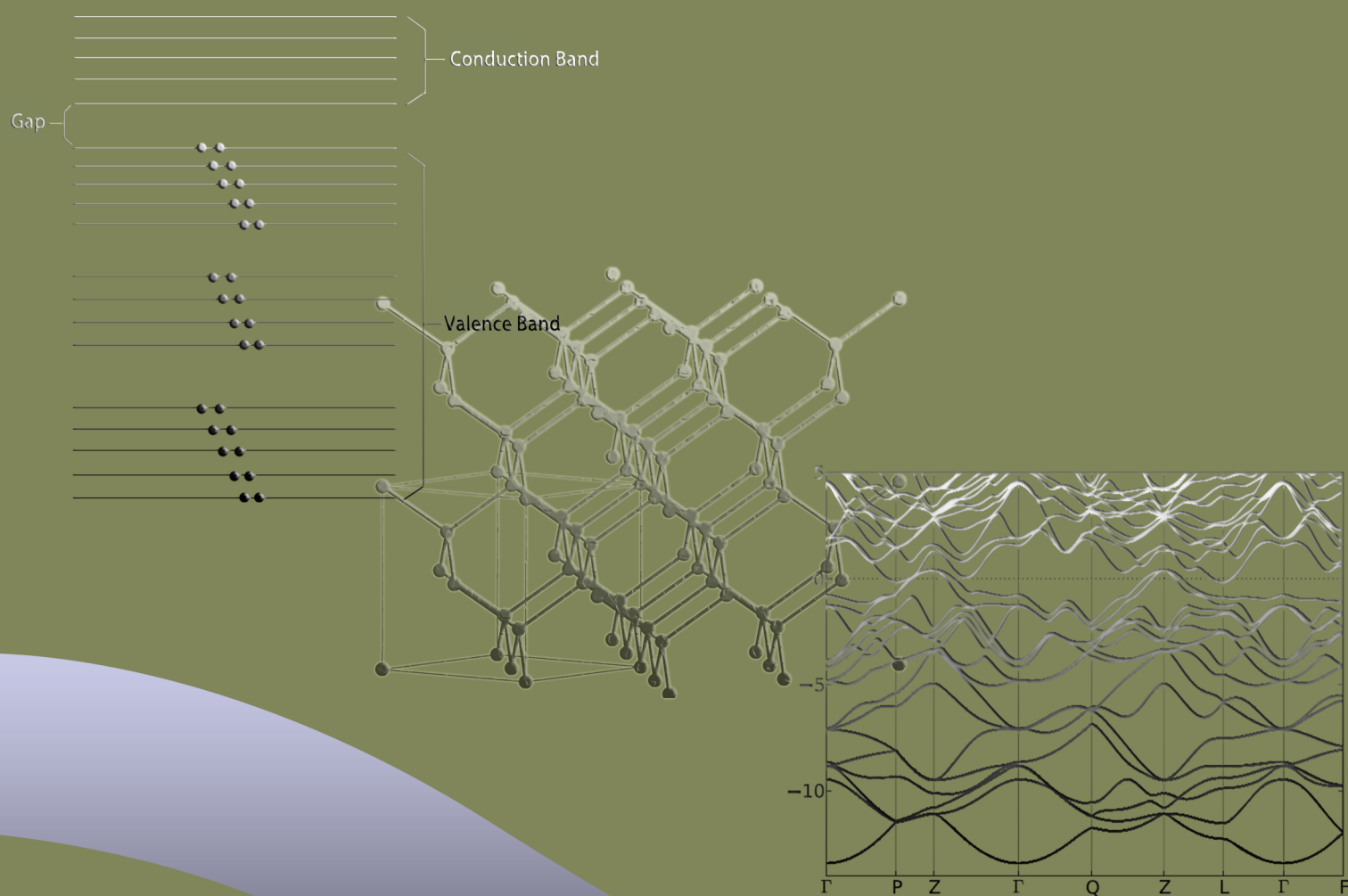


# Queen Mary, University of London

## School of Physics and Astronomy

### 基于玻尔量子化假设的能级结构讨论



巴尔莫经验公式:  $\frac{1}{\lambda} = \tilde{R}_H(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2})$ , ( $n \rightarrow m$ ,  $m < n$ ), 玻尔根据光谱的量子化特性提出了量子跃迁的假设:  $h\nu = E_n - E_m \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{E_n - E_m}{hc}$ , 对比巴尔莫经验公式与Bohr量子化假设得到的结果可以看出:  $E_n = -\frac{hc\tilde{R}_H}{n^2}$ , 这是基于玻尔量子化假设以及巴尔莫经验规律得到的轨道能量量子化的表达式。

而由位力定理, 轨道能量与轨道半径之间有如下关系:  $E_n = -\frac{e^2}{2r_n}$  ( $E_n = \frac{1}{2}V$ ,  $V = -\frac{e^2}{r}$ ), 所以有:

$$-\frac{hc\tilde{R}_H}{n^2} = -\frac{e^2}{2r_n} \Rightarrow r_n = \frac{e^2 n^2}{2hc\tilde{R}_H} \propto n^2 \quad (1)$$

从上述过程可以看出, 由轨道能量的量子化以及轨道能量与轨道半径之间的对应关系(经典物理范畴, 因此, 此处是在用半经典的方式讨论电子轨道的量子化条件)可以得到电子轨道的量子化条件, 只是这里的常数 $\tilde{R}_H$ 值尚未给出。

除了能级跃迁的量子化假设, 玻尔还给出了轨道量子化的假设, 称为玻尔量子化条件, 首先,  $m\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$ , 且有 $l = mvr$ , 因此得出 $l = \sqrt{me^2 r} \propto n$  (这里依然采用的半经典的方式讨论轨道量子化的问题), 玻尔正是在此基础上提出了 $l = n\hbar$ 的轨道量子化假设, 这里之所以将轨道角动量的量子化假设称为轨道量子化假设是因为轨道角动量与轨道半径之间的数量对应关系。进一步,  $l = mvr = pr = \frac{hr}{\lambda} = n\hbar \Rightarrow 2\pi r = n\lambda$ , 这就是电子波沿圆周形成驻波的条件。

由 $l = n\hbar$ 的假设以及 $l = \sqrt{me^2 r}$ 可以得到

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{me^2} \quad (2)$$

, 令 $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$ , (玻尔半径), 则 $r_n = n^2 a_B$ , 特殊情况 $n=1$ 时, 可以看出玻尔半径实际上代表的是氢原子的电子轨道半径。

最后, 将通过两种方式(能量量子化假设-公式(1)以及轨道量子化假设-公式(2))得到的轨道量子化表达式联系起来可以得到:

$$r_n = \frac{e^2 n^2}{2hc\tilde{R}_H} = \frac{n^2 \hbar^2}{me^2} \Rightarrow \tilde{R}_H = \frac{2\pi^2 me^4}{ch^3} \quad (3)$$

令 $R_H = hc\tilde{R}_H$ , 则 $E_n = -\frac{R_H}{n^2}$ , 习惯上, 将 $R_H$ 称为里德堡常数, 而将 $\tilde{R}_H$ 称为约化里德堡常数(以波数为单位的里德堡常数, 对比一开始给出的巴尔莫经验公式的两端可以看出, 左端给出的就是波数的单位, 于是与之对应的右端自然也是以波数为单位的)。

基于玻尔轨道能级量子化假设给出的原子能级结构公式:  $E_n = -\frac{hc\tilde{R}_H}{n^2}$ , 其中的 $\tilde{R}_H$ 是实验常数, 可以由Balmer谱线的规律总结得到, 而 $h$ 是Planck量子化假设中给出的一个常数, 二者之间仅在玻尔轨道能级量子化的前提下只是两个独立的参数, 并没有什么内在的联系, 问题是,  $\tilde{R}_H$ 的物理意义何在? 它真的只是一个简单的实验常数吗? 为了赋予 $\tilde{R}_H$ 相应的物理意义, 正如上面讨论的那样, 玻尔进一步作出的大胆的轨道角动量量子化假设, 这一个假设是第一性的, 至少在当时看来绝对是第一性的假设, 不基于任何的前提条件, 但是后来有了德布罗意物质波的概念以后, 实际上玻尔的轨道角动量量子化假设对应电子波在相应的轨道上形成驻波的情形。在玻尔轨道角动量量子化的前提下, 通过上面给出的一系列半经典的推导可以最终得到 $\tilde{R}_H$ 与 $h$ 以及电子质量、基本电荷等之间的关系, 即式-(3)中给出的关系, 这个关系式说明,  $\tilde{R}_H$ 并不是一个简单的实验



常数，它和Planck常数以及电子质量、电量等之间存在着物理上的联系。另外还需要特别指出的是，基于玻尔的能级量子化以及轨道角动量量子化的两个假设得到的 $\tilde{R}_H$ 计算式，当把式中所有参数值带入可以得到一个 $\tilde{R}_H$ 的理论值，将这一理论值与实验得到的 $\tilde{R}_H$ 对比发现，二者之间吻合的非常好，这一方面说明玻尔假设是“物理的”，另一方面也从侧面说明了Planck假设的物理性。

最后，将与玻尔原子模型相关的公式列出：

$$r_n = n^2 a_B \quad \text{原子轨道半径} \quad (4)$$

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.52 \text{\AA} \quad \text{玻尔半径} \quad (5)$$

$$\tilde{R}_H = \frac{2\pi^2 me^4}{ch^3} = 109,737.31 \text{ cm}^{-1} \quad \text{约化里德堡常数} \quad (6)$$

$$R_H = ch\tilde{R}_H = \frac{2\pi^2 me^4}{h^2} = 13.6 \text{ eV} \quad \text{里德堡常数} \quad (7)$$

$$E_n = -\frac{2\pi^2 mZ^2 e^4}{h^2 n^2} \quad \text{类氢原子量子化能级} \quad (8)$$

