



北京市高等教育精品教材立项项目

激光原理技术及应用

阎吉祥 主编

崔小虹 王茜蓓 编

 **北京理工大学出版社**
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

北京市高等教育精品教材立项项目

激光原理技术及应用

阎吉祥 主编

崔小虹 王茜蓓 编

 **北京理工大学出版社**

BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

内 容 提 要

本书是北京市高等教育精品教材立项项目,内容包括激光概论、激光发生原理与激光工作物质、光学谐振腔理论、典型激光器件、激光技术、激光的应用等6章。可作为理工科大学电子科学与技术专业高年级本科生及物理电子学专业研究生的教材或教学参考书,也可供相关专业或研究领域的科技人员阅读与参考。

版权专有 侵权必究

图书在版编目(CIP)数据

激光原理技术及应用/阎吉祥主编;崔小虹,王茜蒨编. —北京:北京理工大学出版社,2006.8

北京市高等教育精品教材立项项目

ISBN 7-5640-0640-4

I. 激… II. ①阎…②崔…③王… III. 激光理论-高等学校-教材
IV. TN241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 145639 号

出版发行 / 北京理工大学出版社

社 址 / 北京市海淀区中关村南大街 5 号

邮 编 / 100081

电 话 / (010)68914775(办公室) 68944990(批销中心) 68911084(读者服务部)

网 址 / <http://www.bitpress.com.cn>

电子邮箱 / chiefeditor@bitpress.com.cn

经 销 / 全国各地新华书店

印 刷 / 北京圣瑞伦印刷厂

开 本 / 787 毫米 × 960 毫米 1/16

印 张 / 19.75

字 数 / 397 千字

版 次 / 2006 年 8 月第 1 版 2006 年 8 月第 1 次印刷

印 数 / 1 ~ 4000 册

定 价 / 30.00 元

责任校对 / 郑兴玉

责任印制 / 李绍英

图书出现印装质量问题,本社负责调换

前 言

当前,教育改革正在不断深入,教育改革要求课程改革,而课程改革则离不开教材的改革与建设。本书的编写即是一项改革的尝试。

与通常《激光原理》相比,本书在保留基本原理阐述的基础上,适当增加激光技术的比重;与一般的《激光技术》教材相比,本书用一章的篇幅专门介绍激光在各种领域的重要应用,目的在于使学生能在较短的时间内较全面地掌握激光原理、技术及应用的基础知识,从而有更多时间选修其他课程,以拓宽专业面,更好地适应进一步深造或就业的需求。

本书的另一显著特点是取材新颖。例如,“典型激光器件”一章,对读者较熟悉的内容进行了删节,而用相当篇幅介绍了对多数读者目前还较陌生的陶瓷激光器,使教材具有一定的前瞻性。

本书属“北京市高等教育精品教材”立项项目,立项过程中承蒙市教委等部门和评审专家大力支持;出版工作则得到北京理工大学出版社的合作;我国激光领域著名专家、中国工程院院士周寿桓先生在百忙之中对书稿进行了认真审阅,提出了很多宝贵意见。阎吉祥执笔部分的录入得到其研究生冯津京博士、王莉博士等的帮助。对所有这些支持与合作,作者谨致深切谢意。

本书由阎吉祥任主编,并执笔其中第1、2、4章;第3、5章由崔小虹编写;第6章由王茜蓓编写,第4、5章习题由崔小虹编写,其余章节习题由王茜蓓编写。全书由阎吉祥统编。囿于编著者水平,谬误及欠妥之处在所难免,恳请读者不吝指正。

作 者
2006 年

目 录

第 1 章 激光的特性及其在现代科技中的作用概论	(1)
1.1 激光器腔模的概念	(1)
1.2 激光的物理特性	(1)
1.3 激光器的工作特性简介	(4)
1.4 激光在现代科技中的作用	(5)
习 题.....	(6)
第 2 章 激光产生原理与激光工作物质	(8)
2.1 氢原子的能级理论	(8)
2.2 多电子原子及分子的能级	(11)
2.3 固体介电质激光材料中的能级	(14)
2.4 激光产生的必要条件	(17)
2.5 激光产生的充分条件	(22)
2.6 谱线加宽	(24)
2.7 二能级激光器的速率方程	(30)
2.8 连续与脉冲工作	(32)
2.9 粒子数反转分布条件	(37)
2.10 激光放大的阈值条件.....	(38)
2.11 均匀加宽激光器的模竞争和频率牵引.....	(40)
2.12 激光器的输出特性.....	(42)
2.13 激光器的泵浦技术.....	(44)
2.14 半导体激光材料.....	(47)
习 题.....	(54)
第 3 章 光学谐振腔	(57)
3.1 光学谐振腔理论的一般性问题	(57)
3.2 光学谐振腔的稳定条件	(66)
3.3 光学谐振腔的衍射理论分析	(77)
3.4 平行平面腔的衍射积分方程与 Fox - Li 数值迭代法	(82)
3.5 共焦腔及一般稳定球面镜腔的模式理论	(87)
3.6 非稳定谐振腔	(103)

3.7 高斯光束	(109)
习 题	(115)
第 4 章 典型激光器件	(118)
4.1 气体激光器	(118)
4.2 常见固体激光器	(124)
4.3 陶瓷激光器	(128)
4.4 半导体激光器	(134)
习 题	(145)
第 5 章 激光技术	(147)
5.1 模式选择技术	(147)
5.2 稳频技术	(160)
5.3 调 Q 技术	(173)
5.4 超短脉冲技术	(199)
5.5 光学倍频技术	(214)
习 题	(230)
第 6 章 激光的应用	(233)
6.1 激光在光通信领域中的应用	(233)
6.2 激光在信息处理领域中的应用	(251)
6.3 激光在材料加工领域中的应用	(265)
6.4 激光在生命科学领域中的应用	(275)
6.5 激光在军事领域中的应用	(289)
习 题	(305)

第 1 章 激光的特性及其在现代科技中的作用概论

激光作为人类科学史上的一项重大发明,在国民经济及国防建设各领域得到极其广泛的应用,其原因是它具有普通光源发射的光无法相比的特性。而激光之所以具有这些特性,则是由它的产生机理决定的。

激光的产生机理将在本书第 2 章讨论,而其在众多领域的应用则将在第 6 章详细介绍。本章拟简单描述激光的特性及其在现代科学技术中的地位和作用。为了讨论方便,将首先对激光的腔模概念作一简单介绍,这部分内容将在第 3 章详细描述。

1.1 激光器腔模的概念

一个典型的激光器由三部分构成,即激光工作物质、抽运系统和光学谐振腔。工作物质可以是气体、固体、半导体等,并将相应的激光器依次称为气体激光器、固体激光器、半导体激光器等(详见本书第 4 章)。抽运系统提供能源,使激光工作物质中产生激光的两能级(分别称为激光上、下能级)上粒子数密度按照与平衡态相反的方式分布。而开放式光学谐振腔则由具有一定曲率半径,相距为 L 放置的两块反射镜构成,不含工作物质的谐振腔称为无源腔,含工作物质的则称为有源腔(如图 1-1)。

光波在谐振腔反射镜之间多次衍射传播所形成的稳定场分布称为开放式光学谐振腔的模式,不同模式具有不同的光波场空间分布。这种三维空间分布可以分解为沿纵向,即腔轴方向的分布 $E(z)$ 和沿横向,即垂直腔轴方向的分布 $E(x, y)$ 。前者称为纵模,后者称为横模。二者组合形成光腔模式,并记为

TEM_{mnq} ,其中 TEM 表示光波为横电磁波, m, n 分别表示光场在 x 方向和 y 方向通过 0 值的次数,并称为横模序数。 TEM_{00} 模称为基横模,其余称为高阶横模。类似的, q 则表示光场在 z 方向取 0 值的次数,并称为纵模序数。在表示模式时,往往只写出 m, n 的数值而不标 q 的数值。

有了上述关于腔模的基本概念,下面可以比较方便地讨论激光的特性。

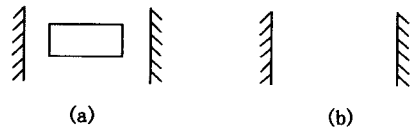


图 1-1 开放式光学谐振腔
(a) 有源腔; (b) 无源腔

1.2 激光的物理特性

这里所说的物理特性,包括激光的单色性、方向性、相干性和高亮度。事实上,单色性和方



向性也是由相干性,主要是一阶相关决定的,而相干性则还应包括高阶相关。

1.2.1 单色性与时间相干性

对光波进行频谱分析,所得频带宽度 $\Delta\nu$ 即是光源单色性的度量。而该光波的相干时间则为

$$\tau_c = \frac{1}{2\pi\Delta\nu} \quad (1-1)$$

由此可见,谱线宽度越窄,或单色性越好,则相干时间越长,即时间相干性越好。

在稳定振荡的条件下,单纵模激光器输出激光的频带宽度理论上可以达到

$$\Delta\nu = 2\pi h\nu_0 \frac{(\Delta\nu_c)^2}{P_0} \left(\frac{n_2}{n_2 - n_1} \right) \quad (1-2)$$

式中, ν_0 为激光输出的中心频率; P_0 为输出功率; n_1, n_2 分别为激光上、下能级的粒子数密度; $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}$, 称为 Planck 常数; 而

$$\Delta\nu_c = \frac{c\delta}{2\pi L}$$

是相应的无源腔的模式频带宽度。其中 L 为腔长; δ 为无源腔的损耗; c 为光速。

以具有毫瓦级功率输出的 He-Ne 激光器为例,取 $\delta = 0.01$, $L = 0.5 \text{m}$, 由式(1-2)得到 $\Delta\nu$ 具有 10^{-4}Hz 的量级。这是极高的单色性,将其带入式(1-1),给出相干时间达到 $10^3 \sim 10^4 \text{s}$, 或相干长度 10^9km 量级。

在实际激光器中,由于存在各种不稳定因素,导致谐振频率的波动,使 $\Delta\nu$ 远大于理论值。在采取最严格稳频措施的情况下,曾在 He-Ne 激光其中观察到 2Hz 的带宽,而典型的单模稳频气体激光器, $\Delta\nu$ 可以达到 $10^6 \sim 10^3 \text{Hz}$ 。

普通光源发射的光,其带宽可与中心频率具有相同量级,对可见光为 10^{14}Hz 。激光发明之前,汞灯的线谱被认为是最好的相干光源,其带宽也在 10^8Hz 以上,是单模稳频气体激光辐射线宽的 10^5 倍,相应的,前者的相干时间只有后者的 10^{-5} 左右。由此可见,高度单色性或时间相干性是激光的特性。

1.2.2 方向性和空间相干性

由物理光学可知^①,线度为 d 的光源发射的光波,在传播方向上对光源张角为 θ 的范围内明显相干的条件为

$$d \leq \frac{a\lambda}{\theta} \quad (1-3)$$

式中, λ 为光波波长; a 为取值范围在 1 附近的常数。

^① 例如, M. Born, E. Wolf. 光学原理(上册). 杨蕴荪等译校. 北京: 科学出版社, 1978, P. 358



设 $a = 1$, 式(1-3)亦可写作

$$d^2 \leq \left(\frac{\lambda}{\theta}\right)^2 \quad (1-4)$$

其物理意义是,传播方向上对光源的张角在 θ 之内的光波明显相干的条件是光源的面积不大于 $(\lambda/\theta)^2$ 。因此

$$A_c = \left(\frac{\lambda}{\theta}\right)^2 \quad (1-5)$$

即为光源的相干面积。式(1-5)表明,光源的相干面积与其发散角 θ 的平方成反比。发散角越小,相干面积越大。

在不采取任何措施的情况下,普通光源向 4π 立体角发光,因而其空间相干性很差。而激光的发散角与谐振腔结构及振荡模式有关(详见本书第3章)。仍以气体激光器 θ 最小,可接近衍射极限。即使是方向性最差的半导体激光器,其 θ 值亦可达到 10^{-2} rad 量级。由此可见,具有小的发散角或高度空间相干性也是激光的特性。

1.2.3 高阶相关

对普通光源,可通过减小线度或加光阑提高其空间相干性,也可通过光学滤波减小 $\Delta\nu$ 以提高其时间相干性。这样,相干光强将随之下降,因此,实际上是不可取的。但理论上可以说,并非只有激光才可能具有高的时间相干性和空间相干性。应该指出的是,时间相干和空间相干均属于光波的一阶相关性。两列光波具有相近的一阶相关性,并不表明它们经历相同的随机过程,因为二者的高阶相关性可以有很大差别。可以证明,只有激光才可能有较高的高阶相关度。所以,可以说高阶相关是激光更本质的特性。

1.2.4 高亮度

截面积为 A 的光源单色亮度可表示为

$$B_\nu = \frac{P}{A\Delta\nu\pi\theta^2} \quad (1-6)$$

式中, P 为光源向立体角 $\pi\theta^2$ 内发射的频率处于 $\nu \sim (\nu + \Delta\nu)$ 内的光功率。

从 1.2.1 和 1.2.2 小节的讨论已知,激光的 $\Delta\nu$ 和 θ 比普通光辐射的小得多,或者说,在非常小的频率间隔向非常小的立体角内发射的光功率比普通光辐射高得多。因而,激光的单色亮度远高于普通光源。虽然通过适当光学系统的变换可以将普通光辐射的 $\Delta\nu$ 或 θ , 甚至二者均压缩到与激光相当的水平,但保留在该频带宽度和空间范围的光功率也会成比例减小。这就是说,尽管光学变换在理论上可以将普通光辐射的单色性和方向性,甚至二者提高到激光的水平,但却不可能将其亮度提高。事实上,可以从理论上证明,只要是在相同媒质中,任何光学系统的成像都不可能使像的亮度高于产生它的物的亮度。因此可以说,高的单色亮度也是激光更本质的特性。



1.3 激光器的工作特性简介

激光之所以有极为广泛的应用,一方面取决于它奇特的物理性能,另一方面也与它的工作特性有关。关于激光工作特性的较详细描述将在较后的章节中给出。这里仅简单介绍普通脉冲工作特性和频率稳定特性,其内容将在 1.4 节的讨论中用到。

1.3.1 超短脉冲特性

正常运转的激光器通常有两种工作状态,即连续输出状态和脉冲输出状态。对以脉冲方式工作的激光,光脉冲两个半峰值能量点之间的间隔 τ_p 称为脉冲宽度(如图 1-2 所示),而每秒钟的脉冲个数 N 则称为脉冲重复率。

对脉冲激光的很多应用而言,特别关心的是它的输出功率水平。假定一个脉冲的能量为 E ,则定义

$$\bar{P} = NE \quad (1-7)$$

为该脉冲激光的平均功率;而

$$P_p = \frac{E}{\tau_p} \quad (1-8)$$

则称为峰值功率。

由式(1-8)易见,为了提高激光脉冲的峰值功率,应尽可能提高脉冲能量或压缩脉宽。由于提高激光脉冲能量受到更多因素的限制,也由于窄脉冲本身在激光的很多应用场合具有十分重要的意义,因此,压缩脉宽一直受到激光工作者的极大重视。事实上,激光器发明后仅仅过了一年左右的时间,一种基于控制谐振腔损耗的“调 Q 技术”将激光脉冲宽度压缩了 3 个量级以上,达到纳秒(10^{-9} s)水平。几年后,“锁模技术”获得成功并不断改进,借助当前锁模技术,已产生出飞秒(10^{-15} s)的脉冲,而且还在朝更窄的脉冲努力。随着脉冲能量的提高和脉宽的压窄,一些固体激光器的峰值功率已可达到 10^{14} W 以上。

1.3.2 频率稳定特性

正如前面所述,激光具有高的单色性,即 $\Delta\nu$ 很小,因而频率稳定性 $\Delta\nu/\nu_0$ 很好。例如,设 $\Delta\nu = 10^6$ Hz,则在可见光波段,频率稳定性可达到 10^{-8} 量级。然而,有些特殊应用场合要求光源具有更高的频率稳定性,所以,稳频也是激光技术的重要研究领域。而且已相继出现多种稳频技术以满足不同要求。例如,基于 Lamb 凹陷可获得优于 10^{-9} 的频率稳定性;基于 Zeeman 效应可使稳定性达到 $10^{-10} \sim 10^{-11}$;而利用饱和吸收则可使 $\Delta\nu/\nu_0$ 达到 $10^{-11} \sim 10^{-12}$ 。

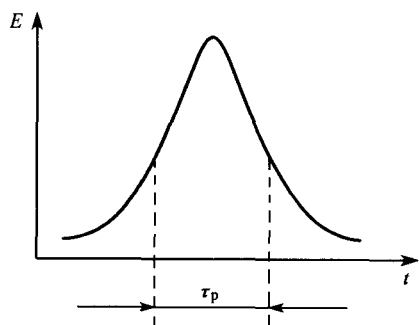


图 1-2 脉冲宽度示意图



1.4 激光在现代科技中的作用

如本章开始所述,激光在国民经济和国防建设众多领域中有着极为广泛的应用,其内容将在第6章详细介绍,而本节拟简要描述激光在现代科学与技术中的一些应用。由于激光的出现,使一些本来无法解决的问题得以解决,使一些本来困难的问题变得容易。

1.4.1 超快与超慢现象的研究

传统的高速摄影可以拍摄以极限速度行驶的汽车,但却难以捕捉飞行子弹的踪迹。20世纪80年代初,美国海军研究实验室的科学家们用激光制造的照相系统成功解决了这一问题。该系统的核心部分便是脉宽30 ns的红宝石激光器。

在无法直接感受的微观世界中,很多现象会在非常短的时间内瞬息即逝。例如,热原子与分子的碰撞就是在皮秒(10^{-12} s)甚至亚皮秒的时间内发生的。在同一时间尺度内,分子还会改变形状,彼此相互作用,交换能量等。这样,为了研究微观世界所发生的现象,就需要本身具有至少是相同时间尺度的工具。这在激光器发明之前是不可能的。而激光已有飞秒级脉冲出现,从而为此项研究奠定了基础。

此外,激光还为研究微观粒子的某些特性开辟了另一条途径,这就是将粒子冷却而使其运动速度大大降低。

尽管早在1920年就有科学家推断,明亮的光或许可能使物体冷却,但在以往用普通光辐射所进行的实验中,加热总是远远超过冷却。直到20世纪末,研究人员才用激光成功地验证了“光学制冷”原理。此后,该项研究进展迅速,到1997年,借助激光技术已可将原子冷却到 10^{-7} K的低温,使原子运动速度从室温下的约 $1 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$ 降低到低温下的 $2 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ 。

在医学和生物学领域,测量超慢运动几乎与测量超快运动一样重要。研究人员需要观察速度只有微米每秒量级的细胞原生质运动,所依据的是Doppler测速技术。由Doppler原理可知,运动物体反射的光与入射光之间存在频率偏移,偏移量正比于物体运动的速度。运动速度越慢,频率偏移也越小。而为了探测微小的频率偏移,就要求用于测量的光本身具有极高的频率稳定性。只有激光才能满足此要求。

1.4.2 激光触发和控制化学反应

化学工作者们主要关心两个问题,一个是材料的化学结构,另一个是化学反应。而激光既能给出有关物质结构的知识,又能促进化学反应的发生。

化学反应是由能量控制的,为使基质分子发生反应必须提供触发能。分子一般以振动形式储存能量,激光通过稳定地向分子提供振动能,可以使原本不能发生的反应得以发生,或使反应的速率提高几个量级。这意味着有关化合物能够更容易地和以更快的速度按照科学家的



意愿和他们预定的方向发生反应。正因为如此,激光领域的很多专家认为,激光诱导化学反应很可能成为相干光未来的主要应用领域之一。

1.4.3 诱发核聚变

核聚变通常是氢的两种同位素,即重氢(氘)与超重氢(氚)的核在高温高压下的结合过程,结果形成氦原子核。

核聚变具有极高的能量转换效率。1 g 核燃料聚变时所释放的能量,大约相当于 10^4 kg 的煤燃烧时所释放的能量,可满足一个三口之家两年的全部能量需求。

核聚变的原料重氢可以从海水中获得;而氚则可由很常见的金属锂来制取。此外,核聚变几乎不产生污染,它既不会像天然气、石油和煤炭燃烧那样释放出许多有害气体,也不会像核裂变那样生成大量放射性核废料,对解决日益严重的能源危机和环境污染,是一种前景很好的途径。然而,引发核聚变需要极高的温度,例如,在发生核聚变的太阳内部,温度高达 2×10^7 °C。科学家们正在努力用激光解决这一难题。他们将氘和氚的组合气体封在一个小瓶内,将高峰值功率、短脉冲激光聚焦于瓶表面,在纳秒量级的时间内产生巨大的热量,使瓶体气化,并造成类似于恒星诞生时的环境,原处于瓶内的氘和氚在高温和高压下发生聚变反应。到2002年晚些时候,已有用 10^{15} W 的激光获得 10^7 °C 高温的报道。

激光在高科技领域还有很多应用,囿于篇幅,这里不再详述。总之,作为科学技术发展的产物,激光正在并必将进一步为促进科学技术的发展发挥无与伦比的作用。

习 题

1. 简述腔模的概念,并解释 TEM_{mnq} 中各符号的含义。
2. 各举出一种用来显示光源时间相干性和空间相干性的试验装置,并简要说明其测量原理。
3. 为使 He - Ne 激光器的相干长度达到 10 km,其输出激光的频带宽度 $\Delta\nu$ 和单色性 $\Delta\lambda/\lambda_0$ 分别应是多少? (He - Ne 激光器输出波长 $\lambda = 632.8$ nm)
4. 某固体激光器的腔长为 45 cm,工作物质长 30 cm,折射率 $n = 1.5$,设此腔总的单程损耗为 0.01π 。求此激光器的无源腔本征纵模的模式频带宽度 $\Delta\nu_c$ 。
5. 已知一单纵模 He - Ne 激光器的腔长为 60 cm,谐振腔总的单程损耗为 0.01,试求无源腔的模式频带宽度 $\Delta\nu_c$ 。当此激光器的输出功率 $P_{out} = 3$ mW 时,其理论上能够达到的线宽极限 $\Delta\nu$ 是多少(设下能级粒子数 $n_1 = 0$)? 若实际输出线宽 $\Delta\nu = 10^4$ Hz,其相干时间和相干长度分别是多少?
6. 已知一氩离子激光器连续输出功率为 1 W,在输出镜面上的光斑半径为 0.5 mm,光束发散角为 2 mrad,输出激光频带宽度为 10 kHz,试求此氩离子激光器的单色辐射亮度。



7. 有一 Nd:YAG 调 Q 重频脉冲激光器,其输出单脉冲能量为 10 mJ,脉冲宽度 10 ns,脉冲重复频率为 10 Hz,求该激光器的平均功率和峰值功率分别为多大。
8. 举例说明激光在现代科学研究中的应用,并简述其原理。



第 2 章 激光产生原理与激光工作物质

激光本质上是相干辐射与物质相互作用的产物,而产生激光辐射的物质可以是原子(离子)系统、分子系统,也可以是凝聚态物质,如半导体材料。本章将依次介绍单电子原子(离子),多电子原子及分子的能级结构,辐射跃迁,速率方程。在此基础上给出激光产生的必要条件和充分条件,讨论激光的工作特性和输出特性。

半导体激光器与其他激光器的工作原理存在明显差别,在本章最后两节予以介绍。

2.1 氢原子的能级理论

本节讨论最简单的情况,即氢原子的能级结构,其意义一方面在于多数结论适用于类氢离子,另一方面,它还是进一步讨论多电子原子(离子)的基础。

2.1.1 量子力学的 Schrödinger 方程

众所周知,量子理论的基础是 Schrödinger 方程。在普适条件下,该方程可写为

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi + V\psi \quad (2-1)$$

式中, ∇ 为 Laplace 算符; ψ 为系统的波函数; m_e 为电子质量; V 为势函数; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$,而 $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ 是 Planck 常数。

方程(2-1)的求解往往比较困难,不过,为了解由物质激发态发生辐射的基本原理,只需求解不含时间的方程

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} (E - V)\psi = 0 \quad (2-2)$$

或写成算符形式为

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2-3)$$

式(2-2)或式(2-3)称为定态 Schrödinger 方程,其中

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \nabla^2 + V \quad (2-4)$$

称为定态 Hamiltonian 算符或能量算符,其本征值为能量 E ,而 ψ 是相应于该本征值的本征函数。于是,问题归结为求解本征值方程(2-3)。由量子理论可知,只有当 E 取有限个离散本征值 E_n 时,方程才存在有意义的解,相应的本征函数为 ψ_n 。电子的几率分布函数即由 $\psi_n^* \psi_n$



给出,这里的星号表示求复共轭。

2.1.2 氢原子的 Schrödinger 方程

用 Schrödinger 方程解氢原子问题时,采用极坐标更为方便。在极坐标中,式(2-2)变为

$$\frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (E - V) \psi = 0 \quad (2-5)$$

其中, $\mu = m_e M_p / (m_e + M_p)$ 为电子与质子的约化质量,而势函数为

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \quad (2-6)$$

式中, e 为电子电荷; ϵ_0 为真空中介电常数; r_0 为正负点电荷之间的距离,根据 Bohr 理论, $r_0 = a_H n^2$, $n = 1, 2, \dots$, 而 $a_H = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} \approx 0.53 \text{Å}^{\text{①}}$ 为第一 Bohr 轨道半径。

2.1.3 氢原子基态

氢原子基态是最简单的电子能态。假定基态 ($n = 1$) 氢原子具有球对称性,则其波函数必有一组球形对称的特解,即 ψ 不显含角度变量,而仅为径向坐标的函数,并可表示为

$$\psi_1 = C_1 e^{-\alpha r} \quad (2-7)$$

式中, α 为待定常数; C_1 为归一化常数。与 ψ_1 相应的能量为 E_1 。

将式(2-7)代入式(2-5),经简单运算易得

$$\alpha = \frac{\pi \mu e^2}{\epsilon_0 h^2} = \frac{1}{a_H}$$
$$E_1 = -\frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \quad (2-8)$$

由归一化条件求出

$$C_1 = \frac{1}{\pi^{1/2} a_H^{3/2}}$$

终得

$$\psi_1 = \left(\frac{1}{\pi^{1/2} a_H^{3/2}} \right) e^{-r/a_H} \quad (2-9)$$

由式(2-9)易见, $r = 0$ 时 ψ_1 有最大值。在 $r = a_H$ (第一 Bohr 半径)处降为峰值的 $1/e$ 。量子理论与 Bohr 理论的区别在于,它只给出电子处于某一位置附近的几率,而不给出准确位置。

① $1 \text{Å} = 10^{-10} \text{m}$



2.1.4 氢原子的激发态

激发态波函数比基态复杂得多,且只能通过求解式(2-5)得到,但仍假定方程可分离变量,于是其解可写为

$$\psi(r, \theta, \phi) = CR(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (2-10)$$

代入式(2-5)得到

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2 \quad (2-11)$$

$$\frac{m^2}{\sin\theta} - \frac{1}{\Theta\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = l(l+1) \quad (2-12)$$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{8\pi^2\mu r^2}{h^2} (E - V) = l(l+1) \quad (2-13)$$

式中, m, l 均为常数。式(2-11)的解为

$$\phi = e^{im\phi} \quad (2-14)$$

由于 $\phi = 0, 2\pi, 4\pi, \dots$ 相应于绕原子整数圈,函数值应相等,故

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2-15)$$

式(2-12)和式(2-13)分别为联属 Legendre 方程和联属 Laguerre 方程。它们的解可以在量子力学书中找到,并最终将氢原子各种态的波函数写为

$$\psi_{n,l,m} = C\rho^l e^{-\rho/2} L_{n-l}^{2l+1}(\rho) P_l^{m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (2-16)$$

式中, $L_{n-l}^{2l+1}(\rho)$ 和 $P_l^{m|}(\cos\theta)$ 分别为联属 Laguerre 和联属 Legendre 多项式; $\rho = 2r/na_H$; 而 C 为归一化常数,相应的能量为

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} = -\frac{\mu e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad (2-17)$$

式中, n, l 和 m 分别称为氢原子的主量子数、角量子数和磁量子数,取值范围为

$$n = 1, 2, \dots$$

$$l = 0, 1, \dots, n-1$$

$$m = 0, 1, \dots, \pm l$$

$$(2-18)$$

由式(2-17)和式(2-16)可以看出,激发态氢原子的能量只依赖于主量子数 n , 而波函数则还与 l 和 m 有关。这样,对应一定的 $n (> 1)$ 存在多种可能状态,即这些能态是简并的。

2.1.5 量子数及原子态的表示

描述原子的量子数主要有主量子数 n , 轨道角量子数 l , 磁量子数 m , 自旋量子数 s 及总角量子数 j 。



如式(2-17)所示, n 决定系统的能量;而轨道角量子数 l 决定轨道角动量 L 的大小,即

$$|L| = [l(l+1)]^{1/2} \hbar \quad (2-19)$$

磁量子数 m 决定轨道角动量在 z 方向的投影, $L_z = m \hbar$;自旋量子数 s 则决定电子自旋角动量 S 及其在 z 方向投影 S_z 的大小,即

$$\begin{aligned} |S| &= [s(s+1)]^{1/2} \hbar \\ S_z &= \pm s \hbar \end{aligned} \quad (2-20)$$

轨道角动量和自旋角动量的矢量和为电子总角动量 J ,其取值由总角动量量子数 j 给出为

$$|J| = [j(j+1)]^{1/2} \hbar \quad (2-21)$$

而 j 由 l 和 s 决定。对单电子系统,当 S 与 L 同向(夹角小于 $\frac{\pi}{2}$)时

$$j = l + s = l + 1/2$$

反之,有

$$j = l - s = l - 1/2 \quad (l \neq 0) \quad (2-22)$$

如果 $l=0$,即有

$$j = s \quad (2-23)$$

当 $l>0$ 时,电子自旋的存在将引起能级的分裂。一个简单的解释是,电子绕核的运动产生磁场,该磁场与电子自旋矩发生作用导致能量漂移。图 2-1 表示 $n=2, l=1$ 的能级因自旋发生分裂的情况。图的左部表示无自旋因而未分裂的能级。

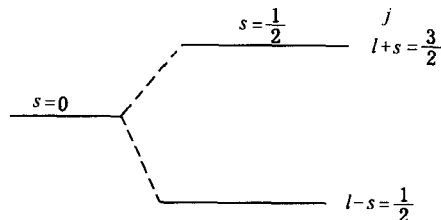


图 2-1 自旋的存在引起能级的分裂

2.2 多电子原子及分子的能级

本节主要关心多电子气体原子和固体原子。由于液体介质在激光器中应用很少,此处不拟讨论。而半导体的能级宜用能带理论描述,故在后面专门予以介绍。

2.2.1 原子的电子组态

根据壳层结构模型,原子核外的电子依照一定规律分布在不同壳层中。主壳层用主量子数 n 表示,相应于 $n=1,2,3,\dots$ 的壳层分别称为 K 壳层、L 壳层、M 壳层,……。每个主壳层包括若干子壳层,后者用轨道角量子数 $l(\leq n-1)$ 表示,小写英文字母 s, p, d, … 分别表示 $l=0, 1, 2, \dots$ 的子壳层。前几个壳层和子壳层的电子数由表 2-1 给出。

