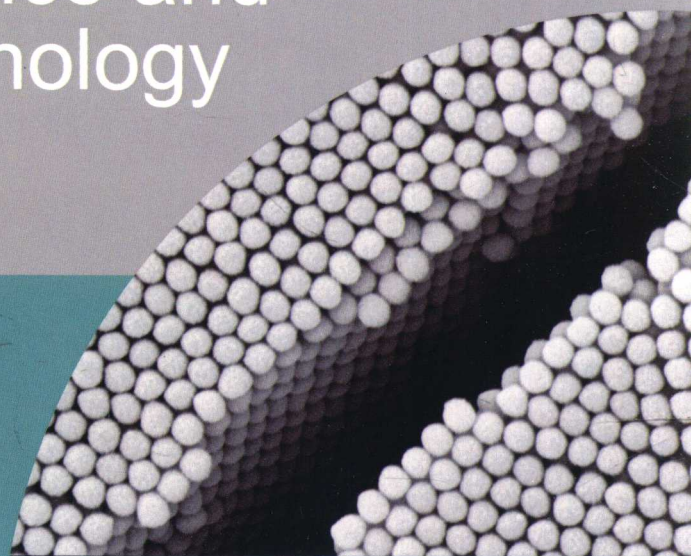


陈乾旺 编著

纳米科技基础

第二版 2nd Edition

Introduction to Nanoscience and Nanotechnology



200 nm



EHT = 5.00 kV

WD = 14.4 mm

Signal A = SE2

Mag = 50.00 K X

Date :11 May 2010

Time :11:47:47

纳米科技基础

第二版 2nd Edition

Introduction to
Nanoscience and
Nanotechnology

陈乾旺 编著

NAMI KEJI JICHU

 高等教育出版社·北京
HIGHER EDUCATION PRESS BEIJING

图书在版编目(CIP)数据

纳米科技基础 / 陈乾旺编著. -- 2 版. -- 北京 :
高等教育出版社, 2014. 1
(纳米科学与技术著作系列)
ISBN 978-7-04-038650-9

I. ①纳… II. ①陈… III. ①纳米技术-研究 IV.
①TB303

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 245244 号

策划编辑 刘剑波 责任编辑 焦建虹 封面设计 姜磊 版式设计 余杨
插图绘制 宗小梅 责任校对 刁丽丽 责任印制 张泽业

出版发行 高等教育出版社
社 址 北京市西城区德外大街 4 号
邮政编码 100120
印 刷 中国农业出版社印刷厂
开 本 787mm×1092mm 1/16
印 张 17.75
字 数 300 千字
插 页 1
购书热线 010-58581118

咨询电话 400-810-0598
网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>
网上订购 <http://www.landaco.com>
<http://www.landaco.com.cn>
版 次 2008 年 1 月第 1 版
2014 年 1 月第 2 版
印 次 2014 年 1 月第 1 次印刷
定 价 45.00 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 38650-00

第二版前言

《纳米科技基础》出版已经五年。这期间,纳米科技飞速发展着,许多新的现象被发现,新的材料被合成,新的应用不断被提出和探索,因而需要在书中进行补充。为此,在第一版的基础上,本版在第5章中增加了石墨烯部分;在第9章中增加了对过去十年纳米科技进展的简要总结和对未来重点发展方向的展望;对纳米生物技术等其他章节也作了补充;为便于读者查阅和学习,在书的末尾部分增加了两张关于常见半导体的能带和一些磁性纳米材料单磁畴尺寸的表格。由于本书是在第一版基础上完成的,因此它承载着前版作者们的智慧和劳动。第一版撰写过程中,熊鹰博士、魏凌志博士、曹方宇、陈瑶和吴明在教授以及在美国工作的彭振猛博士在资料的搜集和整理方面做了大量工作,在此特别致谢。最后还要感谢高等教育出版社的编辑为本书付出的辛勤劳动。由于水平有限,书中难免出现一些错误,敬请批评指正。

编著者

2013年9月

第一版前言

有那么一些领域,非常小,最好的光学显微镜都很难看清它们。在这里,原子和分子都以纳米尺度来度量,1 纳米为 10 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,例如纳米电子学、纳米材料学、纳米机械学、纳米生物学等。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,从而巨型计算机能装入口袋里;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 $1\ \mu\text{m}$ 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。五花八门的发展方向和机遇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,本书编著者在多年科研和教学实践的基础上,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,量子物理,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表征方法,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与综述论文和会议报告。熊鹰博士、魏凌志博士、曹方宇、陈瑶和吴明在教授以及在美国工作的彭振猛博士在资料的搜集和整理方面做了大量工作,在此特别致谢。由于编著者水平有限,文献引用也可能存在疏漏,敬请读者指正。

编著者

2007年12月

目 录

第 1 章 从原子到材料	(1)
1.1 原子结构	(2)
1.2 有限的化学元素与丰富的材料体系	(10)
1.2.1 固体中的化学键	(10)
1.2.2 有限的元素与复杂的物质世界	(13)
1.2.3 固体材料的结构	(16)
参考文献	(18)
第 2 章 低维结构	(21)
2.1 量子阱	(23)
2.1.1 概念与背景	(23)
2.1.2 量子阱中的能级	(24)
2.1.3 量子阱结构造成的能级分裂	(24)
2.1.4 量子阱结构造成的电子态密度分布及其影响	(26)
2.1.5 基于量子阱和超晶格材料的量子器件	(29)
2.2 量子线	(32)
2.2.1 量子线的电子能带结构	(32)
2.2.2 量子线的性质	(35)
2.2.3 碳纳米管电子器件	(35)
2.3 量子点	(36)
2.3.1 量子点的能级	(36)
2.3.2 量子点的性质	(37)
2.3.3 量子点的应用	(38)
参考文献	(42)
第 3 章 纳米制备技术	(45)
3.1 光刻	(47)
3.1.1 光学光刻	(48)

3.1.2	电子束光刻	(50)
3.1.3	离子束光刻	(52)
3.1.4	X射线光刻	(54)
3.2	软刻蚀	(55)
3.2.1	微接触印刷术	(57)
3.2.2	复制模塑	(61)
3.2.3	转移微模塑	(63)
3.2.4	毛细微模塑	(64)
3.2.5	溶剂辅助微模塑	(65)
3.3	“蘸水笔”纳米刻蚀术	(68)
3.3.1	阵列化的磁性纳米结构	(71)
3.3.2	各种固态纳米结构的制备	(72)
3.3.3	DPN 构造生物分子微纳米阵列结构	(74)
3.4	纳米球刻蚀	(77)
3.4.1	单层周期性微粒阵列	(78)
3.4.2	双层周期性微粒阵列	(78)
3.4.3	纳米环	(79)
3.4.4	用 SL PPA _s 为模板通过共价吸附纳米微粒自组装	(80)
3.4.5	角分辨纳米球刻蚀	(81)
3.5	自组装	(85)
3.5.1	静态自组装	(86)
3.5.2	动态自组装	(93)
	参考文献	(94)
第4章	原子或分子操纵	(113)
4.1	STM 操纵原子	(114)
4.1.1	横向操纵模式	(114)
4.1.2	纵向操纵模式	(115)
4.1.3	非弹性隧穿诱导操纵模式	(116)
4.1.4	电场诱导操纵模式	(117)
4.2	操纵原子构筑纳米结构	(118)
4.2.1	量子栅栏	(118)
4.2.2	量子海市蜃楼——近藤共振电子结构的蜃影	(119)
4.3	原子操纵与单分子化学	(122)

4.3.1	非弹性隧穿谱	(122)
4.3.2	原子操纵与单个分子的振动谱研究	(123)
4.3.3	诱导单分子化学反应	(124)
4.4	光镊操纵	(126)
	参考文献	(128)
第5章	典型纳米材料——碳纳米管和石墨烯	(131)
5.1	碳纳米管的制备	(134)
5.1.1	合成技术	(134)
5.1.2	生长机理	(135)
5.2	碳纳米管的结构、缺陷和性能	(136)
5.2.1	碳纳米管的结构和缺陷	(136)
5.2.2	新奇结构碳纳米管	(138)
5.2.3	碳纳米管的性能	(140)
5.3	碳纳米管的潜在应用	(144)
5.3.1	储能	(145)
5.3.2	碳纳米管分子电子学	(147)
5.3.3	微探针和传感器	(148)
5.3.4	复合材料	(149)
5.3.5	纳米反应器	(150)
5.4	石墨烯	(151)
5.4.1	石墨烯的结构	(151)
5.4.2	石墨烯的制备	(151)
5.4.3	石墨烯的性质与应用	(152)
	参考文献	(157)
第6章	纳米结构显微分析	(159)
6.1	前言	(160)
6.2	扫描电子显微镜	(161)
6.2.1	电子与样品的相互作用	(161)
6.2.2	扫描电子显微镜的工作原理及应用	(163)
6.3	透射电子显微镜	(166)
6.3.1	电子衍射分析	(166)
6.3.2	透射电子显微镜的工作模式	(168)

6.3.3	电子衍射图标定	(170)
6.3.4	纳米结构分析	(172)
6.3.5	电子显微分析新进展	(174)
6.4	扫描探针显微镜	(176)
6.4.1	扫描力显微镜的工作原理	(176)
6.4.2	扫描力显微镜的工作和成像模式	(177)
6.4.3	几种常用的扫描力显微镜	(179)
6.4.4	扫描探针显微镜在纳米表征中的应用	(182)
6.5	扫描隧道显微镜	(184)
6.5.1	扫描隧道显微镜的工作原理	(185)
6.5.2	扫描隧道显微镜的应用	(187)
6.6	扫描近场光学显微镜	(194)
6.6.1	传统光学显微镜的工作原理	(194)
6.6.2	扫描近场光学显微镜的工作原理	(195)
	参考文献	(199)
第7章	纳米电子学	(205)
7.1	纳米晶体管	(206)
7.1.1	什么是晶体管	(206)
7.1.2	碳纳米管晶体管	(206)
7.1.3	单电子晶体管	(209)
7.2	纳米存储器	(212)
7.3	纳米电路	(214)
7.3.1	传统大规模集成电路	(214)
7.3.2	纳米电路	(216)
7.4	基于纳米科技的量子计算机	(221)
	参考文献	(224)
第8章	纳米生物技术	(227)
8.1	纳米技术与生物大分子	(228)
8.1.1	DNA	(229)
8.1.2	蛋白质	(234)
8.2	纳米颗粒材料与细胞	(236)
8.2.1	金属纳米颗粒材料	(236)

8.2.2 非金属纳米颗粒材料	(237)
8.3 纳米医学造影材料	(238)
8.3.1 造影剂在磁共振成像中的应用	(239)
8.3.2 医学造影剂在光声成像中的应用	(241)
8.4 癌症的早期诊断与治疗	(243)
8.4.1 肿瘤病理学与纳米粒子治疗的生物学基础	(243)
8.4.2 纳米技术在癌症诊断方面的应用研究	(245)
8.4.3 纳米技术在癌症治疗方面的应用研究	(247)
参考文献	(254)
第9章 前景展望	(257)
9.1 原子和分子	(258)
9.2 创新点	(258)
9.3 纳米科学	(260)
9.4 纳米技术	(260)
9.5 什么是可能的	(261)
9.6 原子力显微镜对纳米技术的贡献	(261)
9.7 纳米科技的未来十年	(262)
附表	(264)
全书思考题	(266)

从原子到材料

第 1 章

- 1.1 原子结构 (2)
- 1.2 有限的化学元素与丰富的材料体系 (10)

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(E. Rutherford)和玻尔(N. Bohr)于 1911 年和 1913 年间发展起来的原子概念。卢瑟福提出原子由占有绝大部分质量的核和带负电的包围着核的云构成,相对核来说,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(R. Feynman)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,如果把一个原子的原子核放大到苹果那么大,那么同比放大的原子就会和地球一样大。电子的质量只占到很小的一部分(表 1-1),但却在原子中相对很大的空间内运动。

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	$9.109\ 4\times 10^{-31}$	-1.6×10^{-19}	10^{-18}
质子 p	$1.672\ 6\times 10^{-27}$	$+1.6\times 10^{-19}$	10^{-15}
中子 n	$1.674\ 9\times 10^{-27}$	0	10^{-15}

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

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 P 、质量数为 A 的原子 M 可以表示成这样的形式: ${}^A_P M$ 。

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^[1]

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的偏转。

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。电子绕原子核作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、卢瑟福的原子结构模型和爱因斯坦的光量子理论的基础上,玻尔于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作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 态的电子吸收一个能量为 $h\nu$ 的光子, 也可跃迁到 E_1 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:

$$r_n = n^2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.5)$$

令

$$a_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \quad (1.6)$$

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 是常数。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; 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的能量不同, 同时电子失去能量跃迁到的低能轨道的能量也不同, 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:

$$R_H = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{hc} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{hc} \cdot \frac{e^2}{2a_1} \quad (1.11)$$

将这些常数代入, 得到的里德伯常量 ($R_H = 1.09677 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$) 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零场中复杂 (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^[2]

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 $\psi = \psi(r, t)$ 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 , 则不确定性可用均方根偏差 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,不确定原理才是重要的。

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,称为电子云图(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,找到粒子的概率正比于正数 $\psi \times \psi$ (即 ψ^2)。

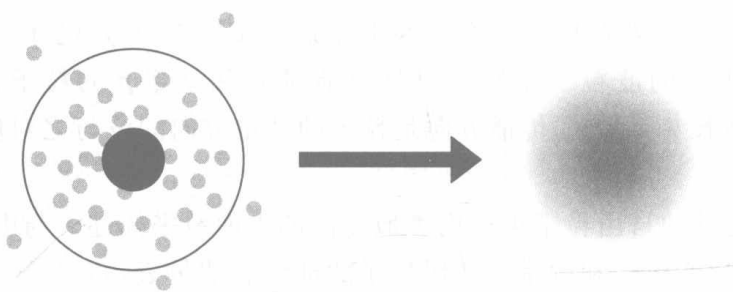


图 1-1 电子云模型

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 $\psi(r, t)$ 满足方程