

《原子物理学》（甲型）期中小结

崔宏滨

原子物理学期望建立关于原子结构与运动方式的物理模型，并基于这样的模型进行定量的数学运算，以解释与原子有关的实验现象，并阐释了量子力学的物理基础和基本概念。

一. 重要的原子物理实验

1. Rutherford 的 α 粒子散射实验：证实了原子的核式结构。
2. 光谱学实验，Frank—Hertz 实验：证实了原子内部分立能级的存在。
3. Stern—Gerlach 实验：证实了磁场中原子角动量空间取向的量子化。
4. 黑体辐射，光电效应，Compton 散射实验：证实了光的粒子性。
5. Davison—Germer 实验，薄膜电子衍射实验，电子干涉实验：证实了电子的波动性。
6. 顺磁共振，核磁共振实验，原子束分子束实验，Zeeman 效应实验：证实了原子的有效磁矩（朗德因子）以及在弱外磁场中原子精细结构能级的进一步分裂。
7. 帕邢-巴克效应：强磁场中，电子的自旋磁矩与轨道磁矩各自与外场相互作用，轨道角动量与自旋角动量不能合成为总角动量。

二. 原子的模型

1. 原子的核式结构模型

金属箔能够使 α 射线产生大角散射，说明入射的 α 粒子与原子之间有很强的库仑排斥力，证明原子中的正电荷集中在一个很小的范围内，即原子中的正电荷集中在原子核中。

$$\text{库仑散射公式：散射角与瞄准距离的关系 } b = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 Z}{\frac{1}{2} M v_0^2} \cot \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 Z}{E} \cot \frac{\theta}{2}$$

$$\text{空心立体角与微分散射截面： } d\sigma = \frac{1}{16} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{z_1 Z}{E} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

$$\text{散射粒子数与微分散射截面： } \frac{dn}{n} = N t d\sigma \quad (N: \text{原子数密度}; t: \text{箔厚})$$

$$\text{卢瑟福散射公式： } \frac{dn}{n} = \frac{N t}{16} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{z_1 Z}{E} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

2. 玻尔模型

为了能够解释原子光谱的特点，玻尔提出了关于核外电子的三个基本假设。玻尔模型适用于氢原子和类型离子。

- (1) 定态条件（分立轨道）假设：核外电子只能在一系列分立的轨道上绕核运动，且电子在这样的轨道上运动时不向外辐射电磁波，使得原子处在一系列的定态。则

$$\text{由于 } \frac{m_e v_n^2}{r_n} = \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}, \text{ 据此可得原子的定态能量（能级） } E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}.$$

- (2) 电子在定态轨道上运动时, 其角动量是量子化的, 只能为 $m_e v_n r_n^2 = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$;
也可以说处于定态的原子, 其角动量是量子化的。若电子与原子核均绕其质心运动, 总的轨道角动量只能为 $n\hbar$ 。
- (3) 电子能够在不同的定态轨道之间跃迁, 或原子能够在不同的定态能级之间跃迁, 跃迁过程中原子发射或吸收光子; 光子的能量等于两定态能级之间的能量差, 即 $h\nu = hc\tilde{\nu} = E_{n_1} - E_{n_2}$ 。

核外电子定态轨道半径 $r_n = a_1 \frac{n^2}{Z} = 0.053 \frac{n^2}{Z} \text{ nm}$, 原子的定态能级

$$E_n = -E_1 \left(\frac{Z}{n}\right)^2 = -13.6 \left(\frac{Z}{n}\right)^2 \text{ eV}, \text{ 核静止时的里德伯常量为 } R_\infty, R_A = R_\infty \frac{1}{1 + m_e / M}。$$

合里德伯公式 $\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right)$, 原子的能级可写作 $E_n = -\frac{hcR_A Z^2}{n^2}$, 光谱项为 $T_n = R_A \frac{Z^2}{n^2}$ 。

可推导出电子的轨道磁矩为 $\mu = n \frac{e\hbar}{2m_e} = n\mu_B$, 其中 $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ 为玻尔磁子。

三. 碱金属原子

1. 原子实的极化与轨道贯穿;

2. 量子数修正: $T(n) = \frac{R_A}{(n - \Delta n_l)^2} = \frac{R_A}{n^{*2}}$;

3. 轨道角动量子数与轨道符号: $l=0$, 记作 s; $l=1$, 记作 p; $l=2$, 记作 d; $l=3$, 记作 f; ……

4. 碱金属原子的 4 个光谱线系: 主线系, $p \rightarrow s$; 锐线系 (第二辅线系), $s \rightarrow p$; 漫线系 (第一辅线系), $d \rightarrow p$; 基线系, $f \rightarrow d$ 。

四. 波粒二象性

1. 热辐射的实验定律: Wien 位移定律, 辐射曲线峰值波长 $\lambda_m T = b$; Stefan-Boltzmann

定律, 热辐射强度 $\Phi(T) = \sigma T^4$ 。

2. Compton 散射: 光子与静止自由电子之间的散射, $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta)$ 。

3. 物质波 (德布罗意波): $\lambda = \frac{h}{p}$ 。

4. 不确定关系: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$, $\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$, $\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$; $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ 。

5. 态叠加原理

五. 氢原子 (类氢离子) 中核外电子的波函数

若只考虑库仑相互作用，核外电子的本征态可用一组量子数 n, l, m_l 表示，波函数为 $\psi_{nlm_l}(R, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)$ ；电子径向分布几率为 $r^2 R_{nl}^2(r) dr$ ；其中 n 为主量子数； $Y_{lm_l}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)$ 为球谐函数，是中心力场中与电子角动量相关的本征函数， l 为轨道角动量量子数， $l = 0, 1, \dots, n-1$ ，电子的轨道角动量为 $p_l = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ ； m_l 为轨道角动量在空间取向的量子数， $m_l = -l, \dots, 0, \dots, l$ ，电子轨道角动量在 z 方向的分量为 $p_{l,z} = m_l \hbar$ 。

四. 电子自旋

电子的自旋量子数 $s = \frac{1}{2}$ ，自旋角动量为 $p_s = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ ，自旋角动量在空间的取向是量子化的，该角动量在 z 方向的分量为 $p_{s,z} = m_s \hbar$ ， $m_s = \pm \frac{1}{2}$ 。

电子的自旋磁矩为 $\mu_s = -\frac{e p_s}{m_e}$ ，自旋磁矩在 z 方向的分量为 $\mu_{s,z} = -2m_s \mu_B = \mp \mu_B$ 。

六. 单电子原子（氢和类氢离子）中自旋-轨道相互作用以及能级的精细结构

1. 是自旋磁矩与轨道磁场间的磁相互作用， $\Delta E_{LS} = -\mu_s \cdot \mathbf{B}_l$ 。
2. 导致能级产生精细结构分裂， n, l 相同的简并能级分裂为双重态精细结构能级。
3. 轨道角动量 p_l 、自旋角动量 p_s 合成为电子的总角动量 p_j 。
4. 总角动量守恒，量子数 $j = l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}$ ， $p_j = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ 。
5. 精细结构常数： $\alpha = \frac{2\pi e^2}{4\pi\epsilon_0 hc} = \frac{1}{137.0359895}$ ， $E_n = -hcR_H \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{(\alpha c)^2 m_e}{2} \frac{Z^2}{n^2}$ 。
6. 单电子原子的精细结构能级：用原子态符号表示为 $n^{2s+1}L_j$ 。
7. 单电子原子电偶极辐射跃迁的选择定则： $\begin{cases} \Delta l = \pm 1 \\ \Delta j = 0, \pm 1 \end{cases}$ 。
8. 氢原子、类氢离子，量子数 n, j 相同的原子态，精细结构能级数值相同，

$$E_{nlj} = -\frac{RhcZ^2}{n^2} - \frac{RhcZ^2}{n^2} \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right)。$$

七. 原子与外磁场的作用

1. 原子的有效总磁矩与朗德因子： $\mu_s = -g_s \frac{e}{2m_e} p_s$ ，自旋朗德因子 $g_s = 2$ ；

$$\boldsymbol{\mu}_l = -g_l \frac{e}{2m_e} \mathbf{p}_l, \text{ 轨道朗德因子 } g_l = 1。$$

2. 单电子原子的朗德因子: $\boldsymbol{\mu}_j = -g_j \frac{e}{2m_e} \mathbf{p}_j, g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}。$
3. 磁场中原子总角动量的空间量子化: $p_{j,z} = M_j \hbar, M_j = -j, -(j-1), \dots, j-1, j,$
共 $2j+1$ 个空间取向, 相应的磁矩 $\mu_{jz} = -g_j \frac{e}{2m_e} p_{jz} = -M_j g_j \frac{e\hbar}{2m_e} = -M_j g_j \mu_B。$
4. Stern-Gerlach 型磁场中, 原子受力 $F_z = \mu_{jz} \frac{dB_z}{dz} = M_j g \mu_B \frac{dB_z}{dz}$; 通过磁场后的横向偏移 $z_j = \frac{M_j g \mu_B}{2m} \left(\frac{L}{v}\right)^2 \frac{dB}{dz}$; 相邻两束的横向间隔 $\Delta z = \frac{g \mu_B L^2}{4E_k} \frac{dB}{dz}$, E_k 为原子的动能。对于 Ag 原子, 基态为 $5^2S_{1/2}, M_J = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, g = 2, z_{\pm 1/2} = \pm \frac{\mu_B}{2m} \frac{dB_z}{dz} \left(\frac{L}{v}\right)^2。$
5. 致使原子的精细结构能级产生进一步的分裂: $\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_J \cdot \mathbf{B} = M_J g \mu_B B。$
6. 分裂后相邻的能级的间隔 $\delta E = g \mu_B B。$
7. 顺磁共振: $h\nu = g \mu_B B。$
8. 塞曼效应: (1) 弱磁场中, 原子精细结构光谱线移动的波数 $\Delta \tilde{\nu}' = (M_2 g_2 - M_1 g_1) \frac{\mu_B B}{hc} = (M_2 g_2 - M_1 g_1) \mathcal{L}$, 其中 $\mathcal{L} = \frac{\mu_B B}{hc}$ 为 Lorentz 单位;
(2) 跃迁的选择定则: $\Delta M = M_2 - M_1 = 0(\pi\text{线}), \pm 1(\sigma\text{线})$, 若 $\Delta J = 0, \Delta M = 0$ 的跃迁禁戒; (3) 垂直与磁场方向, 可观察到 σ 线和有 π 线, 均是线偏振光; 平行于磁场方向, 只能观察到 σ 线, 是圆偏振光。
9. 帕邢-巴克效应: (1) 强外磁场中, 原子与外磁场相互作用能级 $\Delta E = (m_l + 2m_s) \frac{e\hbar B}{2m_e}$;
(2) 跃迁选择定则, $\Delta m_l = 0, \pm 1, \Delta m_s = 0。$ 光谱线并非在精细结构基础上进一步分裂。

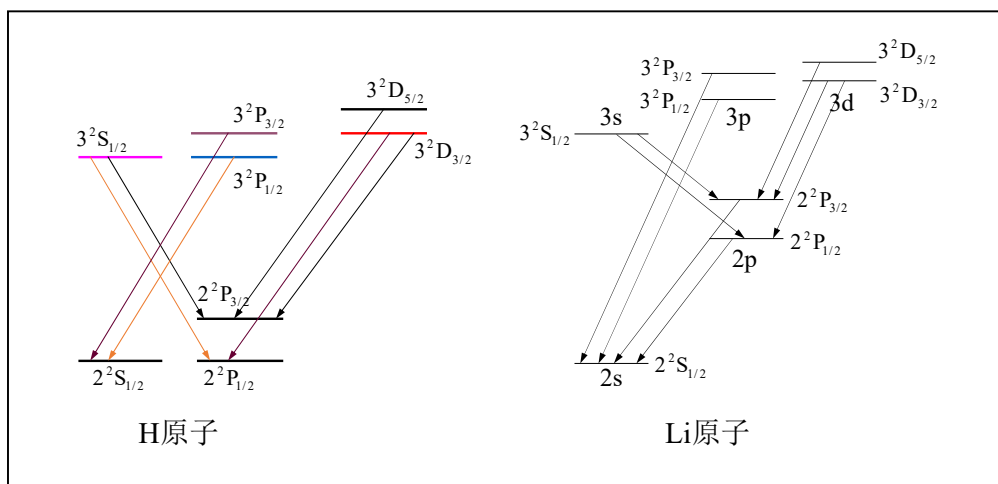
八. 精细结构能级与辐射跃迁的图示

标注形成每一精细结构能级的电子组态和原子态; 量子数 L 相同的能级画在同一列; 量子数 S 相同的多重态画在同一栏; 电偶极辐射跃迁只能发生在相邻的列之间。

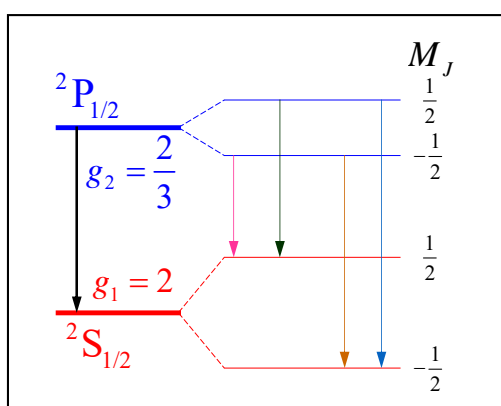
附图为 H 原子与 Li 原子的能级和跃迁图。

九. 塞曼效应的 Grotrian 图

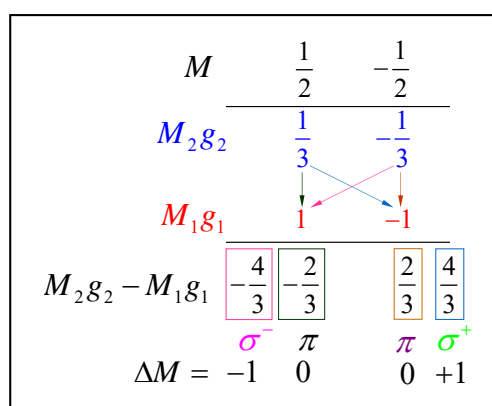
根据原子态计算出原子态的朗德 g 因子以及 M_J 的取值, 按选择定则表示塞曼跃迁, 并算出塞曼分裂后光谱线移动的波数。附图为 Na 原子 D_1 线的塞曼效应分析图示。



原子能级的精细结构与电偶极辐射跃迁



能级的塞曼分裂与塞曼跃迁



Grotrian 图