



第 17 章

量子力学基础

(fundament of quantun mechanics)

- 实物粒子的波粒二象性
- 波函数
- 薛定谔方程



量子力学是描述微观实物粒子运动规律的一门基础理论。

量子力学的建立，揭示了微观世界的基本规律，是人类认识自然界史上的一次飞跃。它和相对论一起已成为近代物理学的两块基石，而且还被广泛地应用到化学、生物、医学、电子学等学科中。

1900年普朗克提出了量子概念，而真正拉开量子论大幕一角的是德布罗意.....



§ 17.1 实物粒子的波粒二象性



德布罗意

一. 德布罗意物质波假设 (1924年)

一切实物粒子也具有波粒二象性。

(实物粒子—静质量 $m_0 \neq 0$ 的粒子)

能量为 E 、动量为 p 的粒子与频率为 ν 、波长为 λ 的波相联系，并遵从以下关系：

$$E = mc^2 = h\nu$$

$$p = m\nu = \frac{h}{\lambda}$$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

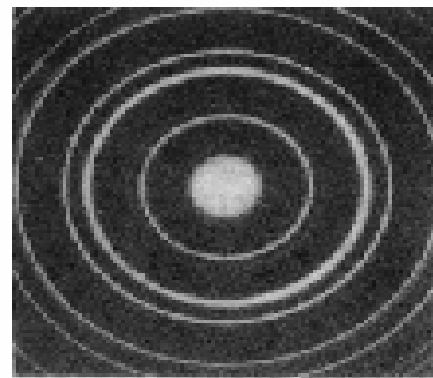
这种与实物粒子相联系的波称为德布罗意波(物质波或概率波)。

其波长 λ 称为德布罗意波长。

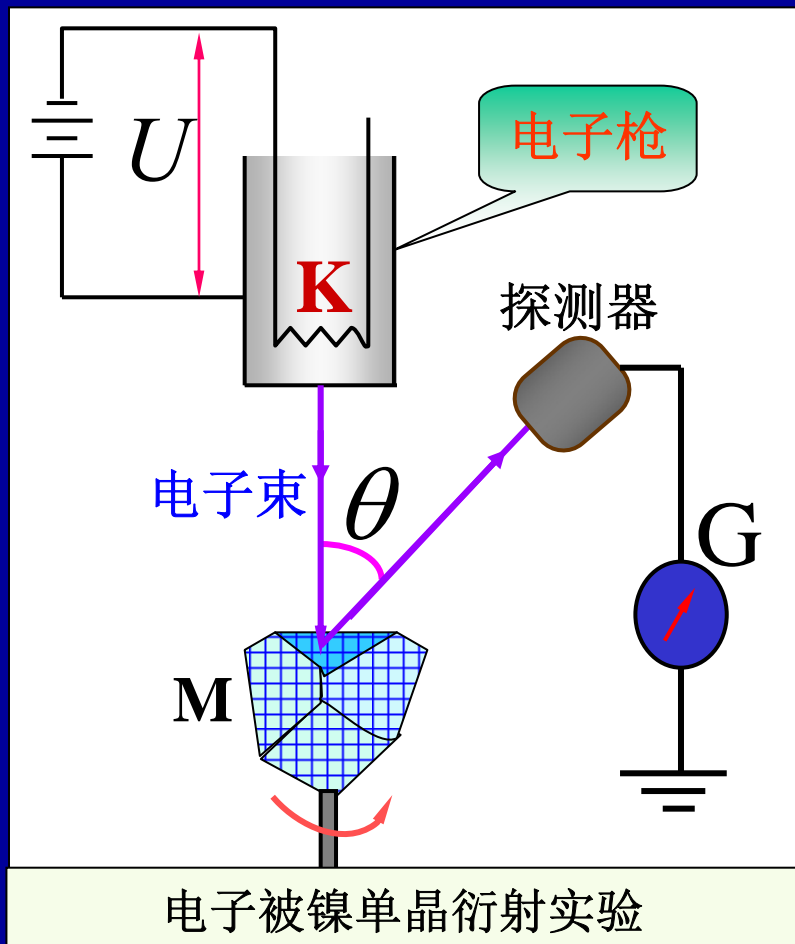


二. 德布罗意波的实验验证

汤姆孙：多晶薄膜电子衍射实验
(汤姆逊1927) G.P.Thomson



衍射图象



戴维孙-革末 — 单晶电子衍射实验：用电子束垂直投射到镍单晶，电子束被散射。

其强度分布可用德布罗意关系和衍射理论解释，从而验证了物质波的存在。



当电压为54V, $\theta=50^\circ$ 电子流最强。

$$eU = \frac{p^2}{2m}, p = \sqrt{2meU}$$

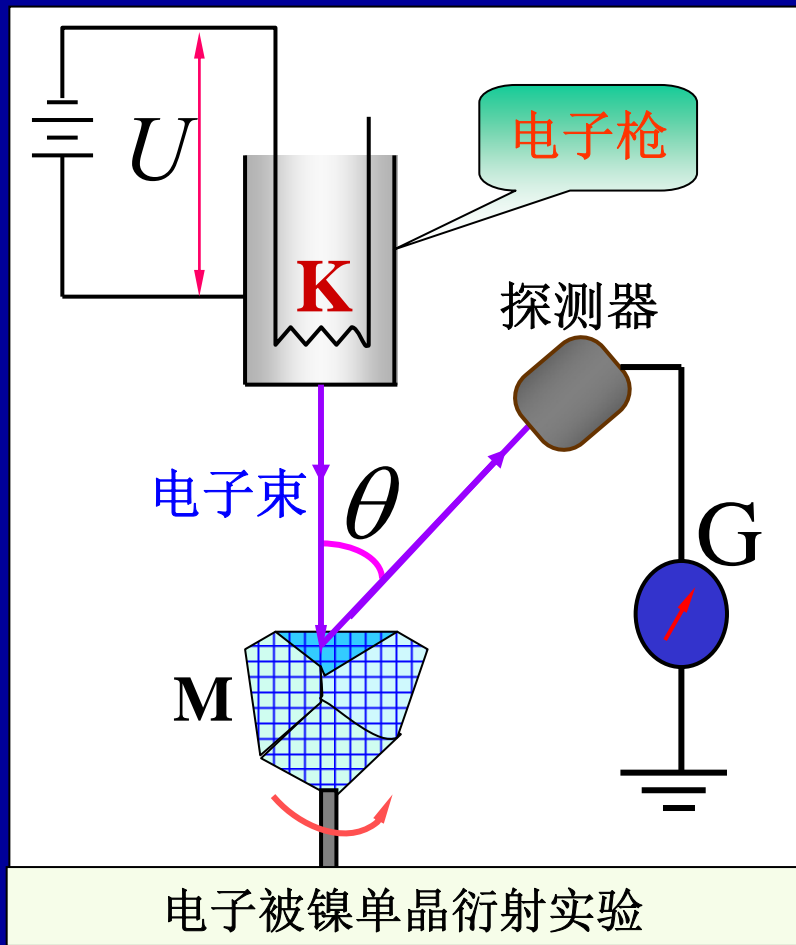
电子的德布罗意波长:

$$\lambda = \frac{h}{p} = 0.167 \text{ nm}$$

由布拉格公式: $2d\sin\varphi = n\lambda$

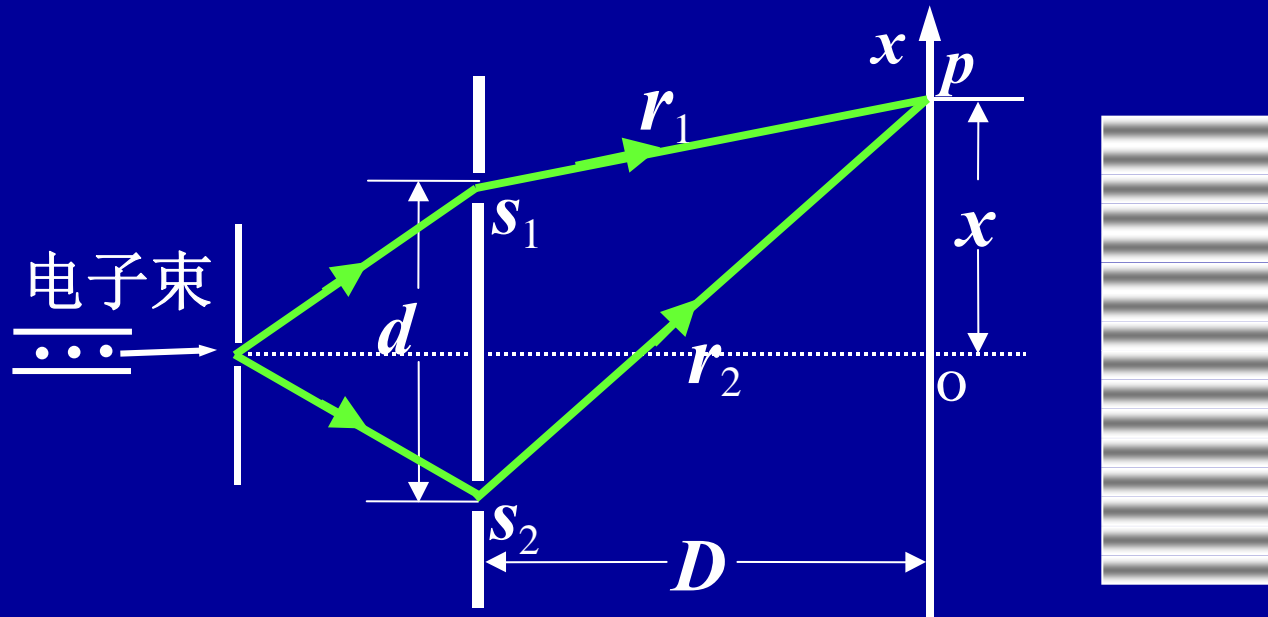
$$\theta = 51^\circ$$

理论值比实验值稍大的原因是电子受正离子的吸引, 在晶体中的波长比在真空中稍小(动量稍大)。经修正后, 理论值与实验结果完全符合。



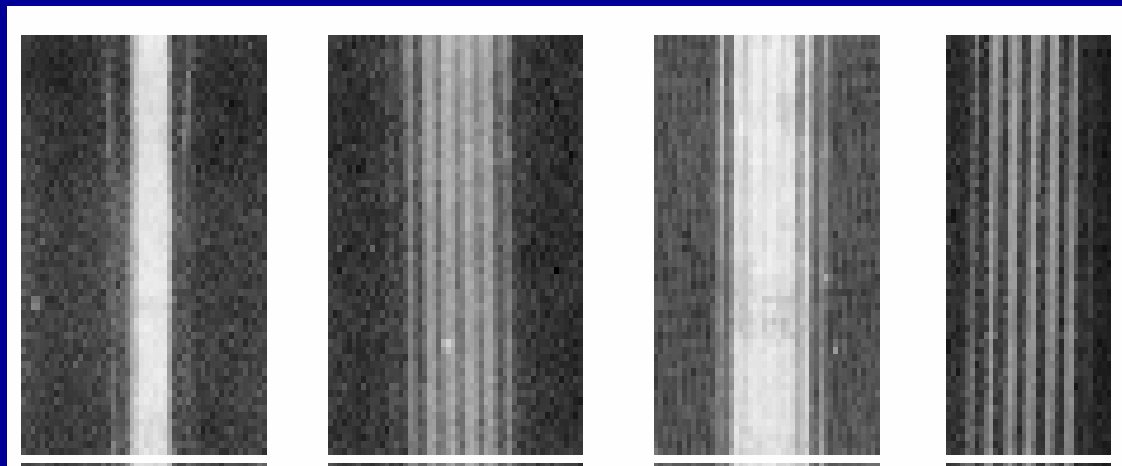


1961年约恩孙电子双缝干涉实验



$$(d=1\mu m \quad b=0.3\mu m \quad \lambda=0.05 \times 10^{-10} m)$$

$$x = k \frac{D\lambda}{d} \quad \lambda = \frac{h}{mv}$$



单缝

双缝

三缝

四缝

其它实验还证实：中子、质子以及原子、分子都具有波动性。

这表明：一切微观粒子都具有波粒二象性。



三. 物质波的统计解释 (—1926年玻恩)

波 动 观 点

粒 子 观 点

明纹处: 波强大

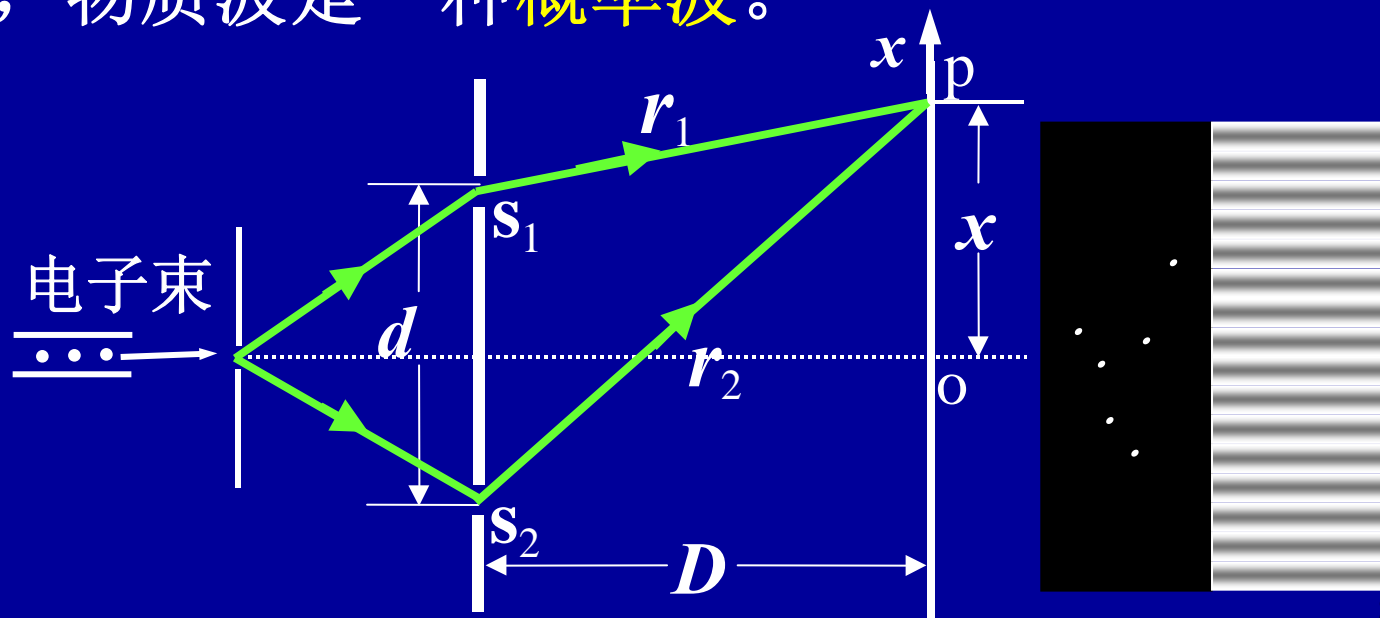
电子出现的概率大

暗纹处: 波强小

电子出现的概率小

波强与粒子在该处附近出现的概率成正比。

可见, 物质波是一种概率波。





例1-1 (1) 电子动能 $E_k=100eV$; (2) 人:
 $m=66.3kg$, $v=10m/s$, 求德布罗意波长。

解: (1) 电子速度较小, 可用非相对论公式求解。

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 \quad v = 5.93 \times 10^6 m/s$$

$$p = mv = 5.4 \times 10^{-24}$$

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p} = 1.23 \text{Å} \quad \begin{array}{l} m = 9.11 \times 10^{-31} kg \\ h = 6.63 \times 10^{-34} J.s \end{array}$$

$$(2) \text{ 人: } \lambda = \frac{h}{p} = 1.0 \times 10^{-36} m$$

可见, 只有微观粒子的波动性较显著; 而宏观粒子(如人)的波动性根本测不出来。



例1-2 用 $5 \times 10^4 V$ 的电压加速电子，求电子的速度、质量和德布罗意波长。

解：因加速电压大，应考虑相对论效应。

$$E_k = mc^2 - m_0c^2 = m_0c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - 1 \right) = 5 \times 10^4 eV$$

$$\therefore v = 1.24 \times 10^8 (m/s)$$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = 10 \times 10^{-31} (kg)$$

$$\lambda = \frac{h}{mv} = 0.0535 \text{Å}$$

$$m_0 = 9.11 \times 10^{-31} kg$$
$$h = 6.63 \times 10^{-34} J.s$$



例1-3 为使电子波长为 1\AA ，需多大的加速电压？

解：因电子波长较长，速度较小，可用非相对论公式求解。

$$eU = E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \quad (\because p = \frac{h}{\lambda})$$

$$U = \frac{h^2}{2me\lambda^2} = 150V$$

$$m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

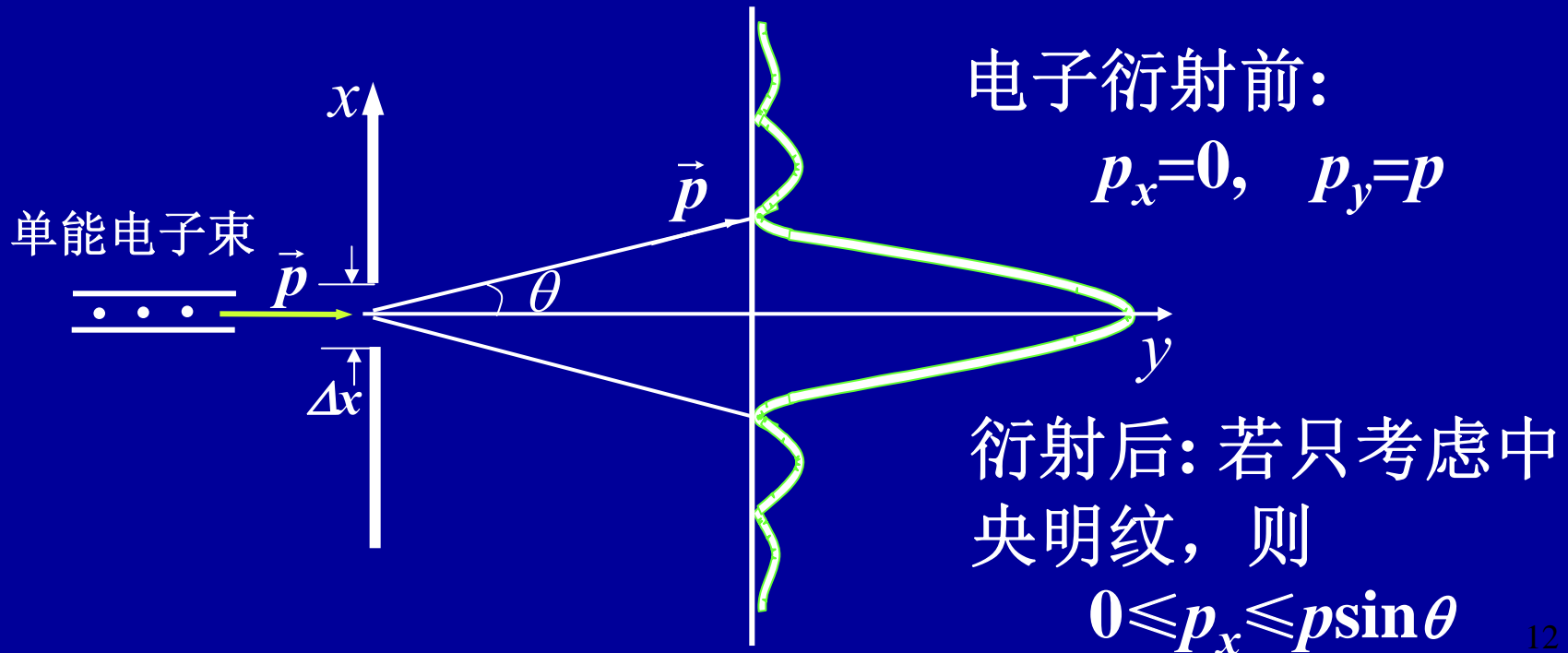
$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$



§17.2 不确定关系

一. 不确定关系

波和粒子是两个截然不同的概念。既然微观粒子具有明显的波粒二象性，用经典力学的方法描述微观粒子，就将受到限制。



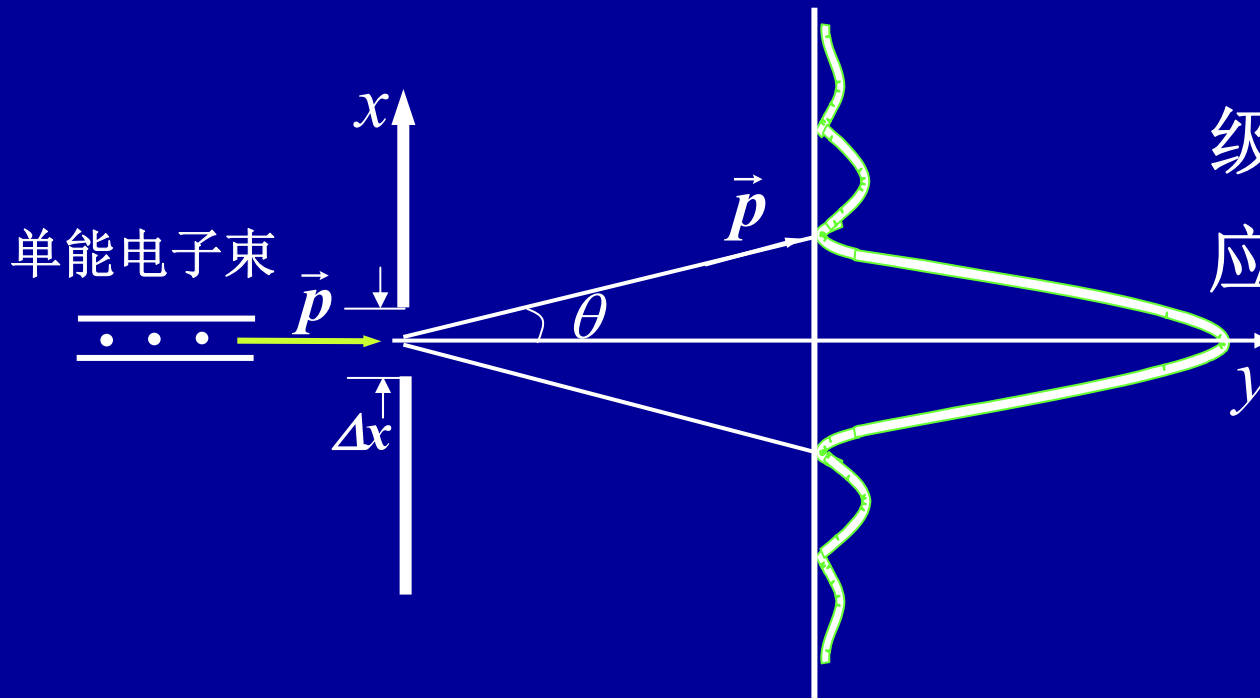


即电子在 x 方向上动量的不确定量为

$$\Delta p_x = p \sin \theta$$

对第一级衍射暗纹: $\Delta x \sin \theta = \lambda$

$$\Delta p_x = p \sin \theta = \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{\Delta x} = \frac{h}{\Delta x} \longrightarrow \Delta x \Delta p_x = h$$



若计及更高

级次的衍射,

应有 $\Delta x \Delta p_x \geq h$

$$\Delta y \Delta p_y \geq h$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq h$$



$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

还可写为

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \text{ —海森堡}$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

实际上上述公式只用于数量级的估计，所以这些公式所反映的物理内涵是相同的。

上述公式称为不确定关系，又称测不准关系。



$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

二. 不确定关系的意义

1. 微观粒子坐标的不确定量越小/测得越准确($\Delta x \rightarrow 0$)，动量的不确定量就越大($\Delta p_x \rightarrow \infty$)；

微观粒子动量的不确定量越小($\Delta p_x \rightarrow 0$)，坐标的不确定量就越大($\Delta x \rightarrow \infty$)。

表明：微观粒子不可能同时具有确定的坐标和动量。



$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

为什么微观粒子的坐标和动量不能同时测准呢？

这是因为微观粒子的坐标和动量本来就不**同时**具有确定量。

2. 不确定关系本质上是微观粒子具有**波粒二象性**的必然反映；是微观世界的一条客观规律，不是测量技术和主观能力的问题。



$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

3. 不确定关系提供了一个判据：

当不确定关系施加的限制可以忽略时，则可以用经典理论来研究粒子的运动。

当不确定关系施加的限制不可以忽略时，那只能用量子力学理论来处理问题。

三. 能量与时间的不确定关系

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$



例2-1 估算氢原子中电子速度的不确定量。

解：电子被束缚在原子球内，坐标的不确定量是

$$\Delta x = 10^{-10} m \text{ (原子的大小)}$$

由 $\Delta x \Delta p_x \geq h$ ，得

$$\Delta v_x = \frac{h}{m \Delta x} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{9.11 \times 10^{-31} \times 10^{-10}} = 7.3 \times 10^6 (m/s)$$

可见，**微观粒子的速度和坐标不能同时准确测定**。故研究氢原子不能用经典理论，只能用**量子力学**理论来处理。



例2-2 子弹质量 $m=1\text{kg}$ ，速度测量的不确定量是 $\Delta v_x=10^{-6}\text{ m/s}$ ，求子弹坐标的不确定量。

解：按不确定关系： $\Delta x \Delta p_x \geq h$ ，则子弹坐标的不确定量为

$$\begin{aligned}\Delta x &= \frac{h}{m \Delta v_x} \\ &= \frac{6.63 \times 10^{-34}}{1 \times 10^{-6}} = 6.63 \times 10^{-28} (\text{m})\end{aligned}$$

可见，子弹的速度和坐标能同时准确测定。这表示，不确定关系施加的限制可以忽略，像子弹这样的宏观物体可以用**经典理论**来研究它的运动。



例2-3 氦氖激光器: $\lambda=632.8nm$, 谱线宽度 $\Delta\lambda=10^{-9}nm$, 求光子坐标的不确定量。

解: 光子的动量

$$p_x = \frac{h}{\lambda} \quad \therefore \Delta p_x = -\frac{h}{\lambda^2} \Delta\lambda$$

按 $\Delta x \Delta p_x \geq h$, 则光子坐标的不确定量为

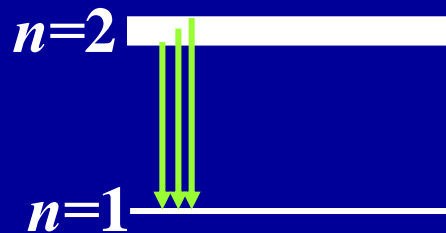
$$\therefore \Delta x = \frac{h}{\Delta p_x} = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda} = 400(km)$$



例2-3 原子激发态的平均寿命 $\Delta t=10^{-8}s$ ，求激发态能级能量的不确定量。

解： $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t} \approx 10^{-8} eV$$



所以原子光谱存在自然宽度。



§17.3 波函数

一. 波函数

对微观粒子，由于不确定关系施加的限制不可以忽略，它的速度和坐标不能同时确定，因此微观粒子的运动状态，不能用坐标、速度、加速度等物理量来描述。

量子力学认为：微观粒子的运动状态可用一个复函数 $\Psi(x,y,z,t)$ 来描述，函数 $\Psi(x,y,z,t)$ 称为波函数。



二. 波函数的统计解释

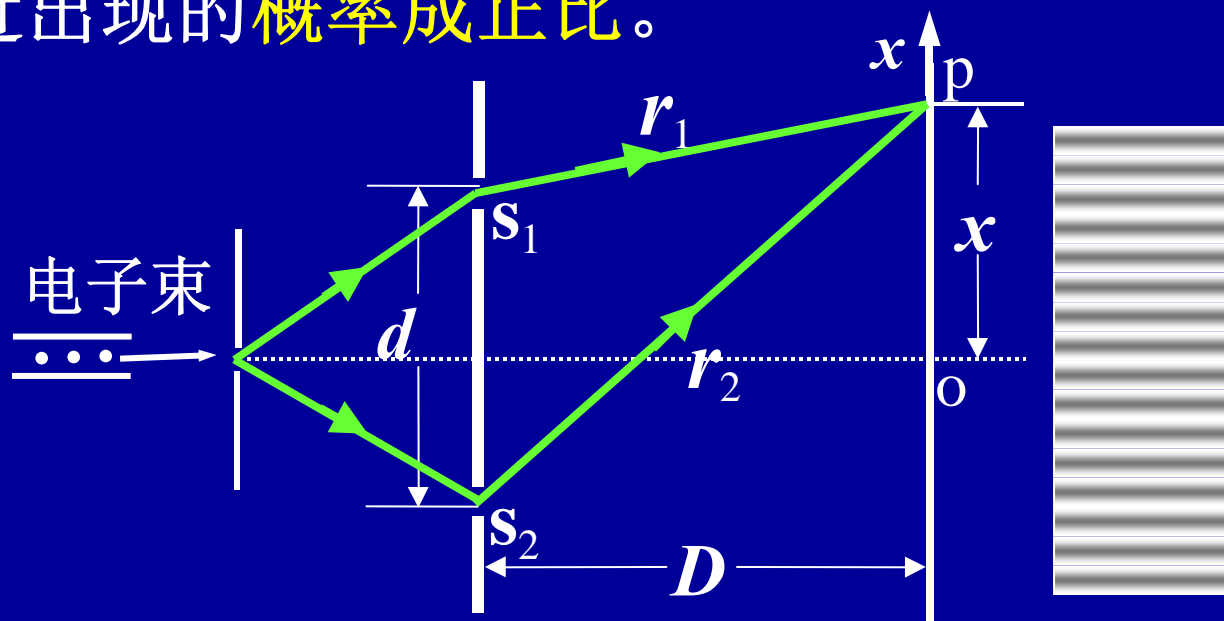
波动观点

粒子观点

明纹处：波强 $|\Psi(x,y,z,t)|^2$ 大，电子出现的概率大；

暗纹处：波强 $|\Psi(x,y,z,t)|^2$ 小，电子出现的概率小。

可见，波函数模的平方 $|\Psi(x,y,z,t)|^2$ 与粒子在该处附近出现的概率成正比。





1926年，玻恩(M.Born)提出了波函数的统计解释：(1954年获诺贝尔物理奖)

波函数模的平方 $|\Psi(x,y,z,t)|^2$ —表示粒子在 t 时刻在 (x,y,z) 处的单位体积中出现的概率，即概率密度。

$|\Psi(x,y,z,t)|^2 dx dy dz$ —表示 t 时刻粒子在 (x,y,z) 处的体积元 $dx dy dz$ 中出现的概率。

玻恩对波函数的这种统计解释，把微观粒子的波粒二象性作出了完美的描述。

1. 因粒子在整个空间出现的概率是1，所以有

$$\iiint |\Psi|^2 dx dy dz = 1 \text{ —归一化条件}$$



2. 波函数的标准条件

由于一定时刻在空间给定点粒子出现的概率是**唯一**的，且应该是**有限**的(具体说应小于1)，在空间不同点处，概率分布应该是**连续**的，不能逐点跃变或在任何点处发生突变。

因此，波函数 Ψ 的**标准条件**应该是：**单值、有限、连续**。

应当指出，物质波与经典物理中的波动是不同的。对机械波 y 表示位移；对电磁波 y 表示电场 E 或磁场 B ，波强与振幅 A 的平方成正比。



在量子力学中，物质波不代表任何实在的物理量的波动，波的振幅的平方 $|\Psi(x,y,z,t)|^2$ 表示粒子在 t 时刻在 (x,y,z) 处的单位体积中出现的概率。

在量子力学中微观粒子的运动状态是用波函数 $\Psi(x,y,z,t)$ 来描述的。

但描述微观粒子运动状态的波函数 $\Psi(x,y,z,t)$ 又到那里去寻找呢？

答案是：求解薛定谔方程。



例3-1 设粒子沿 x 方向运动，波函数为

$$\psi(x) = \frac{A}{1+ix}$$

求：1. 归一化常数 A ；2. 粒子的概率密度按坐标的分布；3. 在何处找到粒子的概率最大？

解：1. 根据归一化条件有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \psi^*(x) dx = 1 \quad \int_{-\infty}^{\infty} A^2 \frac{dx}{1+x^2} = 1 \quad A^2 \cdot \pi = 1$$

由此得归一化常数为

$$A = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \quad \psi(x) = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{1+ix}$$



$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{1+ix}$$

2. 粒子的概率密度分布为

$$W = \psi(x)\psi^*(x)$$

$$W(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}$$

3. 很显然，由上式知 $x=0$ 处概率密度最大。

此时有：

$$W(0) = \frac{1}{\pi}$$



§17.4 薛定谔方程

一. 自由粒子波函数及满足的方程

对能量为 E 和动量为 p 的自由粒子:

$$\lambda = h/p, \quad \nu = E/h$$

$$y(x, t) = A \cos(2\pi\nu t - \frac{2\pi x}{\lambda})$$

$$\psi(x, t) = A e^{i2\pi(\nu t - x/\lambda)} = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

这就是自由粒子的波函数。

粒子在空间某处出现的概率密度为:

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2$$

概率密度不随时间而改变, 是一种稳定状态, 简称定态。



下面研究在 x 方向运动的自由粒子波函数满足什么方程？

$$\psi(x, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi$$

自由粒子势能为零，在非相对论情况下有

$$E = E_k = \frac{p^2}{2m}$$

在以上式子中消去 p, E ，就得

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$



在空间中运动的自由粒子波函数满足什么方程？

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

$$\vec{p} \cdot \vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} \psi \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\frac{p_y^2}{\hbar^2} \psi \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{p_z^2}{\hbar^2} \psi$$

自由粒子势能为零，在非相对论情况下有

$$E = E_k = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$



在以上式子中消去 p, E , 就得

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{拉普拉斯算符}$$


$$\psi(x, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi$$

二. 薛定谔方程

粒子在势场 V 中运动，则粒子的总能量应为

$$E = E_k + V = \frac{p^2}{2m} + V$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$




三维空间:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

——薛定谔方程的一般形式。

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \text{ ——拉普拉斯算符}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \text{ ——哈密顿算符}$$

薛定谔方程的一般形式可写为

$$\hat{H}\psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$



三. 定态薛定谔方程

若势能 V 不显含时间 t ，则

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) f(t)$$

$$\hat{H}\psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

$$\hat{H}\psi(x, y, z) f(t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z) f(t)}{\partial t}$$

将上式两端除以 $\psi(x, y, z) f(t)$ ，并注意到

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

得
$$\frac{\hat{H}\psi(x, y, z)}{\psi(x, y, z)} = i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = E$$



$$\frac{\hat{H}\psi(x, y, z)}{\psi(x, y, z)} = i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = E$$

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} = Ef(t)$$

其解 $f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$

$\psi(x, y, z)$ 满足: $\hat{H}\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x, y, z) + V\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

称为定态薛定谔方程



$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + V\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

波函数: $\psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

概率密度: $|\psi(x,y,z,t)|^2 = |\psi(x,y,z)|^2$

概率密度不随时间而改变——定态。



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z)+V\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

求解问题的思路：

1. 写出具体问题中势函数 V 的形式，代入方程
2. 用分离变量法求解
3. 用归一化条件和标准条件确定积分常数，
只有 E 取某些特定值时才有解

↓
本征值

↓
本征函数

4. 讨论解的物理意义

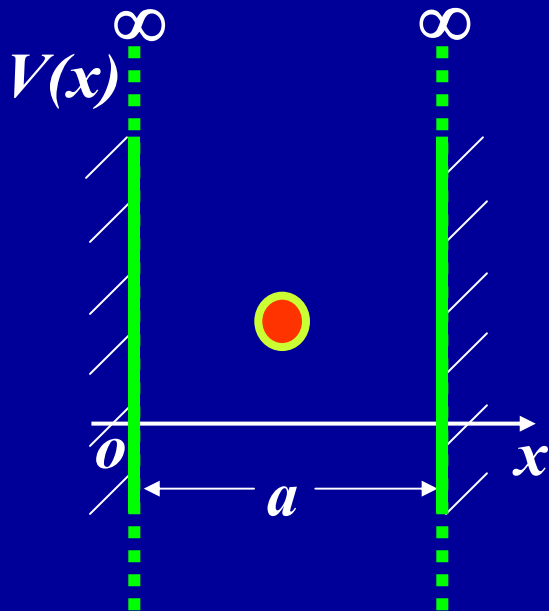
即求 $|\psi|^2$ ，得出粒子在空间的概率分布。



§ 17.5 一维无限深方势阱

粒子 m 在 $0 < x < a$ 的内运动，势能函数为

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V\psi(x) = E\psi(x)$$

阱外粒子出现的概率为零，故

$$\psi(x)=0 \quad (x \leq 0, x \geq a)$$



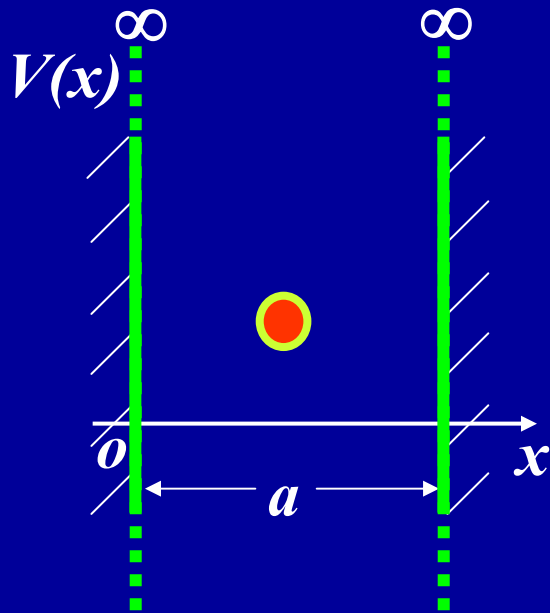
$$0 < x < a: V(x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V\psi(x) = E\psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

$$\text{令 } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

$$\text{有 } \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$$



通解: $\psi(x) = C\sin(kx + \varphi)$, k 和 φ 由边界条件决定。



$$\psi(x) = C \sin(kx + \varphi)$$

由 $x=0$ 处 $\psi(x)$ 的连续性, 有

$$\psi(0) = C \sin \varphi = 0, \therefore \varphi = 0$$

$$\psi(x) = C \sin kx$$

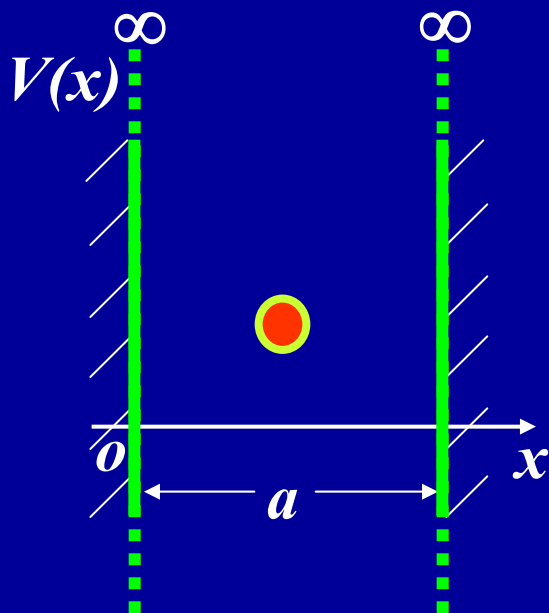
由 $x=a$ 处 $\psi(x)$ 的连续性, 有

$$\psi(a) = C \sin ka = 0$$

$$ka = n\pi$$

$$\text{于是 } k = \frac{n\pi}{a} \quad (n=1, 2, \dots)$$

($n=0$, $\psi(x)=0$; n 为负数与正数表达同样的概率)





1. 能量是量子化的

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k = \frac{n\pi}{a} \quad (n=1,2,\dots)$$

于是 $E_n = n^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \right) \quad (n=1,2,\dots)$

粒子的能量只能取不连续的值——能量量子化。

当量子数 $n=1$,

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \neq 0! \text{ —称为零点能}$$

微观粒子是不可能静止的!



2. 粒子在势阱内的概率分布——形成驻波

波函数: $\psi(x) = C \sin kx$, $k = \frac{n\pi}{a}$

$$\psi_n(x) = C \sin \frac{n\pi}{a} x$$

由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_0^a C^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 1$$

得

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

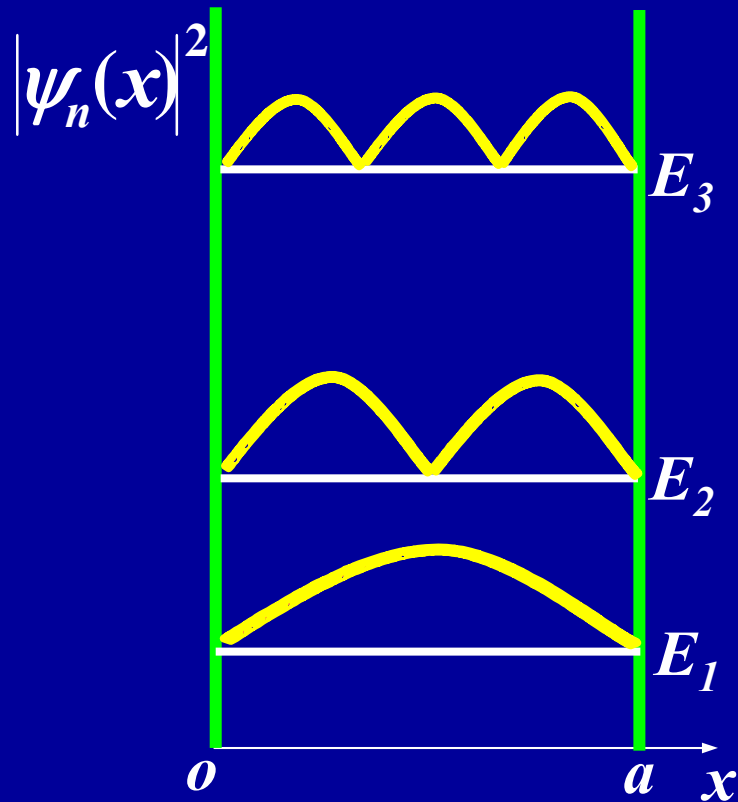
归一化波函数为

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$



$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad \text{为 本征态}$$

粒子出现在势阱内各点的概率密度为



$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \left(\frac{n\pi}{a} x \right)$$

$(n=1,2,\dots)$ 为 量子数

$$E_n = n^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \right) \text{ 为 本征能量}$$



例5-1 粒子 m 在一维无限深方势阱中运动，其波函数为

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{3\pi}{a} x$$

求：(1)粒子的能量和动量；(2)概率密度最大的位置。

解：(1) $E_n = n^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \right)$

量子数 $n=3$ ，粒子的能量： $E_3 = 3^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \right)$

$$\text{又 } E_3 = 3^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \right) = \frac{p^2}{2m}, \quad \therefore p = \pm \frac{3\hbar\pi}{a}$$



(2) 概率密度最大的位置。

概率密度:

$$|\psi_3(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{3\pi}{a}x\right)$$

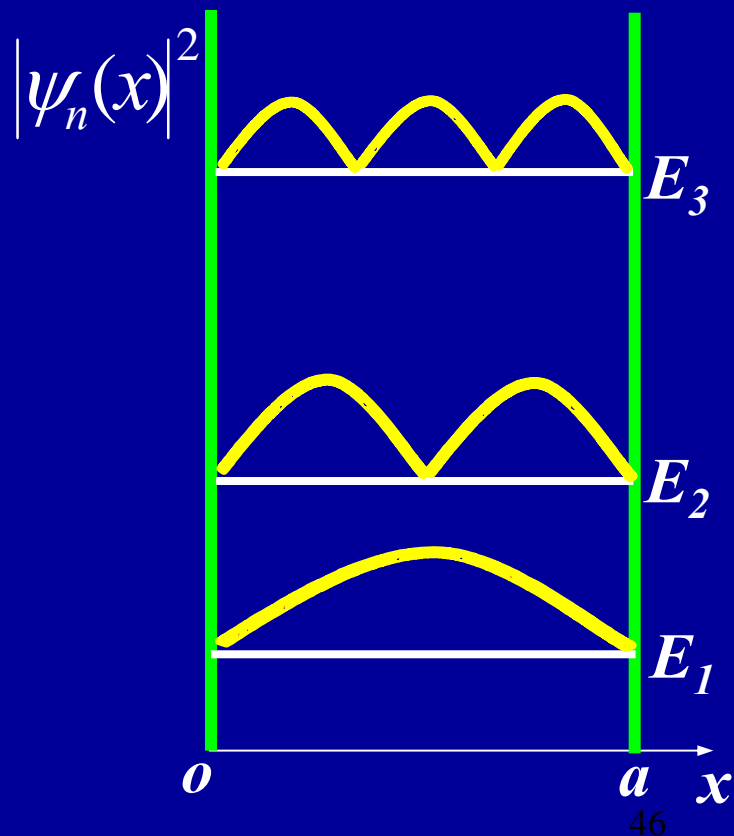
$|\psi_3(x)|^2$ 有极大值的充要条件:

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{3\pi}{a}x\right) \right] = 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \left[\frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{3\pi}{a}x\right) \right] < 0$$

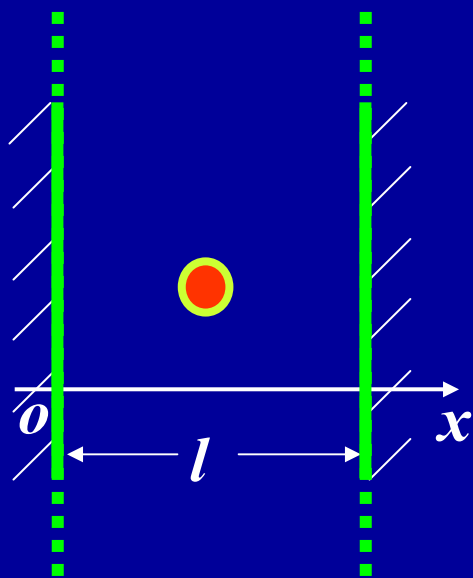
解得 $x = \frac{a}{6}, \frac{a}{2}, \frac{5a}{6}$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{3\pi}{a} x$$





例5-2 一粒子被限制在相距 l 的两个不可穿透的壁之间，如图所示。描述粒子状态的波函数为 $\psi=Cx(l-x)$ ，其中 C 为待定常量。求 $x=0—l/3$ 内发现粒子的概率。



解: $\int_0^l |\psi(x)|^2 dx = 1$

$$\int_0^l C^2 x^2 (l-x)^2 dx = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{30}{l^5}}$$

$$p = \int_0^{l/3} |\psi(x)|^2 dx$$

$$= \int_0^{l/3} \frac{30}{l^5} x^2 (l-x)^2 dx = \frac{17}{81}$$



例5-3 在阱宽为 a 的无限深势阱中，一个粒子的状态为

$$f(x) = \sin \frac{\pi x}{a} - \sin \frac{2\pi x}{a}$$

求：(1)能量的可能值和相应概率；(2)平均能量。

解： (1) $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$

$$\begin{aligned} \psi(x) &= C \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} - \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) - \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(x) \end{aligned}$$



$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad E_n = n^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \right)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) - \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(x)$$

能量的可能值:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad E_2 = 2^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

E_1 、 E_2 的概率各1/2

$$(2) \text{平均能量: } \bar{E} = \frac{1}{2} E_1 + \frac{1}{2} E_2 = \frac{5}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$



例 在长度为 l 的一维势阱中，粒子的波函数为

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l}$$

求从势阱壁 $l=0$ 起到 $l/3$ 区间内粒子出现的概率；又当 $n=2$ 时，此概率是多大？

解：粒子出现在给定区间的概率的计算。由波函数可得概率密度

$$w(x) = |\psi(x)|^2$$

$$P = \int_0^{l/3} w(x) dx = \int_0^{l/3} |\psi(x)|^2 dx$$



$$\begin{aligned} P &= \int_0^{l/3} \frac{2}{l} \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx \\ &= \frac{1}{l} \int_0^{l/3} (1 - \cos \frac{2n\pi}{l} x) dx \\ &= \frac{1}{3} - \frac{1}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{3} \end{aligned}$$

当 $n=2$

$$P = \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \sin \frac{4\pi}{3} = 40.2\%$$



* §17.6 一维势垒 隧道效应

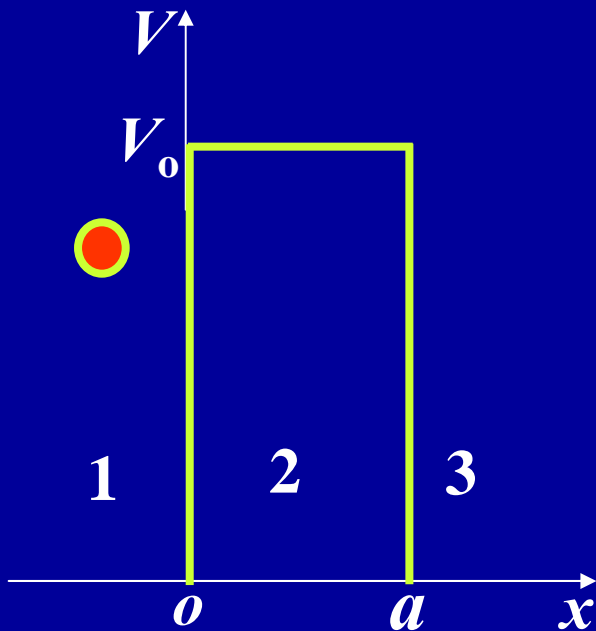
设电子在势场中沿 x 方向运动, 其势能函数为

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & x < 0, x > a \end{cases}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\text{令 } k^2 = \frac{2m(V - E)}{\hbar^2},$$

$$\text{有 } \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) = 0$$





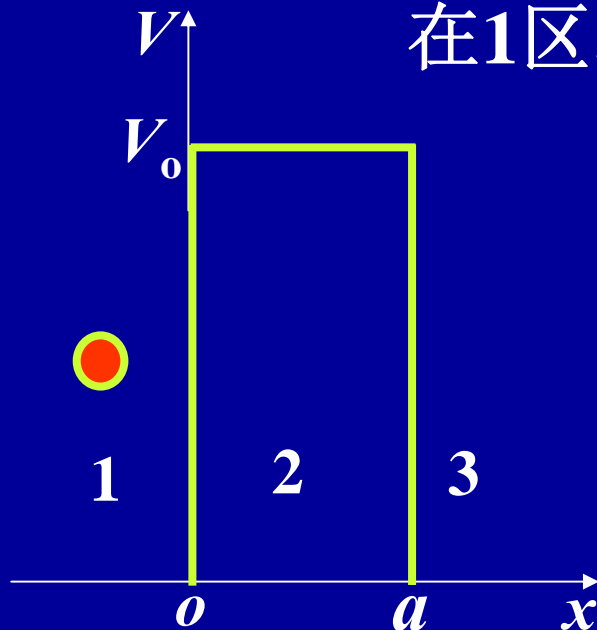
$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & x < 0, x > a \end{cases} \quad k^2 = \frac{2m(V - E)}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) = 0$$

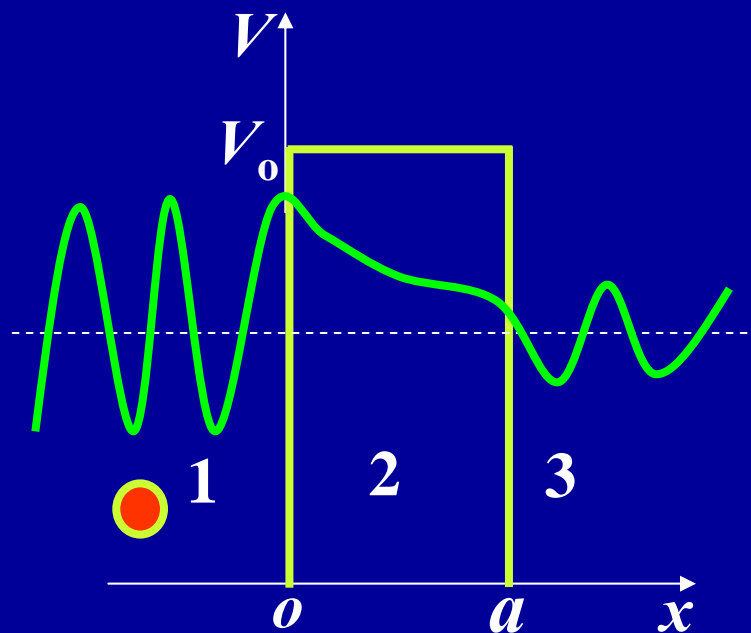
在1区和3区, $\psi_{1,3}(x) = C\sin(kx + \varphi)$

在电子能量 $E < V_0$ 的情况下, 2区:

$$\psi_2(x) = Ae^{-kx}$$



可见, 电子在三个区域都有出现的概率。就是说, 沿 x 方向运动的电子可以从左向右自由穿过势垒。这种 $E < V_0$ 的电子**穿透**势垒的现象称为**隧道效应**。



隧道效应已经为实验证实，并获得许多实际应用。

如半导体隧道二极管；

现代杰作：1986年获诺贝尔物理奖的扫描隧道显微镜(STM)等。



§17.7 量子力学对氢原子的描述

一. 氢原子的定态薛定谔方程

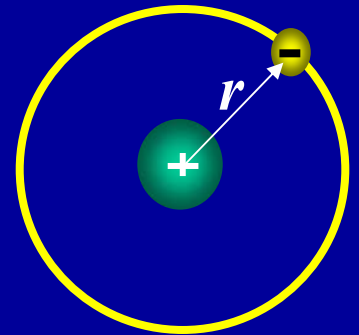
应用玻尔理论，可成功地解释氢原子的光谱规律，但是玻尔仍然把电子视为经典粒子，认为电子沿着确定的轨道在运动。同时又人为地加上了一些量子条件，所以玻尔理论实质上是半经典半量子的不完整的理论体系，无法解释多电子原子的光谱等问题。

电子是微观粒子，它具有波粒二象性，必须应用量子力学才能正确描述电子在氢原子中的运动。



设原子核不动，电子是在原子核的库仑场中运动，其势能为

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$



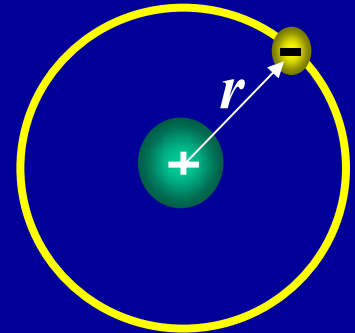
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z)+V\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

波函数 ψ 应满足的条件：单值、连续、有限、归一化。



由于 V 呈球对称，采用球坐标系，取原子核为坐标原点，定态薛定谔方程为

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$



波函数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 可分离变量：

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$



分离成三个常微分方程

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R = 0$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} \right) \Theta = 0$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m_l^2 \Phi = 0$$

式中： m_l 和 λ 为分离变量常数。

在 $E < 0$ (束缚态) 的情况下求解上述方程，可得后面几个结论：



二. 量子力学的结论

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R = 0$$

1. 能量量子化

为使波函数满足标准条件，电子(或说是整个原子)的能量只能是

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} = -\frac{13.6\text{eV}}{n^2}$$

(主量子数: $n=1,2,\dots$)

这和玻尔理论的结果一致。



$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + \gamma\Phi = 0$$

由于 Φ 必须满足波函数的周期性，于是

$$\gamma = m_l^2$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm m.$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{\gamma}{\sin^2\theta} \right) \Theta = 0$$

由于 Θ 必须满足波函数存在且连续，有

$$\lambda = l(l+1)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$



2. 电子(轨道)角动量量子化

由于 Θ 必须满足波函数存在且连续, 于是

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

副量子数(角量子数): $l=0,1,2,\dots,(n-1)$

3. 角动量的空间量子化

为使波函数 Φ 满足单值且周期性, 电子角动量(动量矩)在任意方向(例如 z 轴正向, 外磁场方向)的分量 L_z 满足下面的量子化条件:

$$L_z = m_l \hbar$$

磁量子数: $m_l=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

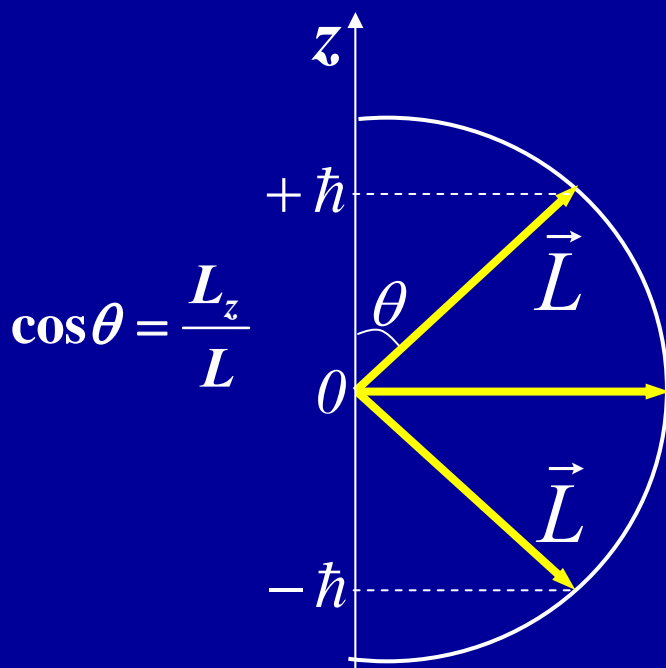


可知：不仅电子角动量大小是量子化的，而且它在空间的方向也有一定的限制，即它在任意方向（例如 z 轴正向，外磁场方向）的分量，也只能取一系列分立的数值，这称为**空间量子化**。

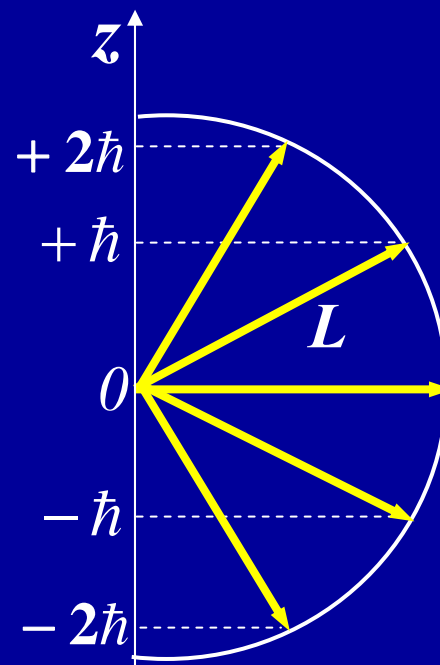
例如： $l=1, L=\sqrt{l(l+1)}\hbar=\sqrt{2}\hbar$

$l=2, L=\sqrt{l(l+1)}\hbar=\sqrt{6}\hbar$

$$L_z = 0, \pm\hbar$$



$$L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar$$





4. 电子的概率分布 电子云

解定态薛定谔方程，可得氢原子的波函数：

$$\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\varphi)$$

电子在核外空间出现的**概率密度**：

$$|\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)|^2$$

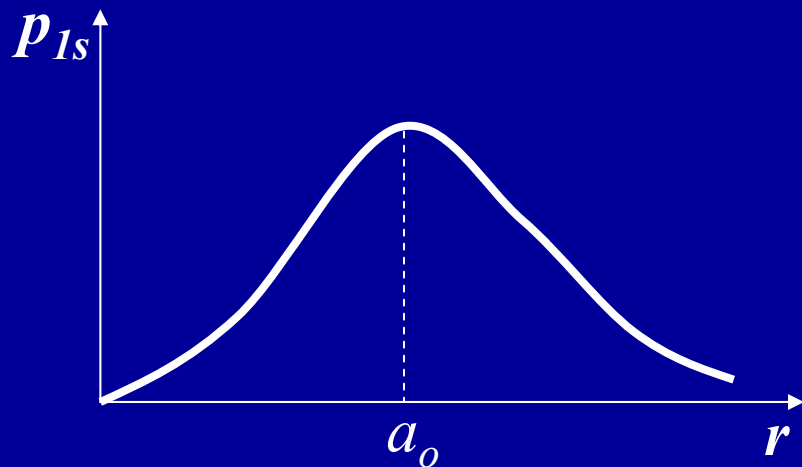
可见，氢原子中的电子是按一定的概率分布在原子核的周围。这种电子在核外空间出现的概率密度，人们往往形象化地称之为“**电子云**”。



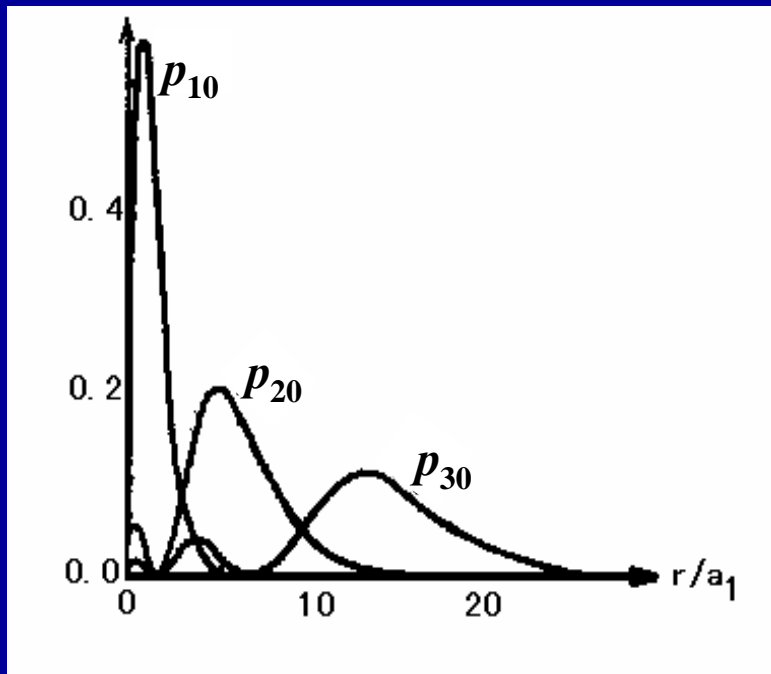
例如：对1S态(基态)的电子，其概率密度为

$$p_{1s} = \frac{4}{a_o^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_o}}, \quad a_o = \frac{\epsilon_o h^2}{\pi m e^2} \text{ (玻尔半径)}$$

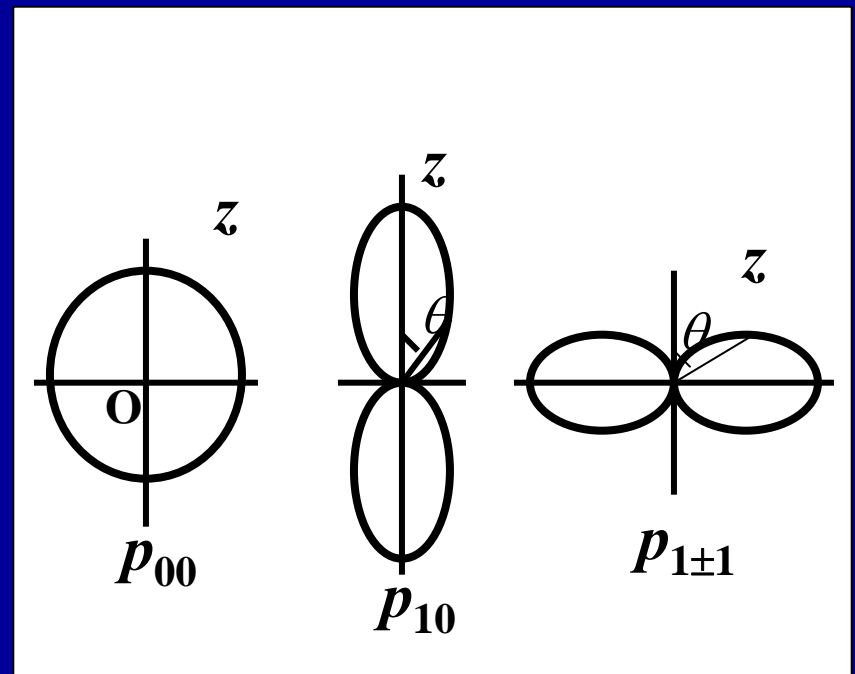
由于 p_{1s} 是 r 的连续函数，可见电子在核外(从 $r=0$ 到 $r=\infty$)每点都有一定的概率，只是概率大小不同而已。



这和玻尔的轨道运动概念完全不同，而玻尔半径只是概率最大的位置。



电子概率的径向分布



电子概率沿角向 θ 分布

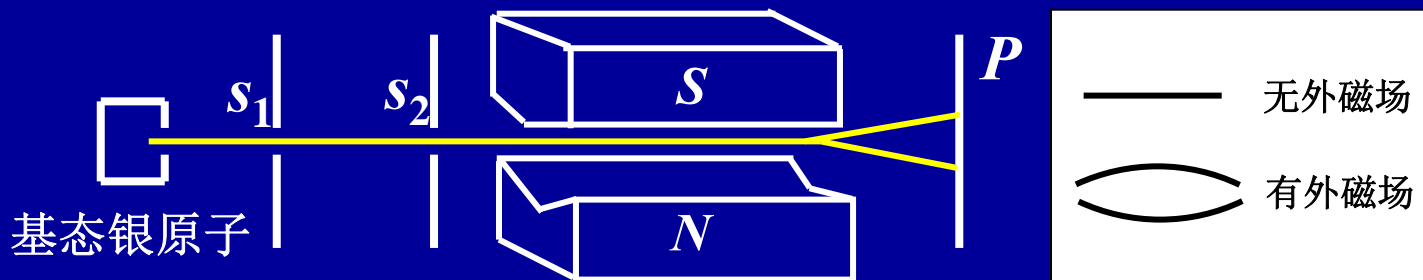


§17.8 多电子原子系统

一. 电子自旋

斯特恩—盖拉赫实验 (1921)

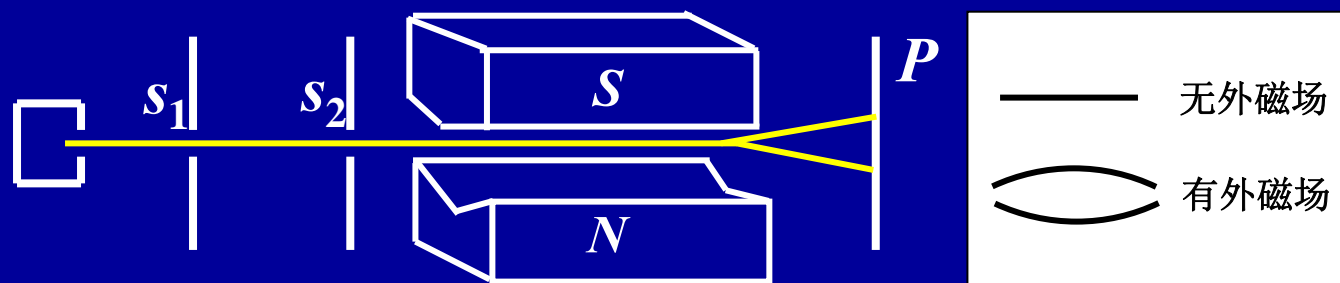
电子除绕核运动外，还有自旋



- 基态银原子： $l=0 \Rightarrow$ 轨道磁矩为零 \Rightarrow 应无偏转

1925年乌伦贝克-古兹密特：电子存在自旋角动量。

电子自旋是一种量子力学效应，不是机械的自转。



可以证明，电子自旋角动量为

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \stackrel{s=\frac{1}{2}}{=} \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

原子束分为两束，表明自旋角动量在空间的取向是量子化。在任意方向(如z轴正向)只有两个分量：

$$S_z = m_s \hbar$$

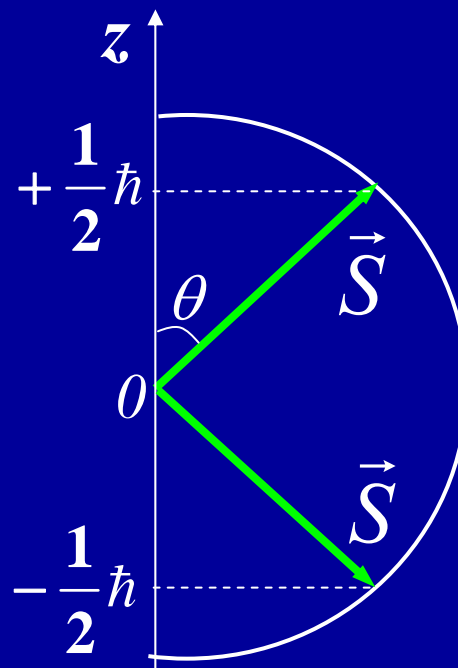
$$m_s = \pm \frac{1}{2} \text{——自旋磁量子数}$$



$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \stackrel{s=\frac{1}{2}}{=} \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \quad S_z = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2}\hbar$$

$$\cos \theta = \frac{S_z}{S} = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\theta = 54.7^\circ$$



$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \begin{cases} s \text{ 取半整数 — 费米子 (如电子、质子)} \\ s \text{ 取整数 — 玻色子 (如光子、}\pi\text{介子)} \end{cases}$$



原子中电子的运动状态应由四个量子数决定：

(1) 主量子数： $n=1,2,3,\dots$ 。

它大体上决定了原子中电子的能量。

(2) 角量子数： $l=0,1,2,\dots,(n-1)$ 。

它决定电子绕核运动的角动量的大小。

一般说来，处于同一主量子数 n ，而不同角量子数 l 的状态中的各个电子，其能量稍有不同。

(3) 磁量子数： $m_l=0,\pm1,\pm2,\dots,\pm l$ 。

它决定电子角动量 z 分量 L_z 的量子化，即空间量子化。



(4) 自旋磁量子数: $m_s = \pm \frac{1}{2}$ 。

它决定电子自旋角动量的 z 分量 S_z 的量子化，
也影响原子在外磁场中的能量。



二. 多电子原子

除氢原子以及类氢离子以外，其他元素的原子核外都有两个或两个以上的电子。

原则上讲，多电子原子系统的问题应该去求解薛定谔方程，得到描写电子运动的波函数和能级。

要从解薛定谔方程求出描写电子运动的波函数和能级是非常复杂和困难的。在量子力学中常采用近似的计算方法。

可证明，原子核外电子的运动状态仍由四个量子数来确定。



三. 原子的壳层结构

1916年柯塞尔提出了原子壳层结构学说：
主量子数 n 相同的电子分布在同一壳层上。

$$n=1, 2, 3, 4, 5, 6 \dots\dots$$

$$K, L, M, N, O, P \dots\dots$$

主量子数 n 相同而角量子数 l 不同的电子分布在不同的分壳层或支壳层上。

$$l=0, 1, 2, 3, 4 \dots\dots$$

$$s, p, d, f, g \dots\dots$$

如： $n=3, l=0, 1, 2\dots$ 分别称为 $3s$ 态, $3p$ 态, $3d$ 态...

主量子数 n 愈小其相应的能级愈低。在同一壳层中，角量子数 l 愈小，其相应的能级愈低。



多电子原子系统中，核外电子在不同的壳层上的分布还要遵从下面两条基本原理：

1. 能量最小原理

原子系统处在正常状态时，每个电子总是尽可能占有最低的能级。

2. 泡利不相容原理 (适用: 费米子)

(1945年获诺贝尔物理奖)

一个原子系统内，不能有两个或两个以上电子具有完全相同的量子态(n, l, m_l, m_s)。

利用泡利不相容原理可以计算各个壳层中可能占有的最多电子数。



对给定的一个 n ,

$l=0,1,2,\dots,(n-1)$, 共 n 个值;

$m_l=0,\pm 1,\pm 2,\dots,\pm l$, 共 $(2l+1)$ 个值;

$m_s = \pm \frac{1}{2}$, 共2个值;

量子态数为

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2$$

所以各壳层能容纳的最多电子数为

$n=$	1,	2,	3,	4,	5,
	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>O</i>
最多电子数:	2	8	18	32	50



对给定的一个 l 的分壳层:

$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$, 共 $(2l+1)$ 个值;

$m_s = \pm \frac{1}{2}$, 共 2 个值;

量子态数为 $2(2l+1)$

所以各分壳层能容纳的最多电子数为

$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$

$s \quad p \quad d \quad f \quad g, \dots$

最多电子数: $2 \quad 6 \quad 10 \quad 14 \quad 18, \dots$

电子在各壳层、分壳层的填充由左向右:

$n = 1$	2	3	4
K	L	M	N
$1s^2$	$2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^6 3d^{10}$	$4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$



$n=1$	2	3	4
K	L	M	N
$1s^2$	$2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^6 3d^{10}$	$4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$

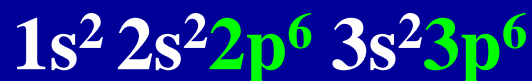
四. 元素周期表 (p304)

周期	序数元素	K 1s	L 2s 2p	M 3s 3p 3d	N 4s 4p 4d 4f
I	1 氢 H 2 氦 He	1 2			
II	3 锂 Li 4 铍 Be 5 硼 B 6 碳 C 7 氮 N 8 氧 O 9 氟 F 10 氖 Ne	2 2 2 2 2 2 2 2	1 2 2 1 2 2 2 3 2 4 2 5 2 6		



$n=1$	2	3	4
K	L	M	N
$1s^2$	$2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^6 3d^{10}$	$4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$

例题17-9 写出氩($z=18$)的电子组态。



例题17-10 钴($z=27$) $4s$ 有两个电子，没有其它 $n \geq 4$ 的电子，则 $3d$ 态上的电子数为 7 个。





例8-1 在某原子的M壳层中，电子可能具有的量子态(n, l, m_l, m_s)为

(A) $(2, 1, 0, -\frac{1}{2})$

(B) $(3, 1, -1, \frac{1}{2})$

$n=3$

(C) $(3, 0, 1, \frac{1}{2})$

(D) $(1, 0, 0, -\frac{1}{2})$

$l=0, 1, 2$

$m_l = 0, \pm 1, \pm 2$

答：(B)

例8-2 下列各组量子数中，哪一组可以描述原子中电子的状态？

(A) $(2, 2, 0, \frac{1}{2})$

(B) $(3, 1, -1, -\frac{1}{2})$

(C) $(1, 2, 1, \frac{1}{2})$

(D) $(1, 0, 1, -\frac{1}{2})$

答：(B)



例8-3 锂($z=3$)原子中有3个电子, 已知一个电子的量子态为 $(1, 0, 0, \frac{1}{2})$, 则其余两个电子的量子态分别为

$$(1, 0, 0, -\frac{1}{2}) \quad (2, 0, 0, \frac{1}{2})$$

$$\text{或} (2, 0, 0, -\frac{1}{2})$$

例8-4 根据量子力学理论, 当主量子数 $n=3$ 时, 电子动量矩的可能值为

答: 当 $n=3$ 时, $l=0, 1, 2$

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

L 的可能值为: $L=0, \sqrt{2}\hbar, \sqrt{6}\hbar$



例8-5 写出 L 壳层上8个电子可能具有的量子态
 (n, l, m_l, m_s) 。

解： L 壳层： $n=2, l=0, 1, m_l = 0, \pm 1, m_s = \pm \frac{1}{2}$

- | | |
|-------------------------------|--------------------------------|
| (1) $(2, 0, 0, \frac{1}{2})$ | (2) $(2, 0, 0, -\frac{1}{2})$ |
| (3) $(2, 1, 0, \frac{1}{2})$ | (4) $(2, 1, 0, -\frac{1}{2})$ |
| (5) $(2, 1, 1, \frac{1}{2})$ | (6) $(2, 1, 1, -\frac{1}{2})$ |
| (7) $(2, 1, -1, \frac{1}{2})$ | (8) $(2, 1, -1, -\frac{1}{2})$ |



第 18 章

固体的能带结构 (energy band of solid)

本章内容提要

- 固体的能带结构
- 半导体的导电机构



固体是一种重要的物质结构形态，是当前物理学中主要的研究对象之一。量子力学用于固体物理领域，促进了固体材料、半导体、激光、超导.....的研究。

本章仅定性介绍固体的能带结构，并在此基础上介绍半导体的导电机构。

固体材料分晶体和非晶体两大类。



§ 18.1 晶体的结合类型

一. 晶体

理想晶体中的粒子(原子、分子或原子集团)在空间的排布上是**长程有序**的；可以用点来表示上述粒子的质心，它们在空间有规则地作周期性的分布，构成**空间点阵**。

按结合力的性质，晶体分为四类：离子晶体、共价晶体、分子晶体、金属晶体。

二. 非晶体

非晶态中的中分子排列在小范围的空间内是**短程有序**的；但与理想晶体相比，在次近邻原子间的关系上就可能有显著差别。（**长程无序**）



三.晶体和非晶体的区别

(1)晶体有一定对称性的规则外形，非晶体则没有。

(2)晶体的物理性质是各向异性的，而非晶体是各向同性的。

(3)晶体有一定的熔点，非晶体则没有。

(4)晶体在外力的作用下，容易沿着一定的平面(解理面)裂开，而非晶体没有解理面。



四. 晶体中电子的波函数

由于晶体中原子紧紧靠在一起，原子上的外层电子都受到邻近原子的作用。原子的价电子都不同程度地**共有化**了。

若要研究晶体中电子的运动，原则上说，应当去解多原子、多电子系统的薛定谔方程。

在单电子近似下，可以认为点阵离子不动，一个电子在周期性势场中运动，由薛定谔方程求解电子的波函数和能量。

然而这是一个复杂得不能严格求解的问题，只能用**近似方法**，这里不加讨论。



§ 18.2 晶体中电子的能带

一. 电子的共有化

晶体中原子排列的很紧密，因而各相邻原子的波函数(或者说外电子壳层)将发生重叠。

因此，各相邻原子的外层电子，很难说是属于那个原子，而实际上是处于为各邻近原子乃至整个晶体所共有的状态。

这种现象称为电子的共有化。



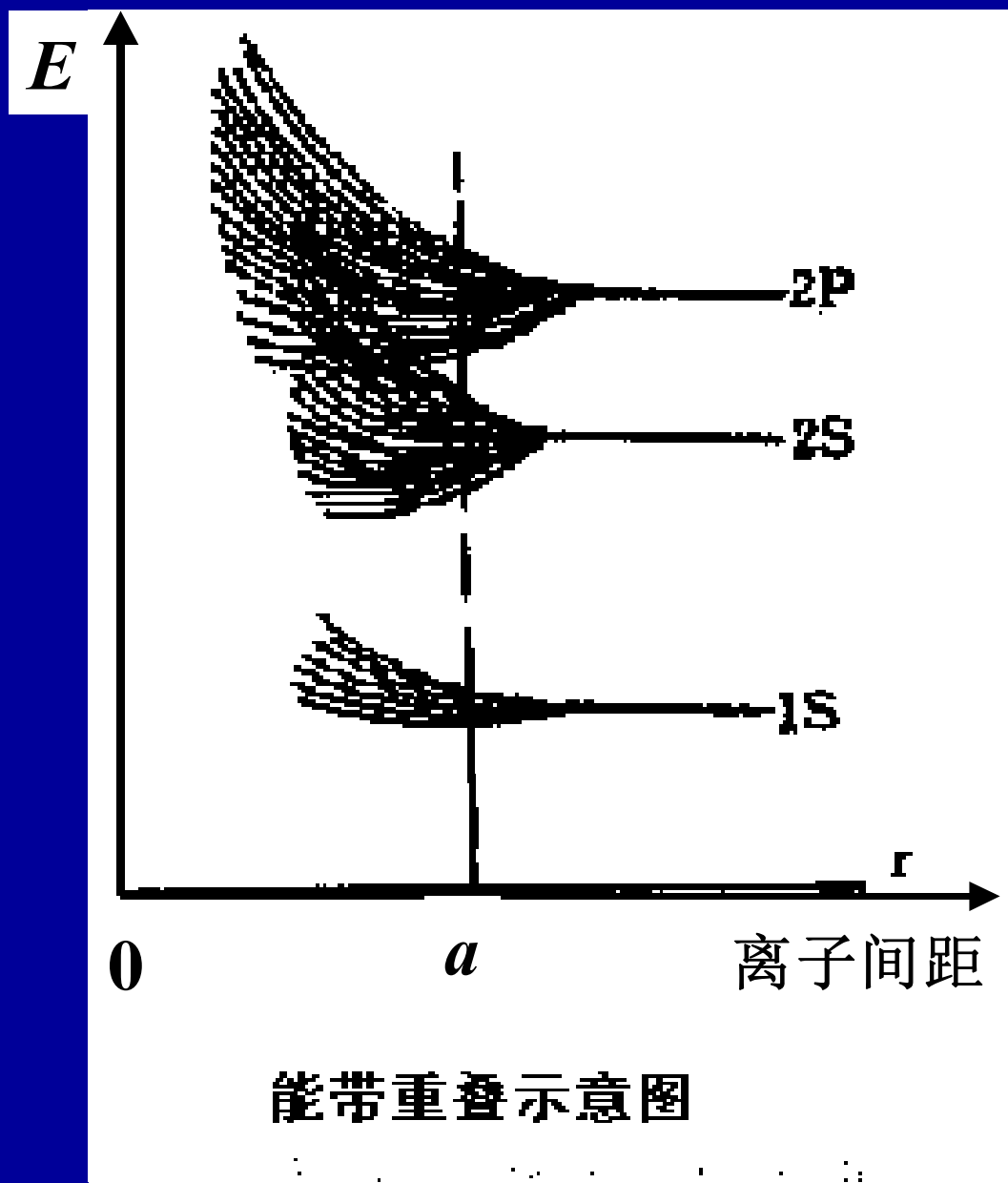
二. 能带的形成

设有 N 个原子结合成晶体，原来单个原子时处于 $1s$ 能级的 $2N$ 个电子现在属于整个原子系统(晶体)所共有。

根据泡利不相容原理，不能有两个或两个以上电子具有完全相同的量子态 (n, l, m_l, m_s) ，因而就不能再占有一个能级，而是分裂为 $2N$ 个微有不同的能级。

由于 N 是一个很大的数，这些能级相距很近，看起来几乎是连续的，从而形成一条有一定宽度 ΔE 的能带。







三.能带的分类

填满电子的能带称为**满带**。

未填满电子的能带称为**导带**。

没有电子填充的能带称为**空带**。显然空带也属导带。

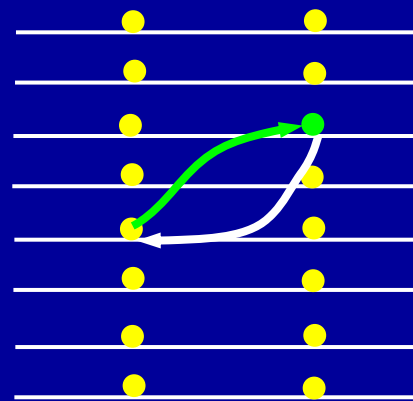
由价电子能级分裂而成的能带称为**价带**。

在能带之间没有可能的量子态的能量区域叫**禁带**。

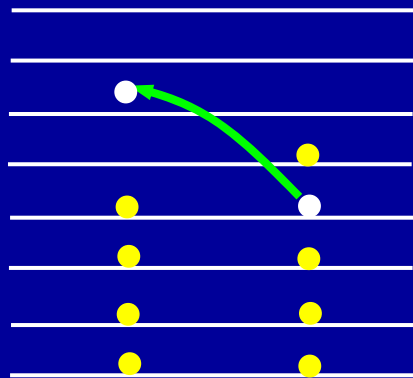


四. 电子在能带中的填充和运动

由于满带中所有能级都被电子占满，因此一个电子在外力作用下向其它能级转移时，必然伴随着相反方向的转移来抵消，所以**满带是不导电的**。



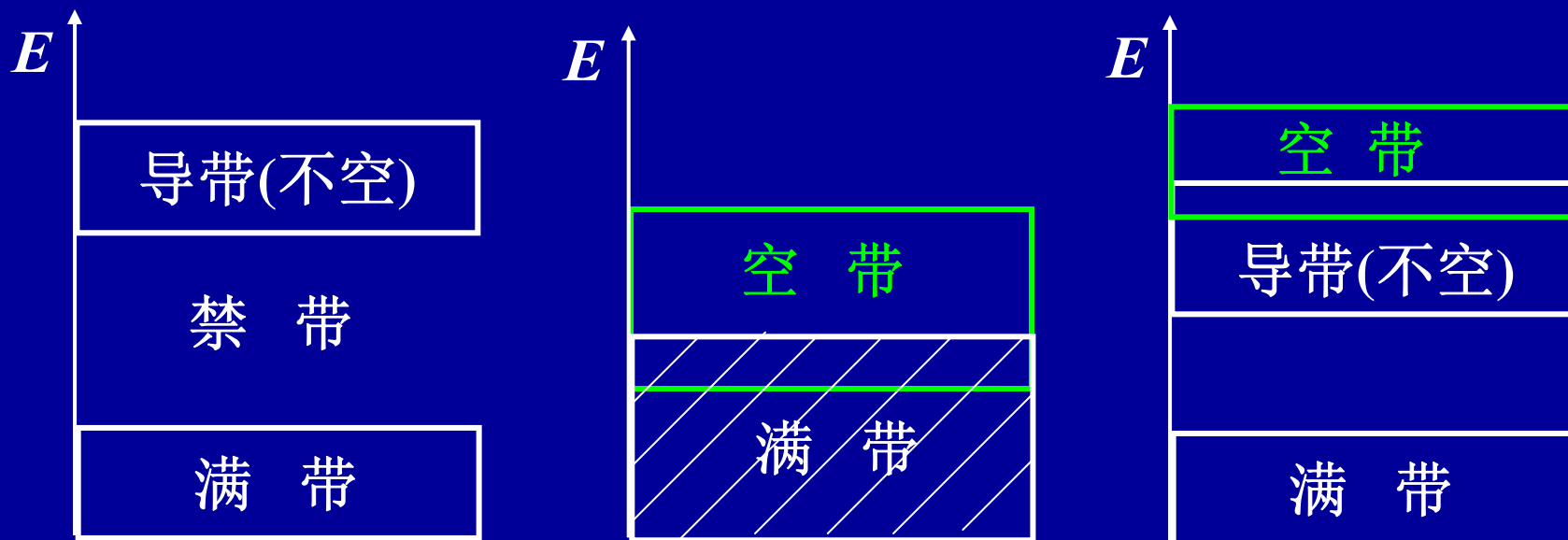
导带中的能级未被占满，一个电子在外力作用下向其它能级转移时，不一定有相反方向的转移来抵消，所以**导带具有导电作用**。





§18.3 导体 半导体 绝缘体的能带

一. 导体的能带

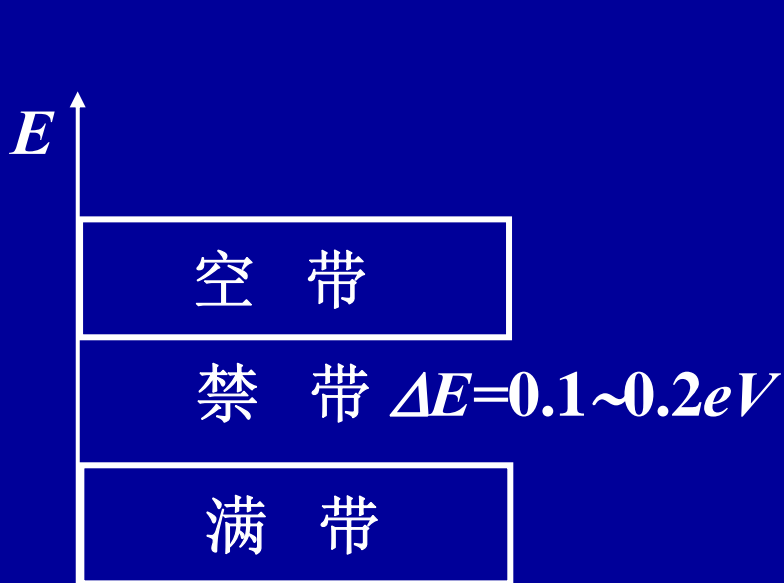


导体的能带特点：都具有一个未被电子填满的能带。

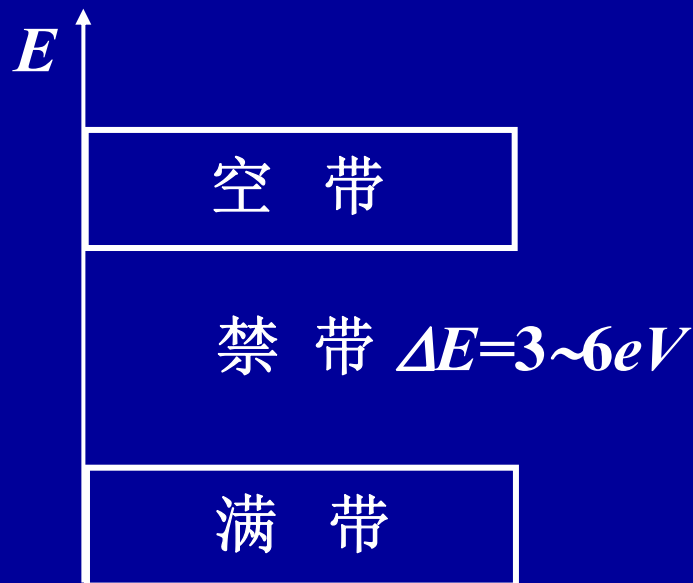
在外电场作用下，这些能带中的电子很容易从一个能级跃入另一个能级，从而形成电流，所以导体显示出很强的导电能力。



二. 半导体和绝缘体(电介质)的能带

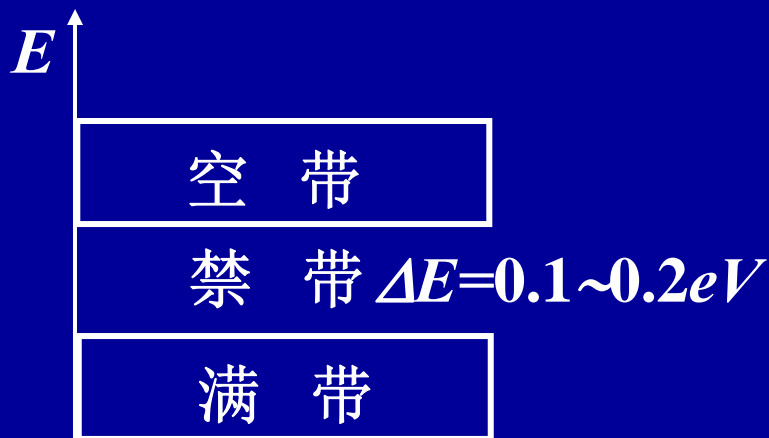


(a) 半导体的能带

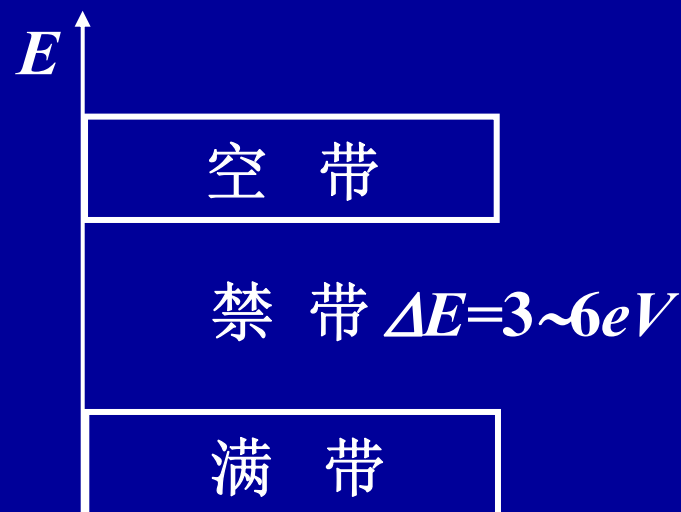


(b) 绝缘体的能带

从能带上看，半导体和绝缘体的能带没有本质区别：都具有填满电子的满带和隔离满带与空带的禁带。不同的是，半导体的禁带较窄，而绝缘体的禁带较宽。



(a) 半导体的能带



(b) 绝缘体的能带

绝缘体：一般的热激发、光照或外加电场不是特别强时，满带中的电子很少能被激发到空带中去，所以绝缘体有较大的电阻率，导电性极差。

半导体：在通常温度下，有较多的电子受到热激发从满带进入空带，不但进入空带的电子具有导电性能，而且满带中留下的**空穴**也具有**导电**性能。所以半导体的导电性虽不及导体但却比绝缘体好得多。



§ 18.4 半导体的导电机制

一. 本征半导体

由前可知，半导体禁带宽度较窄，通常温度下，满带的电子可能受激进入空带。进入空带的电子和留在满带中的空穴在外电场作用下都可导电。这种导电称为**本征导电**。

具有本征导电的半导体，称为**本征半导体**。

参与导电的电子和空穴统称本征**载流子**。



二.杂质半导体

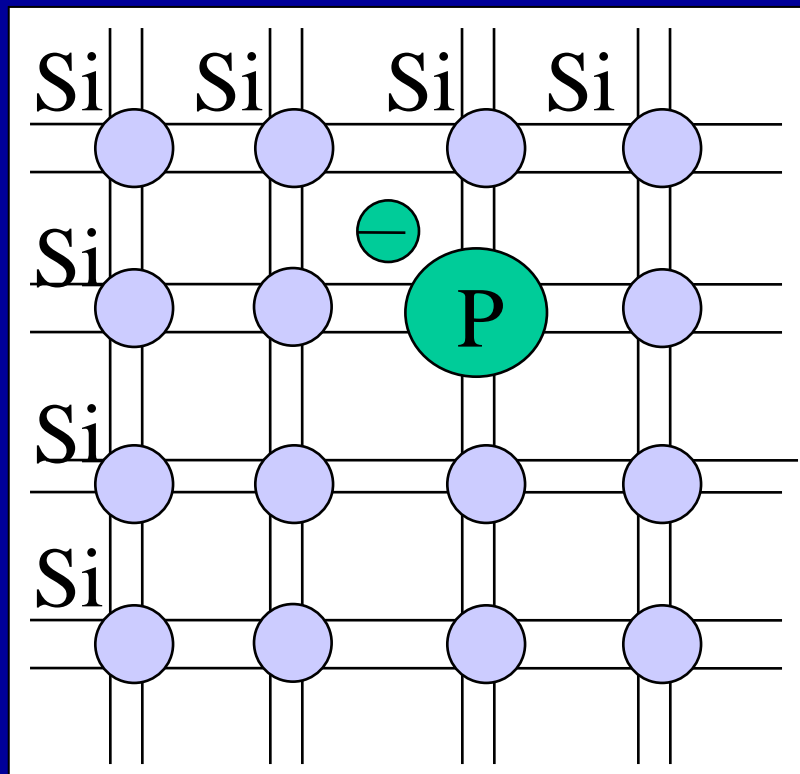
在纯净的半导体里，可以用扩散的方法掺入少量其他元素的原子(称为**杂质**)，掺有杂质的半导体称为**杂质半导体**。

杂质半导体的导电性能较之本征半导体有很大的改变。



1. n型半导体

在四价元素(硅或锗)半导体中，掺入少量五价元素磷(P)或砷(As)等杂质，可构成n型半导体，如图所示。

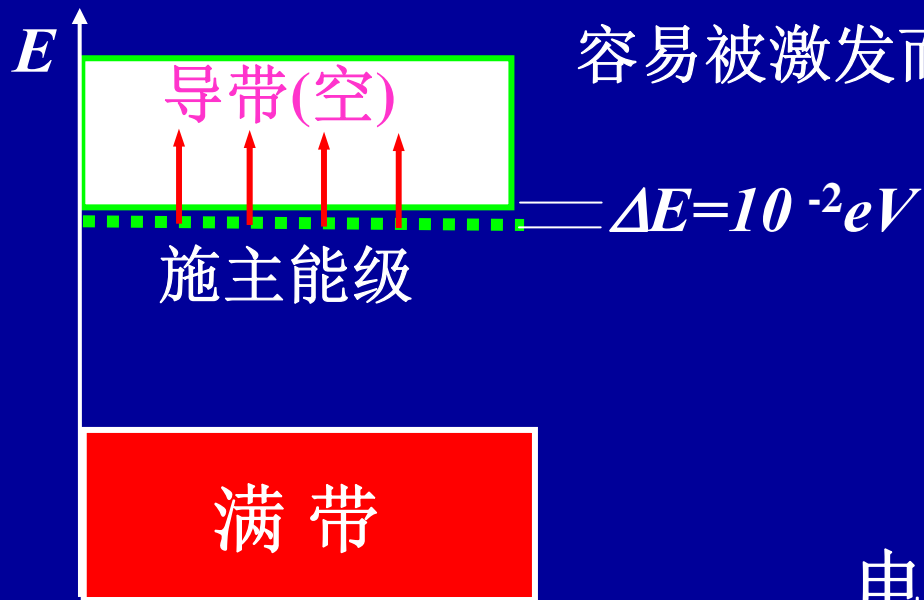


四价元素中掺入五价元素后，其中四个电子可以和邻近的硅原子或锗原子形成共价键，多余的一个电子成为自由电子。



n型半导体多余的这个价电子的能级在禁带中，并靠近导带的边缘，称为**施主能级**，如图所示。

施主能级与导带底部之间的能量差值很小，通常温度下，施主能级中的电子很容易被激发而跃迁到导带去。



大量**自由电子**的存在大大提高了半导体的导电性能。

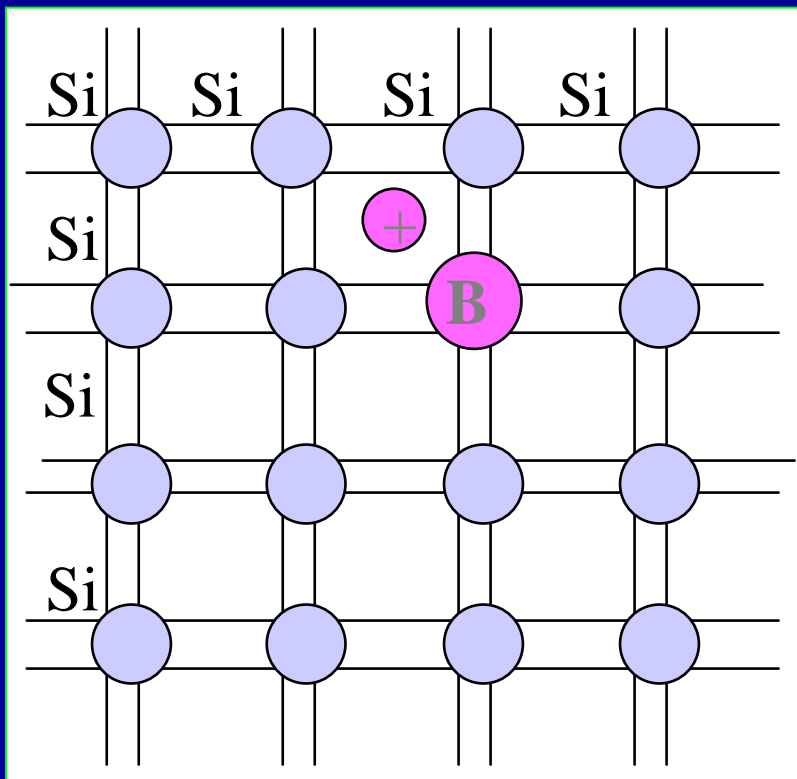
施主—不断向空带输送电子。容易看出，**n型半导体**的多数载流子是**电子**。

negative charge 负电荷



2. p型半导体

在四价元素(硅或锗)半导体中，掺入少量三价元素硼(B)、镓(Ga)等杂质，可构成p型半导体。如图所示。



这种杂质原子在代替晶体中硅或锗原子而构成共价键结构时，将缺少一个电子，这相当于增加一个可供电子填充的**空穴**。



这种空穴的能级出现在禁带中，并且靠近满带，称为**受主能级**，如图所示。

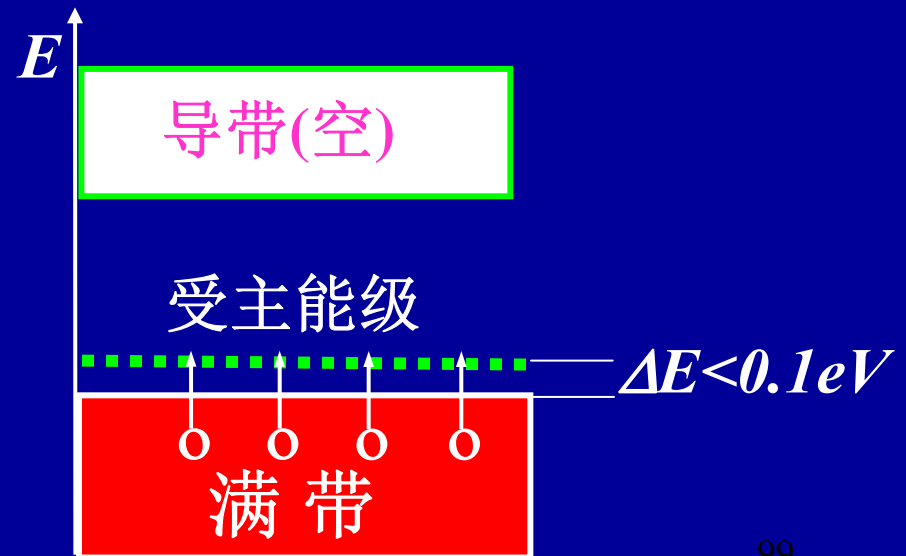
满带顶部与杂质能级之间的能量差值 $\Delta E < 0.1 eV$ 。在温度不很高的情况下，满带中的电子很易被激发到受主能级，同时在满带中形成空穴。

带正电的**空穴**移动是**导电**的。大量空穴的存在，使其导电性大大提高。

受主—收容从满带跃迁来的电子。

容易看出，**p型半导体**的多数载流子是**空穴**。

positive charge 正电荷





17章、18章总结

1.一切实物粒子也具有波粒二象性。

$$E=mc^2=h\nu$$

$$p=mv=\frac{h}{\lambda}$$

2.不确定关系

$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$



3.波函数的模的意义和标准条件

波函数模的平方 $|\Psi(x,y,z,t)|^2$ — 表示粒子在 t 时刻在 (x,y,z) 处的单位体积中出现的概率，即概率密度。

而 $|\Psi(x,y,z,t)|^2 dx dy dz$ — 表示粒子在 t 时刻在 (x,y,z) 处的体积元 $dx dy dz$ 中出现的概率。

波函数 Ψ 的标准条件应该是：

单值、有限、连续、归一。



4. 定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(x,y,z)+V\varphi(x,y,z)=E\varphi(x,y,z)$$

5. 一维无限深势阱

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$E_n = n^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right)$$

6. 量子力学对氢原子的描述(四个量子数)

$$E_n = -\frac{13.6\text{eV}}{n^2}$$

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

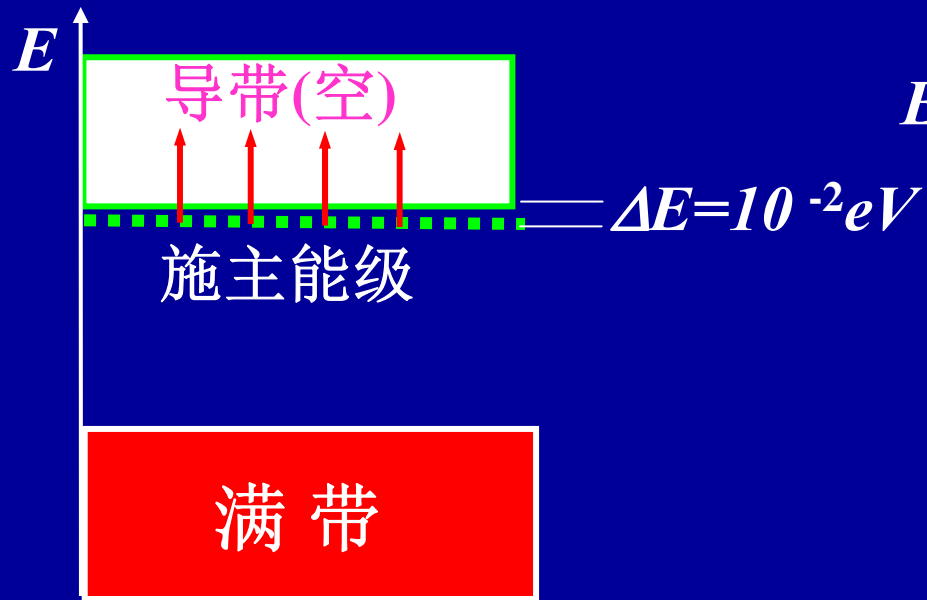
$$L_z = m_l \hbar$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$



7. n、p型半导体能带图

n型半导体



p型半导体

