

《原子物理学》

第三章 量子力学初步

1-2节课

上章内容小结

- 普朗克量子理论
- 光电效应
- 氢原子光谱线系
- 玻尔氢原子理论
- 夫兰克-赫兹实验
- 类氢原子
- 奇异原子

提纲

- 康普顿散射
- 物质的波粒二象性
- 海森堡不确定关系
- 波函数及其统计解释
- 薛定谔方程
- 氢原子的薛定谔方程解

光子的动量

- 1916年爱因斯坦将光量子的概念延拓，提出光量子具有线动量（直线中的动量），并满足

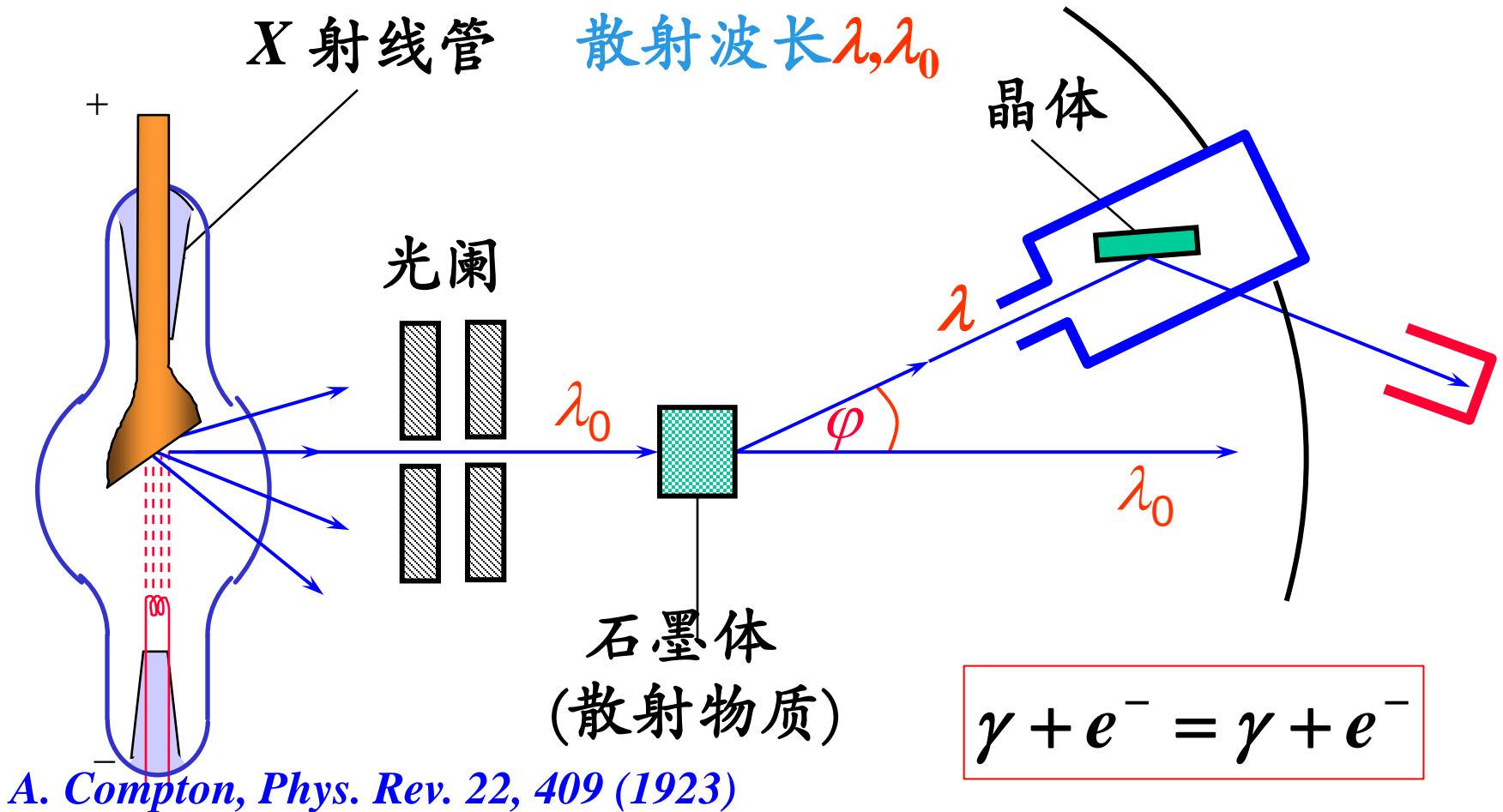
$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

- 因此，当一个光子和物质相互作用时，就会发生能量和动量的转移，就好像在经典意义上光子和电子发生一次碰撞一样，可以建立系统能量与动量守恒方程。

康普顿散射实验

1-1000keV(1nm-1pm) \gg 13.6eV

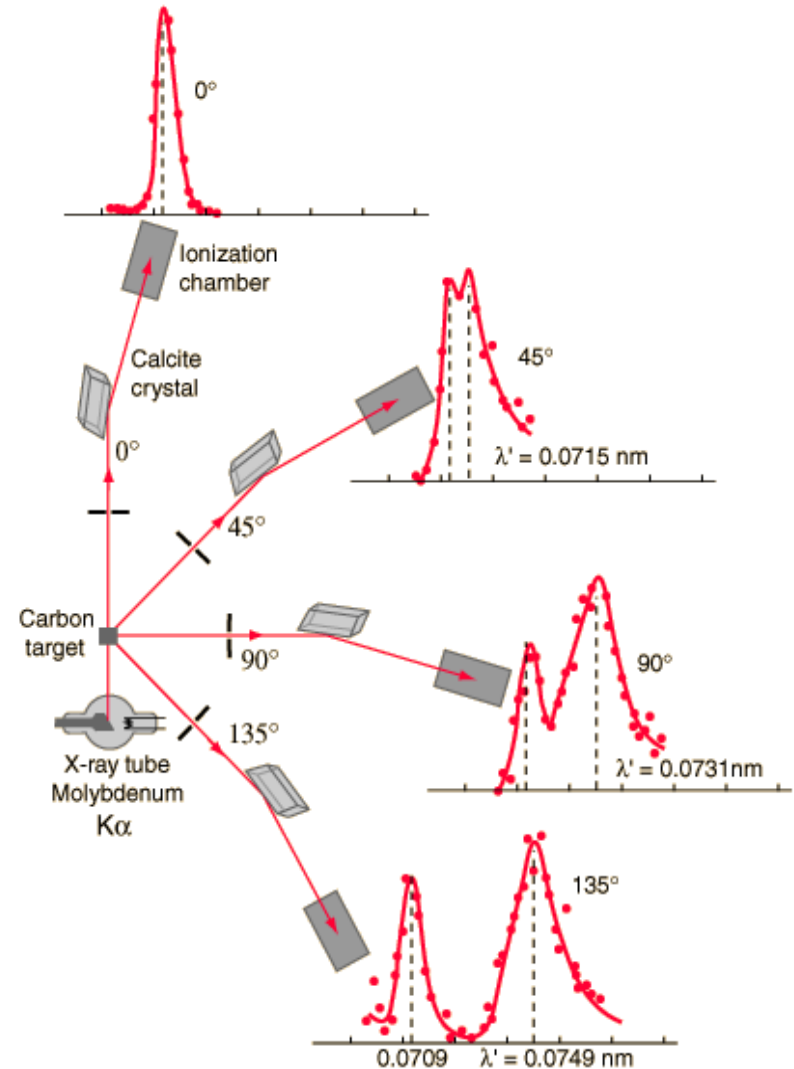
- 1922-23年康普顿研究了X射线在石墨上的散射



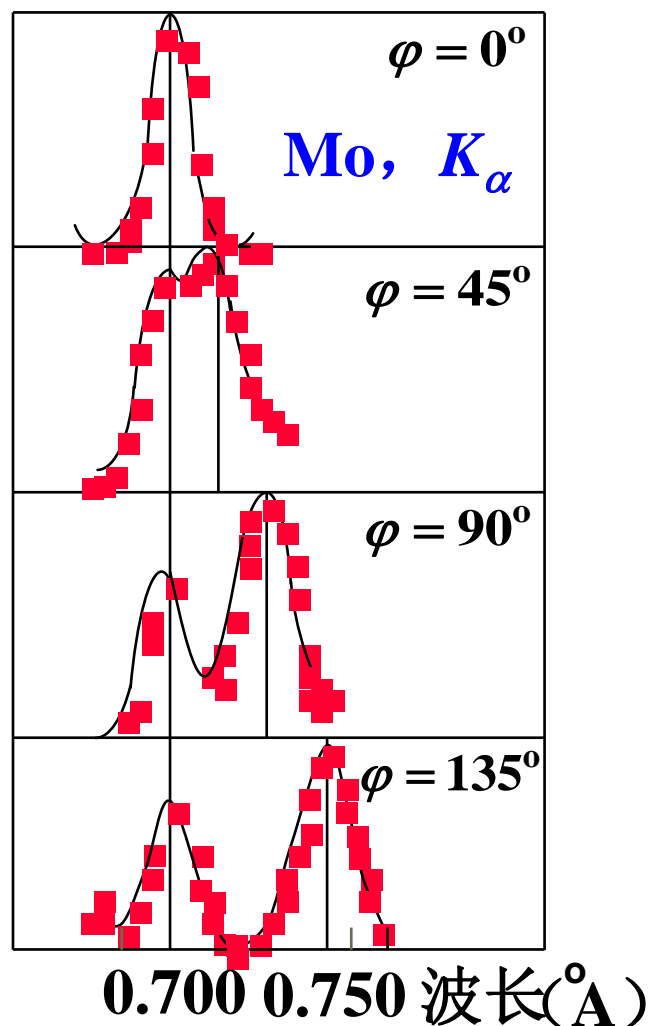
康普顿在做康普顿散射实验



(A. H. Compton)
美国人(1892-1962)



康普顿散射实验结果



- 散射出现了 $\lambda \neq \lambda_0$ 的现象，称为康普顿散射
- 散射曲线的三个特点
 - 除原波长 λ_0 外，出现了移向长波方面的新的散射波长 λ
 - 新波长 λ 随散射角 φ 的增大而增大
 - 当散射角增大时，原波长的谱线强度降低，而新波长的谱线强度升高

康普顿效应

- 新散射波长 $\lambda > \lambda_0$ ，波长的偏移 $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$ 只与散射角 φ 有关，和散射物质无关。
- 实验规律总结：
$$\Delta\lambda = \lambda_c (1 - \cos \varphi) = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\varphi}{2}$$
- $\lambda_c = 0.0241\text{\AA} = 2.41 \times 10^{-3}\text{nm}$ （实验值）
- λ_c 称为电子的康普顿波长
- 只有当入射波长 λ_0 与 λ_c 可比拟时，康普顿效应才显著。因此要用X射线才能观察到！

经典电磁理论遇到的困难

- 经典电磁波理论，当电磁波通过散射物质时，物质中带电粒子将作受迫振动，其频率等于入射光频率，所以它所发射的散射光频率应等于入射光频率

- 无法解释波长和散射角的关系

- 康普顿用光子理论做了成功的解释：

- X射线光子与“静止自由电子”弹性碰撞

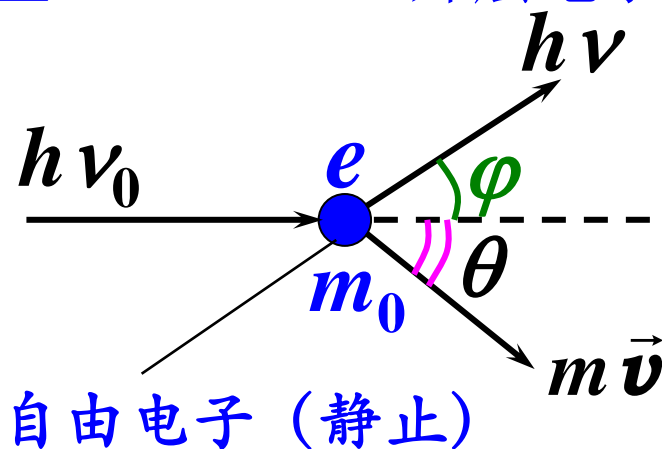
（波长 1\AA 的X射线，其光子能量 $E \sim 10^4 \text{eV}$ ，外层电子束缚能 $\sim \text{eV}$ ，室温下 $kT \sim 10^{-2} \text{eV}$ ）

- 碰撞过程中能量与动量守恒

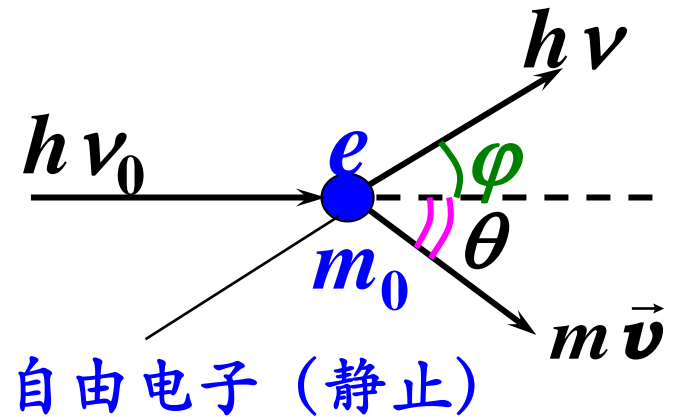
碰撞 \Rightarrow 光子把部分能量

传给电子 \Rightarrow 光子的能量 \downarrow

\Rightarrow 散射X射线频率 \downarrow 波长 \uparrow



理论推导 (1)



$$\left\{ \begin{array}{l} \text{能量守恒: } h\nu_0 + m_0 c^2 = h\nu + m c^2 \\ \text{动量守恒: } \frac{h\nu_0}{c} \hat{n}_0 = \frac{h\nu}{c} \hat{n} + m \vec{v} \\ \text{反冲电子质量: } m = m_0 / \sqrt{1 - v^2 / c^2} \end{array} \right.$$

平行/垂直入射方向动量守恒:

$$\frac{h\nu_0}{c} = \frac{h\nu}{c} \cos \varphi + m v \cos \theta \quad (2)$$

$$\frac{h\nu_0}{c} \sin \varphi = m v \sin \theta \quad (3)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{h\nu_0}{c} \right)^2 + \left(\frac{h\nu}{c} \right)^2 - \frac{2h^2 \nu \nu_0}{c^2} \cos \varphi = m^2 v^2 \quad (4)$$

理论推导 (2)

$$\left(\frac{h\nu_0}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - \frac{2h^2\nu\nu_0}{c^2}\cos\varphi = m^2v^2 \quad (4)$$


能量守恒: $h(\nu_0 - \nu) + m_0c^2 = mc^2 \quad (1)$

两边平方: $h^2(\nu_0 - \nu)^2 + m_0^2c^4 + 2m_0c^2h(\nu_0 - \nu) = m^2c^4 \quad (5)$

把相对论电子质量公式 $m^2 = \frac{m_0^2c^2}{c^2 - v^2} \quad (6)$

代入 (4) 和 (5) , (5) - (4) *c² 得:

$$m_0c^2(\nu_0 - \nu) = h\nu\nu_0(1 - \cos\varphi)$$

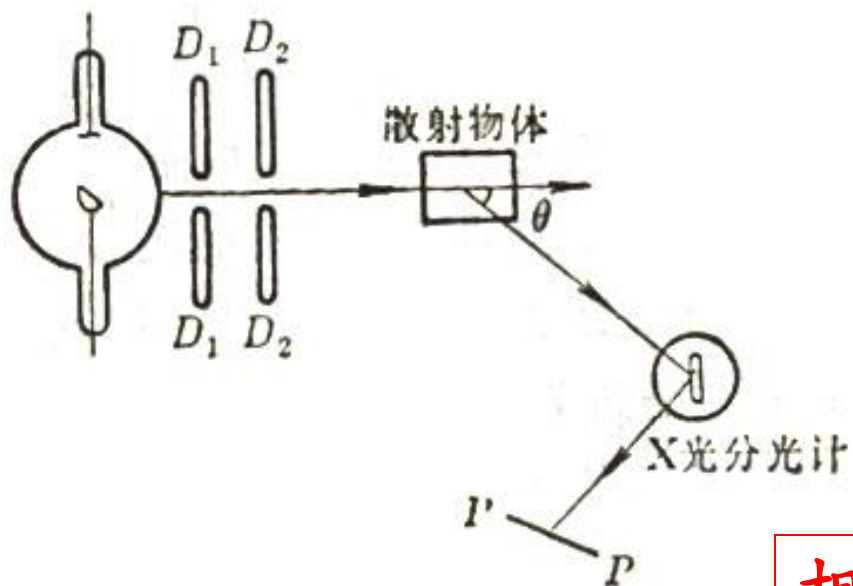

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{c}{\nu} - \frac{c}{\nu_0} = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\varphi) = \lambda_c(1 - \cos\varphi)$$

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0c} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{9.1 \times 10^{-31} \times 3 \times 10^8} (\text{m}) = 2.43 \times 10^{-3} \text{nm} \quad (\text{理论值})$$

几个讨论

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos\varphi)$$

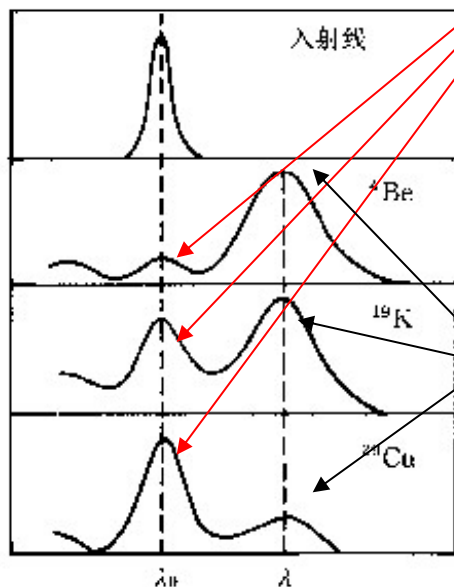
- 康普顿散射中还有原波长 λ_0 成分？
 -
- 为什么康普顿效应中的电子不能像光电效应那样吸收光子而是散射光子？
- 为什么在光电效应中不考虑动量守恒？
- 为什么可见光观察不到康普顿效应？
- 不同能区的光子发生不同的作用（更高能量？正负电子产生）



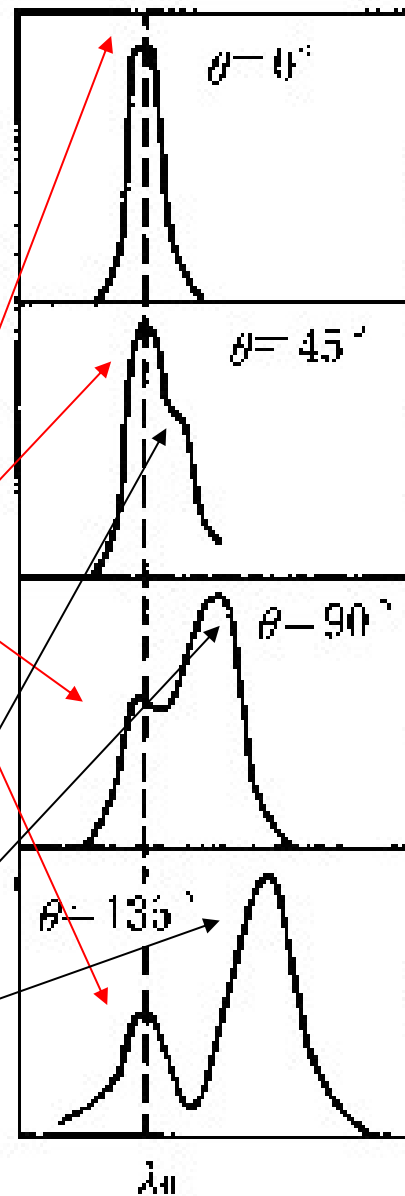
同一元素在不同角度的散射

相干散射

不同元素在同一角度的散射



非相干散射



康普顿散射实验的意义

- 支持了“光量子”概念，进一步证实了

$$E=h\nu$$

- 首次实验证实了爱因斯坦提出的“光量子具有动量”的假设

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

- 证实了在微观领域的单个碰撞事件中，动量和能量守恒定律仍然是成立的。
- 康普顿获得1927年诺贝尔物理学奖。

康普顿—吴有训效应

- 康普顿1923年发现这一效应，但是哈佛大学居里夫人的弟子杜安尼没有重复出这个实验。
- 中华民国十二年（1923年），吴有训成为他的研究生，与康普顿教授一起从事X射线散射光谱研究。
- 中华民国十三年（1924年），他与康普顿合作发表《经过轻元素散射后的钼K α 射线的波长》。
- 中华民国十四年（1925年），吴有训在康普顿的指导下做博士论文，题目就叫“康普顿效应”。通过答辩获得芝加哥大学哲学博士学位，并留校任助教。



1897-1977

吴有训教授

也有人称
康普顿—
吴有训效应

光子概念小结

光子，或者**光量子**的物理概念，是建立在3个著名的物理实验基础上的：

1. **黑体辐射实验**：黑体空腔中的光波，其能量只能取 $E=nh\nu$ 的形式，能量分立。
2. **光电效应实验**：光波由一个个的光子组成，每个光子是一个整体，被电子吸收。
3. **康普顿散射实验**：光子具有动能、动量，与电子作用的过程中，满足守恒律。

这时还没有普遍意义上的量子概念

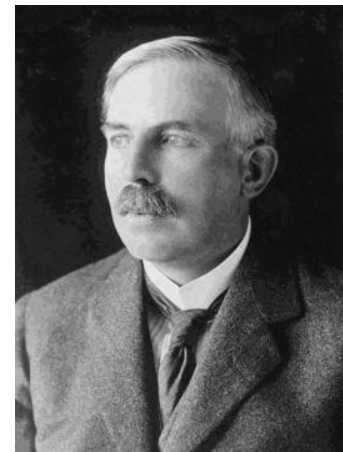
波粒二象性和物质波

玻尔理论困难回顾

- 定态到底为什么不能辐射？
- 卢瑟福（Rutherford）：‘跃迁时，电子必须事先知道它要往哪里跳，才知道该吸收哪个能量的光；但是不吸收光，又怎么知道末态的情况’——逻辑循环
- 薛定谔（Schrodinger）：“糟透的跃迁”-- 电子在跃迁过程中，在哪里？

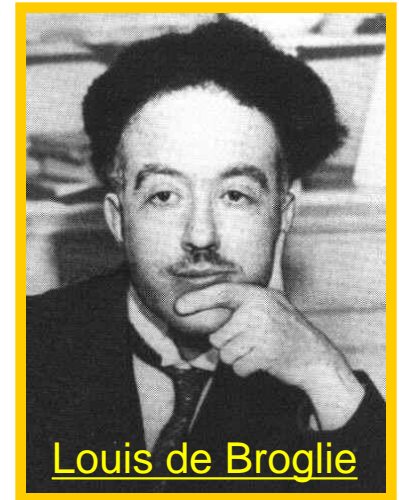
玻尔理论（旧量子论）把经典物理的规律用于微观粒子，有不可克服的困难！

玻尔（1922领诺奖）：“这一理论十分初步，许多基本问题还有待解决！”



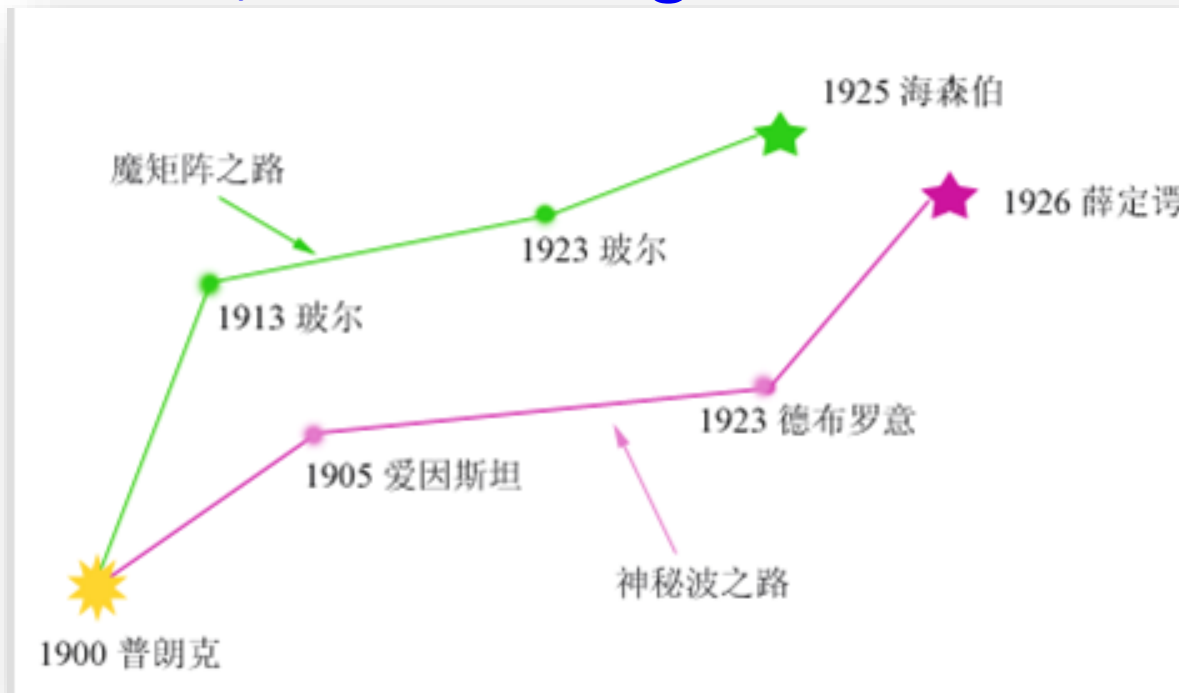
The History of Quantum Theory

- 1900, Planck: Quantum of Energy
- 1905, Einstein: Light Quantum
- 1913, Bohr: Quantum State
- 1925, Pauli: Pauli Exclusion Principle
- 1925, Uhlenbeck(乌伦贝克) & Goudsmit(古德斯特): Discovery of Electron Spin
- 1924, de Broglie: Wave-Particle Duality
- 1925-1928, Heisenberg, Born; Schroedinger; Dirac: Quantum Mechanics



The History of Quantum Theory

- 1900, Planck: Quantum of Energy
- 1905, Einstein: Light Quantum



Principle
Electron Spin
Wave-Particle Duality
Schrödinger;

“孩子们的物理学”

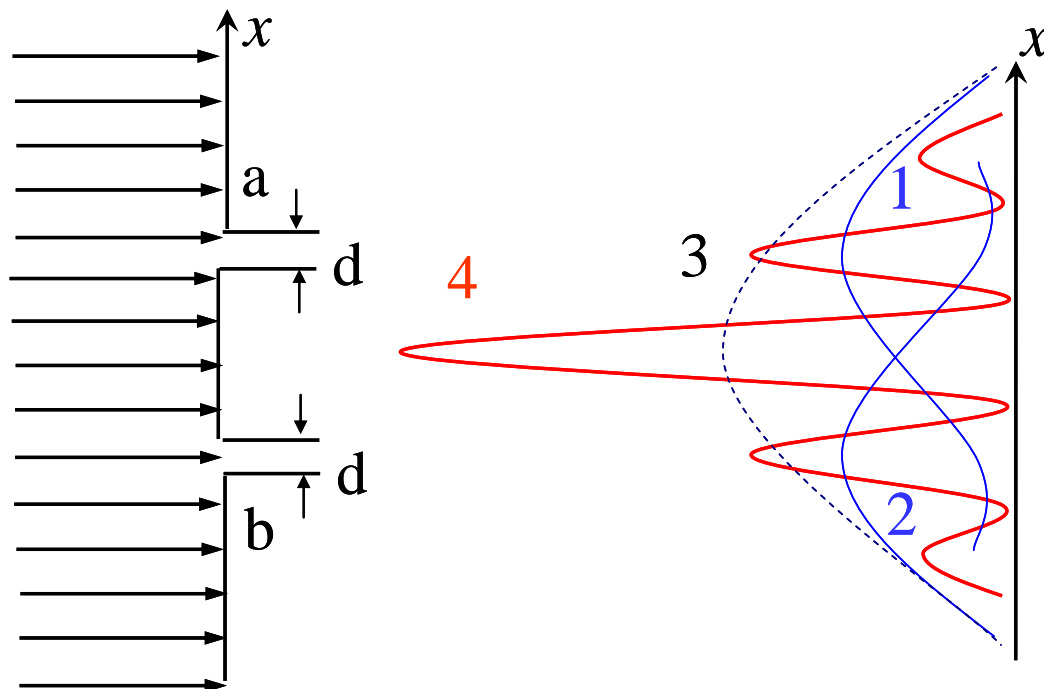
- 1923年，**31岁**的法国人路易斯·德布罗意(Louis de Broglie)考虑，光波既然有时表现出粒子特性，那么实物粒子，例如电子，是不是有时也应该表现的像波一样？**提出物质波理论**
- 1925年，**24岁**的夏天海森堡(Werner Heisenberg)离开哥本哈根回老家的旅行中为了治疗枯草热病在赫林戈兰德(Heligoland) 岛作了短暂停留，期间产生了一个很惊人的卓越思想：玻尔模型的困难是因为它以实际上不可能观测到的一些假设 -- 如电子轨道为基础。取而代之，他的物理量以初末态来标志，**建立了“矩阵力学”**。波恩把它与爱因斯坦抛弃绝对时空观的概念相媲美。**26岁**时又提出了**不确定原理**。

“孩子们的物理学”

- 1925年，**23岁**的帕斯克沃尔.乔丹(Pascual Jordan) 与玻恩(**43岁**)，海森堡一起**创立量子力学**。
- 1925年，**38岁**的奥地利科学家欧文.薛定谔(Erwin Schrodinger) 与朋友去滑雪。然而，他没有心思滑雪，因为在瑞士的阿尔卑斯山上他“被一些计算问题弄得心烦意乱”。薛定谔决定把德布罗意的概念用于数学形式。结果产生了描述原子的新方法，称为**“波动力学”**。
- 1926 泡利 (**26岁**) 提出电子的**不相容原理**。
- 1928年，**26岁**的英国物理学家保罗.狄拉克(Paul Dirac)提出**创立相对论量子力学**，负能解对应为反粒子。

光的波粒二象性—双缝干涉实验

单光子也能产生干涉条纹
⇒ 光到底是粒子还是波？



光的波粒二象性

- **波动性**: 光的干涉和衍射
- **粒子性**: (黑体辐射, 光电效应, 康普顿散射等) $E = h\nu$
- 相对论能量和动量关系 $E^2 = p^2 c^2 + E_0^2$
- 光子 $E_0 = 0, \quad E = pc$

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

描述光的
粒子性

$$\left. \begin{array}{l} E = h\nu \\ p = \frac{h}{\lambda} \end{array} \right\}$$

描述光的
波动性

法国物理学家德布罗意

- Louis Victor de Broglie 1892 – 1987
- 波粒二象性（wave-particle duality）
- 思想方法
 - 自然界在许多方面都是明显地对称的，采用类比的方法提出物质波的假设。
 - 光子的波动和微粒性与原子中电子定态运动的比较
→ 物理学中包含整数的现象是在干涉和简正振动的情况下才发生。 电子不能只是简单的微粒？
- “整个世纪以来，在辐射理论上，比起波动的研究方法来，是过于忽略了粒子的研究方法；在实物理理论上，是否发生了相反的错误呢？是不是我们关于‘粒子’的图象想得太多，而过分地忽略了波的图象呢？”



1929年诺贝尔物理学奖，成为第一个以学位论文获奖的学者。

1923年9月和10月，德布罗意发表了三篇关于物质波的论文（现在叫小论文），创立了物质波理论。之后才是他的大论文《量子理论的研究》，1924年11月答辩通过，获得博士学位。此时32岁(国内很多博士26岁就毕业了)。当然5年后，1929年就赢得了诺贝尔物理学奖，这比较快。

德布罗意假设（1924 年）

- 光：波粒二象性 \Rightarrow 实物粒子：波粒二象性

$$E = h\nu$$

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

- 德布罗意公式

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad \nu = \frac{E}{h} = \frac{mc^2}{h}$$

注意

若 $v \ll c$ 则 $m = m_0$

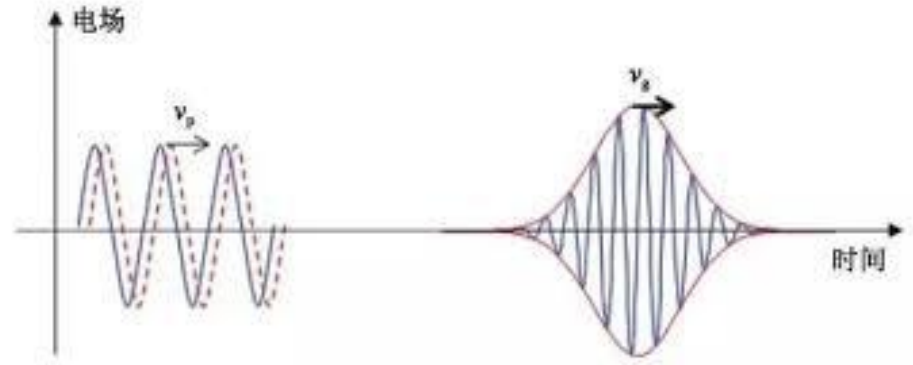
若 $v \rightarrow c$ 则 $m = \gamma m_0$

- 宏观物体的德布罗意波长小到实验难以测量的程度，因此宏观物体仅表现出粒子性

群速度与相速度

$$v = \frac{E}{h}, \lambda = h/p$$

$$v_p = E/p$$



- E 应为 $\gamma m_0 c^2$, p 为 $\gamma m_0 v$, 则 $v_p = \frac{c^2}{v} > c$ (相速度超光速)

- 群速度 $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\partial (E/\hbar)}{\partial (p/\hbar)} = \frac{\partial E}{\partial p}$

- 非相对论下, $v_g = \frac{\partial (p^2/2m)}{\partial p} = \frac{p}{m} = v$

- 相对论下, $v_g = \frac{\partial (\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4})}{\partial p} = \frac{pc^2}{E} = v = c^2/v_p$

参考系选择

- $P = \left(\frac{E}{c}, \vec{p}\right) = m_0 \gamma (c, v_g \vec{n})$
- $K = \left(\frac{\omega}{c}, \vec{k}\right) = \left(\frac{\omega}{c}, \frac{\omega}{v_p} \vec{n}\right)$
- 在 \vec{p} 为0的参考系，则有波长为 ∞ , $h\nu_0 = m_0 c^2$ (德布罗意推导的基础, $\nu_0 = E/h$), 参考系变换后, 频率增大为 $\gamma \nu_0$
- 相对论多普勒效应 $f_s = \frac{\gamma f_0}{1 - \beta}$, $(1 - \beta)$ 来自于相对运动, 故两者相符
- $P = \hbar K$

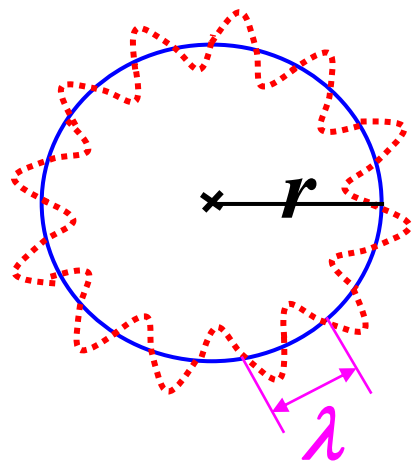
如何理解

- 粒子（如质子）是一个大的波包,但不是经典意义的波包，否则由于相速度的不同，粒子会解体；是概率意义的波包
- 相速度超过光速
- 平面波，具有确定的速度和能量，弥散在整个时空
- 波包的不同组分的波长，根据不确定原理 $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ 动量不确定
- 粒子的运动速度可以理解为波包的群速度
- 即是在“所谓”粒子静止的参考系，粒子实际上也在不断运动

电子究竟是什么：粒子还是波

- Feynman语录：“电子既不是粒子也不是波”
- 更准确地复述Feynman的观点：“电子既不是经典粒子，也不是经典的波”
- 按照辩证法：电子即是粒子，也是波，但波不是经典物理里面的波，粒子也不是经典物理里面的质点
- 波动性和粒子性不能同时共存

物质波的概念⇒轨道量子化条件



$$\left. \begin{array}{l} \text{稳定轨道 } 2\pi r = n\lambda \\ \text{波长 } \lambda = \frac{h}{p} \end{array} \right\} \rightarrow 2\pi r m v = n h$$

- 1924.11.29德布罗意把题为“量子理论的研究”的博士论文提交巴黎大学
- 论文获得了评委会的高度评价
- 朗之万把德布罗意的文章寄给爱因斯坦⇒物质波理论受到了关注
- 德布罗意：电子在晶体上的衍射实验⇒验证物质波

例题

- 在一束电子中，电子的动能为 200eV，求此电子的德布罗意波长 λ ？

解 $v \ll c, E_k = \frac{1}{2}m_0v^2 \quad v = \sqrt{\frac{2E_k}{m_0}}$

$$v = \sqrt{\frac{2 \times 200 \times 1.6 \times 10^{-19}}{9.1 \times 10^{-31}}} \text{m} \cdot \text{s}^{-1} = 8.4 \times 10^6 \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$$

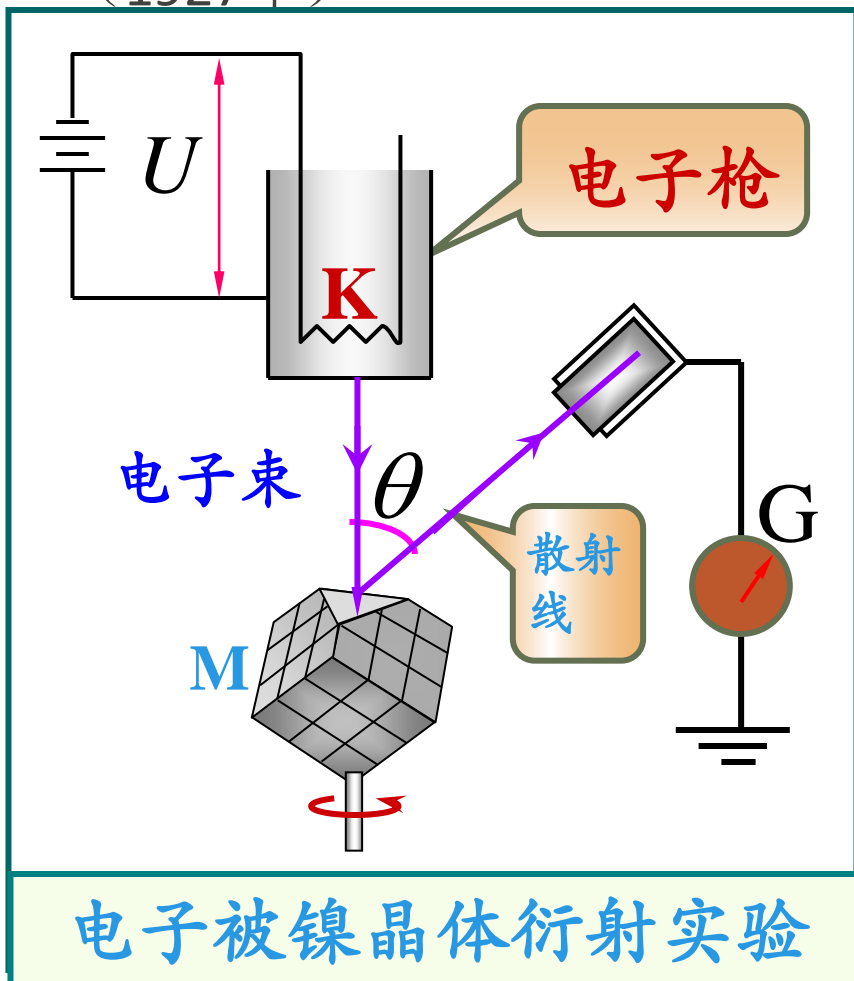
$$\because v \ll c \quad \therefore \lambda = \frac{h}{m_0v} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{9.1 \times 10^{-31} \times 8.4 \times 10^6} \text{nm}$$

$$\lambda = 8.67 \times 10^{-2} \text{nm}$$

- 此波长的数量级与 X 射线波长的数量级相当。

德布罗意波的实验证明

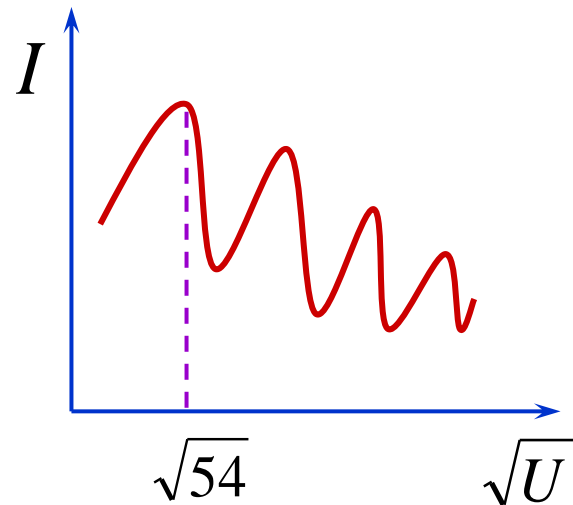
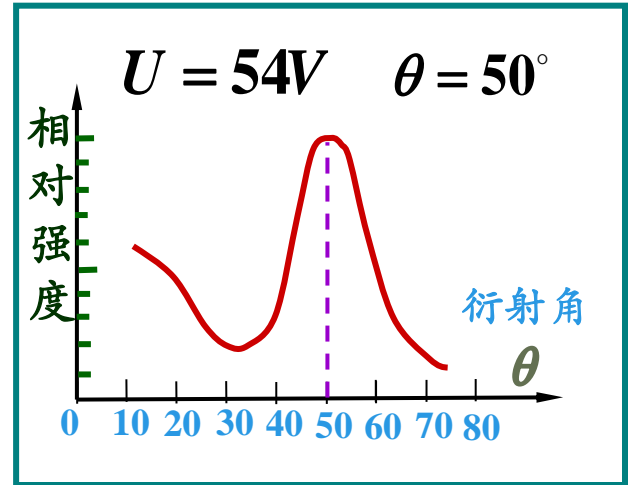
- 戴维孙—革末电子的晶体（三维空间结构周期性变化）衍射实验（1927年）



电子从灯丝K射出，经电势差为 U 的加速电场，通过狭缝后成为很细的电子束，投射在镍晶体M上，电子束在晶体面上散射后进入电子探测器，其电流由电流计G测出。

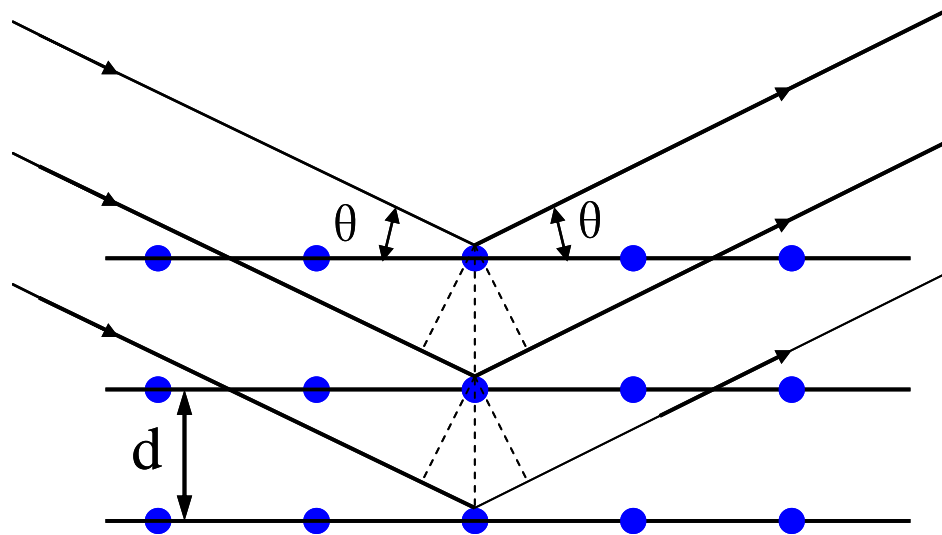
戴维孙—革末实验结果

- 散射电子束在某些方向上特别强；这种现象类似于X射线被单晶衍射的情形，从而显示了电子束的波动特性。
- 使电子束与散射线之间的夹角 θ 保持不变,并测量在不同加速电压下散射电子束的强度
 - 电子束流强度并不随加速电压而单调变化，而是出现一系列峰值
 - $U=54V$ 时，有明显的极大



电子与晶体衍射的物理图像

- 用类似X射线衍射，把电子束看成一束波入射到晶体点阵上，设两入射平行线距离为 d ，垂直入射散射角为 θ 的方向上相邻两原子散射线的波程差为：



$$2d \sin \theta = n\lambda$$

波程差 $2d \sin \theta = n\lambda$ 时加强----布拉格公式（父子诺贝尔奖）

可见，当 θ 、 λ 满足此式时，测得电流的极大值

戴维孙—革末实验结果的理论分析

- 镍晶格常数: $d = 0.215 \text{ nm}$
- 电子的波长: $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} \approx \frac{h}{\sqrt{2m_e E_K}}$
 - 注意当 $v \ll c$ 时 $p = \sqrt{2m_e E_K}$
- 在戴维-孙革末实验中, 电压为 54 伏, 因此

$$\lambda = \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{\sqrt{2 \times 0.511 \times 10^6 \text{ eV} \cdot 54 \text{ eV}}} = 0.167 \text{ nm}$$

- 得到: $\theta = 50.9^\circ$ ($n=1$)
- 实验结果: $\lambda = 1.65 \times 10^{-10} \text{ m}$
 - 理论值稍大一点, 原因是电子受正离子的吸引, 在晶体中的波长比在真空中稍小 (动量稍大)。经修正后, 理论值与实验结果完全符合。

同能量电子和光子波长比较

电子波长

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2 E_k}}$$

$$\lambda = \frac{1240 eV \cdot nm}{\sqrt{2 \times 0.511 \times 10^6 eV \cdot E_k (eV)}} = \frac{1.226}{\sqrt{E_k (eV)}} nm$$

光子波长表达式

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{E} = \frac{1.24 nm \cdot keV}{E_k (keV)} = \frac{1.24}{E_k (keV)} nm$$

With the same energy, the wavelength of photons is much longer than that of electrons.

一些粒子的德布罗意波长

For a wavelength of 1 Å, the energies involved are

for photons	12.4 keV
for electrons	150 eV
for neutrons	0.081 eV
for helium atoms	0.02 eV

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$$

室温下面, 粒子的热运动能量为0.025eV, 因此需要低温环境才能观测到比氦核重的原子的波动性

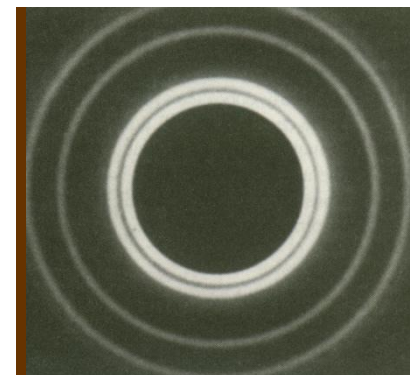
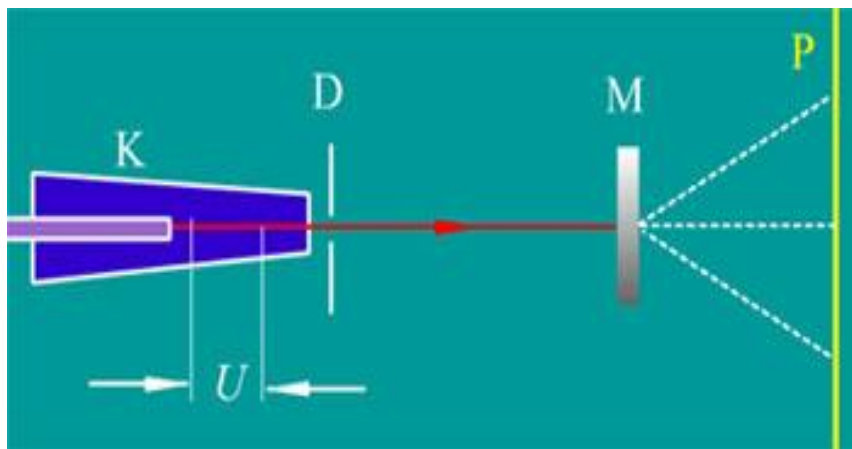
为什么卢瑟福必须用alpha粒子打靶才能发现原子的核式结构?

G.P.汤姆逊电子衍射实验 (1927)

- 英国物理学家 G. P. 汤姆逊 (J. J. 汤姆逊之子) 独立地从实验中观察到电子束穿过金属多晶薄膜时的衍射现象

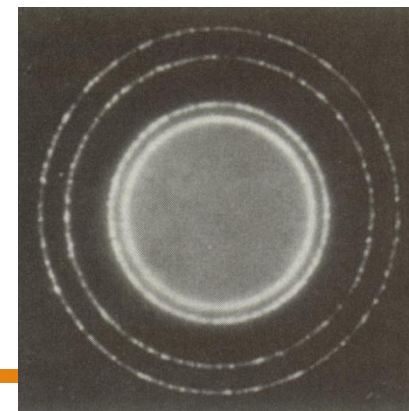


英国物理学家 G. P. 汤姆逊



X射线

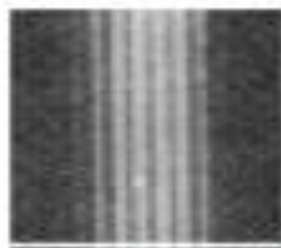
- 1929年 德布罗意 获诺贝尔物理奖
- G.P.汤姆逊和戴维逊因证实电子具有波动性，分享了1937年的诺贝尔物理学奖



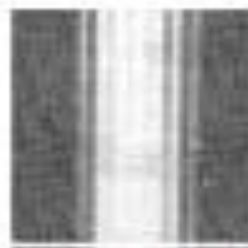
电子束

其他证实粒子具有波动性的实验

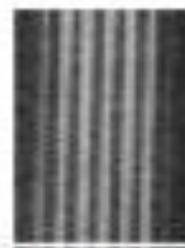
- 1930年艾斯特曼(Estermann)、斯特恩(Stern)、和他们的同事们证实了普通原子具有波动性。后来实验又验证了质子、中子等实物粒子都具有波动性
- 约恩逊实验 (1961)
 - 要将狭缝做得极细是很困难的（由于电子的德布罗意波长很小，这类实验很难做），直到1961年C. Jönsson运用铜箔中形成的2-5条细缝得到了电子的多缝干涉图样



双缝



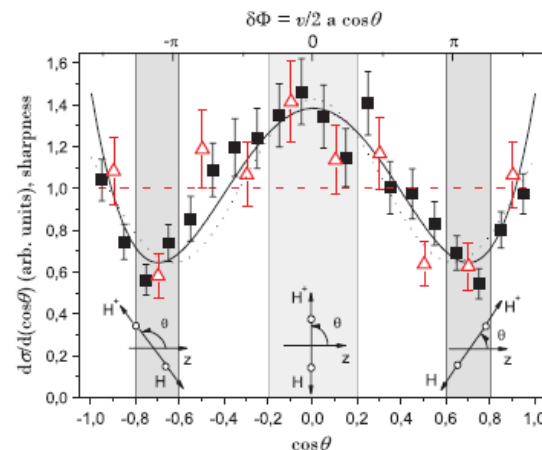
三缝



四缝

其他证实粒子具有波动性的实验

- 目前最新的实验验证是在动能为 1.3 MeV 的单个氢原子中观察到了干涉效应。此时氢原子的德布罗意波长为 25 fm，接近经典极限。其它大分子的干涉如 C_{70} 也在2002年观测到。



PRL 101, 083201 (2008)

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
22 AUGUST 2008

Evidence of Wave-Particle Duality for Single Fast Hydrogen Atoms

H. T. Schmidt,^{1,*} D. Fischer,¹ Z. Berenyi,¹ C. L. Cocke,² M. Gudmundsson,¹ N. Haag,¹ H. A. B. Johansson,¹ A. Källberg,³ S. B. Levin,⁴ P. Reinhed,¹ U. Sassenberg,¹ R. Schuch,¹ A. Simonsson,³ K. Støchkel,⁵ and H. Cederquist¹

¹Department of Physics, Stockholm University, AlbaNova University Center, S-10691 Stockholm, Sweden

²Department of Physics, Kansas State University, Manhattan, Kansas 66506, USA

³Manne Siegbahn Laboratory, Stockholm University, Frescativägen 28, 10405 Stockholm, Sweden

⁴Department of Physics, St. Petersburg State University, 198504, St-Petersburg, Russia

⁵Department of Physics and Astronomy, University of Aarhus, Ny Munkegade, DK-8000 Aarhus C, Denmark
(Received 17 January 2008; published 19 August 2008)

We report the direct observation of interference effects in a Young's double-slit experiment where the interfering waves are two spatially separated components of the de Broglie wave of single 1.3 MeV hydrogen atoms formed close to either target nucleus in $H^+ + H_2$ electron-transfer collisions. Quantum interference strongly influences the results even though the hydrogen atoms have a de Broglie wavelength, λ_{dB} , as small as 25 fm.

经典粒子双缝实验

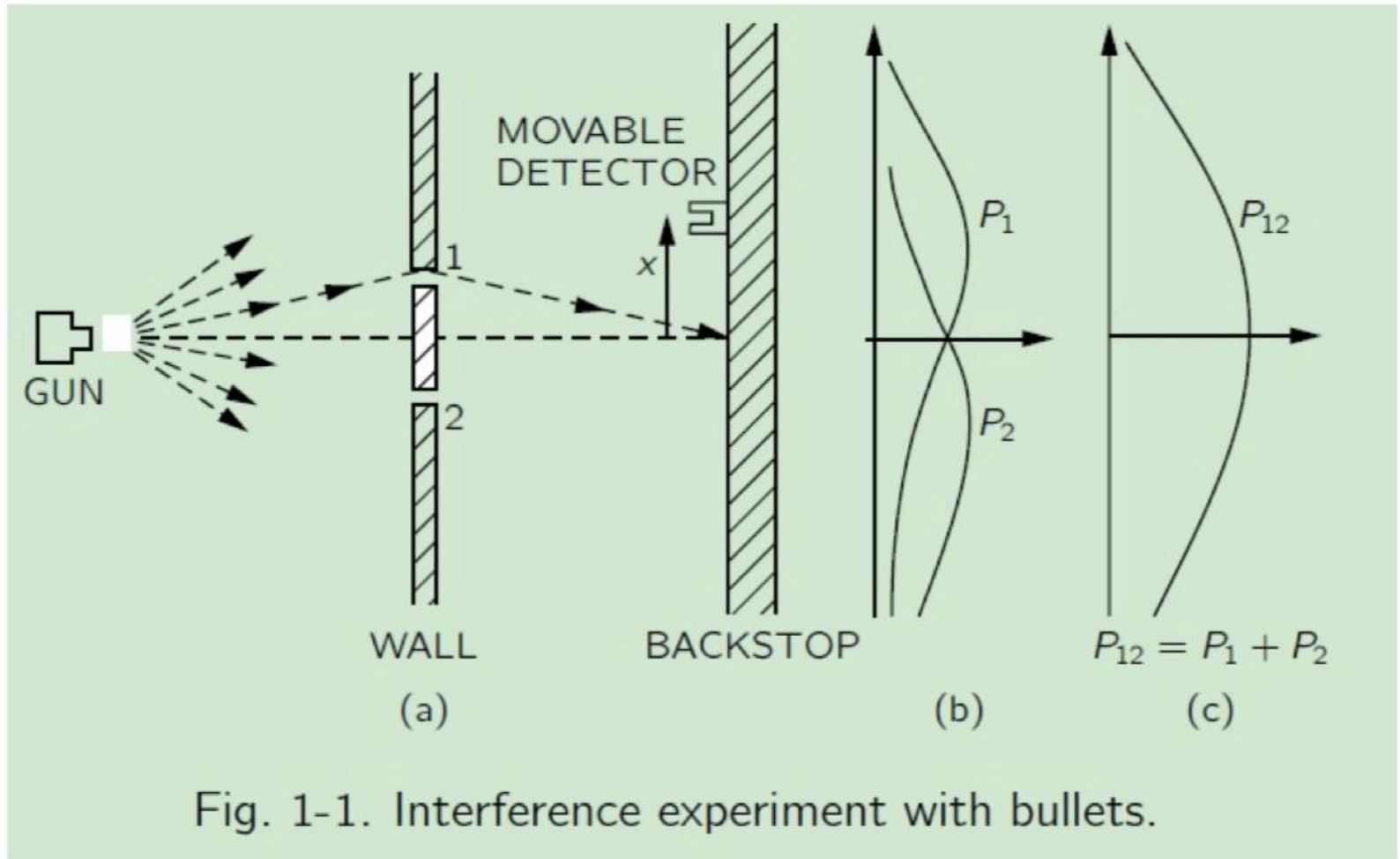
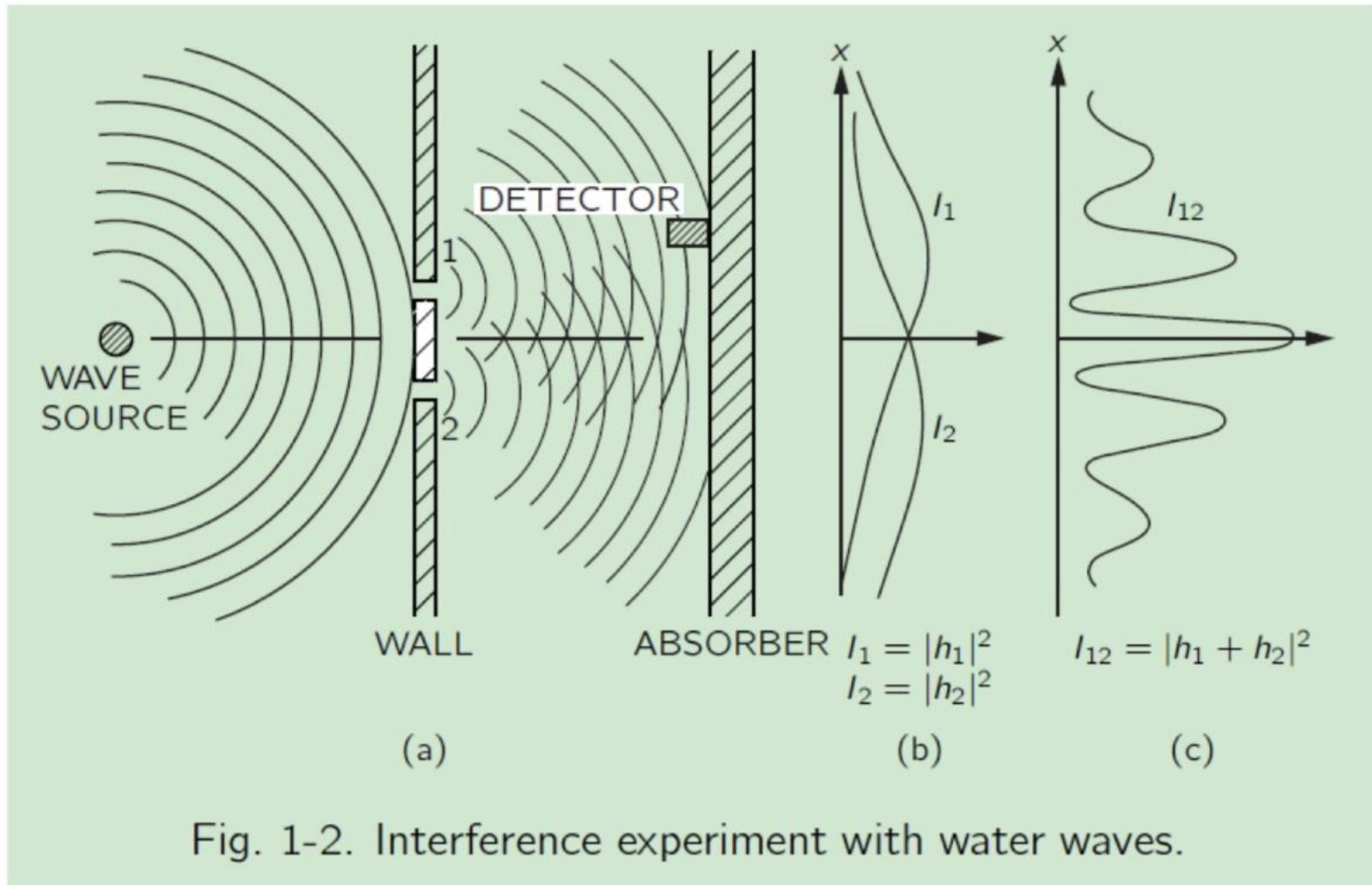


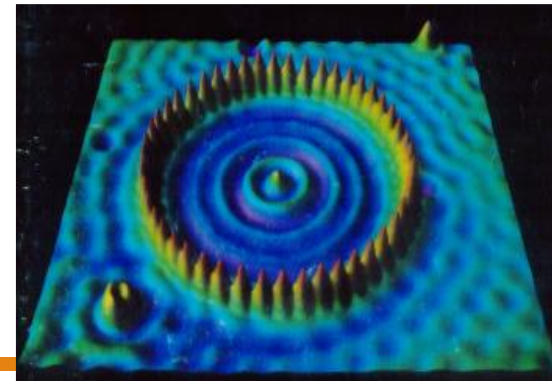
Fig. 1-1. Interference experiment with bullets.

经典波的双缝实验



微观粒子波动性的应用

- 1933年，德国的E.Ruska和Knoll等人研制成功第一台电子显微镜
 - 由于电子波长比可见光波长小 $10^{-3} \sim 10^{-5}$ 数量级，从而可大大提高电子显微镜的分辨率(仪器分辨本领： $\delta\theta_m \approx 1.22\lambda / D$)
- 1982年，IBM的G.Binnig和H.Rohrer研制成功第一台隧道扫描显微镜(STM)
- 1986年诺贝尔物理学奖
 - Ruska：电子物理领域的基础研究工作，设计出世界上第一台电子显微镜
 - Binnig和Rohrer：设计出扫描式隧道效应显微镜



实物粒子波动性和粒子性之间的关系？

当前得到公认的关于德布罗意波的实质的解释，是玻恩在1926年提出的统计解释：

- 物质波是“概率波”，它是怎样描述粒子在空间各处出现的概率呢？
 - 波动性：某处明亮，则某处光强大，即 I 大。
 - 粒子性：某处明亮，则某处光子多，即 N 大。