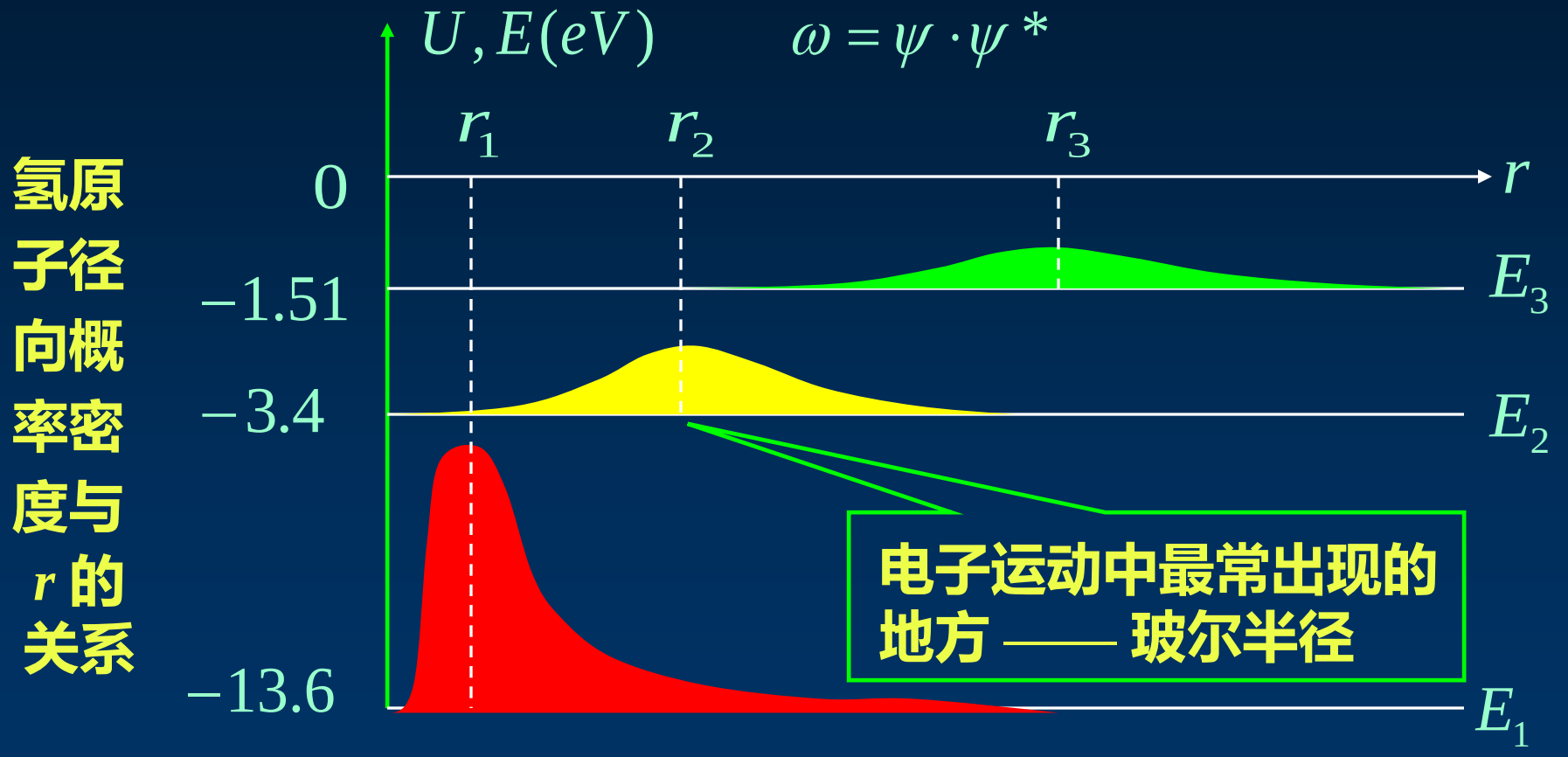
5. 电子云 (Electron cloud)

电子在核周围无固定点，只能用各处出现的概率说明电子运动状态，故用电子云的密度形象地显示概率密度。



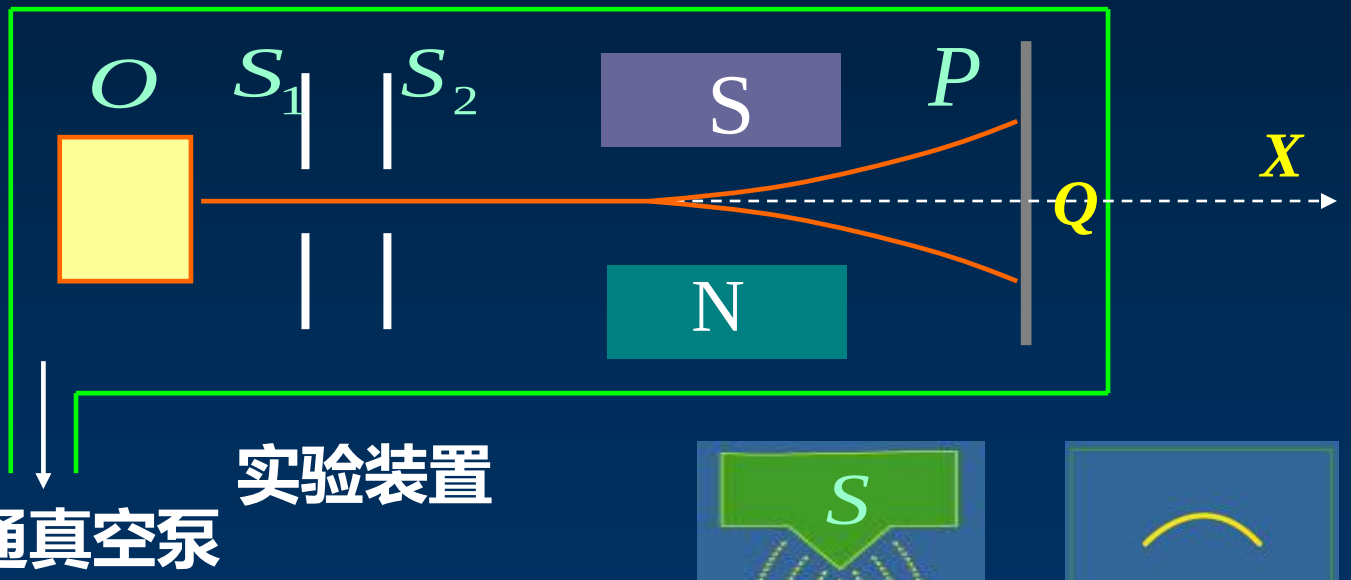
由波函数可求出氢原子的径向概率密度的表达式，其分布极大值出现在 $r_1 = 0.529\,A^0, r_2 = 4r_1, r_3 = 9r_1 \cdots$

16-9 电子自旋 四个量子数

外力场中运动的规律主要反映粒子位置变动 ⇒ 与经典粒子对比，微观粒子还可能有绕自转轴的自旋

一、斯特恩 — 盖拉赫实验（Stern - Gerlach）

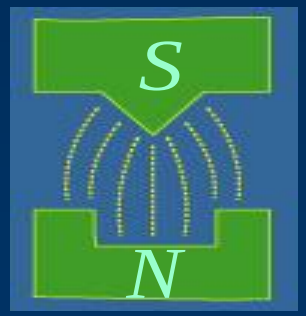
银原子射线产生，经过准直狭缝 S，到达接收屏 P。

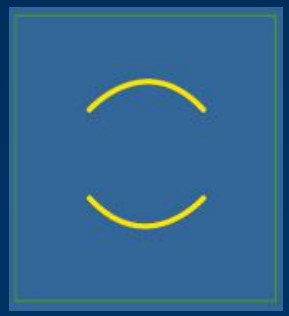


实验结果：

1 无外磁场时，银原子不受外力作用，直接到达屏上 Q 点。

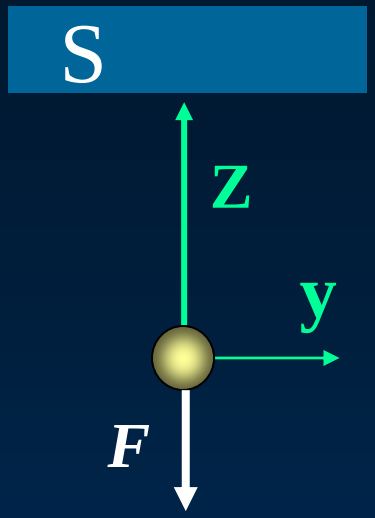
2 加外磁场后，银原子束在屏上记录有两条不连续的痕迹。





○ 若角动量不是空间量子化，可取任意方向，则原子沉积在底片上是连续的。

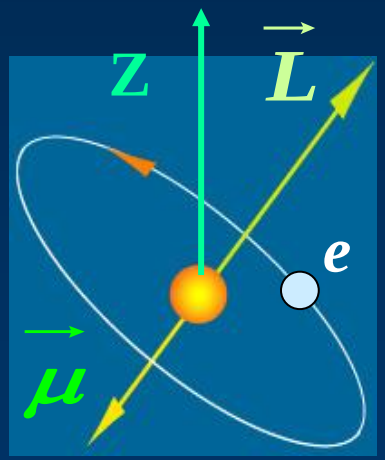
○ 若角动量具有空间量子化，则在底片上会出现分立的原子沉积线。



遇到困难： 银原子磁矩 $\vec{\mu} = -\dfrac{e}{2m_e}\vec{L}$

$$W = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} \qquad F_z = -\frac{\partial W}{\partial z} = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$$

基态 Ag 原子的磁矩等于最外层价电子的磁矩，其 μ_Z 取$(2l+1)$个值，则 F 可取$(2l+1)$个值，原子沉积线条数应为奇数$(2l+1)$，而不应是两条。



◎实验观察到的磁矩 μ_Z 是由价电子自旋产生的，且 μ_Z 取 2 个值。

二、电子自旋

乌伦贝克（G.E.Uhlenbeck）和高德斯密特（S.A.Goudsmit ）

1925年 提出电子自旋假设:

电子存在有一种内在运动，使之具有动量矩和磁矩。

S —— 自旋角动量

s —— 自旋角量子数

$$S=\sqrt{s(s+1)}\hbar \quad \Leftrightarrow \quad s=\frac{1}{2}$$

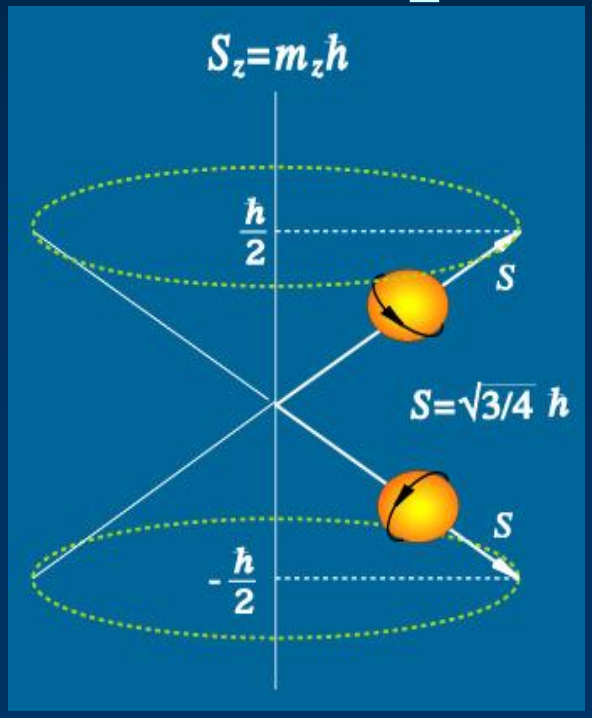
电子自旋在外场方向投影:

$$S_z=m_s\hbar \qquad m_s:2s+1$$

结论：电子的自旋角动量： $S=\sqrt{3/4}\hbar$

$$m_s=\pm\frac{1}{2} \Rightarrow S_z=\pm\frac{1}{2}\hbar$$

电子自旋磁矩： $\vec{\mu}_s=-e/m\,\vec{S}$



三、决定电子运动状态的四个量子数

(1) **主量子数** $n(=1,2,3,\cdots\cdots)$

它决定原子系统中电子的能量

(2) **副量子数** $l\ (=0,1,2,3,\cdots,n-1)$ $L=\sqrt{l(l+1)}\hbar$

它决定原子系统中电子的轨道角动量，对能量也有稍许影响

(3) **磁量子数** $m_l\ (=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l)$ $L_z=m_l\hbar$

它决定电子轨道角动量L 在外磁场中的空间取向

(4) **自旋磁量子数** $m_s\ (=\pm1/2)$ $S_z=m_s\hbar$

它决定电子自旋角动量在外磁场中的空间取向

氢原子是最简单的原子，核外只有一个电子，随着原子序数的增加，核外电子数也增加，使问题变得很复杂，即使核外只有两个电子的原子He也无法精确求解。

1916年，柯塞尔提出多电子原子中核外电子按壳层分布的形象化模型。他认为：

1. 主量子数n相同的电子，组成一个主壳层。

$n = 1$、 2、 3、 4、 5、 6

K、L、M、N、O、P

2. 在一个主壳层n内，又按副量子数l分为若干个子壳层。显然主量子数为n的主壳层中包含有n个子壳层。

$l = 0$、 1、 2、 3、 4、 5

s、p、d、f、g、h

一、泡利不相容原理

在一个原子中不能有两个或两个以上的电子处在完全相同的量子态，即一个原子中任何两个电子都不可能具有一组完全相同的量子数 n, l, m_l, m_s

例如，

$$n=1 \Rightarrow l=0 \Rightarrow m_l=0 \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} m_s=1/2 \\ m_s=-1/2 \end{array}\right\} 2$$

$$n=2 \left\{\begin{array}{l} l=0 \quad m_l=0 \Rightarrow m_s=\pm 1/2 \\ l=1 \left\{\begin{array}{l} m_l=1 \\ m_l=0 \\ m_l=-1 \end{array}\right. \end{array}\right\} 8 \quad \text{各自有：} m_s=\pm 1/2$$

推论：对主量子数为 *n*，最多可容纳量子态数：

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



W. Pauli

The Nobel Prize in Physics 1945

"for the discovery of the Exclusion Principle, also called the Pauli Principle".

This principle was needed for the quantum-mechanical explanation of the electronic structure and chemical properties of atoms.

二. 能量最小原理

原子处于正常状态时，其中每个电子都要占据最低能级。

主量子数 n → 决定 → 能级高低 ← 影响 ← 角量子数 l

		1*s*	2*s*	2*p*	3*s*	3*p*	3*d*	4*s*
1 氢	H	1						
2 氦	He	2						
3 锂	Li	2	1					
4 铍	Be	2	2					
5 硼	B	2	2	1				
6 碳	C	2	2	2				
10 氖	Ne	2	2	6				
13 铝	Al	2	2	6	2	1		
14 硅	Si	2	2	6	2	2		
18 氩	Ar	2	2	6	2	6		
19 钾	K	2	2	6	2	6		1
20 钙	Ca	2	2	6	2	6		2
21 钪	Sc	2	2	6	2	6	1	2

$$D = n + 0.7\,l$$

4*s* 能级低于 3*d* 能级

部分原子的电子排列

三. 全同粒子

1、全同粒子

全同粒子：所有固有（内禀）性质（静止质量、电荷、寿命、自旋、同位旋、内禀磁矩等）完全相同的微观粒子

例如：金属的电子、氢原子的电子和氦原子的电子等。
不论电子处于何种物质中，在什么地方，内禀性质都一样，故所有电子是全同粒子。
而质子和中子、正负电子等，内禀性质不完全相同，它们不是全同粒子。

2、全同粒子的不可区分性（不可分辨性）

1、量子理论中，微观粒子的运动状态用波函数描述，没有确定的轨道，是不可区分的。
2、两个全同粒子可用两个波函数来表示。
3、在运动过程中，两个波函数会在空间中发生重叠，在此区域内无法区分这两个粒子。只有当波函数完全不重叠时，才可区分。

3、全同粒子的全同性原理 ← 不可区分性

全同性原理：全同粒子组成的体系中，任意**交换**两个全同粒子，体系的物理状态**保持不变**。

全同粒子组成的系统必须考虑这种不可区分性。
体系波函数具有确定的交换对称性！

以两个粒子组成的系统为例：

设粒子 1、2 均可分别处在状态 A 或 B，相应波函数分别为 $\psi_A(1)$、$\psi_A(2)$、$\psi_B(1)$、$\psi_B(2)$；系统的波函数为 $\psi(1,2)$

由于粒子不可分辨，应有：$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2$

即：$\psi(1,2) = \pm\psi(2,1)$

$\psi(1,2) = \psi(2,1)$ — 波函数对称

$\psi(1,2) = -\psi(2,1)$ — 波函数反对称

$\psi(1,2)$ 应该和 ψ_A 及 ψ_B 是什么关系呢?

由波函数的概率解释，ψ 应是 ψ_A 和 ψ_B 相乘，但是这样得不到反对称的波函数。

为此需要把 ψ_A 和 ψ_B 的乘积进行如下组合：

$$\psi(1,2) = C\left[\psi_A(1)\psi_B(2) - \psi_A(2)\psi_B(1)\right]$$ （反对称）

$$\psi(1,2) = C\left[\psi_A(1)\psi_B(2) + \psi_A(2)\psi_B(1)\right]$$ （对称）

常量 C 是归一化因子。

结论： 描述全同粒子体系的波函数只能是对称或反对称的。如果体系在某一时刻处于对称状态，则它将永远处于对称状态；如果体系在某一时刻处于反对称状态，则它将永远处于反对称状态。

4、费米子和玻色子

微观全同粒子体系的波函数可按交换对称分为两类（迄今为止，无发现例外），即：

（1）交换对称；（2）交换反对称。

（a）凡角动量的自旋量子数是 1/2 或 1/2 奇数倍的粒子组成的全同粒子体系，波函数具有交换反对称性，服从费米-狄拉克统计，这类粒子称为**费米子**。 **满足泡利不相容原理**

如，电子、质子、中子等。

（b）凡角动量的自旋量子数为整数的粒子组成的全同粒子体系，波函数具有交换对称性，服从玻色-爱因斯坦统计，这类粒子称为**玻色子**。 **不满足泡利不相容原理**

如光子 ($s = 1$) 、处于基态的氦原子($s = 0$)、α 粒子 ($s = 0$)

第17章　激光、固体能带基础

17-1 激光

谱线 —— 研究典型原子、分子以及内部微观结构

经典光源：强度不够、谱线太宽、频率固定不可调等。

⇒

激光：高功率、高亮度，单色性、高度指向性、偏振性和频率可调等。

一、激光器原理

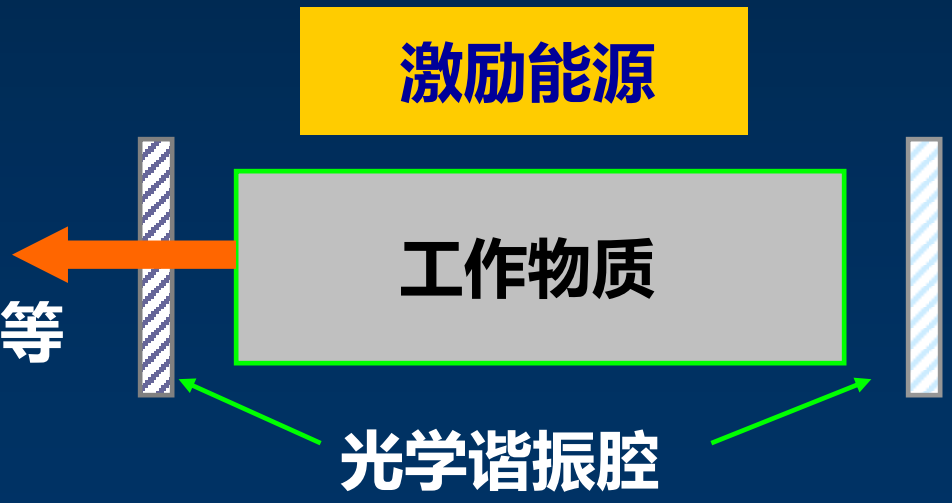
1. 激光器的基本组成

2. 激光器的种类

固体、气体、半导体、染料等

$\lambda: 0.24\mu m \sim 774\mu m$

$P: 10^{-6} \sim 10^{15} W$



激光

▲ 进一步揭示物质的微观结构

△ 揭示物理、化学、生物等宏观现象的微观动力学过程

★ 发展各种特殊效能的光谱技术

二、原子在能级上的分布

通常温度下，原子分布遵守玻耳兹曼分布定律

$$N_n \propto exp(-\frac{E_n}{kT})$$

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp(-\frac{E_2 - E_1}{kT})$$

以氢原子体系为例:

$$T = 300K \Rightarrow \frac{N_2}{N_1} = exp(-\frac{E_2 - E_1}{kT}) = e^{-395} \approx 10^{-171}$$

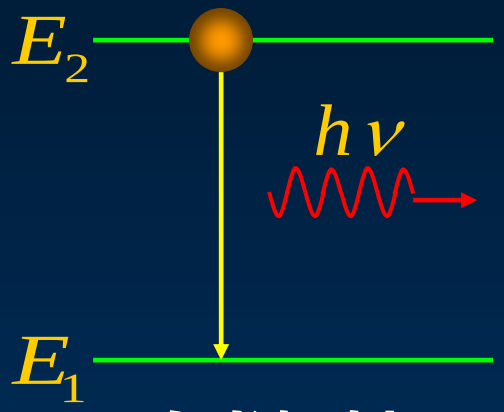
在常温下，体系原子几乎全部处于基态

$$T = 6000K \Rightarrow \frac{N_2}{N_1} = e^{-19.8} \approx 10^{-9}$$

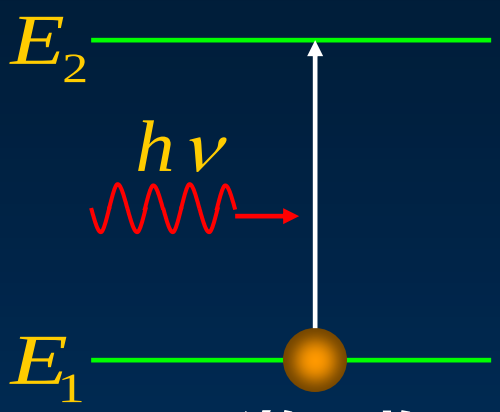
在高温时，绝大部分原子还是处于基态

三、自发辐射、受激吸收和受激发射

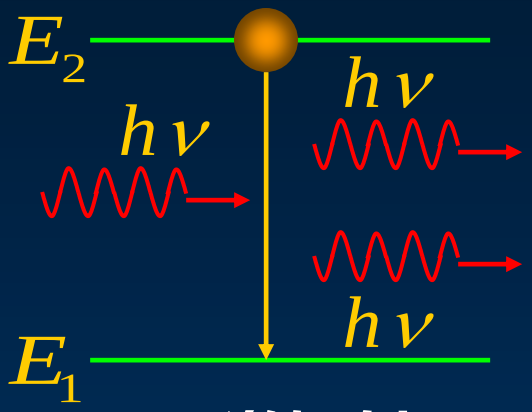
1916年，A.Einstein 提出三种原子跃迁：



自发辐射



受激吸收



受激辐射

讨论：

1. 自发辐射是一种随机过程，自发辐射是一种无序辐射。
2. 受激辐射是一种较有序的辐射，所产生的光具有很好的相干性。

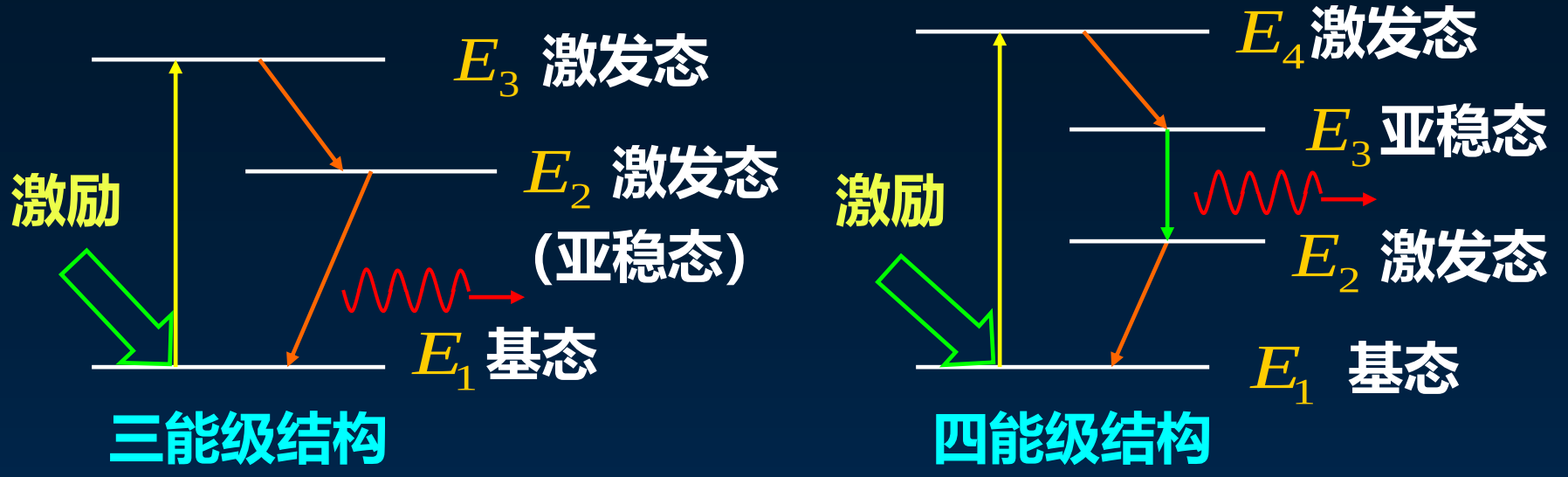
四、粒子数反转（Population inversion）

★ 产生粒子数反转的物质 —— 激活物质

$N_2 << N_1$

$N_2 > N_1$





★ **激励的方法** —— 光激励，电子碰撞，共振转移

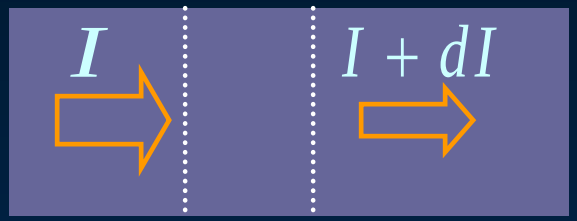
例：*He-Ne*（80%:20%） 激光器中粒子数反转及工作原理



五、光在物质中的增益

设一束光入射介质

光的吸收



$I = I_0 e^{-\alpha x}$



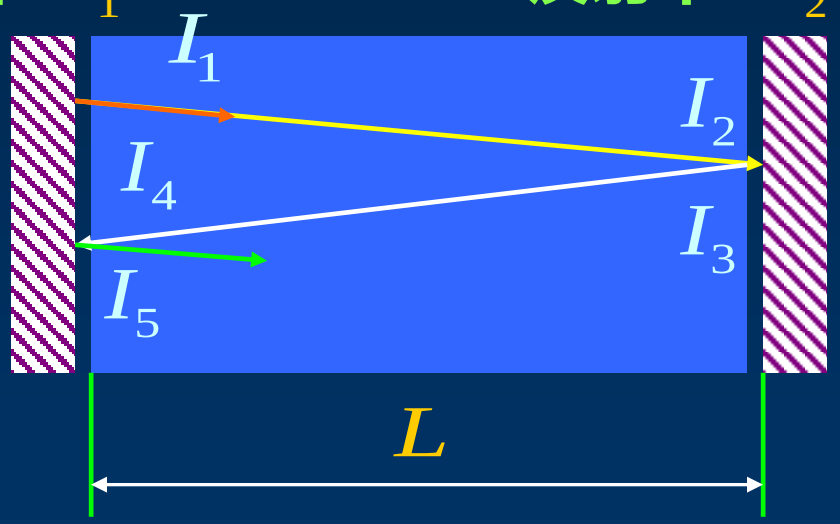
光的放大

$I = I_0 e^{Gx}$

六、光学谐振腔

介质增益← →光的损耗

- 激光的阈值条件



$I_1 \Rightarrow I_2 = I_1 e^{GL}$

$I_3 = R_2 I_2 \Rightarrow I_4 = I_3 e^{GL}$

$I_4 \Rightarrow I_5 = R_1 I_4$

$$I_5 = R_1 R_2 I_1 e^{2GL}$$

增益大于损耗

$$\frac{I_5}{I_1} = R_1 R_2 e^{2GL}$$

- > 1 光放大，光在谐振腔内增强
- $= 1$ 光强维持不变
- < 1 光减弱

阈值增益系数

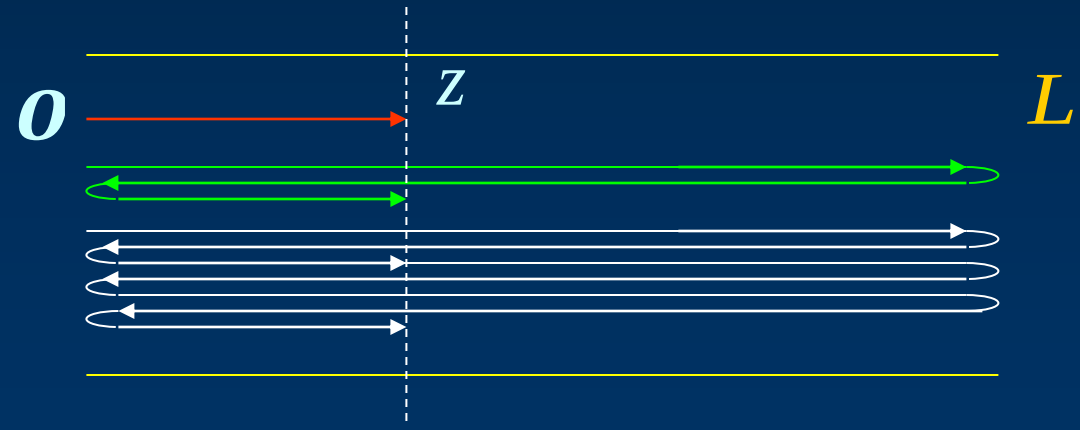
若 $G > G_m$ 可能使

$$R_1 R_2 e^{2GL} > 1 \Rightarrow G_m = \frac{1}{2L}\ln\frac{1}{R_1 R_2} = -\frac{\ln R_1 R_2}{2L}$$

☆ 要形成激光，必须满足**两个条件**：1. 有能实现粒子数反转的激活介质。这是前提条件；2. 有满足阈值条件的谐振腔。

七、激光的纵模与横模

激光的纵模

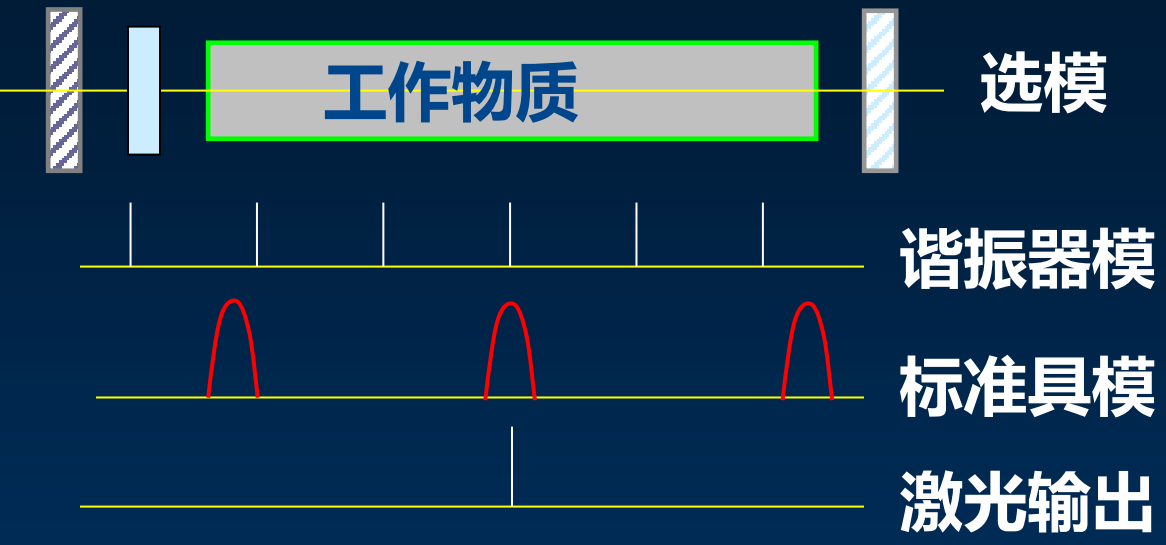


腔内允许存的波长为 $2nL = N\lambda$

$$\lambda_N = \frac{2nL}{N} \qquad \nu_N = \frac{Nc}{2nL}$$

将由整数N所表征的腔内纵向场分布称为腔的纵模。

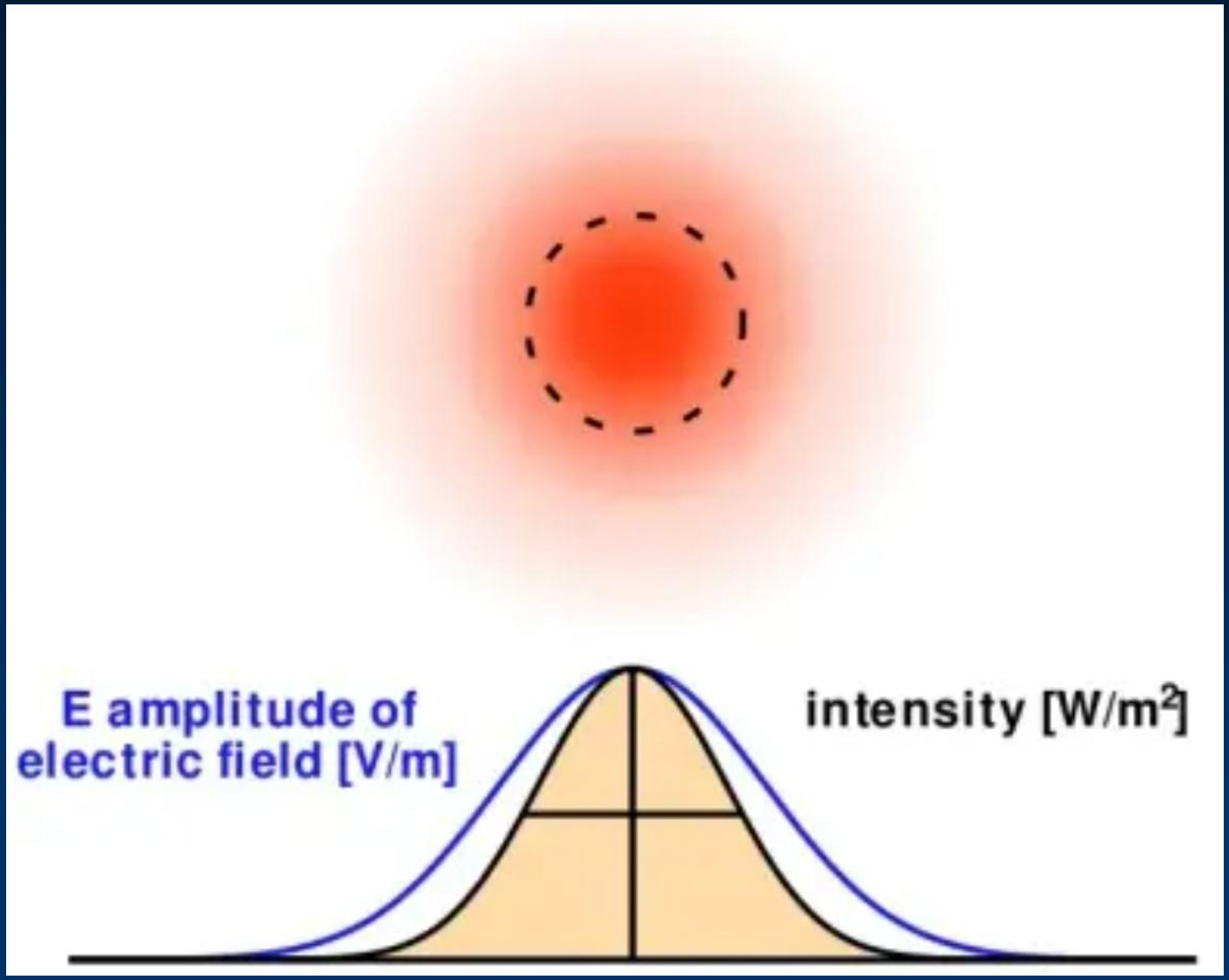
相邻纵模间频率间隔 $\Delta\nu_N = \dfrac{c}{2nL}$ ⇒ 纵模数 $N = \dfrac{\Delta\nu}{\Delta\nu_N}$



激光的横模

激光束在横截面上光强的分布呈现一系列有规则的图样，称为激光的横模。

横模描述的是激光光斑上的能量分布情况，横模可以从激光束横截面上的光强分布看出来。如图，高斯光束的截面光强分布曲线，中心高，辐向减小，满足高斯分布。



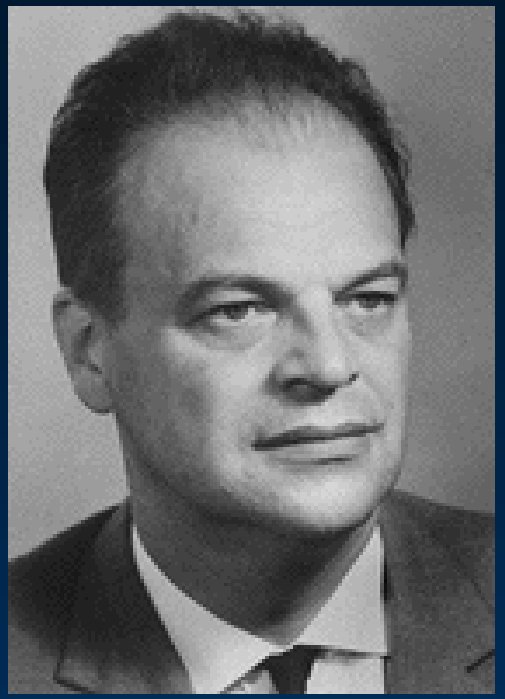
The Nobel Prize in Physics 1964



C.H.Townes



A.M.Prokhorov

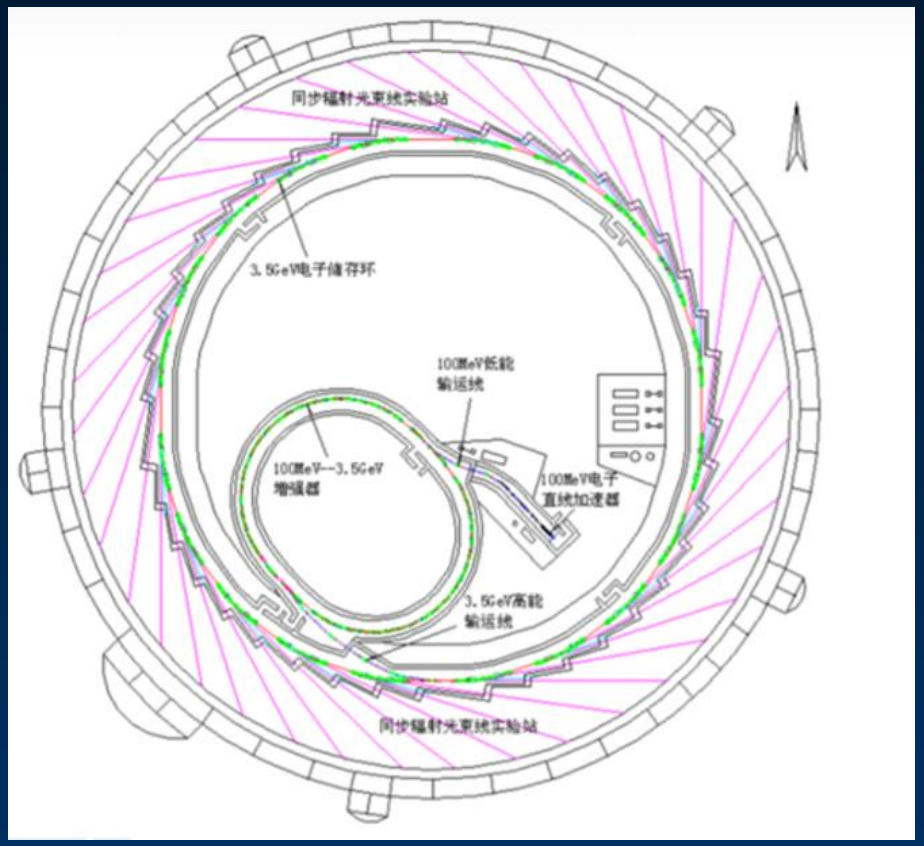


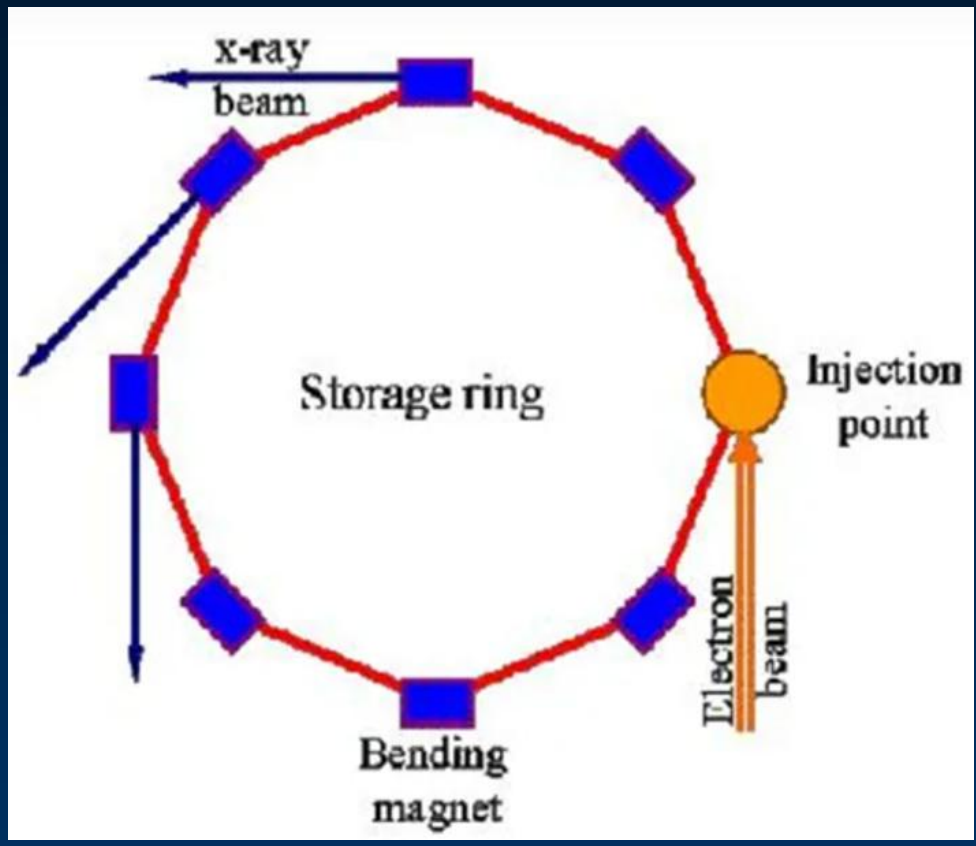
N.G.Basov

汤斯1954年在量子电子学研究中实现了氨分子的粒子数反转，研制了微波激射器和激光器；普罗霍洛夫和巴索夫1958年几乎同时在量子电子学的基础研究中，根据微波激射器和激光器原理研制了振荡器和放大器。以上工作导致了激光器的发明。

1960年T.H.梅曼等人制成了第一台红宝石激光器。1961年A.贾文等人制成了氦氖激光器。1962年R.N.霍耳等人创制了砷化镓半导体激光器。近来还发展了自由电子激光器，大功率激光器通常都是脉冲式输出。

同步辐射原理：速度接近光速的带电粒子在电磁场中做偏转运动时，沿运动轨迹的切线方向会发出电磁辐射。





上海同步辐射光源（SSRF）设计图　　储存环示意图

自由电子激光（FEL）:电子加速器产生的相对论性（近光速）电子束团在周期性磁场中震荡产生的相干辐射。



A.L.Schawlow



N.Bloembergen

肖洛将激光应用于光谱学的研究，由此发展了激光光谱学的新学科，对激光的应用做了许多开拓领域的工作；布洛姆伯根开创了非线性光学，在科学研究和实际应用上具有重要意义。

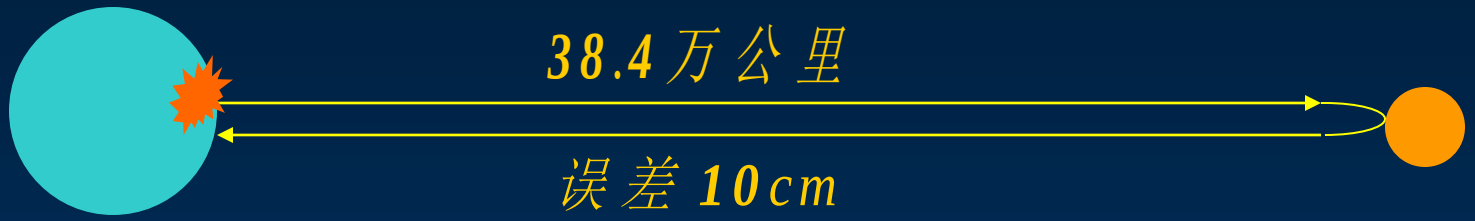
The Nobel Prize in Physics 1981

八、激光的特性与应用：

1. 方向性好　　发散角< $10^{-3}rad$

与普通光源相比，发散角极小，激光几乎是平行光束。

可用于定位，准直，导向，测距、激光雷达等。



2. 能量在空间高度集中

激光器的输出端面上有极高的亮度。

红宝石激光器输出功率：$10^{9}W/cm^{2}$，是太阳亮度几百亿倍！

可用于精密加工，医学治疗，核聚变控制等。

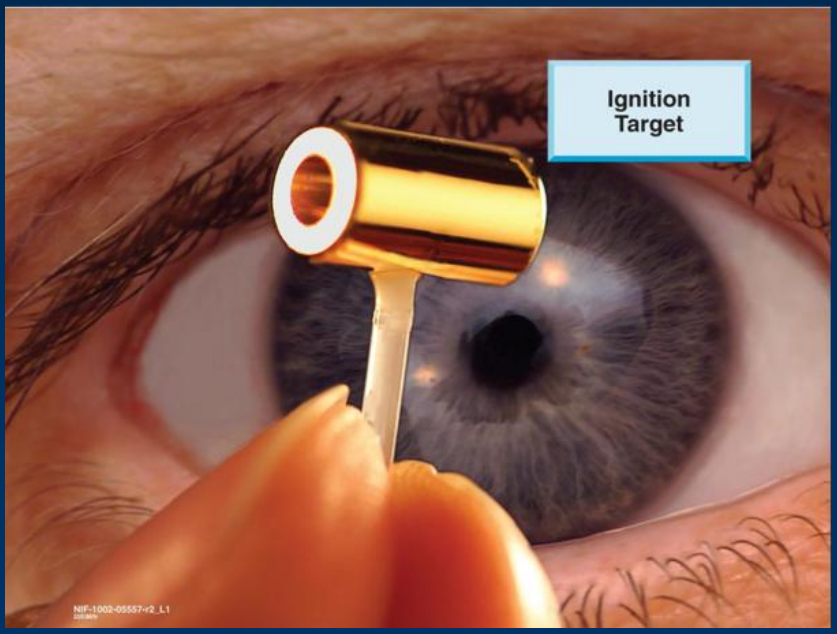
3. 单色性好

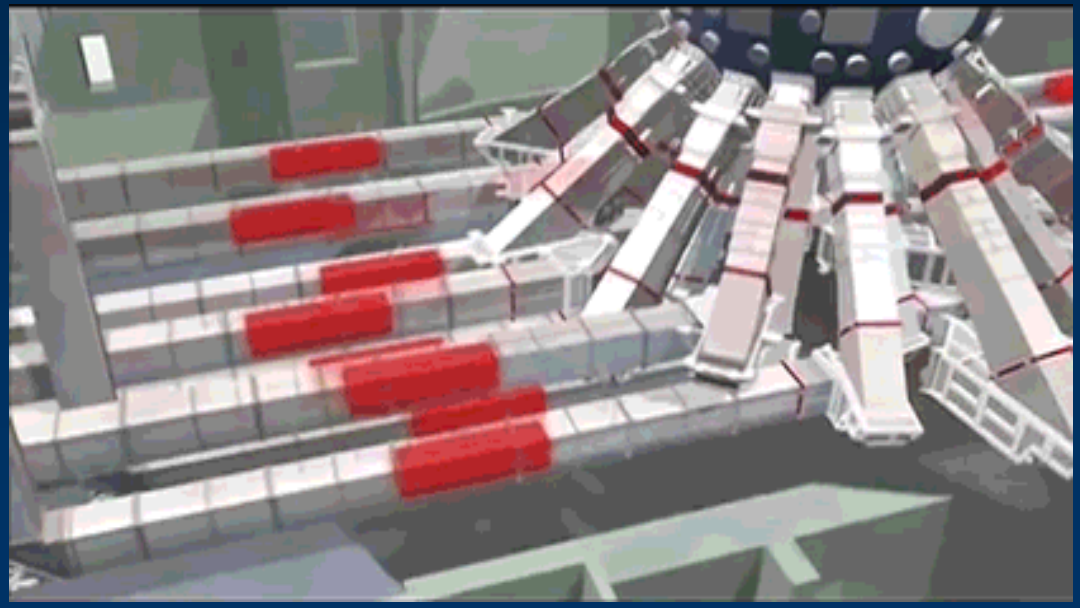
普通光谱中氪同位素86灯的单色性最好，$\Delta\lambda = 4.7\times10^{-13}m$

氦－氖激光器的单色性为　$\Delta\lambda < 10^{-17}m$


Target
Chamber
NIF-0501-02172
X2235


Target
Chamber
Interior
NIF-0506-12157


Ignition
Target



- 2012年首发试验获得聚变能约**20kJ**
- 直到2021年获得的聚变能约**54kJ**
- **2021年8月获得聚变能1.38MJ**
- **2022年12月：2.05MJ→3.15MJ，能量增益达到1.5倍**

这一结果使惯性约束聚变研究向前迈出了历史性的一步，为我们关键的国家安全任务的探索和推进开辟了一个全新的体系。这也证明了这个团队以及几十年来坚定追求这一目标的许多研究人员的创新、创造力、承诺和勇气——Kim Budil

ICF研究取得了巨大进展，同时面临着诸多挑战：

核心问题

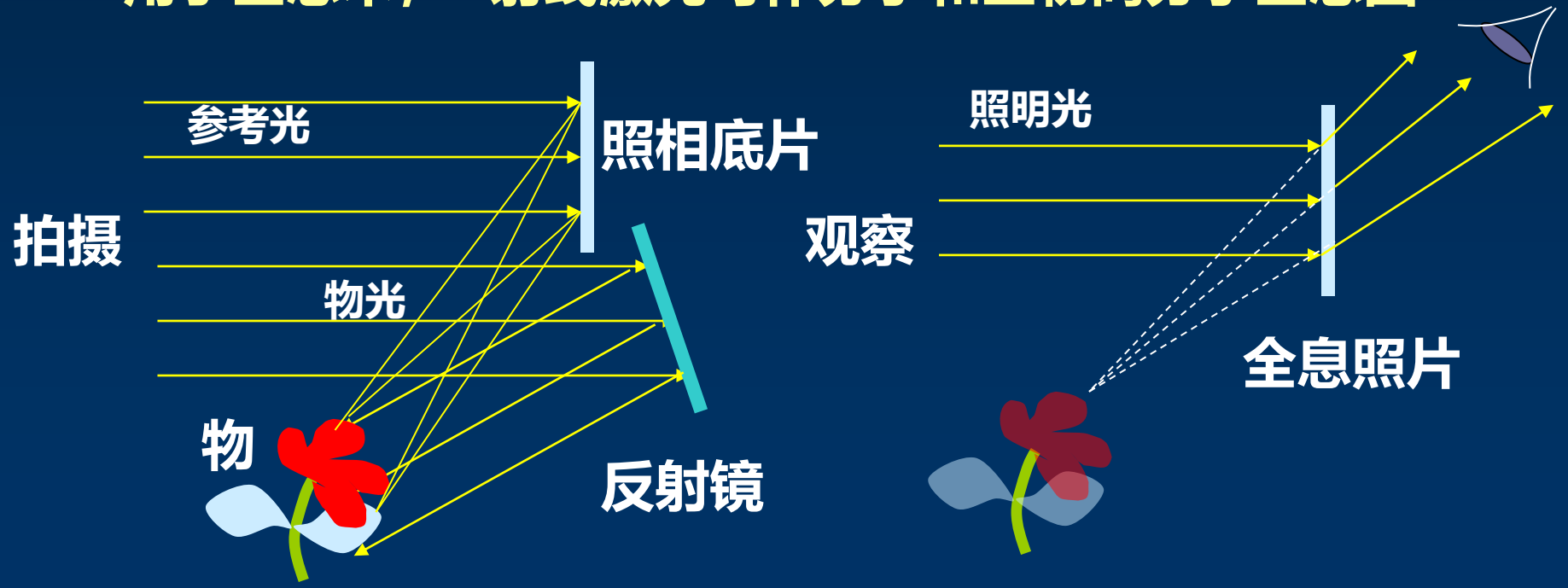
- 高能量密度物态的产生、调控及其宏观性质
- 辐射或粒子与等离子体的相互作用微观机制
- 基于高精度实验数据的物理建模和参数选取

激光谱线分辨率高，用于研究原子、分子、晶体等的能级和光谱精细结构，超精细结构等。

4. 相干性好

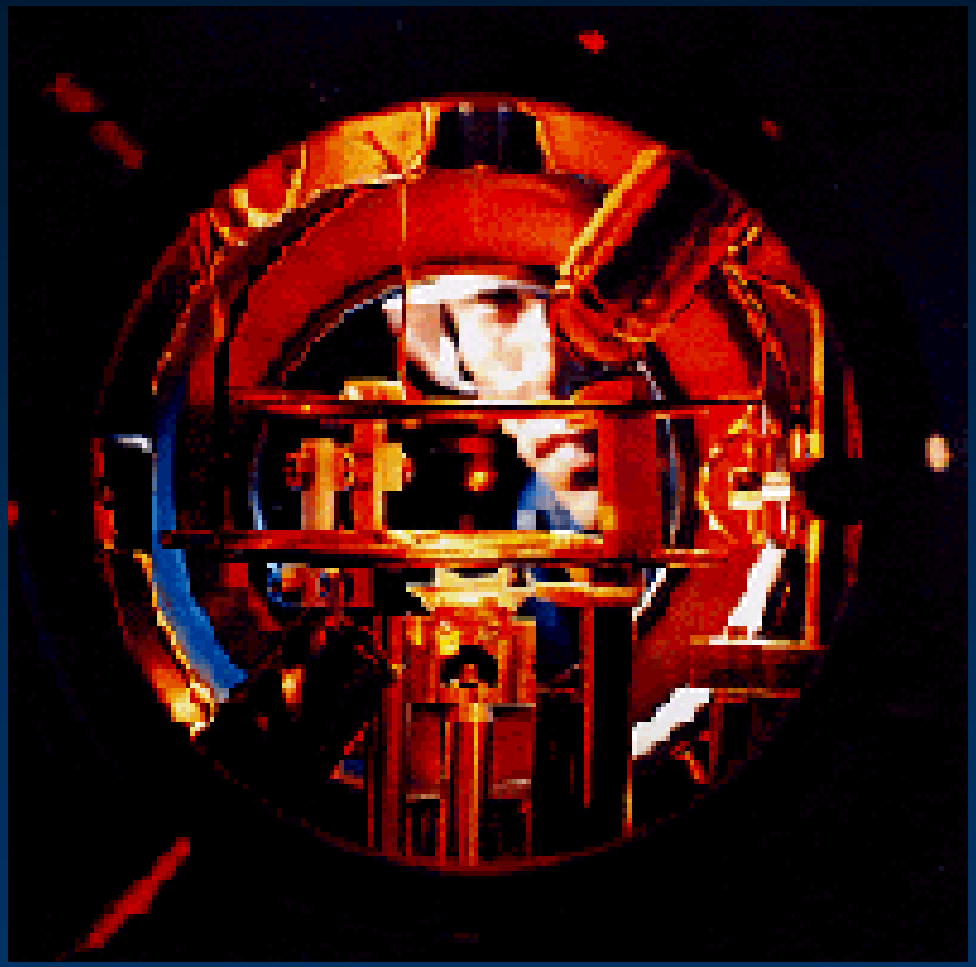
受激辐射输出的是**频率、偏振和传播方向相同的全同光子**。当全同光束相遇，有很好的相干性，产生的干涉条纹非常清晰。

用于全息术，X射线激光可作分子和生物高分子全息图



The Nobel Prize in Physics 1997





"For development of methods to cool and trap atoms with laser light"

The Nobel Prize in Physics 1997



Stephen Chu

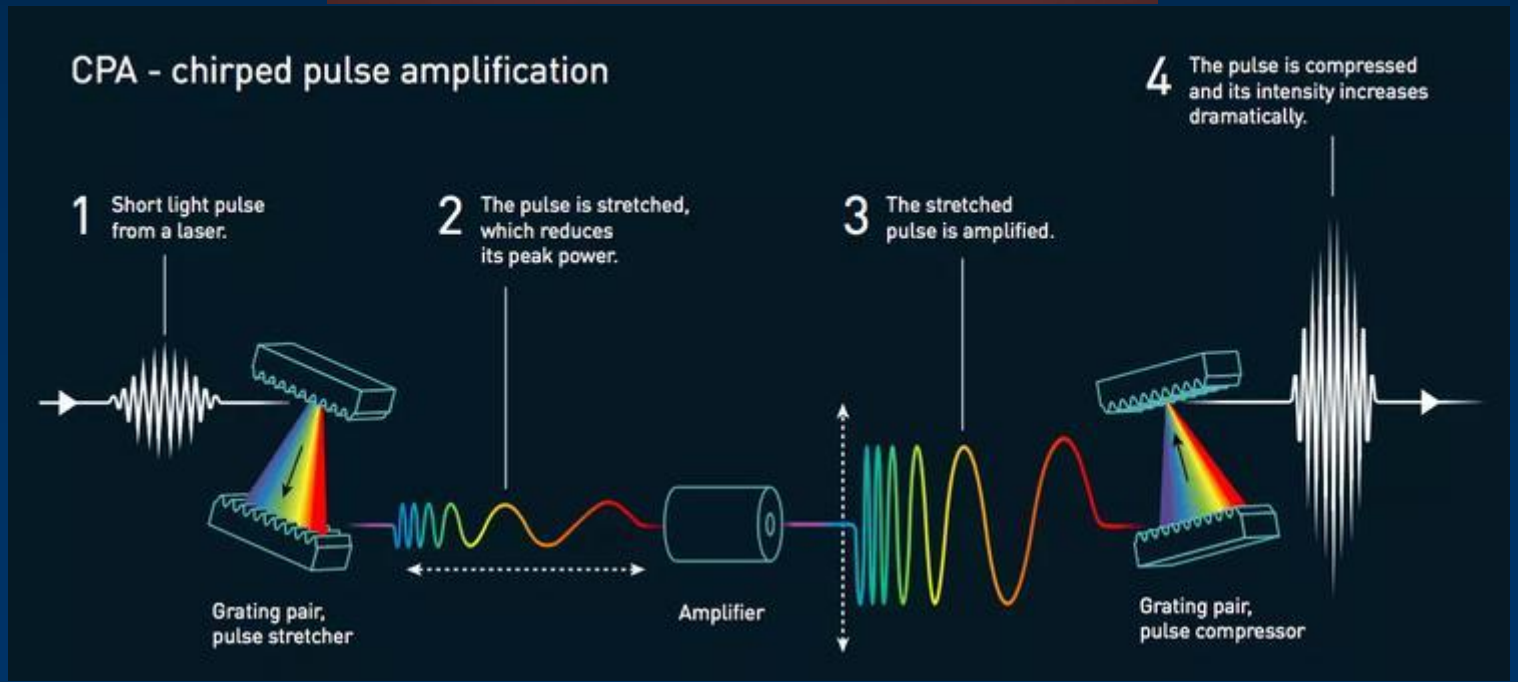


D.Phillips



Cohn Tannoudji


THE NOBEL PRIZE
IN PHYSICS 2018
Illustrations: Niklas Elmehed
Arthur Ashkin
Gérard Mourou
Donna Strickland
"for groundbreaking inventions in the field of laser physics"


CPA - chirped pulse amplification
1 Short light pulse from a laser.
2 The pulse is stretched, which reduces its peak power.
3 The stretched pulse is amplified.
4 The pulse is compressed and its intensity increases dramatically.
Grating pair, pulse stretcher
Amplifier
Grating pair, pulse compressor

17-2 固体能带基础

固体 —— 重要的物质结构形态 —— 主要指晶体

确定晶体中电子能级问题的处理方法：

1 考虑电子在周期势场中运动，通过解薛定锷方程确定可能的能量。

2 按照各个原子能级的状态求出固体中电子的能级。

⇒ 能级被组合成允许能带和禁带，材料的能带结构确定了材料的性质。

一、晶体中电子的共有化

单个原子中电子的能量是离散的 —— 非连续的能级

相邻原子的电荷相互影响

价电子被整个晶体中原子所共有

大量原子有规则排列形成晶体，形成周期性势场

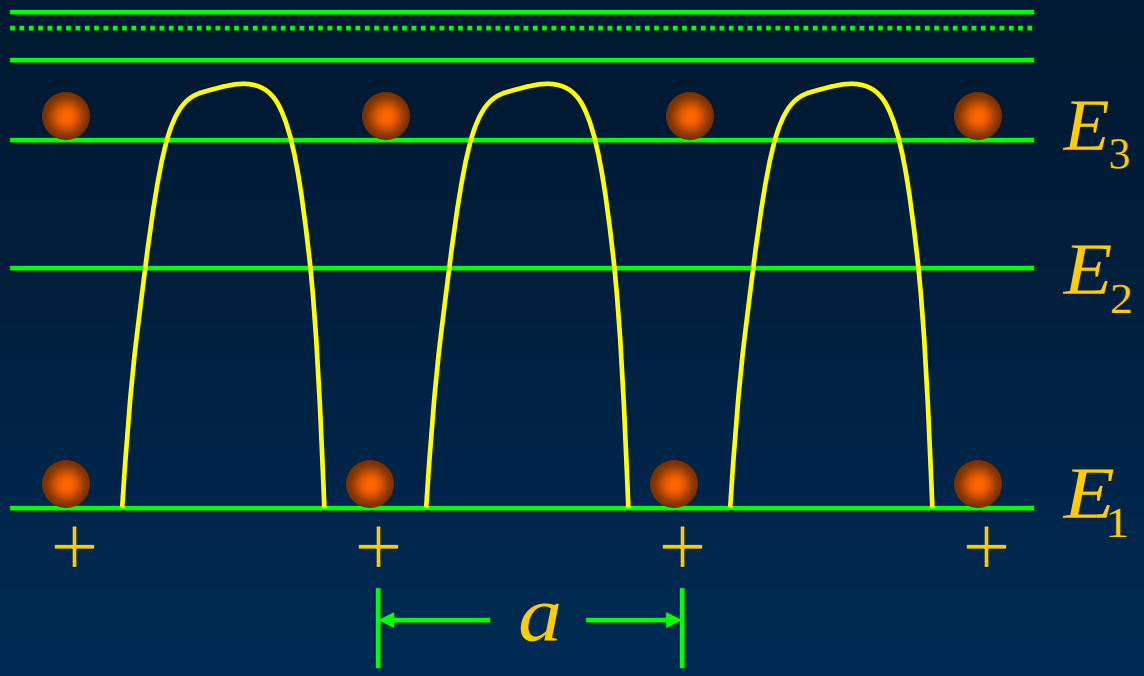
☆电子共有化是量子效应，属于非经典的性质，a 是势场的周期。

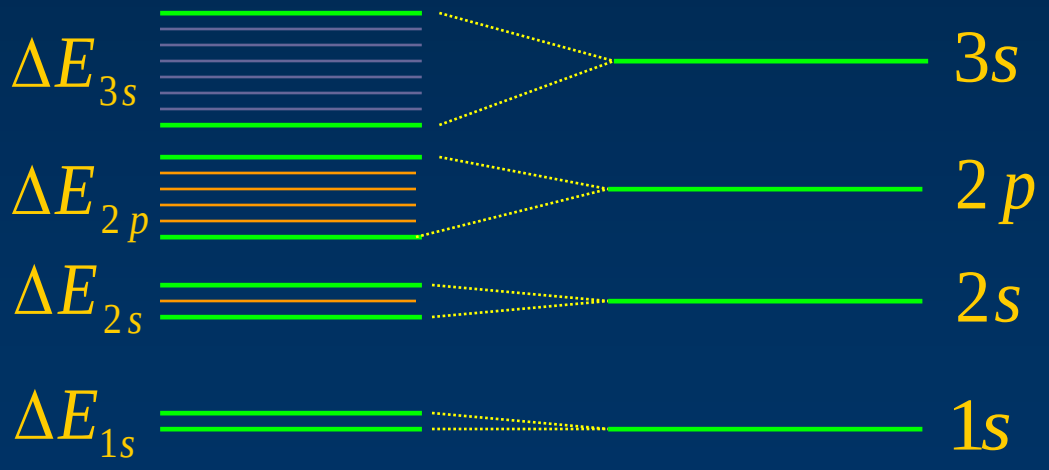
二、能带的形成

每个原子具有相同能量的价电子能级

⇩ 电子共有化

因原子间相互作用，原价电子的能级分裂成一系列和原能级很接近的新能级





晶体中这些能级相距很近，可视为连续分布，则称能带。

例：金刚石的能带结构

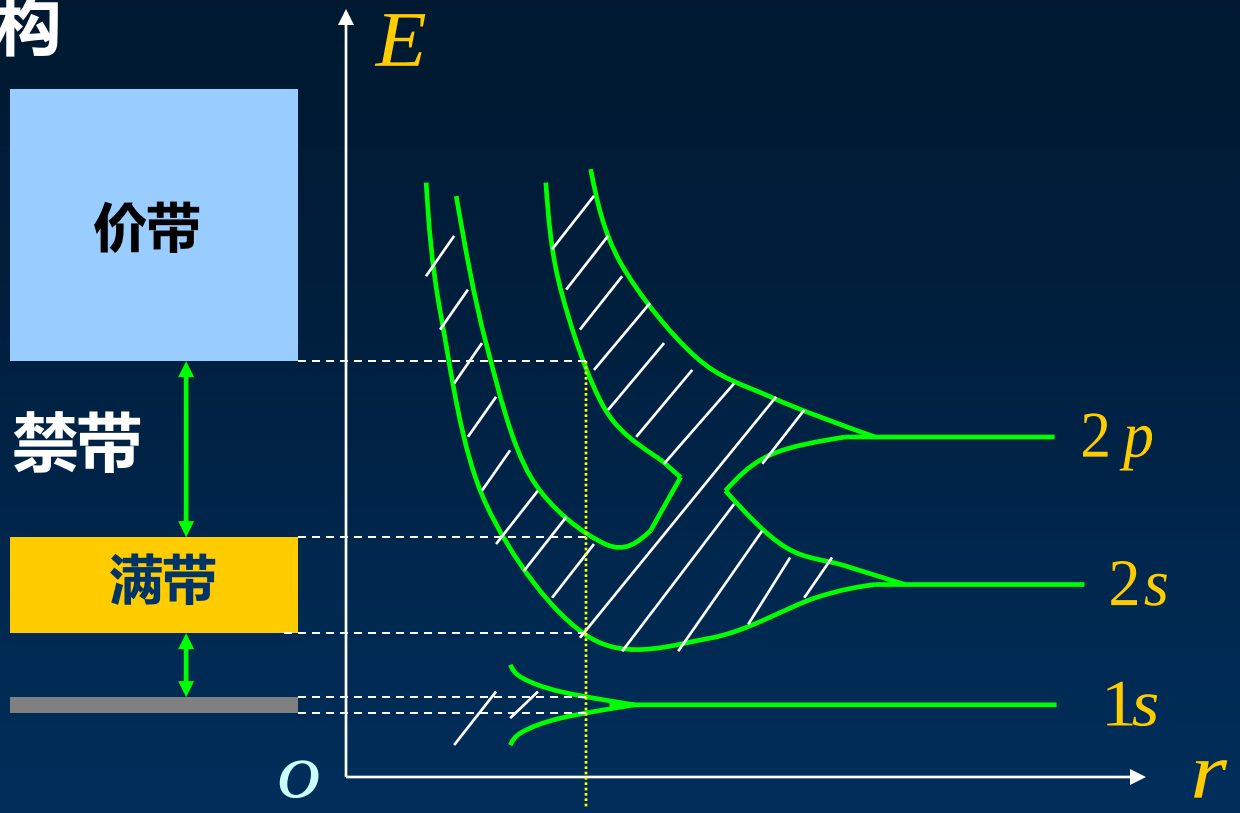
相邻能带间的间隔 —— 禁带

三、能带中电子分布

$s \Rightarrow 2 \quad p \Rightarrow 6$

N **个原子组成的晶体：**

$$\begin{cases} 1s,2s & \Rightarrow 2N \\ 2p & \Rightarrow 6N \end{cases}$$



N **个原子组成晶体，对应一角量子数** l **的能带中，最多可容纳电子数为：**

$$2(2l+1)N$$

- **满带** —— 所有能级被填满。
- **空带** —— 所有能级均没有电子填充。
- **价带** —— 由价电子能级分裂而成的能带。
- **禁带** —— 不存在电子的稳定能态。

四、导体　绝缘体　半导体

1. 满带　导带　空带

★ 在满带中，不论有无电场作用，其电子迁移的总效果与没有电子转移一样。

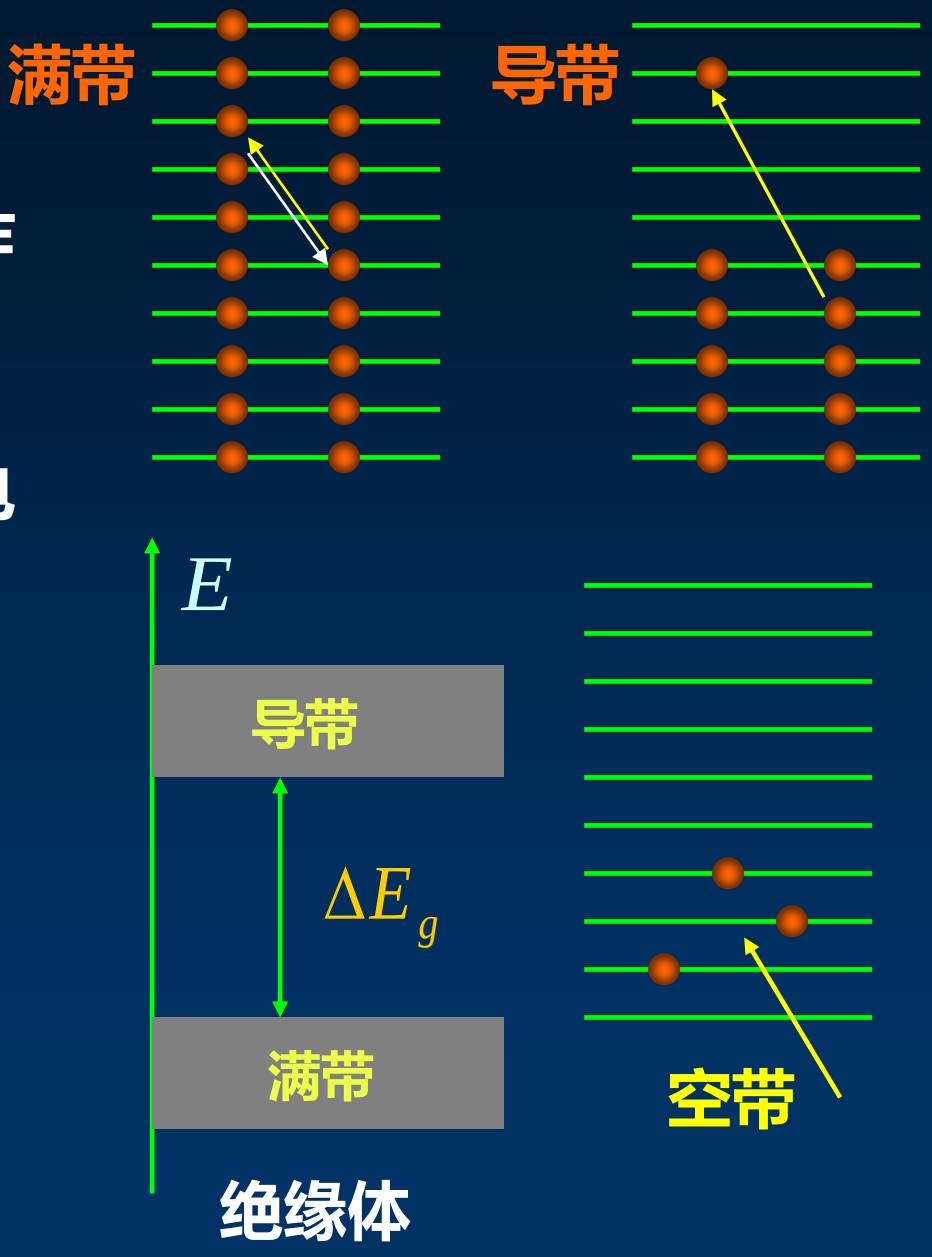
★ 在导带中，一部分电子在电场作用下，进入高能级，形成电流。

★ 若有电子在电场作用下，进入空带，则原空带也就成为导带，也可形成电流。

2. 绝缘体　导体

▲绝缘体的禁带宽度较大

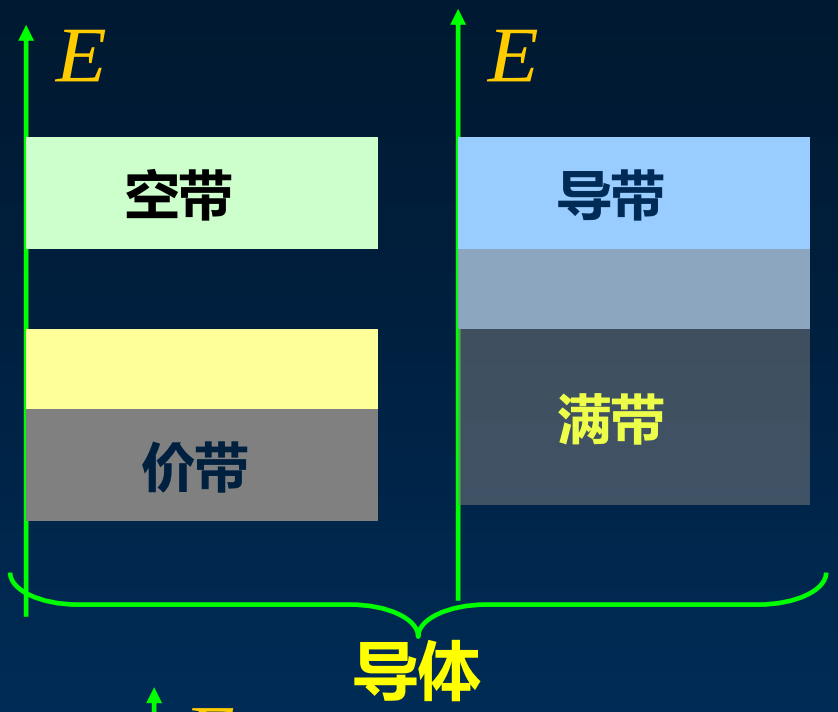
$$\Delta E_g = 3 \sim 6eV$$



▲ 导体有2种能带结构

A 价带只填入了部分电子

B 满带与导带（空带）重叠



3. 半导体

半导体的能带特点：

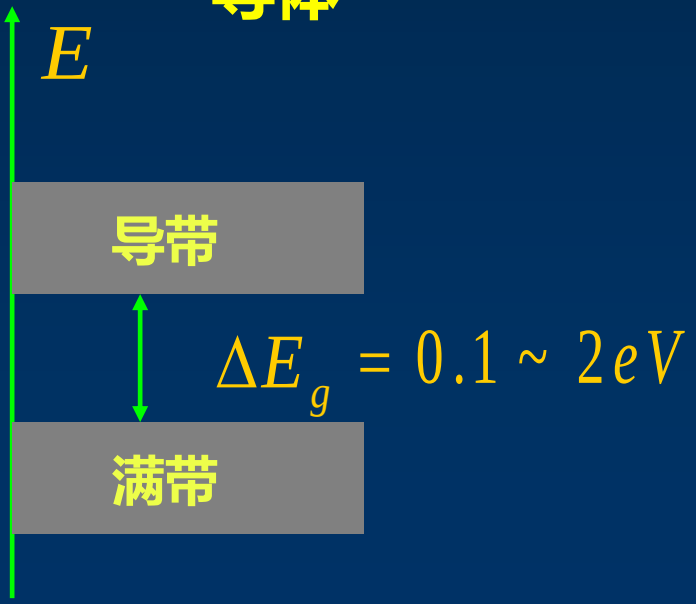
最高的满带（价带）与最低的空带（激发态）间的禁带宽度较小。

在外界作用下，有两个结果：

A. 进入导带中的电子形成电子导电，与金属中的电子相同。

B. 价带中留下的空态，象正电荷一样，形成空穴导电。

半导体 —— 电子和空穴导电概念



4. 本征半导体　掺杂半导体

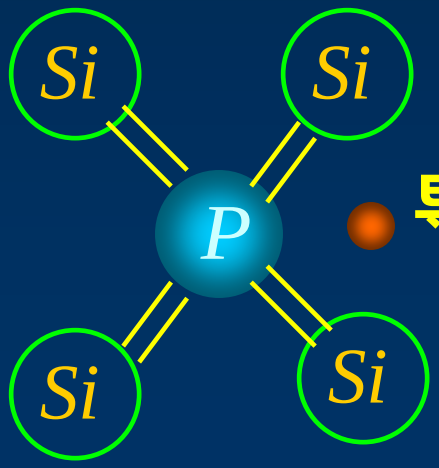
（1）本征半导体：　外电场作用下，导带中的电子和满带中的空穴都参与导电。

电子，空穴 = 本征载流子　　导电性称为本征导电性

（2）掺杂半导体：

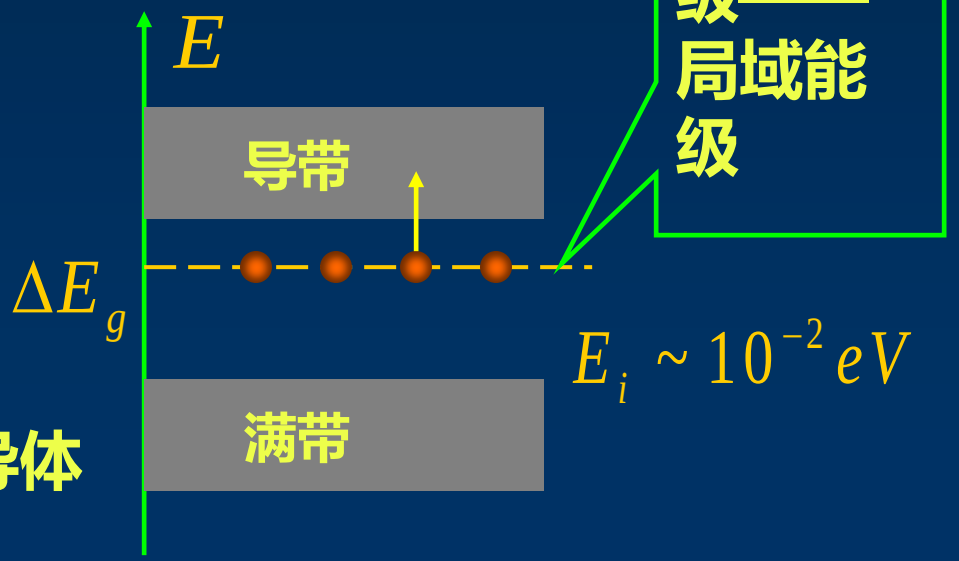
通过掺入部分杂质，提高半导体的导电能力，改变导电性质。

★ n型半导体：　在硅半导体中掺入少量五价元素

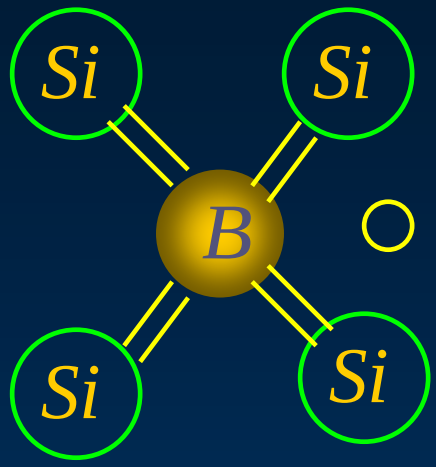


导电电子

电子型半导体

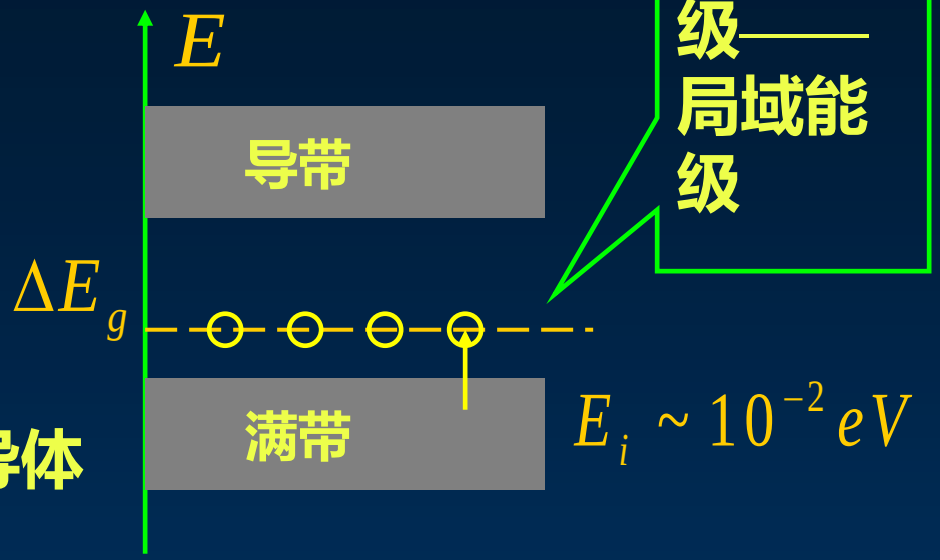


★ p 型半导体： 在硅半导体中掺入少量三价元素



空穴

空穴型半导体

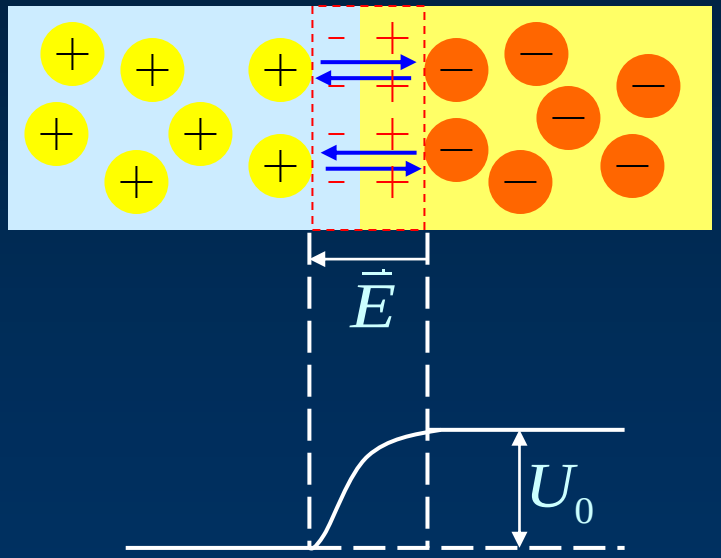


5. pn 结

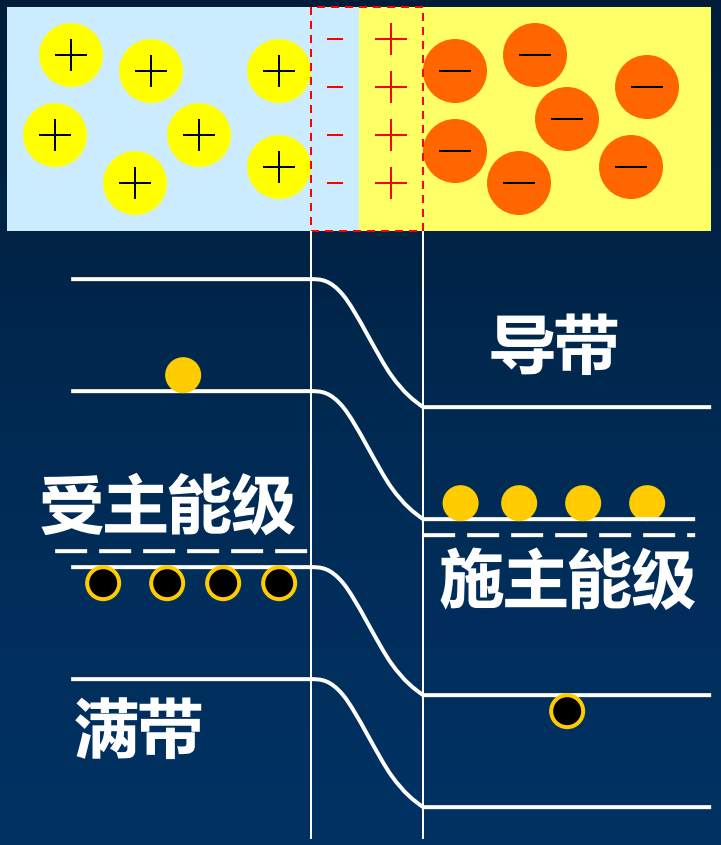
p型半导体和n型半导体接触，两区域的交界面构成pn结。

☆ pn 结中的电场和势垒

pn结 $10^{-7}\,m$

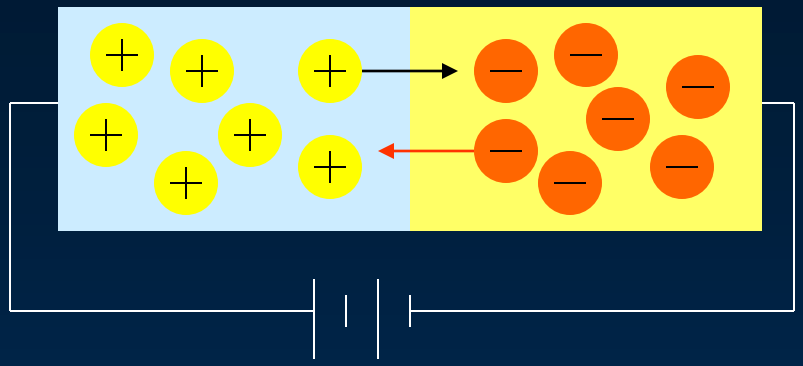


当扩散作用与电偶层电场作用达到平衡时，电偶层的电场形成一稳定的电势差。

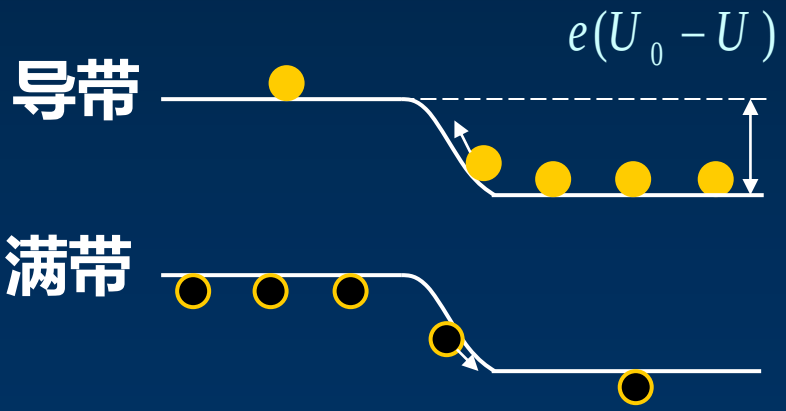


p区能带升高，n区能带降低，形成势垒。

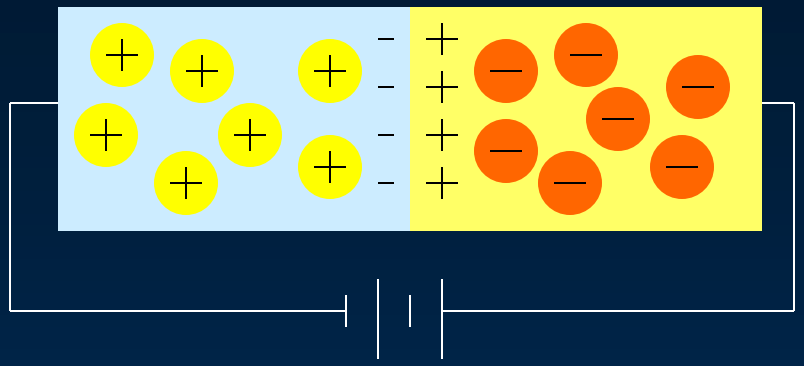
☆ pn结中电流和外加电压的关系



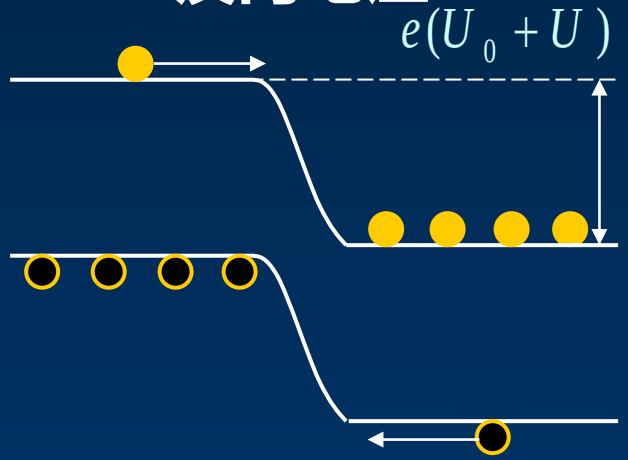
正向电压



pn结中电场减弱，势垒降低，电子、空穴扩散容易，形成正向宏观电流，并随电压变化。

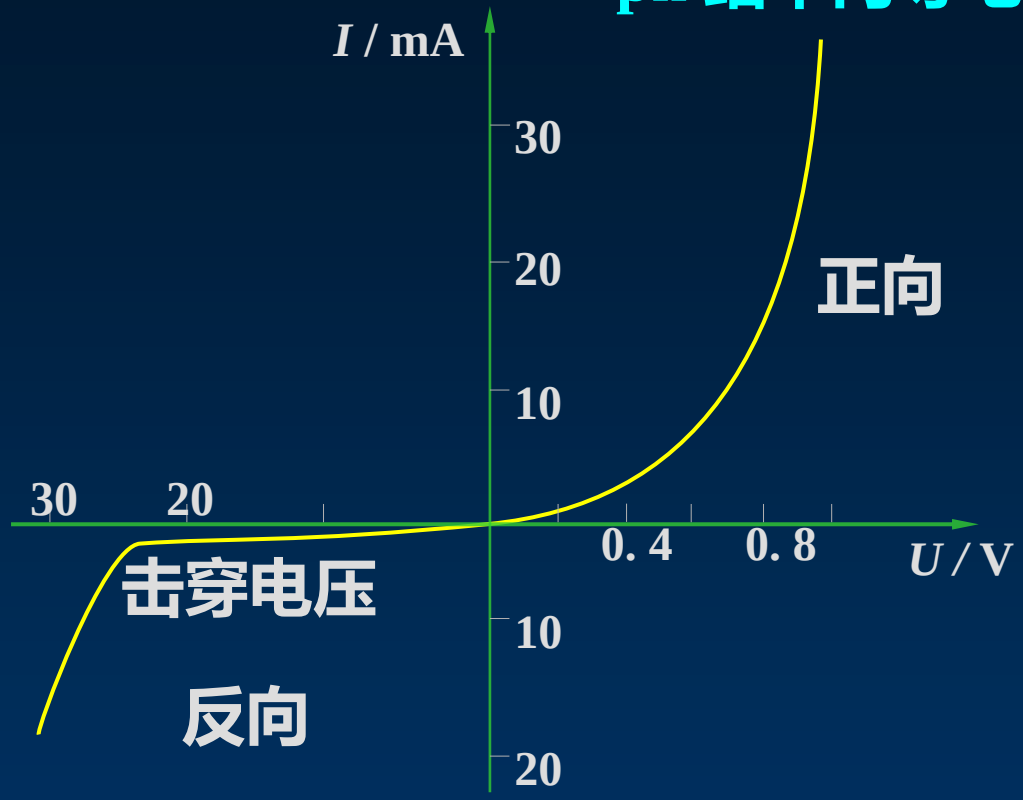


反向电压

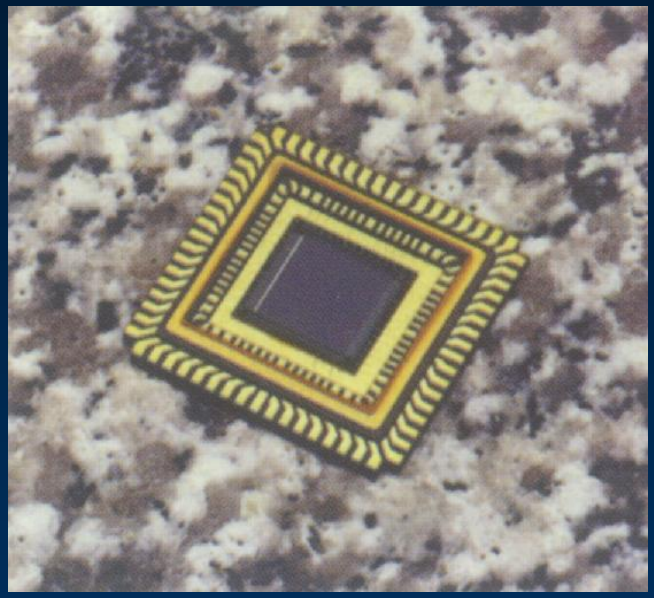


pn结中电场增强，势垒增高，电子、空穴扩散困难，形成很小的反向电流。

pn 结单向导电性



pn 结伏安特性曲线

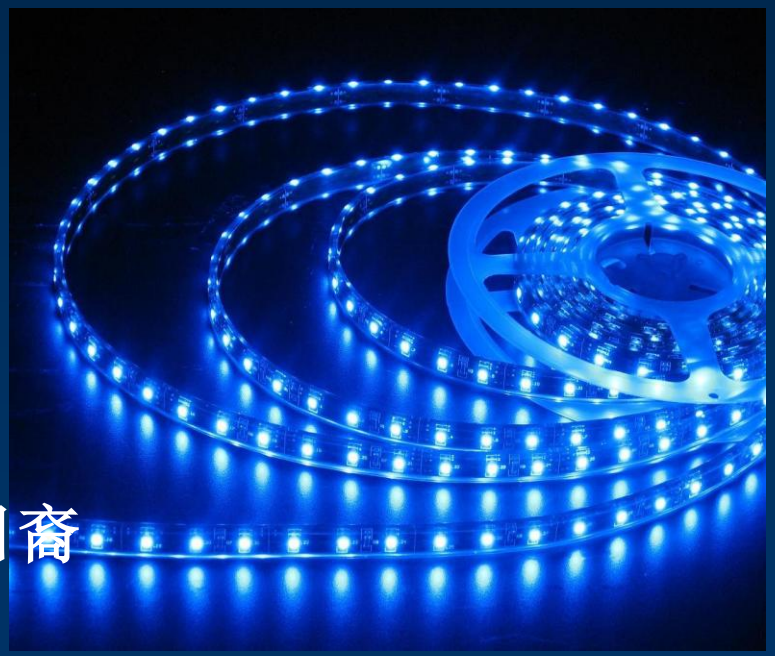


半导体光电检测器

2014年诺贝尔物理学奖



"for the invention of efficient blue light-emitting diodes which has enabled bright and energy-saving white light sources".



赤崎勇（**Isamu Akasaki**）日本

天野浩（**Hiroshi Amano**）日本

中村修二（**Shuji Nakamura**）美籍日裔