

材料物理基础

第2版

任凤章 主编



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

材料物理基础

第2版

任凤章 主编

机械工业出版社

材料物理是介于物理学与材料学之间的一门边缘学科,所涉及面极广,它旨在利用物理学中的一些基础知识来阐明材料的各种物理性能和转变过程。本书突出基础,略去一些过于深奥的专业阐述,突出物理学的主干,从物理学的一些基本概念、基本原理和基本定律出发,阐述材料本身的结构、性质和它们在一些外界条件下发生的变化及其变化规律。本书共分9章。前3章扼要介绍固体材料物理所涉及的量子力学概念、统计力学基本知识、经典物理学方面的波动现象、原子结构、化学键、晶体结构及金属中的电子态,为没有学过固体物理的读者提供一些基础知识。其第4~第7章主要介绍材料的热、电、磁及介电性能的物理本质。第8章介绍第一性原理的基础理论、计算方法和应用。第9章介绍原子间相互作用对势、多体势和晶格反演势。

本书可作为材料科学与工程类专业硕士研究生的教材或参考书,也可供材料科学与工程领域的大专院校教师和科技工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

材料物理基础/任凤章主编.—2版.—北京:机械工业出版社,2012.5
ISBN 978-7-111-39868-4

I. ①材… II. ①任… III. ①材料科学—物理学—高等学校—教材
IV. ①TB303

中国版本图书馆CIP数据核字(2012)第226365号

机械工业出版社(北京市百万庄大街22号 邮政编码100037)

策划编辑:张秀恩 责任编辑:张秀恩

版式设计:霍永明 责任校对:刘志文

封面设计:陈沛 责任印制:乔宇

三河市宏达印刷有限公司印刷

2012年5月第2版·第1次印刷

169mm×239mm·21.75印张·423千字

标准书号:ISBN 978-7-111-39868-4

定价:39.00元

凡购本书,如有缺页、倒页、脱页,由本社发行部调换

电话服务

网络服务

社服务中心:(010) 88361066

教材网:<http://www.cmpedu.com>

销售一部:(010) 68326294

机工官网:<http://www.cmpbook.com>

销售二部:(010) 88379649

机工官博:<http://weibo.com/cmp1952>

读者购书热线:(010) 88379203

封面无防伪标均为盗版

第 2 版前言

本书第 1 版 2006 年出版, 2008 年第二次印刷, 被国内多所高校选为研究生教材。教学实践表明, 本书的总体结构和内容深浅程度是合适的, 但也存在着一些问题, 主要是未对目前广泛应用的一些新理论进行介绍。因此, 根据材料物理的发展, 对本书进行修订再版。

第一性原理计算, 是基于量子力学理论在电子水平上对材料进行计算设计。因其不含任何可调(经验或拟合)参数, 就可以通过求解薛定谔方程, 得到材料的电子结构, 预测材料的组分、结构与性能, 设计具有特定性能的新材料, 从而在材料科学研究中具有重要的地位。原子间相互作用势是所有有关原子水平上的计算机模拟的基础, 广泛应用于物理、化学、材料科学中, 在材料的缺陷、表面和界面、断裂、团簇的结构及其他温度特性的计算模拟中起着重要的不可替代的作用。因此, 本书在原有内容的基础上增加了第一性原理计算和原子间相互作用势两部分内容, 以适应材料学科快速发展的需要。

本书这次修订主要在两个方面: 第一, 对第 1 版章节中个别的难以理解的句子重新书写, 并对一些不妥之处进行修改。第二, 增加了两章新内容, 分别是第 8 章的第一性原理计算和第 9 章的原子间的作用势。

新增内容第 8 章和第 9 章由河南科技大学龙永强编写。第 1 章~第 5 章修订由河南科技大学任凤章完成, 第 6 章、第 7 章修订由河南科技大学龙永强完成。河南科技大学文九巴教授对本书的修订给予了很大的支持和帮助。

虽然本书进行了修订, 但不妥之处仍难免, 敬请广大读者继续提出宝贵意见。

河南科技大学 任凤章

2011 年 8 月

第 1 版前言

材料物理是介于物理学和材料学之间的一门边缘学科，它旨在从物理的微观角度来讨论固体材料的各种性能。要了解材料的性能，不能只满足于实验研究，还必须深入研究材料的内部组织、结构。这样，就要涉及到组成材料的原子运动、电子态、杂质和缺陷及相结构等问题，将材料的各种性能提到微观理论的高度来研究，为改善材料的各种性能和发展新材料奠定基础。因此，本书突出物理学的主干，从物理学的一些基本概念和基本原理出发，解释材料在一些外界条件下出现的一些物理现象和效应。本书可作为材料科学与工程类专业硕士研究生的教材或参考书，也可供材料科学与工程领域的大专院校教师和科技工作者参考。

材料涉及的范围很广，其中的固体材料就包括金属、高分子、无机非金属材料，每种材料的物理性能又是多种多样。因而，材料物理涉及的范围也很广，本书遴选固体材料物理中一些最基础、最基本的内容。全书共分 7 章，各章内容简介分述如下：第 1 章概括性地叙述了固体材料物理所涉及的量子力学概念、统计力学基本知识及经典物理学方面的波动现象。为非物理专业的读者接受微观现象中的量子效应奠定基础。第 2 章介绍材料中原子结构、化学键和晶体结构的基本理论。第 3 章介绍金属的电子理论，重点讨论量子自由电子理论和能带理论。第 4 章首先介绍晶格振动的经典理论和量子理论，在此基础上，重点讨论晶体的热容、热膨胀和热传导的机理及变化规律。第 5 章介绍金属、半导体和超导体电导的物理基础。第 6 章介绍电介质在不同频率、不同场强的电场作用下所表现出的现象，物质内部的电极化过程以及铁电体的非线性介电、压电、热电效应等。第 7 章介绍了原子磁矩、物质磁性的分类、铁磁性的分子场理论、亚铁磁性的超交换理论，也介绍铁磁性物质内部的能量和磁畴的形成。因材料科学与工程类专业的一些教科书和参考书对晶体中的扩散和相变及晶体缺陷都有较详细的叙述，本书略去本该列入的此部分内容。

本书由河南科技大学任凤章博士主持编写，各章节分别由河南科技大学贾淑果博士（第 1 章）、任凤章博士（第 3 章，第 4 章，第 5 章，第 6 章），清华大学李锋军博士（第 2 章 2.1、2.1 节，第 7 章），河南科技大学祝要民博士（第 2 章 2.3 节）撰写。河南科技大学刘平教授、田保红教授和文九巴教授对本书的撰写给予了高度关注，并提出了许多好的建议。全书由任凤章统稿。编写过程中参考了一些相关的文献，已在书后列出，谨此对有关学者表示感谢，如有疏漏，敬请

包涵。

感谢河南科技大学学科建设办公室和材料科学与工程学院对本书出版的大力支持。本书获河南科技大学学术著作出版基金资助。

由于编者水平所限，加之时间仓促，书中的缺点、错误恐怕不少，恳请读者批评指正。

编 者

2006年8月

目 录

第 2 版前言

第 1 版前言

第 1 章 固体物理基础	1
1.1 量子力学引论	1
1.1.1 早期量子论	1
1.1.2 德布罗意物质波	12
1.1.3 测量和测不准原理	16
1.1.4 薛定谔方程	19
1.2 波动现象	22
1.2.1 波的基本方程式	22
1.2.2 谐波	23
1.2.3 变数分离	24
1.2.4 波的叠加	26
1.2.5 傅里叶解析	29
1.2.6 波束(波包)	31
1.2.7 波束的运动	32
1.3 统计力学概要	33
1.3.1 系统的微观运动状态描述	33
1.3.2 分布和微观状态	36
1.3.3 玻尔兹曼分布	38
1.3.4 玻色分布和费米分布	40
第 2 章 原子结构、化学键及晶体结构	42
2.1 原子结构	42
2.1.1 氢原子	42
2.1.2 核外电子的排布规律及周期表中各元素原子的电子层结构	51
2.2 分子结构与化学键	56
2.2.1 原子间作用力及由来	57
2.2.2 化学键	60
2.3 晶体结构	68
2.3.1 晶体学基础	68
2.3.2 典型晶体结构	75

第3章 金属电子论	82
3.1 经典自由电子论	82
3.1.1 经典自由电子论的基本假设	82
3.1.2 经典自由电子论的主要成就	82
3.1.3 经典自由电子论遇到的困难及原因	84
3.2 量子自由电子理论	84
3.2.1 阱内势能为零的电子状态	85
3.2.2 三维自由电子	87
3.2.3 量子自由电子理论对金属导电及电子摩尔热容的解释及遇到的问题	91
3.3 周期势场和布洛赫 (A. Bloch) 定律	92
3.3.1 周期势场	92
3.3.2 布洛赫定律	93
3.3.3 克勒尼希—彭尼 (Kronig-Penney) 模型	95
3.4 能带理论	98
3.4.1 准自由电子近似	98
3.4.2 紧束缚电子近似 (原子轨道线性组合法)	105
3.5 能带中的电子运动	110
3.5.1 电子速度 $v(k)$ 与波矢 k 的关系	110
3.5.2 有效质量 m^* 与波矢大小 k 的关系	112
3.6 能带理论的简单应用	113
3.6.1 导体、半导体和绝缘体的能带	113
3.6.2 金属的能带	115
3.6.3 合金中的能带	118
第4章 晶格振动和晶体的热学性质	121
4.1 晶格振动的经典理论	121
4.1.1 一维简单晶格振动	122
4.1.2 一维复式格子振动	124
4.1.3 声学波和光学波	126
4.1.4 周期性边界条件 (玻恩—冯卡门 (Born-von-Karman) 边界条件)	128
4.2 晶格振动的量子化	129
4.2.1 一维简单晶格振动的总能量	129
4.2.2 三维复式格子的总能量	131
4.3 固体的热容	132
4.3.1 晶态固体热容的经验定律和经典理论	133
4.3.2 晶态固体热容的量子理论	134

4.3.3 固体热容与组织及状态的关系	138
4.4 固体的热膨胀	140
4.4.1 晶格振动的非谐效应——热膨胀的物理本质	141
4.4.2 热膨胀系数与其他物理量之间的关系	142
4.4.3 固体材料热膨胀的一些规律	144
4.5 固体热膨胀的反常现象	146
4.5.1 因瓦效应的微观机制	147
4.5.2 因瓦合金的一些特性	149
4.6 固体的热传导	149
4.6.1 固体材料热传导的宏观规律	149
4.6.2 固体传热的微观机理	150
4.6.3 影响热导率的因素	155
第5章 材料的电导性能	160
5.1 金属材料的电导性能	160
5.1.1 金属材料电导机制与马基申定理	160
5.1.2 影响纯金属导电的因素	161
5.1.3 固溶体合金的导电特性	165
5.1.4 金属化合物、中间相及多相合金导电性	167
5.2 半导体导电性能	169
5.2.1 本征半导体	169
5.2.2 杂质半导体	172
5.2.3 半导体的表面能级	177
5.2.4 半导体接触	178
5.3 超导体	185
5.3.1 超导态三个重要特征	186
5.3.2 超导态三个性能指标	188
5.3.3 两类超导体	189
5.3.4 超导现象的物理本质	189
第6章 材料的介电性能	192
6.1 电介质的极化	193
6.1.1 极化现象及物理量	193
6.1.2 宏观极化强度与微观极化率的关系（在静电场中）	194
6.1.3 电介质极化机制	197
6.2 交变电场下的电介质行为	207
6.2.1 复介电常数和介质损耗	207

6.2.2 电介质弛豫和频率响应	208
6.2.3 介电损耗分析	211
6.3 电介质在电场中的破坏	213
6.3.1 热击穿机制	213
6.3.2 电击穿机制	215
6.3.3 局部放电击穿	217
6.4 铁电性	217
6.4.1 铁电体、电畴	218
6.4.2 钛酸钡自发极化的微观机理及电畴的形成	219
6.4.3 铁电体的临界性质	221
6.5 压电性和热释电性	223
6.5.1 压电性	223
6.5.2 热释电性	228
第7章 材料的磁性能	230
7.1 磁学基本量及物质磁性分类	230
7.1.1 磁学基本量	230
7.1.2 物质的磁性分类	231
7.2 原子和离子的固有磁矩	232
7.2.1 孤立原子(离子)本征磁矩	232
7.2.2 固体中的原子(离子)磁矩	236
7.3 物质的抗磁性和顺磁性	238
7.3.1 抗磁性	238
7.3.2 顺磁性	238
7.3.3 抗磁性金属与顺磁性金属	240
7.4 铁磁体(包括铁氧体)自发磁化	241
7.4.1 外斯(P. E. Weiss)铁磁性假说	241
7.4.2 直接交换作用	242
7.4.3 间接交换作用	244
7.5 铁磁体中的磁晶各向异性、磁致伸缩	248
7.5.1 磁晶各向异性	248
7.5.2 退磁场能	250
7.5.3 磁致伸缩	250
7.6 畴壁与磁畴结构	251
7.6.1 畴壁	252

7.6.2 磁畴	253
7.6.3 单畴结构	256
第 8 章 第一性原理计算	257
8.1 引言	257
8.2 第一性原理的基础理论	258
8.2.1 多原子体系的薛定谔方程 (Schrödinger function)	258
8.2.2 密度泛函理论 (DFT)	262
8.2.3 交换关联能泛函	265
8.2.4 赝势 (Pseudopotential)	267
8.3 第一性原理的计算方法	271
8.3.1 波函数的展开	271
8.3.2 自洽场 (SCF) 运算	275
8.3.3 结构优化	278
8.3.4 能带计算	280
8.3.5 晶体物理性质的计算	281
8.4 常用的第一性原理计算软件	283
8.4.1 CASTEP 软件包	283
8.4.2 WIEN 软件包	284
8.4.3 ABINIT 软件包	284
8.5 第一性原理方法在材料科学研究中的应用	285
8.5.1 Cu-Ni-Si 合金析出相稳定性的第一性原理研究	285
8.5.2 BN 电子结构的第一性原理计算	291
8.5.3 TiB 弹性性质的第一性原理计算	294
第 9 章 原子间相互作用势	296
9.1 原子间相互作用势概述	296
9.2 原子间相互作用对势的形式	297
9.2.1 “刚球”模型	297
9.2.2 Buckingham 势	298
9.2.3 Lennard-Jones (L-J) 势	299
9.2.4 Morse 势	299
9.2.5 Bom-Mayer 势	300
9.2.6 多项式形式的势	300
9.3 原子间相互作用多体势模型	301
9.3.1 Tersoff 和 Brenner 势	301
9.3.2 Stillinger-Weber 势	304

9.3.3 Slater-Kirkwood 类型的三体势	305
9.3.4 Chelikowsky-Philips-Kamal-Strauss 势	306
9.3.5 Khor-Das Sarma 势	306
9.3.6 Biswas-Hamann 势	307
9.3.7 Murrell-Mottram 势	307
9.3.8 Erkoc 势	308
9.4 嵌入 (埋入) 原子势 (Embedded-atom method, EAM)	308
9.4.1 原子对势理论与准费米子理论和有效介质理论	308
9.4.2 原型 EAM 理论	309
9.4.3 分析型嵌入原子 (AEAM) 理论	311
9.4.4 改进分析型 EAM 模型 (MAEAM)	312
9.5 Finnis-Sinclair (F-S) 多体势	324
9.5.1 F-S 多体势的初始模型	324
9.5.2 改进的 F-S 多体势模型	325
9.5.3 立方样条函数的 F-S 多体势模型	326
9.5.4 合金中的 F-S 多体势	326
9.6 晶格反演方法 (LIM)	329
9.6.1 Carlsson-Gelatt-Ehrenreich (CGE) 公式	329
9.6.2 LIM 与异种原子间的对势反演	330
9.6.3 LIM 与原子间的多体势反演	331
9.6.4 陈氏三维晶格反演 (Chen-Möbius)	332
参考文献	335

第 1 章 固体物理基础

固体物理所采用的方法，是从原子论的观点出发，把观察到的各种宏观现象（导电性、介电性、磁性等）看成是构成一切物质的原子或原子集团的行为，应用量子力学和统计力学对它们作统一的论述。因此，本章将扼要介绍后面固体材料物理所涉及的量子力学概念和统计力学基本知识。同时，本章也将简要介绍经典物理学方面的波动现象，有助于理解量子论中的波动现象。

1.1 量子力学引论

量子力学是与 20 世纪一起来到人间的。这门理论为什么叫力学，“力学”这个名词的物理学的广阔定义是物质的运行原理。其次，为什么叫量子？在拉丁文里，量子的意思是“分立的部分”或“数量”。量子力学所讨论的就是物质世界的诸种特性中的“分立性”。量子力学是解释构成一切物质的原子和原子集团所表现的宏观现象（电导率、介电常数、磁导率等）的行为的科学。

量子力学的建立，揭示了微观世界的基本规律，使人们对自然界的认识产生了一个飞跃，为原子物理学、固体物理学和粒子物理学的发展奠定了理论基础。同时，量子力学也深入到化学，生物学等其他领域，形成了量子化学、分子生物学等边缘学科。量子力学的诞生，还大大推动了新技术的发展，如晶体管、集成电路、激光、超导材料等，促进了生产力的提高。

19 世纪末，物理学理论已发展到相当完善的阶段。物体的机械运动在速度远比光速小时准确地遵从牛顿力学的规律；电磁现象的规律（包括光的波动理论）总结为麦克斯韦方程组；热现象也有完整的热力学和经典统计物理的理论。当时有不少物理学家认为，物理学的大厦已经基本建成。正当物理学家为经典物理学理论的辉煌成就而欢欣鼓舞之际，一些新的实验事实与经典物理学理论发生尖锐的矛盾。例如，迈克耳孙—莫雷实验没有提供绝对静止的状态存在的证据，黑体辐射的“紫外灾难”等，使经典物理面临新的危机，以致开尔文（L. Kelvin）把这些矛盾说成是在物理学晴朗天空的“两朵乌云”。相对论和量子论的建立驱散了这两朵乌云，开创了物理学中一场深刻的革命。

1.1.1 早期量子论

1900 年，普朗克（M. Planck）为了解释黑体辐射问题，提出了振荡偶极子的

能量是以不连续的量值改变的量子假设,并导出了与实验结果相符合的黑体辐射公式。以后在爱因斯坦(A. Einstein)、康普顿(A. H. Compton)的理论中进一步提出了“光子学说”,认识到电磁辐射以微粒的形式吸收和发射,从而揭示了光具有微粒和波动的双重特性,称为光的波粒二象性。在普朗克、爱因斯坦明确了光的量子性以后,1913年玻尔(N. Bohr)根据卢瑟福(E. Rutherford)的原子有核模型以及原子光谱的规律性,提出氢原子的量子论,初步奠定了原子物理学的基础。但是,由于当时对微观粒子的基本属性缺乏认识,玻尔的理论本身仍有其不可克服的缺点。

直到1924年,德布罗意(L. de Broglie)在光具有波粒二象性的启发下,认为微观实物粒子(如电子、质子、中子等)与光子一样,也具有波粒二象性,提出了物质波的假说,这一假设不久为电子衍射实验所证实。1925年至1932年间,薛定谔(E. Schrödinger)、海森伯(W. K. Heisenberg)、玻恩(M. Born)、狄拉克(P. A. M. Dirac)等人在物质波假设的基础上建立起描写微观实物粒子运动的新理论,称为量子力学。

1. 热辐射和普朗克的能量子假设

(1) 绝对黑体热辐射实验

任何固体或液体,在任何温度下都在发射各种波长的电磁波,这种由于物体中的分子、原子受到热激发而发射电磁波的现象称为热辐射。物体向四周所发射的能量称为辐射能。实验表明,热辐射具有连续的辐射能谱,波长自远红外区延伸到紫外区。并且辐射能按波长的分布主要决定于物体的温度。

在单位时间内,从物体表面单位面积上所发射的波长在 λ 到 $\lambda+d\lambda$ 范围内的辐射能 dM_λ ,与波长间隔 $d\lambda$ 成正比,比值 $dM_\lambda/d\lambda$ 称为单色辐出度,用 M_λ 表示。单位时间内从物体表面单位面积上所发射的各种波长的总辐射能,称为物体的辐出度,用 $M(T)$ 表示。在一定温度 T 时,物体的辐出度与单色辐出度的关系为

$$M(T) = \int_0^\infty M_\lambda(T) d\lambda \quad (1-1)$$

根据基尔霍夫(G. R. Kirchhoff)辐射定理,只要知道黑体的辐射度以及物体的吸收比,就能了解一般物体的热辐射性质。因此,从实验和理论上确定黑体的单色辐出度就是研究热辐射问题的中心。绝对黑体就像质点、刚体、理想气体等模型一样,也是一种理想化的模型。可以用不透明材料制成开小孔的空腔,作为在任何温度下能100%地吸收辐射能的黑体模型。可用实验方法测定绝对黑体的单色辐出度 $M_{0\lambda}(T)$ 。图1-1表示黑体在不同温度 T 下的 $M_{0\lambda}(T)$ 随 λ 变化的实验曲线。

(2) 绝对黑体热辐射理论解释

1) 维恩(W. Wien)公式 在经典物理学中,把组成黑体空腔壁的分子或原子看作带电的线性谐振子。1896年,维恩假设,平衡辐射时黑体辐射的能量按频

率分布, 和同温度的理想气体分子按动能的麦克斯韦分布规律类同, 从而得出辐射空腔中能量密度分布函数 $M_{0\lambda}(T)$ 为

$$M_{0\lambda}(T) = c_1 \lambda^{-5} e^{-\frac{c_2}{\lambda T}} \quad (1-2)$$

式中, c_1 和 c_2 为常数; λ 为波长 ($\nu = c/\lambda$, ν 为频率, c 为光速)。此式为维恩 (W. Wien) 公式。维恩 (W. Wien) 公式在波长较短、温度较低时, 才与实验结果相符, 而在长波区与实验曲线相差很大, 如图 1-2 所示 (某一温度下)。

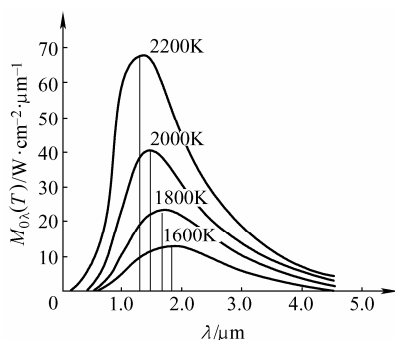


图 1-1 绝对黑体的辐出度按波长分布曲线

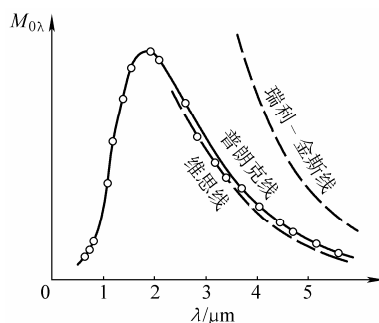


图 1-2 黑体辐射的理论公式与实验结果比较
(○—实验结果)

2) 瑞利 (Lord Rayleigh) - 金斯 (J. H. Jeans) 公式 维恩的假设是缺乏根据的, 其理论结果与实际不符并未引起人们的重视和惊奇。1900 年至 1905 年间, 瑞利和金斯认为辐射空腔内的电磁辐射, 由于腔壁反射形成很多驻波。根据经典电磁理论, 他们算出单位体积内, 频率在 ν 到 $\nu + d\nu$ 之间振动的数目为 $(8\pi\nu/c^3)d\nu$, 这里 c 为光速。如果认为经典统计方法也适用于电磁辐射, 那么, 按经典统计能量均分定理, 每一个振动方式的平均能量为 kT (k 是玻尔兹曼常数), 这样在 ν 至 $\nu + d\nu$ 之间的能量为

$$M_{0\lambda}(T)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT d\nu \quad (1-3)$$

即

$$M_{0\lambda}(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \quad (1-4)$$

式 (1-4) 称为瑞利-金斯公式。这个公式虽然在低频部分与实验符合, 但由于辐射的能量与频率的平方成正比, 所以随频率增大而单调增加, 在高频部分趋于无限大, 即在紫端发散, 后来这个失败被埃伦菲斯特 (B. Ehrenfest) 称为“紫外灾难”。瑞利-金斯公式是用经典物理学的方法来研究热辐射所得的结果, 与实验结果不相符合, 明显地暴露了经典物理学的缺陷。因此, 开尔文 (Lord Kelvin) 认为黑体

辐射实验是物理学晴朗天空中一朵令人不安的乌云。

3) 普朗克公式和能量子 为解决维恩公式和瑞利-金斯公式的困难, 普朗克利用内插法将适用于短波的维恩公式和适用于长波的瑞利-金斯公式衔接起来, 在1900年提出了一个新的公式

$$M_{0\lambda}(T) = 2\pi hc^2 \lambda^{-5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \quad (1-5)$$

式中, h 后来称为普朗克常数。这一公式称为普朗克公式。它与实验结果符合得很好。由普朗克公式不难得到维恩公式。当波长很短或温度较低时, 普朗克公式可近似写成维恩公式; 当波长很长或温度很高时, 普朗克公式可近似写成瑞利-金斯公式。

普朗克得到上述公式后, 他指出“即使这个新的辐射公式证明是绝对精确的, 如果仅仅是一个侥幸揣测出来的内插公式, 它的价值也只能是有限的。”因此, 他要寻找这个公式的理论根据。经过深入研究和分析, 他发现必须使谐振子的能量取分立值, 才能得到上述普朗克公式。由此他提出以下的假设: 把辐射黑体分子、原子的振动看作谐振子, 这些谐振子可以发射和吸收辐射能。但是这些谐振子只可能处于某些分立的状态。在这些状态中, 谐振子的能量并不像经典物理学所允许的可具有任意值。相应的能量是某一最小能量 ε (ε 称为能量子) 的整数倍, 即 $n\varepsilon$ (n 为正整数, 称为量子数)。对于频率为 ν 的谐振子, 最小能量为 $\varepsilon = h\nu$ 。在辐射或吸收能量时, 振子从这些状态中的一个状态跃迁到另一个状态, 即振子只能“跳跃式”地辐射能量。

从经典物理学可知, 原子、分子振动能量遵守玻尔兹曼分布, 如果按照普朗克的量子假设, 则频率为 ν 的谐振子能量为 $nh\nu$ 的概率正比于 $e^{-nh\nu/kT}$ 。因而谐振子的平均能量

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-\frac{nh\nu}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{kT}}} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (1-6)$$

又根据经典电动力学理论得到黑体的单色辐出度为

$$M_{0\lambda}(T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \bar{\varepsilon} \quad (1-7)$$

将式 (1-6) 代入式 (1-7) 即得普朗克公式。

由此可见, 正是黑体辐射的实验事实迫使普朗克作出了能量子的假设, 这样的假设是与经典物理学的概念格格不入的。从经典物理学看来, 能量子的假设是荒诞的、不可思议的。一直到1905年, 爱因斯坦在普朗克能量子假设的基础上提

出光子概念，正确地解释了光电效应，从此普朗克量子假设才冲破经典物理思想的束缚，逐渐为人们所接受。由于普朗克发现了量子，对建立量子理论作出了卓越贡献，获 1918 年诺贝尔物理学奖。

2. 光电效应和爱因斯坦的光量子假设

(1) 光电效应的实验规律

光照射到金属表面时，电子从金属表面逸出的现象称为光电效应。这一效应是赫兹 (H. R. Hertz) 在 1887 年研究电磁波的波动性质时偶然发现的。他用两套放电电极做实验，一套产生振荡，发出电磁波；另一套充当接收器。电极之间存在火花放电的间隙。此后，汤姆孙 (W. Thomson) 和勒纳德 (P. Lenard) 测出光电子的荷质比与阴极射线的荷质比相近，这就肯定光电流和阴极射线实质相同，都是高速运动的电子流。

一个研究光电效应的实验装置如图 1-3 所示。在一抽成高真空度的容器内，装有阴极 K 和阳极 A。阴极 K 为金属板。当单色光通过石英窗口照射到金属板 K 上时，金属板便释放出电子，这种电子称为光电子。如果在 A、K 两端加上电势差 U ，则光电子在加速电场作用下，飞向阳极，形成回路中的光电流。实验结果可归纳如下。

1) 饱和电流 实验指出：以一定强度的单色光照射电极 K 时，加速电势差 U ($U_A - U_K$) 愈大，光电流 I 也愈大。当电势差增加到一定量值时，光电流达饱和值 I_H 如图 1-4 所示。这意味着从电极 K 发射出来的电子全部飞到 A 极上。实验也表明饱和电流 I_H 随入射光的发光强度的增大而增大，也就是说单位时间内，受光照的金属板释放出来的电子数和入射光的发光强度成正比。

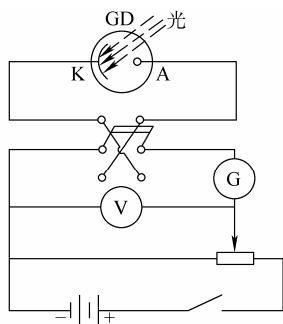


图 1-3 光电效应实验装置图

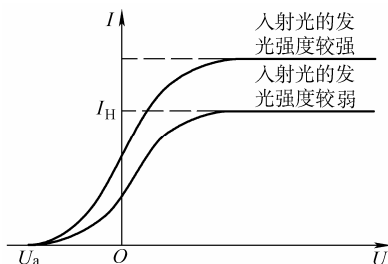


图 1-4 光电效应伏安特性曲线

2) 遏止电势差 降低加速电势差的量值，光电流 I 也随之减小。当电势差 U 减小到零并逐渐变负时，光电流 I 并不等于零，这表明从金属板 K 释出的电子具有初动能。如果使负的电势差足够大，从而使由金属板 K 表面释出时具有最大速度 v_m 的电子也不能到达 A 极时，光电流便降为零。光电流为零时，外加电势差的