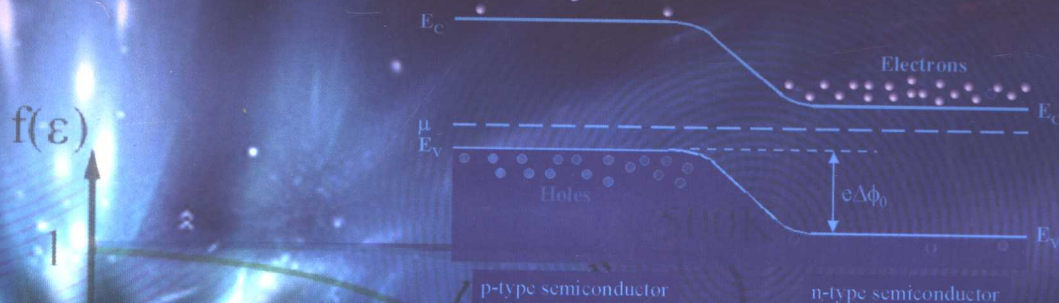


新世纪高等院校精品教材

# 半导体物理

季振国 编著



$f(\epsilon)$

1

p-type semiconductor

n-type semiconductor

浙江大学出版社

新世纪高等院校精品教材

# 半 导 体 物 理

季振国 编 著

浙 江 大 学 出 版 社

## 内 容 提 要

本书针对半导体材料与器件的发展趋势,有必要向读者介绍新型半导体材料相关的知识和基本工作原理。以介绍基本物理概念为主,尽量避免复杂的数学推导和过分细致的器件细节,并尽可能多地利用量子力学知识分析、解释半导体材料和器件涉及的物理原理。本书内容较广,适合于本科生、研究生以及相关研究人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

半导体物理 / 季振国编著. — 杭州: 浙江大学出版社,  
2005. 9  
ISBN 7-308-04458-0

I. 半... II. 季... III. 半导体物理学 IV. 047

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 107307 号

出版发行: 浙江大学出版社

(杭州浙大路 38 号 邮政编码 310027)

(E-mail: zupress@mail. hz. zj. cn)

(网址: <http://www.zjupress.com>)

责任编辑: 宋纪浔

封面设计: 氧化光阴

排 版 者: 杭州好友排版工作室

印 刷: 杭州杭新印务有限公司

经 销: 浙江省新华书店

开 本: 787mm×1092mm 1/16

印 张: 17.5

字 数: 408 千

版 次: 2005 年 9 月第 1 版

印 次: 2006 年 1 月第 2 次印刷

印 数: 1001—2000

书 号: ISBN 7-308-04458-0/O·331

定 价: 28.00 元

# 前言

半导体是一个相对年轻的学科,但它制成的各种器件已广泛应用于人类生活的各个方面。半导体材料与器件的水平已经成为一个国家综合实力的重要组成部分。从人们的日常生活到高科技的航空航天技术,都离不开半导体器件。在人类社会进入信息时代的今天,半导体材料与器件正发挥着越来越大的作用,在微电子领域,锗、硅起到特别重要的作用,特别是以硅材料科学与技术为基础的微电子技术构成了现代信息技术的主体。在半导体电子器件方面,器件的集成度和特征线宽的发展趋势基本符合莫尔定律(指数增长以及指数减小),即每过 18 个月,器件的集成度提高一倍,而器件的特征线宽却降低一半,见图 1 和图 2。例如微处理器中的晶体管数量从 20 世纪 70 年代的每片 1K 左右个晶体管(4004 系列)到现在的每个芯片的上亿个晶体管(奔腾 4 中晶体管的数量超过 4000 万个),随机存储器中 DRAM 的晶体管数量也从 1K 增加到 1G 左右。另一方面,电子器件的工作速度不断提高,从 CPU 的运算速度看已经从 20 世纪 70 年代末的 1M 主频(苹果机)以及 20 世纪 80 年代的 4.77MHz/8MHz(IBM-PC/XT),到了目前的几个 GHz。

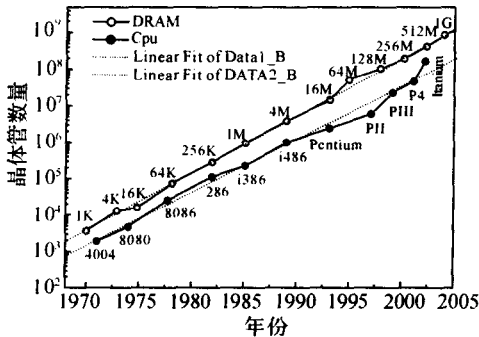


图 1 DRAM 和 CPU 的变化趋势

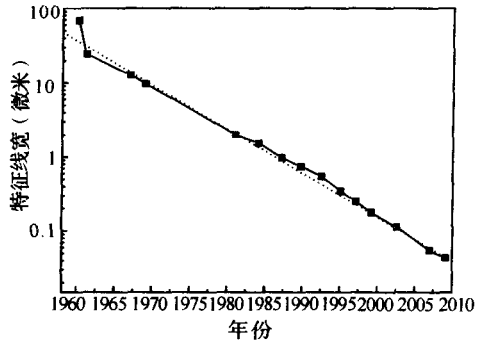


图 2 特征线宽的变化趋势

然而,人们的追求看来还无止境。但是由于电子器件的特征宽度已经接近宏观器件的工作极限,因此新一代基于量子力学原理的微电子、纳电子器件将在下一代电子器件中发挥越来越重要的作用。

另一方面,21 世纪的信息科学与技术将以超高速、超大容量为标志,因此实现超高速及超大容量信息传输与处理是新一代半导体材料的特点,这对光学性能先天不足的硅材料提出了严峻的挑战(间接能带、载流子迁移率小等)。由于这个原因,预见化合物半导体材料,以及基于量子点、量子阱、超晶格和其他低维、异质结构材料的应用将越来越多;另外有机半导体材料由于具有能带可裁剪性、柔软性、低毒性、低成本等优点,也可能在某些领域得到应用。为此本书将在介绍传统半导体材料物理性能的基础上,适当增加量子力学、低维材料、异质结构、光电性能等方面的内容。

# 目 录

<b>第 1 章 量子力学初步</b> .....	1
§ 1.1 量子力学的诞生 .....	1
§ 1.2 物质波 .....	8
§ 1.3 力学量算符与薛定谔方程 .....	9
§ 1.4 定态波函数.....	10
§ 1.5 波函数的性质.....	11
§ 1.6 归一化波函数.....	12
§ 1.7 波函数的统计解释——劳厄(Lauer)衍射公式 .....	13
§ 1.8 求解定态问题的步骤.....	14
§ 1.9 定态问题实例.....	15
§ 1.10 测不准原理 .....	26
§ 1.11 电子的自旋 .....	28
§ 1.12 简谐微扰量子跃迁几率 .....	29
§ 1.13 泡利不相容原理 .....	29
<b>第 2 章 半导体材料的成分与结构</b> .....	30
§ 2.1 半导体材料的导电能力.....	30
§ 2.2 半导体的晶体结构.....	32
§ 2.3 倒格矢.....	34
§ 2.4 晶体结构的测量.....	35
§ 2.5 常见半导体的晶体结构.....	36
<b>第 3 章 晶体中电子的能带</b> .....	39
§ 3.1 能级分裂与能带的形成.....	39
§ 3.2 量子力学处理.....	40
§ 3.3 能带图的表示方法.....	42
§ 3.4 晶体中电子的运动.....	43
§ 3.5 电子的经典近似.....	44
§ 3.6 外力与波矢的关系.....	45
§ 3.7 电子的加速度及有效质量.....	45
§ 3.8 能带填充情况与电流.....	46
§ 3.9 金属、半导体、绝缘体.....	48
§ 3.10 空穴 .....	49

§ 3.11	硅、锗和砷化镓的能带特点	51
§ 3.12	半导体材料中的杂质和缺陷能级	53
§ 3.13	化合物半导体中的杂质能级	55
§ 3.14	施主、受主的类氢模型	56
§ 3.15	各种因素对禁带宽度的影响	59
<b>第 4 章</b>	<b>半导体中的电子统计分布</b>	<b>65</b>
§ 4.1	状态密度	65
§ 4.2	费米-狄拉克分布	67
§ 4.3	本征半导体与非本征半导体	73
§ 4.4	只含一种杂质的半导体	77
§ 4.5	饱和电离区的范围	84
§ 4.6	费米能级与掺杂浓度的关系	85
§ 4.7	简并半导体	86
§ 4.8	杂质补偿	86
§ 4.9	图解法确定费米能级	87
<b>第 5 章</b>	<b>半导体中的电荷输运现象</b>	<b>89</b>
§ 5.1	电导现象	89
§ 5.2	晶格振动与声子	91
§ 5.3	一维双原子晶格的振动	94
§ 5.4	三维晶体中的晶格振动	96
§ 5.5	一维晶格原子振动的能量	97
§ 5.6	声子的统计分布	97
§ 5.7	载流子的散射	98
§ 5.8	多能谷下的电导率	103
<b>第 6 章</b>	<b>半导体材料的物理现象</b>	<b>106</b>
§ 6.1	霍尔效应	106
§ 6.2	磁电阻效应	108
§ 6.3	半导体磁敏二极管	110
§ 6.4	巨磁阻(GMR)与超巨磁阻(CMR)	111
§ 6.5	表面光电压	111
§ 6.6	光磁电效应	112
§ 6.7	耿氏效应	113
§ 6.8	半导体的热效应	114
§ 6.9	热导率	116
§ 6.10	半导体的热电、电热效应	118

§ 6.11	帕尔帖效应	122
§ 6.12	汤姆逊效应	123
§ 6.13	热磁效应	124
§ 6.14	磁光效应	126
§ 6.15	电光现象	127
<b>第 7 章</b>	<b>半导体材料的光学性质</b>	<b>129</b>
§ 7.1	半导体材料的光学常数	129
§ 7.2	反射率和折射率	129
§ 7.3	半导体中的光吸收	130
§ 7.4	直接跃迁的吸收	131
§ 7.5	间接跃迁	132
§ 7.6	Burstein-Moss 效应	134
§ 7.7	激子吸收	135
§ 7.8	杂质吸收	135
§ 7.9	中性杂质吸收	136
§ 7.10	电离杂质吸收	137
§ 7.11	子带之间的跃迁	137
§ 7.12	自由载流子吸收	138
§ 7.13	禁带中带尾态的吸收(Urbach 吸收)	139
§ 7.14	晶格振动吸收	139
§ 7.15	半导体发光	141
§ 7.16	利用等电子陷阱提高发光效率	144
§ 7.17	吸收谱与发射谱之间的关系	146
<b>第 8 章</b>	<b>非平衡载流子</b>	<b>150</b>
§ 8.1	非平衡载流子	150
§ 8.2	对光电导材料的要求	152
§ 8.3	光电导增益	153
§ 8.4	非平衡载流子的复合和寿命	153
§ 8.5	非平衡载流子寿命的测试	154
§ 8.6	连续性方程	156
§ 8.7	非本征半导体中非平衡少子的扩散和漂移	160
§ 8.8	少子的扩散与漂移	163
§ 8.9	少子脉冲的扩散和漂移	164
§ 8.10	复合机理	167
§ 8.11	与复合和产生相关的物理量	169
§ 8.12	非平衡载流子的寿命	172
§ 8.13	通过复合中心的复合	173

§ 8.14	金在硅材料中的复合作用	178
§ 8.15	陷阱效应	179
<b>第 9 章</b>	<b>半导体中的接触现象</b>	<b>181</b>
§ 9.1	表面态和界面态的影响	181
§ 9.2	外电场中的半导体表面	182
§ 9.3	金属-半导体界面	185
§ 9.4	半导体材料的功函数	192
§ 9.5	欧姆接触	194
<b>第 10 章</b>	<b>半导体表面与界面</b>	<b>196</b>
§ 10.1	表面态及空间电荷区	196
§ 10.2	理想 MOS 结构的电容-电压特性	196
§ 10.3	半导体-气体界面	201
§ 10.4	半导体 p-n 结	203
§ 10.5	碰撞电离雪崩渡越时间二极管(IMPATT)	218
<b>第 11 章</b>	<b>半导体电子器件</b>	<b>220</b>
§ 11.1	半导体三极管	220
§ 11.2	结场型晶体管-JFET	224
§ 11.3	MOS 器件	226
§ 11.4	CMOS 反相器	229
§ 11.5	由 MOS 组成的存储器	230
§ 11.6	电荷耦合器件(CCD)	232
§ 11.7	可控硅器件	234
<b>第 12 章</b>	<b>半导体光电器件</b>	<b>236</b>
§ 12.1	固态发光源	236
§ 12.2	发光二极管	238
§ 12.3	光生伏特效应	240
§ 12.4	半导体激光器	242
§ 12.5	其他光电器件	244
<b>第 13 章</b>	<b>异质结、量子阱和超晶格</b>	<b>247</b>
§ 13.1	异质结	247
§ 13.2	二维电子气	250
§ 13.3	异质结的应用	250
§ 13.4	半导体多量子阱和超晶格	256



<b>第 14 章 低维系统中电子的状态</b> .....	259
§ 14.1 2D 系统 .....	259
§ 14.2 1D 系统的能量和状态密度 .....	264
§ 14.3 0D 系统中电子的能量和状态密度 .....	265
§ 14.4 低维中的其他物理现象 .....	266
<b>参考文献</b> .....	270

# 第 1 章 量子力学初步

## § 1.1 量子力学的诞生

### § 1.1.1 经典物理学的困难

如前言所叙,随着半导体器件尺寸的不断缩小,以及各种各样低维结构与器件如量子阱、超晶格、纳米线、纳米点、隧道结、单电子器件等等的出现,描写电子运动的经典电子学将不再适用,因此学习和研究半导体材料必须掌握一些量子力学方面的基础知识。本章主要介绍半导体材料与器件中要涉及的一些量子力学概念及几种最基本的运动方式。

大家知道,19 世纪末,物理学理论已经被认为达到了尽善尽美的境界。牛顿力学、热力学和电磁理论以及光的波动方程的建立使得人们以为所有的物理问题都已经解决了。大到巨大的星体、小到气体分子的运动,都可以用经典物理学精确地预测。然而到了 20 世纪初,物理学碰到了一些前所未有的难题,这些难题包括:黑体辐射、光电效应、氢原子光谱等。

### § 1.1.2 黑体辐射

什么是黑体?从普通物理学我们知道,能吸收入射到其上面全部辐射能的物体称为绝对黑体,简称黑体。黑体辐射就是由这样的物体发出的辐射,例如一个开有小孔的空腔发射出来的电磁波就可以认为是黑体辐射。

当时,人们已经很清楚光与电磁波的关系,并用光的波动方程很好地解释了各种光学现象。但是,在解释黑体热辐射时,却遇到了前所未有的困难。

实验发现,热平衡时,空腔辐射的能量密度随辐射波长的分布曲线的形状和辐射极大值对应的波长位置只与黑体的绝对温度  $T$  有关而与黑体的形状和材料无关。

#### 1. 维恩黑体辐射公式

维恩从热力学出发,利用连续波长分布近似,得到一个热辐射强度随频率的分布公式:

$$\rho_\nu d\nu = C_1 \nu^3 e^{-C_2 \nu/T} d\nu \quad (1.1)$$

$$\rho(\lambda) d\lambda = \frac{C_1}{\lambda^5} e^{-\frac{C_2}{\lambda T}} d\lambda \quad (1.2)$$

式中  $C_1, C_2$  为参数,  $T$  为温度,  $\rho_\nu$  是单位体积在频率  $\nu \rightarrow \nu + d\nu$  之间的辐射能量,  $c$  是光速,  $k$  为波尔兹曼常数,  $\lambda$  为波长,  $\nu$  为频率。

与实验数据比较,发现维恩公式在短波部分与实验结果比较符合,但在长波部分则明显不一致。

## 2. 瑞利-金斯黑体辐射公式

瑞利-金斯以经典电动力学出发推导黑体辐射公式。经典电动力学认为空腔腔壁是由电谐振子组成,谐振子的能量为  $kT$ 。谐振子能够辐射和吸收能量以保持热平衡,从而得到理论公式:

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi}{c^3} kT \nu^2 d\nu \quad (1.3)$$

或者

$$\rho_\lambda d\lambda = \frac{8\pi c}{\lambda^5} kT d\lambda \quad (1.4)$$

式中各参数的意义同上。

与维恩公式相反,瑞利-金斯公式在长波部分与实验符合较好,而在短波部分则完全不符,而且趋于无穷大,即当时的所谓“紫外灾难”。

## 3. 普朗克黑体辐射公式

普朗克在 1900 年 12 月 14 日发表的论文中认为,如果空腔内的黑体辐射和腔壁原子处于平衡状态,那么辐射的能量分布与腔壁原子的能量分布就应有一种对应。作为辐射原子的模型,他假定:

(1)原子的性能和谐振子一样,以给定的频率  $\nu$  振荡;原子的能量只能取  $h\nu$  的整数倍,即  $0h\nu, 1h\nu, 2h\nu, \dots$  这与量子力学中谐振子的能量一致,但量子力学中还发现谐振子的能量存在零点能。

(2)黑体只能以  $h\nu$  为能量单位以不连续的方式发射和吸收能量,因此称  $h\nu$  为“量子”,  $h = 6.6260755 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$  为普朗克常数。

根据这个假定,频率为  $\nu$  的谐振子的平均能量为

$$\bar{\epsilon}_{\nu,T} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n(h\nu)e^{-\frac{nh\nu}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{kT}}} \quad (1.5)$$

令  $\beta = \frac{h\nu}{kT}$ , 则上式可以化为

$$\bar{\epsilon}_{\nu,T} = -h\nu \frac{\frac{d}{d\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta}} = -h\nu \frac{\frac{d}{d\beta} \frac{1}{1-e^{-\beta}}}{\frac{1}{1-e^{-\beta}}}$$

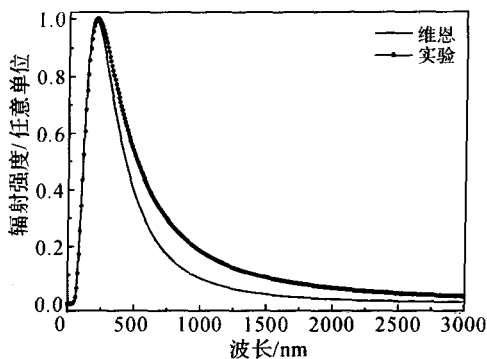


图 1.1 维恩公式与实验数据的比较

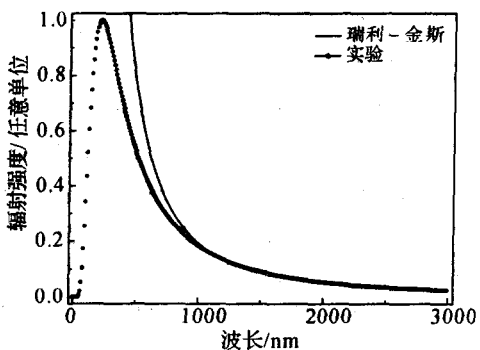


图 1.2 瑞利-金斯公式与实验数据的比较

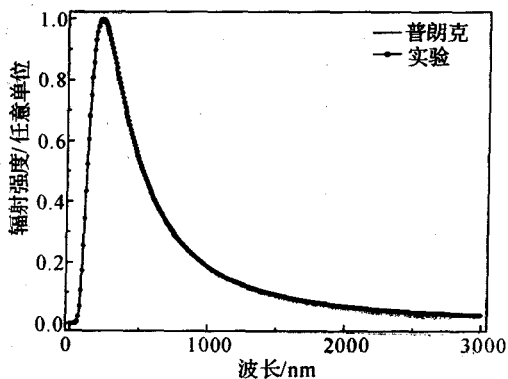


图 1.3 普朗克公式与实验数据的比较

$$= -h\nu \frac{\left( -\frac{e^{-\beta}}{(1-e^{-\beta})^2} \right)}{\frac{1}{1-e^{-\beta}}} = \frac{h\nu e^{-\beta}}{1-e^{-\beta}} = \frac{h\nu}{e^{\beta}-1} \quad (1.6)$$

用这个平均能量取代瑞利-金斯公式中的热运动能  $kT$ ，即得到与实验结果符合很好的黑体辐射公式：

$$\rho_{\lambda}d\lambda = \frac{8\pi c}{\lambda^4} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1} d\lambda = \frac{8\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1} d\lambda \quad (1.7)$$

或

$$\rho_{\nu}d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1} d\nu \quad (1.8)$$

以上两式都是普朗克辐射定律的表达式。

当频率很高或很低时，普朗克公式趋近维恩公式和瑞利-金斯公式。可以证明：

(1) 当频率  $\nu$  很高 (即波长很短) 时,  $e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \approx e^{\frac{h\nu}{kT}}$ , 普朗克定律转化为维恩公式:  $\rho_{\nu}d\nu = C_1\nu^3 e^{-C_2\nu/T} d\nu$ 。

(2) 当频率  $\nu$  很低 (即波长很长) 时, 因为  $e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \rightarrow \frac{h\nu}{kT}$ , 所以普朗克公式转化为瑞利-金斯公式:  $\rho_{\lambda}d\lambda = \frac{8\pi c}{\lambda^4} kT d\lambda$ 。

普朗克在推导上述定律时用到的假定不能完全用经典概念来解释, 但它却能很好地描述实验结果。存在即有它的合理性, 后来发展的量子力学证明了普朗克假设的正确性。

普朗克的假定冲破了当时经典理论的束缚, 打开了认识光及电磁波的微粒性的途径, 使后人意识到光子的能量是不连续的, 或者说, 能量是量子化的。

### § 1.1.3 光电效应

如果说普朗克的黑体辐射理论揭示了光子能量的量子化的特点, 那么 1887 年赫兹的发现进一步揭示了光的粒子性。赫兹发现, 当光波照射到金属表面上时, 有电子从金属表面逸出, 这种现象称为光电效应, 逸出的电子称为光电子, 如图 1.4 所示。

实验中发现, 要使电子从金属表面逸出, 则入射光的频率必须大于某一确定值  $\nu_0$ , 否则不论光强度多大, 照射时间多长, 都没有光电子产生, 这就是所谓的“光电效应的红限”。

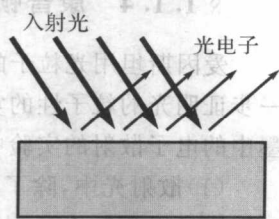


图 1.4 光电效应示意图

该实验的另一个发现是: 逸出的光电子的能量只与入射光的频率有关, 与入射光的强度无关, 入射光的强度只决定逸出光电子数目的多少。然而, 按照经典电磁理论: 光的能量只决定于光的强度而与频率无关。因此经典的电磁理论无法解释光电效应。

1905 年, 爱因斯坦受普朗克黑体辐射量子论的启发, 提出光电效应理论, 并因此获得 1921 年的诺贝尔物理学奖。

爱因斯坦认为:

(1) 光由光粒子 (光子) 的形式存在, 并以光子的形式参与光的发射、吸收和传播等。

(2)光子的能量为  $h\nu$  或  $h\omega$ ,光子的动量为  $p=E/c=h/\lambda=hk$ 。

这样,当光照射到金属表面时,能量为  $h\nu$  的光子被金属内的电子所吸收,把能量全部传递给电子。电子把光子能量的一部分用以克服金属表面对它的吸引,另一部分转化为电子离开金属表面时的动能。其能量关系可写为

$$E_k = h\nu - \phi \quad (1.9)$$

其中  $\phi$  为材料的功函数,如图 1.5 所示。

利用光子的概念,爱因斯坦用非常简单的数学公式,成功地解释了光电效应。以下对光电效应的几个典型特点进行了分析。

### 1. 红限或临界频率 $\nu_0$

当频率小于某个确定值或波长大于某个值时,光子的能量太小以至于吸收了该光子能量的电子没有足够的能量克服金属表面的势垒而脱离金属表面,因而没有光电子产生。

### 2. 光电子的动能

光电子的动能只决定于光子的频率,把光看成光子后,光与电子的作用就好像两个经典粒子的碰撞,碰撞后光子把能量全部交给电子,因此电子的能量就等于光子原先带有的能量  $h\nu$ 。考虑到材料功函数的影响,逸出金属后光电子的动能为  $E_k = h\nu - \phi$ ,与光强无关。

### 3. 光的强度

光的强度决定于光子的数目,从而决定逸出光电子的数目。

爱因斯坦的光电效应理论解释了光的粒子性,即光除了波动性外,在某些情况下,还具有粒子的特性。

## § 1.1.4 康普顿散射

爱因斯坦用光粒子的概念成功地解释了光电效应,初步确立了光量子的概念。另一个进一步证明光的粒子性的实验是光的康普顿散射。康普顿在研究 X 射线被轻元素如白蜡和石墨中的电子散射的实验中发现:

(1)散射光中,除了与入射波长  $\lambda$  相同的 X 射线,还增加了波长为  $\lambda'$  的 X 射线,且  $\lambda' > \lambda$ ,即能量损失后的 X 射线;

(2)波长增量  $\Delta\lambda$  随散射角增大而增大。

以上实验现象称为康普顿效应。

但是,从经典电动力学的观点出发,电磁波被电子散射后,其波长不应该发生改变因此无法解释这个现象。基于爱因斯坦光电效应理论,康普顿用光量子的概念解释了康普顿散射。即假定光子的能量为  $h\nu$  或  $h\omega$ ,光子的动量为  $p=E/c=h/\lambda=hk$ ,则当光子与电子发生碰撞时,将发生能量转移,并导致波长变化。

利用经典力学的刚体碰撞模型中的能量和动量变化公式,可以证明,散射后 X 射线的波长改变为

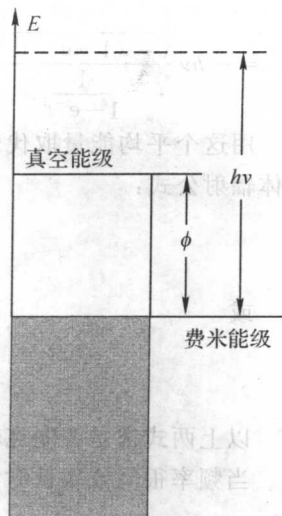


图 1.5 光电效应的爱因斯坦模型

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta) \quad (1.10)$$

其中的  $\theta$  如图 1.6 所示。

以上公式与实验结果符合得非常好。康普顿效应的发现及利用光量子对实验现象的解释,使得光的粒子性得到进一步证实。康普顿因此发现获得了 1927 年的诺贝尔物理学奖。

光电效应和康普顿散射给了当时的研究人员十分重要的启示,即光除波动性(干涉、衍射等)外,还具有普通粒子的特性,即光具有“波粒二象性”。

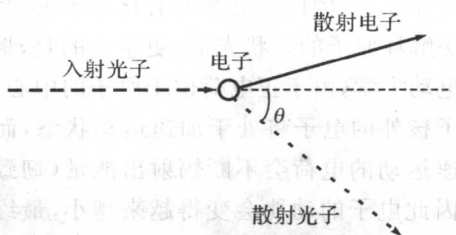


图 1.6 康普顿散射示意图

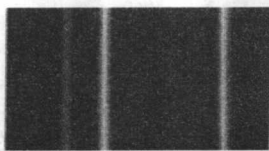
### § 1.1.5 原子光谱及原子的结构

从原子的光谱实验,我们知道原子光谱为线状光谱,即分立而不是连续的光谱,如图 1.7 所示对氢原子光谱来说,谱线出现位置的频率的经验公式是:

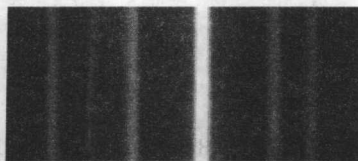
$$\nu = R_{\text{H}}c \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n > m \quad (1.11)$$

式中  $\nu$  为频率,  $R_{\text{H}}$  为里德堡常数 ( $R_{\text{H}} = 1.09737 \times 10^7 \text{m}^{-1}$ ),  $c$  为光速,  $m, n$  为大于零的整数。

如果  $m=1$ , 则  $n$  可以取值为 2、3、4、... 这样的光谱线形成的系列称为赖曼(Lyman)系, 此系位于远紫外区。如果  $m=2$ , 则  $n$  可以取值为 3、4、5、... 这样的光谱线形成的系列称为巴尔末(Balmer)系, 位于可见区。如果  $m=3$ , 则  $n$  可以取得值为 4、5、... 这样的光谱线形成的系列称为帕邢(Paschen)系, 位于红外区。依此类推, 还可得到其他的线系。



氢原子光谱



氢原子光谱

图 1.7 原子光谱

虽然公式(1.11)与实验结果符合得较好,但存在三个难解的关键的问题:

- (1) 为什么原子的光谱是线状光谱,它的产生机制是什么?
- (2) 原子光谱线的频率为什么有这样简单的规律?
- (3) 原子光谱线公式中的两个参数为何正好是整数?

显然,经典物理学无法解释以上实验现象,因为那时对原子的结构还不清楚,只知道原子内有正电荷和带负电的电子,但正、负电荷具体如何分布并不清楚。直到卢瑟福的  $\alpha$  粒子散射实验揭示了新的实验结果,人们才开始对原子结构有了进一步的了解。

卢瑟福在  $\alpha$  粒子散射实验中发现,在大角度方向也有散射后的  $\alpha$  粒子出现,如图 1.8 所示。这就说明原子中存在一个带正电的核,因为只有这样,才有可能让  $\alpha$  粒子发生大角散射。卢瑟福虽然认识到原子是一个有核模型,但他还不知道电子的具体分布,他认为负电荷是均

匀分布的。因此卢瑟福的有核原子模型,还是无法解释原子的线状光谱。更重要的是,根据经典电动力学,由于正电荷位于原子的中心,位于原子核外的电子将处于加速运动状态,而处于加速运动的电荷会不断辐射出能量(韧致辐射)。因此电子的动能会变得越来越小,最终“掉到”原子核中去,即会发生原子的“崩溃”。

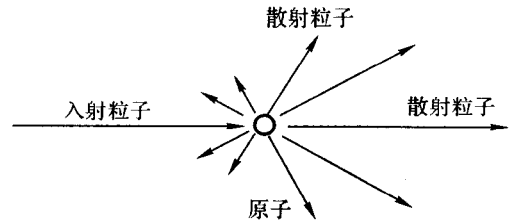


图 1.8 卢瑟福散射

1913年,波尔吸取了普朗克和爱因斯坦的量子概念,并结合卢瑟福的原子有核模型,如图 1.9 所示。把这种概念运用到原子结构问题上,提出了基于量子论的原子结构模型。

波尔的原子模型要点如下:

(1) 原子处于定态,原子结构类似于太阳系模型,带正电的核位于中心,电子围绕原子核做圆周运动。

(2) 电子只能在一些特定的轨道上绕核运动,这些轨道彼此分立;电子在这样的轨道上运动时,不吸收也不放出能量;

(3) 电子的轨道角动量(能量)只能取分立值  $n\hbar$  (索末菲条件,  $\hbar$  为普朗克常数),即

$$\text{角动量 } L = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| = r\mu v = n\hbar, n \text{ 为正整数。} \quad (1.12)$$

(4) 电子在轨道间发生跃迁时放出和吸收能量,电子吸收或放出的能量为两个能级的能量差。

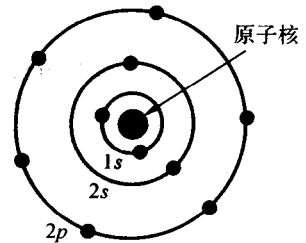


图 1.9 波尔的原子模型

以下以氢原子为例说明原子的线状光谱。假设氢原子中的电子绕核做圆周运动,半径为  $r$ ,电子的质量为  $\mu$ ,则向心力

$$F_c = \frac{\mu v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad (1.13)$$

$$v^2 = \frac{e^2}{\mu r} \quad (1.14)$$

由量子化条件(3),角动量  $L = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| = r\mu v = n\hbar$ ,得  $(r\mu v)^2 = n^2 \hbar^2$ 。把上面的  $v^2$  (式 1.14) 代入,得  $r^2 \mu^2 \frac{e^2}{\mu r} = n^2 \hbar^2$ ,所以

$$r = \frac{n^2 \hbar^2}{\mu e^2} \quad (1.15)$$

当  $n=1$  时,

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \quad (1.16)$$

此即第一波尔半径,此时氢原子处于基态。

氢原子中处于  $n$  能级的电子的能量为

$$E_n = T + V = \frac{1}{2} \mu v^2 - \frac{e^2}{r} \quad (1.17)$$

由于  $r = \frac{n^2 \hbar^2}{\mu e^2}$ ,所以  $E_n = \frac{1}{2} \mu \frac{e^2}{\mu r} - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r}$ ,即

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2n^2 \hbar^2} \quad (1.18)$$

根据波尔的量子跃迁的概念(4),当电子在不同能级间发生跃迁时,吸收或放出的能量等于  $\Delta E = E_n - E_m$ ,相应的频率为  $\nu = \frac{E_n - E_m}{h}$ 。把能量公式代入,得

$$\nu = \frac{1}{2\pi \hbar} \left[ -\frac{\mu e^4}{2n^2 \hbar^2} + \frac{\mu e^4}{2m^2 \hbar^2} \right] = \frac{\mu e^4}{4\pi \hbar^3} \left[ \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right] \quad (1.19)$$

与氢原子线状光谱的经验公式  $\nu_{\text{exp}} = R_H c \left[ \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right]$  比较,得  $R_H = \frac{\mu e^4}{4\pi \hbar^3 c}$ ,其数值与实验结果完全一致。

在这里,我们得到一个重要推论,即原子中电子与光子一样,可取的能量也是不连续的,即原子中电子的能量也是量子化的。

### § 1.1.6 弗朗克-赫兹实验

下面的弗朗克-赫兹实验证实了波尔的原子模型的正确性,它再次直接证明了原子中电子的能量只能取分立的值。

实验装置及结果如图 1.10 所示:在一个充有汞蒸气的玻璃容器内,置有一热灯丝、一个栅网状加速电极、一个电子收集极,收集极与加速极之间加有 0.5V 的电压,这样能量很小的电子通过加速栅后就不能到达收集极,由此滤去从灯丝运动到加速极过程中

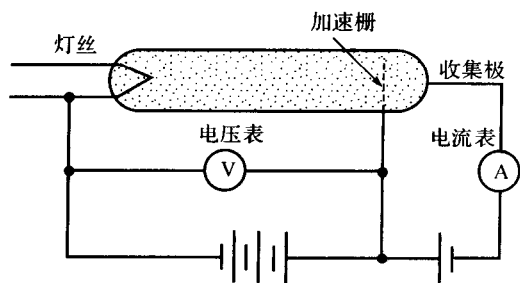


图 1.10 弗朗克-赫兹实验

与气体分子发生碰撞损失了能量的电子。实验结果如图 1.11 所示。从图中可以看出,只有当加速电压在某些值时,电流有规律地出现极大值,说明电子的能量分布是不连续的,即使量子化的波尔的原子模型及量子论虽然很好地解释了氢原子的光谱结构,但仍然存在明显的局限性。例如它不能说明较复杂的原子的光谱,即使是比氢稍微复杂的氦原子的光谱也不能很好地解释,同时,它无法给出光谱中各谱线的强度。另外,它只能处理像原子那样的定态运动,不能处理处于非束缚状态的电子问题,如电子的散射与衍射问题。最重要的是从理论上讲,能量量子化的概念与经典力学不相容,完全是一种人为的假设,没有从物理本质上说清楚。因此,当时的研究人员认为可能需要一种全新的物理理论来解释以上各种所谓的“异常”实验现象。这就导致了量子力学的诞生。

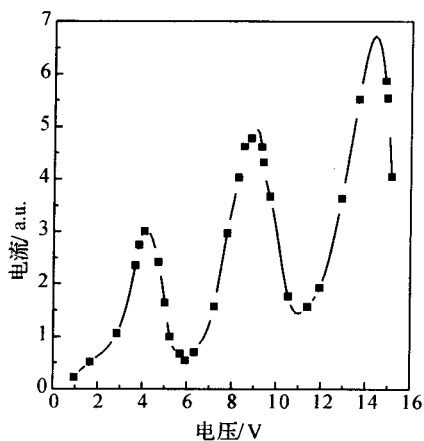


图 1.11 水银蒸气放电的  
电流-电压曲线



## § 1.2 物质波

受爱因斯坦光电理论中光量子的启发,1924年德布罗意提出实物粒子也应具有波粒二象性,并于1929年获得诺贝尔物理学奖。

我们知道,对频率为 $\nu$ ,速度为 $c$ 的光波,相当于能量为 $h\nu$ 或 $h\omega$ 、动量为 $p = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda} = hk$ 的光子。反过来考虑,一个能量为 $E_k$ 、动量为 $p$ 的粒子,它对应的波长应该为 $\lambda = \frac{h}{p}$ ,即

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} \quad (1.20)$$

对高速运动的高能粒子,考虑到相对论效应,则上式应修正为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu} = \frac{h}{m_0\nu} \sqrt{1 - \left(\frac{\nu}{c}\right)^2} \quad (1.21)$$

虽然这只是一个简单的类比,但上式赋予的物理意义却是革命性的。一个能量为 $E_k$ 、动量为 $p$ 的粒子,它除了粒子性外,还具有波的特性,对应的波长为 $\lambda = \frac{h}{p}$ ,频率为 $\nu = \frac{E}{h}$ 。公式(1.20)就是著名的关于物质波的德布罗意(de Broglie)波长公式。

戴维逊-盖末(Davisson-Gemer)在1927—1928年间进行的电子衍射实验证明了德布罗意物质波的假设是成立的。这个实验由于其在证明电子具有波动性方面的贡献而于1937年获得诺贝尔物理学奖。

戴维逊-盖末电子衍射装置的示意图如图1.12所示。从电子枪出来的电子,具有能量 $E$ ,根据德布罗意的假设,它对应的物质波的波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} = \frac{1.225}{\sqrt{E_k}} (\text{nm}) \quad (1.22)$$

式中 $E_k$ 的单位为电子伏。在戴维逊-盖末的实验中,电子枪的加速电压为54V,因此电子的动能为54eV,由此对应当物质波的波长为0.167nm。实验结果发现,电子束经镍单晶(晶格常数为0.215nm)散射后,散射电子的分布不是各向同性的,散射强度随极角的变化而变化,而且在50°时有极大值出现。这在经典力学中是无法解释的,但根据物质波的概念,这种现象一点也不奇怪,相反,它正好证明了电子的波动性质。

从具体数据来看,德布罗意的物质波对电子衍射的描述也是非常精确的。对于正入射的低能电子,由于能量较小,因此透射深度不大,只考虑表面散射就可以了,因此衍射加强处对应的极角为 $d\sin\theta = \lambda$ ,如图1.12所示。代入镍单晶的晶格常数0.215nm和54eV时的电子波的波长0.167nm,则衍射极大对应的极角为50.96°,与实验结果非常接近。到现在为止,我们可以推论任何物质都具有波粒二象性,但由于宏观物质的质量太大,相应的波长太短以至于不会显示其波动性。

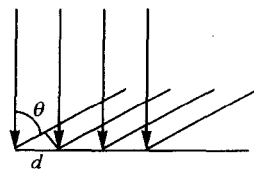


图 1.12 电子衍射示意图