

原子物理B复习

第一章 玻尔原子模型

1 原子的核式结构

定义 $D = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{zZe^2}{E}$, 则 $\cot \frac{\theta}{2} = \frac{2b}{D}$, 且 $d\sigma = \frac{D^2}{16} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} d\Omega$

射入厚度为 t 、单位体积有 N 个原子的金属内, 射到 $d\Omega$ 的概率为: $\frac{dA}{A} = Ntd\sigma$

粒子与原子核最近距离为 $r_m = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{1}{\sin \frac{\theta}{2}} \right)$

2 原子光谱

氢原子光谱: $\nu = \frac{1}{\lambda} = R_h \left[\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right]$, $R_h = 1.096 \times 10^7 m^{-1}$

3 玻尔氢原子理论

玻尔假设:

- 原子存在一系列具有确定能量的稳定状态, 称为定态。
- 当原子从一个定态跃迁到另一个定态时, 原子的能量发生改变, 这时原子才发射或吸收电磁辐射。
- 原子中电子的轨道角动量是量子化的, 只能是 \hbar 的整数倍。

玻尔氢原子模型:

- $r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \frac{n^2}{Z} = a_0 \frac{n^2}{Z}$, $a_0 = 0.53 \times 10^{-10} m$
- $v_n = \frac{Z\alpha c}{n}$, $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c^2} = \frac{1}{137}$
- $E = -\frac{Z^2}{2n^2} m_e c^2 \alpha^2$
- $R_\infty = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2h}$

4 类氢原子

原子核质量影响:

- $r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \frac{n^2}{Z}$
- $E = -\frac{Z^2}{2n^2} \mu c^2 \alpha^2$
- $R_M = R_\infty \frac{1}{1 + \frac{m_e}{M}}$

$Z > 1$ 的影响:

- 计算波数时要取 Z^2 倍。
- 原子核质量的影响。

μ^- 粒子的影响:

- $r_n = a_0 \frac{n^2 m_e}{Z m_\mu}$

5 弗兰克-赫兹实验

支持了能量量子化、定态、角动量量子化。

第二章 量子力学的初步介绍

1 波粒二象性

普朗克辐射公式： $u(\nu, t) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1}$

维恩位移定律： $\lambda_m T = b$

康普顿散射： $\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta)$, θ 为光子散射角。

2 物质波的统计解释和海森伯不确定原理

波函数是单值、有限且连续的。

3 薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(r, t) \psi$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] u(r) = Eu(r)$$

4 力学量的平均值、算符表示和本征值

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla$$

如果波函数 ψ 同时是算符 $\hat{\Omega}^{(1)}$ 和 $\hat{\Omega}^{(2)}$ 的本征函数，那这两个物理量一定是可以同时有确定值，即可同时测定，记为 $[\hat{\Omega}^{(1)}, \hat{\Omega}^{(2)}] = 0$ ，成为这两个算符对易。

5 定态薛定谔方程解的几个简例

阶跃势的透入距离： $\frac{1}{k_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$

势垒的透入系数： $T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}}$

一维谐振子势： $E_n = (\frac{1}{2} + n) \hbar\omega, \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

第三章 单电子原子

1 氢原子的定态薛定谔方程解

a_0 是氢原子基态的最概然半径。

$$\bar{r} = \frac{1}{2} [2n^2 - l(l+1)] \frac{a_0}{Z}$$

$$\overline{r^{-1}} = \frac{1}{n^2} \frac{Z}{a_0}$$

原子波函数的空间对称性与 l 奇偶性相同。

2 量子数的物理解释

3 跃迁概率和选择定则

跃迁率: $\lambda_{if} = \frac{16\pi^3\nu^3}{3\epsilon_0\hbar c^3} |\rho_{if}|^2$, 平均寿命 $\tau = \frac{1}{\lambda_{if}}$, 谱线宽度 $\Delta\omega \approx \lambda_{if}$

选择定则: $\Delta m = 0, \pm 1, \Delta l = \pm 1$

4 电子自旋

5 自旋和轨道相互作用

自旋-轨道耦合能: $\Delta E = -\mu_s B = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2 r^3} \vec{s} \cdot \vec{l}$

轨道磁矩的大小: $\mu_l = g_l \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} = g_l \mu_B \sqrt{l(l+1)}$

塞曼效应: $\hbar\Delta\nu = \Delta m \mu_B B$

电子自旋角动量: $\vec{s} = \frac{1}{2}\hbar$, 磁矩: $\vec{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{s}$

总角动量: $\vec{j} = \vec{s} + \vec{l}$, 且 $j^2 = j(j+1)\hbar^2$

原子磁矩: $\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s = -\frac{\mu_B}{\hbar} (g_l \vec{l} + g_s \vec{s})$, 且 $\mu_j = -g_j \frac{\mu_B}{\hbar} j$

其中 $g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$, 且 $\mu_{jz} = -g_j \mu_B m_j$

6 单电子原子能级的精细结构

相对论修正后的能级: $E_{n,j} = E_n \left[1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right) \right]$

选择定则: $\Delta l = \pm 1, \Delta j = 0, \pm 1$

第四章 氢原子和多原子电子

1 氢原子的能级

氢原子基态能量: $E_g = -74.8\text{eV}$

2 全同粒子与泡利不相容原理

泡利不相容原理: 在多电子原子中, 任何两个电子都不可能处在相同的量子态。

3 多原子电子的电子组态

$n_i = 1, 2, 3, \dots$

$l_i = 0, 1, 2, \dots, n_i - 1$

$m_{l_i} = -l_i, -l_i + 1, \dots, l_i$

能量本征值对 m_{l_i} 简并。

4 原子的壳层结构和元素周期表

电子填充见高中化学

5 多电子原子的原子态和能级

LS耦合: $J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|$

自旋-轨道相互作用能引起的能量变化: $\Delta E = \frac{1}{2}\zeta(L, S)[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]\hbar^2$

同一多重态中相邻能级间隔: $E_{J+1} - E_J = \hbar^2\zeta(L, S)(J+1)$

等效电子组成的原子态数目: $G = 2^v \prod_{i=1}^v (2l_i + 1)$, v 是电子数。可以组成 G 个具有不同量子数 (L, S, J, M_J) 的态。

两个等效电子态允许的量子数要求 $L + S$ 为偶数。

能量变化: $\Delta E = (\Delta M_L + 2\Delta M_S)\mu_B B_0$, 选择定则: $\Delta M_S = 0, \Delta M_L = 0, \pm 1$

jj耦合: 构成的量子数与LS耦合相同。

6 多电子原子的光谱

对的选择定则: $\Delta J = 0, \pm 1; \Delta M_J = 0, \pm 1; \Delta j = 0, \pm 1$

碱金属原子分线系:

- 主线系, 每条谱线由两条波长非常相近的谱线组成, 间隔随波数增加而逐渐减小。
- 锐线系, 也是两条精细结构, 间隔固定。
- 漫线系, 每条线三个精细结构, 最外面同锐线系。
- 基线系, 与漫线系类似。

碱土金属有两套主线系、锐线系、漫线系、基线系。

7 原子的内层能级和X射线

对同一元素, L系谱线频率比K线低。K线中 K_α 最强, 波数最长。L也一样。

经验公式: $\tilde{\nu}_K = R(Z-1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right)$, 且 $\tilde{\nu}_L = R(Z-7.4)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$, R 是里德伯常量。