

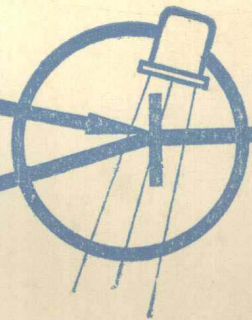
清

中等专业技术学校教材

# 半导体物理

吴士忠 编

江苏科学技术出版社



中等专业技术学校教材

# 半 导 体 物 理

吴士忠 编

江苏科学技术出版社

## 内 容 简 介

本书比较全面地介绍了半导体物理的基础知识以及有关的基础理论知识。内容包括电子的微观特性及其运动规律、晶体的结构与能带、掺杂半导体、半导体中载流子的统计分布、载流子的迁移现象、非平衡载流子，并讨论了 p-n 结、金属与半导体接触、半导体表面及半导体的光、磁、热等各种物理现象。

本书为全国中等专业学校半导体器件专业的统编教材，着重物理概念，避免繁琐的数学推导，可作中专、技工和职业技术学校学生的教科书，也可供有关教师、工程技术人员、工人进修阅读参考。

## 半 导 体 物 理

吴士忠 编

---

出版：江苏科学技术出版社

发行：江苏省新华书店

印刷：扬州印刷厂

---

开本 787×1092 毫米 1/16 印张 16.25 字数 395,000

1986年10月第1版 1986年10月第1次印刷

印数 1-2,570册

---

书号：13196·226 定价：2.44元

# 编者的话

本书系中等专业学校电类专业统编教材。半导体物理是中专半导体器件专业的一门专业基础课。

为了适应中专学校的发展，加强教材建设工作，1979年5月电子部在无锡召开教材工作会议，制定教材编审规划，确定编写《半导体物理基础》教材，由郑福洁、吴士忠两同志主编，1983年出版试用。1982年8月电子部在北戴河召开的教材工作会议上，此书再次列入教材建设选题。嗣后，无线电元器件编审小组征求各校对《半导体物理基础》未定稿与正式教材使用情况和意见，并于1984年5月召开会议，根据“打好基础、精选内容、逐步更新、利于教学”的原则，重新制订教材编写提纲，删除过多的近代物理方面的内容，增加新技术方面的知识，对体系和内容作了调整，确定由无锡无线电工业学校吴士忠同志担任本教材主编，阜新电子工业学校才玉林同志担任主审，并定名为《半导体物理》。经过改编，教材将更适合中等专业学校的特点。

我们在编写过程中得到天津仪表无线电学校刘光毅同志、无锡无线电工业学校吴雪方同志、王国强同志、上海仪表无线电学校罗永农同志的帮助，提供许多宝贵意见，在此一并致以谢意。

我们希望各校将使用中发现的缺点问题和意见及时转告我们，以便今后进一步修订。

# 前 言

半导体工业技术是近代工业技术的新领域。在实践中，人们体会到半导体在现代工业、农业、国防事业上越来越占有重要地位。由半导体制成的电子器件比电子管更具有生命力，它体积小，重量轻，易集成，耗电小，寿命长，坚固耐振，工作速度快，可靠性又高，因此它在国民经济各部门和国防建设中得到越来越广泛的应用。半导体这门学科研究的范围很广，有半导体材料学、半导体化学，半导体物理学、半导体器件工艺学等。

半导体物理是从1930年人们发现  $\text{Cu}_2\text{O}$ （氧化亚铜）后逐步发展起来的一门学科，是半导体器件的重要的基础理论之一。半导体中所呈现的各种效应，都是由半导体内部的电子运动产生的。因此，本学科在固体物理、统计物理、量子力学的基础上运用能带理论着重讨论了半导体晶体中的微观粒子的特性及其运动规律，介绍了  $p-n$  结理论和研究讨论了半导体的表面特性。

近年来，随着科学技术的发展，各种具有特殊性能的半导体器件不断涌现，相应的学科理论也随之有所发展和更新，但这些都是掌握基础理论的前提下取得的，都是以半导体物理为基础的。因此，本课程是半导体器件专业的一门重要的专业基础课，它将为分析、设计各种晶体管工作特性提供必须的理论基础，因此，学好本课程对晶体管设计与制造是很有必要的。

# 目 录

第一章 电子的微观特性及其运动规律 .....	1
§ 1-1 原子的结构 .....	1
§ 1-2 电子运动的轨道理论 .....	4
§ 1-3 原子的壳层结构 .....	15
§ 1-4 波粒二象性 .....	18
§ 1-5 定态薛定谔方程 .....	29
本章小结 .....	33
复习思考题 .....	34
第二章 晶体的结构与能带 .....	36
§ 2-1 晶体的结合和结构 .....	36
§ 2-2 锗、硅、砷化镓的晶体结构 .....	48
§ 2-3 半导体晶体中的缺陷 .....	51
§ 2-4 电子的共有化运动和能带 .....	58
§ 2-5 晶体中电子的运动 有效质量 .....	63
本章小结 .....	68
复习思考题 .....	69
第三章 掺杂半导体 .....	70
§ 3-1 本征半导体的特性 .....	70
§ 3-2 半导体掺杂 .....	76
§ 3-3 $n$ 型半导体和 $p$ 型半导体 .....	79
§ 3-4 掺杂半导体在室温上下下的载流子浓度 .....	83
§ 3-5 掺杂半导体的本征情况 .....	85
§ 3-6 深能级杂质和缺陷能级 .....	87
本章小结 .....	89
复习思考题 .....	90
第四章 半导体中载流子的统计分布 .....	91
§ 4-1 统计的规律性 .....	91
§ 4-2 导带电子与价带空穴统计分布的一般表达式 .....	101
§ 4-3 本征情况下的费米能级和载流子浓度 .....	106
§ 4-4 杂质半导体的费米能级和载流子浓度 .....	108
§ 4-5 简并半导体费米能级的位置和载流子浓度 .....	113
§ 4-6 费米能级的物理意义 .....	114

本章小结	120
复习思考题	121
第五章 半导体中载流子的迁移现象	123
§ 5-1 金属自由电子论	123
§ 5-2 半导体中载流子的运动方式	127
§ 5-3 半导体的电导率和散射	129
§ 5-4 电子和空穴的迁移率	134
§ 5-5 电阻率同杂质浓度和材料温度的关系	137
§ 5-6 半导体的霍尔效应	139
本章小结	142
复习思考题	143
第六章 非平衡载流子	145
§ 6-1 非平衡载流子及其产生	145
§ 6-2 非平衡载流子的复合与寿命	146
§ 6-3 准平衡态与准费米能级	156
§ 6-4 非平衡载流子的运动	158
本章小结	166
复习思考题	167
第七章 $p-n$ 结	168
§ 7-1 $p-n$ 结的形成及杂质分布	168
§ 7-2 平衡 $p-n$ 结	171
§ 7-3 $p-n$ 结的伏安特性	175
§ 7-4 $p-n$ 结的电容效应	184
§ 7-5 $p-n$ 结的击穿特性	189
本章小结	196
复习思考题	197
第八章 金属与半导体接触	200
§ 8-1 金属-半导体接触	200
§ 8-2 金属-半导体接触的整流特性	202
§ 8-3 欧姆接触	206
本章小结	208
复习思考题	208
第九章 半导体表面	209
§ 9-1 表面空间电荷区	209
§ 9-2 理想 MIS 电容器的 $C-V$ 特性	212
§ 9-3 硅-二氧化硅系统的性质	219
§ 9-4 实际 MIS 电容器的 $C-V$ 特性及应用	223
§ 9-5 半导体场效应应用举例——MOS 场效应晶体管	229
§ 9-6 表面电导率及迁移率	230

本章小结.....	231
复习思考题.....	232
第十章 半导体的光磁热电性质 .....	233
§ 10-1 半导体的光学性质 .....	233
§ 10-2 半导体的热电性质 .....	241
§ 10-3 半导体磁电效应 .....	244
本章小结.....	250
复习思考题.....	250
附录 .....	252
一、常用的物理常数.....	252
二、锗、硅和砷化镓材料的物理性质.....	252



# 第一章 电子的微观特性及其运动规律

半导体的各种应用都和半导体中的电子状态有关，因此了解电子的微观特性及其运动规律是首先遇到的问题。众所周知，自然界中的物质是由分子构成的，而分子又是由更小的微粒——原子所组成。随着科学技术的发展，到了十九世纪末二十世纪初，发现了电子、伦琴射线和放射性，实验证实了原子具有复杂的结构。为了较系统的认识原子结构，本章介绍了原子的核型结构，氢原子光谱的规律性，玻尔的氢原子理论和原子的壳层结构。本章还讨论了微观粒子的波粒二象性以及介绍分析微观粒子运动规律的薛定谔方程。

## § 1-1 原子的结构

原子的概念起源于古代。我国的墨子提出过“端”的概念，他认为物质不断地分割下去，到了一个最小的单位叫做“端”，就不能再分割下去了。与墨子同时代的希腊哲学家德谟克利特也提出了类似的学说，他把实物的最小单元称为“原子”，意即不可再分之物。这就是古代朴素的原子论。然而，这种纯朴的看法尚未经过实验的检验，还不是科学的理论。十九世纪末二十世纪初，电子、伦琴射线和放射性的发现，不但证实了原子的存在，而且发现了原子并不是什么“不可分割的最小颗粒”，而是具有复杂结构的粒子。

许多科学实验告诉我们，原子是中性的，它由带正电和带负电的两部分所组成。1911年美国物理学家密立根用油滴实验测定了电子电荷，并证明了一切荷电物质都只能带有基本电荷 $e$ 的整数倍的电量。实验测定，电子电荷（绝对值）及静止电子质量为：

$$e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ 库}$$

$$m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ 千克}$$

实验证明，电子的质量虽然只有氢原子质量的1836分之一，却不能说它是自然界质量最小的粒子。根据相对论理论，电子的质量随着它的速度增大而增大，电子电荷值 $e$ 却不随速度而改度。

既然原子是由带负电的电子和带正电的部分组成，那么，人们自然要问：原子中的电子和正电部分是怎样排列的？

### 一、原子的核型结构

1911年，卢瑟福进行了著名的 $\alpha$ 粒子散射实验，肯定了原子的核型结构。他认为原子具有与太阳系相类似的结构。原子中央是一个几乎占有全部原子质量的，带有正电荷的核，电

子在核的周围绕核转动，核的半径较原子的半径小得多，原子的直径约为  $10^{-10}$  米，而原子核的直径约为  $10^{-15} \sim 10^{-14}$  米。原子核所带的正电荷的电量和绕核的所有电子所带的负电荷的电量相等，所以整个原子呈中性。

$\alpha$  粒子的散射实验，除了证实原子的核型结构以外，还有其他的意义。确定了不同的原子核含有不同的核电荷量，对给定的元素来说，核电荷量等于  $Ze$ ，其中  $e$  是电子的电量， $Z$  称为核电荷数，也就是这一元素在门捷列夫元素周期表中的原子序数。

总之，在原子序数为  $Z$  的元素的原子内，中央是一个带正电荷为  $Ze$  的原子核，原子的质量几乎全部集中在核上，核半径的数量级为  $10^{-15} \sim 10^{-14}$  米，核外有  $Z$  个电子，分别绕核转动。例如，最简单的氢原子，仅有一个电子，氢原子的原子核具有电荷  $+e$ ，其质量约为电子的 1836 倍，称为质子。

卢瑟福的原子的核型结构，只是人们认识原子结构的一个阶段，原子的核型结构与古典电磁理论之间是有矛盾的。根据古典电磁理论，绕核转动的电子有向心加速度，电子将自动地放射辐射能使原子的能量逐渐减少，频率逐渐改变，因而所发射的光谱是连续的。同时，按古典理论，当原子自动辐射时，由于能量的减少，电子将逐渐接近原子核，最后落在核上。总之，按古典理论，原子不可能是一个稳定的系统。但事实上原子是稳定的，原子所发射的光谱是线状的而不是连续的。这些事实指明，从研究宏观现象而确定的古典理论，不能适用于原子中的微观过程，因而我们需要进一步探索原子现象的规律，并建立适合于微观过程的原子理论。直到 1913 年，玻尔发展了一种理论，才初步解决了经典理论所遇到的困难。

## 二、氢原子光谱的规律性

原子发光是重要的原子现象之一。由于原子光谱对建立原子结构的正确模型具有重要的意义，因此，在说明原子结构的量子理论之前，先从原子光谱实验规律说起。

氢原子是最简单的原子，它的光谱也是最简单的光谱。图 1-1 是氢原子在可见光区和近紫外区的发射光谱，图中  $H_\alpha$ 、 $H_\beta$ 、 $H_\gamma$ 、 $H_\delta$  等谱线的波长经实验测得为  $H_\alpha = 6562.10$  埃，

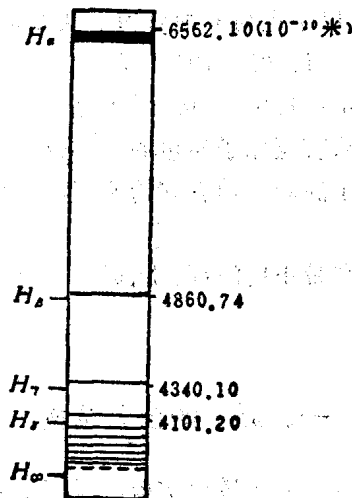


图 1-1 氢原子在可见光区和近紫外区的发射光谱

$H_\beta = 4860.74$ 埃,  $H_\gamma = 4340.10$ 埃,  $H_\delta = 4101.20$ 埃 (1埃 =  $10^{-10}$ 米)。我们把这些有规律排列的谱线统称为线系。

氢原子光谱线系有明显规律, 1885年瑞士的巴耳末首先将氢原子光谱线的波长用下列的经验公式来表示:

$$\lambda = G \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad (1-1)$$

式中 $G$ 是常数, 其量值等于 $3.6456 \times 10^{-7}$ 米,  $n$ 为正整数。当 $n$ 分别等于3, 4, 5, 6时, 可算出对应可见光区的四条谱线 $H_\alpha$ 、 $H_\beta$ 、 $H_\gamma$ 、 $H_\delta$ 的波长,  $H_\alpha$ 线的波长为 $6.5621 \times 10^{-7}$ 米,  $H_\beta$ 线的波长为 $4.8608 \times 10^{-7}$ 米,  $H_\gamma$ 线的波长为 $4.3400 \times 10^{-7}$ 米,  $H_\delta$ 线的波长为 $4.1013 \times 10^{-7}$ 米。巴耳末正确地总结出光谱线系有一个特殊的线系限, 就是当 $n = \infty$ 时, 对应的 $H_\infty$ 线的波长为 $\lambda = G = 3.6456 \times 10^{-7}$ 米。这些计算值与实验值是非常一致的。由上式所代表的氢原子光谱线系叫做巴耳末线系。氢原子的可见光谱能用这样简单的公式表示, 其结果又是如此精确, 表明了这个经验公式确实反映了氢原子本身内在的某种规律性。

由于在光谱学中, 谱线常用频率 $\nu$ 或用波数 $k = 1/\lambda$ 来表征 ( $k$ 的意义是单位长度内所含有的波数)。这样式(1-1)可以改写为

$$k = \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1-2)$$

式中常数 $R = 4/G$ 称为里德伯常数。从氢光谱的更精密测量, 获得 $R = 1.0967758 \times 10^7$ 1/米。式(1-2)称为氢原子光谱巴耳末系的里德伯公式。

里德伯、里兹等指出, 氢原子和碱金属元素的各谱线的频率或波数都可用两个函数的差值 $T(m) - T(n)$ 来表示, 函数中的参变量分别为正整数 $m$ 和 $n$  ( $n > m$ ):

$$k = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = T(m) - T(n) \quad (1-3)$$

上式称为里兹并合原理,  $R \frac{1}{m^2}$ 及 $R \frac{1}{n^2}$ 称为光谱项。对给定的 $m$ 来说,  $R \frac{1}{m^2}$ 具有一定值, 称为定项,  $R \frac{1}{n^2}$ 为可变项,  $n$ 取一系列大于 $m$ 的有序的正整数值, 这样就给出了不同谱线的波数, 这些谱线组成一个谱系。对另一给定的 $m$ 来说, 不同的 $n$ 值, 又组成另一谱系。例如在氢光谱中巴耳末系的两个谱项为 $T(m) = \frac{R}{2^2}$ 和 $T(n) = \frac{R}{n^2}$ , 前者是定项, 后者是可变项,  $n$ 取 ( $n > m = 2$ ) 3, 4, 5, 6, ... 正整数, 由上述两个谱项的差值就可给出巴耳末谱系中各谱线的相应的波数, 再利用 $k = 1/\lambda$ 的关系就可求得波长 $\lambda$ 。

在氢原子光谱中, 除可见光区的巴耳末线系外, 还有紫外光和红外光的光谱线系。

在紫外光区的光谱线系 $m = 1$ 称为赖曼系, 可用下式表示:

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

在红外光区的光谱线有帕邢系

$$m = 3, \quad k = R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 4, 5, 6, \dots \quad (1-5)$$

布喇咯系

$$m = 4, \quad k = R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 5, 6, 7, \dots \quad (1-6)$$

普芳德系

$$m = 5, \quad k = R \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 6, 7, 8, \dots \quad (1-7)$$

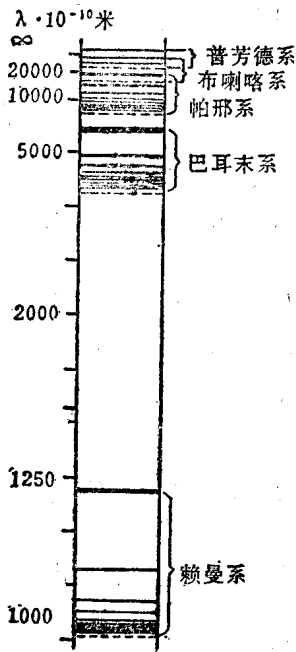


图 1-2 完整的氢原子光谱图

图(1-2)为完整的氢原子光谱图。图中谱线强度大致用线的宽度表示，虚线相当于线系极限。

通过氢原子光谱规律性的讨论，可以总结出如下几点：

(1) 谱线的波数由两个谱项的差值来决定。

(2) 如果前项保持定值，后项随整数参变量而改变，那末，就能给出同一谱系中各谱线的波数。

(3) 改变定项的数值，就能给出不同的谱系。

里兹并合原理不仅适用于氢原子光谱中的各谱线系，对其他原子光谱也有参考价值，因此，这个原理是光谱分析的重要工具，也是探索原子内部结构的很有价值的线索。

以后我们将看到，原子只能存在于某些稳定的状态，这些状态的能量形成不连续的

系列。每一稳定的能量状态相当于每一光谱项，每一个发射的频率是和两个稳定状态联系着的。

## § 1-2 电子运动的轨道理论

原子中电子如何运动？它遵循什么规律？这些是人们长期来致力于研究的问题。本节以轨道理论来讨论这个问题。尽管用轨道理论来描述电子的运动状态不那么严密，但由于轨道

的概念比较直观，容易被人们所理解，又能说明一些问题，因此有一定的实用价值。

## 一、玻尔理论

1913年，丹麦物理学家玻尔以卢瑟福的原子核模型为基础，应用库仑定律和牛顿定律，同时将普朗克的量子理论应用到原子系统，使氢光谱规律获得初步的解释。

玻尔理论的基本假设有

(1) 原子系统只能具有一系列的不连续的能量状态，在这些状态中，电子虽然作加速运动但不辐射电磁能量，这些状态称为原子系统的稳定状态，相应的能量分别为  $E_1, E_2, E_3, \dots (E_1 < E_2 < E_3 < \dots)$ 。

(2) 只有当原子从一个具有较大能量  $E_n$  的稳定状态跃迁到另一个较低能量  $E_m$  的稳定状态时，原子才发射单色光，频率  $\nu_{nm}$  由下式决定：

$$\nu_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h} \quad (1-8)$$

式中  $h$  为普朗克恒量， $h = 6.625 \times 10^{-34}$  焦耳·秒。

(3) 在电子绕核作圆周运动中，不同的可能的稳定状态决定于下列条件：电子的动量矩  $p$  等于  $\frac{h}{2\pi}$  的整数倍，即

$$p = n \frac{h}{2\pi}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-9)$$

式中  $n$  为正整数，称为量子数，式 (1-9) 称为量子条件。

## 二、电子的运动状态

下面我们根据玻尔的基本假设，计算氢原子系统在稳定状态中的能量。首先计算电子圆周运动的轨道半径。

### 1. 电子的稳定轨道半径

设原子核的正电荷为  $Ze$ ，其中  $Z$  为原子序数， $e$  为电子电量的绝对值。对于氢原子取  $Z = 1$ ，假设电子的质量为  $m_e$ ，绕原子核运动的圆周轨道半径为  $r$ ，速度为  $v$ ，那末电子的向心加速度  $a = \frac{v^2}{r}$ ，则电子所受到的向心力  $F = m_e a = m_e \frac{v^2}{r}$ 。又按库仑定律，原子核对电子的引力为  $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$ 。由于向心力只能由核的正电荷和电子间的库仑引力来提供，因此，

$$m_e \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (1-10)$$

根据玻尔第 (3) 个假设，电子在稳定轨道上运动时，动量矩应满足式 (1-9)， $p = m_e v r = n \frac{h}{2\pi}$ ， $n = 1, 2, 3, \dots$ 。解式 (1-9)、(1-10) 两式并以  $r_n$  代替  $r$ ， $v_n$  代替  $v$ ，得

$$r_n = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{\pi m_e e^2} \quad (1-11)$$

式(1-11)表示了原子中第 $n$ 个稳定轨道的半径 $r_n$ 与量子数 $n$ 的平方成正比,其量值是不连续的,所以,我们说,在原子系统中,电子只能在一系列一定大小的、彼此分离的量子化的轨道上运动。

对于氢原子,当 $n=1$ 时,

$$\begin{aligned} r_1 = a_0 &= \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} = \frac{8.85 \times 10^{-12} \times (6.625 \times 10^{-34})^2}{3.14 \times 9.11 \times 10^{-31} \times (1.602 \times 10^{-19})^2} \\ &= 5.3 \times 10^{-11} \text{ (米)} = 0.53 \text{ (埃)} \end{aligned} \quad (1-12)$$

$a_0$ 称为“玻尔半径”。

将式(1-12)代入式(1-11),得

$$r_n = n^2 a_0 \quad (1-13)$$

所以,对于氢原子的可能的稳定轨道半径是

$$r = a_0, 4a_0, 9a_0, 16a_0, \dots$$

即氢原子的稳定轨道半径分别是玻尔半径 $a_0$ 的1, 4, 9, 16, ...倍。

## 2. 能量量子化(能级)

电子在量子数为 $n$ 的轨道上运动时,原子系统的总能量 $E_n$ 等于电子的动能 $\frac{1}{2}m_e v_n^2$ 和电

子与原子核之间的位能 $-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}$ 的代数和,即

$$E_n = \frac{1}{2} m_e v_n^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}$$

对于氢原子来说, $Z=1$ ,所以

$$E_n = \frac{1}{2} m_e v_n^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}$$

由式(1-10)可知 $\frac{1}{2} m_e v_n^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n}$ 代入上式,再将式(1-11)中 $r_n$ 的值代入,整理后可得到

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2} \text{ (焦耳)} \quad (1-14)$$

式(1-14)表示电子在第 $n$ 稳定状态中原子系统的能量。量子数 $n$ 可取1, 2, 3, ...任意正整数,为了和以后提到的量子数区别起见, $n$ 就称为主量子数。

对氢原子,当 $n=1$ 时将 $m_e$ ,  $e$ ,  $\epsilon_0$ ,  $h$ 各数值代入式(1-14),则

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{9.11 \times 10^{-31} (1.602 \times 10^{-19})^4}{8 (8.85 \times 10^{-12})^2 \times (6.625 \times 10^{-34})^2} \\ &= -21.8 \times 10^{-19} \text{ (焦耳)} = -13.6 \text{ (电子伏)} \end{aligned}$$

而  $E_n = \frac{E_1}{n^2} = -\frac{13.6}{n^2} \text{ (电子伏)} \quad (1-15)$

$n=1, 2, 3, \dots$ 。由此可以说明氢原子系统能量的数值是一定的,不连续的,是量子化的。

这种量子化的能量值称为能级。

当  $n \rightarrow \infty$  时,  $E_n \rightarrow 0$ , 即随着  $n$  的增大, 能级逐渐靠近,  $n$  很大时, 就趋近于经典的连续能谱, 如图 1-3 所示。

下面我们根据玻尔理论来进一步讨论氢原子的能级和光谱。

根据玻尔第二个假设, 原子系统中电子从较高能级  $E_n$  跃迁到较低能级  $E_m$  时, 发射单色光, 其频率或波数分别为

$$\nu_{mn} = \frac{E_n - E_m}{h}$$

$$k_{mn} = \frac{\nu_{mn}}{c} = \frac{E_n - E_m}{hc}$$

式中的  $E_m$  和  $E_n$  相应的量子数分别为  $m$  和  $n$ 。  $E_m$  和  $E_n$  的值利用公式 (1-14) 代入。即得

$$\nu_{mn} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$k_{mn} = \frac{\nu_{mn}}{c} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$= R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1-16)$$

$$R = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} = 1.097373 \times 10^7 \text{ (米}^{-1}\text{)} \quad (1-17)$$

在式 (1-16) 中, 如果令  $m=2$ , 得  $k = R \times \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ 。这一表达式在形式上与式 (1-2) 完全相同, 并且  $R$  的理论值与经验公式 (1-2) 中的  $R$  实验值是十分符合的, 可以说式 (1-17) 为里德伯恒量提供了理论的解说。

根据玻尔理论, 氢原子光谱的产生可解释如下: 由式 (1-15) 可知,  $n$  愈大, 原子系统的能量  $E_n$  的绝对值愈小, 但代数值愈大, 亦即电子离核愈远; 原子能量愈大, 电子在第一轨道亦即最内层轨道 ( $n=1$ ) 时, 能量最小, 原子最为稳定, 这种状态称为基态或正常状态。量子数  $n$  大于 1 的各个稳定状态, 其能量大于基态的称为受激态。当原子由正常状态跃迁到受激状态时, 原子必须吸收一定的能量。例如原子受到辐射的照射或高能粒子的撞击等, 这时电子可由第一轨道跃迁到量子数较大的轨道上运动。处于受激状态的原子能够自发地跃迁到能量较低的受激状态或正常状态, 在跃迁过程中将发射一个一定频率的光子, 其波数由式 (1-16) 决定。图 1-4 是氢原子的电子轨道和状态跃迁图。

不难看出, 巴耳末谱系是当氢原子中的电子从不同的较外层的稳定轨道跃迁到第二轨道时所发射的谱线, 跃迁到第一轨道时, 发射赖曼系。其余类推。

与轨道对应的能量只能是不连续的数值, 是量子化的, 图 1-3 已画出了氢原子的能级图, 现在在图 1-3 的基础上画出各种谱线系的跃迁情况, 如图 1-5 所示。

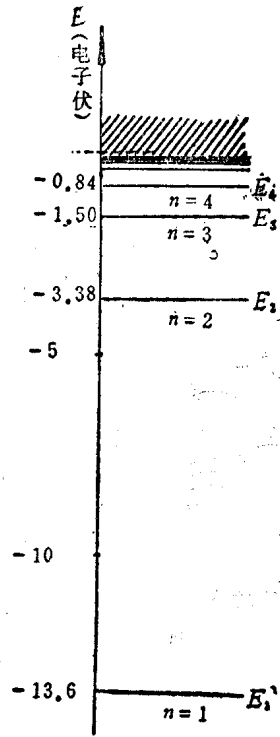


图 1-3 氢原子的能级

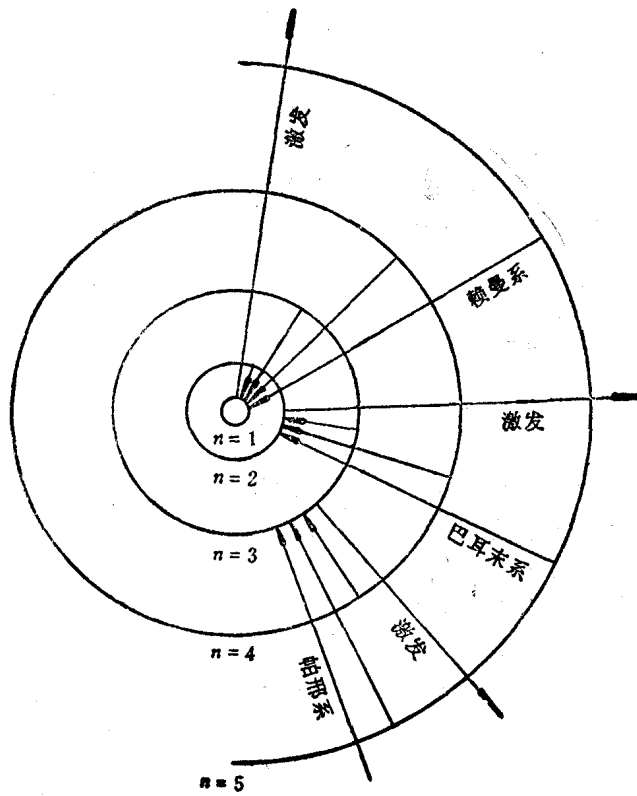


图 1-4 氢原子的电子轨道和状态跃迁图

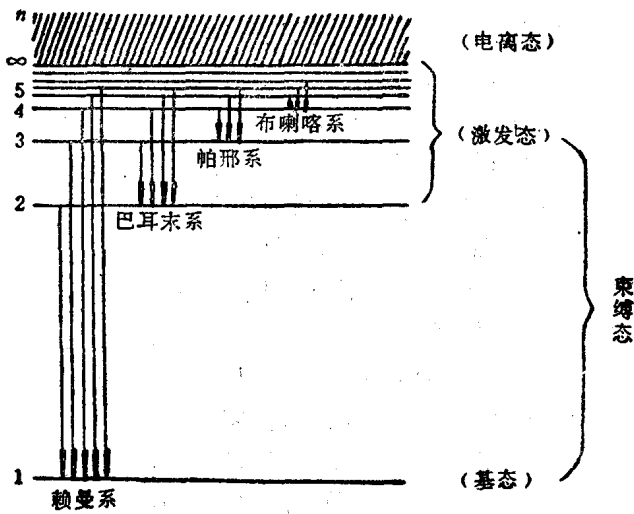


图 1-5 氢原子能级



图 1-5 中每一横线代表一个能级，横线之间的距离表示能级的间隔，即能量的差别。图 1-4 和图 1-5 两图中每一能级和轨道的对应关系以同一量子数  $n$  表示。由式 (1-11) 和式 (1-14) 可知，轨道半径  $r_n$  与  $n^2$  成正比，而能量的绝对值与  $n^2$  成反比。邻近轨道的间距随  $n$  的增加而增大，而邻近的能级的间隔随  $n$  的增加而渐减，乃至趋近于零。 $n=1$ ， $r_1$  最小， $E_1$  最低，原子最稳定，称为基态。 $n=2, 3, 4, \dots$ ， $r_n$  依次增大， $E_n$  能级依次升高，统称为激发态。基态和激发态的电子都还没有脱离原子核，所以都是束缚态。直到  $n=\infty$ ， $E_\infty=0$  之上，即  $E \geq 0$  时，电子才脱离原子，这种状态对应于氢原子的电离态，此时能级是连续的，不再受量子化条件的限制，在图 1-5 上用斜线阴影表示。

当氢原子由一个能级跃迁到另一能级时，就产生一条谱线，用两能级之间的矢线表示。矢线的长度与谱线的波数成正比，即跃迁间距大，所发射的光的波长就短，所以各谱系落在不同的光谱区。在同一谱线系中，也是跃迁的能级间隔越大，谱线的波长越短。但随着间隔的增加，每次的增加量逐渐减少，趋近于零。这说明每一谱线系中的谱线的间隔，向着短波方向递减，在达到线系极限处，趋近于零。

图 1-6 表示一个谱线系中各谱线的分布情况。 $n$  愈大，能级愈密，因而在同一谱系（给定  $m$  值，不同的  $n$  值）中， $n$  愈大，相应的谱线愈靠近短波区域，谱线分布也愈密。

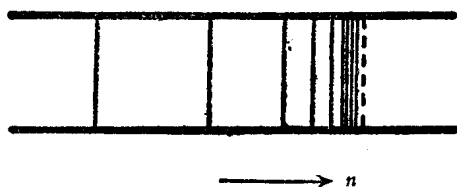


图 1-6 一个谱线系中各谱线的分布

由本节所述可见，玻尔理论在一定程度上准确地反映了单电子的原子系统（包括氢原子和类氢离子）的结构及其运动变化的规律。应该注意，在某一瞬时，一个氢原子只能发射一个一定频率的光子，这一频率相应于一条谱线，不同受激状态的氢原子才能发射不同的谱线。通常在实验中观察到的是大量受激原子所发射的光，所以我们能够同时观察到全部谱线。

### 3. 椭圆轨道

玻尔氢原子理论很成功地解释了氢原子光谱的规律性，但在说明碱金属光谱的双线性性质和其他元素的复线性质的时候，玻尔理论遇到了严重的困难。例如，钠原子是一个多电子的原子，它的光谱黄线（ $\lambda = 5.890 \times 10^{-7}$  米）却不能从玻尔理论中计算出来。这就要求对玻尔理论作合理的补充。

1916年，德国物理学家索末菲提出椭圆轨道的理论。他把玻尔关于电子稳定轨道的量子条件加以合理的发展。索末菲认为，电子绕原子核在一个平面上作椭圆运动是二个自由度的运动，应该用两个量子条件。

如图 1-7 所示，描述椭圆运动中电子位置可用极坐标。矢径为  $r$ ，极坐标角为  $\phi$ ，坐标原点取在原子核的位置，相当于椭圆的两个焦点之一。与  $r$  和  $\phi$  两个坐标对应的动量矩是径向动量矩  $p_r$  和角动量矩  $p_\phi$ 。此时，与 (1-9) 式相当的角动量量子条件为

$$p_\phi = n_\phi \frac{h}{2\pi} = n_\phi h \quad (1-18)$$