

长江学者论丛

纳米科技基础

■ 陈乾旺 编

Introduction to Nanoscience and
Nanotechnology



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

长江学者论丛

卷二

纳米科技基础

■ 陈乾旺 编

**Introduction to Nanoscience and
Nanotechnology**



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

内 容 提 要

本书内容涉及纳米科技的物理和化学基础、技术特征和应用前景。具体章节包括:从原子到材料、典型纳米材料——碳纳米管,低维纳米结构、纳米材料和纳米结构的显微分析、原子和分子操纵与纳米结构制备、纳米生物学、纳米晶体管等纳米器件和前景展望等。本书注重理论,也力求将最新的研究进展,如单电子器件方面的最新研究成果等介绍给读者。本书适合大学高年级学生和研究生使用,也可供该领域科研人员和普通读者参考。

The content of the book has been selected and organized to establish the basic principles of nanoscience and nanotechnology. It contains the introduction and nine chapters: "From atom to materials", "Carbon nanotube: an example of nanomaterials", "Low - dimensional nanostructures", "Characterization method of nanomaterials", "Manipulation of atoms and molecules to construct nanostructures", "Nanobiology", "Nanodevice". The book pays special attention to theory related to nanoscience, and makes effect to introduce recent proceeding in fundament and application research (e. g. the proceeding of single electron transistor). This book could serve as a text for undergraduate students and graduate students; it could also serve as an introduction for researchers involved in this field, and members of the public.

图书在版编目 (CIP) 数据

纳米科技基础 / 陈乾旺编. —北京: 高等教育出版社, 2008. 1

ISBN 978 - 7 - 04 - 022848 - 9

I. 纳… II. 陈… III. 纳米材料 - 高等学校 - 教材
IV. TB383

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2007) 第 168899 号

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010 - 58581118
社 址	北京市西城区德外大街 4 号	免费咨询	800 - 810 - 0598
邮政编码	100011	网 址	http://www.hep.edu.cn
总 机	010 - 58581000		http://www.hep.com.cn
经 销	蓝色畅想图书发行有限公司	网上订购	http://www.landaco.com
印 刷	涿州市京南印刷厂		http://www.landaco.com.cn
		畅想教育	http://www.widedu.com
开 本	787 × 1092 1/16	版 次	2008 年 1 月第 1 版
印 张	15.25	印 次	2008 年 1 月第 1 次印刷
字 数	280 000	定 价	32.00 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

物料号 22848 - 00

“长江学者”学术著作出版资助项目

《长江学者论丛》编辑出版指导委员会

主任委员：赵沁平 教育部副部长

副主任委员：金国藩 清华大学教授，中国工程院院士

闵乃本 南京大学教授，中国科学院院士

吴树青 北京大学教授，教育部社会科学委员会主任

饶子和 南开大学校长，中国科学院院士，长江学者特聘教授

舒德干 西北大学教授，长江学者特聘教授，长江学者成就奖获得者

《长江学者论丛》编辑出版指导委员会办公室

主任：吴德刚 教育部人事司司长

副主任：刘志鹏 高等教育出版社社长

吕玉刚 教育部人事司副司长，教育部人才发展办公室主任

吴向 高等教育出版社副总编辑

总序

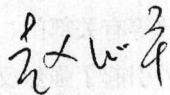
当今世界,科学技术日新月异,知识经济方兴未艾,综合国力竞争日趋激烈。面对日益激烈的国际竞争,立足国情,我国只能走建设创新型国家的发展道路,把提高自主创新能力作为调整经济结构、转变增长方式、提高国家竞争力的中心环节。而科技和人才,特别是创新人才是建设创新型国家和提高自主创新能力的关键。实施科教兴国、人才强国战略,建设创新型国家,构建社会主义和谐社会,高等学校肩负着重大历史使命。教育大计,人才为本。人才问题,始终是高等学校改革与发展的核心问题和头等大事。加快建设高等学校高层次人才队伍,努力培养和造就一批在国际上有重要影响的学术大师、战略科学家和学科带头人,是发展我国高等教育事业的必然要求,也是关系社会主义现代化建设全局的重要任务。

为贯彻落实科教兴国和人才强国战略,推进我国高等学校高层次人才队伍建设,教育部与香港李嘉诚基金会于1998年共同启动了“长江学者奖励计划”。该计划自实施以来,在党和国家领导人的高度重视和关心下,在国家财政等有关部门、高等学校和社会各界的大力支持下,取得了显著成效,在海内外引起了强烈反响。诺贝尔物理学奖获得者杨振宁评价“长江学者奖励计划”是“一个非常了不起的壮举”,是“20世纪末21世纪初中国实施科教兴国战略的一个非常重要的环节”。

长江学者群英荟萃、硕果累累。“长江学者奖励计划”的实施吸引、汇聚和造就了一大批优秀拔尖人才。目前全国88所高等学校聘任727位长江学者,先后有6位优秀学者获得“长江学者成就奖”,31位长江学者被聘为“973”首席科学家,24位长江学者当选为中国科学院、中国工程院院士。在“长江学者

奖励计划”的激励和支持下，长江学者们取得了一批重大科研成果，近年来共有20余篇论文发表在 *Nature*、*Science* 上，近百项科研成果获得国家自然科学奖、技术发明奖、科技进步奖，其中3项成果获得一等奖，20余项重要成果入选“中国十大科技进展新闻”、“中国基础研究十大新闻”、“中国高校十大科技进展”，有力地支持了国家重大战略的实施，促进了学科建设和科技发展，为培养和造就优秀拔尖创新人才做出了贡献。

编辑出版长江学者学术著作，得到了广大长江学者的积极响应和高等教育出版社的大力支持。希望《长江学者论丛》的出版，进一步提高长江学者在学术领域的影响力，并激励广大学者弘扬长江学者的创新精神，勇攀科学高峰，更好地为促进高校在提高国家自主创新能力、建设创新型国家的伟大事业中，做出更大的贡献。



2006年1月

前 言

有那么一些领域,非常小,即使用最好的光学显微镜也很难看清它们。在这里原子和分子都以纳米尺度来度量,1 纳米为十亿分之一米。目前,科学家们在实验室已经能够在纳米尺度上监控、测量和操控物质。纳米科技以空前的分辨率为人类揭示了一个可见的原子、分子世界,它的最终目标是直接以原子和分子来构造具有特定功能的产品。这种精确操控原子、分子构筑材料的能力将会使制造业、农业、能源、医药健康、国家安全等领域取得突破性发展,即人们通常所说的纳米科技革命。从 20 世纪 90 年代初起,纳米科技得到迅速发展,新的交叉学科、新概念不断涌现,像纳米电子学、纳米材料学、纳米机械学、纳米生物学,等等。科学家预言,纳米时代的到来不会很遥远,它在未来的应用将远远超过计算机工业,并成为未来信息时代的核心。

科学家们为我们勾勒了一幅若干年后的蓝图:纳米电子学将使量子元件代替微电子器件,巨型计算机就能装入口袋里;通过纳米化,易碎的陶瓷可以增强韧性,成为一种重要材料;世界上还将出现 1 微米以下的机器甚至机器人;纳米技术还能给药物的传输提供新的方式和途径,对基因进行定位等。正因为如此,世界各国尤其是发达国家都从战略高度部署纳米科技研究,参与研究的科研人员也不断增加,每年都有大量涉及纳米材料、结构、理论和器件的论文出现在国际专业期刊上。众多文献使初涉者眼花缭乱,无从下手,甚至使一线研究人员不知如何深入,迷失方向;使实验工作者疲于为自己所观察到的奇特现象寻找理论解释;使理论工作者忙于为自己的结果寻找实验上的支持。目前,国际上有关专著很多,国内关于纳米材料方面的专著也有不少已经出版发行,对国内纳米科技的发展起了很大的促进作用。为培养纳米科技方面的人才,很多高校相继为本科生和研究生开设了纳米材料科学等涉及纳米科技方面的教学课程,因此,需要有一本既包含有基本理论知识,又不乏最新研究成果介绍的教材。基于这种需要,本书编者在多年教学和科研实践的基础上,编写了这本《纳米科技基础》,以满足学习和教学的需要。本书内容涉及:从原子到材料,碳纳米管等典型纳米材

料介绍,量子点、量子线和量子阱理论与实验,纳米材料和纳米结构的显微分析,原子和分子操纵与纳米结构制备,纳米生物学,纳米晶体管等纳米器件,前景展望等。这是一本从原子开始论述的纳米科技教材,注重理论,兼顾实验,也不乏最新的器件方面研发进展介绍,适合于大学高年级本科生、研究生使用,也同样可供从事纳米材料研究和纳米器件研发的科研人员阅读。

本书素材主要来自国内外科技期刊和网站公开发表的研究论文和综述报告,熊鹰、魏凌志、曹方宇、陈瑶和吴明在博士以及在美国学习的彭振猛先生在资料的搜集和整理方面做了大量工作,在此特别致谢。由于编者水平有限,文献引用也可能存在疏漏,敬请读者指正。

目 录

第一章 从原子到材料	1
1.1 原子结构	1
1.2 从原子到材料	9
第二章 低维结构	19
2.1 量子阱	20
2.2 量子线	29
2.3 量子点	34
第三章 纳米制备技术	42
3.1 光刻	43
3.2 软刻蚀	50
3.3 “沾水笔”纳米刻蚀术	62
3.4 纳米球刻蚀	69
3.5 自组装	77
第四章 原子和分子操纵	100
4.1 STM 操纵原子	100
4.2 操纵原子构筑纳米结构	104
4.3 原子操纵与单分子化学	107
4.4 光镊操纵	111
第五章 典型纳米材料——碳纳米管	116
5.1 碳纳米管的制备	118
5.2 碳纳米管的结构、缺陷和性能	120
5.3 碳纳米管的潜在应用	128
第六章 纳米结构显微分析	137
6.1 前言	137
6.2 扫描电子显微镜(SEM)	138

6.3	透射电子显微镜(TEM)	143
6.4	扫描探针显微镜(SPM)	152
6.5	扫描隧穿显微镜(STM)	161
6.6	扫描近场光线显微镜(SNOM)	171
第七章	纳米电子学	181
7.1	纳米晶体管	181
7.2	纳米存储器	188
7.3	纳米电路	189
7.4	基于纳米科技的量子计算机	195
第八章	纳米生物技术	201
8.1	纳米技术与生物大分子	202
8.2	纳米颗粒材料与细胞	208
8.3	纳米医学造影材料	211
8.4	癌症的早期诊断与治疗	216
第九章	前景展望	223
9.1	原子和分子	223
9.2	创新点	223
9.3	纳米科学	225
9.4	纳米技术	225
9.5	什么是可能的	225
9.6	原子力显微镜对纳米技术的贡献	226
全书思考题		227

第一章 从原子到材料

1.1 原子结构

什么是原子,它是由什么构成的,如何看见它们?关于原子结构问题的研究,从古时候起人们就有着各种各样的猜想。一个开创性的起点是卢瑟福和玻尔于 1911 和 1913 年间发展起来的原子概念。卢瑟福提出原子是由占有绝大部分质量的核和带负电的包围着核的电子云构成,相对核来说,电子云的体积很大。这个模型后来被发展成电子绕原子核运动的行星式原子模型。电子是带负电的粒子,按此模型它会通过辐射释放能量,最终掉到核上,而事实上这个过程并没有发生。玻尔的贡献是对单电子原子的行星式原子模型的稳定性给予了解释。今天,卢瑟福-玻尔原子模型已经被量子力学模型所取代,但它具有非常重要的历史意义。著名理论物理学家诺贝尔奖获得者费曼 1959 年在一次演讲中指出:“……未来人们能够将原子放置在化学家指定的位置,来制备物质。”这就要求我们有识别和操纵单个原子的能力。今天 STM 的发明使我们能看清原子,但要操纵原子就必须了解原子结构的基础上去认识原子与原子之间以及原子与衬底之间相互作用的本质。

现在,我们已经知道原子由原子核和电子组成,带负电的电子绕带正电的原子核转动;在原子中,大部分质量被占原子体积很小一部分的原子核占据。形象地说,如果把苹果中的一个原子的原子核放大到苹果那么大,那么同比放大的苹果的原子就会和地球一样大。电子的质量只占很小的一部分(表 1-1),但却在原子中相对很大的空间内运动。

原子核由一定数目的质子 p 和中子 n 构成(H 原子核只有一个质子),质子的数目决定了元素的种类,和原子序数总是相等的。中子的质量比质子略大,中子和质子数目的和称为原子的质量数 A ,它决定了原子的种类。具有相同质子数和不同中子数的原子互为同位素,它们都属于同一种元素,化学性质几乎完全

表 1-1 电子、质子和中子的比较

	质量/kg	电荷/C	半径/m
电子 e	9.1094×10^{-31}	-1.6×10^{-19}	10^{-18}
质子 p	1.6726×10^{-27}	$+1.6 \times 10^{-19}$	10^{-15}
中子 n	1.6749×10^{-27}	0	10^{-15}

相同。在天然存在的某种元素里,不论是游离态还是化合态,各种同位素所占的原子百分比(丰度)一般都相同。原子核的质量近似等于它所含质子和中子的质量和,核的半径可以由经验公式求出:

$$r = r_0 A^{1/3} \quad (1-1)$$

其中 $r_0 = 1.2 \times 10^{-15} \text{ m}$ 是经验常量。

对于中性原子来说,原子内的电子数总是等于核内质子数,而核内中子数不会小于质子数(H原子除外)。一个含有质子数目为 Z ,质量数为 A 的原子 M 可以表示成这样的形式: ${}_Z^A M$ 。

但是,质子和中子也并不是不可再分的基本粒子。研究发现,质子和中子都是由称为夸克(quark)的更基本的粒子构成,至今尚未发现夸克可以分割。更确切地说,现在认为构成世界的基本粒子包含六种夸克、六种轻子(如电子)和一些能传递相互作用的介子。

1. 玻尔氢原子理论及对氢原子光谱的解释

根据 α 粒子散射实验,卢瑟福提出了原子结构的核式模型:一个原子序数为 Z 的原子,带正电荷 Ze 的部分集中于一个半径相当于原子的 10^{-4} 却占有原子绝大部分质量的原子核内, Z 个电子分布于核外,以库仑力与核相互作用并绕核运动。这个模型很好地解释了实验中 α 粒子出现大角度偏转甚至折回的现象:大部分粒子穿过金箔而几乎不发生偏转,是因为金属原子大部分是空的;当 α 粒子偶尔从带正电荷的核旁边经过时,就会因强烈的库仑斥力而发生强烈地偏转。

从经典理论看,卢瑟福的原子模型存在着不可克服的内在矛盾。电子绕原子核做圆周运动会发射电磁波而损失能量,转动的半径将越来越小直至落入原子核中,从而使正负电荷中和,原子崩溃,整个过程只需约 10^{-9} s 。这就是说,根本不可能出现稳定的原子和建立在这个基础上的物质世界。

为解决这个问题,在氢光谱实验、普朗克的量子假说、卢瑟福原子结构模型和爱因斯坦的光量子理论的基础上,玻尔(N. Bohr)于1913年提出了他的氢原子结构理论,它建立在三个假设的基础之上:

(1) 原子结构采用卢瑟福核式模型,但假定电子绕原子核做圆周运动时不

辐射能量,而是处在稳定状态即所谓的定态上;

(2) 电子处在定态时,绕核运动的轨道角动量 L 满足量子化条件,第 n 个轨道角动量值为

$$L_n = n\hbar = n \frac{h}{2\pi}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-2)$$

(3) 电子从高能态 E_1 跃迁到低能态 E_2 时放出光子,能量等于两定态能量差:

$$E_1 - E_2 = h\nu \quad (1-3)$$

反之, E_2 能态的电子吸收一个能量为 $h\nu$ 的光子,也可跃迁到 E_1 能态。

设氢原子核质量为 m ,带电荷 $+e$,电子质量为 m_e ,带电荷 $-e$,电子与原子核间距为 r ,运动速率为 v ,由经典力学,可把氢原子看作一个折合质量为 μ 的电子绕静止的核运动的体系,即

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m} \quad (1-4)$$

结合经典电磁学和量子化条件,可以求得氢原子半径和对应的能量:

$$r_n = n^2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-5)$$

$$\text{令} \quad a_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \quad (1-6)$$

则 $r_1 = a_1$ 就是 $n=1$ 时的氢原子轨道半径,又称第一玻尔半径。第 n 个轨道的半径为第一轨道半径的 n^2 倍。

玻尔理论可以圆满解释氢光谱。巴耳末(J. T. Balmer)研究了可见光部分的四条谱线波数 σ ,发现满足下列关系:

$$\sigma = A \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, 6 \quad (1-7)$$

式中 A 是常量。紧接着,里德伯(R. J. Rydberg)得到了氢原子光谱的普适公式:

$$\sigma = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = m + 1, m + 2, \dots \quad (1-8)$$

式中 $R_H = 1.09677 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$,称为氢的里德伯常量对某一正整数 m ,不同的 n 值组合在一起形成各个线系, $n=2$ 时即是巴耳末线系中的各条谱线。

处于基态的原子,其电子在最低轨道($n=1$)上运动;当原子因光照或其他

原因受到激发时,电子就接受能量从基态跃迁到激发态,也就是从基态轨道($n=1$)跃迁到高层轨道($n>1$)上;处于激发态的原子是不稳定的,电子会跃迁到基态或者能量较低的激发态,同时将能量以光的形式放出。由于各激发态电子所在轨道能量不同,同时电子失去能量跃迁到的低能轨道能量也不同,因此原子发射光谱就有多种频率不同的谱线。

由玻尔半径可得到量子化的氢原子轨道能量值:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (1-9)$$

当电子从 n_2 轨道跃迁到 n_1 轨道($n_2 > n_1$)时,放出频率为 ν 的光子:

$$h\nu = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (1-10)$$

与氢光谱经验公式相比较,可得里德伯常量的理论表达式:

$$R_H = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{hc} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{hc} \cdot \frac{e^2}{2a_1} \quad (1-11)$$

将这些常量代入,得到的里德伯常量 $R_H = 1.096\ 77 \times 10^7\ \text{m}^{-1}$,与实验值完全一致。

玻尔理论将量子概念引入原子结构中,对氢原子光谱和稳定性的解释非常成功,加上电子在确定轨道上绕核旋转的概念很容易理解,因而玻尔理论很快得到了广泛的认可。但是,这个理论有如下不足:①不能解释多电子原子以及分子光谱;②不能解释原子成键;③静态假设是任意的,它并不能帮助了解量子化过程;④并不能完善描写原子结构,如不能解释为何原子在磁场中的发射光谱比不在磁场中复杂(即塞曼效应)的现象。德国物理学家索末菲(A. Sommerfeld)提出,除了圆轨道之外,电子还可以沿椭圆轨道绕原子核运动,暂时解释了类氢原子的塞曼效应。但是即使是这个理论(称为玻尔-索末菲理论)也无法解释多电子原子的光谱谱图。电子沿固定轨道绕原子核运动的经典概念,势必要被更先进的理论所代替。

2. 波粒二象性与不确定原理

1909年,为解释光电效应,爱因斯坦(A. Einstein)提出了光的波粒二象性理论,这个理论也成为玻尔氢原子理论的基础。1924年,德布罗意(L. de Broglie)推想,既然光具有波粒二象性,那么实物粒子如电子、 α 粒子等也可能具有光子的波粒二象性。对具有能量 E 和动量 p 的粒子,有一个频率 $\nu = E/h$,波长 $\lambda = h/p$,传播方向是粒子的动量方向的波与之对应,称为德布罗意波。

匀速运动的自由粒子可以用类似光波的平面波来描述。与电磁波不同的

是,物质波的波矢 k 和频率 ν 要用粒子的动量和能量表示:

$$\psi = \psi_0 e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)/\hbar} \quad (1-12)$$

振幅 ψ_0 在空间各点均为相同值,所以此式不表示某个粒子在空间某处以动量 p 运动的状态,而是表示在空间均匀分布的以相同动量运动的粒子流。一般情况下,物质波不是平面波,常用波函数 $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$ 表示。

在经典物理中,一个粒子具有确定的坐标和动量,但是对具有波粒二象性的微观粒子来说,物质波是不可能固定在空间某点上的,这使得粒子有某种不确定性。设粒子坐标为 q , 动量大小为 p , 则不确定性可用方均根偏差 Δq 和 Δp 来表示。海森伯(W. K. Heisenberg)证明, Δq 和 Δp 之间满足如下关系:

$$\Delta p \cdot \Delta q \geq \hbar/2 \quad (1-13)$$

这称为海森伯不确定原理。由于这个原因,当人们同时测量粒子的动量和坐标时,测量的偏差必须满足这个关系。

不确定原理是一个反映微观世界本质的基本关系,指出了经典运动概念的使用范围。由于这个范围(以普朗克常量 h 表征)是一个很小的量,宏观粒子的运动的不确定性小到几乎没有意义,粒子仍然有确定的运动轨迹。只有在考虑原子量级或更小的微观粒子时,测不准原理才是重要的。

根据不确定原理,电子必定不是在简单轨道上运动的,否则它在某一瞬间的位置和动量应当能被精确地确定。讨论具有确定能量或动量的电子绕核运动时,只能用电子在某个位置上出现的概率来表达,通常采用电子云的概念。假想有一个照相机,可以连续给绕核运动的具有确定能量的电子拍照,那么把拍下的这许多照片叠加在一起,就会获得类似于云的图,称作电子云图(图 1-1)。在给定的区域内,电子出现的概率以该区域内电子的密度来表示。那么,经典理论中电子轨道的概念在量子力学中就变为集中在核周围一定区域,具有一定形状的电子云,它可以用数学函数表示。为了与经典理论相联系,把这个函数称为轨函。根据德布罗意假设,任何粒子都有一个相关的波长,其运动都可以用波函数 ψ 来描述,波函数可以是正、负或虚数,其物理意义是:在任何空间体积元内,找

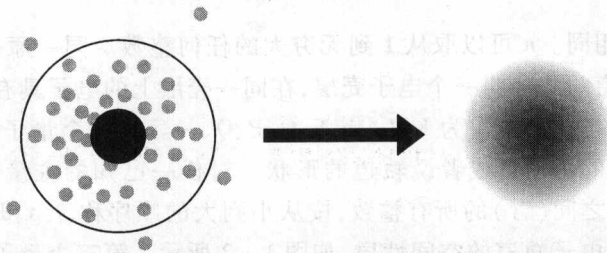


图 1-1 电子云模型

到粒子的概率正比于正数 $\psi^* \psi$ (即 ψ^2)。

3. 薛定谔方程及其氢原子解 四个量子数

1926年,薛定谔(E. Schrödinger)提出了著名的薛定谔波动方程:在势场 V 中运动的粒子,其波函数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 满足方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1-14)$$

在直角坐标系中,拉普拉斯算符 ∇^2 可化为如下形式:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1-15)$$

与经典力学中 $E = p^2/2m + V$ 相比较,从形式上看,只要在经典关系式中作变换:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla \quad (1-16)$$

就可以得到薛定谔方程。

只有氢原子或类氢原子的薛定谔方程能够精确求解。原子的势能 V 是由电子与核之间的库仑引力引起的,对氢原子, $V = -e^2/r$, r 是电子与核之间的距离,这种势能模型叫做中心势场。这里,我们不打算详细阐述薛定谔方程的数学求解过程,而只列出它的结论:电子只能在某些符合量子化条件的轨道上运动,且在一定的轨道上运动的电子具有一定的能量 E 。

氢原子的波函数由三个量子数 n, l, m_l 确定,可写成径向部分 R 和角度部分 Y 的乘积:

$$\psi(n, l, m_l) = R_{n,l}(r) Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) \quad (1-17)$$

第一个量子数 n 叫主量子数,决定电子轨道的有效体积和能量:

$$E = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (1-18)$$

和玻尔理论值相同。 n 可以取从 1 到无穷大的任何整数。同一原子中,具有相同 n 值的各轨道的集合叫一个电子壳层,在同一壳层上的电子具有相同的能量。按 n 从小到大,各壳层依次为 K、L、M、N、O、P、Q、…。第二个量子数 l 称为角量子数,决定电子的角动量或者说轨道的形状。对任一已知的主量子数 n , l 可以取从 0 到 $n-1$ 之间(含)的所有整数,按从小到大的顺序称 s、p、d、f、g、…亚层。 n 和 l 共同决定电子轨道的空间性质,如图 1-2 所示。第三个量子数 m_l 决定原子轨道在空间的伸展方向,称为轨道方向量子数或磁量子数,这是因为采用外磁