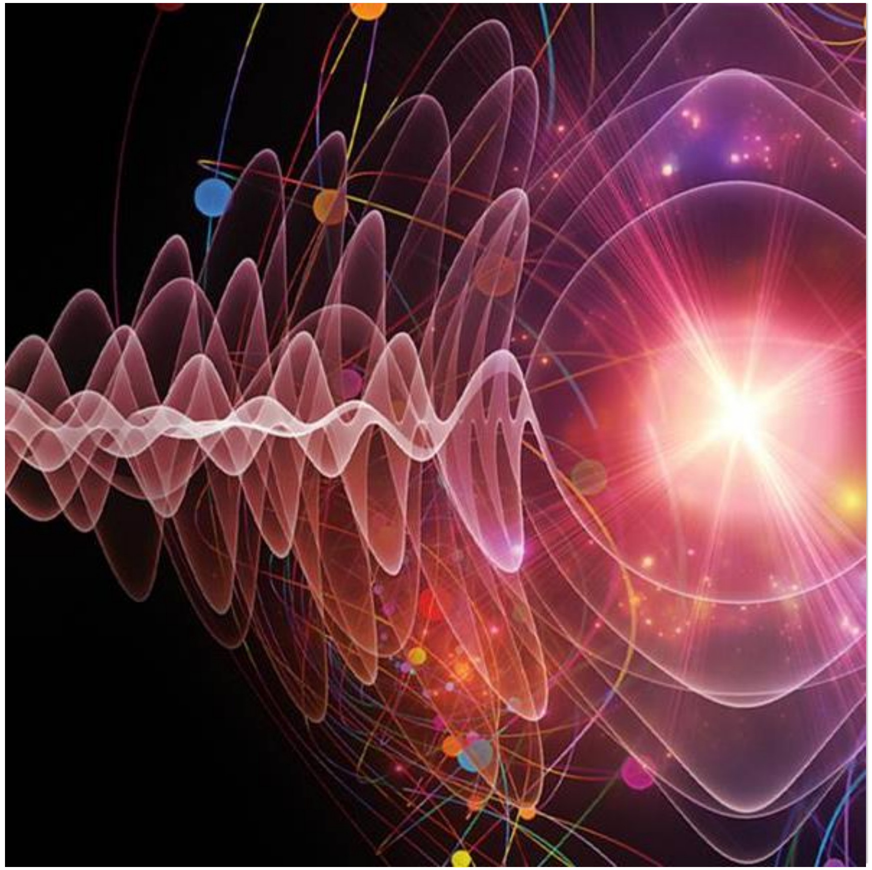


物质波

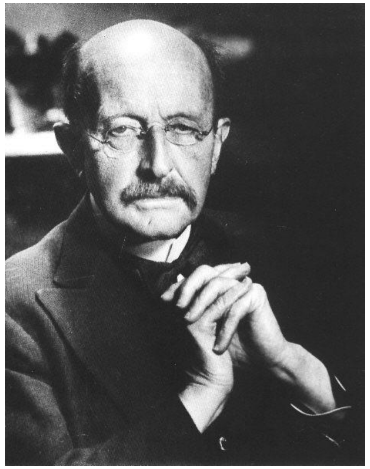
德布罗意波

实验证据

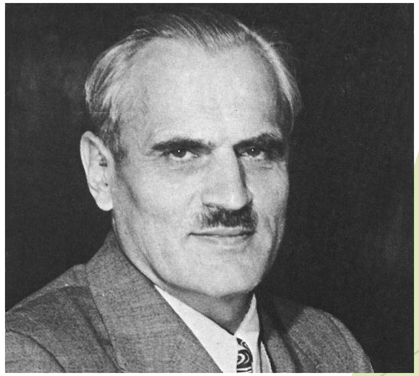
不确定关系

光量子

- 黑体辐射
- 光电效应
- Compton散射



Max Planck

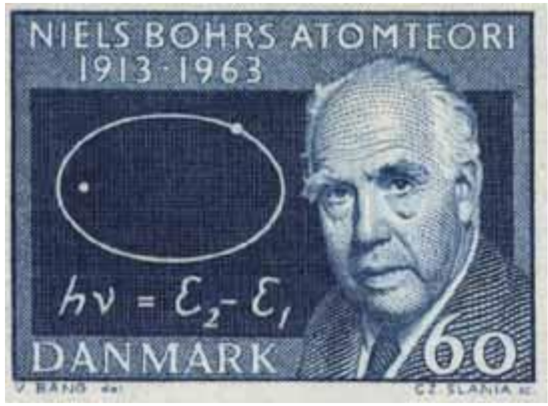


Arthur Holly Compton

- 16:37:24

原子中的量子态

- 光谱实验
- Franck-Hertz实验



Bohr的原子理论很成功，

但是也有无法解决的问题和逻辑上的不一致

旧量子论

- 1925年Pauli提出不相容原理
- 同年Ulembeck和Goudsmit提出电子自旋假设

至此形成的理论体系为旧量子论。可以解释包括Zeeman效应和元素周期性等一系列实验现象

Wolfgang Pauli
1945年 诺贝尔奖

- 16:37:24

旧量子论的困难

- Rutherford：“当电子从一个能态跳到另一个能态时，您必须假设电子事先就知道它要往哪里跳！”（否则不知道吸收能量为$E_1 - E_2$的光子）
- Schrödinger：电子从一个轨道跃迁到另一轨道时，因为速度不能超过光速，电子已经离开E_1态，尚未到达E_2态，那时电子处在什么状态？！
- 无法解释哪怕是稍微复杂一些的He原子光谱
- 对氢原子的谱线强度和精细结构也无能为力
- 无法说明如何组成分子，如何构成液体和固体

1922年Niels Bohr领取Nobel奖时说：“这一理论还是十分初步的，许多基本问题还有待解决。”

放弃量子论还是坚持?

- 放弃量子论回到经典理论是没有出路的
- 需要的是新的思想

光的波粒二象性

- Albert Einstein, 1905年，1917年

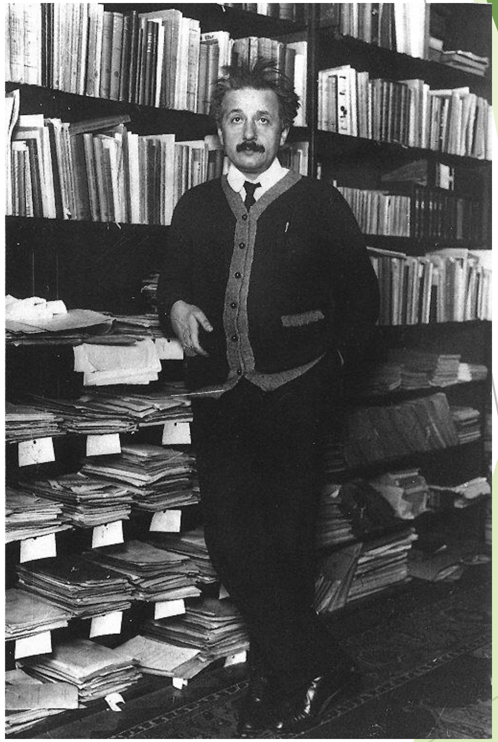
$$\boxed{\begin{aligned} E &= \hbar\omega \\ \vec{p} &= \hbar\vec{k} \end{aligned}}$$

其中$\omega = \dfrac{2\pi}{\lambda/c}, \left|\vec{k}\right| = \dfrac{2\pi}{\lambda}$

光在传播时显出波动性，

在转移能量时显示出粒子性；

两者不会同时出现。



德布罗意假设

- 1923年Louis de Broglie在博士论文中提出所有粒子都有波粒二象性的假设：

$$E = \hbar\omega$$
$$\vec{p} = \hbar\vec{k}$$

- 提出物质波的概念（德布罗意波）

Prince Louis Victor Pierre Raymond de Broglie

- 法国贵族，因为不是长子，所以封爵是“王子”(Prince)，地位要比“子爵”(Viscount)略低，而比“男爵”(Baron)略高。
- 1960年哥哥Maurice de Broglie—第六代德布罗意公爵（射线物理学家 ）去世后，成为第七位Duc de Broglie。
- 父亲是内阁部长；祖父Jacques Victor Albert, Duc de Broglie当过法国总理，罗马史学家。受祖父影响进入巴黎大学学习历史，1910年毕业。
- 1919年一战后从军队退伍，师从Paul Langevin学习物理。
- 5年后提交一份论文。朗之万就事先得知论文评审委员会的六位教授中有三位已明确表态会投反对票，于是给朋友爱因斯坦写信。de Broglie得到Ph. D.
- 按照当时欧洲的学术传统，朗之万则将德布罗意的博士论文印成若干份分寄到了欧洲各大学的物理系。

Louis de Broglie
1892-1987
法国理论物理学家
诺贝尔物理学奖获得者

物质波的波长

- 相对论粒子的动量和能量

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$$

- 物质波的色散关系

$$\omega = \sqrt{k^2c^2 + m^2c^4/\hbar^2}$$

- 相速度和群速度

$$v_p \equiv \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v}$$

$$v_g \equiv \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E} = v$$

- 低速极限$v \ll c$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h\sqrt{1 - v^2/c^2}}{mv} \approx \frac{h}{mv}$$

- 动能为1eV电子的物质波长

$$m_ec^2 = 0.511\text{MeV}$$

$$1\text{eV} \ll m_ec^2$$

无需考虑相对论效应,

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_eE}} = \frac{hc}{\sqrt{2m_ec^2E}}$$

$$= \frac{12.4\text{keV} \cdot \text{Å}}{\sqrt{2 \times 0.511\text{MeV} \times 1\text{eV}}} = 1.23\text{nm}$$

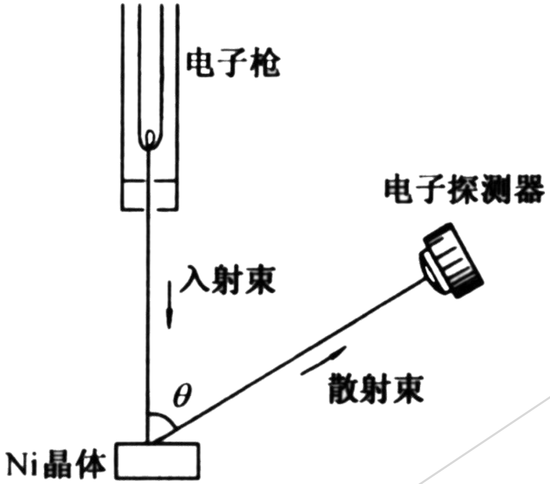
- 衍射屏(障碍物)的空间周期必须非常小

- 怎样看到物质波的干涉或衍射?

戴维逊 - 革末实验

- 1925年，Bell实验室的戴维逊(C. J. Davisson)和革末(L. H. Germer) 因为一次偶然事故，观测到电子在镍单晶上的衍射图样。
- 在了解到物质波的概念后（在牛津召开的英国物理促进会，德国物理学家玻恩），于1927年重做了一次较精确的实验。

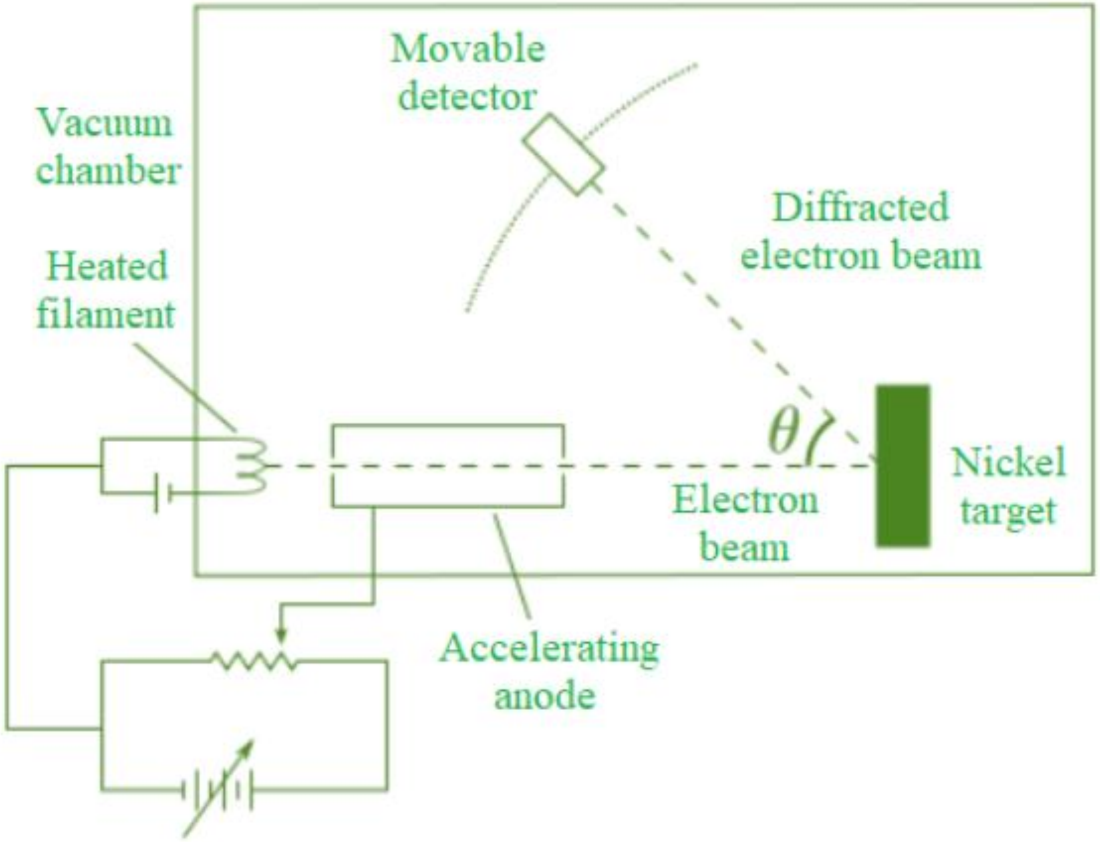
Clinton Joseph Davisson



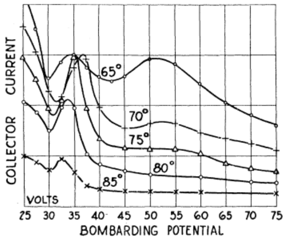
德布罗意1929年获诺贝尔奖，戴维逊1937年获诺贝尔奖

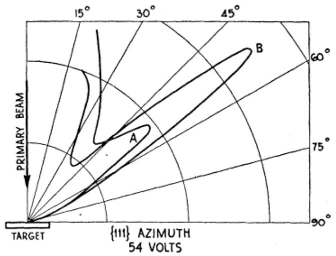
• 16:37:26

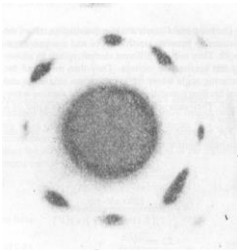
实验装置和现象



Davisson Germer Experiment







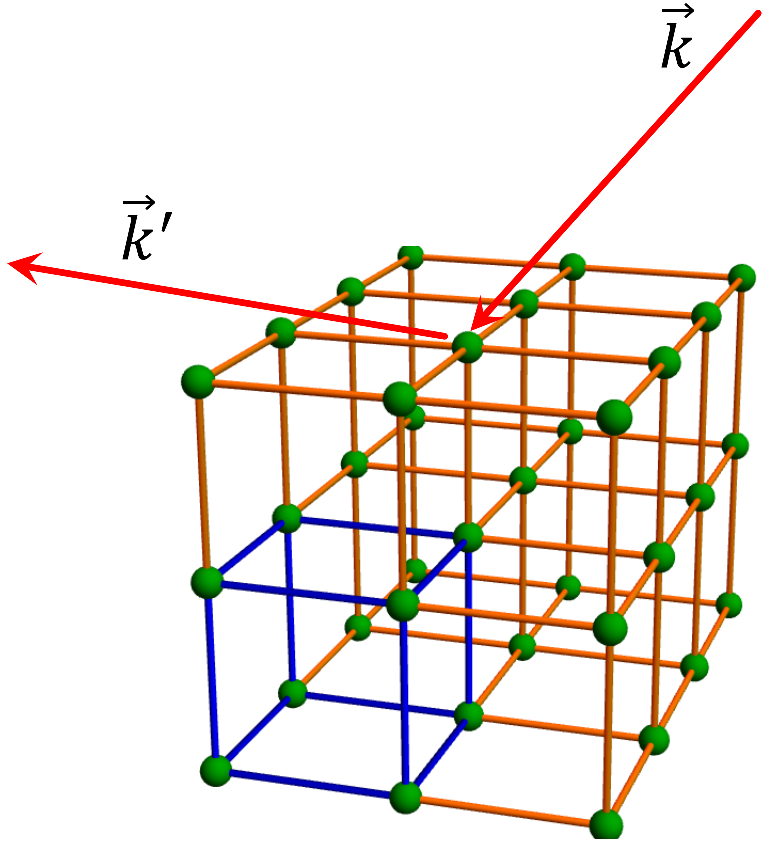
- 16:37:26

理论解释：晶格、晶胞和晶格基矢*

光波在晶体上散射的理论和现象，
早就为物理学家所熟知

原子的坐标组成晶格

$$\{\vec{x}_{l_1,l_2,l_3} = l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3 \,|\, l_j = 0,1,\cdots,N_j - 1; j = 1,2,3\}$$

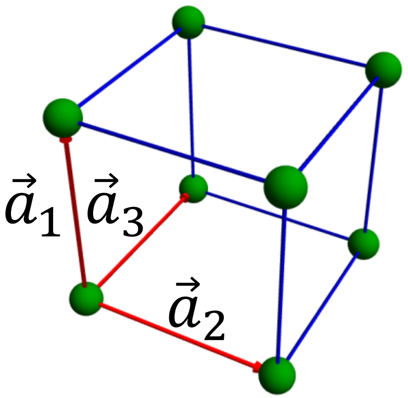


波矢量的变化

$$\Delta\vec{k} \stackrel{\text{def}}{=} \vec{k}' - \vec{k}$$

$$A \propto \sum_{l_1,l_2,l_3} \exp\left(i\vec{k}\cdot\vec{x}_{l_1,l_2,l_3}\right)\exp\left(-i\vec{k}'\cdot\vec{x}_{l_1,l_2,l_3}\right)$$

$$= \sum_{l_1,l_2,l_3} \exp\left(-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{x}_{l_1,l_2,l_3}\right)$$



上式是等比级数求和

理论解释：晶格上的散射振幅*

$$A \propto \sum_{l_1,l_2,l_3} \exp\left(-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{x}_{l_1,l_2,l_3}\right) = \sum_{l_1,l_2,l_3} \exp\left\{-i\Delta\vec{k}\cdot(l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3)\right\}$$

$$= \frac{\exp\left(-iN_1\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_1\right)-1}{\exp\left(-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_1\right)-1}\cdot\frac{\exp\left(-iN_2\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_2\right)-1}{\exp\left(-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_2\right)-1}\cdot\frac{\exp\left(-iN_3\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_3\right)-1}{\exp\left(-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_3\right)-1}$$

$$\Downarrow$$

$$\exp(ix)-1 = 2\exp\left(\frac{i}{2}x\right)\frac{1}{2}\left\{\exp\left(\frac{i}{2}x\right)-\exp\left(-\frac{i}{2}x\right)\right\} = 2i\exp\left(\frac{i}{2}x\right)\sin\frac{x}{2}$$

$$A \propto \frac{\sin\frac{N_1}{2}\left(\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_1\right)}{\sin\frac{1}{2}\left(\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_1\right)}\cdot\frac{\sin\frac{N_2}{2}\left(\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_2\right)}{\sin\frac{1}{2}\left(\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_2\right)}\cdot\frac{\sin\frac{N_3}{2}\left(\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_3\right)}{\sin\frac{1}{2}\left(\Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_3\right)}$$

三维光栅

理论解释：散射强度和主极大*

- 出射波强度

$$I=|A|^2=I_0\left(\frac{\sin(N_1\delta_1/2)}{\sin(\delta_1/2)}\right)^2\left(\frac{\sin(N_2\delta_2/2)}{\sin(\delta_2/2)}\right)^2\left(\frac{\sin(N_3\delta_3/2)}{\sin(\delta_3/2)}\right)^2$$

$$\delta_j \overset{\text{def}}{=} \Delta\vec{k}\cdot\vec{a}_j,\qquad j=1,2,3$$

弹性散射

$$\left|\vec{k}\right|=\left|\vec{k}'\right|=\frac{2\pi}{\lambda}$$

$$2\Delta\vec{k}\cdot\vec{k}+\vec{k}^2=0$$

只有波长合适时，才有衍射斑

- 主极大满足方程（光栅结论）

$$\delta_j=2m_j\pi,\qquad m_j\in\mathbb{Z}$$

- 写成矩阵形式

$$\Delta\vec{k}\cdot(\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3)=(2m_1\pi,2m_2\pi,2m_3\pi)$$

$$\Delta\vec{k}^{\mathrm{T}}A=2\pi(m_1,m_2,m_3)$$

$$\Delta\vec{k}^{\mathrm{T}}=2\pi(m_1,m_2,m_3)A^{-1}$$

$$\Delta\vec{k}=2\pi(A^{-1})^T\begin{pmatrix}m_1\\m_2\\m_3\end{pmatrix}$$

- 记

$$B=(A^{-1})^T=\left(\vec{b}_1,\vec{b}_2,\vec{b}_3\right)$$

那么

$$\Delta\vec{k}=2\pi\left(m_1\vec{b}_1+m_2\vec{b}_2+m_3\vec{b}_3\right)$$

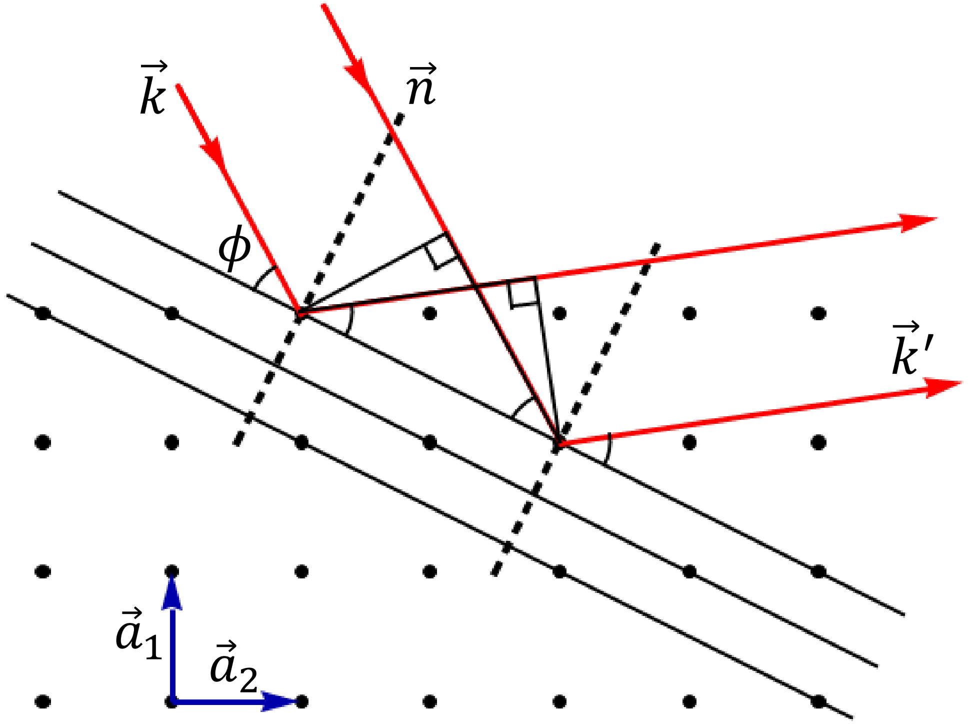
其中A的逆矩阵的行矢量是

$$\vec{b}_1\overset{\text{def}}{=}\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)},$$

$$\vec{b}_2\overset{\text{def}}{=}\frac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)},\qquad \vec{b}_3\overset{\text{def}}{=}\frac{\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)}$$

Max von Laue
X射线晶体学，Nobel Prize 1914

布拉格方程（一）*

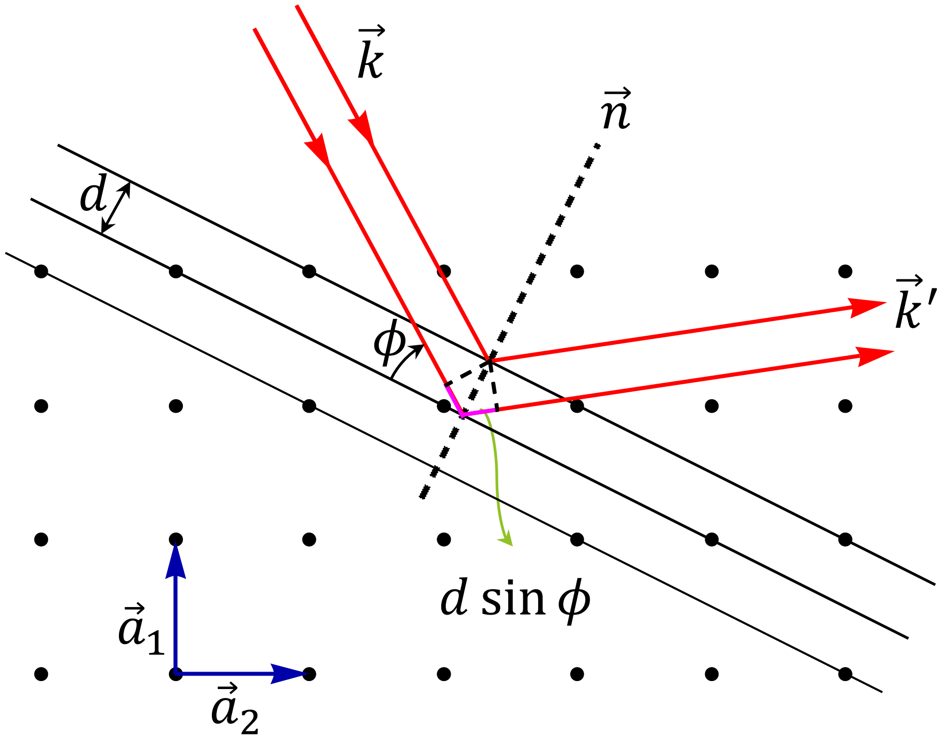


- 主极大条件即所有格点散射波等相位
- 格点构成的平面称为晶面
- 晶面的法向

$$m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3$$

- 整数$\{m_1, m_2, m_3\}$称为面指数（约去公因子）
- 在同一个晶面上的格点，满足反射定律的散射波相位相等，叠加后振幅增强

布拉格方程（二）*



- 面指数相同的晶面互相平行
- 相邻晶面的反射波也等相位，

$$\delta = \frac{4\pi d}{\lambda}\sin\phi = 2n\pi, \qquad n \in \mathbb{Z}$$

其中相邻晶面距离是

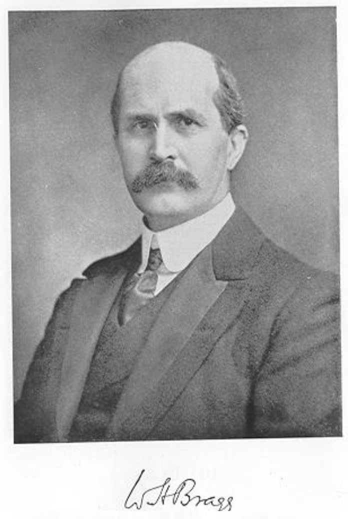
$$d = 1/\left|m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3\right|$$

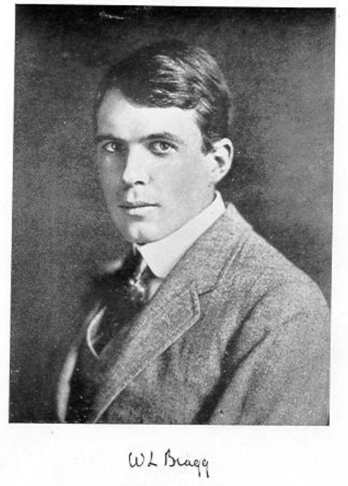
λ是电子的德布罗意波在晶体内部的波长，ϕ是入射波的掠射角（布拉格角），n是干涉级

- 上述条件可写成布拉格公式

$$2d\sin\phi = n\lambda, \qquad n \in \mathbb{Z}$$

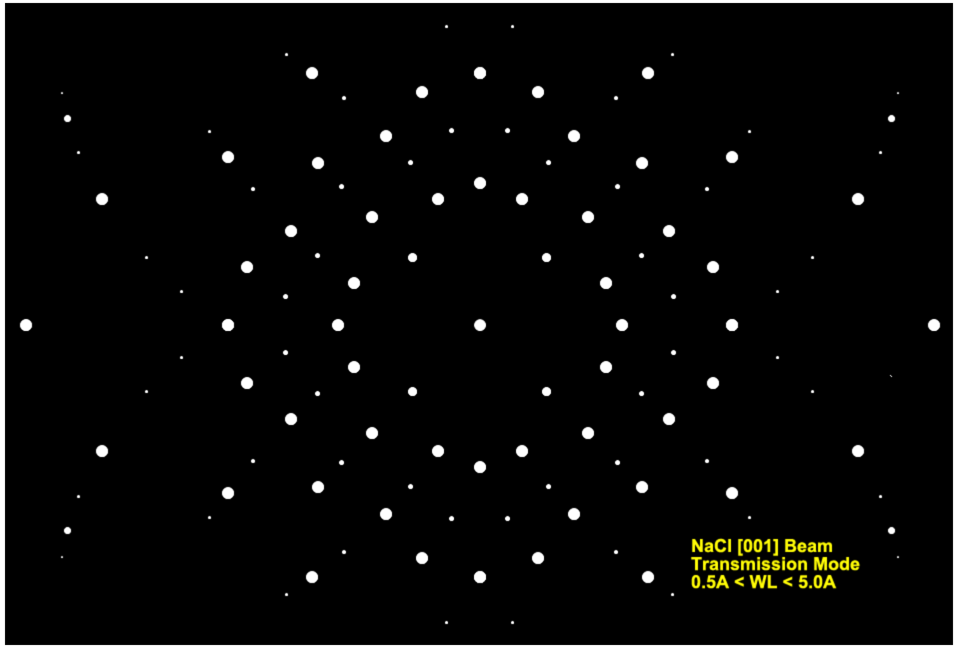
- 对X光在晶体上的散射，这些都是物理学家熟知的结论



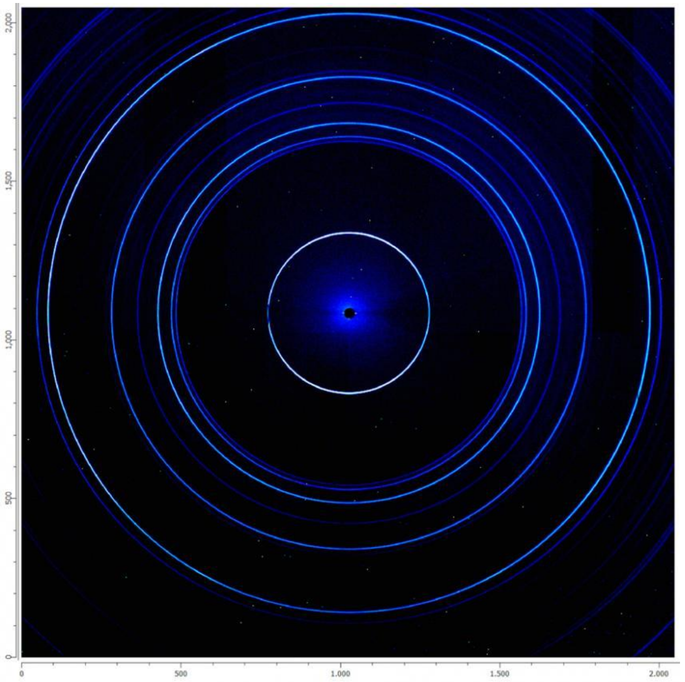


布拉格父子同获诺贝尔奖

X光在晶体上的散射*



Laue Method X-Ray Diffraction Patterns
in Transmission Mode

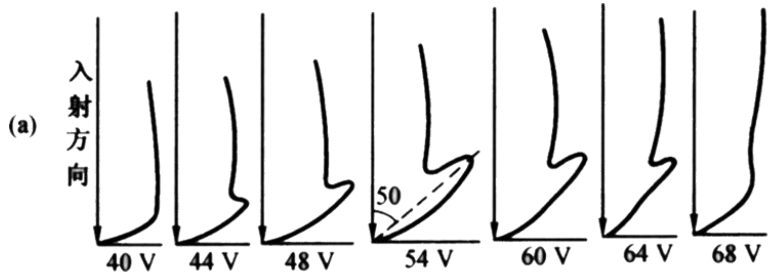


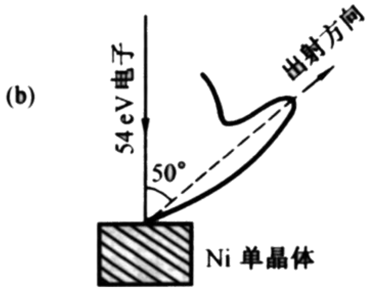
X-Ray Powder Diffraction

• 16:37:28

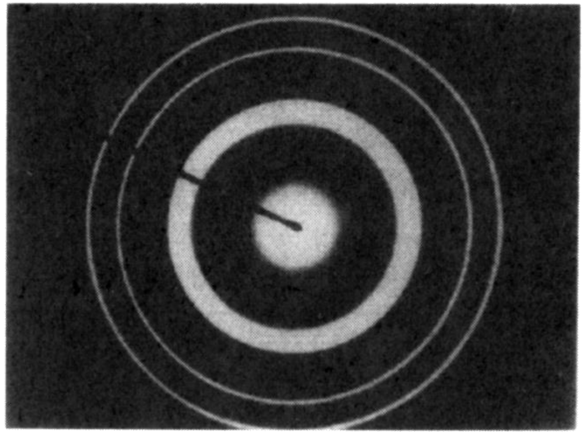
实验结果

- 用单色平面波入射，我们需要旋转晶体，以取得合适的掠射角，才能在散射角2ϕ方向看到一个晶面族的衍射光斑





- 同年（1927），G. P. Thomson在铂的箔片上观测到电子衍射图样

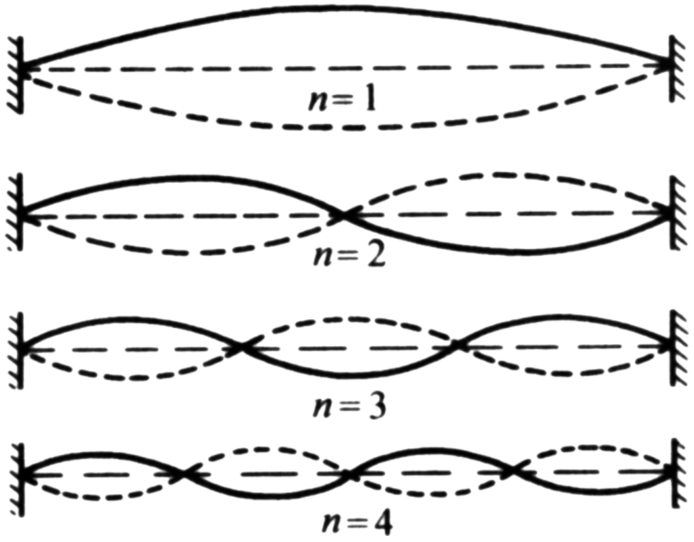


Sir Joseph John Thomson

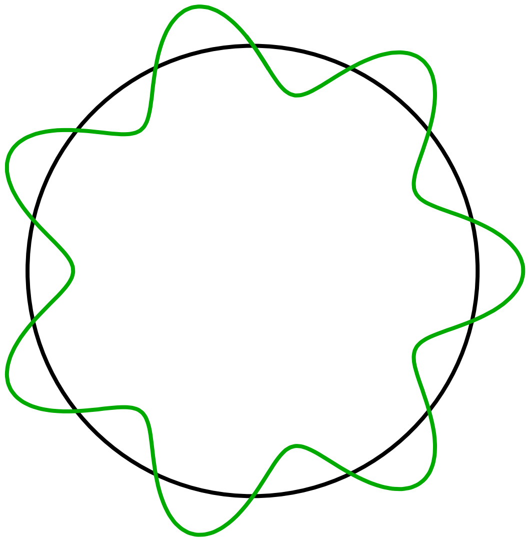
Sir George Paget Thomson

父子同获诺贝尔物理奖

原子的定态和驻波



一维的驻波



原子中轨道电子的驻波

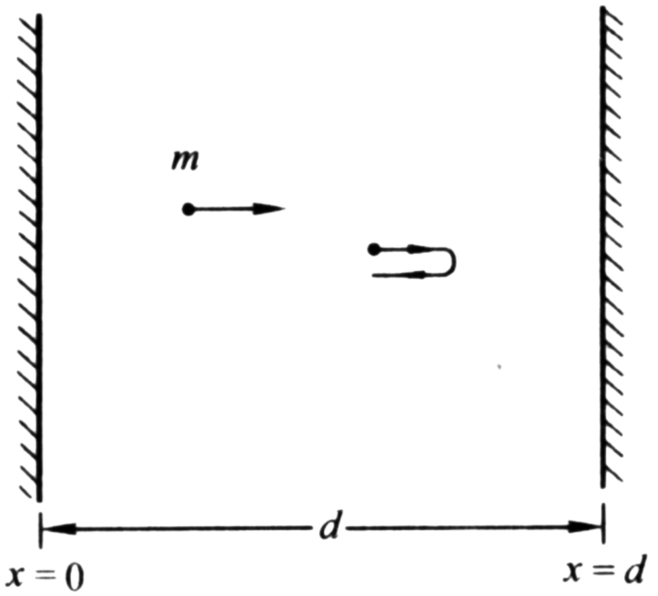
$$2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{mv}$$

$$\Leftrightarrow \color{red}{mvr = n\hbar}$$

由驻波条件推出玻尔理论

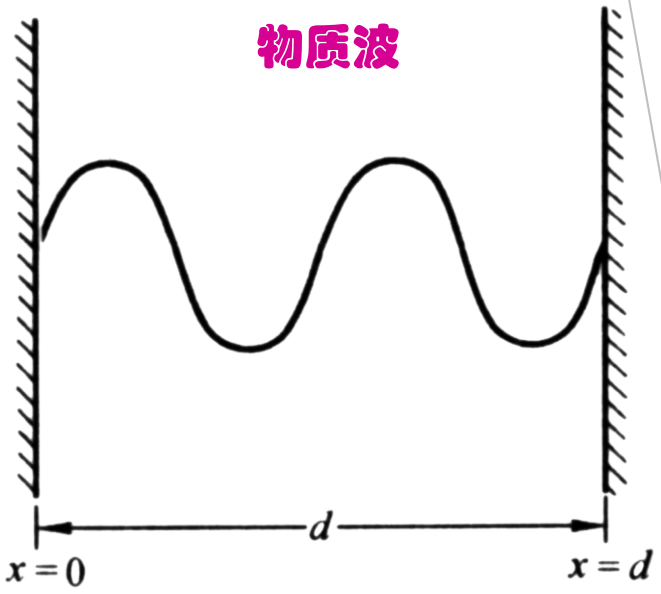
现在角动量量子化是很自然的推论

一维盒子中的粒子



牛顿力学

物质波



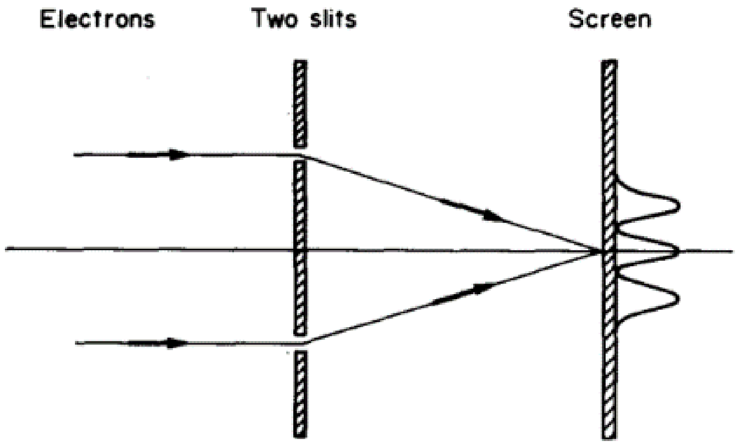
$$2d = n\lambda$$

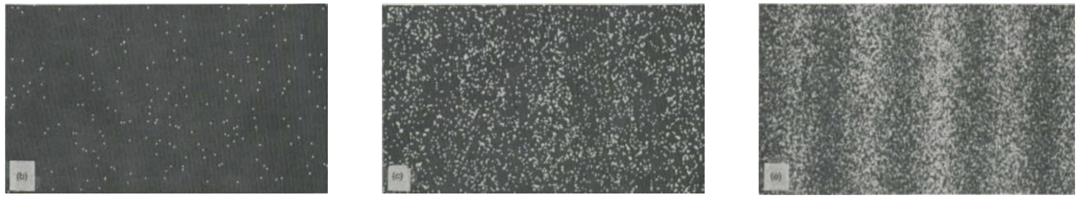
$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{nh}{2d}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2h^2}{8md^2}$$

禁闭的波必然导出量子化条件

进一步的实验验证——单电子双缝干涉

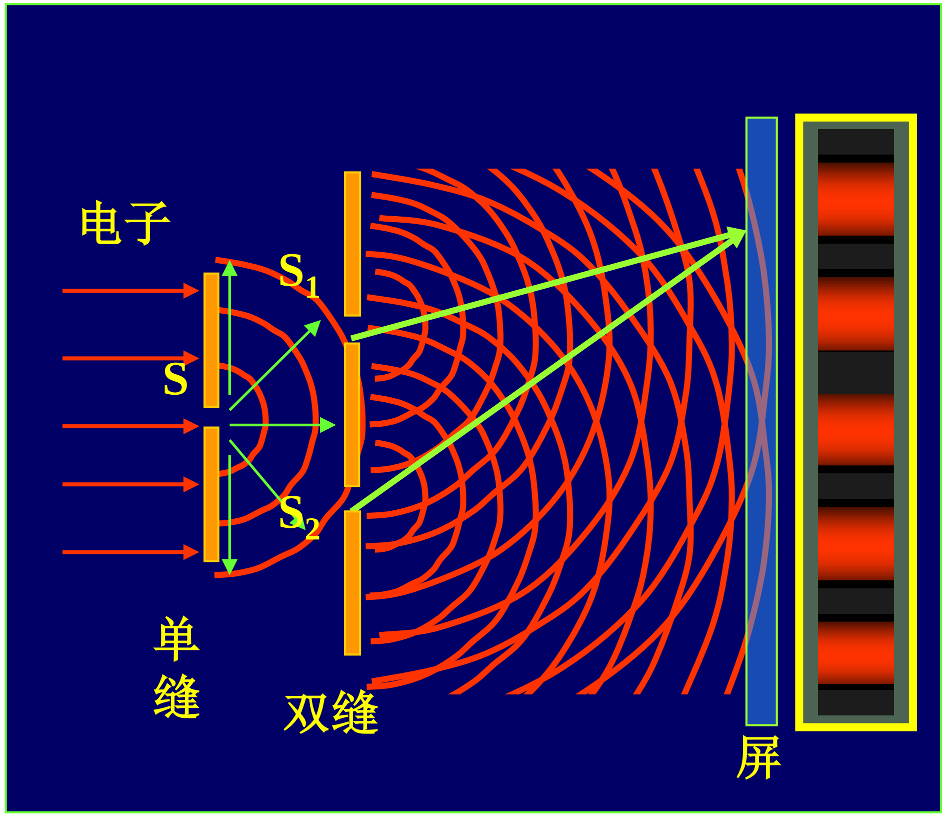




只有10^2-10^3个电子通过时，得到的是散乱点；
当数据积累到60000时，能够看到清晰的干涉条纹

- 所谓物质波的干涉，会不会只是多粒子的复杂相互作用导致的现象？
- 1909年泰勒（G. I. Taylor）用很弱的光源观测到干涉条纹，狄拉克(P. A. M. Dirac)认为这表明“每个光子只是和自身干涉”
- 1989年，物理学家用非常弱的电子源和电子双棱镜经过20分钟的数据积累，看到干涉图样
- 实验中使用的电子流只有1000个/秒，两个电子一起通过双缝的可能性极小
- 单个电子同时通过双缝，然后相干叠加
- 在中子、原子、分子甚至细菌的实验中也得到了验证
- 物质波是经典物理学不可能解释的现象，却是量子力学的核心概念

电子的双缝干涉

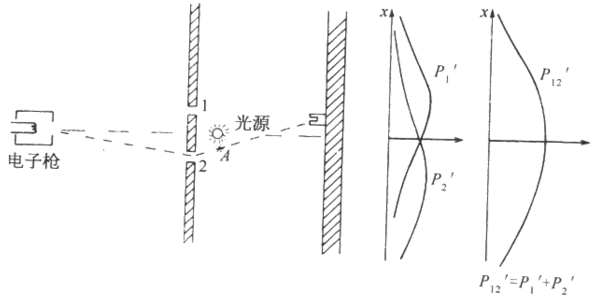


事实是单个电子同时通过两个缝

检测时表现为粒子，
传播时表现为物质波

电子具有波粒二象性
西游记：“聚则成形，散则成气”

量子物理中的波和粒子的概念，
完全不同于经典物理



费曼建议的实验：
（1）不追踪电子，有干涉条纹
（2）用光照电子，并用相机拍摄从哪个缝通过，则干涉条纹消失，成为两条线，符合经典物理学
我们不会看到半个电子

爱因斯坦曾经对玻尔说：
The moon does not simply disappear when we are not looking at it.
在量子理论中，看与不看，大不相同

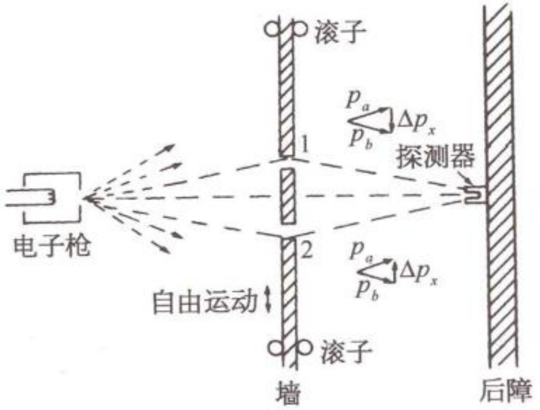
不确定关系Uncertainty Relation

Werner Karl Heisenberg
(1901 - 1976)
德国物理学家
1932年诺贝尔奖

考虑物质波的杨氏双缝干涉

$$p_x = \frac{h}{2\pi} k_x$$

$$\begin{cases} \Delta x \Delta p_x \geq h \\ \Delta y \Delta p_y \geq h \\ \Delta z \Delta p_z \geq h \end{cases}$$



费曼物理学讲义3，第11页

不能同时无限精确的确定动量和位置!

测不准原理→测不准关系

波包的测不准原理

物质波

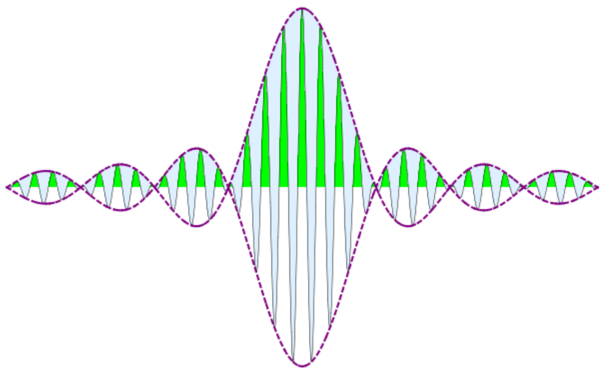
$$\Delta x \Delta p \geq h$$

$$\Delta p = \hbar \Delta k = \hbar 2\pi \Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right) = h\frac{\Delta\lambda}{\lambda^2}$$

$$\Rightarrow \Delta x \geq \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}$$

这也是光学中的最大相干光程差

$$p = \hbar k \Rightarrow \Delta x \Delta k \geq 2\pi$$



《信号与系统》

任意信号都满足测不准原理：

$$\Delta t \Delta \omega \geq 2\pi$$

系统的阶跃上升时间Δt与系统带宽$\Delta\omega$之积有下限，两者不能同时取任意小的数值

能宽和寿命

$$\Delta t \Delta \nu \geq \mathbf{1}$$

$E = h\nu$

$$\Delta t \Delta E \geq h$$

能级寿命$\Delta t = \tau$

能级宽度$\Delta E = \Gamma$

$$\boxed{\Gamma\tau \approx \hbar}$$

- 16:37:29

不确定关系的准确表达式

- 可以在量子力学中严格得出（后面的章节）：

$$\boxed{\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle [A,B] \rangle|}$$

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

实信号$\Delta\omega\Delta t \geq \frac{1}{2}$

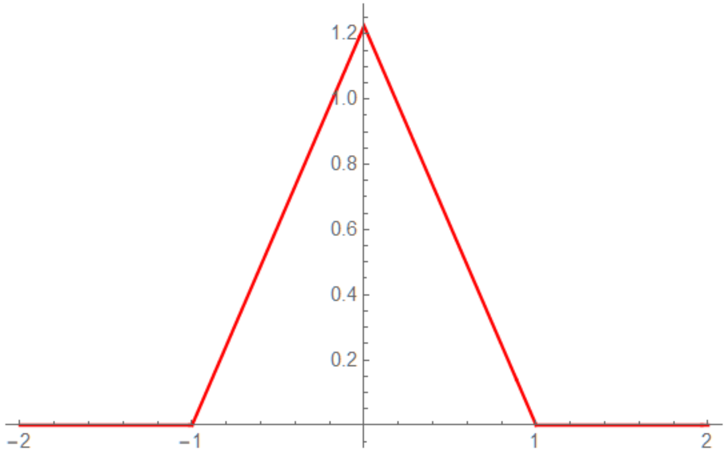
$$\Rightarrow \begin{cases} \Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \end{cases}$$

✓

- 量子力学没有相轨道的概念$(\vec{p}(t), \vec{r}(t))$
- 共轭的一对力学量不能同时精确确定
- 可解释谱线的自然宽度（由能级的固有寿命决定）

检验不确定关系

- 不确定关系对任意波函数均成立



- 例如取三角形波，

$\bar{x} = 0$

$\Delta x^2 = 1/10$

$$\bar{p} = (-i\hbar)\int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial\psi}{\partial x} dx = \frac{1}{2}(-i\hbar)\left(\psi^2\Big|_{-1}^{0} + \psi^2\Big|_{0}^{1}\right) = 0$$

$$\Delta p^2 = (-i\hbar)^2\int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} dx = \frac{3}{2}(-i\hbar)^2\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\{\delta(x+1) - 2\delta(x) + \delta(x-1)\}dx$$

$$= \frac{3}{2}(-i\hbar)^2\{-2\psi(0)\} = 3\hbar^2$$

$$\Delta x\Delta p = \sqrt{\frac{3}{10}}\hbar > \frac{1}{2}\hbar$$

电子落入原子核所需能量

- 原子核的尺寸为$a \approx 10\mathrm{fm}$数量级
- 由不确定关系，

$$\Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2\Delta r_j} \approx \frac{\hbar}{a} = \frac{\hbar c}{ac} = \frac{197\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{fm}}{10\mathrm{fm}\cdot c} = 19.7\mathrm{MeV}\cdot c^{-1}$$

- 落入原子核的电子能量至少是

$$E = \sqrt{\vec{p}^2c^2 + m_e^2c^4} \approx \sqrt{\vec{p}^2c^2} = \sqrt{3\times 19.7^2}\mathrm{MeV} = 34.1\mathrm{MeV}$$

- 远大于电子的质能0.511MeV

- 在历史上，正是根据不确定关系，才最终确定原子核中不可能存在电子