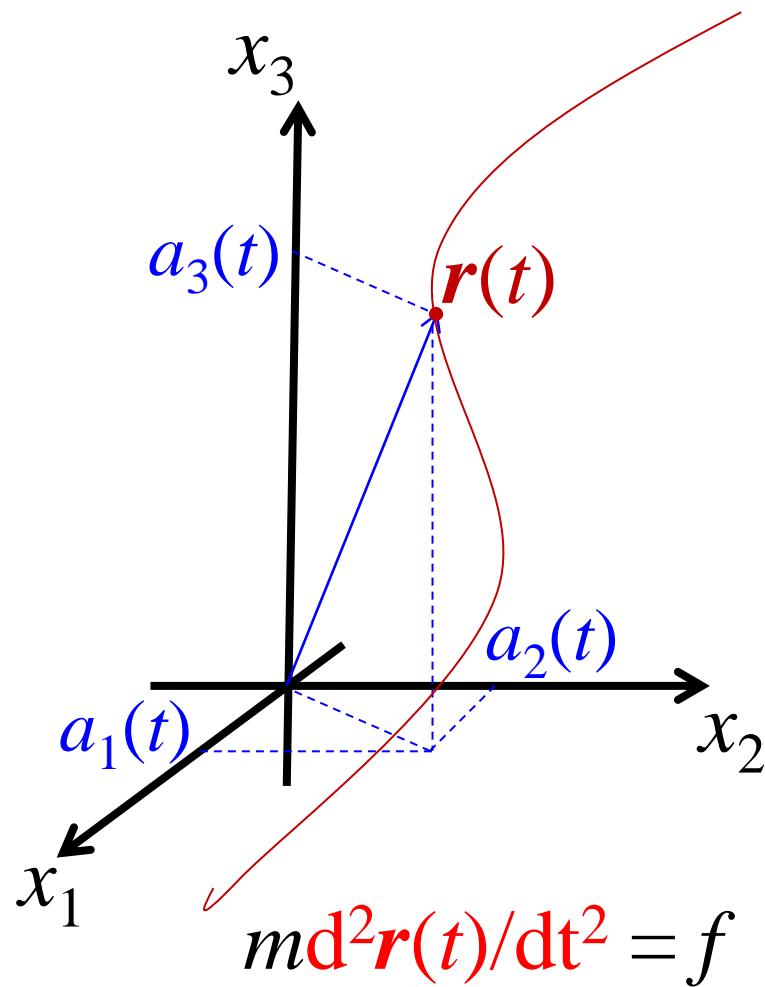
# 等价双态

(二维希尔伯特空间)

更深刻地理解一般量子态、定态，以及量子态的演化。

# 1, 离散能级系统Schroedinger方程

经典矢径 $\mathbf{r}(t)$ 与量子态 $\Psi(\mathbf{r},t)$ 随时间的演化:



# 1, 离散能级系统Schroedinger方程

量子态 $\Psi(r,t)$ 随时间的演化：Schroedinger方程

- 态矢 $|\Psi(r,t)\rangle$ 随时间的演化方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

- 取 $\{|\varphi_i\rangle\}$ （简记作 $\{|i\rangle\}$ ）为描述态矢空间的一组完备的正交归一基

即： $\langle j|i\rangle = \delta_{ij}$ ，且 $|\Psi\rangle$ 态可在此基下展开： $|\Psi\rangle = \sum_j c_j |j\rangle$

- 演化方程两端同时作 $\langle i|$ 内积得：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle i | \Psi \rangle = \langle i | \hat{H} | \Psi \rangle \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_j \langle i | c_j | j \rangle = \sum_j \langle i | \hat{H} | j \rangle c_j$$

→  $i\hbar \frac{\partial c_i}{\partial t} = \sum_j H_{ij} c_j$

$\uparrow$   
 $\langle i | \hat{H} | j \rangle$

写成矩  
阵形式：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

# 1, 离散能级系统Schroedinger方程

对于双态情形:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

•  $\hat{H}$ 的厄米性要求:  
 $H_{12} = H_{21}^*$

• 能量表象: 取正交归一基为Hamilton算符本征矢 (能量本征态)

$\{|I\rangle, |II\rangle\}$ :  $\hat{H}|I\rangle = E_I|I\rangle, \hat{H}|II\rangle = E_{II}|II\rangle$ ; 则Hamilton算符矩阵形式:

$$H_{ij} = \langle i|\hat{H}|j\rangle \Rightarrow \hat{H} = \begin{pmatrix} E_I & 0 \\ 0 & E_{II} \end{pmatrix} \quad \xrightarrow{\text{yellow arrow}} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_I \\ c_{II} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_I & 0 \\ 0 & E_{II} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_I \\ c_{II} \end{pmatrix}$$

可见: 若取基矢为能量本征态, 则 $\hat{H}$ 算符矩阵是**对角的**。

**定态!**

• 易知在能量表象中**展开系数**  $c_i$  ( $i = I, II$ ) 满足:

$$i\hbar \frac{\partial c_i}{\partial t} = E_i c_i \Rightarrow \underline{\underline{c_i(t) = c_i(0)e^{-iE_i t/\hbar}}}$$

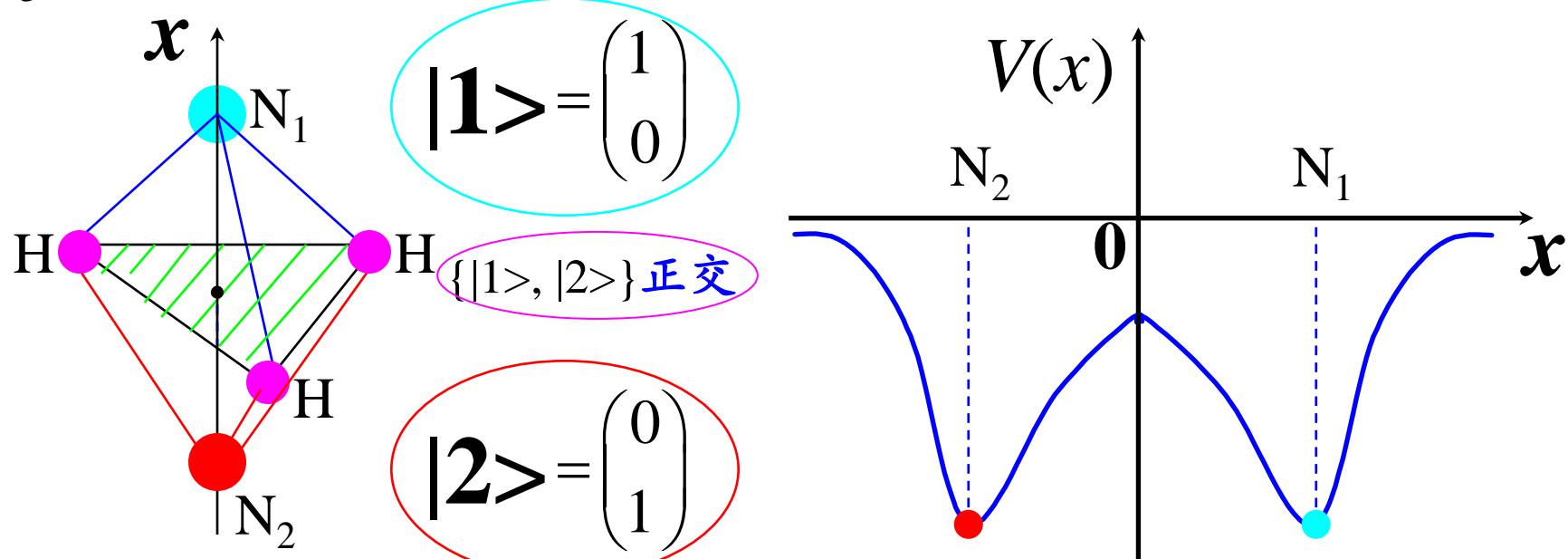
若  $|\Psi(t=0)\rangle = |I\rangle$ , 即  
 $c_I(0)=1, c_{II}(0)=0$ ; 则  
 $c_I(t)^* c_I(t) = 1$ , 态不变!

# 2, 氨分子等价双态

氨分子的一对等价双态：

对称性考虑：“More is Different” (Anderson, 1972)

- $\text{NH}_3$ 分子中N原子相对于三个H原子组成平面可处于镜象对称位置



- 若  $|1\rangle$ 、 $|2\rangle$  为定态，则在能量表象中  $\hat{H}$  的矩阵形式为

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix}$$

$|1\rangle$ 、 $|2\rangle$  态真的是定态吗？

# 2, 氦分子等价双态

因量子隧穿效应,  $|1\rangle$ 、 $|2\rangle$ 非定态

- 因此, 以 $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ 为基矢表示的 $\hat{H}$ 矩阵为 (不失一般性,  $A > 0$ )

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

一般地:  $H_{12} = A e^{i\varphi} = H_{21}^*$ , 如何?  
思考题2-1

易知 $A$ 与隧穿几率有关; 若隧穿几率严格为零则 $A = 0$

显然这里 $E_0$ 并非 $\hat{H}$ 本征值;  $E_0$ 仅为一参数,  $A=0$ 时 $E_0$ 即能量本征值

- Schroedinger方程的求解与能量本征值

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$\Downarrow$   $\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial c_1}{\partial t} = E_0 c_1 - A c_2 \\ i\hbar \frac{\partial c_2}{\partial t} = -A c_1 + E_0 c_2 \end{array} \right.$   $\Downarrow$   $i\hbar \frac{\partial c_\pm}{\partial t} = (E_0 \mp A) c_\pm$

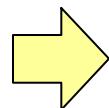
$$c_\pm \equiv \frac{(c_1 \pm c_2)}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow c_\pm(t) = c_\pm(0) e^{-i(E_0 \mp A)t/\hbar} \quad \text{或} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

# 2, 氦分子等价双态

- $|1\rangle$ 、 $|2\rangle$ 双态随时间的演化

$$c_{\pm} \equiv \frac{c_1 \pm c_2}{\sqrt{2}}$$



$$\begin{cases} c_1(t) = \frac{c_+ + c_-}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}[c_+(0)e^{-i(E_0-A)t/\hbar} + c_-(0)e^{-i(E_0+A)t/\hbar}] \\ c_2(t) = \frac{c_+ - c_-}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}[c_+(0)e^{-i(E_0-A)t/\hbar} - c_-(0)e^{-i(E_0+A)t/\hbar}] \end{cases}$$

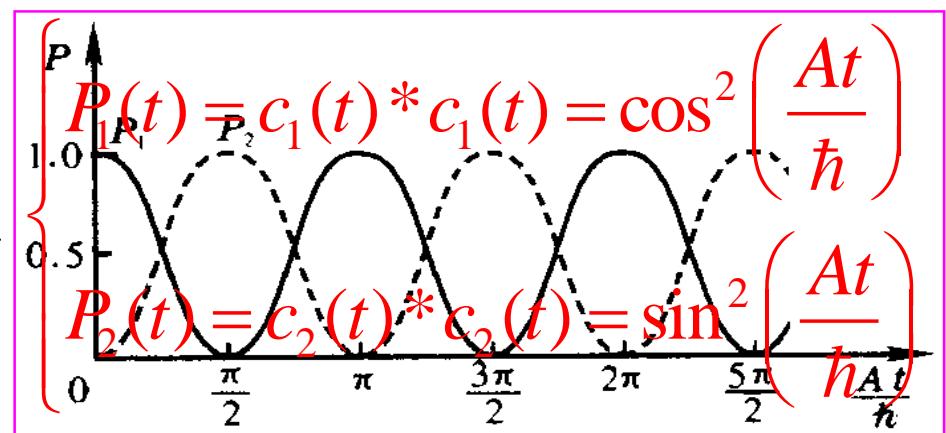
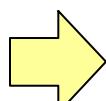
- 给定初条件：设  $t=0$  时处于  $|1\rangle$  态，即  $c_1(0)=1, c_2(0)=0$ ；则有

$$\begin{cases} c_1(0) = \frac{c_+(0) + c_-(0)}{\sqrt{2}} = 1 \\ c_2(0) = \frac{c_+(0) - c_-(0)}{\sqrt{2}} = 0 \end{cases}$$



$$c_+(0) = c_-(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{cases} c_1(t) = e^{-iE_0t/\hbar} \cos\left(\frac{At}{\hbar}\right) \\ c_2(t) = ie^{-iE_0t/\hbar} \sin\left(\frac{At}{\hbar}\right) \end{cases}$$



## 2. 氨分子等价双态

- 由此可见:  $|1\rangle$ 、 $|2\rangle$  双态均为非定态, 那么  $\text{NH}_3$  定态是什么?
- 定义:  $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \pm |2\rangle)$ , 可以证明它们就是定态 (能量本征态)

[证明] 在  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$  基矢下讨论: 碰巧  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$  正交非定态

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{而 } \hat{H} \text{ 算符的矩阵形式为 } \hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{H} |+\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = (E_0 - A) |+ \rangle \\ |- \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{H} |- \rangle = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = (E_0 + A) |- \rangle \end{array} \right.$$

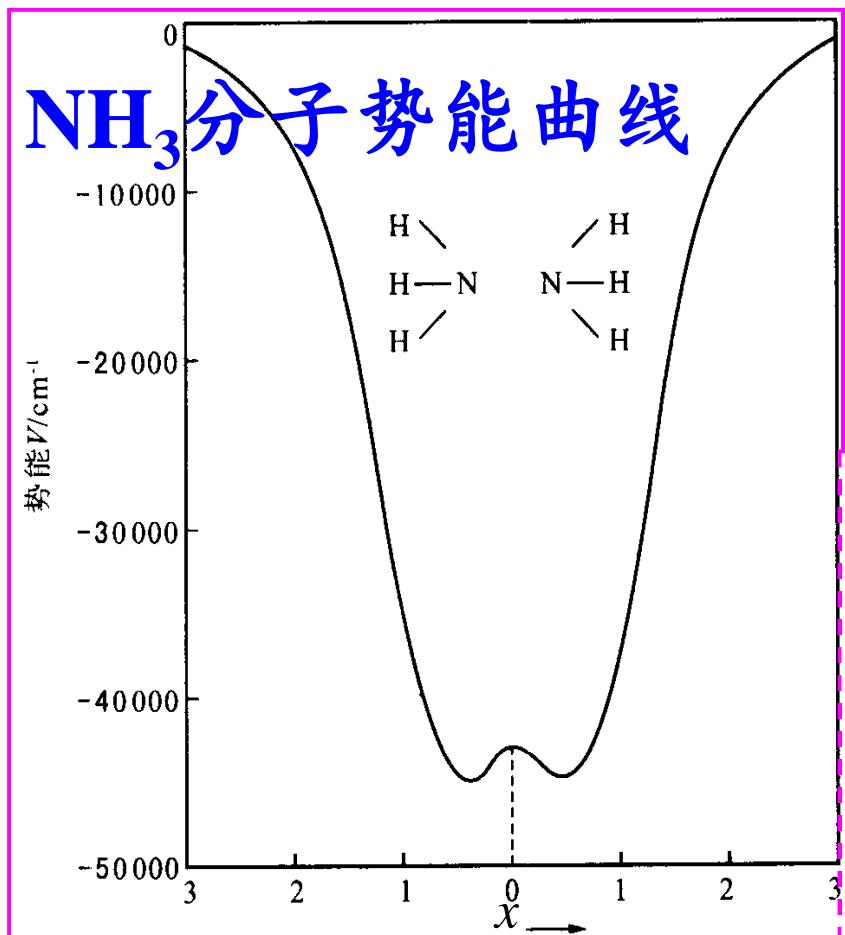
所以,  $|- \rangle$ 、 $|+ \rangle$  态能量本征值分别为  $E_0 \pm A$ :

$$\hat{H}' = \begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix}$$

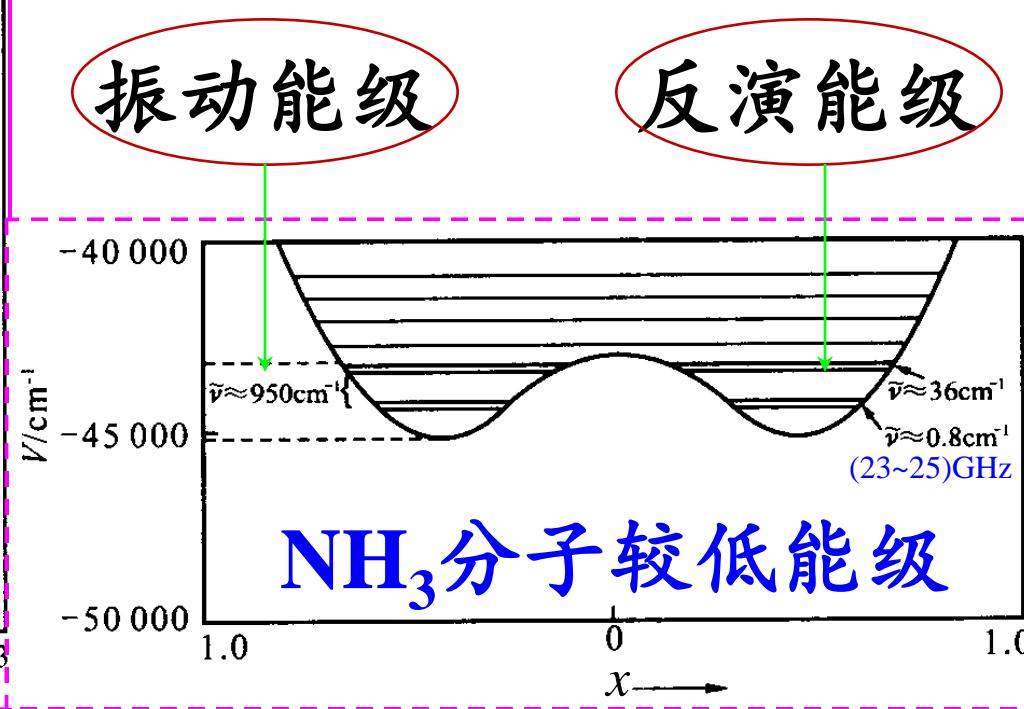
- 结论: 双态之间的转换导致能级分裂  $2A$ !

# 2, 氨分子等价双态

氨分子反演 (inversion) 能级:

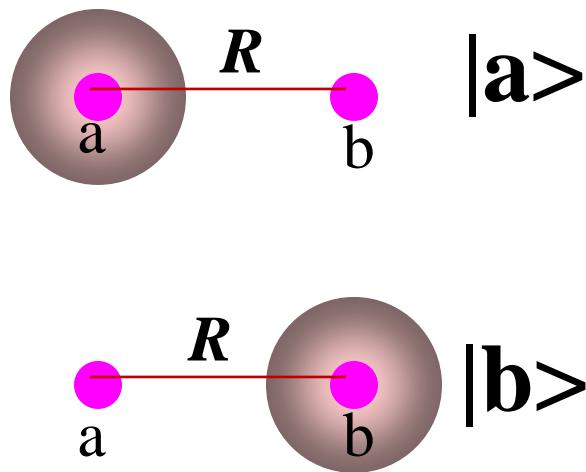


反演能级跃迁容易在低温分子云环境中激发，故对于星际介质物理量的诊断具有重要意义。



# 3, 氢分子离子等价双态

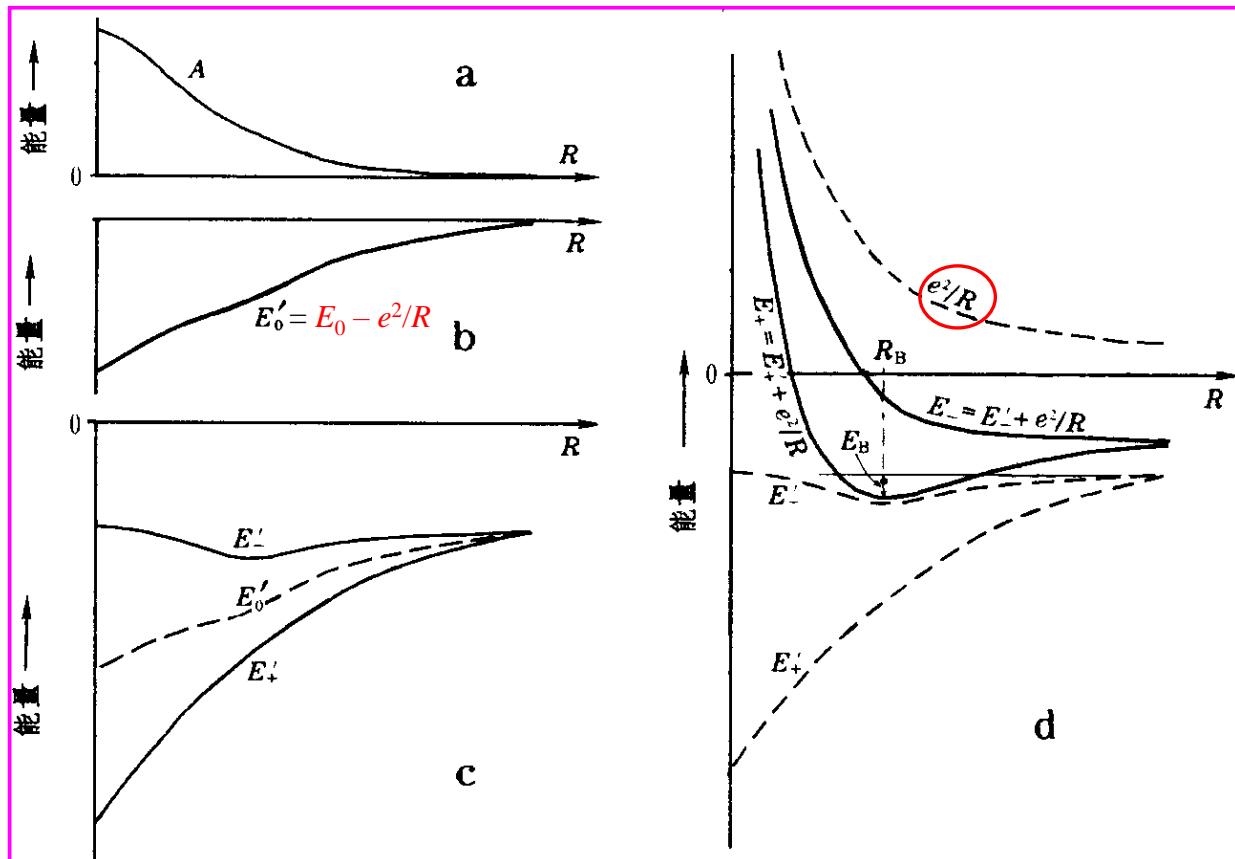
氢分子离子与化学键：



注意：

$|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 不正交！

$\text{H}_2^+$ 与化学键...



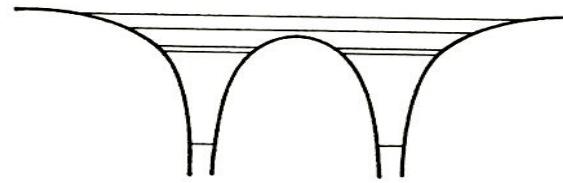
# 3, 氢分子离子等价双态

从能级分裂到能带

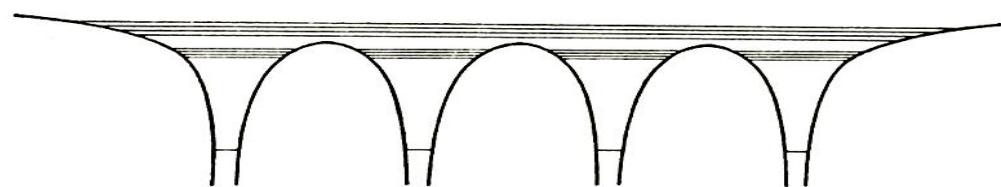
几乎无穷远的两原子：



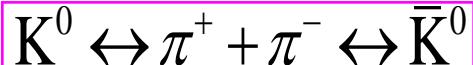
距离较近的两原子：



距离较近的四原子：



其它例子：味本征态与质量（能量）本征态不一致导致基本Fermion（夸克和轻子）之间的味混合...



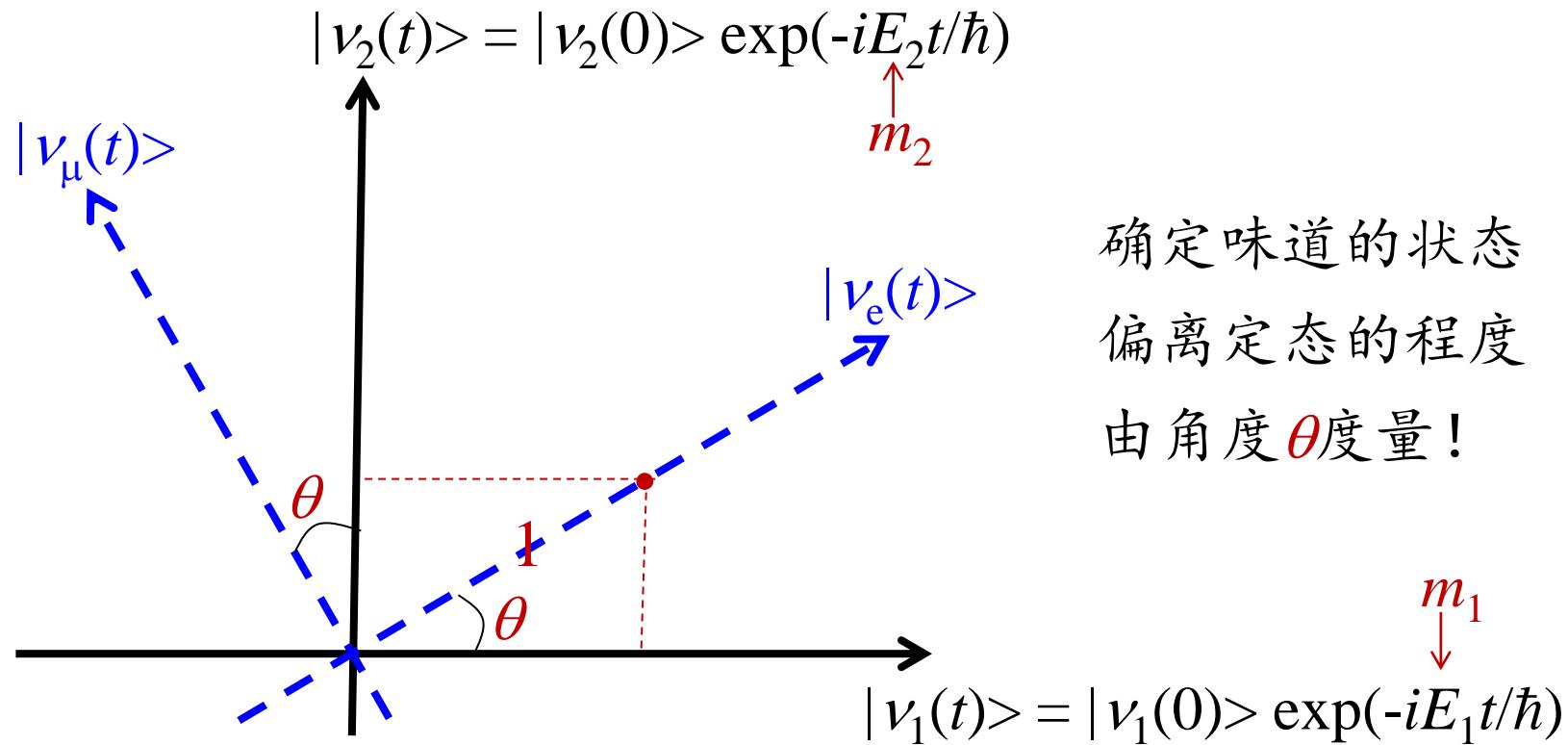
中微子振荡

夸克  
轻子

# 4, 味混合与中微子振荡

- 中微子相互作用味本征态非能量本征态！

弱作用轻子数守恒→中微子味本征态 ( $|\nu_e\rangle$ ,  $|\nu_\mu\rangle$ ) 但**非定态**,  
而质量本征态(即定态)为 $\{|\nu_1\rangle$ ,  $|\nu_2\rangle\}$ , 静质量分别为 $m_1$ 、 $m_2$ 。



# 4, 味混合与中微子振荡

- 中微子相互作用味本征态非能量本征态！

$\{|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle\}$ 与 $\{|\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle\}$ 之间的线性转换关系：

$$\begin{pmatrix} |\nu_e\rangle \\ |\nu_\mu\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\nu_1\rangle \\ |\nu_2\rangle \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{逆变换}} \begin{pmatrix} |\nu_1\rangle \\ |\nu_2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\nu_e\rangle \\ |\nu_\mu\rangle \end{pmatrix}$$

其中称 $\theta$ 为**混合角**，刻画**味混合**程度；显然 $\theta = 0$ 表征无味混合。

- 定态的时间演化由Schroedinger方程确定：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\nu_i\rangle = E_i |\nu_i\rangle \Rightarrow |\nu_i(t)\rangle = e^{-iE_i t/\hbar} |\nu_i(0)\rangle \quad (i = 1, 2)$$

代入味混合方程可得到味本征态 $|\nu_e\rangle$ 的时间演化  $\Rightarrow$

# 4, 味混合与中微子振荡

- 味本征态 $|\nu_e\rangle$ 的时间演化（以 $|\nu_{e,\mu}(0)\rangle$ 替代 $|\nu_{1,2}(0)\rangle$ ）：

$$\begin{aligned} |\nu_e(t)\rangle &= \cos\theta e^{-iE_1 t/\hbar} |\nu_1(0)\rangle + \sin\theta e^{-iE_2 t/\hbar} |\nu_2(0)\rangle \\ &= A_{ee} |\nu_e(0)\rangle + A_{e\mu} |\nu_\mu(0)\rangle \end{aligned}$$

其中的两个系数 ( $A_{ee}^* A_{ee} + A_{e\mu}^* A_{e\mu} = 1$ ) :

$$A_{ee} = \cos^2\theta e^{-iE_1 t/\hbar} + \sin^2\theta e^{-iE_2 t/\hbar}, \quad A_{e\mu} = -\sin\theta \cos\theta e^{-iE_1 t/\hbar} + \sin\theta \cos\theta e^{-iE_2 t/\hbar}$$

微观弱作用过程味道守恒，如： 一例：太阳核心  $p + p \rightarrow d + e^+ + \nu_e$

若 $t = 0$ 时处于 $|\nu_e\rangle$ 态，即： $|\nu_e(0)\rangle = 1|\nu_e\rangle$ ,  $|\nu_\mu(0)\rangle = 0$ , 则 $t$ 时刻处于 $|\nu_e\rangle$ 态的几率并非恒为1，而是：

$$P(\nu_e \rightarrow \nu_e; t) = |\langle \nu_e | \nu_e(t) \rangle|^2 = A_{ee}(t)^* A_{ee}(t)$$

- 结论：**即使 $t = 0$ 时只处于 $|\nu_e\rangle$ 态，但任意 $t$ 不见得还只处于 $|\nu_e\rangle$ 态！

# 4, 味混合与中微子振荡

- 计算 $t$ 时刻处于 $|\nu_e\rangle$ 态的几率：

$$P(\nu_e \rightarrow \nu_e; t) = |\langle \nu_e | \nu_e(t) \rangle|^2 = A_{ee}(t)^* A_{ee}(t)$$

$$= 1 - \frac{1}{2} \sin^2(2\theta) \{1 - \cos[(E_1 - E_2)t/\hbar]\}$$

$$\sin 2\theta = 2 \sin \theta \cos \theta$$

“振荡”

$t$ 时刻处于 $|\nu_\mu\rangle$ 态的几率（总几率为零）：

$$P(\nu_e \rightarrow \nu_\mu; t) = \frac{1}{2} \sin^2(2\theta) \{1 - \cos[(E_1 - E_2)t/\hbar]\}$$

鉴于中微子动能远大于静能， $cp \gg m_i c^2$ , ( $i = 1, 2$ )

$$E_i = cp \sqrt{1 + \left(\frac{m_i c}{p}\right)^2} = cp \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{m_i c}{p}\right)^2 + \dots\right) \sim cp + \frac{m_i^2 c^3}{2p} \quad \rightarrow \quad E_1 - E_2 = \frac{\Delta m^2 c^3}{2p}$$

$$\Delta m^2 \equiv m_1^2 - m_2^2$$

$$1 - \cos \alpha = 2 \sin^2(\alpha/2)$$

$$\therefore P(\nu_e \rightarrow \nu_\mu; t) = \frac{1}{2} \sin^2(2\theta) \left(1 - \cos \frac{\Delta m^2 c^2 L}{2p\hbar}\right) = \sin^2(2\theta) \sin^2 \frac{\Delta m^2 c^2 L}{4p\hbar}$$

$$L \approx ct$$

# 总 结

- 1, 离散能级系统Schroedinger方程
- 2, 氮分子等价双态
- 3, 氢分子离子等价双态
- 4, 味混合与中微子振荡

# 作业

- 1, 氮分子翻转分裂的裂距在厘米波段, 而苯分子的共振能在紫外波段, 其间差几个数量级? 这样大的差别是什么原因造成的?
- 2, 用正规求本征值的办法求 1.2 节中等价双态系统哈密顿矩阵

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

的本征值和本征矢, 以及使之对角化的幺正变换。

- 3, 能量  $10\text{MeV}$  的电子中微子在真空中显著地“震荡”为  $\mu$  中微子的空间距离。 (设:  $\Delta m^2=1\text{eV}^2$ )

# 《原子物理学》

## 旧量子论简介

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

# 人类认识物质基本结构的 历程中最关键的一步：

# 原子

52s

0.26

PORTUGAL

背景邮票：2000年葡萄牙发行的廿世纪物理学回顾

“原子”概念如何形成？又如何  
发展（如“亚原子”结构）？

假如由于某种大灾难，所有的科学知识都丢失了，只有一句话传给下一代，那么怎样才能用最少的词汇来表达最多的信息呢？我相信这句话是原子的假设：所有物体都是用原子构成的——这些原子是一些小小的粒子，它们一直不停地运动着。当彼此略微离开时互相吸引，当彼此过于挤紧时又相互排斥。只要稍微想一下，你就会发现，在这一句话中包含了大量的有关世界的信息。

——《费曼物理学讲义》

不可分  
ατομος

# 1, 哲学家的原子

古代哲学家关于“**物质结构**”的设想I

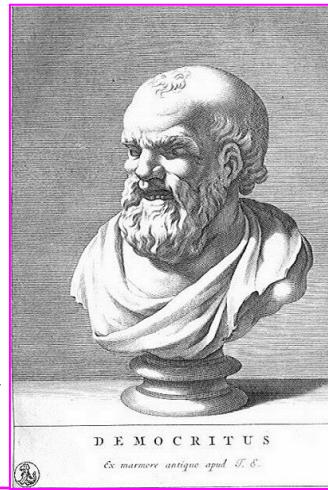
• **德谟克利特** (Demokritos, 约BC460至BC370) 原子论  
古希腊哲学家。认为万物本原为“**原子**”和“**虚空**”。  
自然界存在数量无限、形式多样的原子。原子种类、数量、排列  
方式上的不同造就不同的物体。原子的各种运动形成万物变化。

• **道耳顿** (John Dalton, 1766-1844) 原子论

英国化学家（起先为气象学者）。1803年：

- (a) 所有物质由不再可分的原子组成；
- (b) 某一原子具有特定质量和其它性质；
- (c) 原子三种存在形式：

简单元素，复合分子，复杂分子。



DEMOCRITUS  
*& marmore antiquo apud J. S.*



化学反应过程中  
的质量比例关系

# 1, 哲学家的原子

古代哲学家关于“**物质结构**”的设想II

•庄子（约BC369至BC286）

战国时代宋国（今安徽省蒙城县）人。中国古代著名思想家、哲学家、文学家，是**道家**学派的代表人物。

一尺之捶，  
日取其半，  
万世不竭。

《庄子 • 天下篇》

物质可分

弦？



# 2, 物理学家的原子：光谱

最简单的原子——**氢原子**

- 识别原子的“指纹”：光谱

$$1\text{\AA} = 10^{-8} \text{ cm}$$

1885年：

Ångström已经  
观测到的氢原  
子14条光谱线



6562.1 Å

红

4860.7 Å

蓝

4101.2 Å

紫

- 1885年：瑞士中学教师**Balmer**分析这些谱线后，得到经验公式：  
(1825.5.1-1898)

$$\lambda = B \frac{n^2}{n^2 - 4}, \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

经验常数： $B = 3645.6 \text{\AA}$

或：

$$\text{波数 } \tilde{\nu} \equiv \frac{1}{\lambda} = \tilde{R}_{\text{H}} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Rydberg常数： $\tilde{R}_{\text{H}} \equiv 4/B$

# 2, 物理学家的原子：光谱

## • “Balmer” 们：

MAY 15, 1930

PHYSICAL REVIEW

VOLUME 35

### THE MOST PROBABLE 1930 VALUES OF THE ELECTRON AND RELATED CONSTANTS

BY ROBERT A. MILLIKAN

NORMAN BRIDGE LABORATORY OF PHYSICS, CALIFORNIA INSTITUTE, PASADENA

(Received April 8, 1930)

#### ABSTRACT

The conclusions are reached that: (1) No such empirical oil-drop formula as that suggested by H. A. Wilson can be valid, (2) It is highly improbable that the spectroscopic fine structure constant can be a whole number—either 136 or 137, (3) The most probable 1930 values of  $e$ ,  $N$ , and  $h$ , are the same as in 1917, corrections due merely to new determinations of the velocity of light and the absolute value of the ohm being alone needed. These values so corrected are

$$e = (4.770 \pm 0.005) \times 10^{-10} \quad h = (6.547 \pm 0.011) \times 10^{-27} \quad N = (6.064 \pm 0.01) \times 10^{23}$$

(4) If Lewis and Adams's theoretical equation is considered valid the probable errors are much smaller than the foregoing estimates.

#### III. THEORETICAL RELATIONSHIPS

What, then is to be said of the demands that the theorists have made upon the relations of these constants? This is a very important and a very interesting question. There are two such relations to be considered, one brought forward by Lewis and Adams<sup>12</sup> in 1914 and one by Eddington<sup>13</sup> in 1929. With respect to the first, I have nothing to add to Birge's comments, except to emphasize them. Lewis and Adams, from their theory of ultimate rational units arrive at the following relation between  $h$ ,  $c$ , and  $e$ :

$$\frac{hc}{2\pi c^2} = 8\pi \left(\frac{8\pi^5}{15}\right)^{1/3}. \quad (6)$$

It will be seen that the right side of this equation involves no physical measurements whatever. It has the value 137.348. The left side, which is Eddington's spectroscopic fine-structure constant  $1/\alpha$ , contains three physically measured quantities, and if the values  $e = 4.770 \times 10^{-10}$ ,  $h = 6.547 \times 10^{-27}$ , and  $c = 2.99796 \times 10^{10}$  be inserted, it yields 137.29 in exceedingly close agreement with the right side.

### A Numerical Coincidence

IN “The Expanding Universe” Sir Arthur Eddington refers to the *fine-structure constant*, which appears to be a fundamental in the modern physics of which he treats, as a pure number the value of which is close to, if not exactly, 137, and in a later passage he writes: “nature’s curious choice of certain numbers such as 137 in her scheme.”

There is no indication that Sir Arthur includes the following facts in his thesis but it is undoubtedly the case that the number 137 is remarkable because it is the logarithm of itself, or, to be more precise, 13713 is the mantissa to five decimal places of the logarithm of 13713. Also the reciprocal of 13713 used as circular measure is the value of the usual symbol for the rate of rotation of the earth, it being the angle through which the earth turns in one second of mean solar time.

These things are mentioned as an interesting coincidence in an excellent but perhaps little known book, “A Few Chapters in Astronomy”, by Claudioius Kennedy, first published in 1894. The resemblance of this salient number to one in a very different connexion may well be taken as an example of Nature’s whimsicality.

H. P. HOLLIS.

65, Tranquil Vale,  
Blackheath, S.E.3.  
March 13.

Nature, 1933, April 15, p.550

# 2, 物理学家的原子：光谱 氢原子的谱线系

- 除可见光波段Balmer线系外，在紫外、红外还发现了其它4线系；波数均可统一地表达成：

$$\tilde{\nu} = \tilde{R}_H \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = m+1, m+2, m+3, \dots$$

Lyman线系： $m = 1, \quad n = 2, 3, 4, \dots$  ( $L_\alpha, L_\beta, L_\gamma, L_\delta, \dots$ )

Balmer线系： $m = 2, \quad n = 3, 4, 5, \dots$  ( $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta, \dots$ )

Paschen线系： $m = 3, \quad n = 4, 5, 6, \dots$

Brackett线系： $m = 4, \quad n = 5, 6, 7, \dots$

Pfund线系： $m = 5, \quad n = 6, 7, 8, \dots$

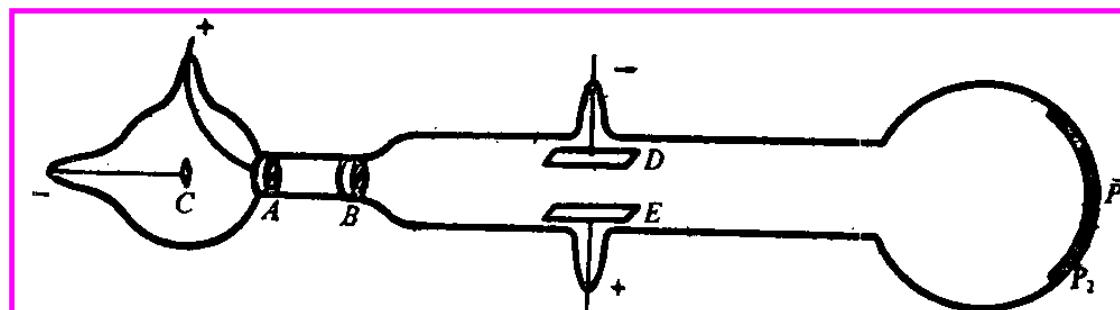
- 定义光谱项： $T(x) \equiv \frac{\tilde{R}_H}{x^2}, \quad \tilde{\nu} = T(m) - T(n)$

为什么最简单的氢原子具有如此“规律”的光谱行为？

# 3, Thomson和Rutherford原子模型

电子的发现：原子其实是可分的！

- 1897年J. J. Thomson利用放电管测量电子荷质比 $e/m$ :



根据加磁场后阴极射线的偏转得到电子荷质比。

之后两年内利用饱和蒸汽测定了雾滴中电子电荷值。

- 其实Thomson并非得到 $e/m$ 实验现象的第一人:

1890年: Schuster测出阴极射线 $e/m$ , 但不敢相信其如此小的质量

1897年: Kaufman实验更精确, 但不愿承认“阴极射线是电子”

- 相关基本常数:

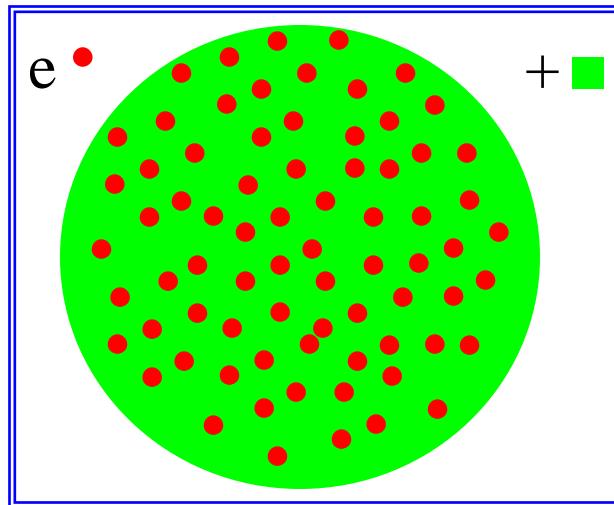
$$e = 4.8 \times 10^{-10} \text{ esu} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}, \quad m_e = 9.109 \times 10^{-28} \text{ g} = 0.511 \text{ MeV}/c^2$$

$$m_p = 1.673 \times 10^{-24} \text{ g} = 938.272 \text{ MeV}/c^2 = 1.00728 \text{ u}, \quad 1 \text{ u} = m(^{12}\text{C原子})/12$$

# 3, Thomson和Rutherford原子模型

## Thomson原子模型

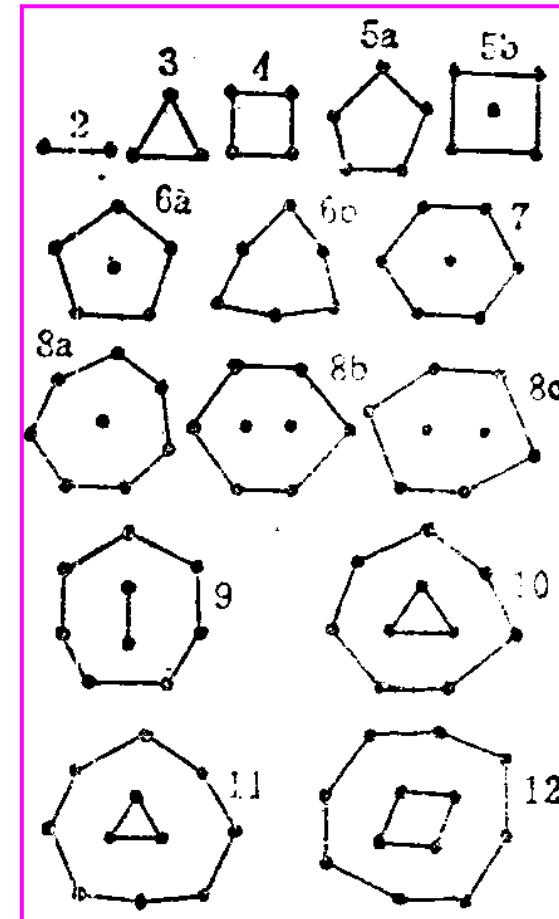
- 原子中的正、负电荷是如何分布的呢？ Thomson尝试：



带负电荷的电子镶嵌于带正电的背景介质

- 正电介质中的电子处于平衡态，平衡态附近的振荡产生特定频率的电磁辐射。

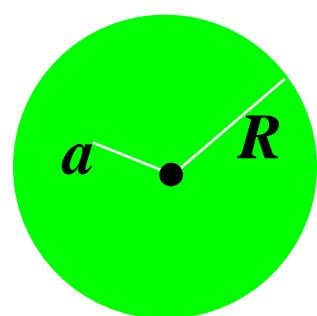
Thomson的研究小组还化了大量精力，从实验等方面找出电子在原子中平衡位形。



# 3, Thomson和Rutherford原子模型

## Thomson原子模型的失败：理论上

- 将Thomson原子模型应用于最简单的氢原子 ( $R \sim 1\text{\AA}$ )


$$\left\{ F = -\frac{\rho e}{3\epsilon_0} a, \quad \rho = \frac{e}{4\pi R^3 / 3}, \quad k \equiv \frac{F}{a} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \right\}$$
$$\xrightarrow{\hspace{1cm}} \left\{ \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \lambda = \frac{c}{\nu} \sim 1000\text{\AA} \right\}$$

### •问题：

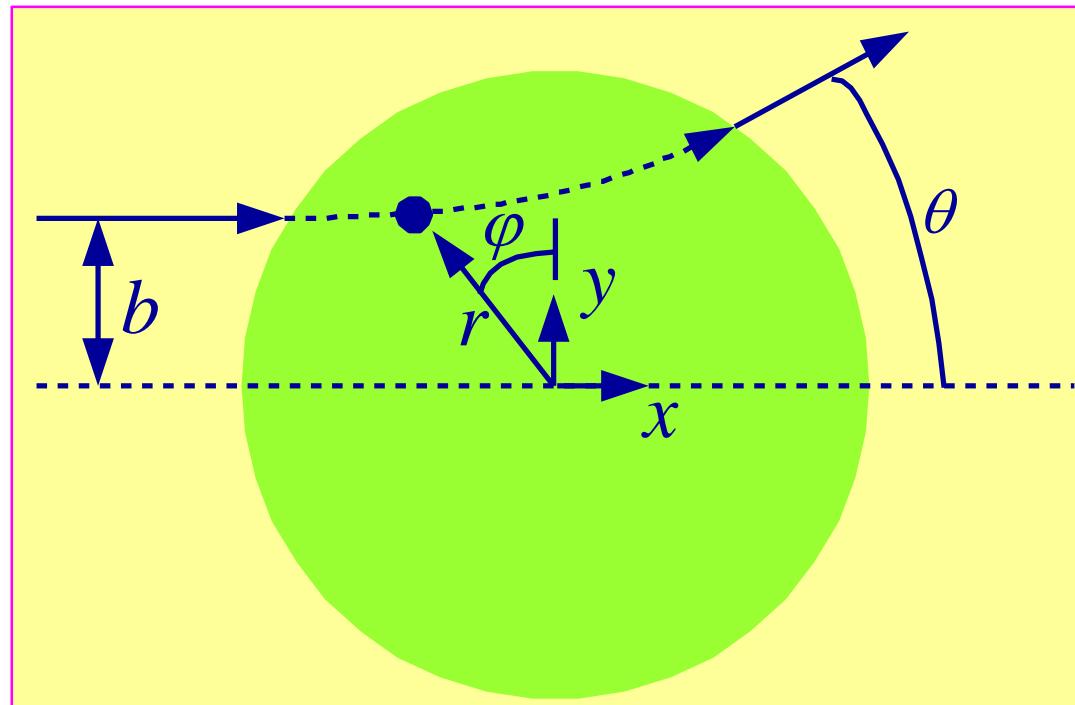
电磁辐射波长，理论 $\sim 1000\text{\AA}$ 与实验 $\sim 4000\text{\AA}$ 不匹配！

如何产生多频率的电磁辐射？

# 3, Thomson和Rutherford原子模型

## Thomson原子模型的失败：实验上

- 1903年: Lenard研究阴极射线被物质吸收, 发现“原子十分空虚”
- 1904年: 长冈半太郎提出原子“**行星模型**” (“太阳主导太阳系”)
- 1909年: Geiger和Marsden的 $\alpha$ 粒子(带+2e氦原子)轰击原子实验



理论上:

$$P(\theta > 90^\circ) \sim 10^{-3500}$$

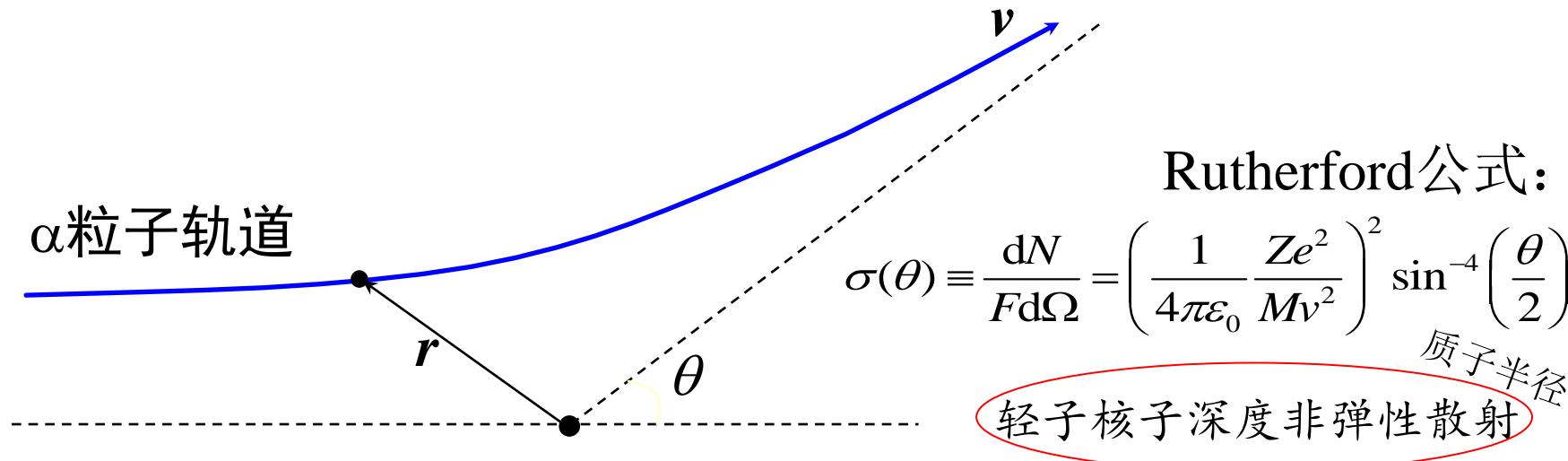
而GM**实验**测得:

$$P(\theta > 90^\circ) \sim 10^{-4}!!!$$

# 3, Thomson和Rutherford原子模型

## Rutherford原子模型：“有核模型”

- 1911年： Rutherford提出“正电荷集中于原子的中心”



- 微分截面  $\sigma$  的物理意义：一个靶核在单位入射粒子流照射下单位时间内散射至  $\Omega$  到  $\Omega + d\Omega$  内的粒子数。量纲  $[\sigma] = T^{-1}/(T^{-1} L^{-2}) = L^2$ 。
- 散射薄膜不遮挡  $\alpha$  粒子，则  $N$  个靶核的截面为  $N\sigma$ 。
- Rutherford 理论结果经受住实验检验

积分（总）截面

$$\Sigma = \int_{4\pi} \sigma(\theta) d\Omega$$

# 3, Thomson和Rutherford原子模型

如果原子真的那么“空” ...

从Thomson 1897 到 Bell 1967:  
“大英”名不虚传！

- 有可能将这些“空”间挤掉？——那时密度将奇高；无穷大？
- 怎么才能挤掉？——引力
- 哪里才会存在这种物质？——“天上”有！

对Rutherford原子模型的质疑：

天狼B (1862) → Rutherford (1911) → Fermi/Dirac (1926)  
→ Fowler (1926) → Chandrasekhar (1931) → Landau (1932) → Bell (1967)

- 根据经典电磁学，电子受核电磁作用而加速运动时辐射电磁波；损失能量的电子势必绕核公转半长轴减少，最终电子必然落向原子核——“原子塌缩”。原子为何不塌缩？
- 按照经典电磁学，电子加速运动辐射电磁波为连续谱（即辐射电磁波频率可以连续取值）；而实验观测到的氢原子光谱是分裂的。这又是为什么？

# 第4章 4, Bohr原子模型

“七巧板中的最后一块”：氢原子光谱经验公式

- 1913年：Bohr提出原子模型

**定态**：存在某些电子不辐射的圆轨道——**不塌缩**

**跃迁**：定态之间转变时吸收或辐射光子  $h\nu = |E_f - E_i|$

- “我一看到巴耳末公式，我对整个事情就豁然开朗了”

$$\tilde{\nu} = \tilde{R}_H \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \Rightarrow h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc\tilde{R}_H}{m^2} - \frac{hc\tilde{R}_H}{n^2}$$

这样能量自然就**量子化**了：  $E(n) = hc\tilde{R}_H/n^2$



Niels Bohr

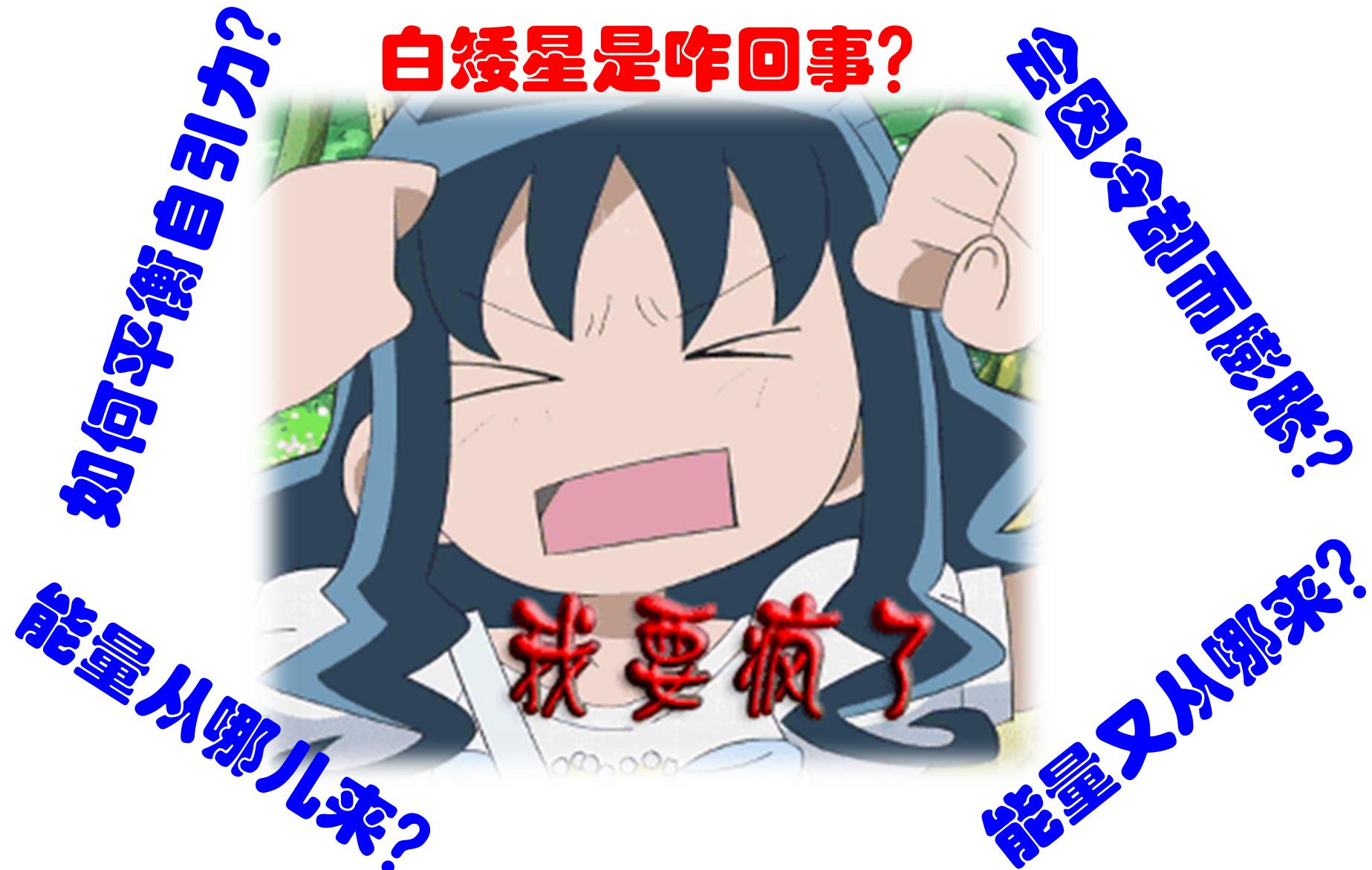
- 角动量量子化：**Bohr“三步曲”** 的最后一步

$$\left. \begin{aligned} L &= mvr = n\hbar \\ \frac{Ze^2}{r^2} &= m\frac{v^2}{r} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{aligned} r &= \frac{\hbar^2}{mZe^2} n^2 \equiv \frac{a_B}{Z} n^2 \\ E &= \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{r} \equiv -R_H \frac{Z^2}{n^2} \end{aligned} \right.$$

Rydberg常数：

$$R_H = \frac{me^4}{2\hbar^2} = hc\tilde{R}_H = 13.6 \text{ eV}$$

### 3, Thomson和Rutherford原子模型



# 4, Bohr原子模型

• **Bhor半径**  $a_B$ : 基态氢原子半径、原子典型尺度, 为0.52Å

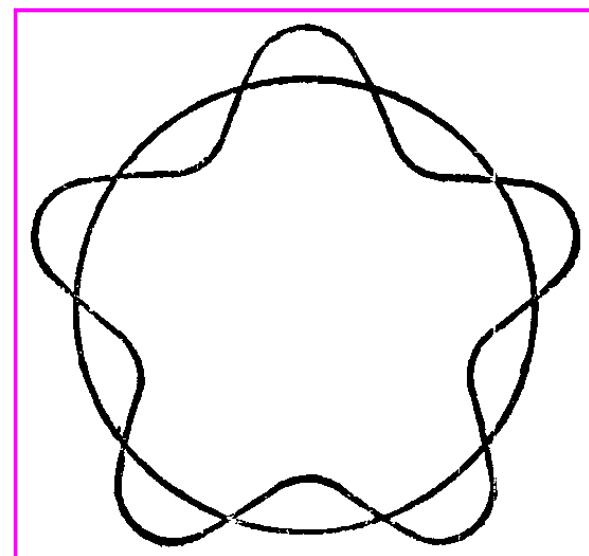
半定量估计**Bhor半径**  $a_B$  和**基态能量**  $E_1$ :

$$\left. \begin{array}{l} \text{零点能: } \sim \frac{p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} \\ \text{作用能: } \sim \frac{e^2}{a_B} \end{array} \right\} \xrightarrow{\substack{\text{电磁力束缚原子系统} \\ \text{作用能} \sim \text{零点能}}} \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} \sim \frac{e^2}{a_B} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} a_B \sim \frac{\hbar^2}{me^2} \\ E_1 \sim \frac{me^4}{\hbar^2} \end{array} \right.$$

• 用de Broglie波的概念理解Bohr的定态

$$\left. \begin{array}{l} \text{Bohr定态: } mvr = n\hbar \\ \text{电子波长: } \lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv} \end{array} \right\} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi r}{n}$$

定态轨道正好容纳整数个de Broglie波  
(1924年de Broglie提出物质波动机之一)



# 5, Bohr模型的改进

- 二体作用:

$$\text{折合质量 } \mu = \frac{Mm}{M+m} \rightarrow m \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} = -R_H \frac{\mu Z^2}{m n^2} = -R_H \frac{M}{M+m} \frac{Z^2}{n^2}$$

- Sommerfeld的椭圆轨道修正 (1916)

Arnold J. Sommerfeld (1868 — 1951)

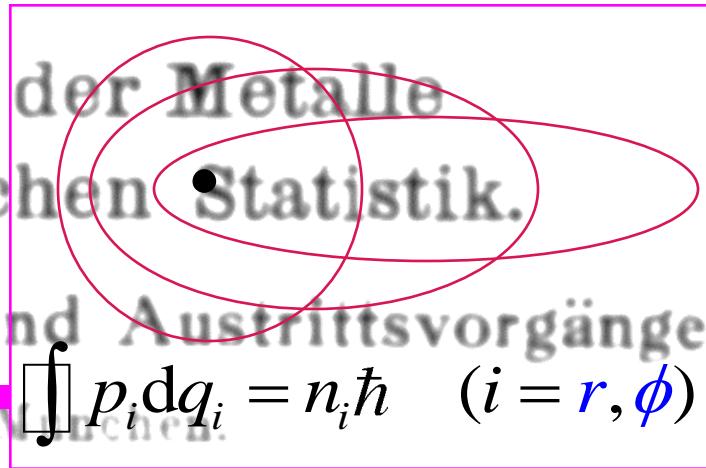
慕尼黑大学理论物理教授

I. Teil: Allgemeines, Stromungs- und Austrittsvorgänge.

$$E_n = \frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(n_r + n_\phi)^2}$$

越难就越有价值?

Sommerfeld in München.



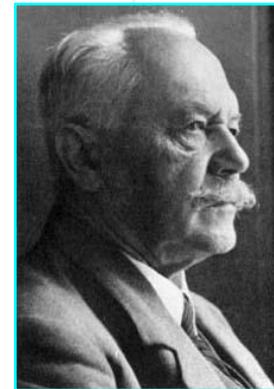
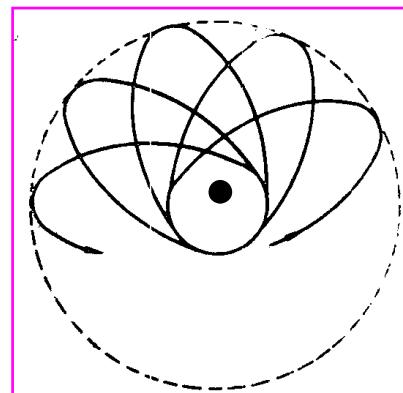
- 电子运动的相对论修正: 进动

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}$$

经过Sommerfeld  
繁复的数学运算

$$E = \frac{m_0 e^4}{2\hbar^2} \frac{Z^2}{(n_r + n_\phi)^2} \left[ 1 + \left( \frac{Z\alpha}{n_r + n_\phi} \right)^2 \left( \frac{n_r + n_\phi}{n_\phi} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

$$\alpha = \frac{1}{137}$$



# 总 结

- 1, 哲学家的原子
- 2, 物理学家的原子：光谱
- 3, Thomson和Rutherford原子模型
- 4, Bohr原子模型
- 5, Bohr模型的改进

# 作 业

- 1,** 试论证：氢原子中在第一玻尔轨道上运动的电子的线速度为 $v = \alpha c$ , 其中 $\alpha = e^2/(\hbar c)$  (静电单位制) = 1/137 (精细结构常数)。这种运动是相对论性的还是非相对论性的?
- 2,** 由正电子代替氢原子中的质子而形成的“原子”称为电子偶素 (positronium)。求 $n=5$  时的圆玻尔轨道半径和电离能。
- 3,** 1932年尤雷(H.C.Urey)在实验中发现，在氢的 $H_\alpha$ 线 ( $\lambda=656.279\text{ nm}$ )旁还有一条 $\lambda=656.100\text{ nm}$ 的谱线，两者的波长只差0.179nm. 他认为这属于氢的一种同位素。试计算此同位素与氢的原子量之比。
- 4,** 一个原子存在两种状态：质量为 $M$ 的基态和质量为 $M+\Delta$ 的激发态。若原子初始处于静止的基态，问它吸收什么频率的光子才能够跃迁至激发态？

# 《原子物理学》

## 氢原子与类氢离子/周期表

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

# 最简单的原子：

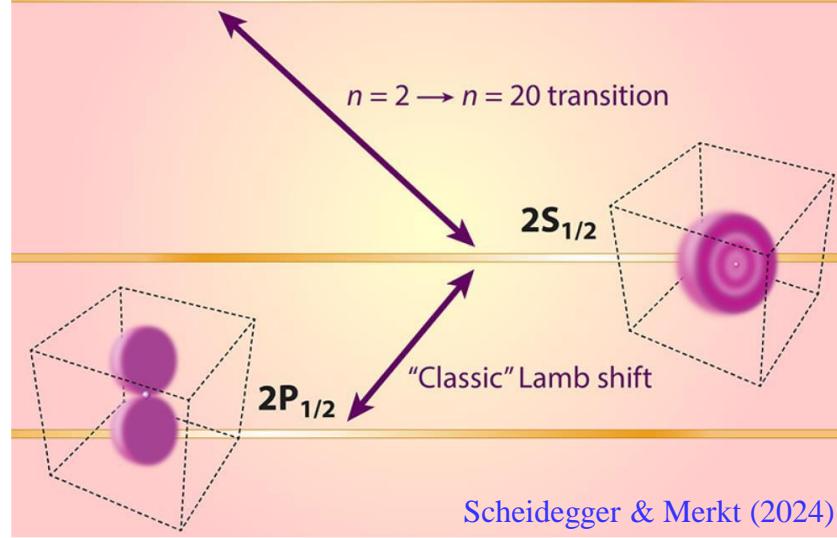
## 氢原子 /

## 类氢离子

$$l \sim \hbar c / (\alpha \cdot mc^2) \sim 1 / (\alpha m)$$

测量氢原子高激发态能级跃迁度量质子大小

Rydberg state ( $n = 20$ )



Scheidegger & Merkt (2024)

- 如何描述氢原子的量子态？
- 一般原子中的电子又是如何分布（排布）的？

一定程度上忽略电子之间的电磁作用

# 1, 刻画氢原子的量子数

Bohr原子模型：

$$E_n = -\frac{13.6 \text{eV}}{\mu m n^2} \frac{\mu Z^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

↑  
Rydberg 常数

- 电子处于具有这些特定能量的轨道上运动
- 真的存在这些轨道吗？

Bohr模型：  $n$



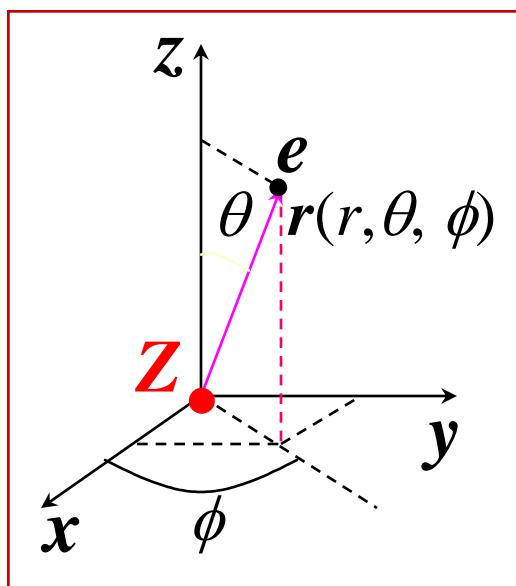
量子力学：  $n, l, m, (s/m_s)$

氢原子问题的量子力学解！

# 1, 刻画氢原子的量子数

量子力学求解氢原子问题

- Coulomb场中定态Schroedinger方程（外部波函数，忽略自旋）：



$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}$$

在球坐标系中：

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

注意到  $\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$

于是得：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}$$

↑      ↑      ↑  
径向动能    角向动能    势能

其中定义  $\hat{p}_r^2 \equiv -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$

$$[\hat{H}, \hat{l}^2] = 0$$
$$[\hat{H}, \hat{l}_z] = 0$$

具有共同本征态  
 $\hat{H}, \hat{l}^2, \hat{l}_z$

# 1, 刻画氢原子的量子数

- 用分离变量法解Schroedinger方程

令:  $\psi(\mathbf{r}) = R(r) \times \Theta(\theta) \times \Phi(\phi)$ , 带入求解...

- 求解结果: 本征波函数 (态)

角向:  $\Theta(\theta)\Phi(\phi) = Y_l^m(\theta, \phi) \rightarrow |lm\rangle$

径向:  $R_{nl}(r) = N_{nl} \exp\left(-\frac{Z}{na_B} r\right) \left(\frac{2Z}{na_B} r\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Z}{na_B} r\right)$

其中归一化系数:  $N_{nl} = -\left\{\left(\frac{2Z}{na_B}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2}$

Laguerre  
多项式

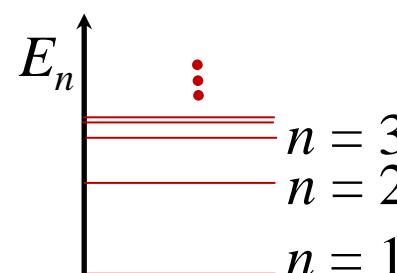
$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

利用Heisenberg  
关系也可估计  
 $l \sim 1/(\alpha m)$

- 求解结果: 能量本征值

$$E_n = -R_H \frac{Z^2}{n^2}$$

与Bohr模型一致!



# 1, 刻画氢原子的量子数

- 为保证波函数的物理意义，量子数 $\{n, l, m\}$ 必须按如下方式取值

主量子数:  $n = 1, 2, 3, \dots$

角量子数:  $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$   
“圆周运动”

磁量子数:  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$

经典两体M-m力学:

$$\text{平方反比律力 } E = -\frac{GMm}{2a}$$

半长轴 $a$ 与角动量无关！

- 若干量子态具有同样的能量称为简并(退化)；态数目称为简并度

能量 $E_n$ 态的简并度:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \frac{1+[2(n-1)+1]}{2} \times n = n^2$$

考虑自旋:  $2n^2$

- $\psi(r)$ 即 $H$ 、 $l^2$ 、 $l_z$ 的共同本征态

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$



$$|nlm\rangle$$

$$\begin{cases} \hat{H} |nlm\rangle = E_n |nlm\rangle \\ \hat{l}^2 |nlm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |nlm\rangle \\ \hat{l}_z |nlm\rangle = \hbar m |nlm\rangle \end{cases}$$

# 2, 波函数的性质

电子于外部空间中的几率密度

- 几率密度  $\rho(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) = R(r)^* R(r) \times \Theta(\theta)^* \Theta(\theta) \times \Phi(\phi)^* \Phi(\phi)$   
径向                  角向

即：  $\rho(\mathbf{r})$  为径向几率密度与角向几率密度之积！

注意到：  $\Theta(\theta)\Phi(\phi) = Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} = \Theta(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$

故有  $\rho(\mathbf{r}) = R(r)^* R(r) \times \Theta(\theta)^* \Theta(\theta)$ ； 即几率分布具有轴对称性。

- 依角量子数  $l$  给波函数命名：

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12 \dots$$

“小名”      s p d f g h i j k l m n o p q

# 2, 波函数的性质

“宇称” 的概念与角向波函数

- 宇称操作  $\hat{P}$

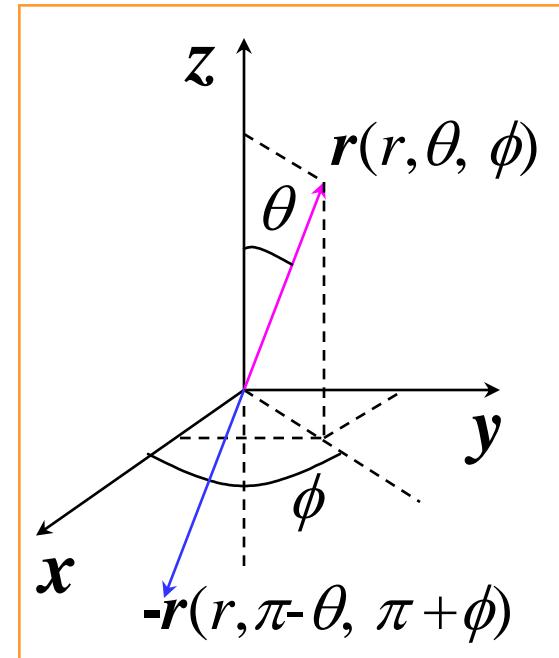
$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$$

即  $\hat{P}\psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \pi - \theta, \pi + \phi)$

可见：波函数的宇称性质只与角向波函数相关，与径向波函数无关。

因  $\hat{P}[\hat{P}\psi(\vec{r})] = \psi(\vec{r})$ ，故存在两种可能性：

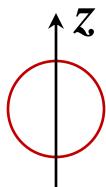
$$\begin{cases} \hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) & P = 1: \text{称 } \psi(\vec{r}) \text{ 具有正宇称} \\ \hat{P}\psi(\vec{r}) = -\psi(\vec{r}) & P = -1: \text{称 } \psi(\vec{r}) \text{ 具有负宇称} \end{cases}$$



# 2, 波函数的性质

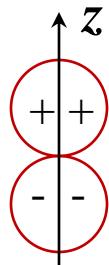
## • 角向波函数举例

s态:  $\Theta_{00}=2^{1/2}/2$



$$P = +1$$

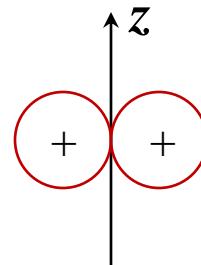
p态:  $\Theta_{10}=(6^{1/2}/2)\cos\theta$



$$P = -1$$

$$\Theta_{1\pm 1}=(2^{1/2}/2)\sin\theta$$

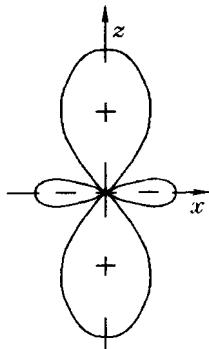
在球对称势场中运动电子的状态（波函数）为何非球对称?  
角动量z方向投影! m量子数  
(与经典力学对比)



$$P = -1$$

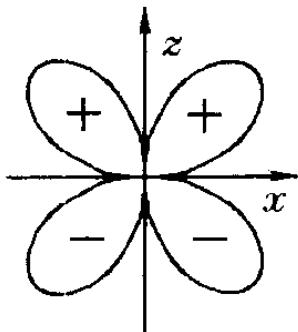
$$e^{im(\pi+\phi)} = e^{im\pi} e^{im\phi} = -e^{i\phi}$$

d态:  $\Theta_{20}=(10^{1/2}/4)(3\cos^2\theta-1)$



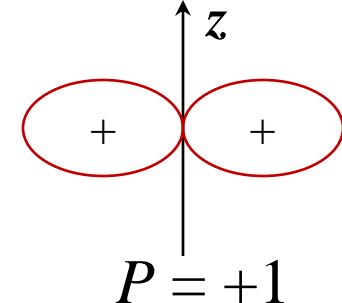
$$P = +1$$

$$\Theta_{2\pm 1}=(15^{1/2}/2)\sin\theta\cos\theta$$



$$P = +1$$

$$\Theta_{2\pm 2}=(15^{1/2}/4)\sin^2\theta$$



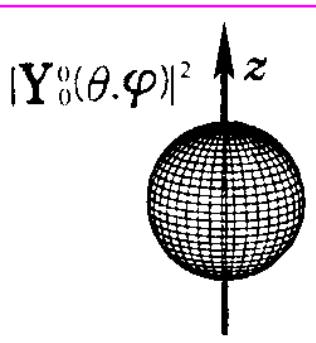
$$P = +1$$

• 一般性结论:  $|nlm\rangle$ 的宇称为 $(-1)^l$ ; 因  $Y_l^m(\pi-\theta, \pi+\phi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi)$

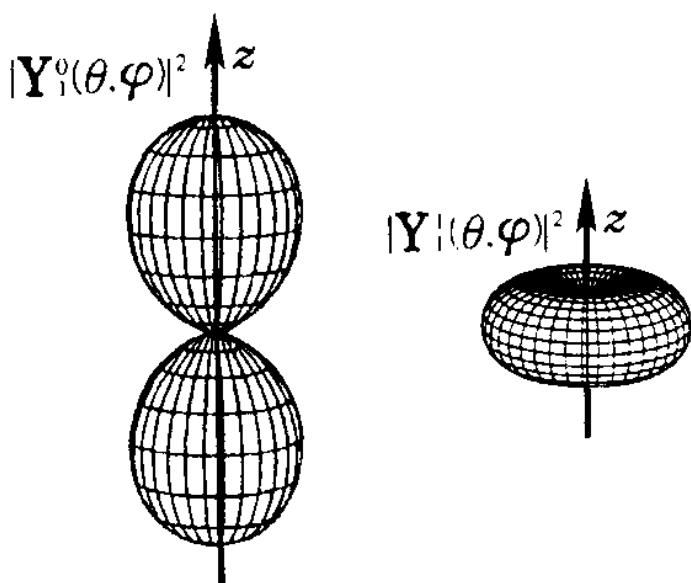
# 2, 波函数的性质

- 电子角向分布几率:  $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$

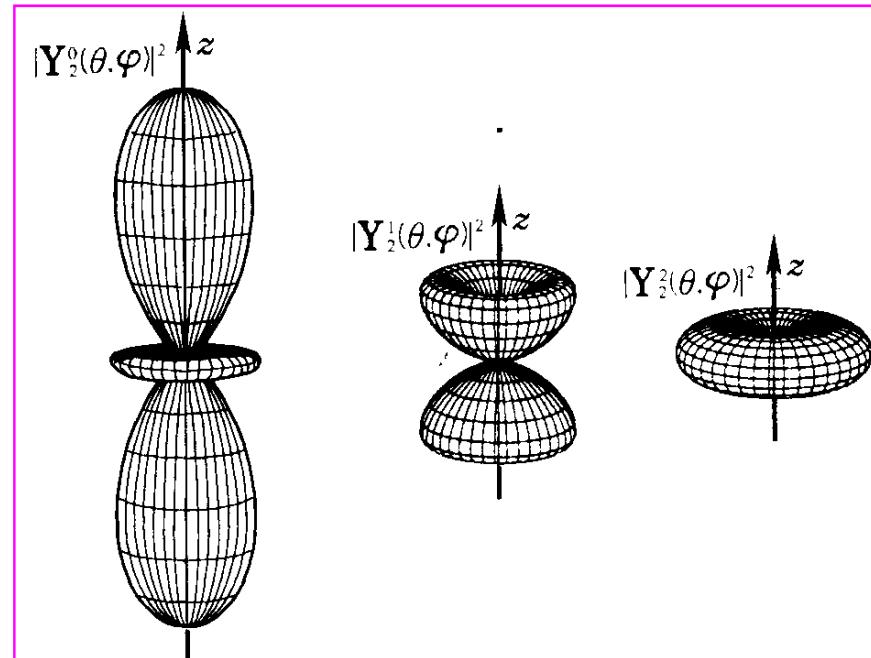
s 电子



p 电子



d 电子

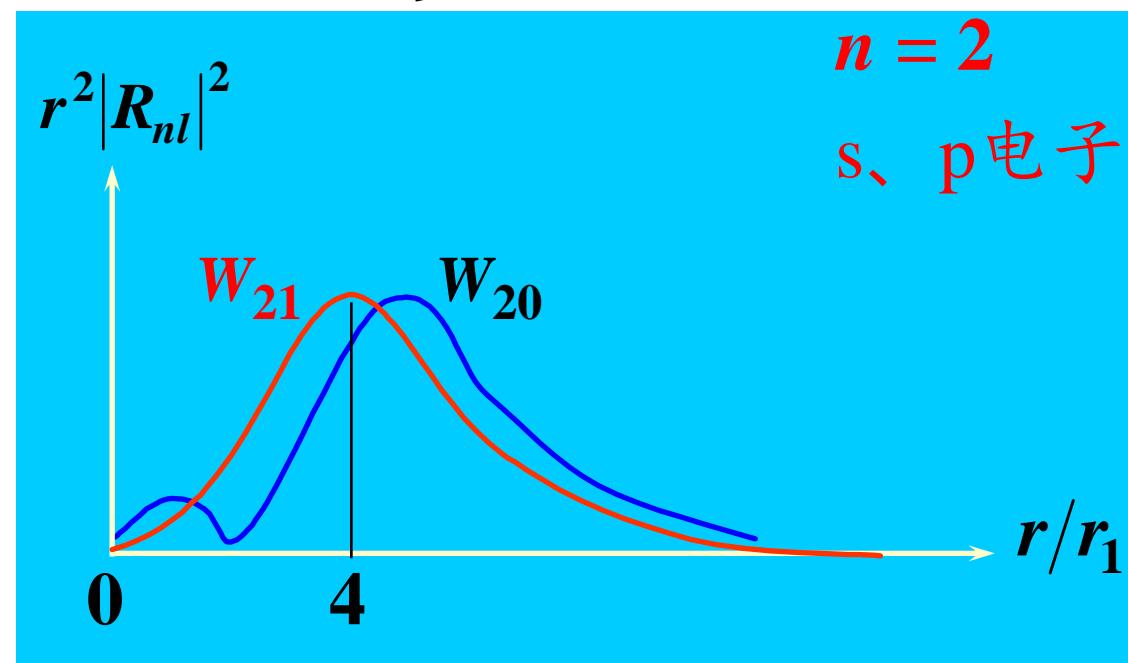
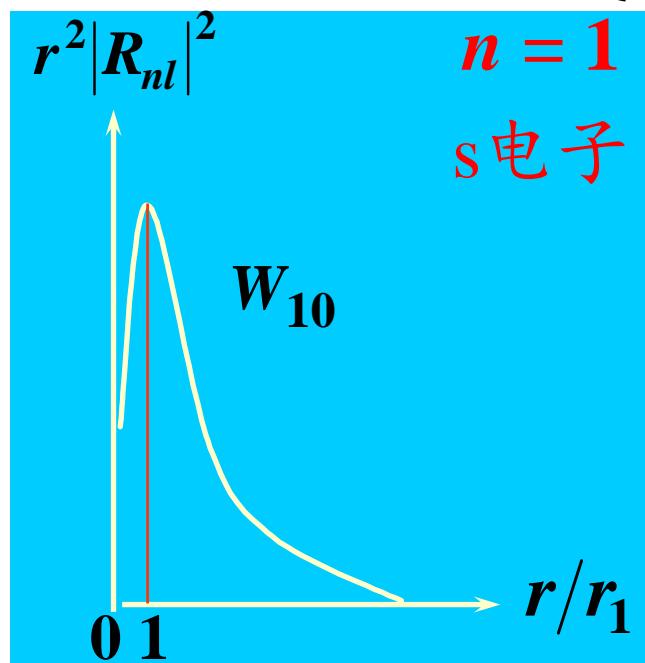


# 2, 波函数的性质

## 径向波函数

- 电子的径向概率分布:  $(r - r+dr)$  便于能量计算  
异于空间一点的概率密度)

$$\rho(r)dr = \left\{ \int_0^{4\pi} |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 d\Omega \right\} [R_{nl}(r)]^2 r^2 dr$$



注:  $r_1$ 为Bohr半径 (即横坐标以 $a_B$ 为单位)

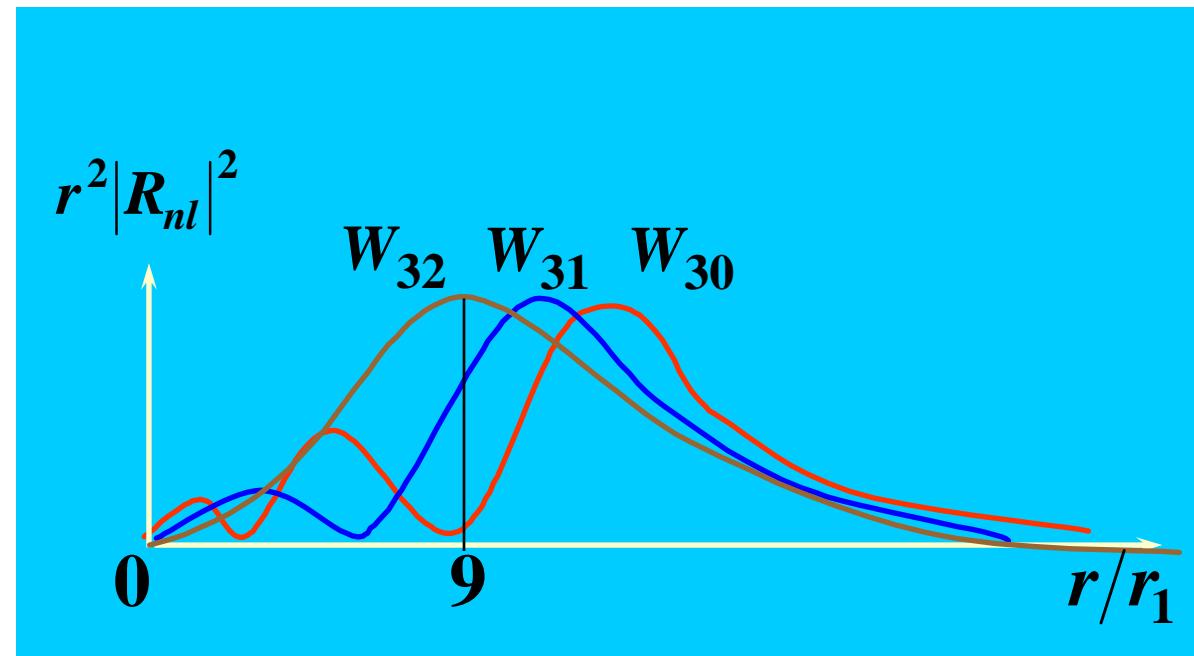
# 2, 波函数的性质

## 径向波函数

- 电子的径向概率分布:  $(r - r+dr)$

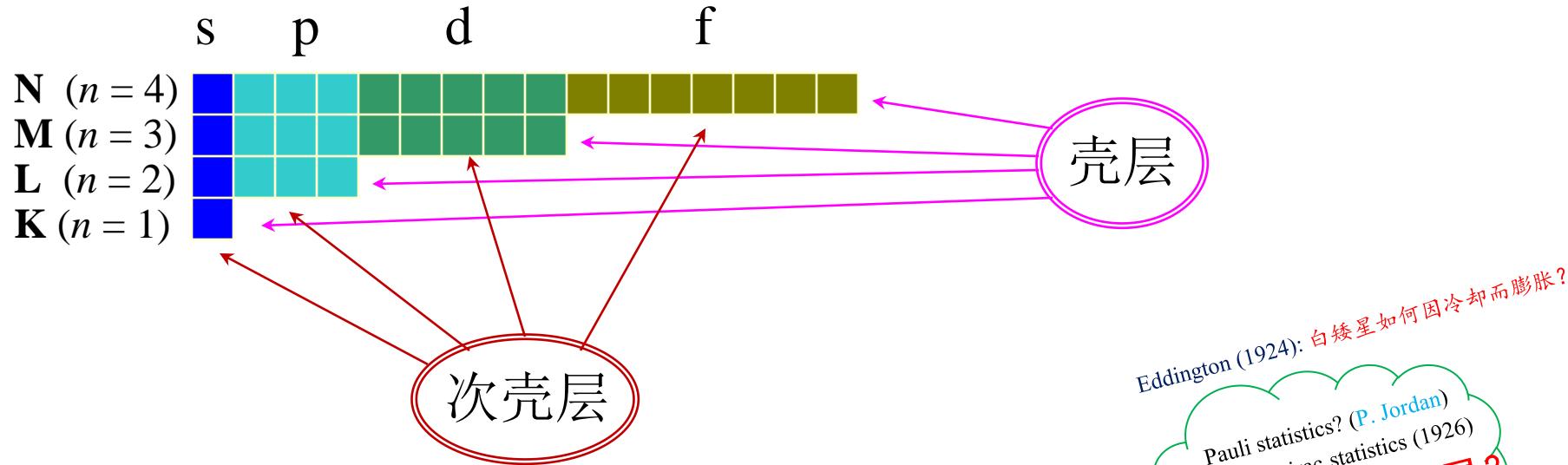
$$\rho(r)dr = \left\{ \int_0^{4\pi} |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 d\Omega \right\} \boxed{|R_{nl}(r)|^2 r^2 dr}$$

$n = 3$   
s、p、d电子



# 3, 电子排布与周期表

忽略电子间电磁作用的原子中电子排布



$$E_n = -R_H \frac{Z^2}{n^2}$$

电子排布原则：

- 1, Pauli原理 1925
- 2, 能量最低原理

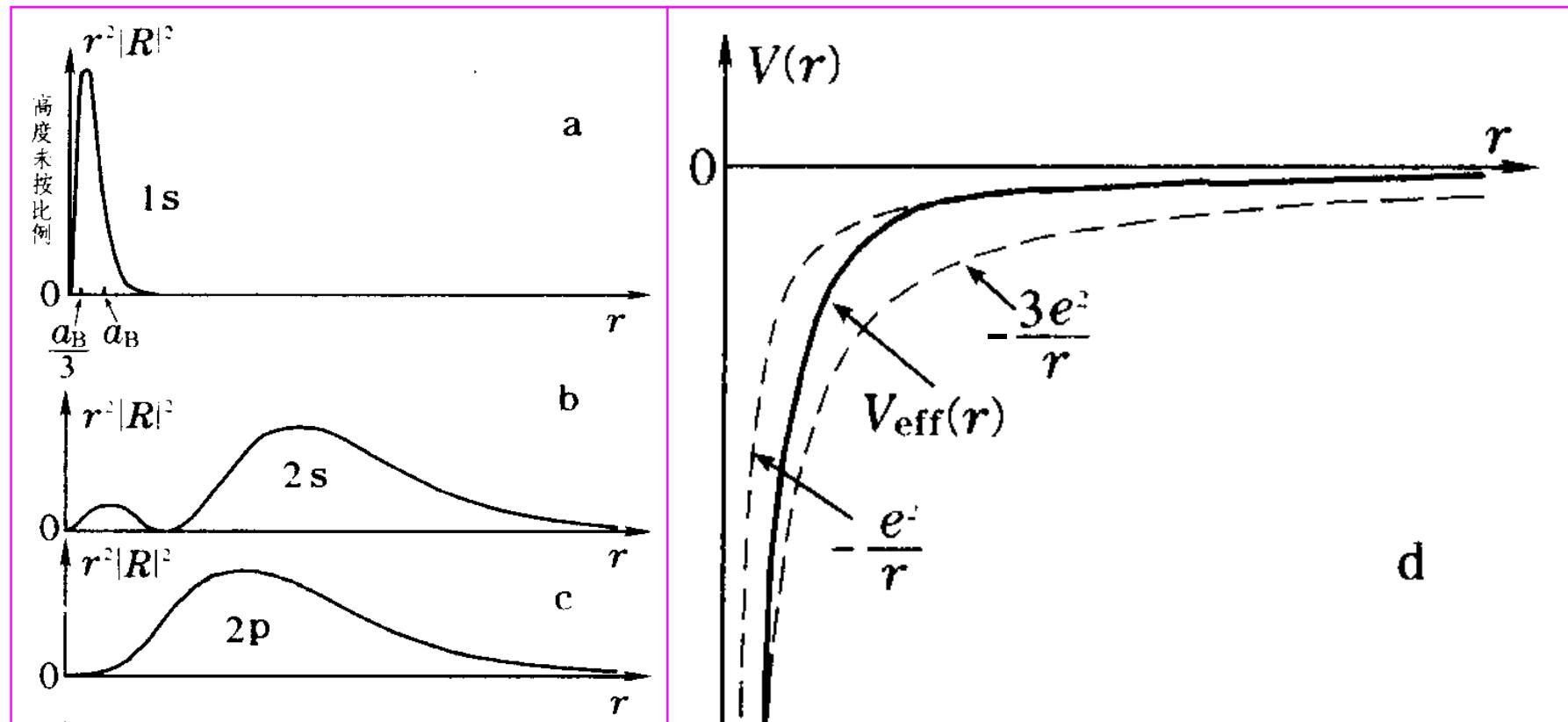
Pauli statistics? (P. Jordan)  
Fermi-Dirac statistics (1926)

为何不谈质子星?

# 3, 电子排布与周期表

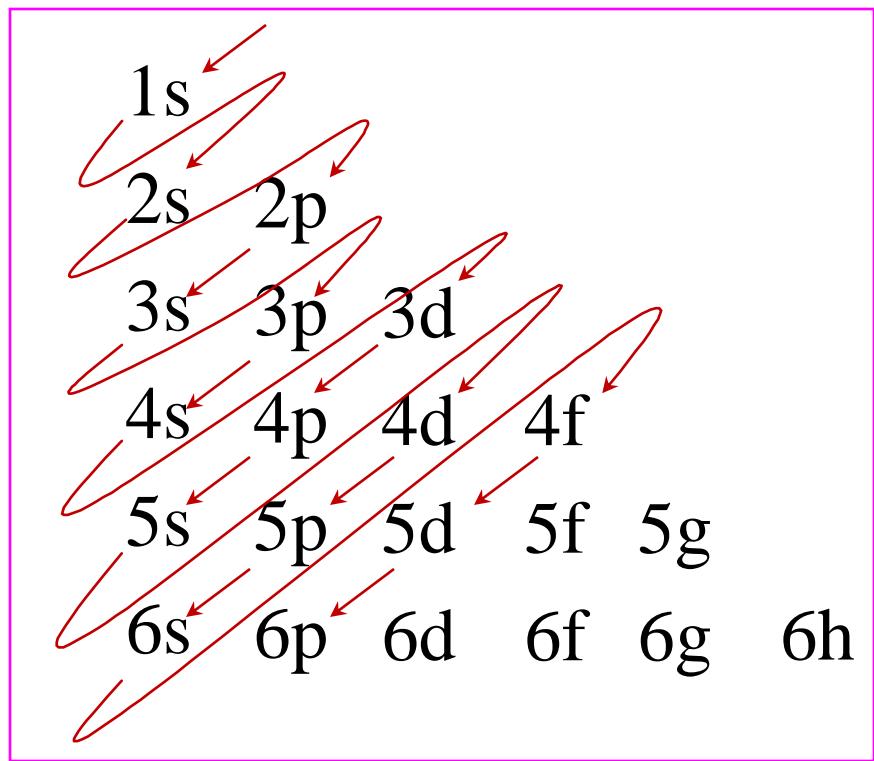
原子实屏蔽效应与*l*简并消除：能量的次壳层依赖

- 以Li( $Z = 3$ )原子为例



# 3, 电子排布与周期表

电子排布的经验规则：电子组态

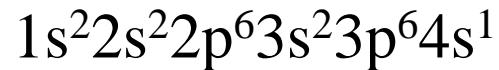


注：这只是经验规则，实际排布  
电子组态可能违背之。

例：<sub>18</sub>Ar原子电子组态



<sub>19</sub>K原子电子组态



<sub>21</sub>Sc电子组态：[Ar]3d<sup>1</sup>4s<sup>2</sup>

例外：<sub>24</sub>Cr原子电子组态？



<sub>24</sub>Cr: [Ar]3d<sup>5</sup>4s<sup>1</sup> 为什么？



# 3, 电子排布与周期表

## 元素周期表

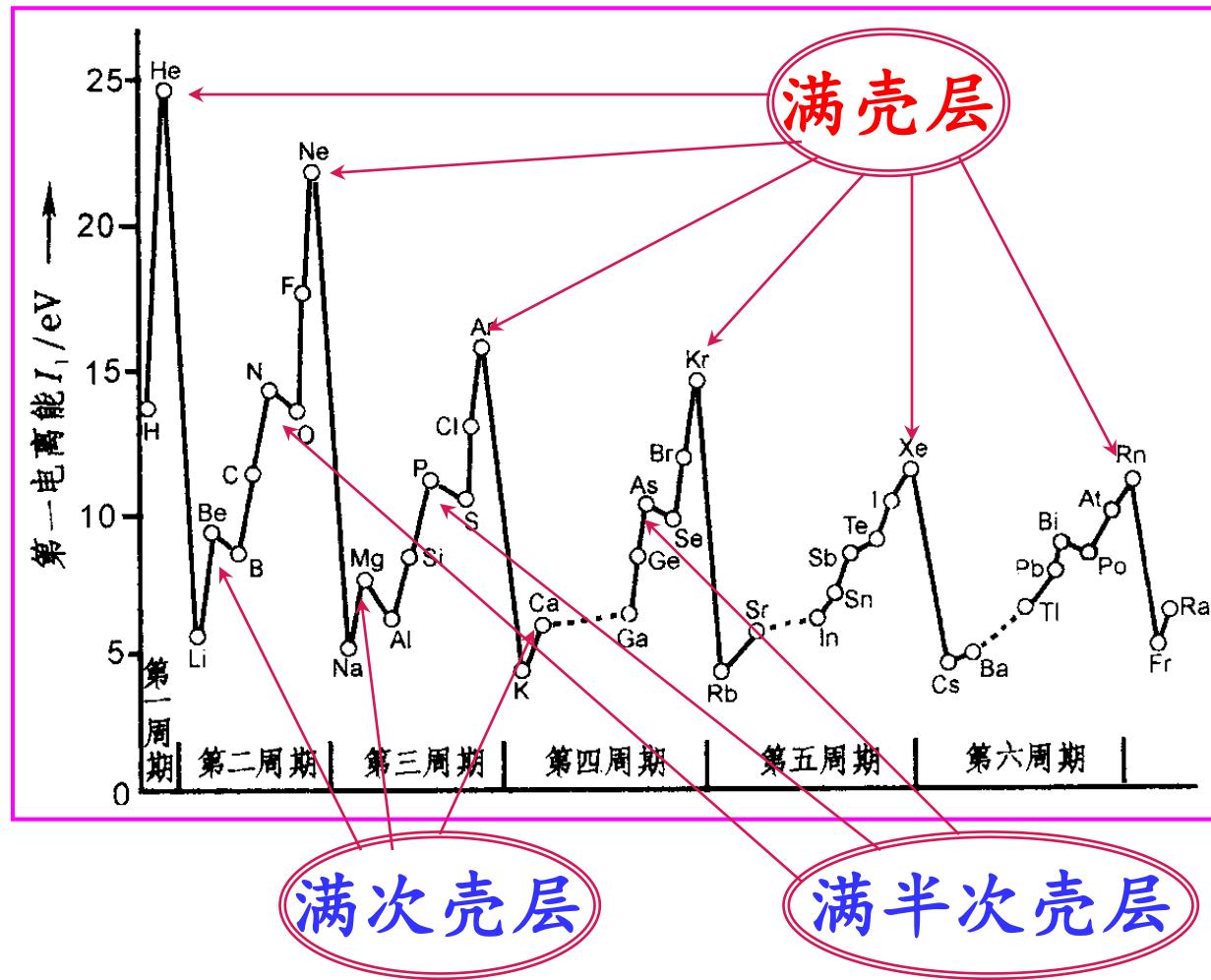
	IA	IIA		碱金属	碱土金属	过渡元素										O						
1	H	IIA		主族金属	非金属	稀有气体									VIIA	He						
2	Li	Be													III A	IVA	V A	VIA	VIIA	Ne		
3	Na	Mg	IIIB	IVB	V B	VIB	VIIB	VIIIB							IB	IIB	Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr				
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Au	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe				
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn				
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sq	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub										
镧系	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu							
锕系	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr							

金属性

非金属性：气体

# 3, 电子排布与周期表

## 第一电离能的周期性变化



# 总 结

- 1, 刻画氢原子的量子数
- 2, 波函数的性质
- 3, 电子排布与周期表

# 作 业

- 1,** 根据氢原子波函数的表达式证明：处于 $1s$  和  $2p$  态的氢原子中, 电子被发现的最大概率分别处在  $r = a_B$  和  $4a_B$  的球壳上。
- 2,** 计算氢原子基态库仑势能  $V(r) = -e^2/r$  的平均值。

# 《原子物理学》

## 氢原子与交换效应

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

# 比氢原子复杂一小点：

## 氦原子

“道生一……，三生万物。”

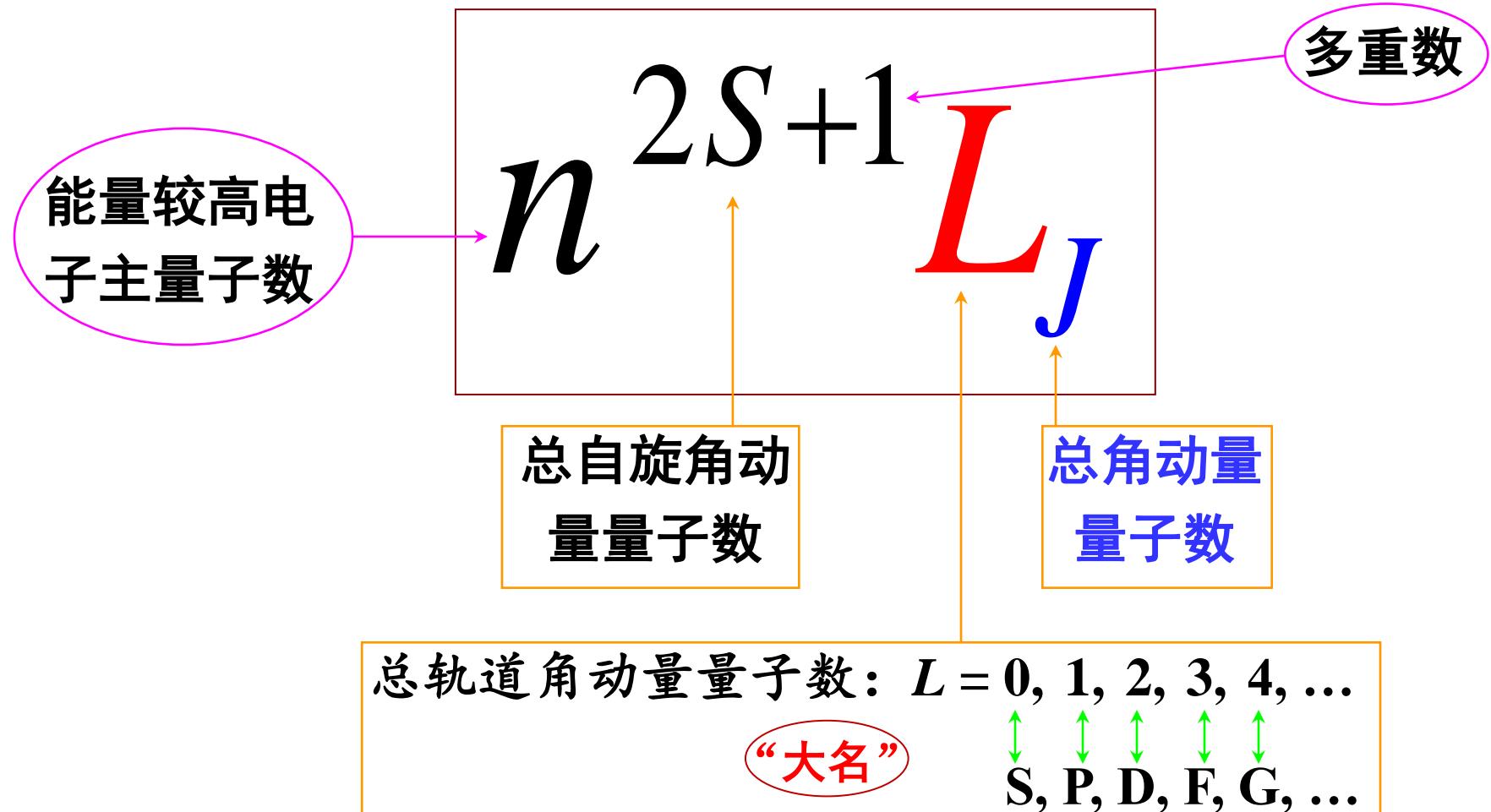
- 氦原子核外的两个电子处于什么状态？这些状态有什么性质？
- 同一亚/次壳层电子状态如何？

$^{24}\text{Cr}$ : [Ar]3d<sup>5</sup>4s<sup>1</sup> 为什么？

$\{\gamma: q = 0$ , 交换对称;  
 $e: q = e$ , 交换反称!

# 描述原子状态的符号

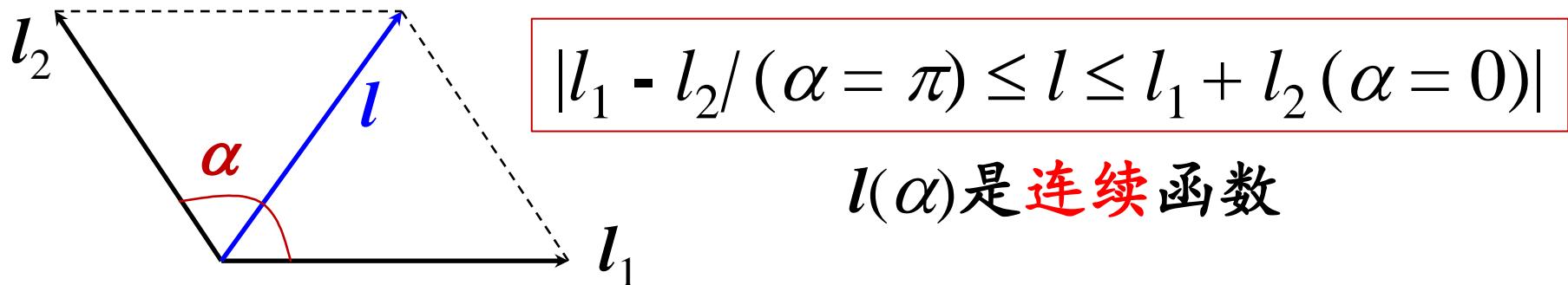
原子态（光谱项）：依据角动量来刻画原子的状态



# 复习：角动量合成的法则

- 经典力学中角动量合成：平行四边形法则

合成角动量矢量  $\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$  依赖于  $|\mathbf{l}_1|$ 、 $|\mathbf{l}_2|$  及夹角  $\alpha$ :



- 量子力学中角动量合成法则（不证明）：

总角动量  $\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$ , 算符  $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{l}}_1 + \hat{\mathbf{l}}_2$ 。

若  $\hat{\mathbf{l}}_1$ 、 $\hat{\mathbf{l}}_2$  本征矢分别为  $|\mathbf{l}_1 m_1\rangle$  和  $|\mathbf{l}_2 m_2\rangle$ , 则可以证明:

$$\hat{\mathbf{l}} |\mathbf{lm}\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1)} |\mathbf{lm}\rangle,$$

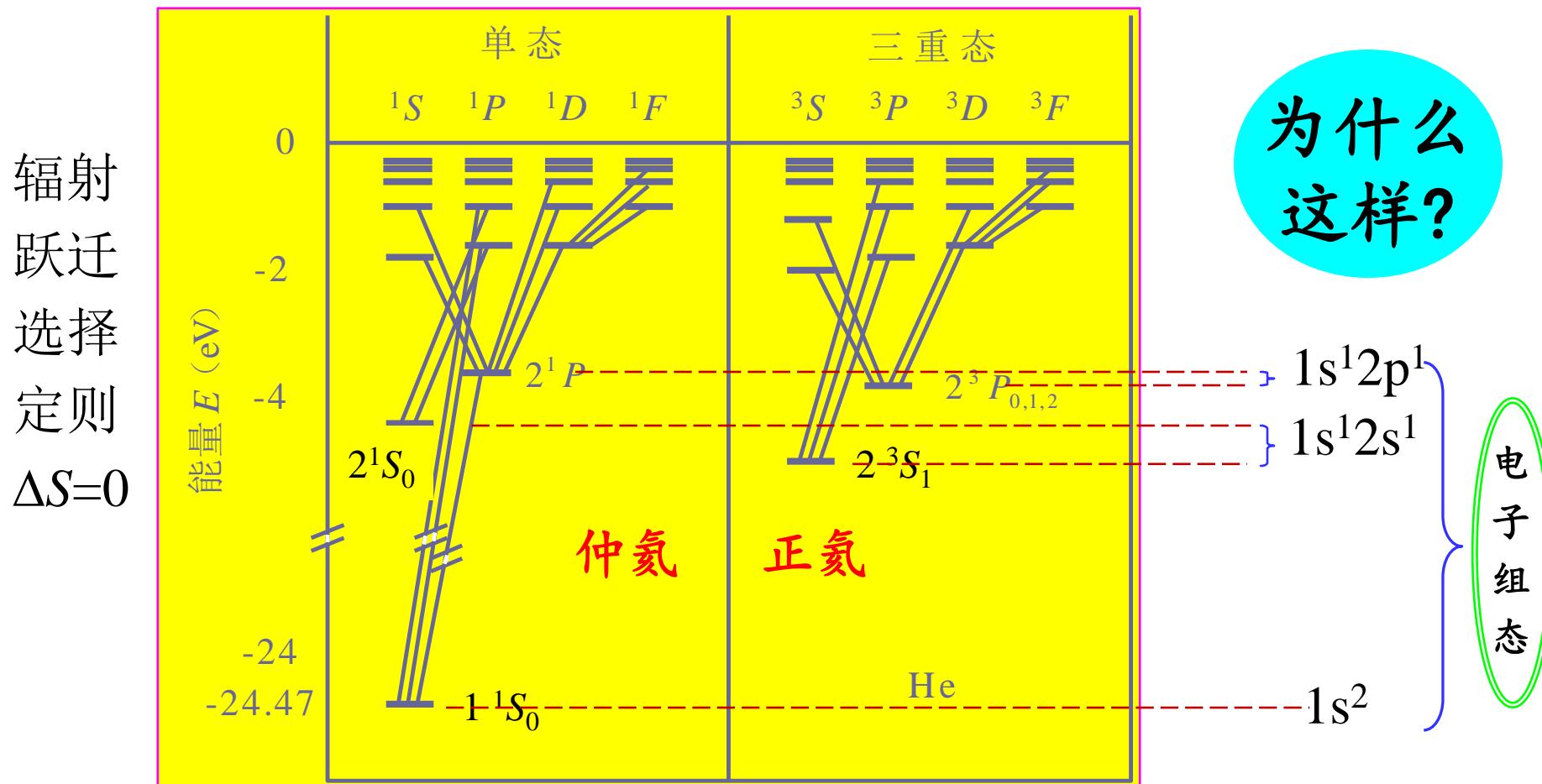
$$l = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 2, \dots, |l_1 - l_2|$$

$l$  是不连续的

# 1, 氦原子光谱的两个特点

1, 基态氦原子的第一电离能:  $\sim 24.5\text{eV}$

2, 三重态能级总低于相应单态, 如  $E(2^3S_1) < E(2^1S_0)$



# 2, 氢原子的电离能

氢原子中“**三体**”之间的作用

- 忽略原子中心氢核的运动，系统的Hamilton量为：

$$H(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{12}) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

- 忽略双电子间作用，则定态Shroedinger方程为：

$$\left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1} \right) + \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2} \right) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

此方程可以**分离变量**为两个Z=2的类氢离子的定态Shroedinger方程，每个电子都处于如下量子化能级上：

$$E_n = -13.6 \text{ eV} \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{54.4}{n^2} \text{ eV}, \quad n=1, 2, 3, \dots$$

## 2, 氢原子的电离能

这样就求出基态能量 $E_g$ 和第一电离能 $E_i$ , 为:

$$E_g = -2 \times 54.4 \text{ eV} = -108.8 \text{ eV}, E_i = 54.4 \text{ eV}.$$

• 双电子之间Coulomb作用修正:

$$\Delta E = \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = e^2 \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle$$

若认为 $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_0(\vec{r}_1)\psi_0(\vec{r}_2)$ , 其中 $\psi_0$ 为Z=2类氢离子基态**单电子**波函数, 则:

$$\Delta E = 34.0 \text{ eV}$$

于是得到:

$$\begin{cases} E_g = -108.8 + 34.0 = -74.8(\text{eV}) \\ E_i = 54.4 - 34.0 = 20.4(\text{eV}) < 24.5\text{eV} \end{cases}$$

\* 实际情况下, 由于双电子间斥力,  $r_{12}$ 要大些,  $\Delta E < 34.0\text{eV}$ 。

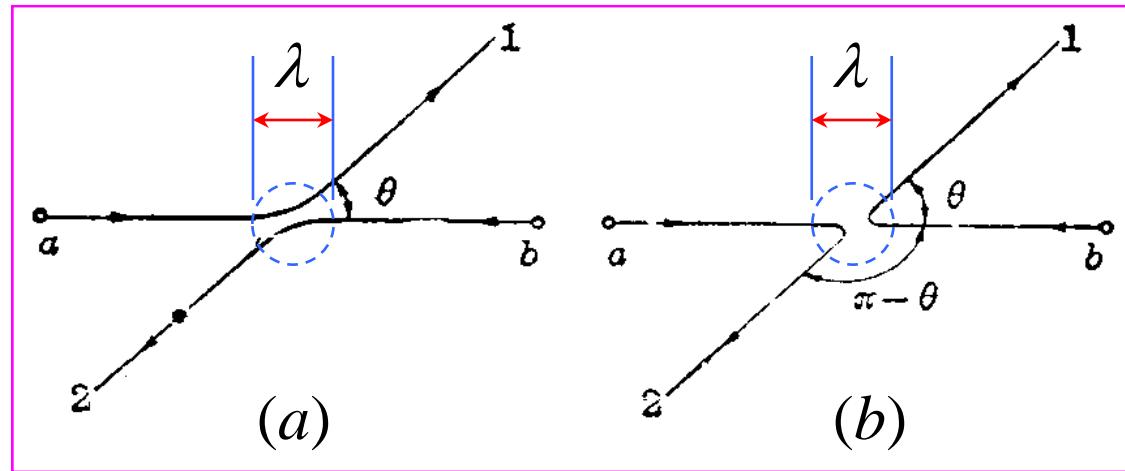
# 3, 粒子全同性与交换效应

## 粒子全同性

“基本” 粒子→人（文物）→国家→物种→…

- 考虑两个全同粒子（如两电子）的散射过程。

在经典力学中，过程(a)、(b)是可以区分的；但量子论中因**波粒二象性**，(a)、(b)是不可区分的！



- 全同粒子：**同类微观粒子具有相同的属性，当它们波函数重叠时不能被区分。原子中电子即为全同粒子系统，原因是：

电子波包尺度 $\lambda \sim$ 典型原子大小 (Bohr半径)

# 3, 粒子全同性与交换效应

## 粒子交换对称性

- 设两个全同粒子处于  $\psi(q_1, q_2)$  态，其中  $q_1$  和  $q_2$  分别为电子 1、2 的全部坐标（包括外部与内部空间的自由度）。定义交换作用  $\hat{P}_{12}$ ：

$$\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2) = \psi(q_2, q_1)$$

$\psi(q_1, q_2)$  与  $\psi(q_2, q_1)$  描述同一物理状态，它们最多差一常数  $\lambda$ ，

$$\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2) = \psi(q_2, q_1) = \lambda\psi(q_1, q_2)$$

$$\hat{P}_{12}^2\psi(q_1, q_2) = \hat{P}_{12}\psi(q_2, q_1) = \lambda^2\psi(q_1, q_2) = \psi(q_1, q_2)$$

$$\Rightarrow \lambda = \begin{cases} +1: \hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2) = \psi(q_1, q_2) & \text{称 } \psi(q_1, q_2) \text{ 为} \textcolor{blue}{\text{交换对称}} \text{ 的} \\ -1: \hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2) = -\psi(q_1, q_2) & \text{称 } \psi(q_1, q_2) \text{ 为} \textcolor{blue}{\text{交换反称}} \text{ 的} \end{cases}$$

# 3, 粒子全同性与交换效应

忽略粒子间作用, 如何从单粒子态得到多粒子态?

- 设单个粒子处于外势场中 (如类氢离子) 定态波函数为  $\psi_i(q)$  态, 两个粒子中的一个处于  $\psi_\alpha(q)$  态, 另一个处于  $\psi_\beta(q)$  态。
- 从经典力学角度来看, 此两粒子系统波函数可能为:

$$\begin{cases} \psi_I = \psi_\alpha(q_1)\psi_\beta(q_2) \\ \psi_{II} = \psi_\alpha(q_2)\psi_\beta(q_1) \end{cases}$$

然而很容易证明: 这两个态不满足全同粒子要求的交换对称性!

- 对称化处理:

$$\begin{cases} \psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_I + \psi_{II}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(q_1)\psi_\beta(q_2) + \psi_\alpha(q_2)\psi_\beta(q_1)] \text{ 交换对称态} \\ \psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_I - \psi_{II}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(q_1)\psi_\beta(q_2) - \psi_\alpha(q_2)\psi_\beta(q_1)] \text{ 交换反称态} \end{cases}$$

# 4, Pauli原理

**Pauli原理**: Fermi子体系波函数必为交换反称的

- 此设想由Pauli在分析了原子能级的经验规律及元素化学性质的周期性的基础上，于1925年提出；又称**Pauli不相容原理**。
- Pauli原理起源于对电子的研究，但被推广至一般Fermi子，从而确立了“**自旋统计关系**”。
- 设两Fermi子所处单粒子波函数为 $\psi_\alpha(q)$ 和 $\psi_\beta(q)$ ，则总反对称态为

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(q_1)\psi_\beta(q_2) - \psi_\alpha(q_2)\psi_\beta(q_1)]$$

很容易看出，当 $\alpha = \beta$ 时， $\psi_A = 0$ ；即：

两个全同Fermi子不能处于同样的量子态！

# 5, 氢原子的单态与三重态

忽略电子间作用，一对全同电子的自旋态

- 单个电子只存在两种自旋态  $\psi_{\text{spin}}$ :

$$|ss_z> \quad |\uparrow> \equiv \frac{1}{2} \frac{1}{2} > \rightarrow \sigma_+, \quad |\downarrow> \equiv \frac{1}{2} - \frac{1}{2} > \rightarrow \sigma_-$$

单态

经典力学中，两个电子自旋态有四种可能性

$$\sigma_+(1) \sigma_+(2), \quad \sigma_+(1) \sigma_-(2), \quad \sigma_-(1) \sigma_+(2), \quad \sigma_-(1) \sigma_-(2)。$$

考虑到交换对称性，只需对以上第二、三两自旋态作对称化处理

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\sigma_+(1) \sigma_-(2) + \sigma_-(1) \sigma_+(2)], \quad \psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\sigma_+(1) \sigma_-(2) - \sigma_-(1) \sigma_+(2)]$$

即:  $\psi_s = \begin{cases} \sigma_+(1) \sigma_+(2) & m_S = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\sigma_+(1) \sigma_-(2) + \sigma_-(1) \sigma_+(2)] & m_S = 0 \\ \sigma_-(1) \sigma_-(2) & m_S = -1 \end{cases}$

总自旋  $S = 1$

$m_S = 1, 0, -1$

(三重态)

# 5, 氢原子的单态与三重态

一对全同电子总的量子态

$$\psi_t = \psi_{\text{space}} \cdot \psi_{\text{spin}}$$

铁磁起源?  
(Heisenberg)

- $\psi_t$ 的交换反对称性要求:

$\psi_{\text{space}}$ 交换对称则  $\psi_{\text{spin}}$  交换反称

$\psi_{\text{space}}$ 交换反称则  $\psi_{\text{spin}}$  交换对称

- ${}^3S_1$ 态  $\psi_{\text{spin}}$  交换对称, 则  $\psi_{\text{space}}$  交换反对称

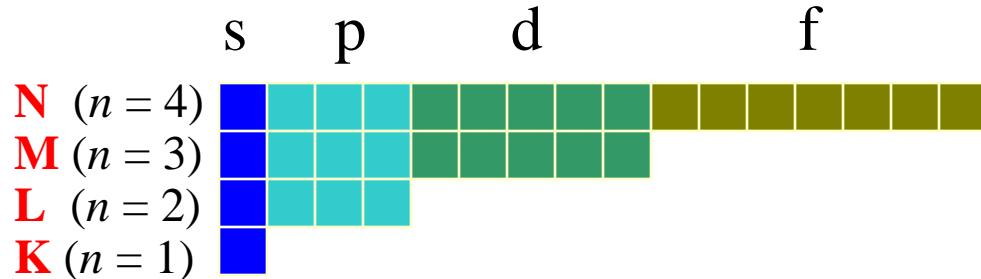
$$\psi_{\text{space}}^A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(\vec{r}_1)\psi_\beta(\vec{r}_2) - \psi_\alpha(\vec{r}_2)\psi_\beta(\vec{r}_1)], \quad \vec{r}_1 \sim \vec{r}_2 \text{时 } \psi_{\text{space}}^A \sim 0$$

- ${}^1S_0$ 态  $\psi_{\text{spin}}$  交换反对称, 则  $\psi_{\text{space}}$  交换对称

$$\psi_{\text{space}}^S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(\vec{r}_1)\psi_\beta(\vec{r}_2) + \psi_\alpha(\vec{r}_2)\psi_\beta(\vec{r}_1)], \quad \vec{r}_1 \sim \vec{r}_2 \text{时 } \psi_{\text{space}}^S \sim \sqrt{2}\psi_\alpha(\vec{r}_1)\psi_\beta(\vec{r}_2)$$

- ${}^3S_1$ 态电子有“排斥”性, Coulomb能小, 故总能量较  ${}^1S_0$ 态低!

# 6, 原子核外电子的排布



忽略电子间作用的原子中电子排布

• 同一次壳层中电子如何排布？

以p<sup>3</sup>壳层为例：



$m_l$  -1 0 +1

Hund定则之一：  
S越大能量越低



原子实屏蔽作用与 / 简并消除

\* 在次壳层中尽量处于不同态以降低Coulomb能

\*  $\psi_{space}$  交换反称具有“排斥”性、低Coulomb能，使自旋尽量同向

• <sub>24</sub>Cr的电子组态（[Ar]3d<sup>5</sup>4s<sup>1</sup>）为何违背经验关系？

# 总 结

- 1, 氦原子光谱的两个特点
- 2, 氦原子的电离能
- 3, 粒子全同性与交换效应
- 4, Pauli原理
- 5, 氦原子的单态与三重态
- 6, 原子核外电子的排布

# 作    业

1. 设自旋 $1/2$ 的两全同Fermi子之间存在吸引作用（作用能随距离增加而减弱）。该双Fermi子系统可能存在那些自旋态？其中哪个自旋态为基态自旋态？
  
2. 在BCS理论中，导致出现低温超导态的关键因素之一是形成Cooper电子对。你认为这对电子应该处于什么样的自旋态？为什么？

# 《原子物理学》

## 多电子原子

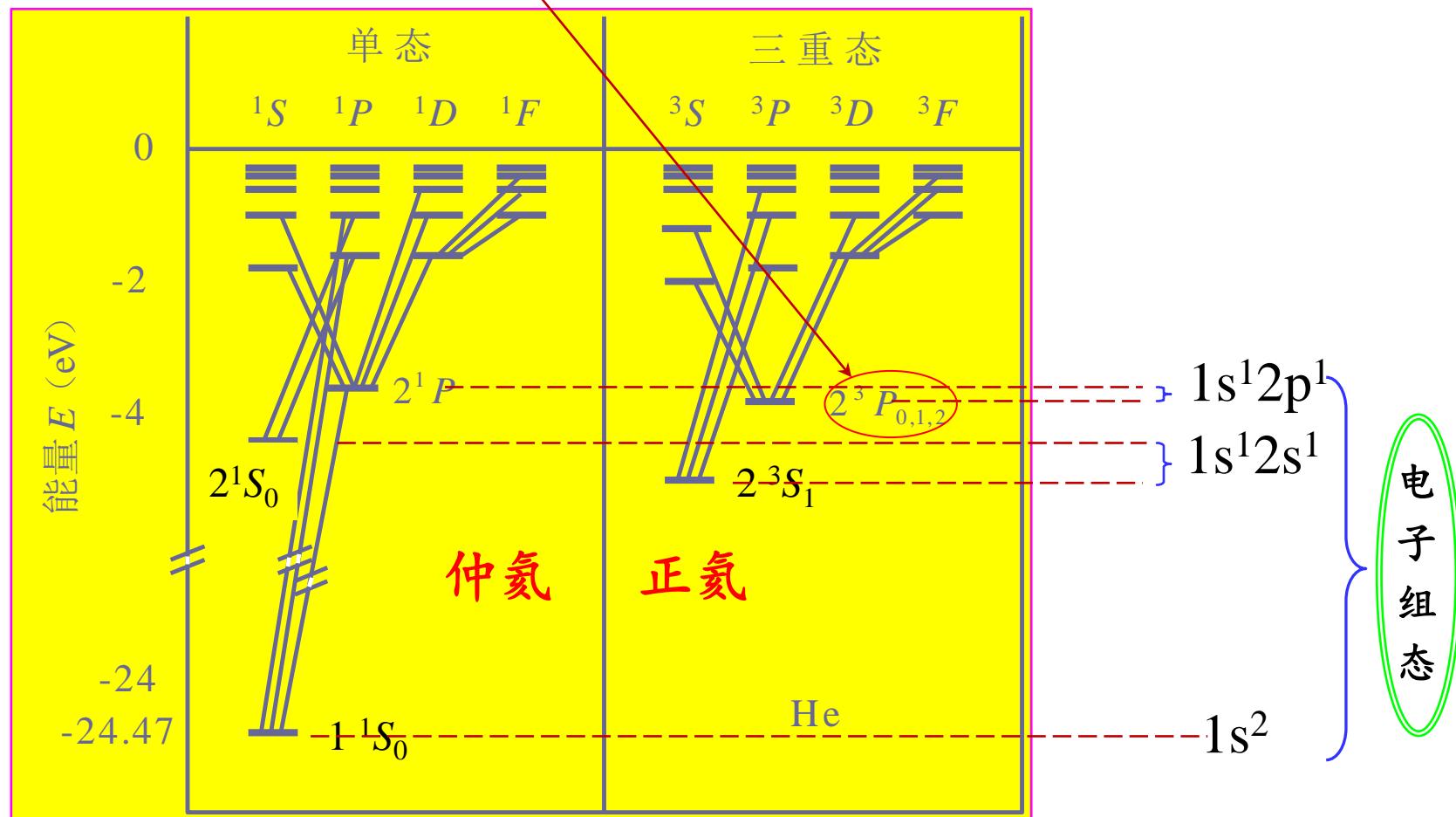
---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

# He原子 $2^3P_{0,1,2}$ 能量一样吗？

辐射  
跃迁  
选择  
定则  
 $\Delta S=0$



• 给定  $S$ 、 $L$  的那些原子态，它们的能量一样吗？

\* 原子核外电子除了静电相互作用和交换效应外，还存在较弱的磁相互 ( $m_l$ 、 $m_s$ ) 作用，这对原子能级有何影响？

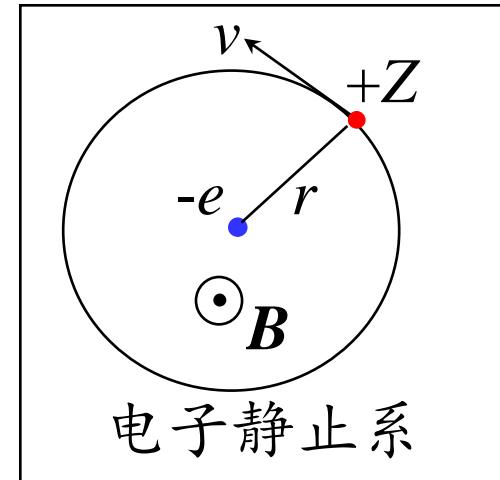
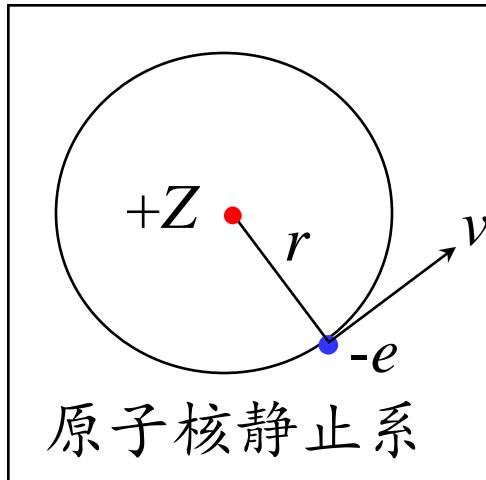
\* 原子核外有“大量”电子时，基态原子处于什么原子态 ( ${}^{2S+1}L_J$ )？

• 内层电子若跃迁有何特征？

# 1, 单电子自旋与轨道磁作用

电子自旋磁矩与轨道磁矩之间作用导致精细结构

- 在 Bohr 模型基础上讨论电子自旋磁矩与轨道磁矩间的作用：



- 在电子静止系中电子感受到的磁场：

$$\left. \begin{aligned} B &= \frac{2\pi i}{c^2 r} \\ i &= \frac{Zev}{2\pi r} \end{aligned} \right\} \Rightarrow B = \frac{Zev}{c^2 r^2} \Rightarrow \vec{B} = \frac{Ze}{mc^2 r^3} \vec{r} \times \vec{p} = \frac{Ze}{mc^2 r^3} \vec{l}$$

# 1, 单电子自旋与轨道磁作用

- 电子 **自旋磁矩**: (轨道磁矩:  $\mu_l = -\mu_B(l(l+1))^{1/2}$ )

$$|\vec{\mu}_s| = -2\mu_B \frac{|\vec{s}|}{\hbar} = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)}, \quad s = \frac{1}{2}; \quad \mu_{sz} = -2m_s\mu_B, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

- 在电子静止系中电子自旋磁矩与外磁场作用能:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

$$\Delta \tilde{E} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = 2 \frac{Z\mu_B e}{\hbar m_e c^2 r^3} \vec{s} \cdot \vec{l} = \frac{Ze^2}{m_e^2 c^2 r^3} \boxed{\vec{s} \cdot \vec{l}}$$

- 由于相对论效应, 在原子核静止系中电子自旋磁矩与轨道磁矩作用能为以上数值的一半 (?) , 即:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \Delta \tilde{E} = \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2 r^3} \vec{s} \cdot \vec{l} = \frac{\hbar Ze^2}{2m_e^2 c^2 r^3} m_s |\vec{l}|$$

→  $\begin{cases} l=0 (\text{s态}) \text{时 } \Delta E = 0 \\ l \neq 0 (\text{非s态}) \text{时 } \Delta E \neq 0; \text{ 能级分裂为双成分 } (m_s = \pm 1/2) ! \end{cases}$

能级精细结构分裂

面向 21 世纪教材  
Textbook Series for 21st Century

# 原子物理学

第四版

杨福家 著



$$\mathbf{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 c^2 r^3} (-\mathbf{v}) \times \mathbf{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 E_0 r^3} \frac{Ze}{m_e} \mathbf{l} \quad (21-1)$$

式中

是电子的轨道角动量，

$$E_0 = m_e c^2$$

是电子的静止能量。

由于电子具有与自旋相联系的磁矩(内禀磁矩) $\mu_s$ , 它在磁场作用下将具有势能

$$U = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$$

利用式  $\mu_s = -\sqrt{s(s+1)}g_s \mu_B$ ;  $|s| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ ;

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{s}$$

以及式(21-1), 可得:

$$U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zg_s \mu_B e}{E_0 \hbar r^3} \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \quad (21-2)$$

这是在电子为静止的坐标系中导得的表达式. 事实上, 我们真正有兴趣的还是以核为静止的坐标系; 两个坐标系看来是对称的, 其实不然, 在它们之间有个相对论时间差\*, 依此修正后, 差  $1/2$ , 于是:

$$U = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zg_s \mu_B e}{E_0 \hbar r^3} \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \quad (21-3)$$

取  $g_s = 2$ , 并注意  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ ,  $E_0 = m_e c^2$ , 则

$$U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2 r^3} \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \quad (21-4)$$

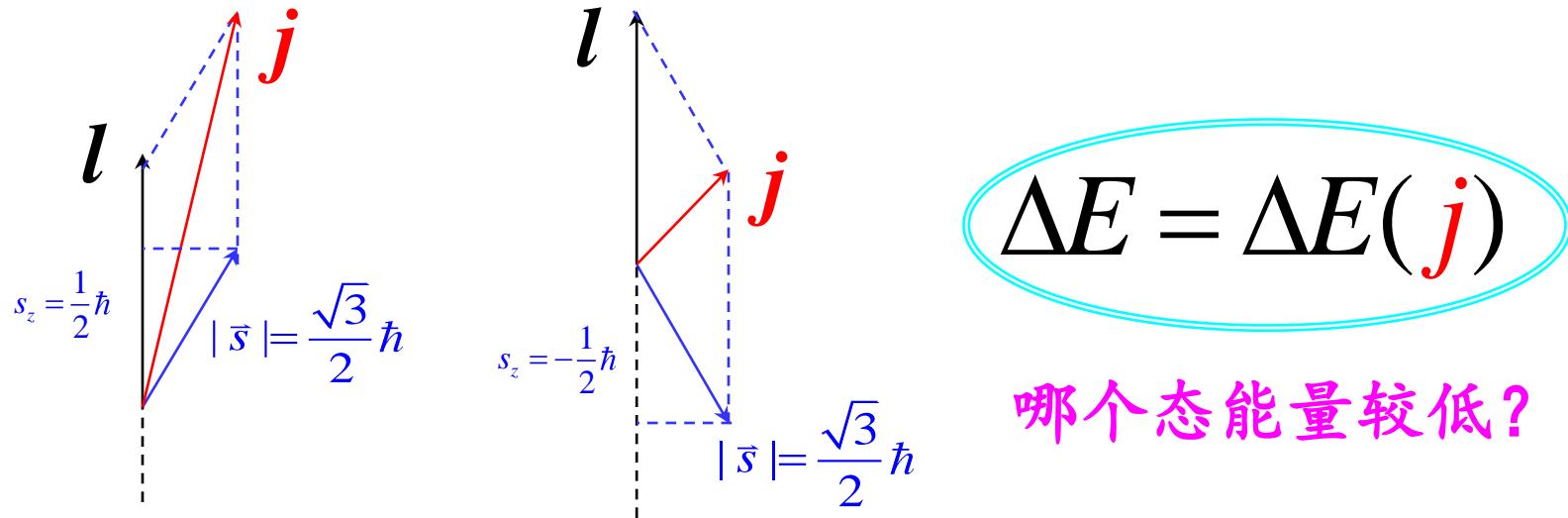
注意, 势能  $U$  只依赖于  $\mathbf{s}$  与  $\mathbf{l}$  的相对取向, 并不依赖于  $\mathbf{s}$  或  $\mathbf{l}$  相对于空间某一个方向的取向. 正因为  $U$  正比于  $\mathbf{s}$  与  $\mathbf{l}$  的组合,  $\mathbf{s} \cdot \mathbf{l}$ , 它就被称为“自旋-轨道耦合”项. 它是由轨道运动产生的磁场与自旋磁矩相互作用产生的附加能量. 在进一步演算之前, 我们可作一数量级估计: 对于氢( $Z=1$ )的第二条能级,  $r=2^2 a_1$  ( $a_1$  为玻尔第一半径),  $|\mathbf{s}| \approx |\mathbf{l}| \approx \hbar$ ,

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\hbar c)^2}{2E_0^2 (4a_1)^3} = \frac{(1.44 \text{ eV} \cdot \text{nm})(197 \text{ eV} \cdot \text{nm})^2}{2(0.511 \times 10^6 \text{ eV})^2 (4 \times 0.0529 \text{ nm})^3}$$

\* 参阅 [6] R. M. Eisberg, Fundamentals of Modern Physics, New York: John Wiley & Sons Inc., (1963) 140. 式(21-3)中的  $\frac{1}{2}$  因子是托马斯算出的, 见 [7] L. H. Thomas, Nature, 117 (1926) 514; Phil. Mag., 3 (1927) 1; 只是在托马斯给出正确结果之后, 泡利写信给玻尔, 表示信服电子自旋的概念. 关于托马斯工作的简述, 还可参见: [8] 史斌星. 量子物理. 清华大学出版社 (1982) 511.

# 1, 单电子自旋与轨道磁作用

- $\Delta E \propto \mathbf{s} \cdot \mathbf{l}$ , 而不同的 $s \cdot l$ 值对应于不同的 $j$ : (以 $l \neq 0$ 为例; 示意图)



- 结论:

电子自旋磁矩与轨道磁矩作用导致能级精细结构分裂，使得 $j$ 简并性解除！

# 1, 单电子自旋与轨道磁作用

碱金属原子：原子实+单电子系统

- 情性原子：满次壳层，总轨道、自旋角动量为零，无磁矩
- 原子实：包括原子核和所有填满次壳层的电子。

• 原子 = 原子实 + “价电子”

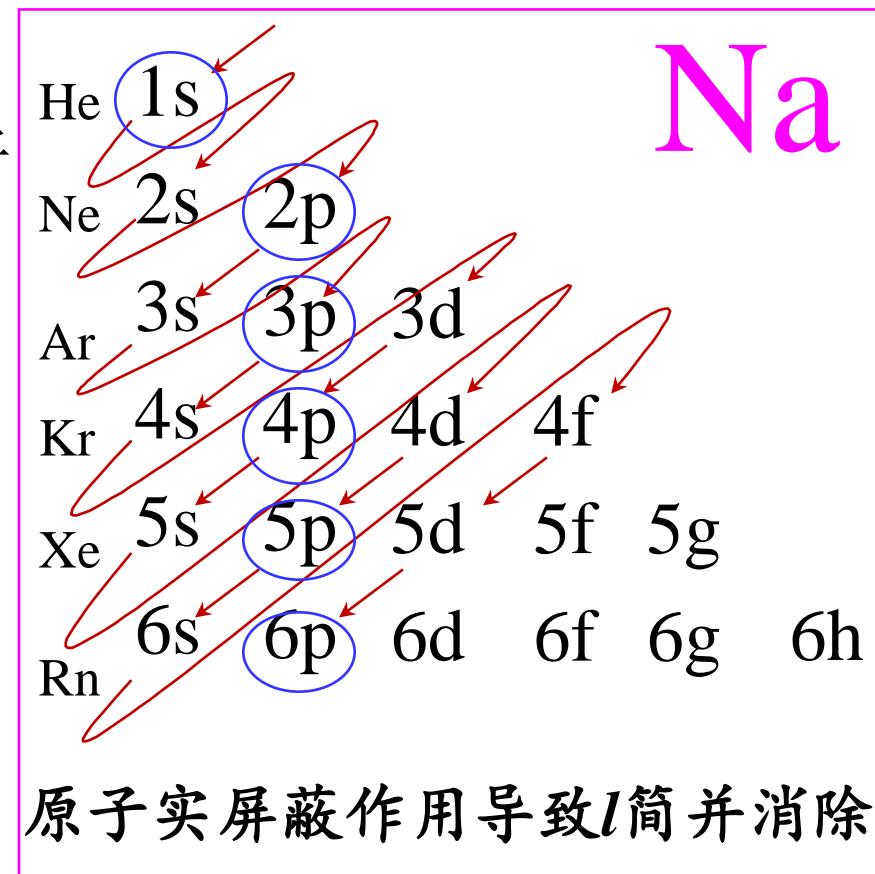
• 碱金属原子 = 原子实 + 单个价电子

$$S \equiv \sum s_i = s, L \equiv \sum l_i = l, J \equiv \sum j_i = j$$

• 不同碱金属原子态的能级也不同

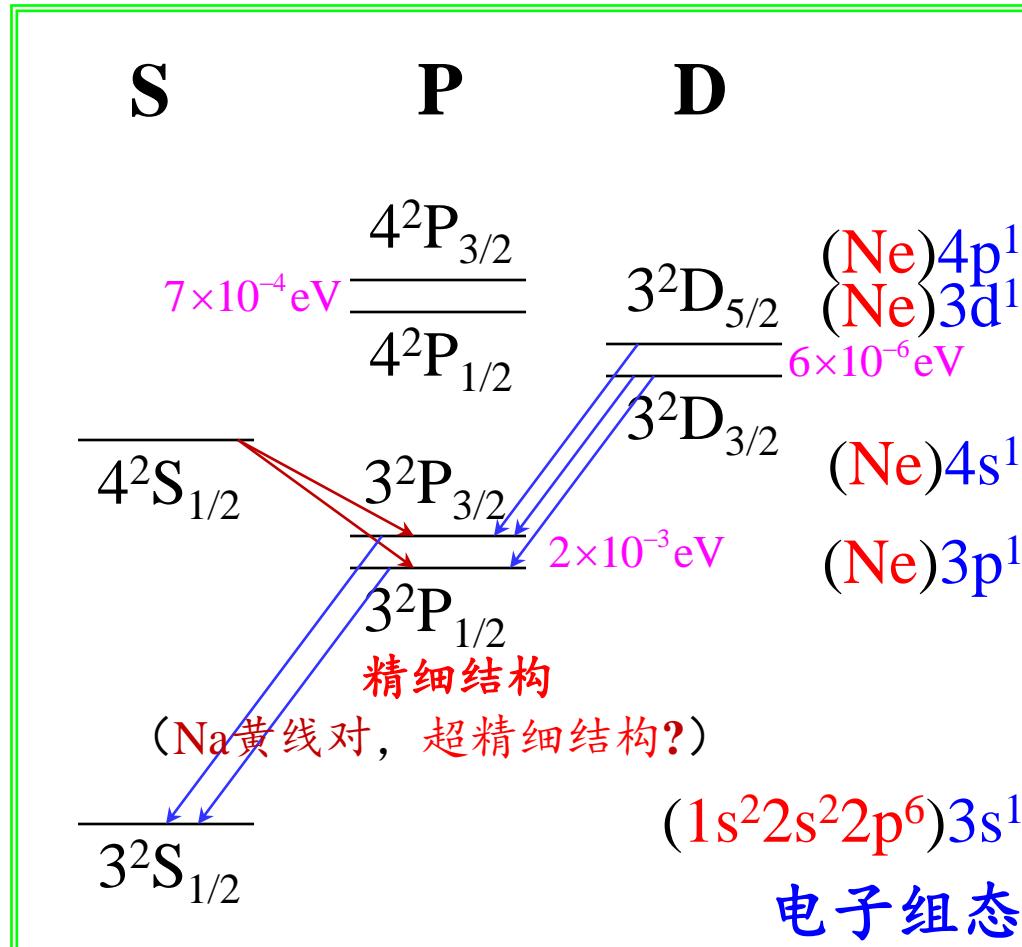
$$n^2 L_j$$

当  $l \neq 0$  时为 2 重态！



# 1, 单电子自旋与轨道磁作用

例：Na原子能级跃迁： $[\text{Ne}] + (3s^1, 3p^1, 4s^1, 3d^1, 4p^1 \dots)$



单价电子辐射跃迁  
选择定则：

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta l = \pm 1; \\ \Delta j = 0, \pm 1. \end{array} \right.$$

问题：为何  $n$  或  $l$  越大  
能级分裂越小？

# 2, 多电子自旋与轨道磁作用

## 耦合法则

- 严格地讲：由于多电子之间自旋磁矩与轨道磁矩之间相互作用，只有总角动量 $J$ 为守恒量。
- 在某些特定条件下， $L$ 、 $S$ 、 $j$ 可以近似守恒：

两种特  
殊情形

LS耦合：轻元素， $L$ 、 $S$ 近似守恒量

$$\{\bar{L} = \sum_i \bar{l}_i, \bar{S} = \sum_i \bar{s}_i\} \Rightarrow \bar{J} = \bar{L} + \bar{S}.$$

标记： $^{2S+1}L_J$

jj耦合：重元素， $j_i$ 近似守恒量

$$\vec{J}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i \Rightarrow \vec{J} = \sum_i \vec{j}_i. \text{ 标记: } \{j_1, j_2, j_3, \dots\}$$

\*本课程要求：掌握LS耦合法则，在给定电子组态时写出原子态。

# 2, 多电子自旋与轨道磁作用

•例：写出价电子组态 $mp^1np^1$  ( $m \neq n$ ) 所有可能的原子态。

分析：因每个p电子可能有6种状态，故总状态应该为 $6 \times 6 = 36$ 种。

$$\begin{array}{l} l_1 = 1 \\ l_2 = 1 \end{array} \} \Rightarrow L = 2, 1, 0$$

$$L = 0 \quad 1 \quad 2$$

$$\begin{array}{l} s_1 = 1/2 \\ s_2 = 1/2 \end{array} \} \Rightarrow S = 1, 0$$

$$S = 0 \quad \begin{matrix} ^1\text{S}_0 & ^1\text{P}_1 & ^1\text{D}_2 \end{matrix}$$
$$1 \quad \begin{matrix} ^3\text{S}_1 & ^3\text{P}_{210} & ^3\text{D}_{321} \end{matrix}$$

\*每个原子态包含 $2j+1$ 种状态，所有状态之和为36种。

# 2, 多电子自旋与轨道磁作用

据LS耦合确定基态原子态

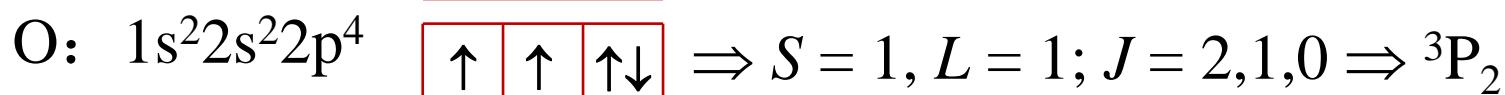
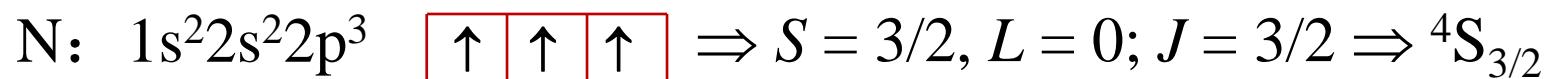
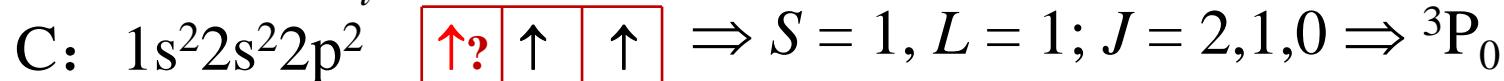
- 利用Hund经验定则确定给定电子组态时原子态能级高低的顺序

$\left\{ \begin{array}{l} a, S \text{越大能量越低;} \\ b, L \text{较大能量较低;} \\ c, \begin{cases} \text{正常次序 (J小能量较低)} : \text{未满半次壳层} \\ \text{反常次序 (J大能量较低)} : \text{过满半次壳层} \end{cases} \end{array} \right.$

- 例：定<sub>6</sub>C、<sub>7</sub>N、<sub>8</sub>O原子的基态原子态

关键：先寻找最大可能  $M_S \Rightarrow S$ ，再寻找最大可能  $M_L \Rightarrow L$ 。

$$m_l = -1 \ 0 \ +1$$

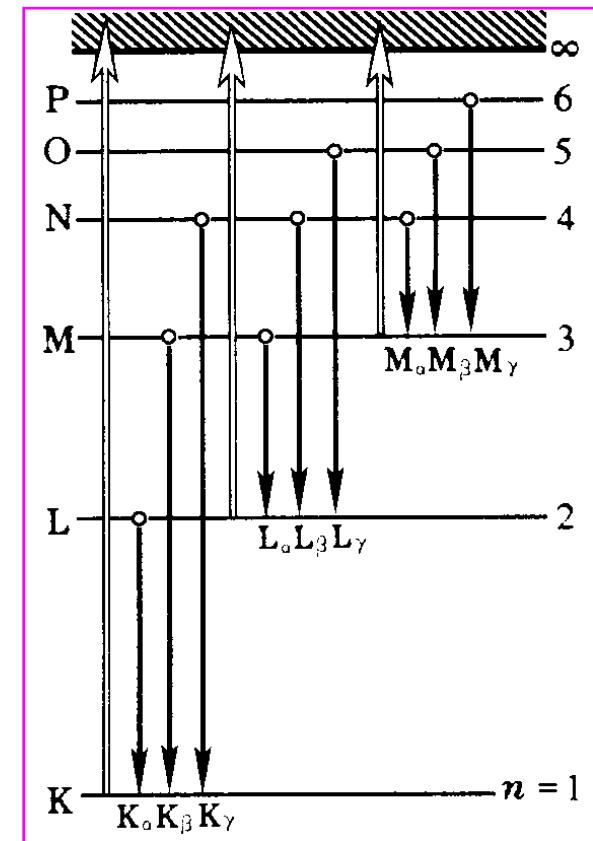
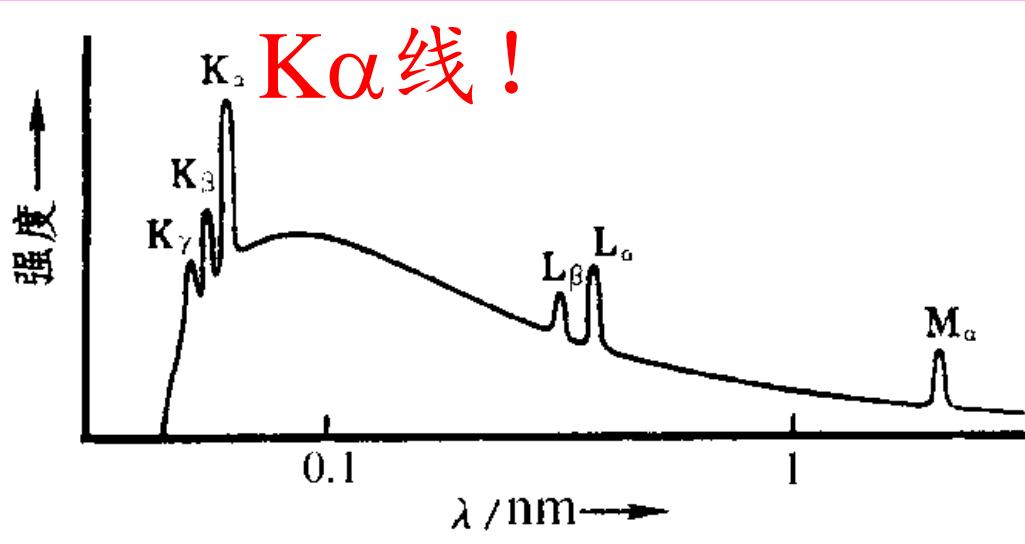


# 3, 内层电子跃迁

内层空隙的产生与内层电子跃迁

- 由于Pauli原理的制约，基态电子组态原子内层电子不能跃迁
- 足够高能电子/粒子的轰击可使内层电子电离，留下“空隙”
- 较外层电子重新跃迁至空隙态，辐射能量  
 $\sim 13.6Z^2 \text{ eV} \approx 1 \text{ keV}$  (对于 $Z > 10$ )

光子称为**X射线标志谱**，叠加于**连续谱**上



# 3, 内层电子跃迁

## 屏蔽数

- 尽管原子核电荷数为Z，但由于其它电子的屏蔽，某单个电子感受到的正电荷要小于Z，为：

$$Z^* = Z - \sigma_n, \quad E_n = -13.6 \text{eV} (Z - \sigma_n)^2/n^2。$$

- $\sigma_n$ 称为**屏蔽数**；经验给出n=1、2内壳层屏蔽数为：

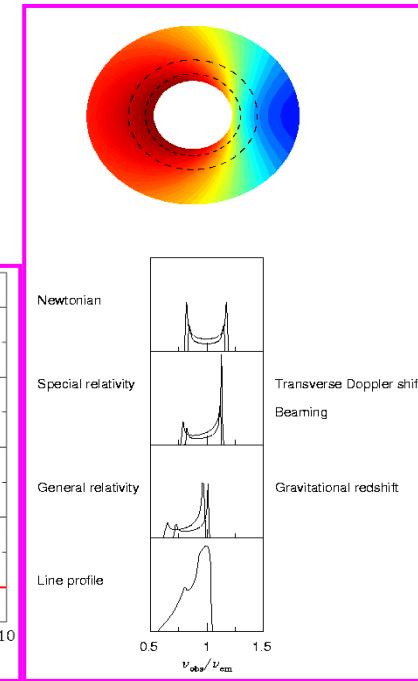
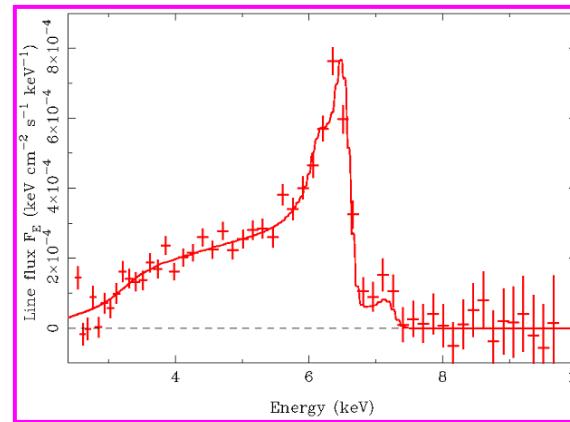
$$\sigma_K = 1, \quad \sigma_L = 7.4。$$

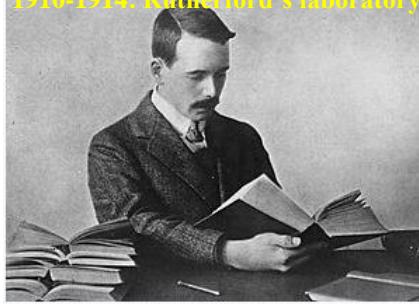
- Fe的**K $\alpha$** 线

$$E_n = -13.6 \text{eV} \frac{(26 - \sigma_n)^2}{n^2}$$

$$\text{FeXXVI: } 13.6 \text{eV} 26^2 \left(1 - \frac{1}{4}\right) \sim 6.9 \text{keV}$$

$$\text{较弱电离: } 13.6 \text{eV} 25^2 \left(1 - \frac{1}{4}\right) \sim 6.4 \text{keV}$$



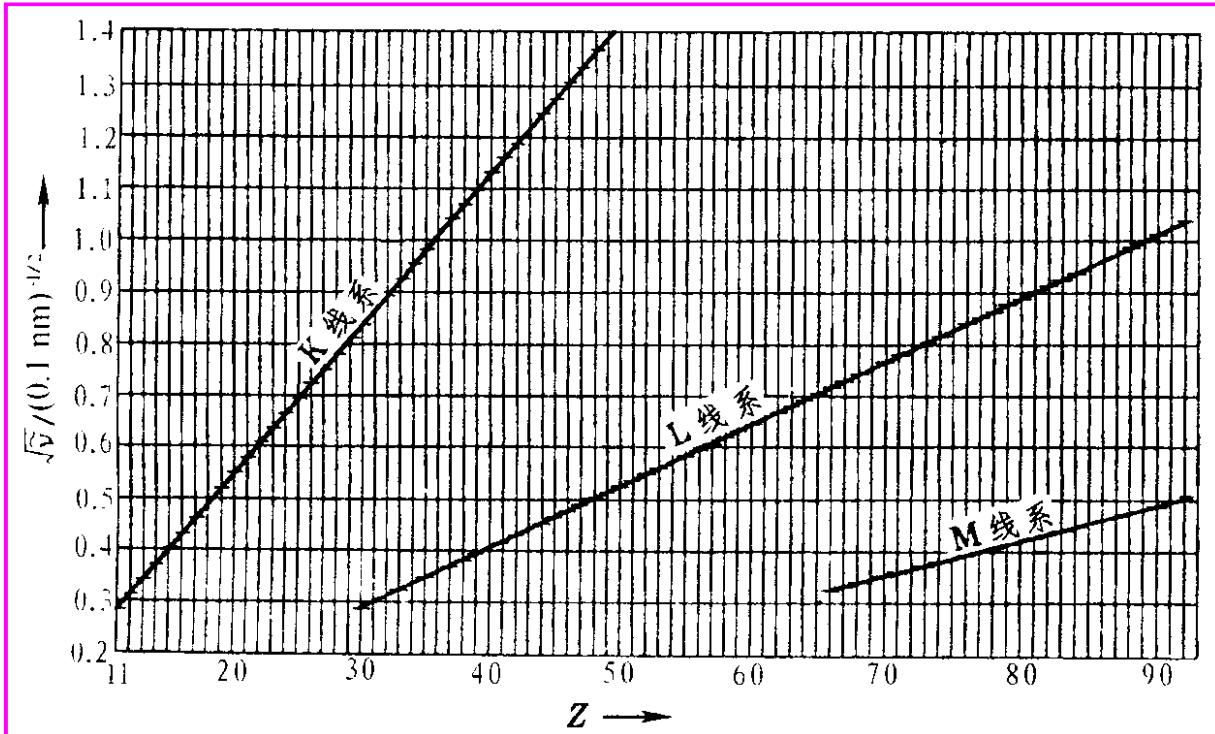


Moseley in 1914

<b>Born</b>	Henry Gwyn Jeffreys Moseley 23 November 1887 Weymouth, Dorset, England
<b>Died</b>	10 August 1915 (aged 27) Gallipoli, Ottoman Empire

# 3, 内层电子跃迁

**Moseley定律** (人民爱好和平, 科学需要和平)  
(1914)



\*Moseley定律用于测量原子核电荷数Z。

$$E_n = -13.6 \text{ eV} \frac{(Z - \sigma_n)^2}{n^2}$$

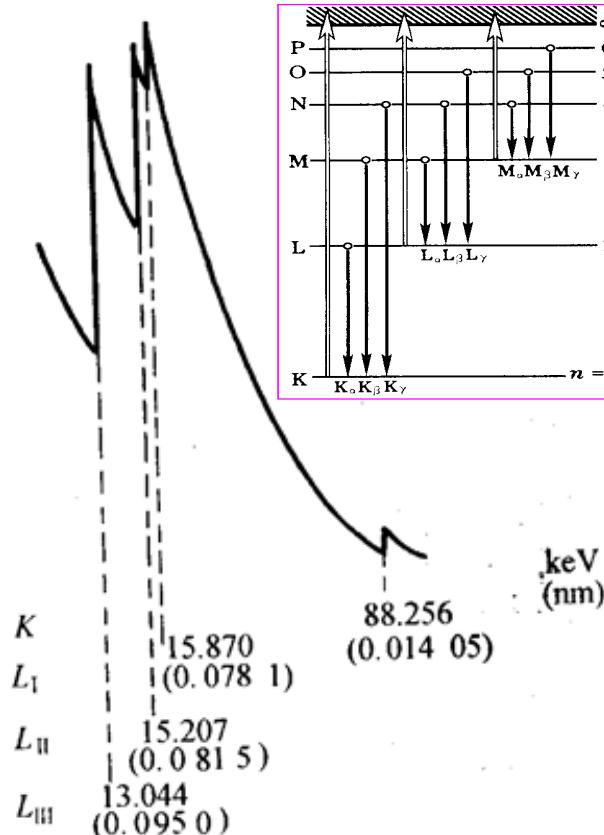
$$\Delta E = h\nu$$

$$= -13.6 \text{ eV} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) (Z - \sigma_n)^2$$

$$\sqrt{\nu} \propto (Z - \sigma_n)$$

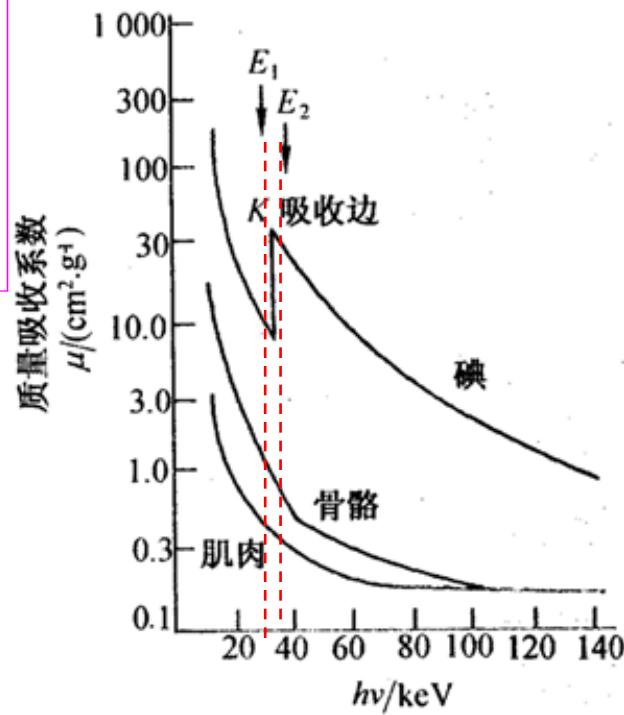
# 3, 内层电子跃迁

**X射线吸收边**: 吸收随 $E$ 增而减少, 但电离时会发生共振吸收



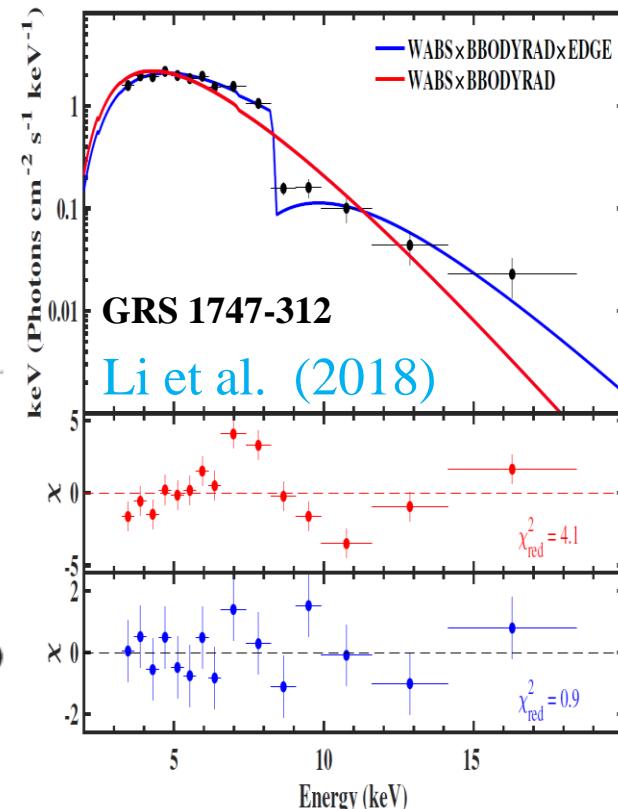
Pb原子K、L层的吸收边

- 碘造影观察局域心血管病变



碘、骨骼和肌肉对X的吸收

- 利用吸收边测量中子星引力红移



# 总 结

- 1, 单电子自旋与轨道磁作用
- 2, 多电子自旋与轨道磁作用
- 3, 内层电子跃迁

# 作 业

- 1,** 写出下列各原子态符号所代表的 $S$ 、 $L$ 、 $J$ 值  $^2S_{3/2}$ ,  $^3D_0$ ,  $^5P_3$ ,  $^4F_2$ ,  $^2G_{7/2}$ , 并指出其中哪些是可能的, 哪些是不可能的。
- 2,** 确定 V ( $Z = 23$ ), Fe ( $Z = 26$ ), Np ( $Z = 93$ ) 的原子基态。
- 3,** Be 原子基态的电子组态是  $(2s)^2$ , 若其中一个电子被激发到  $3p$  态。  
(1) 按 LS 耦合制式可形成哪些原子态?  
(2) 从这些原子态向低能级跃迁时, 可产生几条光谱线? 画出相应的能级跃迁图。
- 4,** 实验测得某 X 射线管所产生的  $K_\alpha$  线和  $K_\beta$  线间频率差为  $1.015 \times 10^{18} \text{ Hz}$ , 试确定: 该管的阳极由何种物质制成?

# 《原子物理学》

## 磁场中原子/分子能级

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

- 给定原子态 ( ${}^{2S+1}L_J$ ) 的原子可以具有多少种原子状态? ——  $2J+1$
- 如何解除  $M_J$  简并? —— 破坏空间各项同性 (如加磁场, 产生附加能  $\Delta E = -\mu_J \cdot \mathbf{B} = -\mu_{J_z} B$ ) !
- 相对于原子光谱, 分子能级跃迁产生的光谱有何特点?

# A. 磁场中原子

# A1, 原子磁矩与角动量关系

电子磁矩与角动量之间的关系：

- 复习：电子轨道磁矩 $\mu_l$ 与自旋磁矩 $\mu_s$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\mu}_l = -\mu_B \vec{l} / \hbar \quad \vec{\mu}_l = -\vec{l} \\ |\vec{\mu}_l| = -\mu_B \sqrt{l(l+1)} \\ \mu_{l_z} = -\mu_B |\vec{l}_z| / \hbar = -\mu_B m_l \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{\mu}_s = -2\mu_B \vec{s} / \hbar \quad \vec{\mu}_s = -2\vec{s} \\ |\vec{\mu}_s| = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)} \\ \mu_{s_z} = -2\mu_B |\vec{s}_z| / \hbar = -2\mu_B m_s \end{array} \right.$$

- 处于 ${}^2S_{1/2}$ 原子态的原子磁矩包括所有电子的轨道磁矩和自旋磁矩之矢量和。

如何计算？形式上引入 $g$ ：

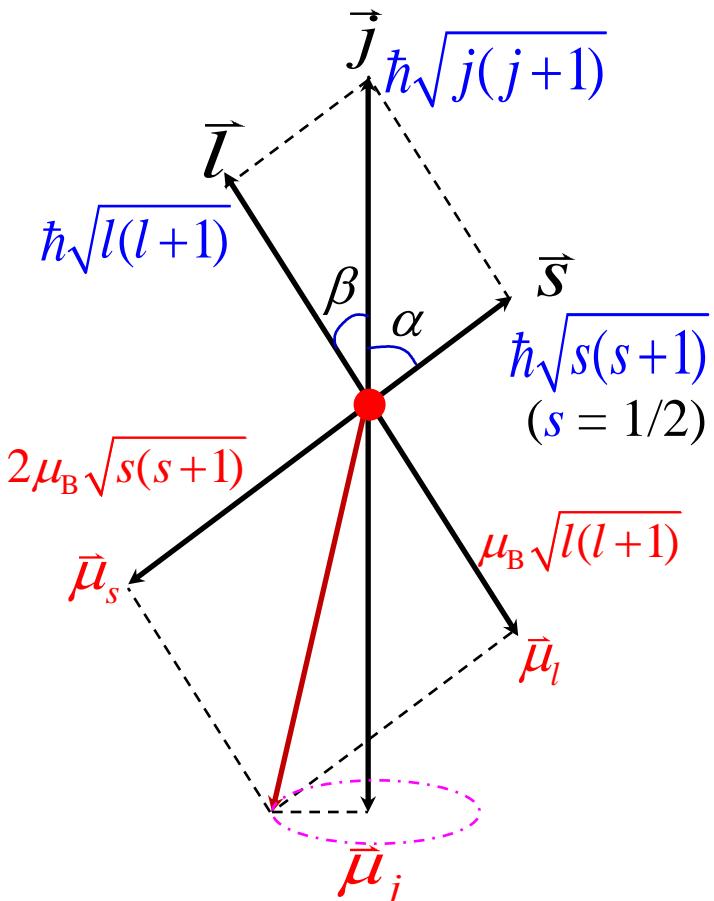
$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\mu}_J = -g \mu_B \vec{J} / \hbar \\ \mu_J = -g \mu_B \sqrt{J(J+1)} \\ \mu_{J_z} = -g \mu_B M_J \end{array} \right.$$

Lande因子

# A1, 原子磁矩与角动量关系

## 如何计算Lande因子 ( $g$ )

- 单价电子原子的g因子:



$$\begin{cases} \cos \alpha = \frac{s(s+1) + j(j+1) - l(l+1)}{2\sqrt{s(s+1) \cdot j(j+1)}} \\ \cos \beta = \frac{l(l+1) + j(j+1) - s(s+1)}{2\sqrt{l(l+1) \cdot j(j+1)}} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \mu_j &= \mu_s \cos \alpha + \mu_l \cos \beta \\ &= -(2\sqrt{s(s+1)} \cos \alpha + \sqrt{l(l+1)} \cos \beta) \mu_B \\ &\equiv -g_j \sqrt{j(j+1)} \mu_B \end{aligned}$$

其中:

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

写成矢量形式:  $\vec{\mu}_j = -g_j \mu_B \vec{j} / \hbar$

# A1, 原子磁矩与角动量关系

- 多价电子原子的g因子：

LS耦合情形

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

要求

jj耦合情形（双电子）

$$g_J = g_{j1} \frac{J(J+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{2J(J+1)} + g_{j2} \frac{J(J+1) + j_2(j_2+1) - j_1(j_1+1)}{2J(J+1)}$$

- 例：Stern-Gerlach实验底片图案

受力： $\vec{f} \approx \mu_{Jz} \frac{dB}{dz} \vec{e}_z \propto \mu_{Jz}$

而  $\mu_{Jz} = -g_J \mu_B M_J \propto g_J M_J$

条纹裂距  $\propto g_J M_J$

原 子	Sn Cd Hg Pb	Sn Pb	H Li Na K Cu Au Ag	Tl	O		
基 态	$^1S_0$	$^3P_0$	$^2S_{\frac{1}{2}}$	$^2P_{\frac{1}{2}}$	$^3P_2$	$^3P_1$	$^3P_0$
$g_J$	—	—	2	$\frac{2}{3}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	—
$g_J M_J$	0	0	$\pm 1$	$\pm \frac{1}{3}$	$\pm 3, \pm \frac{3}{2}, 0$	$\pm \frac{3}{2}, 0$	0
底 片 图 样	+3 +3/2 +1 +1/3 0 -1/3 -1 -3/2 -3						

# A2, 外磁场中原子辐射跃迁

原子在磁场中的**Zeeman**效应

- 外磁场导致的附加能

$$\Delta E = -\mu_J \cdot B = -\mu_{Jz} B = g_J M_J \mu_B B$$

- 若无磁场时，原子的能级2、1之间自发跃迁辐射 $h\nu$ 光子：

$$h\nu = E_2 - E_1,$$

外加磁场B后，能级2、1的能量附加了 $\Delta E$ ：

$$E_2' = E_2 + g_2 M_{J2} \mu_B B, \quad E_1' = E_1 + g_1 M_{J1} \mu_B B;$$

这样原能量 $h\nu$ 的谱线分裂成（显然 $B=0$ 时无分裂）：

$$E_2' - E_1' = h\nu + (\underline{g_2 M_{J2} - g_1 M_{J1}}) \mu_B B.$$

ΔM<sub>J</sub>选择定则  
(g<sub>1</sub>=g<sub>2</sub>)

- 这一现象称为**Zeeman**效应

两类Zeeman效应

{ 若一分为三：称正常Zeeman效应  
若一分非三：称反常Zeeman效应

# A2, 外磁场中原子辐射跃迁

原子在磁场中辐射跃迁的选择定则

- 两原子态除需满足原先辐射跃迁选择定则外，**还要求：**

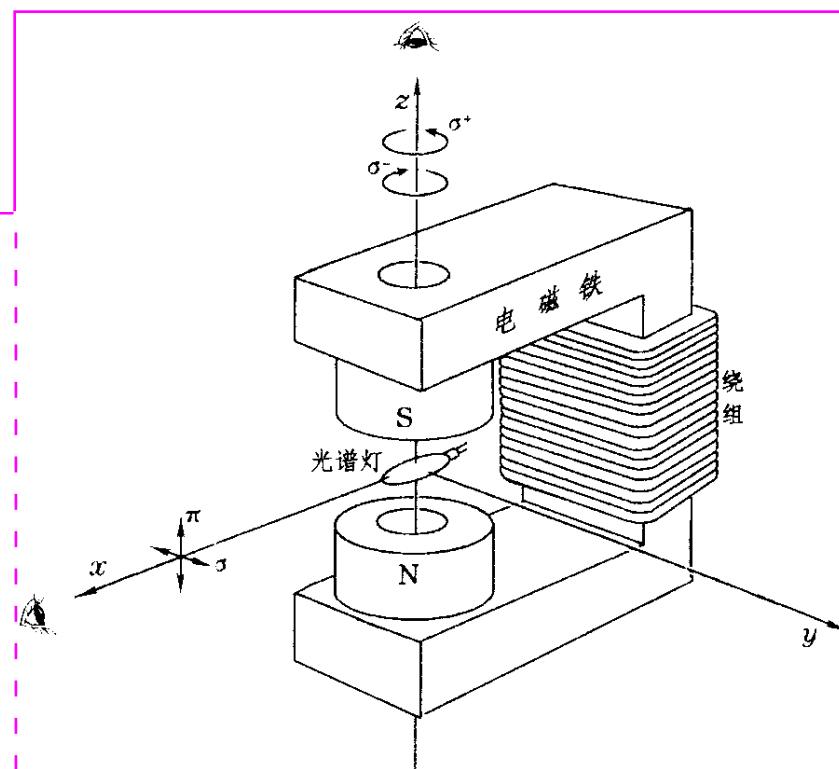
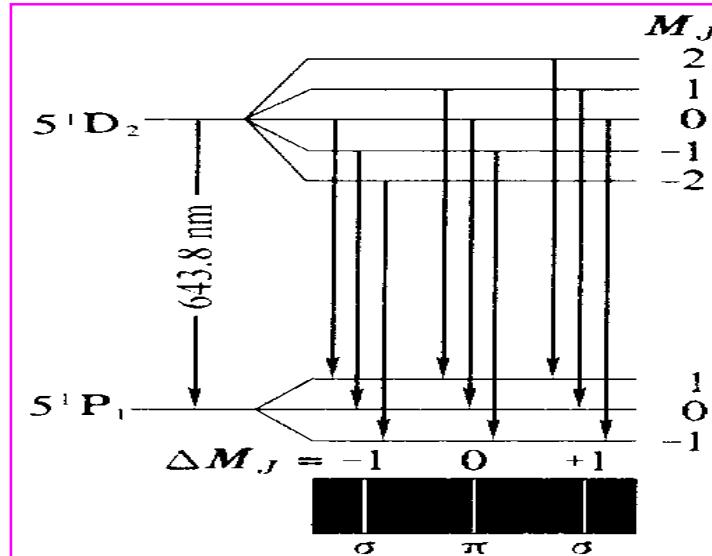
$$\Delta M_J \equiv M_{J2} - M_{J1} = 0, \pm 1$$

可见，当 $g_1 = g_2$ 时，一分为三，属于正常Zeeman效应。

- 例：Cd原子 $5^1D_2 \rightarrow 5^1P_1$ 辐射跃迁

$$S_1 = S_2 = 0 \Rightarrow g_1 = g_2 = 1$$

π光：  
线偏振  
σ光：  
横向-线  
纵向-圆



# A2, 外磁场中原子辐射跃迁

- 例：外磁场中Na原子 $3^2P_{3/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$ 辐射跃迁

$^2P_{3/2}$ 原子态： $S = 1/2, L = 1, J = 3/2 \Rightarrow g_2 = 4/3$

$^2S_{1/2}$ 原子态： $S = 1/2, L = 0, J = 1/2 \Rightarrow g_1 = 2$

$M_J :$      $3/2$         $1/2$         $-1/2$        $-3/2$

$g_2 M_{J2} :$      $2$         $2/3$         $-2/3$        $-2$

$g_1 M_{J1} :$      $1$         $-1$

---

$g_2 M_{J2} - g_1 M_{J1} :$      $-1/3$         $1/3$        $\pi$ 光

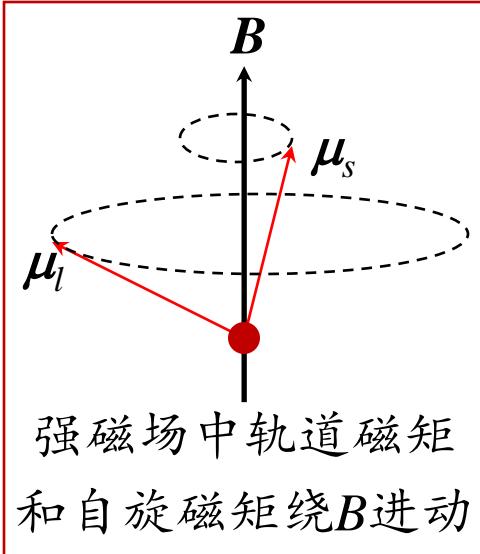
1        $5/3$                            $-5/3$       -1       $\sigma$ 光

一分为六

# A3, Paschen-Back效应

Paschen-Back效应：原子能级在较强磁场中分裂

- 在外磁场远弱于原子内部磁场时LS耦合才是近似适用的
- 极端情形：外磁场远强于原子内部磁场，电子轨道或自旋磁矩与外磁场作用能远大于原子内部轨道-自旋间磁耦合能
- 以单价电子为例：



原子沿 $B$ 方向的总磁矩为

$$\mu_z = \mu_{sz} + \mu_{lz} = -2\mu_B m_s - \mu_B m_l = -(2m_s + m_l)\mu_B$$

原子与外磁场作用导致附加能

$$\Delta E = -\mu_z B = (2m_s + m_l)\mu_B B$$

原能量 $h\nu$ 的谱线分裂成：

$$E_2' - E_1' = h\nu + (2\Delta m_s + \Delta m_l) \mu_B B$$

辐射跃迁选择定则  $\begin{cases} \Delta m_s = 0 \\ \Delta m_l = 0, \pm 1 \end{cases}$

一分为三

# B. 分子能级

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{\text{电子}} \approx (1 \sim 10) \text{ eV} \quad \text{紫外~可见光} \\ E_{\text{振动}} \approx (0.1 \sim 1) \text{ eV} \quad \text{近红外} \\ E_{\text{转动}} \approx (10^{-4} \sim 10^{-2}) \text{ eV} \quad \text{远红外~微波} \end{array} \right.$$

# B0, 估算原子能级/分子能级

- 估算H原子的 $E_{\text{电子}}$ 和H<sub>2</sub>分子的 $E_{\text{振动}}$ 、 $E_{\text{转动}}$

(1) 估算H原子的 $E_{\text{电子}} \sim e^2/a \sim e^2/(\hbar c) \cdot \hbar c/a \sim 10 \text{ eV}$

$$\frac{\hbar^2}{ma^2} \sim \frac{e^2}{a} \Rightarrow a \sim \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar c}{e^2} \frac{\hbar c}{mc^2} \sim 10^5 \text{ fm}$$

(2) 估算H<sub>2</sub>分子的 $E_{\text{振动}} \sim \hbar\omega \sim \hbar\sqrt{k/m_p}$  }  
 $ka^2 \sim E_{\text{电子}} \Rightarrow k \sim E_{\text{电子}}/a^2$  }

$$\Rightarrow E_{\text{振动}} \sim \sqrt{\frac{(\hbar c)^2 k}{m_p c^2}} \sim \sqrt{\frac{4 \times 10^4 \text{ MeV}^2 \text{ fm}^2}{10^3 \text{ MeV}} \cdot \frac{10^{-5} \text{ MeV}}{10^{10} \text{ fm}^2}} \sim 10^{-1} \text{ eV}$$

(3) 估算H<sub>2</sub>分子的 $E_{\text{转动}}$

$$E_{\text{转动}} \sim \hbar^2/I \sim \frac{(\hbar c)^2}{m_p c^2 a^2} \sim \frac{4 \times 10^4 \text{ MeV}^2 \text{ fm}^2}{10^3 \text{ MeV}} \cdot \frac{1}{10^{10} \text{ fm}^2} \sim 10^{-3} \text{ eV}$$

物理常数：

$$\hbar c \approx 200 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$$

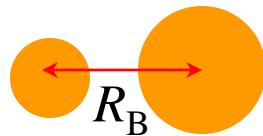
$$e^2/(\hbar c) \approx 1/137$$

$$m_e \approx 0.5 \text{ MeV}$$

$$m_p \approx 1 \text{ GeV}$$

# B1, 振动能级与跃迁

- 分子由原子构成。分子中的原子在平衡态附近**小幅振荡**时，势能可以近似为**简谐振子势**形式。
- 以双原子分子为例子



$$E(r) = E(R_B) + \frac{1}{2} E''(R_B)(r - R_B)^2 + \dots$$

- 振动动能量子化：

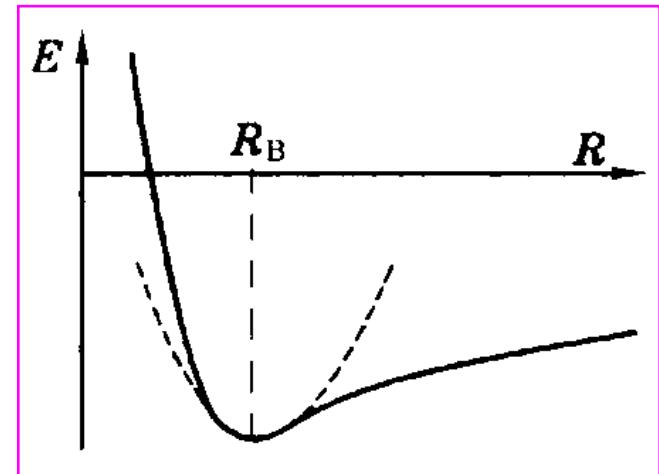
$$E_v = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\omega = \sqrt{E''(R_B)/\mu})$$

能级是等间隔的。

- 辐射跃迁**选择定则**

$$\Delta n = \pm 1$$

跃迁能量： $\Delta E_v = \hbar\omega$



化学键	特征波长 $\lambda/\mu\text{m}$	化学键	特征波长 $\lambda/\mu\text{m}$
O - H	2.68 ~ 2.84	C = O	5.68 ~ 5.81
C ≡ N	4.17 ~ 4.76	C = O	8.70 ~ 9.35
C ≡ C	4.44 ~ 4.65	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	6.54 ~ 6.90
C = C	6.06 ~ 6.15	Na - Cl	20

一些化学键振动的特征波长

# B2, 转动能级与跃迁

- 经典力学中多原子分子的转动能:

$$E_r = \frac{J^2}{2I}$$

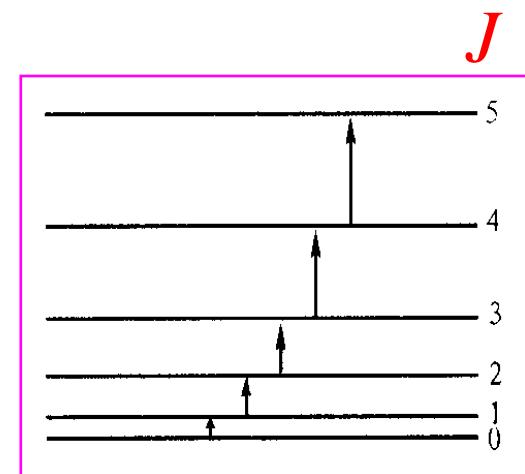
- 量子论中角动量量子化，导致转动能的量子化:

$$E_r = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}, \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

- 辐射跃迁选择定则  $\Delta J = \pm 1$

- 跃迁能量:  $J \rightarrow J+1$

$$\Delta E_r = [J(J+1) - (J+1)(J+2)] \frac{\hbar^2}{2I} = \frac{-(J+1)\hbar^2}{I}$$



转动跃迁光子非单能，能量  $\propto J + 1$

- 跃迁能量 ( $J \rightarrow J-1$ ) :  $\Delta E_r = [J(J+1) - (J-1)J] \frac{\hbar^2}{2I} = \frac{J\hbar^2}{I}$

# B3, 振动转动谱带

- 分子处于低激发态时，先忽略 $E_{\text{电子}}$ 改变
- 分子总能量：

$$E_{\text{vr}} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}$$

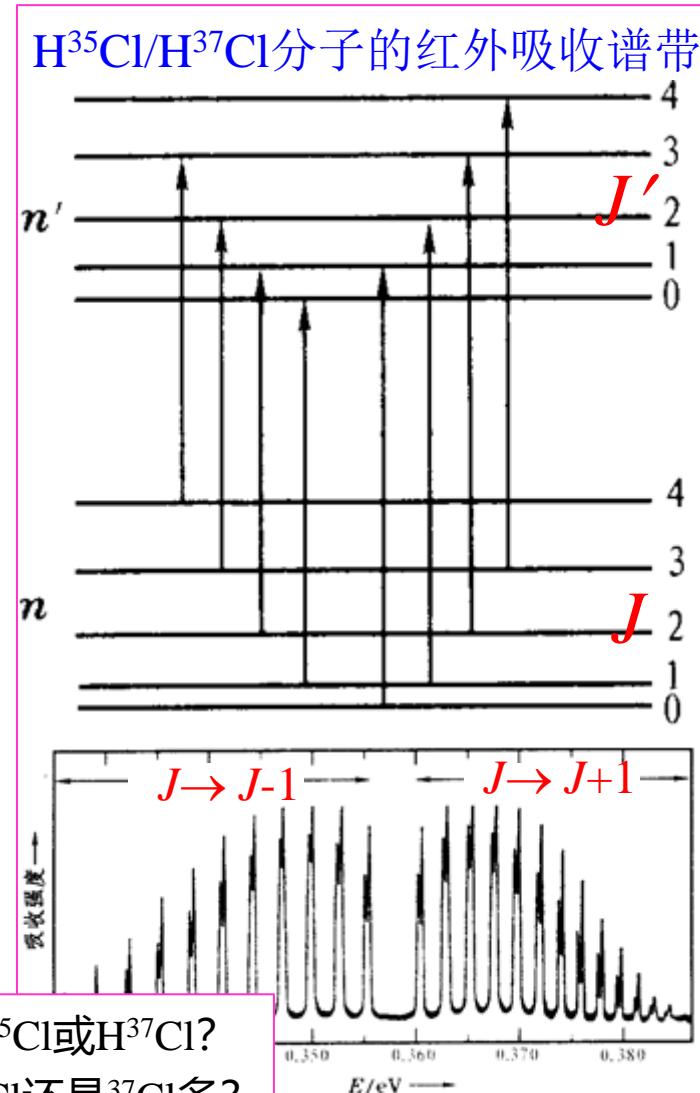
- 对于振动跃迁 $\Delta n = 1$ 的吸收线  
(能级间能量差为负值表征是吸收的能量)

$$\Delta E_{\text{vr}} = -\hbar\omega + \frac{\hbar^2}{I} * \begin{cases} [-(J+1)], & J \rightarrow J+1 \\ J, & J \rightarrow J-1 \end{cases}$$

振动转动谱带

核结合能： 8.52 MeV/A 8.57 MeV/A

哪个是 $\text{H}^{35}\text{Cl}$ 或 $\text{H}^{37}\text{Cl}$ ?  
自然界 $^{35}\text{Cl}$ 还是 $^{37}\text{Cl}$ 多?  
自然如何造就此丰度?



# 总 结

- A1, 原子磁矩与角动量关系
- A2, 外磁场中原子辐射跃迁
- A3, Paschen-Back效应
- B1, 振动能级与跃迁
- B2, 转动能级与跃迁
- B3, 振动转动谱带

# 作 业

- 1,** 求钠原子D<sub>1</sub> 线( $3^2P_{1/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$ ) 在0.2T 磁场中塞曼分裂的四条谱线之间的间隔。
- 2,**  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ 和 $^x\text{C}^{16}\text{O}$ 的 $J = 0 \rightarrow 1$ 转动吸收谱线分别是 $1.153 \times 10^{11}$  Hz和 $1.102 \times 10^{11}$  Hz, 求碳同位素 $^x\text{C}$  的质量数 $x$ .

# 《原子物理学》

## 原子核基本性质/放射性

---

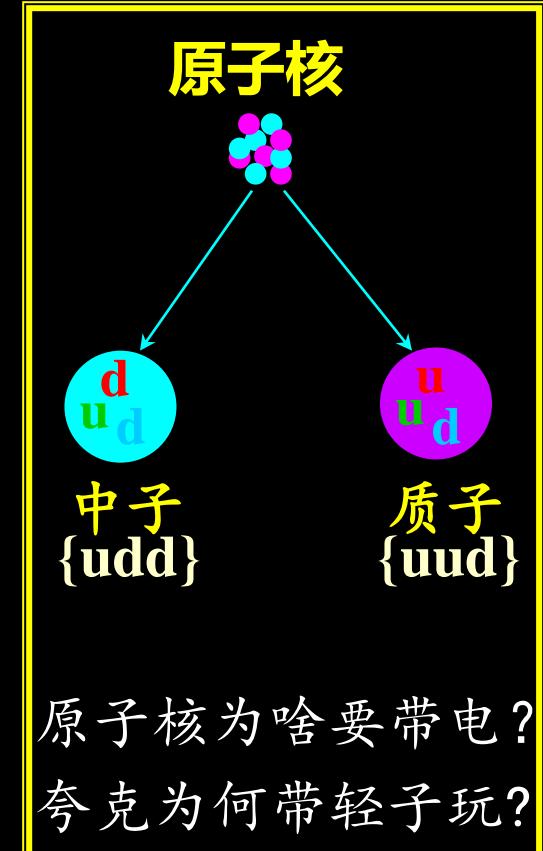
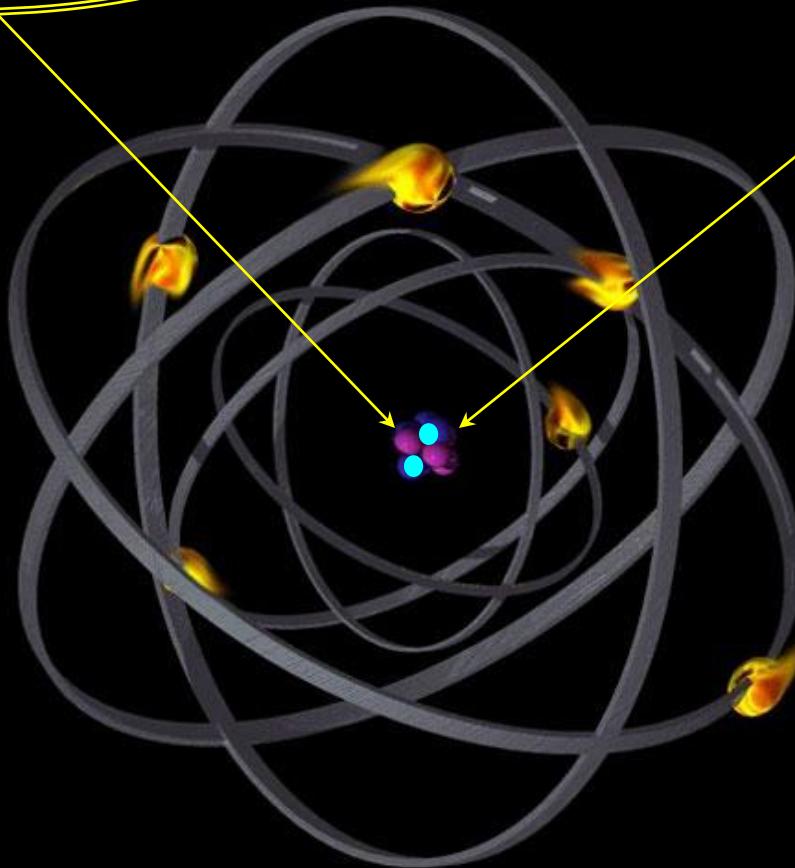
讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

原子核看作“点电荷”  
（“原子物理”，分子物理...）

“点电荷”内部的细节  
（原子核物理，粒子物理）

\*注：  
原子中电子的运动  
其实是没有轨道的，  
电子是全同的；此  
仅为示意。



## 原子核研究的复杂性：

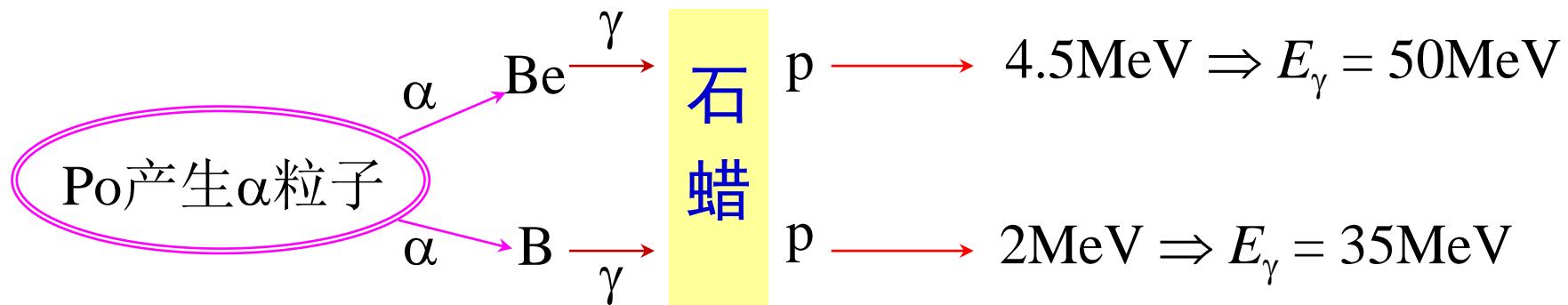
- 1, 成分的多样性 → 多体问题（“群龙无首”）
- 2, 作用形式多样性 → 除了电磁作用外，还存在新的弱作用、强作用

# A. 原子核基本性质

# A1, 中子发现与原子核组成

认识原子核组成的历程：

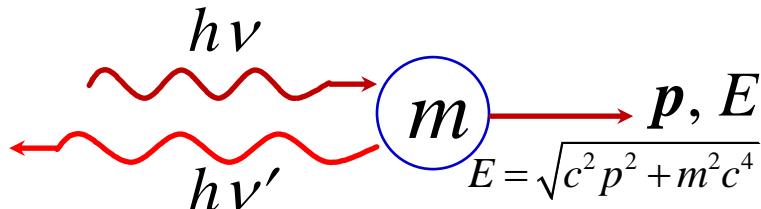
- 1896年~1900年：(原子核蜕变过程) 发射三种射线 ( $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ )
- 1911年：Rutherford提出原子“有核”模型
- 1919年：Rutherford实现 $^{14}\text{N}(\alpha, p)^{17}\text{O}$ 反应，发现质子
- 1920年：Rutherford提出“双子”假说/预言；1921年Harkins：**n**
- 1930年：Bothe和Becker认为Po的 $\alpha$ 粒子轰击Be时产生中性 $\gamma$ 射线
- 1932年：Joliot-Curie夫妇



“要是我们夫妻俩听过卢瑟福的贝克利演讲的话，就不会让查德威克捷足先登了。”

# A1, 中子发现与原子核组成

$E_\gamma$ 的计算方法（设出射质子最大动能为 $E$ ）：

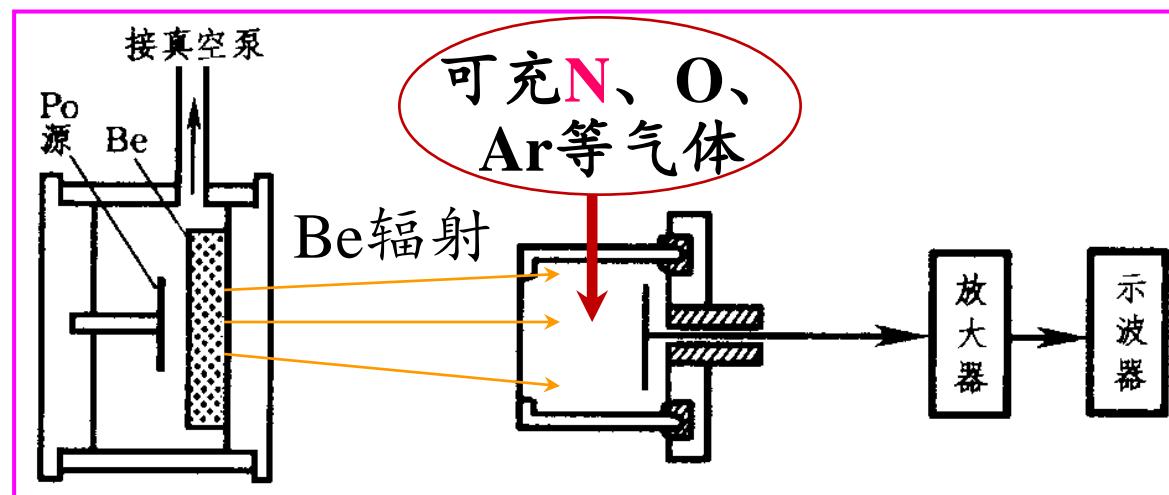


$$\begin{cases} h\nu = h\nu' + E(p) \\ h\nu/c = p - h\nu'/c \end{cases}$$

$E_\gamma(E, m)$

$$h\nu = \frac{E}{2} \left( 1 + \sqrt{1 + 2 \frac{mc^2}{E}} \right)$$

- 受Rutherford“双子”说启示，Chadwick质疑中性射线为 $\gamma$ 射线；并且做实验：



Nobel物理  
奖, 1935年

Possible Existence of a Neutron

It has been shown by Bothe and others that beryllium when bombarded by  $\alpha$ -particles of polonium emits a radiation of great penetrating power, which has an absorption coefficient in lead of about  $0.3 \text{ (cm.)}^{-1}$ . Recently Mme. Curie-Joliot and M. Joliot found, when measuring the ionisation produced by this

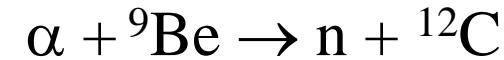
Nature, 129 (1932), 312

of the neutron, while the quantum hypothesis can only be upheld if the conservation of energy and momentum be relinquished at some point.

Cavendish Laboratory,  
Cambridge, Feb. 17.

129, 312; 1932

$$E_\gamma(4.5 \text{ MeV}, m_p) = 50 \text{ MeV} \neq E_\gamma(1.2 \text{ MeV}, m_N) = 90 \text{ MeV}$$



- 1932年：Iwanenko、Heisenburg等提出原子核由质子和中子构成

# A2, 原子核的大小

- 实验测量原子核半径  $R$ :

$$R = r_0 A^{1/3}$$

**核子**: 质子、中子之统称

{ 核力作用方法 (如中子散射) :  $r_0 = (1.4 \sim 1.5) \text{ fm}$

{ 电力作用方法 (如电子散射) :  $r_0 = 1.1 \text{ fm}$

- 这表明原子核是不可压缩的, 其密度可很好地近似为一常数:

$$\rho_n = \frac{M}{V} = \frac{Au}{4\pi r_0^3 A/3} \approx 2.8 \times 10^{14} \text{ g/cm}^3 \approx 0.16 \text{ 个/fm}^3$$

• **核物质**: 以质子、中子等为单元构成大块物质。在只考虑质子、中子等之间核力相互作用时, 其密度为  $\rho_n$  (称为饱和核物质密度, 或核物质密度, 或核密度)。它与原子核的差别主要体现在边界效应是否重要。

普通物质 vs. 核物质

**注意**: 对于由核物质组成的星体, 引力不能忽略, 密度非均匀!

# A3, 原子核的比结合能

- **结合能:** 自由质子、中子结合成原子核所释放的能量

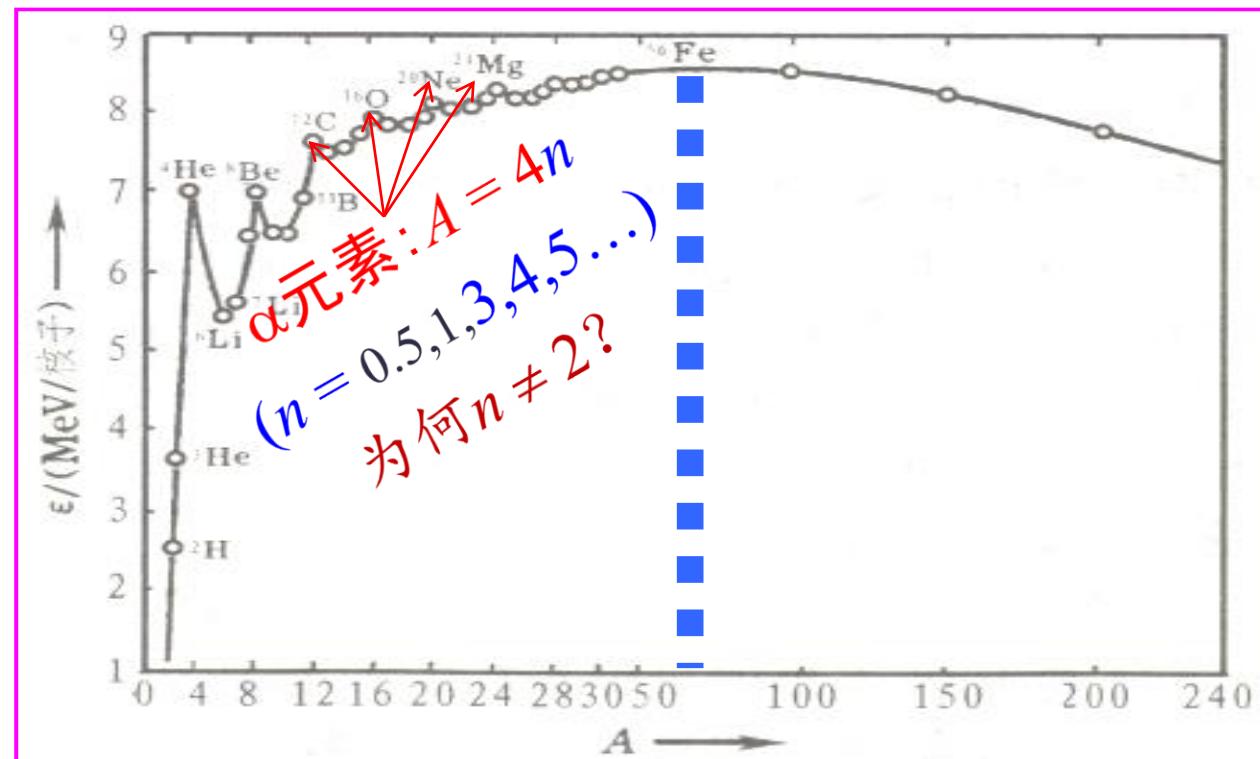
$$B = \Delta Mc^2 = [Zm_p + (A-Z)m_n - M_N]c^2$$

- **比结合能:** 单位核子所具有的结合能

$$\varepsilon = \frac{B}{A}$$

铁族元素具有较高的比结合能，如：

$$\varepsilon(^{56}\text{Fe}) = 8.8\text{MeV}$$



# A4, 原子核磁矩, 超精细结构

- **核自旋:** 原子核的总角动量  $I$ , 其本征值为  $\sqrt{I(I+1)}\hbar$

实验发现  $I$  的规律性

核类型	$I$
偶偶核	0
奇偶核	半奇数 $\rightarrow$ Fermion
奇奇核	整数 $\rightarrow$ Boson

- **核子磁矩**

$$\frac{1}{2} \text{自旋点粒子 Dirac 方程} \Rightarrow \mu = \frac{q\hbar}{2mc}$$

理论上:

对于电子,

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

对于核子, 定义 **核磁子**

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p}$$

实验测量值:  $\mu_{sz}(e) = -1.00\mu_B$ ;  $\mu_{sz}(p) = 2.79\mu_N$ ; 中子  $\mu_{sz}(n) = -1.91\mu_N$

为什么? 核子具有内部结构而非点粒子! (e很好地近似点粒子)

- **反常磁矩:** 磁矩中偏离理论值的部分; 质子  $1.79\mu_N$ ; 中子  $-1.91\mu_N$

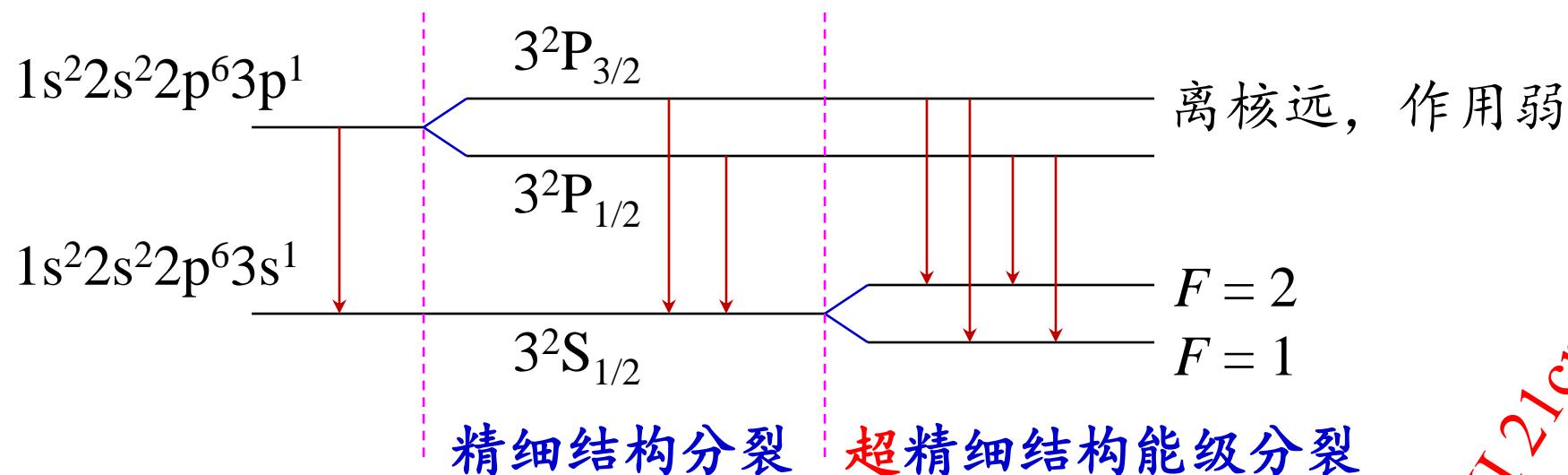
# A4, 原子核磁矩, 超精细结构

- (原子) 核磁矩: 核内所有核子自旋及轨道运动贡献磁矩之和

$$\mu_I = g_I \mu_N \sqrt{I(I+1)}$$

$g_I$ : 核Lande因子

- 原子光谱的超精细结构分裂: 电子总磁矩 $\mu_J$ 与核磁矩 $\mu_N$ 间磁耦合所致。其结果是总角动量 $F = J + I$ 守恒, 不同 $F$ 量子数能级分裂。
- 例:  $^{23}\text{Na}$ 双黄线的超精细结构能级分裂 ( $I = 3/2$ )



HI 21cm line

# B. 放射性

# 什么放射性？

- 不稳定原子核通过发射粒子而蜕变的现象

$\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 放射性

- 研究历史：

1896: Becquerel 研究铀盐的荧光

Röntgen → Poincaré → Becquerel

1898~1900: Curie夫人 提纯放射性元素，分离出 Po、Ra (又获得1911年Nobel化学奖)

- 本质：某些原子核不稳定！ → 衰变

Nobel物理奖  
(1903)

# 为何衰变？没人彻底会算！

地球年龄 ~ 4.6 Gy

Nuclide name

19-K-40

## Nuclear Property

Atomic mass  $39.963998165 \pm 6.0E-8$  u

Mass excess  $-33.535497 \pm 5.6E-5$  MeV

Binding energy / A  $8.5380907 \pm 1.4E-6$  MeV

Beta decay energy  $1.3109051 \pm 5.96E-5$  MeV

Abundance  $0.0117 \pm 0.0001$  %

E <sub>ex</sub> (keV)	J <sub>π</sub>	Half-life	Decay Modes
0.0	4-*	1.248 Gy (0.003)	β-: 89.28%(13) β+: 10.72%(13)
1643.638 (0.011)	0+	336 ns (12)	IT: 100%
4384.0 (0.3)	0+		IT: 100%

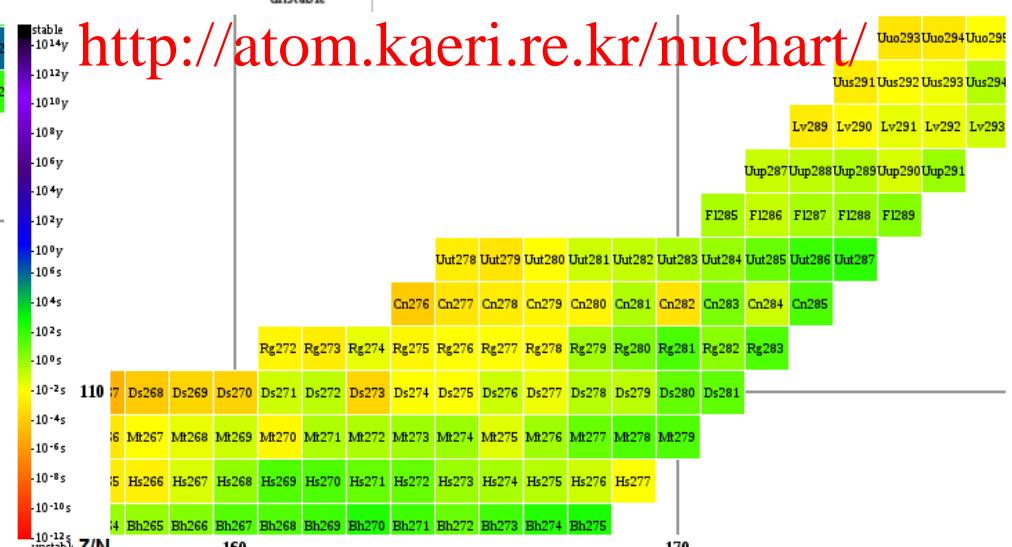
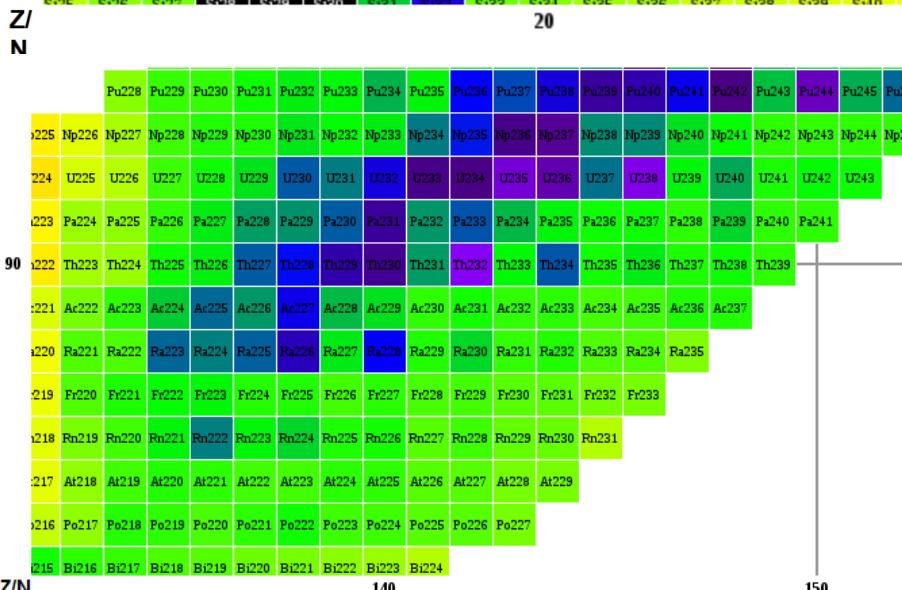
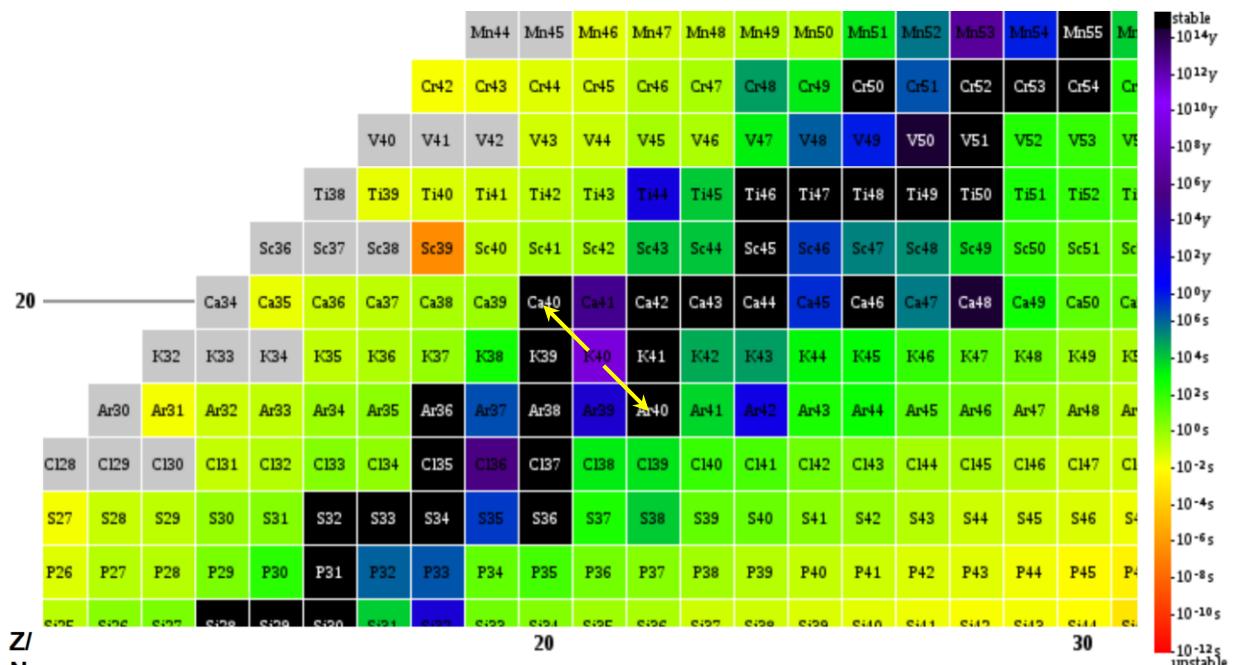
\* Place the mouse pointer here to see the notes.

Isomer Transition

## Neutron-induced Cross Sections

### List of Evaluated Nuclear Data Libraries

<http://atom.kaeri.re.kr/nuchart/>



# B1, 放射性衰变基本规律

## 指数衰变规律

$$-\mathrm{d}N \propto N \, \mathrm{d}t \Rightarrow -\mathrm{d}N = \lambda N \, \mathrm{d}t \Rightarrow N = N_0 \exp(-\lambda t)$$

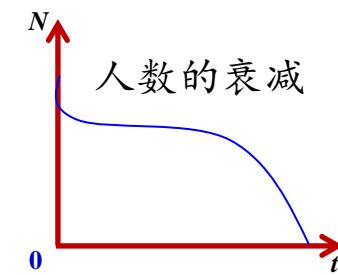
- 衰变常数  $\lambda = -(\mathrm{d}N/\mathrm{d}t)/N$ : 单位时间内一个核发生衰变的几率

**半衰期:** 核衰变为原数目一半的时间  $T_{1/2}$

$$N_0/2 = N_0 \exp(-\lambda T_{1/2}) \Rightarrow T_{1/2} = \ln 2 / \lambda$$

**平均寿命:** 所有核存在时间的平均值  $\tau$

$$\tau = \frac{\int_0^{N_0} (-\mathrm{d}N) \cdot t}{N_0} = \lambda \int_0^{\infty} t e^{-\lambda t} \cdot \mathrm{d}t = \frac{1}{\lambda}$$



# B1, 放射性衰变基本规律

放射性活度  $A$ : 单位时间内发生衰变核数目

$$A = \frac{-dN}{dt} = \lambda N$$

- 单位:  $1\text{Bq} = 1\text{次}/\text{秒}$ ,  $1\text{Ci} = 3.7 \times 10^{10}\text{Bq}$ ,  $1\text{mCi} = 10^{-3}\text{Ci}$

衰变能: 衰变过程中释放的能量  $Q (> 0)$

$$\boxed{A \rightarrow B + C + (D + \dots)}: Q = (m_A - m_B - m_C)c^2 > 0 \Rightarrow m_A > m_B + m_C$$

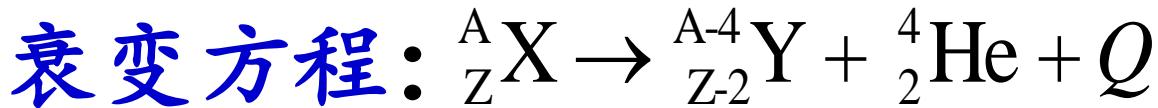
- 若A初始禁止, 且  $m_B \gg m_C$  (NR近似): “两体单能”

$$Q = \frac{(m_B v_B)^2}{2m_B} + \frac{(m_C v_C)^2}{2m_C} = \frac{1}{2} m_C v_C^2 \left( \frac{m_C}{m_B} + 1 \right) \approx \frac{1}{2} m_C v_C^2$$

- 结论: 衰变能大多转化为质量较轻粒子的动能!

三种放射性:  $\alpha(^4\text{He})$ 、 $\beta(\text{e}^-)$ 、 $\gamma(\text{光子})$

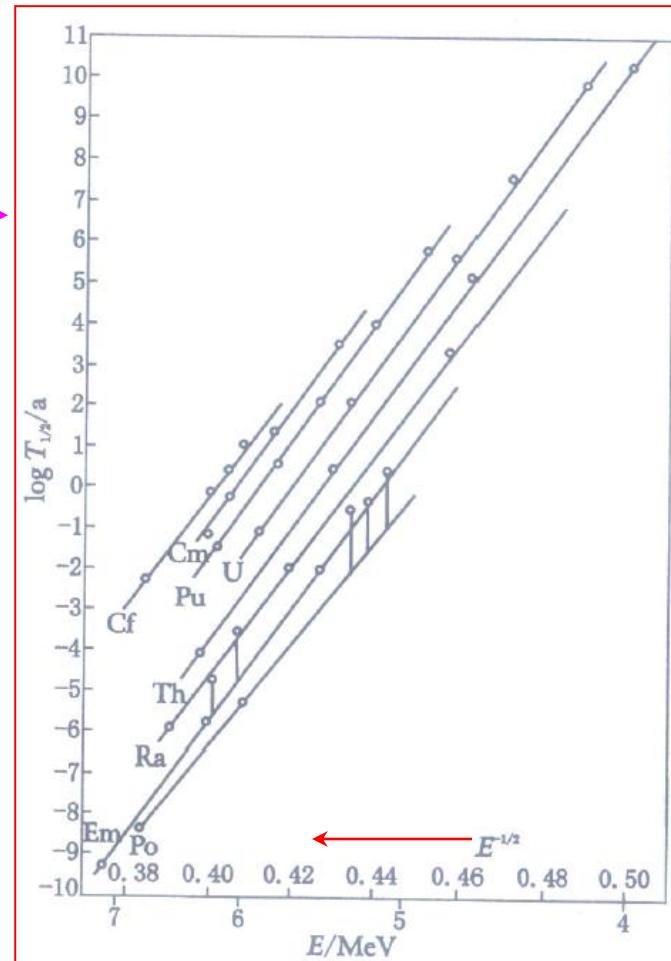
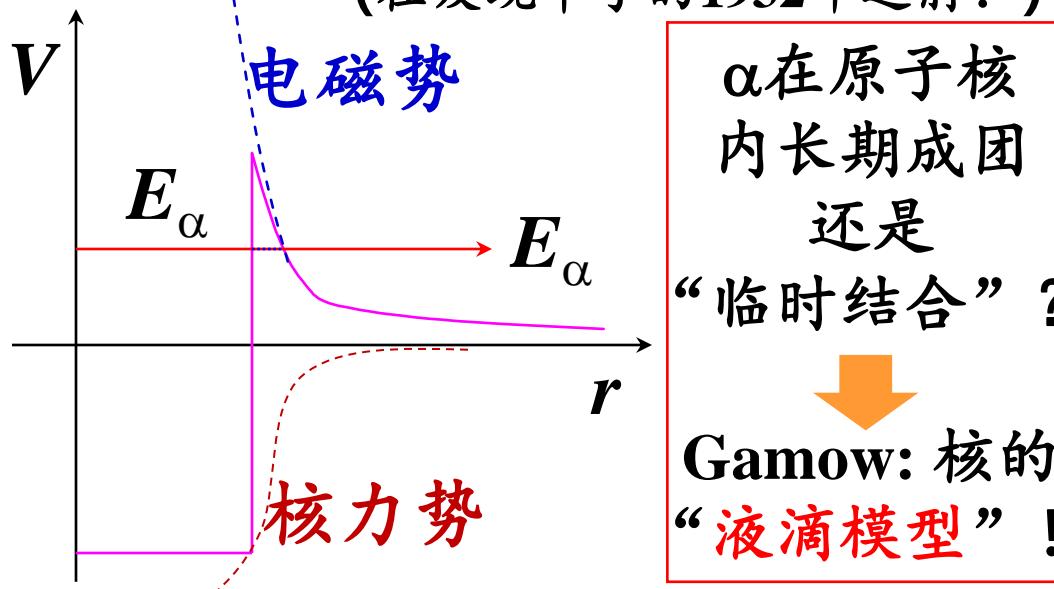
# B2, $\alpha$ 衰变



- 衰变能与半衰期的关系:

$$\log T = c_1 E_\alpha^{-1/2} + c_2 \longrightarrow$$

- 衰变机制: Gamow(1928) “势垒贯穿”  
(在发现中子的1932年之前! )



# B3, $\beta$ 衰变

衰变方程:  ${}^A_Z X \rightarrow {}^A_{Z+1} Y + e^- + (?) + Q$

- 能谱: 连续谱!

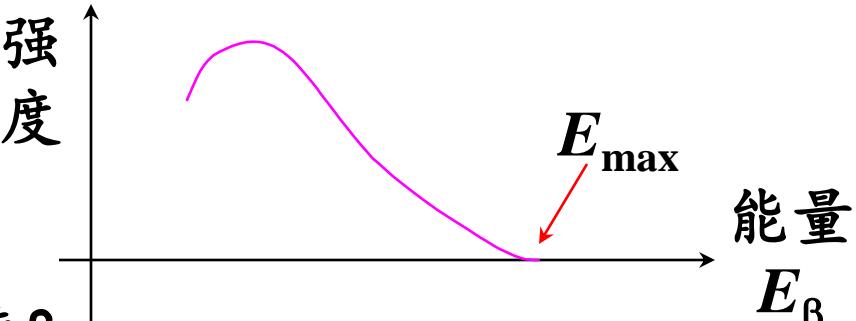
$$Q = E_{\max}$$

- 难题:

1, 核能级量子化而  $E_b$  为何连续?

2,  $E_\beta < E_{\max}$  时能量不守恒?

3, 核内无如此低能电子, 电子从哪儿来?



原子核的“错误”的统计定律和连续 $\beta$ 谱

## 中微子! (1930)

1930年12月4日通过梅特纳给一个放射学家会议的信

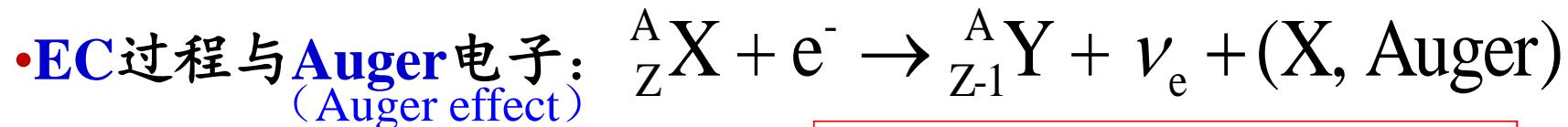
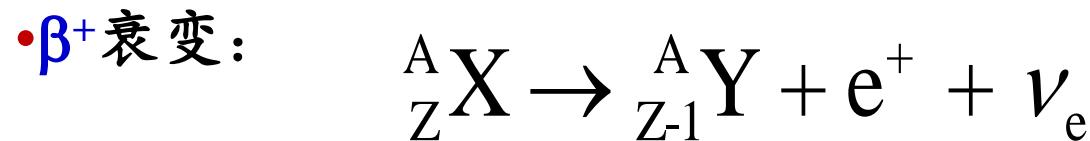
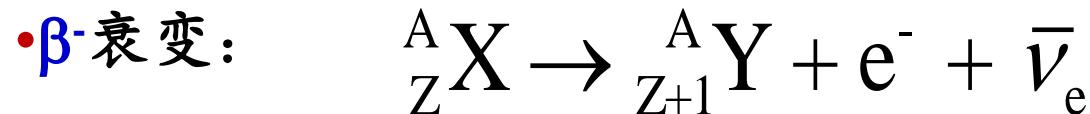
- Pauli假说: Reines & Cowan (1956)  $\bar{\nu}_e + p \rightarrow n + e^+$  (Nobel'95)

Nobel 2002 → David (太阳) + 小柴 (SN1987A)

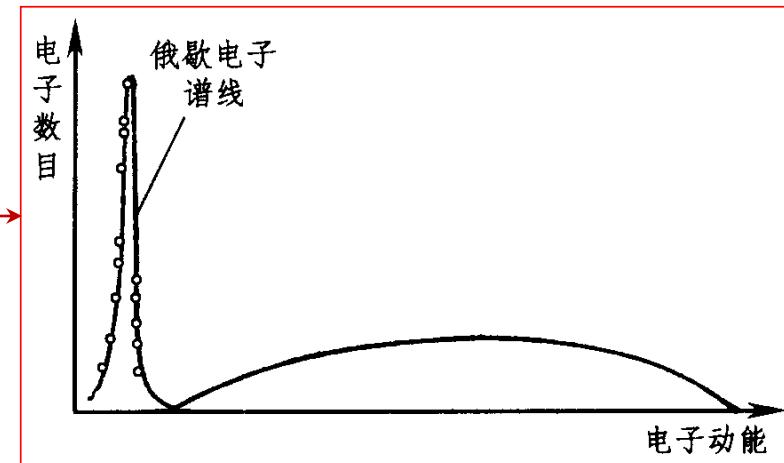
- Fermi弱作用理论: 类似原子辐射光子, 但为一种新相互作用

# B3, $\beta$ 衰变

各种类型的 $\beta$ 衰变：

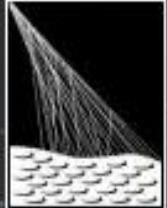


EC过程一例：  
K俘获



## Pierre Auger Observatory

studying the universe's highest energy particles



# Cosmic Ray Shower

### The Pierre Auger Cosmic Ray Observatory

is studying ultra-high energy cosmic rays, the most energetic and rarest of particles in the universe. When these particles strike the earth's atmosphere, they produce extensive air showers made of billions of secondary particles. While much progress has been made in nearly a century of research in understanding cosmic rays with low to moderate energies, those with extremely high energies remain mysterious.

The Pierre Auger Observatory is working on solving these mysteries.

### Inauguration of Pierre Auger Observatory

- [Home](#)
- [Cosmic Rays](#)
- [Auger Observatory](#)
- [News](#)
- [Event Display](#)
- [International Collaboration](#)
- [Images and Media](#)
- [Scientific and Technical Information](#)
- [Special Features](#)
- [Contact Us](#)
- [Auger at Work \(Admin\)](#)



[Viewing the Observatory via Google Earth](#)



[One Observatory, Two Sites](#)

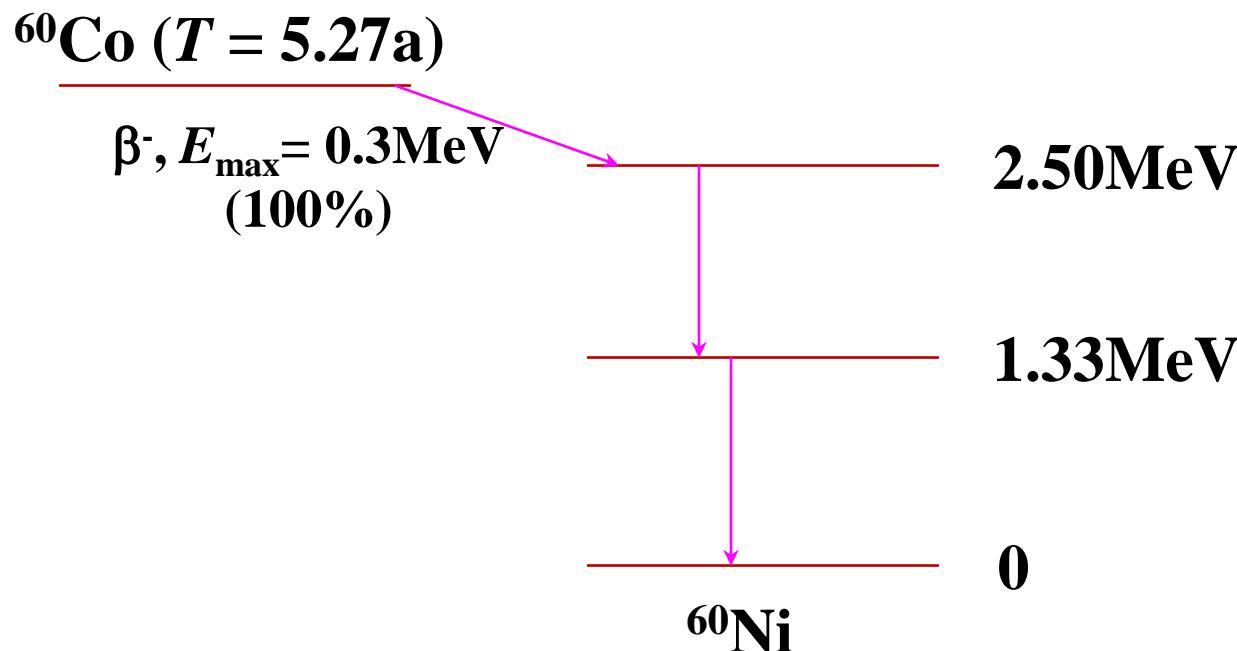


[Auger Celebration](#)

# B4, $\gamma$ 衰变 ( $\gamma$ 跃迁)

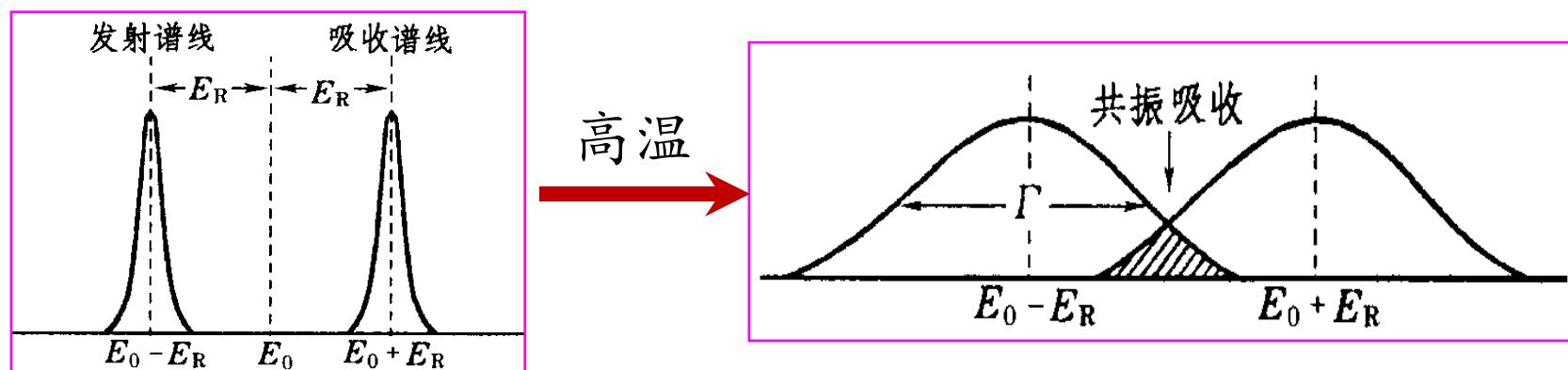
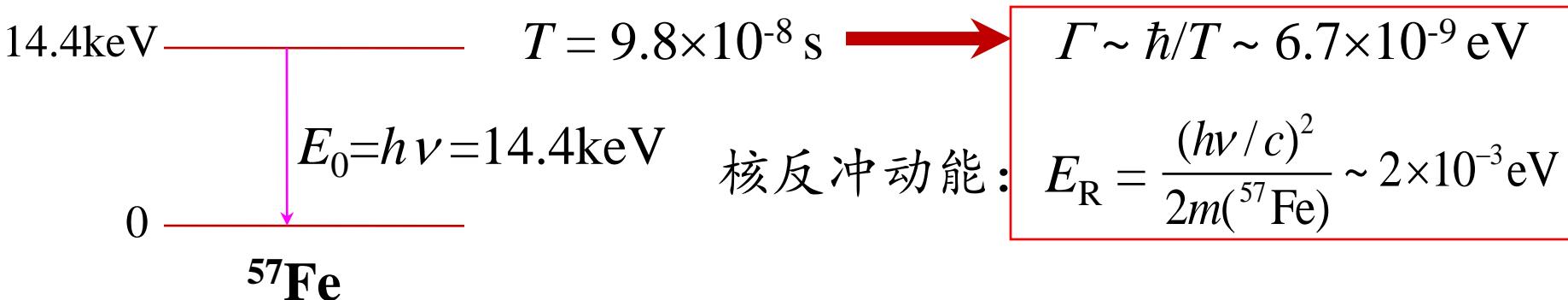
衰变方程:  ${}_{Z}^{A}X^* \rightarrow {}_{Z}^{A}X + (\gamma, e)$  (同质异能态)

- 辐射跃迁:  $\gamma$  (Isomer Transition)
- 非辐射跃迁:  $e$  (IC电子, 即内转换电子), 或,  $e^\pm$
- 一例:



# B4, $\gamma$ 衰变 ( $\gamma$ 跃迁)

Mössbauer效应：1957年发现，Nobel'61



- Mössbauer效应：原子固定于晶格点阵，光子动量被整个晶体吸收时 $E_R \sim 0$ 。测量精度 $\sim \Gamma/E_0 \sim 10^{-13}!$  (Pound等1960: 引力红移)

# B5, 放射性应用

## 示踪原子 射线检测 放射性年代学

例： $^{14}\text{C}$ 年代学。由于地球次级宇宙线与大气氮核反应不断产生 $^{14}\text{C}$ ，并且 $^{14}\text{C}$ 又不断衰变，



因此大气中 $\text{CO}_2$ 含有较稳定的 $N(^{14}\text{C})/N(^{12}\text{C})$ 数密度比。活体因新陈代谢致使体内 $N(^{14}\text{C})/N(^{12}\text{C})$ 与大气相同。活体死亡后 $^{14}\text{C}$ 数目衰减。设大气中 $N(^{14}\text{C})/N(^{12}\text{C}) = 10^{-12}$ ；若某文物中 $N(^{14}\text{C})/N(^{12}\text{C}) = x$ ，求此文物的年龄 $y$ 。

解：

$$\lambda = \ln 2 / T, \quad x = \frac{N_0(^{14}\text{C}) e^{-\lambda y}}{N_0(^{12}\text{C})} = 10^{-12} e^{-\lambda y}.$$

# 总 结

- A1, 中子发现与原子核组成
- A2, 原子核的大小
- A3, 原子核的比结合能
- A4, 原子核磁矩, 超精细结构
- B1, 放射性衰变基本规律
- B2,  $\alpha$ 衰变: **强**
- B3,  $\beta$ 衰变: **弱**
- B4,  $\gamma$ 衰变: **电**
- B5, 放射性应用

# 作业

- 1,**通常所说的核磁矩指的是什么？核磁矩有正有负，意味着什么？为什么氘核的磁矩不等于一个质子与一个中子磁矩之和？
- 2,**创生论者宣称世界是上帝在几千年前创造的，而科学家们则认为地球的年龄约 46 亿年。科学家说话是有根据的，他们的主要证据是什么？
- 3,** SU(5)大统一理论曾预言，质子可能会衰变，其平均寿命约为  $10^{31}$  年。若要测量到它的放射性（譬如在一年中测量到几次事件），至少要用多少吨水？
- 4,**计算 ${}^4\text{He}$ 、 ${}^{65}\text{Cu}$ 、 ${}^{226}\text{Ra}$ 的核半径。
- 5,**计算 ${}^{56}\text{Fe}$ 的比结合能，已知 ${}^{56}\text{Fe}$ 原子的质量为 55.934934 u.
- 6,**已知 Co 原子基态谱项为  ${}^4\text{F}_{9/2}$ , 又测得 ${}^{59}\text{Co}$ 原子基态分裂成 8 个超精细能级。试确定 ${}^{59}\text{Co}$ 核的自旋。
- 7,**计算一根香蕉每天释放大约多少个中微子。（香蕉钾含量高，一根约含 0.5g。 ${}^{40}\text{K}$ 天然丰度~0.01%，通过  $\beta^-$  或 K 俘获而衰变， $T_{1/2} \sim 1.2\text{Gy}$ ）

# 《原子物理学》

## 核反应与核模型

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

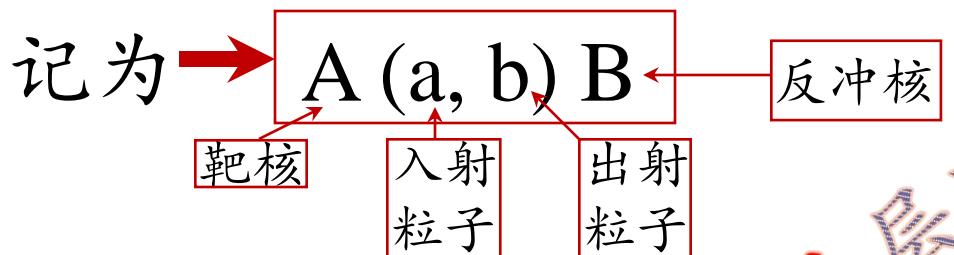
# A. 核反应

# 什么核反应?

- 因其它粒子作用而使原子核状态发生改变

核衰变:  $A \rightarrow B + C (+ D + \dots)$

核反应:  $A + a \rightarrow b + B (+ C + \dots)$



- 核反应两例:

第一次人工核反应(Rutherford):  $^{14}\text{N} (\alpha, p) ^{17}\text{O}$

第一次制放射性核(Curie夫妇):  $^{27}\text{Al} (\alpha, n) ^{30}\text{P}$

# A1, 反应能

反应过程中因质量亏损而释放的能量  $Q$

$$A(a, b)B: Q = (m_A + m_a - m_b - m_B) c^2$$

能量守恒要求  $(E_A + m_A c^2) + (E_a + m_a c^2) = (E_B + m_B c^2) + (E_b + m_b c^2)$

$$\Rightarrow Q = E_B + E_b - E_A - E_a$$

• 放能反应:  $Q > 0$

• 吸能反应:  $Q < 0$

例:  ${}^7\text{Li} + \text{p} \rightarrow 2 \alpha$

$$Q = [m({}^1\text{H}) + m({}^7\text{Li}) - 2 m({}^4\text{He})] c^2 = 17.35 \text{ MeV}$$

若入射质子动能为 0.5MeV

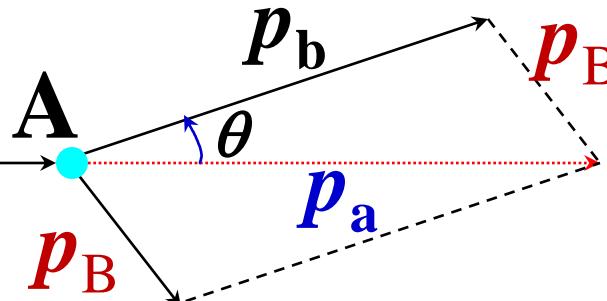
$\Rightarrow \alpha$  粒子的平均动能约为:  $(Q+0.5)/2 \sim 0.89 \text{ MeV}$

# A1, 反应能

Q方程：在 $m$ 未精确测定时如何得到 $Q$ 值？



$$p_a$$



$$Q = \frac{p_b^2}{2m_b} + \frac{p_B^2}{2m_B} - \frac{p_a^2}{2m_a}$$

$$\cos \theta = \frac{p_a^2 + p_b^2 - p_B^2}{2p_a p_b}$$

消去 $p_B \Rightarrow$

NR

$$E_a \quad E_b$$

$$Q = \left( \frac{m_a}{m_B} - 1 \right) \frac{p_a^2}{2m_a} + \left( \frac{m_b}{m_B} + 1 \right) \frac{p_b^2}{2m_b} - \frac{2\sqrt{m_a m_b E_a E_b}}{m_B} \cos \theta$$

$$\approx \left( \frac{A_a}{A_B} - 1 \right) E_a + \left( \frac{A_b}{A_B} + 1 \right) E_b - \frac{2\sqrt{A_a A_b E_a E_b}}{A_B} \cos \theta$$

# A1, 反应能

例：反应 ${}^6\text{Li} (\text{d}, \text{p}) {}^7\text{Li}$ , 当 $E_{\text{d}} = 1\text{MeV}$ 时，在 $\theta = 60^\circ$ 处测得质子能量有双值：5.44MeV和5.00MeV。试计算 ${}^7\text{Li}$ 核的能级差。

解：

$$Q_1 = \left(\frac{2}{7}-1\right)1 + \left(\frac{1}{7}+1\right)5.44 - \frac{2\sqrt{2 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 5.44}}{7} \cos 60^\circ = 5.03 \text{ (MeV)}$$

$$Q_2 = \dots = 4.55 \text{ (MeV)}$$

能级差为 $\Delta Q = Q_1 - Q_2 = 0.48 \text{ MeV}$

# A2, 反应截面

如何描述核反应发生的几率?

- 设薄靶，即“无遮掩”，靶核数 $N$ ，则时间 $dt$ 内发生核反应原子核数目 $dN$ 应该与入射粒子流量 $I$ 、靶核数 $N$ 正比

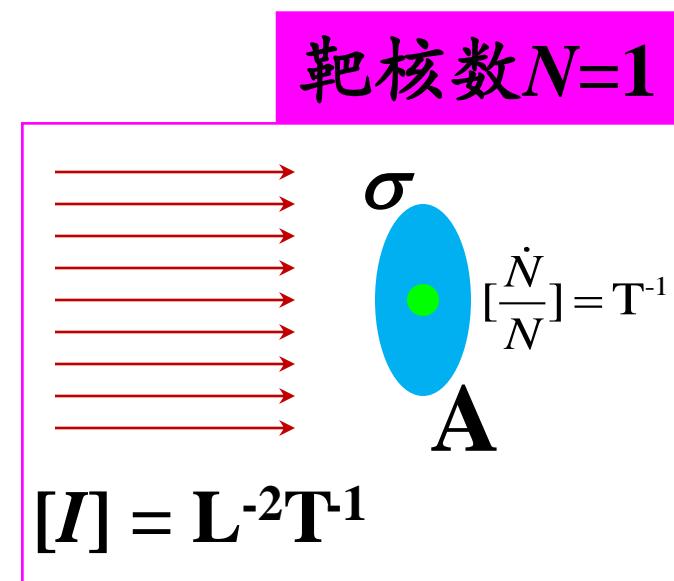
$$dN \propto -IN dt \quad \text{或写成} \quad dN = -\sigma IN dt$$

- $\sigma$ 的量纲：

$$[\sigma] = \frac{[dN/dt]}{[IN]} = \frac{T^{-1}}{T^{-1}L^{-2}} = L^2$$

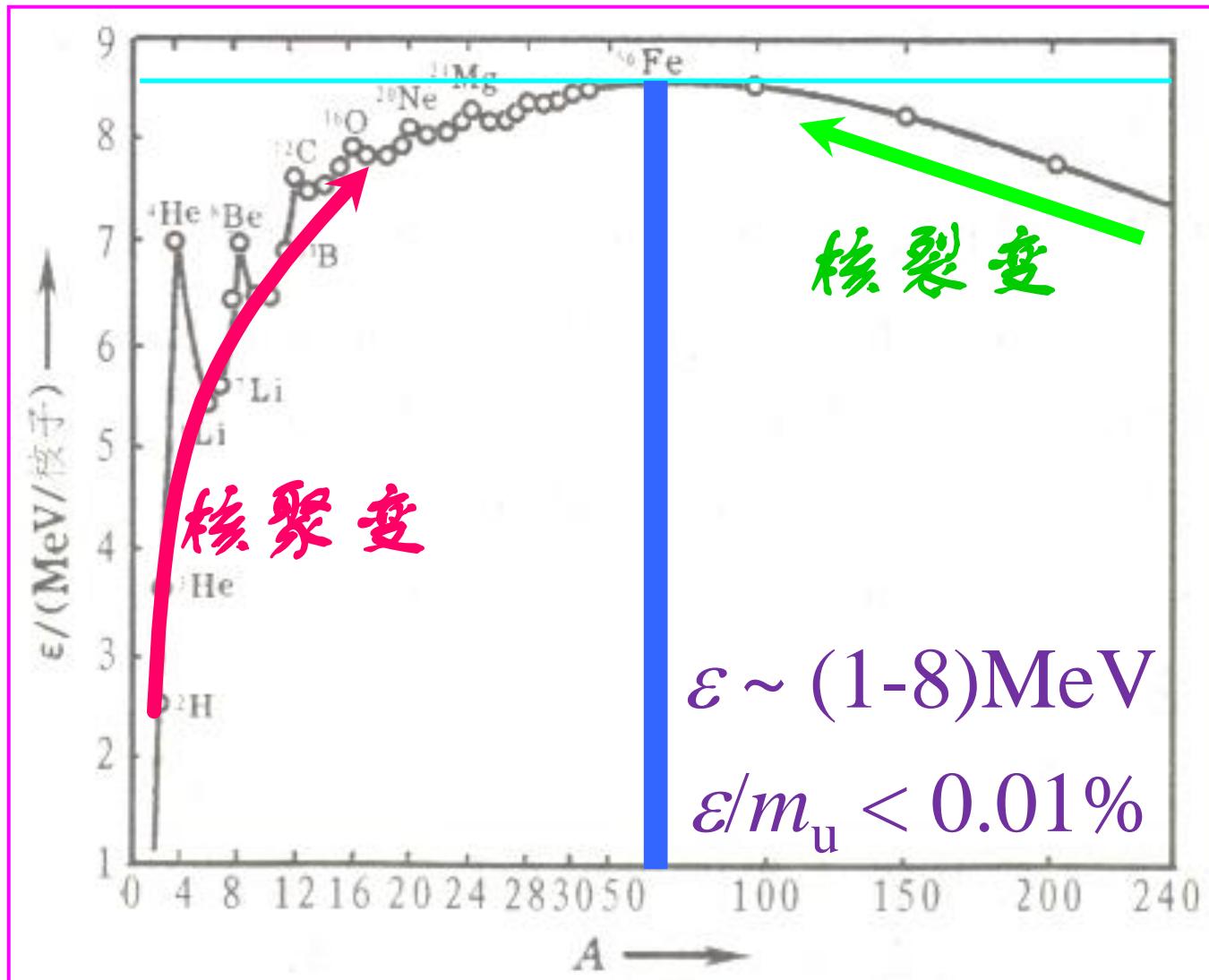
- $\sigma$ 与面积同量纲，称为**截面**；可以形象地认为入射至原子核附近该面元内的入射粒子发生了核反应。

- 单位：1 barn =  $10^{-24} \text{ cm}^2$



# A3, 核裂变与核聚变

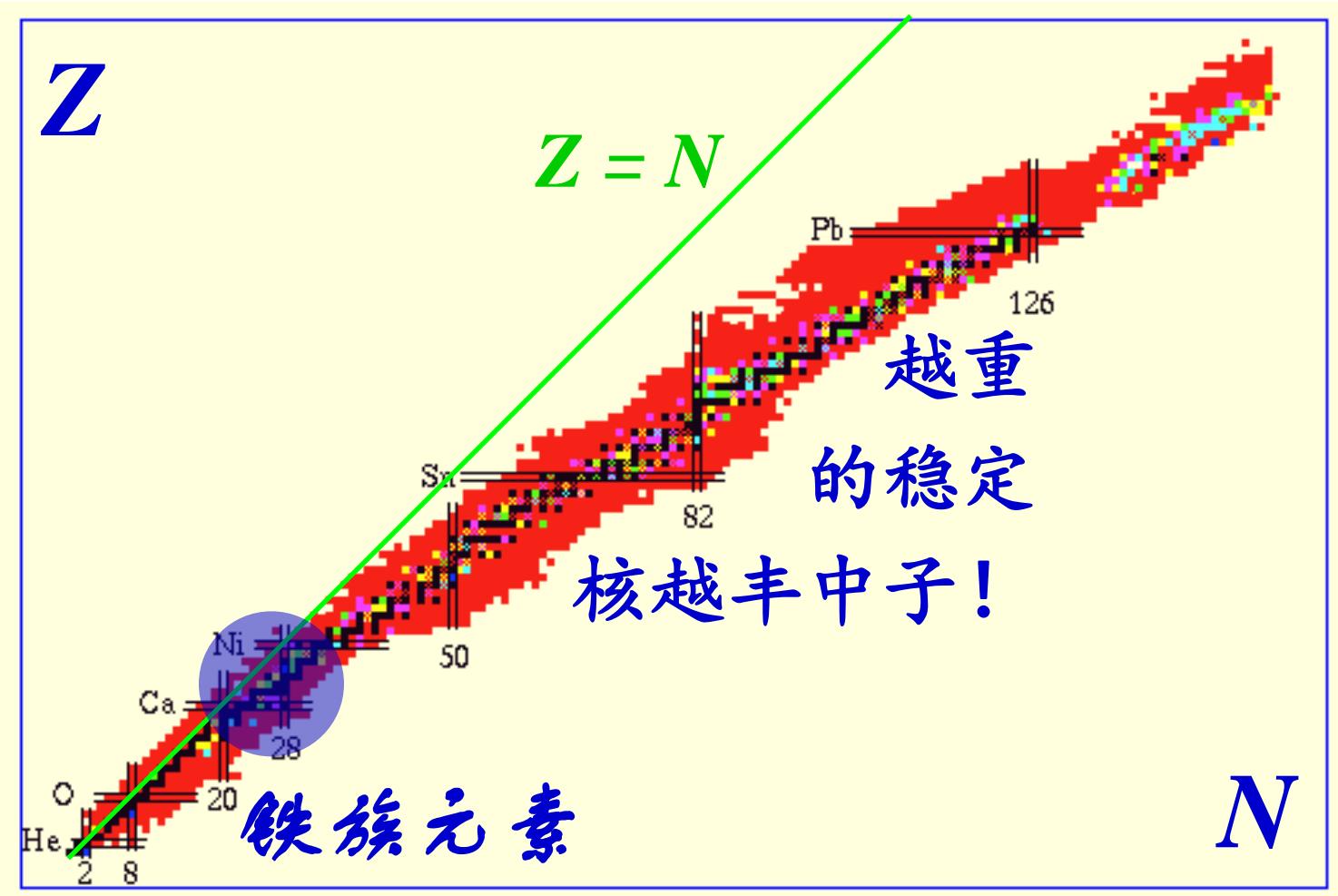
比结合能



# A3, 核裂变与核聚变

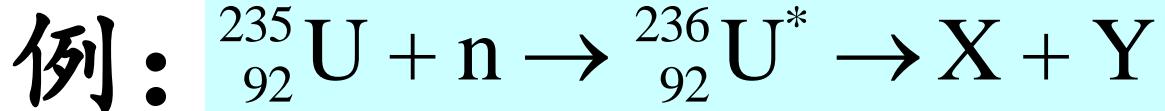
核素图, 裂变与聚变

## 核素图



# A3, 核裂变与核聚变

## 裂变机制与产物

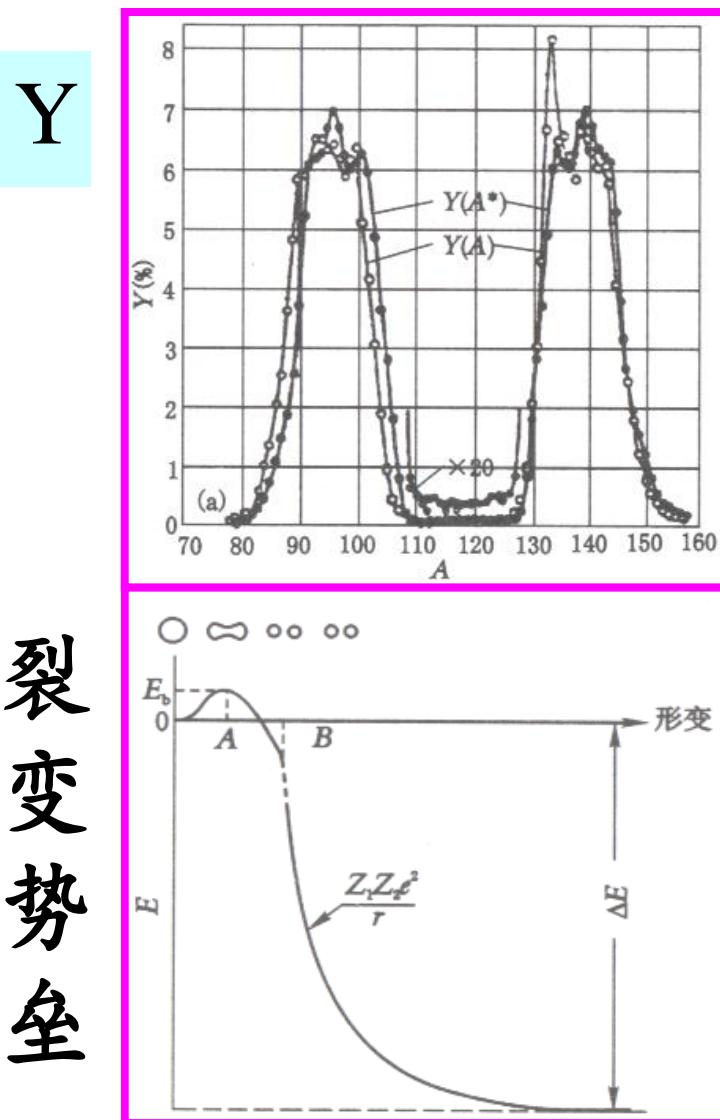


热  $n$  反应截面：

~ 582.2 barn

产物：

- 1, 两个中等质量核
- 2, 约2.5个中子
- 3, 放能210MeV



# A3, 核裂变与核聚变

- **自发裂变**: 因存在裂变势垒, 故几率较小; 如

$^{235}\text{U}$ ,  $T_{1/2} = 350 \text{ Gy}$

$^{238}\text{U}$ ,  $T_{1/2} = 1.01 \times 10^7 \text{ Gy}$

地球年龄  $\sim 4.6 \text{ Gy}$

$^{240}\text{Pu}$ ,  $T_{1/2} = 145 \text{ Gy}$

- (中子) **诱发裂变**: 因截面较大, 且产物中有中子, 故容易导致裂变过程持续发生

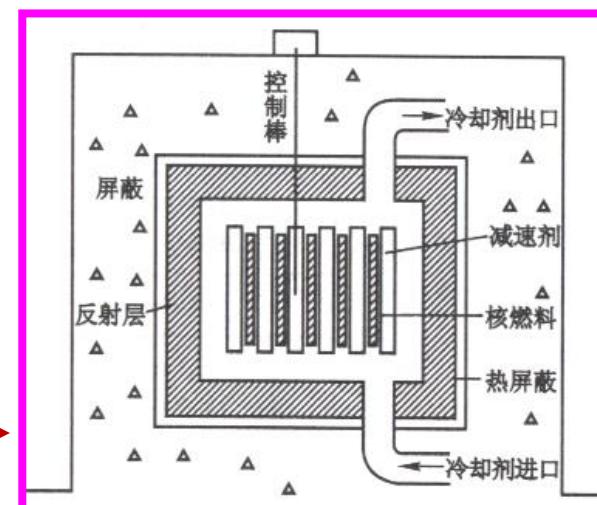
- **链式反应**: 利用裂变产物n使另一个核裂变

- **问题**: 产物n能量 $\sim \text{MeV}$ , 截面小

- **中子热化(慢化)**: 较轻核, 如H、D、 $^{12}\text{C}$

- **反应堆**: 可控链式反应

- **原子弹**: 不可控链式反应



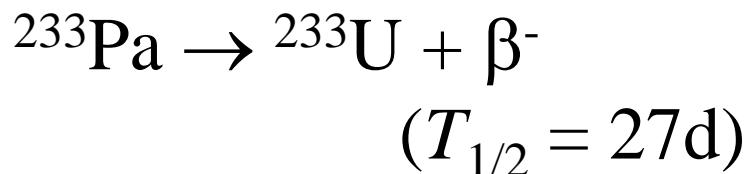
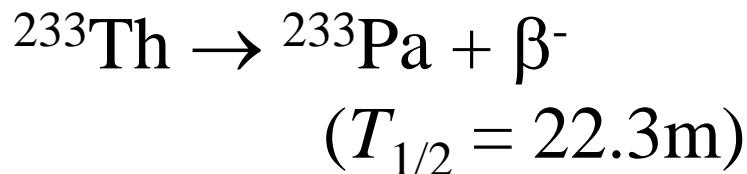
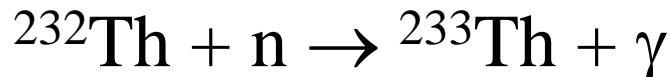
# A3, 核裂变与核聚变

## • 钚反应堆 (首个核电试验堆, 甘肃武威, 2021.9)

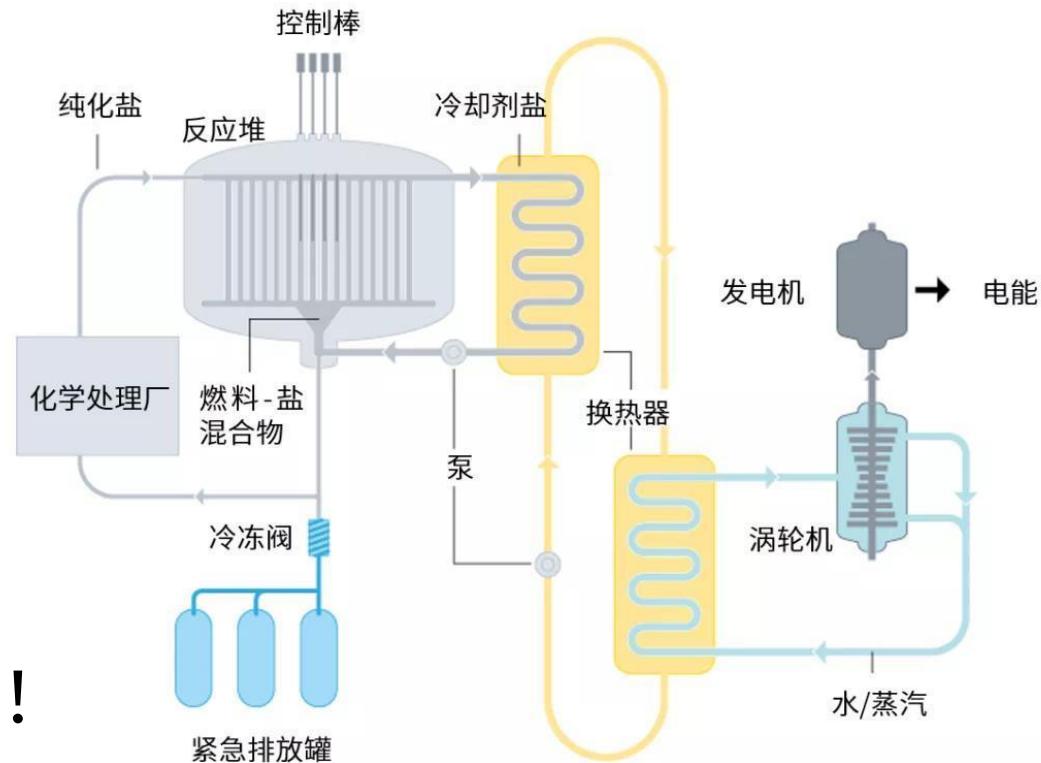
$^{235}\text{U}$ 占铀总量的0.71%，而 $^{238}\text{U}$ 占99.2%

$^{232}\text{Th}$ 丰度~100%， $T_{1/2} = 14 \text{ Gy}$

在熔盐核反应堆中，裂变材料被融在反应堆堆芯的液态盐中。液态盐还能代替水作为冷却剂。反应堆堆芯中发生裂变并产生热量，热量通过冷却剂盐和换热器传递给水，从而产生蒸汽。蒸汽再驱动涡轮机发电。如果反应堆堆芯过热，冷冻阀就会融化，使燃料和盐的混合物流入紧急排放罐。



相对安全和廉价的核电！



©nature

# A3, 核裂变与核聚变

## 聚变机制

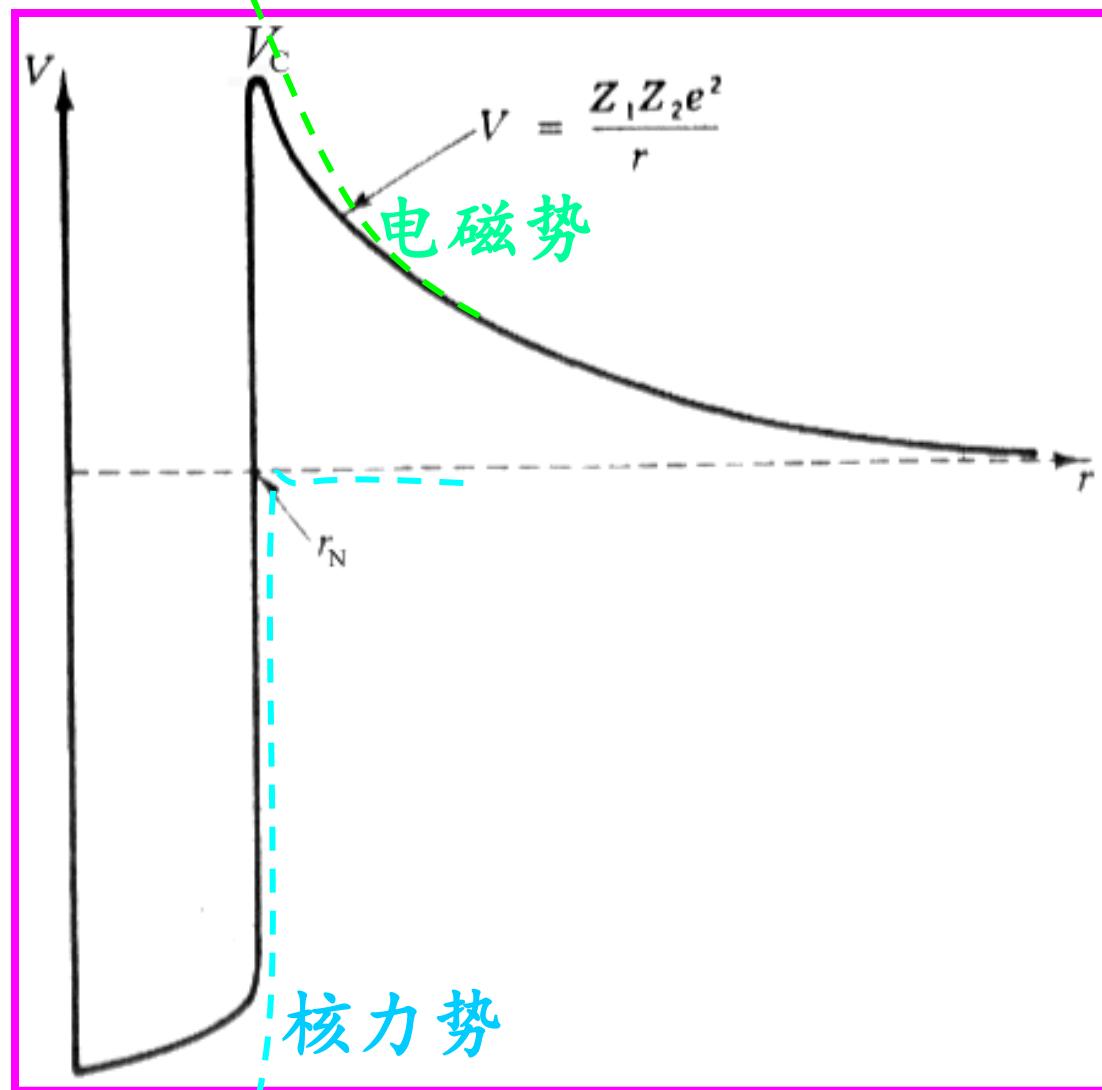


问题：

如何克服

Coulomb

势垒？



# A3, 核裂变与核聚变

若利用高温下原子核热运动穿透Coulomb势垒来实现核聚变，则称为热核反应。

**氢弹：**

利用原子弹产生高温而导致聚变

**恒星内部核合成：**

利用引力束缚恒星中心的高温

**万有引力能否帮助核聚变？**

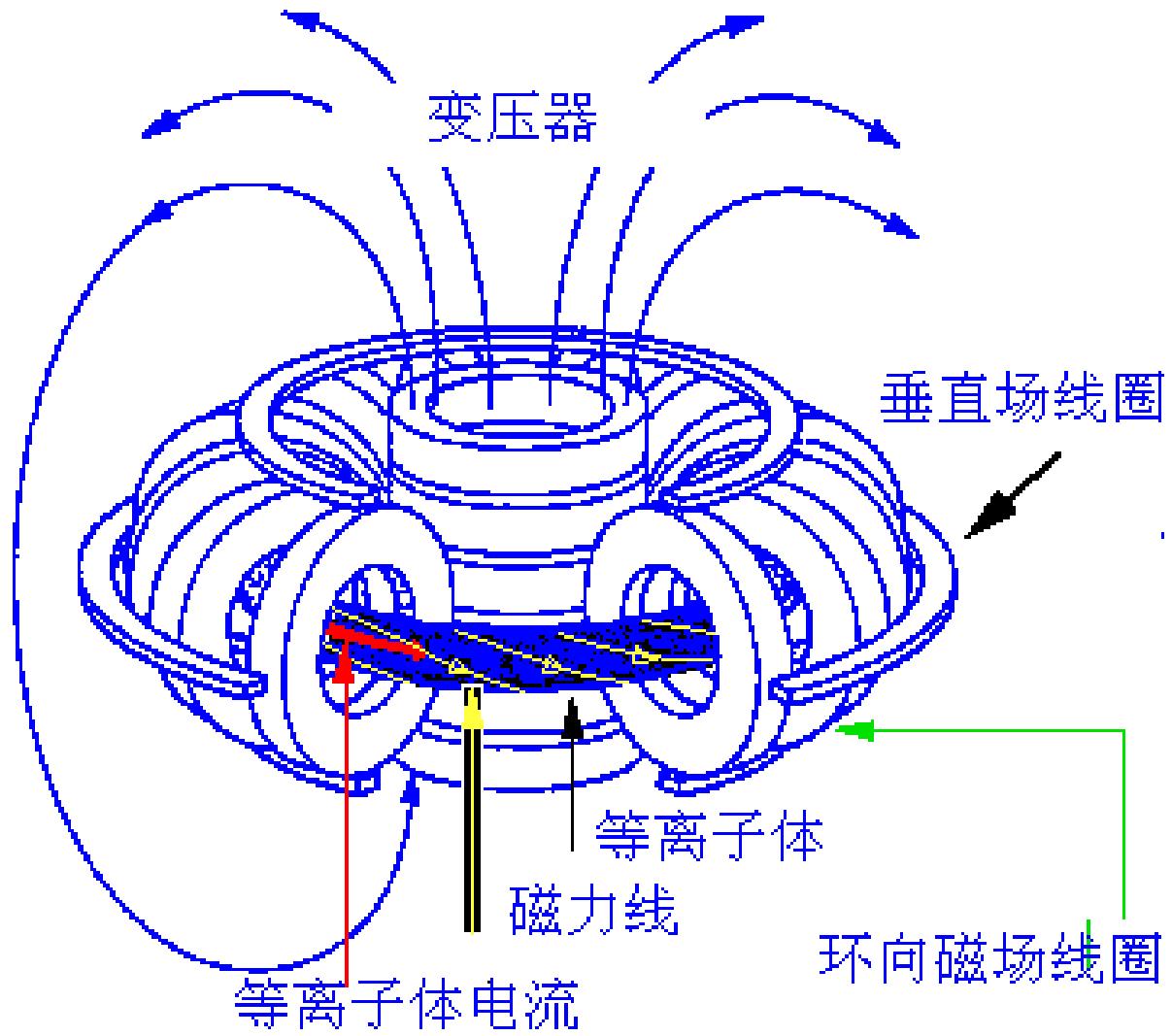
“巨大”原子核以至于引力不可忽略...

A3,

# 核裂变与核聚变

产生高温  
容易，问  
题是如何  
约束！

磁约束：  
Tokamak  
装置



# A3, 核裂变与核聚变

欧盟、中国、美国、日本、  
韩国、俄罗斯和印度七方

“国际热核聚变试验堆”计划

ITER(International Thermonuclear Energy Reactor)

联合建造一座总功率为500万千瓦的热核反应堆，项目总投资额  
>100亿欧元。

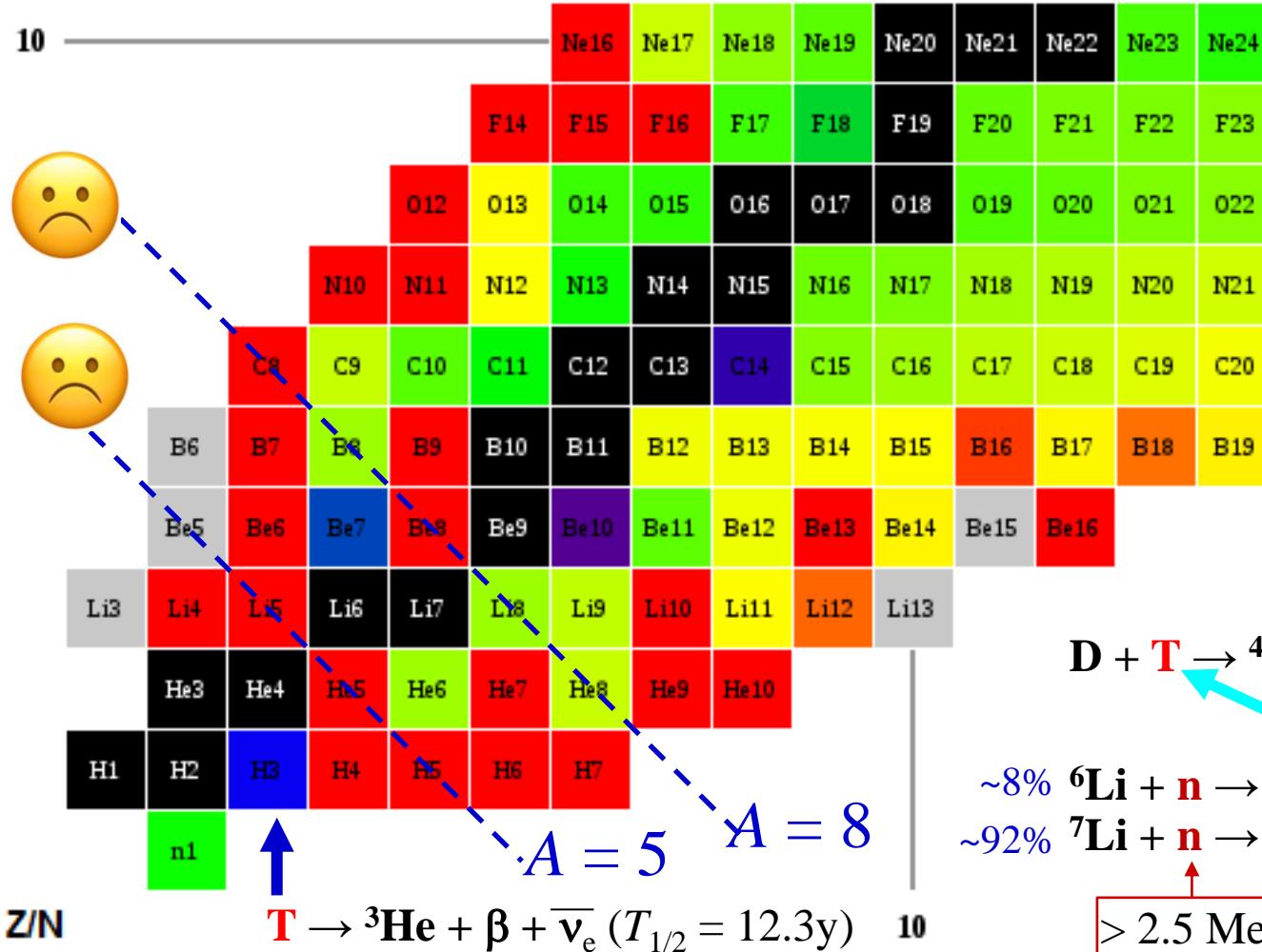
# A3, 核裂变与核聚变



• 实现人工核聚变ITER的反应过程：氘氚反应！

$\epsilon(D) \sim 1 \text{ MeV}$ ,  $\epsilon(^4\text{He}) \sim 7 \text{ MeV}$

ITER实验消耗的材料为D、Li。D在海水中非常丰富，其数目约占总氢元素的0.02%；且Li在地壳中较丰富。



$> 2.5 \text{ MeV}$

# B. 核结构模型

(相对原子而言更算不清啊：非微扰... $\alpha_s \sim 1$ )

# B1, 核力：短程、饱和、排斥芯 重核内所有核子之间都存在相互作用吗？

- 若核力为长程力，每个核子与所有其他核子作用。设任一对核子作用而释放能量 $\sigma$ ，则结合能 $B \sim (\sigma A)A$ （引力 $E_g \propto M^2$ ）
- 实验：结合能 $B \propto A$
- 原因：核力的短程性（饱和性）。

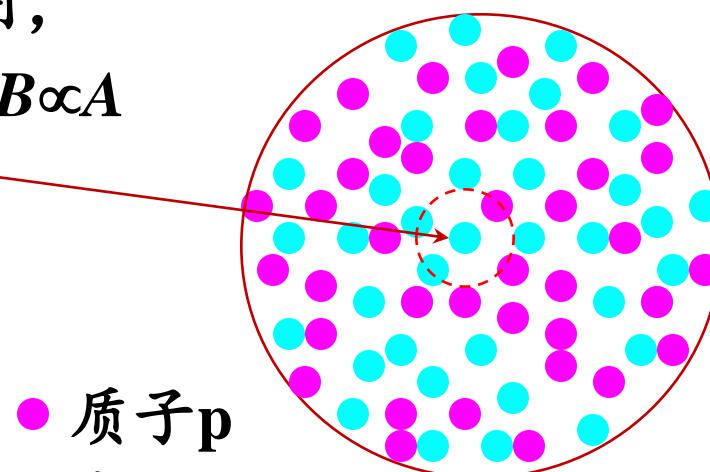
核子只与临近其他核子作用，

力程 $\sim 1\text{fm} \Rightarrow B \sim A$ ；实验： $B \propto A$

只与临近几个核子作用

- 排斥芯：

尽管长程吸引，  
但短程显著排斥！

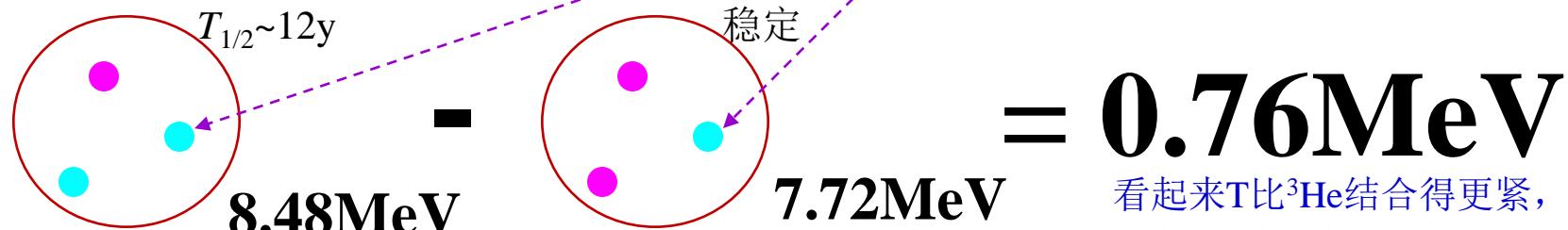


● 质子 p  
● 中子 n

# B1, 核力：电荷无关性

## 质子与中子的核力有区别吗？

- ${}^3\text{H}$ 与 ${}^3\text{He}$ 的结合能：



- p-p 库仑能： $\sim e^2/(2\text{fm}) \sim 0.72\text{ MeV} \sim 0.76\text{MeV}$

- 结论：核力不敏感地依赖于电荷，质子、中子的作用相近。

- 同位旋  $I$ ：质子和中子被看作一种粒子 → 核子

核子具有同位旋  $I = 1/2$ 。类似于自旋空间，核子在同位旋空间的第三方向分量  $I_3 = \pm 1/2$ 。 $I_3(\text{质子}) = 1/2$ ,  $I_3(\text{中子}) = -1/2$ 。

$$\boxed{\text{电荷 } Q = I_3 + 1/2}$$

この像は、湯川秀樹博士の同窓の親友である  
湯浅佑一氏の依頼により、同窓の友人、菊池  
一雄氏が、博士のノーベル賞受賞を記念して  
建てられた本館のために制作されたものであり、  
中間子論を形象化したものといわれる。



# B1, 核力：产生

## 汤川介子模型：

- 核力通过交换介子产生（类似电荷交换光子产生电磁作用）

$$\bullet \xleftrightarrow{\sim 2\text{fm}} \bullet \quad Mc^2 \sim \hbar c / (2\text{fm}) \sim 200m_e c^2$$

- 1935: 汤川预言 (Nobel'49) ; 介子：质量介于核子、e之间
- 1937:  $\mu$ (介)子,  $m_\mu = 207m_e$ ; 但不参与强作用, 故非汤川介子
- 1947: Powell发现 $\pi$ 介子 (Nobel'50) ,  $m_\pi \sim 300m_e$ ; 汤川介子

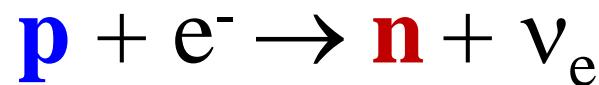
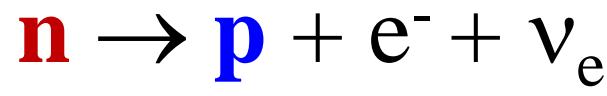
## 核力的夸克模型：作为色作用的剩余力

- 夸克之间通过色力而作用 (QCD)
- 类似于分子间Van de Waals力，核力也是剩余力

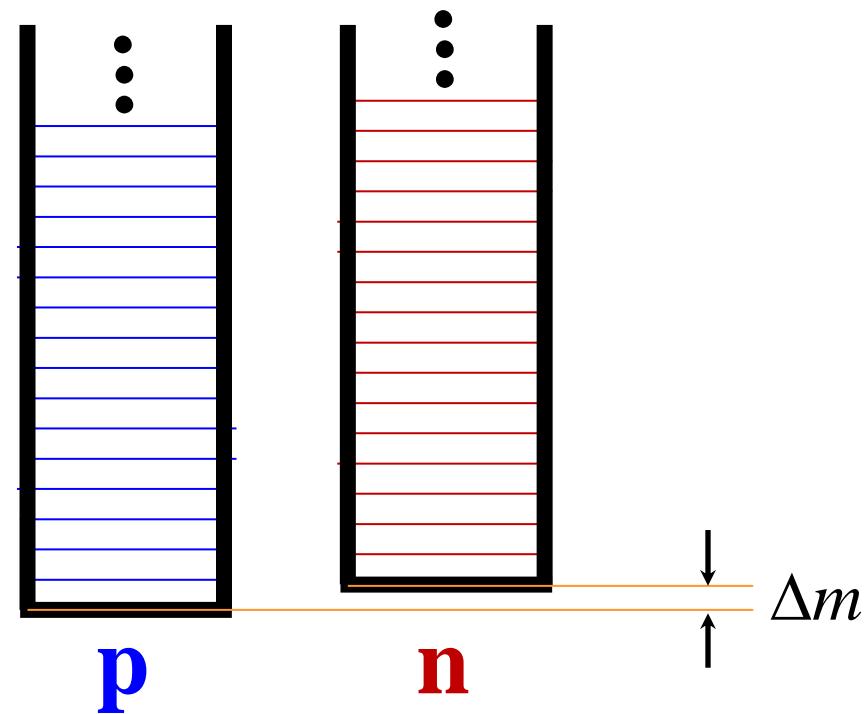
# B2, Fermi 气体模型

图象：核由自由核子（Fermi子）组成

根据：核子遵从Pauli原理，在核内的运动具有独立性



$$(\Delta m \equiv m_n - m_p \sim 1\text{MeV})$$



# B2, Fermi 气体模型

- 计算核子总动能 (非相对论情形下)

$\frac{1}{2}$ 自旋Fermion的Fermi能:  $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} \cdot n^{2/3}$

设:  $n_0 = n_n + n_p$ ;  $n_n = (N/A)n_0$ ,  $n_p = (Z/A)n_0$ ,  $N = A - Z$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{中子: } E_{Fn} = \varepsilon (2N/A)^{2/3} \\ \text{质子: } E_{Fp} = \varepsilon (2Z/A)^{2/3} \end{array} \right.$  其中:  $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} \cdot \left( \frac{n_0}{2} \right)^{2/3}$

→ 总动能:  $E_k = \frac{3}{5} (E_{Fn}N + E_{Fp}Z) = \frac{3}{5} \varepsilon \left( \frac{2}{A} \right)^{2/3} [(A-Z)^{5/3} + Z^{5/3}]$

$dE_k/dZ = 0 \Rightarrow Z = A/2$  即  $N = Z = A/2$  时原子核稳定

将  $E_k(Z)$  在  $Z = A/2$  处展开:

$$E_k(Z) = E_k\left(\frac{A}{2}\right) + \frac{1}{3} \varepsilon \frac{(N-Z)^2}{A} + \dots$$

真的吗?  
(尽管形式上像)  
液滴模型中对称能修正项

# B3, 液滴模型

图象：将原子核看作荷电液滴

根据：重核比结合能近似常数，相互作用是短程的、与液滴中分子结合能相似

比结合能唯象公式：Bethe-Weizsacker

$$B(Z, A) = B_{\text{体积}} + B_{\text{表面}} + B_{\text{库仑}} + B_{\text{对称}} + B_{\text{奇偶}}$$

经典液滴

量子修正

# B3, 液滴模型

对于重核，体积  $V \sim A \sim R^3$

{	体积能 $B_{\text{体积}} = a_{\text{体积}} A,$	多重的原子核 就可完全忽略 库仑能了？
	表面能 $B_{\text{表面}} = -a_{\text{表面}} A^{2/3},$	
	库仑能 $B_{\text{库仑}} = -a_{\text{库仑}} Z^2 A^{-1/3},$	
	对称能 $B_{\text{对称}} = -a_{\text{对称}} \left( \frac{A}{2} - Z \right)^2 / A = -a_{\text{对称}} \frac{(N-Z)^2}{4A},$	
}	奇偶能 $B_{\text{奇偶}} = a_{\text{奇偶}} \delta A^{-1/2}.$	

$$\delta = \begin{cases} +1 & \text{偶偶核,} \\ 0 & \text{奇 } A \text{ 核,} \\ -1 & \text{奇奇核。} \end{cases}$$

# B3, 液滴模型

五个经验常数通过重核比结合能实验数据拟合确定：

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{\text{体积}} = 15.835 \text{ MeV} = 0.017000 \text{ u}, \\ a_{\text{表面}} = 18.33 \text{ MeV} = 0.01968 \text{ u}, \\ a_{\text{库仑}} = 0.714 \text{ MeV} = 0.000767 \text{ u}, \\ a_{\text{对称}} = 92.80 \text{ MeV} = 0.09964 \text{ u}, \\ a_{\text{奇偶}} = 11.2 \text{ MeV} = 0.012 \text{ u}. \end{array} \right.$$

原子质量单位  $u = 931 \text{ MeV} = 1.66 \times 10^{-24} \text{ g}$

# B4, 壳层模型

动机：核子非自由，如何考慮其作用？

需要：为何存在幻数？

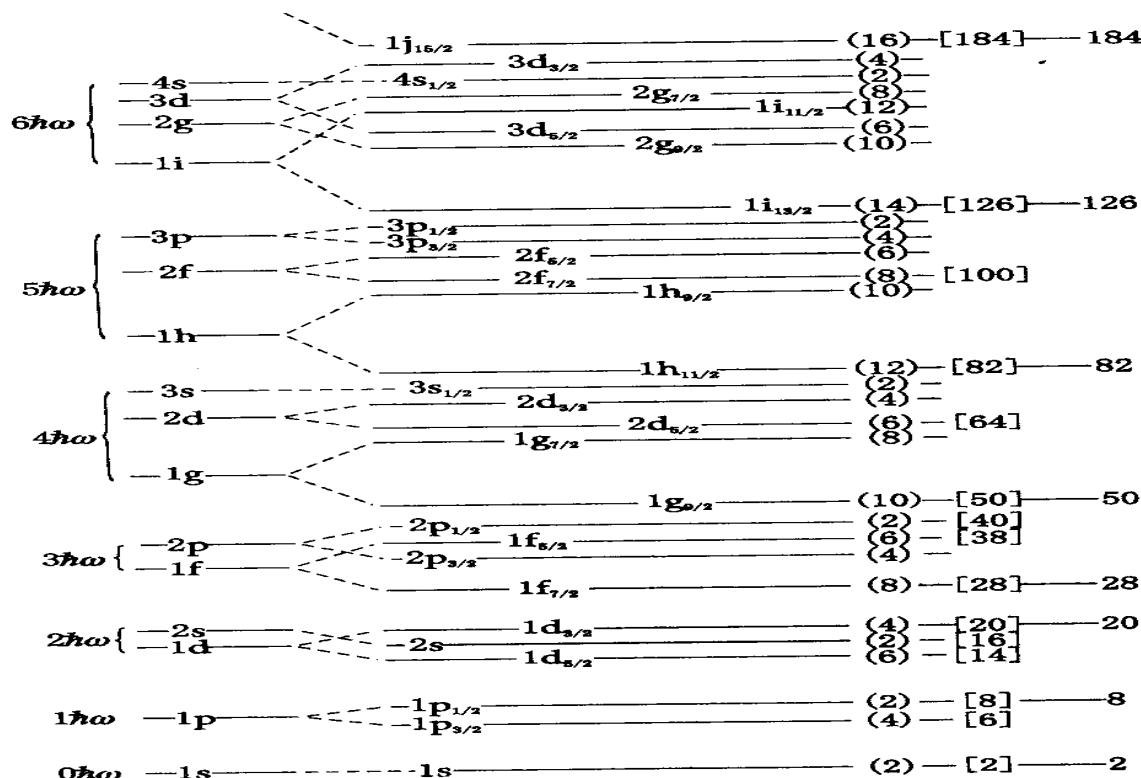
质子幻数： $Z = 2, 8, 20, 28, 50, 82.$

中子幻数： $N = 2, 8, 20, 28, 50, \mathbf{82}, \mathbf{126}.$

# B4, 壳层模型

- 平均场近似（只有2、8、20）

- LS耦合！耦合常数 $>>1/137$



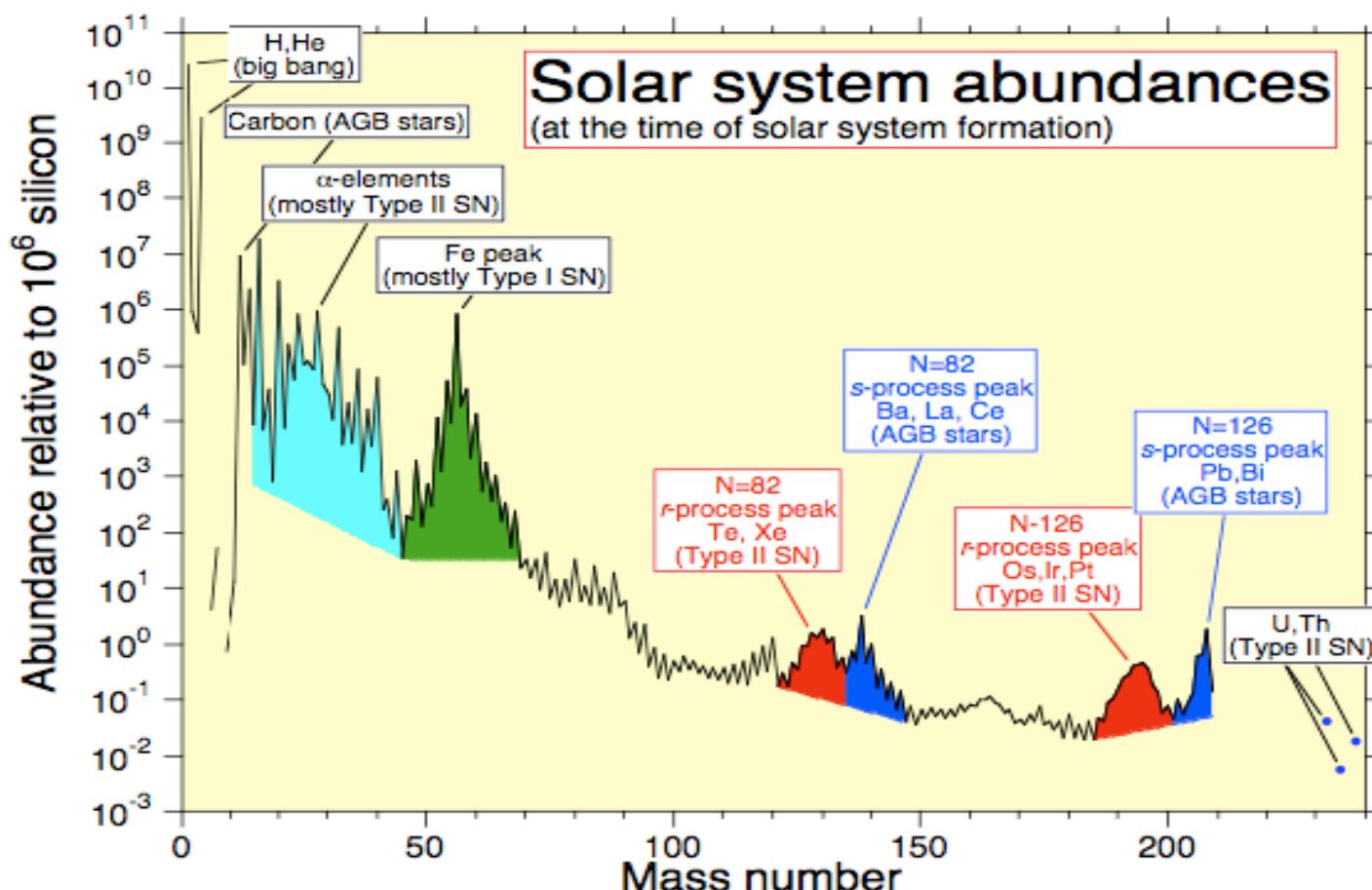
Maria Goeppert Mayer and J. Hans D. Jensen “*for their discoveries concerning nuclear shell structure*”

--- The Nobel Prize in Physics 1963

# B4, 壳层模型

- 中子幻数与元素丰度：**r**过程与**s**过程

## *Cosmic Abundances*



# 总 结

- A1, 反应能
- A2, 反应截面
- A3, 核裂变与核聚变
- B1, 核力
- B2, Fermi 气体模型
- B3, 液滴模型
- B4, 壳层模型

# 作业

1, 由液滴模型结合能的唯象公式论证：大多数稳定核的质量数  $A$  与电荷数  $Z$  满足如下关系：

$$Z = \frac{A}{2 + 0.015A^{2/3}}$$

用此公式在  $Z - N$  图上作一曲线，与图 5 - 14 中实际的核素分布比较。

2, 试计算下列核反应的反应能：



有关核素的质量，可查阅附录C.

3,  ${}^{69}\text{Zn}$  核处于能量为 436 keV 的激发态可放出 K 层内转换电子回到基态，求这时核的反冲能。已知 K 层电子的结合能为 9.7 keV.

4, 用动能为 50 MeV 的质子轰击  ${}^9\text{Be}$  靶，观察到有中子出射。在与入射束流相同的方向上出射中子的最大动能为 48.1 MeV.

(1) 写出核反应方程式；

(2) 利用  $Q$  方程计算在与入射束流成  $30^\circ$  角的方向上中子的最大动能。

5, 1987 年 2 月南天超新星爆发时地面记录到的中微子能量范围为 10~40 MeV, 时间区间约 2s, 假设这些中微子是在这颗超新星爆发时同时辐射出来的，运行了大约 17 万光年后到达地球。试以此估计中微子质量的上限。

6, 自由中子的半衰期约 10 分钟。为何原子核中的中子不衰变？（没人知道正确答案，但每个人都可以有自己的答案！）

# 《原子物理学》

## 核素起源：核合成

---

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

# 问题：各种核素是如何起源的？

- 宇宙早期核合成 → 轻元素：H、He
- 恒星相关核合成 → 重元素

# 对称与不对称 宇宙的热力学演化与早期核合成

对称展示宇宙之美，不对称生成

宇宙之实

•**Planck时期：时空起源**

在探索宇宙的征途中，对称而不

对称直指构成自然界的基  
本规律，成为指引人类探索大自

然的灯塔。我们发现描述自然界  
的理论和方程大多是对称的，而自然

界的现实存在却是不对称的。例如，  
大爆炸中，由于生成的正物质和反物质

的不对称才会构成现在的宇宙世界。  
“求学问，需学问，只学答，非学问。”科普

就是请科学家用深入浅出的方式，向公  
众讲述科学的道理，激发公众对科学

的兴趣，启发对自然界各类现象的探索，  
提出各种深刻的问题，因而提高国民

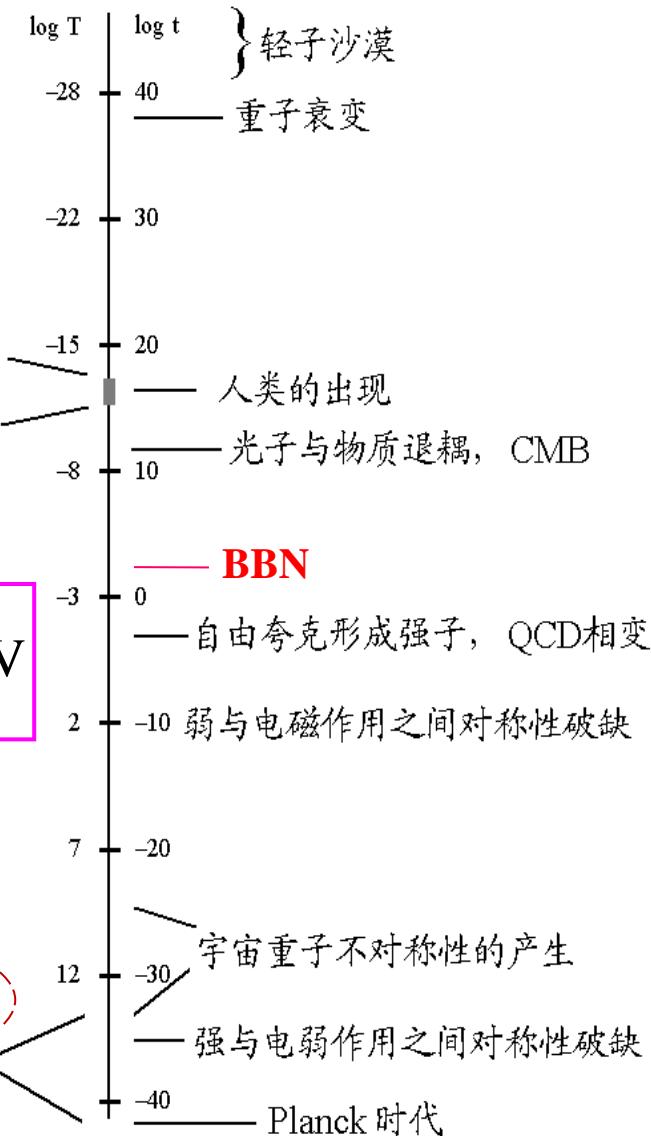
对科学的素质和修养，建立科技强国  
之本。

“有生于无”

李政道

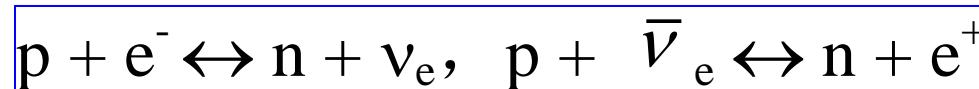
2020年八月

$$T \approx \frac{10^{10}}{\sqrt{t/s}} \text{ K} \approx \frac{1}{\sqrt{t}} \text{ MeV}$$

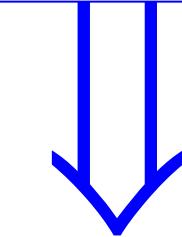


# 宇宙的热力学演化与早期核合成

弱作用化学平衡：



$$\frac{n_n}{n_p} = \exp[-\Delta m/(kT)]$$



如何置 BBN  
之初条件？

$$\frac{n_n}{n_p} \sim \frac{1}{6}$$

$T \sim 1 \text{ MeV}$  ( $t \sim 1 \text{ s}$ ) 时：  
弱作用率 ~ 膨胀率



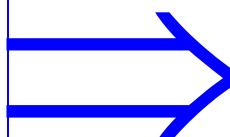
平衡被破坏

# 宇宙的热力学演化与早期核合成

D (结合能2.23MeV) 的合成:

1, 温度

2, 重子-光子数比  $\eta$



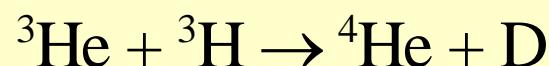
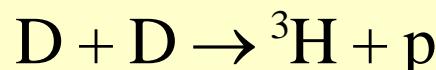
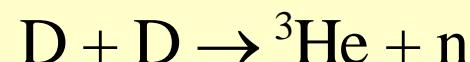
$$T_D \sim 0.1 \text{ MeV}$$

( $t \sim 100 \text{ s}$ )

考虑到中子的衰变  $\rightarrow n_n/n_p \sim 1/7$

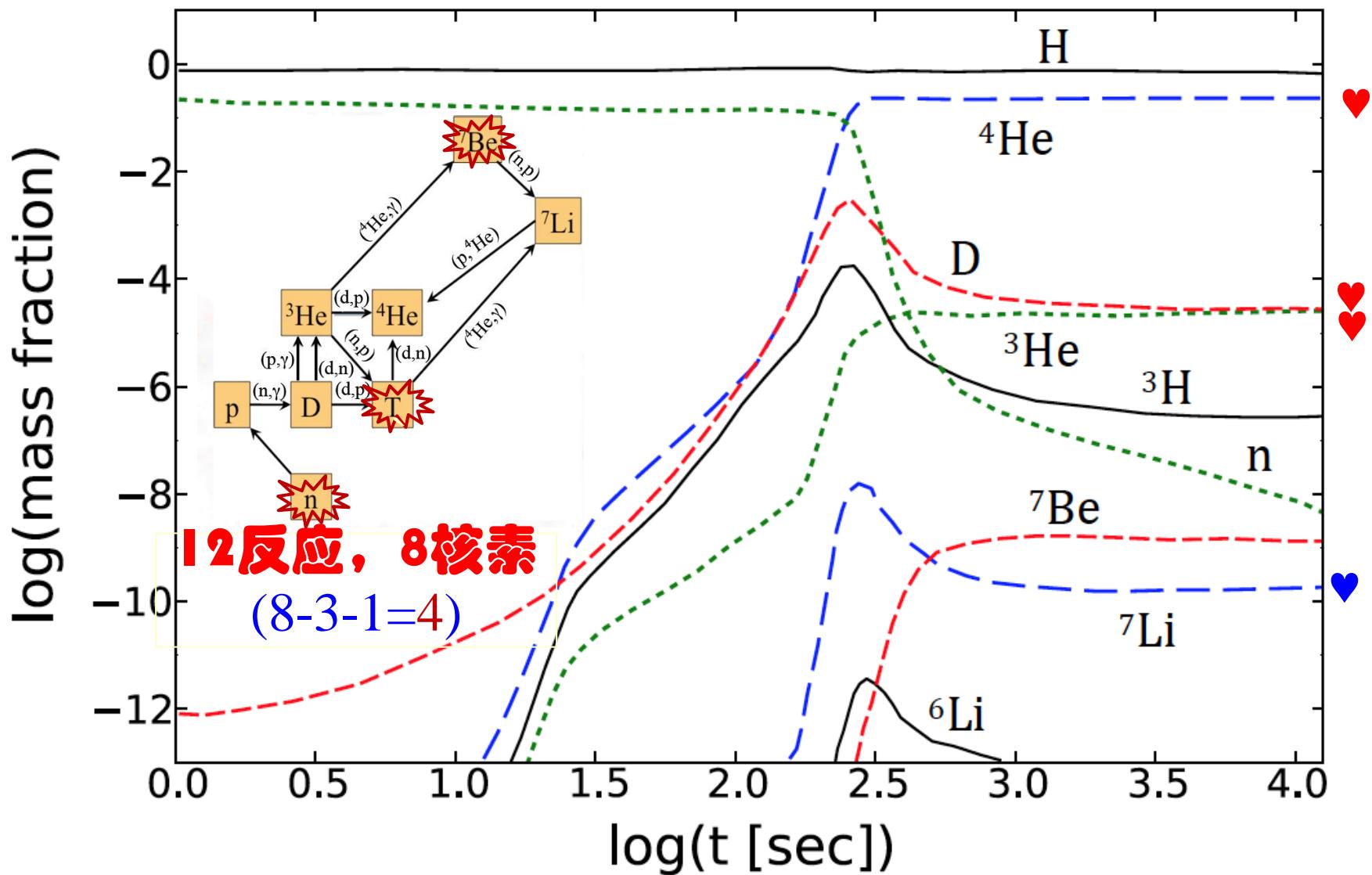
# 宇宙的热力学演化与早期核合成

一旦合成D，即能迅速合成 ${}^4\text{He}$ :



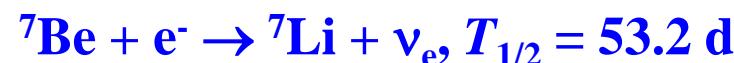
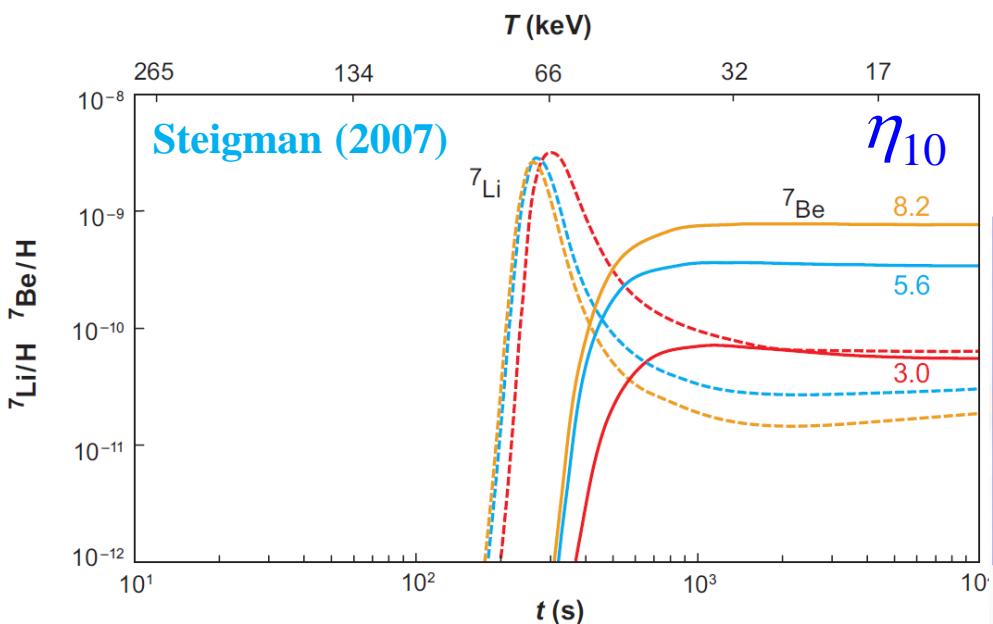
$$Y = \frac{2n_{\text{n}}}{n_{\text{n}} + n_{\text{p}}} = \frac{2(n_{\text{n}} / n_{\text{p}})}{1 + (n_{\text{n}} / n_{\text{p}})} \approx \frac{1}{4}$$

# 宇宙的热力学演化与早期核合成



# 宇宙的热力学演化与早期核合成

- “锂谜” (*Li-Problem*)



$$\eta_{10} = 6.1 \pm 0.04$$

	BBN	Observation
${}^4\text{He}/\text{H}$	0.246	$0.247 \pm 0.0005$
D/H (x 10 <sup>-5</sup> )	2.7	$2.414 \pm 0.047$
${}^3\text{He}/\text{H}$ (x 10 <sup>-5</sup> )	0.98	$1.110 \pm 0.022$
${}^7\text{Li}/\text{H}$ (x 10 <sup>-10</sup> )	4.41	$1.23 + 0.68 - 0.32$

C.A. Bertulani, PKU, Beijing, January 4, 2018

BBN完美，但并非无瑕

# 与恒星相关的核合成

## 恒星为何发光？

➤ 引力能？以太阳为例：

$$E_g \sim GM^2/R \sim 4 \times 10^{48} \text{ erg}, \text{ K-H时标: } t_k \sim E_g/L \sim 3 \times 10^7 \text{ 年}$$

➤ 核能？

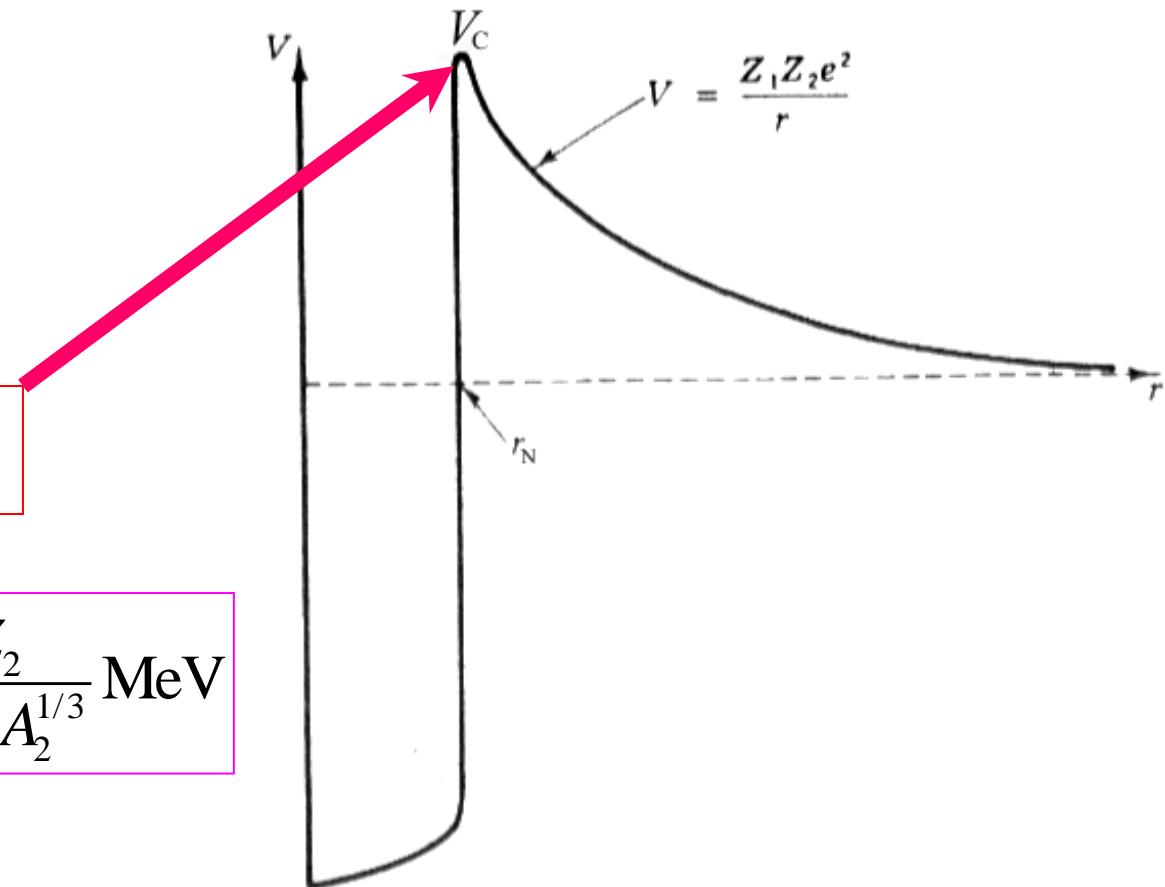


太阳每秒有  $N \sim L/\varepsilon \sim 3.6 \times 10^{38}$  个氢核发生聚变

太阳氢核聚变产能的时标为  $\sim M/(m_p N) \sim 10^{11}$  年

# 与恒星相关的核合成

恒星内部能进行核反应吗？



# 与恒星相关的核合成

恒星中心温度:  $T \sim 10^7 \text{K} \Rightarrow$  核动能  $kT \sim 1 \text{keV} \ll V_c$

如果认为只有能量高于  $V_c$  的粒子才能碰撞后聚变, 太阳每秒核反应的粒子数目远远不够!

热核燃烧也不能提供太阳发光?

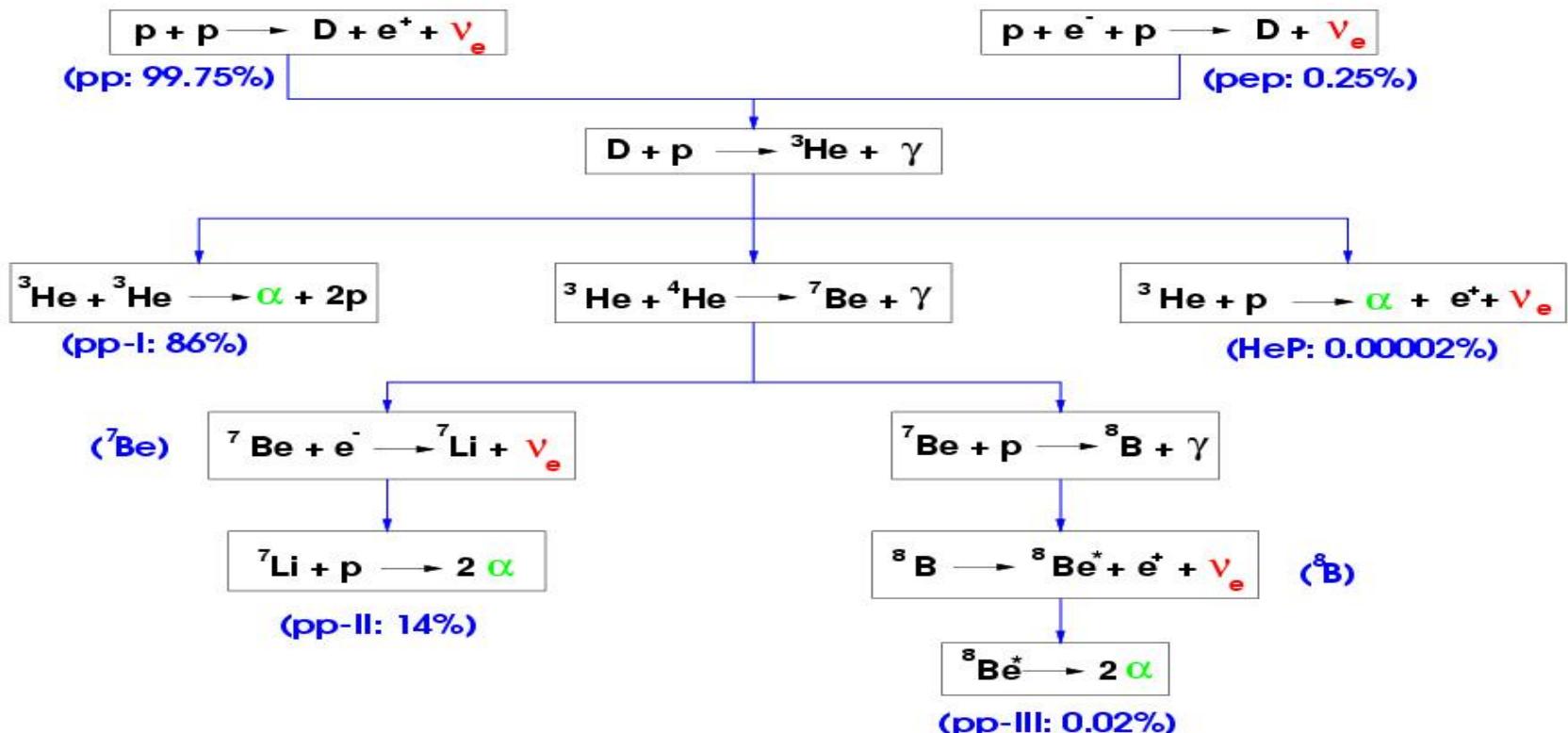
解决之道: 量子隧穿效应!

如果不考虑量子效应, 我们甚至不能理会太阳为什么发光。

# 与恒星相关的核合成

比铁轻元素的核合成过程

➤ 氢燃烧：pp链（和CNO循环）



# 与恒星相关的核合成

- 氢燃烧： $3\alpha$ 反应 ( ${}^4\text{He} \rightarrow {}^8\text{Be} (\sim 10^{-16}\text{s}) \rightarrow {}^{12}\text{C}^*$ )
- 更高级的核反应：质量越大燃烧越充分。
- 例：初始25倍太阳质量的恒星核燃烧过程

燃烧阶段	H	He	C	Ne	O	Si
时标	$7 \times 10^6 \text{y}$	$5 \times 10^5 \text{y}$	600y	1y	6月	1d
中心密度( $\text{g/cm}^3$ )	50	$7 \times 10^2$	$2 \times 10^5$	$4 \times 10^6$	$1 \times 10^7$	$3 \times 10^7$
中心温度( $10^9 \text{K}$ )	0.06	0.23	0.93	1.7	2.3	4.1
释放核能比例	~90%			~ 10%		

# 与恒星相关的核合成

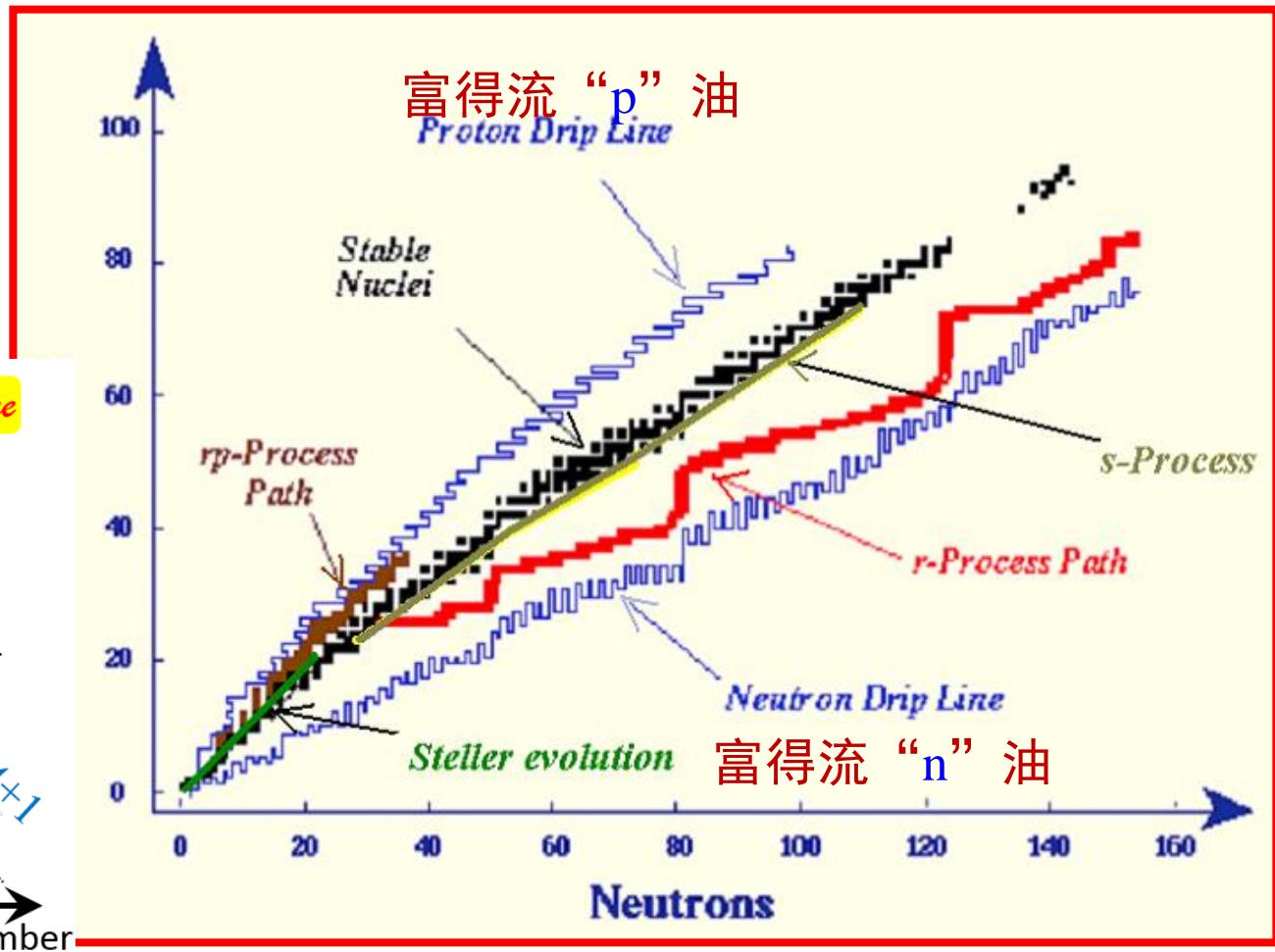
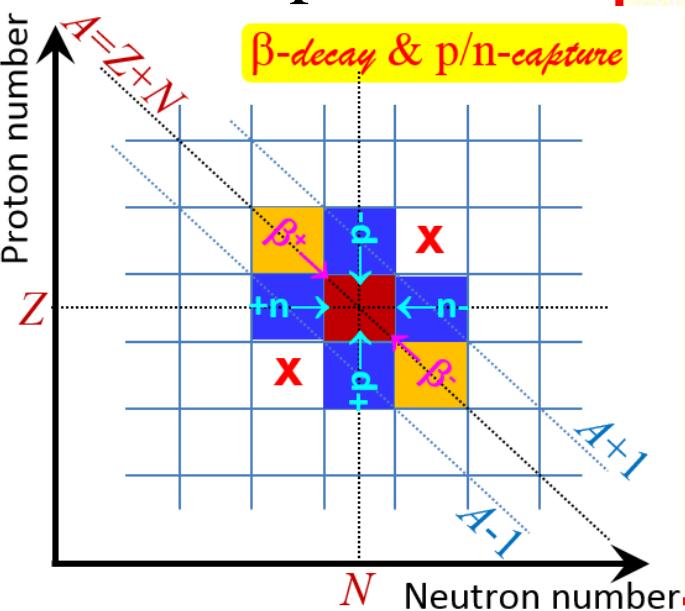
## 比铁重元素的核合成过程

➤ 中子俘获:

S、r过程

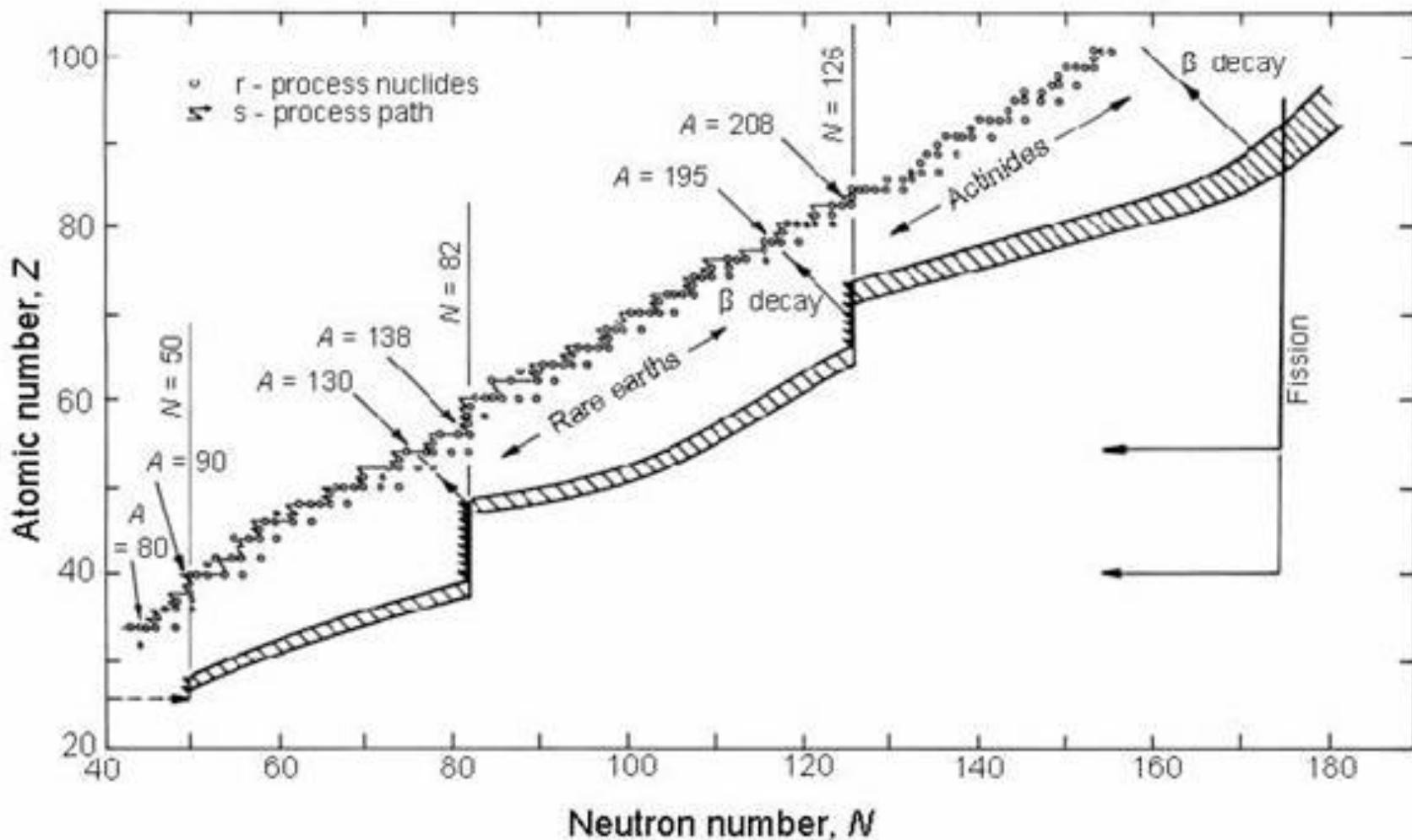
➤ 质子俘获:

p过程



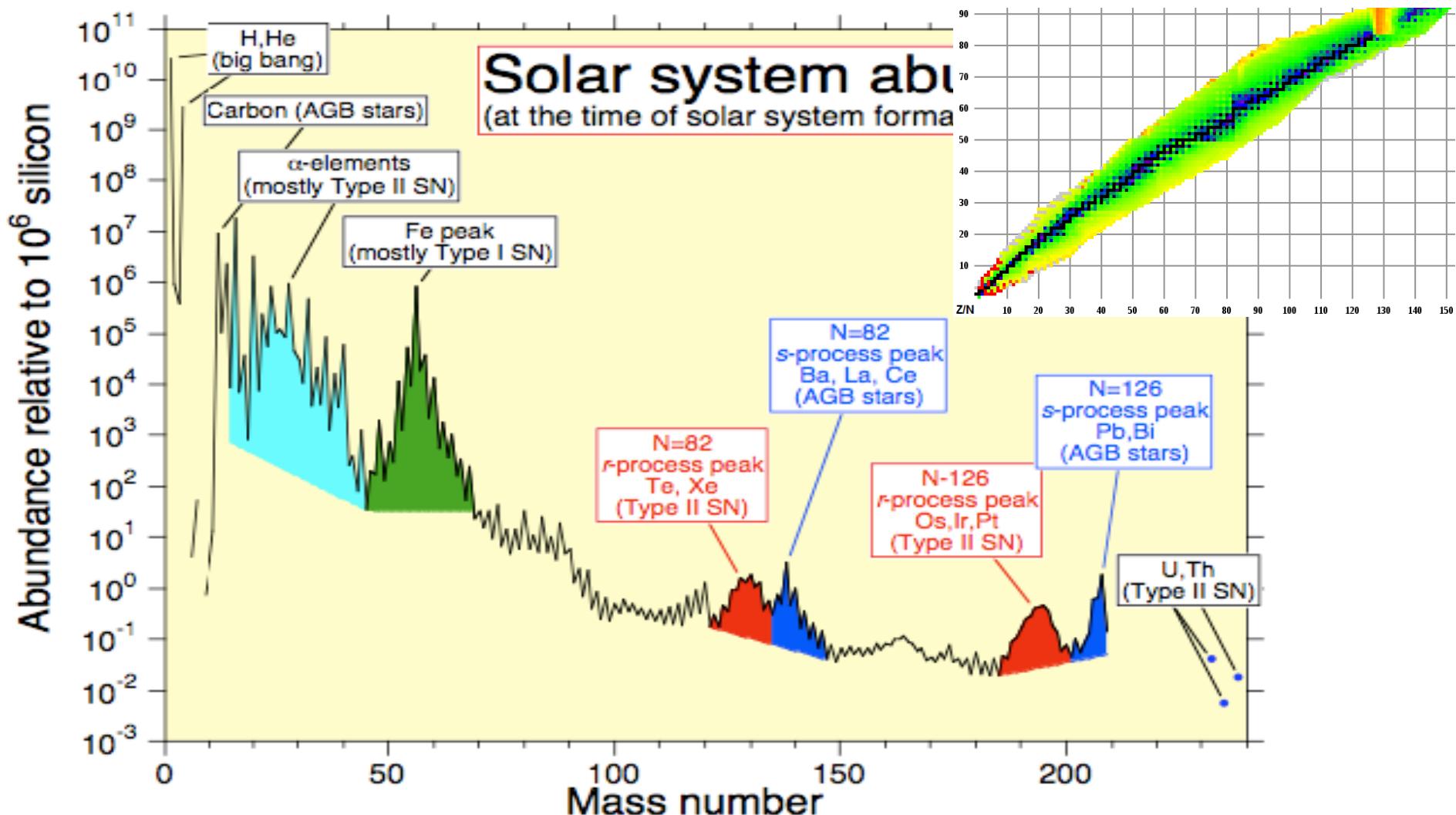
# 与恒星相关的核合成

- 中子幻数与元素丰度：**r**过程与**s**过程



# 与恒星相关的核合成

- 中子幻数与元素丰度：**r**过程与**s**过程



# 总 结

核素起源问题是一个纯粹的物理学问题。

- 重子对称状态的轻度偏离  
→ 重子起源
- 强子化 → p、n
- 早期核合成 → He、H
- 恒星相关核合成过程 → 重元素

# 作 业

- 1, 为何早期宇宙不能核合成C及比C更重的核?  
(提示: 不存在稳定质量数为8或5的原子核)
- 2, 人体内部的某些微量元素 (如I、Zn、Se) 对人的生理过程起重要作用。试问它们是如何产生的? 原则上我们应该感谢这些物理过程。
- 3, 深海<sup>60</sup>Fe同位素分析 (Wallner et al. 2016, Nature, 532, 69) 显示: 过去一千万年内距离太阳系100pc的范围内曾经发生过多起超新星事件并贡献地球深海的<sup>60</sup>Fe丰度。自己查阅文献, 估计离太阳100pc范围内发生超新星爆发的频次。

# 《原子物理学》

## 奇异数与强子分类

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

# 什么是构成宇宙的基本砖块？

- 1930年代的基本粒子：e、p、n、 $\gamma$ 、 $\nu$
- 1935/1937/1947：新增 $\mu/\pi$ （汤川）  
“for his prediction of the  
existence of mesons on the  
basis of theoretical work on  
nuclear forces” (1949)
- 1947年：发现奇异粒子
- 上世纪粒子物理标准模型的建立：  
基本费米子 ( $l, q$ ) 及传递其间作用规范玻色子
- 暗物质与暗能量？

$$\Omega_B \approx 0.04, \Omega_{DM} \approx 0.26, \Omega_\Lambda \approx 0.70$$

奇异粒子的发现是认识基本砖块的 关键！

# 1, 奇异粒子的发现

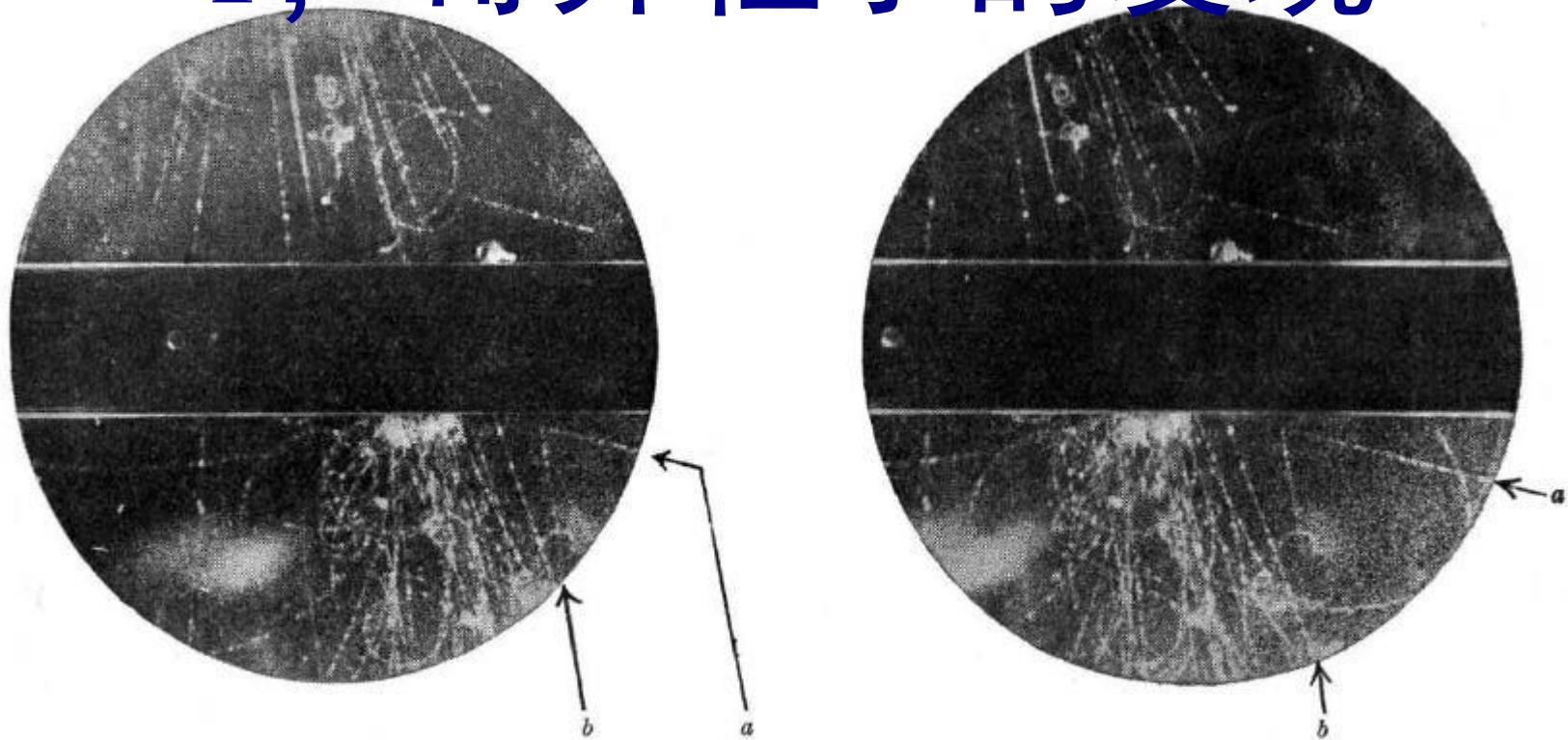


Fig. 1. STEREOGRAPHIC PHOTOGRAPHS SHOWING AN UNUSUAL FORK (*a* *b*) IN THE GAS. THE DIRECTION OF THE MAGNETIC FIELD IS SUCH THAT A POSITIVE PARTICLE COMING DOWNWARDS IS DEVIATED IN AN ANTICLOCKWISE DIRECTION

© 1947 Nature Publishing Group

奇异星的来龙去脉

“想必Rochester和Butler当年毫无意识到，他们的发现会敲开亚核子世界的大门、引起对基本粒子认识的飞跃！2019年Nature杂志收集了“10 extraordinary papers”，文献[8]作为高能物理领域的代表而被列入。”

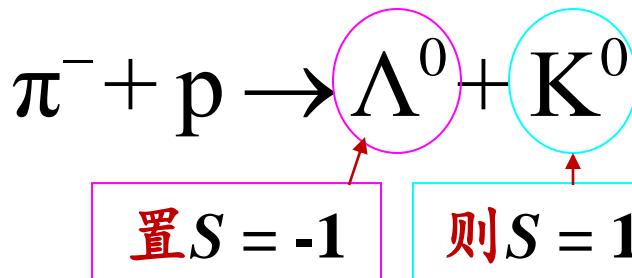
# 1, 奇异粒子的发现

Rochester & Butler (1947) 于宇宙线中发现

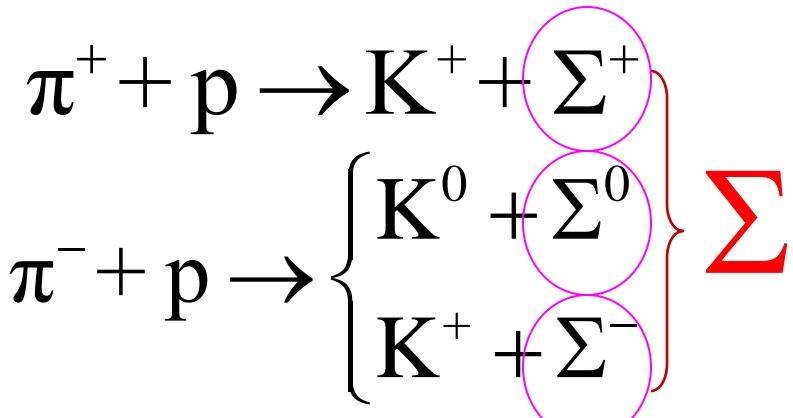
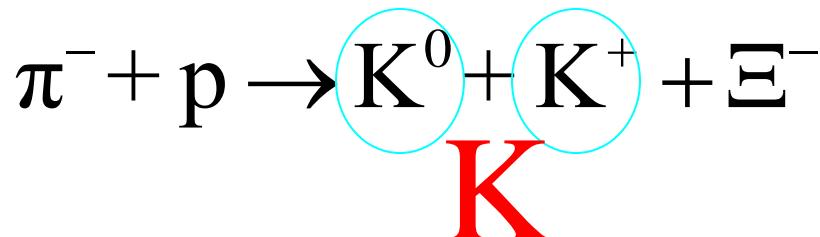
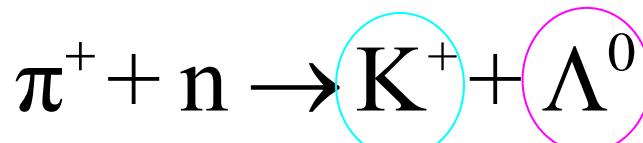
- 这些粒子具有奇异的性质 → 奇异粒子

协同快 ( $\sim 10^{-24}$  s) 产生，单独慢 ( $> 10^{-10}$  s) 衰变！

例如：



1953年Nishijima、Gell-Mann独立提出奇异数S的概念：S在强作用下守恒、而在弱作用下不守恒。



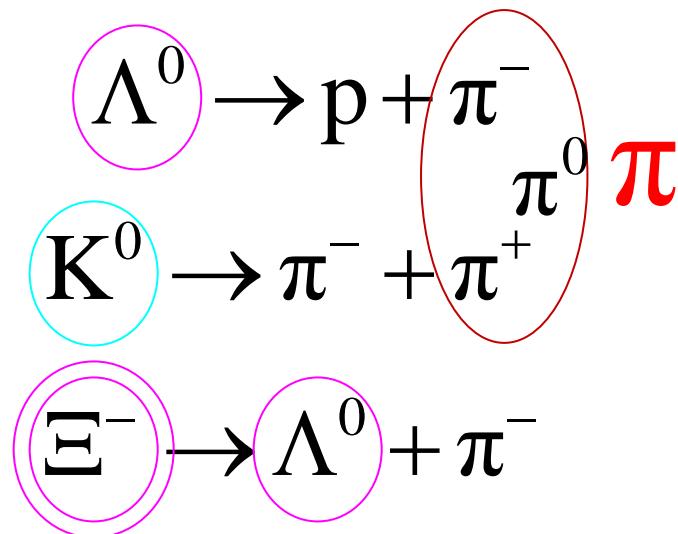
# 1, 奇异粒子的发现

弱作用（衰变）过程中奇异数不守恒

- 弱衰变选择定则：

$$\Delta S = \pm 1$$

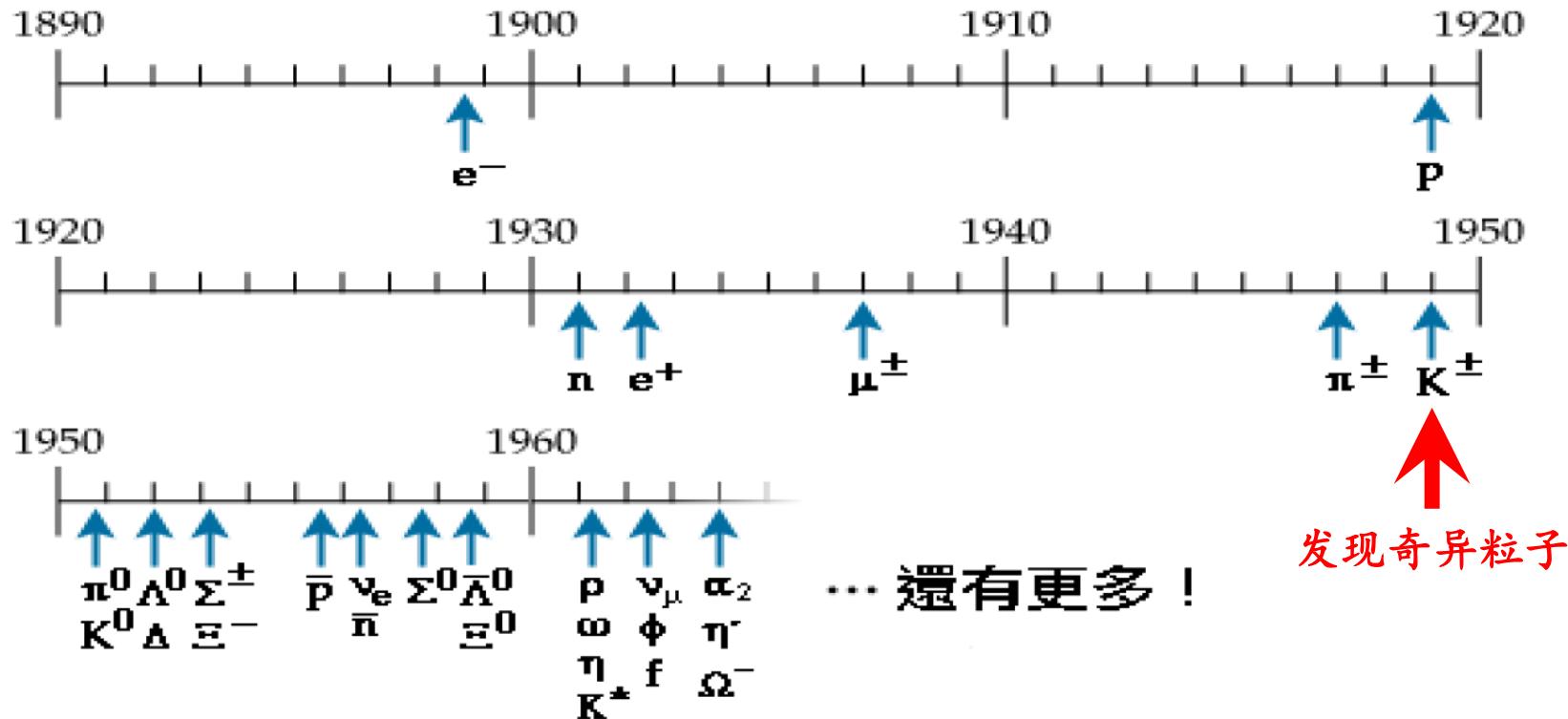
例如：



**强子**：能够参与强作用的粒子；如p、n、 $\pi$ 、K、 $\Lambda$ 、 $\Sigma$ 、 $\Xi$ 等。

# 1, 奇异粒子的发现

强子  
还蛮  
多的  
呢...



千万不要因为记不住或难记这些粒子的名字而对粒子物理失去信心！

Fermi曾告诫他的学生Lederman (因 $\nu$ 而获得1988年Nobel物理奖) :

“年轻人，如果我能够完全记住这些粒子的名字，我早就是个植物学家了！”

# 2, 超荷与Gell-Mann-西岛关系

## 介子与重子（超子）

- 介子（源：质量介于电子与核子之间的粒子）

例如 $\pi$ 介子： $\{\pi^+, \pi^0, \pi^-\}$ 为同位旋多重态

$$I = 1: I_3(\pi^+) = 1, I_3(\pi^0) = 0, I_3(\pi^-) = -1$$

回忆：核子 $Q$ 与 $I_3$ 关系  $Q = I_3 + 1/2$

- 改进后的 $Q$ - $I_3$ 关系：

$$Q = I_3 + B/2$$

其中 $B$ 称为重子数： $B(\text{介子}) = 0, B(\text{重子}) = 1$ 。

- 重子（源：质量较重的粒子，核子属重子）

# 2, 超荷与Gell-Mann-西岛关系

## 介子与重子（超子）

- 超子（源：质量超过核子；实： $S \neq 0$  奇异重子）

例如  $\Sigma$  超子： $\{\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-\}$  为同位旋多重态

$$I = 1: I_3(\Sigma^+) = 1, I_3(\Sigma^0) = 0, I_3(\Sigma^-) = -1$$

回忆  $Q$ - $I_3$  关系： $Q = I_3 + B/2$

- 再改进  $Q$ - $I_3$  关系：**Gell-Mann–Nishijima** 关系

$$Q = I_3 + (B+S)/2$$

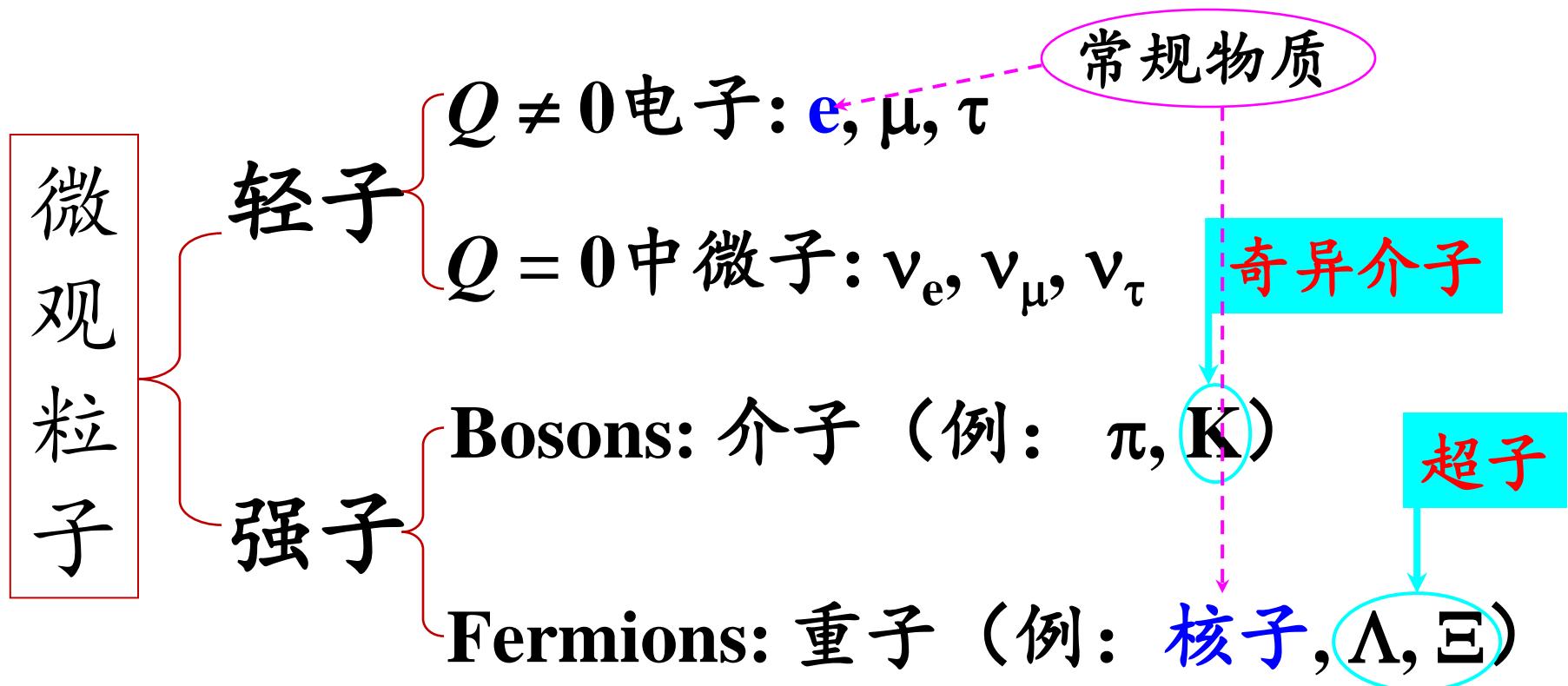
其中  $Y \equiv B+S$  称为超荷： $S(\Sigma) = -1$ 。

$$\text{例: } I_3(K^+) = 1/2, I_3(K^0) = -1/2; Q = I_3 + 1/2$$

# 3, 强子分类

轻子 (源: 质量轻于电子; 实: 不参与强作用)

强子: 参与强作用的粒子 (包括重子、介子)



# 3, 强子分类

## 强子的结构

- 轻子只有六种（味），看来可能是“基本”粒子
- 强子种类繁多，眼花缭乱；都是“基本”粒子？  
|要看本质，先作分类|

同位旋多重态：质量相近，自旋、宇称相同，电荷不同

即使将一同位旋多重态看作一种粒子，强子数目仍然很大！

→ |需寻找更高的对称性以减少多重态的总数目|

Gell-Mann-西岛关系暗示： $\{I_3, Y\}$ 可能反映更高的对称性

$$Q = I_3 + Y/2$$

将质量相近、自旋-宇称相同的强子标记在 $I_3$ -Y图上进行归类...

# 3, 强子分类

强子的归类

例： $J^p = 0^{-+}$ 介子

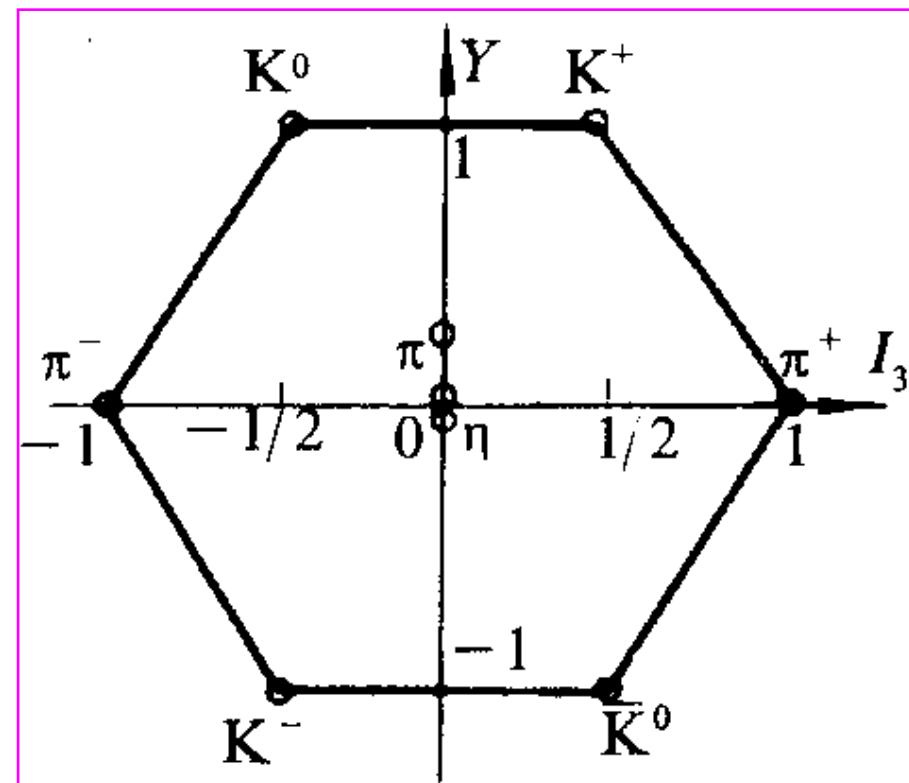
$S = 1$   $\text{K}^+(\text{K}^0)$ :  $m \approx 495 \text{ MeV}$

$S = -1$   $\text{K}^-(\bar{\text{K}}^0)$ :  $m \approx 495 \text{ MeV}$

$S = 0$   $\pi^\pm(\pi^0)$ :  $m \approx 140 \text{ MeV}$

$\eta$ :  $m \approx 548 \text{ MeV}$

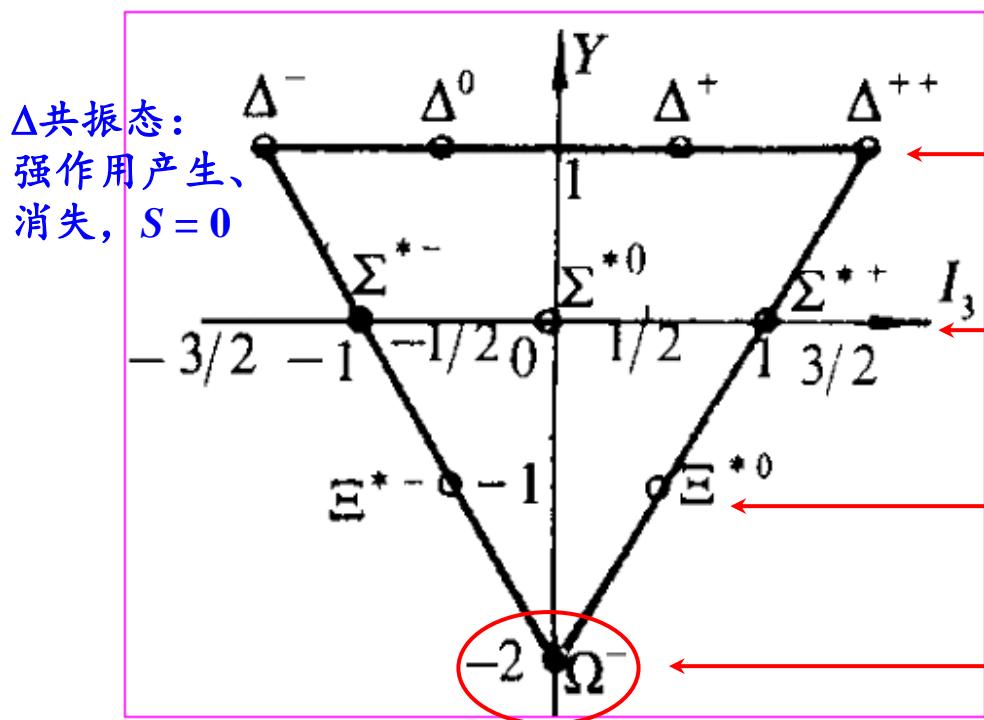
(单态)  $\eta'$ :  $m \approx 958 \text{ MeV}$



# 3, 强子分类

强子的归类

例： $J^P = 3/2^+$ 重子十重态



质量/MeV	质量差
1232	153
1385	149
1534	149?
?	

1962: Gell-Mann预言 $m \sim 1534 + 149 = 1683$ ; 1964:  $m = 1672.22$ ; 1969: Nobel

# Gell-Mann的两页“夸克”纸

Volume 8, number 1 PHYSICS LETTERS February 1964  
**It is fun to speculate about the way quarks would behave if they were physical particles of finite mass (instead of purely mathematical entities ...).**

A SCHEMATIC MODEL OF BARYONS AND MESONS \*

M. GELL-MANN

California Institute of Technology, Pasadena, California

Received 4 January 1964

If we assume that the strong interactions of baryons and mesons are correctly described in terms of the broken "eightfold way" [1-3], we are tempted to look for some fundamental explanation of the situation. A highly promising approach is the purely dynamical "bootstrap" model for all the strongly interacting particles within which one may try to derive isotopic spin and strangeness conservation and broken eightfold symmetry from self-consistency alone [4]. Of course, with only strong interactions, the orientation of the asymmetry in the unitary space cannot be specified; one hopes that in some way the selection of specific components of the F-spin by electromagnetism and the weak interactions determines the choice of isotopic spin and hypercharge directions.

Even if we consider the scattering amplitudes of strongly interacting particles on the mass shell only and treat the matrix elements of the weak, electromagnetic, and gravitational interactions by means of dispersion theory, there are still meaningful and important questions regarding the algebraic properties of these interactions that have so far been discussed only by abstracting the properties from a formal field theory model based on fundamental entities [5] from which the baryons and mesons are built up.

If these entities were octets, we might expect the underlying symmetry group to be SU(8) instead of SU(3); it is therefore tempting to try to use unitary triplets as fundamental objects. A unitary triplet  $t$  consists of an isotopic singlet  $s$  of electric charge  $e$  (in units of  $e$ ) and an isotopic doublet  $(u, d)$  with charges  $+1/2$  and  $-1/2$  respectively. The anti-triplet  $\bar{t}$  has, of course, the opposite signs of the charges. Complete symmetry among the members of the triplet gives the exact eightfold way, while a mass difference, for example, between the isotopic doublet and singlet gives the first-order violation.

For any value of  $s$  and of triplet spin, we can construct baryon octets from a basic central baryon singlet  $b$  by taking combinations  $(bb\bar{b})$ ,  $(bb\bar{b}\bar{b})$ , etc. \*\*. From  $(bb\bar{b})$ , we get the representations 1 and 8, while from  $(bb\bar{b}\bar{b})$  we get 1, 8, 10, 10, and 27. In a similar way, meson singlets and octets can be made out of  $(b\bar{b})$ ,  $(b\bar{b}\bar{b})$ , etc. The quantum num-

bers  $s_1 - s_2$  would be zero for all known baryons and mesons. The most interesting example of such a model is one in which the triplet has spin  $1/2$  and  $s = -1$ , so that the four particles  $s^+$ ,  $s^-$ ,  $u^0$  and  $d^0$  exhibit a parallel with the leptons.

A simpler and more elegant scheme can be constructed if we allow non-integral values for the charges. We can dispense entirely with the basic baryon  $b$  if we assign to the triplet  $t$  the following properties: spin  $1/2$ ,  $s = -1/2$ , and baryon number  $1/2$ . We then refer to the members  $s^0$ ,  $d^0$ , and  $u^0$  of the triplet as "quarks"  $q$  and the members of the anti-triplet as anti-quarks  $\bar{q}$ . Baryons can now be constructed from quarks by using the combinations  $(qq\bar{q})$ ,  $(\bar{q}qq\bar{q})$ , etc., while mesons are made out of  $(q\bar{q})$ ,  $(\bar{q}q\bar{q})$ , etc. It is assumed that the lowest baryon configuration  $(qq\bar{q})$  gives just the representations 1, 8, and 10 that have been observed, while the lowest meson configuration  $(q\bar{q})$  similarly gives just 1 and 8.

A formal mathematical model based on field theory can be built up for the quarks exactly as for  $p, n, \Lambda$  in the old Sakata model, for example [3], with all strong interactions ascribed to a neutral vector meson field interacting symmetrically with the three particles. Within such a framework, the electromagnetic current (in units of  $e$ ) is just

$$J_\mu^+ = \gamma_{\mu} u + \bar{d} \gamma_{\mu} d + \bar{s} \gamma_{\mu} s$$

or  $\mathcal{F}_{B_D} + \mathcal{F}_{B_D}^*/2$  in the notation of ref. [3]. For the weak current, we can take over from the Sakata model the form suggested by Gell-Mann and Levy [7] namely  $i \bar{p} \gamma_\mu (1 + \gamma_5) (n \cos \theta + \bar{n} \sin \theta)$ , which gives in the quark scheme the expression \*\*\*

$$i \bar{u} \gamma_\mu (1 + \gamma_5) (d \cos \theta + \bar{s} \sin \theta)$$

\* Work supported in part by the U.S. Atomic Energy Commission.

\*\* This is similar to the treatment in ref. [4]. See also ref. [5].

\*\*\* The parallel with  $i \bar{u}_0 \gamma_\mu (1 + \gamma_5) s$  and  $i \bar{d}_0 \gamma_\mu (1 + \gamma_5) d$  is obvious. Likewise, in the model with  $d^0$ ,  $s^0$ ,  $u^0$ , and  $\bar{b}$  discussed above, we would take the weak current to be  $i (\bar{b}^0 \cos \theta + \bar{d}^0 \sin \theta) u^0 + \bar{s}^0 d^0 + i (\bar{b}^0 \cos \theta - \bar{d}^0 \sin \theta) \bar{u}^0 + \bar{s}^0 d^0$ . The part with  $d_0 s_0 = 0$  is just  $i \bar{d}^0 \gamma_\mu (1 + \gamma_5) d^0 \cos \theta + s^0 \sin \theta$ .

Volume 8, number 3 PHYSICS LETTERS

February 1964

or, in the notation of ref. [3],

$$[\mathcal{F}_{D_D} + \mathcal{F}_{D_D}^* + i(\mathcal{F}_{D_D} + \mathcal{F}_{D_D}^*) \cos \theta + [\mathcal{F}_{D_D} + \mathcal{F}_{D_D}^* + i(\mathcal{F}_{D_D} + \mathcal{F}_{D_D}^*) \sin \theta]$$

We thus obtain all the features of Cabibbo's picture [8] of the weak current, namely the rules  $|\Delta f| = 1$ ,  $\Delta Y = 0$  and  $|\Delta f| = \frac{1}{2}$ ,  $\Delta Y \Delta Q = -1$ , the conserved  $\Delta Y = 0$  current with coefficient  $\cos \theta$ , the vector current in general as a component of the current of the F-spin, and the axial vector current transforming under  $SU(3)$  as the same component of another octet. Furthermore, we have [3] the equal-time commutation rules for the fourth components of the currents:

$$[\mathcal{F}_{A_D}(x) + \mathcal{F}_{A_D}^*(x), \mathcal{F}_{A_D}(x') + \mathcal{F}_{A_D}^*(x')] = -2 \delta_{D_D} [\mathcal{F}_{A_D}(x) + \mathcal{F}_{A_D}^*(x)] \delta(x-x'),$$

$$[\mathcal{F}_{A_D}(x) + \mathcal{F}_{A_D}^*(x), \mathcal{F}_{M_D}(x') + \mathcal{F}_{M_D}^*(x')] = 0,$$

$i = 1, \dots, 8$ , yielding the group  $SU(3) \times SU(3)$ . We can also look at the behavior of the energy density  $\epsilon_{444}(r)$  (in the gravitational interaction) under equal-time commutation with the operators  $\mathcal{F}_{A_D}(x) + \mathcal{F}_{A_D}^*(x)$ . That part which is non-invariant under the group will transform like particular representations of  $SU(3) \times SU(3)$ , for example like  $(3, 3)$  and  $(3, \bar{3})$  if it comes just from the masses of the quarks.

All these relations can now be abstracted from the field theory model and used in a dispersion theory treatment. The scattering amplitudes for strongly interacting particles on the mass shell are assumed known; there is then a system of linear dispersion relations for the matrix elements of the weak currents (and also the electromagnetic and gravitational interactions) to lowest order in these interactions. These dispersion relations, unsubtracted and supplemented by the non-linear commutation rules abstracted from the field theory, may be powerful enough to determine all the matrix elements of the weak currents, including the effective strengths of the axial vector current matrix elements compared with those of the vector current.

It is fun to speculate about the way quarks would behave if they were physical particles of finite mass

(instead of purely mathematical entities as they would be in the limit of infinite mass). Since charge and baryon number are explicitly conserved, one of the quarks (presumably  $u$  or  $d^0$ ) would be absolutely stable \*\*, while the other member of the doublet would go into the first member very slowly by  $\rho$ -decay or  $K$ -capture. The isotopic singlet quark would presumably decay into the doublet by weak interactions, much as  $\Lambda$  goes into  $N$ . Ordinary matter near the earth's surface would be contaminated by stable quarks as a result of high energy cosmic ray events throughout the earth's history, but the contamination is estimated to be so small that it would never have been detected. A search for stable quarks of charge  $+1/2$  or  $+1/3$  and/or stable di-quarks of charge  $-1/2$  or  $+1/3$  or  $+1/6$  at the highest energy accelerators would help to reassure us of the non-existence of real quarks.

These ideas were developed during a visit to Columbia University in March 1963; the author would like to thank Professor Robert Serber for stimulating them.

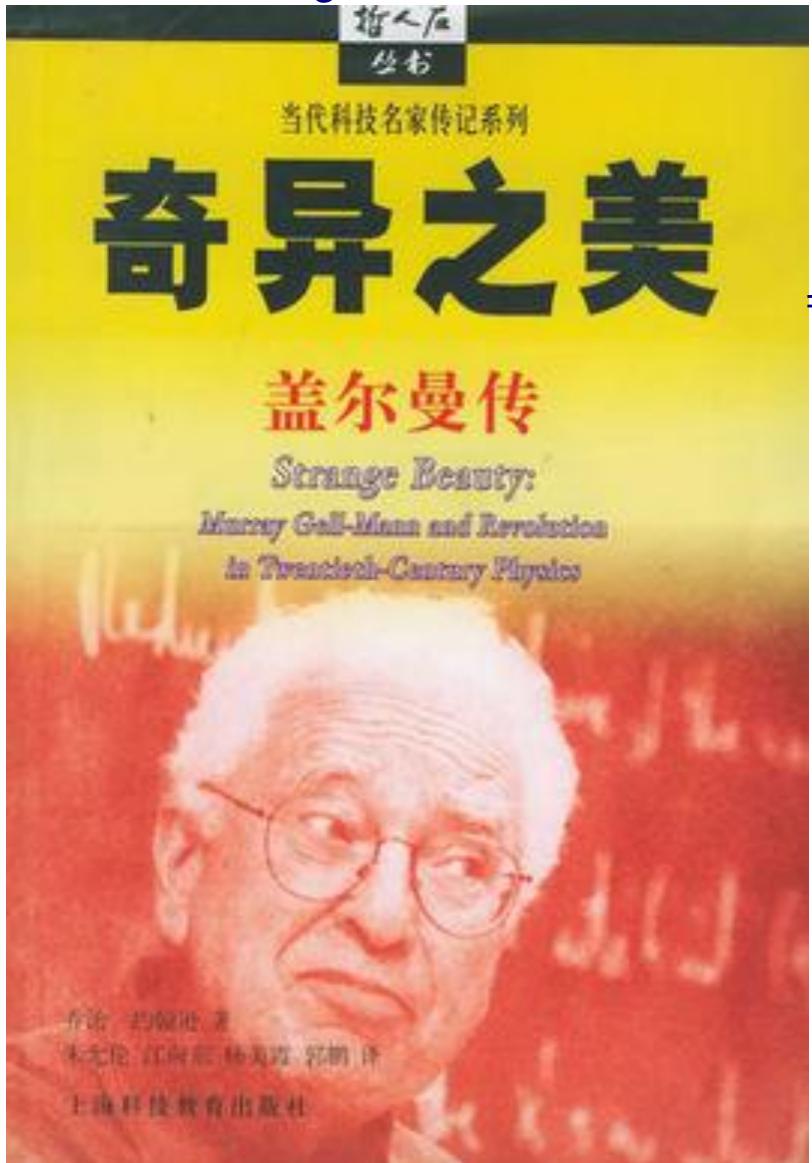
## References

1. M. Gell-Mann, California Institute of Technology Synchrotron Laboratory Report CTSL-20 (1961).
2. Y. Ne'eman, Nuclear Phys. 33 (1962) 222.
3. M. Gell-Mann, Phys. Rev. 128 (1962) 1697.
4. E. P. E. S. C. C. Capra, Phys. Rev. Letters 14 (1965) 312; R. E. Cutkosky, J. Kalcher and P. Tarjan, Phys. Letters 1 (1962) 93;
- E. Abrahams, V. Zachariasen and A. C. Zamach, Phys. Rev. 123 (1961) 1531;
- S. Glashow, Phys. Rev. 130 (1963) 2122;
- R. E. Cutkosky and P. Tarjan, Phys. Rev. 133 (1964) 1554.
- P. Tarjan and V. L. Teplitz, Phys. Rev. Letters 11 (1963) 447.
6. James Joyce, *Finnegan's Wake* (Viking Press, New York, 1939), p. 362.
7. M. Gell-Mann and M. Levy, Nuovo Cimento 16 (1960) 798.
8. R. Galtino, Phys. Rev. Letters 10 (1963) 531.

\*\* There is the alternative possibility that the quarks are unstable under decay into baryon plus anti-di-quark or anti-baryon plus quadri-quark. In any case, some portion of fractional charge would have to be absolutely stable.

Please email me to have a PDF file of this paper: [r.x.xu@pku.edu.cn](mailto:r.x.xu@pku.edu.cn)

# Murray Gell-Mann VS George Zweig



= Jewish =

Winner?  
Loser?



# 4, 强子的更深层次结构

1964年：Gell-Mann(1929生)和Zweig (1937生)  
分别提出**亚核子**(Quark, Ace)的概念

1981年Zweig 在CalTech出版物上的一段回忆：

要想使 CERN 报告以我所希望的形式发表是太困难了，我最后只得停止了努力。当某所一流大学的物理系考虑给我一个职位时，该系的资深理论家，也是整个理论物理界最受尊敬的代言人之一，在教员会议上情绪激昂地批评爱司模型是一个“江湖医生”的工作，从而阻止了对我的委任。<sup>20</sup>

Gribbin “In search of the Big Bang”(卢巨甫译，上海科技教育出版社，2000， p. 243-250)

# 4, 强子的更深层次结构

更多的回忆：

20. Isgur(1981), p.439。茨威格在同一篇文章里还说：“盖尔曼有一次告诉我，他的第一篇夸克论文是寄给《物理学快报》发表的，因为他肯定《物理评论快报》不会同意发表。”

有趣的是，盖尔曼被授予 1969 年诺贝尔奖是因为他对粒子物理的其他贡献，其中突出的是奇异数和八正法。甚至在 1969 年夸克理论也不被认为是对粒子世界认识的明显进展，在成果清单上的等级仍很低。茨威格还没有得到诺贝尔奖，即使夸克理论现在已经成为认识宇宙的基础，而且他 1964 年的文章比盖尔曼的要完整和详细得多。是茨威格仍在为他年轻时的冒昧付出代价吗？如果不是，或许诺贝尔奖委员会将很快认识到自己的疏忽。

Gribbin “In search of the Big Bang” (卢巨甫译, 上海科技教育出版社, 2000, p. 359-360)

# 4, 强子的更深层次结构

值得一提：中国的“层子”模型

北京大学学报

BEIJING DAXUE XUEBAO

自然科学

ZIRAN KEXUE

“基本粒子”结构理論专刊

2

1966

## 强相互作用粒子的结构模型\*

北京大学理論物理研究室基本粒子理論組  
中国科学院数学研究所理論物理研究室

### 一、引言

近年来,基本粒子物理实验和理论研究中许多迹象表明,基本粒子不是物质的最原始的点粒子,而是由更基本的物质单元所组成的复合体系,这种情况已经在文献[1, 2]中作了分析。

目前,实验上发现了大量共振态和新粒子。关于基本粒子对称性(特别是  $SU_3$  和  $SU_6$  对称性)的研究给出了这些粒子的分类,并且揭示了基本粒子质量谱的规律性。这种情

-----  
北京大学理論物理研究室基本粒子理論組和中国科学院数学研究所理論物理研究室参加本期专刊工作的有(按姓氏笔划排列):

北 京 大 学

刘连寿 宋行长 杨国桢 陈 激\* 胡 宁 赵光达

赵志泳 秦旦华 钱治碗 高崇寿 黄朝商

中国科学院数学研究所

朱重远 安瑛 张宗燧 陈庭金 周龙骥 赵万云  
胡诗婉 侯伯宇 戴元本

\* 吉林大学进修教师,参加部分工作。

# 4, 强子的更深层次结构

1967年: SLAC(Stanford linear accler. Center)实验

>20GeV 电子深度非弹性散射质子

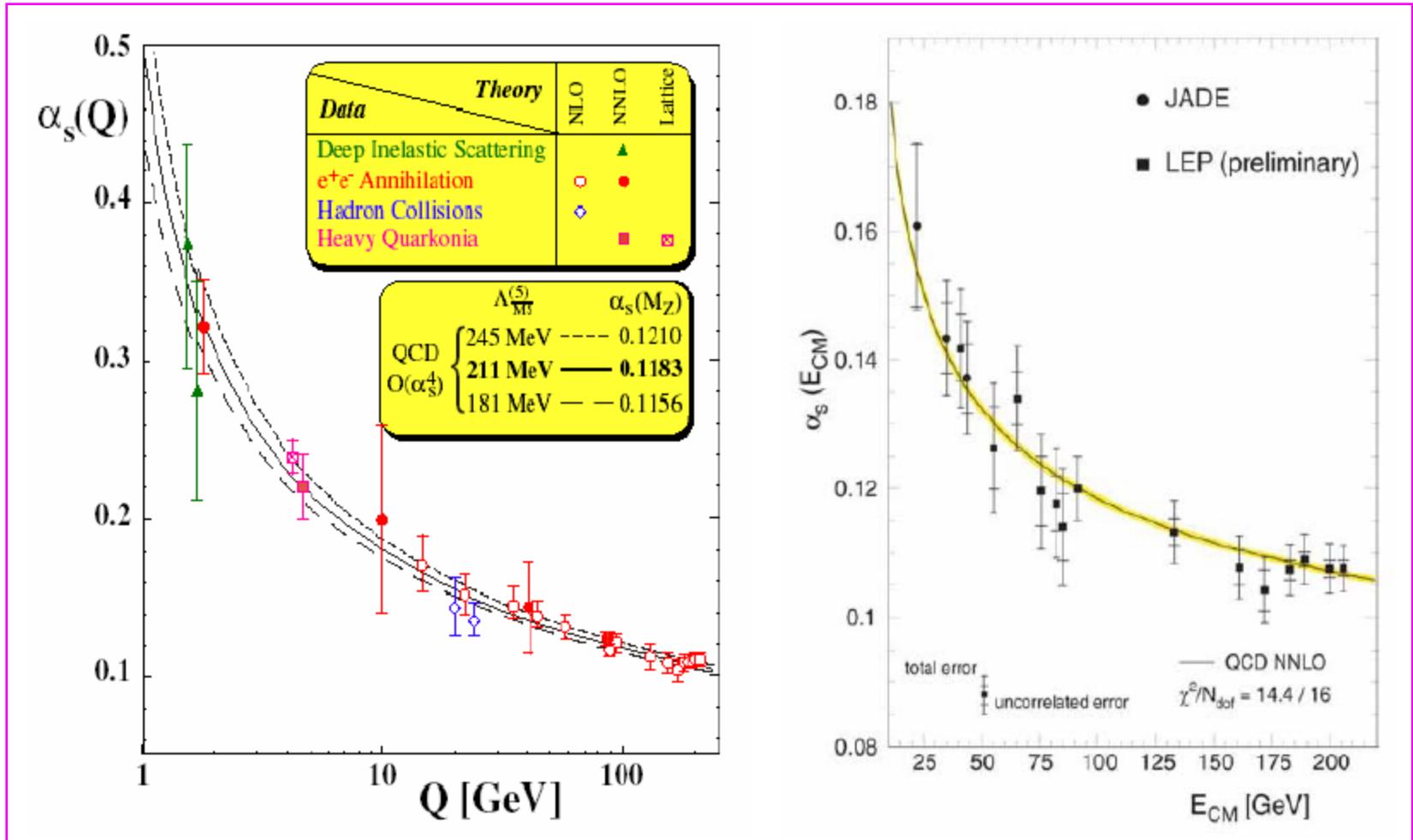
→ 部分子(parton): 点状“硬”核

实验上发现: 电子大动量迁移时, 质子内许多  
“点状”粒子似乎是“自由”的 (即: 质子看  
起来由若干无相互作用的“点”粒子组成)

→ 演近自由

粒子之间相互作用的强度随  
着交换动量的增加而减弱!

# 4, 强子的更深层次结构



# The Nobel prize in Physics (2004)

1973: SU(3) non-Abelian gauge theory  $\Rightarrow$  ***asymptotic freedom***



**David J. Gross (L) of the University of California at Santa Barbara and his wife (R)**



**Frank Wilczek  
of the  
Massachusetts  
Institute of  
Technology.**



**H. David  
Politzer of the  
California  
Institute of  
Technology,  
Pasadena,  
California.**



# The Nobel prize in Physics (2004)

1973: SU(3) non-Abelian gauge theory  $\Rightarrow$  **asymptotic freedom**

## 3.1 Paradigm 1: The Hard Reality of Quarks and Gluons

Because, in order to fit the facts, you had to ascribe several bizarre properties to quarks – paradoxical dynamics, peculiar charge, and anomalous statistics – their “**reality**” was, **in 1972**, still **very much in question**. This despite the fact that they were helpful in organizing the hadrons, and even though Friedman, Kendall, and Taylor had “observed” them! ...

The Nobel Prize in Physics 1990

Jerome I. Friedman, Henry W. Kendall and Richard E. Taylor “for their pioneering investigations concerning deep inelastic scattering of electrons on protons and bound neutrons, which have been of essential importance for the development of the quark model in particle physics”

— Frank Wilczek (2004)  
*Lecture given in acceptance of the Nobel Prize*

“**Observations** should not be trusted until confirmed by **Theory**!” — Arthur Eddington

# 4, 强子的更深层次结构

夸克存在“色”自由度

$\Omega^-$ 粒子:  $Y = -2, B = 1 \Rightarrow S = -3$   
(而 $\Omega^-$ 的自旋为3/2)

$$\Omega^- = \{sss\}$$

夸克为自旋1/2的费米子  
s夸克的奇异数为-1, 反s为+1

Pauli原理  $\Rightarrow$  其中2个s处于激发态  
为何非2个s都处于基态 ( $s = 1/2$ ) ?

夸克具有  
色自由度

QCD(量子色动力学): 描述带色荷粒子间作用的动力学

# 5, 相互作用守恒律总结

对称性的存在导致相应的守恒律

不可观测性	对称性	守恒量	强	弱	电
空间绝对位置	空间平移	动量 $p$	✓	✓	✓
空间绝对方向	空间转动	角动量 $J$	✓	✓	✓
绝对时间	时间平移	能量 $E$	✓	✓	✓
不同带电粒子态间的相对相角	电荷规范变换	电荷 $Q$	✓	✓	✓
不同重子数态间的相对相位	重子数规范变换	重子数 $B$	✓	✓	协同快产生
不同轻子数态间的相对相位	轻子数规范变换	轻子数 $L$	✓	✓	单独慢衰变
不同奇异数态间的相对相位	奇异数规范变换	奇异数 $S$	✓	✗	✓
同位旋空间方向	同位旋空间转动	同位旋 $I$	✓	✗	✗
全同粒子的标记	交换运算	玻色子或费米子	✓	✓	✓
空间左右	空间反射	宇称 $P$	✓	✗	✓
时间方向	时间反演		✓	✗	✓
电荷绝对值	电荷共轭	电荷共轭宇称 $C$	✓	✗	✓

# 总 结

- 1, 奇异粒子的发现
- 2, 超荷与Gell-Mann-西岛关系
- 3, 强子分类
- 4, 强子的更深层次结构
- 5, 相互作用守恒律总结

# 作 业

1, 补充: 对于 **e**(电子)、**p**(质子)、**n**(中子)、 **$\gamma$** (光子)、 **$\nu$** (中微子), 试问:

- (1) 哪些不参与电磁相互作用?
- (2) 哪些不参与强相互作用?

2, 思考题: 为何我们日常生活中物质是“两味”的(即为何奇异数为零)?

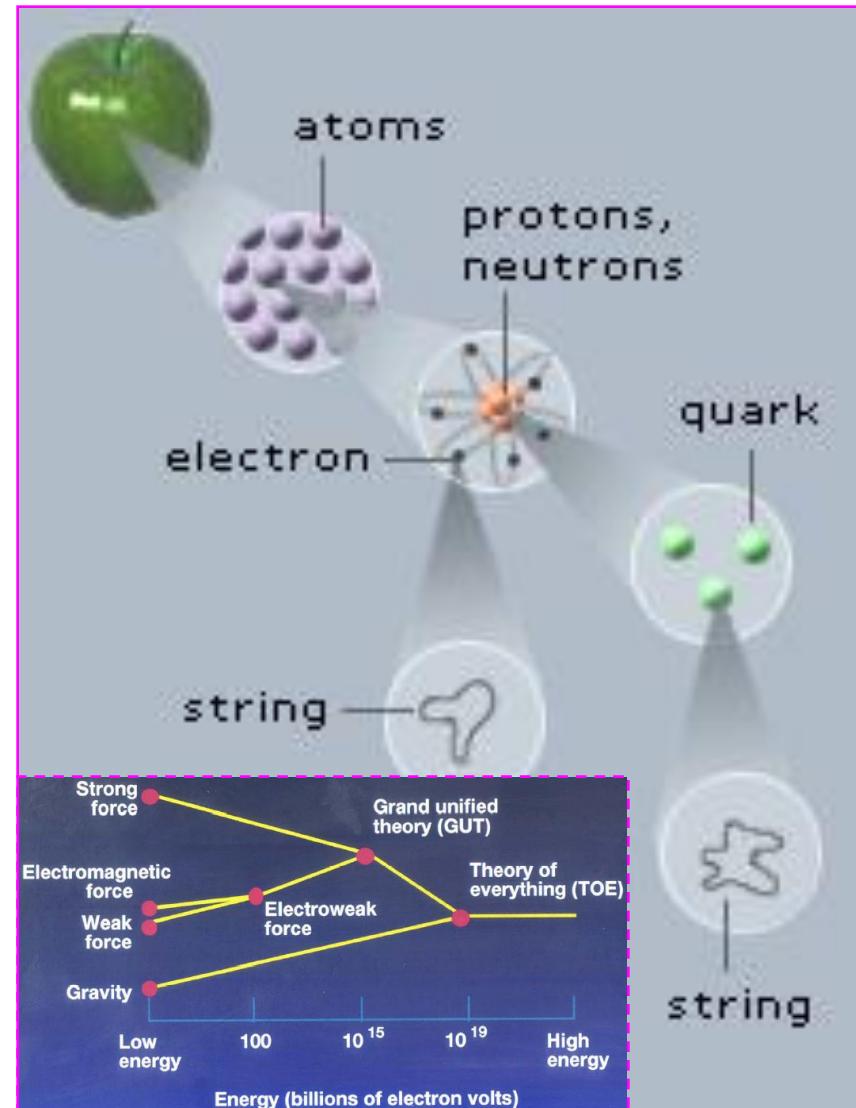
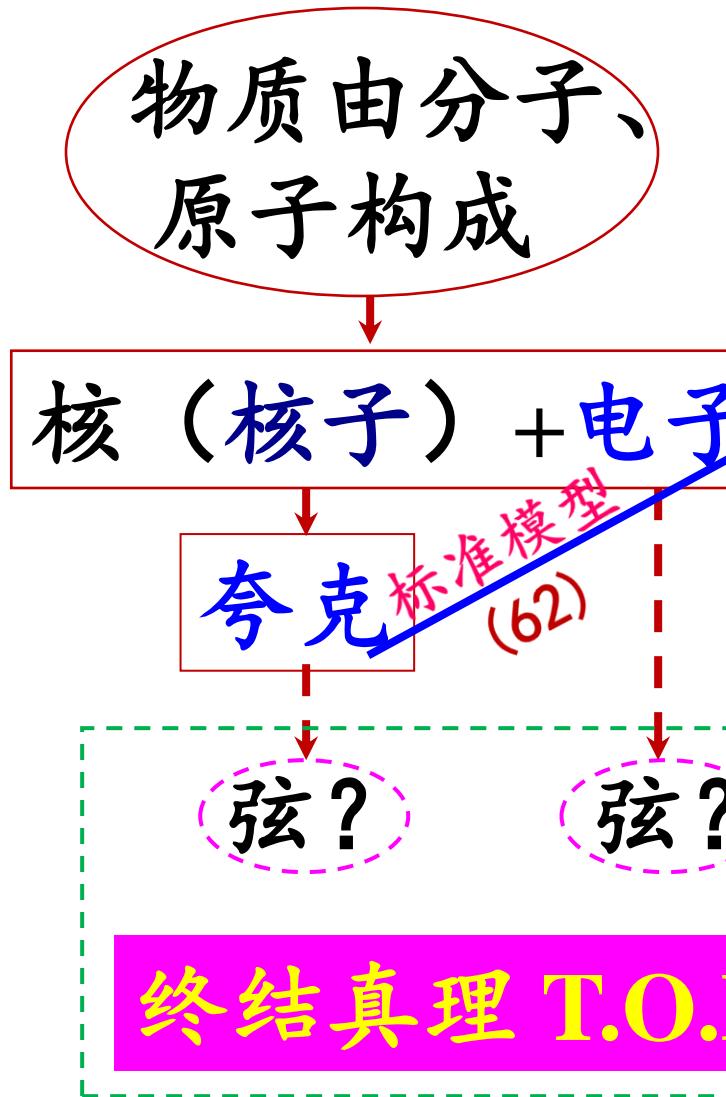
# 《原子物理学》

## 粒子物理标准模型简介

讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

# 存在“万物之理”(TOE) ?

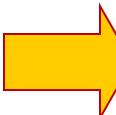


# 1, 电磁学中的规范变换

Maxwell方程组：电磁规范不变性

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho, \\ \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \vec{B} = 0, \rightarrow \vec{B} = \nabla \times \vec{A} \\ \nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{J}. \end{array} \right.$$



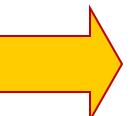


$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \\ \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla \varphi. \end{array} \right.$$

引入任意标量函数 $\tilde{\Lambda}$ , 将 $\{A, \varphi\}$ 转换成 $\{A', \varphi'\}$

规范  
变换

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \tilde{\Lambda} \\ \varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \tilde{\Lambda}}{\partial t} \end{array} \right.$$



$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{B}' = \nabla \times \vec{A}' = \nabla \times (\vec{A} + \nabla \tilde{\Lambda}) = \vec{B} \\ \vec{E}' = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}'}{\partial t} - \nabla \varphi' = \vec{E} \end{array} \right.$$

# 2, 电荷与电磁作用

## 非相对论情形

- 量子力学中，微观运动状态用**波函数** $\Psi$ 描述，而观测量只依赖于 $|\Psi|^2$ 。即作如下的变换时

$$\Psi(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t)e^{i\Lambda}$$

运动状态是不可区分的，其中为 $\Lambda$ 任意函数。

- 若 $\Lambda$ 与 $(r, t)$ 无关，该变换称为**整体规范变换**；反之，若 $\Lambda = \Lambda(r, t)$ ，则为**局部规范变换**。

# 2, 电荷与电磁作用

## 非相对论情形

- 非相对论性电子运动方程: Schroedinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t)$$

Schroedinger 方程式在整体规范变换下具有不变性,  
但在局域规范变换下, 却不再具有不变性。若改写成

$$\left[ \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t)$$

(此即带电粒子在外场  $\{A, \varphi\}$  中的运动方程)

# 2, 电荷与电磁作用

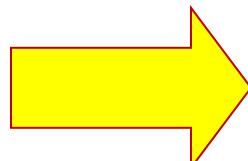
## 非相对论情形

- 上式在如下局域规范变换下，

$$\begin{cases} \Psi(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t) e^{i\Lambda(\vec{r}, t)} \\ \vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \tilde{\Lambda}(\vec{r}, t) \\ \varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \tilde{\Lambda}(\vec{r}, t)}{\partial t} \end{cases}$$

$$\tilde{\Lambda}(\vec{r}, t) \equiv \frac{\hbar c}{e} \Lambda(\vec{r}, t)$$

可以证明是不变的。可见：只有引入了电磁作用后，带电粒子的运动方程才能够在局域规范变换下不变。



若要满足局域规范对称性，务必引入与电荷有关的 $\{A, \varphi\}$ （规范场，此即电磁场）；规范场量子称为规范Boson（此即光子）。

# 2, 电荷与电磁作用

非相对论情形

- 比较规范场引入前后的运动方程：

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \\ \left[ \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \end{array} \right.$$

发现只需做一替换，就能够做到引入规范场（即运动方程中考虑电磁作用）。

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi, \\ \hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla \rightarrow -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A}. \end{array} \right.$$

# 2, 电荷与电磁作用

## 相对论情形

- 相对论性电子运动方程: **Dirac方程**

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} - \beta mc^2 \right) \Psi(\vec{r}, t) = 0$$

其中  $\sigma_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) 为 Pauli 算符,

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

作替换以考虑电磁场的存在后, 才具有局域规范不变性:

$$\left[ \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right) - \vec{\alpha} \cdot (c\vec{p} - e\vec{A}) - \beta mc^2 \right] \Psi(\vec{r}, t) = 0$$

(此即带电粒子在外场  $\{A, \varphi\}$  中的 Dirac 方程)

# 3, 规范相互作用

描述（规范）对称性的语言：群

- 群的定义：

定义乘法、且具有“封闭性、结合律、单位元、逆元”的集合

- 乘法满足交换律：Abel群；否则：非Abel群

- 么正群  $U(n)$ ：独立参数个数  $n^2$

$n$  维复线性空间上的所有非奇性线性变换矩阵  $\{u\}$  中满足  $u^+u = I$   
( $I$  为单位矩阵,  $u^+$  表示  $u$  的转置复共轭) 的集合。

- $SU(n)$ ：独立参数个数  $n^2 - 1$  ( $n > 1$ )

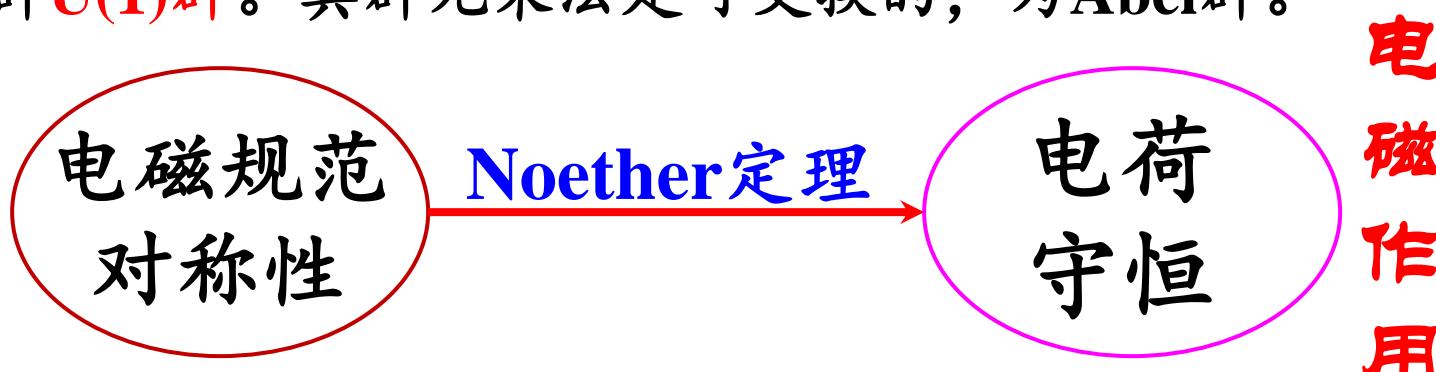
各元素行列式值为 1 的  $U(n)$  群（特殊么正群）。 $n=1$  时自然满足

# 3, 规范相互作用

例：波函数  $\Psi(r, t)$  的变换

$$\Psi(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi'(\vec{r}, t) = e^{i\Lambda(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t)$$

构成群**U(1)群**。其群元乘法是可交换的，为Abel群。



- 规范Boson（即光子）的数目为1，与描述U(1)的独立参数个数一致。
- 电磁规范理论成功而漂亮的框架导致广泛而丰富的联想：自然界其它基本相互作用也是规范理论吗？

# 3, 规范相互作用

## 非Abel群规范理论?

- Yang-Mills: 同位旋守恒与同位旋规范不变性

PHYSICAL REVIEW

VOLUME 96, NUMBER 1

OCTOBER 1, 1954

### Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance\*

C. N. YANG † AND R. L. MILLS

*Brookhaven National Laboratory, Upton, New York*

(Received June 28, 1954)

It is pointed out that the usual principle of invariance under isotopic spin rotation is not consistent with the concept of localized fields. The possibility is explored of having invariance under local isotopic spin rotations. This leads to formulating a principle of isotopic gauge invariance and the existence of a **b** field which has the same relation to the isotopic spin that the electromagnetic field has to the electric charge. The **b** field satisfies nonlinear differential equations. The quanta of the **b** field are particles with spin unity, isotopic spin unity, and electric charge  $\pm e$  or zero.

#### INTRODUCTION

THE conservation of isotopic spin is a much discussed concept in recent years. Historically an isotopic spin parameter was first introduced by Heisen-

stable even nuclei contain equal numbers of them. Then in 1937 Breit, Condon, and Present pointed out the approximate equality of  $p-p$  and  $n-p$  interactions in the  $^1S$  state.<sup>2</sup> It seemed natural to assume that this

# 3, 规范相互作用

**弱电统一理论**: 另一成功实现的规范理论

- 规范群  $SU(2) \times U(1)$ : 非Abel群
- 独立参数数目: 4
- 规范Bosons:  $W^\pm$  (带电流作用)、 $Z^0$  (中性流作用);  $\gamma$  (电磁作用)
- 预言:

80.4GeV      91.2GeV

Glashow、Shalam、Weiberg  
获1979年Nobel物理学奖

{ 中间Boson ( $W^\pm$ 、 $Z^0$ ) 质量  
中性流弱作用 ( $\beta$ 衰变是一种带电流作用) }

- Higgs机制: 真空对称性自发破缺而使得规范Boson质量非零
- 真空相变: 真空从高对称状态转变为低对称状态的过程

# 3, 规范相互作用

**QCD**: 描述基本强作用的规范理论

- 规范群SU(3): 非Abel群
- 独立参数数目: 8
- 规范Bosons: 胶子 (带色荷)
- 成功之处: 高能极限下“渐近自由”

$$\alpha_s(Q^2) = \frac{4\pi}{(11 - \frac{2}{3}n_f)\ln\frac{Q^2}{\Lambda^2}}$$

Gross、Wilczek、Politzer  
获2004年Nobel物理学奖

夸克味数  $n_f = (3 \sim 6)$ , 参数  $\Lambda \approx 220 \text{ MeV}$

# 3, 规范相互作用

**QCD:** 描述基本强作用的规范理论

- 夸克之间相互作用的势模型

$$V(\text{colour}) = -\frac{4}{3} \frac{\alpha_s}{r} + kr, \quad k = 0.86 \text{ GeV/fm}$$

鉴于光子和胶子均无静质量，色作用势和库仑势短距离时都依赖于 $1/r$ ；但长距离时色作用额外的线性势（第二项，或跟夸克禁闭有关）主导。

通过如下估算可以感觉色作用有多么地强。考虑间距fm量级的夸克对之间因强作用而导致的吸引力（以一吨物体的重力为衡量单位）。在距离较大时线性势主导，强作用所致吸引力为：

1MeV~ $10^{-6}$ erg

$$f_c = dV(\text{colour})/dr \approx k = 0.86 \text{ GeV/fm} = 1.36 \times 10^{10} \text{ erg/cm}.$$

而一吨物体的重量为 $f_T = 10^6 \text{ g} \times 9.8 \times 10^2 \text{ cm/s}^2 = 9.8 \times 10^8 \text{ erg/cm}$ 。可见：

$$f_c/f_T \approx 10!$$

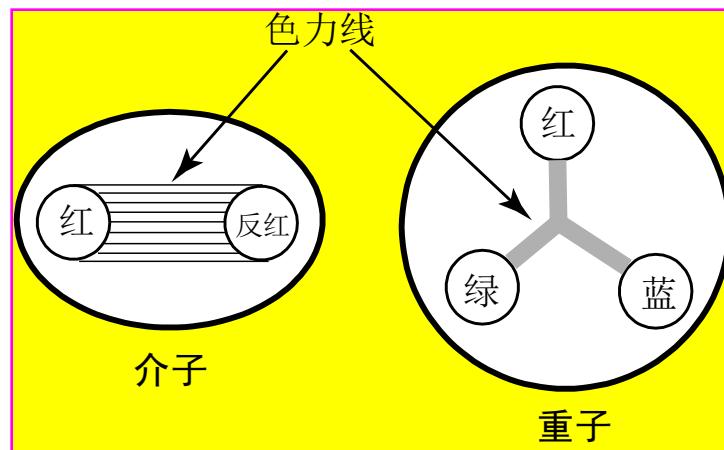
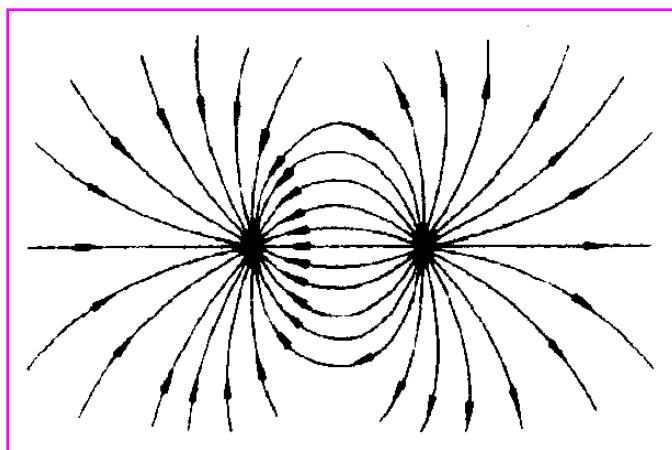
# 4, 粒子物理标准模型简介

## 基本相互作用：规范Bosons

- 几种较成功的规范相互作用理论

作用类型	规范群	是否破缺	规范 Bose 子及其质量	动力学理论
电磁	$U(1)$	否	光子 $\gamma$ ; 零	量子电动力学 (QED)
电弱	$U(1) \times SU(2)$	SU(2)是; $U(1)$ 否	$\gamma$ , 零; $W^\pm$ 、 $Z^0$ , 非零	电弱统一理论
强	$SU(3)$	否	8 种胶子; 零	量子色动力学 (QCD)

- 胶子零质量，为何强力却短程？禁闭！？



# Standard Model of Elementary Particles

62块砖基本性质



# 5, 超出标准模型?

梦 想

“点”粒子导致的疑难：发散！

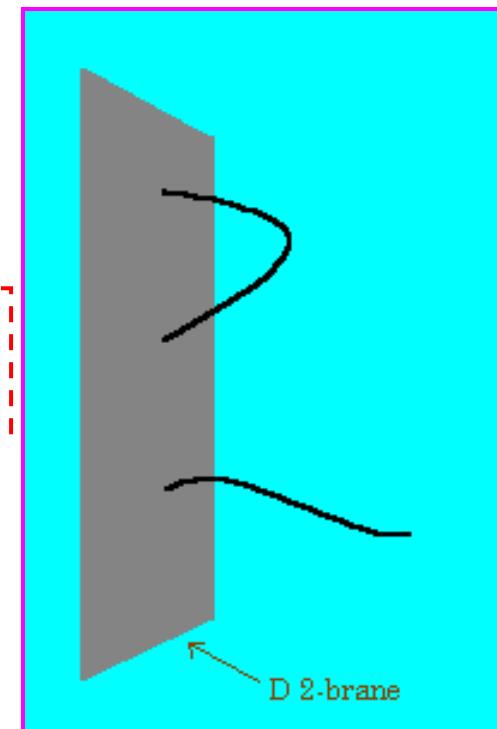
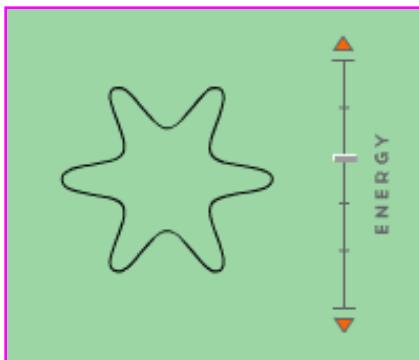
• 例：点粒子电子自身的电磁能

$$\text{CED: } \sim \int_0^\infty r^2 E^2 dr \sim \int_0^\infty r^{-2} dr \sim \frac{1}{r} \Big|_0^\infty \rightarrow \infty !$$

$$\text{QED: } \delta_m \propto \alpha m_{0e} \ln(\Lambda/m_{0e}) \quad (\Lambda: \text{虚光子动量截断})$$

⇒ 基本粒子不是零维的“点”！

是一维的弦？p维的膜？



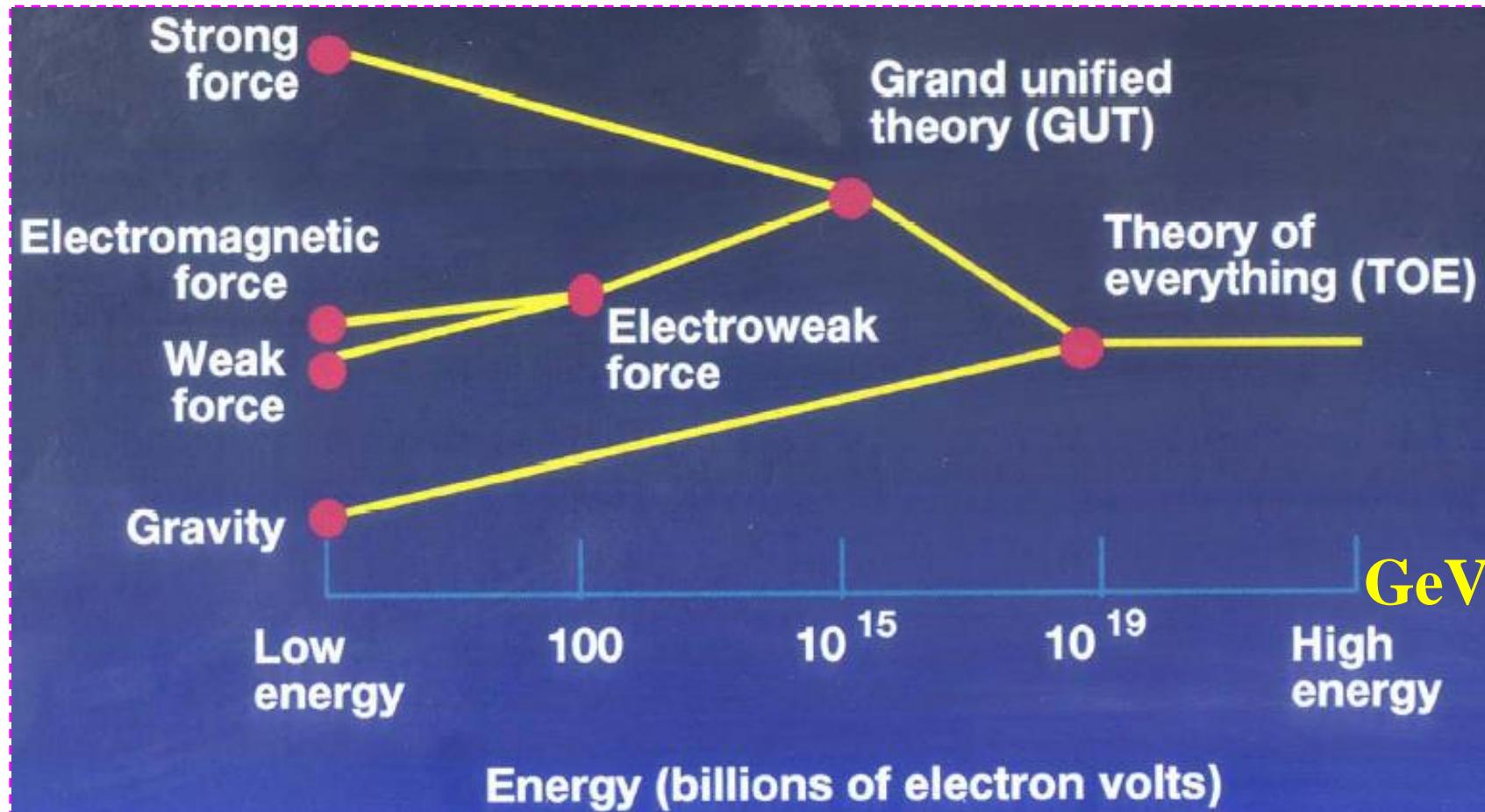


# 5, 超出标准模型？

统一  
想

## 引力规范理论：超统一？

让我们感谢色、电相互作用强度之间如此巨大的差别吧！



# 总 结

- 1, 电磁学中的规范变换
- 2, 电荷与电磁作用
- 3, 规范相互作用
- 4, 粒子物理标准模型简介
- 5, 超出标准模型?

# 作 业

补充：评述Yang-Mills（1954）的研究工作分别与QED、电弱统一理论和QCD之间的关系。

课外阅读（...）

# 《原子物理学》

## 夸克与轻子间基本作用

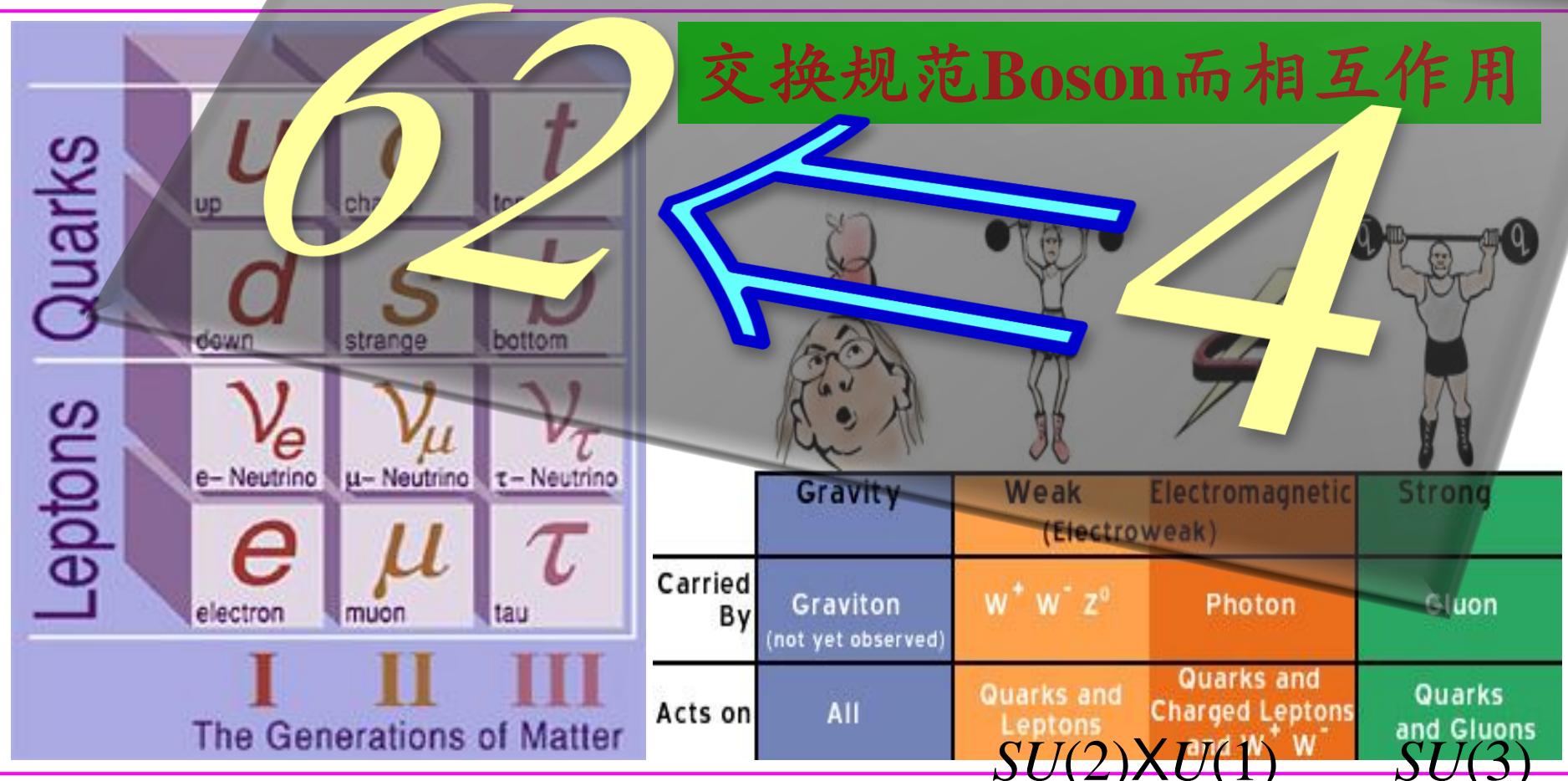


讲授：徐仁新

北京大学物理学院天文学系

# 物质构成基本砖块：夸克与轻子

- 现实生活中的夸克和轻子表现任何？

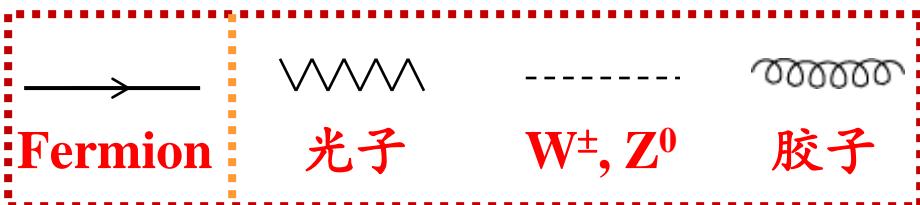


# 1, 相互作用Feynman图描述

Feynman图：形象地描述交换Boson致作用

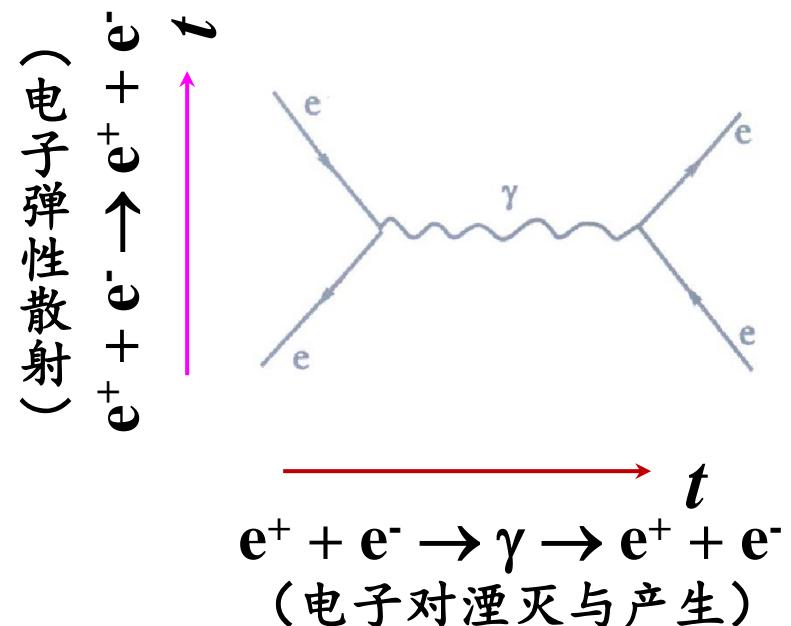
- 作图基本规则

- 1, 时间轴向上（或向右）
- 2, 不同类型线表征不同类型粒子



- 3, 正（反）粒子箭头方向与时间相同（反）

例：电子交换光子产生相互作用



# 2, 夸克、轻子间的弱作用

带电流(charged-current)弱作用： $\beta$ 衰变

- 原子核层次

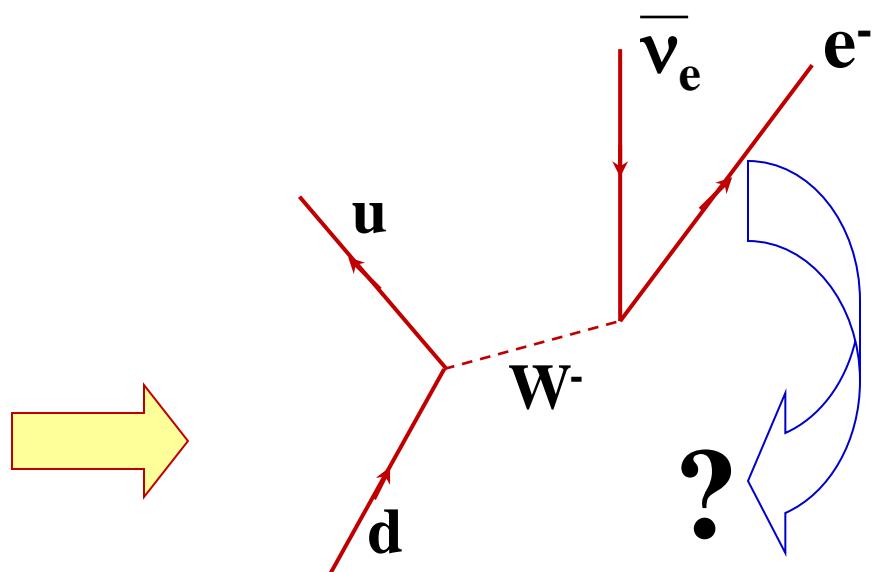


- 核子层次

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$$

- 夸克层次：  $n=\{udd\}$ ,  $p=\{uud\}$

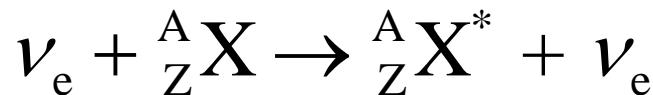
$$d \rightarrow u + W^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e$$



# 2, 夸克、轻子间的弱作用

中性流(neutral-current)弱作用:  $\nu$  散射

- 中微子与原子核散射



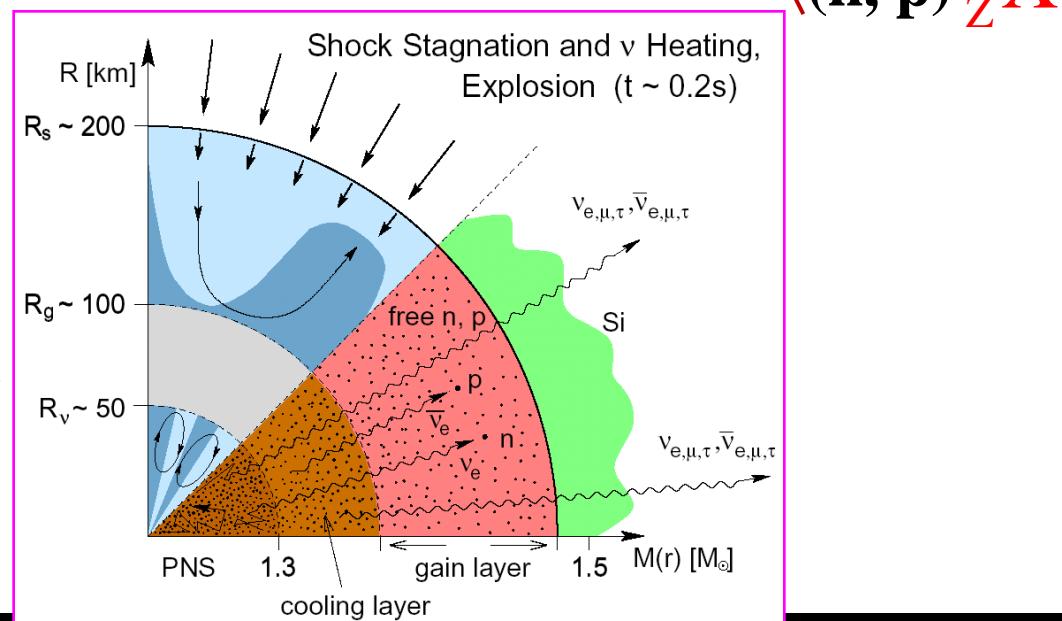
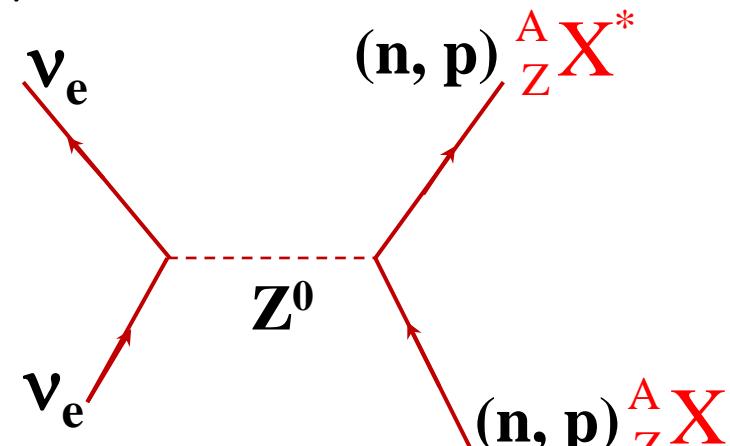
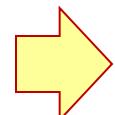
- 相干散射(带电流、中性流)

核子:  $\sigma_\nu \approx 10^{-44} \left( \frac{E_\nu}{m_e c^2} \right)^2 \text{ cm}^2$

$$\lambda_\nu > R_N \Rightarrow A^2$$

重核:  $\sigma_\nu \approx 10^{-45} \left( \frac{E_\nu}{m_e c^2} \right)^2 A^2 \text{ cm}^2$

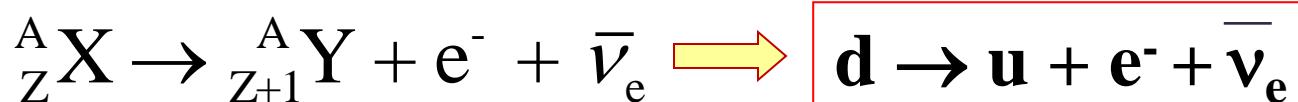
- 应用: 超新星爆发  
(引力塌缩型)



## 2, 夸克、轻子间的弱作用

再谈 $\beta$ 衰变：弱作用本质：导致夸克“变味”

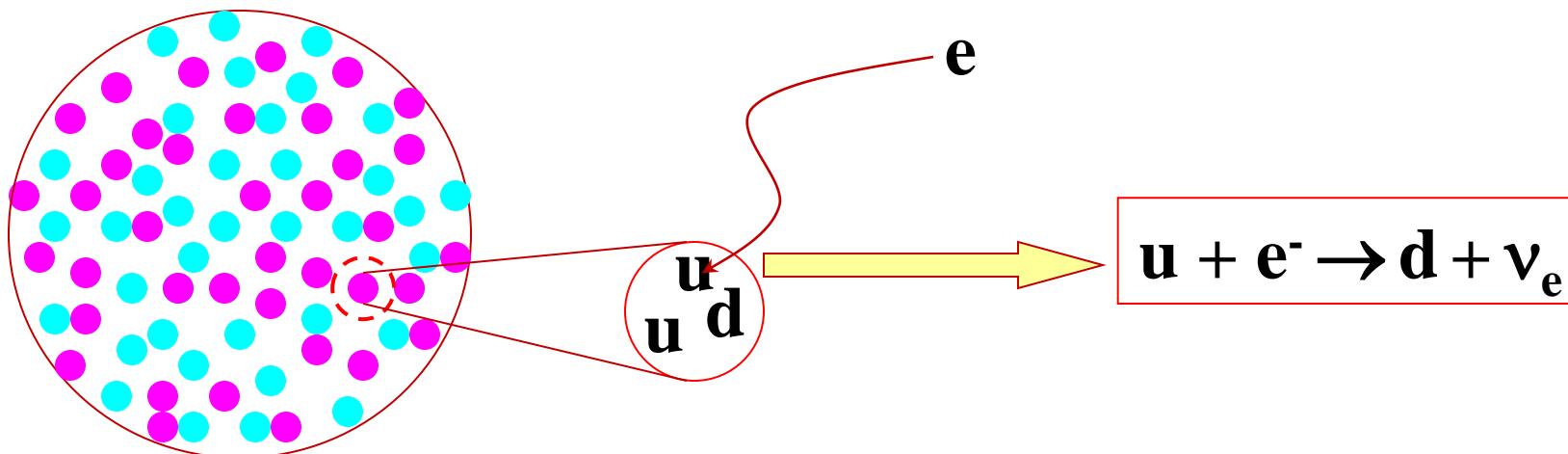
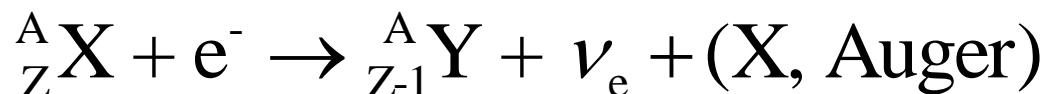
•  $\beta^-$ 衰变：



•  $\beta^+$ 衰变：



• EC过程与Auger电子：



# 2, 夸克、轻子间的弱作用

弱作用过程中轻子数守恒

- 太阳发射 $\nu_e$ ，而反应堆产生 $\bar{\nu}_e$ 。为什么？
- 轻子数 $L_e$ 、 $L_\mu$ 、 $L_\tau$ 分别守恒

	$e^-$	$e^+$	$\nu_e$	$\bar{\nu}_e$	$\mu^-$	$\mu^+$	$\nu_\mu$	$\bar{\nu}_\mu$	$\tau^-$	$\tau^+$	$\nu_\tau$	$\bar{\nu}_\tau$
$L_e$	1	-1	1	-1								
$L_\mu$					1	-1	1	-1				
$L_\tau$							1	-1	1	-1		



# 2, 夸克、轻子间的弱作用

弱作用过程中宇称不守恒

## • $\theta$ - $\tau$ 之谜 (1953-1954)

它们质量相等、寿命相同，但衰变方式不一样：

$$\tau^+ \rightarrow \begin{cases} 2\pi^+ + \pi^- \\ 2\pi^0 + \pi^+ \end{cases}$$

然而

$$\theta^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^0$$

已知 $\pi$ 介子宇称为“-1”，则 $\theta$ 、 $\tau$ 宇称不同，分别为+1、-1。

## • 李-杨 (1956) 提出设想：

弱作用过程中宇称是不守恒的，并建议实验检验。如：



# 2, 夸克、轻子间的弱作用

PHYSICAL REVIEW

VOLUME 104, NUMBER 1

OCTOBER 1, 1956

## Question of Parity Conservation in Weak Interactions\*

T. D. LEE, *Columbia University, New York, New York*

AND

C. N. YANG,† *Brookhaven National Laboratory, Upton, New York*

(Received June 22, 1956)

The question of parity conservation in  $\beta$  decays and in hyperon and meson decays is examined. Possible experiments are suggested which might test parity conservation in these interactions.

RECENT experimental data indicate closely identical masses<sup>1</sup> and lifetimes<sup>2</sup> of the  $\theta^+$  ( $\equiv K_{\pi 2}^+$ ) and the  $\tau^+$  ( $\equiv K_{\pi 3}^+$ ) mesons. On the other hand, analyses<sup>3</sup> of the decay products of  $\tau^+$  strongly suggest on the grounds of angular momentum and parity conservation that the  $\tau^+$  and  $\theta^+$  are not the same particle. This poses a rather puzzling situation that has been extensively discussed.<sup>4</sup>

One way out of the difficulty is to assume that parity is not strictly conserved, so that  $\theta^+$  and  $\tau^+$  are

### PRESENT EXPERIMENTAL LIMIT ON PARITY NONCONSERVATION

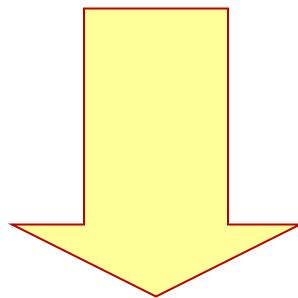
If parity is not strictly conserved, all atomic and nuclear states become mixtures consisting mainly of the state they are usually assigned, together with small percentages of states possessing the opposite parity. The fractional weight of the latter will be called  $F^2$ . It is a quantity that characterizes the degree of violation of parity conservation.

The existence of parity selection rules which work

# 2, 夸克、轻子间的弱作用

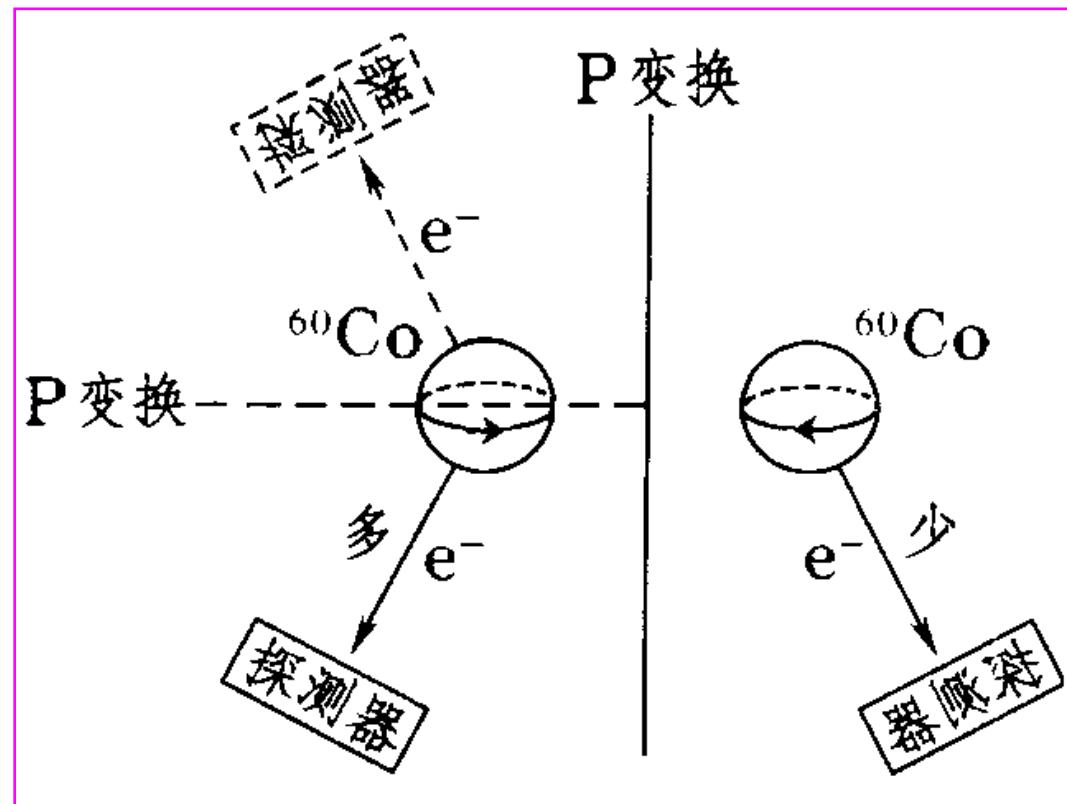
弱作用过程中宇称不守恒

- 吴健雄 (1957) 极化 $^{60}\text{Co}$ 实验



李-杨 (1957)  
Nobel物理奖

Dirac中微子 { 正中微子: 左手  
反中微子: 右手 }



# 2, 夸克、轻子间的弱作用

Wu et al., PR 105, 1413 (1957)

## Experimental Test of Parity Conservation in Beta Decay\*

C. S. Wu, Columbia University, New York, New York

AND

E. AMBLER, R. W. HAYWARD, D. D. HOPPES, AND R. P. HUDSON,  
National Bureau of Standards, Washington, D. C.

(Received January 15, 1957)

IN a recent paper<sup>1</sup> on the question of parity in weak interactions, Lee and Yang critically surveyed the experimental information concerning this question and reached the conclusion that there is no existing evidence either to support or to refute parity conservation in weak interactions. They proposed a number of experiments on beta decays and hyperon and meson decays which would provide the necessary evidence for parity conservation or nonconservation. In beta decay, one could measure the angular distribution of the electrons coming from

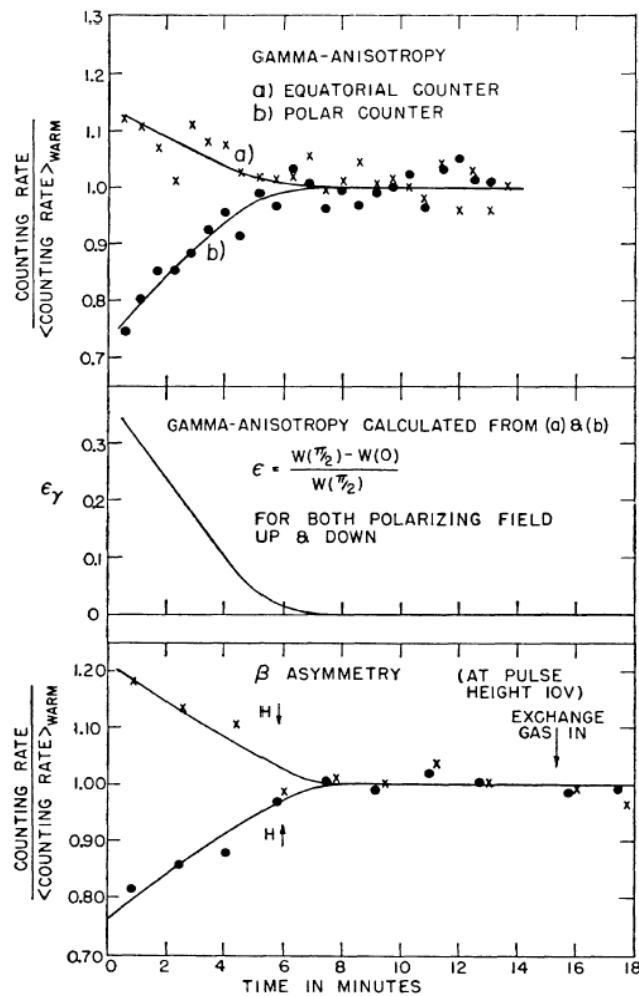
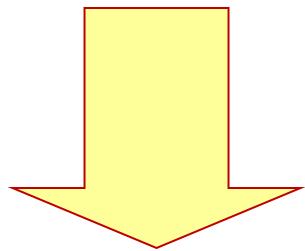


FIG. 2. Gamma anisotropy and beta asymmetry for polarizing field pointing up and pointing down.

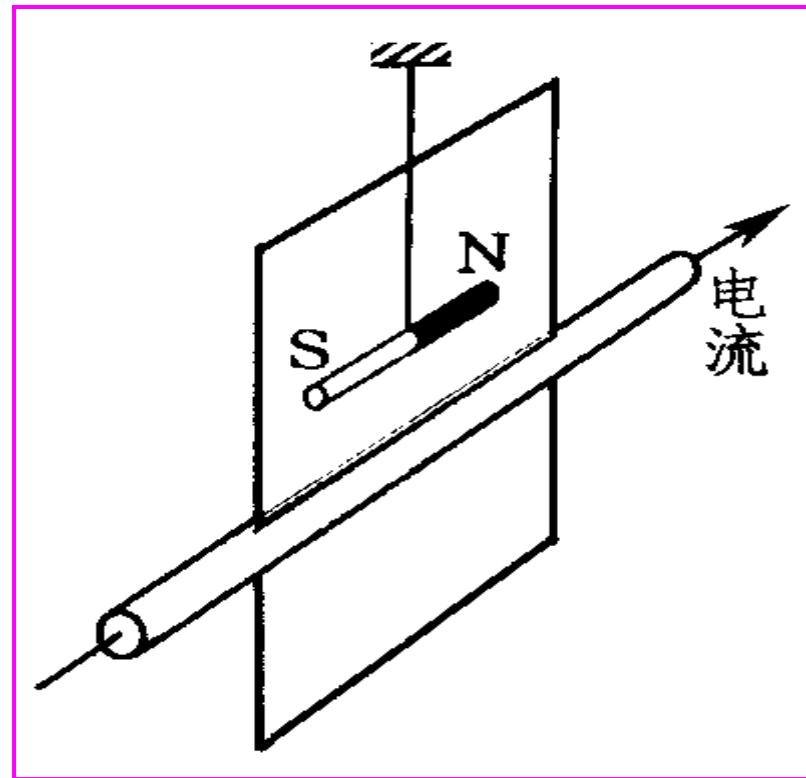
# 2, 夸克、轻子间的弱作用

CP守恒?

- 通电流之前装置是宇称变换 (P) **对称的**,  
而通电流之后出现P不对称偏转



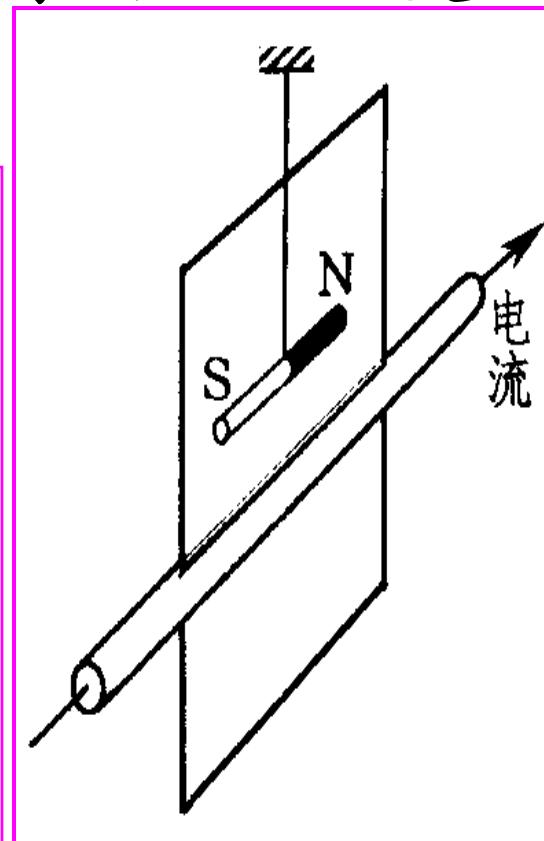
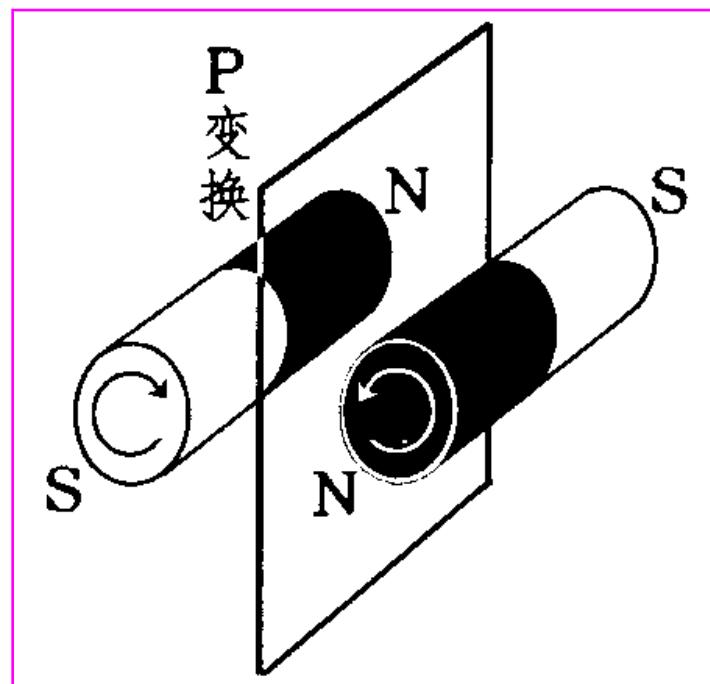
电磁现象P  
不守恒?



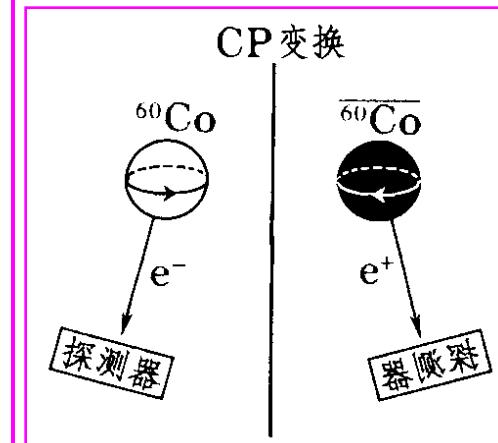
# 2, 夸克、轻子间的弱作用

## CP守恒性

- 考虑到磁棒内部分子环流的P变换，电磁作用的P守恒照样成立！



CP守恒？



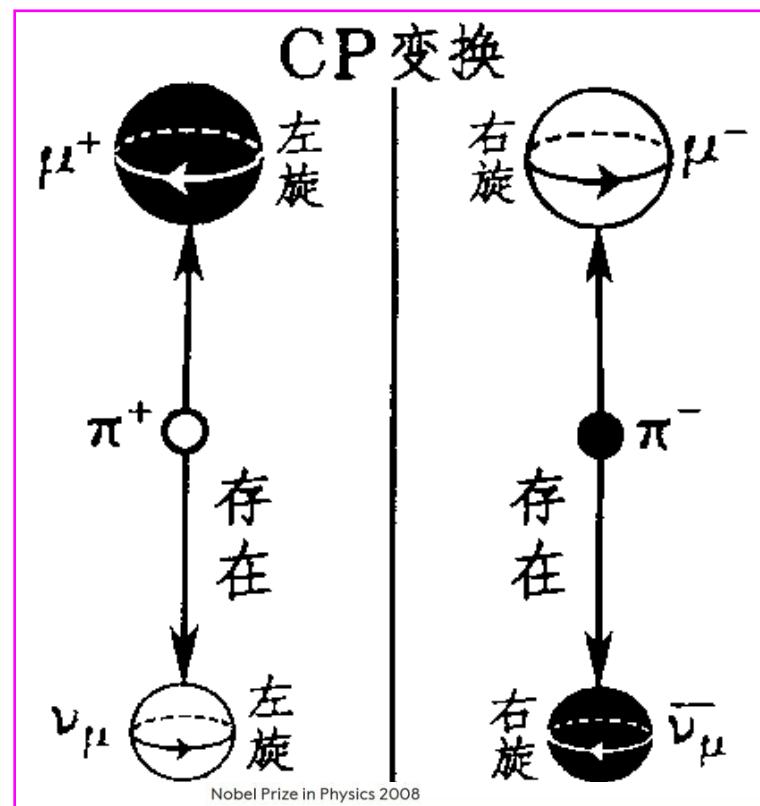
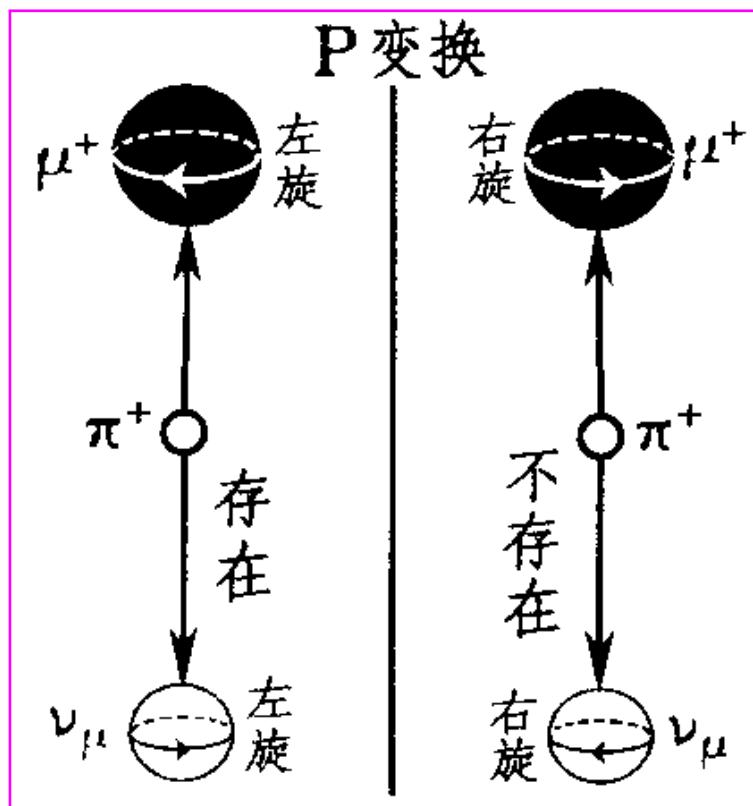
## 2. 夸克、轻子间的弱作用

# CP守恒性

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu$$

# CP变换

$$\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu$$



# CP破缺与重子起源...

1964: K介子衰变CP破缺→1973: 第3代夸克  
“for the discovery of the mechanism of spontaneous broken symmetry in subatomic physics”

Makoto Kobayashi and Toshihide Maskawa

"for the discovery of the origin of the broken symmetry which predicts the existence of at least three families of quarks in nature"

# 3, 夸克与强作用

- 强作用的两大特点：

1, 渐近自由  $\Leftarrow$  被QCD证明

$$\alpha_s(Q^2) = \frac{4\pi}{(11 - \frac{2}{3}n_f)\ln\frac{Q^2}{\Lambda^2}}$$

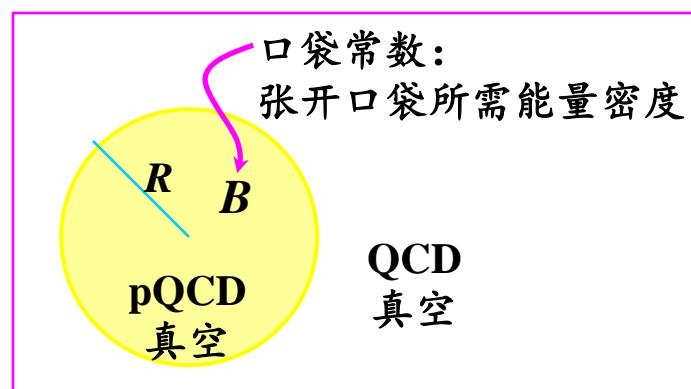
2, 色禁闭  $\Leftarrow$  未发现带色强子 (挑战：如何从QCD得到？)

- 低能强力的描述：格点QCD (LQCD) ?

- 低能强力的描述：唯象模型？

1, 组分夸克模型

2, 口袋模型



重子：  
 $M = \frac{3}{R} + \frac{4}{3}\pi R^3 B$

$$\frac{dM}{dR} = 0 \Rightarrow \frac{4}{3}\pi R^3 B = \frac{1}{R}$$

核子：

$$M = \frac{4}{R} \approx 900 \text{ MeV} \quad \left. \begin{array}{l} \\ R \approx 1 \text{ fm} \end{array} \right\} \Rightarrow B \approx 50 \text{ MeV} \times \text{fm}^{-3}$$

# 4, 费米子的味混合

## Fermion的味混合

- 味本征态（相互作用本征态）与质量本征态（能量本征态，定态）并不一致，出现味混合

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

{ 定态：  $E$  确定，  $|\Psi|$  不变  
非定态：  $E$  不定，  $|\Psi|$  可变

- 夸克之间弱的味混合：

回忆： $\text{NH}_3$ 分子等价双态

$$U^{\text{CKM}} \approx \begin{pmatrix} 0.974 & 0.227 & \sim 10^{-3} \\ -0.227 & 0.973 & 0.04 \\ \sim 10^{-3} & -0.04 & 0.999 \end{pmatrix}$$

近似单  
位矩阵

# 4, 费米子的味混合

## 中微子味混合（振荡）



- 1957: Bruno Pontecorvo (1913 - 1993) 建议 $\nu \leftrightarrow \bar{\nu}$ 振荡
- 1962: Shoichi Sakata (1911-1970), Ziro Maki (1929-2005) 和  
Masami Nakagawa (1932 - 2001)建议味转换（振荡）

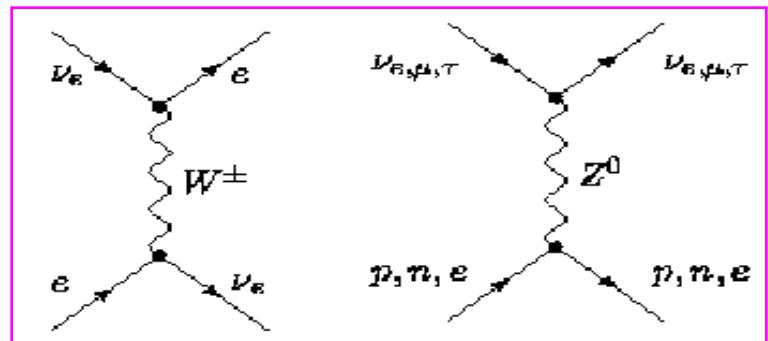
# 4, 费米子的味混合

## 中微子振荡：物质增强效应



- 中微子振荡物质效应 (MSW效应) : Wolfenstein (1978) ;  
Mikheyev和Smirnov (1985)

原因：正常物质中没有 $\mu$ 、 $\tau$ ，  
而 $\nu_e$ 与电子散射主导



# 4, 费米子的味混合

## 中微子振荡：太阳中微子问题

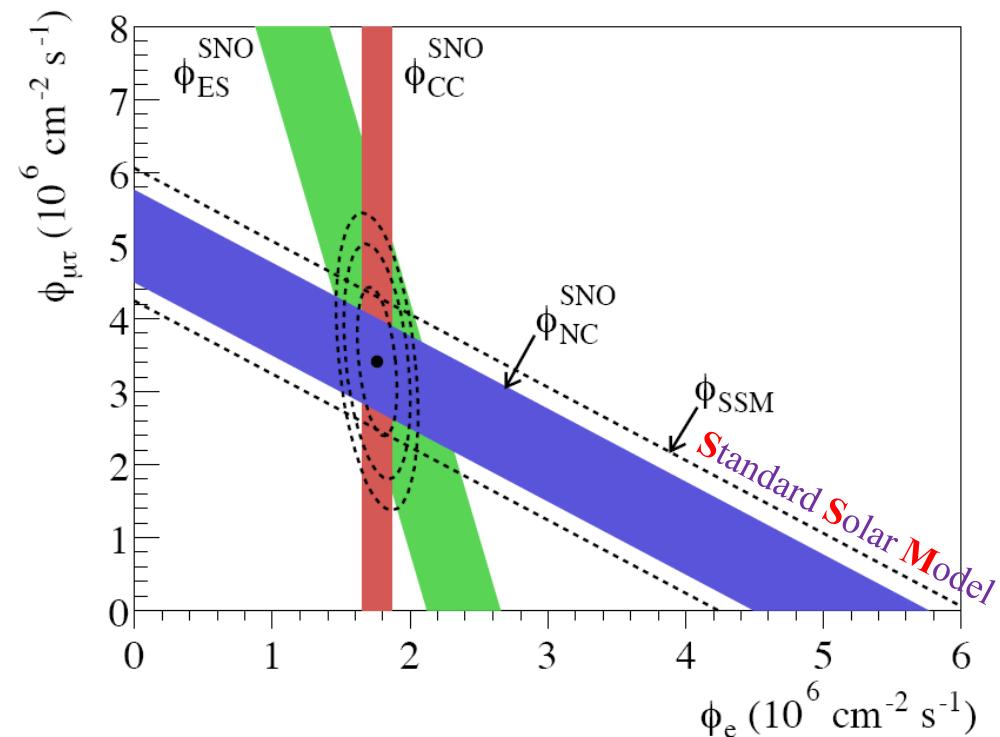
Sudbury Neutrino Observatory 实验： $10^6 \text{kg D}_2\text{O}$  靶， $>5 \text{MeV}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{ES: } \nu_x + e^- \rightarrow \nu_x + e^- \\ \text{CC: } \nu_e + D \rightarrow e^- + 2p \\ \text{NC: } \nu_x + D \rightarrow \nu_x + n + p \end{array} \right.$$

$$\phi_{CC} = [1.76^{+0.06}_{-0.05}(\text{stat.})^{+0.09}_{-0.09}(\text{syst.})] \times 10^6 / \text{cm}^2 \text{s}$$

$$\phi_{ES} = [2.39^{+0.24}_{-0.23}(\text{stat.})^{+0.12}_{-0.12}(\text{syst.})] \times 10^6 / \text{cm}^2 \text{s}$$

$$\phi_{NC} = [5.09^{+0.44}_{-0.43}(\text{stat.})^{+0.46}_{-0.43}(\text{syst.})] \times 10^6 / \text{cm}^2 \text{s}$$



Ahmad et al. PRC 75 (2007) 045502

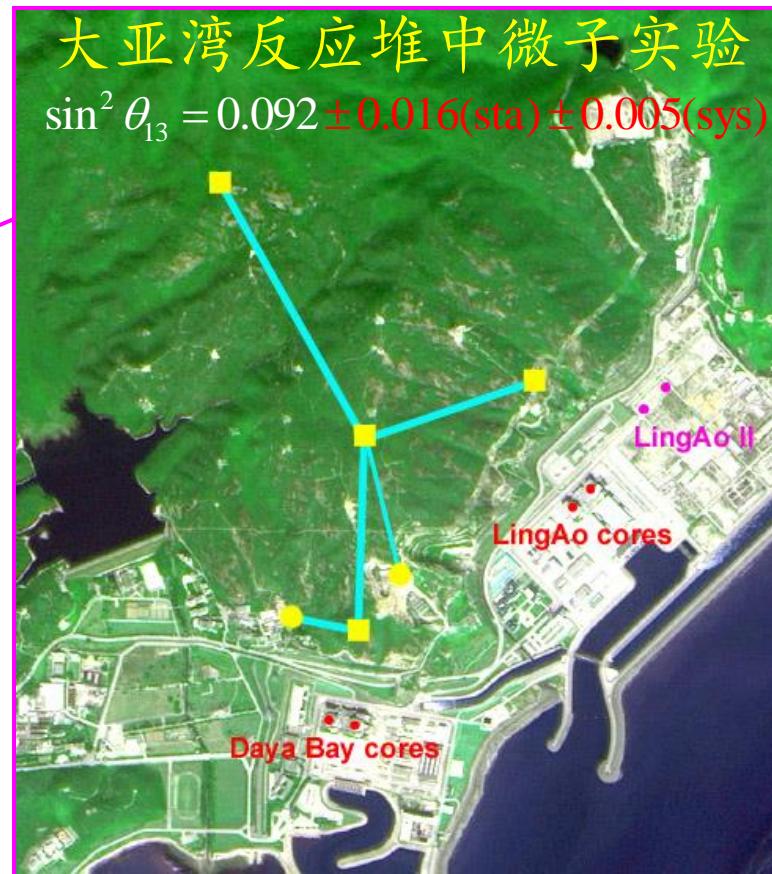
# 4, 费米子的味混合

中微子之间强的味混合

- 混合矩阵:

$$U \approx \begin{pmatrix} 0.8 & 0.5 & ? \\ 0.4 & 0.6 & 0.7 \\ 0.4 & 0.6 & 0.7 \end{pmatrix}$$

严重偏离单位矩阵



太阳中微子、大气中微子及堆中微子实验诠释中微子振荡

# 总 结

- 1, 相互作用Feynman图描述
- 2, 夸克、轻子间的弱作用
- 3, 夸克与强作用
- 4, 费米子的味混合

# 作 业

补充：已知核子质量约 $1\text{GeV}$ 。基于口袋模型的观点，试估计重子数为2的六夸克态质量。