

晶体管电路基础

上册

成都电讯工程学院
半导体器件专业教材编写组 编

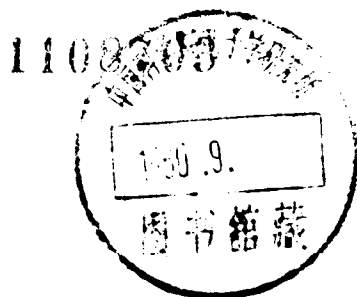
国防工业出版社

7326
206

晶体管电路基础

上册

成都电讯工程学院
半导体器件专业教材编写组 编



国防工业出版社

内 容 简 介

本书对半导体电子学和晶体管电路的基本知识、电路基本原理和基本分析方法作了比较详细地阐述。全书共分上、下两册。上册内容有半导体电子学导论，结型二极管和双极结型三极管，晶体管电路基本知识，低频放大器，负反馈放大器，直流放大器和整流与稳压电路；下册内容有谐振放大器，正弦振荡器，频率变换电路，脉冲电路，场效应管及其电路等。每章末附有习题。

本书可作为职工业余大学有关专业的教材，也可供其它从事电子电路工作的工人和技术人员参考。

晶体管电路基础

上 册

成 都 电 讯 工 程 学 院

半 导 体 器 件 专 业 教 材 编 写 组

编

*

国防工业出版社 出版

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

国防工业出版社印刷厂印装

*

787×1092¹/₁₆ 印张 15¹/₂ 362 千字

1980年7月第一版 1980年7月第一次印刷 印数：00,001—13,000册

统一书号：15034·1981 定价：1.60元

前 言

为满足电子工业半导体器件及有关专业高等业余教育的需要，我们编写了《晶体管电路基础》、《晶体管原理》、《半导体工艺原理》、《半导体模拟集成电路》、《半导体数字集成电路》等专业基础教材。

“晶体管电路基础”上册的第1、2两章由周宗大执笔，第3~7等章由黄嵩如执笔；田吉庆、叶玉林等参加了本书的编审工作。

由于编写时间仓促，业务水平有限，本书难免有错误和不妥之处，敬请读者批评指正。

成都电讯工程学院半导体器件专业教材编写组 编

目 录

第一章 半导体电子学导论	1
§ 1-1 本征型半导体的导电原理	2
§ 1-2 非本征型半导体的导电原理	16
§ 1-3 半导体的电阻率、漂移电流和扩散电流	19
§ 1-4 p-n 结	25
第二章 p-n 结型二极管与双极结型三极管	34
§ 2-1 结型二极管	34
§ 2-2 稳压二极管	45
§ 2-3 窄基区二极管	48
§ 2-4 双极结型三极管	50
第三章 晶体管电路基本知识	70
§ 3-1 概述	70
§ 3-2 晶体管的线性放大工作状态	71
§ 3-3 基本放大电路及其工作原理	74
§ 3-4 放大器的图解分析法	80
§ 3-5 放大器的 h 参数等效电路计算法	85
§ 3-6 静态工作点的不稳和稳定电路	93
第四章 低频放大器	106
§ 4-1 概述	106
§ 4-2 放大器的频率失真	107
§ 4-3 RC 耦合放大级的幅-频特性	110
§ 4-4 功率放大器的几个问题	124
§ 4-5 单端甲类功率放大电路	130
§ 4-6 推挽功率放大器	132
§ 4-7 单端输出推挽功率放大器	138
第五章 负反馈放大器	146
§ 5-1 反馈放大器的一般关系式	146
§ 5-2 负反馈放大器的反馈方式	148
§ 5-3 负反馈对放大器性能的影响	155
§ 5-4 常用负反馈电路的分析	164
§ 5-5 负反馈放大器的稳定问题	176
§ 5-6 寄生反馈和去耦滤波器	181

第六章 直流放大器	186
§ 6-1 单端直接耦合放大器	186
§ 6-2 直流放大器的零点漂移	189
§ 6-3 差动放大器	192
§ 6-4 调制型直流放大器	202
第七章 整流与稳压电路	214
§ 7-1 单相整流电路	214
§ 7-2 平滑滤波器	219
§ 7-3 倍压整流电路	224
§ 7-4 稳压管稳压电路	226
§ 7-5 反馈式串联晶体管稳压电路	229
§ 7-6 可控硅整流器	236

第一章 半导体电子学导论

本书讨论的对象是采用分立元件的电子电路。一般说来,分立元件的电子电路是由有源电子器件(如电子管或晶体管)和无源元件(电阻器、电容器、电感器等)以及直流电源组合而成的。由于晶体管已经在大多数技术领域中取代了电子管,所以我们将主要讨论分立元件的晶体管电路。

电子科学技术的迅猛发展,使电子电路从分立元件的组合过渡到集成化。半导体和厚、薄膜集成电路在许多领域,特别是在电子计算机、国防尖端技术等领域,虽然正在取代分立元件的晶体管电路,但到目前为止,分立元件的晶体管电路仍然有着广泛的应用;而且由于电路理论的统一性,学习分立元件的晶体管电路,可为进一步研究集成电路提供必要的基础知识。因此,不论从实用的观点还是从认识论的观点来看,学习分立元件的晶体管电路还是十分必要的。

有源电子器件是电子电路的心脏部分。了解有源器件的工作原理并掌握它的电特性,是研究电子电路的先决条件。电子管是一种电真空器件,其有源作用产生于器件内部的真空区。要了解电子管的工作原理和电特性,必须先研究真空中电子运动(包括真空中电子产生——热电子发射)的规律。晶体管是一种半导体器件,它的有源作用区处于构成晶体管的固体材料的内部。显然,要想了解晶体管内部的工作原理并掌握其电特性,就应该具备必要的半导体电子学知识。为此,我们在这一章中将首先论述半导体电子学的一些基本概念,从而为今后讨论半导体器件提供必不可少的基础知识。

良导体(金属)的电阻率 ρ 是很低的,只有 $10^{-8} \sim 10^{-4} \Omega \cdot \text{cm}$ (欧姆·厘米)。绝缘体(电介质)的电阻率可能比金属大 $10^{20} \sim 10^{23}$ 倍。顾名思义,半导体是电阻率介乎良导体和绝缘体之间的那一类物质。我们通常以电阻率 $\rho \approx 10^{10} \Omega \cdot \text{cm}$ 作为区分绝缘体和半导体的实际标准。由此可见,半导体的电阻率 ρ 在 $10^{-3} \sim 10^{10} \Omega \cdot \text{cm}$ 的范围内。最重要的单质半导体材料是锗(Ge)和硅(Si)。在室温300K时,纯锗的电阻率为 $47 \Omega \cdot \text{cm}$,纯硅为 $214000 \Omega \cdot \text{cm}$ 。同金属和绝缘体相比较,半导体的电阻率具有一系列的特点。首先,它对温度的变化反应灵敏,纯(本征型)锗或硅在0K时事实上就是绝缘体,随着温度的上升其电阻率将下降,即具有负的温度系数,到室温(300K)时,其电阻率就下降到前面所给出的量值。我们在后面的图1-14中,给出了本征型锗的电阻率和温度之间的关系曲线。金属的电阻率也随温度而改变,并且具有正的温度系数,但这种变化远比半导体为小。以铜为例来看,温度每升高 1°C ,其电阻率增加约0.4%左右,当温度上升 100°C 时增加还不到一半(约40%);而纯锗当温度从 20°C 上升到 30°C 时,其电阻率就降低一半左右。由此可见,半导体器件的特性必然是密切地依赖于温度的。其次,杂质特别是ⅢA族元素〔如硼(B)、铝(Al)、镓(Ga)、铟(In)]和ⅤA族元素〔如磷(P)、砷(As)、锑(Sb)]对半导体电阻率有很大的影响,微量的杂质可使锗、硅的电阻率显著改变。例如在纯硅中加入百万分之一的硼,将使其在室温下的电阻率从 $214000 \Omega \cdot \text{cm}$ 减小到 $0.4 \Omega \cdot \text{cm}$ 左右。杂质对于半

导体特性的影响常常是一个主导的因素，在完美的锗或硅晶体中掺杂，可以精确地控制其电阻率。我们把掺入Ⅲ族杂质的锗或硅称为p型半导体，而把掺入V族杂质的称为n型半导体。晶体管实际上就是在一块半导体上适当地安排p型区和n型区而构成的。半导体的电阻率还有一个特点，就是随光照而改变，这种现象称之为光电导。根据半导体的这一特性，制出了光导管或者叫做光敏电阻。

已经发现一些具有半导体性质的液体和有机化合物，甚至许多部分电离的气体和电解质溶液也具有和固态半导体相类似的性质。但到目前为止，在理论上和技术上处于最重要地位的，仍然是能够制备成高纯度单晶体的单质半导体锗和硅，因此我们将只讨论锗和硅的导电性质。不过应当指出，Ⅲ-V族化合物半导体如砷化镓(GaAs)、磷化镓(GaP)、锑化铟(InSb)等，在工程上的重要性也正在日益显示出来。

研究半导体的导电原理，可以采用两种不同的模型，即共价键模型和能带模型。共价键是化学中常用的概念，利用共价键模型，可以为我们建立关于半导体导电原理的非常形象化的概念，但是它只适合于定性的讨论，对于定量的分析则完全无能为力。能带理论是研究半导体的强有力的工具，但是我们只能把这一模型的讨论限制在定性的范围以内，因为定量的分析是建立在量子力学基础之上的，因而超出了本章论述的范围。平行地运用这两种模型进行讨论，可以起相互补充的作用，它能加深我们对于半导体导电原理的理解。

在这一章里，我们首先讨论本征半导体的导电原理——本征导电，然后讨论杂质电离型即p型和n型半导体的导电原理，最后讨论构成晶体管的基本环节反型(p型与n型)半导体的接触问题即p-n结的工作原理。

§ 1-1 本征型半导体的导电原理

理想的完全没有杂质和缺陷的半导体称为本征型半导体。由于排除了杂质和缺陷的影响，本征导电的原理比较单纯，因此首先讨论这样一种理想情况是适宜的。宇宙中绝对纯的物质是不存在的，当锗和硅单晶体的杂质含量可以提纯到大约 10^{-10} 数量级时，我们可以把它们看作事实上的本征锗和硅。

一、锗和硅的原子结构

锗和硅同属于周期表中的Ⅳ_A族元素，它们的原子序数分别为32和14，原子量分别为72.60和28.06。

物质是由原子构成的，原子是物质进行化学反应的基本微粒。原子仍然具有复杂的结构。对于原子结构，化学和物理学中已经作过论述，现在我们只需作一简要的回顾。

原子由原子核和核外轨道电子两部分组成。电子的主要参量有：

静止质量 $m = 9.11 \times 10^{-31} \text{kg}$ (公斤)

带有电量 $q = 1.60 \times 10^{-18} \text{C}$ (库仑)

科学上把一个电子所带的电量定为一个单位电荷，或者更准确地称之为一个电子电荷单位。

原子核是由一定数量的质子和中子所构成。质子是带一个单位正电荷的微粒，其静止质量为 $1.67 \times 10^{-27} \text{kg}$ ，即大约为电子静止质量的1800多倍。中子是不带电的中性微粒，其静止质量和质子几乎相同。因此，可以认为原子的质量基本集中在原子核。原子核中的

质子数或核电荷数就是元素的原子序数 Z ，它也等于核外电子数。由于原子核的正电荷数等于核外电子的负电荷数，所以整个原子呈电中性。

元素的化学性质和一系列物理性质随元素原子序数递增而周期性变化的规律，就是我们所熟悉的元素周期律。这一规律可以从核外电子壳层结构的重复性中得到解释。

可以设想，电子在原子核周围形成一系列半径逐渐增大的壳层，其延伸度约为 $1\text{\AA}$ (埃)●，即 10^{-10}m (米)。如果电子彼此之间是没有相互作用的 (这一假定只对不太重的原子适用)，则电子在各壳层的分配服从相当简单的规律。设 n 为电子层数，则该层所能容纳的最大电子数 $N_n=2n^2$ 个。但是，原子最外层所能容纳的电子数最多不能超过8个 [钯(Pd)例外]。根据上述法则，可以计算出每一壳层可能容纳的最大电子数如下：

电子层数 $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$

层的名称 K, L, M, N, O, P

层中电子数 $2, 8, 18, 32, 50, 72$

当层中电子达到可以容纳的最大数目时，该层称为饱和层，否则为不饱和层。在每一壳层之中，电子按照一定规律分布在所容许的轨道上围绕原子核运动。

但是，实验给出的结果并不完全符合上面所描述的简单壳层模型，其原因在于电子的相互作用。当考虑了电子的相互作用之后，可以建立更完整的原子理论来正确地解释元素周期律。对这个问题我们不予进一步讨论。必须指出的是，对于原子以及原子内部结构这一类的微观物理现象，只能根据量子力学的规律来加以阐释，譬如这里所涉及的壳层数 n ，就是以后将要讨论的主量子数，又譬如对于所谓电子的轨道，也不能从经典力学的观点去理解它。有关这些问题，我们将在讨论能带模型时给予适当的说明。

根据上面关于原子结构的描述，可以设想电子是在一些容许的轨道上围绕原子核旋转。显然，内层电子在原子核的强大吸引力 (库仑力) 作用下被紧紧束缚起来，而最外层轨道上的电子——价电子，则受到相对说来较弱的吸引力。因此，当原子互相接近以构成物质时，价电子将起着重要的作用。事实上正是价电子决定了元素的化学性质和电学性质。价电子轨道半径已经在前面指出约为 $1\text{\AA}$ 。

现在来具体讨论锗和硅的原子结构。锗和硅的原子结构图分别示于图 1-1 的 (a) 和 (b)。以硅原子为例来看，原子核带有 $+14$ 个单位电荷；核外电子分布情况为： K 层和 L 层分别为2个和8个电子所充满，均属饱和层，最外层有4个价电子。我们可以把硅原子核和内层的10个电子看作带有 $+4$ 个单位电荷的惯性核心，它包含着原子的基本质量，但对于元素的化学性质和

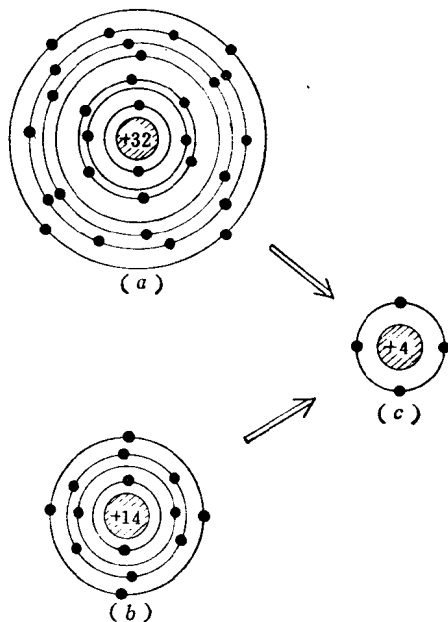


图1-1 锗和硅原子结构的示意图
(a) 锗原子结构图；(b) 硅原子结构图；
(c) 简化的锗、硅原子结构图。

● $\text{\AA}$ (埃) 是长度的单位， $1\text{\AA} = 10^{-4}\mu\text{m} = 10^{-8}\text{cm} = 10^{-10}\text{m}$ 。

电学性质却无明显贡献。决定元素化学和电学性质的是惯性核心之外的 4 个价电子。同样可以认为带 +32 个单位电荷的锗原子核和内层的 28 个电子，形成一个带 +4 个单位电荷的惯性核心而被外层的 4 个价电子所环绕着。于是锗和硅原子都可以用图 1-1(c) 所示出的简化结构图来代表。锗和硅在原子结构上的这种相似性，说明它们必然具有类似的化学和电学性质。

二、锗和硅的晶体结构

锗和硅都可以制备成单晶体。在单晶体中，锗或硅原子按照所谓晶格结构的一定空间图形排列。锗和硅的晶体结构均属于金刚石结构。图 1-2 示出了这种结构的一个单元立方晶体。

图中标出的晶格常数 a 对于锗和硅晶体来说分别为 5.66 Å 和 5.43 Å。圆球代表锗和硅的惯性核心，它们构成晶格点阵。在晶体中每一个锗或硅原子都受到 4 个最邻近的原子的束缚。在用虚线标出的立方体中表明了原子与其 4 个最邻近原子的位置。该原子位于一个四面体的中心，4 个最邻近的原子则占据了这一四面体的四个顶角。不难证明该原子与最邻近的原子间的距离为 $\frac{\sqrt{3}}{4}a$ ，利用前面给出的 a

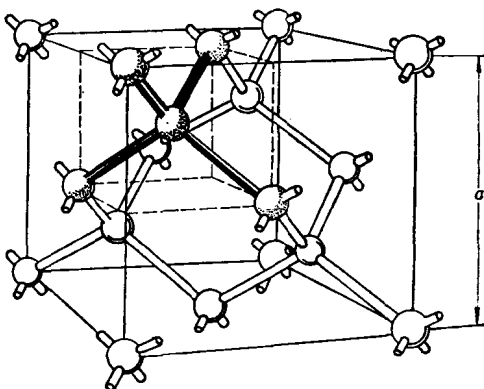


图1-2 金刚石型晶体结构

的数值，就可以得到两个最邻近的锗或硅原子之间距离的实际数值。把此数值与价电子轨道半径(约为 1 Å)相比较，可以看出两个最邻近原子间距离是如此之小，致使它们的价电子轨道将相互交叠。在这种情况下，两个邻近的带正电惯性核心将争夺对方的价电子。由于两个惯性核心夺取对方电子的能力相等，于是建立了两个价电子为两个原子所共有这样一种相对稳定的结构。在图 1-2 中，用连接惯性核心的棒来表征这种价电子对共有化的结构。这种结构叫做共价键或简称为价键。键中的价电子分别来自两个最邻近的原子，由于其相对运动的关系，两个原子之间有了束缚力(即一原子带正电的核心和相邻原子中价电子之间的吸引力)。这一束缚力和两个带正电荷的核心之间的静电斥力刚好平衡。束缚在共价键中的电子称为价电子。正是由于共价键把各原子牢固地保持在这种金刚石型晶体结构之中，因此这种晶体也叫做共价晶体。我们最感兴趣的是如何根据这种晶体结构来解释锗和硅的半导体电学性质。这就是我们在下一节中将要讨论的共价键模型。

三、本征半导体的共价键模型

为了简化起见，我们采用二维的共价键结构示意图。图 1-3(a) 示出了在 $T = 0$ K 时的情况。标有 +4 的小圆代表带有 +4 单位电荷的惯性核心。连接惯性核心的线段表征共价键，短的黑线代表价电子。显然，这种模型既可表征本征锗亦可表征本征硅。在晶体

中虽然存在着大量电子,但束缚在惯性核心中的内层电子显然不能参与导电;而在 $T=0\text{K}$ 时价电子也被束缚在共价键之中。因此,即使在电场的作用下,也没有电子能够从晶体中的这一点自由移动到另一点。这样,锗和硅晶体将和绝缘体一样而不具有导电性。处于这种状态的锗或硅不仅整个晶体为电中性,而且每一原子(在虚线画的圆中)也是电中性的。

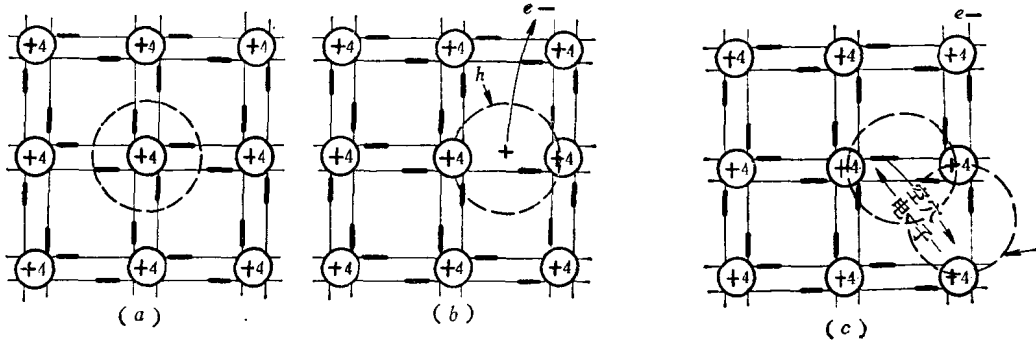


图1-3 二维的共价键结构示意图

(a) $T=0\text{K}$ 时共价键(无导电性); (b) 导电电子-空穴对的产生; (c) 空穴热运动的示意图。

在较高温度下,由于晶格中原子的热振动,有可能使一定数量的价电子从共价键的束缚下解脱出来成为导电电子。使价电子从键中解脱出来所必须给予电子的最低限度的能量 E_g ,叫做价电子的激活能。这实质上是一种电离能。因为晶格中有许多原子都对价电子的运动有影响,使得其数值不同于孤立原子的电离能。对于锗和硅来说, E_g 分别大约为0.7和1.1eV(电子伏)。“电子伏”是一种能量单位,即一个电子通过一伏电势差所获得的能量。 $1\text{eV}=1.60\times 10^{-19}\text{J}$ (焦耳)。晶格振动把能量传递给价键电子使其电离的过程,可以按照光电效应的模式来说明。我们知道,光是由光子组成的,每一光子是一量子(量子和粒子的性质有所不同,量子的静止质量等于零,而粒子如电子等则具有一定的静止质量),具有能量 $E=h\nu$,此处 h 为普朗克常数, ν 为光的频率。当光照射到晶体上时,量子可被晶体吸收而传送到一个共价键上。倘若 $h\nu\geq E_g$,便可以从共价键中逐出一个电子。由 $h\nu_0=E_g$ 便可确定可以激活价键电子的最低频率 ν_0 。因此,晶体被 $\nu\geq\nu_0$ 的光照射时将产生一定数量的导电电子而使晶体导电。这就是前面谈过的光电导现象。事实上晶格原子振动的热能也可产生类似的效果。晶格中的原子并不是互不相干而独立振动的,这和弦线振动中弦线上各点的振动不是互不相干一样。晶格中原子的振动,是由若干不同的基本波动按照波的叠加而成的。我们称这些基本波动为格波。一个格波,它的频率如果是 ν ,那么它的能量是量子化了的,只可以取下列的值:

$$\frac{1}{2}h\nu, \frac{3}{2}h\nu, \dots, \left(n - \frac{1}{2}\right)h\nu, \dots \quad (1-1)$$

因此,一个格波所含振动的能量是以 $h\nu$ 为单元的,增减都只能是 $h\nu$ 的整数倍。有时我们把具有能量 $E=\left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu$ 的格波,描述为 n 个属于这一格波的声子。热能是按麦克斯韦-玻尔兹曼分配函数在各声子之间分布的,即使在室温下,也有一小部分声子具有足以击破共价键的能量。这些高能声子被晶体吸收并传送给共价键时,将产生导电电子。

图1-3(b)给出了产生导电电子 e 的示意图。在晶体中存在着自由漂移的导电电子,

这并不破坏整个晶体的电中性。但在失去一个价键电子的相邻原子处,电中性将不能保持,在那里出现了一个呈+1单位电荷的空位 h ,图中用虚线圆和+号标出了这一空位。这个由于失去电子 e 而留在共价键中的空位 h ,在行为上很像一个带有+1单位电荷的自由粒子,我们把这个带正电荷的粒子叫做空穴。如图1-3(c)所示,空穴显然不是静止不动的,可以想象在图中右下角的价键电子作为其热运动的结果跳入了这一空位,于是原有的空位消失了,但是在右下角出现了新的空位。这样一种价键电子的运动,即价电子从这一共价键跳到另一空的共价键,可以用空穴的反方向运动来描述。

以上的讨论告诉我们,在有限温度的情况下,由于晶格中原子的热振动,将在晶体中产生一定数量的导电电子-空穴对。导电电子和空穴成对产生的现象叫做本征激发。(晶体在光的照射下吸收光子也将产生电子-空穴对,因而称之为本征吸收)这种电子-空穴对所造成的导电现象,称为本征型导电。本征情况所涉及的只是半导体本身结构的特征,而不是外来因素(如杂质)的效果。

在半导体中,电子和空穴均参与导电。在电场的作用下,半导体中将产生电流,而这一电流将包括电子电流和空穴电流两部分。我们把电子和空穴分别称为负性和正性载流子,因为它们是构成电流的带负电和带正电的基本单元。因此可以看到半导体导电和金属导电有着根本差异,在金属中只有一种载流子即自由电子。

本征激发在晶体中产生电子-空穴对,而电子和空穴也可能复合而成对的消失。载流子自产生到与电荷相反的另一载流子重新复合成共价键,这段时间称为载流子寿命。在室温下,锗元素中的电子-空穴对的平均寿命约为 10^{-4} s(秒)。电子-空穴对的产生与复合是一个连续过程。当本征半导体达到任何恒定温度时,电子-空穴对的产生与复合总是处于一个动平衡状态,以致使晶体中的载流子浓度有一定的值。其浓度与温度有关,可以表示为

$$n_i = p_i = 4.82 \times 10^{15} T^{3/2} e^{-\frac{1}{2} \frac{E_g}{kT}} \quad (1-2)$$

式中, k 为玻耳兹曼常数, n_i 和 p_i 代表本征导电电子和空穴的浓度,或总称为本征载流子浓度。对于同一种物质,本征载流子浓度显然只决定于温度。以 $T=300\text{K}$, $E_g=0.7$ 或 1.1eV 代入式(1-2),可以求出本征锗和硅在室温下的载流子浓度分别约为 $3.8 \times 10^{13}(\text{cm})^{-3}$ 和 $1.7 \times 10^{10}(\text{cm})^{-3}$ 。通常计算值和实测值之间有一定差异。

在这一节中,我们根据共价键模型解释了本征晶体中载流子产生的过程。这对于我们初步了解半导体的导电性质是有帮助的。但是,经验证明只有根据能带论,才能适当地阐明绝大多数半导体中电子运动的现象。因此,下面对这一理论作一简要的介绍。

四、能级、能带和本征半导体的能带结构

1913年玻尔提出了分立能级的概念,根据这一假设建立起来的玻尔原子模型,成功地解释了类氢原子的光谱和其它一些现象。由于玻尔理论是经典理论同量子概念的机械的混合,包含着内在的不合理因素,因此它的成就是有限的。它甚至不能对只具有两个电子的氦(He)原子作出定量的解释。从目前看来,这一理论只具有历史的以及教学法上的意义了。正是因为这种教学法上的需要,我们仍然选择玻尔模型作为讨论能级理论的出发点。然后简要地介绍建立在量子力学基础之上的能级论。当讨论半导体这种包含大量电子的系

统时，由于电子的共有化运动，分立的原子能级转化成为能带，即共有化状态的能量不是单一的值，而是分散成一个“带”，即形成一个能带。于是，我们可以根据能带模型给予本征型导电以更准确的解释。

1. 玻尔原子模型

玻尔理论是建立在两个不符合经典力学和经典电动力学的假定之上的。这些假定只在量子力学中才能得到解释。

第一个假定：原子仅可以处在能量值为一定的稳定态中，或者说电子仅可以在一些稳定的轨道上运动，电子在这些轨道上转动时其动量矩为 $\frac{h}{2\pi}$ 的整数倍，即

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad (1-3)$$

式中 $n = 1, 2, 3, \dots$ 。

第二个假定：辐射或吸收仅当从一个稳定态过渡到另一个稳定态时才发生，辐射的频率由下列条件确定

$$h\nu = E_2 - E_1 \quad (1-4)$$

上两式的 h 是前面已经指出的普朗克常数， E_1 和 E_2 代表两个稳定态的能量， m 为电子质量， r 为作圆运动的电子轨道半径。

为了从假定中得到结论，除了这两个假定之外，还必须利用经典物理的理论。我们认为电子是围绕着电荷为 Zq 的核作圆周运动的，根据向心力与库仑吸引力的等式得到

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (1-5)$$

从式 (1-3) 和 (1-5) 可得

$$r_n = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m Z q^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-6)$$

r_n 为可容许的电子轨道半径，它们显然是分立的。轨道上电子的总能量应为动能与势能之和，即

$$E_n = -\frac{Zq^4 m}{8h^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-7)$$

E_n 是电子在可以容许的轨道上（亦即稳定态）所具有的能量值，我们把这些能量值（ n 取不同的整数）叫做原子的能级（或能阶）。 E_n 同可容许的轨道半径 r_n 相对应，因而也是分立的。

当原子序数 $Z = 1$ 时，则所讨论的就是氢原子。这时

$$E_n = -\frac{q^4 m}{8h^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (1-8)$$

取 $n = 1$ ，并代入 $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{F/m}$ （法/米）以及 q 、 h 、 m 的量值，可以算出氢原子内具有最小能量的基本稳定态

$$E_1 = -13.6 \text{eV}$$

于是式 (1-8) 可改写成

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{eV} \quad (1-9)$$

如果想使氢原子电离, 即把电子从基态移到 $E \geq 0$ 的态, 至少要作 13.6 eV 的功。因此 13.6 eV 就是氢原子的电离能。 $E < 0$ 时, 态是分立的, 虽然当 n 很大时, 相邻能级间的距离 (能量差) 非常之小。当 $E > 0$ 时, 态是连续的, 电子成为自由电子。

为了建立形象化的概念, 可以根据上面的论述绘出能级图。能级图是这样绘制的, 选取垂直轴作为电子能量轴, 把 $n = 1, 2, 3, \dots$ 时计算出的分立能量值 $E_1, E_2, E_3, \dots$ 标出在轴上, 通过轴上的这些点作水平线段代表能级。显然, 能级被一系列电子的禁区所分开, 电子不能具有禁区中的那些能量值。虽然直接根据玻尔原子模型绘出的能级图已经没有什么实际意义, 但是这种方法却可以应用到新的理论中去。事实上, 在以后的讨论中, 我们常常用能级图来说明问题。

根据第二个假定, 电子从能量较大的轨道过渡到能量较小的轨道将伴随着量子的辐射, 其频率为

$$r_{nk} = \frac{Zq^4 m}{8h^2 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{K^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R \left(\frac{1}{K^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1-10)$$

式中的 $R = \frac{Zq^4 m}{8h^2 \epsilon_0^2}$ 为罗德堡常数, 计算得到的量值同实验数值非常精确的符合, 这是玻尔理论的主要论证之一。

我们通过对玻尔理论的简单讨论, 引入了分立的原子能级这一重要概念。但是, 只有根据量子力学的原理, 才能阐明原子内部的微观结构。因此, 有必要对量子力学的能级论作一简要的说明。

2. 原子的能级理论

经典物理学中, 在行为方面, 电子被看作类似于通常宏观物体, 它被认为是极小的带电球, 在一般的情况下都可以利用这一概念。然而却不能根据这点解释电子在晶体上反射的实验。正是电子衍射的实验证明了电子具有波的性质, 德布罗意才发展了光学-力学类比, 提出了物质波 (或称之为德布罗意波) 的概念。按照德布罗意的观点, 任何动量为 P 的物体都与一个波长 λ 相联系, 这个波长为

$$\lambda = \frac{h}{P} \quad (1-11)$$

对于宏观物体, 由于其质量很大, 所以与其相联系的波长极短, 以致不可能发现。只有微观粒子 (电子、质子、中子等), 虽然它们的波长也很短, 但却可以测量到。电子显微镜是德布罗意波的实际应用。

由于电子具有微粒性和波动性的联系, 在原子中电子的轨道并不象在经典运动中那样有一个确定的轨迹, 而轨道是量子化了的。所谓量子化轨道, 实际上是说电子以一定的几率出现在各处。例如, 所谓内层轨道, 指电子出现的几率更集中于原子核附近, 而外层轨道, 则指电子出现的几率更靠近于外围区域。

和宏观现象不同, 在原子中, 原子核与电子之间以及电子与电子之间的相互联系, 有着微观的特殊规律性。这种规律性, 主要的是前面已经提出的量子化和泡利原理 (即电子状态的不相容原理)。

量子力学证明, 服从量子化规律的不仅是能量, 还有电子在原子中运动的其它一些特性, 例如: 轨道动量矩, 这个动量矩在给定方向的投影, 以及电子固有的机械动量矩 (自

旋)。后者是与质点围绕自己轴线旋转有关的机械动量矩的量子类比。

由此可见,原子的能级具有复杂的和精细的结构。在原子中,电子只能处于一系列容许的稳定态中。按照量子力学的观点,这些态是由四个量子数即 n 、 l 、 m 和 m_s 所确定。

n 称为主量子数,它可以采取 $1, 2, 3, \dots$ 正整数值。如果不存在电子的相互作用,则它确定了电子的全部能量和前面曾经引用过的电子壳层。

l 称为方位量子数,它确定电子的轨道动量矩并对电子的能量有所影响。当给定主量子数 n 时,方位量子数可以采取下列的一些整数值,即

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1) \quad (1-12)$$

常常采用一种用字母代替 l 数值的标记方法,即

$$l \text{ 的数值: } 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

$$\text{代替字母: } s, p, d, f, g, h, i$$

在复杂原子中必须考虑电子的相互作用,因此电子的能量与 n 和 l 都有关系。由于 n 和 l 的竞争将导致出现一些异常的能级,即 n 增加而同时 l 减小的态的能量,比 n 保持不变而 l 增加时态的能量还要小。

m 称为磁量子数,它确定轨道动量矩在给定方向(一般选择 OZ 轴)上的投影,它对电子能量的影响甚微。当选定方位量子数 l 的值时,磁量子数可以采取下列 $2l+1$ 个不同的值,即

$$m = 0, \pm 1, \dots, \pm(l-1), \pm l \quad (1-13)$$

m_s 确定自旋动量矩在 OZ 轴上的投影,并可取 $\pm \frac{1}{2}$ 的值。只有引入电子自旋的概念,才能解释能级的精细结构。

我们引入了四个量子数并作了简要的介绍,下面将根据这四个量子数来说明原子的能级结构,而不进一步讨论它们的来源和物理意义。

泡利原理是另一个特殊的规律。对于这一原理可以表述如下:在多电子的系统中,在以量子数 n 、 l 、 m 、 m_s 表征的量子态里,不可能有多于一个的电子。根据大量光谱学方面的材料和对于元素周期系结构原理的分析,建立了泡利不相容原理。它表明电子与电子是互相躲避的,它们不能处于同一个态中。但这与电子的静电相互作用无关,因为泡利原理虽然是针对电子建立起来的,却可以推广到其它一些粒子,例如中子也服从泡利原理,显然中子之间不存在静电的相互作用。

如果我们只用 n 、 l 、 m 三个量子数来表征一个态,那么在这样的态中最多可以容纳两个自旋相反的电子。这一种说法和上面对于泡利原理的表述显然是等效的。

综合以上的讨论,可以认为:原子的能级是由一系列量子态(稳定态、容许态)所构成,每一个态是由四个量子数 n 、 l 、 m 、 m_s 所确定的,一个态或者是空着,或者最多被一个电子所占据。

图 1-4 示出了上述的能级理论。图中给出的是氢原子中单一电子的部分能级和容许态的示意图。对于氢原子来说不存在电子的相互作用,因此主量子数 n 将决定电子的全部能量。对于多电子的原子来说,如果不存在电子的相互作用,那么它们也具有非常相似的能态排列。图中用 n 、 l 、 m 三个量子数来表示容许的态,而以指向相反的箭头代表第四个

量子数——电子自旋。显然图 1-4 不能说明异常能级的情况,也不能据以解释元素周期表。

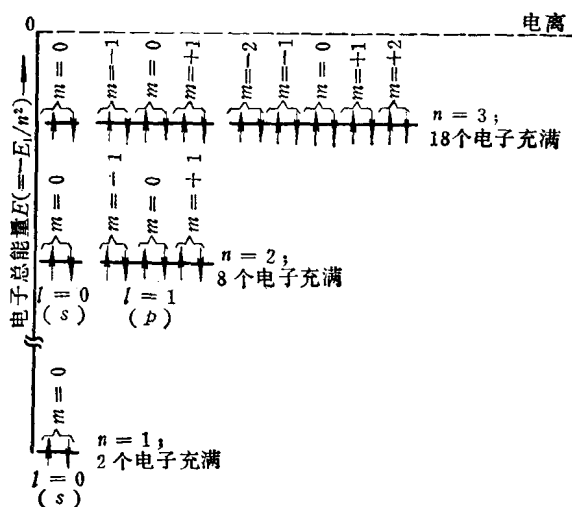


图1-4 氢原子中单个电子的部分能级和容许态的示意图

根据图 1-4 可导出表 1-1, 而得到更加明确的概念。

表1-1 具有四个量子数所有可能值的容许态表

量子数				能级名称	容许态数目	量子数				能级名称	容许态数目
n	l	m	m_s			n	l	m	m_s		
1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	1s	2	3	1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	3p	6
2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2s	2			0	$\pm \frac{1}{2}$		
								+1	$\pm \frac{1}{2}$		
2	1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	2p	6	3	2	-2	$\pm \frac{1}{2}$	3d	10
		0	$\pm \frac{1}{2}$					-1	$\pm \frac{1}{2}$		
		+1	$\pm \frac{1}{2}$					0	$\pm \frac{1}{2}$		
3	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	3s	2			+1	$\pm \frac{1}{2}$		
								+2	$\pm \frac{1}{2}$		

在讨论原子结构的壳层模型时曾经指出: 设 n 为电子层数, 则该层所能容纳的最大电子数 $N_n = 2n^2$ 个。这一论断很容易根据图 1-4 给出的能级图予以证明。因为如果不存在电子的相互作用, 则主量子数 n 既决定了电子能量也规定了壳层数, 显然同一壳层中的电子将具有相同的能量值但却具有不同的 l 、 m 、 m_s 的值, 亦即处于不同的态。按照泡利原理, 因为每一态里的电子不可能多于一个, 那么计算出 n 一定时 (即同一壳层中) 容许态的数目, 也就确定了壳层中所能容纳的最大电子数。根据式 (1-12) 和 (1-13) 并考虑到

有两种自旋时, 可得

$$N_n = 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \\ = 2[1+3+5+\cdots \\ + (2n-1)] = 2n^2 \quad (1-14)$$

由于没有考虑电子的相互作用, 因而根据图 1-4 的能级图来解释复杂原子 ($Z > 10$) 中的物理现象, 将会导致错误的结论。拿 $Z=28$ 的元素镍 (Ni) 为例来看, 镍有 28 个核外电子, 从图 1-4 可以看出, 在 $n=1, 2, 3$ 的三个壳层中, 共有 $2+8+18=28$ 个容许的态, 28 个电子刚好充满这 28 个态, 即构成了三个饱和层, 镍应当属于惰性的元素。然而事实并非如此, 因为镍在能级 $3d$ 上只有 8 个电子而不是 10 个, 另外两个电子则是在能级 $4s$ 上。

当不存在外加磁场时 (场的方向约定为沿着 OZ 轴), 量子数 m 和 m_z 是没有物理意义的, 在这种情况下引入 m 和 m_z 只是为了计算容许态的数目。因此, 如果不考虑能级的精细结构, 则可以得到一种只用量子数 n 和 l 所描述的能级图。图 1-5 示出了这样一种能级图, 而在大多数情况下我们使用的正是这种形式的能级图。图中的能级 $3d$ 、 $4d$ 、 $4f$ 等, 显然就是曾经指出过的异常的能级。能级 $3d$ 比 $4p$ 具有更大的能量值, 而 $4f$ 则比 $5d$ 具有更大的能量值。这种异常的能级的出现可以简略解释如下: 当电子充填复杂原子中的各态时, 由于电子的相互作用, 量子数 n 和 l 将发生特殊的竞争, 于是出现 n 增加同时 l 减小所得的能量, 比 n 保持不变而 l 增加时所得的能量还要小的这种异常现象。

我们曾经利用量子化轨道的概念来描写原子中电子的运动状态, 显然每一量子化的轨道对应一定的量子化能级。因此, 可以说原子从内到外依次有 $1s, 2s, 2p, 3s \cdots$

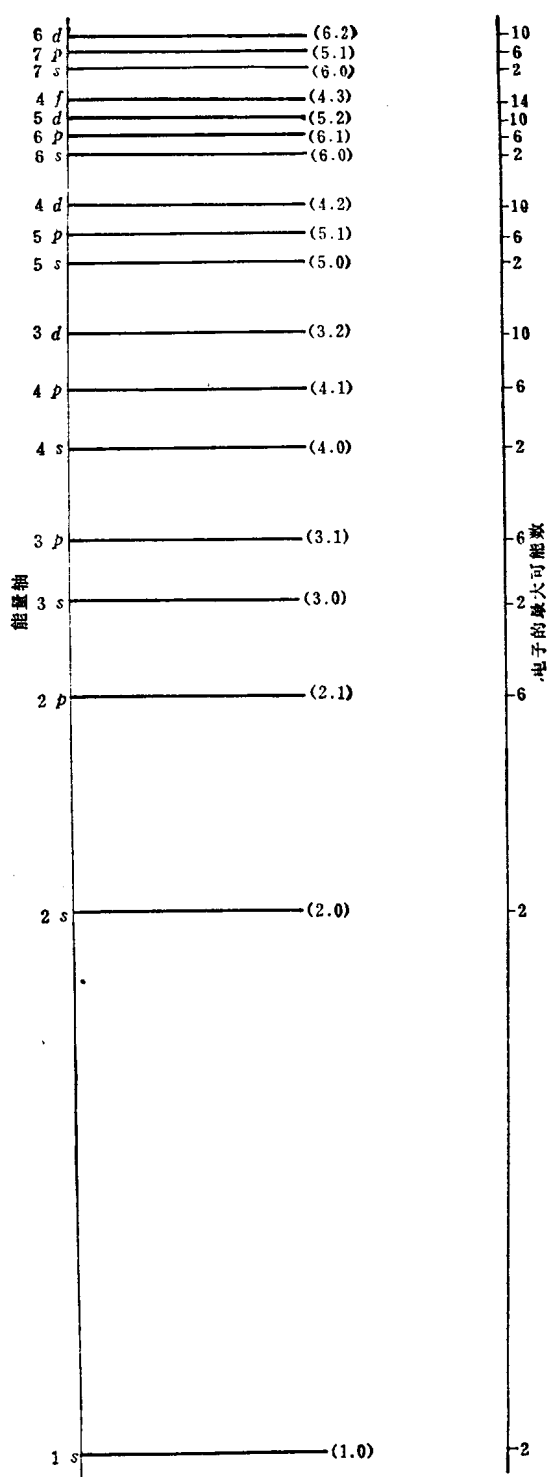


图1-5 能级图