工 科 物 理

清华出版社

需要全本请访问 www.ertongbook.com

工 科 物 理

第 10 卷第 4 期(总第 78 期)　2000 年 8 月

目　　录

院 士 论 坛

- 发展中的平流层通信系统 …… 吴佑寿(1)

专　　论

- 原子围栏中金属表面电子的态函数及能级 …… 周佩瑶　王　莱等(9)
- 热力学的拉格朗日函数 …… 张有生(12)

教 学 研 究

- 如何给工科大学生讲量子力学 …… 李柳青(16)
- x^3 振荡器及其周期 …… 于凤军(20)
- 载流线圈的磁矩及其在均匀磁场中所受磁力矩公式的普遍证明 …… 戴同庆　康垂令(22)
- 菲涅耳圆孔衍射中心场点光强的解析表示 …… 顾永建(24)
- 普遍情况下阐述动生电动势产生机理的简单方法 …… 刘喜斌(26)

物 理 实 验

- 也谈“用绳拉船靠岸的船速问题” …… 程达三　刘兴来(29)
- “浮环”演示实验的定量分析 …… 袁晓忠　张炽伟(33)
- 孤波发生器 …… 陆汝杰　吴於人等(35)

物理与工程

- 高精度激光陀螺的物理基础 …… 郭留河　冯冬梅等(37)
- 电导率监测在研究碳酸钙水溶液析晶过程中的应用 …… 方　健(41)

教 学 手 段 现 代 化

- 统计规律性的计算机模拟演示 …… 吕　春(46)

热 门 话 题

- 物理美之范畴 …… 杨震辉　薛长江等(52)

教 改 论 坛

- 试论大学物理授课中的美育 …… 王心芬　程民治(55)

经 验 交 流

- 物理教学要联系实际 …… 尤景汉　张庆国等(60)
- 工程技术中的物理模型与物理模拟 …… 常同钦(64)

封　　面

- 清华大学出版社最新出版教材

院士论坛



1998 年 8 月在清华大学召开的“当代工程科学进展及工科物理教学改革高级研讨班”上特邀吴佑寿院士作了报告. 2000 年 6 月吴佑寿先生对此报告内容又作了修改, 今予发表.

发展中的平流层通信系统

吴佑寿
中国工程院院士, 清华大学电子工程系教授
(北京　100084)

PROSPECTS OF THE STRATOSPHERIC COMMUNICATION SYSTEM

今天我想谈三个问题, 先谈通信技术的发展趋势, 再讲什么是平流层通信, 最后讨论平流层通信的一些问题.

1　现代的通信技术及其发展趋势

20 世纪 80 年代以来, 信息技术发展神速: 光纤通信和卫星通信技术日益成熟, 蜂窝电话也迅速普及. 在技术推动和市场需求两股巨大力量的促进下, 通信界提出一个“实现 5w 通信”的宏伟目标: 任何人(whoever) 在任何地方(wherever) 与任何时间(whenever) 都可以和任何人(whomever) 进行任何方式(whatever) 的通信. 更具体地说, 任何个人, 不管白天黑夜或寒冬酷暑, 家居或旅行, 也不论在城市, 农村或荒野沙漠, 甚至在海洋, 空中或南北极, 都可以和任何其它人(包括机器) 交换各式各样的信息, 包括电话、数据、图象和视频等多媒体信息. 显然这种 5w 通信对通信技术提出更为严格的要求, 通信设备必须宽带化、移动化、智能化、小型化, 而且价格也必须低廉, 才能广泛应用.

目前已有的各种通信系统各有各的优点和弱点. 光纤通信系统的频带很宽, 可以用来传送各种信息, 但它只能用于固定通信, 也难以铺设到戈壁和崇山峻岭, 更难用于极地与海洋. 同步卫星通信也有很宽的频带, 可以复盖地球每个角落, 但是它距地面 35, 800km, 传输衰减大, 延迟时间长, 地面接收终端很难小型化、移动化. 采用距地面几百或几千公里的低中轨卫星是一种实现全球移动通信的可行方案, 但是这一方案需要用数十颗卫星组成星座才能工作. 例如“铱星”系统由 66 颗高度为 780km 的低轨卫星组成, 1998 年 11 月 1 日投入运营, 实现了全球个人移动电话通信, 使人类“可以在珠穆朗玛峰顶用手机把自己的声音传遍全世界, 也可以在南极或北极和全球任何角落的任何人互通电话”. 这确实

是一项了不起的成就, 是现代通信的一个里程碑式的科技成果. 人们曾经期望, 人类通信将从此进入一个新时代. 可惜铱星系统是在运营只一年就宣告破产. 因为这种系统十分复杂: 建设周期长(约 8 年)、造价高(约 57 亿美元); 技术上又有弱点: 手机体积笨重(约 450g, 是一般 GSM 手机的 4. 5 倍), 使用不便, 也不能在室内使用; 而且价格和通信资费都很高(手机每部 3000 美元, 国际电话费平均每分钟约为 7 美元), 用途也十分有限, 除通话外, 只能传送简短的电子邮件或慢速传真. 有人说, 铱星系统叫好不叫座. 运营一年间, 用户只有一万多户, 入不敷出, 负债累累(据说高达 40 多亿美元), 无法到期偿还, 不得不于今年(2000 年)3 月 17 日宣告破产, 正在运行中的 66 颗低轨通信卫星将先后按地面指令堕毁. 这对 5w 通信计划的实施是一个重大打击.

但是科学技术总是不断进步的. 自 1895 年发明无线电以来的一百多年中, 科技工作者一直在寻求更新更好的传输无线电信号的途径. 电离层、对流层等自由空间传播是最早用于通信的媒介, 20 世纪 40 年代以后, 利用某种类型的人造平台作为接力站来增加信号传输距离和复盖领域, 在理论和实践上都证明是一种性能优越、行之有效的方法. 因而半个多世纪以来, 各种接力系统, 如地面蜂窝系统、卫星系统等陆续投入应用, 在通信领域开创了一个百花齐放的时代. 但是随着人们对通信要求的不断提高, 已有的各种通信系统都难以满足对通信日益增长的需要. 目前人们对 5w 通信的要求确实很高, 近乎苛刻: 既要性能好, 价格低、体积小, 又要随时、随地(包括高山、荒漠、海洋和极地等等) 都能应用. 这些要求在技术上铱星虽然基本上做到了. 但如今, 它却走了! 今后全球个人通信将走向何方? 这是今天我们应该认真研究的问题. 本文介绍的平流层定点平台通信系统将是解决这个问题的一种很好方案.

平流层信息平台可分重型和轻型两大类. 前一种是指作为平台的飞行器其比重大于空气, 需籍外力才能升空运行. 其实这就是飞机或直升机. 美国的间谍飞机, 如 SR-71、U-2 等属于这一类, 主要用来从事侦察、收集情报. 这种飞行器的运行高度约为 2～3 万米, 飞得高, 看得远, 也不易被击落. 近几年来美国 Angel 公司研制了一种名为 Halo 的飞机, 用于通信. 飞机在其通信复盖领域上空约 52～60 英里高度处, 作圆周飞行, 每一只 Halo 飞机工作 8 小时, 三只飞机轮流交替工作, 以保证 24 小时昼夜无间断通信.

轻于空气的平台, 如热气球或充氦飞艇可自行上升到几万米高空. 利用这种汽艇也可以从事科学探测或军事侦察等任务. 但汽艇随风飘流, 如果设法使其在平流层中的位置在较长时间内固定点悬停, 将是人们响往的较为理想的载荷工具. 远在无线电发明之后不久的 20 世纪初期, 德国人齐柏林就设计制成了世界上第一艘巨型的、充氢的飞艇进行实验, 可惜氢容易爆炸, 因而关于轻型飞艇的研究, 随着 1937 年兴登堡号飞艇的堕毁而告中断. 但是近百年来科学工作者仍然前赴后继、从未间断地进行有关的研究, 特别是基础学科的研究工作, 解决了很多有关理论和技术问题, 如能源、材料、大气物理和控制、信息技术等等, 终于使实现这种轻型平流层定点信息平台的理想又露出曙光, 呈现出良好的前景.

2 平流层定点平台通信及其特点

平流层是在对流层顶部至距地面约 50km 的大气层. 这里空气稀薄, 其密度约为海平面的百分之几, 浮力很小, 但气流比较稳定(通常主要风向是由东至西, 或由西至东), 且风切较小, 是比较理想的部署高空悬停飞艇的空域. 在技术上使飞艇成为高空定点平

台的关键是: 首先飞艇应自备用于平衡平流层风力的推进器以保持其位置的固定; 其次, 应自备供各种设备、特别是推进系统所需的能源系统, 使飞艇有较长寿命, 能在较长时间内正常运行, 当然还应有良好的测控系统, 使气艇能自动保持其位姿稳定, 并可以安全放飞及回收.

图 1　各类空中平台示意图

我们下面介绍的平流层定点平台通信系统是指用位于平流层空间、轻于空气的、准静止长驻空的飞艇作为平台, 装载一定的有效信息载荷, 配合各种地面通信设备和测控系统所构成的系统, 简记为 SCS(Stratospheric Communication System). 平流层平台所处的空间位于各种信息卫星(高度几百至 36000km)、高空特种飞机、系留气球(高度约几千米)和地面接力系统(天线高一般在 100m 以下)之间, 如图 1 所示. 这是地球上空一块尚未开垦的‘处女地”, 它的开发利用, 对未来通信的发展, 特别是 5w 个人通信的发展, 具有重要的意义.

20 世纪 90 年代以来, 发达国家积极开展平流层通信系统的研制工作. 表 1 是几种平流层平台的主要技术指标. 由于起始条件不同(例如 SSI 公司的飞艇高度为 23km, 其它公司的设计高度大都为 20～21km, 最大设计风速也有差异)、设计思想也不一样, 因而表 1 所列数据的可比性较差. 但总的说来, 这种平流层通信系统具有如下共同特点:

表 1　正在设计中的几种平流层平台的主要参数

	日本	美国 SSI	西欧 ESA	南韩	美国 Skysat
高度	20km	23km(21km)	21km	20. 6km	20km
艇长	245m	150m	220m	146m	50m× 4
最大直径	61m	50m	55m	47m	25m

需要全本请访问 www.ertongbook.com

续表

	日本	美国 SSI	西欧 ESA	南韩	美国 Skysat
外壳面积	3.66× 10^4m^2	2.22× 10^4m^2	3.0× 10^4m^2		
外形	流线型(半固定型)	流线型	流线型	流线型	长雪茄型
容积	4.8× 10^5m^3	1.7× 10^5m^3	3.2× 10^5m^3	1.32× 10^5m^3	
总重量 艇重 电源 马达、飞行控制 有效载荷	32.4 吨 17.0 吨 11.2 吨 3.2 吨 1.0 吨	10.4 吨 5.628 吨 3.91 吨 1.0 吨	20.8 吨 10.3 吨 1.0 吨	9.02 吨 4.68 吨 2.42 吨 0.94 吨 1.0 吨	自带燃料 3426 磅, 自重量 10530 磅
总功率	205kW	265kW	350kW	81.1kW	
频率	47～48GHz	47～48GHz		47～48GHz	
波束数		300		119	
寿命	3 年	5～10 年		5 年	3～6 个月
缩尺试验	2000 年 L = 50m, H = 10km, W = 200kg	2000 年 6～8 月 L = 110m, D = 20m, H = 17～18km		2001 年 H = 300m, 有效载荷 500kg	1998～1999 年试验 1999 年建造2 台
定型	2005 年 20 台 2008 年 100 台	2002 年 20～30 台 2005 年 50～60 台		2004 年完成实用试验模型 2005 年建立 25 台	2000～2008 年每年建造4 台

● 和通信卫星相比, 平流层平台与地面的距离是同步卫星的 1/ 1800, 自由空间衰减少 65dB, 延迟时间只有 0. 5ms, 有利于通信终端的小型化、宽带化和双工数据流的对称传输和互操作, 实现对称双工的无线接入.

● 与地面蜂窝系统相比, 平流层平台的作用距离远、覆盖地区大, 作为一个高空接力站时, 其作用距离可达 1000km, 比地面接力站约大 20 倍, 而且信道衰落(按 Rice 衰减)为 20dB/ 10 倍程, 只是地面系统(按 Rayleigh 衰减)衰减分贝数的 2/ 5, 因而发射功率也可显著减少.

● 平流层平台既适用于城市, 也可用于海洋、山区, 还可以迅速转移, 用于发生自然灾害地区(如洪水、山火)的监测和通信.

● 造价和通信资费低. 平流层的放飞、回收与日常监测和一般的民航系统相似, 不需复杂庞大的发射基地, 估计每一平台造价只为通信卫星的 1/ 10; 而且每个平台都可以独立运行, 不象低轨通信卫星那样需发射几十颗卫星组成星座之后才能工作, 建设周期短, 投资少. 一般用户端机价格也很低, 通信资费也不高于已有的公众电话.

● 平台可以回收, 不会像卫星那样失效后变成空间垃圾, 有利于环境保护. 此外, 平台高度在民航高度以上, 也不会对空中航行安全造成影响.

● 平台位于国境之内, 主权、使用权、管理权均属于本国, 有利于研制开发适用于本国的产品.

平台覆盖区及其应用

高空平台做为一个承载工具可以有各种

应用,如通信、广播、遥感或科学探测等等. 本文以通信为例介绍有关特点和问题.

平台通信业务的覆盖区域决定于覆盖区边缘至平台的仰角: 仰角越小, 覆盖区越大. 图 2 是覆盖区的示意. 美国 SSI 公司把平台视线所及的整个覆盖区分为市区(UAC)、近郊区(SAC)和远郊区(RAC), 各区边缘至平台的仰角分别为 $\theta=30^\circ$, 10 和 0°, 直径分别为 70, 150 和 560km; 每个覆盖区又分为 700 个蜂窝小区, 三个覆盖区共有 2100 个小区, 7 个小区可重复使用同一个频率, 因而频段再用率为 300. 按每赫兹 1 比特的调制效率计算, 在 47/48GHz 频段的 300MHz 频带中可提供 600 万个 64kb/s 数字用户, 或 150 万个码率为 256kb/s 的宽带用户, 或 18.75 万个码率为 2Mb/s 的 E1 用户.

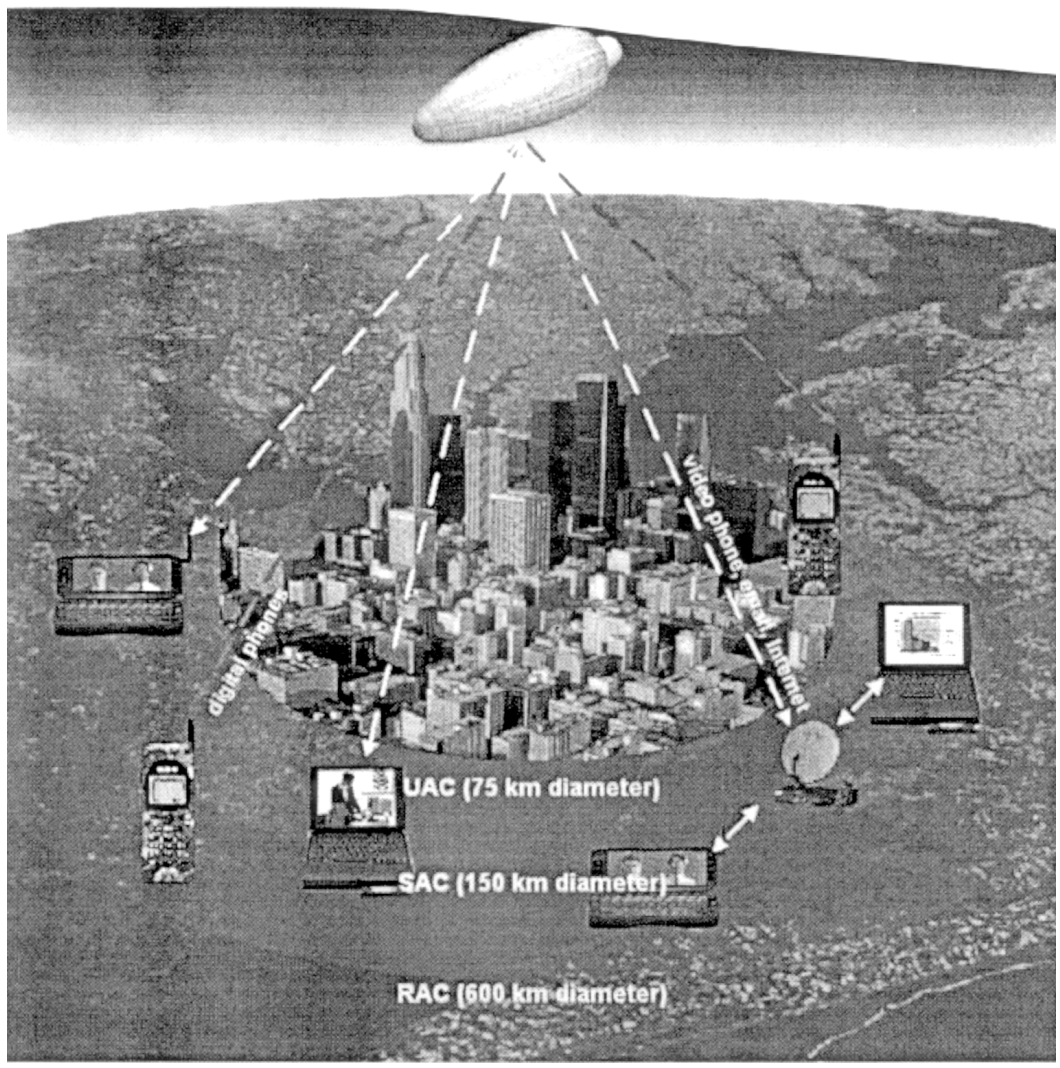

图 2 平流层通信系统覆盖区示意图

日本提出一种把平流层通信系统与其它地面宽带系统相结合的方案, 用 100～200 个平台构成一个覆盖日本全境的网格型网络, 每个平台覆盖面积为 40× 40km^2, (划分为 64 个直径 5km 的蜂窝); 相邻的平台用光通道相连, 网络容量极大, 鲁棒性也好, 因为从信源至任何终端都可以有很多路由可供选择. 这种网络的用途也很广, 采用 30GHz 频段时, 可以适用于 144kbps 的移动终端、32Mbps 的便携式终端, 或高于 622Mbps 的固定终端. 他们认为: 这种方案还可以通过无线接入, 直接把双向宽带信息送达各种用户终端, 解决“最后一公里”的问题, 其价格远低于“光纤到户”(FTTH), 是一种具有极高竞争力的建设信息基础设施的新型通信体系.

1997 年 ITU 通过把 48GHz 频段分配给平流层平台固定业务使用. 这个频段的特点是波长短, 天线尺寸小, 但雨雪衰减大. 目前美日有关机构都在努力争取 ITU 2000 年会议能安排其它频段, 如 2, 10, 20, 30GHz 等供

平台系统使用,并争取和第三代移动通信系统兼容,构成和地面蜂窝相互配合的通信网.把平台悬挂在山区、荒漠或海洋上空,就可以扩大系统的复盖区域,逐步形成全球移动通信网.

3 基础研究与平流层通信

现在谈谈平流层通信的一些问题及有关的基础研究.

如上近述,和其它无线通信系统相比,平流层通信具有很突出的优点.这是通信领域极有前途的新生事物,其可行性已经得到充分论证,利用现有的技术、材料和部件来建造满足定点悬空要求的飞艇,困难不大.当前的主要问题是:平台寿命还不够长,结构还过于笨重,定点精度不够高,能承载的有效信息载荷重量也较小,等等.总之,其性能还有待改进.这是任何新生事物在其发展初期共有的问题.

平流层定点平台是一个巨型的复杂系统,是众多学科结合的产物,涉及大气物理、稀薄空气动力学、推进器、能源、材料以及自动测控等方面的问题.要使平流层通信系统的性能进一步提高,深入研究有关的基本问题,特别是基本理论和关键技术问题是十分必要的.下面对有关问题择要加以讨论.

3.1 推进器

推进器是用来产生推力使飞艇在平流层风力作用下保持位置稳定的关键设备.目前各国设计的飞艇大都采用螺旋桨推进器.由于平流层空气稀薄,这种推进器的效率很低.为了产生足够的推力,电源供给系统的容量和重量,以及飞艇的容积都必须足够大.以日本的设计为例,用于高度 20km、风速 30m/s 的飞艇总重量达 32 吨,长 245m,比两个足球场还要长.这可能和日本的设计思想比较保守有关,但推进器效率低,需要容量很大的电源供给系统也有极大关系.因此探索新型的推进系统,特别是适用于稀薄气体的推进器是研制平流层通信平台应该考虑的首要问题.美国 SSI 公司 1997 推出的平流层飞艇计划时曾宣布 将采用一种新型的推进器—电晕离子推进器.这是美国洛杉矶加州大学华裔学者 A. Wong 的发明,A. Wong 教授是研究大气臭氧层的物理学家.他提出采用电晕放电来产生离子,把它和平流层中大量存在的等离子体相互作用,产生推力,制成推进器.据 SSI 声称,这种离子推进器的效率高达 10mN/W,比航天器与卫星所用的氙离子推进器的效率 0.04mN/W 高两个数量级;更重要的是:适用于空气稀薄的平流层飞艇,又没有转动的机械部件,重量轻,寿命长,而且没有污染.这种推进器的提出,得到各方面的重视,从原理上说是可行的,在实验室也证明它具有较高的效率,可惜目前技术上还有不少问题,近期还难以付诸应用.SSI 公司于 1998 年不得不正式宣布暂时放弃采用这种推进器.但这是一个值得研究的课题,在各种航天器中也可能有广泛应用的前景.

3.2 能源供应系统

这是平台的“心脏”,是决定平台能否在中长时间定点悬停的决定性因素.采用一般燃料提供动力不是理想的方法,因为气艇所能携带的燃料十分有限,平台在空中停留的时间不可能太长.美国 Skysat 公司计划采用这种方法,由飞艇携带 3,400 磅燃油.据估计在平流层风速很低($\leq$10m/s)条件下,飞艇只能在空中停留两三个月.为了保证不间断通信的要求,Skysat 公司提出由两个平台轮流工作.显然这不是一种很好的办法.利用微波向气艇传输能量的方法也已有人做过试验,但所能传送的能量较少,价格昂贵,对环境,特别是民航安全也有严重影响.目前各国设计的飞艇大都采用太阳能电池来提供所需的动力.由于气艇表面积很大,利用铺设在气艇表面的 a 硅太阳能电池来产生几百千瓦的功率很容易做到,价格也较便宜.但是目前 a

硅太阳能电池的效率较低,而且随时间而衰减较快.这是一个必须研究的课题.最近有消息说,以色列科学家经过多年的努力,已经把这个问题解决了.他们采用一种特殊合金制成的太阳能电池,效率很高,而且寿命很长.看来,只要认真开展有关的基础研究,这个问题也是可以解决的.

如何在晚间提供能量是平流层平台的另一个突出的问题.平流层平台和同步卫星不同,后者几乎每天 24 小时都能接受太阳光的照射,而前者一般不多于 10 小时,其它 14 小时不见阳光,太阳能电池无法工作.因而晚间供电是决定飞艇能否昼夜 24 小时连续不间断工作的关键.解决这个问题的一种方案是利用蓄能装置,把太阳能电池白天产生的电能存储起来,供晚间之用.目前可供采用是锂离子电池,其能量密度为 100～200Wh/kg.较理想的畜能机构是再生式燃料电池.这是一种洁净的能源,用途极广.科技界对此已做了多年研究工作,欧美各国已建立了数以百计的功率达几百千瓦的试验电站,但体积和重量都很庞大,价格也很昂贵.如何提高燃料电池的能量密度是今后努力的方向.日本计划于 2003 年把再生型燃料电池的能量密度提高到 500Wh/kg, 2008 年再提高到 690Wh/kg,这样可以把能源供给系统的重量减少 2 吨左右,即由 10.4 吨减至 8.9 吨.为此需要做很多基础性的研究工作,例如质子交换膜的研究工作等.

3.3 材料问题

平流层通信平台的主体是庞大的充氦飞艇,其表面积约为几万平方米.为了降低飞艇自身重量,并延长其寿命,用于构成飞艇囊体的材料必须重量轻、强度高、抗老化性能好,同时还应有较强的抗高能辐射和臭氧腐蚀的能力.据初步估算,飞艇囊体材料的主要性能应达到下列要求:单位面积重量小于$180g/m^2$,拉伸断裂强度大于 400N/cm,氦漏率小于$0.5L/m^2 \cdot DA$.当前已有的各种单一材料都难以满足这些要求,通常都采用以高分子材料为主的多层复合结构.这种多层结构一般分为承力层、阻气层、热封层、防老化层,以及用于粘合功能材料的中间层等.制备这种复合材料的加工工艺也是重要的研究课题.

3.4 平流层大气环境

顾名思义,平流层通信平台位于平流层之中,平台位置姿态的稳定性及其寿命的长短直接受平流层大气环境的影响,因而对平流层大气环境的研究十分重要.

对飞艇位姿稳定性影响最大的因素是平流层的风场.总的说来,平流层的气流相当平稳,但也不是固定不变.统计数据表明,平流层的风场随季节、昼夜和地域的不同而有所变化.一般而言,北半球地区夏季为偏东风环流、冬季为偏西风环流;低纬度地区的环流风速较低,一般在 10～20m/s 之间,高纬度地区的风速较高;此外,在高度为 20～25km 处有一弱风区,如果在这里部署通信平台,则用于保持平台位置所需的功率最小.可惜这里的大气浮力较小,因而目前设计的平台高度大都在 20km 左右.

上述资料只是一些主要的统计平均数据.在实际应用中,掌握风场完整的统计特性、特别是风速的极值及其持续时间是十分重要的.据某些气象资料介绍,我国北方地区平流层最高风速有时可达 50～70m/s,持续时间也较长.在飞艇设计时这样的情况不能不予以考虑.

欧美等发达国家对平流层大气环境的研究十分重视,它们通过国际合作,利用复盖全球的中间层—平流层—对流层的雷达网,取得了大量有关大气环境的测量数据,还建立了相应的电波传播参数预测模型,对开展平流层通信系统的研究,十分有用.我国在这方面的研究工作还相当落后.这是十分重要的基础研究工作,必须充分重视. (完)

吴佑寿 清华大学教授, 1995 年当选为中国工程院院士. 1948 年毕业于清华大学. 曾任清华大学无线电系系主任、研究生院院长, 以及国务院学位委员会电子学与通信评议组召集人和国家教委科学技术委员会常务副主任等职. 我国数字通信开拓者之一, 长期从事数字通信、数字信号处理与模式识别的研究工作. 曾获 1978 年全国科学大会奖、国家科学进步奖二等奖等数项. 著有《高频电路》、《汉字识别》等专著. 被选为中国通信学会副理事长, 中国神经网络委员会主席, 亚太神经网络协会 1995～96 年度主席.

(上接第 15 页)

系在各种条件下的运动方程.

在热力学体系中, 存在着多少种约束不同的组合, 就有着多少种不同形式的热力势, 也就有着多少种不同形式的 Lagrange 函数.

参 考 文 献

[1] M. Planck, S. B. Preuss. Akak, Wiss(1907) 542.

[2] W. 泡利. 相对论. 上海科学出版社, 1979. 183.

[3] 爱因斯坦文集 第二卷, 商务印书馆, 1979. 190.

[4] R. K. Pathria. Statistical Mechanics. Pergamon Press, 1972. 155.

[5] 张有生. 温度的相对论变换. 工科物理, 1999, 9, (4).

张有生 男, 湖北省武汉市人. 1949 年 11 月生, 1966 年湖北省实验中学高中毕业. 先后当过知识青年、工人; 1978 年 3 月录取到华中工学院应用物理专业学习, 1982 年 1 月至今在华中理工大学汉口分校任教; 1985 年 9 月至 1987 年 1 月在南京大学物理系进修硕士课程, 1993 年 6 月晋升副教授. 现任华中理工大学汉口分校基础课部主任. 讲授过大学物理、物理实验、近代物理、传热学、流体力学等 9 门课程. 1993 年和 1997 年两次获湖北省优秀教学成果三等奖, 1998 年获武汉市教育科研成果一等奖; 曾在物理实验、静电、工科物理等刊物、学报和全国性学术会议上发表论文 10 余篇. 主要从事热力学、电磁场、相对论和非线性物理的理论研究.

欢迎选购《工程中的物理学》专辑(1)

本刊搜集并整理了《工科物理》杂志近年来发表的有关阐述物理学原理在工程技术中应用的文章, 将其编辑成《工程中的物理学》专辑(1), 并已于 2000 年 7 月正式出版, 希望它能够对您的教学有所助益.

欢迎从事各类物理教学的教师和读者踊跃选购《工程中的物理学》专辑(1), 也欢迎您多为本刊撰写此类好文章。

联系地址: 清华大学出版社《物理与工程》编辑部 联系人: 郝桂冲

邮编: 100084 电话(010) 62789753



专 论

原子围栏中金属表面电子的态函数及能级

周佩瑶 王 莱 陈宜生

(天津大学理学院, 天津 300072)

(收稿日期: 1999-09-15; 修回日期: 2000-03-20)

摘 要 本文用薛定谔方程求解被束缚在原子围栏中金属表面电子的态函数及能级, 同时用计算机绘制出围栏中电子概率分布图.

关键词 薛定谔方程; 原子围栏; 电子概率波; 态函数

THE EIGENSTATE AND THE EIGENENERGIES OF SURFACE STATE ELECTRONS ON THE CLOSE-PACKED FACES OF THE NOBLE METALS

Zhou Peiyao Wang Lai Chen Yisheng

(School of Science, Tianjin University 300072)

Abstract A quantitative understanding of the local density of electron states (LDOS) inside the quantum corrals at different energies was obtained by solving Schrodinger wave equation. A theoretical picture of surface LDOS was plotted by computer.

Key Words Schrodinger wave equation; quantum corrals; probability wave, eigenstate function

当今人类已经进入了在原子、分子水平上制造材料和器件的时代. 图 1 中所示的是用扫描隧道显微镜的探针将 48 个铁(Fe)原子排列在铜[Cu(111)]的表面上, 形成一个半径为 7.13nm 的圆形原子围栏中的局域电子态密度图[1], 其实这是一幅电子概率驻波图.

下面对处于该围栏内的电子, 建立定态薛定谔方程(考虑单电子体系)并求其态函数(即概率波幅)及能级.

1 原子围栏中的金属表面电子的概率波幅和能级

对于处在铁原子围栏内的电子而言, 这围栏便成了一个横向的势垒, 它们被束缚在一个圆形的势阱中, 由于电子的能量远小于势垒的高度, 因此假设围栏是一“硬壁”. 势能函数可近似表为

需要全本请访问 www.ertongbook.com

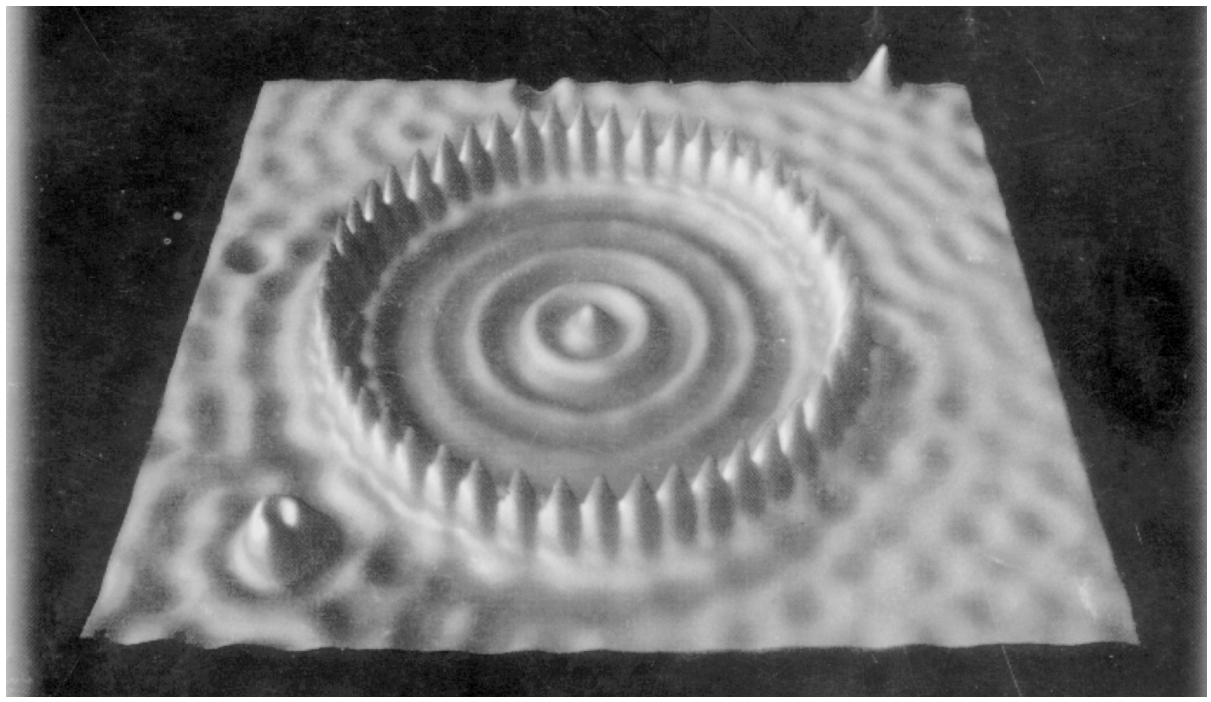

图 1 48 个铁原子在铜板上排列而成的原子围栏

$$U(r)=\begin{cases}0 & 0\le r<R\\ \infty & r\ge R\end{cases} \qquad (1)$$

式中 R 是原子围栏的半径.

设 $\Psi(r,\phi)$ 是描述电子状态的概率波幅(即态函数),其定态薛定谔方程为

$$H\Psi(r,\phi)=E\Psi(r,\phi) \qquad (2)$$

用分离变量法解上方程,设

$$\Psi(r,\phi)=\psi(r)\,\Phi(\phi) \qquad (3)$$

哈密顿算符

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+U(r) \qquad (4)$$

拉普拉斯算符在平面极坐标中的表示形式是

$$\nabla^2=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \qquad (5)$$

将式(1),(3),(4),(5)式代入定态薛定谔方程(2)式中,经整理,得

$$\frac{r\frac{d}{dr}\left[r\frac{d\psi(r)}{dr}\right]}{\psi(r)}+\frac{2\mu E}{\hbar^2}r^2=-\frac{\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}}{\Phi(\phi)} \qquad (6)$$

上方程的左边只和变量 r 有关,而右边只和变量 ϕ 有关,因为 r 和 ϕ 是二个独立的变量,所以要使等式(6)成立,则等式两边必需都等于同一个常数.以 λ 表示这个常数,于是方程(6)分离为两个方程:一个是 $\psi(r)$ 所满足的方程

$$r\frac{d}{dr}\left[r\frac{d\psi(r)}{dr}\right]+\frac{2\mu E}{\hbar^2}r^2\psi(r)=\lambda\psi(r) \qquad (7)$$

另一个是 $\Phi(\phi)$ 所满足的方程

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}+\lambda\Phi(\phi)=0 \qquad (8)$$

方程(8)的解是

$$\Phi(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi},\quad m=0,\pm1,\pm2\cdots \qquad (9)$$

式中 $\lambda=m^2$,$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ 是 $\Phi(\phi)$ 的归一化系数.将 $\lambda=m^2$ 代入方程(7)中,并令

$$\alpha^2=2\mu E/\hbar^2 \qquad (10)$$

经整理,得

$$\frac{d^2\psi(r)}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d\psi(r)}{dr}+\left(\alpha^2-\frac{m^2}{r^2}\right)\psi(r)=0 \qquad (11)$$

令 $x=\alpha r$ 代入上方程中,得

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{d\psi(x)}{dx}+\left(1-\frac{m^2}{r^2}\right)\psi(r)=0 \qquad (12)$$

上式是 m 阶贝塞尔方程,其解是:

$$\psi(x)=A_1J_m(x)+A_2N_m(x)$$

式中的 $J_m(x)$ 是 m 阶贝塞尔函数,$N_m(x)$ 是诺埃曼函数.因 $r\to0$ 时,$N_m(0)\to\infty$ 不符合概率波幅有限条件,故,上式中的 $A_2=0$.在图 1 中,围栏中心处是波幅,根据贝塞尔函数的性质

$$J_m(0) = \begin{cases} 1, & m = 0 \\ 0, & m \neq 0 \end{cases}$$

可见,要使围栏中心处出现波幅,量子数 m 必需为零,即 m= 0. 于是,电子的概率波幅的径向函数是

$$\psi(r) = A_1 J_0(\alpha)$$

式中 $J_0(\alpha)$是零阶贝塞尔函数. 又由于 $\psi(R) = 0$, 所以要求 $J_0(\alpha R) = 0$, 设

$$\alpha R = x_k^{(0)} \qquad (13)$$

$x_k^{(0)}$是零阶贝塞尔函数的第 k 个根,由式(13)得

$$\alpha = x_k^{(0)}/R \qquad (14)$$

于是求得,电子概率波幅(即态函数)为

$$\Psi(r, \phi) = BJ_0[(x_k^{(0)}/R)r] \qquad (15)$$

式中 B 是归一化系数. 从上式可以看出原子围栏内电子的概率波幅分布与 φ的变化无关,即对于 z 轴,分布具有旋转对称性. 联立式(10)、(14),得电子的能量为

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{x_k^{(0)}}{R}\right]^2 \qquad (16)$$

2 电子的概率分布图

我们将式(15)给出的结果输入计算机,用 Mathcad7. 0 软件绘制出原子围栏内电子概率$|\Psi(r, \phi)|^2$分布图,即在围栏内形成的电子驻波图.

图 2 与图 1 非常相似,只不过是在图 2 中没有考虑透射波. 因为,在上面讨论中,原子围栏(势垒)的高度按无限高处理,因此,电子概率波幅在围栏外无定义.

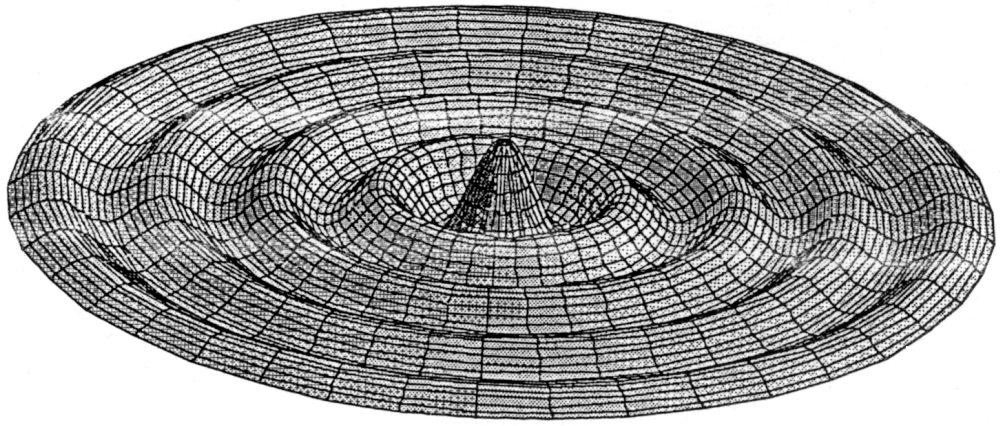

图 2 电子概率驻波图

若改变扫描隧道显微镜的探针与围栏中心处金属表面的电压,当其达某些特定值时,围栏中心处的波幅可变为波节. 在文献[1]中报导了 60 个铁原子在铜板表面排列成半径为 8. 87nm 量子围栏,当探针与围栏中心处金属表面的电压为 V= - 10mV,电流为 I= 1nA 时,围栏中心处形成波腹;改变电压,使其达到 V= 10mV,电流为 I= 1nA 时,围栏中心处变为波节. 实际上,图 1,图 2 所示的是角动量等于零(l= 0)的解,对于非零角动量(m≠0)的解,中心处是节点.

参 考 文 献

[1] M. F. Crommie et al.. /Physica D 83(1995): 98～108.

[2] 思索 编著. Mathcad7. 0 实用教程. 北京:人民邮电出版社. 1998.

[3] 周世勋 编. 量子力学教程. 北京:人民教育出版社. 1979.

[4] 工科物理杂志. 1997, (4)封面.

热力学的拉格朗日函数

张有生

(华中理工大学汉口分校, 武汉 430012)

(收稿日期: 2000-01-04)

摘 要 Planck 和 Pauli 提出了相对论热力学 Lagrange 函数的一种形式. 本文表明: 在不同的约束条件下, Lagrange 函数的形式是不同的, 它可以分别是内能、焓、Helmholtz 自由能、Gibbs 函数、巨势等的负值; 文中对该函数的相对论变换性质也进行了讨论.

关键词 相对论; 热力势; Lagrange 函数; Maxwell 关系; Legendre 变换

LAGRANGIAN FUNCTION IN RELATIVISTIC THERMODYNAMICS

Zhang Yousheng

(Hankou Branch, Huazhong University of Science and Technology)

Abstract Planck and Pauli proposed a form of thermal Lagrangian function. This article shows: under the different constraint conditions, the forms of the thermal Lagrangian function are different. It can be the negatives of internal energy, enthalpy, Helmholtz free energy, Gibbs function, grand potential and the other thermal potentials respectively; the relativistic transformation properties of the function are also discussed.

Key Words relativity; thermodynamics; potential function; Lagrangian function; Maxwell relations; Legendre transformation

1 引 言

Planck 将最小作用原理应用于相对论热力学, 得到了热力学 Lagrange 函数[1]. Pauli 也得到了相同的结果: $L = -E + u.G + TS$, 他指出: 在随体系一起运动的坐标系中, Lagrange 函数就是负的 Helmholtz 自由能[2].

本文准确定义了相对论的热力势, 得出它们同长度和温度一样是 Lorentz 收缩的; 根据约束条件恰当选取独立的态参量, 对协变的热力学基本方程进行共轭 Legendre 变换, 得到不同形式的 Lagrange 函数, 分别是内能 U、焓 H、Helmholtz 自由能 F、Gibbs 函

数 G、巨势 J 等的负值. 这对于相对论热力学理论有重要的价值.

2 相对论热力学的态参量

处于平衡态的热力学体系相对 K_0 参照系静止, 相对 K 参照系以速度 u 作匀速运动. 在 K_0 系中体系的宏观态参量为固有值, 其宏观动量 $G_0 = 0$.

体系的粒子数 N、熵 S 和压强 P 是 Lorentz 不变量. 体积 V 是 Lorentz 收缩的, 即

$$N = N_0, \quad S = S_0, \quad P = P_0 \tag{2-1}$$

$$V = \gamma^{-1} V_0, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \tag{2-2}$$

首先讨论两类不同的体系:

(1) 封闭的体系, 其动量和能量构成四维矢量$(G, i\frac{E}{c})$, 相对论变换式为

$$G = \gamma u \frac{E_0}{c^2} \tag{2-3}$$

$$E = \gamma E_0 \tag{2-4}$$

(2) 受到同方向无关且处处垂直于表面的外压强 P_0 作用的体系, Einstein 得出[3]

$$G = \gamma u \frac{E_0 + P_0 V_0}{c^2} \tag{2-5}$$

$$E = \gamma\left(E_0 + \frac{u^2}{c^2} P_0 V_0\right) \tag{2-6}$$

利用(2-1)和(2-2)式还得到

$$(E + PV) = \gamma(E_0 + P_0 V_0) \tag{2-7}$$

比较(2-3)和(2-5)、(2-4)和(2-7)可以看出, 受到均匀外压强作用的体系(E + PV)和封闭体系的 E 是相对应的. 因此 Pathria 说: 在受均匀外压强作用的体系中,“不是体系的动量 G 和能量 E, 而是动量 G 和焓(E + PV), 象四维矢量的分量一样变换”[4].

上述两类体系有一个相同的变换关系

$$E_0 = \gamma(E - u \cdot G) \tag{2-8}$$

从该式出发, 可以导出温度是 Lorentz 收缩的[5]

$$T = \gamma^{-1} T_0 \tag{2-9}$$

3 相对论的热力势

在 K_0 系中, 体系是静止的, 宏观动量 $G_0 = 0$, E_0 就是它的内能

$$U_0 = E_0 \tag{3-1}$$

在 K 系中, 体系以匀速 u 运动, 具有宏观动量 G, (u · G) 是宏观有序运动的能量. 从总能量 E 中减去有序运动的能量, 才是微观无序运动的内能. 因此相对论内能的定义是

$$U = E - u \cdot G \tag{3-2}$$

由(2-8)式, 内能是 Lorentz 收缩的

$$U = \gamma^{-1} U_0 \tag{3-3}$$

仿照经典热力学, 根据(3-2)式, 可以定义其它约束条件下的热力学势函数, 它们依次是焓 H、Helmholtz 自由能 F、Gibbs 函数 G 和巨势 J:

$$H = U + PV = E - u \cdot G + PV \tag{3-4}$$

$$F = U - TS = E - u \cdot G - TS \tag{3-5}$$

$$G = F + PV = E - u \cdot G - TS + PV \tag{3-6}$$

$$J = F - G = -PV = E - u \cdot G - TS - \mu N \tag{3-7}$$

其中, 化学势

$$\mu = \frac{G}{N} \tag{3-8}$$

根据 N、S、P 是 Lorentz 不变量, V、T、U 是 Lorentz 收缩量, 立即得到这些热力势和化学势都是 Lorentz 收缩的, 即

$$H = \gamma^{-1} H_0 \tag{3-9}$$

$$F = \gamma^{-1} F_0 \tag{3-10}$$

$$G = \gamma^{-1} G_0 \tag{3-11}$$

$$J = \gamma^{-1} J_0 \tag{3-12}$$

$$\mu = \gamma^{-1} \mu \tag{3-13}$$

其实 Pathria 将(E + PV)称为“焓”是不对的. $(E_0 + P_0 V_0) = (U_0 + P_0 V_0)$ 是焓, 然而

$(E+PV)=(U+u\cdot G+PV)$包含了有序运动的能量$(u\cdot G)$,并不是焓;正如同E_0是内能,而$E=U+u\cdot G$并不是内能.$(E+PV)$是 Lorentz 膨胀的,而$(U+PV)$是 Lorentz 收缩的.

4 热力学 Lagrange 函数

相对论热力学的基本方程为

$$dE-u\cdot dG=TdS-PdV+\mu dN \tag{4-1}$$

分别作态参量的共轭 Legendre 变换

$$u\cdot dG=d(u\cdot G)-G\cdot du \tag{4-2}$$

$$PdV=d(PV)-VdP \tag{4-3}$$

$$TdS=d(TS)-SdT \tag{4-4}$$

$$\mu dN=d(\mu N)-Nd\mu \tag{4-5}$$

考虑到速度

$$u=(u_x,u_y,u_z)=\frac{d}{dt}(x,y,z)=X_j \quad (j=1,2,3)$$

和动量定理

$$\frac{d}{dt}G=\frac{d}{dt}(G_x,G_y,G_z)=\frac{d}{dt}G_j=K_j$$

其中K_j是外力的第 j 个分量,可以得到 Lagrange 函数常见的五种形式.

第一种形式:将(4-2)代入(4-1)式,有

$$d(-E+u\cdot G)=G_jdX_j-TdS+PdV-\mu dN$$

令$L=-E+u\cdot G=-U$,则

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{L}{X_j}\right)=\frac{d}{dt}G_j=K_j \quad (j=1,2,3)$$

$$\left(\frac{L}{S}\right)_{V,N}=-T,\ \left(\frac{L}{V}\right)_{S,N}=P,$$

$$\left(\frac{L}{N}\right)_{S,V}=-\mu \tag{4-6}$$

第二种形式:将(4-2)和(4-3)代入(4-1),有

$$d(-E+u\cdot G-PV)=G_jdX_j-TdS-VdP-\mu dN$$

令$L=-E+u\cdot G-PV=-H$,则

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{L}{X_j}\right)=\frac{d}{dt}G_j=K_j \quad (j=1,2,3)$$

$$\left(\frac{L}{S}\right)_{P,N}=-T,\ \left(\frac{L}{P}\right)_{S,N}=-V,$$

$$\left(\frac{L}{N}\right)_{S,P}=-\mu \tag{4-7}$$

第三种形式:将(4-2)和(4-4)代入(4-1),有

$$d(-E+u\cdot G+TS)=G_jdX_j+SdT+PdV-\mu dN$$

令$L=-E+u\cdot G+TS=-F$,则

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{L}{X_j}\right)=\frac{d}{dt}G_j=K_j \quad (j=1,2,3)$$

$$\left(\frac{L}{T}\right)_{V,N}=S,\ \left(\frac{L}{P}\right)_{T,N}=P,$$

$$\left(\frac{L}{N}\right)_{T,V}=-\mu \tag{4-8}$$

第四种形式:将(4-2)、(4-3)和(4-4)都代入(4-1),有

$$d(-E+u\cdot G+TS-PV)=G_jdX_j+SdT-VdP-\mu dN$$

令$L=-E+u\cdot G+TS-PV=-G$,则

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{L}{X_j}\right)=\frac{d}{dt}G_j=K_j \quad (j=1,2,3)$$

$$\left(\frac{L}{T}\right)_{P,N}=S,\ \left(\frac{L}{P}\right)_{T,N}=-V,$$

$$\left(\frac{L}{N}\right)_{S,P}=-\mu \tag{4-9}$$

第五种形式,将(4-2)、(4-4)和(4-5)代入(4-1),有

$$d(-E+u\cdot G+TS+\mu N)=G_jdX_j+SdT+PdV+Nd\mu$$

令$L=-E+u\cdot G+TS+\mu N=-J$,则

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{L}{X_j}\right)=\frac{d}{dt}G_j=K_j \quad (j=1,2,3)$$

$$\left(\frac{L}{T}\right)_{V,\mu}=S,\ \left(\frac{L}{V}\right)_{T,\mu}=P,$$

$$\left(\frac{L}{\mu}\right)_{T,V}=N \tag{4-10}$$

综上所述,热力学 Lagrange 函数至少可以有五种形式,它们分别是

$$L=-U,\ L=-H,\ L=-F,$$

$$L = -G,\quad L = -J \qquad (4\text{-}11)$$

Planck 和 Pauli 提出的仅仅是第三种形式 $L = -E + u\cdot G + TS$, Pauli 指出: 在静止系统 K_0 中, L 与(负的)自由能等同, $L_0 = -E_0 + T_0S_0$".

5 讨论

(1) Lagrange 函数的约束条件

基本的热力学变量是三对共轭的态参量: P、V; T、S; μ、N. 根据约束条件不同, 必须恰当选取独立变量. 就某种具体条件而言, Lagrange 函数只能取特定的形式.

当 S、V、N 为独立变量时,

$$L = L(S、V、N) = -U(S、V、N) \qquad (5\text{-}1)$$

当 S、P、N 为独立变量时,

$$L = L(S、P、N) = -H(S、P、N) \qquad (5\text{-}2)$$

当 T、V、N 为独立变量时,

$$L = L(T、V、N) = -F(T、V、N) \qquad (5\text{-}3)$$

当 T、P、N 为独立变量时,

$$L = L(T、P、N) = -G(T、P、N) \qquad (5\text{-}4)$$

当 T、V、μ为独立变量时,

$$L = L(T、V、\mu) = -J(T、V、\mu) \qquad (5\text{-}5)$$

(2) 导出 Maxwell 关系式

由(4-6)到(4-9), N 不变时, 可以得到

$$\left(\frac{U}{S}\right)_V = T,\quad \left(\frac{U}{V}\right)_S = -P \qquad (5\text{-}6)$$

$$\left(\frac{H}{S}\right)_P = T,\quad \left(\frac{H}{P}\right)_S = V \qquad (5\text{-}7)$$

$$\left(\frac{F}{T}\right)_V = -S,\quad \left(\frac{F}{V}\right)_T = -P \qquad (5\text{-}8)$$

$$\left(\frac{G}{T}\right)_P = -S,\quad \left(\frac{G}{P}\right)_T = V \qquad (5\text{-}9)$$

由它们立即得到 Maxwell 关系式

$$\left(\frac{T}{V}\right)_S = -\left(\frac{P}{S}\right)_V \qquad (5\text{-}10)$$

$$\left(\frac{T}{V}\right)_S = -\left(\frac{V}{S}\right)_P \qquad (5\text{-}11)$$

$$\left(\frac{P}{T}\right)_V = -\left(\frac{S}{V}\right)_T \qquad (5\text{-}12)$$

$$\left(\frac{S}{P}\right)_T = -\left(\frac{V}{T}\right)_P \qquad (5\text{-}13)$$

(3) 外力与热力势的关系

当 S、V、N 不变时, $K_j = -\frac{d}{dt}\left(\frac{U}{X_j}\right)$ (5-14)

当 S、P、N 不变时, $K_j = -\frac{d}{dt}\left(\frac{H}{X_j}\right)$ (5-15)

当 T、V、N 不变时, $K_j = -\frac{d}{dt}\left(\frac{F}{X_j}\right)$ (5-16)

当 T、P、N 不变时, $K_j = -\frac{d}{dt}\left(\frac{G}{X_j}\right)$ (5-17)

当 T、V、μ不变时, $K_j = -\frac{d}{dt}\left(\frac{J}{X_j}\right)$ (5-18)

在本文的讨论中, 由于速度 u 即 X_j 是常数量, 所以宏观外力 K_j 都为零.

(4) 化学势与热力势的关系

$$\mu = \left(\frac{U}{N}\right)_{S、V},\quad \mu = \left(\frac{H}{N}\right)_{S、P}$$

$$\mu = \left(\frac{F}{N}\right)_{T、V},\quad \mu = \left(\frac{G}{N}\right)_{T、P} \qquad (5\text{-}19)$$

6 Lagrange 函数性质

由(5-1)到(5-5)式, 以及(3-1)和(3-9)至(3-12)式, 得到 Lagrange 函数的相对论变换性质是 Lorentz 收缩的.

$$L = \gamma^{-1}L_0 \qquad (6\text{-}1)$$

根据时钟膨胀效应

$$t = \gamma t_0$$

由 Lagrange 函数对时间的作用量积分

$$I = \int L\,dt$$

是 Lorentz 不变量, 这符合相对论的一般要求. 运用最小作用量原量, 可以得到热力学体

(下转第 8 页)

需要全本请访问 www.ertongbook.com