

Chapter 1

由经典物理到量子物理的过渡

- | | |
|------------------|--------------------|
| 1.1 热辐射与普朗克光量子假说 | 1.2 光电效应与爱因斯坦光量子理论 |
| 1.3 康普顿效应 | 1.4 光的本质 |
| 1.5 玻尔的半经典量子理论 | |

1.1 热辐射的经典物理理论遇到的困难与普朗克光的量子假说

1.1.1 热辐射及基尔霍夫辐射定律

物体以电磁波形式向外部发射能量的现象称为辐射。处在热平衡态的物体在一定温度下进行的辐射称为热辐射。为讨论经典物理在关于热辐射的研究中遇到的困难，我们先回顾关于热辐射的基本概念和性质。

一、描述热辐射的基本物理量及相关概念

1. 辐射本领

温度为 T 的物体在单位时间内从单位表面上发射的波长在 λ 到 $\lambda + d\lambda$ 范围内的辐射能量 dE 与波长间隔 $d\lambda$ 之比称为物体在温度 T 、波长 λ 情况下的辐射本领，常记为 r 。上述定义可以解析地简记为

$$r(T, \lambda) = \frac{dE(T, \lambda)}{d\lambda}. \quad (1.1)$$

单位时间内从单位面积上辐射的各种波长的总能量称为该物体的总辐射本领，即有

$$E(T) = \int_{\lambda=0}^{\lambda \rightarrow \infty} dE(T, \lambda) = \int_0^{\infty} r(T, \lambda) d\lambda. \quad (1.2)$$

2. 物体对其它物体的辐射能量的响应方式及其描述

物体都有热辐射，并且对其他物体的辐射（辐射来的能量）有反射（散射）、吸收、透射等方式进行响应。为描述物体的性质，除辐射本领外，人们还引入了吸收本领（系数）、反射本领（系数）和透射本领（系数）等概念。在一定温度下，物体从其他物体辐射来的能量中吸收的能量 $dE^a(T, \lambda)$ 与外来辐射能量 $dE^{\text{in}}(T, \lambda)$ 的比值称为该物体的吸收本领（系数），常记为 a ，即有

$$a(T, \lambda) = \frac{dE^a(T, \lambda)}{dE^{\text{in}}(T, \lambda)}. \quad (1.3)$$

同理，反射本领（系数） $\rho(T, \lambda)$ 和透射本领（系数） $t(T, \lambda)$ 分别定义为

$$\rho(T, \lambda) = \frac{dE^{\text{refl}}(T, \lambda)}{dE^{\text{in}}(T, \lambda)}, \quad (1.4)$$

$$t(T, \lambda) = \frac{dE^{\text{trans}}(T, \lambda)}{dE^{\text{in}}(T, \lambda)}. \quad (1.5)$$

3. 黑体与绝对黑体

显然，根据能量守恒定律，我们有

$$a(T, \lambda) + \rho(T, \lambda) + t(T, \lambda) = 1. \quad (1.6)$$

我们通常称不透明，即 $t(T, \lambda) \equiv 0$ ，的物体为黑体。对于黑体，如果 $a(T, \lambda) = 1$ ，则显然有 $\rho(T, \lambda) = 0$ 。在任何温度下都把辐照在其上的任意波长的辐射能量都全部吸收，即有 $a(T, \lambda) \equiv 1$ ，的物体称为绝对黑体，通常简称之为黑体。

(1) 黑体及其吸收本领和反射本领间的关系

黑体即不透明的物体，也就是有 $t(T, \lambda) \equiv 0$ ，因此，黑体的吸收本领与反射本领之间的关系为

$$a(T, \lambda) + \rho(T, \lambda) = 1.$$

显然，如果 $a(T, \lambda) = 1$ ，则有 $\rho(T, \lambda) = 0$ 。

(2) 绝对黑体

在任何温度下都把辐照在其上的任意波长的辐射能量全部吸收的物体称为绝对黑体，即有：

$$a(T, \lambda) \equiv 1.$$

二、基尔霍夫辐射定律

根据平衡态的定义可以证明，包含辐射本领和吸收本领分别为 r_1, r_2, r_3, \dots , a_1, a_2, a_3, \dots 的一系列物体 O_1, O_2, O_3, \dots ，的系统，各辐射体的辐射本领与吸收本领的比值仅与系统的温度和辐射的波长有关，与具体的物体无关，即有

$$\frac{r_1(T, \lambda)}{a_1(T, \lambda)} = \frac{r_2(T, \lambda)}{a_2(T, \lambda)} = \frac{r_3(T, \lambda)}{a_3(T, \lambda)} = \dots = f(T, \lambda). \quad (1.7)$$

该规律称为基尔霍夫辐射定律。那么，吸收本领大的物体的辐射本领也大。由此可知，（绝对）黑体是辐射本领最大的物体，即一般物体（常称为灰体）的辐射本领都小于（绝对）黑体的辐射本领，即有 $r(T, \lambda) \leq r_B(T, \lambda)$ 。因此，研究物体的辐射本领时，人们通常由研究黑体的辐射本领入手。

1.1.2 绝对黑体的辐射规律

一、绝对黑体模型

如图 1.1 所示，进入开有很小很小开口的黑箱的光线很难再射出黑箱，这相当于对外来的光完全吸收、没有反射。因此，这样的具有很小很小开口的黑箱常作为绝对黑体的模型。

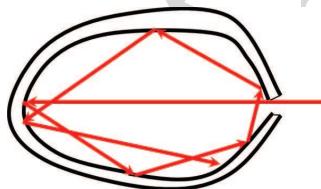


Figure 1.1: 黑体模型示意图

二、关于黑体辐射的辐射本领的实验测量结果

1. 关于黑体的辐射本领的实验测量结果概述

到 19 世纪末，已进行了很多关于黑体的辐射本领的实验测量，测得的结果如图 1.2 所示。

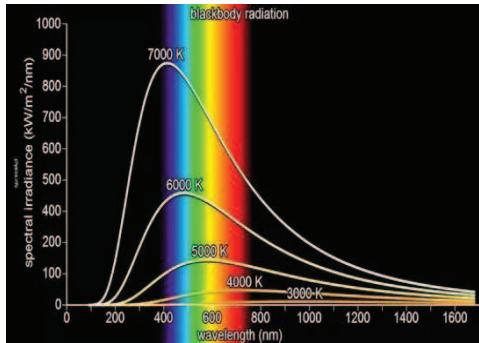


Figure 1.2: 关于黑体辐射的辐射本领的实验测量结果示意图

2. 关于黑体辐射本领的两个实验定律

(1) 斯特藩—玻尔兹曼定律

通过对大量实验结果的综合分析，斯特藩 (J. Stefan) 和玻尔兹曼 (L. E. Boltzmann) 分别提出了关于黑体辐射的总辐射本领的规律，它可以表述为

$$E = \sigma T^4, \quad (1.8)$$

其中 $\sigma = 5.639 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$. 此即著名的斯特藩—玻尔兹曼定律。

(2) 维恩位移定律

由图 1.2 知，对于任一温度下的黑体辐射，其对不同波长的电磁波的辐射本领不同，并且存在一个特定波长，其被辐射的辐射本领最大。维恩 (W. Wien) 通过总结很多实验测量结果发现，对应辐射本领取得极大值的辐射的波长 λ_m 随温度 T 升高而减小，二者的乘积 $\lambda_m T$ 保持为常量，即有

$$\lambda_m T = b, \quad (1.9)$$

其中 $b = 2.898 \times 10^{-3} \text{ mK}$ 为常量。该规律称为（黑体辐射的）维恩位移定律。

三、经典物理对黑体辐射的描述及其困难

1. 瑞利—金斯公式

根据热辐射的定义，温度 T 情况下波长为 λ 的热辐射即从物体中发射出的波长为 λ 的电磁波的能量。对于波长为 λ 的电磁波，其频率为 $\nu = \frac{c}{\lambda}$ ，角频率为 $\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda} = 2\pi ck$ ，其中 c 为电磁波传播的速度（即光速）， $k = \frac{1}{\lambda}$ 称为波数。假设辐射体为边长为 L 的立方体，记电磁波的角频率密度为 $D(\omega)$ ，考虑各方向振动为相互独立事件，则在物体内形成电磁波的振动数为各方向振动数的乘积，即有

$$D(\omega)d\omega = dn_xdn_ydn_z = d\left(\frac{L}{\lambda_x}\right)d\left(\frac{L}{\lambda_y}\right)d\left(\frac{L}{\lambda_z}\right) = Vdk_xdk_ydk_z,$$

其中 $V = L^3$ 为辐射体的体积。严格地，因为固定边界内的振动形成的波为驻波，上述计算应以 $\frac{\lambda}{2}$ 为分母计算出半个振动的数目，再转化为振动的数目。假设振动各向同性，将上式转换到球坐标系 (k, θ, φ) ，并考虑电磁波有两个偏振方向，则有

$$D(\omega)d\omega = V \cdot 2 \cdot 4\pi k^2 dk = 8\pi V \frac{\omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu.$$

将上式转换到波长 λ 空间，则有

$$D(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi V}{\lambda^4} d\lambda.$$

于是，电磁波的态密度可以以频率 ν 为宗量表述为

$$D(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2, \quad (1.10)$$

也可以以波长 λ 为宗量表述为

$$D(\lambda) = \frac{8\pi}{\lambda^4}. \quad (1.11)$$

由上一小节的讨论知，单位时间内从物体上的单位面积辐射出去的电磁波的数目为电磁波的泻流数率 $\Gamma = \frac{1}{4}n\bar{v} = \frac{1}{4}cD$ 。再考虑能量均分定理：每一振动的平均能量与系统的温度之间有关系 $\bar{e} = k_B T$ ，则得黑体的辐射本领 $r = \Gamma\bar{e}$ 可以表述为

$$r_B(T, \lambda) = \frac{2\pi c}{\lambda^4} k_B T. \quad (1.12)$$

该表达式即著名的黑体辐射本领的瑞利-金斯 (Rayleigh-Jeans) 公式。

2. 维恩公式

如果不利用能量均分定理的结果，而考虑一个振动的能量与其波长 λ 之间有关系 $\varepsilon \propto \frac{1}{\lambda}$ ，系统的振动能量的分布满足玻尔兹曼分布 $n(\varepsilon) \propto e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}$ ，即有 $\bar{\varepsilon} \propto \varepsilon e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} \propto \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{c_2}{\lambda T}}$ ，则得黑体辐射本领的维恩（Wein）公式

$$r_B(T, \lambda) = \frac{c_1}{\lambda^5} e^{-\frac{c_2}{\lambda T}}. \quad (1.13)$$

其中 c_1 、 c_2 为普适常量（常分别称之为第一、第二辐射常量）。

3. 经典物理的困难

利用瑞利-金斯公式和维恩公式对黑体的辐射本领的计算结果及其与实验结果的比较如图 1.3 所示。

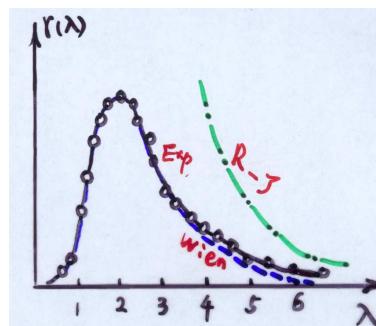


Figure 1.3: 利用瑞利-金斯公式和维恩公式对黑体的辐射本领的计算结果（分别如点划线、虚线所示）及其与实验结果（由实线连接的圆圈）的比较（以对应最大辐射本领的波长之半 ($\lambda_m/2$) 为单位）。

由图 1.3 很容易看出，维恩公式可以很好地描述黑体辐射本领在中短波长区的行为，但不能描述其在长波区的行为（衰减太快）。瑞利-金斯公式可以描述黑体辐射在长波区的行为，但对于黑体辐射本领在短波区的行为，不仅不能定量描述，并且出现发散，也就是说，定性上就不正确。此即著名的关于黑体辐射的紫外灾难。这说明，对于黑体辐射，经典物理遇到了本质上的困难。

1.1.3 紫外灾难的解决—光量子假说

一、普朗克光量子假说与普朗克黑体辐射本领公式

为解决上述紫外灾难，根据维恩公式可以很好地描述黑体辐射本领在中短波长区的行为和瑞利-金斯公式可以描述黑体辐射在长波区的行为的结果，并参照热力学关系，德国物理学家普朗克（Max Planck）最早提出对维恩公式和瑞利-金斯公式进行内插叠加的方法，并给出一个对全波长区域都适用的辐射本领公式—普朗克黑体辐射公式，从数值上解决了经典物理在描述黑体辐射本领时遇到的困难。

为探索普朗克公式的物理本质，在分析原来两个公式的导出过程，发现其问题可能是出在黑体辐射出的能量的平均值的表述之后，普朗克假设引起辐射的谐振子的能量只能取某些特殊的分立值，这些分立值是某一最小能量单元 ε_0 的整数倍，即 $E = E_n = n\varepsilon_0$ ，对于频率为 ν 的谐振动的辐射，其能量单元为 $\varepsilon_0 = h\nu$ ， $h = (6.6256 \pm 0.0005) \times 10^{-34}$ Js 为普朗克常量。那么，考虑粒子能量状态的玻尔兹曼分布率

$$P(\varepsilon) \propto e^{-\beta\varepsilon},$$

其中 $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ，知，黑体辐射出的能量的平均值应为

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\varepsilon_0 e^{-\beta n\varepsilon_0}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n\varepsilon_0}} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left[\ln \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n\varepsilon_0} \right) \right].$$

因为 $\{e^{-\beta n\varepsilon_0}, n = 0, 1, 2, \dots, \infty\}$ 是公比为 $e^{-\beta\varepsilon_0}$ 的等比数列，即有

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n\varepsilon_0} = \frac{1}{1 - e^{-\beta\varepsilon_0}},$$

于是¹

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_0 e^{-\beta\varepsilon_0}}{1 - e^{-\beta\varepsilon_0}} = \frac{\varepsilon_0}{e^{\beta\varepsilon_0} - 1}.$$

所以

$$r_B(T, \lambda) = \frac{2\pi c}{\lambda^4} \bar{\varepsilon} = \frac{2\pi c}{\lambda^4} \frac{\varepsilon_0}{e^{\beta\varepsilon_0} - 1} = \frac{2\pi c}{\lambda^4} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}.$$

将波长与频率间的关系 $\nu = \frac{c}{\lambda}$ 代入，则得

$$r_B(T, \lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1}. \quad (1.14)$$

¹用现代的观点来看，玻色分布 $n_\varepsilon = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}} - 1}$ ，则 $\bar{\varepsilon} = \varepsilon n_\varepsilon = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$ 是玻色分布下的直接结果。只不过当时没有建立玻色统计规律，没有量子统计物理。

此即著名的黑体辐射本领的普朗克(Planck)公式。具体计算表明,普朗克公式给出的结果与实验测量结果完全一致。

二、普朗克公式与维恩公式及瑞利—金斯公式间的关系

很显然,在短波情况, $k_B T \ll \frac{hc}{\lambda}$, $e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} \gg 1$, 于是

$$r_B(T, \lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} \approx \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} e^{-\frac{hc}{\lambda k_B T}}.$$

此即前述的维恩公式,并有 $c_1 = 2\pi hc^2$, $c_2 = \frac{hc}{k_B}$ 。

在长波情况, $k_B T \gg \frac{hc}{\lambda}$, $e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1 \approx \frac{hc}{\lambda k_B T}$, 于是

$$r_B(T, \lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} \approx \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\frac{hc}{\lambda k_B T}} = \frac{2\pi c}{\lambda^4} k_B T.$$

此即前述的瑞利—金斯公式。

这些分析表明,瑞利—金斯公式和维恩公式分别是普朗克公式在长波、短波情况下的近似。那么,经典物理下的瑞利—金斯公式可以很好地描述黑体辐射的辐射本领在长波区的行为、维恩公式可以很好地描述黑体辐射的辐射本领在短波区的行为的事实可以作为普朗克公式的正确性的例证。

三、斯特藩—玻尔兹曼定律和维恩位移定律的导出

1. 斯特藩—玻尔兹曼定律的导出

进一步,将普朗克公式代入(1.2)式,完成积分,则得

$$E = \sigma T^4,$$

其中 $\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15 h^3 c^2} = 5.639 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{K}^4)$ 。此即著名的斯特藩—玻尔兹曼定律,并且这样确定的其中的常量与实验观测值 σ_{emp} 符合得很好。

2. 维恩位移定律的导出

另一方面,将普朗克公式代入 $\frac{dr_B(T, \lambda)}{d\lambda} = 0$, 并求解相应的方程,在保证二阶导数 $\frac{d^2 r_B(T, \lambda)}{d\lambda^2} < 0$ (即使得辐射本领 $r_B(T, \lambda)$ 取得极大值) 情况下,得到

$$\lambda_m T = b,$$

其中 λ_m 为对应辐射本领取得极大值的辐射的波长， $b = \frac{hc}{4.965k_B}$ 为与实验观测结果很好符合的常量 ($2.898 \times 10^{-3} \text{ mK}$)。这就是著名的维恩位移定律。

另外，再考虑由泻流数率联系的辐射的机制我们知道，辐射体内的平均能量密度与总辐射本领之间有关系

$$\bar{u} = 4\frac{E}{c}.$$

代入极端相对论性理想气体的状态方程 $p = \frac{1}{3}\bar{u}$ （推导过程可参阅 刘玉鑫《热学》（北京大学出版社，2016年第一版）第一章第六节，或其它教材或专著），则得理想光子气体的状态方程为

$$p = \frac{1}{3}aT^4, \quad (1.15)$$

其中 $a = \frac{4}{c}\sigma = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15h^3 c^3}$.

1.2 光电效应与爱因斯坦光量子理论

1.2.1 光电效应的实验事实

1887年，德国物理学家海因里希·赫兹（Heinrich Hertz）进行了电磁波的发射与接收实验。实验中，赫兹利用火花间隙作为电磁波发射器，（由于实验条件简陋）由置于同一室内的线圈作为接收器来侦测，并也由火花间隙中的火花表征。实验结果表明，当接收器接收到电磁波时，其火花间隙中出现火花，即由光照引导出了电流，这一现象即后来被称为光电效应的原始表现（“赫兹效应”）。为了更容易观测并提高实验精度（排除发射器直接影响，说明接收器接收到的确实是传播来的电磁波），赫兹把整个接收器置入一个不透明的盒子内，结果发现接收间隙中的最大火花长度因之而减小。分析利用玻璃隔板、石英隔板等不同的不透明隔板的实验结果表明，石英隔板不影响最大火花的长度。利用石英棱镜分光的进一步实验表明，除频率高（波长短）的紫外光外，其它波段的光都遇到屏蔽问题，这说明“赫兹效应”由紫外光引起。随着这一发现在《物理年鉴》（Annalen der Physik. 1887, 267: S. 983 (1887)）发表，威廉·霍尔伐克士（Wilhelm Hallwachs）、奥吉斯图·里吉（Augusto Righi）和亚历山大·史托勒

托夫 (Aleksandr Stoletov) 等物理学家进行了一系列实验，结果都证实了“赫兹效应”。约翰·艾斯特 (Johann Elster) 和汉斯·盖特尔 (Hans Geitel) 则首先发展出实用的光电真空管，并将其应用于研究光波照射到带电物体上产生的效应，还得到一些金属的“赫兹效应”由强到弱的顺序为：铷、钾、钠钾合金、钠、锂、镁、铊、锌，并且，对于普通光波，铜、铂、铅、铁、镉、碳、汞等金属的光电效应极弱（实际无法测量到任何效应）。1888至1891年间，史托勒托夫设计出一套适合定量分析光电效应的实验装置，完成很多关于光电效应的实验与分析，并发现辐照度与感应光电流的直接比例；他还与里吉共同发现，存在最优电压，在最优电压之上，光电流随电压降低而增大；在最优电压之下，光电流随电压降低而减小。随着电子的发现（约瑟夫·汤姆孙，1897–1899年），相关研究越来越深入。1902年，匈牙利物理学家菲利普·莱纳德 (Phillips Leonard) 根据其系统深入的实验结果，发布了关于光电效应的规律（重要实验结果）。

经进一步研究，人们把由光（电磁波）照射到物质材料（金属等）表面上、材料中有电子（光电子）溢出形成光电流的现象称为光电效应，现在常用的观测光电效应的实验装置如图 1.4（示意图）所示。并且归纳总结出光电效应的实验事

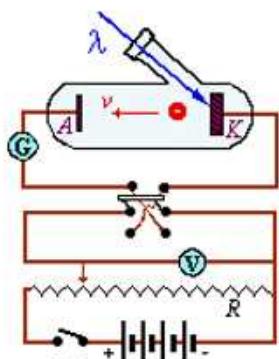


Figure 1.4: 常用的表征光电效应的实验装置示意图
(其中 λ 为入射光, K 为金属板, A 为栅极板。加适当电压后, 由 K 逸出的电子运动到 A, 并由外接电路记录逸出电子的数量)

实和规律如下：

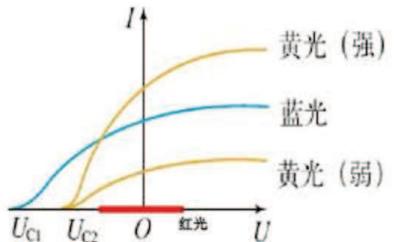


Figure 1.5: 光电效应的部分实验规律示意图

- (1) 尽管对不同材料有差异，但都存在截止频率（红限） ν_s ，采用频率低于 ν_s 的光，无论其辐照光的强度（辐照度）多大，都不会产生光电效应。该最低“极限频率”（对应的波长称为“极限波长”）是材料的特征频率，称为该材料的截止频率，亦称为其红限。
- (2) 对于不同材料，只要辐照光的频率在截止频率之上，单位时间从材料的单位表面发射的光电子的数量（光电流强度）随外加电压增大不一直增大，而存在最大值（饱和电流），饱和电流强度与辐照光强度成正比。如图 1.5 所示，饱和电流 $I_s \propto E$ ，其中 E 为入射光的光强。
- (3) 每一种材料所发射出的光电子都有其特定的最大动能（最大速度） $\frac{1}{2}mv_{\max}^2$ ，该最大动能与辐照强度无关；存在截止电压，并与外加电压成正比；与光波的光谱成分有关，正比于辐照光的频率。记截止电压为 U_0 ，辐照光的截止频率为 ν_s ，电子携带电量的数值为 e ，则光电子的最大动能可表述为

$$\frac{1}{2}mv_{\max}^2 = e(U - U_0) \propto (\nu - \nu_s). \quad (1.16)$$

- (4) 驰豫时间非常短，只要辐照光的频率在截止频率之上，辐照到材料表面马上即有光电子溢出（所需时间小于 3×10^{-9} 秒）。

1.2.2 经典物理遇到的困难

根据光电子的最大速度与辐照度无关的实验事实，莱纳德认为，这些电子在溢出材料表面之前就已拥有这一能量，光波不给予它们任何能量、而仅起类似于触发器的作用，只要辐照光的频率在截止频率之上，材料就立即选择并释放出束缚于其内部的电子。这就是莱纳德著名的“触发假说”，并在当时得到学术界的广泛接受。但是，该假说遇到一些严峻问题，其中最直接的是，如果材料内部的电子本来就拥有逃逸束缚和发射之后的动能，那么，将阴极加热应该会给予光电子更大的动能，可是实验并没有测量到任何与之相应的结果。于是，人们仍然坚持受外电磁场影响，电子在固体中作受迫振动，并逐渐获得能量，当能量积累足够多或达到共振吸收时获得能量而脱出的观点。

在电子受迫振动获得能量的观点下，只要光照（外电磁场影响）时间足够长，电子总可以获得足够的能量而脱出，从而不应该存在截止频率（红限），这显然无法解释前述的实验观测到的第(1)条规律。

根据经典物理学，入射光束是一种电磁波，在材料表面的电子感受到电磁波的电场力后会跟随电磁波振动。那么电磁波的振幅越大，即辐照光强度越大，电子的振动就越激烈、从而具有更大的能量，因此，发射出的光电子应该拥有更大的动能。但事实是发射的光电子的最大动能与辐照光的强度无关，从而经典物理遇到严重困难。再者，按照经典电磁理论，材料中的电子通过共振吸收获得能量而脱出时，其吸收谱很复杂（后来的著作可参见J.D. Jackson, 经典电动力学（第3版）第7章），绝非线性关系，因此发射出的光电子的最大动能与辐照光的频率不应该成简单的线性关系。在这一方面经典物理也遇到了严峻挑战。

按照上述受迫振动—共振吸收方案，记 W 为光电子的脱出功， P 为单位时间内照射到单位面积上的光能量， n 为金属内自由电子数密度， d 为光穿入金属内的深度， τ 为弛豫时间，根据能量守恒原理，应有

$$P\tau = dnW.$$

于是，弛豫时间

$$\tau = \frac{dnW}{P}.$$

将通常所用材料的 n 、 W 以及所用光的 P 和 d 代入上式知，对常用材料及光，溢出光电子的弛豫时间一般很大(小时的量级)。这与实验观测到的，只要频率足够高，光一照上去就有光电流形成存在严重的矛盾。

1.2.3 困难的解决 — 爱因斯坦光子理论

一、爱因斯坦的光量子理论

上一节关于黑体辐射的讨论表明，为解决经典物理遇到的困难（关于黑体辐射本领的紫外灾难），马克斯·普朗克提出了光量子假说：引起辐射的谐振系统只能以 $h\nu$ 为单元改变能量，并吸收或发射电磁波，其中 h 为普朗克常量， ν 为光波的频率。为探讨普朗克光量子假说的机制，1905年，爱因斯坦发表了题为“关于光的产生和转化的一个试探性观点”的论文（Annalen der Physik 322, 132-148 (1905)），一方面在当时物理学发展水平上证明了普朗克的光量子假说，一方面对光电效应给出了很好的解释（因此获得1921年的诺贝尔物理学奖）。爱因斯坦的证明大致如下。

由关于黑体辐射的讨论知，温度为 T 的辐射系统中频率为 ν 的单模振动的态密度如 (1.10) 式所示，对长波情况 ($\frac{\nu}{T} \ll 1$)，系统的辐射本领由 (1.12) 式所示的瑞利-金斯公式表征；对短波情况 ($\frac{\nu}{T} \gg 1$)，系统的辐射本领由 (1.13) 式所示的维恩公式表征，并且如果记 (1.13) 式中的 $c_2 = \frac{hc}{k_B}$ ，其中 c 为光速、 k_B 为玻尔兹曼常量、 h 为新引入的常量，则有

$$r(T, \nu) = \frac{2\pi h\nu^5}{c^3} e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}. \quad (1.17)$$

考虑系统的熵是振动频率 ν 的函数，并可能与系统的辐射本领 r 有关，则体积为 V 的辐射系统的熵可记为

$$S = V \int_0^\infty \Phi(r, \nu) d\nu,$$

其中 $\Phi(r, \nu)$ 为待定的函数。因为达到平衡态时系统的熵极大，并且相应状态的能量 $\int_0^\infty r(\nu) d\nu$ 确定，则有

$$\delta \int_0^\infty \Phi(r, \nu) d\nu = 0, \quad \delta \int_0^\infty r(\nu) d\nu = 0.$$

该熵极大显然是一个能量确定情况下的极值问题，即条件极值问题，引入拉格朗日乘子 λ ，则有

$$\int_0^\infty \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} - \lambda \right) dr d\nu = 0.$$

考虑 dr 和 $d\nu$ 的正定性，则有：

$$\frac{\partial \Phi}{\partial r} - \lambda = 0.$$

由此知， $\frac{\partial \Phi}{\partial r} = \lambda$ 为常量，即 $\frac{\partial \Phi(r, \nu)}{\partial r}$ 既与辐射（振动）的频率 ν 无关也与辐射本领 r 无关。那么

$$dS = V \int_0^\infty \frac{\partial \Phi}{\partial r} dr d\nu = V \frac{\partial \Phi}{\partial r} \int_0^\infty dr d\nu.$$

显然， $\int_0^\infty dr d\nu$ 为辐射本领有无穷小改变情况下辐射能量的无穷小改变量，那么，上式即

$$dS = V \frac{\partial \Phi}{\partial r} dE = V \frac{\partial \Phi}{\partial r} dQ.$$

与热力学中 $dS = \frac{dQ}{T}$ 比较，则得

$$V \frac{\partial \Phi}{\partial r} = \frac{1}{T}.$$

另一方面，对于总能量确定，亦即总辐射本领确定、任一频率的辐射本领 $E(T, \nu)$ 确定的辐射系统，由辐射本领的Wein公式知

$$r(T, \nu) = \frac{E(T, \nu)}{V} c = \frac{2\pi h\nu^5}{c^3} e^{-\frac{h\nu}{k_B T}},$$

亦即有

$$e^{-\frac{h\nu}{k_B T}} = \frac{c^4 E}{2\pi h\nu^5 V}.$$

对上式两边都取对数，再经简单运算，则得

$$\frac{1}{T} = -\frac{k_B}{h\nu} \ln\left(\frac{c^4 E}{2\pi h\nu^5 V}\right).$$

于是有

$$\frac{\partial \Phi}{\partial r} = -\frac{k_B}{h\nu} \ln\left(\frac{c^4 E}{2\pi h\nu^5 V}\right).$$

由 $dS = V \frac{\partial \Phi}{\partial r} dE$ 得，相对于体积为 V_0 的参考状态的熵变为：

$$\Delta S = S - S_0 = \frac{k_B E}{h\nu} \ln\left(\frac{V}{V_0}\right).$$

显然，该辐射系统的熵的改变量与系统体积的关系的表达式和理想气体系统的熵的改变量与系统体积的关系的表达式完全相同。据此，爱因斯坦大胆外推，既然系统的熵的改变量的表达式与理想气体系统的熵的改变量的表达式相同，那么其组分也应该具有相同的特征或性质；理想气体系统的组分单元是一个一个近独立的颗粒（分子），那么组成辐射系统的单元也应该是一个一个近独立的具有能量的颗粒。并且，如果记该辐射系统包含的颗粒数为 $N = nN_A$ （其中 N_A 为阿伏加德罗常量， n 为摩尔数），每个能量颗粒的能量为 $h\nu$ ，则系统的能量 $E = Nh\nu$ ，

$$\Delta S = S - S_0 = N k_B \ln\left(\frac{V}{V_0}\right) = n R \ln\left(\frac{V}{V_0}\right),$$

其中 $R = N_A k_B$ 为普适实气体常量。此即理想气体系统的熵的改变量与体积之间的关系。

爱因斯坦利用截至20世纪初建立起来的物理学的理论（电磁的、热力学统计物理的、等）对辐射系统的熵的直接计算和利用类比方法的大胆外推表明，光（电磁波）是由一份一份不连续的能量单元组成的能力流，其中每一个单元称为光量子（简称光子），光子的能量 $\varepsilon = h\nu$ ，其中 h 为普朗克常量， ν 为光波的频率，光子只能整个地被吸收或发射。与普朗克在对于黑体辐射的研究中提出的关于光的认识：“谐振子系统只能以 $\varepsilon = h\nu$ 为单元改变能量，并吸收或发射电磁波”相比较，爱因斯坦的“ $\varepsilon = h\nu$ ”显然具有很好的理论基础，并且描述了光的本质（严格来讲，应该是光的本质的一个侧面），因此，人们称爱因斯坦的这一结论（以及其后建立的关于自发辐射的机制）为光量子理论，而称普朗克的“ $\varepsilon = h\nu$ ”（实际比爱因斯坦的早五年）为光量子假说。

二、经典物理在描述光电效应的规律时遇到的困难的解决

在证明了光是一个一个不连续的能量颗粒形成的能力流之后，作为其关于光的新观点的应用，爱因斯坦讨论了光电效应。

既然光束是一个一个光子形成的能力流，光子只能整个地发射或被吸收，并且光子的能量正比于光的频率，那么只有当光子的能量满足材料中电子对能量共振吸收的条件时，才被吸收，于是，一定存在极限频率（红限），对频率在极限频率之下的光，由于不满足共振吸收条件，光子都不会被吸收，因此无论光强多大，都不会有光电子产生；对频率在极限频率之上的光，电子在很短的时间内即可吸收一个光子、获得大于电子在材料中的束缚能（脱出功）的能量，从而立即脱离束缚而溢出、形成光电子，亦即光电效应的弛豫时间很短。这样，很自然地解决了经典物理在描述光电效应的第（1）、第（4）条规律时遇到的无法克服的困难。

在爱因斯坦关于光的新观点下，记光子能量为 $\varepsilon = h\nu$ ，材料中的电子的束缚能（脱出功）对应的能量为 $\varepsilon_c = h\nu_s$ ，根据能量守恒原理，溢出电子的最大动能可以表述为

$$E_{K,\max} = \frac{1}{2}m_e v_{\max}^2 = \varepsilon - \varepsilon_c = h(\nu - \nu_s).$$

这样圆满解决了经典物理在描述光电效应的第（3）条规律时遇到的无法克服的困难。

在爱因斯坦关于光的新观点下，顾名思义，光的强度即单位时间内通过单位

横截面的光子数；而由电流强度的定义知，光电流强度为单位时间内通过单位横截面积的光电子携带的电量（当然正比于光电子的数目）。既然材料中的电子吸收一个满足共振吸收条件的光子即成为光电子，那么光电子的数目自然等于被吸收的光子的数目，对于满足频率极限（波长极限）条件的光束，其拥有的可在单位时间内通过单位横截面积的光子数目自然决定（理想情况下，等于）光电子的数目，即光电流的强度。于是，自然存在正比于光的强度的饱和光电流强度，由于设备设计因素，在未达到饱和光电流强度情况下，外加电压当然具有加速光电子、提高光电流强度的作用。这样，爱因斯坦关于光的新观点自然可以很好地描述光电效应的第（2）条规律。

尽管爱因斯坦关于光的新观点具有当时建立的物理学理论的基础，并解决了经典物理在描述光电效应的规律时遇到的困难，但其毕竟是建立在类比外推的基础上的，或者说其论证极具想像力，并且因其与通过精密实验证明的光的波动理论不相容而遭遇到学术界强烈的抗拒。例如，美国物理学家罗伯特·密立根（Robert A. Millikan）曾坦率地讲“他压根就不相信爱因斯坦的所谓理论”，并致力利用实验事实否定爱因斯坦的观点。然而，经过花费十年时间、完成对Na、Mg、Al、Cu、等等很多材料的实验之后，密立根不得不宣布承认爱因斯坦的理论正确无误，并且应用光电效应直接确定了普朗克常量（Phys. Rev. 7, 355 (1915)）。基于“关于基本电荷以及光电效应的工作”，密立根获得了1923年的诺贝尔物理学奖。

光电效应的发现和对其规律的解释，不仅推动了人们对光的量子性的认识的发展，还引发了很多技术上的重大进步，成为当今的一个巨大产业，推动着人类社会的进步。并且，光电效应问题的解决可谓是好奇心和批判性思维引发重大创新的典型，是演绎推理与类比外推、实验检验等科学方法论产生重大创新的典型。再回顾提出问题（发现光电效应）和解决问题的历程知，持之以恒的艰苦探索、雄厚扎实的知识储备和对知识融会贯通应用的能力是解决问题的关键。

1.3 康普顿效应

1.3.1 康普顿散射与康普顿效应

一、康普顿散射

X光在由轻元素原子形成的物质上的散射称为康普顿(Compton)散射(Phys. Rev. 22, 409(1923))，其实验装置和过程如图 1.6 所示。我国学者霍秉全先生曾参与相关研究、并对之作出重要贡献。

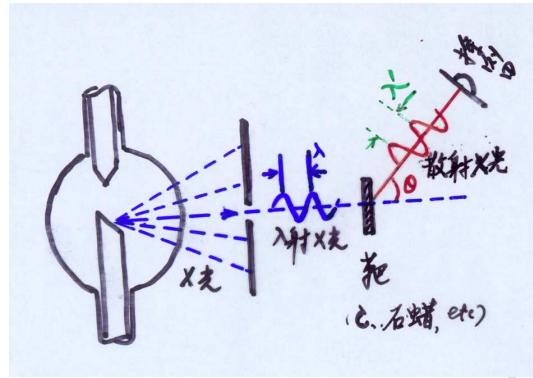


Figure 1.6: X光的康普顿散射实验装置及过程示意图

二、康普顿效应

众多实验得到的结果可以归纳为下述四条规律：

- (1) 散射光中除有与原入射光波长 λ 相同的成分外，还有较原波长长的部分 λ' ，如图 1.7 所示。
- (2) $\lambda' - \lambda$ 随散射角 θ 的增大而增大，并且 λ 成分的强度随 θ 的增大而减小， λ' 成分的强度随 θ 的增大而增大(如图 1.7 所示)。
- (3) 对不同元素的散射物质，在相同散射角下，波长的改变量 $\lambda' - \lambda$ 相同(如图 1.8 所示)。
- (4) 随散射物质原子量的增大，原波长 λ 成分的强度增大， λ' 成分的强度减小。(如图 1.8 所示)。

1.3.2 康普顿效应的解释

一、关于康普顿效应的理论描述

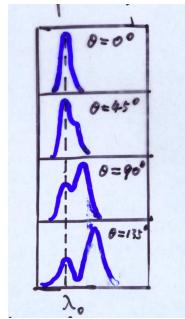


Figure 1.7: 康普顿散射实验观测到的散射光的成分及其强度随散射角 θ 变化的行为

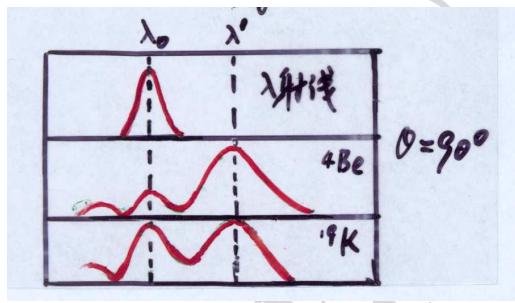


Figure 1.8: 康普顿散射实验观测到的一个固定散射角情况下散射光成分及其强度随靶材料变化的行为

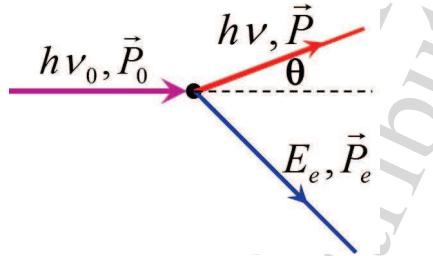


Figure 1.9: X光的康普顿散射过程示意图

X射线波长很短，其散射过程可以表述为形成X射线的光子经电子作用而散射的过程，并可近似为图1.9所示的形式。

假设X射线为光子流，碰撞前，电子处于静止状态，其质量为 m_0 ，X射线的频率为 ν_0 ，运动方向的单位向量为 \hat{k}_0 ；碰撞后，运动的电子的质量为 m ，速度为 \vec{v} ，X射线的频率为 ν ，运动方向的单位向量为 \hat{k} ；再记光速为 c ，普朗克常量为 h ，如果能量守恒定律仍然成立，则有

$$h\nu_0 + m_0 c^2 = h\nu + mc^2, \quad (C1)$$

如果动量守恒定律仍然成立，则有

$$\frac{h\nu_0}{c} \hat{k}_0 = \frac{h\nu}{c} \hat{k} + m \vec{v}. \quad (C2)$$

记光子的散射角（即光子的出射方向 \hat{k} 与入射方向 \hat{k}_0 之间的夹角）为 θ ，由 (C2) 式（移项，然后取平方）得，

$$(m\vec{v})^2 = \left(\frac{h\nu_0}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - 2\frac{h\nu_0}{c} \cdot \frac{h\nu}{c} \cos \theta,$$

即

$$m^2 c^2 \vec{v}^2 = h^2 \nu_0^2 + h^2 \nu^2 - 2h^2 \nu_0 \nu \cos \theta. \quad (C3)$$

由 (C1) 式得，

$$mc^2 = h(\nu_0 - \nu) + m_0 c^2, \quad (C4)$$

(C4) 式的平方减去 (C3) 式 得

$$m^2 c^4 \left(1 - \frac{\vec{v}^2}{c^2}\right) = m_0^2 c^4 - 2h^2 \nu_0 \nu (1 - \cos \theta) + 2m_0 c^2 h (\nu_0 - \nu). \quad (C5)$$

由狭义相对论原理知

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{\nu^2}{c^2}}},$$

即有

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

则 (C5) 式即

$$h\nu_0 \nu (1 - \cos \theta) = m_0 c^2 (\nu_0 - \nu).$$

记

$$\Delta\nu = \nu_0 - \nu, \quad \Delta\lambda = \lambda - \lambda_0,$$

并考虑频率与波长之间有关系 $\nu = \frac{c}{\lambda}$ ，则上式即

$$h \frac{c^2}{\lambda_0 \lambda} (1 - \cos \theta) = m_0 c^2 \left(\frac{c}{\lambda_0} - \frac{c}{\lambda}\right) = m_0 c^2 \frac{c \Delta \lambda}{\lambda_0 \lambda}.$$

于是，有

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta) = \frac{2h}{m_0 c} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (1.18)$$

显然，上式中的 $\frac{h}{m_0 c}$ 是由电子的静止质量、普朗克常量和真空中的光速决定的常量。为方便，人们称之为电子的康普顿波长（常量），即有

$$\frac{h}{m_0 \lambda} = \lambda_C = 0.0243 \times 10^{-10} \text{ m} = 0.00243 \text{ nm}.$$

进而，(1.18) 式改写为

$$\Delta\lambda = 2\lambda_C \sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

由此易知，康普顿散射中 X 光的波长的改变量仅由电子的内禀性质和散射角决定。

二、对于康普顿效应的解释

由上述计算得到的康普顿散射中 X 光的波长的改变量的表达式和分析讨论很容易对康普顿效应给予解释。

- (1) 由 $\Delta\lambda$ 的表达式知， $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0 > 0$ ，这充分表明，散射光中除有与原入射光波长 λ_0 相同的成分外，还有较原波长长（或记为 λ' ）的成分。
- (2) 由 $\Delta\lambda$ 的表达式知， $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ 正比于散射角 (θ) 之半的正弦的平方，在习惯的 $\theta \in [0, \pi]$ 范围内，它显然是散射角 θ 的增函数，即随 θ 增大而增大。
- (3) 由 $\Delta\lambda$ 的表达式知， $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ 由散射角和电子的内禀性质决定，与散射物质种类无关，与入射光波长无关；因此，对于不同元素的散射物质，在相同散射角下，波长的改变量 $\lambda' - \lambda$ 相同。
- (4) 尽管 $\Delta\lambda$ 的表达式表明康普顿散射中波长的改变量与散射物质种类无关、与入射光波长无关，但回顾前述的计算和推导过程知，前述的波长改变量的表达式是在仅考虑光子与外层的一个电子作用下得到的。对于重原子，光子不仅与外层电子作用还与内层电子作用（电子的康普顿波长远小于 X 光的波长），与内层电子作用引起的能量转移较小，因此随散射物质原子量的增大，原波长 λ 成分保留的越多，即其强度增大，改变到的波长 λ' 成分的强度减小。

至此，在考虑光的量子性、狭义相对论基本原理及能量和动量守恒原理的情况下，人们很好地解释了康普顿效应。但仔细比较上述结果和实验测量结果知，对于确定角度下散射光的成分随散射物质种类变化的行为知，按照上述理论结果，散射光强度的分布应该仅是对应于两波长的两条线，不应该是连续的曲线。为解决这一矛盾，我们再回顾前述的计算和推导过程，在计算中，我们假设碰撞前的电子是静止的，但事实上碰撞前后的电子都不可能是静止的，而是具有各种运动状态，因此碰撞之后，散射（出射）光中就不仅具有 λ 和 λ' 两种成分，还具有其它各种波长成分，所以散射光成分呈具有两个峰的连续分布。

再者，由于前述的计算和分析仅仅是建立在能量动量守恒等基本原理上的，没有考虑具体的光子与电子相互作用的动力学因素，因此不能定量地严格讨论散射光子的强度随出射角变化的行为。利用后来建立的量子电动力学（QED），人们可以很好地定量描述这些角分布规律。

1.3.3 康普顿效应的意义

回顾关于康普顿散射和康普顿效应的计算和分析讨论知，我们的计算和分析的基础是光的粒子性（量子性）、狭义相对论给出的质能关系、以及能量动量守恒原理。其结果与实验结果的很好符合表明，康普顿散射和康普顿效应进一步证实了光具有粒子性（量子性），为爱因斯坦的狭义相对论给出的微观粒子的质能关系提供了实验事实，还说明能量动量守恒原理不仅适用于宏观系统和宏观现象，在微观粒子作用过程中，能量、动量守恒原理同样成立。鉴于康普顿散射和康普顿效应的重要学术意义，康普顿获得了1927年的诺贝尔物理学奖。

1.4 经典物理在光的本质研究中遇到的困难

前面讨论的黑体的热辐射、光电效应及X射线的康普顿散射都表明，光是一个一个不连续的能量集团形成的能力流，即光具有微粒性，或者说光具有粒子性（亦即量子性）。然而，在没有清楚知晓光的这种颗粒性（粒子性、量子性）的产生机理之前，人们很难理解光的量子性。事实上，向前追溯，原子光谱早已表明光具有粒子性，只不过人们没有从这方面对之进行认真的探究。并且，与之相联系，人们在探讨光的产生机理时，经典物理也遇到了严重的本质性的困难。下面

简单介绍原子光谱的观测事实及在关于光谱和光的产生机理的研究中经典物理遇到的困难。

1.4.1 原子结构的核式模型

在建立了经典电磁理论之后，人们知道，带电粒子运动状态发生变化时，电磁波就辐射出来，也就是光被产生出来。到19世纪末，关于物质结构的研究表明，物质由分子组成，分子由原子组成，原子是包含有带负电荷的电子和带正电荷的物质形成的整体电中性的不能由任何化学手段分割或改变的基本单元。根据电磁学原理（经典物理理论），物质材料发光应该是组成物质的原子中的带电粒子的运动状态发生变化所致。为探讨原子发光的机制和原子光谱，我们先讨论原子的结构。

一、原子结构的西瓜模型

1897年，J.J. Thomson 完成测量阴极射线在电磁场中的轨迹的实验，说明阴极射线的组成单元带负电荷，并测定了这些组分单元的荷质比，从而发现电子（Thomson 因此获得 1906 年的诺贝尔物理学奖）。1910年，R.A. Millikan 完成油滴实验，测定电子的电量（Milliken 因此贡献及确认爱因斯坦关于光电效应的理论的实验工作而获得 1923 年的诺贝尔物理学奖）结合后来的进展，我们知道，自然界中存在电子，电子是微观粒子，它具有静止质量 $m = 9.1093897 \times 10^{-31} \text{ kg} = 0.511 \text{ MeV}/c^2$ ，并且携带电量 $e = -1.6021773 \times 10^{-19} \text{ C}$ 。

在发现电子后不久的 1898 年，J.J. Thomson 就提出：原子呈球体形状，由带正电荷的物质和带负电荷的电子两部分组成，其中的带正电荷的物质均匀分布在在整个球体中，电子分立地嵌在其中，从而使得原子整体呈电中性。这与西方常见的食品布丁及我国和西方都常见的西瓜中物质的分布很相似（布丁是与我国的带葡萄干或/和果仁的发糕类似，电子的分布相当于其中的葡萄干或果仁，带正电荷的物质相当于其中发酵过的淀粉。以西瓜来表征原子，则其中带正电荷的物质的分布相当于西瓜中的瓜瓢儿，电子的分布相当于西瓜中的瓜籽儿），因此这一模型常称为布丁模型，也称为西瓜模型。

二、原子结构的核式模型

1903年，P. Lenard 利用阴极射线照射物质的实验发现阴极射线可以被物质吸

收，这表明原子不是均匀地充满物质的坚实的集团，而是十分空虚的集团（粒子）。1904年，日本物理学家长冈半太郎就提出原子结构的行星模型，原子中的带正电荷的物质和带负电荷的电子不是均匀混合的，而是相互分离的，带负电荷的电子围绕带正电荷的物质运动。

1909年，英国学者 H. Geiger 和 E. Marsden 在利用以 RaBr_2 为源产生的 α 粒子（能量约 7 MeV）轰击金箔的实验（其示意图见图 1.10）中发现（Proc. Roy. Soc. A 82: 495 (1909)） α 粒子有 $\frac{1}{8000}$ 的概率被反射。根据电磁学原理，正电荷与负电荷之间的作用是吸引的，因此，带正电荷的 α 粒子被反射不可能是 α 粒子与带负电荷的电子之间的相互作用引起的，而应该是 α 粒子与金原子中的带正电荷的物质作用导致的。

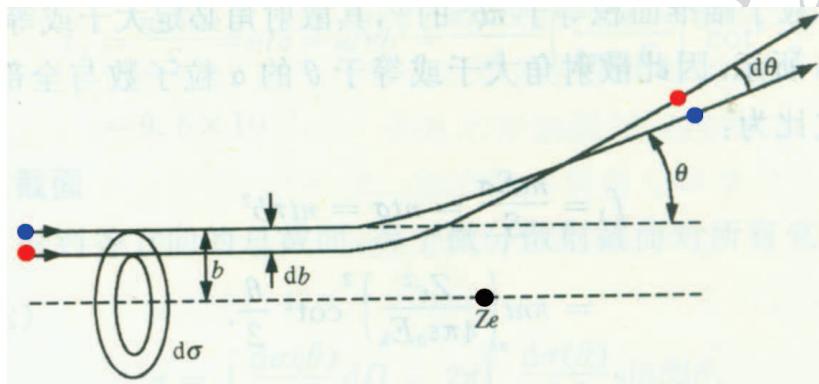


Figure 1.10: 固定靶散射的散射截面示意图

按照 Thomson 的西瓜模型，金原子中带正电荷的物质均匀分布于原子中，即金原子中的正电荷分布于一个球体中。由电磁学原理知，与半径为 r_0 的有正电荷均匀地分布于其中的球体的球心相距为 r 的带正电荷的粒子所受的库仑排斥力有下述规律

$$F \propto \begin{cases} r, & (r < r_0), \\ \frac{1}{r^2}, & (r > r_0). \end{cases}$$

这表明，越靠近金原子中心， α 粒子所受的排斥力越小，从而不可能被“反弹”。这一结果与实验事实显然不符。这表明，Thomson 关于原子结构的布丁模型（西瓜模型）不正确。

为解决 α 粒子轰击金箔实验发现的 α 粒子可以被反弹的事实与原子结构的西瓜模型不一致的矛盾，1911年，卢瑟福（E. Rutherford）提出原子结构的核式模型：原子中，带正电荷的物质集中在很小的区域($< 10^{-14}$ m)内，并且原子的质量主要集中在正电荷部分，形成原子核，而电子则围绕着原子核运动。

按照 Rutherford 的核式结构模型，金原子中的带正电荷的物质形成空间线度很小的原子核，即可以近似为电荷为正的点电荷，其与 α 粒子之间的相互作用（库仑排斥力）总有

$$F \propto \frac{1}{r^2}$$

的行为。很显然， α 粒子越靠近金原子的中心，其所受的排斥力就越大，从而可能被“反弹”。并且，因为金原子很空虚， α 粒子很靠近金原子中心的概率很小，因此其被反弹的概率也就很小。

为定量描述散射粒子随方向变化的分布情况，人们引入微分散射截面的概念。其定义为：微分散射截面

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \text{粒子被散射到 } \theta \text{ 方向单位立体角内的概率} \quad (1.19)$$

$$= \frac{\text{单位时间内被一个粒子散射到 } \theta \text{ 方向单位立体角内的粒子数}}{\text{单位时间内入射到单位靶面上的粒子数}}. \quad (1.20)$$

对于带电量分别为 $Z_1 e$ 、 $Z_2 e$ 的两粒子的库仑散射，在假设散射中心粒子（例如， α 粒子轰击金箔实验中金原子的原子核）静止（相当于假设其质量为无穷大）情况下，力学计算（具体见附录一）表明，入射能量为 E_k 的被散射粒子的角分布（微分散射截面）为：

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 4 E_k} \right]^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

实验中，靶箔面积为 A ，厚度为 t ，单位体积内原子的数目为 N ，单位时间内有 n 个 α 粒子射到靶箔上，记单位时间内出射到 θ 方向 $d\Omega$ 立体角内的 α 粒子的数目为 dn ，依定义，相应的散射截面为

$$d\sigma = \frac{1}{Nt} \frac{dn}{n}.$$

于是有与实验测量直接相关的卢瑟福散射（微分散射截面）公式

$$\frac{dn}{d\Omega} = n N t \frac{d\sigma}{d\Omega} = n N t \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 4 E_k} \right]^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (1.21)$$

对于 α 粒子散射实验，(1.21) 式中的 $Z_1 \equiv 2$ ，因此散射截面依赖于靶的厚度 t 、靶原子的核电荷数 Z_2 、 α 粒子的入射能量 E_k 和散射角 θ 。自从该公式提出，或者说原子的核式结构模型提出，Rutherford、Geiger 和 Marsden 就于1913年进一步进行了 α 粒子轰击金箔的实验，之后人们进行了很多实验对前述的核式结构模型下的带电粒子被原子（实际为原子核）散射的微分散射截面的正确性进行检验。一些实验结果举例如图1.11 所示。

图1.11 所示的实验结果表明，前述的卢瑟福散射公式的预言与实验测量结果很好符合，从而确立了原子结构的核式模型。基于卢瑟福对原子结构的研究成果及对原子核的放射性的研究成果，他获得了1908年的诺贝尔化学奖。

例题：原子核大小的确定(近似)

设 α 粒子的入射动能为 E_k ，动量为 $p = \sqrt{2mE_k}$ ，瞄准距离为 b ，与原子核接近到的最小距离(即原子核的半径)为 r_m ，此时的动量为 p_m ，由能量守恒原理知，

$$E_k = \frac{p_m^2}{2m} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_m}.$$

由角动量守恒则得

$$bp = r_m p_m.$$

记此时散射角为 θ ，由力学原理（导出过程见附录一）知，

$$\cot \frac{\theta}{2} = 4\pi\epsilon_0 \frac{2bE_k}{Z_1 Z_2 e^2}.$$

上述三式联立，消去 b 和 p_m ，则得

$$r_m = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2E_k} \left(1 + \frac{1}{\sin \frac{\theta}{2}}\right).$$

1.4.2 原子光谱 — 光具有粒子性的另一实验事实

一、原子光谱的概念

按照经典电磁理论，原子中的电子绕原子核运动时，由于其速度变化引起电磁辐射，该辐射光一般包括许多不同的波长。经分光仪器分光后，形成一系列的谱线，每一条谱线对应一种波长（频率）成分，这种由分立的谱线形成的光谱称为线状光谱，也叫原子光谱。最简单的，人们拿一棱镜，即可看到太阳光（常说

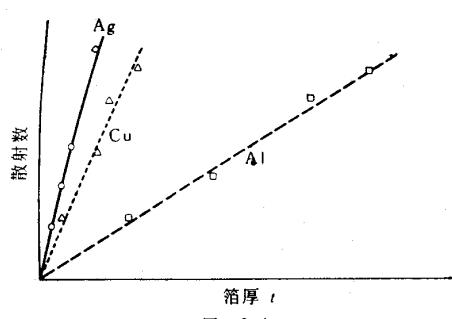


图 6.4

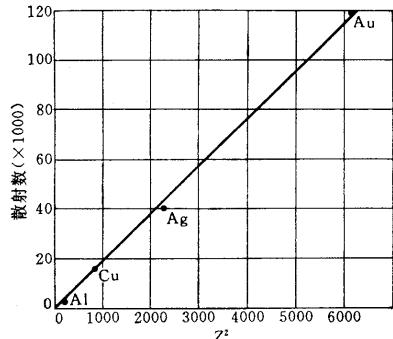


图 6.5

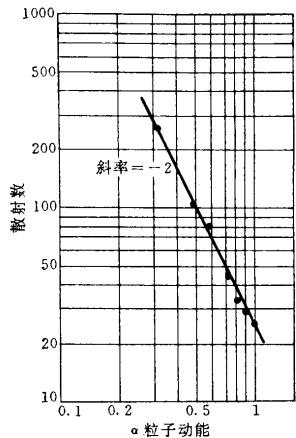


图 6.6

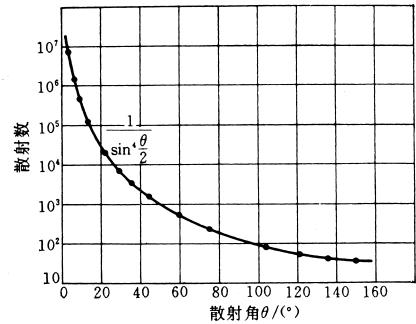


图 6.7

Figure 1.11: 检验卢瑟福散射公式（原子核式模型）的实验观测结果举例。左上子图：散射计数随靶的厚度变化的行为；右上子图：散射计数随靶原子的核电荷数变化的行为；左下子图：散射计数随入射能量变化的行为；右下子图：散射计数随散射角变化的行为。

的自然的白光) 实际由赤橙黄绿青蓝紫七色组成, 其中的每一种光对应一个波长(频率), 即对应一条光谱线。

实验还发现, 原子及由之形成的各种材料可以发射光, 形成发射光谱; 也可以吸收光, 形成吸收光谱。因此, 原子光谱可分为发射光谱和吸收光谱两类。

二、原子光谱的实验规律

1. 原子光谱的特征

实验发现, 氢原子的光谱如图 1.12 所示。氦原子光谱和锂原子光谱如图 1.13 所示。这表明, 除表现更复杂外, 其它原子的光谱也具有与氢原子光谱类似的线状谱的特征。

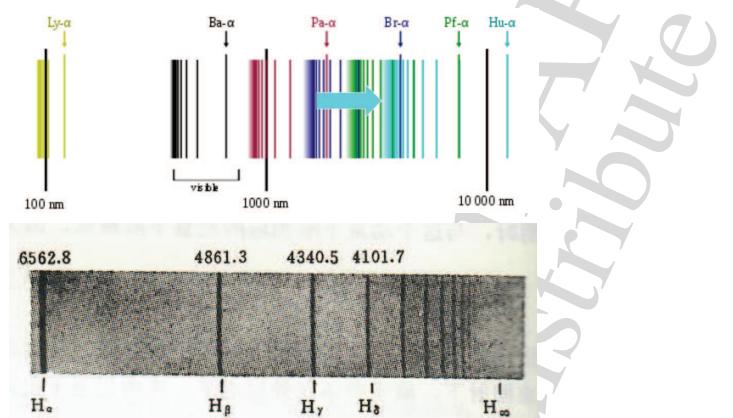


Figure 1.12: 氢原子光谱示意图 (上半部分为整体概貌, 下半部分为巴尔末系的谱线)

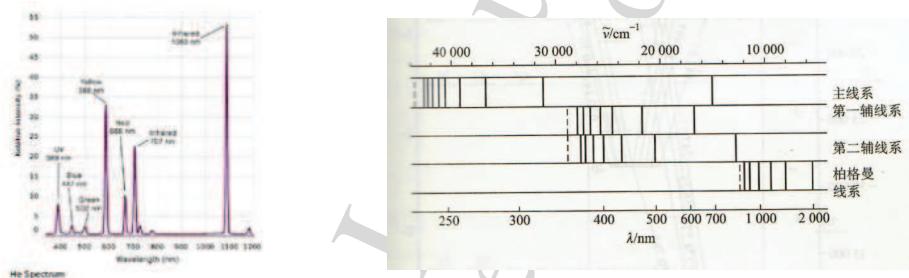


Figure 1.13: 实验观测到的氦原子光谱 (左) 和锂原子光谱 (右)

原子光谱的特征可以概括如下:

- (1) 不同元素的光谱具有成分不同的线状谱。
- (2) 各种元素的光谱中，光谱线按一定规律排列，形成线系。

例如，早在1885年天文学家巴尔末通过分析太阳光谱中光谱线的波长，发现氢原子光谱中的一些谱线满足

$$\tilde{\nu} = R \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right],$$

其中 $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{c}{\lambda}$ 称为波数， $n = 3, 5, 5, , 6, \dots$ ， R 为一常量，并且 $R = \frac{4}{\lambda_0} = 109677.6 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda_0 = 364.57 \text{ nm}$)。该关系常被称为巴尔末公式。

后来的研究表明，氢原子的其它光谱线的波数也满足类似的关系，即有广义巴尔末公式

$$\tilde{\nu} = R \left[\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right], \quad (1.22)$$

$R = \frac{4}{\lambda_0} = 109677.58 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda_0 = 364.57 \text{ nm}$) 称为里德堡常量， m 、 n 为整数，并且 $n > m$ 。 m 、 n 不同，形成不同的线系，其划分规则（依发现人的姓氏命名）如下：

- $m = 2, n = 3, 4, 5, 6, \dots$ ，称为巴尔末系（1885年发现）；
- $m = 1, n = 2, 3, 4, 5, \dots$ ，称为莱曼系（1906年发现）；
- $m = 3, n = 4, 5, 6, , 7, \dots$ ，称为帕邢系（1808年发现）；
- $m = 4, n = 5, 6, 7, 8, \dots$ ，称为布拉开系（1922年发现）；
- $m = 5, n = 6, 7, 8, 9, \dots$ ，称为普丰德系（1928年发现）；等等。

并可由图 1.14 所示的形式展示。

2. 光谱项和里德堡—里兹组合原理

(1) 光谱项

由广义巴尔末公式 $\tilde{\nu} = R \left[\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right]$ 知，原子光谱的光谱线的波数总由两项之差决定，即有

$$\tilde{\nu} = T(m) - T(n), \quad (1.23)$$

其中 $T(m)$ 、 $T(n)$ 即称为光谱项。特殊地，氢原子的光谱项可以表示为 $T_H(n) = \frac{R}{n^2}$ ，碱金属的光谱项可以表示为 $T_A(n) = \frac{Z^2 R_A}{n^2}$ ， R_A 与 R 略有差异，并也称之为（原子A 的）里德堡常量。

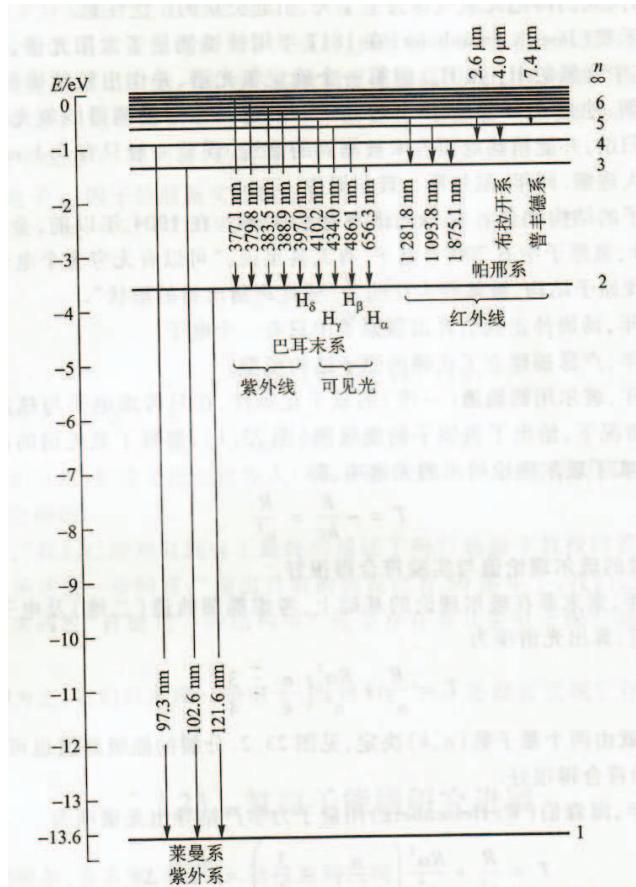


Figure 1.14: 原子光谱的线系确定规则示意图

(2) 里德堡—里兹组合原理

后来的研究表明，原子的任何两光谱项之差都给出这种原子的一条谱线的波数，即原子光谱的波数都可以表述为(1.23)式所示的形式。该规律称为里德堡—里兹组合原理。例如：氢原子光谱的 α 线， $T(2) - T(3) = \tilde{\nu}(H_{\alpha})$ 。

广义巴尔末公式和里德堡—里兹组合原理都表明，原子的光谱线的波数都是不连续的，也就是说原子的光谱线对应的波长（频率）都是不连续的。由此可以推知，对于一种原子，其发出的光不是波长可以连续改变的波，而是特殊的具有不能连续变化的波长的能量集团（流）。

1.4.3 光的本质—波粒二象性

前面讨论的黑体辐射、光电效应、X射线的康普顿散射和光谱都表明，光是一个一个不连续的能量集团形成的能量流，即光具有微粒性，或者说光具有粒子性（亦即量子性）。

早前的关于光的干涉、衍射和偏振的研究（具体讨论见光学的教材或专著，例如钟锡华《现代光学原理》（北京大学出版社），或 M. Born, and E. Wolf, Principles of Optics (Pergamon, London), 等等）表明，光具有波动性。

综合前述现象和特征我们知道，作为一个可观测的物理实在，光具有前述的两方面的特征和性质，即光既具有波动性，又具有粒子性（量子性）。简单来讲就是，光具有波粒二象性。按照前述的传统的光的产生机制，光是电磁振荡的传输，具有波的性质，从而光在主要与传播有关的现象中显示出其波动性；而在与物质相互作用的过程中，光主要表现出其不连续的能量集团形成的流的性质，即主要显示其粒子性。总之，光既具有波动性，又具有粒子性，在不同情况下（场合）表现出波粒二象性的不同方面。

1.4.4 经典物理的困难

前述的光的波粒二象性似乎已经全面反映了光的本质，但物理学的范畴不仅应探明是什么和怎么样的问题，更应该研究清楚为什么的问题。因此，对于我们现在讨论的光，我们还应该关注其产生机理。

前述的光的产生机理是物质原子的核式结构学说和电磁学的电磁辐射原理，按照经典电磁辐射原理，电子绕原子核运动时，由于其速度状态连续改变，因此辐射出电磁波，即发出光；根据能量守恒原理，辐射使得电子的能量连续减小，于是其轨道半径减小、频率连续变化，该辐射源频率的连续变化当然使得辐射出的电磁波（光）的频率连续变化，那么实验测量到的原子光谱应该为连续谱。这一结果显然与实际测量结果严重不符。另一方面，由于电子绕原子核运动的轨道半径不断减小，电子最后将落到原子核上，考虑原子核带正电荷、电子带负电荷的事实，当电子落到原子核上时，二者即会湮灭掉，从而原子是不稳定的。但实验发现，原子是稳定的，并且是不能由任何化学手段分割或改变的。

很显然，在关于原子光谱的实验测量结果，或者广义来讲，光的波粒二象性及

光的产生机制的研究中，经典物理的结论与实验观测事实之间存在严重矛盾。也就是说，经典物理也遇到了无法克服的困难。因此，必须发展新的物理理论，至少回答光为什么是具有不连续的能量集团形成的能量流（粒子性）、物质原子为什么在辐射光之后仍然是稳定的、等问题。

探讨和回答上述问题正是原子物理学的主要内容之一。下面我们沿着历史发展进程，先从半经典半量子的旧量子论出发对这些问题进行探讨。

1.5 关于光的粒子性的机制的旧量子理论

1.5.1 玻尔关于氢原子结构的理论

为解决前述的经典物理遇到的困难，丹麦物理学家尼尔斯·玻尔（Niels Bohr）于1913年提出了两个基本假设，再结合德国物理学家索末菲通过推广普朗克的量子化条件而提出的角动量量子化条件，建立了关于氢原子及其光谱的（旧）量子理论，形式上解决了前述困难。本节介绍关于氢原子结构及其光谱的（旧）量子理论。

一、玻尔的两个基本假设

为解决前述困难，玻尔提出了两个基本假设：定态假设和频率假设。

1. 定态假设

经典物理在描述原子光谱时遇到的严重困难之一是原子中的电子在辐射光子之后仍然是稳定的。为解决这一困难，玻尔假设：原子中的电子绕原子核运动时既不辐射也不吸收能量，而是处于一定的能量状态，这种状态称为定态。原子的定态的能量不能连续取值，只能取一些分立数值 E_1, E_2, E_3, \dots ，这些分立的定态能量称为能级。相应于最低能量的状态称为基态。其它的较高能量的状态称为激发态，并可根据能量由低到高的顺序分别称为第一激发态、第二激发态、等等。这些概念显然与经典物理中关于原子中的电子绕原子核运动中辐射的能量连续（因其速度状态在连续改变）的概念完全不同，但在该定态假设中认定这些能量分立的状态都有确定的运动轨道。

2. 频率假设

为描述原子光谱呈线状光谱，即光是一份一份不连续的能量集团形成的能量流的事实，玻尔假设：原子能量的任何变化（包括发射或吸收电磁辐射）都只能在

两个定态间以跃迁方式进行。原子在以 n 、 m 标记的两个定态之间跃迁时，发射或吸收的电磁辐射的频率满足

$$h\nu = E_n - E_m. \quad (1.24)$$

这一能量即原子发出的光子的能量，其中的 ν 即所发出的光的频率， n 和 m 称为量子数。

二、玻尔关于氢原子能级和光谱的理论

下面我们在前述的量子概念下推导氢原子的能级公式和所发出的光的频率（波数）公式。

1. 角动量量子化

记一系统的动能为 E_k 、势能为 E_p ，则系统的能量为 $E = E_k + E_p$ 。对于讨论黑体辐射时我们已经讨论过的谐振子，记做谐振运动的粒子的质量为 m 、谐振的劲度系数为 k 、处于位置 x 处的速度为 \vec{v} ，则

$$E = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2,$$

其中 $\vec{p} = m\vec{v}$ 为粒子的动量（实际是低速运动的质点的动量）。

很显然，上式可以改写为

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{\frac{2E}{k}} = 1.$$

这表明，谐振子运动在其相空间中的轨道为一椭圆，其长短轴之半分别为 $a = \sqrt{2mE}$ 、 $b = \sqrt{\frac{2E}{k}}$ 。

再考虑关于上述相空间轨道的回路积分，由几何原理知，该回路积分的结果即椭圆的面积，于是有

$$\oint pdx = \pi ab = \pi\sqrt{2mE}\sqrt{\frac{2E}{k}} = 2\pi E\sqrt{\frac{m}{k}}.$$

因为与劲度系数为 k 的轻弹簧相连的质量为 m 的质点的振动频率 $\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$ ，即 $\sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{1}{2\pi\nu}$ ，所以

$$\oint pdx = \frac{E}{\nu}.$$

考虑能量量子化条件 $E = nh\nu$, 则得

$$\oint pdx = nh. \quad (1.25)$$

这一关系常称为普朗克量子化条件。

索末菲进一步假设: 上述普朗克量子化条件适用于任意自由度, 对转动, 记其角度变量为 φ , 则有

$$\oint p_\varphi d\varphi = nh.$$

对有心力场, 因为角动量守恒, 即 $p_\varphi = \text{常量}$, 于是有

$$2\pi p_\varphi = nh.$$

这表明, 对空间转动角动量 $p_\varphi = L$, 我们有

$$L = n \frac{\hbar}{2\pi} = n\hbar, \quad (1.26)$$

其中 $\hbar = \frac{\hbar}{2\pi}$ 称为约化普朗克常量, n 常被称为相应轨道的量子数。该关系称为索末菲(角动量)量子化条件。

2. 能级公式

假设氢原子的原子核(质子)静止不动, 记电子质量为 m_e , 其绕原子核所作圆周运动的轨道半径为 r_n , 运动速率为 v_n , 由电子作圆周运动的向心力为电子与质子之间的库仑作用力, 则知

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n^2} = m_e \frac{v_n^2}{r_n}.$$

那么

$$r_n = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e v_n^2}.$$

由角动量的定义 $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ 知, 上述圆周运动的角动量的大小为

$$L = m_e v_n r_n.$$

考虑索末菲(角动量)量子化条件, 则得

$$m_e v_n r_n = n\hbar.$$

于是有

$$v_n = \frac{n\hbar}{m_e r_n}.$$

将之代入 r_n 的表达式，则有

$$r_n = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e \frac{n^2 \hbar^2}{m_e^2 r_n^2}} = \frac{m_e e^2 r_n^2}{4\pi\varepsilon_0 n^2 \hbar^2}.$$

由之可得

$$r_n = n^2 \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = n^2 \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}.$$

记 $a_B = r_1 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} = 5.29 \times 10^{-11}$ m = 0.0529 nm，并称之为玻尔半径（或更严格的是，第一玻尔轨道半径），则有

$$r_n = n^2 r_1 = n^2 a_B. \quad (1.27)$$

进而，电子绕原子核运动的动能可以表示为

$$E_k = \frac{1}{2} m_e v_n^2 = \frac{1}{2} m_e \frac{n^2 \hbar^2}{m_e^2 r_n^2} = \frac{n^2 h^2}{8\pi^2 m_e} \frac{1}{(\frac{n^2 \varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2})^2} = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2},$$

电子绕原子核运动时的势能为

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\frac{n^2 \varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}} = -\frac{m_e e^4}{4\varepsilon_0^2 n^2 h^2}.$$

所以，氢原子中电子绕原子核运动的总能量为

$$E_n = E_k + E_p = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2}.$$

记常量组合

$$\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = R,$$

则有

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}. \quad (1.28)$$

显然，对应于确定轨道量子数 n 的状态，氢原子的能量为小于 0 的常量，不随电子绕原子核的运动而变化，因此，尽管电子绕原子核的运动是加速运动，但氢原子是稳定的，即处于定态。

3. 氢原子光谱

因为轨道量子数为 n 的定态的能量为

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}$$

其中

$$R = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c},$$

由频率假设，则得

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} = R c \left[\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right].$$

所以，由 m 态到 n 态的跃迁产生的光的波数为

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = R \left[\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right], \quad (1.29)$$

其中 $R_{th} = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = 109737.3 \text{ cm}^{-1}$ ，与实验测量结果 $R_{ob} = 109677.6 \text{ cm}^{-1}$ 很好符合，但略有差异。

至此，将量子化假设与经典电磁作用规律相结合的玻尔理论解决了近三十年的“巴尔末公式之谜”。

三、实验检验

关于玻尔的原子结构和光谱的量子理论的实验检验，最早的，也是最常用的，是夫兰克—赫兹实验（最早的夫兰克—赫兹实验于1914年进行）。

1. 实验装置

夫兰克—赫兹实验装置的示意图如图 1.15 所示。

装置中 U_1 为加速电压， U_2 为减速电压。实验中，由加热的电阻丝溢出的电子经加速电压加速，然后再经减速电压减速，如果电子在加速阶段获得的能量不够高，则在减速电压的作用下，这些电子不能到达接收端并形成电流，即不能被电流表测量到。显然，电子能否克服减速电压减速而到达接收端、并由电流表测量到，取决于其在加速阶段被加速的程度和在充有稀薄气体的腔内运动的过程中是否有能量损失掉。

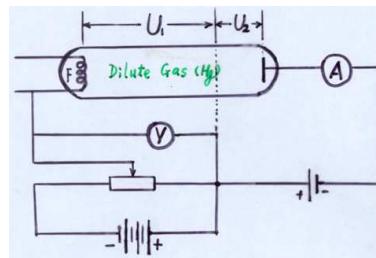


Figure 1.15: 夫兰克-赫兹实验装置示意图

2. 实验及测量到的现象

假设由加热的电阻丝溢出的电子的速度为 0, 加速电压为 U_1 , 由能量守恒定律知, 在加速电压作用下, 电子获得的动能 E_k 及定向速度 \vec{v}_e 满足关系

$$E_k = \frac{1}{2}m_e \vec{v}_e^2 = eU_1.$$

实验时, 在不同加速电压情况下, 由电流表测量穿过减速电压区到达另一侧的电子的数目。

对于管内充以稀薄的汞蒸汽情况, 实验观测的结果如图 1.16 所示。

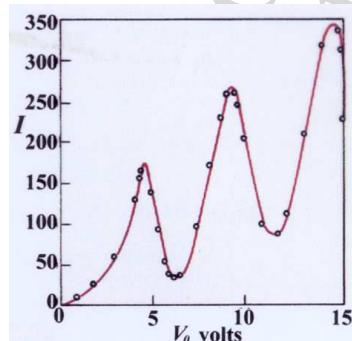


Figure 1.16: 阴极射线管内充以稀薄汞蒸汽情况下夫兰克-赫兹实验测量结果示意图

考察实验测量结果知, 在加速电压 $U_1 < 4.9$ V, 即电子获得的能量 $E_k < 4.9$ eV 情况下, 记录到的电流强度随加速电压 U_1 增大而单调增大。由于加速电压 U_1 决定电子进入减速电压区时的速度的平方, 而被电流表记录下电子的数目(形成的电流的电流强度)正比于电子的速度, 因此实验测量到的电流强度与加速电压 U_1 近似呈平方根的关系。上述实验测量结果表明, 在 $U_1 < 4.9$ V 的加速电压

区域，被加速的电子基本都到达收集极。进而，我们可以得知，这些被加速的电子在汞原子形成的介质内运动的过程中不损失能量，也就是说，即使被加速的电子与汞原子之间有碰撞，相应的碰撞为弹性碰撞。

但是，在加速电压 $U_1 = U_0 = 4.9 \text{ V}$ ，即电子获得的能量 $E_k = 4.9 \text{ eV}$ 情况下，记录到的电流强度突然急剧减小，这表明出现了明显地类似于减速电压的作用的因素，也就是存在使电子能量突然减小的效应。考察实验装置和过程知，由于减速电压确定，因此这一能量突然减小只可能是因为电子与汞原子之间的碰撞是非弹性碰撞、从而其能量突然被汞原子吸收所致。

在加速电压 $U_1 > U_0 (= 4.9) \text{ V}$ ，即电子获得的能量 $E_k > 4.9 \text{ eV}$ 情况下，当加速电压 U_1 不是 $U_0 = 4.9 \text{ V}$ 的整数倍的情况下，记录到的电流强度随 U_1 增大而增大；而在 U_1 是 $U_0 = 4.9 \text{ V}$ 的整数倍的情况下，记录到的电流强度也突然减小。这表明，这种情况下也具有使电子能量突然减小 4.9 eV 的效应。参照 $U_1 = U_0 = 4.9 \text{ V}$ 情况下的结果，我们知道，在 $U_1 > U_0$ 情况下，电子与汞原子之间的非弹性碰撞中损失的能量只能是 eU_0 的整数倍。

3. 结论

上述实验现象表明，在汞原子与电子的非弹性碰撞过程中，对于外来能量，汞原子不是“来者皆收”，而是仅吸收 4.9 eV 的整数倍的能量。由于通常实验环境下，系统的温度都很低（即使上千K，其对应的能量也仅是 0.1 eV 的量级），不足以使原子处于激发态，按照玻尔兹曼分布律，实验之前，稀薄的汞蒸汽中的绝大多数汞原子都处于基态；按照能量守恒定律和共振吸收原理，只有在汞原子具有特定能量间隔状态的情况下，它才能吸收相应的能量。由此知，汞原子具有比基态能量高 4.9 eV 的第一激发态。

填充其它气体，例如 Na、K、N 等的实验给出完全类似的结果，并说明 Na、K、N 等的第一激发态能量分别为 2.12 eV 、 1.63 eV 、 2.1 eV 、等。

这些实验结果表明：玻尔的关于原子结构的量子理论完全正确。基于玻尔对深化原子结构和原子光谱的贡献以及后来提出对应原理² 的贡献，玻尔获得了 1922 年的 Nobel 物理奖，² 玻尔模型可以很好描述氢原子的光谱，但无法定量描述其他原子的光谱，也无法解释光谱线的强度及光的偏振现象，为了深入探讨经典物理与前述的量子观念的关系，玻尔于 1918 年提出对应原理（进一步假设）：在大量子数的极限下，量子体系的行为趋于与经典体系的行为相同。

1.5.2 玻尔理论的成功与局限

一、玻尔理论的成功

回顾玻尔理论的内容及其结果，我们知道，玻尔理论至少在下述三个方面取得了成功，

- (1) 很好地描述了氢原子光谱，解决了“巴尔末公式之谜”；
- (2) 清楚地说明了光子是不连续的能量集团的机制；
- (3) 把光谱学、电磁辐射、原子结构纳入一个理论框架内统一和谐地处理。

二、玻尔理论的局限

尽管玻尔理论取得了巨大的成功，但仍存在问题和局限，例如：

- (1) 在描述光谱结构方面，她不能描述复杂光谱。
- (2) 玻尔理论实际是一个把经典概念与量子假设混杂在一起的模型，缺乏完整统一的理论体系。因此常称之为半经典理论、或旧量子论。

为弘扬其成功之处、解决其存在的问题和局限，有必要发展新的（完整的）量子理论。

三、量子理论体系及其建立过程概述

1925年，W.K. Heisenberg, M. Born 和 E.P. Jordan 赋予每个物理量一个矩阵，矩阵运算中出现普朗克常量 h ，建立了以矩阵形式表述的量子力学 – 矩阵力学；解决了谐振子、转子、氢原子等的离散能级、光谱线频率和强度等问题。

1923年，L. de Broglie 提出实物粒子也有波粒二象性的概念；1926年，E. Schrödinger 提出描述实物粒子对应的物质波的运动方程，建立了以波动方程形式表示的量子力学 – 波动力学；也解决了氢原子光谱等重大问题。

1926年，M. Born 提出波函数统计诠释；1928年，E.P. Jordan 和 E.P. Wigner 提出占有数表象方法（亦称二次量子化方法）；从而建立了非相对论性量子力学的理论框架。其后广泛应用，造福人类。

再者，1928年，P.A.M. Dirac 提出 Dirac 方程，建立相对论性量子力学；1927 – 1929年，Dirac 提出量子电动力学（QED）；1950 年代，R.H. Feynman 提出量子力学的路径积分表述，杨振宁和 Mills 建立量子规范场理论；1960 – 70 年代，众多物理学家共同努力建立量子色动力学（QCD）；从而建立起了描述目前可见物质结构的标准模型，并取得了很大成功。

限于课程范畴规定，下一章简要介绍非相对论性量子力学的主要内容，为具体讨论原子及分子的结构和过程提供理论工具。

思考题与习题

- 1.1. 实验测量表明，太阳光的能流密度大约为 $135 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2)$ ，试确定与太阳光线垂直放置的黑色平板的稳定温度大约多少 $^\circ\text{C}$ 。
- 1.2. 实验测得，在每分钟时间内通过每平方厘米面积的地面接收到的来自太阳辐射的能量为 8.11 J ，太阳与地面之间的距离为 1.5 亿千米，太阳直径为 $1.39 \times 10^6 \text{ km}$ ，太阳表面温度约 6000 K 。试由这些测量结果确定斯特藩-玻尔兹曼常量。
- 1.3. 一温度为 $5700 \text{ }^\circ\text{C}$ 的空腔，壁上开有直径为 0.10 mm 的小孔，试确定通过该小孔辐射波长在 $550.0 \sim 551.0 \text{ nm}$ 内的光的功率。如果辐射是以发射光子的形式进行的，试确定光子的发射速率。
- 1.4. 实验测得宇宙微波背景辐射的能量密度为 $4.8 \times 10^{-14} \text{ J/m}^3$ ，试确定宇宙微波背景辐射的温度、光子数密度、平均光子能量及最大亮度的波长。
- 1.5. 观测表明，天空中最亮的天狼星呈白色、但略带蓝色，试确定其表面温度大约为多少 $^\circ\text{C}$ 。
- 1.6. 热核爆炸火球的初始阶段形成的火球的温度高达千万度，试确定辐射最强的光的波长和相应光子的能量。
- 1.7. 试估算一位身高 1.80 m 的人（正常体表温度大约 $33.5 \text{ }^\circ\text{C}$ ）在正常的舒适环境下的辐射功率。
- 1.8. (1.9) 式给出了黑体辐射的维恩位移定律的波长表达形式。试给出维恩位移定律的频率表达形式。
- 1.9. 现在许多机场、车站、码头都设有非接触型的红外体温计，以检测是否有高烧的病人。（1）如果认定体温在 $39.5 \text{ }^\circ\text{C}$ （忽略衣服表面温度与人体温度的差异）及其以上的人为高烧病人，试确定光敏体温计前的滤光片应该最敏感的红外光波长；（2）如果光敏体温计也能同样检测到正常体温（体表温度大约为 $33.5 \text{ }^\circ\text{C}$ ）的人的频谱，试确定该体温计检测到的体温为 $39.5 \text{ }^\circ\text{C}$ 的高烧病人的频谱亮度比正常体温的人的频谱亮度高出的百分率。

- 1.10. 正常人的眼睛能够觉察的最小光强为 10^{-10} W/m^2 。假设人眼瞳孔的面积为 0.13 cm^2 , 试确定, 对于波长 560 nm 的光, 每秒有多少光子进入眼睛时就有光感。
- 1.11. 假设正常人的眼睛在一秒钟内接收到 100 个波长为 550 nm 的可见光光子时即有光感, 试确定与此相当的功率。
- 1.12. 试确定强度为 $Nh\nu$ 的单色电磁波 (其中 N 为单位时间通过单位面积的光子数, ν 为电磁波的频率, h 为普朗克常量) 照射到全反射镜面上时产生的辐射压强。
- 1.13. 实验测得一束单色电磁辐射的强度为 1 W/cm^2 , 如果它来自于 1 MHz 的无线电波, 试确定这种情况下每立方米的空间内的平均光子数。如果上述辐射光强来自于 10 MeV 的 γ 射线呢。
- 1.14. 试证明, 在没有物质背景的情况下, 不可能发生光电效应; 或者说, 自由电子不能发生光电效应。
- 1.15. 实验测得, 对一红限波长为 600 nm 的光电管阴极, 某入射单色光的光电流的反向截止电压为 2.5 V , 试确定这束光的波长。
- 1.16. 利用 Ca 阴极光电管做光电效应实验, 采用不同波长 λ 的单色光照射时, 测出相应光电流的反向截止电压 U_0 如下表所列,

辐照光波长 λ (nm)	253.6	313.2	365.0	404.7
反向截止电压 U_0 (V)	1.95	0.98	0.50	0.14

试确定普朗克常量。

- 1.17. 实验测得, 从钠中取出一个电子所需的能量为 2.3 eV , 试确定钠表面光电效应的截止波长, 并说明采用波长为 680.0 nm 的橙黄光可否发生光电效应。
- 1.18. 对于感光底版, 它之所以能感光并记录下信息, 是因为底版上有受光照即可以分解出来的光敏物质分子。实验测得, 分解出一个溴化银分子需要的最小能量为约 10^{-19} J 。试确定可否利用溴化银照相底版在红光环境下进行拍照。

- 1.19. 试给出通常的康普顿散射中反冲电子的动能 E_R 与入射光子能量 $E_{\gamma,i}$ 之间的关系。
- 1.20. 试证明, 通常的康普顿散射中电子反冲偏离入射线方向的角度 ϕ 与散射光子偏离入射线方向的角度 θ 之间的关系为 $\cot \phi = \left(1 + \frac{h\nu}{m_e c^2}\right) \tan \frac{\theta}{2}$ 。
- 1.21. 在一单光子能量为 0.500 MeV 的 X 射线经可近似为静止的电子散射的实验中, 测得散射后电子获得了 0.100 MeV 的动能, 试确定散射出的 X 射线与入射的 X 射线之间的夹角。
- 1.22. 一个能量为 12 MeV 的光子被一自由电子散射到与原入射方向垂直的方向上时, 对该光子可测到的波长是多长。
- 1.23. 一个 5.00 MeV 的电子与一静止的正电子相遇后发生湮灭, 产生两个光子, 其中一个光子向电子入射的方向运动, 试确定这两个光子的能量。
- 1.24. 在通常的康普顿散射实验中, 如果散射出的光子可以产生 (湮灭为) 一对正负电子, 其最大散射角不会超过多大。
- 1.25. 对采用由 ^{137}Cs 得到的波长为 0.0188 nm 的 γ 射线与自由电子的散射实验中, 在与入射方向垂直的方向测量散射光的性质, 实验测得的波长偏移为多大? 入射光在散射时损失的能量占总能量的比例为多大? 给予反冲电子的动能为多大?
- 1.26. 试讨论如何解决卢瑟福散射中朝前散射的描述的问题。
- 1.27. 在推导卢瑟福散射截面公式的过程中没有考虑实际材料中散射中心相互遮挡的厚度问题。例如, 1913年盖革和马斯登测量 α 粒子 (仍以 RaBr_2 为源产生) 轰击金箔或银箔的实验中, 记录到的每分钟散射到 θ 方向的 α 粒子的计数如下

散射角 θ	45°	75°	135°
关于Au箔的计数	1435	211	43
关于Ag箔的计数	989	136	27.4

Au箔的厚度为 1.86 微米, Ag箔的厚度为 2.82 微米, 密度分别为 $1.93 \times 10^4 \text{ kg/m}^3$ 、 $1.05 \times 10^4 \text{ kg/m}^3$ 。试给出这两实验中每一散射角处卢瑟福公式给出计数与实际计数的比值。并讨论如何解决这一厚度问题。

- 1.28. 试确定，在仅考虑库仑作用情况下，质子以 2.0 MeV 的动能射向 Au 原子核时能够达到的最小距离；如果考虑质子的半径为 0.8 fm 和 Au 核半径为 8.1 fm 的有限线度的现实，即不做点电荷近似，以 2.0 MeV 的动能入射的质子能否与 Au 原子核接触从而发生核反应。
- 1.29. 对于氢原子的能谱和光谱，人们常引入里德堡常量进行简洁的表述，试说明为什么利用玻尔的旧量子论（半经典量子论）计算得到的氢原子的里德堡常量与实验测量结果之间存在差异。
- 1.30. 利用能量为 12.5 eV 的电子激发基态氢原子，受激发的氢原子向低能态跃迁时可以发出哪些波长的光谱线。
- 1.31. 假设一个电子可以在一半径为 R 、总带电量为 Ze 的均匀带电球内运动，试采用玻尔理论方法计算相应于在带电球内运动的那些状态的能级。
- 1.32. 两个分别处于基态、第一激发态的氢原予以速率 v 相向运动，如果原来处于基态的氢原子吸收从激发态氢原子发出的光之后刚好跃迁到第二激发态，试确定这两个氢原子相向运动的速率 v 。
- 1.33. 试确定氢原子光谱中位于可见光区的那些谱线的波长。
- 1.34. 已知氢原子基态的能量为 -13.6 eV ，试给出氢原子光谱的莱曼系、巴尔末系、帕邢系中的长波极限波长 λ_{ll}^L 、 λ_{ll}^B 、 λ_{ll}^P 及短波极限波长 λ_{sl}^L 、 λ_{sl}^B 、 λ_{sl}^P 分别为多长？
- 1.35. 实验测得，氢原子光谱的巴尔末系的最短波长为 365 nm ，试确定氢原子的电离能。
- 1.36. 当氢原子跃迁到激发能为 10.19 eV 的状态时，发出一个波长为 489 nm 的光子，试确定氢原子所处初态的结合能。
- 1.37. 静止氢原子从第一激发态向基态跃迁发射一个光子，试确定这个氢原子获得的反冲速度及反冲能与所发出光子能量的比值。
- 1.38. 电子射入室温下的氢原子气体，试确定，如果观测到了 H_α 线，试确定入射电子的最小动能。
- 1.39. 一运动质子与一个静止的基态氢原子发生完全非弹性的对心碰撞，结果使得氢原子发射出一个光子，试确定运动质子的速度至少为多大。

1.40. 我们知道，玻尔关于氢原子的理论的原始出发点是库仑场中运动粒子的经典力学描述方案，没有考虑电子高速运动的相对论性效应。索末菲最早考虑了相对论性修正对氢原子能级的贡献。试证明，在考虑了相对论性修正情况下，玻尔理论结果中主量子数为 n 的能级修正为

$$E_n = -\frac{1}{2}m_0c^2\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2\left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2\right],$$

其中 m_0 为电子的静质量， Z 为原子核的核电荷数， c 为真空中的光速， $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ （常称之为精细结构常数，在电磁作用至关重要的特征量）。