



普通高等教育“九五”国家级重点教材



清华大学教材

大学物理学

第五册

量子物理

第二版

张三慧 主编



清华大学出版社
<http://www.tup.tsinghua.edu.cn>

清华大学教材

张三慧 主编

大学物理学(第五册)

量子物理

(第二版)

清华大学出版社

(京)新登字 158 号

内 容 简 介

本书是清华大学教材《大学物理学》第二版第五册,讲述量子力学的基本概念和规律,包括微观粒子的二象性,薛定谔方程,原子中的电子和发光机制,固体中的电子,量子统计的基本概念和核物理的基础知识等。除了基本内容外,还专题介绍了自由电子激光,激光冷却,多光子吸收,核磁共振,扫描隧道显微镜,正电子湮没技术等今日物理趣闻与现代技术。此外,还介绍了几位有关科学家的传略。基本内容简明扼要,附加内容通俗易懂。

本书可作为高等院校的大学物理教材,也可以作为中学物理教师教学和其他读者自学的参考书。

书 名: 大学物理学(第五册)量子物理(第二版)

作 者: 张三慧 主编

出版者: 清华大学出版社(北京清华大学教研大厦,邮编 100084)

<http://www.tup.tsinghua.edu.cn>

印刷者: 北京丰华印刷厂

发行者: 新华书店总店北京发行所

开 本: 850×1168 1/32 印 张: 8·375 字 数: 211 千字

版 次: 2000 年 8 月第 2 版 2001 年 2 月第 4 次印刷

书 号: ISBN 7-302-04010-9/O · 247

印 数: 52001~67000

定 价: 11.00 元

目 录

量子物理概述	(1)
第1章 波粒二象性	(3)
1.1 黑体辐射	(3)
1.2 光电效应	(8)
1.3 光的二象性 光子	(11)
1.4 康普顿散射	(16)
1.5 粒子的波动性	(21)
1.6 概率波与概率幅	(26)
1.7 不确定关系	(32)
提要	(38)
思考题	(39)
习题	(40)
科学家介绍 德布罗意	(44)
第2章薛定谔方程	(47)
2.1 薛定谔得出的波动方程	(47)
2.2 无限深方势阱中的粒子	(53)
2.3 势垒穿透	(61)
2.4 谐振子	(67)
提要	(69)
思考题	(70)
习题	(71)

Ⅱ 目录

科学家介绍 薛定谔	(74)
物理学与现代技术 I 扫描隧道显微镜	(76)
第3章 原子中的电子.....	(80)
3. 1 氢原子.....	(80)
3. 2 电子的自旋与自旋轨道耦合.....	(95)
*3. 3 微观粒子的不可分辨性和泡利不相容原理	(103)
3. 4 各种原子核外电子的排布	(105)
*3. 5 X射线	(111)
3. 6 激光	(115)
*3. 7 分子的转动和振动能级	(122)
提要.....	(129)
思考题.....	(132)
习题.....	(133)
科学家介绍 玻尔	(138)
物理学与现代技术 II 激光冷却与捕陷原子	(141)

今日物理趣闻 A 自由电子激光

今日物理趣闻 B 多光子吸收

今日物理趣闻 C 非线性光学

C. 1 倍频与混频	(154)
------------------	-------

目 录

N 目录

习题	(233)
物理学与现代技术 III 正电子湮没技术	(236)
物理学与现代技术 IV 核磁共振	(239)
元素周期表	(242)
数值表	(243)
习题答案	(245)
诺贝尔物理学奖获得者名录	(250)
索引	(255)

量子物理概述

量子概念是 1900 年普朗克首先提出的,到今天已经整整一百年了。期间,经过爱因斯坦、玻尔、德布罗意、玻恩、海森伯、薛定谔、狄拉克等许多物理大师的创新努力,到 20 世纪 30 年代,就已经建成了一套完整的量子力学理论。这一理论是关于微观世界的理论。和相对论一起,它们已成为现代物理学的理论基础。量子力学已在现代科学和技术中获得了较大的成功,尽管它的哲学意义还在科学家中间争论不休。应用到宏观领域时,量子力学就转化为经典力学,正像在低速领域相对论转化为经典理论一样。

量子力学是一门奇妙的理论。它的许多基本概念、规律与方法都和经典物理的基本概念、规律和方法截然不同。本书将介绍有关量子力学的基础知识。第 1 章先介绍量子概念的引入 —— 微观粒子的二象性,由此而引起的描述微观粒子状态的特殊方法 —— 波函数,以及微观粒子不同于经典粒子的基本特征 —— 不确定关系。然后在第 2 章介绍微观粒子的基本运动方程(非相对论形式)—— 薛定谔方程。对于此方程,首先把它应用于势阱中的粒子,得出微观粒子在束缚态中的基本特征——能量量子化、势垒穿透等。

第 3 章用量子概念介绍(未经详细的数学推导)了电子在原子中运动的规律,包括能量、角动量的量子化,自旋的概念,泡利不相容原理,原子中电子的排布,X 光和激光的原理等。

第 4 章介绍固体中的电子的量子特征,包括自由电子的能量分布以及导电机理,能带理论及对导体、绝缘体、半导体性能的解释。由于固体中的电子的讨论已涉及大量微观粒子的运动,所以简要地介绍了量子统计概念。

2 量子物理概述

最后一章介绍原子核的基础知识,包括核的一般性质、结合能、核模型、核衰变及核反应等。关于基本粒子的知识和当今关于宇宙及其发展的知识也都属于量子物理的范围,其基本内容在本套书第一册力学“今日物理趣闻 A 基本粒子”和第二册热学“今日物理趣闻 A 大爆炸和宇宙膨胀”中已分别有所介绍,在本书中不再重复。

第1章 波粒二象性

量子物理理论起源于对波粒二象性的认识。本章着重说明波粒二象性的发现过程、定量表述和它们的深刻含义。先介绍普朗克在研究热辐射时提出的能量子概念，再介绍爱因斯坦引入的光子概念以及用光子概念对康普顿效应的解释，然后说明德布罗意引入的物质波概念。最后讲解概率波、概率幅和不确定关系的意义。这些基本概念都是对经典物理的突破，对了解量子物理具有基础性的意义，它们的形成过程也是很发人深思的。

1.1 黑体辐射

当加热铁块时，开始看不出它发光。随着温度的不断升高，它变得暗红、赤红、橙色而最后成为黄白色。其他物体加热时发的颜色也有类似的随温度而改变的现象。这似乎说明在不同温度下物体能发出频率不同的电磁波。事实上，仔细的实验证明，在任何温度下，物体都向外发射各种频率的电磁波。只是在不同的温度下所发出的各种电磁波的能量按频率有不同的分布，所以才表现为不同的颜色。这种能量按频率的分布随温度而不同的电磁辐射叫做热辐射。

为了定量地表明物体热辐射的规律，引入光谱辐射出射度的概念。频率为 ν 的光谱辐射出射度是指单位时间内从物体单位表面积发出的频率在 ν 附近单位频率区间的电磁波的能量。光谱辐射出射度（按频率分布）用 M_ν 表示，它的SI单位为 $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{Hz})$ 。实验测得的100 W白炽灯钨丝表面在2750 K时以及太阳表面的

M_ν 和 ν 的关系如图 1.1 所示(注意图中钨丝和太阳的 M_ν 的标度不同。太阳的吸收谱线在图中都忽略了)。从图中可以看出, 钨丝发的光的绝大部分能量在红外区域, 而太阳发的光中, 可见光占相当大的成分。

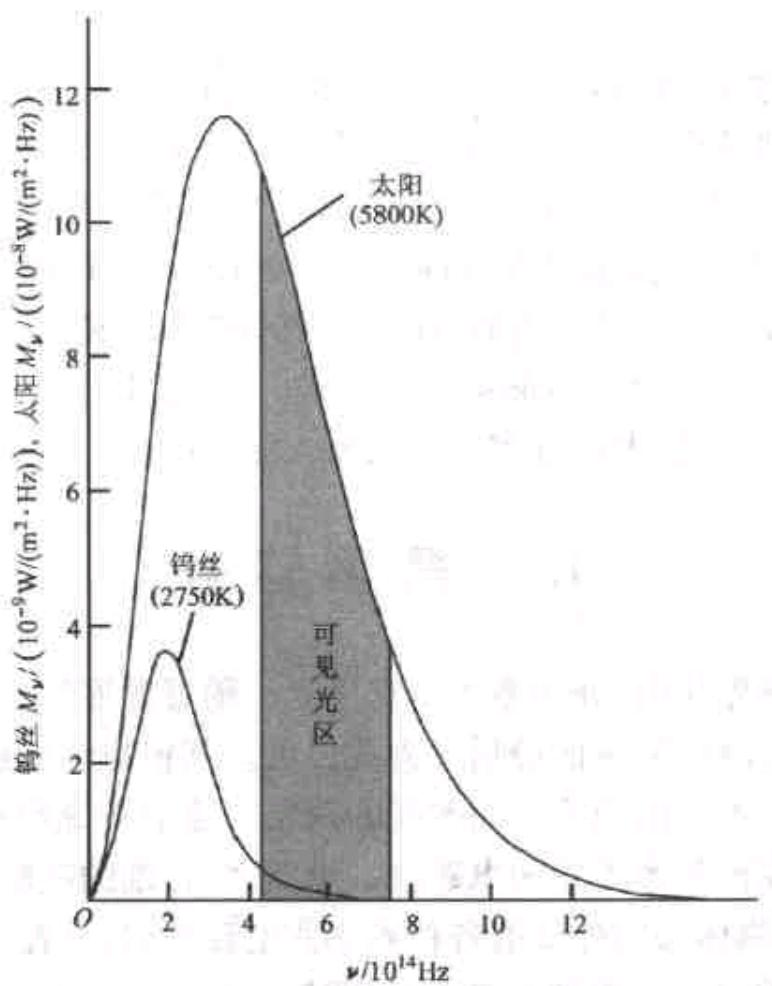


图 1.1 钨丝和太阳的 M_ν 和 ν 的关系曲线

物体在辐射电磁波的同时, 还吸收照射到它表面的电磁波。如果在同一时间内从物体表面辐射的电磁波的能量和它吸收的电磁波的能量相等, 物体和辐射就处于温度一定的热平衡状态。这时的热辐射称为平衡热辐射。下面只讨论平衡热辐射。

在温度为 T 时, 物体表而吸收的频率在 ν 到 $\nu + d\nu$ 区间的辐射

能量占全部入射的该区间的辐射能量的份额，称做物体的光谱吸收比，以 $\alpha(\nu)$ 表示。实验表明，辐射能力越强的物体，其吸收能力也越强。理论上可以证明，尽管各种材料的 M_ν 和 $\alpha(\nu)$ 可以有很大的不同，但在同一温度下二者的比 ($M_\nu/\alpha(\nu)$) 却与材料种类无关，而是一个确定的值。能完全吸收照射到它上面的各种频率的光的物体称做黑体。对于黑体， $\alpha(\nu) = 1$ 。它的光谱辐射出射度应是各种材料中最大的，而且只与频率和温度有关。因此研究黑体辐射的规律就具有更基本的意义。

煤烟是很黑的，但也只能吸收 99% 的入射光能，还不是理想黑体。不管用什么材料制成一个空腔，如果在腔壁上开一个小洞（图 1.2），则射入小洞的光就很难有机会再从小洞出来了。这样一个小洞实际上就能完全吸收各种波长的入射电磁波而成了一个黑体。加热这个空腔到不同温度，小洞就成了不同温度下的黑体。用分光技术测出由它发出的电磁波的能量按频率的分布，就可以研究黑体辐射的规律。

19 世纪末，在德国钢铁工业大发展的背景下，许多德国的实验和理论物理学家都很关注黑体辐射的研究。有人用精巧的实验测出了黑体的 M_ν 和 ν 的关系曲线，有人就试图从理论上给以解释。1896 年，维恩 (W. Wien) 从经典的热力学和麦克斯韦分布律出发，导出了一个公式，即维恩公式

$$M_\nu = \alpha \nu^3 e^{-\beta \nu/T} \quad (1.1)$$

式中 α 和 β 为常量。这一公式给出的结果，在高频范围和实验结果符合得很好，但在低频范围有较大的偏差（图 1.3）。

1900 年 6 月瑞利发表了他根据经典电磁学和能量均分定理

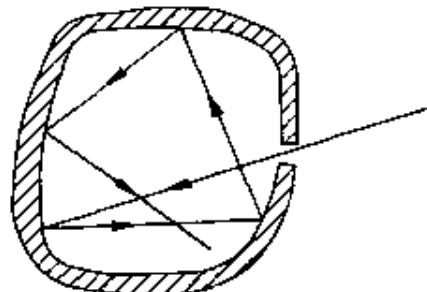


图 1.2 黑体模型

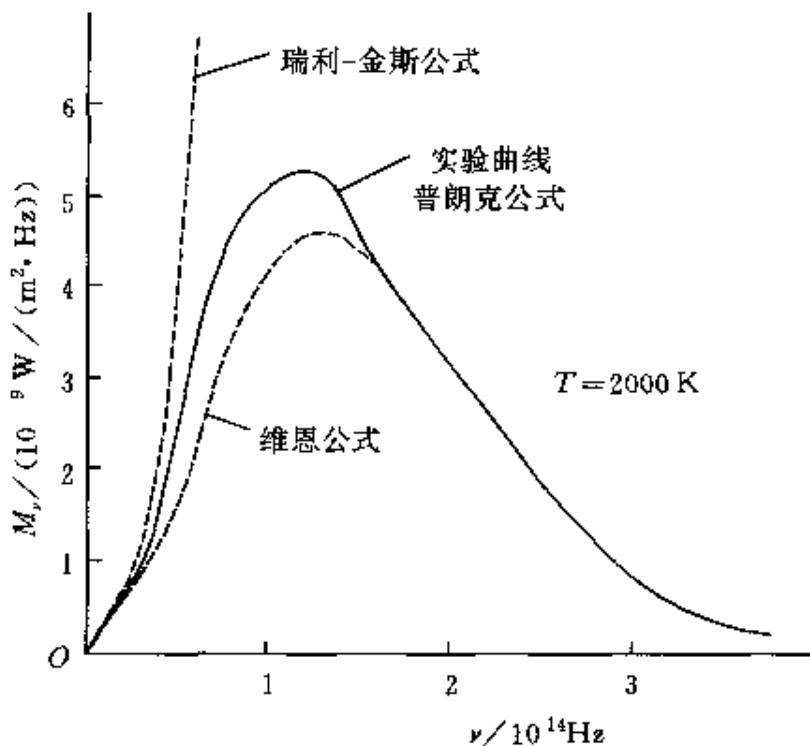


图 1.3 黑体辐射的理论和实验结果的比较

导出的公式(后来由金斯(J. H. Jeans)稍加修正),即**瑞利-金斯公式**

$$M_\nu = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} kT \quad (1.2)$$

这一公式给出的结果,在低频范围内还能符合实验结果;在高频范围就和实验值相差甚远,甚至趋向无限大值(图 1.3)。在黑体辐射研究中出现的这一经典物理的失效,曾在当时被有的物理学家惊呼为“紫外灾难”。

1900 年 12 月 14 日普朗克(Max Planck)发表了他导出的黑体辐射公式,即**普朗克公式**

$$M_\nu = \frac{2\pi h}{c^2} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (1.3)$$

这一公式在全部频率范围内都和实验值相符(图 1.3)!

普朗克所以能导出他的公式,是由于在热力学分析的基础上,

他“幸运地猜到”，同时为了和实验曲线更好地拟合，他“绝望地”，“不惜任何代价地”（引文均为普朗克本人的话）提出了**能量量子化**的假设。对空腔黑体的热平衡状态，他认为是组成腔壁的带电谐振子和腔内辐射交换能量而达到热平衡的结果。他大胆地假定谐振子可能具有的能量不是连续的，而是只能取一些离散的值。以 E 表示一个频率为 ν 的谐振子的能量，普朗克假定

$$E = nh\nu \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.4)$$

式中 h 是一常量，后来就叫**普朗克常量**。它的现代最优值为

$$h = 6.626\ 075\ 5 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

普朗克把(1.4)式给出的每一个能量值称做“**能量子**”，这是物理学史上第一次提出量子的概念。由于这一概念的革命性和重要意义，普朗克获得了 1918 年诺贝尔物理学奖。

至于普朗克本人，在提出量子概念后，还长期尝试用经典物理理论来解释它的由来，但都失败了。直到 1911 年，他才真正认识到量子化的全新的、基础性的意义。它是根本不能由经典物理导出的。

读者可以证明，在高频范围内，普朗克公式就转化为维恩公式；在低频范围内，普朗克公式则转化为瑞利-金斯公式。

从普朗克公式还可以导出当时已被证实的两条实验定律。一条是关于黑体的全部辐射出射度的**斯特藩-玻耳兹曼定律**：

$$M = \int_0^{\infty} M_d \nu = \sigma T^4 \quad (1.5)$$

式中 σ 称做**斯特藩-玻耳兹曼常量**，其值为

$$\sigma = 5.670\ 51 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$$

另一条是**维恩位移律**。它说明，在温度为 T 的黑体辐射中，光谱辐射出射度最大的光的频率 ν_m 由下式决定：

$$\nu_m = C_v T \quad (1.6)$$

式中 C_v 为一常量，其值为

$$C_1 = 5.880 \times 10^{10} \text{ Hz/K}$$

此式说明,当温度升高时, ν_m 向高频方向“位移”(图 1.4)。

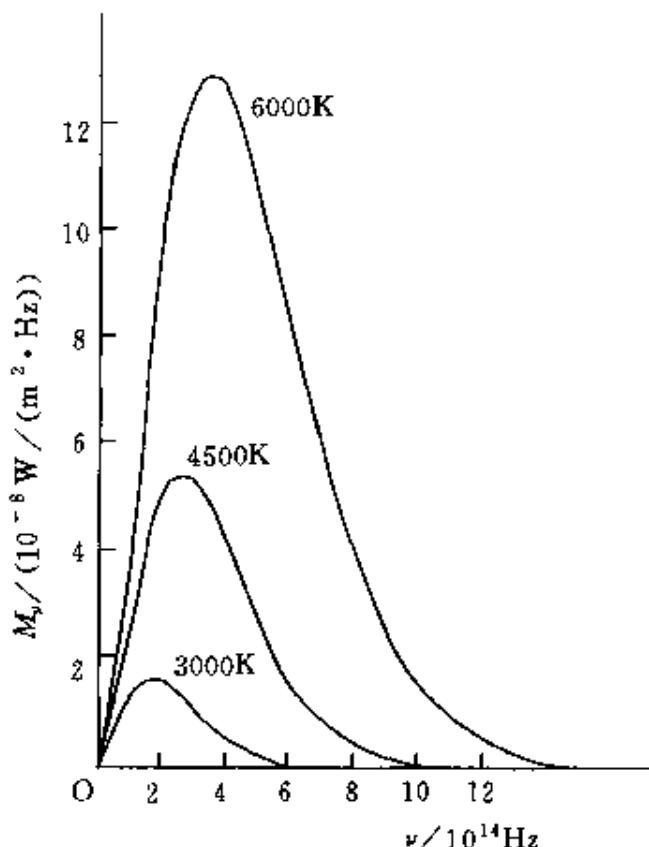


图 1.4 不同温度下的普朗克热辐射曲线

1.2 光电效应

19世纪末,人们已发现,当光照射到金属表面上时,电子会从金属表面逸出。这种现象称为光电效应。

图 1.5 所示为光电效应的实验装置简图,图中 GD 为光电管(管内为真空)。当光通过石英窗口照射阴极 K 时,就有电子从阴极表面逸出,这电子叫光电子。光电子在电场加速下向阳极 A 运动,就形成光电流。

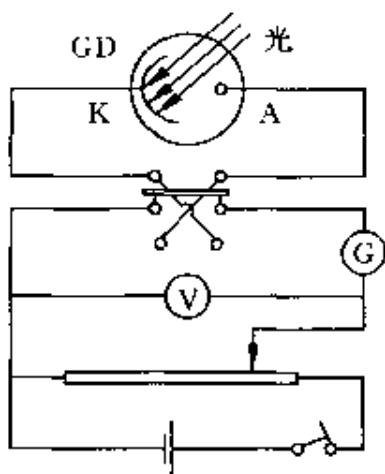


图 1.5 光电效应实验装置简图

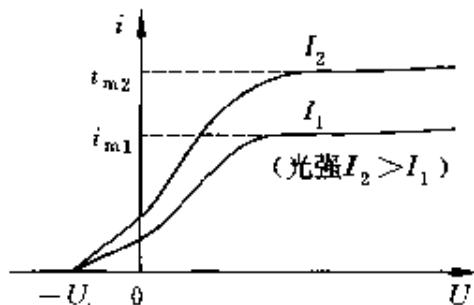


图 1.6 光电流和电压的关系曲线

实验发现,当入射光频率一定且光强一定时,光电流 i 和两极间电压 U 的关系如图 1.6 中的曲线所示。它表明,光强一定时,光电流随加速电压的增加而增加,当加速电压增加到一定值时,光电流不再增加,而达到一饱和值 i_m 。饱和现象说明这时单位时间内从阴极逸出的光电子已全部被阳极接收了。实验还表明饱和电流的值 i_m 和光强 I 成正比。这又说明单位时间内从阴极逸出的光电子数和光强成正比。

图 1.6 的实验曲线还表示,当加速电压减小到零并逐渐变负时,光电流并不为零。仅当反向电压等于 $-U_c$ 时,光电流才等于零。这一电压值 $-U_c$ 称为截止电压。截止电压的存在说明此时从阴极逸出的最快的光电子,由于受到电场的阻碍,也不能到达阳极了。根据能量分析可得光电子逸出时的最大初动能和截止电压 U_c 的关系应为

$$\frac{1}{2}mv_m^2 = eU_c \quad (1.7)$$

其中 m 和 e 分别是电子的质量和电量, v_m 是光电子逸出金属表面时的最大速度。

实验表明,截止电压 U_c 和入射光的频率 ν 有关,它们的关系由

图 1.7 的实验曲线表示,不同的曲线是对不同的阴极金属做的。这一关系为线性关系,可用数学式表示为

$$U_e = K\nu - U_0 \quad (1.8)$$

式中 K 是直线的斜率,是与金属种类无关的一个普适常量。将(1.8)式代入(1.7)式,可得

$$\frac{1}{2}mv_m^2 = eK\nu - eU_0 \quad (1.9)$$

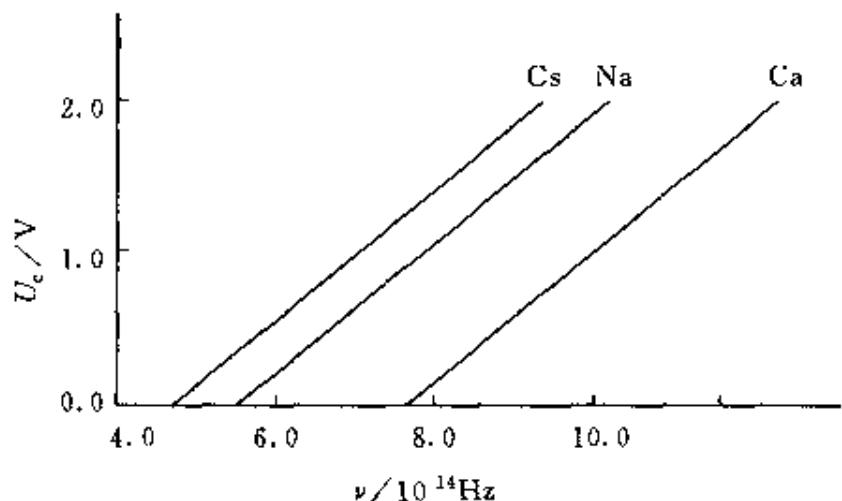


图 1.7 截止电压与入射光频率的关系

图 1.7 中直线与横轴的交点用 ν_0 表示。它具有这样的物理意义:当入射光的频率等于大于 ν_0 时, $U_e \geq 0$, 据(1.7)式, 电子能逸出金属表面, 形成光电流; 当入射光的频率小于 ν_0 时, 电子将不具有足够的速度以逸出金属表面, 因而就不会产生光电效应。由图 1.7 可知, 对于不同的金属有不同的 ν_0 。要使某种金属产生光电效应, 必须使入射光的频率大于其相应的频率 ν_0 才行。因此, 这一频率叫光电效应的红限频率, 相应的波长就叫红限波长。由(1.8)式可知, 红限频率 ν_0 应为

$$\nu_0 = \frac{U_0}{K} \quad (1.10)$$

几种金属的红限频率如表 1.1 所列。

表 1.1 几种金属的逸出功和红限频率

金 属	钨	锌	钙	钠	钾	铷	铯
红限频率 $\nu_0/10^{14}\text{Hz}$	10.95	8.065	7.73	5.53	5.44	5.15	4.69
逸出功 A/eV	4.54	3.34	3.20	2.29	2.25	2.13	1.94

此外,实验还发现,光电子的逸出,几乎是在光照到金属表面上的同时发生的,其延迟时间在 10^{-9}s 以下。

19世纪末叶所发现的上述光电效应和入射光频率的关系以及延迟时间甚小的事实,是当时大家已完全认可的光的波动说——麦克斯韦电磁理论——完全不能解释的。这是因为,光的波动说认为光的强度和光振动的振幅有关,而且光的能量是连续地分布在光场中的。

1.3 光的二象性 光子

当普朗克还在寻找他的能量子的经典根源时,爱因斯坦在能量子概念的发展上前进了一大步。普朗克当时认为只有振子的能量是量子化的,而辐射本身,作为广布于空间的电磁波,它的能量还是连续分布的。爱因斯坦在他于 1905 年发表的“关于光的产生和转换的一个有启发性的观点”的文章中,论及光电效应等的实验结果时,这样写道:“尽管光的波动理论永远不会被别的理论所取代,……,但仍可以设想,用连续的空间函数表述的光的理论在应用到光的发射和转换的现象时可能引发矛盾。”于是他接着假定:“从一个点光源发出的光线的能量并不是连续地分布在逐渐扩大的空间范围内的,而是由有限个数的能量子组成的。这些能量子个个都只占据空间的一些点,运动时不分裂,只能以完整的单元产生或被吸收。”在这里首次提出的光的能量子单元在 1926 年被刘易斯(G. N. Lewis)定名为“光子”。

关于光子的能量,爱因斯坦假定,不同颜色的光,其光子的能量不同。频率为 ν 的光的一个光子的能量为

$$E = h\nu \quad (1.11)$$

其中 h 为普朗克常量。

为了解释光电效应,爱因斯坦在1905年那篇文章中写道:“最简单的方法是设想一个光子将它的全部能量给予一个电子。”^①电子获得此能量后动能就增加了,从而有可能逸出金属表面。以 A 表示电子从金属表而逸出时克服阻力需要做的功(这功叫逸出功),则由能量守恒可得一个电子逸出金属表后的最大动能应为

$$\frac{1}{2}mv_m^2 = h\nu - A \quad (1.12)$$

将此式与(1.9)式相比,可知它可以完全解释光电效应的红限频率和截止电压的存在。(1.12)式就叫光电效应方程。对比(1.12)式和(1.9)式可得

$$h = eK \quad (1.13)$$

1916年密立根(R. A. Millikan)曾对光电效应进行了精确的测量,他利用 $U_c-\nu$ 的正比直线的斜率 K 计算出的普朗克常数值为

$$h = 6.56 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

这和当时用其他方法测得的值符合得很好。

对比(1.12)式和(1.9)式还可以得到

$$A = eU_0$$

再由(1.10)式可得

$$\nu_0 = \frac{A}{eK} = \frac{A}{h} \quad (1.14)$$

这说明红限频率与逸出功有一简单的数量关系。因此,可以由红限频率计算金属的逸出功。不同金属的逸出功也列在表1.1中。

^① 现在利用激光可以使几个光子一次被一个电子吸收。见本书“今日物理趣闻B 多光子吸收。”

饱和电流和光强的关系可作如下简单解释：入射光强度大表示单位时间内入射的光子数多，因而产生的光电子也多，这就导致饱和电流的增大。

光电效应的延迟时间短是由于光子被电子一次吸收而增大能量的过程需时很短，这也是容易理解的。

就这样，光子概念被证明是正确的。

在 19 世纪，通过光的干涉、衍射等实验，人们已认识到光是一种波动——电磁波，并建立了光的电磁理论——麦克斯韦理论。进入 20 世纪，从爱因斯坦起，人们又认识到光是粒子流——光子流。综合起来，关于光的本性的全面认识就是：光既具有波动性，又具有粒子性，相辅相成。在有些情况下，光突出地显示出其波动性，而在另一些情况下，则突出地显示出其粒子性。光的这种本性被称做波粒二象性。光既不是经典意义上的“单纯的”波，也不是经典意义上的“单纯的”粒子。

光的波动性用光波的波长 λ 和频率 ν 描述，光的粒子性用光子的质量、能量和动量描述。由(1.11)式，一个光子的能量为

$$E = h\nu$$

根据相对论的质能关系

$$E = mc^2 \quad (1.15)$$

一个光子的质量为

$$m = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{h}{c\lambda} \quad (1.16)$$

我们知道，粒子质量和运动速度的关系为

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

对于光子， $v = c$ ，而 m 是有限的，所以只能是 $m_0 = 0$ ，即光子是静止质量为零的一种粒子。但是，由于光速不变，光子对于任何参考系都

不会静止,所以在任何参考系中光子的质量实际上都不会是零。

根据相对论的能量-动量关系

$$E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$$

对于光子, $m_0 = 0$, 所以光子的动量为

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} \quad (1.17)$$

或

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (1.18)$$

(1.11)式和(1.18)式是描述光的性质的基本关系式,式中左侧的量描述光的粒子性,右侧的量描述光的波动性。注意,光的这两种性质在数量上是通过普朗克常量联系在一起的。

例 1.1 在某次光电效应实验中,测得某金属的截止电压 U_c 和入射光频率的对应数据如下:

U_c/V	0.541	0.637	0.714	0.80	0.878
$\nu/10^{14}\text{Hz}$	5.644	5.888	6.098	6.303	6.501

试用作图法求:

- (1) 该金属光电效应的红限频率;
- (2) 普朗克常量。

解 以频率 ν 为横轴,以截止电压 U_c 为纵轴,选取适当的比例画出曲线如图 1.8 所示。

- (1) 曲线与横轴的交点即该金属的红限频率,由图上读出红限频率

$$\nu_0 = 4.27 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

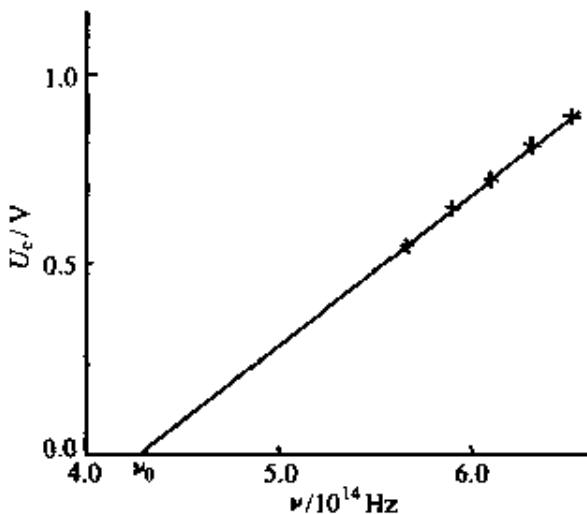
- (2) 由图求得直线的斜率为

$$K = 3.91 \times 10^{-5} \text{ V} \cdot \text{s}$$

根据(1.13)式得

$$h = eK = 6.26 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

例 1.2 求下述几种辐射的光子的能量、动量和质量:(1) $\lambda = 700 \text{ nm}$ 的红光;(2) $\lambda = 7.1 \times 10^{-2} \text{ nm}$ 的 X 射线;(3) $\lambda = 1.24 \times 10^{-3} \text{ nm}$ 的 γ 射线;

图 1.8 例 1.1 的 U_e 和 ν 的关系曲线

并与经 $U = 100 \text{ V}$ 电压加速后的电子的动能、动量和质量相比较。

解 光子的能量、动量和质量可分别由(1.11)、(1.18)、(1.16)式求得。至于电子的动能、动量等的计算,由于经 100 V 电压加速后,电子的速度不大,所以可以不考虑相对论效应。这样可得电子的动能为

$$E_e = eU = 100 \text{ eV}$$

电子的质量近似于其静止质量,为

$$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

电子的动量为

$$\begin{aligned} p_e &= m_e v = \sqrt{2m_e E_e} = \sqrt{2 \times 9.11 \times 10^{-31} \times 100 \times 1.6 \times 10^{-19}} \\ &= 5.40 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1} \end{aligned}$$

经过计算可得本题结果如下:

(1) 对 $\lambda = 700 \text{ nm}$ 的光子

$$E = 1.78 \text{ eV}, \quad \frac{E}{E_e} = \frac{1.78}{100} \approx 2\%$$

$$p = 9.47 \times 10^{-28} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}, \quad \frac{p}{p_e} = \frac{9.47 \times 10^{-28}}{5.40 \times 10^{-24}} \approx 2 \times 10^{-4}$$

$$m = 3.16 \times 10^{-36} \text{ kg}, \quad \frac{m}{m_e} = \frac{3.16 \times 10^{-36}}{9.11 \times 10^{-31}} \approx 3 \times 10^{-6}$$

(2) 对 $\lambda = 7.1 \times 10^{-2} \text{ nm}$ 的光子

$$E = 1.75 \times 10^4 \text{ eV}, \quad \frac{E}{E_e} = \frac{1.75 \times 10^4}{100} = 175$$

$$p = 9.34 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}, \quad \frac{p}{p_e} = \frac{9.34 \times 10^{-24}}{5.40 \times 10^{-24}} \approx 2$$

$$m = 3.11 \times 10^{-32} \text{ kg}, \quad \frac{m}{m_e} = \frac{3.11 \times 10^{-32}}{9.11 \times 10^{-31}} \approx 3\%$$

(3) 对 $\lambda = 1.24 \times 10^{-3} \text{ nm}$ 的光子

$$E = 1.00 \times 10^6 \text{ eV}, \quad \frac{E}{E_e} = \frac{1.00 \times 10^6}{100} = 10^4$$

$$p = 5.35 \times 10^{-22} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}, \quad \frac{p}{p_e} = \frac{5.35 \times 10^{-22}}{5.40 \times 10^{-24}} = 99$$

$$m = 1.78 \times 10^{-30} \text{ kg}, \quad \frac{m}{m_e} = \frac{1.78 \times 10^{-30}}{9.11 \times 10^{-31}} \approx 2$$

以上计算给出了关于光的粒子性质的一些数量概念。

1.4 康普顿散射

1923年康普顿(A. H. Compton)及其后不久吴有训研究了X射线通过物质时向各方向散射的现象。他们在实验中发现,在散射的X射线中,除了有波长与原射线相同的成分外,还有波长较长的成分。这种有波长改变的散射称为康普顿散射(或称康普顿效应),这种散射也可以用光子理论加以圆满的解释。

根据光子理论,X射线的散射是单个光子和单个电子发生弹性碰撞的结果。对于这种碰撞的分析计算如下。

在固体如各种金属中,有许多和原子核联系较弱的电子可以看作自由电子。由于这些电子的热运动平均动能(约百分之几电子伏特)和入射的X射线光子的能量($10^4 \sim 10^5 \text{ eV}$)比起来,可以略去不计,因而这些电子在碰撞前,可以看作是静止的。一个电子的静止能量为 $m_0 c^2$, 动量为零。设入射光的频率为 ν_0 , 它的一个光子就具有能量 $h\nu_0$, 动量 $\frac{h\nu_0}{c}e_0$ 。再设弹性碰撞后, 电子的能量变为 mc^2 , 动量变为 mv ; 散射光子的能量为 $h\nu$, 动量为 $\frac{h\nu}{c}e$, 散射角为 φ 。这里 e_0 和 e 分别为在碰撞前和碰撞后的光子运动方向上的单位矢

量(图 1.9)。按照能量和动量守恒定律,应该有

$$h\nu_0 + m_0c^2 = h\nu + mc^2 \quad (1.19)$$

和

$$\frac{h\nu_0}{c}e_0 = \frac{h\nu}{c}e + mv \quad (1.20)$$

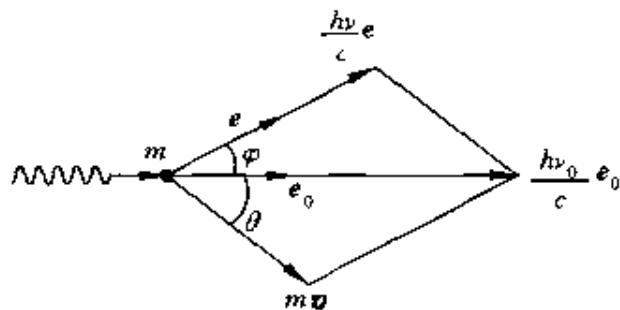


图 1.9 光子与静止的自由电子的碰撞分析矢量图

考虑到反冲电子的速度可能很大,式中 $m = m_0 / \sqrt{1 - v^2/c^2}$ 。由上述两个式子可解得^①

① 康普顿散射公式(1.21)式的推导:

将(1.20)式改写为

$$mv = \frac{h\nu_0}{c}e_0 - \frac{h\nu}{c}e$$

两边平方得

$$m^2v^2 = \left(\frac{h\nu_0}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - 2\frac{h^2\nu_0\nu}{c^2}e_0 \cdot e$$

由于 $e_0 \cdot e = \cos\varphi$, 所以由上式可得

$$m^2v^2c^2 = h^2\nu_0^2 + h^2\nu^2 - 2h^2\nu_0\nu\cos\varphi \quad (1.22)$$

将(1.19)式改写为

$$mc^2 = h(\nu_0 - \nu) + m_0c^2$$

将此式平方,再减去(1.22)式,并将 m^2 换写成 $m_0^2/(1 - v^2/c^2)$,化简后即可得

$$\frac{c}{\nu} - \frac{c}{\nu_0} = \frac{\hbar}{m_0c}(1 - \cos\varphi)$$

将 ν 换用波长 λ 表示,即得(1.21)式。

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos\varphi) \quad (1.21)$$

式中 λ 和 λ_0 分别表示散射光和入射光的波长。此式称为康普顿散射公式。式中 $\frac{h}{m_0 c}$ 具有波长的量纲，称为电子的康普顿波长，以 λ_c 表示。将 h, c, m_0 的值代入可算出

$$\lambda_c = 2.43 \times 10^{-3} \text{ nm}$$

它与短波 X 射线的波长相当。

从上述分析可知，入射光子和电子碰撞时，把一部分能量传给了电子。因而光子能量减少，频率降低，波长变长。波长偏移 $\Delta\lambda$ 和散射角 φ 的关系(1.21)式也与实验结果定量地符合(图 1.10)。(1.21)式还表明，波长的偏移 $\Delta\lambda$ 与散射物质以及入射 X 射线的波长 λ_0 无关，而只与散射角 φ 有关。这一规律也已为实验证实。

此外，在散射线中还观察到有与原波长相同的射线。这可解释如下：散射物质中还有许多被原子核束缚得很紧的电子，光子与它们的碰撞应看做是光子和整个原子的碰撞。由于原子的质量远大于光子的质量，所以在弹性碰撞中光子的能量几乎没有改变，因而散射光子的能量仍为 $h\nu_0$ ，它的波长也就和入射

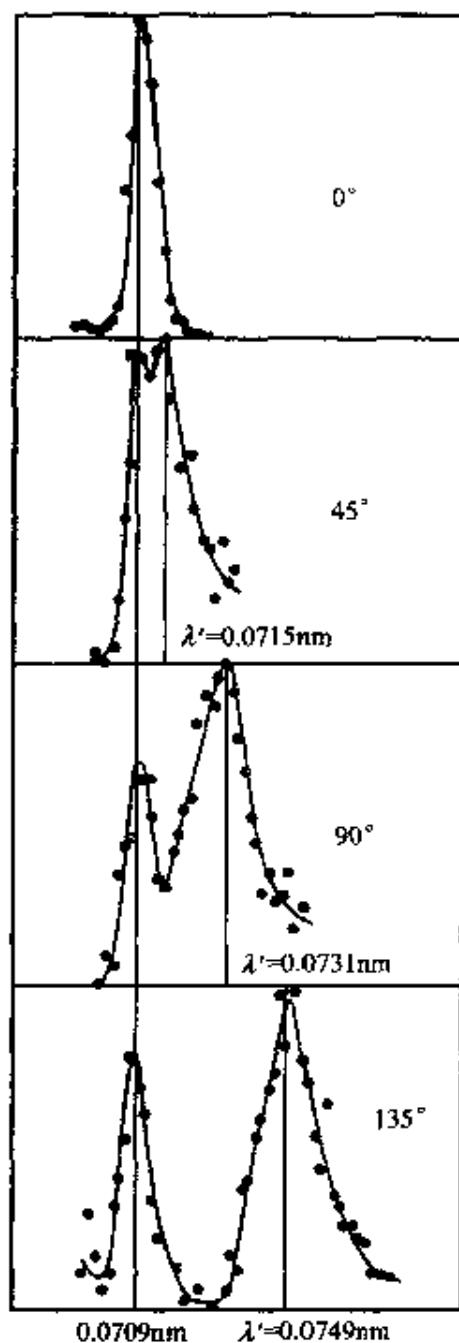


图 1.10 康普顿做的 X 射线散射结果

线的波长相同。这种波长不变的散射叫瑞利散射，它也可以用经典电磁理论解释。

康普顿散射的理论和实验的完全相符，曾在量子论的发展中起过重要的作用。它不仅有力地证明了光具有二象性，而且还证明了光子和微观粒子的相互作用过程也是严格地遵守动量守恒定律和能量守恒定律的。

应该指出，康普顿散射只有在入射波的波长与电子的康普顿波长可以相比拟时，才是显著的。例如入射波波长 $\lambda_0 = 400 \text{ nm}$ 时，在 $\varphi = \pi$ 的方向上，散射波波长偏移 $\Delta\lambda = 4.8 \times 10^{-3} \text{ nm}$, $\Delta\lambda/\lambda_0 = 10^{-5}$ 。这种情况下，很难观察到康普顿散射。当入射波波长 $\lambda_0 = 0.05 \text{ nm}$, $\varphi = \pi$ 时，虽然波长的偏移仍是 $\Delta\lambda = 4.8 \times 10^{-3} \text{ nm}$ ，但 $\Delta\lambda/\lambda \approx 10\%$ ，这时就能比较明显地观察到康普顿散射了。这也就是选用 X 射线观察康普顿散射的原因。

在光电效应中，入射光是可见光或紫外线，所以康普顿效应不显著。

现在说明一个理论问题。上面指出，光子和自由电子碰撞时，“把一部分能量传给了电子”。这就意味着在碰撞过程中，光子分裂了。这是否和爱因斯坦提出的光子“永不分离”相矛盾呢？不是的。上面的分析是就光子和电子碰撞的全过程说的。量子力学的分析指出：康普顿散射是一个“二步过程”，而且这二步又可以采取两种可能的方式。一种方式是自由电子先整体吸收入射光子，然后再放出一个散射光子（先吸后放）；另一种方式是自由电子先放出一个散射光子，然后再吸收入射光子（先放后吸）。每一步中光子都是“以完整的单元产生或被吸收的”。无论哪一种方式，所经历的时间都是非常短的。这样的二步过程可以用“费恩曼图”表示（图 1.11）。值得注意的是，两步中的每一步都遵守动量守恒定律，全过程自然也满足动量守恒定律。但是每一步并不遵守能量守恒定律，只是全过程总地满足能量守恒定律。这种对能量守恒定律的

违反，在量子力学理论中是允许的（见后面1.7节不确定关系）。

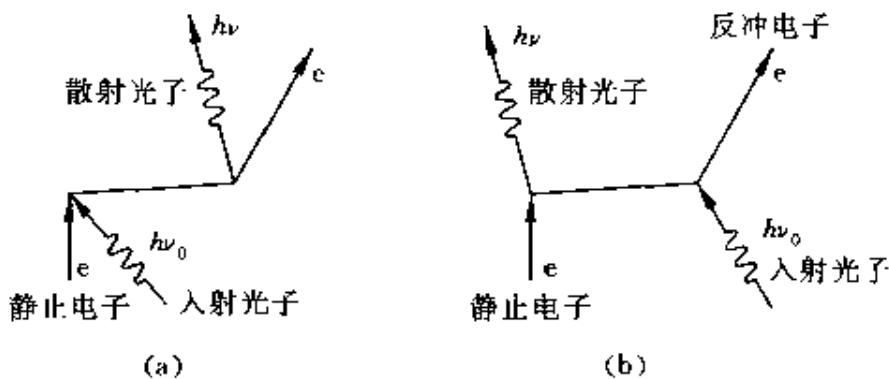


图 1.11 康普顿散射二步过程费恩曼图

(a) 先吸后放；(b) 先放后吸

例 1.3 波长 $\lambda_0 = 0.01 \text{ nm}$ 的 X 射线与静止的自由电子碰撞。在与入射方向成 90° 角的方向上观察时，散射 X 射线的波长多大？反冲电子的动能和动量各如何？

解 将 $\varphi = 90^\circ$ 代入 (1.21) 式可得

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \lambda_c(1 - \cos\varphi) = \lambda_c(1 - \cos 90^\circ) = \lambda_c$$

由此得康普顿散射波长为

$$\lambda = \lambda_0 + \lambda_c = 0.01 + 0.0024 = 0.0124 \text{ (nm)}$$

当然，在这一散射方向上还有波长不变的散射线。

至于反冲电子，根据能量守恒，它所获得的动能 E_k 就等于入射光子损失的能量，即

$$\begin{aligned} E_k &= h\nu_0 - h\nu = hc\left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda}\right) = \frac{hc\Delta\lambda}{\lambda_0\lambda} \\ &= \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8 \times 0.0024 \times 10^{-9}}{0.01 \times 10^{-9} \times 0.0124 \times 10^{-9}} \\ &= 3.8 \times 10^{-15} (\text{J}) = 2.4 \times 10^4 (\text{eV}) \end{aligned}$$

计算电子的动量，可参看图 1.12，其中 p_e 为电子碰撞后的动量。根据动量守恒，有

$$p_e \cos\theta = \frac{h}{\lambda_0}, \quad p_e \sin\theta = \frac{h}{\lambda}$$

两式平方相加并开方,得

$$\begin{aligned} p_e &= \frac{(\lambda_0^2 + \lambda^2)^{\frac{1}{2}}}{\lambda_0 \lambda} h \\ &= \frac{[(0.01 \times 10^{-9})^2 + (0.0124 \times 10^{-9})^2]^{1/2}}{0.01 \times 10^{-9} \times 0.0124 \times 10^{-9}} \times 6.63 \times 10^{-34} \\ &= 8.5 \times 10^{-23} (\text{kg} \cdot \text{m/s}) \\ \cos \theta &= \frac{h}{p_e \lambda_0} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{0.01 \times 10^{-9} \times 8.5 \times 10^{-23}} = 0.78 \end{aligned}$$

由此得

$$\theta = 38^\circ 44'$$

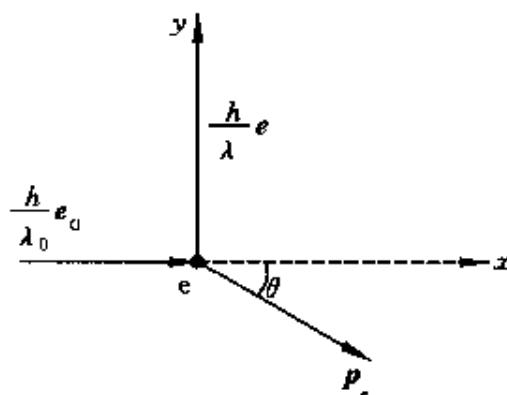


图 1.12 例 1.3 用图

1.5 粒子的波动性

1924 年法国青年物理学家德布罗意(L. V. de Broglie)在光的二象性的启发下想到:自然界在许多方面都是明显地对称的,如果光具有波粒二象性,则实物粒子,如电子,也应该具有波粒二象性。他提出了这样的问题:“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?”于是,他大胆地提出假设:实物粒子也

具有波动性。他并且把光子的能量-频率和动量-波长的关系式(1.11)式和(1.18)式借来,认为一个粒子的能量 E 和动量 p 跟和它相联系的波的频率 ν 和波长 λ 的定量关系与光子的一样,即有

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{mc^2}{h} \quad (1.23)$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (1.24)$$

应用于粒子的这些公式称为德布罗意公式或德布罗意假设。和粒子相联系的波称为物质波或德布罗意波,(1.24)式给出了相应的德布罗意波长。

德布罗意是采用类比方法提出他的假设的,当时并没有任何直接的证据。但是,爱因斯坦慧眼有识。当他闻知德布罗意的假设后就评论说:“我相信这一假设的意义远远超出了单纯的类比。”事实上,德布罗意的假设不久就得到了实验证实,而且引发了一门新理论——量子力学——的建立。

1927年,戴维孙(C. J. Davisson)和革末(L. A. Germer)在爱尔萨塞(Elsasser)的启发下,做了电子束在晶体表面上散射的实验,观察到了和X射线衍射类似的电子衍射现象,首先证实了电子的波动性。他们用的实验装置简图如图1.13(a)所示,使一束电子射到镍晶体的特选晶面上,同时用探测器测量沿不同方向散射的电子束的强度。实验中发现,当入射电子的能量为54 eV时,在 $\varphi=50^\circ$ 的方向上散射电子束强度最大(图1.13(b))。按类似于X射线在晶体表面衍射的分析,由图1.13(c)可知,散射电子束极大的方向应满足下列条件:

$$dsin\varphi = \lambda \quad (1.25)$$

已知镍晶面上原子间距为 $d = 2.15 \times 10^{-10}$ m,(1.25)式给出“电子波”的波长应为

$$\lambda = dsin\varphi = 2.15 \times 10^{-10} \times \sin 50^\circ = 1.65 \times 10^{-10} (\text{m})$$

按德布罗意假设(1.24)式,该“电子波”的波长应为

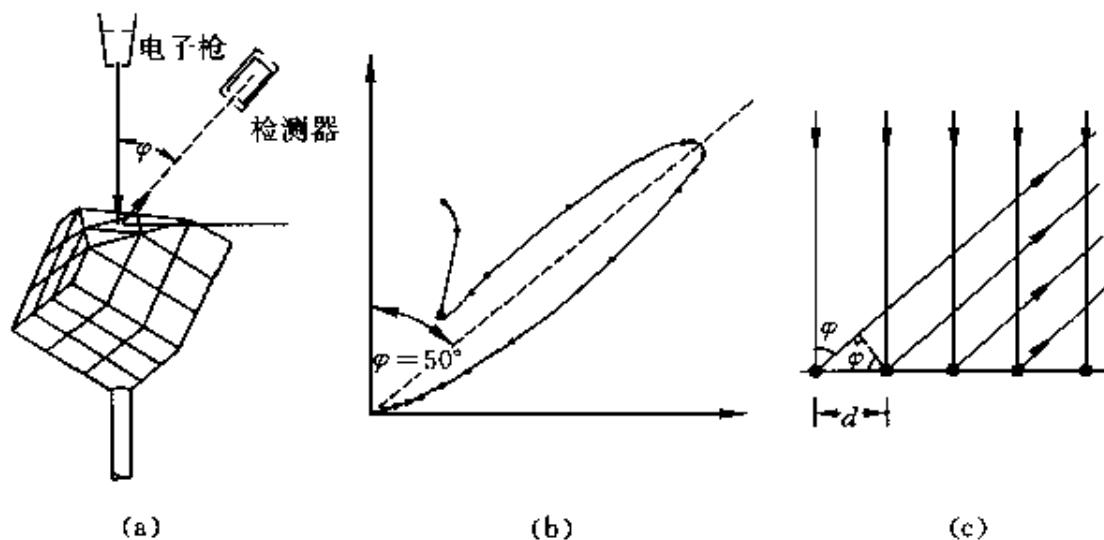


图 1.13 戴维孙-革末实验

(a) 装置简图; (b) 散射电子束强度分布; (c) 衍射分析

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_k}} \\ &= \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 0.91 \times 10^{-31} \times 54 \times 1.6 \times 10^{-19}}} \\ &= 1.67 \times 10^{-10} (\text{m})\end{aligned}$$

这一结果和上面的实验结果符合得很好。

同年,汤姆孙(G. P. Thomson)做了电子束穿过多晶薄膜的衍射实验(图 1.14(a)),成功地得到了和 X 射线通过多晶薄膜后产生的衍射图样极为相似的衍射图样(图 1.14(b))。

图 1.15 是一幅波长相同的 X 射线和电子衍射图样对比图。后来,1961 年约恩孙(C. Jönsson)做了电子的单缝、双缝、三缝等衍射实验,得出的明暗条纹(图 1.16)更加直接地说明了电子具有波动性。

除了电子外,以后还陆续用实验证实了中子、质子以及原子甚至分子等都具有波动性,德布罗意公式对这些粒子同样正确。这就说明,一切微观粒子都具有波粒二象性,德布罗意公式就是描述微

观粒子波粒二象性的基本公式。

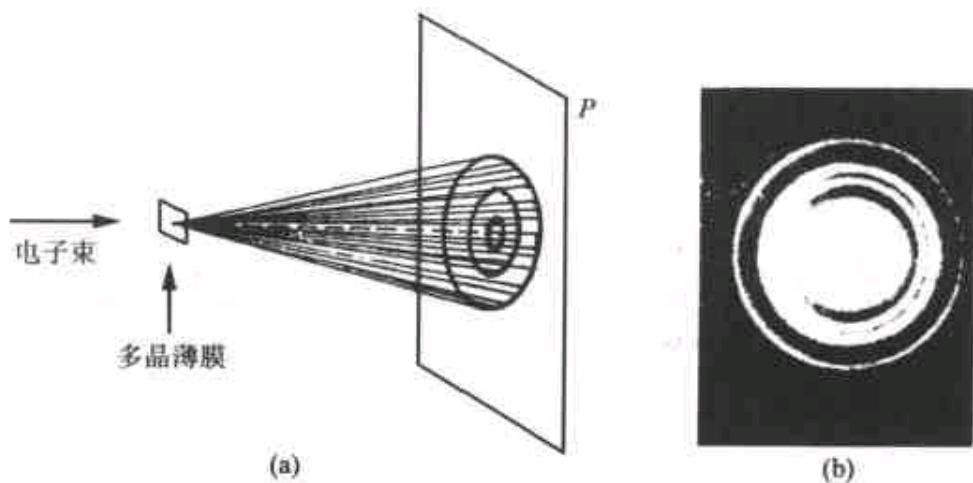


图 1.14 汤姆孙电子衍射实验

(a) 实验简图; (b) 衍射图样

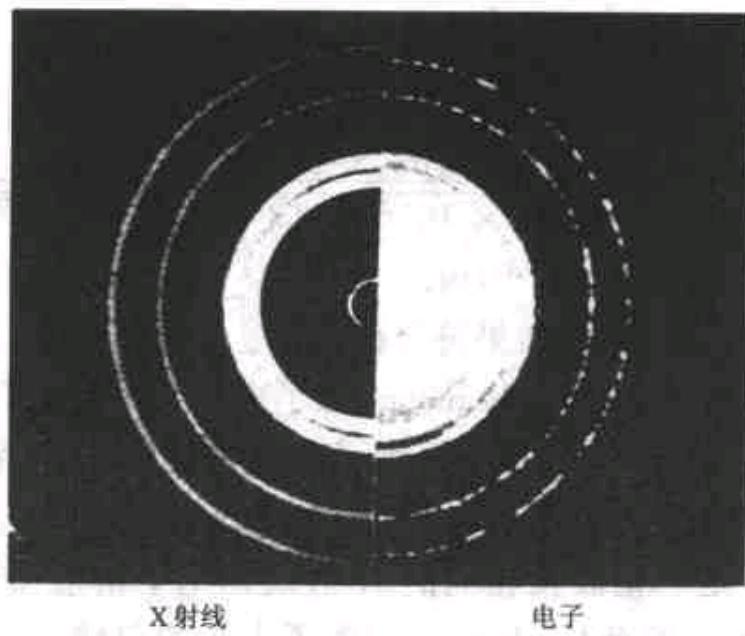


图 1.15 电子和 X 射线衍射图样对比图

粒子的波动性已有很多的重要应用。例如,由于低能电子波穿透深度较 X 光小,所以低能电子衍射被广泛地用于固体表面性质的研究。由于中子易被氢原子散射,所以中子衍射就被用来研究含

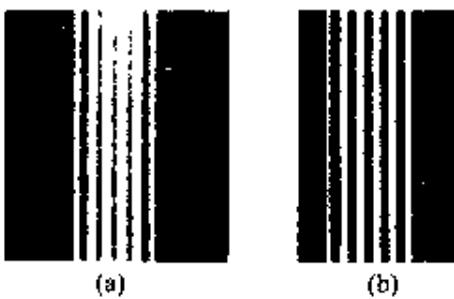


图 1.16 约恩孙电子衍射图样

(a) 双缝; (b) 四缝

氢的晶体。电子显微镜利用了电子的波动性更是大家熟知的。由于电子的波长可以很短, 电子显微镜的分辨能力可以达到 0.1 nm。

例 1.4 计算电子经过 $U_1 = 100$ V 和 $U_2 = 10000$ V 的电压加速后的德布罗意波长 λ_1 和 λ_2 分别是多少?

解 经过电压 U 加速后, 电子的动能为

$$\frac{1}{2}mv^2 = eU$$

由此得

$$v = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$$

根据德布罗意公式, 此时电子波的波长为

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2em}} \frac{1}{\sqrt{U}}$$

将已知数据代入计算可得

$$\lambda_1 = 0.123 \text{ nm}, \quad \lambda_2 = 0.0123 \text{ nm}^{\textcircled{1}}$$

这都和 X 射线的波长相当。可见一般实验中电子波的波长是很短的, 正是因为这个缘故, 观察电子衍射时就需要利用晶体。

例 1.5 计算质量 $m = 0.01$ kg, 速率 $v = 300$ m/s 的子弹的德布罗意波长。

^① 由于此时电子速度已大到 $0.2c$, 故需考虑相对论效应, 根据相对论计算出的 $\lambda_2 = 0.0127$ nm, 上面结果误差约为 3%。

解 根据德布罗意公式可得

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{0.01 \times 300} = 2.21 \times 10^{-34} \text{ (m)}$$

可以看出,因为普朗克常量是个极微小的量,所以宏观物体的波长小到实验难以测量的程度,因而宏观物体仅表现出粒子性。

例 1.6 证明物质波的相速度 u 与相应粒子运动速度 v 之间的关系为

$$u = \frac{c^2}{v}$$

证 波的相速度为 $u = v\lambda$,根据德布罗意公式,可得

$$\lambda = \frac{h}{mv}, \quad v = \frac{mc^2}{h}$$

两式相乘即可得

$$u = \lambda v = \frac{c^2}{v}$$

此式表明物质波的相速度并不等于相应粒子的运动速度^①。

1.6 概率波与概率幅

德布罗意提出的波的物理意义是什么呢?他本人曾认为那种与粒子相联系的波是引导粒子运动的“导波”,并由此预言了电子的双缝干涉的实验结果。这种波以相速度 $u = c^2/v$ 传播而其群速度就正好是粒子运动的速度 v 。对这种波的本质是什么,他并没有给出明确的回答,只是说它是虚拟的和非物质的。

量子力学的创始人之一薛定谔在 1926 年曾说过,电子的德布罗意波描述了电量在空间的连续分布。为了解释电子是粒子的事实,他认为电子是许多波合成的波包。这种说法很快就被否定了。

① 由于 $v < c$,所以 $u > c$,即相速度大于光速。这并不和相对论矛盾。因为对一个粒子,其能量或质量是以群速度传播的。德布罗意曾证明,和粒子相联系的物质波的群速度等于粒子的运动速度。

因为,第一,波包总是要发散而解体的,这和电子的稳定性相矛盾;第二,电子在原子散射过程中仍保持稳定也很难用波包来说明。

当前得到公认的关于德布罗意波的实质的解释是玻恩(M. Born)在1926年提出的。在玻恩之前,爱因斯坦谈及他本人论述的光子和电磁波的关系时曾提出电磁场是一种“鬼场”。这种场引导光子的运动,而各处电磁波振幅的平方决定在各处的单位体积内一个光子存在的概率。玻恩发展了爱因斯坦的思想。他保留了粒子的微粒性,而认为物质波描述了粒子在各处被发现的概率。这就是说,德布罗意波是概率波。

玻恩的概率波概念可以用电子双缝衍射的实验结果来说明^①。图1.16(a)的电子双缝衍射图样和光的双缝衍射图样完全一样,显示不出粒子性,更没有什么概率那样的不确定特征。但那是用大量的电子(或光子)做出的实验结果。如果减弱入射电子束的强度以致使一个一个电子依次通过双缝,则随着电子数的积累,衍射“图样”将依次如图1.17中各图所示。图(a)是只有一个电子穿过双缝所形成的图象,图(b)是几个电子穿过后形成的图象,图(c)是几十个电子穿过后形成的图象。这几幅图象说明电子确是粒子,因为图象是由点组成的。它们同时也说明,电子的去向是完全不确定的,一个电子到达何处完全是概率事件。随着入射电子总数的增多,衍射图样依次如(d),(e),(f)诸图所示,电子的堆积情况逐渐显示出了条纹,最后就呈现明晰的衍射条纹,这条纹和大量电子短时间内通过双缝后形成的条纹(图1.16(a))一样。这些条纹把单个电子的概率行为完全淹没了。这又说明,尽管单个电子的去向是概率性的,但其概率在一定条件(如双缝)下还是有确定的规律的。这些就是玻恩概率波概念的核心。

图1.17表示的实验结果明确地说明了物质波并不是经典的

^① 关于光的双缝衍射实验,也做出了完全相似的结果。

波。经典的波是一种运动形式。在双缝实验中，不管入射波强度如何小，经典的波在缝后的屏上都“应该”显示出强弱连续分布的衍射条纹，只是亮度微弱而已。但图 1.17 明确地显示物质波的主体仍是粒子，而且该种粒子的运动并不具有经典的振动形式。

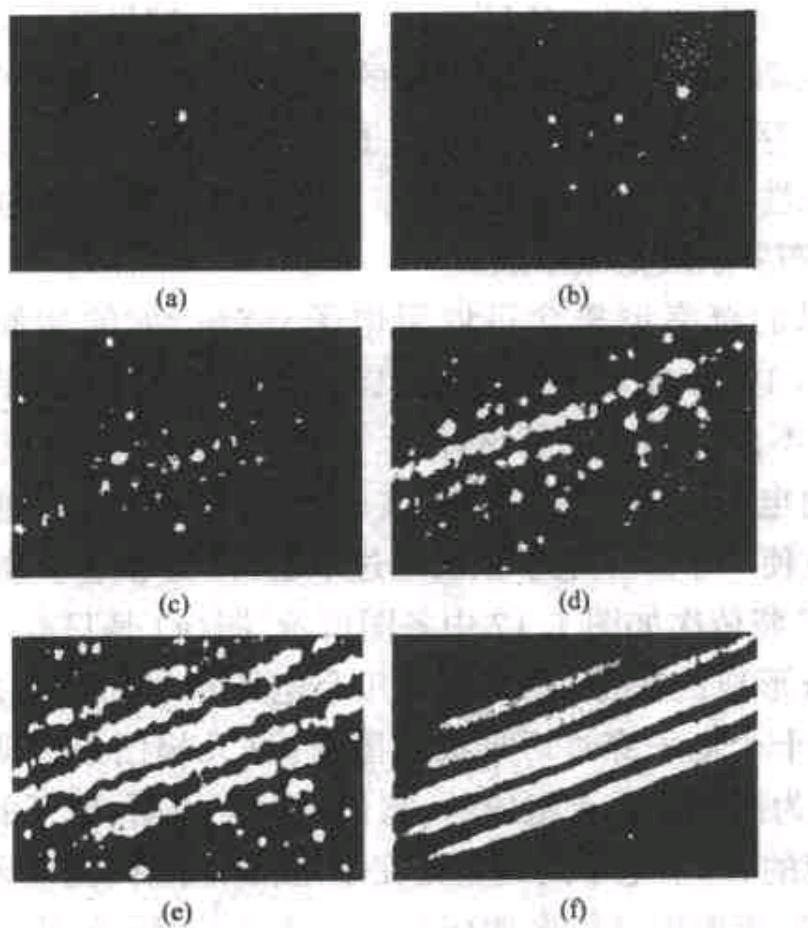


图 1.17 电子逐个穿过双缝的衍射实验结果

图 1.17 表示的实验结果也说明微观粒子并不是经典的粒子。在双缝实验中，大量电子形成的衍射图样是若干条强度大致相同的较窄的条纹，如图 1.18(a) 所示。如果只开一条缝，另一条缝闭合，则会形成单缝衍射条纹，其特征是几乎只有强度较大的较宽的中央明纹（图 1.18(b) 中的 P_1 和 P_2 ）。如果先开缝 1，同时关闭缝 2，经过一段时间后改开缝 2，同时关闭缝 1，这样做实验的结果所

形成的总的衍射图样 P_{12} 将是两次单缝衍射图样的叠加，其强度分布和同时打开两缝时的双缝衍射图样是截然不同的。

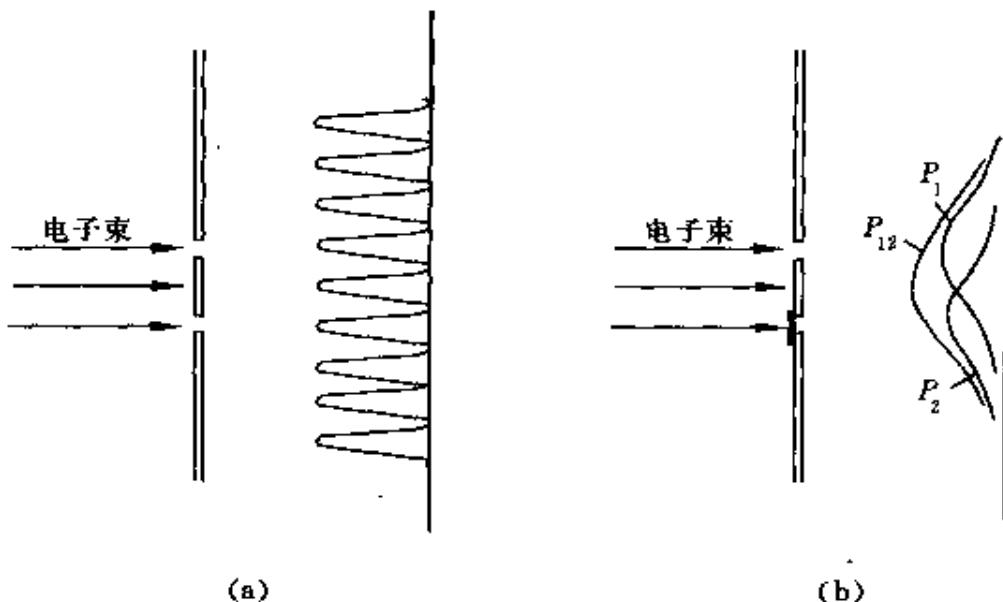


图 1.18 电子双缝衍射实验示意图

(a) 两缝同时打开；(b) 依次打开一个缝

如果是经典的粒子，它们通过双缝时，都各自有确定的轨道，不是通过缝 1 就是通过缝 2。通过缝 1 的那些粒子，如果也能衍射的话，将形成单缝衍射图样。通过缝 2 的那些粒子，将形成另一幅单缝衍射图样。不管是两缝同时开，还是依次只开一个缝，最后形成的衍射条纹都应该是图 1.18(b) 那样的两个单缝衍射图样的叠加。实验结果显示实际的微观粒子的表现并不是这样。这就说明，微观粒子并不是经典的粒子。在只开一条缝时，实际粒子形成单缝衍射图样。在两缝同时打开时，实际粒子的运动就有两种可能：或是通过缝 1 或是通过缝 2。如果还按经典粒子设想，为了解释双缝衍射图样，就必须认为通过这个缝时，它好像“知道”另一个缝也在开着，于是就按双缝条件下的概率来行动了。这种说法只是一种“拟人”的想象，实际上不可能从实验上测知某个微观粒子“到底”

是通过了哪个缝，我们只能说它通过双缝时有两种可能。微观粒子由于其波动性而表现得如此不可思议地奇特！但客观事实的确就是这样！

为了定量地描述微观粒子的状态，量子力学中引入了波函数，并用 Ψ 表示。一般来讲，波函数是空间和时间的函数，并且是复函数，即 $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$ 。将爱因斯坦的“鬼场”和光子存在的概率之间的关系加以推广，玻恩假定 $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$ 就是粒子的概率密度，即在时刻 t ，在点 (x, y, z) 附近单位体积内发现粒子的概率。波函数 Ψ 因此就称为概率幅。对双缝实验来说，以 Ψ_1 表示单开缝 1 时粒子在底板附近的概率幅分布，则 $|\Psi_1|^2 = P_1$ 即粒子在底板上的概率分布，它对应于单缝衍射图样 P_1 （图 1.18(b)）。以 Ψ_2 表示单开缝 2 时的概率幅，则 $|\Psi_2|^2 = P_2$ 表示粒子此时在底板上的概率分布，它对应于单缝衍射图样 P_2 。如果两缝同时打开，经典概率理论给出，这时底板上粒子的概率分布应为

$$P_{12} = P_1 + P_2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$$

但事实不是这样！两缝同开时，入射的每个粒子的去向有两种可能，它们可以“任意”通过其中的一条缝。这时不是概率相叠加，而是概率幅叠加，即

$$\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2 \quad (1.26)$$

相应的概率分布为

$$P_{12} = |\Psi_{12}|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 \quad (1.27)$$

这里最后的结果就会出现 Ψ_1 和 Ψ_2 的交叉项。正是这交叉项给出了两缝之间的干涉效果，使双缝同开和两缝依次单开的两种条件下的衍射图样不同。

概率幅叠加这样的奇特规律，被费恩曼(R. P. Feynman)在他的著名的《物理学讲义》中称为“量子力学的第一原理”。他这样写道：“如果一个事件可能以几种方式实现，则该事件的概率幅就是各种方式单独实现时的概率幅之和。于是出现了干涉。”

在物理理论中引入概率概念在哲学上有重要的意义。它意味着：在已知给定条件下，不可能精确地预知结果，只能预言某些可能的结果的概率。这也就是说，不能给出唯一的肯定结果，只能用统计方法给出结论。这一理论是和经典物理的严格因果律直接矛盾的。玻恩在 1926 年曾说过：“粒子的运动遵守概率定律，但概率本身还是受因果律支配的。”这句话虽然以某种方式使因果律保持有效，但概率概念的引入在人们了解自然的过程中还是一个非常大的转变。因此，尽管所有物理学家都承认，由于量子力学预言的结果和实验异常精确地相符，所以它是一个很成功的理论，但是关于量子力学的哲学基础仍然有很大的争论。哥本哈根学派，包括玻恩、海森伯 (W. Heisenberg) 等量子力学大师，坚持波函数的概率或统计解释，认为它就表明了自然界的最终实质。费恩曼也写过（1965 年）：“现时我们限于计算概率。我们说‘现时’，但是我们强烈地期望将永远是这样——解除这一困惑是不可能的——自然界就是按这样的方式行事的。”

另一些人不同意这样的结论，最主要的反对者是爱因斯坦。他在 1927 年就说过：“上帝并不是跟宇宙玩掷骰子游戏。”德布罗意的话（1957 年）更发人深思：“不确定性是物理实质，这样的主张并不是完全站得住的。将来对物理实在的认识达到一个更深的层次时，我们可能对概率定律和量子力学作出新的解释，即它们是目前我们尚未发现的那些变量的完全确定的数值演变的结果。我们现在开始用来击碎原子核并产生新粒子的强有力的方法可能有一天向我们揭示关于这一更深层次的目前我们还不知道的知识。阻止对量子力学目前的观点作进一步探索的尝试对科学发展来说是非常危险的，而且它也背离了我们从科学史中得到的教训。实际上，科学史告诉我们，已获得的知识常常是暂时的，在这些知识之外，肯定有更广阔的新领域有待探索。”最后，还可以引述一段量子力学大师狄拉克 (P. A. M. Dirac) 在 1972 年的一段话：“在我看来，

我们还没有量子力学的基本定律。目前还在使用的定律需要作重要的修改，……。当我们作出这样剧烈的修改后，当然，我们用统计计算对理论作出物理解释的观念可能会被彻底地改变。”

1.7 不确定关系

上一节讲过，波动性使得实际粒子和牛顿力学所设想的“经典粒子”根本不同。根据牛顿力学理论（或者说是牛顿力学的一个基本假设），质点的运动都沿着一定的轨道，在轨道上任意时刻质点都有确定的位置和动量。在牛顿力学中也正是用位置和动量来描述一个质点在任一时刻的运动状态的。对于实际的粒子则不然，由于其粒子性，可以谈论它的位置和动量，但由于其波动性，它的空间位置需要用概率波来描述，而概率波只能给出粒子在各处出现的概率，所以在任一时刻粒子不具有确定的位置，与此相联系，粒子在各时刻也不具有确定的动量。这也可以说，由于二象性，在任意时刻粒子的位置和动量都有一个不确定量。量子力学理论证明，在某一方向，例如 x 方向上，粒子的位置不确定量 Δx 和在该方向上的动量的不确定量 Δp_x 有一个简单的关系，这一关系叫做**不确定[性]关系**（也曾叫做测不准关系）。下面我们将借助于电子单缝衍射实验来粗略地推导这一关系。

如图 1.19 所示，一束动量为 p 的电子通过宽为 Δx 的单缝后发生衍射而在屏上形成衍射条纹。让我们考虑一个电子通过缝时的位置和动量。对一个电子来说，我们不能确定地说它是从缝中哪一点通过的，而只能说它是从宽为 Δx 的缝中通过的，因此它在 x 方向上的位置不确定量就是 Δx 。它沿 x 方向的动量 p_x 是多大呢？如果说它在缝前的 p_x 等于零，在过缝时， p_x 就不再是零了。因为如果还是零，电子就要沿原方向前进而不会发生衍射现象了。屏上电子落点沿 x 方向展开，说明电子通过缝时已有了不为零的 p_x 值。

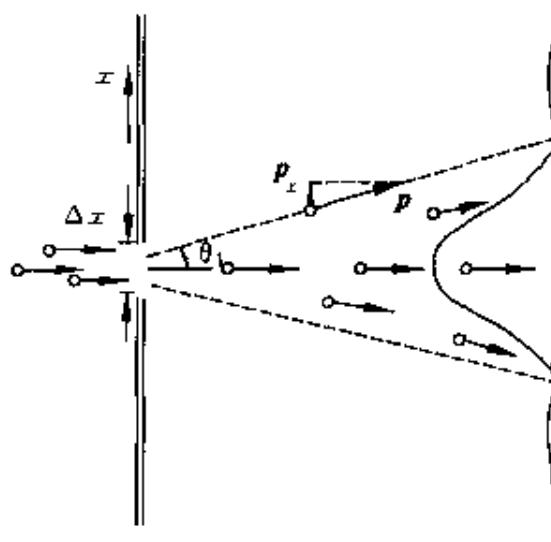


图 1.19 电子单缝衍射说明

忽略次级极大,可以认为电子都落在中央亮纹内,因而电子在通过缝时,运动方向可以有大到 θ_1 角的偏转。根据动量矢量的合成,可知一个电子在通过缝时在 x 方向动量的分量 p_x 的大小为下列不等式所限:

$$0 \leq p_x \leq p \sin \theta_1$$

这表明,一个电子通过缝时在 x 方向上的动量不确定量为

$$\Delta p_x = p \sin \theta_1$$

考虑到衍射条纹的次级极大,可得

$$\Delta p_x \geq p \sin \theta_1 \quad (1.28)$$

由单缝衍射公式,第一级暗纹中心的角位置 θ_1 由下式决定:

$$\Delta x \sin \theta_1 = \lambda$$

此式中 λ 为电子波的波长,根据德布罗意公式

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

所以有

$$\sin \theta_1 = \frac{h}{p \Delta x}$$

将此式代入上面 Δp_x 的表示式可得

$$\Delta p_x \geq \frac{h}{\Delta x}$$

或

$$\Delta x \Delta p_x \geq h \quad (1.29)$$

更一般的理论给出

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$$

对于其他的分量，类似地有

$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \frac{h}{4\pi}$$

引入另一个常用的量

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054\ 588\ 7 \times 10^{-34}\ \text{J} \cdot \text{s} \quad (1.30)$$

也叫普朗克常量，上面三个公式就可写成^①

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.31)$$

$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.32)$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.33)$$

这三个公式就是位置坐标和动量的不确定关系。它们说明粒子的位置坐标不确定量越小，则同方向上的动量不确定量越大。同样，某方向上动量不确定量越小，则此方向上粒子位置的不确定量越大。总之，这个不确定关系告诉我们，在表明或测量粒子的位置和动量时，它们的精度存在着一个终极的不可逾越的限制。

不确定关系是海森伯于1927年给出的，因此常被称为海森伯不确定关系或不确定原理。它的根源是波粒二象性。费恩曼曾把

^① 在作数量级的估算时，常用 \hbar 代替 $h/2$ 。

它称做“自然界的根本属性”，并且还说“现在我们用来描述原子以及，实际上，所有物质的量子力学的全部理论都有赖于不确定原理的正确性。”

除了坐标和动量的不确定关系外，对粒子的行为说明还常用到能量和时间的不确定关系。考虑一个粒子在一段时间 Δt 内的动量为 p ，能量为 E 。根据相对论，有

$$p^2 c^2 = E^2 - m_0^2 c^4$$

而其动量的不确定量为

$$\Delta p = \Delta \left(\frac{1}{c} \sqrt{E^2 - m_0^2 c^4} \right) = \frac{E}{c^2 p} \Delta E$$

在 Δt 时间内，粒子可能发生的位移为 $v \Delta t = \frac{p}{m} \Delta t$ 。这位移也就是在这段时间内粒子的位置坐标不确定度，即

$$\Delta x = \frac{p}{m} \Delta t$$

将上两式相乘，得

$$\Delta x \Delta p = \frac{E}{mc^2} \Delta E \Delta t$$

由于 $E = mc^2$ ，再根据不确定关系(1.31)式，就可得

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.34)$$

这就是关于能量和时间的不确定关系。

例 1.7 设子弹的质量为 0.01 kg，枪口的直径为 0.5 cm，试用不确定性关系计算子弹射出枪口时的横向速度。

解 枪口直径可以当作子弹射出枪口时的位置不确定量 Δx ，由于 $\Delta p_x = m \Delta v_x$ ，所以由(1.31)式可得

$$\Delta x \cdot m \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

取等号计算，

$$\Delta v_x = \frac{\hbar}{2m\Delta x} = \frac{1.05 \times 10^{-34}}{2 \times 0.01 \times 0.5 \times 10^{-2}} = 1.1 \times 10^{-30} (\text{m/s})$$

这也就是子弹的横向速度。和子弹飞行速度每秒几百米相比，这一速度引起的运动方向的偏转是微不足道的。因此对于子弹这种宏观粒子，它的波动性不会对它的“经典式”运动以及射击时的瞄准带来任何实际的影响。

例 1.8 原子的线度为 10^{-10} m，求原子中电子速度的不确定量。

解 说“电子在原子中”就意味着电子的位置不确定量为 $\Delta x = 10^{-10}$ m，由不确定关系可得

$$\Delta v_x = \frac{\hbar}{m\Delta x} = \frac{1.05 \times 10^{-34}}{9.11 \times 10^{-31} \times 10^{-10}} = 1.2 \times 10^6 \text{ (m/s)}$$

按照牛顿力学计算，氢原子中电子的轨道运动速度约为 10^6 m/s，它与上面的速度不确定量有相同数量级。可见对原子范围内的电子，谈论其速度是没有什么实际意义的。这时电子的波动性十分显著，描述它的运动时必须抛弃轨道概念而代之以说明电子在空间的概率分布的电子云图象。

例 1.9 氦氖激光器所发红光波长为 $\lambda = 632.8$ nm，谱线宽度 $\Delta\lambda = 10^{-9}$ nm，求当这种光子沿 x 方向传播时，它的 x 坐标的不确定量多大？

解 光子具有二象性，所以也应满足不确定关系。由于 $p_x = \hbar/\lambda$ ，所以数值上

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{\lambda^2} \Delta\lambda$$

将此式代入(1.31)式，可得

$$\Delta x = \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{\lambda^2}{4\pi\Delta\lambda} \approx \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}$$

由于 $\lambda^2/\Delta\lambda$ 等于相干长度，也就是波列长度（见本套教材第四册波动与光学·3.3节）。上式说明，光子的位置不确定量也就是波列的长度。根据原子在一次能级跃迁过程中发射一个光子（粒子性）或者说发出一个波列（波动性）的观点来看，这一结论是很容易理解的。将 λ 和 $\Delta\lambda$ 的值代入上式，可得

$$\Delta x \approx \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda} = \frac{(632.8 \times 10^{-9})^2}{10^{-18}} = 4 \times 10^5 \text{ (m)} = 400 \text{ (km)}$$

例 1.10 求线性谐振子的最小可能能量（又叫零点能）。

解 线性谐振子沿直线在平衡位置附近振动，坐标和动量都有一定限制。因此可以用坐标-动量不确定关系来计算其最小可能能量。

已知沿 x 方向的线性谐振子能量为

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

由于振子在平衡位置附近振动,所以可取

$$\Delta x \approx x, \quad \Delta p \approx p$$

这样,

$$E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

利用(1.31)式,取等号,可得

$$E = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2 \quad (1.35)$$

为求 E 的最小值,先计算

$$\frac{dE}{d(\Delta x)} = -\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^3} + m\omega^2(\Delta x)$$

令 $dE/d(\Delta x) = 0$, 可得 $(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$ 。将此值代入(1.35)式可得最小可能能量为

$$E_{\min} = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\nu$$

例 1.11 (1) J/ψ 粒子的静能为 3 100 MeV, 寿命为 5.2×10^{-21} s。它的能量不确定度是多大? 占静能的几分之几? (2) ρ 介子的静能是 765 MeV, 寿命是 2.2×10^{-24} s。它的能量不确定度多大? 又占其静能的几分之几?

解 (1) 由(1.34)式,取等号可得 $\Delta E = \hbar/2\Delta t$, 此处 Δt 即粒子的寿命。对 J/ψ 粒子,

$$\Delta E = \frac{\hbar}{2\Delta t} = \frac{1.05 \times 10^{-34}}{2 \times 5.2 \times 10^{-21} \times 1.6 \times 10^{-13}} = 0.063 \text{ (MeV)}$$

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{0.063}{3100} = 2.0 \times 10^{-5}$$

(2) 对 ρ 介子

$$\Delta E = \frac{\hbar}{2\Delta t} = \frac{1.05 \times 10^{-34}}{2 \times 2.2 \times 10^{-24} \times 1.6 \times 10^{-13}} = 150 \text{ (MeV)}$$

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{150}{765} = 0.20$$

提 要

1. 黑体辐射

普朗克量子化假设：谐振子能量为

$$E = nh\nu, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

普朗克热辐射公式：黑体的光谱辐射出射度

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

斯特藩 - 玻耳兹曼定律：黑体的总辐射出射度

$$M = \sigma T^4$$

其中 $\sigma = 5.6703 \times 10^{-8} \text{ W/(m}^2 \cdot \text{K}^4)$

维恩位移律：光谱辐射出射度最大的光的频率为

$$\nu_m = C_\nu T$$

其中 $C_\nu = 5.880 \times 10^{10} \text{ Hz/K}$

2. 光电效应

光子：光(电磁波)是由光子组成的。

每个光子的能量 $E = h\nu$

每个光子的动量 $p = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda}$

光电效应方程 $\frac{1}{2}mv_{max}^2 = h\nu - A$

光电效应的红限频率 $\nu_0 = A/h$

3. 康普顿散射：用光子和电子的碰撞解释。

散射公式： $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c}(1 - \cos\varphi)$

康普顿波长(电子)： $\lambda_c = 2.4263 \times 10^{-3} \text{ nm}$

4. 粒子的波动性

德布罗意假设：粒子的波长

$$\lambda = h/p = h/mv$$

5. 概率波与概率幅

德布罗意波是概率波, 它描述粒子在各处被发现的概率。

用波函数 Ψ 描述微观粒子的状态。 Ψ 叫概率幅, $|\Psi|^2$ 为概率密度。概率幅具有叠加性。

6. 不确定关系: 它是粒子二象性的反映。

位置动量不确定关系: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

能量时间不确定关系: $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

思 考 题

1. 1 霓虹灯发的光是热辐射吗? 熔炉中的铁水发的光是热辐射吗?
1. 2 人体也向外发出热辐射, 为什么在黑暗中还是看不见人呢?
1. 3 刚粉刷完的房间从房外远处看, 即使在白天, 它的开着的窗口也是黑的。为什么?
1. 4 把一块表面的一半涂了煤烟的白瓷砖放到火炉内烧, 高温下瓷砖的哪一半显得更亮些?
1. 5 为什么几乎没有黑色的花?
1. 6 如果普朗克常量大到 10^{34} 倍, 弹簧振子将会表现出什么奇特的行为?
1. 7 在光电效应实验中, 如果(1) 入射光强度增加一倍; (2) 入射光频率增加一倍, 各对实验结果有什么影响?
1. 8 用一定波长的光照射金属表面产生光电效应时, 为什么逸出金属表面的光电子的速度大小不同?
1. 9 用可见光能产生康普顿效应吗? 能观察到吗?
1. 10 为什么对光电效应只考虑光子的能量的转化, 而对康普顿效应则还要考虑光子的动量的转化?
1. 11 光电效应和康普顿效应在对光的粒子性的认识方面, 其意义有

何不同?

1.12 若一个电子和一个质子具有同样的动能,哪个粒子的德布罗意波长较大?

1.13 电子显微镜所用电子波长常小于0.01 nm,为什么不用这么短的波长的光子来制造显微镜?

1.14 如果普朗克常量 $\hbar \rightarrow 0$,对波粒二象性会有什么影响?如果光在真空中的速率 $c \rightarrow \infty$,对时间空间的相对性会有什么影响?

1.15 根据不确定关系,一个分子即使在0 K,它能完全静止吗?

习 题

1.1 夜间地面降温主要是由于地面的热辐射。如果晴天夜里地面温度为 -5°C ,按黑体辐射计算,1 m²地面失去热量的速率多大?

1.2 太阳的光谱辐射出射度 M_{ν} 的极大值出现在 $\nu_m = 3.4 \times 10^{14} \text{ Hz}$ 处。(1)求太阳表面的温度 T ;(2)求太阳表面的辐射出射度 M 。

1.3 在地球表面,太阳光的强度是 $1.0 \times 10^3 \text{ W/m}^2$ 。一太阳能水箱的涂黑面直对阳光,按黑体辐射计,热平衡时水箱内的水温可达几摄氏度?忽略水箱其他表面的热辐射。

1.4 太阳的总辐射功率为 $P_s = 3.9 \times 10^{26} \text{ W}$ 。

(1)以 r 表示行星绕太阳运行的轨道半径。试根据热平衡的要求证明:行星表面的温度 T 由下式给出:

$$T^4 = \frac{P_s}{16\pi\sigma r^2}$$

其中 σ 为斯特藩-玻耳兹曼常量。(行星辐射按黑体计。)

(2)用上式计算地球和冥王星的表面温度,已知地球 $r_E = 1.5 \times 10^{11} \text{ m}$,冥王星 $r_P = 5.9 \times 10^{12} \text{ m}$ 。

1.5 Procyon B 星距地球11 l.y.,它发的光到达地球表面的强度为 $1.7 \times 10^{-12} \text{ W/m}^2$,该星的表面温度为6 600 K,求该星的线度。

1.6 宇宙大爆炸遗留在宇宙空间的均匀各向同性的背景热辐射相当于3 K 黑体辐射。

(1)此辐射的光谱辐射出射度 M_{ν} 在何频率处有极大值?

(2) 地球表面接收此辐射的功率是多大?

1.7 试由黑体辐射的光谱辐射出射度按频率分布的形式(1.3)式,导出其按波长分布的形式

$$M_\nu = \frac{2\pi h c^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}$$

*1.8 以 w_ν 表示空腔内电磁波的光谱辐射能密度。试证明 w_ν 和由空腔小口辐射出的电磁波的黑体光谱辐射出射度 M_ν 有下述关系:

$$M_\nu = \frac{c}{4} w_\nu$$

式中 c 为光在真空中的速率。

*1.9 试对(1.3)式求导,证明维恩位移律

$$\nu_m = C_\nu T$$

(提示:求导后说明 ν_m/T 为常量即可,不要求求 C_ν 的值。)

*1.10 试根据(1.5)式将(1.3)式积分,证明斯特藩-玻耳兹曼定律

$$M = \sigma T^4$$

(提示:由定积分说明 M/T^4 为常量即可,不要求求 σ 的值。)

1.11 铝的逸出功是 4.2 eV,今用波长为 200 nm 的光照射铝表面,求:

(1) 光电子的最大动能;

(2) 截止电压;

(3) 铝的红限波长。

1.12 银河系间宇宙空间内星光的能量密度为 10^{-15} J/m^3 , 相应的光子数密度多大? 假定光子平均波长为 500 nm。

1.13 在距功率为 1.0 W 的灯泡 1.0 m 远的地方垂直于光线放一块钾片(逸出功为 2.25 eV)。钾片中一个电子要从光波中收集到足够的能量以便逸出,需要多长的时间? 假设一个电子能收集入射到半径为 $1.3 \times 10^{-10} \text{ m}$ (钾原子半径) 的圆面积上的光能量。(注意,实际的光电效应的延迟时间不超过 10^{-9} s)

*1.14 在实验室参考系中一光子能量为 5 eV, 一质子以 $c/2$ 的速度和此光子沿同一方向运动。求在此质子参考系中,此光子的能量多大?

1.15 入射的 X 射线光子的能量为 0.60 MeV, 被自由电子散射后波长变化了 20%。求反冲电子的动能。

1.16 一个静止电子与一能量为 $4.0 \times 10^3 \text{ eV}$ 的光子碰撞后, 它能获得的最大动能是多少?

*1.17 用动量守恒定律和能量守恒定律证明: 一个自由电子不能一次完全吸收一个光子。

*1.18 一能量为 $5.0 \times 10^4 \text{ eV}$ 的光子与一能量为 $2.0 \times 10^4 \text{ eV}$ 的电子发生正碰, 碰后光子向后折回。求碰后光子和电子的能量各是多少?

1.19 电子和光子各具有波长 0.20 nm , 它们的动量和总能量各是多少?

1.20 室温(300 K)下的中子称为热中子。求热中子的德布罗意波长。

1.21 一电子显微镜的加速电压为 40 keV , 经过这一电压加速的电子的德布罗意波长是多少?

*1.22 试重复德布罗意的运算。将(1.23)式和(1.24)式中的质量用相对论质量 $\left(m = m_0 / \sqrt{1 - v^2/c^2} \right)$ 代入, 然后利用公式 $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\nu}{d(1/\lambda)}$ 证明: 德布罗意波的群速度 v_g 等于粒子的运动速度 v 。

1.23 德布罗意关于玻尔角动量量子化的解释。以 r 表示氢原子中电子绕核运行的轨道半径, 以 λ 表示电子波的波长。氢原子的稳定性要求电子在轨道上运行时电子波应形成整数波长的驻波(图 1.20)。试由此并结合德布罗意公式(1.24)式导出电子轨道运动的角动量应为

$$L = m_e r v = n \hbar, \quad n = 1, 2, \dots$$

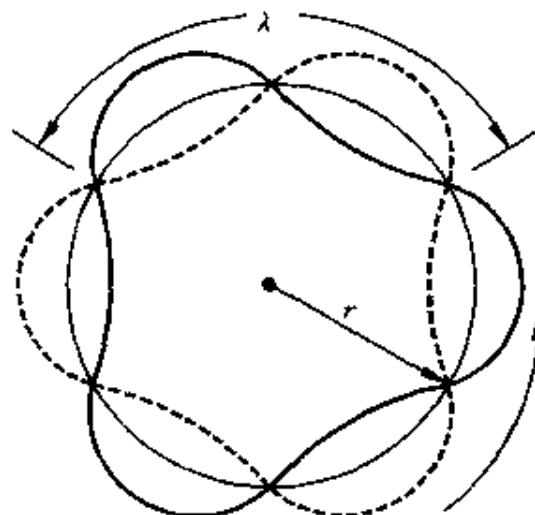


图 1.20 习题 1.24 用图

这正是当时已被玻尔提出的电子轨道角动量量子化的假设。

1.24 用干涉仪确定一个宏观物体的位置精确度为 $\pm 10^{-12}$ m。如果我们以此精度测得一质量为 0.50 kg 的物体的位置，根据不确定性关系，它的速度的不确定量多大？

1.25 电视机显象管中电子的加速电压为 9 kV，电子枪枪口直径取 0.50 mm，枪口离荧光屏距离为 0.30 m。求荧光屏上一个电子形成的亮斑直径。这样大小的亮斑影响电视图象的清晰度吗？

1.26 卢瑟福的 α 散射实验所用 α 粒子的能量为 7.7 MeV。 α 粒子的质量为 6.7×10^{-27} kg，所用 α 粒子的波长是多少？对原子的线度 10^{-10} m 来说，这种 α 粒子能像卢瑟福做的那样按经典力学处理吗？

1.27 为了探测质子和中子的内部结构，曾在斯坦福直线加速器中用能量为 22 GeV 的电子做探测粒子轰击质子。这样的电子的德布罗意波长是多少？已知质子的线度为 10^{-15} m，这样的电子能用来探测质子内部的情况吗？

1.28 证明：做戴维孙-革末那样的电子衍射实验时，电子的能量至少应为 $h^2/8m_e d^2$ 。如果所用镍晶体的散射平面间距 $d = 0.091$ nm，则所用电子的最小能量是多少？

1.29 铀核的线度为 7.2×10^{-15} m。

(1) 核中的 α 粒子 ($m_\alpha = 6.7 \times 10^{-27}$ kg) 的动量值和动能值各约是多大？

(2) 一个电子在核中的动能的最小值约是多少 MeV？(电子的动能要用相对论能量动量关系计算，结果为 13.7 MeV，此值比核的 β 衰变放出的电子的动能(约 1 MeV)大得多。这说明在核中不可能存在单个的电子。 β 衰变放出的电子是核内的中子衰变为质子时“临时制造”出来的。)

1.30 证明：一个质量为 m 的粒子在边长为 a 的正立方盒子内运动时，它的最小可能能量(零点能)为

$$E_{\min} = \frac{3\hbar^2}{8ma^2}$$



德布罗意(Prince Louis Victor de Broglie 1892—1986年)

LOUIS DE BROGLIE

The wave nature of the electron

Nobel Lecture, December 12, 1929



When in 1920 I resumed my studies of theoretical physics which had long been interrupted by circumstances beyond my control, I was far from the idea that my studies would bring me several years later to receive such a high and envied prize as that awarded by the Swedish Academy of Sciences each year to a scientist: the Nobel Prize for Physics. What at that time drew me towards theoretical physics was not the hope that such a high distinction would ever crown my work; I was attracted to theoretical physics by the mystery enshrouding the structure of matter and the structure of radiations, a mystery which deepened as the strange quantum concept introduced by Planck in 1900 in his research on black-body radiation continued to encroach on the whole domain of physics.

To assist you to understand how my studies developed, I must first depict for you the crisis which physics had then been passing through for some twenty years.

For a long time physicists had been wondering whether light was composed of small, rapidly moving corpuscles. This idea was put forward by the philosophers of antiquity and upheld by Newton in the 17th century. After Thomas Young's discovery of interference phenomena and following the admirable work of Augustin Fresnel, the hypothesis of a granular structure of light was entirely abandoned and the wave theory unanimously adopted. Thus the physicists of last century spurned absolutely the idea of an atomic structure of light. Although rejected by optics, the atomic theories began making great headway not only in chemistry, where they provided a simple interpretation of the laws of definite proportions, but also in the physics of matter where they made possible an interpretation of a large number of properties of solids, liquids, and gases. In particular they were instrumental in the elaboration of that admirable kinetic theory of gases which, generalized under the name of statistical mechanics, enables a clear meaning to be given to the abstract concepts of thermodynamics. Experiment also yielded decisive proof in favour of an atomic constitution of electricity; the concept of the

获诺贝尔物理奖仪式上演讲稿的首页

法国理论物理学家德布罗意 1892 年 8 月 15 日出生于法国迪埃普的一个贵族家庭。少年时期酷爱历史和文学，在巴黎大学学习法制史，大学毕业时获历史学士学位。

他的哥哥是法国著名的物理学家，是第一届索尔威国际物理学会议的参加者，是第二和第三届索尔威国际物理学会议的秘书。当德布罗意在哥哥处

了解到现代物理学最迫切的课题后，决定从文史转到自然科学上来，用自己全部精力弄清量子的本质。

第一次世界大战期间，德布罗意中断了物理学的研究，在法国工兵中服役，他的主要精力用在巴黎埃菲尔铁塔的无线电台。

1920年开始在他哥哥的私人实验室研究X射线，并逐渐产生了波和粒子相结合的想法。1922年发表了他研究绝对黑体辐射的量子理论的初步成果。1923年关于微观世界中波粒二象性的想法已趋成熟，发表了题为《波和量子》，《光的量子，衍射和干涉》，《量子，气体动力学理论和费马原理》等三篇论文。

1924年德布罗意顺利地通过了博士论文，题目是《量子理论的研究》。文章中德布罗意把光的二象性推广到实物粒子，特别是电子上去，用

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

表示物质波的波长，并指出可以用晶体对电子的衍射实验加以证明。

德布罗意关于物质波的思想，几乎没有引起物理学家们的注意。但是，他的导师把他的论文寄给了爱因斯坦，立即引起了这位伟大的物理学家的重视，爱因斯坦认为他的工作“揭开了巨大帷幕的一角”，他的文章是“非常值得注意的文章”。两年后奥地利物理学家薛定谔在此基础上加以数学论证，提出了著名的薛定谔方程，建立了现代物理学的基础——量子力学。

3年后，也就是1927年，美国物理学家戴维孙和革末以及英国物理学家G.P.汤姆孙分别在实验中发现了电子衍射，证明了物质波的存在。后来德国物理学家施特恩在实验中发现了原子、分子也具有波动性，进一步证明了德布罗意物质波假设的正确性。

1929年德布罗意因对实物的波动性的发现而获得诺贝尔物理奖。在法国他享有崇高的威望。

德布罗意发表过许多著作，如《波和粒子》，《新物理学和量子》，《物质和光》，《连续和不连续》，《关于核理论的波动力学》，《知识和发现》，《波动力学和分子生物学》等等。至死他仍然关心着各种最新的科学问题：基本粒子理论，原子能，控制论等。

德布罗意自己讲，他对普遍性和哲学性概念极为爱好，关于物质波的概念是他在不断探索可以把波动观点和微粒观点结合起来的一般综合概念的

过程中产生的。

许多科学史专家认为,德布罗意能够作出这项发现的关键在于对动力学和光学的发展做了历史学的和方法论的分析。

从 20 世纪 50 年代开始,德布罗意对薛定谔等人在量子力学中引入概率持批评态度,他在不断寻求着波动力学的因果性解释,他认为统计理论在各个我们的实验技术不能测量的量的背后隐藏着一种完全确定的、可查明的真实性。

第2章 薛定谔方程

薛定谔方程是量子力学的基本动力学方程。本章先列出了该方程,包括不含时和含时的形式,并简要地介绍了薛定谔“建立”他的方程的思路。然后将不含时的薛定谔方程应用于无限深方势阱中的粒子、遇有势垒的粒子以及谐振子等情况。着重说明根据对波函数的单值、有限和连续的要求,由薛定谔方程可自然地得出能量量子化的结果。接着说明了隧道效应这种量子粒子不同于经典粒子的重要特征。本章最后介绍了关于谐振子的波函数和能量量子化的结论。

2.1 薛定谔得出的波动方程

德布罗意引入了和粒子相联系的波。粒子的运动用波函数 $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$ 来描述,而粒子在时刻 t 在各处的概率密度为 $|\Psi|^2$ 。但是,怎样确定在给定条件(一般是给定一势场)下的波函数呢?

1925年在瑞士,德拜(P. J. W. Debye)让他的学生薛定谔作一个关于德布罗意波的学术报告。报告后,德拜提醒薛定谔:“对于波,应该有一个波动方程。”薛定谔此前就曾注意到爱因斯坦对德布罗意假设的评论,此时又受到了德拜的鼓励,于是就努力钻研。几个月后,他就向世人拿出了一个波动方程,这就是现在大家称谓的薛定谔方程。

薛定谔方程在量子力学中的地位和作用相当于牛顿方程在经典力学中的地位和作用。用薛定谔方程可以求出在给定势场中的波函数,从而了解粒子的运动情况。作为一个基本方程,薛定谔方

程不可能由其他更基本的方程推导出来。它只能通过某种方式建立起来，然后主要看所得的结论应用于微观粒子时是否与实验结果相符。薛定谔当初就是“猜”加“凑”出来的（他建立方程的步骤见本节[注]）。以他的名字命名的方程^① 为（一维情形）

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (2.1)$$

式中 $\Psi = \Psi(x, t)$ 是粒子（质量为 m ）在势场 $U = U(x, t)$ 中运动的波函数。我们没有可能全面讨论（2.1）式那样的含时薛定谔方程（那是量子力学课程的任务），下面只着重讨论粒子在恒定势场 $U = U(x)$ （包括 $U(x) = \text{常量}$ ，因而粒子不受力的势场）中运动的情形。在这种情形下，（2.1）式可用分离变量法求解。作为“波”函数，应包含时间的周期函数，而此时波函数应有下述形式：

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (2.2)$$

式中 E 是粒子的能量。将此式代入（2.1）式，可知波函数 Ψ 的空间部分 $\psi = \psi(x)$ 应该满足的方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U\psi = E\psi \quad (2.3)$$

此方程称为定态薛定谔方程。本章的后几节将利用此方程说明一些粒子运动的基本特征。函数 $\psi = \psi(x)$ 叫粒子的定态波函数，它描写的粒子的状态叫定态。

关于薛定谔方程（2.1）式和（2.3）式需要说明两点。第一，它们都是线性微分方程。这就意味着作为它们的解的波函数或概率幅 ψ 和 Ψ 都满足叠加原理，这正是 1.6 节中提到的“量子力学第一原理”所要求的。

^① 薛定谔是 1926 年发表他的方程的，该方程是非相对论形式的。1928 年狄拉克（P. A. M. Dirac）把该方程发展为相对论形式，可以讨论磁性、粒子的湮灭和产生等更为广泛的问题。

第二,从数学上来说,对于任何能量 E 的值,方程(2.3)式都有解,但并非对所有 E 值的解都能满足物理上的要求。这些要求最一般的是,作为有物理意义的波函数,这些解必须是**单值的,有限的和连续的**。这些条件叫做波函数的标准条件。令人惊奇的是,根据这些条件,由薛定谔方程“自然地”、“顺理成章地”就能得出微观粒子的重要特征——量子化条件。这些量子化条件在普朗克和玻尔那里都是“强加”给微观系统的。作为量子力学基本方程的薛定谔方程当然还给出了微观系统的许多其他奇异的性质。

对于微观粒子的三维运动,定态薛定谔方程(2.3)式的直角坐标形式为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U\psi = E\psi \quad (2.4)$$

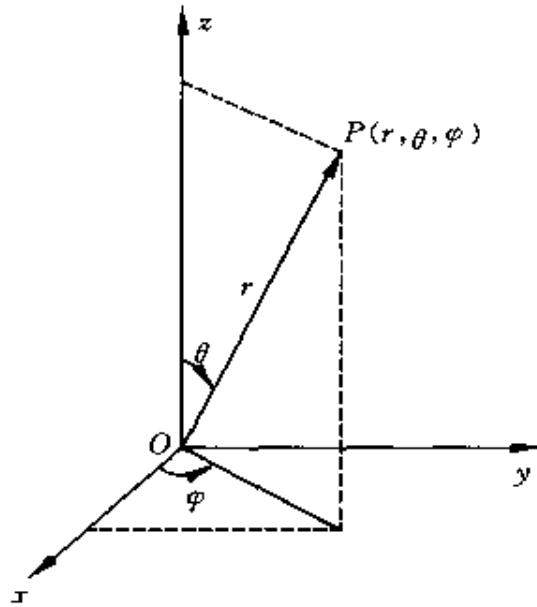


图 2.1 球坐标

相应的球坐标(图 2.1)形式为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right]$$

$$+ U\psi = E\psi \quad (2.5)$$

其中 r 为粒子的径矢的大小, θ 为极角, φ 为方位角。

例 2.1 一质量为 m 的粒子在自由空间绕一定点作圆周运动, 圆半径为 r , 求粒子的波函数并确定其可能的能量值和角动量值。

解 取定点为坐标原点, 圆周所在平面为 xy 平面。由于 r 和 θ ($\theta = \pi/2$) 都是常量, 所以 ψ 只是方位角 φ 的函数。令 $\psi = \Phi(\varphi)$ 表示此波函数。又因为 $U = 0$, 所以粒子的薛定谔方程(2.5)式变为

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = E\Phi$$

或

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + \frac{2mr^2E}{\hbar^2}\Phi = 0$$

这一方程类似于简谐运动的运动方程, 其解为

$$\Phi = A e^{im_l \varphi} \quad (2.6)$$

其中

$$m_l = \pm \sqrt{\frac{2mr^2E}{\hbar^2}} \quad (2.7)$$

(2.6) 式是 φ 的有限连续函数。要使 Φ 再满足在任一给定 φ 值时为单值, 就需要

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$$

或

$$e^{im_l \varphi} = e^{im_l(\varphi + 2\pi)}$$

由此得

$$e^{im_l 2\pi} = 1 \quad (2.8)$$

(2.8) 式给出 m_l 必须是整数^①, 即

$$m_l = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.9)$$

为了求出(2.6)式中 A 的值, 我们注意到粒子在所有 φ 值范围内的总概率为

^① 由欧拉公式 $e^{im_l 2\pi} = \cos(m_l 2\pi) + i \sin(m_l 2\pi) = 1$, 由此得 $\cos(m_l \cdot 2\pi) = 1$, 于是 $m_l =$ 整数。

1——归一化条件,由此得

$$1 = \int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\varphi = \int_0^{2\pi} A^2 d\varphi = 2\pi A^2$$

于是有

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

将此值代入(2.6)式,得和 m_l 相对应的定态波函数为

$$\Phi_{m_l} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \varphi} \quad (2.10)$$

最后可得粒子的波函数为

$$\Psi_{m_l} = \Phi_{m_l} e^{i2\pi \frac{E}{\hbar} t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m_l \varphi + 2\pi \frac{Et}{\hbar})} \quad (2.11)$$

由(2.7)式可得

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr^2 m_l^2} \quad (2.12)$$

此式说明,由于 m_l 是整数,所以粒子的能量只能取离散的值。这就是说,这个做圆周运动的粒子的能量“量子化”了。在这里,能量量子化这一微观粒子的重要特征很自然地从薛定谔方程和波函数的标准条件得出了。 m_l 叫做量子数。

根据能量和动量关系有 $p = \sqrt{2mE_k}$,而此处 $E_k = E$,再由(2.12)式可得这个做圆周运动的粒子的角动量(此角动量矢量沿 z 轴方向)为

$$L = rp = m_l \hbar \quad (2.13)$$

即角动量也量子化了,而且等于 \hbar 的整数倍。

[注] 薛定谔建立他的方程的过程

薛定谔注意到德布罗意波的相速与群速的区别。他发现德布罗意波的相速度为

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m(E - U)}} \quad (2.14)$$

其中 m 为粒子的质量, E 为粒子的总能量, $U = U(x, y, z)$ 为粒子在给定的保守场中的势能。这一公式是和德布罗意假设(1.23)式和(1.24)式相符的。因为,由该二式, $u = \lambda v = E/p$, 而在非相对论情况下, $p = \sqrt{2mE_k} =$

$\sqrt{2m(E-U)}$, 于是就有(2.14)式。对于一个波, 薛定谔假设其波函数 $\Psi(x,y,z,t)$ 通过一个振动因子

$$\exp[-i\omega t] = \exp[-2\pi i\nu t] = \exp\left[-2\pi i\frac{E}{\hbar}t\right] = \exp[-iEt/\hbar]$$

和时间 t 有关, 式中 $i = \sqrt{-1}$ 为虚数单位。于是有

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\exp\left[-i\frac{E}{\hbar}t\right]$$

其中 $\psi(x,y,z)$ 可以是空间坐标的复函数。下面先就一维的情况进行讨论, 即 Ψ 取(2.2)式那样的形式

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\exp\left[-i\frac{E}{\hbar}t\right] \quad (2.15)$$

将(2.15)式和(2.14)式代入波动方程的一般形式

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

稍加整理, 即可得

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U\psi = E\psi \quad (2.16)$$

式中 $\hbar = h/2\pi$ 。由(2.15)式可得粒子的概率密度为

$$|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = \psi(x)\exp\left[-i\frac{E}{\hbar}t\right]\psi(x)\exp\left[i\frac{E}{\hbar}t\right] = |\psi(x)|^2$$

由于此概率密度与时间无关, 所以(2.15)式中的 $\psi = \psi(x)$ 称为粒子的定态波函数, 而决定这一波函数的微分方程(2.16)式就是定态薛定谔方程(2.3)式。这一方程是研究原子系统的定态的基本方程。

原子系统可以从一个定态转变到另一个定态, 例如氢原子的发光过程。在这一过程中, 原子系统的能量 E 将发生变化。注意到这种随时间变化的情况, 薛定谔认为这时 E 不应该出现在他的波动方程中。他于是用(2.15)式来消去(2.16)式中的 E 。(2.15)式可换写为

$$\psi(x) = \Psi\exp\left[i\frac{E}{\hbar}t\right]$$

将此式回代入(2.16)式可以得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi = E\Psi \quad (2.17)$$

由(2.15)式可得

$$E\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

所以由(2.17)式又可得

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - U\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

式中的 U 可以推广为也是时间 t 的函数。此式就是含时薛定谔方程(2.1)式。这是关于粒子运动的普遍的运动方程,是非相对论量子力学的基本方程。

从以上介绍可知,薛定谔建立他的方程时,虽然也有些“根据”,但并不是什么严格的推理过程。实际上,可以说,(2.1)式和(2.3)式都是“凑”出来的。这种根据少量的事实,半猜半推理的思维方式常常萌发出全新的概念或理论。这是一种创造性的思维方式。这种思维得出的结论的正确性主要不是靠它的“来源”,而是靠它的预言和大量事实或实验结果相符来证明的。物理学发展史上这样的例子是很多的。普朗克的量子概念,爱因斯坦的相对论,德布罗意的物质波大致都是这样。薛定谔得出他的方程后,就把它应用于氢原子中的电子,所得结论和已知的实验结果相符,而且比当时用于解释氢原子的玻尔理论更为合理和“顺畅”。这一尝试曾大大增强了他的自信,也使得当时的学者们对他的方程倍加关注,经过玻恩、海森伯、狄拉克等诸多物理学家的努力,几年的时间内就建成了一套完整的和经典理论迥然不同的量子力学理论。

2.2 无限深方势阱中的粒子

本节讨论粒子在一种简单的外力场中做一维运动的情形,分析薛定谔方程会给出什么结果。粒子在这种外力场中的势能函数为

$$U = \begin{cases} 0, & |x| \leq a/2 \\ \infty, & |x| > a/2 \end{cases} \quad (2.18)$$

这种势能函数的势能曲线如图 2.2 所示。由于图形像井，所以这种势能分布叫势阱。图 2.2 中的井深无限，所以叫无限深方势阱。在阱内，由于势能是常量，所以粒子不受力而做自由运动，在边界 $|x| = a/2$ 处，势能突然增至无限大，所以粒子会受到无限大的指向阱内的力。因此，粒子的位置就被限制在阱内，粒子这时的状态称为束缚态。

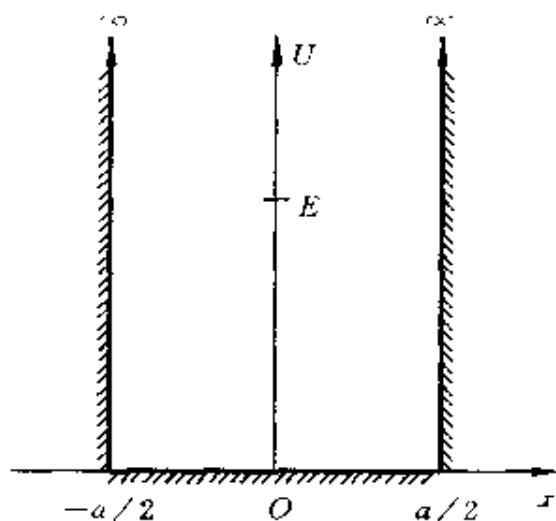


图 2.2 无限深方势阱

势阱是一种简单的理论模型。自由电子在金属块内部可以自由运动，但很难逸出金属表面。这种情况下，自由电子就可以认为是处于以金属块表面为边界的无限深势阱中。在粗略地分析自由电子的运动(不考虑点阵离子的电场)时，就可以利用无限深方势阱这一模型。

为研究粒子的运动，利用薛定谔方程(2.3)式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U\psi = E\psi$$

在 $|x| > a/2$ 的区域，由于 $U = \infty$ ，所以必须 $\psi = 0$ ，否则(2.3)式将给不出任何有意义的解。 $\psi = 0$ 说明粒子不可能到达这一区域，这是和经典概念相符的。

在势阱内, 即 $|x| \leq a/2$ 的区域, 由于 $U = 0$, (2.3) 式可写成

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = -k^2 \psi \quad (2.19)$$

式中

$$k = \sqrt{2mE/\hbar} \quad (2.20)$$

这个常见的微分方程的解为

$$\psi = A \sin(kx + \varphi) \quad (2.21)$$

此解需满足标准条件: 在 $x = -a/2$ 和 $x = +a/2$ 处是连续的。由于在边界外, $\psi = 0$, 所以有

$$A \sin(-ka/2 + \varphi) = 0, \quad A \sin(ka/2 + \varphi) = 0 \quad (2.22)$$

由此得

$$-ka/2 + \varphi = l_1\pi, \quad ka/2 + \varphi = l_2\pi$$

其中 l_1 和 l_2 是整数。于是得 $2\varphi = (l_1 + l_2)\pi = l\pi$, 或

$$\varphi = \frac{l}{2}\pi \quad (2.23)$$

式中 l 也是整数。 $l = 0$ 或 1 给出 (2.21) 式的两种表示:

(1) $l = 0$, 则有

$$\psi_o = A \sin kx \quad (2.24)$$

这是一个奇函数, 下标 o 表示“奇”。

(2) $l = 1$, 则有

$$\psi_e = A \cos kx \quad (2.25)$$

这是一个偶函数, 下标 e 表示“偶”。

l 的其他整数值所对应的解没有独立的物理意义, 因为那些解和 (2.24) 式或 (2.25) 式的形式一样, 只不过可能有正负的区别, 而这正负并不影响 $|\psi|^2$, 即概率密度的分布。

由于 ψ 在 $x = \pm a/2$ 的连续性, (2.24) 式给出

$$\psi_o\left(\frac{a}{2}\right) = A \sin(ka/2) = 0$$

于是

$$ka = n\pi, \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

(2.25) 式给出

$$\phi_e\left(\frac{a}{2}\right) = A \cos(ka/2) = 0$$

于是

$$ka = (2n + 1)\pi, \quad n = 0, 1, 3, 5, \dots$$

将这两类结果合并在一起, 可得

$$ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.26)$$

将(2.20)式的 k 值代入(2.26)式, 即可得势阱内的粒子的能量的可能值为

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.27)$$

由于 n 只能取整数值, 这一结果就表示束缚在势阱内的粒子的能量只能取离散的值, 每一值对应于一个能级。这些能量值称为**能量本征值**, 而 n 称为**量子数**。

利用(2.26)式, 可将(2.24)式和(2.25)式写成

$$\psi_o = A \sin \frac{n\pi}{a} x, \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.28)$$

$$\psi_e = A \cos \frac{n\pi}{a} x, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (2.29)$$

为了求出 A 的值, 我们用波函数 ψ_o 或 ψ_e 的归一化条件, 即

$$1 = \int_{-a/2}^{a/2} |\psi_o|^2 dx = A^2 \int_{-a/2}^{a/2} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = \frac{a}{2} A^2$$

由此得

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (2.30)$$

于是,对于每一个 n 值,波函数的空间部分为^①

$$\left. \begin{aligned} \psi_{on} &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x, & n = 2, 4, 6, \dots \\ \psi_{en} &= \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi}{a} x, & n = 1, 3, 5, \dots \\ \psi_n &= 0 & \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} x \leq \frac{a}{2} \\ x > \left| \frac{a}{2} \right| \end{array} \quad (2.31)$$

这些函数称做**能量本征函数**。

将(2.31)式代入(2.2)式,即可得全部波函数为

$$\Psi_n = \psi_n \exp(-2\pi i E_n t / \hbar) \quad (2.32)$$

这些波函数叫做**能量本征波函数**。由每个本征波函数所描述的粒子的状态称为粒子的**能量本征态**。

图 2.3 中的实线表示 $n = 1, 2, 3, 4$ 时的 $\psi_n - x$ 关系,虚线表示相应的 $|\psi_n|^2 - x$ 关系,即概率密度与坐标的关系。注意,这里由粒子的波动性给出的概率密度的周期性分布和经典粒子的完全不同。按经典理论,粒子在阱内来来回回自由运动,在各处的概率密度应该是相等的,而且与粒子的能量无关。

和经典粒子不同的另一点是,由(2.27)式知,量子粒子的最小能量 $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$,不等于零。这是符合不确定关系的,因为量子粒子在有限空间内运动,其速度不可能为零,而经典粒子可能处于静止的能量为零的最低能态。

由(2.27)式还可以得到势阱中粒子的动量为

^① 如果将图 2.2 的坐标原点左移 $a/2$ 到达势阱边缘,则(2.31)式的阱内部分可以统一写成

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin kx, \quad k = \frac{\pi}{a} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.33)$$

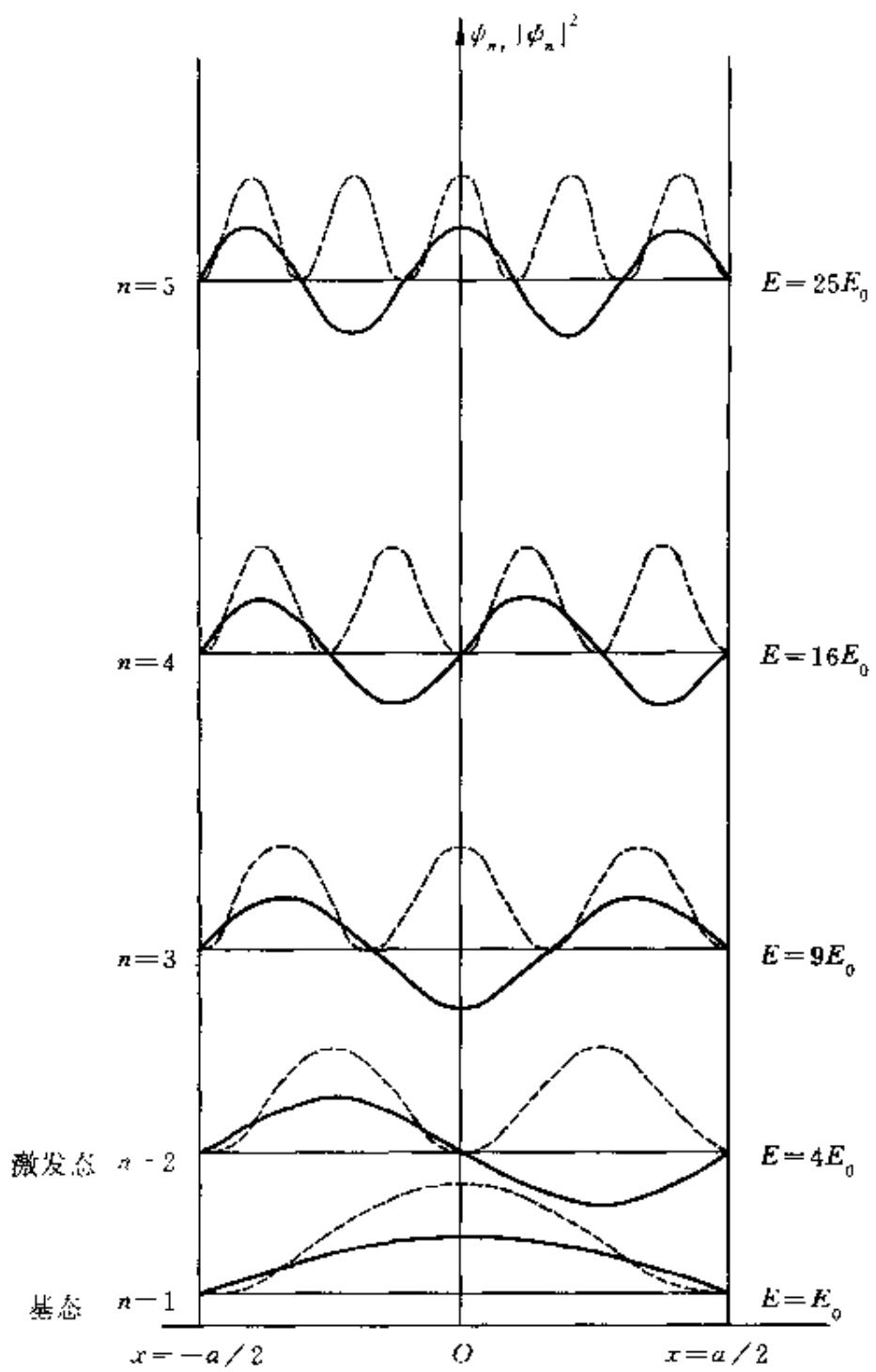


图 2.3 无限深方势阱中粒子的能量本征函数
和概率密度与坐标的关系

$$p_n = \pm \sqrt{2mE_n} = \pm n \frac{\pi \hbar}{a} = \pm k \hbar \quad (2.34)$$

相应地, 粒子的德布罗意波长为

$$\lambda_n = \frac{\hbar}{p_n} = \frac{2a}{n} = \frac{2\pi}{k} \quad (2.35)$$

此波长也量子化了, 它只能是势阱长度两倍的整数分之一。这使我们回想起两端固定的弦中产生驻波的情况。无限深方势阱中粒子的每一个能量本征态对应于德布罗意波的一个特定波长的驻波。

宇称

由(2.28)式和(2.29)式所表示的两类能量本征函数有一个不同点, 即经过一个“反演变换”, 也就是将 x 换成 $-x$ 后, ψ_o 改变符号而 ψ_e 符号不变, 即有

$$\psi_o(x) = -\psi_o(-x), \quad \psi_e(x) = \psi_e(-x)$$

其实这也就是分别把它们称做奇函数和偶函数的原因。在量子力学中, 用“宇称”一词来表征波函数的反演对称性。波函数为奇函数的状态具有奇宇称并以宇称量子数 -1 作为标记。波函数为偶函数的状态具有偶宇称, 以宇称量子数 $+1$ 作为标记。应该指出, 这种区分为偶或奇宇称的状态是和势能 $U = U(x)$ 具有反演对称性, 即 $U(x) = U(-x)$, 有直接关系的。图 2.2 的势能分布就具有这种反演对称性。

例 2.2 在核内的质子和中子可粗略地当成是处于无限深势阱中而不能逸出, 它们在核中的运动也可以认为是自由的。按一维无限深方势阱估算, 质子从第 1 激发态($n = 2$)到基态($n = 1$)转变时, 放出的能量是多少 MeV? 核的线度按 1.0×10^{-14} m 计。

解 由(2.27)式, 质子的基态能量为

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_p a^2} = \frac{\pi^2 \times (1.05 \times 10^{-34})^2}{2 \times 1.67 \times 10^{-27} \times (1.0 \times 10^{-14})^2} \\ &= 3.3 \times 10^{-13} (\text{J}) \end{aligned}$$

第 1 激发态的能量为

$$E_2 = 4E_1 = 13.2 \times 10^{-13} (\text{J})$$

从第 1 激发态转变到基态所放出的能量为

$$\begin{aligned}E_2 - E_1 &= 13.2 \times 10^{-13} - 3.3 \times 10^{-13} \\&= 9.9 \times 10^{-13} (\text{J}) = 6.2 (\text{MeV})\end{aligned}$$

实验中观察到的核的两定态之间的能量差一般就是几 MeV, 上述估算和此事实大致相符。

例 2.3 根据叠加原理, 几个波函数的叠加仍是一个波函数。假设在无限深方势阱中的粒子的一个叠加态是由基态和第 1 激发态叠加而成, 前者的幅为 $1/2$, 后者的幅为 $\sqrt{3}/2$ (这意味着基态概率是 $1/4$, 第 1 激发态的概率为 $3/4$)。试求这一叠加态的概率分布。

解 由于基态和第 1 激发态的波函数分别是

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= \Psi_{e1} = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-iE_1 t/\hbar} \\\Psi_2 &= \Psi_{e2} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) e^{-iE_2 t/\hbar}\end{aligned}$$

所以题设叠加态的波函数为

$$\begin{aligned}\Psi_{12} &= \frac{1}{2}\Psi_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_2 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-iE_1 t/\hbar} \\&\quad + \frac{\sqrt{3}}{2}\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) e^{-iE_2 t/\hbar}\end{aligned}$$

这一叠加态的概率分布为

$$\begin{aligned}P_{12} &= |\Psi_{12}|^2 \\&= \left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-iE_1 t/\hbar} + \frac{\sqrt{3}}{2}\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) e^{-iE_2 t/\hbar} \right] \\&\quad \times \left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{iE_1 t/\hbar} + \frac{\sqrt{3}}{2}\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) e^{iE_2 t/\hbar} \right] \\&= \frac{1}{2a} \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \frac{3}{2a} \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \\&\quad + \frac{\sqrt{3}}{2a} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) [e^{i(E_2 - E_1)x/\hbar} + e^{-i(E_2 - E_1)x/\hbar}] \\&= \frac{1}{2a} \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \frac{3}{2a} \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \\&\quad + \frac{\sqrt{3}}{a} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \cos[(E_2 - E_1)t/\hbar]\end{aligned}$$

注意,这一结果的前两项与时间无关,而第三项则是一个频率为 $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ 的振动项。因此,这一叠加态不是定态。概率分布的这一振动项(出自两定态波函数相乘的交叉项)给出量子力学对电磁波发射的解释。两个定态的叠加表示粒子从一个态过渡或跃迁到另一个态。如果粒子是带电的,上述结果中的振动项就表示一个振动的电荷分布,相当于一个振动电偶极子。这个振动电偶极子将向外发射电磁波或光子。此电磁波的频率就是 $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$,而相应光子的能量 $\epsilon = \hbar\nu = \hbar\omega = E_2 - E_1$ 。这正是玻尔当初提出的原子发光的频率条件。在玻尔那里,这条件是一个“假设”,在量子力学中它却是理论的一个逻辑推论。不仅如此,量子力学还可以给出粒子在两个定态之间的跃迁概率,从而对所发出的电磁波的强度做出定量的解释。

2.3 势垒穿透

让我们考虑“半无限深方势阱”中的粒子。这势阱的势能函数为

$$U = \begin{cases} \infty, & x < -a/2 \\ 0, & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ U_0, & x > a/2 \end{cases} \quad (2.36)$$

势能曲线如图 2.4 所示。

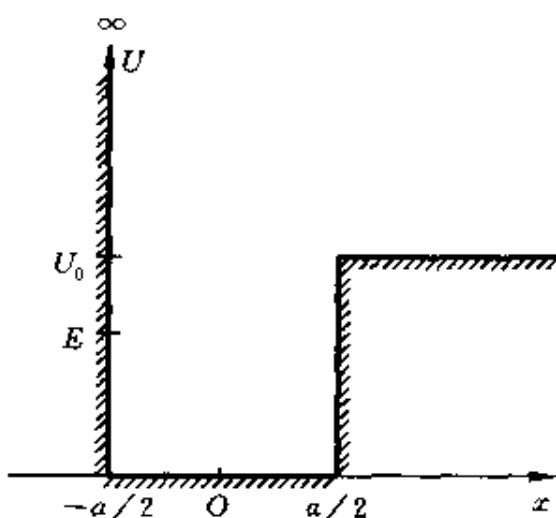


图 2.4 半无限深方势阱

在 $x < -a/2$ 的区域, 粒子的波函数 $\psi = 0$ 。

在阱内部, 粒子具有小于 U_0 的能量 E , 薛定谔方程和(2.19)式一样, 为

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \\ &= -k^2 \psi\end{aligned}\quad (2.37)$$

式中 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ 。此式的解仍具有(2.21)式的形式, 即

$$\psi = A \sin(kx + \varphi) \quad (2.38)$$

在 $x > a/2$ 的区域, 薛定谔方程(2.3)式可写成

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi = k'^2 \psi \quad (2.39)$$

其中

$$k' = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar \quad (2.40)$$

(2.39)式的解应为

$$\psi = C e^{-k' x} + D e^{k' x}$$

其中 C, D 为常数。为了满足 $x \rightarrow \infty$ 时, 波函数有限的条件, 必须 $D = 0$ 。于是得

$$\psi = C e^{-k' x} \quad (2.41)$$

为了满足此波函数在 $x = a/2$ 处连续, 由(2.38)式和(2.41)式得出

$$A \sin(k a/2 + \varphi) = C e^{-k a/2} \quad (2.42)$$

此外, $d\psi/dx$ 在 $x = a/2$ 处也应连续(否则 $d^2\psi/dx^2$ 将变为无限大而与(2.37)式和(2.39)式表明的 $d^2\psi/dx^2$ 有限相矛盾), 因而又有

$$k' A \cos(k a/2 + \varphi) = -k' C e^{-k a/2} \quad (2.43)$$

(2.42)式和(2.43)式将给出: 对于束缚在阱内的粒子(即 $E < U_0$), 其能量也是量子化的, 不过其能量的本征值不再能用上节(2.27)式表示。由于数学过程较为复杂, 我们不再讨论其能量

本征值的具体数值。这里只想着重指出,(2.42)式和(2.41)式还给出在 $x = a/2$ 处, $\psi \neq 0$, 而 ψ 的连续性将进一步给出在 $x > a/2$ 的区域, 波函数将由(2.41)式给出, 即波函数随 x 的增大而按指数规律减小。粒子处于可能的基态和第 1, 2 激发态(U_0 太小时, 粒子不能被束缚在阱内)的波函数如图 2.5 中的实线所示, 虚线表示粒子的概率密度分布。

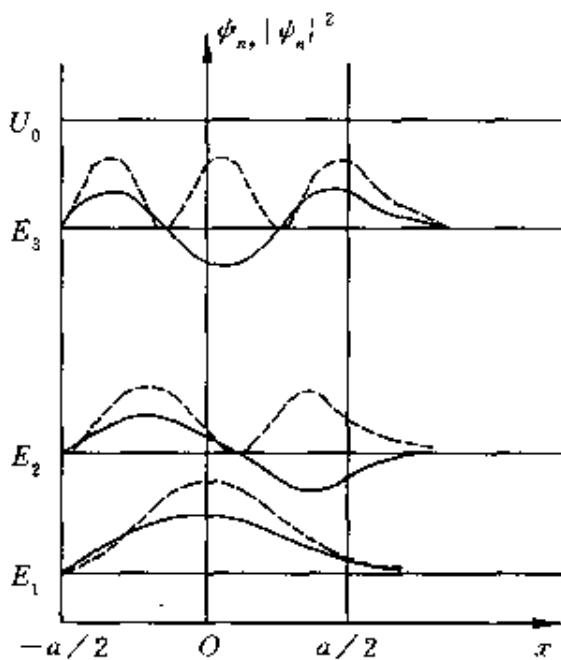


图 2.5 半无限深方势阱中粒子的
波函数与概率密度分布

在这里我们又一次看到量子力学给出的结果与经典力学给出的不同。不但处于束缚态的粒子的能量量子化了, 而且还需注意的是, 在 $E < U_0$ 的情况下, 按经典力学, 粒子只能在阱内(即 $-a/2 < x < a/2$)运动, 不可进入其能量小于势能的 $x > a/2$ 的区域, 因为在这一区域粒子的动能 E_k ($E_k = E - U_0$) 将为负值。这在经典力学中是不可能的。但是, 量子力学理论给出, 在其势能大于其总能量的区域内, 如图 2.5 所示, 粒子仍有一定的概率密度, 即粒

子可以进入这一区域，虽然这概率密度是按指数规律随进入该区域的深度而很快减小的。

怎样理解量子力学给出的这一结果呢？为什么粒子的动能可能有负值呢？这要归之于不确定关系。根据(2.41)式，粒子在 $E < U_0$ 的区域的概率密度为 $|\psi|^2 = C^2 e^{-2k'x}$ 。 $x = 1/2k'$ 可以看做粒子进入该区域的典型深度，在此处发现粒子的概率已降为 $1/e$ 。这一距离可以认为是在此区域内发现粒子的位置不确定度，即

$$\Delta x = \frac{1}{2k'} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}} \quad (2.44)$$

根据不确定关系，粒子在这段距离内的动量不确定度为

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x} = \sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (2.45)$$

粒子进入的速度可认为是

$$v = \Delta v = \frac{\Delta p}{m} \geq \sqrt{\frac{2(U_0 - E)}{m}} \quad (2.46)$$

于是粒子进入的时间不确定度为

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v} \leq \frac{\hbar}{4(U_0 - E)} \quad (2.47)$$

由此，按能量-时间的不确定关系式，粒子能量的不确定度为

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t} \geq 2(U_0 - E) \quad (2.48)$$

这时，粒子的总能量将为 $E + \Delta E$ ，而其动能的不确定度为

$$\Delta E_k = E + \Delta E - U_0 \geq U_0 - E \quad (2.49)$$

这就是说，粒子在到达的区域内，其动能的不确定度大于其名义上的负动能的值。因此，负动能被不确定关系“掩盖”了，它只是一种观察不到的“虚”动能。这和实验中能观察到的能量守恒并不矛盾。（上述关于(2.49)式的计算有些巧合，它实质上是说明薛定谔方程给出的粒子的行为是符合量子力学不确定关系的要求的。）

由于粒子可以进入 $U_0 > E$ 的区域, 如果这一高势能区域是有限的, 即粒子在运动中为一势垒所阻(如图 2.6 所示), 则粒子就有可能穿过势垒而到达势垒的另一侧。这一量子力学现象叫做势垒穿透或隧道效应。

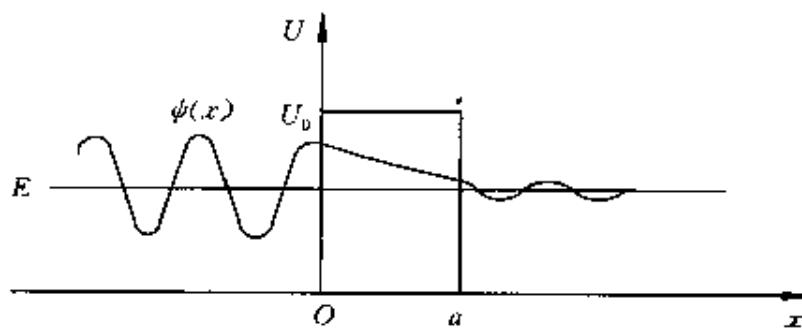


图 2.6 势垒穿透

隧道效应的一个例子是 α 粒子从放射性核中逸出, 即 α 衰变。如图 2.7 所示, 核半径为 R , α 粒子在核内由子核力的作用其势能是很低的。在核边界上有一个因库仑力而产生的势垒。对 ^{238}U 核, 这一库仑势垒可高达 35 MeV, 而这种核在 α 衰变过程中放出的 α 粒子的能量 E_α 不过 4.2 MeV。理论计算表明, 这些 α 粒子就是通过隧道效应穿透库仑势垒而跑出的。

黑洞的边界是一个物质(包括光)只能进不能出的“单向壁”。这单向壁对黑洞内的物质来说就是一个绝高的势垒。理论物理学家霍金(S. W. Hawking)认为黑洞并不是绝对黑的。黑洞内部的物质能通过量子力学隧道效应而逸出。但他估计, 这种过程很慢。一个质量等于太阳质量的黑洞温度约为 10^{-6} K, 约需 10^{67} a 才能完全“蒸发”消失。不过据信有一些微型黑洞(质量大约是太阳质量的 10^{-20} 倍)产生于宇宙大爆炸初期, 经过 2×10^{10} a 到现在已经蒸发完了。

热核反应所释放的核能是两个带正电的核, 如 ^2H 和 ^3H , 聚合时产生的。这两个带正电的核靠近时将为库仑斥力所阻, 这斥力的

作用相当于一个高势垒。 ^2H 和 ^3H 就是通过隧道效应而聚合到一起

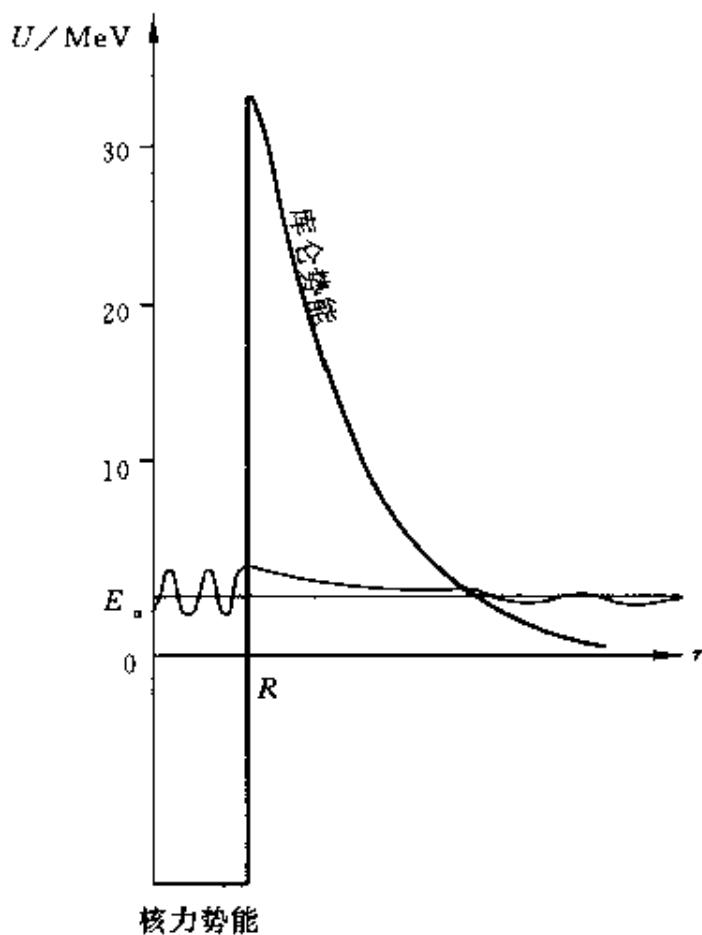


图 2.7 α 粒子的隧道效应

的。这些核的能量越大，它们要穿过的势垒厚度越小，聚合的概率就越大。这就是为什么热核反应需要高达 10^8 K 的高温的原因。

隧道效应的一个重要的实际应用是扫描隧穿显微镜，用它可以观测固体表面原子排列的状况，其详细原理可参看“物理学与现代技术 I 扫描隧穿显微镜”。

在《聊斋志异》中，蒲松龄讲述了一个故事，说的是一个崂山道士能够穿墙而过(图 2.8)。这虽然是虚妄之谈，但从量子力学的观点来看，也还不能说是完全没有道理吧！只不过是概率“小”了一些。



图 2.8 崂山道士穿墙而过

2.4 谐 振 子

本节讨论粒子在略为复杂的势场中做一维运动的情形,即谐振子的运动。这也是一个很有用的模型,固体中原子的振动就可以用这种模型加以近似地研究。

一维谐振子的势能函数为

$$U = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (2.50)$$

其中 $\omega = \sqrt{k/m}$ 是振子的固有角频率, m 是振子的质量, k 是振子的等效劲度系数。将此式代入(2.3)式,可得一维谐振子的薛定谔方程为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \psi = 0 \quad (2.51)$$

这是一个变系数的常微分方程,求解较为复杂(最简单的情况参看习题 2.10)。因此我们将不再给出波函数的解析式,只是着重指出:为了使波函数 ψ 满足单值、有限和连续的标准条件,谐振子的

能量只能是

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.52)$$

这说明, 谐振子的能量也只能取离散的值, 即也是量子化的, n 就是相应的量子数。和无限深方势阱中粒子的能级不同的是, 谐振子的能级是等间距的。

谐振子的能量量子化概念是普朗克首先提出的(见(1.4)式)。但在普朗克那里, 这种能量量子化是一个大胆的有创造性的假设。在这里, 它成了量子力学理论的一个自然推论。从量上说, (1.4)式和(2.52)式还有不同。(1.4)式给出的谐振子的最低能量为零, 这符合经典概念, 即认为粒子的最低能态为静止状态。但(2.52)式给出的最低能量为 $\frac{1}{2}h\nu$, 这意味着微观粒子不可能完全静止。这是波粒二象性的表现, 它满足不确定关系的要求(参看例 1.10)。这一谐振子的最低能量叫零点能。

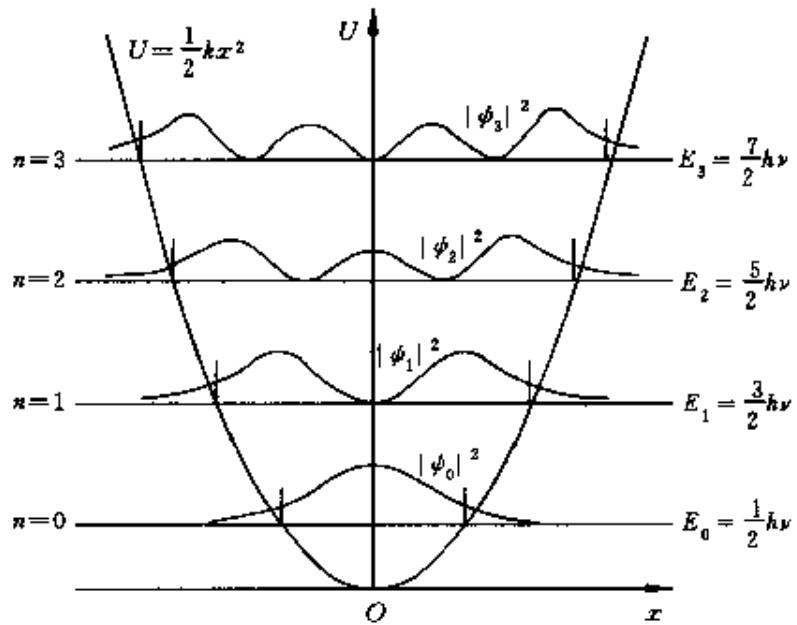


图 2.9 一维谐振子的能级和概率密度分布图

图 2.9 中画出了谐振子的势能曲线、能级以及概率密度与 x 的关系曲线。由图中可以看出，在任一能级上，在势能曲线 $U = U(x)$ 以外，概率密度并不为零。这也表示了微观粒子运动的这一特点：它在运动中有可能进入势能大于其总能量的区域，这在经典理论看来是不可能出现的。

例 2.4 设想一质量为 $m = 1 \text{ g}$ 的小珠子悬挂在一个小轻弹簧下面做振幅为 $A = 1 \text{ mm}$ 的谐振动。弹簧的劲度系数为 $k = 0.1 \text{ N/m}$ 。按量子理论计算，此弹簧振子的能级间隔多大？和它现有的振动能量对应的量子数 n 是多少？

解 弹簧振子的角频率是

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{\frac{0.1}{10^{-3}}} = 10(\text{s}^{-1})$$

据(2.52)式，能级间隔为

$$\Delta E = \hbar \omega = 1.05 \times 10^{-34} \times 10 = 1.05 \times 10^{-33}(\text{J})$$

振子现有的能量为

$$E = \frac{1}{2} k A^2 = \frac{1}{2} \times 0.1 \times (10^{-3})^2 = 5 \times 10^{-8}(\text{J})$$

再由(2.52)式可知相应的量子数

$$n = \frac{E}{\hbar \omega} - \frac{1}{2} = 4.7 \times 10^{25}$$

这说明，用量子的概念，宏观谐振子是处于能量非常高的状态的。相对于这种状态的能量，两个相邻能级的间隔 ΔE 是完全可以忽略的。因此，当宏观谐振子的振幅发生变化时，它的能量将连续地变化。这就是经典力学关于谐振子能量的结论。

提 要

1.薛定谔方程(一维)

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

定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U\psi = E\psi$$

波函数 $\Psi = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, 其中 $\psi(x)$ 为定态波函数。

以上微分方程的线性表明波函数 $\Psi = \Psi(x, t)$ 和定态波函数 $\psi = \psi(x)$ 都服从叠加原理。

波函数必须满足的标准物理条件：单值，有限，连续。

2. 一维无限深方势阱中的粒子

能量量子化：

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

概率密度分布不均匀。

德布罗意波长量子化：

$$\lambda_n = 2a/n = \frac{2\pi}{k}$$

此式类似于经典的两端固定的弦驻波。

3. 势垒穿透

微观粒子可以进入其势能(有限的)大于其总能量的区域, 这是由不确定关系决定的。

在势垒有限的情况下, 粒子可以穿过势垒到达另一侧, 这种现象又称隧道效应。

4. 谐振子

能量量子化： $E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\nu, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$

零点能： $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\nu$

思 考 题

2. 1 薛定谔方程是通过严格的推理过程导出的吗?

2. 2 薛定谔方程怎样保证波函数服从叠加原理?

- 2.3 什么是波函数必须满足的标准条件?
- 2.4 波函数归一化是什么意思?
- 2.5 从图 2.3、图 2.5 和图 2.9 分析,粒子在势阱中处于基态时,除边界外,它的概率密度为零的点有几处?在激发态中,概率密度为零的点又有几处?这种点的数目和量子数 n 有什么关系?
- 2.6 在势能曲线如图 2.10 所示的一维阶梯式势阱中能量为 E_5 ($n = 5$) 的粒子,就 $O-a$ 和 $-a-O$ 两个区域比较,它的波长在哪个区域内较大?它的波函数的振幅又在哪个区域内较大?
- 2.7 本章讨论的势阱中的粒子(包括谐振子)处于激发态时的能量都是完全确定的——没有不确定量。这意味着粒子处于这些激发态的寿命将为多长?它们自己能从一个态跃迁到另一态吗?

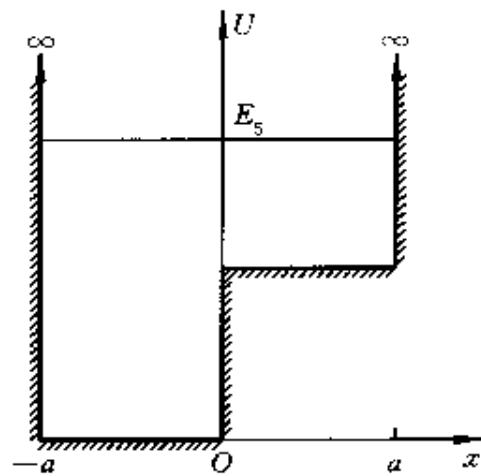


图 2.10 思考题 2.6 用图

习 题

- 2.1 一个细胞的线度为 10^{-5} m,其中一粒子质量为 10^{-14} g。按一维无限深方势阱计算,这个粒子的 $n_1 = 100$ 和 $n_2 = 101$ 的能级和它们的差各是多大?
- 2.2 一个氧分子被封闭在一个盒子内。按一维无限深方势阱计算,并设势阱宽度为 10 cm。
- 该氧分子的基态能量是多大?
 - 设该分子的能量等于 $T = 300$ K 时的平均热运动能量 $\frac{3}{2}kT$,相应的量子数 n 的值是多少?这第 n 激发态和第 $n + 1$ 激发态的能量差是多少?
- 2.3 在如图 2.11 所示的无限深斜底势阱中有一粒子。试画出它处于

$n=5$ 的激发态时的波函数曲线。

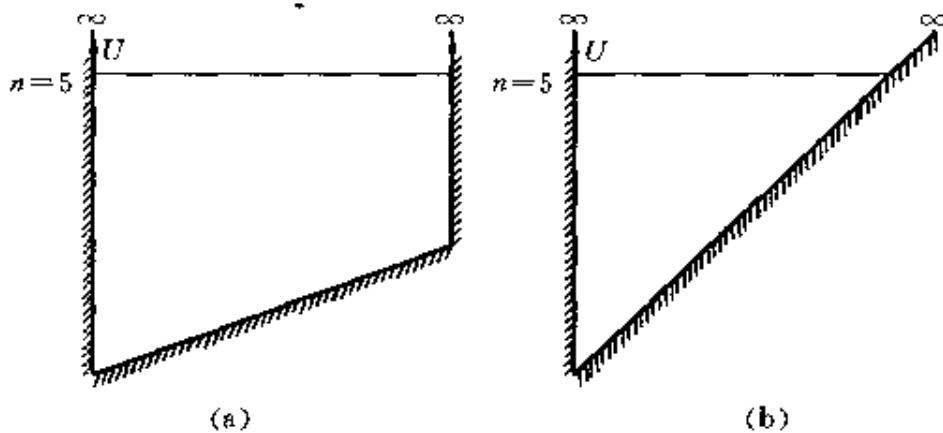


图 2.11 习题 2.3 用图

2.4 一粒子在一维无限深方势阱中运动而处于基态。从阱宽的一端到离此端 $1/4$ 阵宽的距离内它出现的概率多大？

*2.5 一粒子在一维无限深方势阱中运动，波函数如(2.33)式表示。求 x 和 x^2 的平均值。

*2.6 证明：如果 $\Psi_m(x,t)$ 和 $\Psi_n(x,t)$ 为一维无限深方势阱中粒子的两个不同能态的波函数，则

$$\int_0^a \Psi_m^*(x,t) \Psi_n(x,t) dx = 0$$

此结果称为波函数的正交性。它对任何量子力学系统的任何两个能量本征波函数都是成立的。

2.7 在一维盒子(图 2.2)中的粒子，在能量本征值为 E_n 的状态中，对盒子的壁的作用力多大？

2.8 一维无限深方势阱中的粒子的波函数在边界处为零。这种定态物质波相当于两端固定的弦中的驻波，因而势阱宽度 a 必须等于德布罗意波的半波长的整数倍。试由此求出粒子能量的本征值为

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

2.9 一粒子处于一正立方盒子中，盒子边长为 a 。试利用驻波概念导出粒子的能量为

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

其中 n_x, n_y, n_z 为相互独立的正整数。

2.10 谐振子的基态波函数为 $\psi = Ae^{-ax^2}$, 其中 A, a 为常量。将此式代入(2.51)式, 试根据所得出的式子在 x 为任何值时均成立的条件导出谐振子的零点能为

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \nu$$

2.11 H_2 分子中原子的振动相当于一个谐振子, 其等效劲度系数为 $k = 1.13 \times 10^3 \text{ N/m}$, 质量为 $m = 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$ 。此分子的能量本征值(以 eV 为单位)为何? 当此谐振子由某一激发态跃迁到相邻的下一激发态时, 所放出的光子的能量和波长各是多少?

实际锻炼。

第一次世界大战期间，薛定谔参军服役，担任炮兵军官。在此期间，他仍用零星时间阅读专业文献，1916年在广义相对论刚刚发表后，他就以极大的兴趣阅读了这篇论文。

战后，先在维也纳物理研究所工作，后到耶鲁大学任讲师，并做实验物理学家 M. 玻恩的助手。

1921 年任苏黎世大学教授。1924 年受德布罗意物质波理论的影响，着手把物质波概念用于束缚电子，以改进玻尔的原子模型。起初，薛定谔把相对论力学用于电子的运动，但因未考虑电子的自旋，结果与实验不符。1926 年薛定谔发表了他的非相对论形式的研究结果，提出了著名的薛定谔方程，建立了新型的量子理论。

1927 年受聘去柏林大学接替普朗克的职务，任理论物理学教授。在此，他经常和普朗克、爱因斯坦等探讨理论物理中的重大疑难问题。

英国理论物理学家狄拉克，考虑了电子的自旋和氢原子能级的精细结构，于 1928 年提出了相对论性的运动方程——狄拉克方程，对量子论的发展作出了突出的贡献。

1933 年，薛定谔和狄拉克分享了该年度的诺贝尔物理奖。

1938 年，薛定谔受爱尔兰首相瓦列拉的邀请去爱尔兰，建立了一个高级研究所。在这里，他专心致志从事科学的研究工作达 17 年之久。在这期间，他进一步发展了波动力学，同时还研究宇宙论和统一场论。

1956 年，在他 70 岁高龄时返回维也纳。维也纳大学的物理研究所为他提供了一个特设研究室，他继续进行研究，直到逝世。

薛定谔除了在量子力学方面的重大贡献和相对论以及统一场论等方面的工作外，他还把量子力学理论应用到生命现象中，发展了生物物理这一边缘学科，撰写了《生命是什么》一书。

此外，他对哲学也很感兴趣，还很注意普及科学知识，酷爱文学。他撰写的文章有《精神和物质》，《我的世界观》，《自然科学和人道主义》，《自然规律是什么？》等。此外，还发表过诗集。



物理学与现代技术

I 扫描隧道显微镜

固体或液体表面的性质和其内部的性质有着根本的不同。这是因为表面的微观结构，如原子的排列与电子云的分布等与内部的微观结构不同。现在人们已注意到从实验和理论两方面来研究物质表面的性质，并由此形成了一门新型科学——表面物理。

大家知道，电子显微镜是近代用于研究材料微观结构的有力工具，但由于高速电子会穿进样品深处，所以并不适用于研究材料的表面结构。1981年瑞士苏黎世IBM公司研究实验室的两位科学家宾尼(G. Binnig)和罗赫尔(H. Rohrer)研制成了一种扫描隧道显微镜(STM)，可以很精确地观察材料的表面结构，因而成了研究表面物理和其他实验研究的重要显微工具。由于这一卓越贡献，宾尼和罗赫尔二人和电子显微镜的发明者鲁斯卡(E. Ruska)分享了1986年度的诺贝尔物理奖。

1988年，我国科学家设计制成了新型的STM，其分辨率达到原子级，图象质量达到国际水平，为在我国广泛开展扫描隧道显微学的研究工作，为进一步探索微观世界的奥秘，提供了必要的物质基础。

STM的特点是不用光源也不用透镜，其显微部件是一枚细而尖的金属(如钨)探针。它的工作原理是量子隧道效应，其装置与原理示意图如图I.1所示。

在样品的表面有一表面势垒阻止内部的电子向外运动。但正如量子力学所指出的那样，表面内的电子能够穿过这表面势垒，到达表面外形成一层电子云。这层电子云的密度随着与表面的距离的增大而按指数规律迅速减小。这层电子云的纵向和横向分布由样品表面的微观结构决定，STM就是通过显示这层电子云的分布而考察样品表面的微观结构的。

使用STM时，先将探针推向样品，直至二者的电子云略有重叠为止。这时在探针和样品间加上电压，电子便会通过电子云形成隧道电流。由于电子云密度随距离迅速变化，所以隧道电流对针尖与表面间的距离极其敏感。例

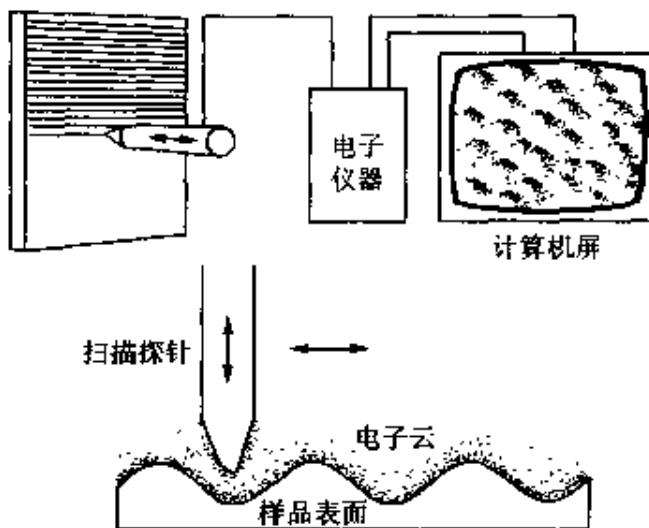


图 1.1 STM 示意图

如,距离改变一个原子的直径,隧穿电流会变化一千倍。当探针在样品表面上方全面横向扫描时,根据隧穿电流的变化利用一反馈装置控制针尖与表面间保持一恒定的距离。把探针尖扫描和起伏运动的数据送入计算机进行处理,就可以在荧光屏或绘图机上显示出样品表面的三维图象,和实际尺寸相比,这一图象可放大到 1 亿倍。

为了显示表面的微观结构,要求探针在样品上方移动时,针尖与表面间距离小于 1 nm,同时还要保证其稳定性,且精确度小于 0.01 nm,这些都是极为严格的要求。为此,探针的驱动头必须高度精确,整个设备要全面防止外界振动的干扰,而探针尖也应在刚性和稳定性容许的范围内,尽可能做得尖锐。

探针尖的精密定位和微小步进移动巧妙地利用了压电晶体的电致伸缩性质。它可以使针尖每一步只移动 10 nm 到 100 nm 之间的距离。排除外界振动的干扰采用了弹簧支撑和涡电流阻尼的办法。目前,STM 的纵向(竖直)分辨本领为千分之几纳米(原子半径为十分之几纳米),横向(水平)分辨本领和探针与样品间的绝缘介质以及针尖端部的尺寸有关。在真空中进行隧道贯穿时,横向分辨本领一般可达 0.6~1.2 nm。当针尖端部仅为一个原子时,分辨本领可达 0.2 nm,这个原子通常来自样品本身,是在样品和探尖间的强电场作用下,由样品飞出牢牢地附着到针尖上的。

目前用 STM 已对石墨、硅以及金晶体等的表面状况进行了观察,取得

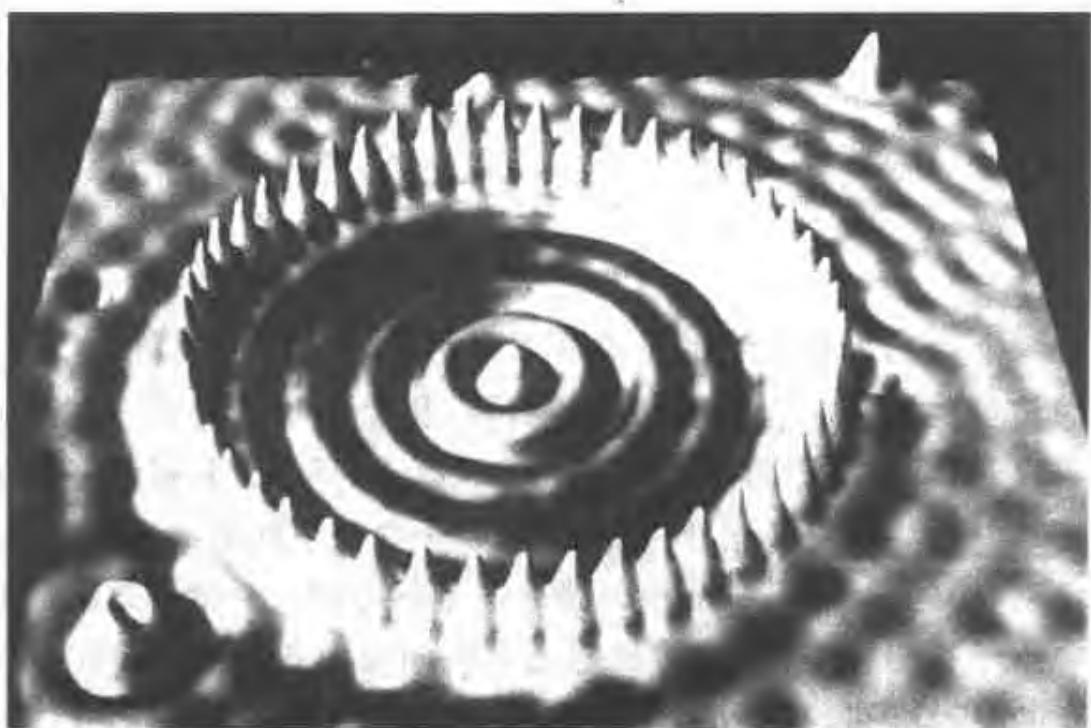


图 1.3 量子围栏照片

第3章 原子中的电子

薛定谔利用他得到的方程所取得的第一个突出成就是,它更合理地解决了当时有关氢原子的问题,从而开始了量子力学理论的建立。本章先介绍薛定谔方程关于氢原子的结论,并提及多电子原子。除了能量量子化外,还要说明原子内电子的角动量(包括自旋角动量)的量子化。然后根据描述电子状态的4个量子数讲解原子中电子排布的规律,从而说明元素周期表中各元素的排序以及X光的发射机制。其后介绍激光产生的原理及其应用,最后介绍分子的能级以及分子光谱的特征。

3.1 氢 原 子

氢原子是一个三维系统,其电子在质子的库仑场内运动,处于束缚状态。它的势能为

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3.1)$$

其中 r 为电子到质子的距离。由于此势能具有球对称性,为方便求解,就利用定态薛定谔方程(2.5)式,即

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] \\ & - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi \end{aligned} \quad (3.2)$$

其中波函数应为 r, θ 和 φ 的函数,即 $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$ 。

(3.2)式可以用分离变量法求解,即有

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

由于求解的过程和 ψ 的具体形式比较复杂, 下面只给出关于波函数 ψ 的一些结论。

根据处于束缚态的粒子的波函数必须满足的标准条件, 求解(3.2)式时就自然地(即不是作为假设条件提出的)得出了量子化的结果, 即氢原子中电子的状态由 3 个量子数 n, l, m_l 决定, 它们的名称和可能取值如表 3.1 所示。

表 3.1 氢原子的量子数

名 称	符 号	可 能 取 值
主量子数	n	1, 2, 3, 4, 5, …
轨道量子数	l	0, 1, 2, 3, 4, …, $n-1$
轨道磁量子数	m_l	$-l, -(l-1), \dots, 0, 1, 2, \dots, l$

主量子数 n 和波函数的径向部分($R(r)$)有关, 它决定电子的(也就是整个氢原子在其质心坐标系中的)能量。这一能量的表示式为^①

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (3.3)$$

其中 m_e 是电子的质量。此式表示氢原子的能量只能取离散的值, 这就是**能量的量子化**。(3.3)式也可以写成

$$E_n = -\frac{e^2}{2(4\pi\epsilon_0)a_0} \frac{1}{n^2} \quad (3.4)$$

式中

① 对于**类氢离子**, 即一个电子围绕一个具有 Z 个质子的核运动的情况,(3.1)式的势能函数应为 $U(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$, 而(3.3)式的能量表示式相应地为

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

使氢原子电离所必需的最小能量叫电离能,它的值就等于 E_1 。

$n > 1$ 的状态统称为激发态。在通常情况下,氢原子就处在能量最低的基态。但当外界供给能量时,氢原子也可以跃迁到某一激发态。常见的激发方式之一是氢原子吸收一个光子而得到能量 $h\nu$ 。处于激发态的原子是不稳定的,经过或长或短的时间(典型的为 10^{-8} s),它会跃迁到能量较低的状态而以光子或其他方式放出能量。不论向上或向下跃迁,氢原子所吸收或放出的能量都必须等于相应的能级差。就吸收或放出光子来说,必须有

$$h\nu = E_b - E_l \quad (3.6)$$

其中 E_b 和 E_l 分别表示氢原子的高能级和低能级。(3.6)式叫玻尔频率条件。

在氢气放电管放电发光的过程中,氢原子可以被激发到各个高能级中。从这些高能级向不同的较低能级跃迁时,就会发出各种相应的频率的光。经过分光镜后,每种频率的光会形成一条谱线。氢原子发出的光组成一组组的谱线系,如图 3.1 所示。从较高能级回到基态的跃迁形成莱曼系,这些光在紫外区。从较高能级回到 $n=2$ 的能级的跃迁发出的光形成巴耳末系,处于可见光区。从较高能级回到 $n=3$ 的能级的跃迁发出的光形成帕邢系,在红外区,等等。

例 3.1 求巴耳末系光谱的最大和最小波长。

解 由 $h\nu = E_b - E_l$ 和 $\lambda\nu = c$ 可得最大波长为

$$\begin{aligned} \lambda_{\max} &= \frac{ch}{E_3 - E_2} = \frac{3 \times 10^8 \times 6.63 \times 10^{-34}}{[-13.6/3^2 - (-13.6/2^2)] \times 1.6 \times 10^{-19}} \\ &= 6.58 \times 10^{-7}(\text{m}) = 658(\text{nm}) \end{aligned}$$

这一波长的光为红光。最小波长为

$$\begin{aligned} \lambda_{\min} &= \frac{ch}{E_\infty - E_2} = \frac{3 \times 10^8 \times 6.63 \times 10^{-34}}{0 - (-13.6/2^2) \times 1.6 \times 10^{-19}} \\ &= 3.66 \times 10^{-7}(\text{m}) = 366(\text{nm}) \end{aligned}$$

这一波长的光在近紫外区,此波长叫巴耳末系的极限波长。 $E > 0$ 的自由电子

跃迁到 $n=2$ 的能级所发的光在此极限波长之外形成连续谱。

表 3.1 中的轨道量子数 l 和波函数的 $\Theta(\theta)$ 部分有关, 它决定了电子的轨道角动量的大小 L 。电子在核周围运动的角动量的可能取值为

$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad (3.7)$$

这说明轨道角动量的数值也是量子化的。

波函数 ψ 中的 $\Phi(\phi)$ 部分可证明就是第 2 章例 2.1 求出的 (2.10) 式, 即 $\Phi_{m_l} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \phi}$, 其中 m_l 就是轨道磁量子数。 m_l 决定了电子轨道角动量 L 在空间某一方向(如 z 方向)的投影。在通常情况下, 自由空间是各向同性的, z 轴可以取任意方向, 这一量子数没有什么实际意义。如果把原子放到磁场中, 则磁场方向就是一个特定的方向, 取磁场方向为 z 方向, m_l 就决定了轨道角动量在 z 方向的投影(这也就是 m_l 所以叫做磁量子数的原因)。这一投影也是量子化的, 据 (2.13) 式其

可能取值为

$$L_z = m_l \hbar \quad (3.8)$$

此投影值的量子化意味着电子的轨道角动量的指向是量子化的。因此这一现象叫空间量子化。

空间量子化的含义可用一经典的矢量模型来形象化地说明。图 3.2 中的 z 轴方向为外磁场方向。在 $l=2$ 时, $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$, $L = \sqrt{2(2+1)} \hbar = \sqrt{6} \hbar$, 而 L_z 的可能取值为 $\pm 2\hbar, \pm \hbar, 0$ 。

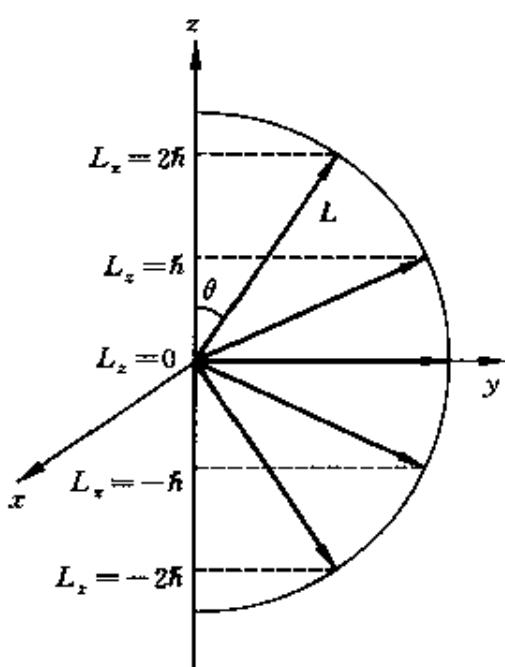


图 3.2 空间量子化的矢量模型

对于确定的 m_l 值, L_z 是确定的, 但是 L_x 和 L_y 就完全不能确定了。这是海森伯不确定关系给出的结果。和 L_z 对应的空间变量是方位角 φ , 因此海森伯不确定关系给出, 沿 z 方向

$$\Delta L_z \Delta \varphi \geq \hbar / 2 \quad (3.9)$$

L_z 的确定意味着 $\Delta L_z = 0$, 而 $\Delta \varphi$ 变为无限大, 即 φ 就完全不确定了, 因此 L_x, L_y 也就完全不确定了。这可以用图 3.3 所示的矢量模型说明。 L_z 的保持恒定可视为 L 矢量绕 z 轴高速进动, 方位角 φ 不断变化就使得 L_x 和 L_y 都不能有确定的值。由图也可知 L_x 和 L_y 的时间平均值为零。由于 L_x, L_y 不确定, 所以它们也不可能测定, 因而轨道角动量 L 也不可能测定, 能测定的就是具有恒定值的分量 L_z 。

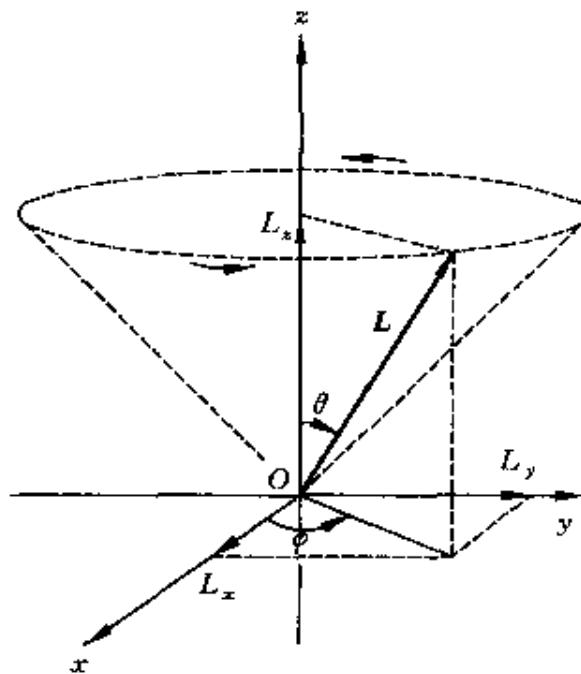


图 3.3 电子角动量变化的矢量模型

有确定量子数 n, l, m_l 的电子状态的波函数记作 $\psi_{n,l,m_l} = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)$ 。对于基态, $n=1, l=0, m_l=0$, 其波函数为

$$\psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^{3/2}}} e^{-r/a_0} \quad (3.10)$$

此状态下的电子概率密度分布为

$$|\psi_{1,0,0}|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} \quad (3.11)$$

这是一个球对称分布。以点的密度表示概率密度的大小，则基态下氢原子中电子的概率密度分布可以形象化地用像图 3.4 那样的图表示。这种图常被说成是“电子云”图。注意，量子力学对电子绕原子核运动的图象（或意义）只是给出这个疏密分布，即只能说出电子在空间某处小体积内出现的概率多大，而没有经典的位移随时间变化的概念，因而也就没有轨道的概念。早期量子论，如玻尔最先提出的原子模型，认为电子是绕原子核在确定的轨道上运动的，这种概念今天看来是错误的。上面提到角动量时所加的“轨道”二字只是沿用的词，不能认为是电子沿某封闭轨道运动时的角动量。现在可以理解为“和位置变动相联系的”角动量，以区别于在 3.2 节将要讨论的“自旋角动量”。

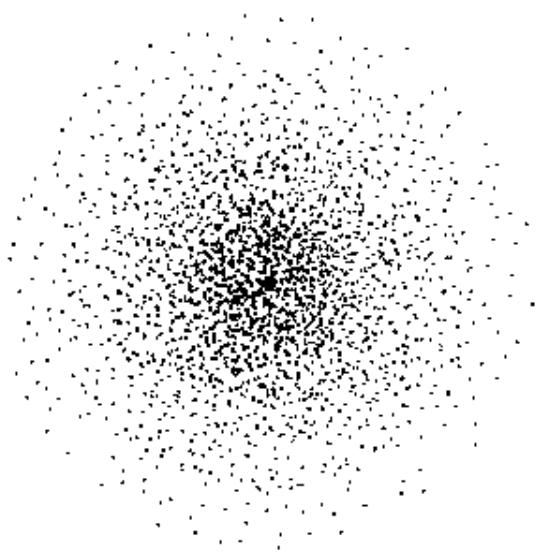


图 3.4 氢原子基态的电子云图

对于 $n=2$ 的状态， l 可取 0 和 1 两个值。 $l=0$ 时， $m_l=0$ ； $l=1$

时, $m_l = -1, 0$ 或 $+1$ 。这几个状态下氢原子电子云图如图 3.5 所示。 $l=0, m_l=0$ 的电子云分布具有球对称性。 $l=1, m_l=\pm 1$ 这两个状态的电子云分布是完全一样的。它们和 $l=1, m_l=0$ 的状态的电子云分布都具有对 z 轴的轴对称性。对孤立的氢原子来说, 空间没有确定的方向, 可以认为电子平均地往返于这三种状态之间。如果把这三种状态的概率密度加在一起, 就发现总和也是球对称的。由此我们可以把 $l=1$ 的三个相互独立的波函数归为一组。一般地说, l 相同的波函数都可归为一组, 这样的一组叫一个次壳层, 其中电子概率密度分布的总和具有球对称性。 $l=0, 1, 2, 3, 4, \dots$ 等的次壳层分别依次命名为 s, p, d, f, g, \dots 等次壳层。

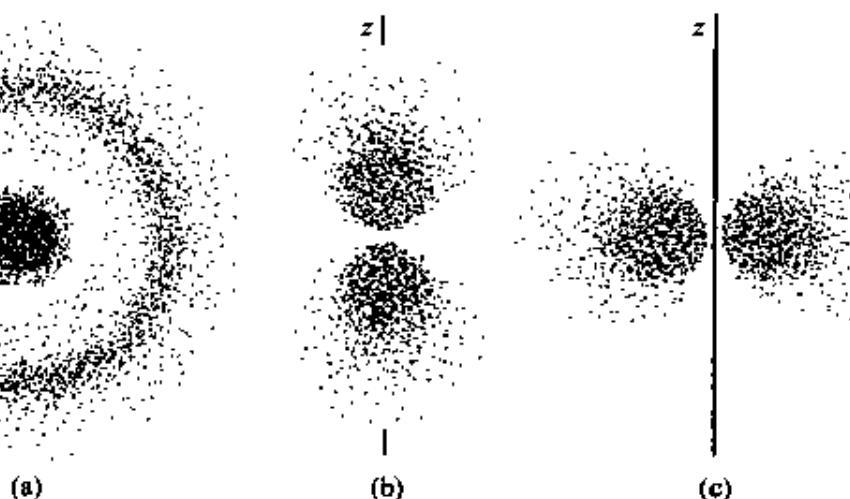


图 3.5 氢原子 $n=2$ 的各状态的电子云图

(a) $l=0, m_l=0$; (b) $l=1, m_l=0$; (c) $l=1, m_l=\pm 1$

由(3.3)式可以看到氢原子的能量只和主量子数 n 有关^①, n 相同而 l 和 m_l 不同的各状态的能量是相同的。这种情形叫能级的简并。具有同一能级的各状态称为简并态。具有同一主量子数的各状态可以认为组成一组, 这样的一组叫做一个壳层。 $n=1, 2, 3,$

^① 实际上还和电子的自旋状态有关, 见 3.2 节。

4, … 等的壳层分别依次命名为 K, L, M, N, \dots 等壳层。联系到上面提到的次壳层的意义可知, 主量子数为 n 的壳层内共有 n 个次壳层。

对于概率密度分布, 考虑到势能的球对称性, 我们更感兴趣的是径向概率密度 $P(r)$ 。它的定义是: 在半径为 r 和 $r+dr$ 的两球面间的体积内电子出现的概率为 $P(r)dr$ 。对于氢原子基态, 由于(3.11)式表示的概率密度分布是球对称的, 因此可以有

$$P_{1,0,0}(r)dr = |\psi_{1,0,0}|^2 \cdot 4\pi r^2 dr$$

由此可得:

$$\begin{aligned} P_{1,0,0}(r) &= |\psi_{1,0,0}|^2 \cdot 4\pi r^2 \\ &= \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} \end{aligned} \quad (3.12)$$

此式所表示的关系如图 3.6 所示。由(3.12)式可求得 $P_{1,0,0}(r)$ 的极大值出现在 $r=a_0$ 处, 即从离原子核远近来说, 电子出现在 $r=a_0$ 附近的概率最大。在量子论早期, 玻尔用半经典理论求出的氢原子中电子绕核运动的最小的可能圆轨道的半径就是这个 a_0 值,

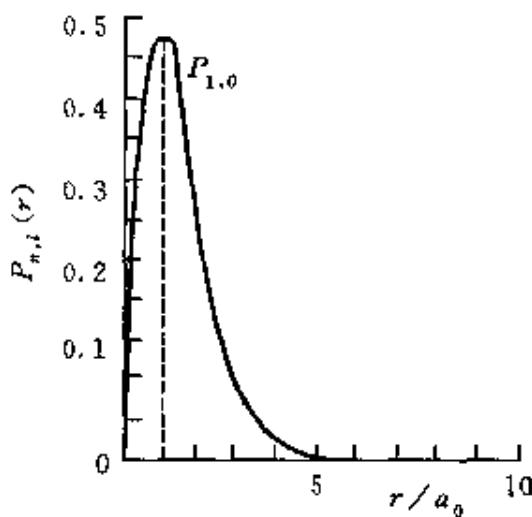


图 3.6 氢原子基态的电子径向概率密度分布曲线

这也是把 a_0 叫做玻尔半径的原因。

$n=2, l=0$ 的径向概率密度分布如图 3.7(a) 中的 $P_{2,0}$ 曲线(图(b)为(a)的局部放大图)所示, 它对应于图 3.5(a)的电子云分布。 $n=2, l=1$ 的径向概率密度分布如图 3.7(a)中的 $P_{2,1}$ 曲线所示, 它对应于图 3.5(b),(c)叠加后的电子云分布。 $P_{2,1}$ 曲线的极大值出现在 $r=4a_0$ 的地方。

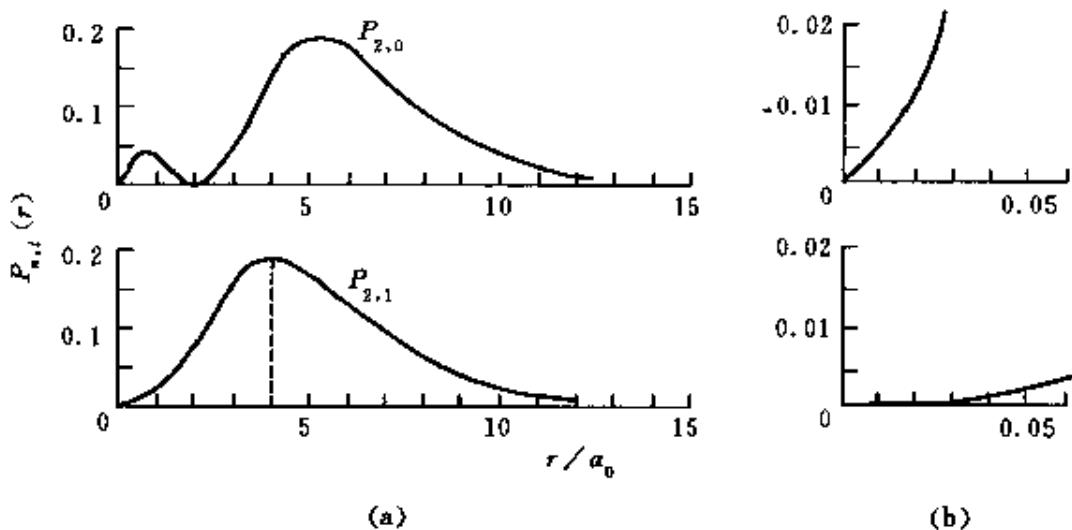


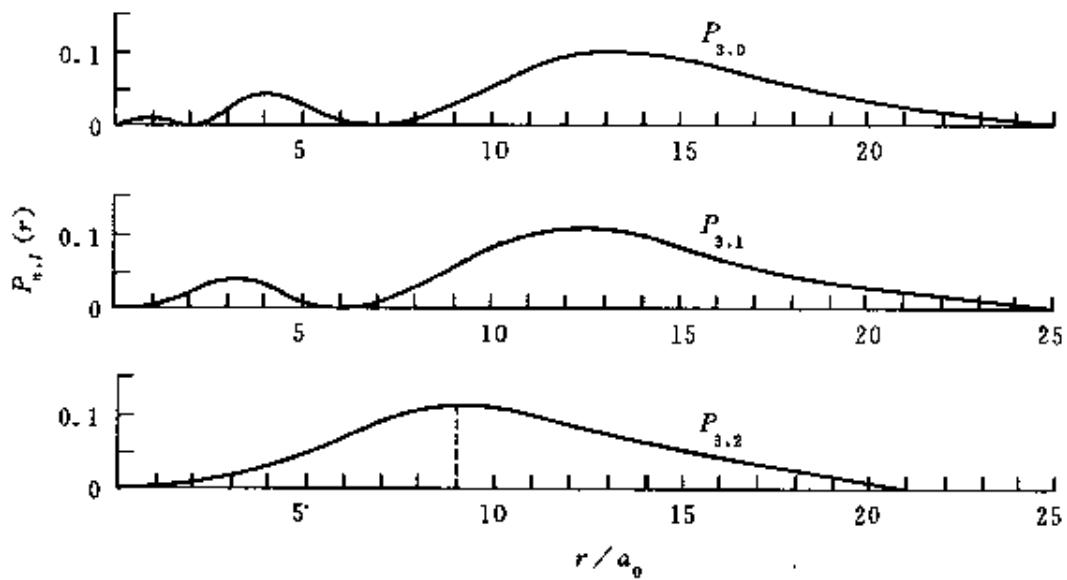
图 3.7 $n=2$ 的电子径向概率密度分布曲线

$n=3, l=0, 1, 2$ 的电子径向概率密度分布如图 3.8 所示, $P_{3,2}$ 曲线的最大值出现在 $r=9a_0$ 的地方。

例 3.2 求氢原子处于基态时, 电子处于半径为玻尔半径的球面内的概率。

解 由(3.12)式可得所求概率为

$$\begin{aligned} P_{\text{int}} &= \int_0^{a_0} P_{1,0,0}(r) dr = \int_0^{a_0} \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} dr \\ &= \left[1 - e^{-2r/a_0} \left(1 + \frac{2r}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2} \right) \right]_{r=a_0} \\ &= 1 - 5e^{-2} = 0.32 \end{aligned}$$

图 3.8 $n=3$ 的电子径向概率密度分布曲线

概率流密度 电子云的转动

上面讲了由定态薛定谔方程导出的氢原子的定态波函数 ψ_{n,l,m_l} 的特征，此波函数的平方，即 $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ ，给出电子的概率密度分布。此概率密度分布是和时间无关的。若用电子云来描述，则如图 3.4 和图 3.5 中的电子云图形总是保持不变的，这就是“定态”的含义。这些电子云真是完全静止的吗？不！它们都是绕 z 轴转动的。下面用波函数的性质说明这一点。

一般说来，电子在一定状态时，其概率密度 $|\Psi(r,t)|^2$ 是随时间改变的，但全空间的总概率

$$\int |\Psi(r,t)|^2 dV$$

是不改变的。 $\Psi(r,t)$ 归一化后，上述总概率应等于 1，这一结果是粒子数守恒的反映。一个粒子，无论怎样运动，无论过了多长时间，在各处出现的概率可以变化，但永远是一个粒子，粒子数目不会增加，也不会减少。

由于全空间的概率密度总和是恒定的，所以某处的概率密度减少时，在另外某处的概率密度一定同时要增加，好像概率密度由一处流向另一处一样。概率密度的这种变化在量子力学中用概率流密度来描述。某点的概率流密度 j 是一个矢量，大小等于该点附近单位时间内流过与 j 垂直的单位面积

的概率密度。量子力学给出

$$j = \frac{i\hbar}{2m_e} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (3.13)$$

式中 ∇ 是梯度算符。在球坐标中

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.14)$$

对氢原子的量子数为 n, l, m_l 的定态, 其波函数为

$$\Psi = \Psi_{n,l,m_l} = R_{n,l}(r) \Theta_{l,m_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\varphi) e^{-i\varphi/\hbar}$$

其中, $R_{n,l}(r)$ 和 $\Theta_{l,m_l}(\theta)$ 两部分都是实函数, 而 $\Phi_{m_l}(\varphi) = e^{im_l\varphi}/\sqrt{2\pi}$ 。由于决定 j 的公式(3.13)式中括号内为一减号, 所以由(3.14)式的算符给出的在 \mathbf{e}_r 和 \mathbf{e}_θ 方向 j 的分量是零。由 $\Phi_{m_l}(\varphi) = e^{im_l\varphi}/\sqrt{2\pi}$ 可得

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi = im_l \Psi, \quad \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi^* = -im_l \Psi^*$$

将此结果代入(3.13)式可得

$$\begin{aligned} j &= \frac{i\hbar}{2m_e} \left[0 + 0 + \frac{\mathbf{e}_\varphi}{r \sin \theta} \left(\Psi \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi^* - \Psi^* \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi \right) \right] \\ &= \frac{i\hbar(-im_l)}{2m_e r \sin \theta} [\Psi \Psi^* + \Psi^* \Psi] \mathbf{e}_\varphi \\ &= \frac{\hbar m_l}{m_e r \sin \theta} |\Psi|^2 \mathbf{e}_\varphi \end{aligned}$$

由于 $|\Psi|^2 = |\psi|^2$, 所以可得

$$j = \frac{\hbar m_l}{m_e r \sin \theta} \psi^2 \mathbf{e}_\varphi \quad (3.15)$$

这一结果说明, 在氢原子内, 各处的概率流密度都沿 \mathbf{e}_φ 方向, 即绕 z 轴的正方向, 大小与 $|\psi|^2$ 成正比, 与距 z 轴的距离 $r \sin \theta$ 成反比。由于氢原子所有的状态的电子云分布都是对 z 轴对称的(参看图 3.4 和图 3.5, 这是因为 $|\psi|^2$ 和 φ 无关), 所以尽管电子云各部分都在绕 z 轴转动, 但概率密度分布, 亦即电子云的形状, 却能保持不随时间改变。这就是定态电子云的真实情况。

概率密度表示电子在各处出现的概率。由于电子具有质量 m_e 和电荷 $-e$, 所以概率密度乘以 m_e , 即 $m_e |\psi|^2$, 就是氢原子内各处的电子云的质量密度; 概率密度乘以 $-e$, 即 $-e |\psi|^2$, 就是电荷密度; 而概率流密度分别乘以 m_e 和 $-e$, 即 $m_e j$ 和 $-ej$, 就分别是质量流密度和电流密度。由于电子云是绕 z

轴转动的,所形成的环形质量流必然产生沿 z 轴的角动量,而环形的电流必然产生沿 z 轴的磁矩。下面就用这样的量子力学观点来计算氢原子的角动量和磁矩沿 z 轴方向的分量。

如图3.9所示,以球坐标的原点 O 为氢原子的中心,选一垂直于 z 轴的细圆环,其半径为 $r\sin\theta$,截面积为 $dS = rd\theta dr$,以 v 表示 dS 处的质量流的速度,则 dt 时间内流过 dS 的质量为

$$dm_e = m_e j dS dt = m_e |\psi|^2 dS v dt$$

由此得

$$v = j / |\psi|^2$$

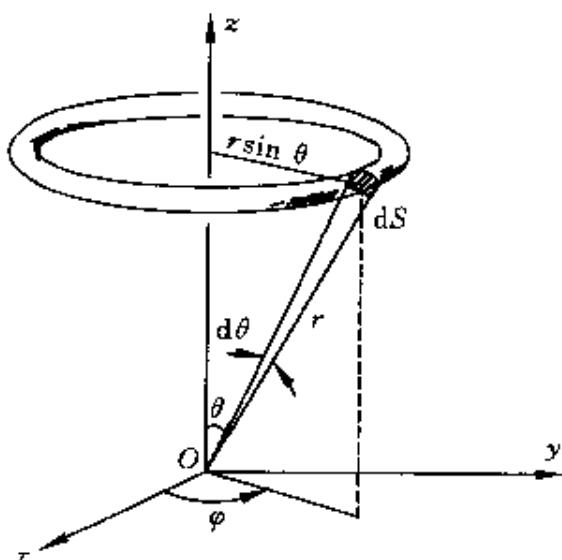


图3.9 氢原子中电子概率流密度分析

将(3.15)式中 j 的大小代入,可得

$$v = \frac{\hbar m_l}{m_e r \sin \theta}$$

dm_e 对 z 轴的角动量为

$$dL_z = dm_e r \sin \theta v = \frac{\hbar m_l}{m_e} dm_e$$

此式对电子云的所有部分积分,可得电子云对 z 轴的总角动量为

$$L_z = \int dL_z = \int_{m_e} \frac{\hbar m_l}{m_e} dm_e = \hbar m_l \quad (3.16)$$

这正是角动量在 z 方向的分量的量子化公式(3.8)式。

下面再求电子云的总磁矩沿 z 方向的分量。仍参照图 3.9, 截面积 $dS = rd\theta dr$ 的细环形电流为 $di = -ejdS$, 细环围绕的面积为 $A = \pi r^2 \sin^2 \theta$ 。此环形电流沿 z 方向的磁矩的大小为

$$d\mu_z = Adi = -e_j \pi r^2 \sin^2 \theta dS$$

将(3.15)式 j 的大小代入可得

$$d\mu_z = -\frac{e\hbar m_l}{2m_e} |\psi|^2 \cdot 2\pi r \sin \theta r d\theta dr$$

此式对全空间进行积分, 可得总磁矩沿 z 方向的分量为

$$\mu_z = \int d\mu_z = -\frac{e\hbar m_l}{2m_e} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^{\infty} |\psi|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

考虑到 $r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$ 就是球坐标中的体积元, 上式中的积分即为 $|\psi|^2$ 对全空间的积分。由于 $|\psi|^2$ 的归一化, 此积分应等于 1, 于是得

$$\mu_z = -\frac{e\hbar}{2m_e} m_l = -\mu_B m_l \quad (3.17)$$

这就是电子轨道运动的磁矩沿 z 方向的量子化公式, 其中 $\mu_B = e\hbar/2m_e$ 叫做玻尔磁子(见 3.2 节(3.26)式)。

单价原子的能级

单价原子, 如锂、钠等碱金属元素的原子中有多个电子围绕着带正电的原子核运动, 最外层只有一个电子, 叫做价电子。和氢原子相比, 这一价电子所围绕的不是一个质子而是一个原子核和许多电子组成的实体, 叫原子实。价电子就在这原子实的库仑场中运动。如果原子核中有 Z 个质子, 则原子实内将有 $(Z-1)$ 个电子。原子核对价电子的作用将被这些电子所减弱或屏蔽。如果价电子完全在原子实之外运动, 则它受原子实的作用就和在一个质子的库仑场中所受的作用一样。它的能级分布将和氢原子的一样, 只是由于离核较远, 因而基态处于 $n > 1$ 的状态而能量较高。实际上, 价电子在运动中还可以到达原子实内, 这可以从图 3.7 和图 3.8 所显示的电子出现的概率在离核很近(即 r 值很小的区域)处还有一定的值看出来。图中还显示, l 越小, 电子出现在核周围的概率越大。价电子进入原子实时, 所受库仑力将增大, 因而所具有的能量减小, 能级变低, 而且 l 越小, 能级越低。这样, 孤立原子中价电子

的能量,亦即原子的能量将不再具有氢原子那样的能量简并情况,而是由 n 和 l 值共同决定了。图 3.10 画出了钠原子的能级图。钠原子的基态的主量子数 $n=3$, 对应的 $l=0, 1, 2$, 即分别为 $3s, 3p, 3d$ 态(数字表示 n 值, 字母表示 l 值)。这三个态的能量不同,而以 $3s$ 态的能量最低。类似的 $n=4$ 的 $4s, 4p, 4d, 4f$ 各态的能量也不相同。由于这种能级的分裂,当原子的状态由高能态跃迁到低能态时所发出的光形成的谱线系就比氢原子更为复杂了。钠原子发的光形成的较为明显的谱线系有主线系、锐线系和漫线系,如图 3.9 标出的那样,其中由 $3p$ 态到 $3s$ 态跃迁时发出的光就是著名的钠黄光,波长为 589 nm。

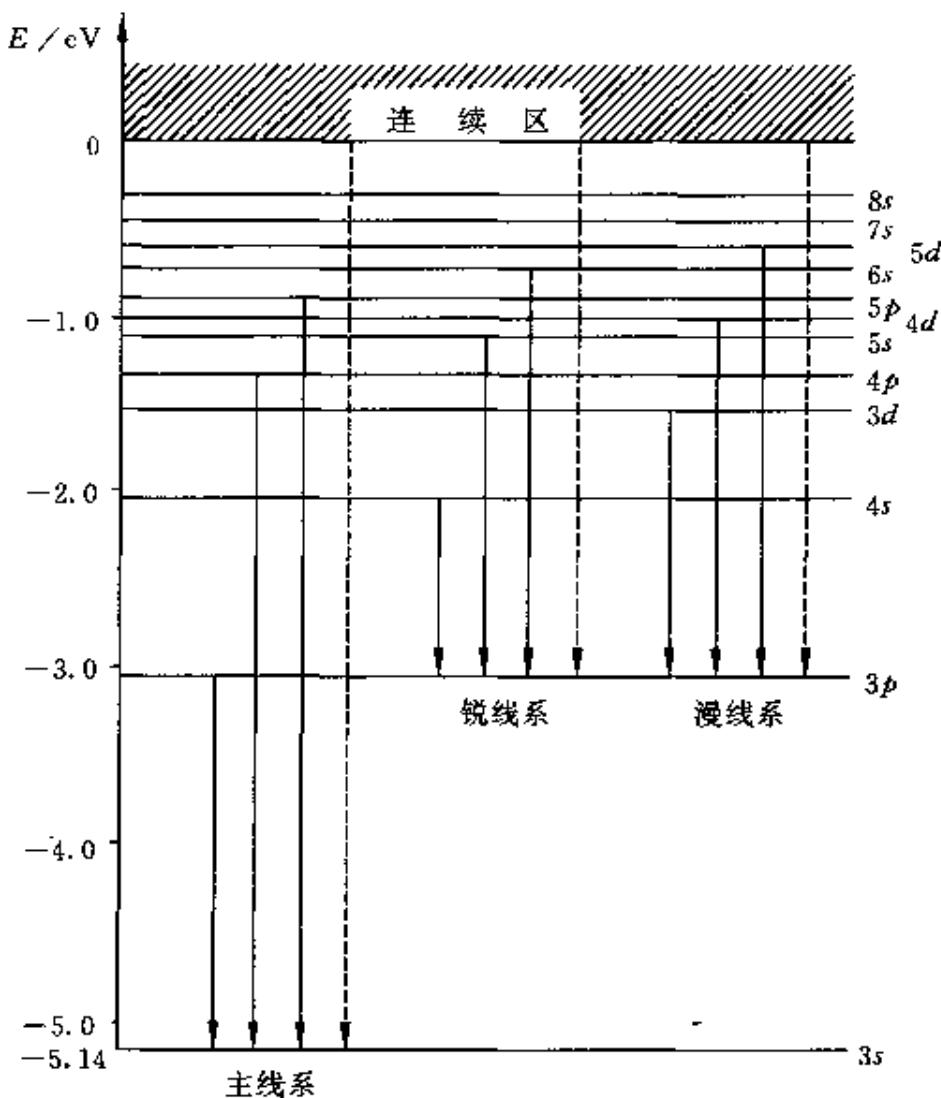


图 3.10 钠原子的能级图

还应指出，原子并非在任意两个能级之间都能跃迁。跃迁要遵守一定的选择定则。对图 3.9 所标出的跃迁来说，必须遵守的选择定则为，跃迁前后轨道量子数的变化为

$$\Delta l = \pm 1 \quad (3.18)$$

这一选择定则是角动量守恒所要求的。由于光子具有角动量，所以原子发出一个光子时，原子本身的轨道角动量也要发生变化，其变化的值可以由量子力学导出，即由(3.18)式决定。

3.2 电子的自旋与自旋轨道耦合

原子中的电子不但具有轨道角动量，而且具有**自旋角动量**。这一事实的经典模型是太阳系中地球的运动。地球不但绕太阳运动具有轨道角动量，而且由于围绕自己的轴旋转而具有自旋角动量。但是，正像不能用轨道概念来描述电子在原子核周围的运动一样，也不能把经典的小球的自旋图象硬套在电子的自旋上。电子的自旋和电子的电量及质量一样，是一种“内禀的”，即本身固有的性质。由于这种性质具有角动量的一切特征（例如参与角动量守恒），所以称为自旋角动量，也简称**自旋**。

电子的自旋也是量子化的。对应的**自旋量子数**用 s 表示。和轨道量子数 l 不同， s 只能取 $1/2$ 这一个值。电子自旋的大小为

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar \quad (3.19)$$

电子自旋在空间某一方向的投影为

$$S_z = m_s \hbar \quad (3.20)$$

其中 m_s 叫电子的**自旋磁量子数**，它只取 $\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$ 两个值，即

$$m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \quad (3.21)$$

和轨道角动量一样，自旋角动量 S 是不能测定的，只有 S_z 可以测

定(图 3.11)。

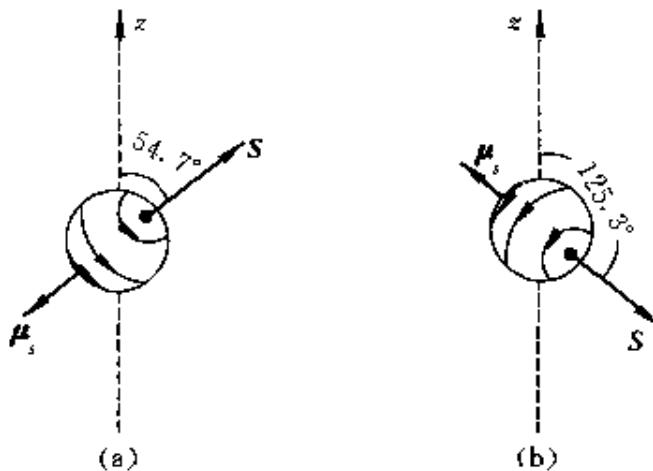


图 3.11 电子自旋的经典矢量模型

(a) $m_s = 1/2$; (b) $m_s = -1/2$

一个电子绕核运动时,既有轨道角动量 L ,又有自旋角动量 S 。这时电子的状态和总的角动量 J 有关,总角动量为前二者的和,即

$$J = L + S \quad (3.22)$$

这一角动量的合成叫自旋轨道耦合。由量子力学可知, J 也是量子化的。相应的总角动量量子数用 j 表示,则总角动量的值为

$$J = \sqrt{j(j+1)} \hbar \quad (3.23)$$

j 的取值取决于 l 和 s 。在 $l=0$ 时, $J=S, j=s=1/2$ 。在 $l \neq 0$ 时, $j=l+s=l+1/2$ 或 $j=l-s=l-1/2$ 。 $j=l+1/2$ 的情况称为自旋和轨道角动量平行; $j=l-1/2$ 的情况称为自旋和轨道角动量反平行。图 3.12 画出 $l=1$ 时这两种情况下角动量合成的经典矢量模型图,其中 $S=\sqrt{3}\hbar/2, L=\sqrt{2}\hbar, J=\sqrt{15}\hbar/2$ 或 $\sqrt{3}\hbar/2$ 。

在实际的氢原子中,自旋轨道耦合可以用图 3.13 所示的玻尔模型图来定性地说明。在原子核参考系中(图 3.13(a)),原子核 p

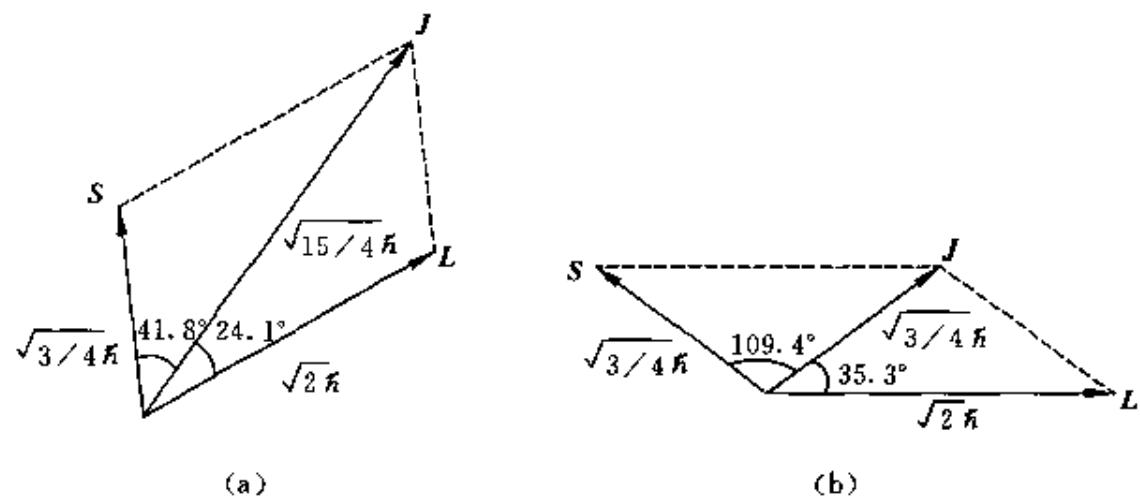


图 3.12 自旋轨道耦合矢量模型

$$(a) j = \frac{3}{2}; (b) j = \frac{1}{2}$$

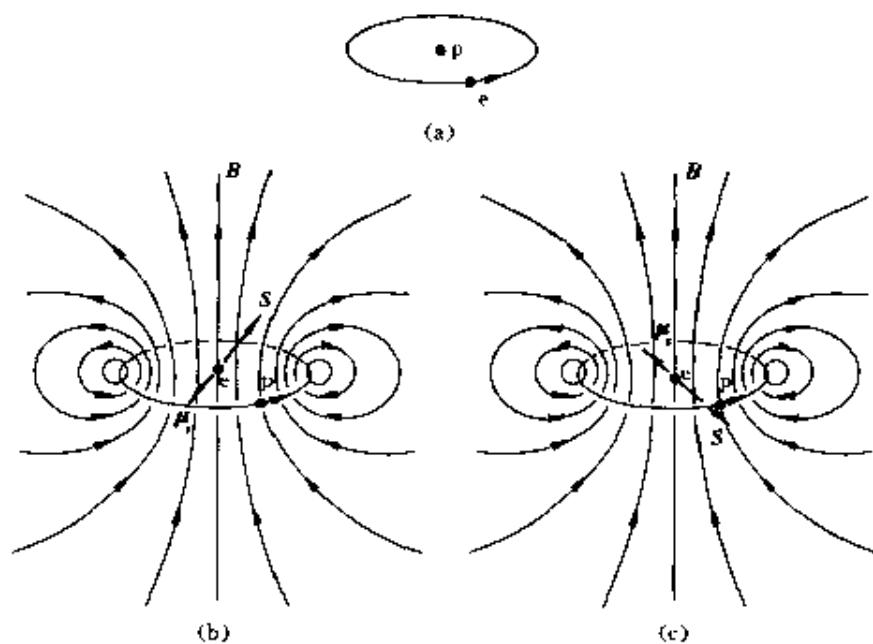


图 3.13 自旋轨道耦合的简单说明

静止，电子 e 围绕它做圆周运动。在电子参考系中(图 3.13(b), (c))电子是静止的，而原子核绕电子做相同转向的圆周运动，因而

在电子所在处产生向上的磁场 B 。以 B 的方向为 z 方向，则电子的角动量相对于此方向，只可能有平行与反平行两个方向。图 3.13 (b), (c) 分别画出了这两种情况。

自旋轨道耦合使得电子在 l 为某一值 ($l=0$ 除外) 时，其能量由单一的 $E_{n,l}$ 值分裂为两个值，即同一个 l 能级分裂为 $j=l+1/2$ 和 $j=l-1/2$ 两个能级。这是因为和电子的自旋相联系，电子具有内禀自旋磁矩 μ 。量子理论给出，电子的自旋磁矩与自旋角动量 S 有以下关系：

$$\mu = -\frac{e}{m_e} S \quad (3.24)$$

它在 z 方向的投影为

$$\mu_{s,z} = \frac{e}{m_e} S_z = \frac{e}{m_e} \hbar m_s$$

由于 m_s 只能取 $1/2$ 和 $-1/2$ 两个值，所以 $\mu_{s,z}$ 也只能取两个值，即

$$\mu_{s,z} = \pm \frac{e \hbar}{2m_e} \quad (3.25)$$

此式所表示的磁矩值叫做玻尔磁子，用 μ_B 表示，即

$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2m_e} = 9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T} \quad (3.26)$$

因此，(3.25) 式又可写成^①

$$\mu_{s,z} = \pm \mu_B \quad (3.27)$$

在电磁学中学过，磁矩 μ 在磁场中是具有能量的，其能量为

$$E_s = -\mu_s \cdot B = -\mu_{s,z} B \quad (3.28)$$

^① 在高等量子理论，即量子电动力学中， $\mu_{s,z}$ 的值不是正好等于 (3.26) 式的 μ_B ，而是等于它的 1.001 159 652 38 倍。这一结果已被实验在实验精度范围内确认了。理论和实验在这样多的有效数字范围内相符合，被认为是物理学的惊人的突出成就之一。

将(3.27)式代入,可知由于自旋轨道耦合,电子所具有的能量为

$$E_s = \mp \mu_B B \quad (3.29)$$

其中 B 是电子在原子中所感受到的磁场。

对孤立的原子来说,电子在某一主量子数 n 和轨道量子数 l 所决定的状态内,还可能有自旋向上($m_s=1/2$)和自旋向下($m_s=-1/2$)两个状态,其能量应为轨道能量 $E_{n,l}$ 和自旋轨道耦合能 E_s 之和,即

$$E_{n,l,s} = E_{n,l} + E_s = E_{n,l} \pm \mu_B B \quad (3.30)$$

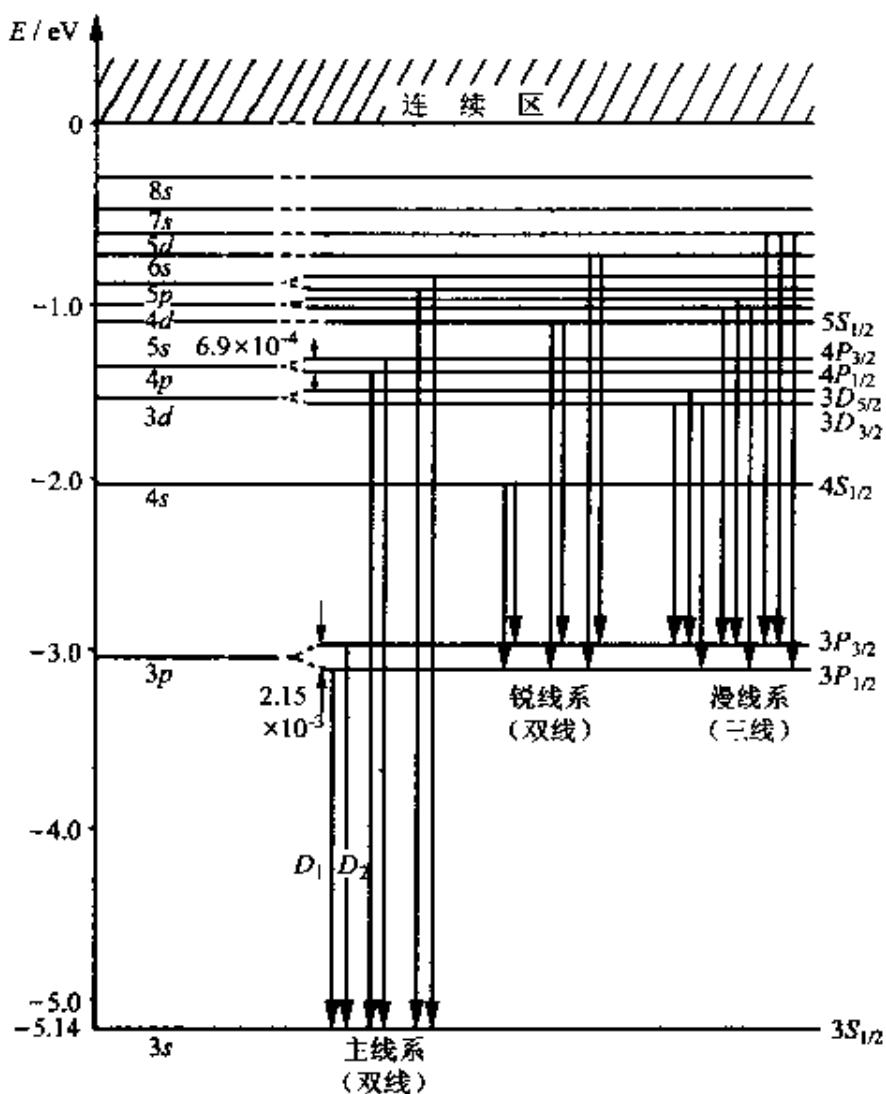
这样, $E_{n,l}$ 这一个能级就分裂成了两个能级($l=0$ 除外),自旋向上(如图 3.13(b))的能级较高,自旋向下(如图 3.13(c))的能级较低。

考虑到自旋轨道耦合,常将原子的状态用 n 的数值、 l 的代号和总角动量量子数 j 的数值(作为下标)表示。如 $l=0$ 的状态记做 $nS_{1/2}$; $l=1$ 的两个可能状态分别记作 $nP_{3/2}, nP_{1/2}$; $l=2$ 的两个可能状态分别记做 $nD_{5/2}, nD_{3/2}$; 等等。图 3.14 中钠原子的基态能级 $3S_{1/2}$ 不分裂, $3P$ 能级分裂为 $3P_{3/2}, 3P_{1/2}$ 两个能级,分别比不考虑自旋轨道耦合时的能级($3P$)大 $\mu_B B$ 和小 $\mu_B B$ 。这样,原来认为钠黄光(D 线)只有一个频率或波长,现在可以看到它实际上是由两种频率很接近的光(D_1 线和 D_2 线)组成的。由于自旋轨道耦合引起的能量差很小(典型值 10^{-5} eV),所以 D_1 和 D_2 的频率或波长差也是很小的,但用较精密的光谱仪还是很容易观察到的。这样形成的光谱线组合叫光谱的精细结构,组成钠黄线的两条谱线的波长分别为 $\lambda_{D_1}=589.592$ nm 和 $\lambda_{D_2}=588.995$ nm。

例 3.3 试根据钠黄线双线的波长求钠原子 $3P_{1/2}$ 态和 $3P_{3/2}$ 态的能量差,并估算在该能级时价电子所感受到的磁场。

解 由于

$$\hbar\nu_{D_1} = \frac{hc}{\lambda_{D_1}} = E_{3P_{1/2}} - E_{3S_{1/2}}$$



$$B = \frac{\Delta E}{2\mu_B} = \frac{3.41 \times 10^{-22}}{2 \times 9.27 \times 10^{-24}} = 18.6 \text{ (T)}$$

这是一个相当强的磁场。

施特恩-格拉赫实验

1924 年泡利 (W. Pauli) 在解释氢原子光谱的精细结构时就引入了量子数 $1/2$, 但是未能给予物理解释。1925 年乌伦贝克 (G. E. Uhlenbeck) 和哥德斯密特 (S. A. Goudsmit) 提出电子自旋的概念, 并给出 (3.19) 式, 指出自旋量子数为 $1/2$, 1928 年狄拉克 (P. A. M. Dirac) 用相对论波动方程自然地得出了电子具有自旋的结论。但在实验上, 1922 年施特恩 (O. Stern) 和格拉赫 (W. Gerlach) 已得出了角动量空间量子化的结果。这一结果只能用电子自旋的存在来解释。

施特恩和格拉赫所用实验装置如图 3.15 所示, 在高温炉中, 银被加热成蒸气, 飞出的银原子经过准直屏后形成银原子束。这一束原子经过异形磁铁产生的不均匀磁场后打到玻璃板上沉积下来。实验结果是在玻璃板上出现了对称的两条银迹。这一结果说明银原子束在不均匀磁场作用下分成了两束, 而这又只能用银原子的磁矩在磁场中只有两个取向来说明。由于原子的磁矩和角动量的方向相同 (或相反), 所以此结果就说明了角动量的空间量子化。实验者当时就是这样下结论的。

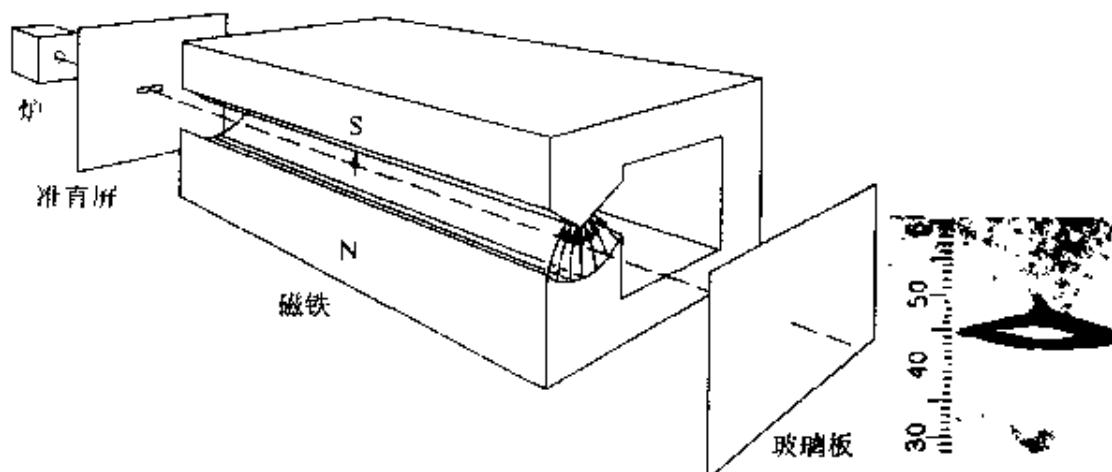


图 3.15 施特恩-格拉赫实验装置简图

后来知道银原子的轨道角动量为零, 其总角动量就是其价电子的自旋角

动量。银原子在不均匀磁场中分为两束就证明原子的自旋角动量的空间量子化,而且这一角动量沿磁场方向的分量只可能有两个值。这一实验结果的定量分析如下。

电子磁矩在磁场中的能量由(3.29)式给出。在不均匀磁场中,电子磁矩会受到磁场力 F_m 的作用,而

$$F_m = -\frac{\partial E_s}{\partial z} = -\frac{d}{dz}(\mp \mu_B B) = \pm \mu_B \frac{dB}{dz} \quad (3.31)$$

此力与磁场增强的方向相同或相反,视磁矩的方向而定,如图 3.16 所示。在此力作用下,银原子束将向相反方向偏折。以 m 表示银原子的质量,则银原子受力而产生的垂直于初速方向的加速度为

$$a = \frac{F_m}{m} = \pm \frac{\mu_B}{m} \frac{dB}{dz}$$



图 3.16 磁矩在不均匀磁场中受的力

(a) 自旋向下; (b) 自旋向上

以 d 表示磁铁极隙的长度,以 v 表示银原子的速度,则可得出两束银原子飞出磁场时的间隔为

$$\Delta z = 2 \times \frac{1}{2} |a| \left(\frac{d}{v} \right)^2 = \frac{\mu_B}{m} \frac{dB}{dz} \left(\frac{d}{v} \right)^2$$

银原子的速度可由炉的温度 T 根据 $v = \sqrt{3kT/m}$ 求得。所以最后可得

$$\Delta z = \frac{\mu_B d^2}{3kT} \frac{dB}{dz} \quad (3.32)$$

实验中求得的 μ_B 值和(3.26)式相符,证明电子自旋概念是正确的。

* 3.3 微观粒子的不可分辨性和 泡利不相容原理

每一种微观粒子,如电子、质子、中子、氘核、 α 粒子等等,各个个体的质量、电荷、自旋等固有性质都是完全相同的,因而是不能区分的。在这一点上经典理论和量子理论的认识是一样的。但二者还有很大的差别。经典理论认为同种粒子虽然不能区分,但是它们在运动中可以识别。这是由于经典粒子在运动中各有一定的确定的轨道,我们可以沿轨道追踪所选定的粒子。例如,粒子 1 和粒子 2 碰撞前后,各有清晰的轨道可寻,因而在碰撞后我们还能认出哪个是碰前的粒子 1,哪个是碰前的粒子 2。量子理论则不同,由于粒子的波动性,它们并没有确定的轨道,两个粒子的“碰撞”必须用波函数的叠加来描述。由于这种“混合”,碰撞后哪个是碰前的粒子 1,哪个是碰前的粒子 2,再也不能识别了。可以说,量子物理对同类微观粒子不能区分的认识,更要“彻底”一些。量子物理把这种不能区分称做**不可分辨性**。

量子理论对微观粒子的不可分辨性的这种认识产生重要的结果。对于有几个粒子组成的系统的波函数必须考虑这种不可分辨性。以在一维势阱中的两个粒子为例。以 x 和 x' 分别表示二者的坐标,它们的波函数应是两个坐标的函数,即

$$\psi = \psi(x, x') \quad (3.33)$$

粒子 1 出现在 dx 区间和粒子 2 出现在 dx' 区间的概率为

$$P_{x,x'} = |\psi(x, x')|^2 dx dx' \quad (3.34)$$

如果将两粒子交换,即粒子 1 出现在 dx' 区间,粒子 2 出现在 dx 区间,则其概率为

$$P_{x',x} = |\psi(x', x)|^2 dx' dx \quad (3.35)$$

由于两个粒子无法分辨,不能识别哪个是粒子 1,哪个是粒子 2,所

以(3.34)式和(3.35)式表示的概率必须相等,即

$$|\psi(x, x')|^2 = |\psi(x', x)|^2 \quad (3.36)$$

于是,两个粒子的波函数必须满足下列条件之一,即

$$\psi(x, x') = \psi(x', x) \quad (3.37)$$

或是

$$\psi(x, x') = -\psi(x', x) \quad (3.38)$$

满足(3.37)式的波函数称为对称的,波函数为对称的粒子叫做玻色子。满足(3.38)式的波函数称为反对称的,波函数是反对称的粒子称为费米子。实验证明,自旋量子数为半整数($1/2, 3/2, 5/2$ 等)的粒子,如电子、质子、中子等是费米子;自旋量子数是0或正整数的粒子,如氘核、氢原子、 α 粒子以及光子等是玻色子。

在应用(3.34)式和(3.35)式时还需注意,要完整地描述粒子的状态,其波函数除了包含空间坐标外,还需要包括自旋。因此在交换坐标 x, x' 时,还需要交换自旋 m_s 和 $m'_{s'}$ 。以电子为例,由于 m_s 和 $m'_{s'}$ 都只能取值 $1/2$ 或 $-1/2$,我们将以“+”号和“-”号分别标记“自旋上”和“自旋下”。这样包含自旋的波函数的反对称性((3.38)式)可进一步表示为

$$\psi(x, x')m_{s,+}m'_{s,-} = -\psi(x', x)m_{s,-}m'_{s,+} \quad (3.39)$$

为了进一步说明这一反对称性的影响,我们假设在一维势阱中的两电子的相互影响可以忽略不计,它们的状态只由势阱的势函数决定。在两个电子都处于同一轨道状态时,它们每个的轨道的波函数相同,用 $\psi_1(x)$ 表示。每个电子的整个波函数(包括自旋)可表示为

$$\psi_1(x)m_{s,+} \quad \text{或} \quad \psi_1(x)m_{s,-}$$

由于两个电子分别出现在 x 和 x' 处的概率为二者概率之积,这个两电子系统的整个波函数可写做

$$\psi(x, x', m_s, m'_{s'}) = \psi_1(x)m_{s,\pm}\psi_1(x')m'_{s,\mp}$$

或几个这样的积的叠加。考虑到反对称要求的(3.38)式,唯一可能

的叠加式是

$$\psi(x, x', m_s, m'_s) = \psi_1(x)\psi_1(x')m_{s+}m'_{s-} - \psi_1(x')\psi_1(x)m_{s-}m'_{s+} \quad (3.40)$$

注意,此式中两个粒子的自旋是相反的。这就是说,在轨道波函数相同(或者说描述轨道运动的量子数都相同)的情况下,电子的自旋必须是相反的,即一个向上($m_s=1/2$),另一个向下($m_s=-1/2$)。于是我们得到一个重要结论:对一个电子系统,如果描述状态的量子数包括自旋磁量子数,则该系统的任何一个确定的状态内不可能有多于一个的电子存在。

上面的论证可用于任何费米子系统的任何状态,所得的上述结论叫不相容原理,它是泡利于1925年研究原子中电子的排布时在理论上提出的。

3.4 各种原子核外电子的排布

对于多电子原子,薛定谔方程不能完全精确地求解,但可以利用近似方法求得足够精确的解。其结果是在原子中每个电子的状态仍可以用 n, l, m_l 和 m_s 四个量子数来确定。主量子数 n 和电子的概率密度分布的径向部分有关, n 越大,电子离核越远。电子的能量主要由 n ,较小程度上由 l ,所决定。一般地, n 越大, l 越大,则电子能量越大。轨道磁量子数 m_l 决定电子的轨道角动量在 z 方向的分量。自旋磁量子数 m_s 决定自旋方向是“向上”还是“向下”,它对电子的能量也稍有影响。由各量子数可能取值的范围可以求出电子以四个量子数为标志的可能状态数分布如下:

n, l, m_l 相同,但 m_s 不同的可能状态有2个。

n, l 相同,但 m_l, m_s 不同的可能状态有 $2(2l+1)$ 个,这些状态组成一个次壳层。

n 相同,但 l, m_l 和 m_s 不同的可能状态有 $2n^2$ 个,这些状态组

成一个壳层。

原子处于基态时，其中各电子各处于一定的状态。这时各电子实际上处于哪个状态，由两条规律决定：

其一是能量最低原理，即电子总处于可能最低的能级；

其二是泡利不相容原理,即同一状态不可能有多于一个电子存在。

元素周期表中各元素是按原子序数 Z 由小到大依次排列的。原子序数就是各元素原子的核中的质子数,也就是正常情况下各元素原子中的核外电子数。各元素的原子在基态时核外电子的排布情况如表 3.2 所示。下面举几个典型例子说明电子排布的规律性。

表 3.2 各元素原子在基态时核外电子的排布

元素 Z	K	L	M	N	O	P	Q	电离能
								/eV
H	1	1						13.5981
He	2	2						24.5868
Li	3	2	1					5.3916
Be	4	2	2					9.322
B	5	2	2 1					8.298
C	6	2	2 2					11.260
N	7	2	2 3					14.534
O	8	2	2 4					13.618
F	9	2	2 5					17.422
Ne	10	2	2 6					21.564
Na	11	2	2 6	1				5.139
Mg	12	2	2 6	2				7.646
Al	13	2	2 6	2 1				5.986
Si	14	2	2 6	2 2				8.151
P	15	2	2 6	2 3				10.486
S	16	2	2 6	2 4				10.360
Cl	17	2	2 6	2 5				12.967
Ar	18	2	2 6	2 6				15.759

续表

元素 Z	K	L	M	N	O	P	Q	电离能 /eV										
	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s
K	19	2	2	6	2	6	1											4.341
Ca	20	2	2	6	2	6	2											6.113
Sc	21	2	2	6	2	6	1	2										6.54
Ti	22	2	2	6	2	6	2	2										6.82
V	23	2	2	6	2	6	3	2										6.74
Cr	24	2	2	6	2	6	5	1										6.765
Mn	25	2	2	6	2	6	5	2										7.432
Fe	26	2	2	6	2	6	6	2										7.870
Co	27	2	2	6	2	6	7	2										7.86
Ni	28	2	2	6	2	6	8	2										7.635
Cu	29	2	2	6	2	6	10	1										7.726
Zn	30	2	2	6	2	6	10	2										9.394
Ga	31	2	2	6	2	6	10	2	1									5.999
Ge	32	2	2	6	2	6	10	2	2									7.899
As	33	2	2	6	2	6	10	2	3									9.81
Se	34	2	2	6	2	6	10	2	4									9.752
Br	35	2	2	6	2	6	10	2	5									11.814
Kr	36	2	2	6	2	6	10	2	6									13.999
Rb	37	2	2	6	2	6	10	2	6	1								4.177
Sr	38	2	2	6	2	6	10	2	6	2								5.693
Y	39	2	2	6	2	6	10	2	6	1	2							6.38
Zr	40	2	2	6	2	6	10	2	6	2	2							6.84
Nb	41	2	2	6	2	6	10	2	6	4	1							6.88
Mo	42	2	2	6	2	6	10	2	6	5	1							7.10
Tc	43	2	2	6	2	6	10	2	6	5	2							7.28
Ru	44	2	2	6	2	6	10	2	6	7	1							7.366
Rh	45	2	2	6	2	6	10	2	6	8	1							7.46
Pd	46	2	2	6	2	6	10	2	6	10								8.33
Ag	47	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1							7.576
Cd	48	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2							8.993
In	49	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	1						5.786
Sn	50	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2						7.344
Sb	51	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	3						8.641
Te	52	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	4						9.01
I	53	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	5						10.457
Xe	54	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	6						12.130

续表

元素 Z	K	L	M	N				O			P			Q		电离能 /eV						
				1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s	
Cs	55	2	2	6	2	6	10	2	6	10				2	6			1				3.894
Ba	56	2	2	6	2	6	10	2	6	10				2	6			2				5.211
La	57	2	2	6	2	6	10	2	6	10				2	6	1		2				5.5770
Ce	58	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1			2	6	1		2				5.466
Pr	59	2	2	6	2	6	10	2	6	10	3			2	6			2				5.422
Nd	60	2	2	6	2	6	10	2	6	10	4			2	6			2				5.489
Pm	61	2	2	6	2	6	10	2	6	10	5			2	6			2				5.554
Sm	62	2	2	6	2	6	10	2	6	10	6			2	6			2				5.631
Eu	63	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7			2	6			2				5.666
Gd	64	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7			2	6	1		2				6.141
Tb	65	2	2	6	2	6	10	2	6	10	(8)			2	6	(1)		(2)				5.852
Dy	66	2	2	6	2	6	10	2	6	10	10			2	6			2				5.927
Ho	67	2	2	6	2	6	10	2	6	10	11			2	6			2				6.018
Er	68	2	2	6	2	6	10	2	6	10	12			2	6			2				6.101
Tm	69	2	2	6	2	6	10	2	6	10	13			2	6			2				6.184
Yb	70	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6			2				6.254
Lu	71	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	1		2				5.426
Hf	72	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	2		2				6.865
Ta	73	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	3		2				7.88
W	74	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	4		2				7.98
Re	75	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	5		2				7.87
Os	76	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	6		2				8.5
Ir	77	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	7		2				9.1
Pt	78	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	9		1				9.0
Au	79	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	10		1				9.22
Hg	80	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	10		2				10.43
Tl	81	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	10		2	1			6.108
Pb	82	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	10		2	2			7.417
Bi	83	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	10		2	3			7.289
Po	84	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	10		2	4			8.43
At	85	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	10		2	5			8.8
Rn	86	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14			2	6	10		2	6			10.749

续表

元素 Z	K	L	M			N			O			P			Q		电离能 /eV			
			1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s
Fr	87	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6	10	2	6	3.8
Ra	88	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6	10	2	6	5.278
Ac	89	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6	1	2	6	5.17
Th	90	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6	2	2	6	6.08
Pa	91	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6	1	2	6	5.89
U	92	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	3	2	6	1	2	6.05
Np	93	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	4	2	6	1	2	6.19
Pu	94	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	6	2	6	2	6	6.06
Am	95	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6	2	6	5.993
Cm	96	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6	1	2	6.02
Bk	97	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	(9)	2	6	(0)(2)	6	6.23
Cf	98	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	(10)	2	6	(0)(2)	6	6.30
Es	99	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	(11)	2	6	(0)(2)	6	6.42
Fm	100	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	(12)	2	6	(0)(2)	6	6.50
Md	101	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	(13)	2	6	(0)(2)	6	6.58
No	102	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	(14)	2	6	(0)(2)	6	6.65
Lw	103	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	(14)	2	6	(1)(2)	6	8.6

*括号内的数字尚有疑问。

氢(H,Z=1) 它的一个电子就在 *K* 壳层($n=1$)内, $m_s = 1/2$ 或 $-1/2$ 。

氦(He,Z=2) 它的两个电子都在 *K* 壳层内, m_s 分别是 $1/2$ 和 $-1/2$ 。*K* 壳层已被填满了。

锂(Li,Z=3) 它的两个电子填满 *K* 壳层, 第三个电子只能进入能量较高的 *L* 壳层($n=2$)的 *s* 次壳层($l=0$)内。这种排布记作 $1s^2 2s^1$, 其中, 数字表示壳层的 n 值, 其后的字母是 n 壳层中次壳层的符号, 指数表示在该次壳层中的电子数。

氖(Ne,Z=10) 电子的排布为 $1s^2 2s^2 2p^6$ 。由于各次壳层的电子都已成对, 所以总自旋角动量为零。又由于 *p* 次壳层都已填满,

所以这一次壳层中电子的轨道角动量在 z 方向的投影的总和为零(参看图 3.2)。又因为 $L_x^2 + L_y^2$ 的时间平均值为零, 所以这一次壳层中电子的总轨道角动量就等于零。这一情况叫做次壳层的闭合。由于这一闭合, 使得氖原子不容易和其他原子结合而成为“惰性”原子。

钠(Na, $Z = 11$) 电子的排布为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ 。由于 3 个内壳层都是闭合的, 而最外的一个电子离核又较远因而受核的束缚较弱, 所以钠原子很容易失去这个电子而与其他原子结合, 例如与氯原子结合。这就是钠原子化学活性很强的原因。

氯(Cl, $Z = 17$) 电子的排布为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ 。 $3p$ 次壳层可以容纳 6 个电子而闭合, 这里已有了 5 个电子, 所以还有一个电子的“空位”。这使得氯原子很容易夺取其他原子的电子来填补这一空位而形成闭合次壳层, 从而和其他原子形成稳定的分子。这使得氯原子也成为化学活性大的原子。

铁(Fe, $Z = 26$) 电子的排布是 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$, 直到 $3p^6$ 的 18 个电子的排布是“正常”的。 d 次壳层可以容纳 10 个电子, 但 $3d$ 壳层还未填满, 最后两个电子就进入了 $4s$ 次壳层。这是由于 $3d^6 4s^2$ 的排布的能量比 $3d^8$ 排布的能量还要低的缘故。这种排布的“反常”对电子较多的原子是常有的现象。可以附带指出, 铁的铁磁性就和这两个 $4s$ 电子有关。

银(Ag, $Z = 47$) 电子的排布是 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1$ 。这一排布中, 除了 $4f(l = 3)$ 次壳层似乎“应该”填入而没有填入, 而最后一个电子就填入了 $5s$ 次壳层这种“反常”现象外, 可以注意到已填入电子的各次壳层都已闭合, 因而它们的总角动量为零, 而银原子的总角动量就是这个 $5s$ 电子的自旋角动量。在施特恩-格拉赫实验中, 银原子束的分裂能说明电子自旋的量子化就是这个缘故。

* 3.5 X 射 线

X 射线是 1895 年伦琴(W. K. Rontgen)发现的。它是一种电磁波,频率约在 3×10^{16} Hz 到 3×10^{20} Hz 之间。由于其穿透能力强,在医疗检查和工业探伤等方面已有广泛的应用。图 3.17 是一种近代 X 射线管简图,其正负极间的电压通常有几万伏。当电子由阴极发出被此高电压加速而撞到作为阳极的靶上时,从靶上就会射出 X 射线。

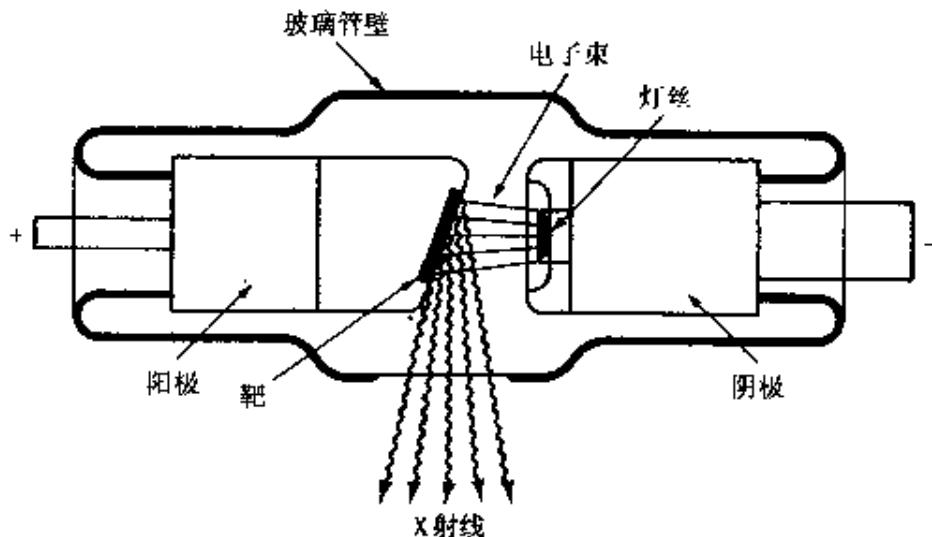


图 3.17 X 射线管简图

X 射线的波长可以用衍射的方法测出。图 3.18 是 X 射线谱的两个实例。图(a)是在同样电压(35 kV)下不同靶材料(钨、钼、铬)发出的 X 射线谱,图(b)是同一种靶材料(钨)在不同电压下发射的 X 射线谱。从图中可看出,X 射线谱一般分为两部分:连续谱和线状谱。不同电压下的连续谱都有一个截止波长(或频率),电压越高,截止波长越短,而且在同一电压下不同材料发出的 X 射线的截止波长一样。线状谱有明显的强度峰——谱线,不同材料的谱线的位置(即波长)不同,这谱线就叫各种材料的特征谱线(钨和铬

的特征谱线波长在图 3.18(a) 所示的波长范围以外)。

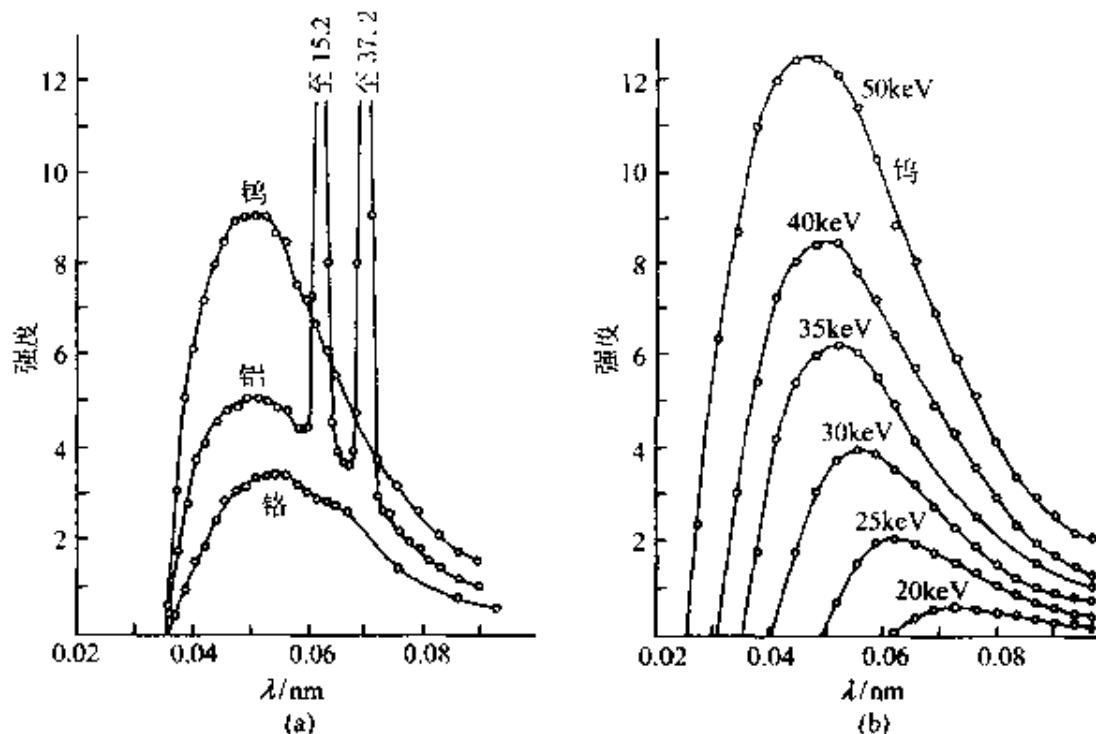


图 3.18 X 射线谱

X 射线连续谱是电子和靶原子非弹性碰撞的结果, 这种产生 X 射线的方式叫 **轫致辐射**。入射电子经历每一次碰撞都会损失一部分能量, 这能量就以光子的形式发射出去。由于每个电子可能经历多次碰撞, 每一次碰撞损失的能量又可能大小不同, 所以就辐射出各种能量不同的光子而形成连续谱。由于电子所损失的能量的最大值就是电子本身从加速电场获得的能量, 所以发出的光子的最大能量也就是这个能量。因此在一定的电压下发出的 X 射线的频率有一极大值。相应地, 波长有一极小值, 这就是截止波长。以 E_k 表示射入靶的电子的动能, 则有 $h\nu_{\max} = E_k$ 。由此可得截止波长为

$$\lambda_{\text{cut}} = \frac{c}{\nu_{\max}} = \frac{hc}{E_k} \quad (3.41)$$

例如, 当 $E_k = 35 \text{ keV}$ 时, 上式给出 $\lambda_{\text{cut}} = 0.036 \text{ nm}$, 和图 3.18 所给

的相符。

X 射线特征谱线只能和可见光谱一样, 是原子能级跃迁的结果。但是由于 X 射线光子能量比可见光光子能量大得多, 所以不可能是原子中外层电子能级跃迁的结果, 但可以用内层电子在不同壳层间的跃迁来说明。然而在正常情况下, 原子的内壳层都已为电子填满, 由泡利不相容原理可知, 电子不可能再跃入。在这里, 加速电子的碰撞起了关键的作用。加速电子的碰撞有可能将内壳层(如 K 壳层)的电子击出原子, 这样便在内壳层留下一个空穴。这时, 较外壳层的电子就有可能跃迁入这一空穴而发射出能量较大的光子。以 K 壳层为例, 填满时有两个电子。其中一个电子所感受到的核的库仑场, 由于另一电子的屏蔽作用, 就约相当于 $Z - 1$ 个质子的库仑场。仿类氢离子的能量公式, 此壳层上一个电子的能量应为

$$E_1 = -\frac{m_e(Z-1)^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13.6(Z-1)^2 \text{ eV} \quad (3.42)$$

同理, 在 L 壳层内一个电子的能量为

$$E_2 = -\frac{13.6(Z-1)^2}{4} \text{ eV}$$

因此, 当 K 壳层出现一空穴而 L 层一个电子跃迁进入时, 所发出的光子的频率为

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{3 \times 13.6(Z-1)^2}{4h} = 2.46 \times 10^{15}(Z-1)^2$$

或者

$$\sqrt{\nu} = 4.96 \times 10^7(Z-1) \quad (3.43)$$

这一公式称为莫塞莱公式。

频率由(3.43)式给出的谱线称为 K_{α} 线。由于多电子原子的内层电子结构基本上是一样的, 所以各种序数较大的元素的原子的 K_{α} 线都可由(3.43)式给出。这一公式说明, 不同元素原子的 K_{α}

线的频率的平方根和元素的原子序数成线性关系。这一线性关系已为实验所证实,如图 3.19 所示。

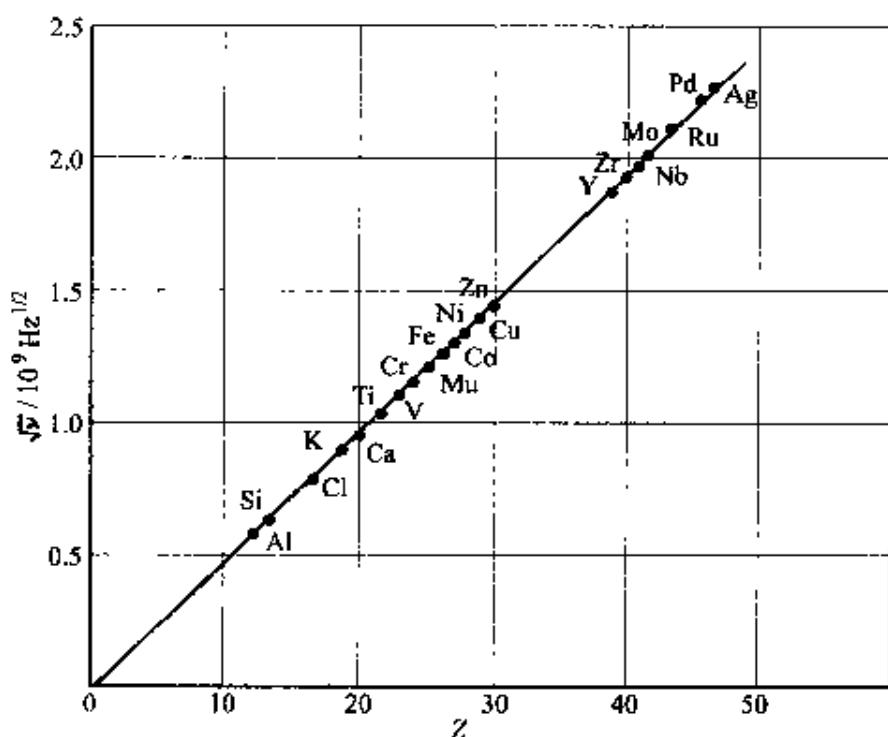


图 3.19 K_{α} 线的频率和原子序数的关系

由 M 壳层($n=3$)电子跃入 K 壳层空穴形成的 X 射线叫 K_{β} 线。 K_{α}, K_{β} 和更外的壳层跃入 K 壳层空穴形成的诸谱线组成 X 射线的 K 系,由较外壳层跃入 L 壳层的空穴形成的谱线组成 L 系。类似地还有 M 系、 N 系等。实际上,由于各壳层(K 壳层除外)的能级分裂,各系的每条谱线都还有较精细的结构。图 3.20 给出了铀(U)的 X 射线能级及跃迁图。

1913 年莫塞莱(H. G. J. Moseley)仔细地用晶体测定了近 40 种元素的原子的 X 射线的 K 线和 L 线,首次得出了(3.43)式。当年玻尔发表了他的氢原子模型理论。这使得莫塞莱可以得出下述结论:“我们已证实原子有一个基本量,它从一个元素到下一个元素有规律地递增。这个量只能是原子核的电量。”当年由他准确测定的 Z 值曾校验了当时周期表中各元素的排序。至今超铀元素的

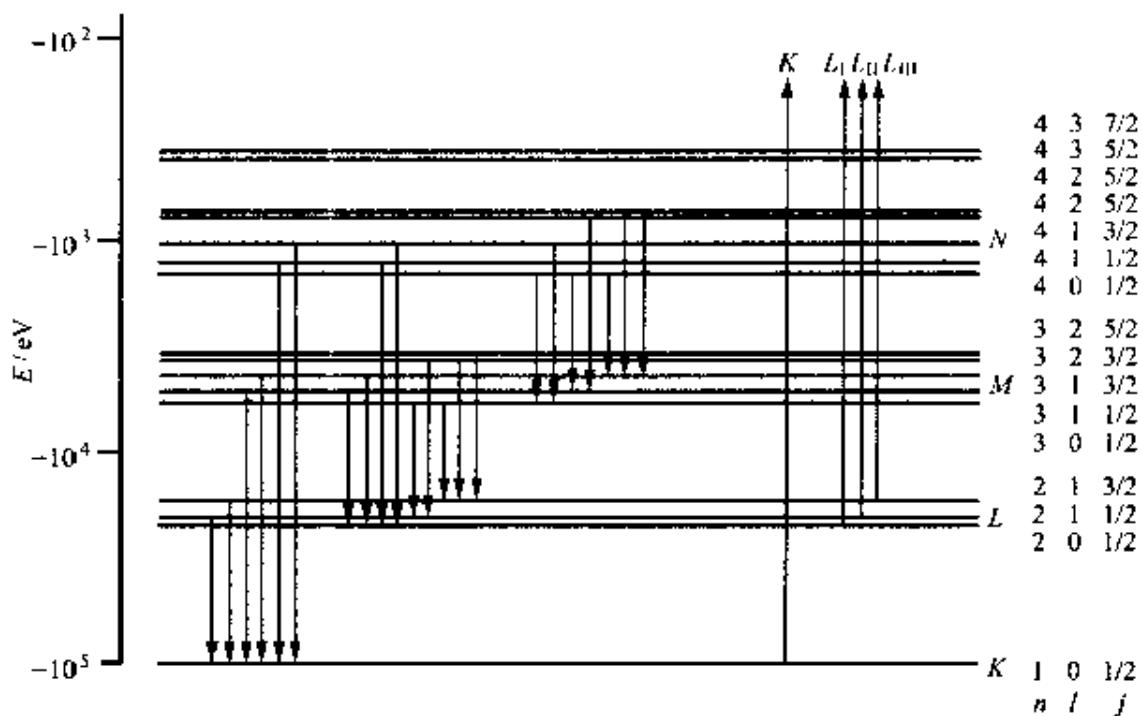


图 3.20 U 原子的 X 射线能级图

认定也靠足够量的这些元素的 X 射线谱。

3.6 激 光

激光现今已得到了极为广泛的应用。从光缆的信息传输到光盘的读写, 从视网膜的修复到大地的测量, 从工件的焊接到热核反应的引发等等都利用了激光。“激光”是“受激辐射的光放大”的简称^①。第一台激光器是 1960 年休斯飞机公司实验室的梅曼 (T. H. Maiman) 首先制成的, 在此之前的 1954 年哥伦比亚大学的唐斯 (C. H. Townes) 已制成了受激辐射的微波放大装置。但是, 它的基本原理早在 1916 年已由爱因斯坦提出了。

^① 激光的英文为 laser, 它是 light amplification by stimulated emission of radiation 一词的首字母缩略词。

激光是怎么产生的?它有哪些特点?为什么有这些特点呢?下面通过氦氖激光器加以说明。

氦氖激光器的主要结构如图 3.21 所示,玻璃管内充有氦气(压强为 1 mmHg ^①)和氖气(压强为 0.1 mmHg)。所发激光是氖原子发出的,波长为 632.8 nm 的红光,它是氖原子由 $5s$ 能级跃迁到 $3p$ 能级的结果。

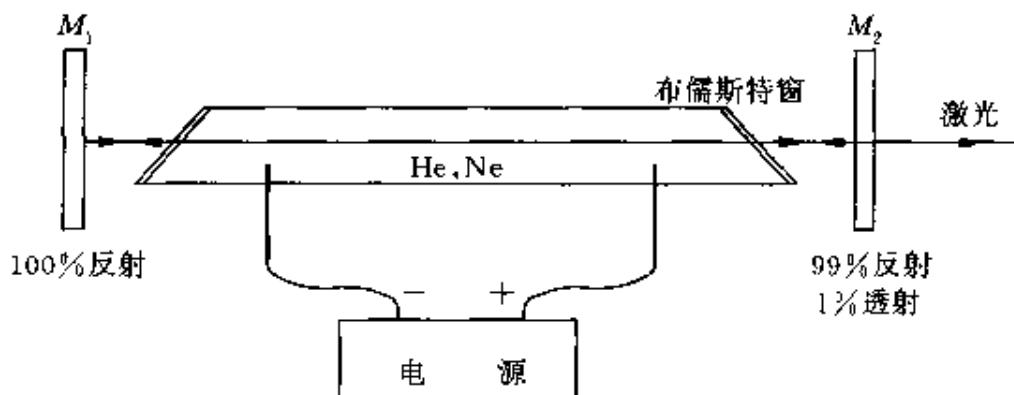


图 3.21 氦氖激光器结构简图

处于激发态的原子(或分子)是不稳定的。经过或长或短的时间(例如 10^{-8} s)会自发地跃迁到低能级上,同时发出一个光子。这种辐射光子的过程叫**自发辐射**(图 3.22(a))。相反的过程,光子射入原子内可能被吸收而使原子跃迁到较高的能级上去(图 3.22(b))。不论发射和吸收,所涉及的光子的能量都必须满足玻尔频率条件 $\hbar\nu = E_h - E_l$ 。爱因斯坦在研究黑体辐射时,发现辐射场和原子交换能量时,只有自发辐射和吸收是不可能达到热平衡的。要达到热平衡,还必须存在另一种辐射方式——**受激辐射**。它指的是,如果入射光子的能量等于相应的能级差,而且在高能级上有原子存在,入射光子的电磁场就会引发原子从高能级跃迁到低能级

① $1 \text{ mm Hg} = 133 \text{ Pa}$ 。

上,同时放出一个与入射光子的频率、相位、偏振方向和传播方向都完全相同的光子(图 3.22(c))。在一种材料中,如果有-一个光子引发了一次受激辐射,就会产生两个相同的光子。这两个光子如果都再遇到类似的情况,就能够产生 4 个相同的光子。由此可以产生 8 个、16 个……为数不断倍增的光子,这就可以形成“光放大”。看来,只要有一个适当的光子入射到给定的材料内就可以很容易地得到光放大了,其实不然。

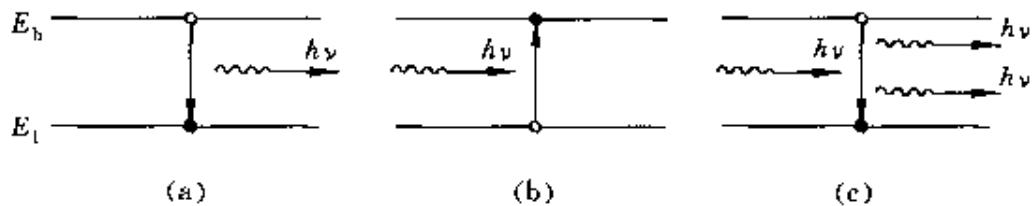


图 3.22 自发辐射(a)、吸收(b)和受激辐射(c)

这里还有原子数的问题。在正常情况下,在高能级 \$E_h\$ 上的原子数 \$N_h\$ 总比在低能级 \$E_l\$ 上的原子数 \$N_l\$ 小得多。它们的比值由玻耳兹曼关系决定,即

$$\frac{N_h}{N_l} = e^{-(E_h - E_l)/kT} \quad (3.44)$$

以氮氛激光器为例,在室温热平衡的条件下,相应于激光波长 632.8 nm 的两能级上氮原子数的比为

$$\begin{aligned} \frac{N_h}{N_l} &= e^{-(E_h - E_l)/kT} = \exp\left(-\frac{hc}{\lambda kT}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{632.8 \times 10^{-9} \times 1.38 \times 10^{-23} \times 300}\right) = e^{-76} \\ &= 10^{-33} \end{aligned}$$

这一极小的数值说明 \$N_h \ll N_l\$。爱因斯坦理论指出原子受激辐射的概率和吸收的概率是相同的。因此,合适的光子入射到处于正常状

态的材料中,主要的还是被吸收而不可能发生光放大现象。

如上所述,要想实现光放大,必须使材料处于一种“反常”状态,即 $N_h > N_l$ 。这种状态叫粒子数布居反转^①。要想使处于正常状态的材料转化为这种状态,必须激发低能态的原子使之跃迁到高能态,而且在高能态有较长的“寿命”。激发的方式有光激发、碰撞激发等方式。氦氖激光器的激发方式是碰撞激发。氦原子和氖原子的有关能级如图 3.23 所示。氦原子的 $2s$ 能级(20.61 eV)和氖原子的 $5s$ 能级(20.66 eV)非常接近,当激光管加上电压后,管内产生电子流,运动的电子和氦原子的碰撞可使之升到 $2s$ 能级上。处于此激发态的氦原子和处于基态($2p$)的氖原子相碰时,就能将能量传给氖原子使之达到 $5s$ 态。氦原子的 $2s$ 态和氖原子的 $5s$ 态的寿命相对地较长(这种状态叫亚稳态),而氖原子的 $3p$ 态的寿命很短。这一方面保证了氖原子有充分的激发能源,同时由于处于 $3p$ 态的氖原子很快地由于自发辐射而减少,所以就实现了氖原子在 $5s$ 态和 $3p$ 态之间的粒子数布

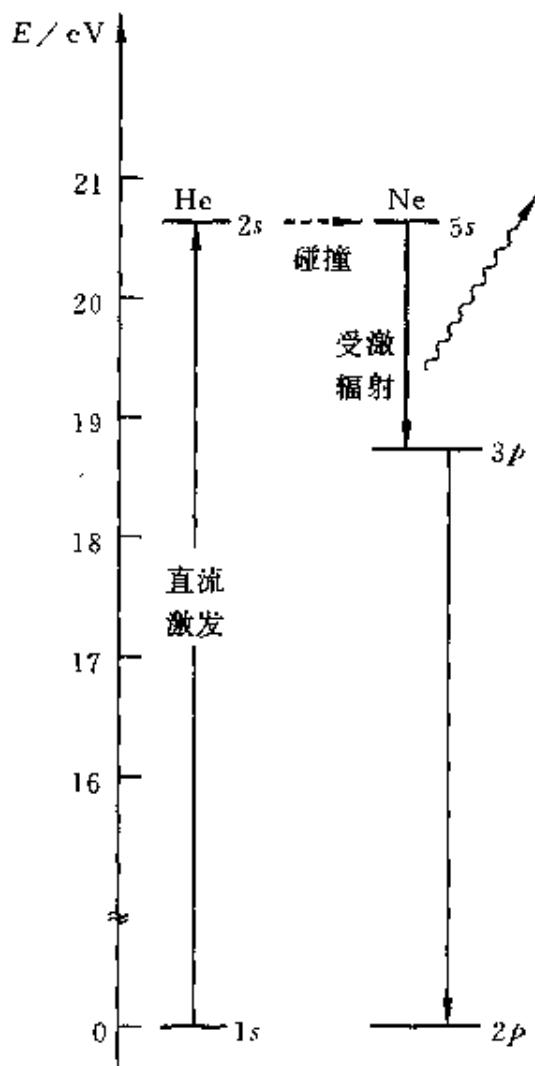


图 3.23 氦氖能级图

^① 由(3.44)式可知,在 $N_h > N_l$ 的情况下, $T < 0$ 。这是一个可以用负热力学温度描述状态的一个例子。

居反转，从而为光放大提供了必要条件^①。一旦有一个光子由于氛原子从 $5s$ 态到 $3p$ 态的自发辐射而产生，这种光将由于不断的受激辐射而成倍地急剧增加。在激光器两端的平面镜（或凹面镜） M_1 和 M_2 （见图 3.21）的反射下，光子来回穿行于激光管内，这更增大了加倍的机会从而产生很强的光。这光的一部分从稍微透射的镜 M_2 射出就成了实际应用的激光束。

由于受激辐射产生的光子频率与偏振方向都相同，所以经放大后的激光束，不管光束截面多大，都是完全相干的。普通光源发的光是不相干的，所发光的强度是各原子发的光的非相干叠加，因而和原子数成正比。激光发射时，由于各原子发的光是相干的，其强度是各原子发的光的相干叠加，因而和原子数的平方成正比。由于光源内原子数很大，因而和普通光源发的光相比，激光光强可以大得惊人。例如经过会聚的激光强度可达 10^{17} W/cm^2 ，而氧炔焰的强度不过 10^3 W/cm^2 。针头大的半导体激光器的功率可达 200 mW（现已制造出纳米级的半导体激光器），连续功率达 1 kW 的激光器已经制成，而用于热核反应实验的激光器的脉冲平均功率已达 10^{14} W （这大约是目前全世界所有电站总功率的 100 倍），可以产生 10^8 K 的高温以引发氘-氚燃料微粒发生聚变。

在图 3.21 中，激光是在两面反射镜 M_1 和 M_2 之间来回反射的。作为电磁波，激光将在 M_1, M_2 之间形成驻波，驻波的波长和 M_1, M_2 之间的距离是有确定关系的。在实际的激光器中 M_1, M_2 之间的距离都已调至和所发出激光波长严格地相对应，其他波长的光不能形成驻波因而不能加强。在激光器稳定工作时，激光由于来回反射过程中的受激辐射而得到的加强，即能量增益，和各种能量损耗正好相等，因而使激光振幅保持不变。这相当于无限长的波

^① 现在有人正在研究不用粒子数布居反转就能产生激光的机制。一种非受激辐射的自由电子激光已经制成，见“今日物理趣闻 A 自由电子激光。”

列,因而所发出的激光束就可能是高度单色性的。普通氖红光的单色性($\Delta\nu/\nu$)不过 10^{-6} ,而激光则可达到 10^{-15} 。这种单色性有重要的应用,例如可以准确地选择原子而用在单原子探测中。

图3.21中的两个反射镜都是与激光管的轴严格垂直的,因此只有那些传播方向与管轴严格平行的激光才能来回反射得到加强,其他方向的光线经过几次反射就要逸出管外。因此由 M_2 透出的激光束将是高度“准直”的,即具有高度的方向性,其发散角一般在 $1'$ ([角]分)以下。这种高度的方向性被用来作精密长度测量。例如曾利用月亮上的反射镜对激光的反射来测量地月之间的距离,其精度达到几个厘米。

现在利用反馈可使激光的频率保持非常稳定,例如稳定到 2×10^{-12} 甚至 10^{-14} (这相当于每年变化 10^{-7} s!)这种稳定激光器可以用来极精密地测量光速,以致在1983年国际计量大会上利用光速值来规定“米”的定义:1 m就是在 $(1/299\ 792\ 458)$ s内光在真空中传播的距离。

除了固定波长的激光器外,还有可调激光器。它们通常用化学染料做工作物质,可以在一定范围内调节输出激光的频率。这种激光器也有多方面的应用,其中一个应用是制成消多普勒饱和分光仪,可消除多普勒效应对光谱线的影响,从而研究光谱的超精细结构。

消多普勒饱和分光仪

光源内发光原子的无规则运动对原子所发光子的频率会发生多普勒效应,从而使频率的不确定度增大,相应的光谱线会展宽。谱线的展宽会掩盖光谱的精细结构而妨碍对原子结构更精细的研究。为了消除多普勒效应的影响,设计了一种消多普勒饱和分光仪,其结构简图如图3.24所示。图中 L 是一可调激光器,它发出的光经过分束器 M (半镀银玻璃板)分为两束。一束叫探测束 P ,可射入探测器 D ;另一束叫致饱和束 S 。这两束分别经过 M_1 和 M_2

反射后沿相反方向通过吸收盒 A, 盒内装有谱线待测的样品。致饱和束经过斩波器 C 被周期性地遮断。当致饱和束被遮断时, 探测束频率如果和样品某光谱线频率相同, 则被共振吸收, 探测器将收不到信号。当致饱和束被斩波器放过, 再被反射通过样品时, 它将被共振吸收从而导致样品的相应低能级上的原子都跃迁到高级上去而低能级被腾空, 探测束射过来就不能再被吸收。这时接收器将接收到最大强度的光强。但要注意, 能够这样对方向相反的两束光都共振吸收的原子只能是那些沿光束方向速度为零的原子。对沿光束方向速度不为零的原子, 相反方向射来的同样频率的激光, 将因多普勒效应而具有不同的频率, 因此不能同时发生共振, 而接收器接收的光强也就不会有明显的变化。这样两束方向相反的激光就选出了那些速度为零的原子, 它们的共振吸收不再受多普勒效应的影响, 而相应的谱线变得非常细, 以致频率差很小的两条谱线也能区别开来。调节入射激光的频率, 就可在探测器的光强记录上相应的极大处得到样品的线状谱。

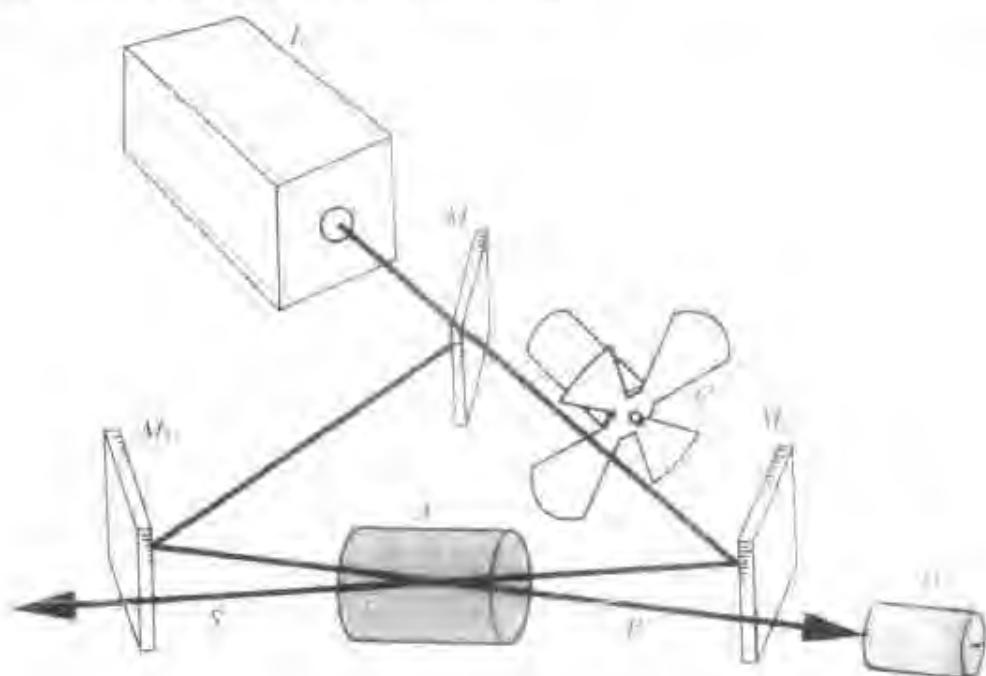


图 3.24 俏多普勒饱和分光仪

利用俏多普勒饱和分光仪第一次清楚地观察到了氢原子光谱的精细结构和超精细结构。如图 3.25 所示, 图(a)的曲线表示氢原子巴耳末系 H_α (由 $n=3$ 上跃迁到 $n=2$ 态发出) 线的光强分布, 它只能大致地显示精细结构。这精细结构是

电子自旋轨道耦合的结果。量子电动力学给出,由于核自旋、相对论效应以及量子涨落效应, H_α 谱线还应包含由图中其他竖线表示的光谱线。在一般的分光计中这些谱线就被淹没到精细结构的谱线宽度以内而分辨不出来了。利用消多普勒饱和分光仪得出的氢原子光谱 H_α 线附近的强度分布如图(b)所示。它清楚地显示了量子电动力学的理论结果。图(a)中 b, c 两谱线的频率差是有名的兰姆移位,其频率差为 1.05×10^9 Hz,而波长差仅为 1.5 pm。

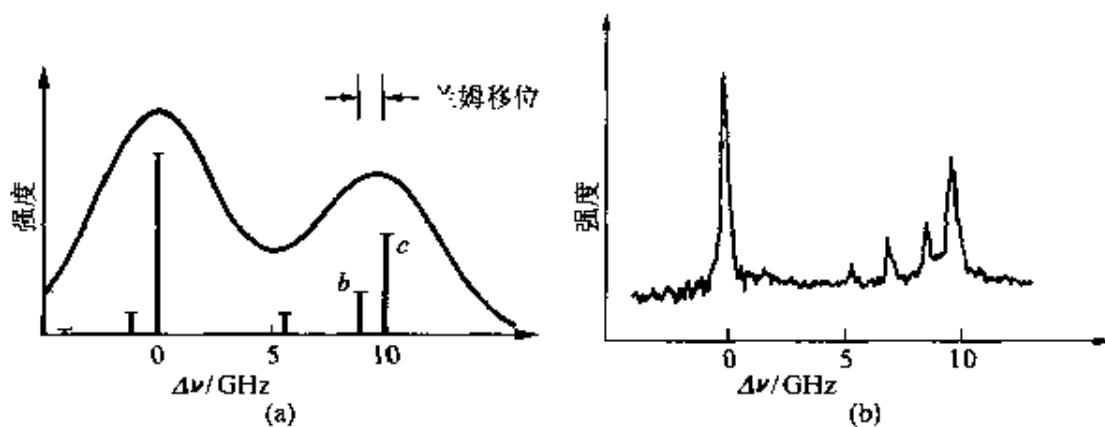


图 3.25 氢原子 H_α 线的精细结构与超精细结构

* 3.7 分子的转动和振动能级

由两个或更多的原子组成的分子,其能量不仅决定于每个原子中电子的状态,而且和整个分子的转动与振动状态有关。作为粗略模型,分子可以想象为用弹簧联系在一起的许多小球,这些小球就是一个个原子核(或原子实),而弹簧就是电子,这些电子的存在和运动就产生了分子中原子之间的相互作用力。每个原子的电子状态一定时,“弹簧”的劲度系数就有一定的值。这时分子的能量除了由电子的状态决定的能量外,还有分子转动和分子内原子的振动所决定的能量。

分子的转动能量可计算如下。以 I 表示分子绕通过自己的质心的轴的转动惯量,而以 $J = I\omega$ 表示其角动量,则转动能量为

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{J^2}{2I}$$

分子的角动量也遵守量子化规律, 即

$$J = \sqrt{j(j+1)} \hbar, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

式中 j 是转动量子数。将此 J 值代入上一式, 可得分子的转动能级为

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} j(j+1) \hbar^2, \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (3.45)$$

和此式对应的能级图如图 3.26 所示。

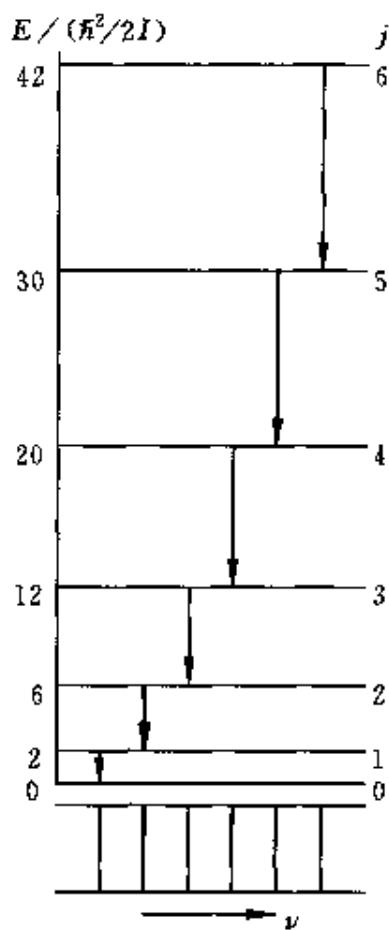


图 3.26 转动能级及光谱图

转动能量的大小可粗略地估计如下。以双原子分子为例。如图 3.27 所示, 以 M 表示每个原子的质量, 它们到其质心的距离粗略地按玻尔半径 a_0 计, 则 $I = 2Ma_0^2$, 而转动能量约为

$$E_{\text{rot}} \approx \frac{j(j+1)}{4Ma_0^2} \hbar^2$$

对低转动能级来说,

$$E_{\text{rot}} \approx \frac{\hbar^2}{Ma_0^2}$$

对于基态的氢原子, 由(3.3)式和(3.5)式可得

$$|E_{\text{H},1}| = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}$$

由此可得

$$E_{\text{rot}} \approx \frac{m_e}{M} |E_{\text{H},1}| \quad (3.46)$$

对大多数原子来说 m_e/M 约为 10^4 或 10^5 , 因此, 转动能量的典型值约是 $|E_{\text{H},1}|$ 的 10^{-4} 或 10^{-5} , 即约 $10^{-3} \sim 10^{-4}$ eV。

分子转动能级的改变需遵守选择定则

$$\Delta j = \pm 1 \quad (3.47)$$

于是, 由于分子转动能级的改变, 所能发出的光子的频率为

$$\nu_{\text{rot}} = \frac{E_{j+1} - E_j}{h} = \frac{\hbar}{2\pi I} (j+1), \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (3.48)$$

由(3.46)式所表示的数量级的关系, 可知转动光谱的典型频率较电子能量改变而产生的光谱的典型频率小到 10^{-4} , 或波长大到 10^4 倍, 因而转动光谱在远红外甚至延伸到微波范围。从图 3.26 中还可以看出转动光谱中各谱线以频率表示时都是等间距的。

例 3.4 求 NO 分子的转动光谱的最大波长。设 NO 分子中两原子的间距为 $r_0 = 0.11 \text{ nm}$ 。

解 如图 3.26 所示, NO 分子的转动光谱的最大波长应是分子从 $j = 1$ 跃迁到 $j = 0$ 状态时所发出的光子的波长, 所以

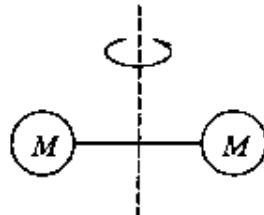


图 3.27 双原子分子的转动

$$\lambda_{\max} = \frac{ch}{E_{\text{rot},1} - E_{\text{rot},0}} = \frac{ch}{\hbar^2/I} = \frac{2\pi c}{\hbar} I = \frac{2\pi c}{\hbar} (mr_0^2)$$

式中 $I = mr_0^2$, 而 m 应为 NO 两原子的约化质量, 即 $m = m_N m_O / (m_N + m_O)$, 因而

$$\begin{aligned}\lambda_{\max} &= \frac{2\pi c m_N m_O}{\hbar(m_N + m_O)} r_0^2 \\ &= \frac{2\pi \times 3 \times 10^8 \times 14 \times 16 \times (1.66 \times 10^{-27})^2}{1.05 \times 10^{-34} (14 + 16) \times 1.66 \times 10^{-27}} \\ &\quad \times (0.11 \times 10^{-9})^2 \\ &= 2.7 \times 10^{-3} (\text{m}) = 2.7 (\text{mm})\end{aligned}$$

此波长在微波范围。

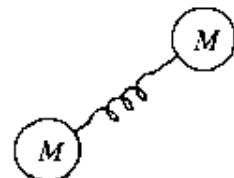


图 3.28 双原子分子模型

分子的振动光谱, 以双原子分子(图 3.28)为例, 其振动能量是

$$E_{\text{vib}} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0, \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad (3.49)$$

其中 ω_0 是振动角频率, v 是振动量子数。此式给出的能级图是等间距的, 如图 3.29 所示。(对于较大的 v 值, 分子间的势能函数不再是抛物线型, 能级的间距将随 v 的增大而减小。)

可如下粗略地估计分子的振动能量。对图 3.28 的双原子分子的振动来说, 由弹簧振子的能量公式, 有

$$E_{\text{vib}} = \frac{1}{2} M \omega_0^2 A^2 \times 2 = M \omega_0^2 A^2$$

式中 M 为一个原子的质量, A 为原子的振幅, 此处就粗略地认为 $A = a_0$, 所以有

$$E_{\text{vib}} = M \omega_0^2 a_0^2$$

由于振动能量等于最大势能, 而这最大势能就取分别带有 $+e$ 和 $-e$ 的两

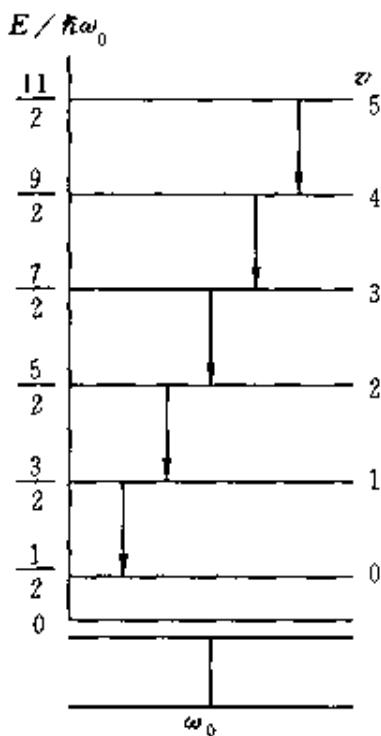


图 3.29 分子振动能级和光谱图

个原子相距为 a_0 时的静电势能,于是有

$$M\omega_0^2 a_0^2 \approx \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} = |E_{H,1}| = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}$$

由此可导出

$$\hbar^2 \omega_0^2 = \frac{m_e \hbar^4}{2m_e^2 a_0^4 M} \approx m_e E_{H,1}^2 / M$$

因而

$$\hbar \omega_0 \approx \sqrt{\frac{m_e}{M}} |E_{H,1}| \quad (3.50)$$

由于 $m_e/M \approx 10^{-4}$ 或 10^{-5} , 所以

$$\begin{aligned} \hbar \omega_0 &\approx 10^{-2} |E_{H,1}| \\ &\approx 10^{-1} \text{ eV} \text{ 或 } 10^{-2} \text{ eV} \end{aligned}$$

由于振动能级之间的跃迁需遵守选择定则

$$\Delta v = \pm 1 \quad (3.51)$$

所以振动光谱谱线只有一条,其频率可由(3.50)式大致估算,在红外范围。

实际上,分子既有转动,又有振动,其总机械能为

$$E_{\text{mech}} = E_{\text{rot}} + E_{\text{vib}} \quad (3.52)$$

由于 $E_{\text{vib}} \gg E_{\text{rot}}$, 每一振动状态总会包含许多转动状态,其总的能级图如图 3.30 所示,其中也画出了分子的可能跃迁以及所产生的谱线系。图 3.31 是 HCl 的吸收光谱(HCl 分子也只吸收那些它能发出的频率的光子)。

对分子来说,由于 $\Delta E_{\text{rot}} \ll \Delta E_{\text{vib}}$, 所以在同一振动能级跃迁所产生的光谱实际上是由很多密集的由转动能级跃迁所产生的谱线组成的。分辨率不大的分光镜不能分辨这些谱线而会形成连续的谱带。有这种谱带出现的转动和振动合成的光谱就叫带状谱,图 3.32 就是 N₂ 的带状光谱的例子。

分子光谱是分子内部结构的反映,因此,研究分子光谱可以获

得关于分子内部情况的信息，帮助人们了解分子的结构。分子光谱是研究分子结构，特别是有机分子的结构的非常重要的手段。

如果将分子内的电子能级 E_{elec} 一并考虑，则分子的总能量为

$$E = E_{elec} + E_{vib} + E_{rot} \quad (3.53)$$

等号右边三项的大小不同，如图 3.33 所示。如果电子能级也发生变化，则分子发生的光的频率为

$$\nu = \nu_{elec} + \nu_{vib} + \nu_{rot} \quad (3.54)$$

由于和 ν_{elec} 相比， ν_{vib} 和 ν_{rot} 都很小，所以当观察到由第一项所显示的谱线系时，后两项实际上就分辨不出了。这时，观察到的光谱在可见光范围，称为分子的光学光谱。

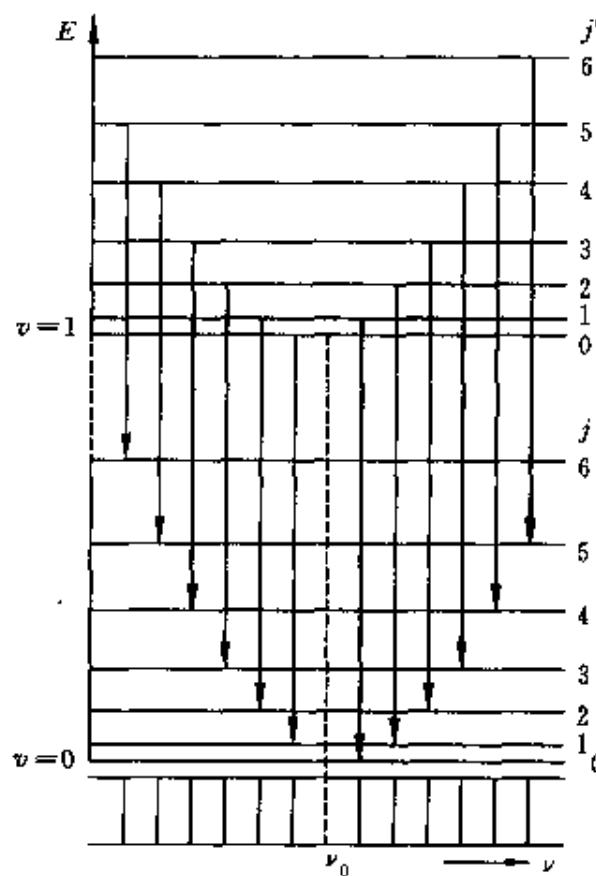


图 3.30 分子的转动能级和振动能级总图
(转动能级已被大大放大了)

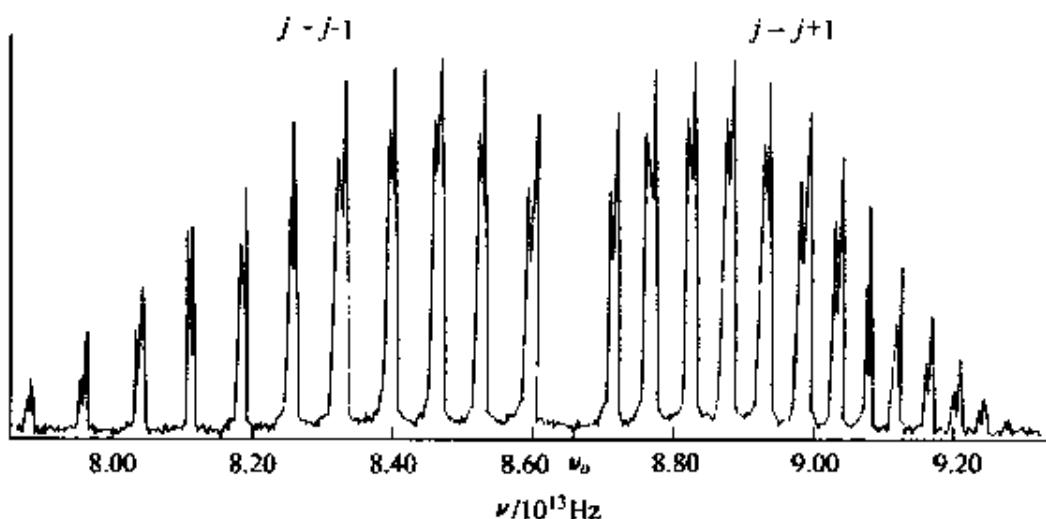


图 3.31 HCl 的吸收光谱(高峰由于 H^{35}Cl ，
低峰由于 H^{37}Cl)

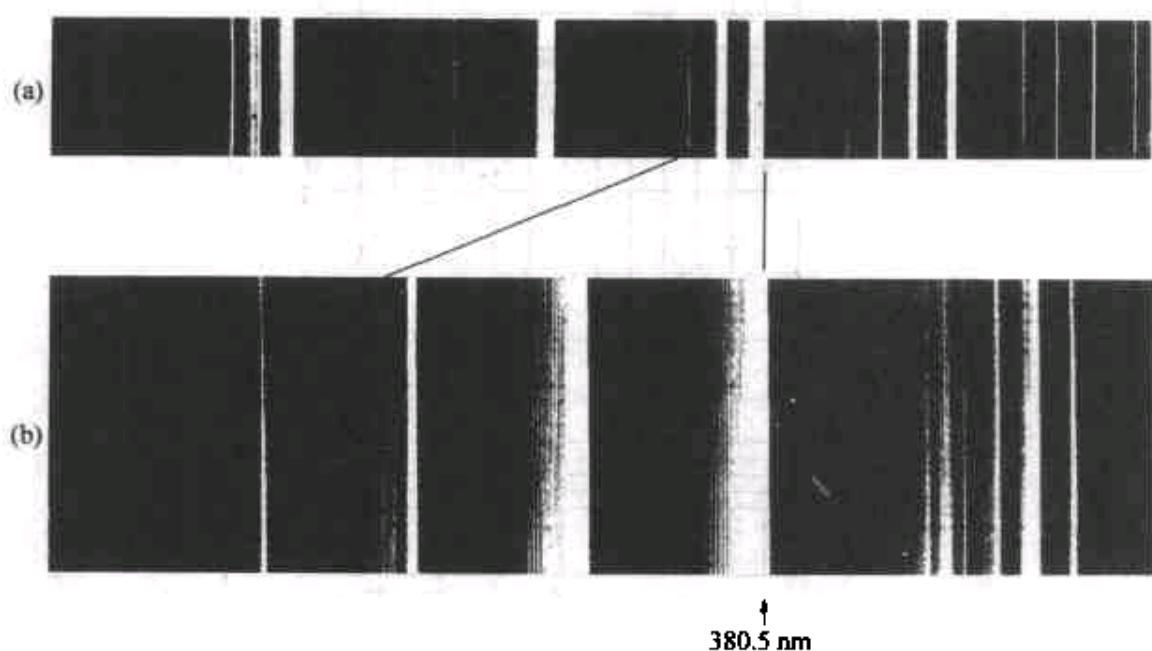


图 3.32 N_2 的带状谱(a)及其局部放大(b)

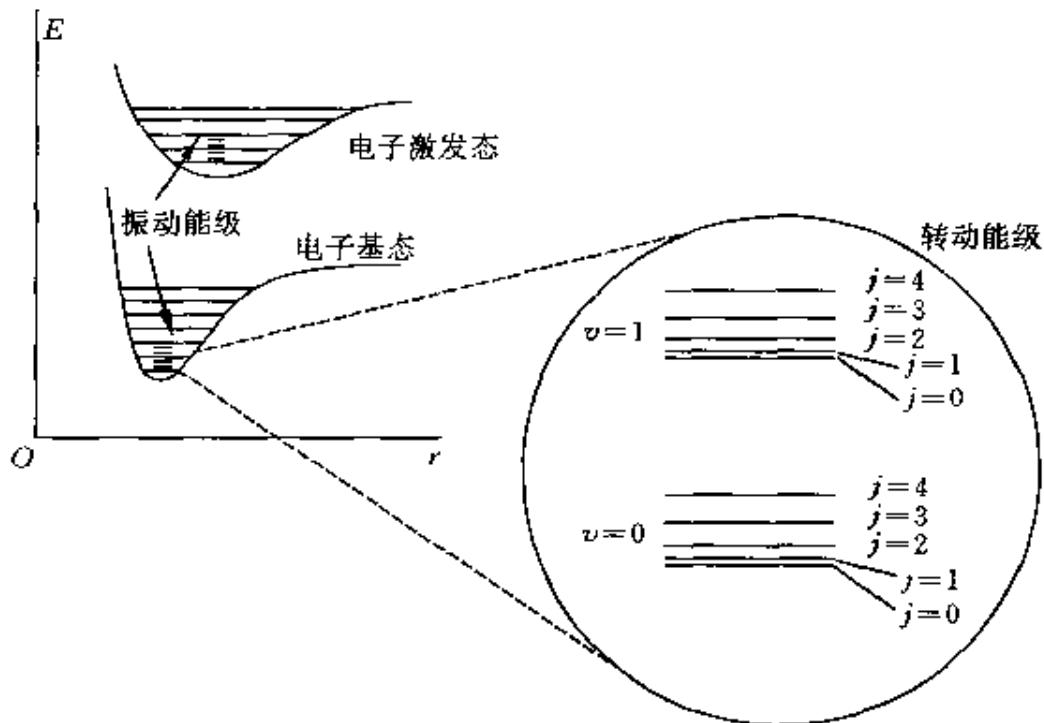


图 3.33 分子的总能级图

提 要

1. 氢原子：由薛定谔方程得到 3 个量子数：

主量子数 $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

轨道量子数 $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$

轨道磁量子数 $m_l = -l, -(l - 1), \dots, 0, 1, \dots, l$

氢原子能级：

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{2(4\pi\epsilon_0)a_0} \frac{1}{n^2} = -13.6 \times \frac{1}{n^2}$$

玻尔频率条件： $h\nu = E_b - E_i$

轨道角动量： $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$

轨道角动量沿某特定方向（如磁场方向）的分量：

$$L_z = m_l \hbar$$

原子内电子的运动不能用轨道描述,只能用波函数给出的概率密度描述,形象化地用电子云图来描绘。

简并态: 能量相同的各个状态。

径向概率密度 $P(r)$: 在半径为 r 和 $r + dr$ 的两球面间的体积内电子出现的概率为 $P(r)dr$ 。

* 单价原子中核外电子的能量也和 l 有关。

2. 电子的自旋与自旋轨道耦合

电子自旋角动量是电子的内禀性质。它的大小是

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar$$

s 是电子的自旋量子数, 只有一个值, 即 $1/2$ 。

电子自旋在空间某一方向的投影为

$$S_z = m_s \hbar$$

m_s 只有 $1/2$ (向上) 和 $-1/2$ (向下) 两个值, 叫自旋磁量子数。

轨道角动量和自旋角动量合成的角动量 J 的大小为

$$J = |L + S| = \sqrt{j(j+1)} \hbar$$

j 为总角动量量子数, 可取值为 $j = l + \frac{1}{2}$ 和 $j = l - \frac{1}{2}$ 。

$$\text{玻尔磁子: } \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T}$$

电子自旋磁矩在磁场中的能量: $E_s = \mp \mu_B B$

自旋轨道耦合使能级分裂, 产生光谱的精细结构。

*3. 微观粒子的不可分辨性: 在同种粒子组成的系统中, 在各状态间交换粒子并不产生新的状态。由此可知粒子分为两类: 玻色子(波函数是对称的, 自旋量子数为 0 或整数)和费米子(波函数是反对称的, 自旋量子数为半整数)。电子是费米子。

4. 多电子原子中电子的排布

电子的状态用 4 个量子数 n, l, m_l, m_s 确定。 n 相同的状态组成

一壳层，可容纳 $2n^2$ 个电子； l 相同的状态组成一次壳层，可容纳 $2(2l + 1)$ 个电子。

基态原子中电子排布遵循两个规律：

(1) 能量最低原理，即电子总处于可能最低的能级。一般地说， n 越大， l 越大，能量就越高。

(2) 泡利不相容原理，即同一状态（四个量子数 n, l, m_l, m_s 都已确定）不可能有多于一个电子存在。

*5. X 射线：X 射线谱有连续谱和线状谱之分。

连续谱是入射高能电子与靶原子发生非弹性碰撞时发出——轫致辐射。截止波长由入射电子的能量 E_k 决定，即

$$\lambda_{\text{cut}} = hc/E_k$$

线状谱为靶元素的特征谱线，它是由靶原子中的电子在内壳层间跃迁时发出的光子形成的。这需要入射电子将内层电子击出而产生空穴。以 Z 表示元素的原子序数，则这种元素的 X 射线的 K_α 谱线的频率 ν 由下式给出：

$$\sqrt{\nu} = 4.96 \times 10^7 (Z - 1)$$

6. 激光：激光由原子的受激辐射产生，这需要在发光材料中造成粒子数布居反转状态。

激光是完全相干的，光强和原子数的平方成正比，所以光强可以非常大。

激光器两端反射镜之间的距离控制其间驻波的波长，因而激光有极高的单色性。

激光器两端反射镜严格与管轴垂直，使得激光具有高度的指向性。

*7. 分子的转动和振动能级

分子的转动能级：

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} j(j + 1) \hbar^2, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

大小约为 10^{-3} eV 或 10^{-4} eV, 转动光谱在远红外甚至微波范围。

分子的振动能级

$$E_{\text{vb}} = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0, \quad v = 0, 1, 2, \dots$$

大小约为 10^{-1} eV 或 10^{-2} eV, 振动光谱在红外区。

振动和转动能级同时发生跃迁时产生的分子光谱为带状谱。

思 考 题

3.1 为什么说原子内电子的运动状态用轨道来描述是错误的?

3.2 什么是能级的简并?若不考虑电子自旋,氢原子的能级由什么量子数决定?

*3.3 钾原子的价电子的能级由什么量子数决定?为什么?

3.4 1966年用加速器“制成”了反氢原子,它是由一个反质子和围绕它运动的正电子组成。你认为它的光谱和氢原子的光谱会完全相同吗?

3.5 $n = 3$ 的壳层内有几个次壳层,各次壳层都可容纳多少个电子?

3.6 证明按经典模型,电子绕质子沿半径为 r 的圆轨道上运动时能量应为 $E_{\text{class}} = -e^2/(4\pi\epsilon_0)r$ 。将此式和(3.4)式对比,说明可能的轨道半径和 n^2 成正比。

*3.7 施特恩-格拉赫实验中,如果银原子的角动量不是量子化的,会得到什么样的银迹?又为什么两条银迹不能用轨道角动量量子化来解释?

3.8 处于基态的 He 原子的两个电子的各量子数各是什么值?

*3.9 在保持 X 射线管的电压不变的情况下,将银靶换为铜靶,所产生的 X 射线的截止波长和 K_α 线的波长将各有何变化?

*3.10 光子是费米子还是玻色子?它遵守泡利不相容原理吗?

3.11 什么是粒子数布居反转?为什么说这种状态是负热力学温度的状态?

3.12 为了得到线偏振光,就在激光管两端安装一个玻璃制的“布儒斯特窗”(见图 3.21),使其法线与管轴的夹角为布儒斯特角。为什么这样射出的光就是线偏振的?光振动沿哪个方向?

3.13 分子的电子能级、振动能级和转动能级在数量级上有何差别?带光谱是怎么产生的?

3.14 为什么在常温下,分子的转动状态可以通过加热而改变,因而分子转动和气体比热有关?为什么振动状态却是“冻结”着而不能改变,因而对气体比热无贡献?电子能级也是“冻结”着吗?

习 题

3.1 求氢原子光谱莱曼系的最小波长和最大波长。

3.2 一个被冷却到几乎静止的氢原子从 $n = 5$ 的状态跃迁到基态时发出的光子的波长多大?氢原子反冲的速度多大?

3.3 证明:氢原子的能级公式也可以写成

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \frac{1}{n^2}$$

或

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \frac{1}{n^2}$$

3.4 证明 $n = 1$ 时,(3.4)式所给出的能量等于经典图象中电子围绕质子做半径为 a_0 的圆周运动时的总能量。

3.5 1884 年瑞士的一所女子中学的教师巴耳末仔细研究氢原子光谱的各可见光谱线的“波数” $\tilde{\nu}$ (即 $1/\lambda$) 时,发现它们可以用下式表示:

$$\tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

其中 R 为一常量,叫里德伯常量。试由氢原子的能级公式求里德伯常量的表达式并求其值(现代光谱学给出的数值是 $R = 1.097\ 373\ 153\ 4 \times 10^7\ \text{m}^{-1}$)。

3.6 电子偶素的原子是由一个电子和一个正电子围绕它们的共同质心转动形成的。设想这一系统的总角动量是量子化的,即 $L_s = n\hbar$,用经典理论计算这一原子的最小可能圆形轨道的半径多大?当此原子从 $n = 2$ 的轨道跃迁到 $n = 1$ 的轨道上时,所发出的光子的频率多大?

3.7 原则上讲,玻尔理论也适用于太阳系:太阳相当于核,万有引力相当于库仑电力,而行星相当于电子,其角动量是量子化的,即 $L_s = n\hbar$,而且其

运动服从经典理论。

(1) 求地球绕太阳运动的可能轨道的半径的公式;

(2) 地球运行轨道的半径实际上是 1.50×10^{11} m, 和此半径对应的量子数 n 是多少?

(3) 地球实际运行轨道和它的下一个较大的可能轨道的半径相差多少?

3.8 天文学家观察远处星系的光谱时,发现绝大多数星系的原子光谱谱线的波长都比观察到的地球上的同种原子的光谱谱线的波长长。这个现象就是红移,它可以用多普勒效应解释。在室女座外面一星系射来的光的光谱中发现有波长为 411.7 nm 和 435.7 nm 的两条谱线。

(1) 假设这两条谱线的波长可以由氢原子的两条谱线的波长乘以同一因子得出,它们相当于氢原子谱线的哪两条谱线?相乘因子多大?

(2) 按多普勒效应计算,该星系离开地球的退行速度多大?

3.9 处于激发态的原子是不稳定的,经过或长或短的时间 Δt (Δt 的典型值为 1×10^{-8} s) 就要自发地跃迁到较低能级上而发出相应的光子。由海森伯不确定关系(1.34)式可知,在激发态的原子的能级 E 就有一个相应的不确定值 ΔE ,这又使得所发出的光子的频率有一不确定值 $\Delta\nu$ 而使相应的光谱线变宽。此 $\Delta\nu$ 值叫做光谱线的自然宽度。试求电子由激发态跃迁回基态时所发出的光形成的光谱线的自然宽度。

*3.10 由于多普勒效应,氢放电管中发出的各种单色光都不是“纯”(单一频率)的单色光,而是具有一定的频率范围,因而使光谱线有一定的宽度。如果放电管的温度为 300 K,试估算所测得的 H_α 谱线(频率为 4.56×10^{14} Hz)的频率范围多大?

3.11 证明,就氢原子基态来说,电子的径向概率密度((3.12)式)对 r 从 0 到 ∞ 的积分等于 1。这一结果具有什么物理意义?

*3.12 求氢原子处于基态时,电子离原子核的平均距离 \bar{r} 。

*3.13 求氢原子处于基态时,电子的库仑势能的平均值,并由此计算电子动能的平均值。若按经典力学计算,电子的方均根速率多大?

*3.14 氢原子的 $n = 2, l = 1$ 和 $m_l = 0, +1, -1$ 三个状态的电子的波函数分别是

$$\psi_{2,1,0}(r, \theta, \varphi) = (1/4\sqrt{2\pi})(a_0^{-3/2})(r/a_0)e^{-r/2a_0}\cos\theta$$

$$\psi_{2,1,1}(r,\theta,\varphi) = (1/8\sqrt{\pi})(a_0^{-3/2})(r/a_0)e^{-r/2a_0}\sin\theta e^{i\varphi}$$

$$\psi_{2,1,-1}(r,\theta,\varphi) = (1/8\sqrt{\pi})(a_0^{-3/2})(r/a_0)e^{-r/2a_0}\sin\theta e^{-i\varphi}$$

(1) 求每一状态的概率密度分布 $P_{2,1,0}$, $P_{2,1,1}$ 和 $P_{2,1,-1}$ 并和图 3.5(b), (c) 对比验证。

(2) 说明这三状态的概率密度之和是球对称的。

(3) 证明 $P_{2,1,0}$ 对全空间积分等于 1, 即

$$P = \int P_{2,1,0} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} |\psi_{2,1,0}|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = 1$$

并说明其物理意义。

3.15 求在 $l=1$ 的状态下, 电子自旋角动量与轨道角动量之间的夹角。

3.16 由于自旋轨道耦合效应, 氢原子的 $2P_{3/2}$ 和 $2P_{1/2}$ 的能级差为 4.5×10^{-5} eV。

(1) 求莱曼系的最小频率的两条精细结构谱线的频率差和波长差。

(2) 氢原子处于 $n=2, l=1$ 的状态时, 其中电子感受到的磁场多大?

3.17 求银原子在外磁场中时, 它的角动量和外磁场方向的夹角以及磁场能。设外磁场 $B = 1.2$ T。

*3.18 在施特恩 - 格拉赫实验中, 磁极长度为 4.0 cm, 其间垂直方向的磁场梯度为 1.5 T/mm。如果银炉温度为 2500 K, 求:

(1) 银原子在磁场中受的力;

(2) 玻璃板上沉积的两条银迹的距离。

3.19 在 1.60 T 的磁场中悬挂一小瓶水, 今加以交变电磁场通过共振吸收可使水中质子的自旋反转。已知质子的自旋磁矩沿磁场方向的分量的大小为 1.41×10^{-26} J/T, 设分子内本身产生的局部磁场和外加磁场相比可以忽略, 求所需的交变电磁场的频率多大? 波长多长?

3.20 证明: 在原子内,

(1) n, l 相同的状态最多可容纳 $2(2l+1)$ 个电子;

(2) n 相同的状态最多可容纳 $2n^2$ 个电子。

3.21 写出硼(B, $Z=5$), 氩(Ar, $Z=18$), 铜(Cu, $Z=29$), 溴(Br, $Z=35$) 等原子在基态时的电子排布式。

*3.22 用能量为 30 keV 的电子产生的 X 射线的截止波长为 0.041 nm,

试由此计算普朗克常量值。

*3.23 要产生 0.100 nm 的 X 射线, X 光管所要加的电压最小应多大?

*3.24 40 keV 的电子射入靶后经过 4 次碰撞而停止。设经过前 3 次碰撞每次能量都减少一半, 则所能发出的 X 射线的波长各是多大?

*3.25 某元素的 X 射线的 K_{α} 线的波长为 3.16 nm 。

(1) 该元素原子的 L 壳层和 K 壳层的能量差是多少?

(2) 该元素是什么元素?

*3.26 铜的 K 壳层和 L 壳层的电离能分别是 8.979 keV 和 0.951 keV 。铜靶发射的 X 射线入射到 NaCl 晶体表面在掠射角为 74.1° 时得到第一级衍射极大, 这衍射是由于钠离子散射的结果。求平行于晶体表面的钠离子平面的间距是多大?

3.27 CO_2 激光器发出的激光波长为 $10.6 \mu\text{m}$ 。

(1) 和此波长相应的 CO_2 的能级差是多少?

(2) 温度为 300 K 时, 处于热平衡的 CO_2 气体中在相应的高能级上的分子数是低能级上的分子数的百分之几?

(3) 如果此激光器工作时其中 CO_2 分子在高能级上的分子数比低能级上的分子数多 1% , 则和此粒子数布居反转对应的热力学温度是多少?

3.28 现今激光器可以产生的一个光脉冲的延续时间只有 10 fs ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$)。这样一个光脉冲中有几个波长? 设光波波长为 500 nm 。

3.29 一脉冲激光器发出的光波长为 694.4 nm 的脉冲延续时间为 12 ps , 能量为 0.150 J 。求:(1) 该脉冲的长度;(2) 该脉冲的功率;(3) 一个脉冲中的光子数。

3.30 GaAlAs 半导体激光器的体积可小到 $200 \mu\text{m}^3$ (即 $2 \times 10^{-7} \text{ mm}^3$), 但仍能以 5.0 mW 的功率连续发射波长为 $0.80 \mu\text{m}$ 的激光。这一小激光器每秒发射多少光子?

3.31 一氯离子激光器发射的激光束截面直径为 3.00 mm , 功率为 5.00 W , 波长为 515 nm 。使此束激光沿主轴方向射向一焦距为 3.50 cm 的凸透镜, 透过后在一毛玻璃上焦聚, 形成一衍射中心亮斑。(1) 求入射光束的平均强度多大?(2) 求衍射中心亮斑的半径多大?(3) 衍射中心亮斑占有全部功率的 84% , 此中心亮斑的强度多大?

*3.32 氧分子的转动光谱相邻两谱线的频率差为 $8.6 \times 10^{10} \text{ Hz}$, 试由此

求氧分子中两原子的间距。已知氧原子的质量为 $2.66 \times 10^{-26} \text{ kg}$ 。

*3.33 将氢原子看作球形电子云裹着质子的球，球半径为玻尔半径。试估计氢分子绕通过两原子中心的轴转动的第一激发态的转动能量，这一转动能量对氢气的比热有无贡献？

*3.34 CO 分子的振动频率为 $6.42 \times 10^{13} \text{ Hz}$ 。求它的两原子间相互作用力的等效劲度系数。

在哥本哈根大学学习期间，玻尔参加了丹麦皇家学会组织的优秀论文竞赛，题目是测定液体的表面张力，他提交的论文获丹麦科学院金质奖章。玻尔作为一名才华出众的物理系学生和一名著名的足球运动员而蜚声全校。

1911年玻尔获哥本哈根大学哲学博士学位，论文是有关金属电子论的。由于玻尔别具一格的认真，此时他已开始领悟到了经典电动力学在描述原子现象时所遇到的困难。

获得博士学位后，玻尔到了剑桥大学，希望在电子的发现者汤姆孙的指导下，继续他的电子论研究，然而汤姆孙已对这个课题不感兴趣。不久他转到曼彻斯特卢瑟福实验室工作。在这里，他和卢瑟福之间建立了终身不渝的友谊，并且奠定了他在物理学上取得伟大成就的基础。

1913年，玻尔回到哥本哈根，开始研究原子辐射问题。在受到巴耳末公式的启发后，他把作用量子引入原子系统，写成了长篇论文《论原子和分子结构》，并由卢瑟福推荐分三部分发表在伦敦皇家学会的《哲学杂志》上。后来人们称玻尔的这三部分论文为“三部曲”。论文的第一部分着重阐述有关辐射的发射和吸收，以及氢原子光谱的规律。大家熟悉的原子的稳定态，发射和吸收时的频率条件及角动量量子化条件就是在这一部分提出来的。第二和第三部分的标题分别是单原子核系统和多原子核系统，这两部分着重阐述原子和分子的结构。玻尔在论文中对比氢原子重的原子得出了正确的结论，提出了原子结构和元素性质相对应的论断。对于放射现象，玻尔认为，如果承认卢瑟福的原子模型，就只能得出一个结论，即 α 射线和 β 粒子都来自原子核，并给出了每放射一个 α 粒子或 β 粒子时原子结构的相应的变化规律。玻尔在论文最后做总述时，归纳了自己的假设，这就是著名的玻尔假设。当时以及后来的实验都证明了玻尔关于原子、分子的理论是正确的。

论文发表后，引起了物理学界的注意。1916年，玻尔在进一步研究的基础上，提出了“对应原理”，指出经典行为和量子的关系。

1920年，丹麦理论物理研究所（现名玻尔研究所）建成，在玻尔领导下，研究所成了吸引年轻物理学家研究原子和微观世界的中心。海森伯、泡利、狄拉克、朗道等许多杰出的科学家都先后在这里工作过。

玻尔不断完善自己的原子论，他的开创性工作，加上1925年泡利提出的不相容原理，从根本上揭示了元素周期表的奥秘。

此后，德布罗意、海森伯、玻恩、约旦、狄拉克、薛定谔等人成功地创立了

量子力学，海森伯提出了不确定性关系，玻尔提出了“并协原理”，物理学取得了巨大进展。同时也引起了一场争论，特别是爱因斯坦和玻尔之间的争论持续了将近30年之久，争论的焦点是关于不确定性关系。爱因斯坦对于带有不确定性的任何理论，都是反对的，他说：“……从根本上说，量子理论的统计表现是由于这一理论所描述的物理体系还不完备。”他认为，玻尔还没有研究到根本上，反而把不完备的答案当成了根本性的东西。他相信，只要掌握了所有的定律，一切活动都是可以预言的。争论中，他提出不同的“假想实验”以实现对微观粒子的位置和动量或时间和能量进行准确的测量，结果都被玻尔理论所否定。然而爱因斯坦还是不喜欢玻尔提出的理论。在争论的基础上，玻尔写成了两部著作：《原子理论和对自然的描述》、《原子物理学和人类的知识》，分别在1931年和1958年出版。

在20世纪30年代中期，量子物理转向研究核物理，1936年玻尔发表了《中子的俘获及原子核的构成》一文，提出了原子核液滴模型。1939年和惠勒共同发表了关于原子核裂变力学机制的论文。在发现链式反应后，玻尔继续完善他的原子核分裂的理论。

二次世界大战期间，玻尔参加了制造原子弹的曼哈顿计划，但他坚决反对使用原子弹。

1952年欧洲核子研究中心成立，玻尔任主席。

玻尔一生中获得了许多荣誉、奖励和头衔，享有崇高的威望。1922年由于他对原子结构和原子放射性的研究获诺贝尔物理奖。

物理学与现代技术

II 激光冷却与捕陷原子

获得低温是长期以来科学家所刻意追求的一种技术。它不但给人类带来实惠,例如超导的发现与研究,而且为研究物质的结构与性质创造了独特的条件。例如在低温下,分子、原子热运动的影响可以大大减弱,原子更容易暴露出它们的“本性”。以往低温多在固体或液体系统中实现,这些系统都包含着有较强的相互作用的大量粒子。20世纪80年代,借助于激光技术获得了中性气体分子的极低温(例如, 10^{-10} K)状态,这种获得低温的方法就叫激光冷却。

激光冷却中性原子的方法是汉斯(T. W. Hänsch)和肖洛(A. L. Schawlow)于1975年提出的,80年代初就实现了中性原子的有效减速冷却。这种激光冷却的基本思想是:运动着的原子在共振吸收迎面射来的光子(图 I. 1)后,从基态过渡到激发态,其动量就减小,速度也就减小了。速度减小的值为

$$-\Delta v = \frac{h\nu}{Mc} \quad (I. 1)$$

处于激发态的原子会自发辐射出光子而回到初态,由于反冲会得到动量。此后,它又会吸收光子,又自发辐射出光子。但应注意的是,它吸收的光子来自同一束激光,方向相同,都将使原子动量减小。但自发辐射出的光子的方向是随机的,多次自发辐射平均下来并不增加原子的动量。这样,经过多次吸收和自发辐射之后,原子的速度就会明显地减小,而温度也就降低了。实际上一般原子一秒钟可以吸收发射上千万个光子,因而可以被有效地减速。对冷却钠原子的波长为589 nm的共振光而言,这种减速效果相当于10万倍的重力加速度!由于这种减速实现时,必须考虑入射光子对运动原子的多普勒效应,所以这种减速就叫多普勒冷却。

由于原子速度可正可负,就用两束方向相反的共振激光束照射原子

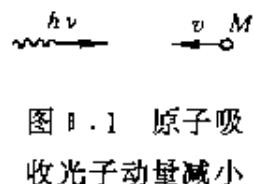


图 I. 1 原子吸收光子动量减小

(图 I. 2)。这时原子将优先吸收迎面射来的光子而达到多普勒冷却的结果。

实际上,原子的运动是三维的。1985年贝尔实验室的朱棣文小组就用三对方向相反的激光束分别沿 x , y , z 三个方向照射钠原子(图 I. 3),在 6 束激光交汇处的钠原子团就被冷却下来,温度达到了 $240 \mu\text{K}$ 。

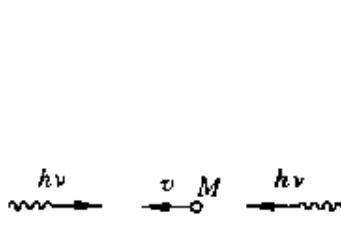


图 I. 2 用方向相反的两束激光照射原子

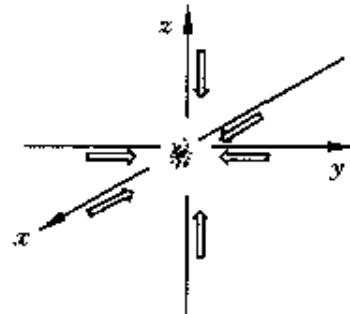


图 I. 3 三维激光冷却示意图

理论指出,多普勒冷却有一定限度(原因是入射光的谱线有一定的自然宽度),例如,利用波长为 589 nm 的黄光冷却钠原子的极限为 $240 \mu\text{K}$,利用波长为 852 nm 的红外光冷却铯原子的极限为 $124 \mu\text{K}$ 。但研究者们进一步采取了其他方法使原子达到更低的温度。1995 年达诺基小组把铯原子冷却到了 2.8 nK 的低温,朱棣文等利用钠原子喷泉方法曾捕集到温度仅为 24 pK 的一群钠原子。

在朱棣文的三维激光冷却实验装置中,在三束激光交汇处,由于原子不断吸收和随机发射光子,这样发射的光子又可能被邻近的其他原子吸收,原子和光子互相交换动量而形成了一种原子光子相互纠缠在一起的实体。低速的原子在其中无规则移动而无法逃脱。朱棣文把这种实体称做“光学粘团”,这是一种捕获原子使之集聚的方法。更有效的方法是利用“原子阱”,这是利用电磁场形成的一种“势能坑”,原子可以被收集在坑内存起来。一种原子阱叫“磁阱”,它利用两个平行的电流方向相反的线圈构成(图 I. 4)。这种阱中心的磁场为零,向四周磁场不断增强。陷在阱中的原子具有磁矩,在中心时势能最低。偏离中心时就会受到不均匀磁场的作用力而返回。这种阱曾捕获 10^{12} 个原子,捕陷时

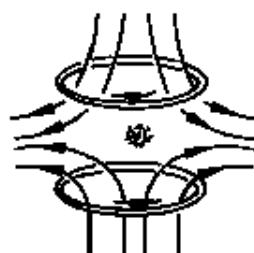


图 I. 4 磁阱

间长达 12 min。除了磁阱外，还有利用对射激光束形成的“光阱”和把磁阱、光阱结合起来的磁-光阱。

激光冷却和原子捕陷的研究在科学上有很重要的意义。例如，由于原子的热运动几乎已消除，所以得到宽度近乎极限的光谱线，从而大大提高了光谱分析的精度，也可以大大提高原子钟的精度。最使物理学家感兴趣的是它使人们观察到了“真正的”玻色-爱因斯坦凝聚。这种凝聚是玻色和爱因斯坦分别于 1924 年预言的，但长期未被观察到。这是一种宏观量子现象，指的是宏观数目的粒子（玻色子）处于同一个量子基态。它实现的条件是粒子的德布罗意波长大于粒子的间距。在被激光冷却的极低温度下，原子的动量很小，因而德布罗意波长较大。同时，在原子阱内又可捕获足够多的原子，它们的相互作用很弱而间距较小，因而可能达到凝聚的条件。1995 年果真观察到了 2000 个铷原子在 170 nK 温度下和 5×10^5 个钠原子在 2 μK 温度下的玻色-爱因斯坦凝聚。

朱棣文 (S. Chu)、达诺基 (C. C. Tannoudji) 和菲利浦斯 (W. D. Phillips) 因在激光冷却和捕陷原子研究中的出色贡献而获得了 1997 年诺贝尔物理奖，其中朱棣文是第五位获得诺贝尔奖的华人科学家。



A 自由电子激光

自由电子激光是利用自由电子为工作媒质产生的强相干辐射，它的产生机理不同于原子内束缚电子的受激辐射。自由电子激光的概念是梅第 (J. Maday)于 1971 年在他的博士论文中首次提出的，并在 1976 年和他的同事们在斯坦福大学实现了远红外自由电子激光，观察到了 $10.6 \mu\text{m}$ 波长的光放大。自那以后，许多国家都开展了关于自由电子激光的理论和实验研究。目前已做到 ps(皮秒)级自由电子激光脉冲，平均功率密度可达 10^7 W/m^2 ，峰值功率可达 GW 数量级。

自由电子激光的基本原理是通过自由电子和辐射的相互作用，电子将能量转送给辐射而使辐射强度增大。下面较具体地介绍一种利用扭摆磁铁(又叫波荡器)产生自由电子激光的原理。

如图 A. 1 所示，一组扭摆磁铁可以沿 z 方向产生周期性变化的磁场，磁场方向沿 y 方向。由加速器提供的高速电子束(流速接近光速)经偏转磁铁导引进入这一扭摆磁场。电子受此磁场的作用，将在 xz 平面内摇摆前进。这一摇摆运动是有加速度的(如沿 x 方向的振荡电偶极子)，所以电子将发射电磁波。这样的辐射称为自发辐射。自发辐射的电磁波主要集中在轴向的前方，振动方向沿 x 方向，其中心波长为

$$\lambda = \lambda_w / 2\gamma^2 \quad (\text{A. 1})$$

其中 λ_w 是扭摆磁场的空间周期长度， $\gamma = 1 / \sqrt{1 - v^2/c^2} = E/E_0 = mc^2/m_0c^2$ 是电子的能量因子。由于电子束中各电子的自发辐射是随机的，所以不能相干叠加，也就不能增强放大。

今设有一束光沿 z 方向射入电子通道内，在一定条件下可以从摇摆前进的电子取得能量而增强。如图 A. 2 所示，设入射光的电场振动方向沿 x 方向，

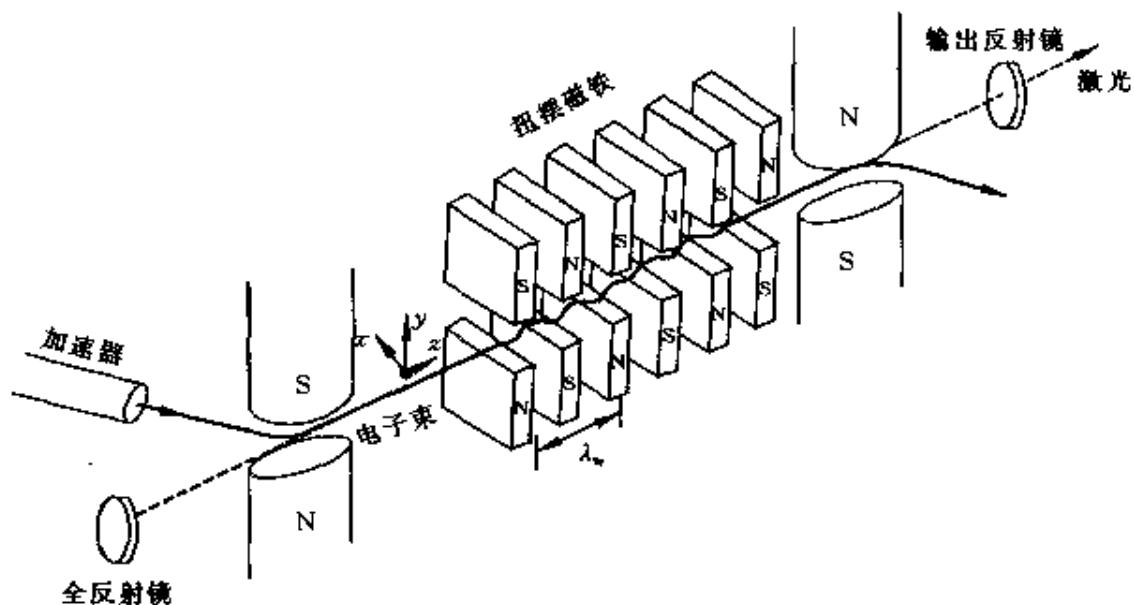


图 A.1 自由电子激光原理图

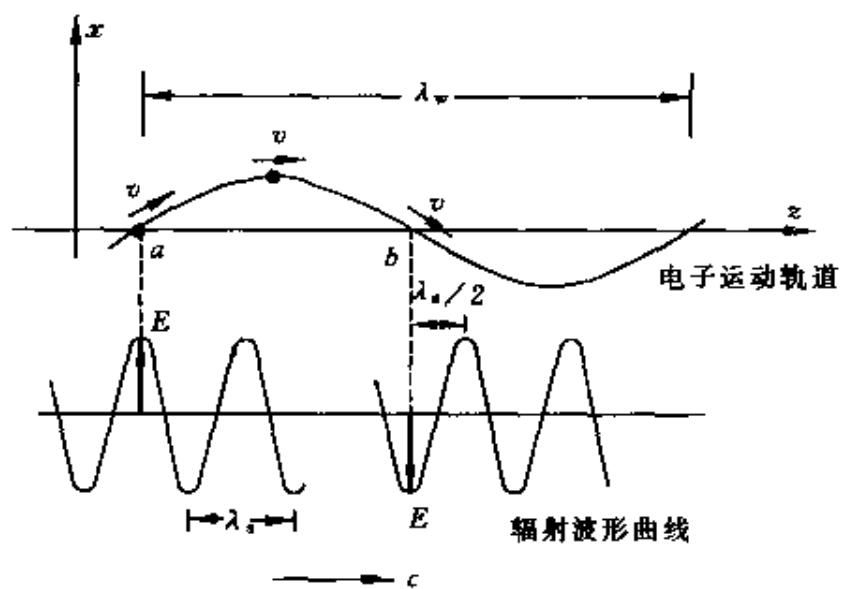


图 A.2 电子向辐射转送能量

在某时刻其极大值正好在电子通过 z 轴的地方 a 点并指向 x 正向。这时电子所受电场力方向与其运动方向成钝角，故要克服此电场力做功。电子的动能将减小而将能量转送给辐射，此后辐射和电子都沿 z 方向前进。如果当电子

前进半个 λ_w 到达B点的同时,辐射多走了半个 λ_s 的距离,则此时电子仍要克服电场力做功,将能量转给辐射。这样继续下去,电子不断地将能量转给辐射而使辐射强度不断增大。符合这一“同步条件”的辐射的波长应满足下式①:

$$\frac{\lambda_w}{v} = \frac{\lambda_w + \lambda_s}{c}$$

由此可得

$$\lambda_s = \lambda_w \frac{c}{v} \left(1 - \frac{v}{c} \right)$$

由于 $v \approx c$,此式可化为

$$\lambda_s = \lambda_w \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) / 2 = \lambda_w / 2\gamma^2 \quad (\text{A. 2})$$

注意,(A. 2)式和(A. 1)式是相同的,由此可知,进入扭摆磁场的辐射的频率如果和该扭摆磁场中运动的电子的自发辐射的频率相同,则该辐射就能从电子持续地获得能量而加强,这时电子的能量称为共振能量。这是用经典电磁场图象对辐射能量加强的说明。改用量子的语言,可以理解为在辐射和电子能量共振(同步)的条件下,自由电子可以被外来辐射光子所激发而发出频率和振动方向相同的光子从而增大了原来辐射的强度。这就是自由电子“受激辐射”的过程。

以上是指单电子受激辐射的过程。由于进入扭摆磁场的电子束是宏[观]脉冲,其脉冲长度为 μs 量级,一个脉冲延续长度可达百米,连续覆盖许多辐射光的波长。但并不是每个电子都能像图A. 2那样向辐射场转送能量,因此这种脉冲还不能形成光放大。所幸的是,进入扭摆磁场的电子束由于磁场和辐射的联合作用,会使电子发生“群聚”现象。其结果是宏脉冲会被分成一个个越来越密集的微[观]脉冲——微束团,其长度为 ps 量级。这些微束团的间距就是辐射的波长 λ_s 。这样,各微束团内的电子将发射同相的辐射,而不同微束团所发射的辐射相差也几乎都等于 2π 的整数倍,自然就能相干叠加而增强了。激光器两端的反射镜使此相干辐射多次在扭摆磁场中沿电子运动的方向加强(相反方向无效果),最后就能得到很强的自由电子激光了。

从(A. 2)式可以看出自由电子激光的频率随入射电子能量的增大而增

① 此处忽略 v 和 v_s 的区别,(A. 1)式中也有这一忽略。

大,因而是连续可调的。目前扭摆磁场的周期长度为 $2\sim3\text{ cm}$,电子束的能量可达 $10^6\sim10^9\text{ eV}$,自由电子激光的频谱可以从远红外跨越到硬X射线。

自由电子激光具有一系列已有的普通激光光源无法代替的优点。例如,频率连续可调,频谱范围广,峰值功率和平均功率大,且可调(美国原“星球大战”计划曾打算用自由电子激光作定向能武器),相干性好,偏振强,具有ps量级脉冲的时间结构,且时间结构可控,等等。因此它在科学、军事、国民经济各方面都有重要的应用前景。中国科学院高能所已于1993年制成了我国第一台红外自由电子激光装置。



B 多光子吸收

频率为 ν 的单色光照射金属时,能产生光电效应。根据能量守恒,可以得出如下的光电效应方程:

$$h\nu = \frac{1}{2}mv^2 + A$$

式中 A 为金属的逸出功。由此式可知,产生光电效应的光子的最低频率为

$$\nu_0 = \frac{A}{h}$$

以前我们讨论的都是单光子效应。当光子能量低于 $h\nu_0$ 时,金属中的自由电子能否从入射光中吸收多个光子而产生光电效应呢?如果这种多光子效应是可能的,则光电效应方程应为

$$nh\nu = \frac{1}{2}mv^2 + A$$

式中 n 是一个光电子吸收的光子数。

在量子论建立的初期,认为一个电子一次只能吸收一个频率大于 ν_0 的光子,而且实验结果和此设想相符合。激光出现后,实验上发现了新的吸收过程。1962年发现了铯原子的双光子激发过程,1964年发现了氩原子的七光子电离过程,1978年又做了铯原子的四光子激发,以后又取得了关于多光子吸收过程的很多进展,特别是对双光子吸收的研究,在实验和理论上都取得了许多成果。

按照量子力学理论,无论是金属中的单个自由电子,或是原子、分子中处于束缚态的单个电子,在强光照射下,使光电子逸出金属表面的多光子光电效应,或使原子从低能态跃迁到高能态的多光子激发甚至多光子电离,在原则上都是容许的。但在实验上观察到多光子光电效应存在着一定困难。以双

光子吸收来看,自由电子在吸收一个光子后,如果此光子频率小于红限频率,电子并不能逃出金属表面。这时如果它能紧接着吸收第二个光子,其能量积累有可能使它逃出金属产生双光子光电效应;如果不能紧接着吸收第二个光子,则通过和晶格的碰撞,电子会很快地失去原来吸收的光子的能量,双光子光电效应就不能发生。能否发生双光子吸收,一方面取决于电子和金属晶格的碰撞概率,同时又取决于入射光子数的多少(即光强的大小)。如果入射光足够强,电子吸收的机会就多,就能在发生能量损失之前,紧接着吸收第二个光子而产生双光子光电效应。

多光子吸收,从理论上可做如下简单说明:

用频率为 ν 的光照射某种原子,单光子激发需要满足频率条件

$$E_2 - E_1 = h\nu$$

如果一个光子的能量不足以使原子从 E_1 态跃迁到 E_2 态,就需要多个光子,这时的频率条件应为

$$E_2 - E_1 = nh\nu$$

如果原子只吸收了一个光子,则所处的状态并不和原子有任何稳定状态对应,如图B.1所示。图中 E_1 和 E_2 表示实际的能级,单向箭头表示每吸收一个光子后所发生的跃迁。这种跃迁因为不符合频率条件所以称为虚跃迁,而所达到的能量状态称为虚能级(图中水平虚线),虚跃迁和虚能级在量子力学中是允许的。按照能量-时间的不确定关系,即

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

其中 Δt 为原子能量处在 ΔE 区间内的时间。 ΔE 愈小则 Δt 愈大,即原子的能量处在 ΔE 区间的状态的时间愈长。在原子吸收一个光子后,其能量和 E_2 之差

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

根据上述不确定性关系,在

$$\Delta t \approx \frac{\hbar}{E_2 - E_1 - h\nu}$$

的时间内,电子是能够处于 E_2 态(或 $E_1 + h\nu$ 的虚状态)的。如果电子连续吸

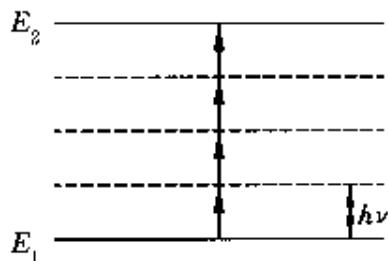


图 B.1 多光子激发示意图

收了 n 个光子的能量而且总能量等于 $E_2 - E_1$, 原子将由 E_1 态跃迁到稳定的 E_2 态, 它在 E_2 状态的时间由此状态的平均寿命 τ 决定。

对于双光子跃迁的简单情况,

$$\Delta E \approx h\nu$$

由此可得

$$\Delta t \approx 1/\nu$$

对于可见光, $\Delta t \approx 10^{-15}$ s, 同激发态的平均寿命 $\tau \approx 10^{-8}$ s 相比, Δt 是很小的, 这一 Δt 也就是产生双光子吸收时两个光子到达所隔时间的最大容许值。这一时间越短, 多光子吸收的几率就越小。实验和理论指出, 单位时间内, n 光子吸收的概率 $W^{(n)}$ 与入射光强 I (以单位时间通过单位面积的光子数表示) 的 n 次方成正比, 即

$$W^{(n)} = \sigma_n I^n$$

其中 σ_n 为一常数, 它随 n 的增大而迅速减小。对于原子体系的单光子吸收, $\sigma_1 \approx 10^{-12} \text{ cm}^2$, 而双光子吸收的 $\sigma_2 \approx 10^{-50} \text{ cm}^4 \cdot \text{s}$ 。由此可见, 要产生双光子吸收, 入射光强度要大大增加才行。这也就是为什么只是在激光器这种单色强光源出现后多光子吸收才被有效地进行研究的原因。

然而, 强激光能引起金属表面的蒸发和熔化, 这给多光子光电效应的观察带来困难, 因此多光子吸收的实验, 通常是在低气压稀薄气体中进行, 而观察到的常常是原子的多光子电离。

多光子过程的研究, 已经在科学技术上取得了一些应用, 如应用双光子吸收光谱, 可以研究分子、原子能级的超精细结构。利用这种光谱技术已经测定了氢原子从 $2s$ 态跃迁到 $1s$ 态产生的光谱的超精细结构。利用多光子吸收光谱, 可以大大扩展激光器的有效频率范围, 如利用可见的或红外激光可研究属于紫外波段的光谱结构, 研究高激发态的能级结构。这就解决了紫外光谱研究中光源缺乏的问题。目前正在发展中的分子红外激光多光子光谱学对于单原子的探测、高分子的离解和合成、同位素的分离以及激光核聚变等领域都有重要的应用。

一种单原子探测装置如图 B.2 所示。在原子化器内用电热法将样品(含有极少量待测原子) 蒸发成原子束, 然后用三束频率不同的激光同时照射此原子束。待测原子, 例如金原子, 它的外围电子的能级有一确定的分布。调节染料激光器的输出频率使它们的光子分别与三个能级差对应。这样金原子就

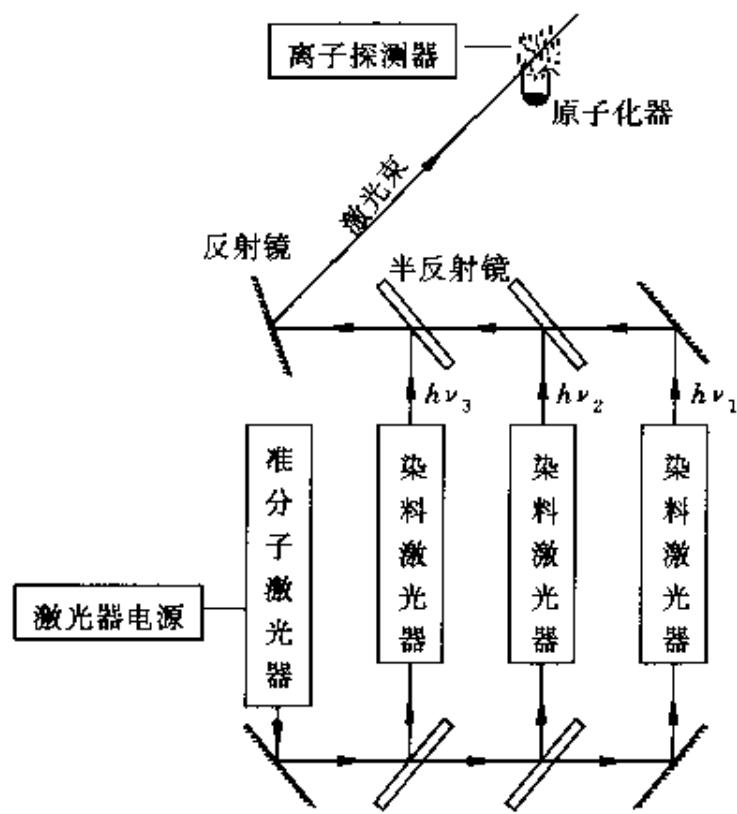


图 B. 2 单原子探测装置示意图

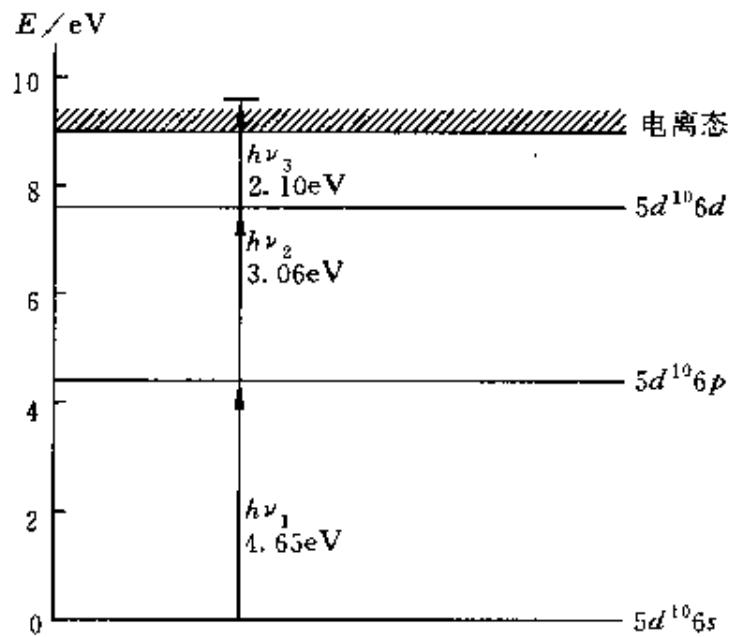


图 B. 3 金原子的多光子电离

能一次吸收三个不同的光子而变为正离子(图 B.3),然后再由离子探测器加以确认。这种多光子吸收的选择性是非常高的,因为不同元素的原子的能量结构是不同的。这种探测方法的灵敏度也很高。清华大学单原子分子测控实验室对地质样品中黄金微量元素的直接测量的灵敏度达到 10^{-12} ,即在 10^{12} 个其他原子中检测出一个金原子。



● 非线性光学

非线性光学亦称强光光学,是研究强激光与物质相互作用下,出现的新现象、规律和应用的一门新兴学科。因此把激光出现之前的光学称为线性光学或弱光光学或普通光学。

这里强光与弱光的区别是就光场的电场强度大小 E 与组成物质的分子或原子内部的平均电场强度大小 E' 比较而言的。普通光源发的光, $E/E' \ll 1$, 光场与物质的作用表现为线性关系, 属于线性光学。对于强激光, E 与 E' 可以相比拟, 此时光场与物质作用的非线性关系明显地表现出来, 出现了在普通光源条件下观察不到的一系列新现象和规律, 此即属强光光学研究范围。有关计算表明, $E' \approx 10^{11} \text{ V/m}$, 普通光源发出的光, 相应的电场强度要比 E' 低好几个数量级, 而 Q 开关红宝石激光器发出的 200 MW 的光脉冲集中在直径约 $25 \mu\text{m}$ 的圆面上, 其光场可达 $E \approx 10^{10} \text{ V/m}$ 。用现代技术甚至可获得光场 $E \approx 10^{12} \text{ V/m}$ 的强光。

这样的强激光与物质相互作用将出现许多非线性光学效应。如光学倍频和混频, 光学参量放大与振荡, 自聚焦, 光学相位共轭, 光的受激散射, 光致透明, 多光子吸收等等。这些效应不但在学术内容上有重要价值, 而且在科学技术上有重要的应用潜力。

按照参与作用的光波场和光学介质之间的能量、动量的交换情况, 非线性光学效应可以分为两类:一类是参与作用的光波场和光学介质之间没有能量和动量的交换, 能量守恒与动量守恒只表现在作用光波之间;光学介质的作用如同化学反应中的催化剂。这类相互作用有倍频和混频等。另一类是作用光波场和光学介质之间有能量和动量交换, 能量守恒与动量守恒表现在作用光场和介质组成的总体系中。这类相互作用有受激散射等。下面简单介绍几种典型的非线性光学效应。

C. 1 倍频与混频

处在外电场中的电介质，在外电场作用下会产生极化，其极化程度用极化强度描述。同理，光在介质中传播时，光场 E 也能引起光学介质的极化，使组成介质的分子、原子成为振荡偶极子，并成为辐射次级电磁波的辐射源。

对于各向同性介质，极化强度 P 与场强 E 的方向相同。当介质为各向异性时， P 与 E 的方向不再相同，而且在强激光作用下， P 与 E 之间不再呈现线性关系。为简单起见，我们不考虑 P 与 E 的矢量特征，并把 P 与 E 的关系写成下式：

$$P = \chi^{(1)}E + \chi^{(2)}E^2 + \chi^{(3)}E^3 + \dots \quad (\text{C. 1})$$

式中 $\chi^{(1)}$, $\chi^{(2)}$, $\chi^{(3)}$, ... 为表示介质特征的常量，分别称为介质的线性电极化率（在电磁学中， $\chi^{(1)} = \epsilon_0\chi_e$ ，其中 χ_e 为介质的电极化率）、二次非线性电极化率和三次非线性电极化率等。实际上，在考虑 P 和 E 的矢量特性及介质的各向异性时，它们分别是二阶、三阶和四阶张量。可以证明，(C. 1) 式中的后项与前项的比值在数量级上粗略为

$$\frac{\chi^{(2)}E^2}{\chi^{(1)}E} \approx \frac{\chi^{(3)}E^3}{\chi^{(2)}E^2} \approx \frac{E}{E'} \quad (\text{C. 2})$$

普通弱光入射时， $E/E' \ll 1$ ，电极化强度的非线性项可以忽略；在强激光入射时，因为 E 与 E' 可相比，非线性项不能忽略，此即一系列强光光学效应的物理根源。下面说明与二次非线性电极化效应有关的光学倍频。

设入射光频电场为

$$E = E_0 \cos \omega t$$

忽略介质的三次以上非线性极化项，则有

$$\begin{aligned} P &= \chi^{(1)}E_0 \cos \omega t + \chi^{(2)}E_0^2 \cos^2 \omega t \\ &= \chi^{(1)}E_0 \cos \omega t + \frac{1}{2}\chi^{(2)}E_0^2 + \frac{1}{2}\chi^{(2)}E_0^2 \cos 2\omega t \end{aligned} \quad (\text{C. 3})$$

等式右边第一项是频率等于入射光频的电极化强度分量，是基频项。这表明介质中存在与入射光频相同的偶极振荡，它将辐射与入射光同频率的光波。第二项是不随时间变化的电极化强度分量，为直流项。这一项的存在使介质的两相对表面分别出现正的与负的极化面电荷，相应产生一恒定电场。这种

从一个交变电场得到一个恒定电场的现象称为光学整流。第三项相应于介质中存在频率为入射光频率两倍的振荡偶极子。它将辐射其频率为入射光频率两倍的光，这就是光学倍频。

光学倍频的实验观察是在激光问世后一年由费兰肯(P. A. Franken)等人完成的。他们将红宝石激光器发出的 $\lambda = 694.3 \text{ nm}$ 的光脉冲聚焦在石英晶体上，对出射光进行摄谱，结果在紫外端观察到 $\lambda = 349.15 \text{ nm}$ 的倍频光谱线。不过当时入射光能量转换为倍频光能量的转换效率极低。若考虑到作用光波之间满足能量守恒和动量守恒所要求的位相匹配条件，转换效率可以提高。目前转换效率已提高到接近 100% 的水平。

当两种不同频率的强激光

$$\begin{aligned} E_1 &= E_{10} \cos \omega_1 t \\ E_2 &= E_{20} \cos \omega_2 t \end{aligned}$$

同时入射时，不考虑介质的三次以上非线性极化项，则有

$$\begin{aligned} P &= \chi^{(1)} [E_{10} \cos \omega_1 t + E_{20} \cos \omega_2 t] \\ &\quad + \chi^{(2)} [E_{10} \cos \omega_1 t + E_{20} \cos \omega_2 t]^2 \\ &= \chi^{(1)} E_{10} \cos \omega_1 t + \chi^{(1)} E_{20} \cos \omega_2 t \\ &\quad + \frac{1}{2} \chi^{(2)} E_{10}^2 (1 + \cos 2\omega_1 t) + \frac{1}{2} \chi^{(2)} E_{20}^2 (1 + \cos 2\omega_2 t) \\ &\quad + \chi^{(2)} E_{10} E_{20} [\cos(\omega_1 + \omega_2) + \cos(\omega_1 - \omega_2)] \end{aligned} \quad (\text{C. 4})$$

式中除了有直流项、基频项、倍频项外，还出现了和频($\omega_1 + \omega_2$)和差频($\omega_1 - \omega_2$)项，相应频率的振荡偶极子将辐射其频率为和频与差频的光，这就是光学混频。

光学频率能够混合是强光光学现象。同时入射的不同频率的弱光在介质中是独立传播的，不能混合。

光学倍频和混频扩展了强相干辐射的范围，是光频转换较成熟的方法，有广泛的应用。

常用的非线性光学晶体有 KDP(磷酸二氢钾)、ADP(磷酸二氢铵)、 LiNbO_3 (铌酸锂)、 LiIO_3 (碘酸锂)等。

不难想到，若考虑介质的电极化强度的高次非线性极化分量，则在强光照射下，还可以得到更高倍频率或和频、差频的光。

C. 2 自 聚 焦

由电磁理论可知,光学介质的折射率 n 决定于介质的相对介电常数 ϵ_r ,而且 $n = \sqrt{\epsilon_r}$ 。以 D 表示在光场为 E 的入射光照射下介质中电位移的大小,则由关系式 $D = \epsilon_0 \epsilon_r E$ (此处为简单起见,我们也不考虑 D 和 E 的矢量特征)可得

$$\epsilon_r = \frac{D}{\epsilon_0 E} \quad (\text{C. 5})$$

再由 D 的定义,并利用(C. 1)式,可得

$$\begin{aligned} D &= \epsilon_0 E + P = \epsilon_0 E + \chi^{(1)} E + \chi^{(2)} E^2 + \chi^{(3)} E^3 + \dots \\ &= \left[\left(1 + \frac{\chi^{(1)}}{\epsilon_0} \right) + \frac{\chi^{(2)}}{\epsilon_0} E + \frac{\chi^{(3)}}{\epsilon_0} E^2 + \dots \right] \epsilon_0 E \end{aligned}$$

由此可得

$$\epsilon_r = \left(1 + \chi_e \right) + \frac{\chi^{(2)}}{\epsilon_0} E + \frac{\chi^{(3)}}{\epsilon_0} E^2 + \dots \quad (\text{C. 6})$$

根据(C. 6)式可知,当入射光场 E 很小时,(C. 6)式中和 E 有关的项与常数项 $(1 + \chi_e)$ 相比可以忽略,因而 ϵ_r 为常数,折射率也为常数。这时折射率与入射光强无关,介质表现为线性的。这是普通光学中遇到的情况。

当用强激光照射介质时,(C. 6)式给出介质的 ϵ_r ,因而折射率 n 就与入射光强有关了,而且随入射光强增加而增大。如果入射光束截面上光强分布不均匀,则在该截面上各处介质的折射率的分布也将是不均匀的。

激光光束的强度呈高斯分布,轴线上光强最大,因而轴线上折射率高于边缘部分。这就在介质内形成一类似凸透镜的结构,使光束向轴上会聚,最后形成一束极细的光丝,这一现象称为自聚焦。

自聚焦形成极高的能量密度。现在人们已经清楚,在很多实验条件下,首先是产生自聚焦,然后才进一步导致其他非线性光学效应。当然,自聚焦也有可能导致介质本身的光学破坏,一般应该避免。

C. 3 受激拉曼散射

一束光通过光学介质时,大部分沿原方向透过,还有一部分偏离原来的

方向传播,后者称为光的散射。通常散射光频率与入射光频率相同,这种散射称为瑞利散射。

1928年拉曼(C. V. Raman)发现,单色光通过某些介质时,散射光中除了有与入射光频率 ν_0 相同的成分外,还有频率为 $\nu_0 \pm \Delta\nu$ 的成分。特别值得注意的是, $\Delta\nu$ 的大小与入射光频率 ν_0 无关,而是由介质性质决定。后来的研究指出, $\Delta\nu$ 的大小决定于介质的分子结构及其运动(转动和振动等)。这种散射称为拉曼散射。后来又发现拉曼散射光中还有其他的频率成分,这些成分间的频率差也和入射光的频率无关,而由介质的性质决定。

拉曼散射的光强是非常微弱的(只有入射光强的 10^{-7} 倍)。因此,在普通光学中观察拉曼散射非常困难。激光出现后,拉曼散射在分子结构的研究中得到了普遍的应用。

弱的拉曼散射光是自发辐射的结果,无相干性。当用强激光观察拉曼散射时,出现了新现象,即散射过程具有受激辐射的性质,故称受激拉曼散射。

受激拉曼散射光具有激光的一切特征。散射光具有很高的相干性,其强度增益是雪崩式的。

受激拉曼散射为深入了解散射介质分子的能级结构、运动状态、跃迁性质等提供了有效途径,它也是产生强相干光的一种方法。

第4章 固体中的电子

固体，严格地说指晶体，是物质的一种常见的凝聚态，在现代技术中有很多的应用。它的许多性质，特别是导电性，和其中电子的行为有关。本章先用量子论介绍金属中自由电子的分布规律，较详细地解释了金属的导电机制。然后用能带理论说明了绝缘体、半导体等的特性。因为本章讨论对象是大量粒子的集体，所以也对量子统计规律作了简单的介绍。

4.1 自由电子按能量的分布

通常我们把金属中的电子称做**自由电子**，是认为它们不受力的作用而可以自由运动。实际并不是这样。在金属中那些“公共的”电子都要受晶格上正离子的库仑力的作用。这些正离子对电子形成一个周期性的库仑势场，其空间周期就是离子的间距 d （图 4.1）。不过，在一定条件下，这种势场的作用可以忽略不计。这是

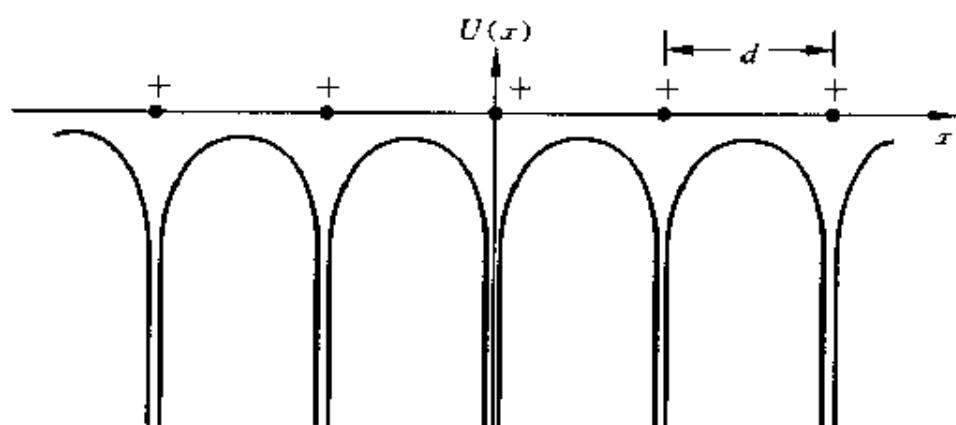


图 4.1 一维正离子形成的库仑势场

因为从量子观点看来,电子具有波动性。对于波动,线度比波长小得多的障碍物对波的传播是没有什么影响的。在金属中的电子只要它们的德布罗意波长比周期性势场的空间周期大得多,它们的运动也就不会受到这种势场的明显影响。在这种势场中,波长较长的电子感受到的是一种平均的均匀的势场,因而不受力的作用。只是在这个意义上,金属中那些公共的电子才可被认为是自由电子,而其集体才能称为是自由电子气。

对于铜块,其中铜离子的间距可估算如下。铜的密度取 $10 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$,则离子间距为

$$d = \left[1 / \left(\frac{10 \times 10^3}{64 \times 10^{-3}} \times 6.02 \times 10^{23} \right) \right]^{1/2} \approx 2 \times 10^{-10} (\text{m})$$

在室温($T = 300 \text{ K}$),电子的方均根速率为 $v = \sqrt{3kT/m_e}$,相应的德布罗意波长为

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{\sqrt{3m_e kT}} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{3 \times 9.1 \times 10^{-31} \times 1.38 \times 10^{-23} \times 300}} \\ &= 6 \times 10^{-9} (\text{m}) \end{aligned}$$

此波长比离子间距大得多,所以铜块中的电子可以看成是自由电子。

由于在通常温度或更低温度下,电子很难逸出表面,所以可以认为金属表面对电子有一个很高的势垒。这样,作为一级近似,可以认为金属块中的自由电子处于一个三维的无限深方势阱中。对于这种电子,其波函数由(2.4)式的薛定谔方程(其中 $U=0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = E\psi \quad (4.1)$$

决定。此处我们不关心 ψ 的具体形式,仍借助于驻波概念讨论粒子数随粒子能量的分布。如图 4.2,设金属块为一边长为 a 的正立方体,沿三个棱的方向分别取作 x , y 和 z 轴。在 2.2 节中曾说明一维无限深方势阱中粒子的每一个能量本征态对应于德布罗意波的一

一个特定波长的驻波。三维情况下的驻波要求每个方向都为驻波的形式,因而应有

$$\lambda_x = \frac{2a}{n_x}, \quad \lambda_y = \frac{2a}{n_y}, \quad \lambda_z = \frac{2a}{n_z} \quad (4.2)$$

其中量子数 n_x, n_y 和 n_z 都可以独立地分别任意取 $1, 2, 3, \dots$ 等整数值。

对应于(4.2)式的波长,电子在各方向的动量分量为

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{\pi \hbar}{a} n_x, & p_y &= \frac{\pi \hbar}{a} n_y, \\ p_z &= \frac{\pi \hbar}{a} n_z \end{aligned} \quad (4.3)$$

由此可进一步求得电子的能量(按非相对论情况考虑)为

$$\begin{aligned} E &= \frac{p^2}{2m_e} = \frac{1}{2m_e} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \\ &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \end{aligned} \quad (4.4)$$

此式说明,对于任一个由 n_x, n_y, n_z 各取一给定值所确定的空间或轨道状态,电子具有一定的能量。但应注意,由于同一($n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$)值可以由许多 n_x, n_y, n_z 值组合而得,所以电子的一个能级可以包含许多轨道状态。也就是说,电子的能级是简并的。为了求得金属块中自由电子数随能量的分布,必须先求出状态数随能量的分布。为此我们先求能量小于某一值 E 的所有能级所包含的状态数。

设想一量子数空间,它的三个相互垂直的轴分别表示 n_x, n_y 和 n_z (图 4.3)。在各量子数均为正值的 $1/8$ 空间内,任一具有整数坐标值的点都给出一组量子数,因而代表电子的一个可能的状态。以原点为心,半径为 R 的球面上各点具有相同的($n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$)值,

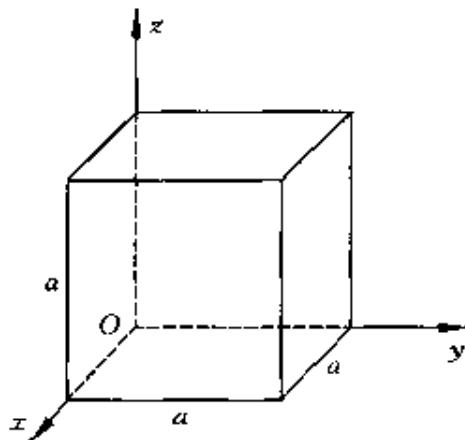


图 4.2 金属正立方体

因而这些点的对应状态具有相同的能力。和能力 E 对应的半径为

$$R = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \sqrt{\frac{2m_e a^2}{\pi^2 \hbar^2} E}$$

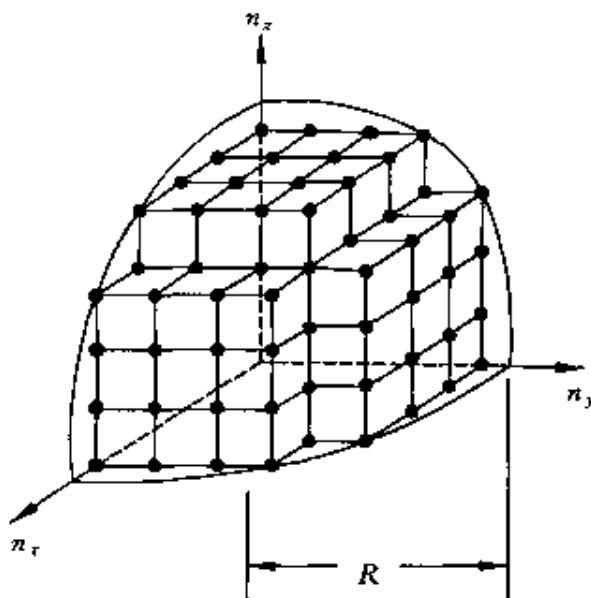


图 4.3 量子数空间

能力小于 E 的状态数就是在此球内的所有状态数。由于一个整数坐标点和一个单位体积相对应，所以当 R 足够大时，球内 $1/8$ 体积内的状态数就等于球内相应的体积。再考虑到每一个轨道状态都包含两个自旋状态，所以该金属块具有的能力小于 E 的电子的可能状态总数为

$$N_s = 2 \times \frac{1}{8} \times \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{1}{3} (2m_e)^{3/2} \frac{a^3}{\pi^2 \hbar^3} E^{3/2}$$

由于金属块的体积为 $V = a^3$ ，所以单位体积内自由电子能力小于 E 的可能状态总数为

$$n_s = \frac{N_s}{V} = \frac{1}{3} (2m_e)^{3/2} \frac{E^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (4.5)$$

现在考虑 $T=0$ 的金属块。由能量最低原理和泡利不相容原

理可知,电子将从能量最低($E=0$)的状态开始一个个地逐一向上占据能量较高的状态。以 n 表示金属中单位体积内的自由电子数,即自由电子数密度,则当 $n_s=n$ 时,(4.5)式将给出电子可能占据的最高能级。这一能级叫费米能级,相应的能量叫费米能量,用 E_F 表示。由(4.5)式可得

$$E_F = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_e} n^{2/3} \quad (4.6)$$

此式说明,此费米能量仅决定于金属的自由电子数密度。一些金属在 $T=0$ 时的费米能量见表4.1。

表4.1 $T=0$ 时一些金属的费米参数

金属	电子数密度 n/m^{-3}	费米能量 E_F/eV	费米速度 $v_F/(m/s)$	费米温度 T_F/K
Li	4.70×10^{28}	4.76	1.29×10^6	5.52×10^4
Na	2.65×10^{28}	3.24	1.07×10^6	3.76×10^4
Al	18.1×10^{28}	11.7	2.02×10^6	13.6×10^4
K	1.40×10^{28}	2.12	0.86×10^6	2.46×10^4
Fe	17.0×10^{28}	11.2	1.98×10^6	13.0×10^4
Cu	8.49×10^{28}	7.05	1.57×10^6	8.18×10^4
Ag	5.85×10^{28}	5.50	1.39×10^6	6.38×10^4
Au	5.90×10^{28}	5.53	1.39×10^6	6.41×10^4

和费米能量对应,可以认为自由电子具有一定的最大速度,叫费米速度。它的值可以按 $v_F = \sqrt{2E_F/m_e}$ 算出,也列在表中。费米速度可达 $10^6 m/s$!注意,这是在 $T=0$ 的情况下。这个结果和经典理论是完全不同的。因为,按经典理论,在 $T=0$ 时,任何粒子的动能应是零而速度也是零。

为了从另一角度表示量子理论和经典理论在电子能量状态上的差别,还引入费米温度的概念。费米温度 T_F 是指按经典理论电子具有费米能量时的温度。它可由下式求出:

$$T_F = E_F/k \quad (4.7)$$

式中 k 是玻耳兹曼常量。各金属的费米温度均高于 10^4 K, 而实际上金属是在 0 K!

由(4.5)式可以求出单位体积内的态密度, 即单位能量区间的量子态数。以 $g(E)$ 表示态密度, 就有

$$g(E) = \frac{dn_s}{dE} = \frac{(2m_e)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} \quad (4.8)$$

$g(E)$ 随 E 变化的曲线如图 4.4 所示。以 E_F 为界的那些密集的较低能级都被电子在 0 K 时占满了, 因此 Oab 曲线就是 0 K 时电子的能量分布曲线, 即 $dn(E)/dE-E$ 曲线 ($dn(E)$ 为在 E 到 $E+dE$ 能量区间的电子数)。

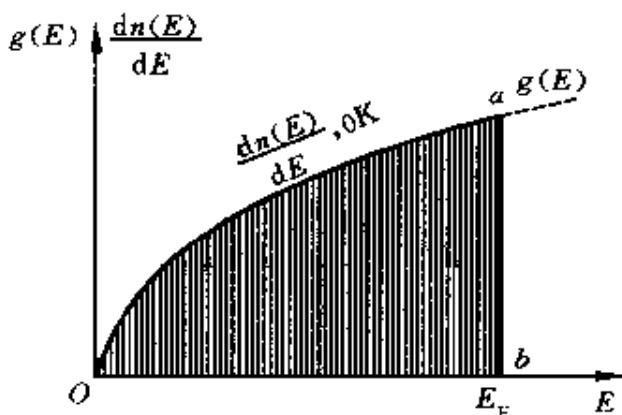


图 4.4 电子态密度分布曲线和 0 K 时电子能量分布

现在考虑温度升高时的电子能量分布。由于温度的升高, 电子会由于和晶格离子的无规则碰撞而获得能量。但是, 泡利不相容原理对电子的状态改变加了严格的限制。在温度为 T 时, 晶格离子的能量为 kT 量级。在常温下, $kT \approx 0.03$ eV, 电子从和离子的碰撞中最多可能得到这样多的能量。由于此能量较 E_F 小得多, 所以绝大多数电子不可能借助这一能量而跃迁到 E_F 以上的空能级上去。特别是由于低于 E_F 的能级都已被电子填满, 电子又不可能通

过无规则的碰撞过程吸收这点能量而跃迁到较高能级上去。这就是说，在常温下，绝大部分电子的能量被限死了而不能改变。只有在费米能级以下紧邻的能量在约 0.03 eV 的能量薄层内的电子才能吸收热运动能量而跃迁到上面邻近的空能级上去。

因此，在常温下，金属中自由电子的能量分布（图 4.5）和 $T = 0\text{ K}$ 时的分布没有多大差别。甚至到熔点时，其中电子的能量分布和 0 K 时也差别不大（ 10^3 K 的热运动能量也不过 0.1 eV）。这种情况可以形象化地用深海中的水比喻：海面上薄层内可以波浪滔天，但海面下深处的水基本上是静止不动的。

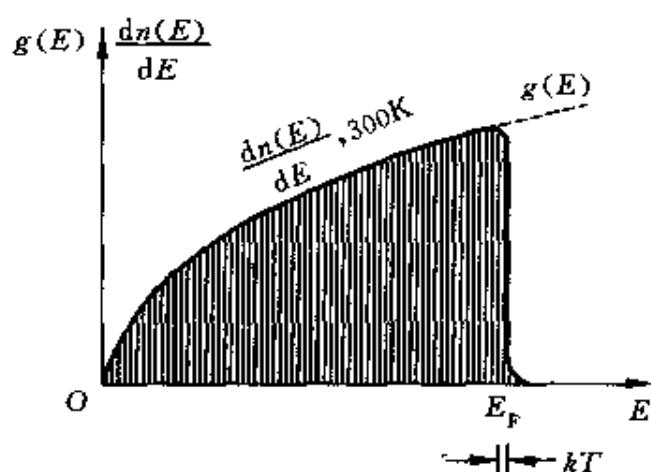


图 4.5 室温时电子的能量分布

由自由电子的能量分布可以说明金属摩尔热容的实验结果。19世纪就曾测得金属的摩尔热容都约为 $25\text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ ，例如，铝的是 $24.8\text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ ，铜的是 $24.7\text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ ，银的是 $25.2\text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ ，等等。经典理论的解释归因于离子的振动的 6 个自由度。按能量均分定理就可求出摩尔热容为 $6 \times R/2 = 3R = 24.9\text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ 。可是，后来知道金属中有大量自由电子，其数目和离子数同量级。电子的自由运动应有 3 个自由度，对热容就应该有 $3 \times R/2 = 12.5\text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ 的贡献（这差不多是实验值的一

半),实际上却没有,这是为什么呢?

这个问题用上述自由电子的量子理论很好解决,这是泡利不相容原理的结果。绝大多数自由电子的状态都被固定死了,它们不可能吸收热运动能量,因而对金属热容不会有贡献。只是能量在 E_F 附近 kT 能量薄层内的电子能吸收热能,这些电子的数目占总数的比例约为 kT/E_F 。按经典理论计算这些电子才能对热容有贡献,但贡献也不过 $3 \times (R/2) \times (kT/E_F)$ (准确理论结果为 $\pi^2 \times (R/2) \times (kT/E_F)$)。由于 E_F 的典型值为几 eV,而室温时 kT 不过 0.03 eV,这一贡献也不过经典预计值的 1%,所以实验中就不会有明显的显示了。

4.2 金属导电的量子论解释

用上节介绍的自由电子的量子理论可以对金属导电做出圆满的解释。首先注意到,尽管绝大多数电子状态已固定,但泡利不相容原理并不能阻止电子的加速。在热运动中,电子只能通过无规则碰撞从离子获得能量,一个电子碰撞时,另一比它能量稍高的电子可能并未碰撞,因而保持在原来的量子态上而拒绝其他电子进入。导电情况不同。在加上电场后,金属内所有电子都将同时从电场获得能量和动量,因而每个电子都在不停地离开自己的能级高升或下降,同时为下一能级的电子腾出位置。整个电子的能级分布就这样松动了。这时电子不靠碰撞从离子获得能量,或者说不会发生碰撞。只有一种碰撞是例外,就是那些速度被电场加速到费米速度的电子。它们经过碰撞后速度变为反向的而大小略减的速度,然后在电场的作用下重新加速。这种碰撞过程叫做“倒逆”碰撞,即速度反转的意思。

上述电子导电的过程,可以生动地借助于速度空间来说明。在如图 4.6 所示的速度空间内,在没有电场时,自由电子可能向各方

向以任意小于 v_F 的速度运动,所有电子的速度可以用球心在原点,半径为 v_F 的球体内的点表示(图 4.6(a))。这个球叫做费米球(图中画出了 0 K 的情况,球面是清晰分明的。高于 0 K 时,球大致还是那样,不过球面变得模糊了)。当加上沿 $-v_y$ 方向的电场后,所有电子将同时沿 v_y 方向以同一加速度加速,而费米球也就沿 v_y 方向加速前进。量子力学给出纯净完美的结晶点阵是没有电阻的(根本原因是电子的波动性),但实际上,由于杂质原子和晶体缺陷(如位错、空位等)的存在以及离子的无规则的热振动,电子会被碰撞而发生“倒逆”过程。在图 4.6(b)中是那些在球最前方的电子经过和晶体缺陷或离子的碰撞而突然改变方向到达球的后表面。经过倒逆,这些电子的动能稍有减小而动量则反向了。此后这些电子在电场作用下,又沿 v_y 方向加速(实际上在未到达 $v_y = 0$ 之前是减速的)。由于这种倒逆碰撞,费米球不再向前移了。所有电子加速到球前面时就折回到球后面,再向前加速到球前面,如此周而复

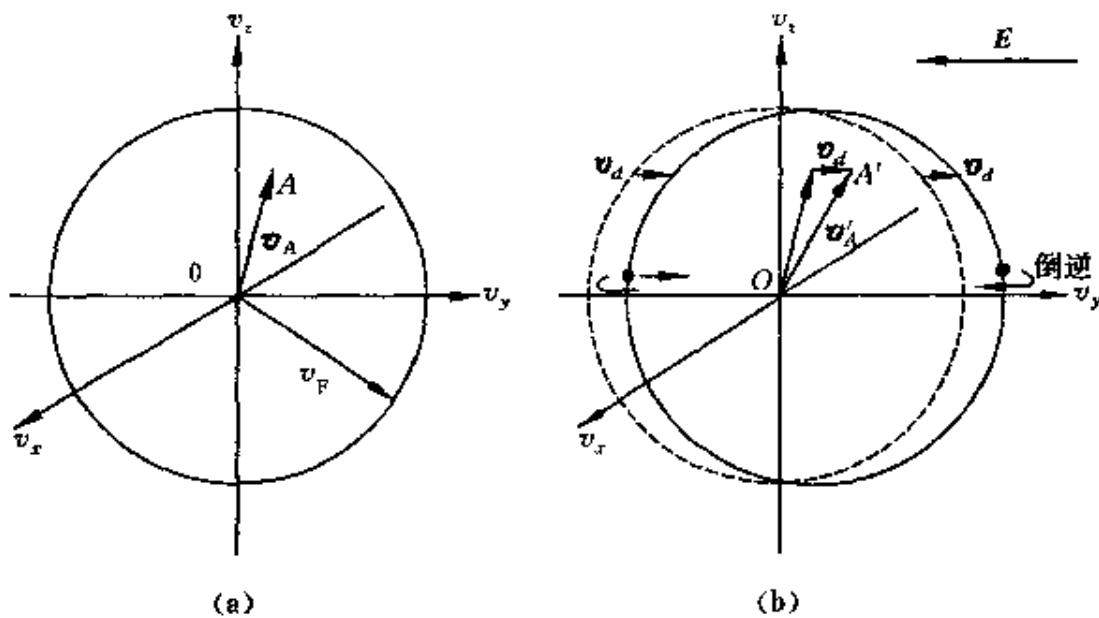


图 4.6 0 K 时的费米球
(a) 无电场时; (b) 有电场时

始地进行实际的导电过程。在电场作用下,费米球对于没有电场时的位移,就是所有电子都具有的“漂移速度” v_d 。

在本套教材第三册电磁学中,曾用经典理论和图象导出了金属电导率公式,即(6.34)式 $\sigma = ne^2\tau/m_e$,其中 τ 为自由电子的自由飞行时间。以平均自由程 $\bar{\lambda}$ 和平均速率 \bar{v} 表示 τ ,即 $\tau = \bar{\lambda}/\bar{v}$,电导率又可写做

$$\sigma = \frac{ne^2\bar{\lambda}}{m_e\bar{v}} \quad (4.9)$$

根据上面讲的量子论图象,只有那些速度达到 v_F 的电子才发生碰撞,所以可以把上式中的 \bar{v} 换成 v_F 而得到量子论的电导率公式,即

$$\sigma = \frac{ne^2\bar{\lambda}}{m_e v_F} \quad (4.10)$$

由于 $v_F \gg \bar{v}$,似乎这一结果将与实验不符。但量子力学给出的 $\bar{\lambda}$ 值也要比经典结果大得多,例如可以大到上千倍。这样,量子力学给出的理论结果也就能和实验相符了。

* 4.3 量子统计

量子统计指量子理论中关于微观粒子的统计分布规律。在 3.3 节中已讨论过,由于微观粒子的量子不可分辨性,微观粒子分为两类。一类是费米子,它服从泡利不相容原理,一个量子态最多容纳一个费米子。另一类是玻色子,不受泡利不相容原理的约束,一个量子态内可容纳的粒子数不限。根据这两类粒子的不同特点,量子论导出了两种统计分布规律:用于费米子的叫费米-狄拉克分布,常记作 FD 分布;用于玻色子的统计分布规律叫玻色-爱因斯坦分布,常记作 BE 分布。下面对它们加以简单介绍。

费米-狄拉克分布指出:由费米子组成的系统,在热平衡状态下,一个能量为 E 的量子态上存在的粒子数平均为

$$n_{FD,1}(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \quad (4.11)$$

其中 T 是系统的热力学温度, E_F 叫做系统的化学势。

由(4.11)式可知, 在 $T=0$ 时, 如果 $E>E_F$, 则 $e^{(E-E_F)/kT}=\infty$, 因而 $n_{FD,1}=0$ 。如果 $E<E_F$, 则 $e^{(E-E_F)/kT}=0$, 因而 $n_{FD,1}=1$ 。这就是说, 对费米子, 在 $T=0$ 时, 能量大于 E_F 的能级上没有粒子分布, 而在小于 E_F 的能级上, 每个量子态上都有一个粒子, 即各量子态都被填满了。这正是上节介绍的作为费米子的电子所具有的分布特点。和上节对比还可以看出, 此处的化学势就是费米子在 0 K 时的费米能量。

温度不为 0 K 时, 如果温度在室温附近, $n_{FD,1}(E)$ 和 0 K 时的没有太大差别, 温度越高差别越大。图 4.7 画出了不同温度下的 $n_{FD,1}(E)$ 曲线。由(4.11)式可以看出, 在不同温度下, 当 $E=E_F$ 时, $n_{FD,1}=1/2$, 因此可以一般地把平均粒子数等于 $1/2$ 的量子态的能量定义为费米能级(0 K 时除外), 费米能级是温度的函数。

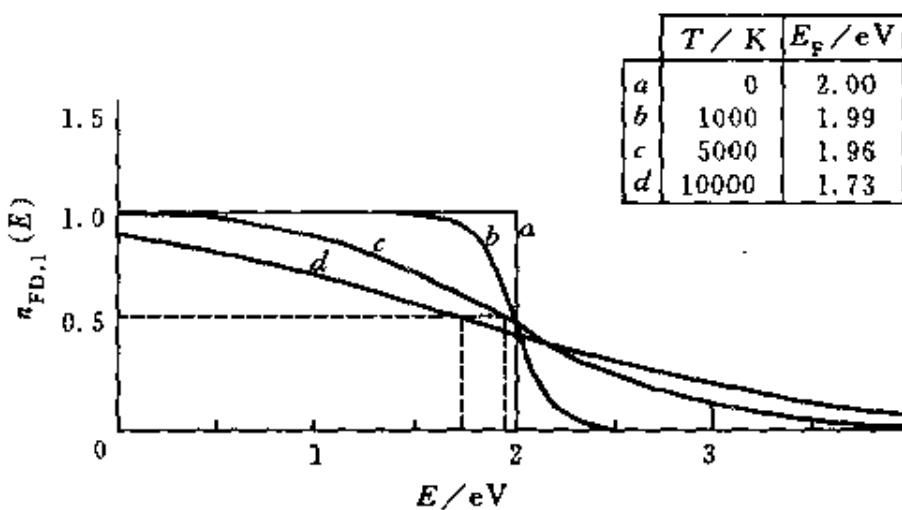


图 4.7 不同温度下的 $n_{FD,1}$ 分布曲线

至于费米子按能级的分布, 由于能级的简并, 就需要对(4.11)式再乘以简并度。在能级十分密集的情况下, 在单位体积内能量在

E 到 $E+dE$ 区间的粒子数将为

$$dn_{\text{FD}}(E) = \frac{g(E)}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} dE \quad (4.12)$$

式中 $g(E)$ 即 (4.8) 式给出的能量为 E 处的态密度。温度为 0 K 和室温附近的费米子能量分布曲线已分别在图 4.4 和图 4.5 中画出了。

玻色-爱因斯坦分布指出：由玻色子组成的系统，在热平衡状态下，一个能量为 E 的量子态上存在的粒子数平均为

$$n_{\text{BE},1}(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} - 1} \quad (4.13)$$

式中 μ 为化学势。

由 (4.13) 式可以看出，在某些温度和某些能量的量子态上，粒子数是可能大于 1 的。这就说明玻色子不受泡利不相容原理的约束。特别是，粒子数随 E 的减小而增大，以致可能在一定的低温下，所有玻色子都聚集在最低的能级，即基态能级上，而形成“玻色-爱因斯坦”凝聚状态。由于宏观量的粒子聚集在同一个基态能级上，所以这是一种宏观量子现象。实验上曾观察到液态氦在 $T = 2.18 \text{ K}$ 时会出现一个 He I 相。它具有一些特殊的物理性质，如超流动性，就是这种玻色-爱因斯坦凝聚的结果。1995 年更进一步观察到了气体的玻色-爱因斯坦凝聚体，如 $0.17 \mu\text{K}$ 温度下的 2000 个铷原子的凝聚体， $2 \mu\text{K}$ 温度下的 5×10^5 个钠原子的凝聚体等。

玻色子的一个常见例子是光子。光子的自旋是 \hbar ，而且也有 $+\hbar$ 和 $-\hbar$ 两个自旋态。现在考虑一个空腔内的平衡热辐射。由于热辐射的能量密度按光子能量的分布与空腔的形状和腔壁材料无关，所以我们设想腔壁为金属，边长为 a 正立方空腔。作为电磁波，在热平衡条件下，在边界（即金属内表面）上，电场应为零，而在空腔内形成驻波。作为光子，其量子态就可以像 4.1 节所讨论的金属块中自由电子的量子态那样加以描述。一个量子态对应于一组量

子数(n_x, n_y, n_z)的值。由于对光子, $p = h/\lambda$ 也成立, 所以一个量子态的光子的动量分量为

$$p_x = \frac{\pi \hbar}{a} n_x, \quad p_y = \frac{\pi \hbar}{a} n_y, \quad p_z = \frac{\pi \hbar}{a} n_z \quad (4.14)$$

由于光子的能量 $E = pc$, 所以各量子态的能量为

$$E = \frac{c\pi\hbar}{a} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \quad (4.15)$$

由此可以像在 4.1 节中那样求出空腔内能量小于 E 的量子态的数目

$$N_s = 2 \times \frac{1}{8} \times \frac{4}{3}\pi \frac{a^3}{c^3 \pi^3 \hbar^3} = \frac{a^3}{3\pi^2 c^3 \hbar^3} E^3 \quad (4.16)$$

由此可得单位体积内在能量 E 附近的光子的态密度为

$$g(E) = \frac{dN_s}{dE} = \frac{E^2}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \quad (4.17)$$

对于光子, 由于不断地被空腔壁吸收和发射(这是空腔热辐射处于热平衡状态的保证), 所以腔内光子总数是不固定的。因此, 可以证明(4.13)式中的 $\mu=0$ 。所以对光子, 玻色-爱因斯坦分布为

$$n_{BE,1}(E) = \frac{1}{e^{E/kT} - 1} \quad (4.18)$$

在能量 E 到 $E+dE$ 区间的单位体积内的光子数为

$$dn = n_{BE,1}(E) g(E) dE \quad (4.19)$$

而单位体积内能量在 E 到 $E+dE$ 能量区间的光子的总能量为

$$dW_E = Edn = n_{BE,1}(E) g(E) EdE \quad (4.20)$$

由于一个光子的能量 $E=h\nu$, 所以上式可用 ν 表示为

$$\begin{aligned} dW_\nu &= \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \frac{h^2 \nu^2}{\pi^2 c^3 \hbar^3} h\nu h d\nu \\ &= \frac{8\pi h\nu^3}{c^3 (e^{h\nu/kT} - 1)} d\nu. \end{aligned}$$

此式为单位体积内频率在 ν 到 $\nu+d\nu$ 区间的光子的总能量。在 ν 附

近单位频率区间的热辐射的能量为

$$w_\nu = \frac{dW_\nu}{d\nu} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3(e^{h\nu/kT} - 1)} \quad (4.21)$$

此 w_ν 叫热辐射的光谱辐射能密度。

由于光谱辐射出射度 M_ν 和腔内热辐射的光谱辐射能密度有以下关系(见习题 1.8)：

$$M_\nu = \frac{c}{4} w_\nu$$

所以还可以得出热辐射的光谱辐射出射度以 ν 表示的形式, 即

$$M_\nu = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2(e^{h\nu/kT} - 1)} \quad (4.22)$$

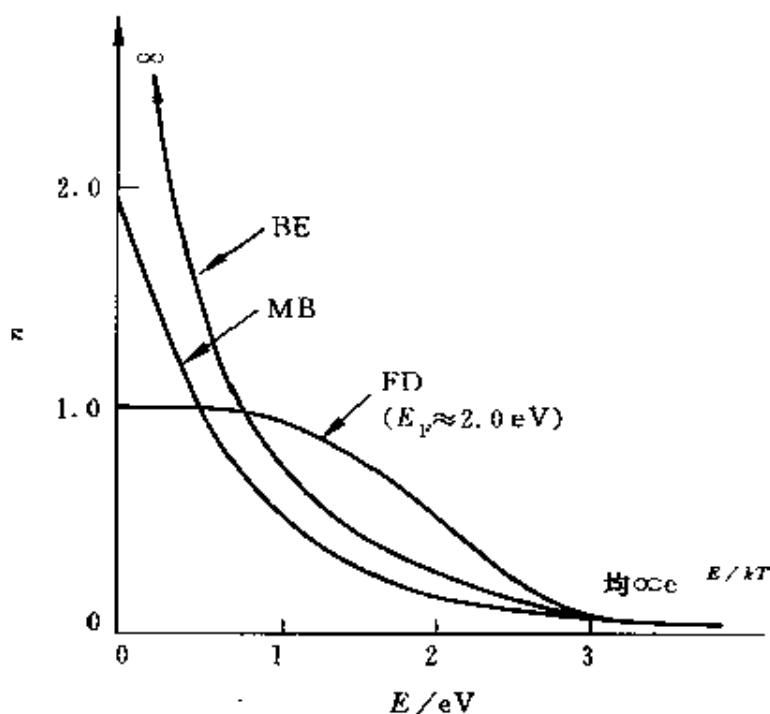
这就是在第一章中介绍的普朗克热辐射公式(1.3)式。

在本套教材第二册热学中曾讲过麦克斯韦-玻耳兹曼分布(记作 MB 分布), 它给出经典粒子的能量分布, 即能量为 E 的粒子数与 $e^{-E/kT}$ 成正比, 亦即

$$n_{MB}(E) = Ce^{-E/kT} = C/e^{E/kT} \quad (4.23)$$

式中 C 为一归一化常数。比较(4.12)、(4.13)和这里的(4.23)三个统计分布函数, 可以看到当 E 充分大时, FD 分布和 BE 分布都转化为 MB 分布。图 4.8 在同一坐标图中画出了这三种分布在 5000 K 时的分布曲线, 也显示了在 E 大的区域三条线趋于一条线。其所以如此, 是因为在 E 足够大时, 粒子数相对于可能的量子态数目来说, 已经非常小了, 泡利不相容原理也就没有什么实际意义, 粒子的费米子和玻色子的区别, 甚至量子粒子和经典粒子的区分也就没有什么实际意义了。

最后我们给出一个量子统计适用的一个大致的范围。作为量子粒子, 它的基本性质是具有波动性。由此可以想到, 当粒子的德布罗意波长 λ 和系统中粒子的平均间距 d 可比或 λ 更大时, 各粒子的波函数将相互严重地重叠, 因而量子效应将突出地显示出来。

图 4.8 三种分布曲线的比较($T=5000\text{ K}$)

因此,可以说在 $\lambda \geq d$ 时,对粒子系统必须用量子统计。由于 $\lambda = h/p = h/\sqrt{2mE}$ (非相对论情况),而在温度为 T 时,粒子的能量可以按 $E = 3kT/2$ 计算,所以有

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mkT}} \quad (4.24)$$

以 n 表示粒子的数密度,则粒子的平均间距 $d \approx n^{-1/3}$ 。由此量子统计适用的条件 $\lambda \geq d$ 可以进一步表示为

$$\frac{hn^{1/3}}{\sqrt{3mkT}} \geq 1 \quad (4.25)$$

例如,对于液氮,在 $T=2.18\text{ K}$ 时, $n=2.2 \times 10^{28}\text{ m}^{-3}$, 而 $m=6.64 \times 10^{-27}\text{ kg}$ 。代入上式可得

$$\frac{hn^{1/3}}{\sqrt{3mkT}} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times (2.2 \times 10^{28})^{1/3}}{\sqrt{3 \times 6.64 \times 10^{-27} \times 1.38 \times 10^{-23} \times 2.18}} = 2.4$$

由于所求值大于 1,由(4.25)式知对此状态下的液氦应该用 BE 量子统计。

4.4 能带 导体和绝缘体

在 4.1 节中介绍了自由电子的能量分布。金属中自由电子的行为是忽略了晶体中正离子产生的周期性势场对电子运动的影响的结果。更进一步考虑晶体中电子的行为应该顾及这种周期势场的作用或原子集聚时对电子能级的影响,其结果是在固体中存在着对电子来说的能带。能带被电子填满与否决定着固体的电学性质。能带中只有部分能级为电子占有的固体是导体,能带中各能级均被电子填满的固体为绝缘体。下面更仔细地说明这一点。

为了说明能带的形成,让我们考虑一个个独立的原子集聚形成晶体时其能级怎么变化。当两个原子相隔很远时,二者的相互影响可以忽略。各原子中电子的能级就如 3.4 节中所说的那样根据泡利不相容原理分壳层和次壳层分布着。当两个原子逐渐靠近时,它们的电子的波函数将逐渐重叠。这时,作为一个系统,泡利原理不允许一个量子态上有两个电子存在。于是原来孤立状态下的每个能级将分裂为 2,这对应于两个孤立原子的波函数的线性叠加形成的两个独立的波函数。这种能级分裂的宽度决定于两个原子中原来能级分布状况以及二者波函数的重叠程度,亦即两个原子中心的间距。图 4.9(a)表示两个钠原子的 3s 能级的分裂随两原子中心间距离 r 变化的情况,图中 r_0 为原子平衡间距。

更多的原子集聚在一起时,类似的能级分裂现象也发生。图 4.9(b)表示 6 个原子相聚时,原来孤立原子的 1 个能级要分裂成 6 个能级,分别对应于孤立原子波函数的 6 个不同的线性叠加。如果 N 个原子集聚形成晶体,则孤立原子的 1 个能级将分裂为 N 个能级。由于能级分裂的总宽度 ΔE 决定于原子的间距,而晶体中

原子的间距是一定的,所以 ΔE 与原子数 N 无关。实际晶体中原子数 N 是非常大的(10^{24} 量级),所以一个能级分裂成的 N 个能级的间距就非常小,以至于可以认为这 N 个能级形成一个能量连续的区域,这样的一个能量区域就叫一个能带。图 4.9(c)表示钠晶体的 $3s$ 能带随晶格间距变化的情况,阴影就表示能级密集的区域。图 4.10(b)画出了钠晶体中其他能级分裂的程度随原子间距变化的情况(注意能量轴的折接)。左侧图(a)表示在平衡间距 r_0 (0.367 nm)处的能带分布,上面几个能带重叠起来了;右侧图(c)表示在间距为 r_1 (8 nm)处的能带分布。

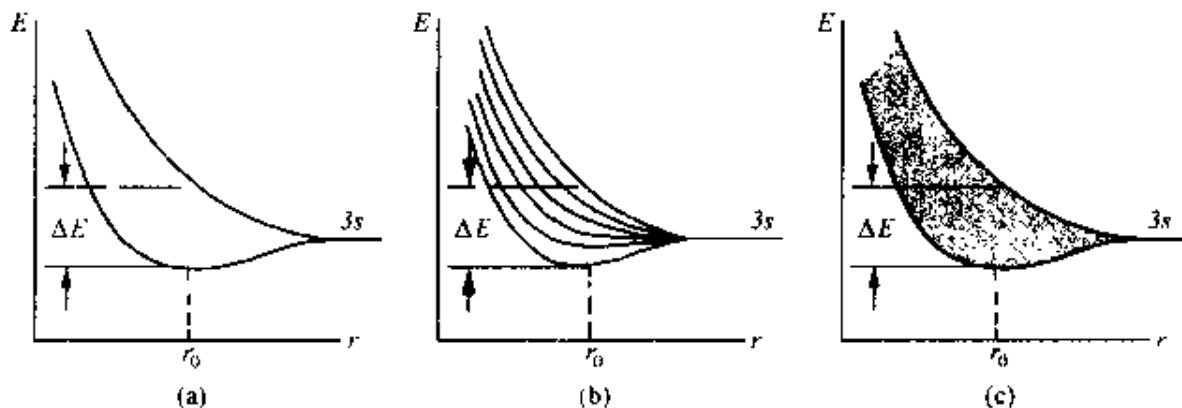


图 4.9 钠晶体中原子 $3s$ 能级的分裂

现在注意看图 4.10(c)原子间距为 $r_1=8\text{ nm}$ 时的能级分布。孤立钠原子的 $2p$ 能级中共有 6 个可能量子态,而各量子态各被一个电子占据。钠晶体中此 $2p$ 能级分裂为一能带,此能带中有 $6N$ 个可能量子态,但也正好有 $6N$ 个原来的 $2p$ 电子,它们各占一量子态,这一 $2p$ 能带就被电子填满了。孤立钠原子的 $3s$ 能级上有 2 个可能量子态,钠原子的一个价电子在其中的一个量子态上。在钠晶体中, $3s$ 能带中共有 $2N$ 个可能量子态,但总共只有 N 个价电子在这一能带中,所以这一能带电子只填了一半,没有填满。和 $3p$ 能级相对应的 $3p$ 能带以及以上的能带在钠晶体中并没有电子分布,都是空着的。

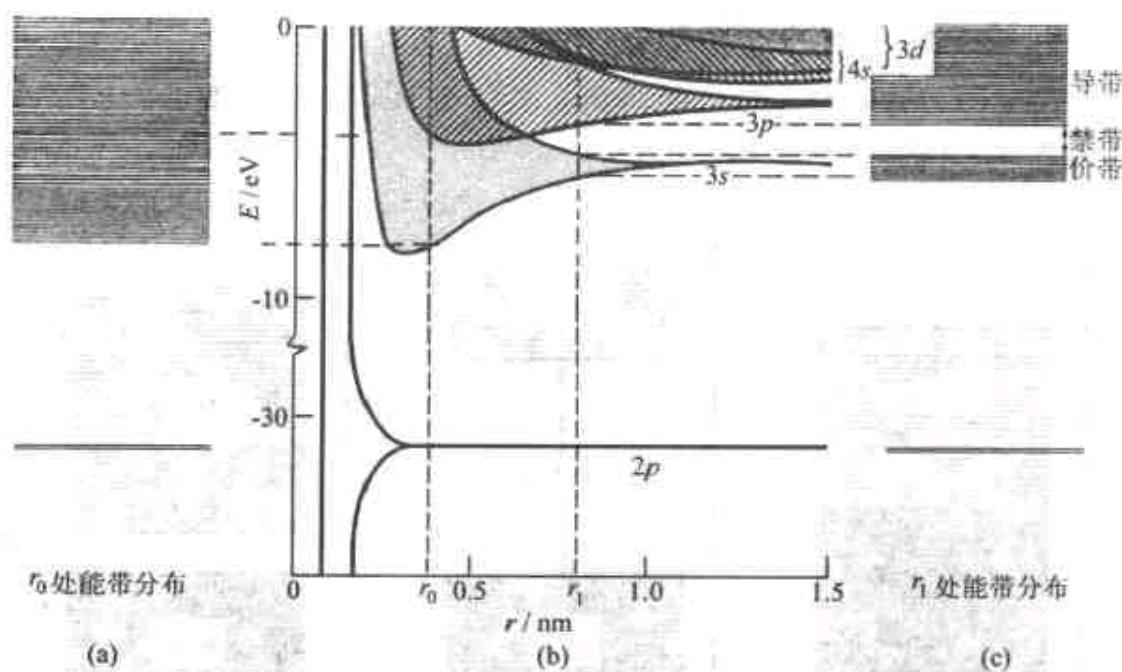


图 4.10 钠晶体的能级分裂成能带的情况

晶体的能带中最上面的有电子存在的能带叫价带,如图 4.10(c)中的 $3s$ 能带。价带上面相邻的那个空着的能带叫导带,如图 4.10(c)中 $3p$ 能带。在能带之间没有可能量子态的能量区域叫禁带,在这个能量区域不可能有电子存在。

现在可以讨论导体和绝缘体的区别了。对导体,如钠,在实际的晶体中,原子的平衡间距为 r_0 ,其价带中有电子存在,但未被填满(在 0 K 时只填满费米能级以下的能级)。因此,在外电场作用下,这些电子就可以被加速而形成电流。这就是 4.2 节描述的电子导电的情况。这种物质就是导体。铜、金、银、铝等金属都有相似的未填满的价带结构。

有些物质,以金刚石为例,其晶体的能带结构特征是:价带已被电子填满而其上的导带则完全空着(0 K),价带和导带之间的禁带宽度约为 6 eV。在常温下,价带中电子几乎完全不可能跃入导带。加外电场时,在一般电压下,价电子也不可能获得足够能量跃入导带而被加速,这使得金刚石成为绝缘体了。一般绝缘体都有

相似的禁带较宽的能带结构。

图 4.11 就导体(铜)、绝缘体(金刚石)以及半导体(硅)的能带结构作了对比。

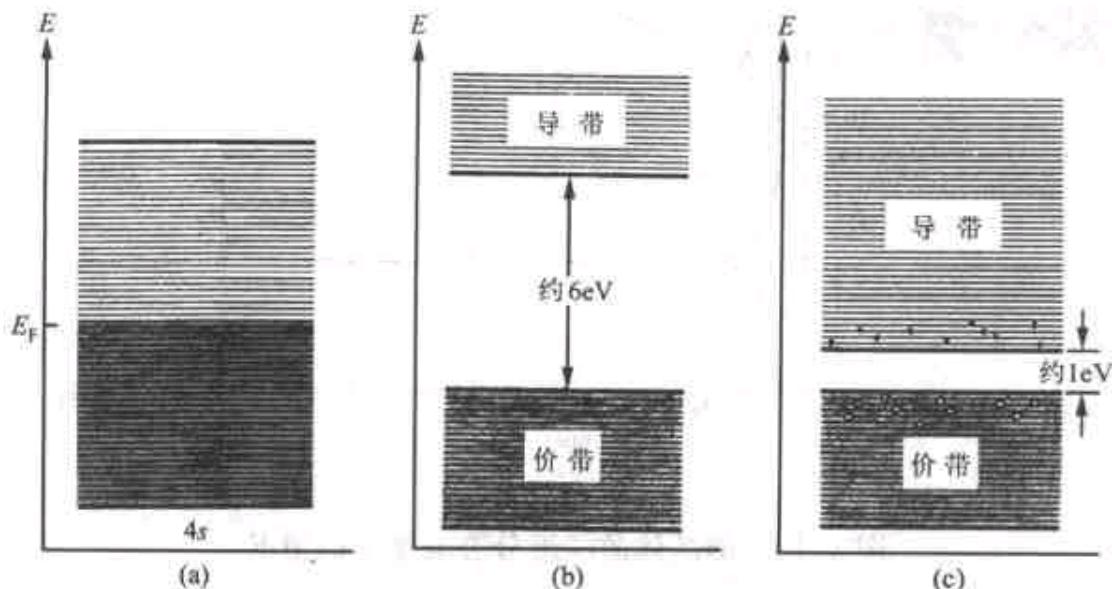


图 4.11 能带结构对比

(a) 铜；(b) 金刚石；(c) 硅

例 4.1 估算：(1) 使金刚石变成导体需要加热到多高温度？(2) 金刚石的电击穿强度多大？金刚石的禁带宽度 \$E_g\$ 按 6 eV 计，其中电子运动的平均自由程按 \$0.2 \mu\text{m}\$ 计。

解 (1) 设温度为 \$T\$ 时金刚石变为导体，则应有 \$kT \approx E_g\$，因而

$$T \approx \frac{E_g}{k} = \frac{6 \times 1.6 \times 10^{-19}}{1.3 \times 10^{-23}} \approx 7 \times 10^4 (\text{K})$$

而金刚石的熔点约 \$4 \times 10^3 \text{ K}\$！

(2) 以 \$E_b\$ 表示击穿场强，要击穿，则需 \$E_b e\lambda = E_g\$，由此得

$$\begin{aligned} E_b &= \frac{E_g}{e\lambda} = \frac{6 \times 1.6 \times 10^{-19}}{1.6 \times 10^{-19} \times 0.2 \times 10^{-6}} = 3 \times 10^7 (\text{V/m}) \\ &= 30 (\text{kV/mm}) \end{aligned}$$

空气的击穿场强为 3 kV/mm，为上述结果的 1/10。

4.5 半 导 体

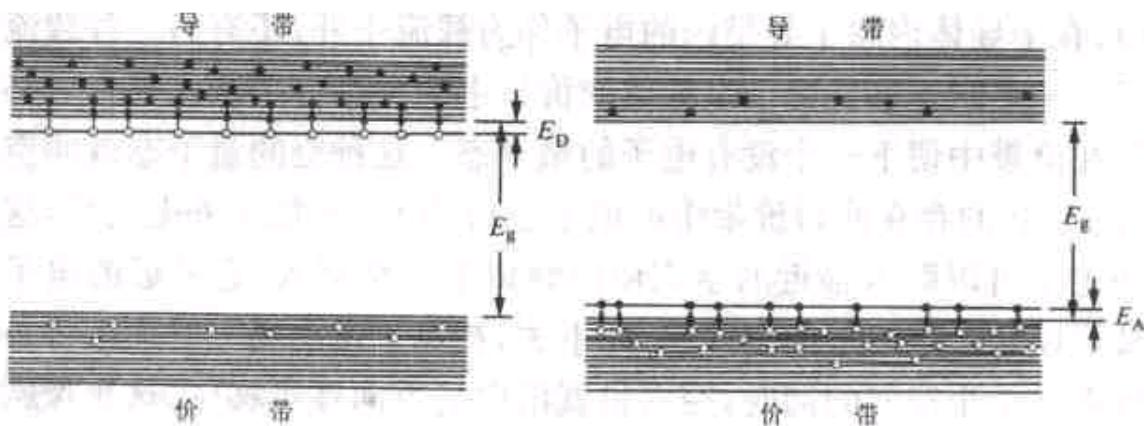
常用的半导体材料有硅和锗，它们的能带结构和绝缘体类似，但是价带到导带的禁带宽度 E_g 较小（图 4.11(c)），如硅为 1.14 eV，锗为 0.67 eV（均在 300 K）。因此在通常情况下就有一定数量的电子在导带中（在 300 K 时电子数密度在 10^{16} m^{-3} 量级，而金属为 10^{28} m^{-3} 量级）。这些电子在电场作用下可以加速而形成电流，但其电导介于导体和绝缘体之间，所以这样的材料称做**半导体**。在温度升高时，价带中电子能吸收晶格离子热运动能量，大量跃入导带而使自由电子数密度大大增加，其对电导的影响远比晶格离子热振动的加强对电导的负影响为大。因此半导体的电导率随温度的升高而明显地增大，这一点和金属导体的电导率随温度的升高而减小是不同的。利用这种性质可用半导体做成**热敏电阻**。有的半导体，如硒，对光很灵敏，在光照射下自由电子数密度也能大量增加。利用这种性质可做成**光敏电阻**。

半导体导电和金属导电的另一个重要区别是在导电机制方面。在半导体内除了导带内的电子作为载流子外，还有另一种载流子——**空穴**。这是由于半导体的价带中的一个电子跃入导带后必然在价带中留下一个没有电子的量子态。这种空的量子态就叫空穴。空穴的存在使得价带中的电子也松动了。当加上外电场后，这些电子可以跃入临近的空穴而同时留下一个空穴，它邻近的电子又可以跃入这留下的空穴。如此下去，在电子逆电场方向逐次替补进入一个个空穴的同时，空穴也就沿电场方向逐步移位。这正像剧场中一排座位除最左端的空着，其余都坐满了人，当从最左边开始各人都依次向左移一个座位时，那空着的座位就逐渐地向右移去一样。理论证明，电子在半导体中这种逐个依次填补空穴的移位和带正电的粒子沿反方向移动产生的导电效果相同，因而可以把这

种形式的导电用带正电的载流子的运动加以说明和计算。这种导电机制就叫**空穴导电**。半导体的导电是导带中的电子导电和价带中的空穴导电共同起作用的结果。

像纯硅和纯锗这种具有相同数量的自由电子和空穴的半导体(图 4.11(c)), 叫做**本征半导体**。

实用的半导体一般都是适量掺入了其他种原子的半导体, 这种半导体叫**杂质半导体**。硅和锗都是 4 价元素, 一种杂质半导体是由导带中的电子和价带中的空穴共同导电的。图 4.11(d) 是杂质半导体的能带图。



于能给出电子而被称为施主,相应的杂质能级称为施主能级。在 N 型半导体中,电子称为多[数载流]子,空穴称为少[数载流]子。(杂质能级上的空穴是被冻结了的,因为价带中的电子很难有能量跃入此一能级而使一个空穴留在价带中,因此掺杂后价带中的空穴数基本不变。)

如果在硅和锗中掺入 3 价元素如铝、铟,由于这种杂质原子只有 3 个价电子,所以一个这种原子取代一个硅原子后,就在硅的正常晶格内缺了一个电子,即杂质原子带来了一个空穴。从能态上说,这种杂质中电子的能级原来在价带上很近处,它和价带顶的能级差 E_A 比禁带宽度也小得多(图 4.12(b)),如铝的 E_A 在硅晶体中只有 0.067 eV。价带中的电子很容易跃入杂质能级而在价带中产生大量的空穴。(进入杂质能级的电子由于 E_g 较大而很难进入导带,所以导带中的电子数基本不变。)这样,在这种杂质半导体中,空穴成了多子,而电子成了少子。这种半导体称做 **P 型半导体** 或**空穴型半导体**,而掺入的 3 价元素由于接受了电子而被称为受主。

4.6 PN 结

现代技术,甚至可以说,现代文明,都是和半导体的应用分不开的,而半导体的各种应用的最基本的结构或者说核心结构是所谓 PN 结。它是在一块本征半导体的两部分分别掺以 3 价和 5 价杂质而制成的。在 N 型和 P 型半导体的接界处就形成 PN 结。下面为了简单起见,我们假设在 PN 结处两型半导体有一个清晰明确的分界面。

如图 4.13 所示,在两种类型的半导体的接界处, N 型区的自由电子将向 P 型区扩散,同时 P 型区的空穴将向 N 型区扩散,在界面附近二者中和(或叫湮灭)。这将导致 N 型侧缺少电子而带正

电，P型侧缺少空穴而带负电。这种空间电荷分布将在界面处产生由N侧指向P侧的电场 E 。这一电场有阻碍电子和空穴继续向对方扩散的作用，最后会达到一定平衡状态。此时在PN交界面邻近形成一个没有电子和空穴的“真空地带”薄层，其中有从N指向P的“结电场” E ，它和电子、空穴的扩散作用相平衡。这一“真空地带”叫**阻挡层**，其厚度约 $1\mu\text{m}$ ，其中电场强度可达 10^4 V/cm 到 10^6 V/cm 。

PN结的重要的独特性能是它只允许单向电流通过。如图4.14(a)那样，将PN结的P区连电源正极，N区连电源负极(这种联接叫做**正向偏置**)时，电源加于PN结的电场与结内电场方向相反，使阻挡层内电场减弱，阻挡层变薄，层内电场与扩散作用的平衡被打破，P区内的空穴和N区内的电子就能不断通过阻挡层向对方扩散，这就形成了正向电流。这电流随正向电压的增大而迅速增大，如图4.14(c)中伏安特性曲线在 $U>0$ 的区域那一段所示。

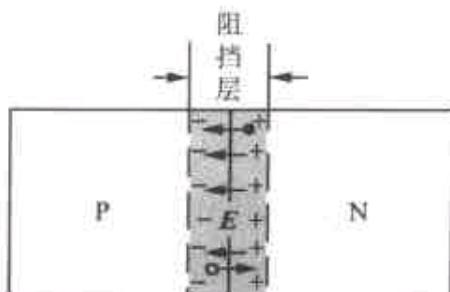


图4.13 平衡时PN结处的
阻挡层和层内的电场

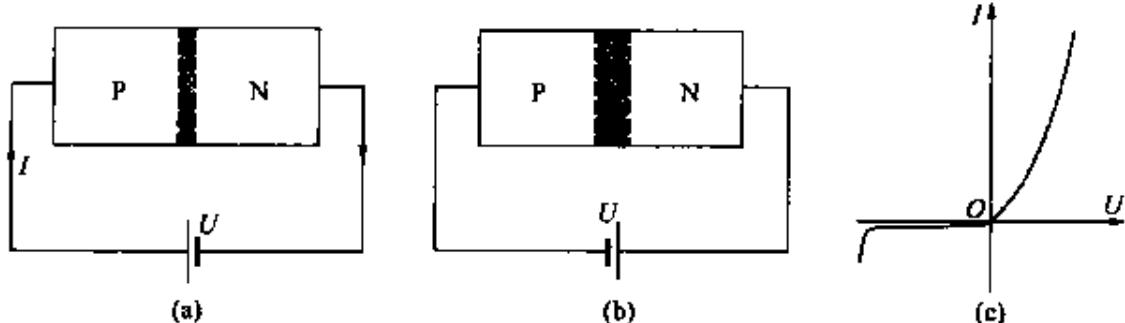


图4.14 PN结的正向偏置(a)和反向偏置(b)以及伏安特性曲线(c)

如果像图4.14(b)那样，将PN结的P区与电源负极相连，N区与电源正极相连(这种联接叫**反向偏置**)时，电源加于PN结的电场与结内电场方向相同，使阻拦层内电场增大，阻拦层变厚。这

使得 P 区内空穴和 N 区内电子更难于向对方扩散，两区中的多子就不可能形成电流，两区内的少子（即 P 区的电子和 N 区的空穴）会沿电场方向产生微弱的反向电流。这微弱电流随着反向电压的增大而很快达到饱和，如图 4.14(c) 中 $U < 0$ 的区域那一段所示。反向电压过大，则 PN 结将被击穿破坏。

PN 结只有在正向偏置时才有电流通过，这就是 PN 结的单向导电性。这种特性使 PN 结能在交变电压的作用下提供单一方向的电流——直流。这就是 PN 结（实际的元件叫半导体二极管）可以用来整流的道理。

4.7 半导体器件

利用 PN 结可以做成很多有独特功能的器件，下面举几个例子。

1. 发光二极管(LED)

正向电流通过 PN 结时，在结处电子和空穴的湮没在能级图上是导带下部的电子越过禁带与价带内空穴中和的过程，这一过程中电子的能量减少因而有能量放出。很多情况下，这能量转化为晶格离子的热振动能量。但是在有些半导体，如砷化镓中，这种能量转化为光子能量放出（图 4.15），这就是发光二极管发光的基本原理。要发出足够强的光需要有足够多的电子和空穴配对，一般的本征半导体或只是 P 型或 N 型的半导体是达不到这一要求的。因为它们不是电子和空穴较少，就是空穴数大大超过电子数，或是电子数大大超过空穴数。但是用 PN 结就可以达到目的，因 P 区有大量空穴而 N 区有大量电子，它们成对湮灭时就能发出足够强的光。商品发光二极管就是在镓中大量掺入砷、磷而做成的，在适当大的电流通过时发出红光。

应注意的是，在发光二极管的 PN 结内的大量电子是处于导

0.6 V, 光能转换为电能的效率不超过 15%。

3. 半导体三极管

半导体二极管由一薄层杂质半导体夹在相反类型的杂质半导体间构成, 这三部分半导体分别称做收集极(c)、基极(b)和发射极(e)。图 4.16 表示一个 NPN 型半导体三极管。工作时, 发射极和基极间取正向偏置而收集极和基极间取反向偏置。这样就有大量电子从发射极拥入基极。由于基极很薄, 所以拥入的电子在此处只能和少数空穴湮灭, 大部分电子都游走到收集极和基极间的 PN 结处。此处结内电场方向由 N 区指向 P 区, 游来的电子将被电场拉入收集极而形成收集极电流 I_c , 另有少量电子从基极流出形成电流 I_b 。 I_b 和 I_c 决定于半导体三极管的几何结构和各半导体的性质。对于给定的三极管,

$$\frac{I_c}{I_b} = \text{常数}$$

此常数一般可做到 20 到 200。当电流 I_b 有微小变化时, I_c 可以发生较大的变化, 因此这种晶体被用做放大器。

4. 金属氧化物场效应管(MOSFET)

这是一种数字逻辑电路中广泛使用的半导体器件。它能迅速地进行数字 1(通)和 0(断)之间的转换, 实现二进位制数码的快速运算, 其结构如图 4.17 所示。在轻度掺杂的 P 型基底上, 用 N 型杂质“过量掺杂”形成两个 N 型“岛”, 一个叫“源”(S), 一个叫“漏”(D), 各通过一金属电极和外部相连。在源和漏之间用一 N 型薄层

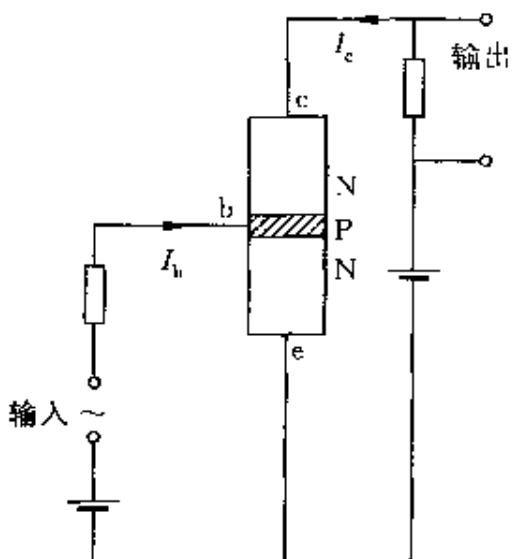


图 4.16 半导体三极管电路

相连形成一个N型通道，N型通道上方则敷以绝缘的氧化物薄层，其上再盖以金属薄层，这层金属薄层叫“栅”(G)。

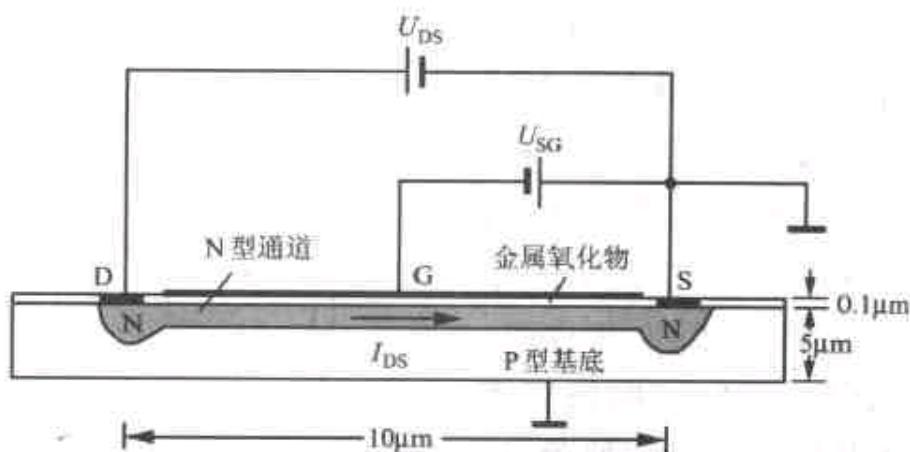


图 4.17 金属氧化物场效应管结构图

先考虑P型基底和源接地而栅和电源未相接的情况。这时如果漏和源之间加以电压 $U_{DS} > 0$ ，则电子将从源流向漏形成由漏到源的电流 I_{DS} ，像图 4.17 所示的那样。

现在在栅和源之间加一电压 U_{SG} ，使栅电势低于源电势，这将使N型通道内形成一指向栅的电场。这一电场将使通道中的电子移向基底从而加宽通道和基底交界处的阻拦层而使通道变窄，同时还由于通道内电子数减少而使通道电阻增大，这都将使通道电流 I_{DS} 减小。适当增大 U_{SG} ，则 I_{DS} 可以完全被阻断。这样，通过改变 U_{SG} ，就可以控制 I_{DS} 的通断从而给出数字 1 或 0 的信号。

5. 集成电路

现代计算机和各种电子设备使用成千上万的半导体器件和电阻、电容等元件。这么多的元件并不是一个一个的单独元件联接在一起的，而是极其精巧地制备在一小片半导体基底上形成一个集成电路或集成块。(本书封面彩图为清华大学微电子所大规模集成电路实验室情景。)集成电路的元件数从上千、上万不断增加，以至目前的超大规模集成电路在 1 cm^2 基片上可以包含有几十万、上

百万个元件，布线的间距已接近纳米量级，而且还在向更多元件更小间距发展。各种各样的集成块具有各种各样的功能，它们的组合更是创造了当今信息时代很多难以想象的奇迹。这不能不使人惊叹人类的智慧和科学的威力！

提 要

1. 自由电子按能量分布

$$0\text{ K 时的费米能量: } E_F = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_e} n^{2/3}$$

$$\text{费米温度: } T_F = E_F/k$$

自由电子按能量分布的单位体积内的态密度：

$$g(E) = \frac{(2m_e)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2}$$

在 0 K，自由电子占满 E_F 以下的所有量子态。常温下，自由电子分布和 0 K 时基本相同。

泡利不相容原理使自由电子对金属比热贡献甚微。

2. 自由电子导电机制

泡利不相容原理不阻碍自由电子的导电。

电子导电可用费米(速度)球说明。倒逆碰撞使费米球只逆电场方向平移一定速度，此速度即电子的漂移速度。

3. 量子统计

费米子服从费米-狄拉克分布(FD 分布)，即一个能量为 E 的量子态上存在的粒子数平均为

$$n_{FD,1}(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}$$

自由电子分布即 FD 分布，可说明自由电子的分布规律。

玻色子服从玻色-爱因斯坦分布(BE 分布)，即一个能量为 E 的量子态上存在的粒子数平均为

$$n_{\text{BE},1}(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} - 1}$$

光子分布即 BE 分布, 可说明普朗克热辐射公式。

经典粒子服从麦克斯韦-玻耳兹曼分布(MB 分布)。 $n_{\text{MB}}(E) = Ce^{-E/kT}$ 。粒子能量足够大时, FD 分布和 BE 分布都转化为 MB 分布。

量子统计适用条件: $\frac{hn^{1/3}}{\sqrt{3mkT}} \gg 1$

4. 能带, 导体和绝缘体

N 个原子集聚成晶体时, 孤立原子的每一能态都分裂成 N 个能态, 分裂的程度随原子间距的缩小而增大。在一定间距处同一能级分裂成的 N 个能级的间距很小, 这 N 个能级就共同构成一能带。

晶体的最上面而且其中有电子存在的能带叫价带, 其上相邻的那个空着的能带叫导带, 能带间没有可能量子态的区域叫禁带。

价带未填满的晶体为导体。价带为电子填满而且它和导带间的禁带宽度甚大的晶体为绝缘体。

5. 半导体

半导体在 0 K 时, 价带为电子填满, 导带空着, 但价带和导带间的禁带宽度较小。在常温下有电子从价带跃入导带, 可以导电。电导率随温度升高而明显增大。除电子导电外, 半导体还同时有空穴导电。纯硅纯锗电子和空穴数目相同, 为本征半导体。

杂质半导体: 纯硅或纯锗(4 价)掺入 5 价原子成为 N 型半导体, 其中电子是多子, 空穴是少子; 纯硅或纯锗掺入 3 价原子成为 P 型半导体, 其中电子是少子, 空穴是多子。

6. PN 结

P 型半导体和 N 型半导体相接处的薄层内由于电子和空穴向对方扩散而形成一阻挡层, 层内存在由 N 侧指向 P 侧的电场。

这一薄层即 PN 结。

PN 结具有单向导电作用。

7. 半导体器件

利用 PN 结做成了各种器件,如发光二极管、光电池、三极管、金属氧化物场效应管等等。集成块包含有大量的元件,在现代科学技术中有广泛的应用。

思 考 题

4. 1 金属中的自由电子在什么条件下可以看成是“自由”的?
4. 2 金属中的自由电子为什么对比热贡献甚微而却能很好地导电?
4. 3 量子统计的适用条件是根据什么原则给出的?
4. 4 什么是能带、禁带、导带、价带?
4. 5 导体、绝缘体和半导体的能带结构有何不同?
4. 6 硅晶体掺入磷原子后变成什么型的半导体?这种半导体是电子多了,还是空穴多了?这种半导体是带正电,带负电,还是不带电?
4. 7 将铟掺入锗晶体后,空穴数增加了,是否自由电子数也增加了?如果空穴数增加而自由电子数没有增加,锗晶体是否会带上正电荷?
4. 8 本征半导体、单一的杂质半导体都和 PN 结一样具有单向导电性吗?
4. 9 根据霍尔效应测磁场时,用杂质半导体片比用金属片更为灵敏,为什么?
4. 10 水平地放置一片矩形 N 型半导体片,使其长边沿东西方向,再自西向东通入电流。当在片上加以竖直向上的磁场时,片内霍尔电场的方向如何?如果换用 P 型半导体片,而电流和磁场方向不变,片内霍尔电场的方向又如何?
4. 11 用本征半导体片能测到霍尔电压吗?
4. 12 在 MOSFET(图 4.17)中,增大 U_{SG} 直至 N 型通道被阻断而使 I_{DS} 降至 0。通道被阻断是先从源一端开始,还是先从漏一端开始,或是全通道同时阻断?

4.13 电视机的遥控是通过红外线实现的,在遥控器和电视机内部为此使用了半导体元件。在遥控器内是何种元件? 在电视机内又是何种元件?

习 题

4.1 已知金的密度为 19.3 g/cm^3 , 试计算金的费米能量、费米速度和费米温度。具有此费米能量的电子的德布罗意波长是多少?

4.2 求 0 K 时单位体积内自由电子的总能量和每个电子的平均能量。

*4.3 求 0 K 时费米电子气的电子的平均速率和方均根速率, 以 v_F 表示之。

4.4 中子星由费米中子气组成。典型的中子星密度为 $5 \times 10^{16} \text{ kg/m}^3$, 试求中子星内中子的费米能量和费米速率。

*4.5 在什么温度下, 费米电子气的比热占经典气体比热的 10%? 设费米能量为 5 eV。

*4.6 在足够低的温度下, 由晶格粒子的振动决定的“点阵”比热和 T^3 成正比。由于“电子”比热和 T 成正比, 所以在极低温度下, “电子”比热将占主要地位。在这样的温度下, 钾的摩尔热容表示为

$$C_m = (2.08 \times 10^{-3}T + 2.57 \times 10^{-3}T^3) \text{ J/(mol} \cdot \text{K})$$

(1) 求钾的费米能量;

(2) 在什么温度下电子和点阵粒子对比热的贡献相等?

4.7 银的密度为 $10.5 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, 电阻率为 $1.6 \times 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$ (在室温下)。

(1) 求其中自由电子的自由飞行时间;

(2) 求自由电子的经典平均自由程;

(3) 用费米速率求平均自由程;

(4) 估算点阵离子间距并和(2),(3)求出的平均自由程对比。

*4.8 在 1000 K 时, 在能量比费米能量高 0.1 eV 的那个量子态内的平均费米子数目是多少? 比费米能量低 0.10 eV 的那个量子态内呢?

4.9 金刚石的禁带宽度按 5.5 eV 计算。

(1) 禁带顶和底的能级上的电子数的比值是多少? 设温度为 300 K。

(2) 使电子越过禁带上升到导带需要的光子的最大波长是多少?

4.10 纯硅晶体中自由电子数密度 n_0 约为 10^{16} m^{-3} 。如果要用掺磷的方法使其自由电子数密度增大 10^6 倍, 试求:

(1) 多大比例的硅原子应被磷原子取代? 已知硅的密度为 2.33 g/cm^3 。

(2) 1.0 g 硅这样掺磷需要多少磷?

4.11 硅晶体的禁带宽度为 1.2 eV 。适量掺入磷后, 施主能级和硅的导带底的能级差为 $\Delta E_D = 0.045 \text{ eV}$ 。试计算此掺杂半导体能吸收的光子的最大波长。

4.12 已知 CdS 和 PbS 的禁带宽度分别是 2.42 eV 和 0.30 eV 。它们的光电导的吸收限波长各多大? 各在什么波段?

4.13 Ga-As-P 半导体发光二极管的禁带宽度是 1.9 eV , 它能发出的光的最大波长是多少?

4.14 KCl 晶体在已填满的价带之上有一个 7.6 eV 的禁带。对波长为 140 nm 的光来说, 此晶体是透明的还是不透明的?

第5章 核 物 理

自 1911 年卢瑟福通过 α 粒子散射实验发现原子的核式结构以来，已获得了很多关于核的知识，包括核的结构、能量以及核的转化等。有很多知识，如核能、放射性同位素等，已得到了广泛的应用。本章先概述核的一般性质，包括核的组成、大小、自旋等，然后讲解使核保持稳定的核力和结合能。核的模型只着重介绍了液滴模型，以便计算核裂变或聚变时所释放的能量。再然后讲解放射性衰变的规律以及 α 衰变和 β 衰变的特征，对 γ 射线特别介绍了穆斯堡尔效应及其一些应用。最后介绍了有关核反应的基本知识。

5.1 核的一般性质

1. 核的组成

卢瑟福的实验结果说明，虽然核的体积只有原子体积的 10^{-15} 分之一，但核中却集中了原子的全部正电荷和几乎全部质量。由于核的正电荷是氢核正电荷的整数倍，所以一般就认为氢核是各种核的组分之一而被称为质子。由于核的质量总是大于由其正电荷所显示的质子的总质量，所以人们又设想核是质子和电子的复合体，多于电子的质子的总电荷就是核的电荷。但通过计算知道核内不可能存在单独的电子（参看习题 1.29）。1932 年查德威克通过实验发现了核内存在一种质量和质子相近但不带电的粒子，以后被称为中子。此后人们就公认核是由质子和中子组成的，质子和中子也因此统称为核子。

质子和中子的质量大约是电子质量的 1 840 倍。质子所带电

量和电子的相等,但符号相反。质子和中子的自旋量子数和电子的一样,都是 $1/2$,因此它们都是费米子。表5.1列出了质子、中子和电子各种内禀性质的比较,其中质量的单位“u”叫原子质量单位,它是 ^{12}C 原子的质量的 $1/12$ 。原子质量单位和其他单位的换算关系为

$$1\text{u} = 1.660\,540\,2 \times 10^{-27} \text{ kg} = 931.494\,3 \text{ MeV}/c^2$$

表5.1 质子、中子和电子的内禀性质比较

内禀性质	质子	中子	电子
质量/u	1.007 276 466 0	1.008 664 923 5	$5.485\,799\,03 \times 10^{-4}$
质量/kg	$1.672\,623\,1 \times 10^{-27}$	$1.674\,928\,6 \times 10^{-27}$	$9.109\,389\,7 \times 10^{-31}$
质量/ $\text{MeV} \cdot c^{-2}$	938.272 31	939.565 63	0.511 0
电荷/e	+1	0	-1
自旋量子数	$1/2$	$1/2$	$1/2$
磁矩①/ $\text{J} \cdot \text{T}^{-1}$	$1.410\,607\,61 \times 10^{-26}$	$-0.966\,236\,69 \times 10^{-26}$	$9.284\,770\,1 \times 10^{-24}$

不同元素的原子核中的中子数和质子数不同。质子数 Z 叫核的原子序数。中子数 N 和质子数 Z 的和用 A 表示,即

$$A = Z + N \quad (5.1)$$

A 叫核的质量数,因为核的质量几乎就等于 A 乘以一个核子的质量。原子核通常用 ${}^A_Z\text{X}$ 表示,其中 X 表示该核所属化学元素的符号。由于各元素的原子序数 Z 是一定的,所以也常不写 Z 值,如写成 ${}^{16}\text{O}$, ${}^{107}\text{Ag}$, ${}^{238}\text{U}$ 等。

同一元素的原子的核中的质子数是相同的,但中子数可能不同。质子数相同而中子数不同的核叫同位素,取在周期表中位置相同之意。如碳的同位素有 ${}^6\text{C}$, ${}^7\text{C}$, \dots , ${}^{12}\text{C}$, ${}^{13}\text{C}$, ${}^{14}\text{C}$, \dots , ${}^{20}\text{C}$ 等。天然存

① 所列磁矩的值都是各该磁矩在 z 方向的投影,只有这投影是实际上能测出的。

在的各元素中各同位素的多少是不一样的，各种同位素所占比例叫各该同位素的天然丰度。例如在碳的同位素中， ^{12}C 的天然丰度为 98.90%， ^{13}C 的为 1.10%，而 ^{14}C 的只是 $1.3 \times 10^{-10}\%$ 。许多同位素是不稳定的，经过或长或短的时间要衰变成其他的核。因此，许多同位素，包括 $Z > 92$ 的各种核都是天然不存在的，只能在实验室中通过核反应人工地制造出来。

2. 核的大小

卢瑟福根据他们的实验结果计算出来的核的线度为 10^{-15} m 量级。其他实验（包括高能电子散射实验）给出，如果把核看作球形，则核的半径 R 和 $A^{1/3}$ 成正比，即

$$R = r_0 A^{1/3} \quad (5.2)$$

其中

$$r_0 = 1.2\text{ fm} = 1.2 \times 10^{-15}\text{ m}$$

由(5.2)式可算得 ^{56}Fe 核的半径为 4.6 fm， ^{238}U 的核半径为 7.4 fm。当然，由于粒子的波动性，核不可能有清晰的表面。有的实验还证明，有的核的形状明显地不是球形而是椭球形或梨形。

由于球的体积和半径的 3 次方成正比，所以原子核的体积和质量数 A 成正比。这表示核好像是 A 个不可压缩的小球紧挤在一起形成的。由此也可知各种核的密度都是一样的，其大小为

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{1.67 \times 10^{-27} A}{\frac{4}{3}\pi \times (1.2 \times 10^{-15})^3 A} = 2.3 \times 10^{17} (\text{kg/m}^3)$$

这一数值比地球的平均密度大到 10^{14} 倍！

3. 核的自旋和磁矩

核子在核内运动的轨道角动量和自旋角动量之和称为核的自旋角动量，简称核自旋。核自旋量子数用 I 表示。按一般的量子规则，核的自旋角动量的大小为 $\sqrt{I(I+1)}\hbar$ 。核自旋在 z 方向的投影为

$$I_z = m_I \hbar, \quad m_I = \pm I, \pm (I-1) \cdots, \pm \frac{1}{2} \text{ 或 } 0 \quad (5.3)$$

I 的值可以是半整数或整数。实验结果指出, 偶偶核 (Z, N 都是偶数) 的自旋都是零, 如 ${}^4\text{He}$, ${}^{12}\text{C}$, ${}^{238}\text{U}$ 等就是。奇奇核 (Z, N 都是奇数) 的自旋都是整数, 如 ${}^{34}\text{Cl}$ 的是 0, ${}^{10}\text{B}$ 的是 3, ${}^{26}\text{Al}$ 的是 5, 等等。这些核都是玻色子。奇偶核 (Z, N 中一个是奇数, 一个是偶数) 的自旋都是半整数, 如 ${}^{15}\text{N}$ 的是 $1/2$, ${}^{29}\text{Na}$ 的是 $3/2$, ${}^{25}\text{Mg}$ 的是 $5/2$, ${}^{83}\text{Kr}$ 的是 $9/2$ 等。这些核都是费米子。

和角动量相联系, 核有磁矩。质子由于其轨道角动量而有轨道磁矩 $\mu_L = \frac{e}{2m_p} L$ 。此磁矩在 z 方向的投影为

$$\mu_{L,z} = \frac{e}{2m_p} L_z = \frac{e\hbar}{2m_p} m_t = \mu_N m_t \quad (5.4)$$

式中常量

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5.057\ 866 \times 10^{-27} \text{ J/T} \quad (5.5)$$

叫做核磁子。它比电子的玻尔磁子小到 5×10^{-4} 。中子由于不带电, 所以没有轨道磁矩。

质子和中子都由于自旋而有自旋磁矩

$$\mu_s = g_s \left(\frac{e}{2m_p} \right) S \quad (5.6)$$

它在 z 方向的投影为

$$\mu_{s,z} = g_s \left(\frac{e\hbar}{2m_p} \right) m_s = g_s \mu_N m_s, \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (5.7)$$

式中 g_s 叫 **g 因子**。质子的 g 因子 $g_{s,p} = 5.585\ 7$, 中子的 g 因子 $g_{s,n} = -3.826\ 1$ 。由于 $m_s = \pm \frac{1}{2}$, 所以质子的自旋磁矩在 z 方向的投影为

$$\mu_{p,z} = 2.792\ 8 \mu_N = 1.410\ 6 \times 10^{-26} \text{ J/T}$$

中子的自旋磁矩在 z 方向的投影为

$$\mu_{n,z} = -1.9131\mu_N = -0.9662 \times 10^{-26} \text{ J/T}$$

中子的磁矩为负值表示其磁矩方向和自旋方向相反。中子不带电为什么有自旋磁矩呢?这是因为中子只是整体上不带电。电子散射实验证明,中子由带正电的内核和带负电的外壳构成^①。按经典模型处理,自旋着的中子就有磁矩而且其磁矩的方向和自旋的方向相反。

整个核的自旋角动量用 I 表示,其磁矩为 $\mu = g \frac{e}{2m_p} I$ 。核磁矩在 z 方向的分量为 $\mu_z = g \frac{e}{2m_p} I_z = g \frac{e\hbar}{2m_p} m_I = g\mu_N m_I$ 。

5.2 核 力

由于核中质子间的距离非常小,因而它们之间的斥力很大。核的稳定性说明核子之间一定存在着另一种和库仑斥力相抗衡的吸引力,这种力叫核力或强力(核子是“强子”)。在核的线度内,核力可能比库仑力大得多。例如,中心相距 2 fm 的两个质子,其间库仑力约为 60 N,而相互吸引的核力可达 2×10^3 N。

核力虽然比电磁力大得多,但力程非常短,它不像电磁力那样是长程力。当两核子中心相距大于核子本身线度时,核力几乎已完全消失。因此,在核内,一个核子只受到和它“紧靠”的其他核子的核力作用,而一个质子却要受到核内所有其他质子的电磁力。

实验证明,核力与电荷无关。质子和质子,质子和中子,中子和中子之间的作用力是一样的。质子-质子和中子-质子的散射实验证明了这一点,一个质子和一个中子的平均结合能相同也支持了这一结论。

^① 参看本套教材第三册电磁学第 1.1 节图 1.1 和习题 1.25。

实验证明，核力和核子自旋的相对取向有关。两个核子自旋平行时的相互作用力大于它们自旋反平行时的相互作用力。氘核的稳定基态是两个核子的自旋平行状态就说明了这一点。氘的自旋磁矩为 $0.8574\mu_N$ ，这与质子和中子的磁矩之和 $0.8797\mu_N$ 是十分相近的。

强力不像库仑力那样是有心力。更奇特的是，强力是一种多体力，即两个核子的相互作用力和其他相邻的核子的位置有关。因此，强力不遵守叠加原理，强力的这种性质给核子系统的理论计算带来巨大的困难。

由于核力的复杂性，它还没有精确的表达式。通常就用一个势能函数（薛定谔方程就要用这个函数）或势能曲线表示两个核子之间的相互作用。图 5.1 就是两个自旋反平行而轨道角动量为零的两个核子之间的势能曲线。它的形状和两个中性分子或原子之间的势能曲线^①相似，只是横轴的距离标度小很多（小到 10^{-15} m）而竖轴的能量标度又大很多（大到分子间势能的 10^8 倍）。这种相似不是偶然的。两个中性原子之间的作用力本质上是电磁

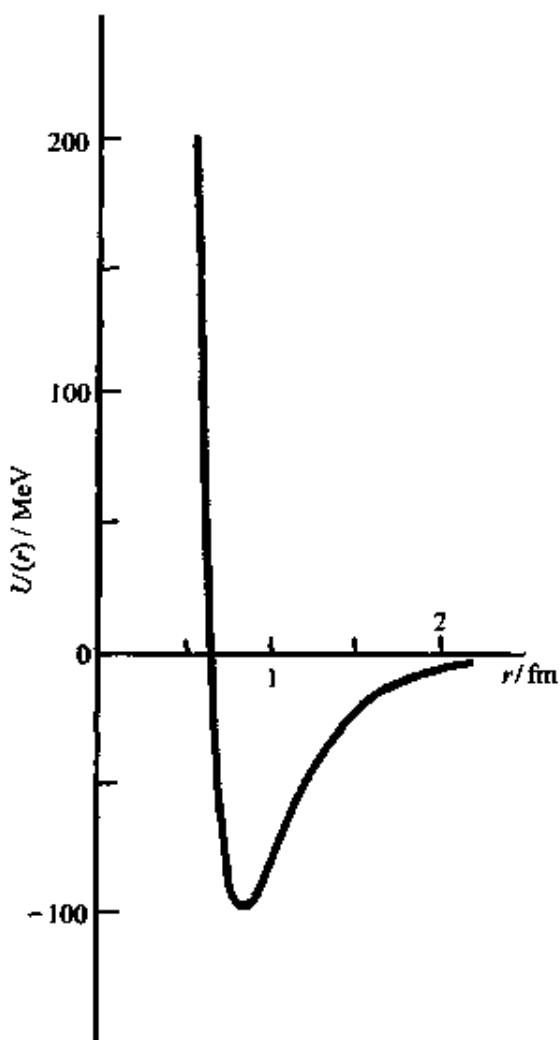


图 5.1 核力势能曲线

^① 参看本套教材第一册力学第 4.8 节图 4.17。

力。由于每个原子都是中性的，所以它们之间的电磁力是两个带电系统的正负电荷相互作用的电磁力抵消之后的残余电磁力。对核子来说，现已确认核子是由夸克组成。每个夸克都有“色荷”作为其内禀性质。色荷有三种：“红”、“绿”、“蓝”。三“色”俱全，则色荷为零。色荷具有相互作用力，叫色力。每个核子都由三个色荷不同的夸克构成，总色荷为零。两个核子之间的作用力就是组成它们的夸克之间的相互作用力抵消之后的残余色力的表现，图 5.1 就是这种残余色力的势能曲线。可以说，和原子之间的力相比较，同为残余力，所以具有形状相似的势能曲线。由图 5.1 可以看出，在两核子相距超过 2 fm 时，核力基本上消失了。距离稍近一些，核力是吸引力；相距约小于 1 fm 时，核力为斥力，而且随距离的减小而迅速增大。这可以说明核子有一定“半径”。这种斥力实际上是两个夸克的波函数相互重叠时泡利不相容原理起作用的结果（夸克都是费米子）。

例 5.1 估算其势能曲线如图 5.1 所示的那两个核子相距 1.0 fm 时的相互作用核力并与电磁力相比较。

解 在图中作 $r = 1.0 \text{ fm}$ 处的曲线的切线，其斜率约为 $100/0.7$ (MeV/fm)，于是相互作用核力为

$$F_N = -\frac{\Delta U}{\Delta r} = -\frac{100 \times 10^6 \times 1.6 \times 10^{-19}}{0.7 \times 10^{-15}} = -2.3 \times 10^4 (\text{N})$$

负号表示在 $r = 1.0 \text{ fm}$ 时两核子相互吸引。在该距离时两质子的相互库仑斥力为

$$F_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{9 \times 10^9 \times (1.6 \times 10^{-19})^2}{(1.0 \times 10^{-15})^2} = 2.3 \times 10^2 (\text{N})$$

此力较核力小到 10^{-2} 。

5.3 核的结合能

由于核力将核子聚集在一起，所以要把一个核分解成单个的

中子或质子时必须反对核力做功，为此所需的能量叫做核的结合能。它也就是单个核子结合成一个核时所能释放的能量。

一个核的结合能 E_b 可以由爱因斯坦质能关系求出。以 m_N 表示核的质量，则能量守恒给出

$$(Zm_p + Nm_n)c^2 = m_Nc^2 + E_b$$

由此得

$$E_b = (Zm_p + Nm_n - m_N)c^2 = \Delta mc^2 \quad (5.8)$$

式中 $\Delta m = Zm_p + Nm_n - m_N$ 叫核的**质量亏损**，它是单独的核子结合成核后其总的静质量的减少。由于数据表一般多给出原子的质量，所以利用质量亏损求结合能时多用氢原子的质量 m_H 代替 (5.8) 式中的 m_p ，而用原子质量 m_a 代替其中的核质量 m_N 而写成

$$E_b = (Zm_H + Nm_a - m_a)c^2 \quad (5.9)$$

可以看出在此式中所涉及的电子的质量是消去了的，结果和 (5.8) 式一样。

例 5.2 计算⁵Li 核和⁶Li 核的结合能，给定⁵Li 原子的质量为 $m_5 = 5.012\ 539\text{ u}$ ，⁶Li 原子的质量为 $m_6 = 6.015\ 121\text{ u}$ ，氢原子的质量为 $m_H = 1.007\ 825\text{ u}$ 。比较⁵Li 核的质量与质子及 α 粒子的质量和 ($m_{He} = 4.002\ 603\text{ u}$)。

解 由 (5.9) 式可得⁵Li 核和⁶Li 核的结合能分别为

$$\begin{aligned} E_{b,5} &= (3 \times 1.007\ 825 + 2 \times 1.008\ 665 - 5.012\ 539) \times 931.5 \\ &= 26.3\text{ (MeV)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{b,6} &= (3 \times 1.007\ 825 + 3 \times 1.008\ 665 - 6.015\ 121) \times 931.5 \\ &= 32.0\text{ (MeV)} \end{aligned}$$

由子 $m_5 = 5.012\ 539\text{ u} > m_H + m_{He} = 5.010\ 428\text{ u}$

可知⁵Li 核的质量大于质子和 α 粒子的质量和。因此⁵Li 核不稳定，它会分裂成一个质子和一个 α 粒子并放出一定的能量，这能量可计算为

$$(5.012\ 539 - 5.010\ 428) \times 931.5 = 2.0\text{ MeV}$$

不同的核的结合能不相同，更令人注意的是平均结合能，即

就一个核平均来讲,一个核子的结合能。图 5.2 画出了稳定核的平均结合能 $E_{b,1}$ 和质量数 A 的关系。开始时, $E_{b,1}$ 很快随 A 的增大而增大,而在 $A = 4(\text{He}), 12(\text{C}), 16(\text{O}), 20(\text{Ne})$ 和 $24(\text{Mg})$ 时具有极大值,说明这些核比与其相邻的核更稳定。在 $A > 20$ 时 $E_{b,1}$ 差不多与 A 无关,都大约为 8 MeV。这说明核力的一种“饱和性”,这种饱和性是核力的短程性的直接后果。由于一个核子只和与它紧靠的其他核子有相互作用,而在 $A > 20$ 时在核内和一个核紧靠的粒子数也基本不变了,因此,核子的平均结合能也就基本上不随 A 的增加而改变了。

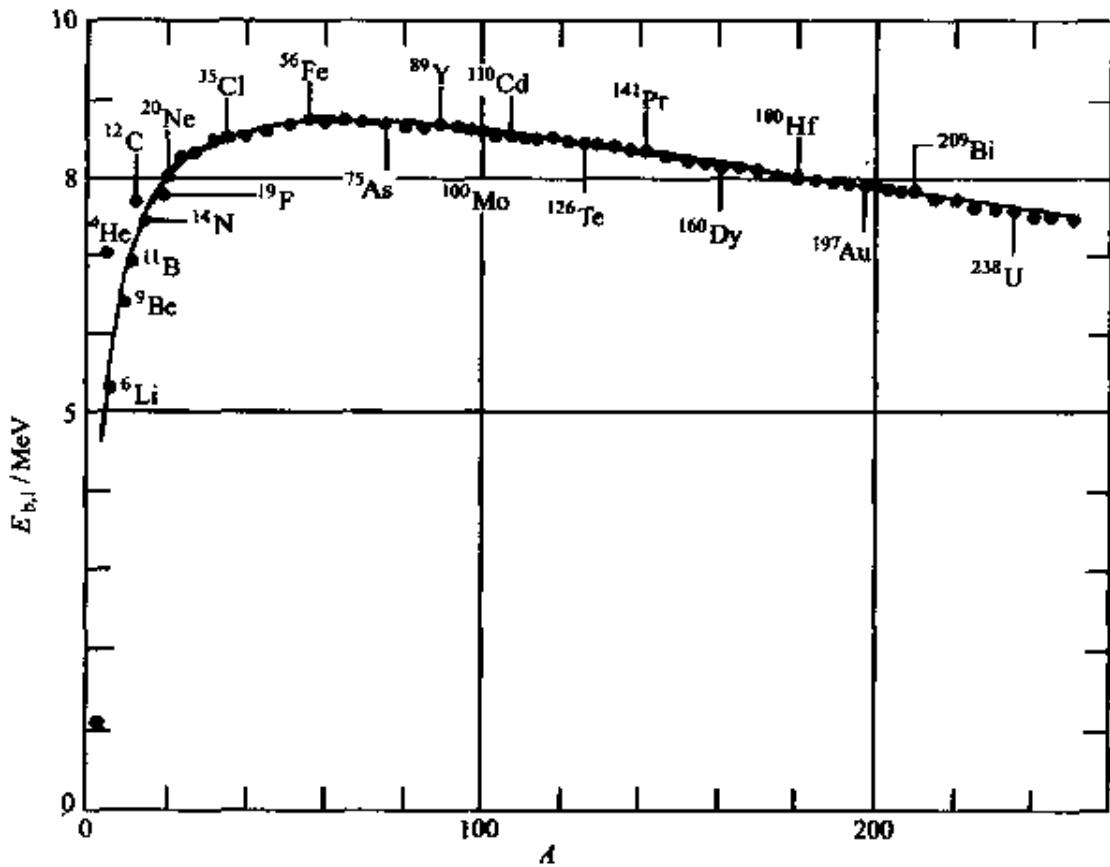


图 5.2 平均结合能和质量数的关系图

核内质子之间有库仑斥力作用。这力和核力不同,为长程力。因此,一个质子要受到核内所有其他质子的作用。当质子数增大

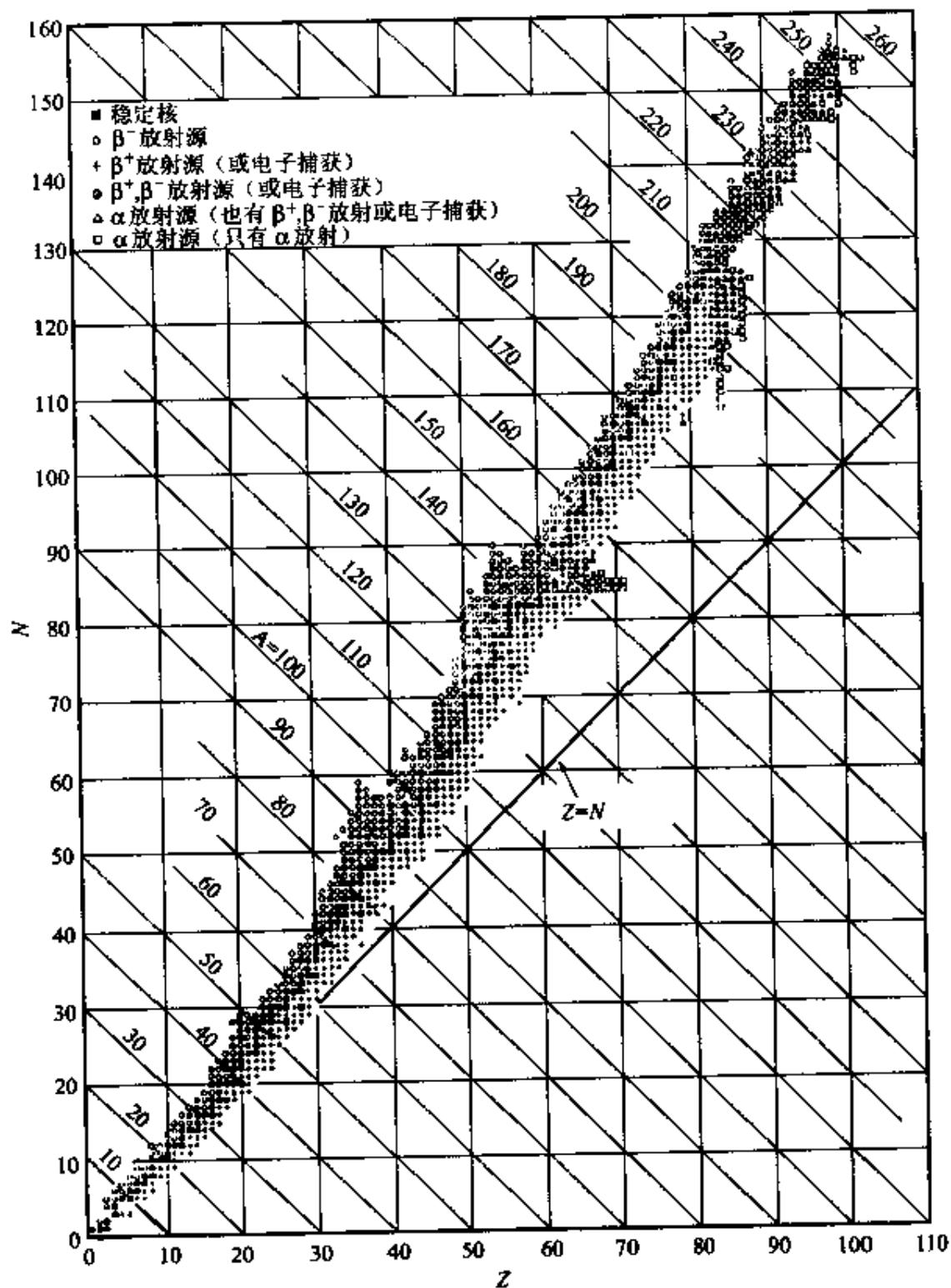


图 5.3 核的中子数和质子数的关系

时,库仑力的效果渐趋显著。这斥力有减小结合能的作用,这就是图5.2中 $A > 60$ 时 $E_{b,1}$ 逐渐减小的原因。结合能的减少将削弱核的稳定性。中子不带电,不受库仑斥力的作用。因此,在核内增加质子数的同时,多增加一些中子将会使核更趋稳定。图5.3中标出了稳定核的中子数和质子数的关系,在质量数大时,中子数超过质子数就是由于这种原因。质子数很大时,稳定性将不复存在。实际上,正如图5.3所示,在 $Z > 81$ 的绝大多数同位素核都是不稳定的,它们都会通过放射现象而衰变。

从图5.2的核子平均结合能曲线还可看出,重核分裂为轻核时是会放出能量的(因为两个轻核的结合能大于分裂前那个重核的结合能)。这种释放能量的方式叫裂变。裂变除了应用于爆炸——原子弹,目前已被广泛地应用于发电或供暖,这种原子能发电站的“锅炉”,即释放核能的部位叫反应堆。图5.2还说明,两个轻核聚合在一起形成一个新核时也会放出能量(因为原来两个轻核的结合能小于聚合成的新核的结合能)。这种释放能量的方式叫聚变。目前已应用于爆炸——氢弹,而人工控制的聚变还正在积极研究中。

* 5.4 核的液滴模型

到目前为止,核的结构还不能有精确全面的理论描述,因此,只能利用模型来近似。已提出了许多模型,每种模型能解释某一方面的问题。作为例子,下面介绍核的液滴模型,它曾在裂变能量的计算中给出过重要的结果。

液滴模型最初是由玻尔根据核力和液体的分子力的相似而提出的。此模型设想核是一滴“核液”,核力在核子间距很小时变为巨大的斥力使核液具有“不可压缩性”,核子间距较大时,核力又表现为引力。斥力和引力的平衡使得核子之间保持一定的平衡间距而

使核液有一恒定的密度。像普通的液滴由于表面张力而聚成球形那样，也可以设想核液滴也有表面张力而使核紧缩成球形。在这种相似的基础上，核的液滴模型提出了一个核的结合能的计算公式，该公式包括以下几项。

(1) 体积项 这是由核力的近程性决定的能量。由于一个核子只和它紧邻的核子有相互作用，整个核内的核子间的核力相互作用能就和总核子数 A 成正比(当 A 比较大时)。因此由于核力产生的结合能应为

$$a_1 A$$

此处 a_1 是一正的比例常量。由于核子之间的相互作用是核力占优势，所以在结合能表示式中，这一项也是最主要的一项。

(2) 表面项 由于表面的核子的紧邻核子数比内部核子的紧邻核子数少，所以上项应加以一负值的修正。由于表面核子数和表面积成正比，而表面积和核半径 R 的平方，也就是 $A^{2/3}$ 成正比，所以这一修正项应为

$$- a_2 A^{2/3}$$

此处 a_2 是另一个比例常量。

(3) 电力项 质子间的库仑斥力有减少结合能的效果，所以应再加以库仑势能的修正项。按电荷均匀分布的球体计算，库仑势能与 Q^2/R 成正比。由于 $Q \propto Z$, $R \propto A^{1/3}$ ，所以这一电力项应为

$$- a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}}$$

(4) 不对称项 这是一个量子力学修正项。量子理论认为核子在核内都处于一定的能级上。由于是费米子，当质量数逐渐增加时，核子将从最低能级开始向上填充。这种填充以中子数和质子数相同时比较稳定(图 5.4(a))。在 A 相同并且 $N = Z$ 时如果将一个质子改换成一个中子，该中子势必要进入更高的能级(图 5.4(b))，这将增大核的能量从而使结合能减少。 $N \neq Z$ 就叫做不对称。 $|Z - N|$

越大，则核的能量越大，结合能越小。可以设想由不对称引起的能量增加和 $|Z - N| = |A - 2Z|$ 或 $(A - 2Z)^2$ 成正比。另外， A 越大，核子要填充的能级越高而能级差越小。所以，又可以认为这一项修正和 A 成反比。于是不对称项就应为

$$-a_4(A - 2Z)^2/A$$

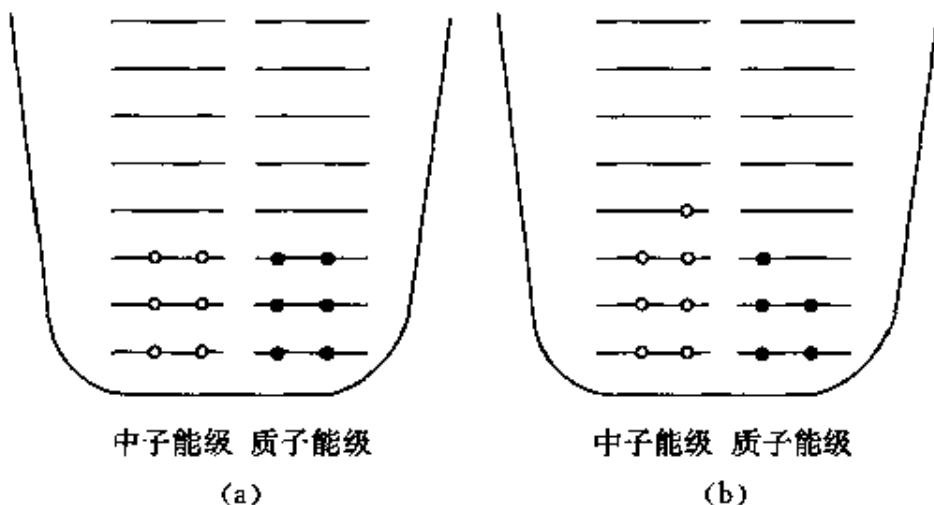


图 5.4 不对称项的说明

(5) 对项 这是一项实验结果的引入, 对结合能的影响是: 偶偶核为正, 奇奇核为负, 而奇偶核为 0。此项的形式为

$$a_5 A^{-1/2}$$

将以上 5 项合并, 可得整个关于结合能的公式为

$$\begin{aligned} E_b = & a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 Z^2 / A^{1/3} \\ & - a_4 (A - 2Z)^2 / A + a_5 A^{-1/2} \end{aligned} \quad (5.10)$$

式中的 5 个常量要通过用最小二乘法去和实验结果拟合来求得。下面的一组数据使(5.10)式和实验结果非常相近(特别是对于 $A > 20$ 的核):

$$a_1 = 15.753 \text{ MeV}$$

$$a_2 = 17.804 \text{ MeV}$$

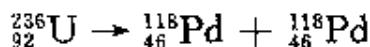
$$a_3 = 0.7103 \text{ MeV}$$

$$a_4 = 23.69 \text{ MeV}$$

$$a_5 = \pm 11.18 \text{ MeV} \text{ 或 } 0$$

(5.10) 式最早是由韦塞克(C. F. von Weisäcker)1935年提出的,现在就叫核结合能的韦塞克半经验公式。

利用韦塞克半经验公式曾成功地计算过重核的裂变能。考虑 ^{236}U 核(^{235}U 核吸收一个中子生成)裂变为两个相等的裂片:



此反应中,质量数为A,质子数为Z的一个核变成了两个质量数为A/2,质子数为Z/2的核。由韦塞克公式可得原来的重核的结合能为(忽略最后一项)

$$\begin{aligned} E_{b,A,Z} = & \left[15.753A - 17.804A^{2/3} - 0.7103 \frac{Z^2}{A^{1/3}} \right. \\ & \left. - 23.69 \frac{(A-2Z)^2}{A} \right] \text{MeV} \end{aligned}$$

裂变后每个核的结合能为

$$\begin{aligned} E_{b,A/2,Z/2} = & \left[15.753 \frac{A}{2} - 17.804 \left(\frac{A}{2} \right)^{2/3} - 0.7103 \frac{(Z/2)^2}{(A/2)^{1/3}} \right. \\ & \left. - 23.69 \frac{(A/2-2Z/2)^2}{A/2} \right] \text{MeV} \end{aligned}$$

此裂变释放出的能量为

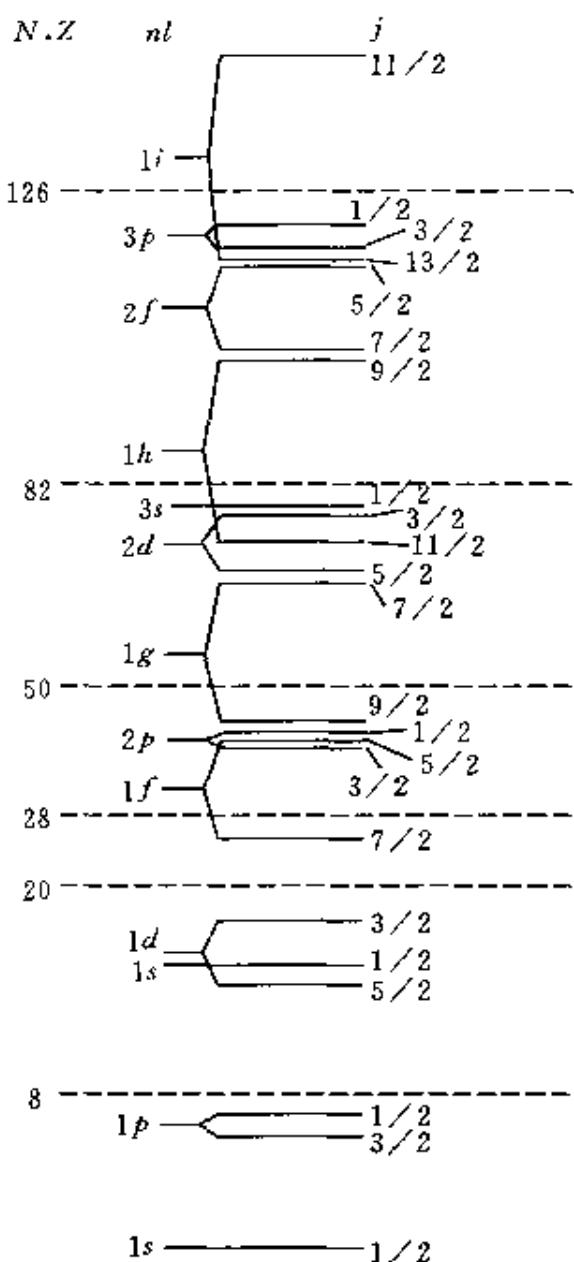
$$2E_{b,A/2,Z/2} - E_{b,A,Z} = \left(-4.6A^{2/3} + 0.26 \frac{Z^2}{A^{1/3}} \right) \text{MeV} \quad (5.11)$$

此结果的第一项是裂变后核的表面积增大而由核“表面张力”做的功,这是核力做的功。(5.11)式右侧第二项是重核裂开时两裂片的质子间的斥力做的功。将A=236,Z=92代入(5.11)式可得

$$\begin{aligned} \left(-4.6 \times 236^{2/3} + \frac{0.26 \times 92^2}{236^{1/3}} \right) \text{MeV} &= (-180 + 360) \text{MeV} \\ &= 180 \text{ MeV} \quad (5.12) \end{aligned}$$

此式表明,核力做了-180 MeV的功,即重核裂开时,裂片反抗相

互吸引的核力做了功,同时库仑斥力使裂片分开做了 360 MeV 的功。两项抵消后裂片共获得动能 180 MeV,这就是裂变所释放的核能或原子能。其实,这核能的真实能源并不是核力,而是静电斥力。

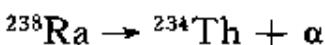
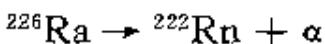


核的壳模型

液滴模型不能说明核的能量和角动量的量子化,也不能说明平均结合能的极大值。迈耶(M. G. Mayer)和金森(H. D. Jensen)提出了类似子原子能级那样的壳模型,该模型给出的核子的能级如图 5.5 所示。图中符号和原子能级的符号意义相同。和原子能级不同的是:能级差变大(MeV 量级),特别是由于自旋轨道耦合甚强而引起的轨道能级的分裂间隔很大(由于核力场不是有心力场,所以 $l < n$ 的限制不再有效)。由图可知,对于 Z 或 N 为 8, 20, 28, 50, 82, 126 的核,有核子的最高能级到其上没有核子的能级的差都比较大。这说明这些核都特别稳定,和原子中的惰性元素原子类似。核的稳定性的这一现象在此前已从实验结果中得知了,壳模型对它作出了较圆满的解释。

5.5 放射性和衰变定律

放射性是不稳定核自发地发射出一些射线而本身变为新核的现象,这种核的转变也称做放射性衰变(或蜕变)。放射性是 1896 年贝可勒尔(H. Becquerel)发现的,他当时观察到铀盐发射出的射线能透过不透明的纸使其中的照相底片感光。其后卢瑟福和他的合作者把已发现的射线分成 α , β 和 γ 三种。再后人们就发现 α 射线是 α 粒子,即氦核(${}^4\text{He}$)流, β 射线是电子流, γ 射线是光子流。下面列出几个放射性衰变的例子:



式中 $\bar{\nu}_e$ 是反电子中微子的符号。以上衰变例子中原来的核称母核,生成的新核叫子核。

天然的放射性元素的原子序数 Z 都大于 81,它们都分属三个

放射系。这三个放射系的起始元素分别为 ^{238}U , ^{235}U 和 ^{232}Th , 常根据各系的核的质量数而分别地命名为 $4n + 2$, $4n + 3$ 和 $4n$ 系, 各系的最终核分别是同位素 ^{206}Pb , ^{207}Pb 和 ^{208}Pb 。图 5.6 给出了钍系的衰变顺序图。还有一个系, 即 $4n + 1$ 系, 由于系中各核的半衰期较短, 它们在自然界已不存在。此系的起始元素是镎的同位素 ^{237}Np , 而其最终核应为 ^{209}Pb 。

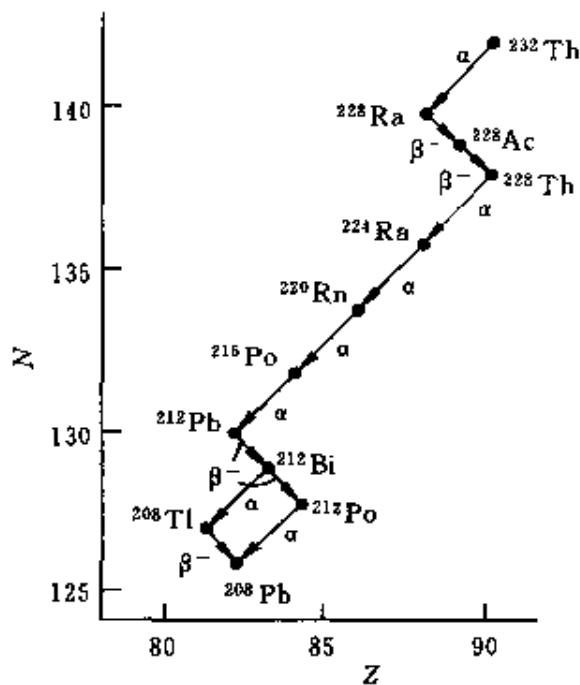


图 5.6 钍系衰变图

所有放射性核的衰变速率都跟它们的化学和物理环境无关, 所有衰变都遵守同样的统计规律: 在时间 dt 内衰变的核的数目 $-dN$ 和 dt 开始时放射性核的数目 N 以及 dt 成正比。因此可以得到

$$-dN = \lambda N dt \quad (5.13)$$

式中常量 λ 叫 **衰变常量**。衰变常量也就是一个放射性核单位时间

内衰变的概率。

(5.13) 式积分之后, 就可得到

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} \quad (5.14)$$

式中 N_0 是在 $t = 0$ 时放射性核的数目。

由(5.13) 式可知, 从 $t = 0$ 开始, $-dN$ 个放射性核的生存时间为 t , 所以所有放射性核的平均寿命为

$$\tau = \frac{1}{N_0} \int_0^\infty t (-dN) = \frac{1}{N_0} \int_0^\infty t \lambda N dt = \int_0^\infty t \lambda e^{-\lambda t} dt$$

积分结果是

$$\tau = \frac{1}{\lambda} \quad (5.15)$$

实际上讨论衰变速率时常不用 λ 和 τ , 而用半衰期。一种放射性核的半衰期是它的给定样品中的核衰变一半所用去的时间, 半衰期用 $t_{1/2}$ 表示。由此定义, 根据(5.14) 式可知

$$N_0/2 = N_0 e^{-t_{1/2}/\tau}$$

于是有

$$t_{1/2} = (\ln 2) \tau = 0.693 \tau = 0.693/\lambda \quad (5.16)$$

不同的放射性核的半衰期不同, 而且差别可以很大, 从微秒(甚至更小)到万亿年(甚至更长)都有。表 5.2 列出了一些半衰期的实例。

表 5.2 半衰期实例

核	$t_{1/2}$	核	$t_{1/2}$	核	$t_{1/2}$
^{218}Ra	0.18 μs	^{131}I	8.04 d	^{237}Np	$2.14 \times 10^6 \text{ a}$
^{207}Ra	1.3 s	^{60}Co	5.272 a	^{235}U	$7.04 \times 10^8 \text{ a}$
自由中子	12 min	^{226}Ra	1 600 a	^{238}U	$4.46 \times 10^9 \text{ a}$
^{191}Au	3.18 h	^{14}C	5 730 a	^{232}Th	$1.4 \times 10^{10} \text{ a}$

在使用放射性同位素时, 常用到活度这个量, 一个放射性样品的活度是指它每秒钟衰变的次数。以 $A(t)$ 表示活度, 再利用(5.14)式可得

$$A(t) = -\frac{dN}{dt} = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = \lambda N = A_0 e^{-\lambda t} \quad (5.17)$$

式中 $A_0 = \lambda N_0$ 是起始活度。由此式可知, 活度与衰变常量以及当时的放射性核的数目成正比。因此, 活度和放射性核数以相同的指数速率减小。对于给定的 N_0 , 半衰期越短, 则起始活度越大而活度减小得越快。

活度的国际单位是贝可[勒尔], 符号是 Bq。1 Bq = 1 s⁻¹。

活度的常用单位是居里, 符号为 Ci。其分数单位有毫居(mCi)和微居(μ Ci)。它最初是用 1 g 的镭的活度定义的, 该定义为

$$1\text{Ci} = 3.70 \times 10^{10} \text{ Bq} \quad (5.18)$$

例 5.3 ^{226}Ra 的半衰期为 1 600 a, 1 g 纯 ^{226}Ra 的活度是多少? 这一样品经过 400 a 和 6 000 a 时的活度又分别是多少?

解 样品中最初的核数为

$$N_0 = \frac{1 \times 6.023 \times 10^{23}}{226} = 2.66 \times 10^{21}$$

衰变常量为

$$\lambda = 0.693/t_{1/2} = \frac{0.693}{1600 \times 3.156 \times 10^7} = 1.37 \times 10^{-11} (\text{s}^{-1})$$

起始活度为

$$A_0 = \lambda N_0 = 1.37 \times 10^{-11} \times 2.66 \times 10^{21} = 3.65 \times 10^{10} (\text{Bq})$$

差不多等于 1 Ci, 和(5.18)式定义相符合。由(5.17)式可得

$$\begin{aligned} A_{400} &= A_0 e^{-\lambda t} = A_0 \times 2^{-t/t_{1/2}} = 3.65 \times 10^{10} \times 2^{-400/1600} \\ &= 3.07 \times 10^{10} (\text{Bq}) = 0.83 (\text{Ci}) \end{aligned}$$

$$A_{6000} = 3.65 \times 10^{10} \times 2^{-6000/1600} = 2.71 \times 10^9 (\text{Bq}) = 0.073 (\text{Ci})$$

上面说过, 一个母核生成的子核还可能是放射性的。假定开

始时是纯母核 P 的样品,由于它的放射,子核 D 的数目开始时要增大,但是不久此子核的数目就会由于母核数的减少和此子核本身的衰变而逐渐减小。子核数 N_D 随时间变化的微分方程为

$$\frac{dN_D}{dt} = \lambda_P N_P - \lambda_D N_D = \lambda_P N_{0P} e^{-\lambda_P t} - \lambda_D N_D$$

此方程的解为

$$N_D(t) = \frac{N_{0P} \lambda_P}{\lambda_D - \lambda_P} (e^{-\lambda_P t} - e^{-\lambda_D t}) \quad (5.19)$$

常常遇到母核的半衰期比子核的半衰期大很多的情况。这种情况下,在时间 t 满足 $t_{1/2,P} \gg t \gg t_{1/2,D}$ 的时期内,(5.19) 式给出

$$N_D = \frac{\lambda_P}{\lambda_D} N_P = \frac{t_{1/2,D}}{t_{1/2,P}} N_P \approx \frac{t_{1/2,D}}{t_{1/2,P}} N_{0P} \quad (5.20)$$

这就是说,在这一时期内放射性核 D 由于 P 的衰变而产生的速率和 D 核本身衰变的速率相等,因此 D 的数目保持不变。例如, ^{238}U 是一种 α 放射源,半衰期为 4.46×10^9 a。它的衰变产物 ^{234}Th 是 β 放射源,半衰期仅为 24.1 d。如果开始的样品中是纯 ^{238}U ,它的 α 活度随时间不会有明显的变化。当 ^{234}Th 的产生速率和它由于发射 β 射线而衰变的速率相平衡时, ^{234}Th 核的数目将基本不变。这种长期平衡状态实际上经过约 5 个 ^{234}Th 的半衰期就达到了。此后样品将以基本上不变的速率放射 α 粒子和 β 粒子。贝可勒尔当初观察到的 β 射线就是这些 ^{234}Th 核发生的。(也还有 ^{235}U 核的子核 ^{231}Th 核发出的,这两种核的半衰期分别是 7.04×10^8 a 和 25.2 h)。

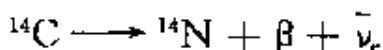
放射性的一个重要应用是鉴定古物年龄,这种方法叫放射性鉴年法。例如,测定岩石中铀和铅的含量可以确定该岩石的地质年龄(见习题 5.14)。下面介绍一种对于生物遗物的 ^{14}C 放射性鉴年法。

^{14}C 放射性鉴年法是利用 ^{14}C 的天然放射性来鉴定有生命物体的遗物(如骨骼、皮革、木头、纸等)的年龄的方法。它是 20 世纪

50年代里贝(W. F. Libby)发明的，并因此获得1960年诺贝尔化学奖。各种生物都要吸收空气中的 CO_2 用来合成有机分子。这些天然碳中绝大部分是 ^{12}C ，只有很小一部分是 ^{14}C 。这些 ^{14}C 是来自太空深处的宇宙射线中的中子和地球大气中的 ^{14}N 核发生下述核反应产生的：



这 ^{14}C 核接着以 $(5\ 730 \pm 30)\text{ a}$ 的半衰期进行下述衰变：



由于产生的速率不变，同时又进行衰变，经过上万年后空气中的 ^{14}C 已达到了恒定的自然丰度，约 $1.3 \times 10^{-10}\%$ 。植物活着的时候，它不断地吸收空气中的 CO_2 来制造新的组织代替旧的组织。动物一般要吃植物，所以它们也要不断地吸收碳进行新陈代谢。生物组织不能区别 ^{12}C 和 ^{14}C ，所以它们身体组织中的 ^{14}C 的丰度和大气中的一样。但是，一旦它们死了，就再不吸收 CO_2 了。在它们的遗体中， ^{12}C 的含量不会改变，但 ^{14}C 由于衰变而不断减少，于是由此衰变产生的活度也将不断减小，测量一定量遗体的活度就能判定该遗体的存在时间，或说年龄。请看下面例题。

例 5.4 河北省磁山遗迹中发现有古时的粟。一些这种粟的样品中含有1 g 碳，它的活度经测定为 $2.8 \times 10^{-12}\text{ Ci}$ 。求这些粟的年龄。

解 1 g 新鲜碳中的 ^{14}C 核数为

$$N_0 = 6.023 \times 10^{23} \times 1.3 \times 10^{-12} / 12 = 6.5 \times 10^{10}$$

这些粟的样品活着的时候，活度应为

$$\begin{aligned} A_0 &= \lambda N_0 = (\ln 2) N_0 / t_{1/2} = 0.693 \times 6.5 \times 10^{10} / (5730 \times 3.156 \times 10^7) \\ &= 0.25(\text{Bq}) = 6.8 \times 10^{-12}(\text{Ci}) \end{aligned}$$

由于 $A_t = 2.8 \times 10^{-12}\text{ Ci}$ ，按 $A_t = A_0 e^{-0.693/t_{1/2}}$ 计算可得

$$t = \frac{t_{1/2}}{0.693} \ln \frac{A_0}{A_t} = \frac{5730}{0.693} \ln \frac{6.8 \times 10^{-12}}{2.8 \times 10^{-12}} = 7300(\text{a})$$

据考证这些粟是世界上发现得最早的粟，比在印度和埃及发现得都要早。

5.6 α 衰变

α 衰变是 ${}^4\text{He}$ 核从核内逃逸的现象。由于 ${}^4\text{He}$ 的结合能特别大，所以在核内两个质子和两个中子就极有可能形成一个单独的单位—— α 粒子。核对 α 粒子形成一势阱，因而 α 粒子从中逃出是一个势垒穿透过程。 α 粒子逃出时所要穿过的势垒是 α 粒子和子核的相互作用形成的。图 5.7 画出 ${}^{232}\text{Th}$ 的 α 粒子势能和离核中心的距离的关系。在核外 ($r > R$, R 为核半径)，势能为 α 粒子和子核之间的库仑势能

$$U(r) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (5.21)$$

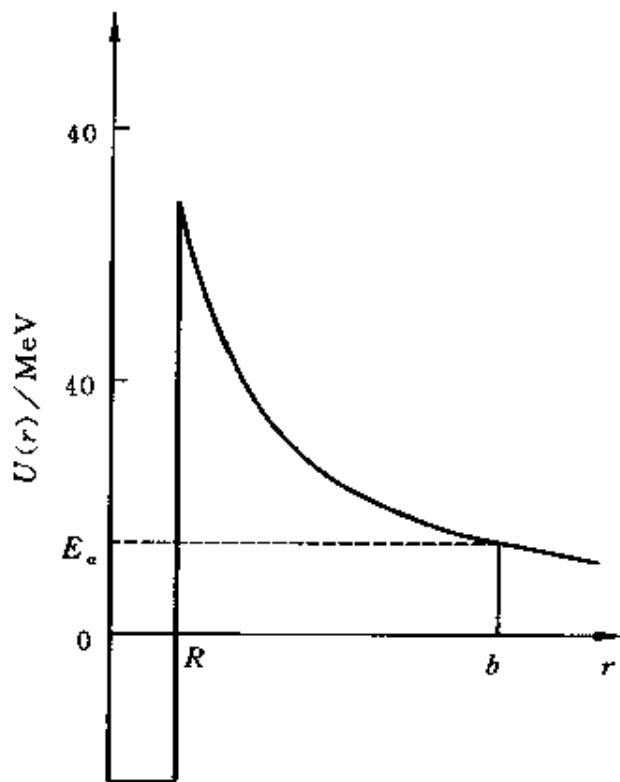


图 5.7 核内外 α 粒子的势能曲线

式中 Z 为子核的电荷数。在核内，势能基本上是常量，深度为几十

MeV。逃出核的 α 粒子的能量 E_α 一般比势垒高峰低得多。

例 5.5 求 ^{238}U 核中 α 粒子的库仑势垒的峰值。

解 因为 $r = R = r_0 A^{1/3}$, 由(5.21)式可得

$$U(R) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_0 A^{1/3}}$$

此式中 Z 和 A 应分别用子核 ^{234}Th 的值90和234, 是

$$\begin{aligned} U(R) &= \frac{9 \times 10^9 \times 2 \times 90 \times (1.6 \times 10^{-19})^2}{1.2 \times 10^{-15} \times 234^{1/3}} \\ &= 5.6 \times 10^{-12} (\text{J}) = 35 (\text{MeV}) \end{aligned}$$

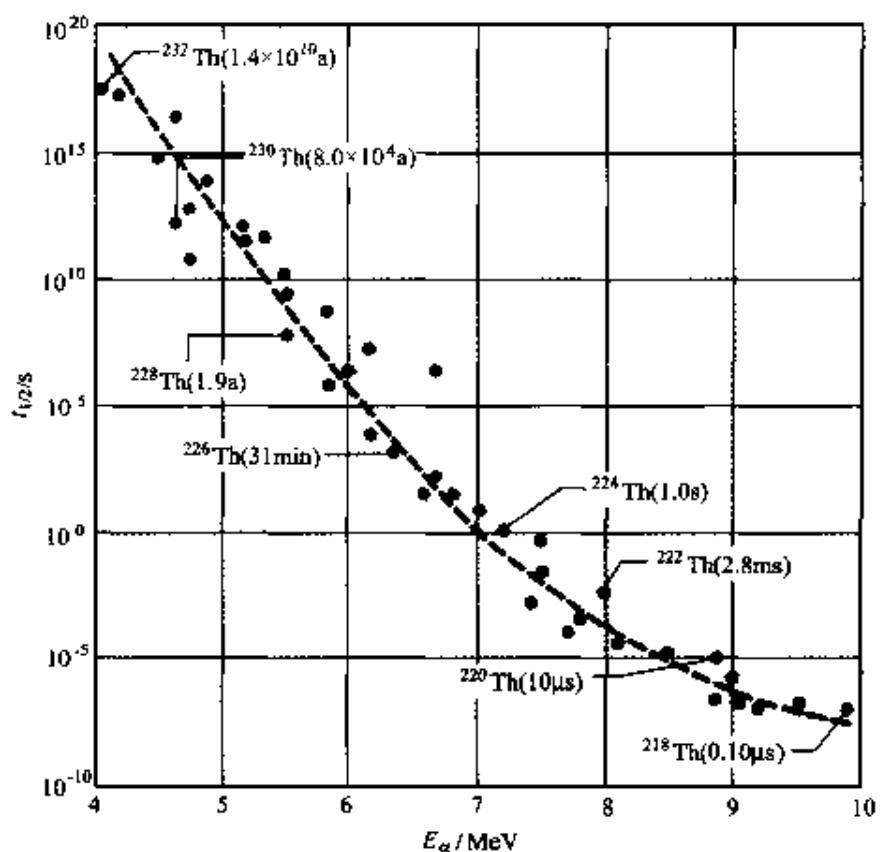
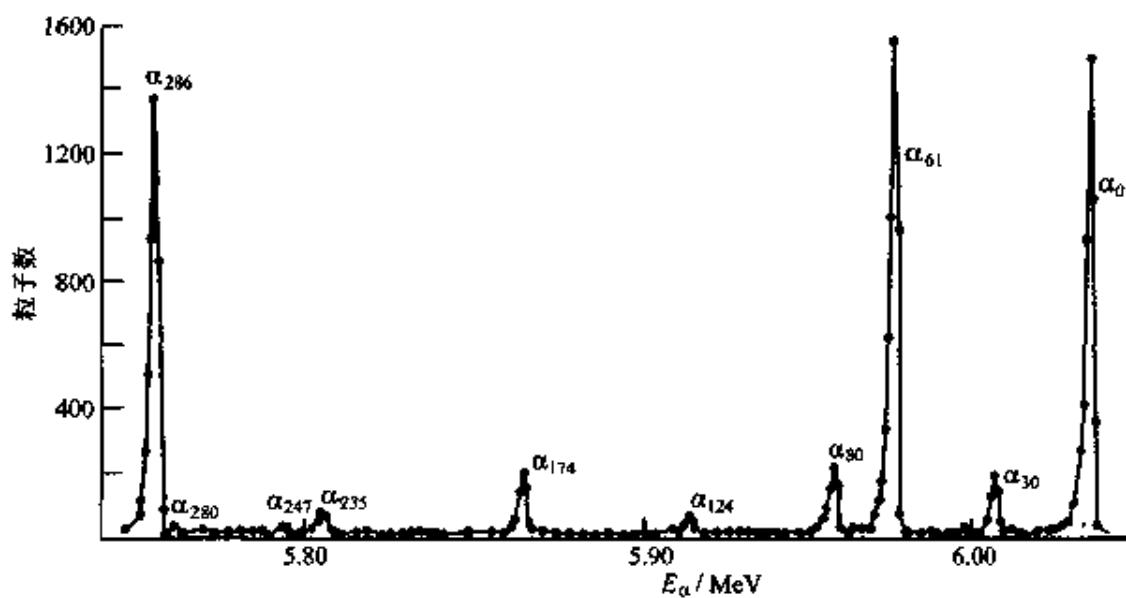
这比由 ^{238}U 核放射出的 α 粒子的能量(4.2 MeV)大得多。

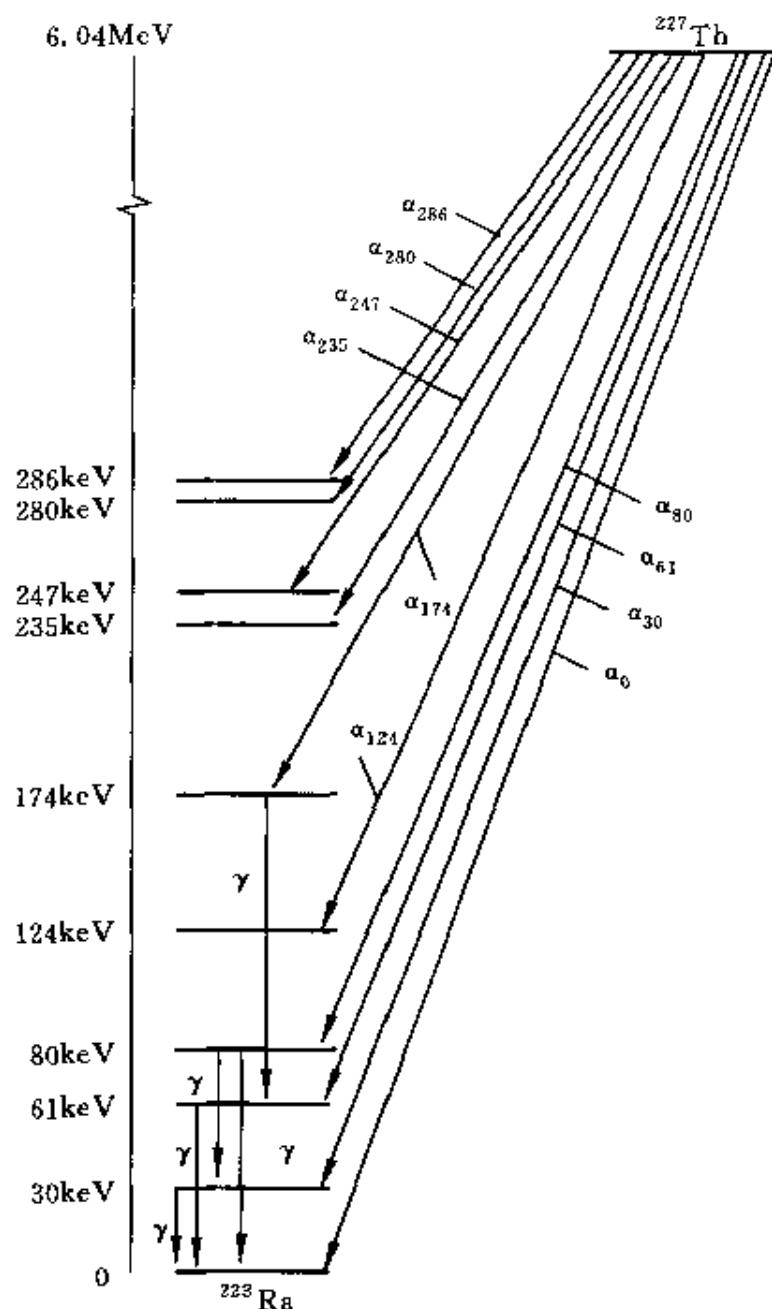
同一 α 放射源可以放射出不同能量的 α 粒子。由图5.7可知, 逸出的 α 粒子的能量越大, 它要穿过的势垒的厚度就越小, 因而这种 α 粒子穿过势垒的概率就越大, 相应的 α 衰变的半衰期就会越短。量子理论给出 α 半衰期 $t_{1/2}$ 和 α 粒子能量 E_α 有下述关系:

$$\ln t_{1/2} = AE_\alpha^{-1/2} + B \quad (5.22)$$

式中 A 和 B 对一种核基本上是常量。由于上式中 $t_{1/2}$ 和 E_α 是对数关系, 所以差别不大的 E_α 所对应的 $t_{1/2}$ 可以有非常大的差别。这可由图5.8中的实验数据看出来(图中所示Th核的各同位素的库仑势垒峰值基本相同)。

α 衰变的同时常常有 γ 射线发出—— γ 衰变, 这意味着由衰变产生的子核是处于激发态。一种 α 放射源所发射的 α 射线几乎无例外地按能量明显地分成若干组, 图5.9所示的 ^{227}Th 衰变为 ^{223}Ra 时所发射的 α 粒子的能谱就说明了这一点。由于可以假定母核在衰变前都处于基态, 此 α 能谱说明子核可能(至少在短时间内)处于一定的激发态。于是, 当子核从这些激发态衰变回其基态时, 就会发射出一系列能量不同的 γ 射线, 实验证明了这一点。图5.10画出了 ^{227}Th 核 α 衰变伴随的 γ 射线的能量与 α 能谱(图5.9)中峰的能量差的关系。这种关系也给出了一种用 α 能谱确定核的能级的方法。

图 5.8 α 衰变半衰期和 α 粒子能量的关系图 5.9 ^{227}Th 核的 α 能谱的一部分

图 5.10 由 α 能谱确定子核能级及 γ 射线能量

* 5.7 穆斯堡尔效应

在研究原子系统时,常常做共振实验。这种实验是使一组原子

发光,照射另一组同样的原子,观察前者发的光被后者吸收的情况。根据玻尔频率条件

$$h\nu = E_h - E_l \quad (5.23)$$

原子发出的光子的能量和能被该原子吸收的能量相等,因此,总能发生共振吸收。但仔细分析起来,(5.23)式只是近似式。因为该式只考虑了能量关系而没有考虑动量。实际上,原子发光过程还要遵守动量守恒定律。原子发出能量为 $h\nu$ 的光子的同时,由于光子带走了 $h\nu/c$ 的动量,根据动量守恒,原子本身就获得了反冲动量 $p_{rec} = h\nu/c$ (设原子原来静止),因此也就获得了反冲能量

$$E_{rec} = \frac{p_{rec}^2}{2m} = \frac{(h\nu)^2}{2mc^2} \quad (5.24)$$

式中 m 为原子的质量。这样,原子发出的光子的能量应为

$$h\nu_{emi} = E_h - E_l - E_{rec} \quad (5.25)$$

同样,由于反冲,能被该原子吸收的光子的能量应为

$$h\nu_{abs} = E_h - E_l + E_{rec} \quad (5.26)$$

同一种原子所能吸收的光子的能量和该种原子所发射的光子的能量(在同样的原子能级改变的情形下)不同,差为 $2E_{rec}$ 。因此,共振吸收似乎是不可能的了,但实际上并非如此。

我们知道,原子所发的光子的能量并不是只有单一确定的值,而是有一定的谱线自然宽度。这自然宽度 ΔE_N 决定于有关激发态能级的寿命 Δt 。根据不确定关系

$$\Delta E_N = \frac{\hbar}{2\Delta t} \quad (5.27)$$

而原子激发态能级的寿命的典型值为 10^{-8} s,因此所发光子的能量自然宽度为 $\Delta E_N = 1.05 \times 10^{-34} / (2 \times 10^{-8}) = 5 \times 10^{-27}$ (J) = 3×10^{-8} (eV)。由于原子发出光子的能量为 1 eV 量级,取 $m = 10 u = 9350 \text{ MeV}/c^2$,由(5.24)式可得

$$E_{rec} = \frac{(h\nu)^2}{2mc^2} = \frac{1^2}{2 \times 9350 \times 10^6} \approx 5 \times 10^{-11} (\text{eV})$$

由于 $\Delta E_N \gg 2E_{rec}$, 所以和同一能级改变相对应的发射光子和能被吸收的光子的能量分布就差不多完全重合在一起了, 如图 5.11 所示(图中 ΔE_N 和 $2E_{rec}$ 相比, 不成比例地缩小了很多倍)。这样, 一种原子发射的光子就能基本上完全被同种原子吸收了, 这就是一般很容易观察到光学共振吸收的原因。

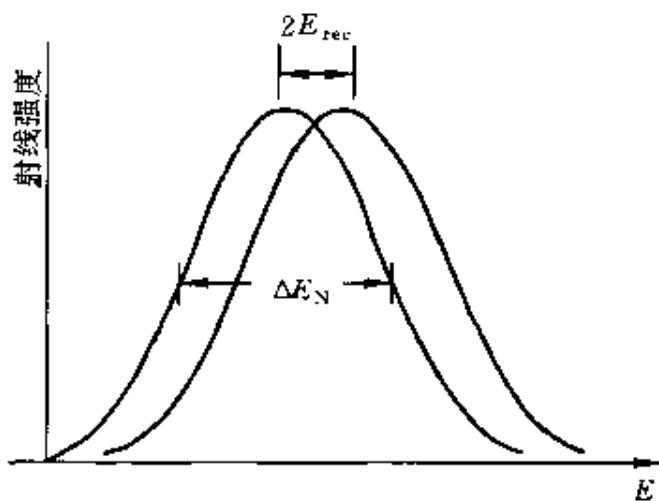
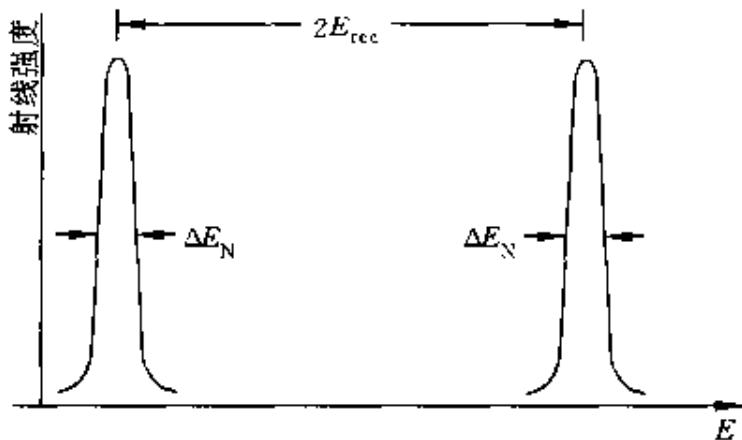


图 5.11 原子发光和吸收的共振能谱

对于高能量的光子, 如 γ 光子, 共振吸收又如何呢?

γ 光子是原子核能级发生变化时发出的。原子核激发态能级寿命的典型值为 10^{-10} s。由(5.27)式可得 γ 光子的能量自然宽度为 10^{-6} eV。 γ 光子的能量以 0.1 MeV 计, 核的质量以 $100\text{ u} = 9.35 \times 10^4\text{ MeV}$ 计, 则可由(5.24)式求得 $E_{rec} \approx 0.1\text{ eV}$ 。这种情况下, $\Delta E_N \ll 2E_{rec}$, 能量分布曲线如图 5.12 所示(图中 $2E_{rec}$ 和 ΔE_N 相比, 缩小了很多倍)。共振吸收成为不可能的了。1958 年以前曾用加热 γ 源的方法借助多普勒效应展宽 γ 光子的谱线宽度以达到共振吸收的目的, 但效果并不明显。

1958 年研究生穆斯堡尔(R. Mossbauer)发明了一种 γ 共振吸收的方法(因此获得 1961 年诺贝尔物理奖)。他用的 γ 源是 ^{191}Ir 。他使这种核嵌在晶体中作为 γ 源和吸收体。这样, 接受反冲的就不是

图 5.12 γ 光子的发射和吸收能量分布

一个单独的核而是整个晶体了。(5.24) 式中的 m 一下子增大了 10^{22} 倍, 从而 E_{rec} 可以完全忽略而认为没有反冲。这种情况下, 发射的 γ 光子的能量分布和能被吸收的 γ 光子的能量分布就完全重叠起来, 而共振吸收就能很容易地观察到了。当时穆斯堡尔还降低了样品的温度(低温下晶体能量量子化更为明显)以增大共振吸收的概率。这种无反冲的共振吸收就叫穆斯堡尔效应。

利用穆斯堡尔效应可以精确地测量 γ 射线的谱线宽度, 为此需要源或吸收体发生运动以产生多普勒效应来调节 γ 光子的频率。如图 5.13 所示, 把源放置在一个振动器上。当源以一定速度 v 向接收器运动时, 它发出的 γ 光子的频率将由 ν 变为

$$\nu' = \left(1 + \frac{v}{c}\right)\nu \quad (5.28)$$

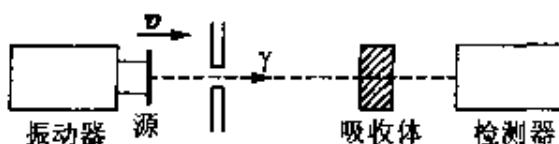


图 5.13 穆斯堡尔实验装置

由于光子能量为 $h\nu = E$, 所以 γ 光子的能量也由 E_γ 变为

$$E'_{\gamma} = \left(1 + \frac{v}{c}\right) E_{\gamma} \quad (5.29)$$

当速度 $v = 0$ 时, $E'_{\gamma} = E_{\gamma}$, 发生准确的共振吸收, 检测器测到的射线强度最小。从大到小改变 v 值(包括反向 v 值), 则 ν' 将扫过整个谱线宽度 ΔE_N , 而

$$\Delta E_N = E'_{\gamma} - E_{\gamma} = \frac{v}{c} E_{\gamma} \quad (5.30)$$

而探测器接收到的吸收能谱将如图 5.14 所示。由于源和吸收体都有一能级宽度 ΔE_N , 所以这一吸收谱线的宽度 δ 将是 ΔE_N 的两倍。测出 δ , 就能得出谱线宽度 ΔE_N 的值了。

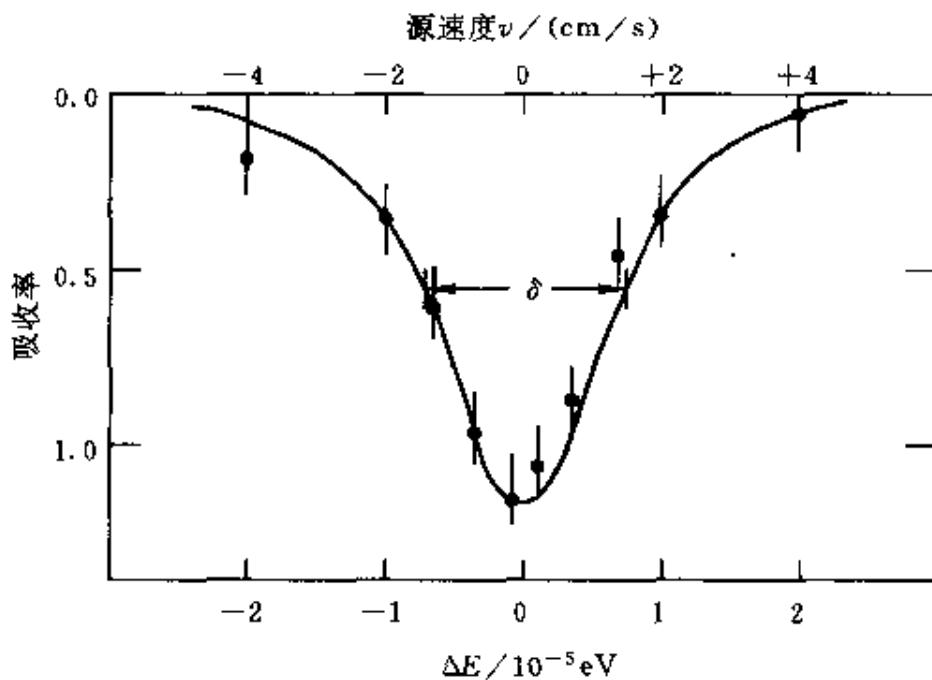


图 5.14 ^{191}Ir 的穆斯堡尔 γ 吸收谱

对常用的 $^{57}\text{Fe}\gamma$ 源来说, $\Delta t = 1.41 \times 10^{-7} \text{ s}$, 由(5.27)式可求得 $\Delta E_N = 2.3 \times 10^{-9} \text{ eV}$ 。由于 ^{57}Fe 发射的 γ 光子能量为 $E_{\gamma} = 14.4 \text{ keV}$, 所以可得相对线宽为

$$\frac{\Delta E_N}{E_{\gamma}} = \frac{2.3 \times 10^{-9}}{14.4 \times 10^3} = 1.6 \times 10^{-13} \quad (5.31)$$

这样的精确度是十分惊人的。再加以谱线宽度可以精确测量到 10^{-2} , 因而利用穆斯堡尔效应可以将 γ 射线能量(或频率)变化测量到 10^{-15} 量级。这相当于把地球月球之间的距离(10^8 m)精确测量到 10^{-7} m 量级, 这一量级和光的波长相当了!

穆斯堡尔仪器并不太复杂, 而且源的移动速度要求也不高。对 ^{57}Fe 来说, 由(5.30) 和(5.31) 式可得

$$\begin{aligned} v &= \frac{\Delta E_N}{E_\gamma} \times c = 1.6 \times 10^{-13} \times 3 \times 10^8 \\ &= 5 \times 10^{-5} (\text{m/s}) = 0.05 (\text{mm/s}) \end{aligned}$$

这个速度是相当小的。

γ 光子的能量反映核的能级的分布。尽管核的能级受其外的环境影响甚小, 但由于穆斯堡尔实验的精确度很高, 还是可以测出这种影响的。在图 5.13 的实验中, 如果源和吸收体的有关核(如 ^{57}Fe) 所处环境不同, 则其穆斯堡尔吸收能谱不可能在 $v = 0$ 处出现极小值, 而是稍有位移。特别是在有的环境(如加外磁场) 中核的原有一个能级分裂为几个能级时, 得到的穆斯堡尔谱就可能出现若干个极值。借助于这种能谱就可以对核的超精细结构加以研究。现在穆斯堡尔谱仪已是研究原子核结构, 原子的化学键、价态等等常用的工具了。由于铁元素是红血球的重要组成元素之一, 所以穆斯堡尔效应也被应用到生物科学的研究中了。图 5.15 是在对西藏高原红细胞增多症患者的血红蛋白特异性研究中, 用 ^{57}Co 源 (^{57}Co 捕获电子后成为 ^{57}Fe γ 源) 在 80 K 温度下对红细胞所做的穆斯堡尔谱。

爱因斯坦广义相对论曾预言, 光受引力的作用会发生红移。由于地球的引力较弱, 引起的引力红移就非常小, 因此在地球上观察引力红移十分困难。但人们总想这样来验证广义相对论, 所以当 1958 年穆斯堡尔实验结果一发表, 世界上就有几个小组立即利用它极高的精确度来做引力红移实验。1960 年庞德(R. V. Pound) 和

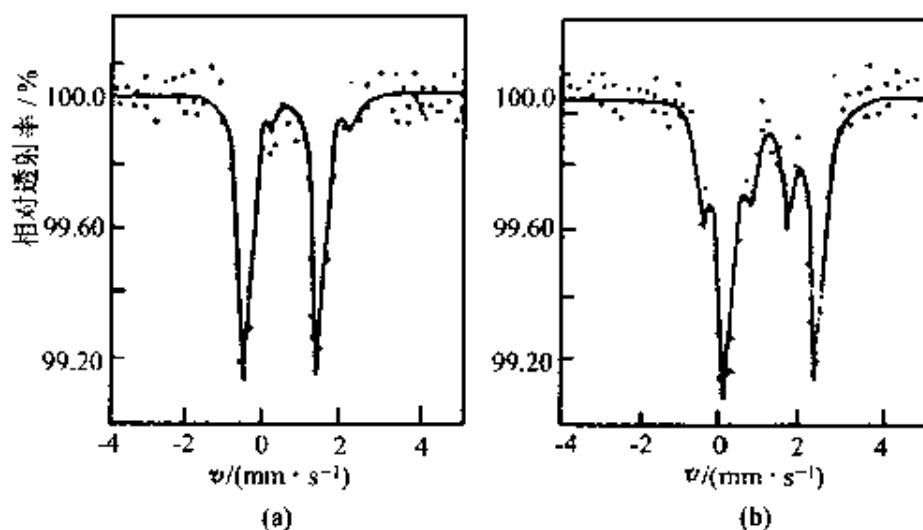


图 5.15 红细胞的穆斯堡尔谱

(a) 正常人的; (b) 高原病患者的

瑞布卡(G. A. Rebka)果然取得了成功。他们在哈佛大学的塔楼内高差为 22.6 m 的上下两层内分别安置了振动的源和固定的吸收体(图 5.16)。上面的源是 ^{57}Co (它吸收电子后变为 ^{57}Fe 的 γ 射线源),下面的吸收体为含有 ^{57}Fe 的铍膜,该膜紧贴在 NaI 和光电管组成的探测器上面。上下连通的直管内通以 He 气以减弱空气对 γ 射线的吸收。实验原理如下:

以 m_γ 表示光子质量,则 $m_\gamma = h\nu/c^2$ 。光子下落高度 H 时,能量守恒给出

$$h\nu + m_\gamma gH = h\nu + \frac{h\nu}{c^2}gH = h\nu'$$

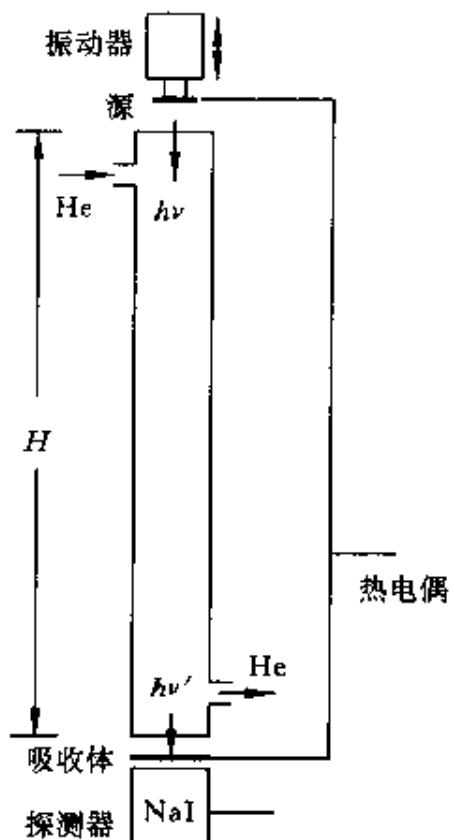


图 5.16 引力红移实验装置

由此得

$$\Delta\nu = \nu' - \nu = \frac{gH}{c^2}\nu$$

而

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{gH}{c^2} = 1.09 \times 10^{-16} H$$

对 ^{57}Fe , $\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{\Delta E}{E_\gamma} = 1.6 \times 10^{-13}$, 和上式相比较, 就要求

$$H = \frac{1.6 \times 10^{-13}}{1.09 \times 10^{-16}} = 1.5 \times 10^3 (\text{m})$$

实际上谱线宽度测定可精确到 10^{-2} , 因此 H 有 15 m 就应该能够观察到确定的引力红移量了。实验中的高度 H 是 22.6 m, 满足了这个要求。他们得到的结果 $(\Delta\nu)_{\text{exp}}$ 和理论结果 $(\Delta\nu)_{\text{th}}$ 的比是

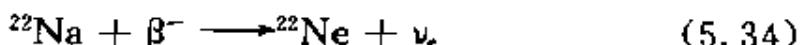
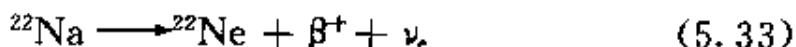
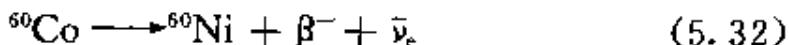
$$\frac{(\Delta\nu)_{\text{exp}}}{(\Delta\nu)_{\text{th}}} = 1.05 \pm 0.10$$

这就很好地证实了广义相对论关于引力红移的结论。

可以附带指出的是, 温度对 $\Delta\nu$ 也有影响, 源和吸收体的温度差略大一些就可能淹没掉引力红移效应。庞德和瑞布卡能把源和吸收体的温差控制在 0.03 K 内, 这也是他们先于其他小组实验成功的原因之一。

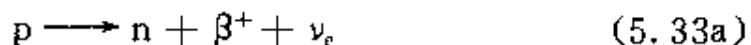
5.8 β 衰 变

早先 β 衰变只是指核放出电子 (β^-) 的衰变, 现在把所有涉及电子和正电子 (β^+) 的核转变过程都叫做 β 衰变。实际的例子有



由于核中并没有单个的电子或正电子, 所以上述衰变实际上是核

中的中子和质子相互变换的结果。上面三个衰变分别对应于下述变换：



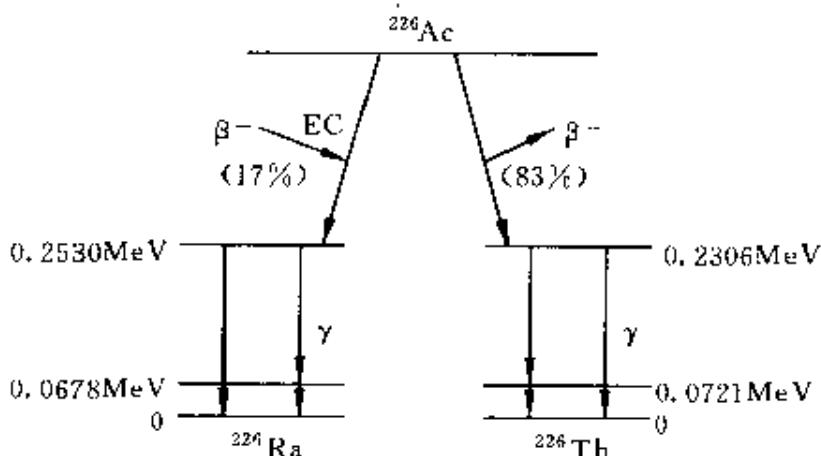
(5.32a) 是不稳定核中的中子衰变，不同的核的中子衰变的半衰期不同。自由中子也发生这种形式的衰变，半衰期约为 12 min。
 (5.33a) 式是质子的衰变。由于 $m_p < m_n$ ，所以自由质子从能量上说不可能发生衰变。但是，在不稳定核内，质子可以获得能量进行这种 β^+ 衰变^①。

(5.34a) 式的反应称做电子捕获(EC)。在这种反应中，核捕获一个核外电子(常是 K 壳层的电子)。所以能被核捕获，是因为这电子在核内也有一定的(虽然是很小的)概率出现。核捕获一电子后，壳层内就出现了一个空穴。因此 EC 经常伴随有 X 光发射。一般来讲，能发生 β^+ 衰变的核也可能发生 EC 衰变。这种核进行两种衰变的概率不同。例如，¹⁰⁷Cd 样品，0.31% 为 β^+ 衰变，99.69% 为 EC 衰变。

一个核能进行 β^- 衰变，也可能发生 EC 衰变，如图 5.17 所示的 ²²⁶Ac 的衰变就是。

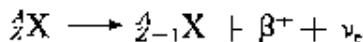
另一种涉及电子的过程叫内转换。在这种过程中，一个处于激发态的核跃迁到低能态时把能量传给了一个核外电子。这个核外电子接受此较大的能量后即时从原子中高速飞出，好像是 β^- 射线一样。

^① 目前关于粒子的“大统一理论”预言质子也能进行 β^+ 衰变，但其半衰期约为 $10^{30} \sim 10^{33}$ a(目前宇宙学关于宇宙从诞生到现在的年龄不过 10^{10} a)，实验上确定的质子的半衰期的下限是 10^{31} a。现在还在有的废弃深矿井中用成千吨水做着质子衰变的实验。

图 5.17 ^{226}Ac 的衰变方式

例 5.6 核衰变时放出的能量称为该过程的 Q 值。用衰变前质量和衰变后质量表示一个核的 β^+ 衰变和 EC 过程的 Q 值。

解： m_X 和 m_Y 分别表示反应前后的原子的质量，二者的原子序数分别为 Z 和 $Z - 1$ ，则 β^+ 衰变可表示为

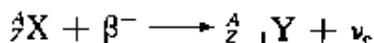


由于 ν_e 的质量可忽略，所以此衰变的 Q 值为

$$\begin{aligned} Q_{\beta^+} &= (m_X - Zm_e)c^2 - [m_Y - (Z - 1)m_e]c^2 - m_e c^2 \\ &= m_X c^2 - m_Y c^2 - 2m_e c^2 \end{aligned}$$

由此结果可知，从能量上看，只有当起始原子的质量比后来原子的质量多两倍电子的质量时， β^+ 衰变才可能发生。

EC 衰变可表示为



而 Q 值为

$$Q = m_e c^2 + (m_X - Zm_e)c^2 - [m_Y - (Z - 1)m_e]c^2 = m_X c^2 - m_Y c^2$$

由此结果可知，只要起始原子的质量比后来原子的质量大，就能够发生 EC 衰变。与上一 β^+ 衰变比较可知，有些可能发生 EC 衰变的核并不能发生 β^- 衰变。

引起 β 衰变的核内相互作用是“弱”相互作用。在形成原子或核时，强相互作用和电磁相互作用扮演着主要的角色，弱相互作用

不参与这种过程。弱相互作用的媒介粒子是 W^+ 和 Z^0 粒子, 只在像 (5.32)~(5.34) 式那样的过程中起作用, 而且经常放出或吸收中微子。

β 衰变所放出的电子的能谱是连续曲线(图 5.18), 不像 α 能谱那样(图 5.9) 是线状谱。但 β 能谱有一最大能量, 在图 5.18 中这一最大能量是 1.16 MeV。

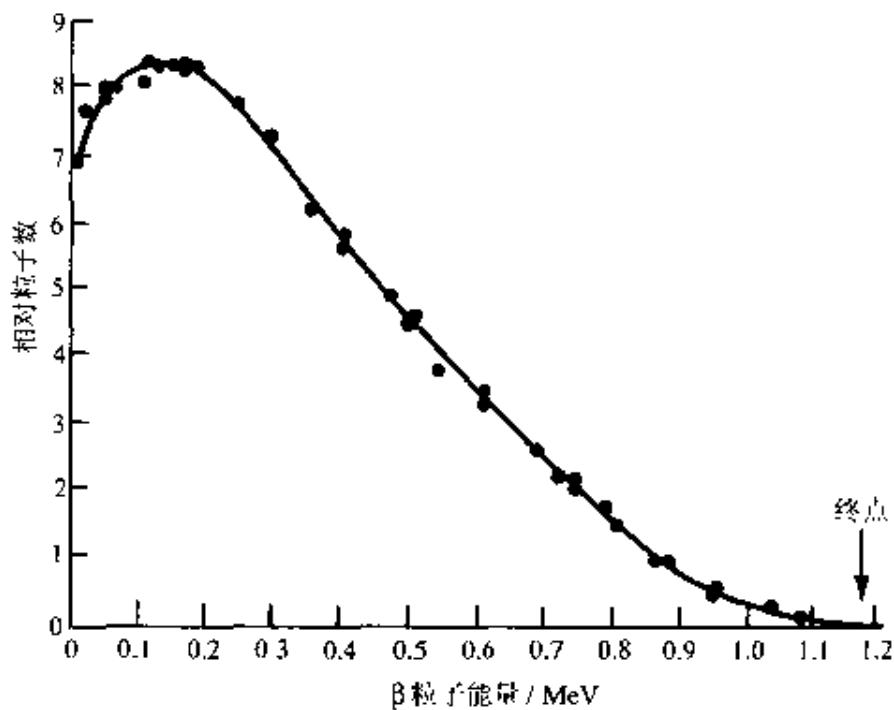
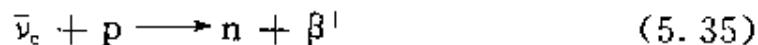


图 5.18 ^{210}Bi 的 β 射线能谱

β 能谱的连续性在历史上曾导致中微子概念的提出。 β 衰变引起的质量亏损是确定的, 所放出的能量就是一定的。如果这能量只在放出的电子和子核之间分配, 则由于子核质量比电子质量大得多而几乎得不到能量, 衰变能量就应该全归电子而为一确定值。但实际上 β 衰变发出的电子能量却能在最大值以内取连续值。这一能量不守恒现象曾在 20 世纪 20 年代给理论物理学家很大的困惑, 以致有人因而怀疑能量守恒定律的普遍性。1931 年泡利(即提出不相容原理的那位科学家)提出一种解释: β 衰变时发出了另一

种未检测到的粒子带走了那“被消灭”的能量(后来费米把这种粒子定名为中微子)。当时并无任何其他证据证明此种粒子的存在,泡利的解释完全出自他对守恒定律的坚信不疑。直接的证据终于在1953年出现了。当年瑞恩斯(F. Reines)和考安(C. L. Cowan)把含有大量氢的靶放入一反应堆内预计很强的反中微子流中,以期观察到下述反应的发生:



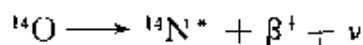
他们果然检测到了与此反应相符的中子和正电子。

中微子有三种: ν_e , ν_μ 和 ν_τ , 各有它们的反粒子, 分别和电子、 μ 子和 τ 子同时出现。所有中微子都不带电而具有自旋 $1/2$, 它们的质量原来说是零。但根据后来的有些实验显示它们的质量可能不是零, 但很小, 如大约 $20 \text{ eV}/c^2$ 。由于中微子的质量和宇宙中暗物质的质量有密切关系, 所以目前中微子的质量仍是世界上许多实验室所十分关心的课题。

应该提及的是, 吴健雄利用在 0.01 K 的温度下 ^{60}Co 在强磁场中的 β 衰变验证了李政道和杨振宁提出的弱相互作用宇称不守恒的规律。在此实验之前, 泡利听到李、杨的提议后, 也曾本着他对守恒定律的信念加以反驳。只是在见到吴健雄的实验报告后才承认了错误, 而且庆幸自己不曾为此打赌。信念是可贵的, 但毕竟, 实践是检验真理的唯一标准。

最后, 关于 β 衰变还应该指出的是, 它和 α 衰变一样, 也常伴随着 γ 射线的产生。这种情况同样说明子核往往处在激发态, 图 5.17 的 ^{226}Ac 的衰变就是一个例子, 下面再举一个例子。

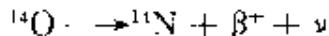
例 5.7 考虑图 5.19 所示的 ^{14}O 的 β^- 衰变。它可能经过两步, 伴随有 γ 射线, 如



和



也可能只经过一步



而不发射 γ 射线。第一种方式的 β^+ 粒子的最大能量是1.84 MeV, γ 光子的能量是2.30 MeV。第二种方式的 β^- 粒子的最大能量是4.1 MeV。这三个能量值有何关系?它们和此 β^+ 衰变的质量亏损有何关系?给定原子质量 $m_0 = 14.008\ 595\ \text{u}$, $m_N = 14.003\ 074\ \text{u}$ 。

解 第一种方式从 ^{14}O 到 $^{14}\text{N}^*$ 再到 ^{14}N 基态所放出的总能量为 $1.84 + 2.30 = 4.14(\text{MeV})$ 。由于第二种方式和第一种方式的反应物的初末态都一样,所以也应该释放这么多能量。实验值4.1 MeV和这个论断是相符的。

至于此 β^+ 衰变的质量亏损,由例5.6可知

$$\begin{aligned}\Delta m &= m_0 - m_N - Zm_e = (14.008\ 595 - 14.003\ 074) \times 935 - 2 \times 0.511 \\ &= 4.16(\text{MeV}/c^2)\end{aligned}$$

这一结果也和释放能量的实验值4.14 MeV相符。以上计算都忽略了核的反冲效应,也没有计入中微子的质量。

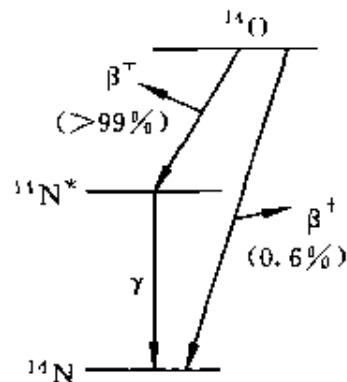


图 5.19 ^{14}O 的 β^+ 衰变

5.9 核 反 应

核反应指的是核的改变,衰变就是一种核反应。但它更多地是指一个人射的高能粒子轰击一靶核时引起的变化,下面举几个例子。

1919年卢瑟福第一次用 α 粒子轰击氮核实现的人工核嬗变



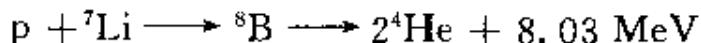
此反应式也常简写成 $^{14}\text{N}(\alpha, \text{p})^{17}\text{O}$ 。

1932年查德威克发现中子的核反应

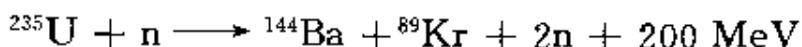


此反应式也常简写成 $^9\text{Be}(\alpha, \text{n})^{12}\text{C}$ 。

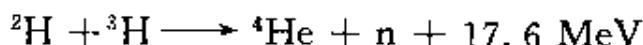
第一次用加速粒子引发的核反应



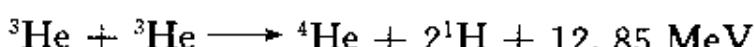
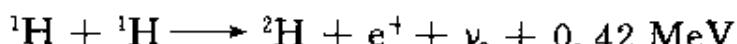
一种可能的铀核裂变反应



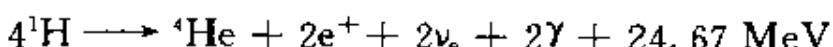
氢弹爆炸的热核反应



太阳中进行的热核反应(质子-质子链)



其总效果是



在核反应中,粒子的转变和产生都要遵守一些守恒定律,如质能守恒、电荷守恒、角动量守恒、重子数守恒、轻子数守恒、宇称守恒等等^①。

在表示核反应的概率时,常用到反应截面这一概念。一种核反应的反应截面 σ 是单位时间内一个靶粒子的反应次数和入射粒子流强 I (单位时间内通过单位面积的入射粒子数) 的比值,即

$$\sigma = \frac{R}{NI} \quad (5.36)$$

式中 R 是反应速率,即单位时间内的反应次数, N 是入射粒子流中的靶核数。由于 R 和 I 的量纲分别是 T^{-1} 和 $\text{L}^{-2} \text{T}^{-1}$ 而 N 无量纲,所以 σ 的量纲就是面积的量纲 L^2 。由于反应截面是反应发生的概率的表示,所以如果入射粒子是经典粒子,而且每个粒子飞向一个核的瞄准距离小于该核的半径,就一定会发生碰撞而引发反应。这种情况下,该反应的反应截面就应当等于该核的几何截面面积。因

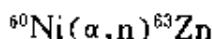
^① 参看本套教材第一册力学 A.3 节粒子的转化与守恒定律。

此,为了方便,就定义了一个反应截面的单位靶恩,符号为 b,

$$1 \text{ b} = 10^{-28} \text{ m}^2$$

由于入射粒子实际上是量子粒子,它的波函数覆盖面积较大,因而即使经典瞄准距离大于核半径也能引发反应,但每次引发的概率可能小于 100%,所以实际的反应截面可能大于也可能小于核的几何截面面积。例如 ^{113}Cd 捕获慢中子的反应截面约为 55 000 b,差不多是 ^{113}Cd 核的几何截面的 10^4 倍。正是由于这样大的反应截面,镉就成了控制反应堆反应速率的上好材料。把镉做的控制棒插入反应堆内,堆内中子流量和裂变速率就会减小。

例 5.8 下述反应



对于能量为 18 MeV 的 α 粒子的反应截面是 0.7 b。此反应在回旋加速器中进行,靶为厚 2.5 μm 的 Ni 箔。Ni 的密度是 8.8 g/cm^3 ,其中 ^{60}Ni 的天然丰度为 26.2%,入射束电流是 $8 \mu\text{A}$ 。求反应速率。

解 入射 α 粒子流强为

$$I = \frac{8 \times 10^{-6}}{2 \times 1.6 \times 10^{-19} S} = \frac{2.5 \times 10^{13}}{S} (\text{m}^2 \cdot \text{s})^{-1}$$

式中 $S(\text{m}^2)$ 为入射束流的横截面积。在该束流内的 Ni 原子的数目为

$$N' = 6.02 \times 10^{23} \times \frac{2.5 \times 10^{-6} \times S \times 8.8 \times 10^3}{58.7 \times 10^3} = 2.26 \times 10^{23} S$$

在束流中 ^{60}Ni 核的数目为

$$N = 0.262 N' = 5.92 \times 10^{22} S$$

(5.36) 式给出反应速率为

$$R = \sigma NI = 0.7 \times 10^{-28} \times 5.92 \times 10^{22} \times 2.5 \times 10^{13} = 1.04 \times 10^8 (\text{s}^{-1})$$

对于各种核反应,除关注核的种类的变化外,还要特别注意能量的转化情况。核反应的 Q 值,即核反应释放的能量也可通过质量亏损算出。对于如下的典型核反应



它的 Q 值为

$$Q = (m_X - m_x - m_y - m_Y)c^2 \quad (5.38)$$

对不同的核反应, Q 可正可负。 $Q > 0$ 的称做放能反应, $Q < 0$ 的称做吸能反应。

下面考虑一下吸能反应。设想入射粒子的动能为 $E_{k,x}$, 靶粒子 X 在实验室中静止。应注意的是要引发一吸能反应, 入射粒子的动能等于该反应的 Q 值(绝对值)是不够的。这是因为入射粒子和静止的靶粒子的质心动能在反应时是不会改变因而不能被利用于核转变的。引发核反应的资用能必须大于 $|Q|$ 。一般来讲, 上述核反应总要经过入射粒子和靶粒子结合为一体的中间阶段, 然后再分解成后来的粒子。分析从最初到两者结合为一体这一过程可以求得入射粒子和靶粒子在它们的质心系中的动能之和为^①

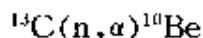
$$E_{av} = \frac{m_X}{m_x + m_X} E_{k,x}$$

这也就是该吸热反应所可能利用的资用能, 此资用能大于 $|Q|$ 时才能引发该吸热反应。因此入射粒子的动能至少应等于

$$E_{th} = \frac{m_x + m_X}{m_X} |Q| = \left(1 + \frac{m_x}{m_X}\right) |Q| \quad (5.39)$$

这一引发吸能核反应所需的入射粒子的最小能量叫该反应的阈能。

例 5.9 计算下述核反应的阈能:



给定原子质量 $m_c = 13.003\ 355\ \text{u}$, $m_{Be} = 10.013\ 534\ \text{u}$ 。

解 由质量亏损计算 Q 值为

$$\begin{aligned} Q &= (13.003\ 355 + 1.008\ 665 - 4.002\ 603 - 10.013\ 534) \\ &\times 931.5 = -3.835(\text{MeV}) \end{aligned}$$

负号表示该反应为吸能反应。由 (5.39) 式可得在实验室中此核反应的阈

^① 请参看本套教材第一册力学第 4 章例 4.11 和习题 4.19。

能为

$$E_{\text{th}} = \left(1 + \frac{m_n}{m_c}\right) |Q| = \left(1 + \frac{1}{13}\right) \times 3.835 = 4.13(\text{MeV})$$

以上是在 $|Q|$ 值相对较小的情况下用经典力学计算的结果，近代高能加速器给出的入射粒子的能量可达 GeV 甚至 TeV 量级。这样入射粒子和靶核的质心动能就很大，因而耗用能只占入射粒子能量的很小一部分。用相对论动量能量关系可求得(5.37)式的核反应的耗用能为^①

$$E_{\text{av}} = \sqrt{2m_x c^2 E_{k,x} + [(m_x + m_N)c^2]^2}$$

正是由于用高能粒子去轰击静止的靶核时能量利用率很低，所以现代高能加速器都采用了对撞机的结构。在这种加速器中质量相同的高能粒子对撞时的全部能量都可用来引发核反应。

提 要

1. 核的一般性质

核由中子和质子组成。中子数 N 、质子数 Z 和质量数 A 的关系为 $A = Z + N$ 。

核的半径： $R = r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1.2 \text{ fm}$

核的自旋： 自旋量子数 I 。核自旋角动量在 z 方向的投影

$$I_z = m_I \hbar, m_I = \pm I, \pm (I - 1), \dots, \pm \frac{1}{2} \text{ 或 } 0.$$

核的磁矩在 z 方向的投影为

$$\mu_z = g \mu_N m_I$$

$$\text{核磁子： } \mu_N = \frac{e \hbar}{2m_p} = 5.06 \times 10^{-27} \text{ J/T}$$

^① 请参看本套教材第一册力学第 6 章例 6.11 和习题 6.25, 6.26。

质子、中子都有磁矩, $\mu_s = g\mu_N m_I, m_I = \pm 1/2$ 。

2. 核力: 大而短程, 与电荷无关, 和核子的自旋取向有关, 是一种多体力, 不服从叠加原理。核力实际上是核子内部的夸克之间的色相互作用的残余力。

3. 核的结合能: 等于使一个核的各核子完全分开所需要做的功。可由中子和质子组成核时的质量亏损乘以 c^2 算出。大多数核的核子的平均结合能约为 $8 \text{ MeV}/c^2$ 。

4. 核的液滴模型: 韦塞克关于结合能的半经验公式为

$$E_b = a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 Z^2 / A^{1/3} - a_4 \frac{(A - 2Z)^2}{A} + a_5 A^{-1/2}$$

5. 放射性和衰变规律

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} = N_0 e^{-t/\tau}$$

其中, λ 为衰变常量, τ 为平均寿命。

半衰期: $t_{1/2} = 0.693\tau$

活度: $A(t) = -dN/dt = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = \lambda N = A_0 e^{-\lambda t}$

活度常用单位: $1 \text{ Ci} = 3.70 \times 10^{10} \text{ Bq}$

6. α 衰变: α 衰变是 α 粒子势垒穿透过程。逸出的 α 粒子能量越大, 半衰期越短。

α 衰变常伴随 γ 射线的发射。

7. 穆斯堡尔效应: 是无反冲 γ 射线共振效应。 γ 源运动时, 吸收体对所发 γ 射线的共振吸收谱叫穆斯堡尔谱。该谱能给出与源同种的核的环境信息从而在许多方面得到应用。

8. β 衰变: 包括正、负电子衰变和电子捕获, 都是核内质子和中子的相互变换的结果。

β 衰变也常伴随 γ 射线的发射。

9. 核反应: 常指入射粒子进入靶核引起变化的过程。

反应截面: 单位时间内一个靶粒子的反应次数和入射粒子流强的比值, 即

$$\sigma = R/NI$$

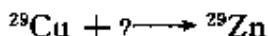
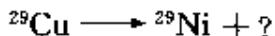
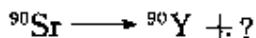
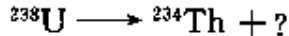
量纲是面积量纲,常用单位:1 b = 10^{-28} m^2

Q值:核反应释放的能量。 $Q > 0$ 的是放能反应, $Q < 0$ 的是吸能反应。

能引发吸能反应的入射粒子的最小能量称为该反应的阈能 E_{th} , $E_{th} > |Q|$ 。

思 考 题

1. 为什么说核好像是 A 个小硬球挤在一起形成的?
2. 为什么各种核的密度都大致相等?
3. 为什么核子由强相互作用决定的结合能和核子数成正比?
4. 怎么理解核力是一种残余力?
5. 假定质子的正电荷均匀分布在核内,试根据带电球体的静电能公式校核韦塞克半经验公式的电力项并求出系数 a_2 的值。
6. 完成下列核衰变方程:



7. 放射性 ^{235}U 系的起始放射核是 ^{235}U ,最终核为 ^{207}Pb 。从 ^{235}U 到 ^{207}Pb 共经过了几次 α 衰变? 几次 β 衰变(所有 β 衰变都是 β^- 衰变)?
8. 为什么单核 γ 源不可能进行 γ 射线共振吸收? 穆斯堡尔怎么做到 γ 射线共振吸收的?
9. 为什么粒子束引起核反应的反应截面可能大于或小于靶核的几何截面面积?
10. 为什么实现吸能核反应的阈能大于该反应的 Q 值的大小? 利用对撞机为什么能大大提高引发核反应的能量利用率?

习 题

5.1 一个能量为 6 MeV 的 α 粒子和静止的金核(^{197}Au)发生正碰, 它能到达离金核的最近距离是多少? 如果是氮核(^{14}N)呢? 都可以忽略靶核的反冲吗? 此 α 粒子可以到达氮核的核力范围之内吗?

5.2 ^{16}N , ^{16}O 和 ^{16}F 原子的质量分别是 16.006 099 u, 15.994 915 u 和 16.011 465 u。试计算这些原子的核的结合能。

5.3 将核中质子当费米气体处理, 试求原子序数为 Z 和质量数为 A 的核内的质子的费米能量和每个质子的平均能量。对 ^{56}Fe 核和 ^{238}U 核求这些能量的数值(以 MeV 为单位)。

5.4 有下列三对“镜象核”(Z, N 互换):

^{11}C 和 ^{11}B , ^{15}O 和 ^{15}N , ^{21}Na 和 ^{21}Ne

它们各对中两核的静电能差分别是 2.79 MeV, 3.48 MeV 和 4.30 MeV。试由此计算各对核的半径。半径是否与 $A^{1/3}$ 成正比? 比例常量是多少?

5.5 有些核可以看成是由几个 α 粒子这种“原子”组成的“分子”。例如, ^{12}C 可看成是由 3 个 α 粒子在一个三角形 3 顶点配置而成, 而 ^{16}O 可看成是 4 个 α 粒子在一个四面体的 4 顶点配置而成。试通过计算证明用这种模型计算的 ^{12}C 和 ^{16}O 的结合能和用质量亏损计算的结合能是相符的, 设每对 α 粒子的结合能为 2.42 MeV 并且计入每个 α 粒子本身的结合能, 给定一些原子的质量为

^1H : 1.007 825 ^4He : 4.002 603

^{16}O : 15.994 915 ^{12}C : 12.000 000

5.6 假设一个 ^{232}Th 核分裂成相等的两块。试用结合能的半经验公式计算此反应所释放的能量。

5.7 假设两个 Z, A 核聚合成一个 $2Z, 2A$ 的核。试根据结合能的半经验公式写出反应所释放的能量的表示式并计算两个 ^{12}C 核聚合时所释放能量的数值。

5.8 一种放射性衰变的平均寿命为 τ 。这种放射性物质的寿命对平均寿命的方均根偏差是多少? 最概然寿命多长?

5.9 天然钾中放射性同位素 ^{40}K 的丰度为 1.2×10^{-4} , 此种同位素的半衰期为 $1.3 \times 10^9 \text{ a}$ 。钾是活细胞的必要成分, 约占人体重量的 0.37%。求每个人体内这种放射源的活度。

5.10 计算 10 kg 铀矿(U_3O_8) 中 ^{226}Ra 和 ^{231}Pa 的含量。已知天然铀中 ^{238}U 的丰度为 99.27%, ^{235}U 的丰度为 0.72%; ^{226}Ra 的半衰期为 1 600 a, ^{231}Pa 的半衰期为 $3.27 \times 10^4 \text{ a}$ 。

5.11 一个病人服用 30 μCi 的放射性碘 ^{123}I 后 24 h, 测得其甲状腺部位的活度为 4 μCi 。已知 ^{123}I 的半衰期为 13.1 h。求在这 24 h 内多大比例的被服用的 ^{123}I 集聚在甲状腺部位了。(一般正常人此比例约为 15% 到 40%。)

5.12 向一人静脉注射含有放射性 ^{24}Na 而活度为 300 kBq 的食盐水。10 h 后他的血液每 cm^3 的活度是 30 Bq。求此人全身血液的总体积, 已知 ^{24}Na 的半衰期为 14.97 h。

5.13 一年龄待测的古木片在纯氧氛围中燃烧后收集了 0.3 mol 的 CO_2 。这样样品由于 ^{14}C 衰变而产生的总活度测得为每分钟 9 次计数。试由此确定古木片的年龄。

5.14 一块岩石样品中含有 0.3 g 的 ^{238}U 和 0.12 g 的 ^{206}Pb 。假设这些铅全来自 ^{238}U 的衰变, 试求这块岩石的地质年龄。

5.15 ^{226}Ra 放射的 α 粒子的动能为 4.782 5 MeV, 求子核的反冲能量。此 α 衰变放出的总能量是多少?

5.16 不同衰变方式释放的能量可用来确定子核的质量差。 ^{64}Cu 可通过 β 衰变产生 ^{64}Zn , 也可通过 β^+ 衰变产生 ^{64}Ni 。两种衰变的 Q 值分别为 0.57 MeV 和 0.66 MeV。试由这些数据求 ^{64}Zn 核和 ^{64}Ni 核的质量差, 以 u 表示。

5.17 由于 ^{60}Co 的 β 衰变(半衰期为 5.27 a) 总伴随着其子核的 γ 射线发射, 所以 ^{60}Co 常被用于放射疗法。 ^{60}Co 可以通过用反应堆中的热中子照射 ^{59}Co 而得到。反应式是

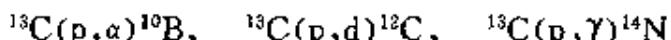


此反应的截面是 120 b。一个边长为 2 cm 的正立方钴块(天然钴中 ^{59}Co 的丰度为 100%) 放入中子通量为 $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 的中子射线中, 求 6 h 后从中取出时钴块的活度。已知钴块密度为 8.858 g/cm³。

5.18 Cd 有 8 种稳定同位素, 有的对热中子有大的吸收截面。如果 Cd 的

平均吸收截面是 4 000 b, 要吸收入射热中子通量的 95%, 需要多厚的 Cd 片? 已知 Cd 的摩尔质量是 112.4 g/mol, 密度是 8.64 g/cm³。

5.19 计算下列反应的 Q 值并指出何者吸热, 何者放热:



给定一些原子的质量为

$$^{13}\text{C}: 13.003\ 355\ \text{u}$$

$$^1\text{H}: 1.007\ 825\ \text{u}$$

$$^4\text{He}: 4.002\ 603\ \text{u}$$

$$^{10}\text{B}: 10.012\ 937\ \text{u}$$

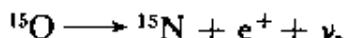
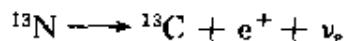
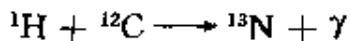
$$^2\text{H}: 2.014\ 102\ \text{u}$$

$$^{14}\text{N}: 14.003\ 074\ \text{u}$$

5.20 计算反应 $^{13}\text{C}(\text{p}, \alpha)^{10}\text{B}$ 的阈能。注意, 入射质子必须具有足够大的能量以便进入靶核 ^{13}C 的半径以内。(原子质量数据见 5.19 题。)

5.21 目前太阳内含有约 1.5×10^{30} kg 的氢, 而其辐射总功率为 3.9×10^{26} W。按此功率辐射下去, 经多长时间太阳内的氢就要烧光了?

5.22 在温度比太阳高的恒星内氢的燃烧据信是通过碳循环进行的, 其分过程如下:



(1) 说明此循环并不消耗碳, 其总效果和质子-质子循环一样。

(2) 计算此循环中每一反应或衰变所释放的能量。

(3) 释放的总能量是多少?

给定一些原子的质量为

$$^1\text{H}: 1.007\ 825\ \text{u}$$

$$^{13}\text{N}: 13.005\ 738\ \text{u}$$

$$^{14}\text{N}: 14.003\ 074\ \text{u}$$

$$^{15}\text{N}: 15.000\ 109\ \text{u}$$

$$^{13}\text{C}: 13.003\ 355\ \text{u}$$

$$^{15}\text{O}: 15.003\ 065\ \text{u}$$

物理学与现代技术

III 正电子湮没技术

正电子是电子的反粒子，它具有与电子相同的静止质量($m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$)和自旋($S = \hbar/2$)。它带的电荷和电子的电量相等($e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$)，但是正的，因而也具有正的磁矩。首先是狄拉克在1930年建立相对论性的量子力学时预言了这种粒子存在，两年以后安德森(Anderson)在宇宙射线中发现了它。它是人们发现的第一种反粒子。

在我们这个物质世界里，正电子不可能长时间稳定地存在。它遇到电子时就会湮没，即一对电子和正电子同时消失，继而产生两个 γ 光子(也能产生一个或三个 γ 光子，但概率甚小)。实验中用的正电子都来自放射性同位素的正电子衰变。常用的正电子源是放射性同位素 ^{22}Na 。把一滴外观和化学性质都跟一滴食盐水完全一样的 $^{22}\text{NaCl}$ 的水溶液滴到样品表面上，就会有大量正电子射到样品中去，与样品中的电子湮没，发射出 γ 射线。用 γ 射线探测器探测这些射线，就可以获知样品材料内部有关电子结构、电子密度等方面的信息。目前在这方面已形成了一种专门的新技术——正电子湮没技术，以及新学科——正电子湮没谱学。

金属或固体(晶体)材料内电子密度分布和电子的动量及能量是决定材料微观结构的重要因素。利用正电子湮没技术就可获得有关这方面的信息。这是因为正电子湮没的概率和它到达处的电子密度有关。在电子密度大的地方，正电子进入时更快地湮没。正电子到达材料中各处时在湮没前经历的时间叫正电子的寿命。

在不同的材料中或材料相同但相结构不同的物质中各处的电子密度不同，正电子到达材料中各处时的寿命也不同，例如金属中正电子的寿命一般在100到250 ps之间，在离子化合物或其他非金属化合物中则可到1 ns。材料中有空位缺陷时，缺陷中的电子密度较小，因而正电子进入缺陷后会有更长的寿命。这样，正电子寿命的测量就能提供有关物质相结构(用来研究各种结构相变、液晶相变乃至生物膜相变等)以及晶体中缺陷的大小和种类的信

息。这对了解材料的宏观性质都是很重要的。

利用²²Na来测量正电子的寿命时,还利用了这样的事实,即²²Na在放出一个正电子的同时,还放出一个能量为1.28 MeV的γ光子。它放射出的正电子的最大动能为0.545 MeV。具有这样大动能的正电子有可能在几个ps的时间内透入固体几十到几百微米的深度,同时能量减小到1 eV以下,然后在该处扩散而和电子结合发生湮没。湮没时若原有电子的动量很小可以忽略,则根据爱因斯坦质能方程

$$E = mc^2$$

可求出生成的两个光子的能量都等于正电子或电子的静止能量,即

$$E_\gamma = m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$$

由于湮没前正电子-电子对的总动量为零,所以湮没后生成的两个光子的总动量也应等于零。因此,这两个光子就沿相反的方向射出。图 I.1 就是记录正电子湮没事件次数的实验装置简图。在滴上²²Na溶液的样品的两侧对着放置两个γ射线探测器。它们接收的信号送入一个符合电路。该符合电路只有当其两端同时有脉冲输入时,才能输出一个脉冲。这一脉冲送入计数器就是一次正电子湮没的计数。

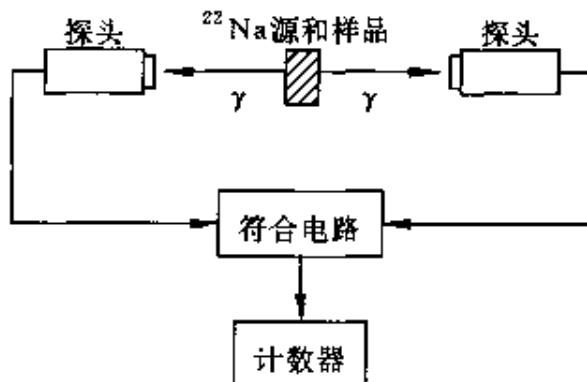
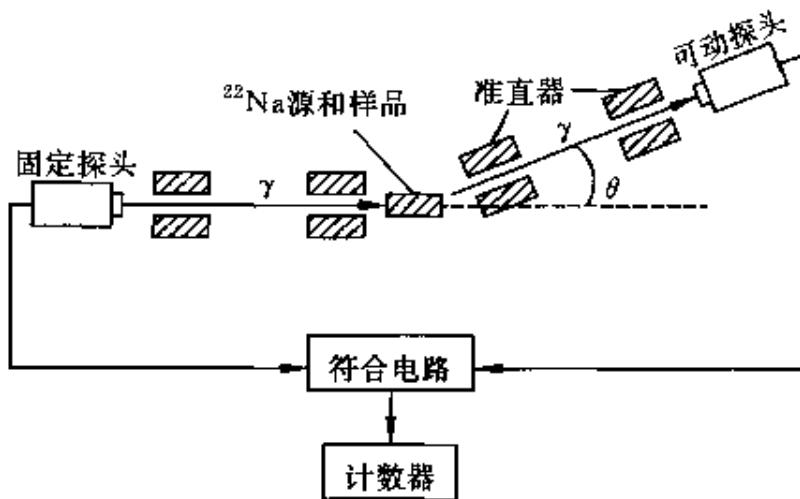


图 I.1 记录正电子湮没实验简图

为了测出正电子寿命,实验装置中还要加进探测²²Na发射1.28 MeV的γ光子的部件。这样就能测出正电子从发射到湮没所存在的时间,也就是测出了正电子的寿命。

以上是正电子-电子对湮没前动量都很小的情况。实际上固体中电子的能量一般有几个电子伏特,因而湮没前正电子-电子对的总动量不能忽略。

这样湮没后产生的两个 γ 光子的发射方向将不在同一条直线上,而且能量也会发生和0.511 MeV的偏离(因而光子的频率也会变化)。实验上能够测量出两个光子发射方向的夹角和光子能量的变化,这种测量叫角关联测量。通过角关联测量可以获得固体中电子的动量和能量的信息。这对研究金属中电子的能级及固体能带结构都是很重要的。这种信息也用来研究材料的缺陷。图Ⅲ.2是一种一维角关联测量装置。样品中正电子湮没时同时发出的两个其夹角为 $180^\circ - \theta$ 的 γ 光子经过准直器后分别为两个探测器测出。



图Ⅲ.2 角关联测量装置简图



物理学与现代技术

IV 核磁共振

核磁共振是一种利用核在磁场中的能量变化来获得关于核的信息的技术。

由 5.1 节可知, 核有自旋角动量和自旋磁矩, 核自旋磁矩沿磁场方向的分量为

$$\mu_z = g \mu_N m_I$$

式中 μ_N 是核磁子, 大小为 $5.057\ 866 \times 10^{-27}$ J/T; g 是核的 g 因子, 随核的结构不同而不同; m_I 为自旋磁量子数。对氢核, $m_I = \pm \frac{1}{2}$ 。

核磁矩在外磁场 B 中的能量为

$$E = -\mu \cdot B = \mu_z B = -g \mu_N m_I$$

对氢核, 此两能级之差为 $\Delta E =$

$g \mu_N B$ (图 IV.1)。当氢核在外磁场中受到电磁波的照射时, 就只能吸收如下频率的电磁波:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{g \mu_N B}{h} \quad (\text{IV.1})$$

这种在外磁场中的核吸收特定频率的电磁波的现象就叫核磁共振(NMR)。

实验和实际应用中常利用氢核的核磁共振。氢核即质子, 它的

$g_p = 5.585\ 7$, 代入(IV.1)式可得在 $B = 1$ T 时, 相应的电磁波的共振频率为 $\nu = 42.69$ MHz。这一频率在射频范围, 波长为 7 m。

实现核磁共振, 既可以保持磁场不变而调节入射电磁波的频率, 也可以使用固定频率的电磁波照射, 而调节样品所受的外磁场。一种在实验室中观

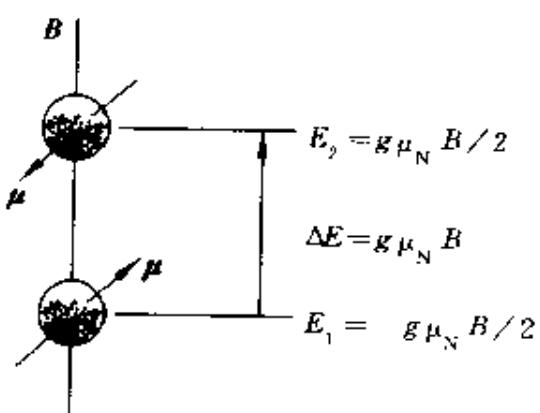


图 IV.1 氢核在外磁场中的能量

察核磁共振的装置的主要部分如图 N.2 所示。这一装置通过调节频率来达到核磁共振，样品（如水）装在小瓶中置于磁铁两极之间，瓶外绕以线圈，由射频振荡器向它通入射频电流。这电流就向样品发射同频率的电磁波。这频率大致和磁场 B 对应的频率相等。为了精确地测定共振频率，就用一个调频振荡器使射频电磁波的频率在共振频率附近连续变化。当电磁波频率正好等于共振频率时，射频振荡器的输出就出现一个吸收峰，它可以从示波器上看出，同时可由频率计读出此共振频率。

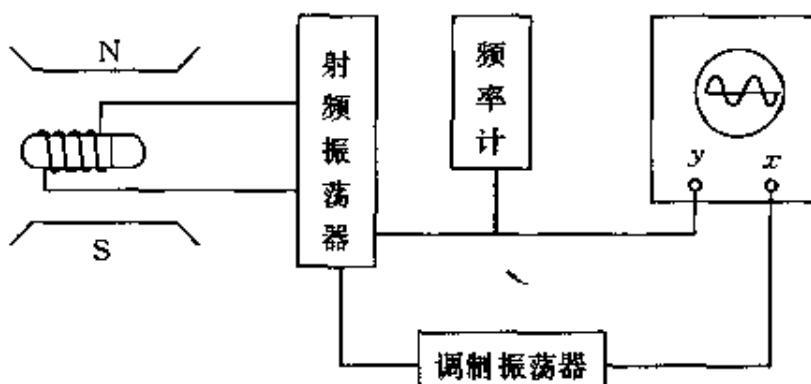


图 N.2 核磁共振实验装置示意图

核磁共振现象应用广泛，特别是在化学中应用它来研究分子的结构。由于氢核的核磁共振信号最强，所以核磁共振在研究有机化合物的分子结构时特别有用。这种研究根据的原理是：分子中各个氢核实际上还受到核外电子或其他原子的磁场的作用，因而对于一定频率的入射电磁波，发生共振时的外加磁场和用上面(N.1)式计算出的磁场有些许偏离。在不同分子或同一分子内的不同集团中，氢核的环境不同，它受的分子内部的磁场也不同，因而发生核磁共振时磁场偏离的大小也不同。在化学研究中，正是利用这种不同的偏离和已知的标准结构的偏离之对比来判定所研究物质的分子结构的。

由于磁场，包括交变电磁场可以穿入人体，而人体的大部分(75%)是水(一个水分子有两个氢核)，而且这些水以及其他富含氢的分子的分布可因种种疾病而发生变化，所以可以利用氢核的核磁共振来进行医疗诊断。核磁共振成象就是这样的一种新的医疗技术。

图 N.3 为人体核磁共振成象仪的方框图，病人躺在一个空间不均匀的磁场中，磁场在人体内各处的分布已知。激发单元用来产生射频电磁波，以激

发人体内各处的氢核发生核磁共振。接收单元接收核磁共振信号，由于人体内各处的磁场不同，与之相应的共振电磁波的频率也就不同，改变电磁波的频率就可以得出人体内各处的核磁共振信号。这些信号经过计算机处理就可以以三维立体图象或二维断面象的形式由显示单元显示出来。将病态的图象和正常态的组织图象加以对比，就可以做出医疗判断。

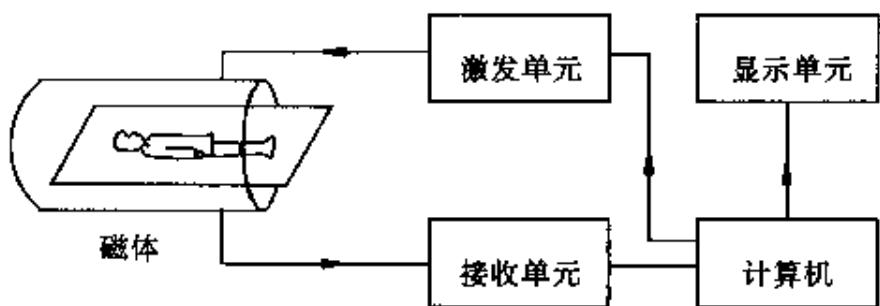


图 IV.3 核磁共振成象方框图

核磁共振成象的优点是：射频电磁波对人体无害；可以获得内脏器官的功能状态、生理状态以及病变状态的情况等。

元素周期表

元素周期表

数 值 表

名称	符号	计算用值	最佳值(1986年)	
			数 值	不确定度 $/10^{-6}$
真空中的光速	c	$3.00 \times 10^8 \text{ m/s}$	2.997 924 58	(精确)
普朗克常量	h	$6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$	6.626 075 5	0.60
	\hbar	$= h/2\pi$		
		$= 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$	1.054 572 66	0.60
玻耳兹曼常量	k	$1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$	1.380 651 3	1.8
真空磁导率	μ_0	$4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$		
		$= 1.26 \times 10^{-6} \text{ H/m}$	1.256 637 061...	(精确)
真空介电常量	ϵ_0	$= 1/\mu_0 c^2$		
		$= 8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m}$	8.854 187 817	(精确)
引力常量	G	$6.67 \times 10^{-11} \text{ N} \cdot \text{m}^2/\text{kg}^2$	6.672 59	128
阿伏伽德罗常量	N_A	$6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	6.022 136 7	0.59
元电荷	e	$1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$	1.602 177 33	0.30
电子静质量	m_e	$9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$	9.109 389 7	0.59
		$5.49 \times 10^{-4} \text{ u}$	5.485 799 03	0.023
		$0.511 0 \text{ MeV}/c^2$	0.510 999 06	0.30
质子静质量	m_p	$1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$	1.672 623 1	0.59
		$1.007 3 \text{ u}$	1.007 276 466 0	0.005
		$938.3 \text{ MeV}/c^2$	938.272 31	0.30
中子静质量	m_n	$1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$	1.674 928 6	0.59
		$1.008 7 \text{ u}$	1.008 664 923 5	0.002 3
		$939.6 \text{ MeV}/c^2$	939.565 63	0.30
α 粒子静质量	m_α	$4.002 6 \text{ u}$	4.002 603 2	0.067
玻尔磁子	μ_B	$9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T}$	9.274 015 4	0.34
电子磁矩	μ_e	$9.28 \times 10^{-24} \text{ J/T}$	9.284 770 0	0.34
核磁子	μ_N	$5.05 \times 10^{-27} \text{ J/T}$	5.050 786 6	0.34

续表

名称	符号	计算用值	最佳值(1986年)	
			数 值	不确定度 $/10^{-6}$
质子磁矩	μ_p	$1.41 \times 10^{-26} \text{ J/T}$	1.410 607 61	0.34
中子磁矩	μ_n	$0.966 \times 10^{-26} \text{ J/T}$	0.966 237 07	0.41
里德伯常量	R	$1.10 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$	1.097 373 153 4	0.001 2
玻尔半径	a_0	$5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$	5.291 772 49	0.045
经典电子半径	r_e	$2.82 \times 10^{-15} \text{ m}$	2.817 940 92	0.13
电子康普顿波长	$\lambda_{C.e}$	$2.43 \times 10^{-12} \text{ m}$	2.426 310 58	0.089
斯特藩 - 玻耳兹曼常量	σ	$5.67 \times 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$	5.670 51	34
1 埃	\AA	$1 \text{\AA} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$		(精确)
1 光年	l.y.	$1 \text{l.y.} = 9.46 \times 10^{15} \text{ m}$		
1 电子伏	eV	$1 \text{eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$	1.602 177 33	0.30
1 特[斯拉]	T	$1 \text{T} = 1 \times 10^4 \text{ G}$		(精确)
1 原子质量单位	u	$1 \text{u} = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$ $= 931.5 \text{ MeV}/c^2$	1.660 540 2 931.494 32	0.60 0.30
1 居里	Ci	$1 \text{Ci} = 3.70 \times 10^{10} \text{ Bq}$		(精确)
1 韦恩	b	$1 \text{b} = 10^{-28} \text{ m}^2$		(精确)

习 题 答 案

第 1 章

1.1 292 W/m^2

1.2 $5.8 \times 10^3 \text{ K}$; $6.4 \times 10^7 \text{ W/m}^2$

1.3 91°C

1.4 (2) 279 K , 45 K

1.5 $2.6 \times 10^7 \text{ m}$

1.6 $1.76 \times 10^{11} \text{ Hz}$, $1.5 \times 10^8 \text{ W}$

1.11 2.0 eV , 2.0 V , 296 nm

1.12 $2.5 \times 10^3 \text{ m}^{-3}$

1.13 85 s

*1.14 2.9 eV

1.15 0.10 MeV

1.16 62 eV

*1.18 $6.9 \times 10^4 \text{ eV}$, $0.1 \times 10^4 \text{ eV}$

1.19 $3.32 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$, $3.32 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$;

$5.12 \times 10^5 \text{ eV}$, $6.19 \times 10^3 \text{ eV}$

1.20 0.146 nm

1.21 $6.1 \times 10^{-12} \text{ m}$

1.24 $5.3 \times 10^{-23} \text{ m/s}$

1.25 1.2 nm , 不

1.26 $5.2 \times 10^{-15} \text{ m}$, 能

1.27 $5.7 \times 10^{-17} \text{ m}$, 能

1.28 45.5 eV

1.29 (1) $7.29 \times 10^{-21} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$, $2.48 \times 10^4 \text{ eV}$

第 2 章

2.1 $5.4 \times 10^{-37} \text{ J}$, $5.5 \times 10^{-37} \text{ J}$, $0.11 \times 10^{-37} \text{ J}$ 2.2 (1) $1.0 \times 10^{-40} \text{ J}$; (2) 7.8×10^9 , $1.6 \times 10^{-30} \text{ J}$

2.4 0.091

*2.5 $a/2$, $a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right)$ 2.7 $\pi^2 \hbar^2 n^2 / ma^3$ 2.11 $\left(n + \frac{1}{2} \right) \times 0.54 \text{ eV}$, 0.54 eV , $2.30 \times 10^3 \text{ nm}$

第 3 章

3.1 91.4 nm, 122 nm

3.2 95.2 nm, 4.17 m/s

3.5 $me^4 / 2\pi(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3 c$, $1.11 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ 3.6 $5.3 \times 10^{-11} \text{ m}$, $1.25 \times 10^{15} \text{ Hz}$ 3.7 (1) $n^2 \hbar^2 / GMm^2$; (2) 2.54×10^{74} ;(3) $1.18 \times 10^{-63} \text{ m}$ 3.8 (1) 分别从 $n = 6$ 和 5 跃迁到 $n = 2$ 时发出的光形成的谱线, 1.000 9;
(2) $2.9 \times 10^5 \text{ m/s}$

3.9 8 MHz

*3.10 $4.8 \times 10^9 \text{ Hz}$ *3.12 $3a_0/2$ *3.13 -27.2 eV , 13.6 eV , $2.18 \times 10^6 \text{ m/s}$ 3.15 65.9° , 144.7° 3.16 (1) $1.1 \times 10^{10} \text{ Hz}$, 0.54 pm ; (2) 0.39 T 3.17 54.7° , 125.3° , $1.1 \times 10^{-23} \text{ J}$ *3.18 $\pm 1.4 \times 10^{-20} \text{ N}$, 0.21 mm

3.19 68.1 MHz, 4.41 m

3. 21 $B(1s^2 2s^2 2p^1)$, $Ar(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5)$
 $Cu(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1)$
 $Br(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5)$
- * 3. 22 $6.6 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
- * 3. 23 12.4 kV
- * 3. 24 0.062 nm, 0.124 nm, 0.248 nm
- * 3. 25 (1) 393 eV; (2) N
- * 3. 26 $0.80 \times 10^{-10} \text{ m}$
3. 27 (1) 0.117 eV; (2) 1.07%; (3) $-1.37 \times 10^5 \text{ K}$
3. 28 6
3. 29 (1) 0.36 mm; (2) 12.5 GW; (3) 5.2×10^{17}
3. 30 $2.0 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$
3. 31 (1) $7.07 \times 10^6 \text{ W/m}^2$; (2) 7.33 μm ;
(3) $2.49 \times 10^{10} \text{ W/m}^2$
- * 3. 32 0.12 nm
- * 3. 33 34 eV, 无贡献
- * 3. 34 $1.85 \times 10^3 \text{ N/m}$

第 4 章

4. 1 5.50 eV, $1.39 \times 10^6 \text{ m/s}$,
 $6.38 \times 10^4 \text{ K}$, 0.524 nm
4. 2 $3n E_F/5$, $3E_F/5$
- * 4. 3 $3v_F/4$, $\sqrt{3/5} v_F$
4. 4 19 MeV, $6.0 \times 10^7 \text{ m/s}$
- * 4. 5 $1.8 \times 10^3 \text{ K}$
- * 4. 6 (1) 1.70 eV; (2) 0.900 K
4. 7 (1) $3.8 \times 10^{-14} \text{ s}$; (2) 4.09 nm;
(3) 53 nm; (4) 0.26 nm
- * 4. 8 0.24, 0.76

4.9 (1) 4.9×10^{-93} ; (2) 226 nm

4.10 (1) $1/5 \times 10^6$; (2) 0.22 μg

4.11 27.6 μm

4.12 513 nm, 可见光; 4.14 μm , 红外线

4.13 654 nm

4.14 不透明

第 5 章

5.1 3.8×10^{-14} m, 4.32×10^{-15} m; N核不可, 否

5.2 118.0 MeV, 127.7 MeV, 111.5 MeV

5.3 $53(Z/A)^{2/3}$ MeV, $32(Z/A)^{2/3}$ MeV;
32, 19 和 28, 17 MeV

5.4 3.41 fm, 3.72 fm, 4.22 fm; 1.5 fm

5.5 127.7 MeV, 92.2 MeV

5.6 169 MeV

5.7 $\left(-0.8345 \frac{Z^2}{A^{1/3}} + 7.345 \cdot 8A^{2/3} \right)$ MeV, 25.4 MeV

5.8 τ , 0

5.9 8.1 kBq

5.10 2.87 mg, 2.71 mg

5.11 48%

5.12 6.29 L

5.13 1.5×10^4 a

5.14 2.45×10^9 a

5.15 0.086 2 MeV, 4.870 7 MeV

5.16 9.7×10^{-5} u

5.17 0.42 Ci

5.18 51 μm

5.19 -4.06 MeV (吸), -2.72 MeV (吸),
 7.55 MeV (放)

5. 20 6.7 MeV

5. 21 7.2×10^{10} a

5. 22 (2) 1.944, 1.198, 7.551, 7.297, 1.732, 4.966 MeV
(3) 24.69 MeV

诺贝尔物理学奖获得者名录

年份	获 得 者	发现、发明、实验或理论创新
1901	Wilhelm Konrad Rontgen	X射线(1895)
1902	Hendrik Antoon Lorentz Pieter Zeeman	磁场对辐射的影响
1903	Antoine Henri Becquerel Pierre Curie Marie Skłodowska Curie	天然放射性(1896) 放射现象
1904	John William Strutt Lord Rayleigh	氯气和气体密度
1905	Phillip Eduard Anton von Lenard	阴极射线(1899)
1906	Joseph John Thomson	气体电导(1897)
1907	Albert Abraham Michelson	精密光学仪器及其用于计量学(1880)
1908	Gabriel Lippmann	基于干涉的彩色照片(1891)
1909	Guglielmo Marconi Karl Ferdinand Braun	电报
1910	Johannes Diderik van der Waals	气体和液体的状态方程(1881)
1911	Wilhelm Wien	热辐射定律(1893)
1912	Nils Gustaf Dalen	灯塔用的自动气体调节器
1913	Heike Kamerlingh Onnes	低温和氦的液化(1908)
1914	Max Theodor Felix von Laue	晶体的X射线衍射(1912)
1915	William Henry Bragg William Lawrence Bragg	用X射线作晶体结构分析
1917	Charles Glover Barkla	元素的特征X射线(1906)
1918	Max Planck	能量子(1900)
1919	Johannes Stark	电场致谱线分裂(1913)
1920	Charles Edouard Guillaume	殷钢及其低膨胀系数导致精密测量
1921	Albert Einstein	光电效应的解释(1905)
1922	Niels Henrik David Bohr	原子模型及其发光(1913)
1923	Robert Andrews Millikan	电子电量测定(1911), 光电效应实 验研究(1914)
1924	Karl Manne Georg Siegbahn	X射线谱

1925 James Frank, Gustav Hertz	电子 - 原子碰撞实验
1926 Jean Baptiste Perrin	物质结构的不连续性和原子大小的测量
1927 Arthur Holly Compton Charles Thomson Rees Wilson	康普顿效应(1922) 云室(1906)
1928 Owen Willans Richardson	热电子发射(1911)
1929 Prince Louis Victor de Broglie	电子的波动性(1923)
1930 Sir Chandrasekhara Venkata Raman	原子或分子对光的散射(1928)
1932 Werner Heisenberg	量子力学(1925)
1933 Erwin Schrodinger Paul Adrien Maurice Dirac	波动力学(1925) 相对论量子力学(1927)
1935 James Chadwick	中子
1936 Victor Franz Hess Carl David Anderson	宇宙线 正电子
1937 Clinton Joseph Davisson George Paget Thomson	晶体的电子衍射证实德布罗意假设 (1927)
1938 Enrico Fermi	中子照射产生超铀放射性元素和慢 中子引起核反应(1934—1937)
1939 Ernest Orlando Lawrence	回旋加速器(1932)
1943 Otto Stern	分子束(1923) 和质子磁矩(1933)
1944 Isidor Issac Rabi	原子束内的核磁共振
1945 Wolfgang Pauli	泡利不相容原理(1924)
1946 Percy Williams Bridgman	高压物理
1947 Sir Edward Victor Appleton	电离层及其中 Appleton 层
1948 Patrick Maynard Stuart Blackett	利用云室研究核物理和宇宙射线
1949 Hideki Yukawa	核力和介子(1935)
1950 Cecil Frank Powell	乳胶, 新介子
1951 Sir John Douglas Cockcroft Ernest Thomas Sinton Walton	加速器中的核嬗变(1932)
1952 Felix Bloch Edward Mills Purcell	液体和气体中的核磁共振(1946)
1953 Frits Zernike	相衬显微镜
1954 Max Born Walther Bothe	波函数的统计解释(1926) 符合方法(1930—1931)
1955 Willis Eugene Lamb	氢光谱的兰姆移位(1947)

	Polykarp Kusch	电子磁矩(1947)
1956	William Bradford Shockley John Bardeen Walter Houser Brattain	半导体,三极管(1956)
1957	杨振宁(Chen Ning Yang) 李政道(Tsing Dao Lee)	弱作用中宇称不守恒(1956)
1958	Pavel Alekseyevich Cherenkov Ilya Mikhaylovich Frank Igor Yevgenyevich Tamm	切连科夫辐射(1935) 切连科夫辐射的解释(1937)
1959	Emilio Gino Segre Owen Chamberlain	反质子(1955)
1960	Donald Arthur Glaser	汽泡室(1952)
1961	Robert Hofstadter Rudolf Ludwig Mossbauer	核子的结构 无反冲 γ 射线发射(1957)
1962	Lev Davidovich Landau	液氮和凝聚态物质
1963	Eugene Paul Wigner Maria Goeppert Mayer J. Hans D. Jensen	应用对称原理研究核和粒子 核的壳模型(1947)
1964	Charles Hard Townes Nikolay Gennadiyevich Basov Alexander Mikhazlovich Prokhorov	微波激射器(1951—1952)和激光
1965	Sin-itiro Tomonaga Julian S. Schwinger Richard Phillips Feynman	量子电动力学(1948)
1966	Alfred Kastler	研究原子能级的光学方法
1967	Hans Albrecht Bethe	恒星能量的产生(1939)
1968	Luis Walter Alvarez	粒子的共振态
1969	Murray Gell-Mann	粒子的分类和相互作用(1963)
1970	Hannes Olof Gosta Alfven Louis Eugene Felix Neel	磁流体动力学及应用 反铁电体和铁电体(1930)
1971	Dennis Gabor	全息照相(1947)
1972	John Bardeen, Leon Neil Cooper John Robert Schrieffer	超导理论(1957)
1973	Leo Esaki	半导体隧穿

Ivar Giaever	超导体隧道穿
Brian David Josephson	约瑟夫森效应(1962)
1974 Anthony Hewish	中子星
Sir Martin Ryle	无线天文干涉测量学
1975 Aage Bohr, Ben Mottelson	非对称形核
Leo James Rainwater	
1976 Burton Richter	J/ Ψ 粒子
丁肇中(Samuel Chao Chung Ting)	
1977 Phillip Warren Anderson	磁性无序系统的电子结构
Sir Nevill Francis Mott	
John Hasbrouck Van Vleck	
1978 Pyotr Leonidovich Kapitsa	低温, 液氦
Arno Allan Penzias	宇宙微波背景辐射(1965)
Robert Woodrow Wilson	
1979 Sheldon Lee Glashow	弱电统一
Abdus Salam, Steven Weinberg	
1980 James Watson Cronin	CP 破坏(1964)
Val L. Fitch	
1981 Nicolaas Bloembergen	激光光谱
Arthur Leonard Schawlow	
Kai M. Siegbahn	高分辨率电子能谱学
1982 Kenneth Geddes Wilson	分析临界现象的方法
1983 Subrahmanyan Chandrasekhar	恒星的结构和演化(1930)
William A. Fowler	宇宙化学元素的形成
1984 Carlo Rubbia	W 和 Z 粒子(1982—1983)
Simon van der Meer	
1985 Klaus von Klitzing	量子霍尔效应(1980)
1986 Ernst August Friedrich Ruska	电子显微镜(1931)
Gerd Binnig	扫描隧道显微镜(1981)
Heinrich Rohrer	
1987 Karl Alex Muller	高温超导(1986)
Johnnes George Bednorz	
1988 Leon Max Lederman	中微子束方法和 μ 子中微子
Melvin Schwarz, Jack Steinberger	

1989	Norman Foster Ramsey, Jr. Hans Georg Dehmelt Wilhelm Paul	分离振荡场方法用于原子钟 离子捕陷技术
1990	Jerome I. Friedman Henry W. Kendall Richard E. Taylor	夸克(1967)
1991	Pierri-Gilles de Gennes	聚合物和液晶
1992	Georges Charpak	多丝正比室(1968)
1993	R. A. Hulse, J. H. Taylor	引力辐射(1975—1993)
1994	Bertram Niville Brokhouse Clifford Glenwood Shull	中子散射技术
1995	Martin L. Perl Frederick Reines	τ 子(1977) 中微子(1953)
1996	David M. Lee Douglas D. Osheroff Robert C. Richardson	3 He
1997	朱様文(Stephen Chu) Claude Cohen-Tannoudji William D. Phillips	激光冷却和捕陷原子
1998	R. B. Laughlin, H. L. Stormer 崔琦(D. C. Tsui)	分数量子霍尔效应(1982)
1999	Gerardus't Hooft Martinus J. G. Veltman	电弱相互作用的量子结构

索

引

A

爱因斯坦 Einstein, A. 11, 22, 27
31, 115

B

巴耳末系 Balmer series 83
靶恩 barn(b) 228
半导体 semiconductor 117
N型 N-type 178
P型 P-type 179
本征 intrinsic 178
杂质 impurity 178
半导体器件 semiconductor device 181
半导体三极管 semiconductor transistor 183
半衰期 half-life 207
饱和电流 saturated current 9
倍频 frequency doubling 154
标准条件 standard condition 49
玻尔半径 Bohr radius 82
玻尔磁子 Bohr magneton 98
玻尔频率条件 Bohr frequency condition 83
玻色-爱因斯坦分布 Bose Einstein (BE) distribution 167
玻色-爱因斯坦凝聚 Bose Einstein condensation 169

玻色子 boson 104

波函数 wave function 30

定态 stationary 48

波粒二象性 wave-particle duality 13

不可分辨性 indistinguishability 103

不确定关系 uncertainty relation 32

布儒斯特窗 Brewster window 132

C

残余色力 residual color force 196

长程力 long-range force 194

磁矩 magnetic moment 93, 98, 192

次壳层 sub-shell 87

D

戴维孙-革末实验 Davisson-Germer experiment 23

带状谱 band spectrum 126

单价原子的能级 energy levels of monovalence atom 93

单原子探测 single atom detection 150

倒逆过程 umklapp process 166

导体 conductor 173

德布罗意波 de Broglie wave 22	105
德布罗意波长 de Broglie wavelength 22	Doppler cooling 141
德布罗意公式 de Broglie formula 22	Doppler effect 134, 216
德布罗意波假设 de Broglie hypothesis 22	多[数载流]子 majority carrier 179
电导率 conductivity 167	多体力 many-body force 195
电子 electron 158	F
电子捕获 electron capture 222	发光二极管 light emitting diode, LED 181
电子磁矩 electron magnetic moment 98	发射极 emmitter 183
电子导电 electron conductance 178	反冲 recoil 215
电子偶素 positronium 133	反对称波函数 antisymmetric wave function 104
电子显微镜 electron microscope 25	反氢原子 antihydrogen atom 132
电子云 electron cloud 86	反应截面 reaction cross-section 227
电子自旋 electron spin 95	放能反应 exothermic reaction 229
叠加原理 superposition principle 30, 48	放射性 radioactivity 205
定态 stationary state 48	放射系 radioactive series 206
定态波函数 stationary state wave function 48	放射性鉴年法 radioactive dating 209
短程力 short-range force 194	非线性光学 non-linear optics 153
对称波函数 symmetric wave function 104	费恩曼图 Feynman diagram 19
对撞机 collider 230	费米-狄拉克分布 Fermi-Dirac (FD) distribution 167
多光子吸收 multiphoton absorption 148	费米能级 Fermi level 162
多电子原子 many-electron atom	费米球 Fermi sphere 166
	费米速度 Fermi velocity 162
	费米温度 Fermi temperature 162

费米子 fermion 104	[光]谱线 spectral line 83	
分子光谱 molecular spectrum 126	[光]谱线系 spectral series 83	
分子振动能级 molecular vibration energy level 122	光子 photon 11	
分子转动能级 molecular rotation energy level 122	归一化条件 normalizing condition 51,56	
辐射出射度 radiant exitance 7	轨道 orbit 86	
G		
<i>g</i> 因子 <i>g</i> -factor 193	轨道磁矩 orbital magnetic moment 93,193	
概率波 probability wave 27	轨道角动量 orbital angular momentum 84	
概率幅 probability amplitude 30	H	
概率密度 probability density 30	核半径 nuclear radius 192	
概率流密度 probability flow density 90	核磁共振 nuclear magnetic resonance, NMR 239	
共振吸收 resonance absorption 121,215	核磁矩 nuclear magnetic moment 193	
光电池 photoelectric cell 182	核磁子 nuclear magneton 193	
光电效应方程 photoelectric effect equation 12	核的组成 nuclear composition 190	
光的二象性 duality of light 11	核反应 nuclear reaction 226	
光敏电阻 photosensitive resistance 177	核聚变 nuclear fusion 200	
光谱 spectrum 82	核力 nuclear force 194	
精细结构 fine structure of 99	核裂变 nuclear fission 200	
超精细结构 hyperfine structure of 121	核模型 nuclear model 200	
光谱辐射出射度 spectral radiant exitance 3	液滴 liquid-drop 200	
光谱辐射能密度 spectral radiation energy density 171	壳 shell 205	
	核子 nucleon 190	
	核自旋 nuclear spin 192	
	黑洞蒸发 blackhole evaporation 65	
	黑体 blackbody 5	

黑体辐射 blackbody radiation 5
 宏观量子现象 macroscopic quantum phenomenon 143,169
 红限频率 red-limit frequency 10
 红限波长 red-limit wavelength 10
 红移 red shift 134
 多普勒 Doppler 134
 引力 gravitational 219
 混频 frequency mixing 155
 活度 activity 208

J

基板 base 183
 基态 ground state 82
 激发态 excited state 83
 激光 laser [light] 115
 激光器 laser 116
 半导体 semiconductor 119,136
 二氧化碳 CO₂ 136
 氦氖 He-Ne 116
 染料 dye 120
 激光致冷和捕陷原子 laser cooling and atom trapping 141
 极限波长 limiting wavelength 83
 集成电路 integrated circuit 184
 集电极 collector 183
 价电子 valence electron 93
 简并态 degenerate state 87
 截止波长 cutoff wavelength 111
 截止电压 cutoff voltage 9
 结电场 junction field 180

结合能 binding energy 196
 平均 average 197
 金属导电 metallic conductance 165
 金属摩尔热容 mole heat capacity of metal 164
 康普顿散射 Compton scattering 16
 径向概率密度 radial probability density 88
 居里 (Ci) curie 208
 绝缘体 insulator 173

K

康普顿波长 Compton wavelength 18
 康普顿散射 Compton scattering 16
 康普顿效应 Compton effect 16
 空穴 hole 177
 空穴导电 hole conductance 178
 库仑势垒 Coulomb potential barrier 212
 夸克 quark 196

L

莱曼系 Lyman series 83
 兰姆移位 Lamb shift 122
 嵩山道士 Laoshan daoshi 66
 类氢离子 hydrogen-like ion 81
 里德伯常量 Rydberg constant 133

- 粒子 particle 21
 α 粒子 α -particle 43, 205, 211
 粒子的波动性 wave nature of
 particle 21
 粒子数布居反转 population inversion
 118
 量子化 quantization 51
 角动量 angular 51
 空间 space 84
 能量 energy 51, 81
 量子数 quantum number 51, 56,
 81
 轨道 orbital 84
 轨道磁 orbital magnetic 84
 自旋 spin 95
 自旋磁 spin magnetic 95
 主 principal 81
 量子数空间 quantum number space
 160
 量子态 quantum state 163, 167,
 169
 量子统计 quantum statistics 167
 量子围栏 quantum corral 78
 零点能 zero-point energy 68
 漏 drain 183
- M**
- 金属氧化物场效应管(MOSFET)
 metal-oxide-semiconductor field
 effect transistor 183
 麦克斯韦-玻耳兹曼分布 Maxwell-
 Boltzmann(MB) distribution 171
- 漫线系 diffuse series 94
 莫塞莱公式 Moseley formula 113
 穆斯堡尔谱 Mossbauer spectrum
 219
 穆斯堡尔效应 Mossbauer effect
 217
- N**
- 内转换 internal conversion 222
 能带 energy band 174
 导带 conduction 175
 禁带 forbidden 175
 价带 valence 175
 能级 energy level 56
 能级寿命 life-time of energy level
 118, 216
 能量本征函数 energy eigenfunction
 57
 能量本征态 energy eigenstate 57
 能量本征值 energy eigenvalue 56
 能量子 energy quantum 7
 能量最低原理 principle of least
 energy 106
 扭摆磁铁 wiggler 144
- P**
- PN 结 PN junction 179
 帕邢系 Paschen series 83
 泡利不相容原理 Pauli exclusion
 principle 105, 106
 偏置 bias 180
 正向 forward 180

反向 reverse 180	弱相互作用 weak interaction 223,225
漂移速度 drift velocity 167	
平衡热辐射 equilibrium heat radiation 4	S
平均寿命 mean lifetime 207	扫描隧道显微镜 scanning tunneling microscope,STM 76
普朗克常量 Planck constant 7	色荷 color charge 196
普朗克[辐射]公式 Planck [radiation] formula 6	色力 color force 196
谱线宽度 line width 134,215	栅 gate 184
Q	
Q值 Q value 228	少[数载流]子 minority carrier 179
强力 strong force 194	射线 ray 205
壳层 shell 87	α射线 α-ray 205
氢弹 hydrogen bomb 200	β射线 β-ray 205
氢原子能级图 energy level diagram of hydrogen atom 82	γ射线 γ-ray 205
R	
热辐射 heat radiation 3	施主 donor 179
热核反应 thermonuclear reaction 227	势函数 potential function 195
热敏电阻 thermosensitive resistance 177	势阱 potential well 54
人工嬗变 artificial transmutation 226	势垒 potential barrier 65
轫致辐射 bremsstrahlung 112	势垒穿透 barrier penetration 65
瑞利-金斯公式 Rayleigh-Jeans formula 6	收集极 collector 183
瑞利散射 Rayleigh scattering 19, 157	受激辐射 stimulated radiation 116
锐线系 sharp series 94	受激拉曼散射 stimulated Raman scattering 157
	受主 acceptor 179
	束缚态 bound state 54
	衰变 decay 205
	α衰变 α-decay 211
	β衰变 β-decay 221
	γ衰变 γ-decay 212
	衰变常量 decay constant 207

衰变定律 decay law 205	连续 continuous 111	
斯特恩-盖拉赫实验 Stern-Gerlach experiment 101	线状 line 111	
斯特藩-玻耳兹曼常量 Stefan-Boltzmann constant 7	吸收 absorption 117	
斯特藩-玻耳兹曼定律 Stefan-Boltzmann law 7	吸能反应 endothermic reaction 229	
速度空间 velocity space 165	消多普勒饱和分光仪 doppler-free saturation spectrometer 120	
隧道效应 tunneling effect 65	谐振子 harmonic oscillator 67	
T		
态密度 density of states 163	选择定则 selection rule 95	
碳循环 carbon cycle 235	薛定谔方程 Schrodinger equation 47	
汤姆孙衍射实验 Thomson diffraction experiment 24	定态 stationary 48	
特征谱线 characteristic line 111	含时 time-dependent 48	
天然放射性 natural radioactivity 206	Y	
天然丰度 natural abundance 192	[液]氦 II He II 169	
同位素 isotope 191	逸出功 work function 12	
退行速度 recession velocity 134	宇称 parity 59	
W		
维恩公式 Wien formula 5	奇 odd 59	
维恩位移律 Wien displacement law 7	偶 even 59	
韦塞克半经验公式 Weizacker semiempirical formula 203	量子数 quantum number of 59	
无反冲共振吸收 recoilless resonant absorption 217	宇称不守恒 parity nonconservation 225	
物质波 matter wave 22	阈能 threshold energy 229	
X		
X 射线谱 X-ray spectrum 111	源 source 183	
	原子实 atomic kernel 93	
	原子序数 atomic number 191	
	原子质量 atomic mass 197	
	原子质量单位 atomic mass unit 191	
	约恩孙电子衍射实验 Jonsson electron diffraction experiment 23	

Z	
杂质能级 impurity energy level 178	中子数 neutron number 191
整流 rectification 181	周期表 periodic table 106, 242
正电子湮没技术 positron-annihilation technique 236	主线系 principal series 94
正交性 orthogonality 72	驻波 standing wave 59
质量亏损 mass defect 197	子核 daughter nucleus 206
质量数 mass number 191	自发辐射 spontaneous radiation 116
质能关系 mass-energy relation 197	自聚焦 self-focusing 156
质子 proton 190	自然宽度 natural width 134
质子磁矩 proton magnetic moment 193	自旋 spin 95
质子数 proton number 191	自旋磁矩 spin magnetic moment 98
质子-质子链 proton-proton chain 227	自旋轨道耦合 spin-orbit coupling 96
中微子 neutrino 225	自旋角动量 spin angular momentum 95
中子 neutron 190	资用能 available energy 229
中子磁矩 neutron magnetic moment 193	自由电子 free electron 158
	自由电子激光 free electron laser 144
	阻挡层 depletion zone 180