

大学物理

College Physics

主讲

华中科技大学

刘超飞

● 氢原子的薛定谔方程

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \text{库伦势场}$$

$$\text{三维定态薛定谔方程: } \nabla^2 \psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi(r) = 0$$

球坐标系求解:

$$(1) \text{ 能量量子化: } E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

n : 主量子数

玻尔理论与量子力学结果一致。

(2) 角动量大小的量子化:

$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad l=0,1,2,\dots,n-1 \quad (\text{共 } n \text{ 个值})$$

l : 角量子数 无轨道可言

(3) 角动量的空间取向量子化

$$L_z = m_l \hbar \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

m_l 或者 m : 磁量子数

对一个确定的 l , m_l 有 $2l+1$ 个值

(4) 电子的波函数和概率分布:

$$\text{波函数: } \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \cdot \Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_m(\phi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi)$$

径向波函数与角向波函数

$$\rho_{nl}(r) = \frac{dW(r)}{dr} = r^2 |R_{nl}(r)|^2$$

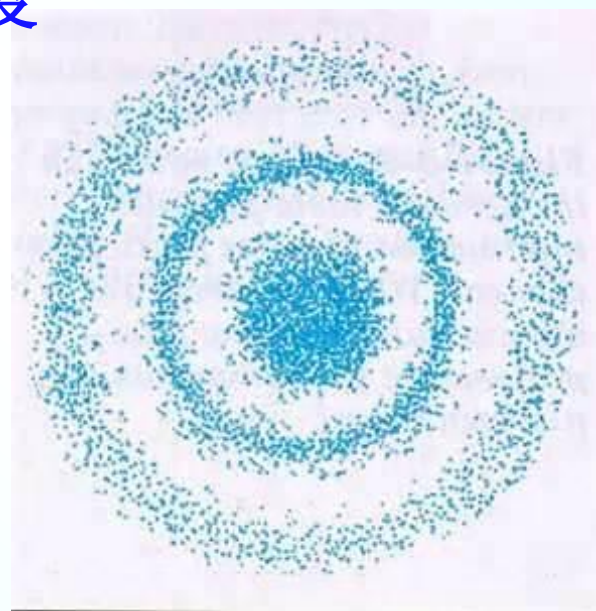
——径向概率密度

没有轨道的概念, 几率分布(电子云)

轨道半径: 玻尔理论 vs 量子力学

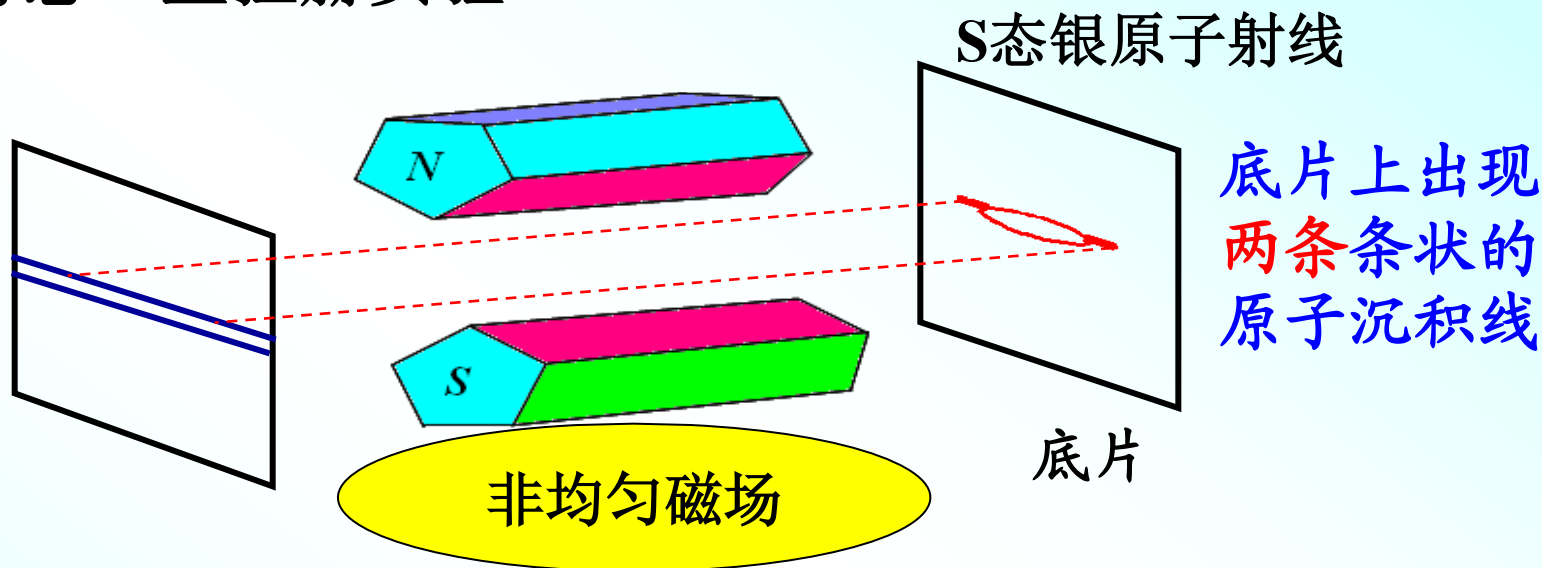
$$\rho_{lm}(\theta, \phi) = \frac{dW(\theta, \phi)}{d\Omega} = |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2$$

——角向概率密度



六、电子自旋

1. 斯特恩—盖拉赫实验



无外场作用时，原子射线将集结在与缝平行的直线上。
加上非均匀磁场，原子射线在观测屏分为上下两束！

⇒ 原子必然有磁矩！

原子轨道磁矩为 $\mu = \frac{e}{2m} L$

角动量 $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$

S态银原子射线 $l=0$

⇒ 原子轨道磁矩为0

还有什么磁矩？！！

2. 电子自旋

1925年, 不到25岁的年轻大学生乌伦贝克和高斯米特(荷兰)提出“**电子自旋**”的假说.

1) 电子除绕原子核旋转外, 还绕自身的轴旋转
——自旋

因此具有**自旋角动量**和**自旋磁矩**(\vec{L}_S , $\vec{\mu}_S$)

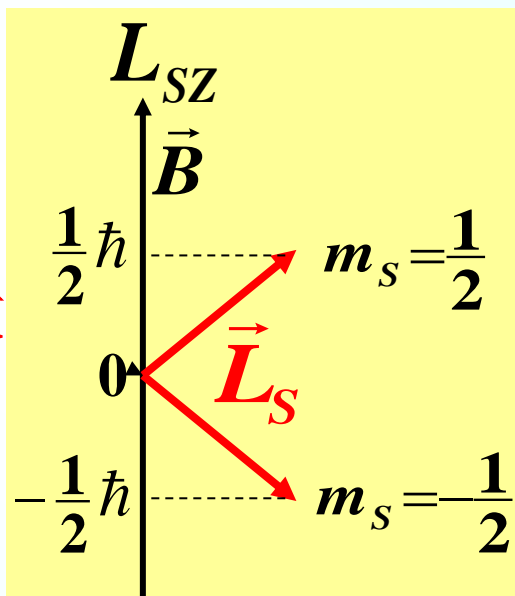
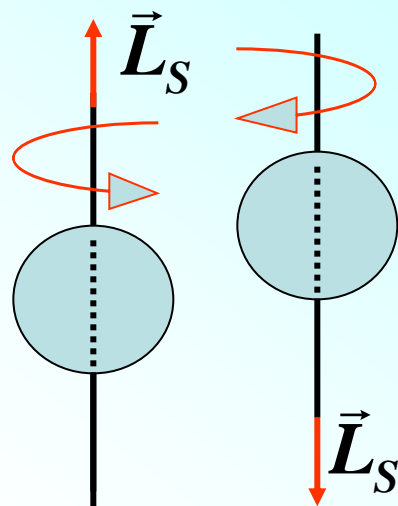
2) 每个电子的自旋角动量 L_S 是量子化的

$$L_S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad s = \frac{1}{2} \text{ — 自旋量子数}$$

其在空间取向也是量子化的,
且在空间某方向的投影只能取两个值:

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

不但电子有自旋, 中子、质子、光子等所有微观粒子都存在自旋, 只不过取值不同。



关于电子自旋的讨论：

电子自旋角动量大小为：

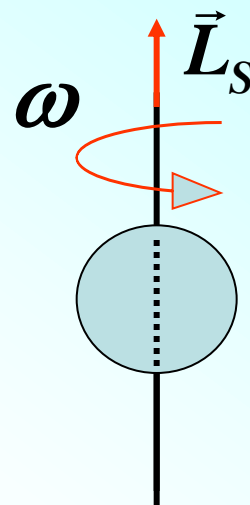
$$\left\{ \begin{array}{l} L_s = \sqrt{s(s+1)} \hbar \\ s = \frac{1}{2} \end{array} \right. \Rightarrow L_s = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

把电子视为质量均匀分布的球体，角动量为

$$\left\{ \begin{array}{l} L_s = J\omega \\ J = \frac{2}{5} m R^2 \\ \omega = v / R \end{array} \right. \Rightarrow v = \frac{5}{2} \frac{L_s}{m R}$$

$$\begin{aligned} \text{而电子半径：} R &\sim 10^{-15} \text{ m} \\ \Rightarrow v &\sim 10^{11} \text{ m/s} \gg 10^8 \text{ m/s} \end{aligned}$$

电子表面旋转速度将超过光速！



所以只能解释为：自旋是内秉角动量！

自旋和静质量、电荷等一样，是微观粒子的固有属性。

总结前面的讨论：

原子中电子的状态应由四个量子数来决定

n —主量子数	$n = 1, 2, \dots$	$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$
l —角量子数	$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$	$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$
m_l —轨道磁量子数	$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$	$L_z = m_l \hbar$
m_s —自旋磁量子数	$m_s = \pm 1/2$	$L_{sz} = m_s \hbar$

无论是单电子原子，还是多电子原子，每一组量子数
(n, l, m_l, m_s) 将决定电子的一个状态。

电子的波函数： $\psi_{n,l,m_l,m_s} = R_{nl}(r) \cdot \Theta_{lm_l}(\theta) \cdot \Phi_{m_l}(\phi) \cdot \chi_{m_s}$

或： $\psi_{n,l,m_l,m_s} = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\theta, \phi) \cdot \chi_{m_s}$

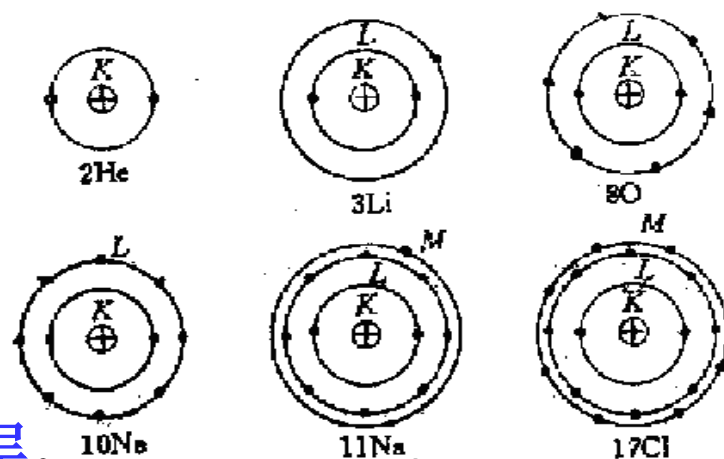
电子自旋波函数

七、原子的壳层结构

在**含有多个电子的原子**中, 每个电子在受到核的作用的同时还受到其他电子的作用(复杂运动)。

电子的状态仍由四个量子数决定, 但电子能量不仅与 n 有关, 还与 l 有关。

1916年, **W. Kossel**提出多电子原子中核外电子按壳层分布的形象化模型



主量子数 n 相同的电子组成一个**主壳层**,

对应于 $n = 1, 2, 3, 4, 5 \dots$,

分别用大写字母**K, L, M, N, O, P, ...** 等表示;

在每一主壳层内, 又按角量子数 l 分为若干**支壳层**,

$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ 的支壳层分别用小写字母**s, p, d, f, g, h, ...** 表示

氢原子内电子的状态

	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$
	s	p	d	f	g	h
$n = 1$	$1s$					
$n = 2$	$2s$	$2p$				
$n = 3$	$3s$	$3p$	$3d$			
$n = 4$	$4s$	$4p$	$4d$	$4f$		
$n = 5$	$5s$	$5p$	$5d$	$5f$	$5g$	
$n = 6$	$6s$	$6p$	$6d$	$6f$	$6g$	$6h$

●在光谱学中，谱线的命名与角量子数有关，相应于一定角动量的线系都赋予一定的名字，如对于跃迁 $h\nu = E_2 - E_1$

E_1 的角量子数 $l = 0$ 的谱线称为锐线系 s —— sharp

E_1 $l = 1$ 主线系 p —— principal

E_1 $l = 2$ 漫线系 d —— diffuse

E_1 $l = 3$ 基线系 f —— fundamental

● 对于确定的 n 和 l ，用 nl 表示，如 $1s, 2s, 2p, \dots$;

● 当一个原子的每个电子组态 n 和 l 均被指定后，则称该原子具有一定的电子组态，例如：

Cu: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

八、基态原子的核外电子排布服从的规律

1 泡利不相容原理

问题：原子中的电子可以分布在不同的壳层上，
每一主壳层和支壳层上能容纳多少电子呢？

泡利不相容原理：

1925年，泡利提出：

在一个原子中，**不可能**有两个或两个以上的电子具有**完全相同**的量子态。

即：原子中的任何两个电子不可能有完全相同的一组量子数
(n, l, m_l, m_s)。

泡利



1945年诺贝尔
物理学奖

每一壳层上容纳的电子数:

- 对于每一支壳层, 对应的量子数为 n, l , 它们的磁量子数 $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$, 共有 $(2l+1)$ 种可能值
- 对于每一个 m_l 值又有两种自旋量子数 $m_s = \pm 1$

⇒ 在同一支壳层上(同一个 l)可容纳的电子数为:

$$2(2l+1)$$

- 对于某一主壳层 n , 角量子数可取 $l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$, 共 n 种可能值

⇒ 主壳层 n 上可容纳的电子数为:
$$N_n = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$

每一壳层上容纳的电子数：

主壳层 n 上可容纳的电子数为： $N_n = 2n^2$

支壳层上(同一个 l)可容纳的电子数： $2\ 2l + 1$

		0	1	2	3	4	5	6	N_n
		s	p	d	f	g	h	i	
1	K	2							2
2	L	2	6						8
3	M	2	6	10					18
4	N	2	6	10	14				32
5	O	2	6	10	14	18			50
6	P	2	6	10	14	18	22		72
7	Q	2	6	10	14	18	22	26	98

例题：试确定基态氦原子中电子的量子数。
 (n, l, m_l, m_s)

解：氦原子有两个电子。

这两个电子正好填满**1s**态，即 $n=1, l=0$ ，因而 $m_l=0$ 。

根据泡利不相容原理，这两个电子的量子数不能完全相同，所以它们的自旋量子数分别为 $m_s = +1/2$ 和 $-1/2$ 。

因此基态氦原子中两个电子的四个量子数分别为 $(1, 0, 0, 1/2)$ 和 $(1, 0, 0, -1/2)$ 。

2.能量最小原理

原子系统处于正常状态时，每个电子趋向占据未被填充的最低能级。

- 1) 主量子数 n 越低，离核越近的壳层首先被电子填满。
- 2) 能级也与副量子数有关，有时 n 较小的壳层未充满， n 较大的壳层上却有电子填入。

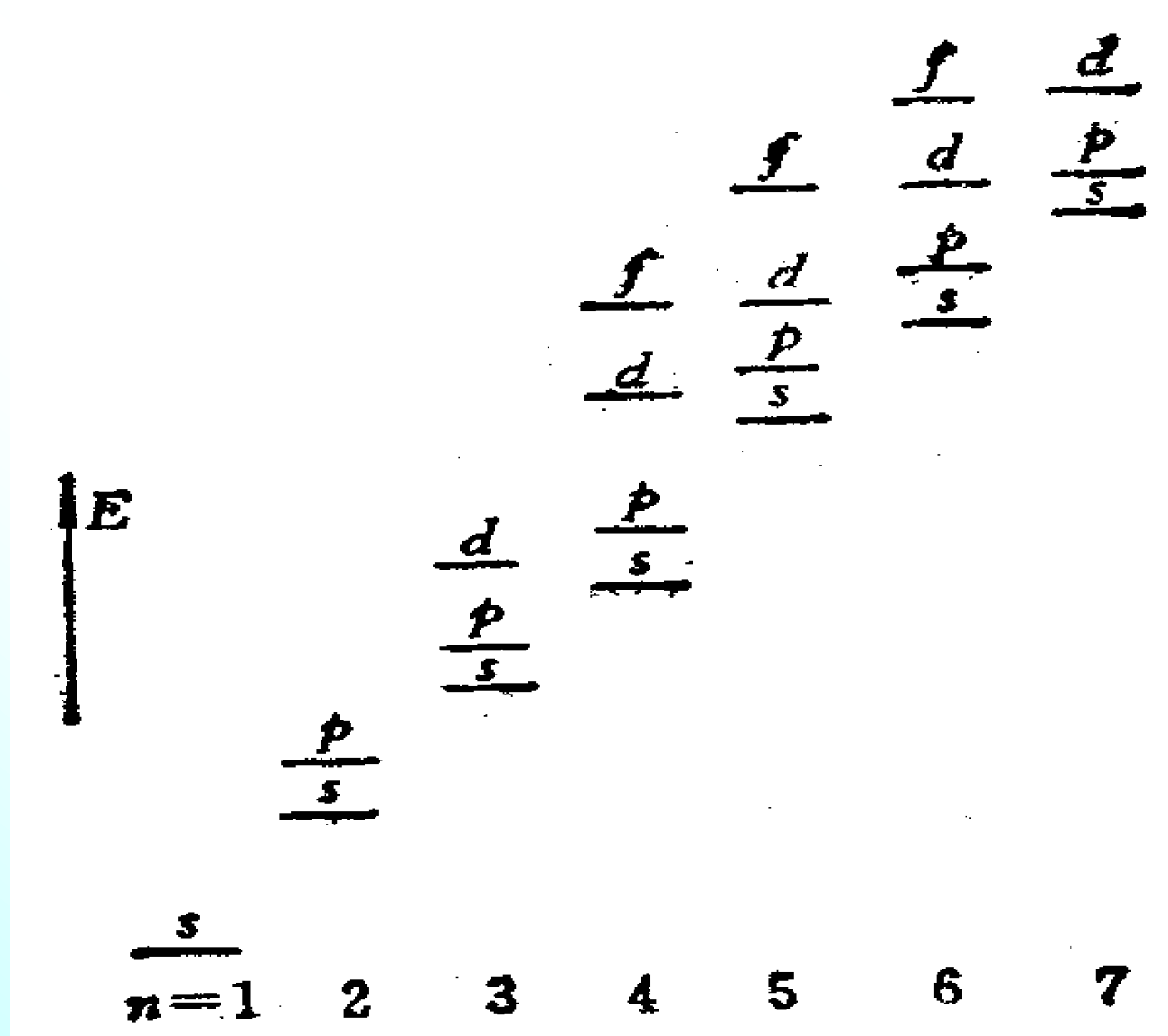
能级的高低由 $n + 0.7l$ 判定。

(徐光宪—经验公式)

例：比较 $4s$ 和 $3d$ 状态

$$\begin{cases} 4s \Rightarrow (n + 0.7l) = (4 + 0.7 \times 0) = 4 \\ 3d \Rightarrow (3 + 0.7 \times 2) = 4.4 \end{cases}$$

\therefore 电子先进入 $4s$ 态

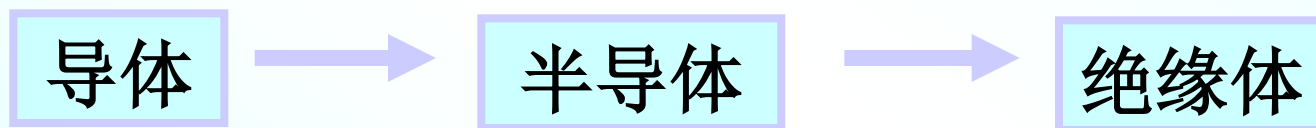


能级结构图

第16章 半导体与激光简介

一、半导体的基本概念

固体按导电性能的高低可以分为



半导体的电阻率介于导体和绝缘体之间。

其电学性能可用能带理论解释。

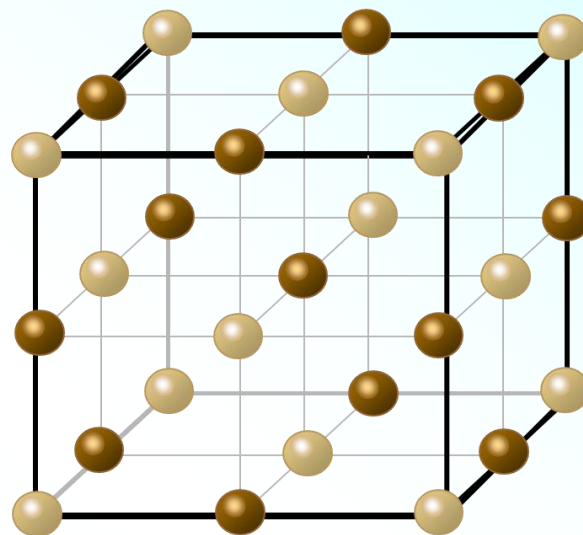
1. 固体的能带

a. 固体的晶格结构

固体(晶体)是具有大量分子、原子或离子的有规则排列的点阵结构。

在晶体中，电子受到周期性势场的作用。

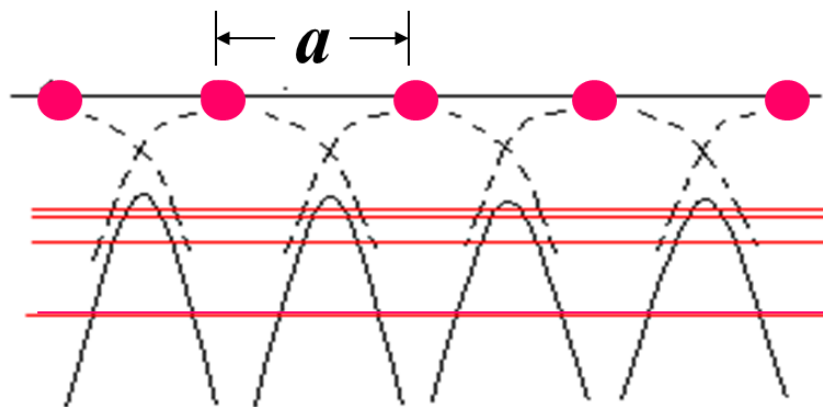
晶体中原子相互影响，形成周期性势垒



氯化钠晶体

● 氯离子
 Cl^+

● 钠离子
 Na^-



b. 共有化电子

● 求解定态薛定谔方程，可以得出两个重要结论：

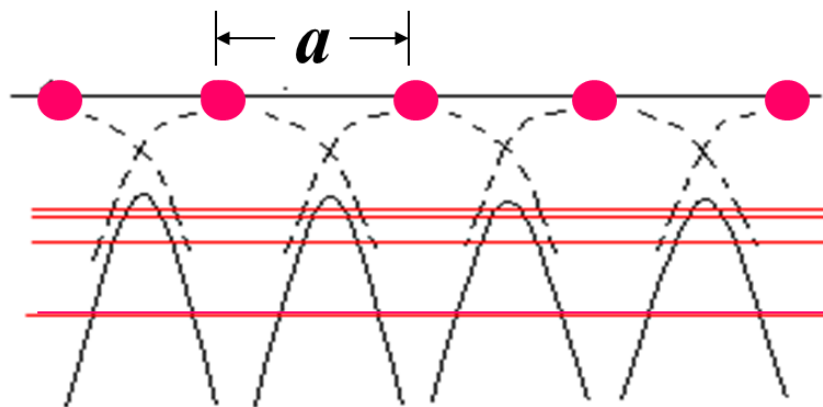
1. 电子的能量是量子化的；

2. 电子的运动有隧道效应。

对于原子的外层电子(高能级电子)，其势垒宽度较小，穿透概率较大。

这些电子不再局限于一个原子，可以在整个固体中运动，称为共有化电子。

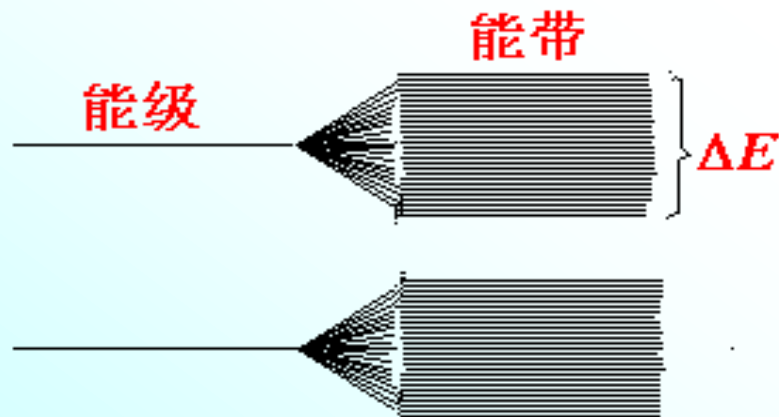
原子的内层电子与原子核结合较紧，一般不是共有化电子。



c. 能带

固体中的电子能级有什么特点？

量子力学计算表明，固体中若有 N 个原子，由于各原子间的相互作用，对应于原来孤立原子的每一个能级，变成了 N 条靠得很近的能级，称为**能带**。



能带的宽度记作 ΔE ，
数量级为 $\Delta E \sim \text{eV}$ 。

d. 能带中电子的排布

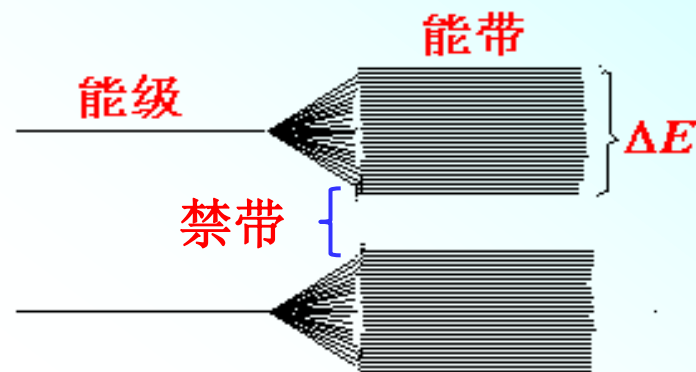
固体中的一个电子只能处在某个能带中的某一能级上。

排布原则： $\left\{ \begin{array}{l} 1. \text{服从泡里不相容原理（费米子）} \\ 2. \text{服从能量最小原理} \end{array} \right.$

电子排布时，从最低的能级排起，占据能带中的位置。

有关能带被占据情况的几个名词：

1. 满带（排满电子）
2. 价带（能带中一部分能级排满电子）——亦称导带
3. 空带（未排电子）——亦称导带
4. 禁带（不能排电子）



作业： 15 —T15-T16

作业要求

1. 独立完成作业。
2. 图和公式要有必要的标注或文字说明。
3. 作业纸上每次都要写姓名以及学号(或学号末两位)。
4. 课代表收作业后按学号排序，并装入透明文件袋。
5. 每周二交上周的作业。迟交不改。
6. 作业缺交三分之一及以上者综合成绩按零分计。