



生物医学工程学科规划教材

医学成像

的基本原理

黄力宇 编著



电子工业出版社

PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY <http://www.phei.com.cn>

生物医学工程学科规划教材

医学成像的基本原理

黃力宇 编著

電子工業出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京 · BEIJING

内 容 简 介

本书完整系统地讨论了医学临幊上最幊见的 X 光(包括 X-CT)、超声、磁共振、核素等四大成像的基本原理,描述对图像性能的评价,说明最新发展与趋势。除此之外,对目前成像领域的研究热点如分子成像、功能成像也在最后给出了简要介绍。

本书的特色是注重基本概念和方法,尽可能地采取定量描述以使讨论达到一定深度,通俗易懂,方便自學。读者只要经过理工科大学二年级的数理训练,读懂本书应该不存在知识盲点。

尽管本书编写的目标和出发点都是立足于为研究型大学“生物医学工程”专业的本科高年级学生、或为研究生教学提供深度适中的教材,但几乎所有理工科毕业的相关从业人员或对医学成像技术感兴趣的读者阅读起来也不会有太大困难。

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,侵权必究。

图书在版编目(CIP)数据

医学成像的基本原理/黄力宇编著. —北京:电子工业出版社,2009.5

生物医学工程学科规划教材

ISBN 978-7-121-08594-9

I. 医… II. 黄… III. 影像诊断—成象系统—高等学校—教材 IV. R445

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 046254 号

责任编辑:陈晓莉

印 刷:北京海淀区四季青印刷厂

装 订:涿州市桃园装订有限公司

出版发行:电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编 100036

开 本: 787×1092 1/16 印张:25 字数:640 千字

印 次: 2009 年 5 月第 1 次印刷

印 数: 4000 册 定价:40.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题,请向购买书店调换。若书店售缺,请与本社发行部联系。联系及邮购电话:(010)88254888。

质量投诉请发邮件至 zlts@phei.com.cn,盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

服务热线:(010)88258888。

代序

“医学成像原理”是生物医学工程专业学生必修的核心专业课程之一。医学成像涉及的技术蕴含了一个多世纪以来多个学科门类科学的研究和技术发展的成果，直接推动医学成像技术发展的诺贝尔奖获得者就超过十位，间接相关的更多达数十位。医学成像技术是现代医学中极其重要的手段之一，诊疗技术的新突破常常与成像技术的新进展有密切的关系。显然，掌握成像的基本原理对于一个工程技术人员更好地为医学的发展服务是很必要的。

目前与医学成像相关的著作已出版不少，但往往选材有所偏颇，不能涉及当今所有主要的医学图像器材，适合作为教材在教学中使用的就更为少见。黄力宇所著《医学成像的基本原理》一书，内容较为全面，而各不同机种的分量取舍较为得当，作为高校生物医学工程专业的教材使用比较合适。但由于篇幅较大，往往在有限的学时内很难涉及所有的内容，建议各校要在各自的课程设置条件下，适当地增删某些章节，以求在整个教学计划中覆盖所有重要的成像技术。

本书最为突出的优点是着重在各种成像方法的物理原理，而对成像理论中涉及计算方法的长篇数学推导则大多省略，或只给出主要结论。因为本课程的难点是在于新方法的物理原理，只要弄清了各种新型探测器和能量源的原理，学生就能迅速抓住成像原理的核心。本书的这个特色是值得推荐出版的理由。

医学成像涉及的一些技术原理是艰深的，恰当地描述这些技术的复杂机理有助于学生在有限的学时内更好地理解和掌握其中的核心内容。本书从最基本的概念讲起，内容较完备。可读性好是本书的另一个优点，估计学生自学应无困难。

医学成像技术还在不断发展中，功能成像或分子成像是当今最引人瞩目的研究热点。教材的最后一章概述了功能成像中相对成熟的几种技术，收入了最新的研究成果也是本书的一个亮点。

作者为了强调物理基础在第1章增设了对物质结构的物理学温习，是一个好的创意，在教学中可略去不讲，以备学生查阅。

本书中也看到一些疏漏，如 X 线电源未提及现大量采用的高频高压；最后一章将超声造影剂列为分子成像的一种似乎牵强，可移前。望在再版或修订时能予以补充和修正。

总之，本书是值得立即付印的新教材。

李大华

2009 年 4 月 6 日

前　　言

前些年,开设生物医学工程本科或研究生教育的学校大多集中在国内比较知名的重点院校,但现在大多数医学院和相当一部分工科院校都有了生物医学工程专业,累计高校已超过百所。然而,与各学校培养生物医学工程专业高级人才的热情相比,生物医学工程专业的教材建设却相对滞后,各门专业课都缺少业界公认的优秀教材,教师选择教材的余地很小。以“医学成像技术”课程为例,国内目前同类教材极为匮乏。清华大学高上凯教授主编的《医学成像系统》(清华大学出版社 2000 年出版)注重系统分析方法,但以不足二百页的篇幅要使讨论达到一定深度还显困难。西安交通大学黄诒焯教授翻译的《医学成像的物理原理》一书(高等教育出版社 1993 年出版)用浅显的语言定性描述医学成像的原理,曾在国内多所高校使用。但该书外文原版编写的主要目的是为培训临床医生和相关工程师使用的,其内容侧重、理论深度和描述方式都使得该书不太适合用于研究型大学的本科生教学。另外,该书原版出版较早(1988 年),许多成像技术的新发展不可能提及。

相比之下,近年出版的国外原版医学成像原理类著作的内容往往十分丰富,除了四大成像的基本知识外,还涉及发展历史、图像质量的评价与影响因素、放射防护、伪像的产生与消除,有的还介绍了不少相关的基础知识如概率与统计、傅里叶变换、计算机网络,甚至包括人类的视觉特性等。但原版书不适合作为教材使用的原因包括篇幅过大、内容过多过细,部分我们认为重要的内容却一带而过,如断层成像的重建算法在多本原版书中都介绍得相当简略。另外,购买国外原版书非常昂贵,翻印又会存在知识产权问题。编写适合我国国情的医学成像教材刻不容缓。

本教材是在作者多年来为西安电子科技大学生物医学工程专业本科生授课所用讲义的基础上充实而成的。编写的目标和出发点都是立足于为研究型大学生物医学工程专业的高年级本科生或研究生教学使用,在编写过程中注意突出以下几点:

1. 注重基础。本教材的特色是强调基本概念和方法,从最基本的概念开始讨论四大成像的成像机理,对具体设备的讲述则相对简略,因为具体的仪器设备会更新换代,但成像的基本方法则不容易过时。

2. 内容系统。本教材完整地讨论了医学临幊上最常见的 X 光(包括 X—CT)、超声、磁共振、核素等四大成像的成像机制,涉及相关器件、材料、算法、药物,描述对图像性能的评价,给出最新发展与趋势。除此之外,本教材对目前成像领域的研究热点如分子成像、功能成像进行简要介绍,作为最后一个章节供各学校根据情况选用。

3. 通俗易懂。本教材的论述是较完备的。读者只要经过大学二年级的数理训练,读懂本书主要内容应该不存在知识盲点。编写过程注重论述的来龙去脉,方便自学。

4. 难易适中。尽管本教材注重基础,尽可能从定量的角度说明问题,但对过于烦琐的理论推导则大多舍弃,只给出最终结果,以免喧宾夺主。如果读者需要了解某些结论的来源,可查阅相关文献。

为方便各学校教师教学,与本书配套的教学课件也已制作完毕。使用本书作为教材的教

师可发电子邮件联系作者索取。

本着注重基本概念、尽可能定量描述、内容系统全面的编写原则,本书包含的内容较多,希望为教师教学提供较大的选择余地。全面讲授本书内容约需 70~80 学时,但国内高校在开设“医学成像技术”类课程的同时大多数还开设有“医学超声学”课程,超声成像的内容在“医学成像技术”课程中可不再讲授,这样所需学时就下降为 50~60 左右。如果想用 40~50 个学时讲授完本课程,教师可根据学校性质、培养目标、教师和学生的实际情况酌情裁剪内容,如物质的结构与性质一章的内容可分解后分别放在 X 射线和放射性核素成像的相关位置讲授;CT 的伪像及其产生的原因这一部分可略去或安排学生自学;CT 图像的质量评价和 CT 技术的发展这些内容可简要提及,或者对 CT 的图像重建算法部分仅进行定性讨论。

本书的编写和出版得到西安电子科技大学教学改革项目和教材建设重点项目资助。我国生物医学工程学科的奠基人、IEEE Life Fellow、西安交通大学生命科学与技术学院资深教授蒋大宗先生以耄耋之年,不辞辛劳审阅了书稿的主要内容。蒋先生对医学成像关键技术的深刻理解和远见卓识常使作者有醍醐灌顶之感,更以严谨、博学、宽容为后进学人树立了难以企及的标杆。西安交通大学医学院资深教授黄治焯先生、中国科学院自动化研究所研究员田捷博士、中南大学生物医学工程系教授邓振生博士也对书稿的内容进行了审阅,提出了详细的修改意见。作者指导的研究生高莉、林富国、史文虎、张培、徐磊、张秀芝、杨建、赵鹏等在资料收集、外文资料的翻译等方面给予作者许多帮助。电子工业出版社的陈晓莉编辑为本书的出版做了大量细致的工作。作者在此一并致谢,其中的感激自不待言。

本教材在编写过程中参考了大量相关文献,书后所附仅是其中最主要的一部分。尽管书中绝大多数附图都是作者在参考文献的基础上亲自绘制的,但为了更好地说明问题,也有一些插图直接引自前辈学者的论文或贤学者的著述,这都在图题中一一标注了出处。极个别出处不易确定的图片(主要来自一些网络论坛)则未加说明地予以引用,等明确权属后在修订重印时再行注明。作者对这些文献资源的编绘者表达深切的谢意。

医学成像技术发展到今天的水平是多个学科一个多世纪以来发展与交叉融合的结果,其内容横跨数学、物理、化学、材料、生物医学、电子信息、光学、机械等学科门类,在教材编写过程中要对涉及不同学科的知识点进行准确描述是有难度的。尽管作者希望精益求精,但学海无涯,不恰当的提法、理解偏差甚至谬误都是完全可能存在的。欢迎阅读本书的读者随时指教,以便修订再版时及时更正。

huangly@mail.xidian.edu.cn

作 者
于西安电子科技大学

目 录

第1章 物质的结构与性质	1
1.1 物质的原子结构	1
1.1.1 原子与原子核	1
1.1.2 电子	2
1.1.3 原子核的自旋与磁矩	3
1.1.4 核素	7
1.2 能量与辐射	8
1.2.1 能量、功率、强度	8
1.2.2 辐射	9
1.2.3 标识辐射和俄歇电子	9
1.3 放射性物质	10
1.3.1 衰变指数规律和描述参数	11
1.3.2 典型衰变简介	14
1.3.3 衰变纲图(decay schemes)	16
1.3.4 连续衰变	17
1.3.5 放射平衡	18
第2章 X射线的产生与辐射剂量	21
2.1 X射线管	21
2.2 管电压的产生与控制	25
2.2.1 高电压的产生	25
2.2.2 控制电路	26
2.3 X射线产生的物理机制	28
2.3.1 X射线的能量谱	28
2.3.2 X射线管的效率	30
2.3.3 X射线的滤过	31
2.4 X射线管的焦点与额定参数	32
2.4.1 X射线管的焦点	32
2.4.2 X射线管的额定参数	34
2.5 X射线的剂量	36
2.5.1 流量、通量与强度	36
2.5.2 照射量与吸收剂量	37
2.5.3 不同辐射源生物效应的比较	38
2.6 X射线的物理特征	42

第3章 X射线与物质的相互作用	44
3.1 X射线与物质作用的机制	44
3.1.1 作用参数	44
3.1.2 光电效应	48
3.1.3 康普顿散射	49
3.1.4 电子对效应	51
3.1.5 三种效应的总结	52
3.2 X射线在介质中的吸收	53
3.2.1 化合物与混合物的等效原子序数	53
3.2.2 X射线在介质中的边缘吸收现象	54
3.2.3 连续能谱X射线在介质中的衰减	55
3.3 X射线与人体组织的交互	57
第4章 X射线摄影与透视	61
4.1 X射线摄影	61
4.1.1 胶片	61
4.1.2 增感屏	63
4.1.3 散射与滤线器	65
4.1.4 特殊X射线摄影	66
4.2 X射线透视	68
4.3 数字X射线成像	71
4.3.1 概述	71
4.3.2 胶片的数字化	72
4.3.3 计算机X射线摄影术	75
4.3.4 直接数字摄影术——DR	78
4.3.5 线扫描直接数字摄影术——多丝正比法	80
4.3.6 数字减影技术	84
第5章 X射线计算机断层成像	90
5.1 引言	90
5.2 X-CT的扫描方式	92
5.2.1 几个基本概念	92
5.2.2 主要的扫描方式简介	93
5.3 CT图像的重建算法	99
5.3.1 解方程组法图像重建	99
5.3.2 直接反投影法	100
5.3.3 滤波反投影法	102
5.4 CT图像的显示与后处理	114
5.4.1 CT图像的灰度显示	114
5.4.2 CT图像显示的窗口技术	114
5.4.3 其他后处理技术简介	116
5.5 CT扫描机的硬件组成	119

5.5.1 X射线管	120
5.5.2 准直器	121
5.5.3 X射线探测器	121
5.5.4 机架和滑环	122
5.6 CT图像的质量评价	122
5.6.1 对比度分辨率	123
5.6.2 空间分辨率	124
5.6.3 噪声	126
5.6.4 CT值的准确度	128
5.6.5 剂量	128
5.6.6 图像质量及相关参数间的制约关系	129
5.7 伪像及其产生的原因	130
5.7.1 伪像的定义	130
5.7.2 与系统设计相关的伪像	131
5.7.3 与射线管相关的伪像	136
5.7.4 与射线探测器相关的伪像	137
5.7.5 受检人体引起的伪像	140
5.8 CT技术的发展和应用	144
5.8.1 基本趋势	144
5.8.2 CT技术进展	146
5.8.3 新技术的典型应用	148
第6章 放射性核素成像基础	152
6.1 概述	152
6.1.1 放射性核素示踪技术	152
6.1.2 核素成像的分类和技术特点	154
6.2 医用放射性核素的生产	154
6.2.1 回旋加速器法	154
6.2.2 核反应堆法	156
6.2.3 核素发生器法	157
6.3 放射性药物	163
6.3.1 放射性药物的标记	163
6.3.2 放射性药物的体内选择性聚集机制	164
6.3.3 典型显像剂简介	167
6.4 核辐射探测器	168
6.4.1 闪烁体	169
6.4.2 光的收集和光导	171
6.4.3 光电倍增管	172
6.5 放射性测量中的统计特征	174
6.5.1 放射性衰变与测量的统计涨落	174
6.5.2 放射性测量的误差估计	176

6.5.3 放射性测量的质量控制	178
第7章 放射性核素成像装置	180
7.1 γ 照相机	180
7.1.1 γ 照相机的系统构成	180
7.1.2 γ 照相机的性能评价	189
7.2 单光子发射计算机断层成像	192
7.2.1 SPECT 的成像原理	193
7.2.2 SPECT 图像的特点与质量控制	197
7.3 正电子发射计算机断层成像	199
7.3.1 引言	199
7.3.2 PET 成像的原理	202
第8章 医学超声的物理基础	214
8.1 超声波的性质	214
8.1.1 超声波的分类和特征量	214
8.1.2 声波在介质中的传播规律	218
8.1.3 声波在介质中的衰减	225
8.2 超声波的生物效应	228
8.2.1 生物效应的发生机制	228
8.2.2 超声医学成像的安全剂量	230
第9章 超声成像系统	232
9.1 超声波的发射与接收	232
9.1.1 压电效应与压电材料	232
9.1.2 超声换能器	237
9.1.3 超声换能器的声场分布	239
9.1.4 超声波声束的聚焦	244
9.2 超声成像的基本技术	247
9.2.1 脉冲回波检测技术	247
9.2.2 回波检测技术涉及的参数讨论	248
9.2.3 回波信号处理技术	250
9.3 超声成像的主要方式	251
9.3.1 A型超声诊断仪	251
9.3.2 M型超声诊断仪	253
9.3.3 B型超声诊断仪	253
9.4 超声图像的质量评估	260
9.4.1 典型技术指标	260
9.4.2 伪像	262
第10章 超声多普勒血流测量与成像	265
10.1 多普勒效应	265
10.2 多普勒血流测量中的信号处理	267
10.2.1 血流方向信息的提取	268

10.2.2 血流速度值的提取	271
10.3 超声多普勒血流测量系统	274
10.3.1 连续波超声多普勒血流测量仪	274
10.3.2 脉冲波超声多普勒血流测量仪	275
10.3.3 多普勒信息的表达	277
10.4 超声多普勒血流成像	278
10.4.1 连续波超声多普勒血流成像	279
10.4.2 脉冲超声多普勒血流成像	279
10.4.3 彩色超声多普勒血流成像	280
第 11 章 磁共振成像基础	288
11.1 静磁场中的磁性核	288
11.1.1 拉莫尔进动	288
11.1.2 塞曼效应与磁共振现象	290
11.2 核磁共振的宏观描述	294
11.2.1 磁化强度矢量	294
11.2.2 弛豫和弛豫时间	300
11.2.3 自由感应衰减信号	308
11.3 脉冲序列与组织对比	309
11.3.1 部分饱和序列与 T_1 对比	309
11.3.2 组织的 T_2 对比与自旋回波技术	314
第 12 章 磁共振图像的建立	322
12.1 基于梯度场的断层选取	322
12.1.1 MRI 图像建立概述	322
12.1.2 影响断层选取的因素	326
12.2 平面内信号源的定位	331
12.2.1 频率编码	331
12.2.2 相位编码	333
12.3 K 空间与傅里叶变换图像重建	337
12.3.1 数据空间及其数字化	337
12.3.2 K 空间	340
12.4 MRI 扫描仪	346
12.4.1 磁体系统	346
12.4.2 梯度场系统	350
12.4.3 射频发射与接收系统	353
第 13 章 功能成像与分子成像	357
13.1 概述	357
13.2 弥散加权与弥散张量成像	358
13.2.1 弥散加权成像	358
13.2.2 弥散张量成像	363
13.2.3 弥散成像的应用	365

13.3 基于 BOLD 的脑功能成像	366
13.3.1 BOLD 功能成像的基本原理	367
13.3.2 BOLD 功能成像的过程	370
13.4 磁共振分子成像	376
13.4.1 磁共振造影剂	376
13.4.2 磁共振分子探针	379
13.5 超声分子成像	382
13.5.1 超声造影与造影剂	382
13.5.2 超声分子成像造影剂	386
参考文献	388

第1章 物质的结构与性质

1.1 物质的原子结构

1.1.1 原子与原子核

1. 质量与电荷

物质是由原子组成的。某些物质仅由一种原子组成，另外一些物质由两种或两种以上的原子组成，这些物质是化合物或混合物。原子由带正电荷的原子核和围绕在原子核周围带负电荷的电子壳层组成。参见图 1.1，原子核处在原子的中央，尺寸小而结构紧密，半径约为 10^{-12} cm。原子核又由中子和质子组成，质子和中子统称核子。质子数常用 p 表示，中子数常用 n 表示。原子核内核子的总数称为质量数，用 A 表示，即质量数 A 等于核内质子数 p 加上中子数 n 。氢原子核中只有一个质子，没有中子，因此有时直接就称氢原子核为质子。

粒子（甚或物质）所带电量的大小呈现量子化特征，总是一个电子所带电量的整数倍。质子的带电量为 $+e$ ，大小与一个电子所带的电荷相等，但符号相反。中子是电中性的粒子，对外不显电性。

质子的质量 $m_p = 1.6726 \times 10^{-27}$ kg，约是电子质量的 1836 倍。中子的质量为 $m_n = 1.6749 \times 10^{-27}$ kg，与质子质量相差不多，约是电子质量的 1836.3 倍。质子与中子的大小也相差不大，两者的质量和占了整个原子的绝大部分质量。常用原子质量单位(u)来定量地描述亚原子层级粒子的质量，其与千克的换算关系是：

$$1u = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg} \quad (1.1)$$

原子质量单位(u)来源于质量数 A 为 12 的碳原子，将其质量定义为 12.000u。这样，一个质子的质量约为 1.007276u，一个中子的质量为 1.008665u。当以原子质量单位衡量原子核的质量时，核的总质量近似等于该核的质量数。如³⁵Cl 的质量为 34.96885u，³⁷Cl 的质量是 36.96590u，它们的近似值分别是 35 和 37，等于其质量数。

原子中包含的质子数也称为原子序数，以字母 Z 代表。显然， $Z=p$ 。另外，原子序数也等于核外的电子数。原子核具有质量且带正电，其电量 q 的大小等于核外电子电量和的绝对值。显然， $q=Ze$ 成立。每个原子序数都对应了一种化学元素。目前已知约 109 种化学元素，其原子序数就是从 1~109，代表不同元素对应的原子核内含有 1~109 个质子。

实验表明，可以将不同原子核的几何结构都近似看成球体，原子核内电荷与物质的分布近似可以认为是球对称的，这样，就可以用原子核的半径来表示原子核的大小，且如下关系式存在

$$R=R_0 A^{\frac{1}{3}} \quad (1.2)$$

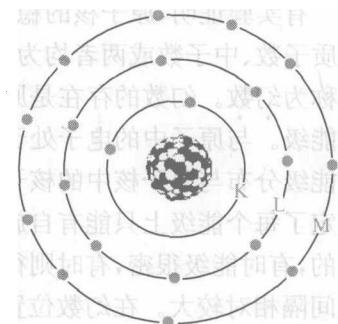


图 1.1 原子结构示意图
(核与电子大小不是按比例画的)

这里的 R 是原子核的半径, A 是原子核的质量数, R_0 是一个常数, 经精密测定确定为 1.2×10^{-15} m。根据球体半径与体积的关系, 可以确定原子核质量数 A 与体积 V 的关系式为:

$$V = \frac{4}{3} \pi R_0^3 A \quad (1.3)$$

2. 稳定性

由于核中质子间的距离非常小, 因而它们之间的库仑斥力很大, 必然存在一种很强的引力把所有的核子结合在极小的空间里, 这种引力称为核力(nuclear force)。核力是强相互作用力, 比电磁力和万有引力大得多。核力又是短程力, 它的作用距离仅为 10^{-15} m 数量级。

由于强核力将核子聚集在一起形成原子核, 要把核中的一个核子完全分开为单个核子所需要的能量称为核的结合能。核的结合能与核内核子数相关, 核子越多结合能越大。从原子核的结合能大小来判定原子核的稳定性并不完全正确。核子越多的原子核结合能越大, 但并不是越稳定, 相反核子数目多的原子核大多数都是不稳定的。

原子核物理的研究表明, 原子核的稳定性还与核内质子与中子之间的比有着密切的关系。对于较轻的核, 当中子与质子的比约为 1:1 时, 核最稳定。随着原子序数的增加, 保持稳定需要的比值也在增加, 对于原子序数很大的重核区, 保持核稳定需要的中子与质子的比约为 1.3:1。中子数过多或偏少的核素往往都是不稳定的。

有实验证明, 原子核的稳定性会随着核内质子数或中子数的增加而出现周期性的变化。当质子数、中子数或两者均为 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 等数值时, 核具有较高的稳定性, 这些数被称为幻数。幻数的存在是原子核内核子的能量呈量子化分布的反映, 量子化分布的能量就是能级。与原子中的电子处于不同能级的量子化分布一样, 核子也处于不同的能级分布中, 这种能级分布与原子核中的核子数相联系, 称为 Nilsson 单粒子能级, 且泡利(Pauli)不相容原理决定了每个能级上只能有自旋相反的 2 个质子, 或 2 个中子。各能级之间的间隔不是均匀变化的, 有时能级很密, 有时则很疏。实验及理论研究表明, 幻数位置附近的原子核其单粒子能级间隔相对较大。在幻数位置的核子数发生变化时, 所需要的能量也就相对较多。据此也发展出了核子数的壳层模型, 与电子的壳层模型类似, 而当质子或中子数为幻数时, 刚好填满一个核子壳层, 此时的核就具有较大的稳定性。

原子核的稳定性还与核内质子和中子的奇偶性有关, 偶偶核最稳定, 稳定核素最多; 其次是奇偶核和偶奇核; 奇奇核最不稳定, 稳定核素最少, 参见表 1.1。

表 1.1 核子数与核素的稳定关系

质子数	中子数	稳定核素数
偶数	偶数	165
偶数	奇数	57
奇数	偶数	53
奇数	奇数	6

1.1.2 电子

正常原子核外的电子个数等于核内的质子数, 也就是原子序数。核外电子在半径约为 10^{-8} cm 的轨道上运动。每个电子带有一个负电荷, 其电量大小等于一个质子所带的正电荷。一般情况下, 电子和质子数目相同, 正负电荷数平衡, 使得原子对外呈电中性。

一个电子 e 所带的电量约为 $1.602 \times 10^{-9} \text{ C}$, 这是一个带电体所能带的最小电量, 且任何电荷所带电量都是 e 的整数倍, 这就是电荷的量子性。电子的质量约为 $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ 。

核外电子的一个重要特性是它们处于不连续的壳层中。按照玻尔理论, 离核最近的第一层称为 K 层, 最多只能容纳 2 个电子; 第二层称为 L 层, 最多只能容纳 8 个电子; 第三层称为 M 层, 最多只能容纳 18 个电子, 随着电子数的增加, 还可以有 N、O、P 等层。一个原子最外层的电子数最多只能是 8 个。原子中电子的数量及分布决定了原子的化学性质, 最外层电子又称为价电子, 它在很大程度上决定了原子的化学性质。最外层电子填满了 8 个的原子很难起化学反应, 这些原子组成了惰性气体元素(He、Ne、Ar、Kr、Xe、Rn)。

带负电荷的电子与带正电荷的核之间存在吸引力。处于不同层的电子与核的吸引力不同。为了表达这种不同, 定义了结合能的概念: 一个电子的结合能等于使电子脱离原子所需要的能量。如果电子处于离核很远的地方, 电子与核之间就没有吸引力了, 该电子的结合能是 0。这样看, 结合能是势能的一种形式, 离核很远的地方势能为 0。

原子核外电子所处的能级定义为结合能的负值。原子中 K 层电子的结合能最大, 但其能级最低, 外层电子的结合能较小, 但能级较高。不同电子层具有不同的能级, 除了 K 层外, L、M 等层还存在些微能量差的亚能级, 如 L 层可根据这些能量差别, 进一步细分为 L_1 、 L_2 、 L_3 三个层内能级。

为了描述核外电子所处的不同状态, 引入了几个量子数。主量子数 n 用来描述电子所处的能级($n=1$ 为 K 层, $n=2$ 为 L 层等)。轨道角动量量子数(也称角量子数) l 用来描述电子轨道角动量的量子化特征($l=0, 1, 2, \dots, n-1$), 电子的磁矩在外磁场中的取向由磁量子数 m_l ($m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$) 描述, 电子自旋形成的自旋角动量由自旋量子数 s 描述, $s=1/2$ 。电子的自旋角动量和自旋磁矩也是量子化的, 在空间任一方向(如外磁场方向)上的分量只有两种可能性, 这两种可能性可由自旋磁量子数 m_s 来说明($m_s +1/2$ 或 $-1/2$)。泡利不相容原理指出, 一个原子中任何两个电子不可能具有一组完全相同的量子数。角量子数 $l=0, 1, 2, 3, 4, 5$ 也可以分别用 s、p、d、f、g、h 来表示。原子的 K 层由一个轨道 $1s$ 组成, 包含两个电子。L 层由 $2s$ 和 $2p$ 组成, 其中 $2s$ 包含一个轨道(2 个电子), $2p$ 最多为 3 个轨道(6 个电子)。

原子序数大的原子相同壳层电子的结合能比原子序数小的要大。L 壳层电子的结合能比 K 层的小得多, 但它也随原子序数的增大而增大。

如果由于某种原因一个电子离开了原子, 变成自由电子了, 这就是原子的电离。电离后的原子变成正离子, 自由电子为负离子。

1.1.3 原子核的自旋与磁矩

1. 角动量

角动量(angular momentum)也称动量矩(moment of momentum), 是用于描述物体转动状态的物理量。质量为 m 、速度为 v (角速度为 ω)的质点绕 O 点做圆周运动, 设 O 点到质点的距离为 r 时, 质点的角动量 P 为

$$P = r \times mv \quad (1.4)$$

如图 1.2 所示。角动量是矢量, 其方向由右手法则确定, 其大小为 $P = rmv = r^2 m\omega$ 。

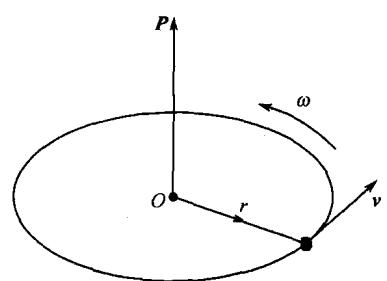


图 1.2 质点绕固定点旋转时的角动量

(1) 电子的轨道角动量与自旋角动量

电子绕原子核做轨道旋转运动形成的角动量称为**轨道角动量**,用 \mathbf{P}_l 表示。原子物理学研究表明,核外电子绕原子核进行轨道运动形成的角动量分布呈量子化特征, \mathbf{P}_l 只能取一系列的分立值,其大小为

$$P_l = \frac{\hbar}{2\pi} \sqrt{l(l+1)} = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar \quad (l=0,1,2,\dots,n-1) \quad (1.5)$$

式中的 \hbar 为普朗克常数(Planck constant), $\hbar = \frac{\hbar}{2\pi}$ 称为约化普朗克常数(reduced Planck constant)或狄拉克常数(Dirac constant), n 是主量子数, l 是角量子数。角量子数决定了轨道角动量的大小,角量子数 l 不同,轨道角动量不同,电子处于不同的运动状态。

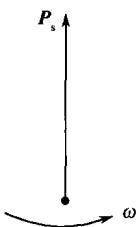


图 1.3 电子的

原子物理学的研究表明,电子除了绕原子核做轨道运动外,还绕自身轴进行自旋(spin)运动。电子自旋运动形成的角动量称为**自旋角动量**,用 \mathbf{P}_s 表示,其大小为

$$P_s = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar \quad (1.6)$$

式中的 s 是电子的自旋量子数,且 $s=1/2$ 。这样,电子的自旋角动量就是一个常数。

基于上述分析,原子核外一个电子具有的总角动量就等于其轨道角动量与自旋角动量的矢量和。事实上,自旋是所有微观粒子的基本属性,所有微观粒子都具有自旋角动量,但不同的粒子自旋量子数不同。在原子核中,质子和中子也都有自旋运动和轨道运动,因而都具有自旋角动量和轨道角动量。如同电子一样,质子和中子的自旋量子数也等于 $1/2$ 。

(2) 原子核的自旋角动量

原子核具有一定的质量与大小,可将其视为球体。1924年泡利(Pauli)为了解释原子光谱的超精细结构(hyperfine structure),提出原子核作为一个整体,必须假定其具有自旋。1932年中子发现后,原子核存在自旋现象得到合理解释。这是因为一方面核内核子都具有固有的自旋运动,另一方面核子在原子核内还存在复杂的相对运动,形成相应的轨道角动量,显然,一个原子核的自旋角动量等于核内核子的轨道角动量与自旋角动量的矢量和。原子核物理的研究表明,原子核自旋角动量 \mathbf{P}_I 的取值也是量子化的,其大小为

$$P_I = \sqrt{I(I+1)} \cdot \hbar \quad (1.7)$$

式中的 I 称为核的自旋量子数。式(1.7)说明,原子核的自旋角动量由核的自旋量子数来表征。自旋量子数 I 属于原子核的固有特性,不同的核具有不同的 I 值。量子力学的研究表明,组成原子核核子的角动量存在成对抵消的现象,原子核的自旋角动量通常等于那些不成对的核子角动量的叠加。这样,原子核的自旋量子数 I 的值由核内质子数和中子数的奇偶关系决定,且只能取整数或半整数,具体规律如下:

① 偶偶核 核内质子数是偶数,中子数也是偶数(质量数为偶数,原子序数也为偶数)的核其自旋量子数 $I=0$,即原子核内核子的角动量成对抵消,核的自旋角动量为零。典型的偶偶核有 $^{12}_{6}\text{C}$ 、 $^{16}_{8}\text{O}$ 、 $^{32}_{16}\text{S}$ 等。

② 奇偶核 质子数和中子数中有一个是奇数、另一个是偶数(质量数为奇数)的核其自旋量子数 I 的值为半整数(如 $1/2$ 、 $3/2$ 、 $5/2$ 等)。典型的奇偶核包括 I 为 $1/2$ 的 $^1_{1}\text{H}$ 、 $^{13}_{6}\text{C}$ 、 $^{15}_{7}\text{N}$ 、 $^{19}_{9}\text{F}$ 、 $^{31}_{15}\text{P}$ 等, I 为 $3/2$ 的 $^{11}_{5}\text{B}$ 、 $^{33}_{16}\text{S}$ 、 $^{35}_{17}\text{Cl}$ 等,以及 I 为 $5/2$ 的 $^{17}_{8}\text{O}$ 等。核磁共振研究中最为常见的核