

# 目 录

## 第一篇 阴极电子学

引言	(1)
<b>第一章 金属的自由电子模型和固体的能带理论</b>	<b>(3)</b>
§ 1.1 金属的自由电子模型	(3)
1.1.1 金属的索末菲自由电子模型	(3)
1.1.2 金属内自由电子的状态	(4)
1.1.3 金属中自由电子的统计分布	(7)
1.1.4 金属中电子的费米能级	(9)
§ 1.2 金属的内电位、表面势垒和逸出功	(12)
§ 1.3 金属的接触电位差	(15)
§ 1.4 固体的能带理论	(18)
1.4.1 固体的周期场模型	(18)
1.4.2 固体能带形成的定性说明	(19)
1.4.3 周期场里电子的波函数	(20)
1.4.4 克龙尼格-潘宁模型	(21)
1.4.5 电子在周期场里的运动 有效质量 ( $m^*$ )	(24)
<b>第二章 半导体物理基础</b>	<b>(28)</b>
§ 2.1 半导体的基本性质	(28)
2.1.1 半导体中的杂质和缺陷	(29)
2.1.2 半导体中电子的统计分布	(31)
2.1.3 半导体的电导率和迁移率	(34)
2.1.4 半导体中的光吸收	(36)
2.1.5 半导体的光电导现象 (内光电效应)	(39)
§ 2.2 固体的接触	(40)
2.2.1 金属-半导体接触	(40)
2.2.2 半导体 p-n 结	(43)
2.2.3 半导体异质结	(47)
§ 2.3 固体的界面 (表面) 效应	(53)
2.3.1 半导体的表面态	(53)
2.3.2 表面态对半导体能带的影响——表面势	(54)
2.3.3 表面吸附和脱附	(56)
2.3.4 表面吸附对逸出功的影响	(57)
<b>第三章 纯金属及原子薄膜阴极</b>	<b>(64)</b>

§ 3.1	热阴极的基本参量	(64)
§ 3.2	纯金属的热电子发射	(65)
3.2.1	纯金属的热电子发射现象	(65)
3.2.2	纯金属的热电子发射公式	(67)
3.2.3	热电子初速与电子冷却效应	(69)
3.2.4	实用纯金属阴极	(71)
§ 3.3	电场作用下热电子发射电流的流通规律	(72)
3.3.1	理想二极管的全伏安特性和极间电位分布	(73)
3.3.2	拒斥场下的阳极电流	(75)
3.3.3	加速场下的阳极电流——肖特基效应	(76)
3.3.4	空间电荷限制下的阳极电流—— $3/2$ 次方定律	(78)
§ 3.4	原子薄膜阴极	(79)
3.4.1	敷钍钨薄膜阴极	(80)
3.4.2	非正常肖特基效应和“斑点”理论	(82)
3.4.3	碳化敷钍钨阴极	(83)
3.4.4	钍铯钨阴极和铯钨阴极	(84)
<b>第四章</b>	<b>氧化物阴极</b>	<b>(86)</b>
§ 4.1	氧化物阴极的材料和工艺	(86)
4.1.1	氧化物阴极的材料和结构	(86)
4.1.2	氧化物阴极的分解和激活	(88)
§ 4.2	氧化物阴极的发射模型及逸出功	(89)
§ 4.3	氧化物阴极的脉冲发射特性	(93)
4.3.1	氧化物阴极的脉冲发射衰减	(94)
4.3.2	氧化物阴极脉冲发射与脉冲工作比的关系	(95)
4.3.3	氧化物阴极的火花现象	(97)
§ 4.4	环境气体对氧化物阴极发射的影响	(100)
§ 4.5	氧化物阴极的蒸发与寿命	(102)
§ 4.6	改进型氧化物阴极	(106)
<b>第五章</b>	<b>储备式阴极及其它类型热阴极</b>	<b>(110)</b>
§ 5.1	储备式阴极	(110)
5.1.1	铝酸盐钡钨阴极	(110)
5.1.2	钨酸盐钡钨阴极	(112)
5.1.3	钡钨阴极的蒸发	(114)
5.1.4	储备式阴极的新发展	(117)
5.1.5	用电子显微镜观察钡钨阴极	(120)
§ 5.2	其它类型热阴极	(123)
5.2.1	硼化物阴极	(123)
5.2.2	氧化钍及稀土氧化物阴极	(126)

5.2.3	金属陶瓷阴极	(127)
5.2.4	碳化物阴极	(128)
§ 5.3	热阴极在器件中的应用	(129)
5.3.1	电真空器件对热阴极的要求	(129)
5.3.2	气体放电器件对热阴极的要求	(131)
<b>第六章</b>	<b>场致发射</b>	<b>(136)</b>
§ 6.1	引言	(136)
§ 6.2	金属场致发射理论	(137)
6.2.1	经典理论的矛盾	(137)
6.2.2	场致发射量子理论的定性说明	(137)
6.2.3	用量子力学分析场致发射	(138)
6.2.4	绝对零度时的场致发射	(141)
6.2.5	温度对场致发射的影响 热场致发射	(143)
§ 6.3	金属场致发射公式的实验验证	(144)
6.3.1	实验方法和实验结果	(144)
6.3.2	空间电荷对场发射电流的影响	(147)
6.3.3	真空电弧	(149)
§ 6.4	场致发射的稳定性和场致发射阴极的寿命	(151)
§ 6.5	“热”场致发射	(152)
§ 6.6	多尖端场致发射阴极及其应用	(154)
§ 6.7	等离子体场发射(爆发式电子发射)	(157)
§ 6.8	场发射显微镜	(159)
6.8.1	场发射显微镜成像原理	(159)
6.8.2	场发射显微镜的分辨率	(161)
6.8.3	场发射显微镜的应用	(161)
§ 6.9	场离子发射、场电离和场离子显微镜	(163)
6.9.1	场解吸和场蒸发	(163)
6.9.2	场电离	(164)
6.9.3	场离子显微镜	(165)
§ 6.10	半导体的场致发射	(167)
§ 6.11	小功率冷阴极	(168)
6.11.1	钨锥薄膜场发射阴极	(168)
6.11.2	薄膜冷阴极	(168)
6.11.3	半导体过热电子发射的冷阴极	(169)
6.11.4	金属(半导体)-介质-金属结构的冷阴极	(170)
<b>第七章</b>	<b>光电子发射</b>	<b>(173)</b>
§ 7.1	光电发射的基本规律	(173)
§ 7.2	光电发射的理论解释	(175)

§ 7.3	半导体的光电发射	(177)
§ 7.4	获得高量子产额光电阴极的条件	(182)
7.4.1	增加光吸收	(182)
7.4.2	改善能带结构	(184)
7.4.3	降低表面势垒	(184)
§ 7.5	实用光电阴极	(185)
7.5.1	铯铷光电阴极	(186)
7.5.2	多碱光电阴极	(188)
7.5.3	银氧铯光电阴极	(189)
7.5.4	铋银氧铯光电阴极	(190)
§ 7.6	光电阴极的新发展	(192)
7.6.1	负电子亲合势 (NEA) 阴极	(192)
7.6.2	紫外光电阴极	(197)
7.6.3	金属-氧化物-半导体 (MOS) 光电阴极	(199)
§ 7.7	光电发射的测试	(200)
7.7.1	光电子的能量分布及光电发射阈的确定	(200)
7.7.2	光谱特性曲线的测定	(202)
<b>第八章</b>	<b>次级电子发射</b>	<b>(205)</b>
§ 8.1	次级电子发射现象	(205)
8.1.1	纯金属的次级电子发射	(205)
8.1.2	半导体、绝缘体的次级电子发射	(208)
§ 8.2	关于次级电子发射的理论解释	(212)
8.2.1	次级电子发射的物理过程	(212)
8.2.2	次级电子发射过程的定性解释	(213)
8.2.3	次级电子发射比的定量计算	(213)
§ 8.3	实用次级电子发射体	(217)
8.3.1	常用次级电子发射体	(217)
8.3.2	具有负电子亲合势的次级发射体	(219)
8.3.3	通道式电子倍增器和微通道板	(221)
§ 8.4	次级电子能量分布	(221)
8.4.1	次级电子能量分布曲线	(221)
8.4.2	俄歇电子的产生和应用	(223)
§ 8.5	离子轰击引起的次级发射	(225)
§ 8.6	次级发射的实验方法	(227)
8.6.1	金属次级电子发射系数的测量	(227)
8.6.2	绝缘体和半导体次级电子发射系数的测量	(229)
<b>第九章</b>	<b>阴极温度测量原理</b>	<b>(231)</b>
§ 9.1	物体热辐射的基本规律	(231)

9.1.1	热辐射、辐射本领、吸收系数和反射系数	(231)
9.1.2	基尔霍夫定律 物体的辐射系数	(233)
9.1.3	绝对黑体的辐射定律	(233)
§ 9.2	利用热辐射规律确定物体的温度	(236)
9.2.1	能量温度	(236)
9.2.2	亮度温度	(237)
9.2.3	比色温度	(238)
9.2.4	光学高温计	(238)
9.2.5	光谱辐射系数的测定	(240)
9.2.6	用光学高温计测量温度的准确度	(242)
9.2.7	红外测温仪	(243)
§ 9.3	利用热电偶测量物体温度	(245)
9.3.1	热电偶的测温原理	(245)
9.3.2	热电偶中加入第三根导体后的情况	(246)
9.3.3	用热电偶测量阴极温度的方法	(247)
§ 9.4	制成管中阴极温度的量测	(248)
9.4.1	电阻法	(288)
9.4.2	谱波分量法	(249)
<b>第十章</b>	<b>阴极发射与蒸发量测原理</b>	<b>(252)</b>
§ 10.1	热阴极发射量测	(252)
10.1.1	热阴极实验“理想二极管”	(252)
10.1.2	阴极发射本领的测量原理	(254)
10.1.3	二极管伏安特性的量测	(257)
§ 10.2	阴极活性鉴定	(260)
10.2.1	阴极降落测试	(260)
10.2.2	阴极噪声测试	(265)
10.2.3	阴极图象观察	(266)
§ 10.3	逸出功的测量	(267)
10.3.1	李查生方法	(268)
10.3.2	量热法	(269)
10.3.3	接触电位差法	(270)
§ 10.4	热阴极蒸发的量测	(273)
10.4.1	贝克法原理	(273)
10.4.2	拒斥场法原理	(273)
10.4.3	蒸发速率的估算	(275)
10.4.4	蒸发能 $H_0$ 的计算	(279)
附录 I	热能-电能直接转换器	(281)
附录 II	热阴极噪声	(285)

附录Ⅲ 常用基本物理常数	(289)
附录Ⅳ 几个物理量的单位换算	(290)

## 第二篇 气体放电原理

引言	(291)
<b>第十一章 气体放电的基本物理过程</b>	(192)
§ 11.1 带电粒子的产生	(192)
11.1.1 原子的能级	(192)
11.1.2 原子光谱	(295)
11.1.3 粒子碰撞的基本规律	(297)
11.1.4 电子与气体原子碰撞时所引起的激发和电离	(301)
11.1.5 激发几率和电离几率	(307)
11.1.6 亚稳态、累积电离及第二类非弹性碰撞	(312)
11.1.7 其他形式的激发和电离	(313)
§ 11.2 带电粒子在气体中的运动	(317)
11.2.1 带电粒子在气体中的热运动	(317)
11.2.2 带电粒子在气体中的迁移运动	(318)
11.2.3 带电粒子在气体中的扩散	(323)
11.2.4 带电粒子在气体中运动的近似处理	(326)
§ 11.3 带电粒子的转化及其消失	(327)
11.3.1 带电粒子的转化	(327)
11.3.2 带电粒子的消失	(329)
<b>第十二章 气体放电的各种形式与着火过程</b>	(334)
§ 12.1 气体放电的伏安特性	(334)
§ 12.2 暗放电	(336)
12.2.1 电子繁流理论	(336)
12.2.2 $\alpha$ 系数和 $\gamma$ 系数	(338)
12.2.3 气体放电的着火过程	(341)
12.2.4 影响着火电压的其他因素	(345)
12.2.5 罗果夫斯基(Роговский)的放电理论	(346)
§ 12.3 辉光放电	(348)
12.3.1 正常辉光放电	(348)
12.3.2 辉光放电阴极位降区的理论分析	(351)
12.3.3 正常辉光放电的正柱区	(355)
12.3.4 异常辉光放电和阴极溅射	(357)
12.3.5 空心阴极辉光放电	(359)
§ 12.4 弧光放电	(360)

12.4.1	概 述	(360)
12.4.2	弧光放电的电位分布和伏安特性	(363)
12.4.3	高气压和超高气压弧光放电	(365)
§ 12.5	其他类型气体放电	(366)
12.5.1	电晕放电	(366)
12.5.2	火花放电	(369)
12.5.3	脉冲放电	(370)
12.5.4	高频放电	(371)
§ 12.6	气体放电等离子体	(375)
12.6.1	概 述	(376)
12.6.2	气体放电等离子体参量的实验测定	(377)
12.6.3	气体放电等离子体理论	(380)
12.6.4	等离子体的电振荡	(385)
<b>第十三章</b>	<b>气体放电的应用</b>	<b>(387)</b>
§ 13.1	离子管	(387)
13.1.1	闸流管	(387)
13.1.2	辉光放电稳压管	(389)
§ 13.2	气体放电光源	(391)
13.2.1	高压水银荧光灯	(391)
13.2.2	钠铊铟灯	(394)
§ 13.3	气体激光器	(396)
13.3.1	激光原理	(396)
13.3.2	氮-氛激光器	(399)
§ 13.4	气体显示器件	(400)
13.4.1	等离子显示板	(400)
13.4.2	平面多位辉光放电数码管	(402)

# 第一篇 阴极电子学

## 引言

“阴极电子学”主要研究电子和离子从物体内部逸出以及粒子同固体表面相互作用的物理过程。如果从发现和应用电子发射现象算起，这门学科已经有近百年的历史了。但从四十年代以后它才逐渐发展成为电子物理学的一个重要分支。

各类电真空器件，各种应用电子束、离子束的分析仪器和加工设备，都需要一个满足不同要求的电子源或离子源。固体内部含有大量电子，但必须用不同形式的外界能量与物体作用，以激发这些电子才能获得电子发射。讨论这些现象的物理过程及其规律就是“阴极电子学”课程的主要内容。

按外界激发能量的不同形式，电子发射可以分为：

(1) 热电子发射。把物体加热到足够高的温度，内部电子的能量随着温度升高而增大。其中有一部份电子的能量就足以克服阻碍它们逸出的障碍而由体内进入真空。这样得到的电子发射叫热电子发射，这是一种最为简单而应用很广的发射形式。

(2) 光电子发射。如果用光辐射能作用于物体而使体内电子逸出，这就是光电发射。光电发射现象在近代物理中是认识光的“二象性”的重要实验依据之一。当前，光电发射不仅在科学技术上有重要的应用和发展，而且已成为“光电子学”的一个组成部份，在微观粒子和表面物质结构的研究方面显示着广阔的前景。

(3) 次级电子（离子）发射。用一定能量的电子（或离子）轰击物体表面，则能引起电子（离子）发射，这叫次级发射。它不仅是各类粒子-电子倍增器件中必需采用的基本发射形式，近年来，以次级电子（离子）发射原理为基础的低能电子衍射仪，俄歇能谱仪和二次离子谱仪等分析仪器得到了迅速发展，广泛用于固体表面状态的研究、表面单原子层组成结构等分析技术中，对材料的物理和化学研究起着有力的促进作用。

(4) 场致电子（离子）发射。在固体表面作用一个很强的电场时，电子逸出固体表面的势垒被降低，并可以由于隧道效应而获得电流密度很大的电子发射（达 $10^7$ 安/厘米<sup>2</sup>），这叫场致发射。这是获得大功率密度电子流的有效方法。超高真空技术的进展为场致发射的应用开辟了前景。场致发射电子（离子）显微镜又是研究固体表面状态的有效工具。

(5) 自释电子发射。在固体表面上进行机械加工，相变化，氧化等或表面经过紫外线、X射线照射后也会产生电子发射，这叫自释电子发射。它的电流很小，只有用计数器才能观察到，发射还随时间不断衰减，发射机理也不甚清楚，这种发射形式本书不作介绍。

此外，当某些原子与炽热金属表面接触时产生的离化现象；离子轰击固体表面时的电子离子发射和加热物体时产生的正、负离子发射现象也都属于“阴极电子学”范畴，但限于篇



幅，本教材不予讨论。

几种电子发射形式有着内在的联系。它们都与电子在固体里的能量状态有关。当电子发射出来时也都受到固体与真空界面所给予的阻碍。因此，金属和半导体的电子理论是“阴极电子学”的物理基础。特别是近十几年来，半导体材料（包括元素的或化合物的；单晶的或多晶的…）在电真空器件领域中应用越来越广泛。以Ⅲ-V族化合物半导体材料为代表的负电子亲和势阴极的出现，更使“阴极电子学”的内容有了一个重大飞跃。因此本教材对于半导体物理基础讲述篇幅稍多，为了内容的系统性，有关固体物理的某些知识作了简述。

电子从固体内部逸出，显然还与固体的表面状态有关。固体表面对于外来原子的吸附和脱附早在十九世纪末就开始研究了，但人们对这一问题的认识仍在逐步深化。固体表面电子状态和结构是当前表面物理学集中研究的课题，其结果必将对“阴极电子学”带来重大影响。由于课程重点不同，本教材中仅给予这方面一些基本概念的介绍。

阴极热电子发射和其他参数的测试是鉴别发射材料优劣的重要手段，必须掌握测试原理和正确运用方法，这方面内容在第九、十章中作了介绍。

当代，科学技术迅速发展，各学科间相互渗透，相互促进，新成就层出不穷。作为教学用书我们没有试图写进最新成果的综述，而是着眼于反映新发展中所用到的基本物理概念和新思想，因此本书总的侧重于电子物理的基础内容。

# 第一章 金属的自由电子模型和固体的能带理论

## § 1.1 金属的自由电子模型

人们早就发现, 金属的导电是其内部大量电子运动的结果。1900年, 德鲁特(P. Drude)首先提出了金属的自由电子理论。他认为金属内部有许多同金属原子处于热平衡的“自由电子”, 它们可以在金属内部自由运动。用这个模型能够解释金属的导电性和导热性。后来, 洛仑茨(Lorentz)在1905年进一步提出, 金属内“自由电子”的速度分布符合麦克斯威-玻尔兹曼(Maxwell-L. Boltzmann)统计规律, 并假定电子和金属离子的碰撞是弹性的, 确立了“电子气”概念, 由此可求出热导率和电导率的数值, 并推导出热电子发射的定量关系。1928年索末菲(A. Sommerfeld)从量子力学的观点提出了金属的自由电子模型。他认为金属内势能恒定, 电子可以在其中自由运动, 其速度分布则满足费米-狄拉克(E. Fermi-P. A. M Dirac)统计。但当电子运动到金属表面时就受到一个把它们拉回的力, 即在金属表面存在一个足够高的势垒, 如果要把电子从金属内部移到金属外部, 还必须作相当的功。从这个模型出发, 用量子力学的方法求解电子在金属中的运动规律, 以此来说明金属的电子发射问题, 可以得到满意的结果。

### 1.1.1 金属的索末菲自由电子模型

下面将进一步讨论, 为什么根据索末菲模型, 可以把金属中的电子认为是处于等势能的场中, 这些电子的状态如何呢?

我们知道, 对于孤立原子, 有四个量子数决定其电子状态[主量子数  $n$ , 角量子数(或辅量子数)  $l$ , 磁量子数  $m$  和自旋量子数  $s$ ]。又根据泡利(W. Pauli)不相容原理, 决定了各种不同原子的电子壳层结构。稳态原子的电子首先从允许的最低能态填起, 然后按主量子数和辅量子数决定的能级依次填充。对于一些金属, 如钠、钡、钨等, 它们的原子结构都是在最外层有一、二或三个电子, 这些最外层电子叫价电子。

价电子与原子核(正离子)的结合较松。孤立原子中电子所处的势场近似地如图1-1(a)所示。它具有库仑场的性质, 但随着与原子核距离的不同, 场的势能函数形式也不同, 可以分为几个区域来看:

1. 在电子与原子核的距离( $r$ )很近时, 即  $r < r_K$  时 ( $r_K$  为  $K$  层电子的半径), 存在一个由整个原子核电荷  $Ze$  建立的库仑场 ( $Z$  为原子序数,  $e$  为电子电荷), 这个场的势能函数  $eU = K \frac{Ze^2}{r}$  ( $K$  为取决于单位制的常数。当用静电单位制时, 取  $K = 1$ ; 当用国际单位制时, 取  $K = 1/4\pi\epsilon_0$ ,  $\epsilon_0$  为真空介电常数)。

2. 当  $r_K < r < r_L$  时 ( $r_L$  为  $L$  层电子的半径), 核电场被  $K$  层的两个电子的场所屏蔽, 则  $eU = K \frac{(Z-2)e^2}{r}$ 。

3. 当  $r_L < r < r_M$  时 ( $r_M$  是  $Z \geq 10$  的元素的  $M$  层电子的半径), 则  $eU = K \frac{(Z-10)e^2}{r}$ 。

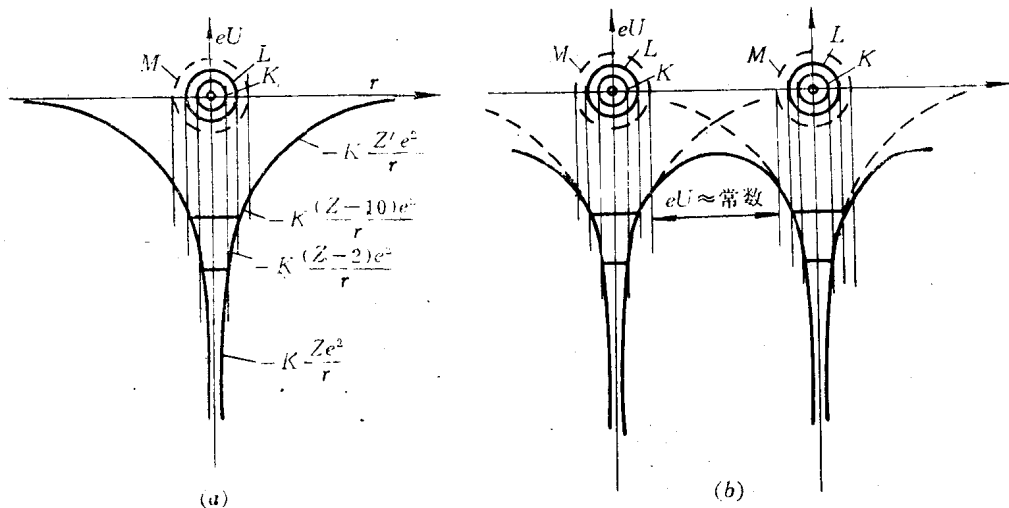


图 1-1 孤立原子和金属中电子的势能图  
(a) 孤立原子中电子的势能图; (b) 金属中电子的势能图

4. 当  $r > r_M$  时, 用  $eU = K \frac{Z'e^2}{r}$  表示。

由图可见, 随着远离原子核, 势场逐渐减弱。当许多相同的原子聚积在一起形成固体时, 原子内层电子处的势场受到的影响很小; 而对于最外层电子, 它们所处的势场可以近似地看作单个原子势场叠加的结果。如图 1-1(b) 中实线所示。由于两个原子之间的空间电势变化很小, 故可近似看作是等势的, 只是在每个正离子的位置有一个势阱。所以严格来讲, 固体内的势场是周期性的场。但对于最外层电子而言, 势场的起伏很小, 它对电子运动的影响不大, 因此就认为金属中的自由电子处在一个近似均匀的势场中“自由”运动了。这就是索末菲的自由电子模型。

### 1.1.2 金属内自由电子的状态

根据索末菲模型, 可认为金属内自由电子的势能恒定并可以令它等于零。金属表面有一个足够高的势垒, 这样一个金属块就可看作是一“平底势垒箱”, 如图 1-2 所示。要确定电子在金属内的状态可以用薛定谔 (E. schrödinger) 方程求解。

我们首先写出薛定谔方程:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - eU) \Psi = 0 \quad (1-1)$$

式中,  $\Psi$  为描述电子运动状态的波函数;  $m$  为自由电子的质量;  $h$  为普朗克常数。

假设电子的总能量  $E$  和势能  $eU$  都是常数, 并令

$$\frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - eU) = 4\pi^2 k^2 \quad (1-2)$$

其中  $k$  称为波数。式 (1-1) 可简写为

$$\nabla^2 \Psi + 4\pi^2 k^2 \Psi = 0$$

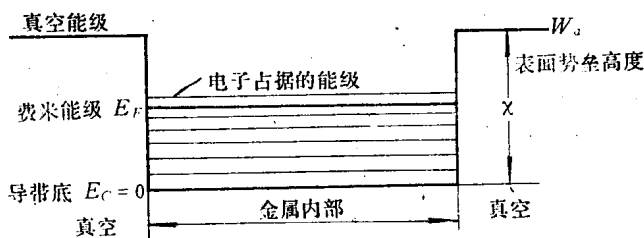


图 1-2 金属块的“平底势垒箱”模型

该方程的解为

$$\begin{aligned} \Psi &= A \exp[i2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] \\ &= A \exp[i2\pi(k_x x + k_y y + k_z z)] \end{aligned} \quad (1-3)$$

这与在真空中自由电子的波函数是一样的。即  $\Psi$  是沿矢量  $\mathbf{r}$  方向的一个平面波。 $\mathbf{k}$  是波数矢量，它是式 (1-2) 中波数  $\mathbf{k}$  的矢量形式，与动量  $\mathbf{p}$  之间有以下关系：

$$|\mathbf{k}| = |\mathbf{p}|/h \quad (1-4)$$

对于一块有限大的金属，边界处有高度为  $W_a$  的势垒。当电子的能量  $E < W_a$  时，金属里自由电子的波函数在边界处就很快下降并趋于零，即自由电子要受到边界条件的限制。为了克服数学上的困难，卡尔曼-玻恩 (Von Kármán-Born) 提出一个假设：在有限晶体边界之外仍然有无穷多个相同的晶体（如果立方晶体的边长为  $L$ ，则可分成无数个体积为  $L^3$  的立方体）。自由电子可以看成是在这无限大的周期场里运动，仍然可用周期性的平面波来描述电子的运动状态。这时，每当  $x$ 、 $y$ 、 $z$  各增加  $L$  时，波函数  $\Psi$  的值与在  $x$ 、 $y$ 、 $z$  处的  $\Psi$  值相同，即

$$\left. \begin{aligned} \Psi(x+L) &= \Psi(x) \\ \Psi(y+L) &= \Psi(y) \\ \Psi(z+L) &= \Psi(z) \end{aligned} \right\} \quad (1-5)$$

这就是著名的周期性边界条件。

根据式 (1-3) 和 (1-5)，在  $x$  方向可写出

$$\begin{aligned} \exp[2\pi i k_x x] &= \exp[2\pi i k_x (x+L)] \\ \text{即 } \exp[2\pi i k_x L] &= 1 \end{aligned} \quad (1-6)$$

只要  $k_x L = \pm n_x$  ( $n_x$  为任何正整数)，式 (1-6) 就可成立。对  $y$ 、 $z$  方向同理成立，因此可得

$$\mathbf{k}_x \cdot L = \pm n_x; \quad \mathbf{k}_y \cdot L = \pm n_y; \quad \mathbf{k}_z \cdot L = \pm n_z \quad (1-7)$$

由式 (1-4) 可以把式 (1-7) 改写为

$$p_x = \pm n_x h/L; \quad p_y = \pm n_y h/L; \quad p_z = \pm n_z h/L \quad (1-8)$$

同时，因为我们假设了金属内的势能为零，由式 (1-2) 可得

$$E = \frac{h^2 \mathbf{k}^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \quad (1-9)$$

从式 (1-8), 式 (1-9) 可见, 金属里自由电子的动量及对应于这个动量的能量是量子化的, 它们只能取分立的不连续的数值。\$E\$ 同 \$k\$ 的关系是用分立的点连成的抛物线。但因为总是考虑电子数很多的情况, 这些电子的能量或动量虽然是量子化的, 可是相邻能值之间的差别非常小, 在处理问题时往往可把 \$E-k\$ 关系看作是连续变化的。

由式 (1-3), (1-4), (1-9) 可以看出, 只要 \$k\$ 一定, 金属内自由电子的波函数, 动量、能量等也就确定了。所以波矢 \$k\$ 能够完全地确定一个自由电子在金属内部的状态。我们可以用状态空间, 即用 \$k\_x, k\_y, k\_z\$ 为座标所组成的空间(简称 \$k\$ 空间)来描绘电子。图 1-3(a) 就是这样一个状态空间。同样也可以在动量空间中来讨论电子状态, 可画出如图 1-3(b) 所示的动量空间坐标系。在动量空间中每一动量矢量的终端就对应自旋不同的两个量子态, 它构成一个立方点阵, 点阵常数为 \$h/L\$, 它的元体积为 \$h^3/L^3\$, 因此动量空间里单位体积内的状态数为 \$2/h^3\$, 即 \$2L^3/h^3\$。对应于动量间隔为 \$dp\_x dp\_y dp\_z\$ 的可能量子态数 \$dZ\_p\$ 为

$$dZ_p = \frac{2L^3}{h^3} dp_x dp_y dp_z \quad (1-10)$$

称 \$L^3/h^3\$ 为动量空间中的态密度。

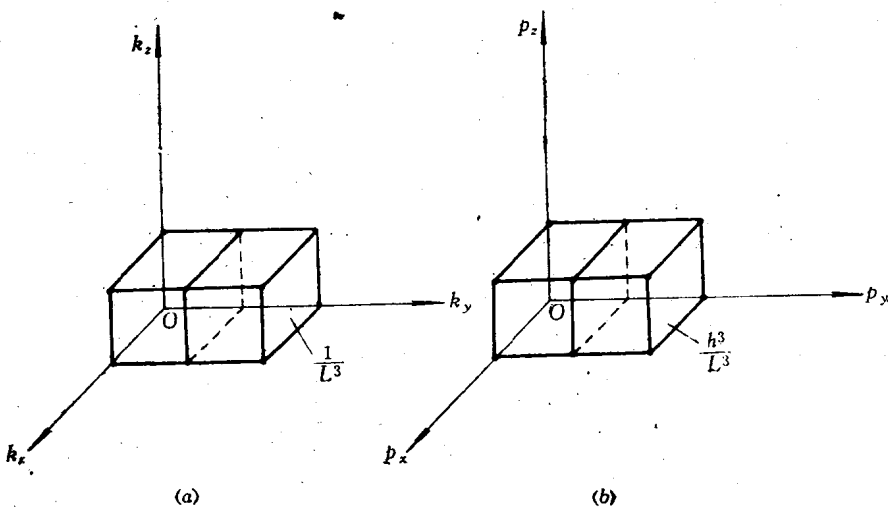


图 1-3 描写电子状态的 \$k\$ 空间和动量空间  
(a) \$k\$ 空间; (b) 动量空间。

对应于能量从 \$E\$ 到 \$E + dE\$ 的量子态数 \$dZ\_E\$, 是由动量空间中动量半径为 \$p = (2mE)^{1/2}\$ 和 \$p + dp\$ 的两个球壳之间的体积来决定的, 这一球壳层的体积 \$dV\$ 如图 1-4 所示, 可求出

$$dV = 4\pi p^2 dp = 2\pi(2m)^{3/2} E^{1/2} dE$$

所以

$$dZ_q = \frac{2L^3}{h^3} dV = \frac{2L^3}{h^3} \cdot 2\pi(2m)^{3/2} E^{1/2} dE$$

$$= \frac{8\pi mL^3}{h^3} \sqrt{2mE} dE \quad (1-11)$$

$$\frac{dZ_E}{dE} = \frac{8\pi mL^3}{h^3} \sqrt{2mE} \quad (1-12)$$

称函数  $dZ_E/dE$  为态密度按能量的分布函数。

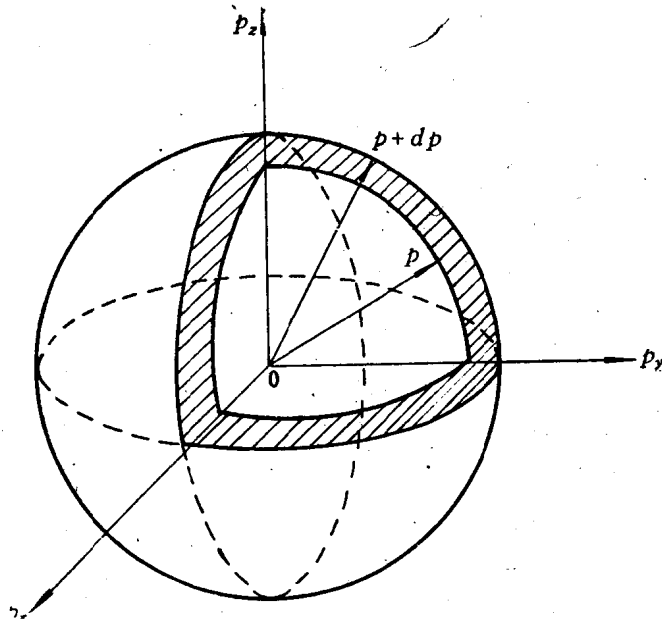


图 1-4 动量从  $p$  到  $p+dp$  所对应的球壳体积示意图

由式(1-10)、式(1-11)可见，不论是按动量或是按能量来计算，可能有的态数都同晶体的大小成正比。同时，一个均匀晶体里的电子数也必定同晶体的大小成正比。所以电子不论按哪种物理量分布，都同晶体的大小无关。

### 1.1.3 金属中自由电子的统计分布

以上讨论了金属中自由电子可能有的各种状态的分布，但这些状态并不一定都占有电子。在建立固体电子发射理论时，还必须知道在单位体积内对应于能量  $E$  到  $E+dE$  间隔中的电子数  $dn_E$ 。由于  $E$  到  $E+dE$  中的量子态数为  $dZ_E$ ，若电子占据能量为  $E$  的状态的几率为  $f(E)$ ，则有

$$dn_E = f(E)dZ_E/L^3 \tag{1-13}$$

由统计物理可知  $f(E)$  就是费米-狄拉克分布函数；

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left[\frac{E-E_F}{kT}\right] + 1} \tag{1-14}$$

式中， $k$  为玻尔兹曼常数； $T$  为体系所处的绝对温度； $E_F$  是费米能级。

把式(1-12)、式(1-14)代入式(1-13)，则可得到单位体积内能量在  $E$  到  $E+dE$  之间的电子数  $dn_E$ ：

$$dn_E = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot \frac{E^{\frac{1}{2}}}{\exp\left[\frac{E-E_F}{kT}\right] + 1} dE \tag{1-15}$$

按式(1-15)可以画出  $dn_E/dE-E$  曲线, 如图 1-5 所示。图中, 曲线 1 是绝对零度时的情形, 2 是高于零度时的情形, 3 为更高温度时的情形。由图可见, 不论在什么温度下, 低能量部份的电子分布没有变化, 只有在  $E_F$  附近几个  $kT$  的小范围内, 电子的分布受到了扰动。关于费米能级的问题下一节还将详细讨论。

金属里单位体积内自由电子按动量的分布可以用类似的办法求得

$$dn_p = \frac{2}{h^3} \cdot \frac{dp_x dp_y dp_z}{\exp\left[\frac{E(p_x, p_y, p_z) - E_F}{kT}\right] + 1} \quad (1-16)$$

其中  $E(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ 。

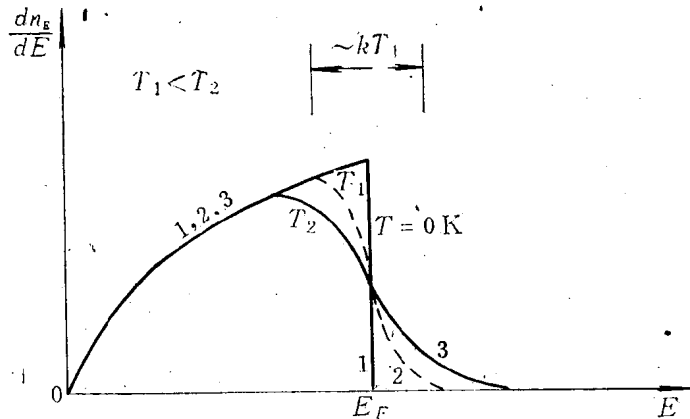


图 1-5 电子按能量分配的函数与 E 的关系

研究单位时间里打在单位面积上的电子数, 对许多问题是很有用的。现在我们来推导动量在  $p_x$  到  $p_x + dp_x$  之间 ( $p_y, p_z$  任意), 每秒钟内由金属内部打到单位面积 ( $1\text{cm}^2$ ) 上的电子数  $dv_{p_x}$ 。

单位体积内动量在  $p_x$  到  $p_x + dp_x, p_y, p_z$  为任意值的电子数为

$$dn_{p_x} = \frac{2dp_x}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_y dp_z}{\exp\left[\frac{1}{kT}\left(\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} - E_F\right)\right] + 1} \quad (1-17)$$

因  $E_x = \frac{1}{2m}p_x^2$ , 并换用极坐标完成上述积分, 可得

$$dn_{p_x} = \frac{2\pi m}{h^3} \left(\frac{2m}{E_x}\right)^{\frac{1}{2}} kT \ln\left\{1 + \exp\left[-\frac{E_x - E_F}{kT}\right]\right\} dE_x \quad (1-18)$$

由图 1-6 可见, 在  $v_x \cdot 1$  的长方体中, 凡是具有速度分量为  $v_x$  的电子, 在单位时间内一定能到达右端平面。所以单位时间内打到该单位截面积上的速度分量为  $v_x$  的电子数  $dv_{p_x}$ , 就等于该长方体中所包含的速度为  $v_x$  的电子数:

$$dv_{p_x} = v_x \cdot dn_{p_x} = \left(\frac{2E_x}{m}\right)^{\frac{1}{2}} dn_{p_x}$$

将式 (1-18) 代入:

$$dv_{p_x} = \frac{4\pi m}{h^3} kT \ln \left\{ 1 + \exp \left[ -\frac{E_x - E_F}{kT} \right] \right\} dE_x \quad (1-19)$$

式 (1-19) 在两种情况下可以得到简化:

1.  $E_F - E_x \gg kT$  时,  $\exp \left[ -\frac{E_x - E_F}{kT} \right] \gg 1$ ,

这时:

$$dv_{p_x} = \frac{4\pi m}{h^3} (E_F - E_x) dE_x$$

2.  $E_x - E_F \gg kT$ , 这正对应于电子发射的情况,

这时:

$$\exp \left[ -\frac{E_x - E_F}{kT} \right] \ll 1$$

考虑到  $\ln(1+B) \approx B$  (当  $B \ll 1$  时) 可得

$$dv_{p_x} = \frac{4\pi m kT}{h^3} \exp \left[ -\frac{E_x - E_F}{kT} \right] dE_x \quad (1-20)$$

有时用速度  $v_x$  的形式表示更方便, 式 (1-20) 可写为

$$dv_{v_x} = \frac{4\pi m^2 kT}{h^3} \exp \left[ -\frac{E_F}{kT} \right] \exp \left[ -\frac{mv_x^2}{2kT} \right] v_x dv_x \quad (1-21)$$

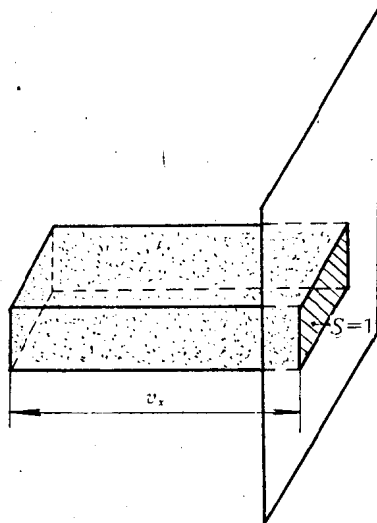


图 1-6

### 1.1.4 金属中电子的费米能级

费米能级  $E_F$  是一个很重要的物理量。我们将对它作进一步的讨论。

在统计物理中引入的费米能级就是系统的化学势。热力学中曾指出, 当从一个粒子系统里取走一个粒子时, 系统自由能的减少量就是化学势 (体积不变时)。由此可知, 固体电子发射的过程也一定与  $E_F$  有关。热力学里的化学势是能量的量纲, 但  $E_F$  则是能级图里的一定位置, 两者不可混淆。这是因为在能级图里,  $E_F$  的值将随对能级零点的不同选择而变化。

如前所述, 费米分布的表达式是

$$f(E) = \frac{1}{\exp \left[ \frac{E - E_F}{kT} \right] + 1}$$

在不同的  $kT$  下可作成如图 1-7 的曲线。由图可见, 当  $kT = 0$  时, 电子占据所有低于  $E_F$  的能级的几率为 1, 而  $E > E_F$  的能级都空着。随着温度的升高, 少数能量略低于  $E_F$  的电子占据了  $E > E_F$  的能级, 温度越高, 占据高于  $E_F$  能级的电子越多。然而, 不管温度如何, 电子占有费米能级的几率总是  $1/2$ , 这是费米分布函数的一个十分重要的性质。

一个系统的费米能级显然与电子总数, 温度等因素有关。在某些系统 (如半导体) 中还与其他能级的具体情况有关。下面来求费米能级的表达式并讨论其性质。

费米能级的数值可以根据系统中电子的总数来确定。金属中电子的能量可以取由 0 到  $\infty$



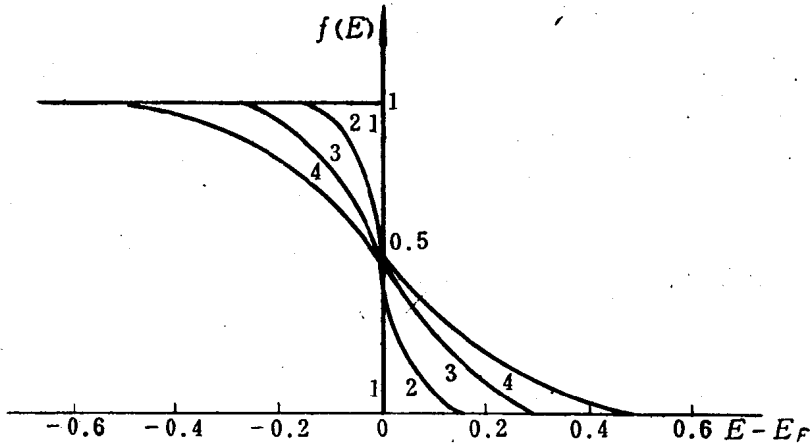


图 1-7 费米分布函数  
1— $T_1 = 0$  K, 2— $T_2 = 300$  K, 3— $T_3 = 1000$  K, 4— $T_4 = 1500$  K。

之间的值，但单位体积内电子的总数应该是一个不变的值  $n$ ，根据式 (1-15)，可求得

$$n = \int_0^{\infty} dn_E = \int_0^{\infty} C \frac{\sqrt{E} dE}{\exp\left[\frac{E - E_F}{kT}\right] + 1} \quad (1-22)$$

其中

$$C = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$$

式 (1-22) 的积分不易求出，我们讨论以下几种情况：

1.  $T = 0$  K。在这种情况下，当  $0 \leq E \leq E_F$  时， $dn_E = C\sqrt{E} dE$ ；当  $E > E_F$  时， $dn_E = 0$ 。所以

$$n = C \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE$$

代入  $C$  求  $E_F$ ，并令这时的  $E_F$  等于  $E_{F_0}$  则得

$$n = \frac{2}{3} C E_{F_0}^{\frac{3}{2}} \quad (1-23)$$

$$E_{F_0} = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (1-24)$$

$E_{F_0}$  表示绝对零度时的费米能级，它对应金属中电子在  $T = 0$  K 时所具有的最大能量。对于金属钨，把相应的数据代入式 (1-24) 后，可算得  $E_{F_0}$  为 8.95 eV。

2.  $T > 0$  K，且  $kT \ll E_F$ ，这时高于  $E_F$  的能级上也存在电子。必须用式 (1-22) 求  $n$ ，积分限从 0 到  $\infty$ 。求解式 (1-22) 的步骤可参阅文献[4]中 §7-2。最后得到

$$n = C \left[ \frac{2}{3} (E_F)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi^2}{12} \frac{(kT)^2}{(E_F)^{\frac{1}{2}}} + \dots \right]$$