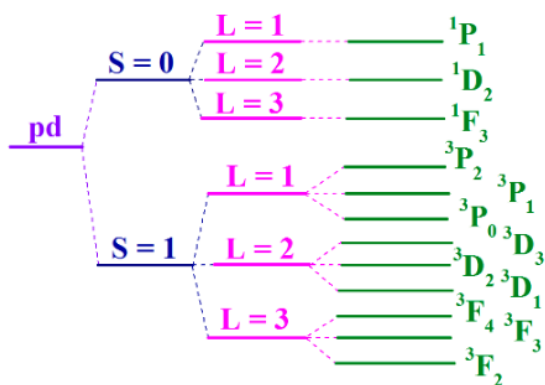
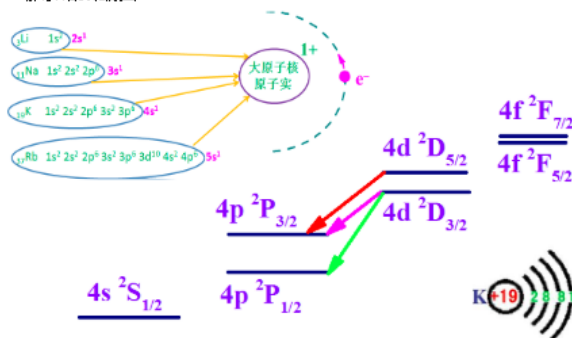


以pd 电子组态生成的12个原子态为例，粗略定性图解 Hund 规则：



问题：

1、针对 Z=19 钾原子 第一辅线系的第一条谱线的精细结构，画出相关的原子能级图，并标注每个能级的原子态、画出光谱跃迁。并分析哪条谱线最强。



5-B

1、按照 LS 耦合极限推导 ps 电子组态可生成的原子态。

$$l_1 = 1, l_2 = 0, \quad L = 1$$

$$s_1 = 1/2, s_2 = 1/2, \quad S = 1, 0$$

$$S = 1, L = 1, \quad J = 2, 1, 0 \quad \Rightarrow \quad {}^3P_{2,1,0}$$

$$S = 0, L = 1, \quad J = 1 \quad \Rightarrow \quad {}^1P_1$$

2、按照 LS 耦合极限推导 2p4p 电子组态可生成的原子态，并按照洪特规则对各原子态的能量高低进行排序（按反常次序假定）。

$$l_1 = 1, l_2 = 1, \quad L = 2, 1, 0$$

$$s_1 = 1/2, s_2 = 1/2, \quad S = 1, 0$$

$$S = 1, L = 2 \quad \Rightarrow \quad J = 3, 2, 1 \quad \Rightarrow \quad {}^3D_{3,2,1}$$

$$L = 1 \quad \Rightarrow \quad J = 2, 1, 0 \quad \Rightarrow \quad {}^3P_{2,1,0}$$

$$L = 0 \quad \Rightarrow \quad J = 1 \quad \Rightarrow \quad {}^3S_1$$

$$S = 0, L = 2 \quad \Rightarrow \quad J = 2 \quad \Rightarrow \quad {}^1D_2$$

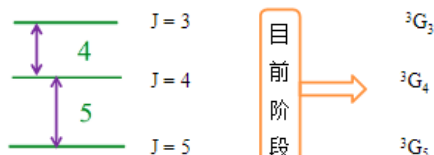
$$L = 1 \quad \Rightarrow \quad J = 1 \quad \Rightarrow \quad {}^1P_1$$

$$L = 0 \quad \Rightarrow \quad J = 0 \quad \Rightarrow \quad {}^1S_0$$

能级次序，由低到高排列：

$${}^3D_3, {}^3D_2, {}^3D_1, {}^3P_2, {}^3P_1, {}^3P_0, {}^3S_1, {}^1D_2, {}^1P_1, {}^1S_0$$

3、按照LS耦合所生成的一套完整多重结构如图，间隔比为 4:5。请写出图中每个能级的原子态。



完整多重结构 一共三层  
 $J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|$

$$\text{能级层数} = J \text{ 值数目} = \text{Min}(L, S) + 1$$

$$L = 1 \text{ 或 } S = 1$$

若  $L = 1$ ，则  $S = 4$ ，则  ${}^5P_{5,4,3}$

若  $S = 1$ ，则  $L = 4$ ，则  ${}^3G_{5,4,3}$

2、 $p^2$  同科电子原子态的推导

推导  $1s2s$  的原子态：

$$\left. \begin{array}{l} l_1 = l_2 = 0, \quad L = 0 \\ s_1 = s_2 = 1/2, \quad S = 1, 0 \end{array} \right\} {}^1S_0, {}^3S_1$$

$${}^1S_0: M_L = 0, m_{l1} = m_{l2} = 0; M_S = 0, m_{s1} = +1/2, m_{s2} = -1/2.$$

$${}^3S_1: M_L = 0, m_{l1} = m_{l2} = 0; M_S = 1, m_{s1} = +1/2, m_{s2} = +1/2 \\ M_S = 0, m_{s1} = +1/2, m_{s2} = -1/2 \\ M_S = -1, m_{s1} = -1/2, m_{s2} = -1/2$$

如果换成推导等效电子  $1s1s$  的原子态，如何推导？

思路 X：先不考虑同科问题，即不考虑 n 相同问题，直接推出  ${}^1S_0, {}^3S_1$ 。然后分解出  $m_L, m_S$ ，再对比不相容原理而剔除  ${}^3S_1$ 。

思路 Y：先构造出符合泡利原理的最微观态，然后推出  $M_L, M_S$ ，进一步推出  $L, S$ ，最终推出  $J$  以及原子态。例如  $1s1s$  时

$$\left. \begin{array}{l} m_{l1} = m_{l2} = 0 \\ m_{s1} = +, m_{s2} = - \end{array} \right\} \Rightarrow M_L = 0, M_S = 0 \Rightarrow L = 0, S = 0 \Rightarrow {}^1S_0$$

逻辑模块不同，A 是自上向下，B 是自下向上。

## 2、p<sup>2</sup> 同科电子原子态的推导

推导 1s2s 的原子态：

$$\left. \begin{array}{l} l_1 = l_2 = 0, \quad L = 0 \\ s_1 = s_2 = 1/2, \quad S = 1, 0 \end{array} \right\} {}^1S_0, {}^3S_1$$

$${}^1S_0: M_L = 0, m_{l1} = m_{l2} = 0; M_S = 0, m_{s1} = +1/2, m_{s2} = -1/2$$

$${}^3S_1: M_L = 0, m_{l1} = m_{l2} = 0; M_S = 1, m_{s1} = +1/2, m_{s2} = +1/2$$

$$M_S = 0, m_{s1} = +1/2, m_{s2} = -1/2$$

$$M_S = -1, m_{s1} = -1/2, m_{s2} = -1/2$$

如果换成推导等效电子 1s1s 的原子态，如何推导？

思路 X：先不考虑同科问题，即不考虑 n 相同问题，直接推出  ${}^1S_0, {}^3S_1$ ，然后分解出  $m_{l1}, m_{l2}, m_{s1}, m_{s2}$ ，再对比不相容原理而剔除  ${}^3S_1$ 。

思路 Y：先构造出符合泡利原理的最微观态，然后推出  $M_L, M_S$ ，进一步推出  $L, S$ ，最终推出  $J$  以及原子态。例如 1s1s 时

$$\left. \begin{array}{l} m_{l1} = m_{l2} = 0 \\ m_{s1} = +, m_{s2} = - \end{array} \right\} \Rightarrow M_L = 0, M_S = 0 \Rightarrow L = 0, S = 0 \Rightarrow {}^1S_0$$

逻辑模块不同，A 是自上向下，B 是自下向上。

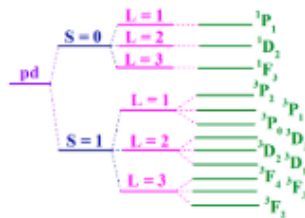
对比 非同科  $mpnp$  电子可以形成的原子态



同科情况下，留下的合法原子态 具有  $L+S = \text{偶数}$  的特征。（偶数定则）这一规律适用于任何两个同科电子的情况，例如  $d^2, f^2$  等。

原子光谱跃迁以电偶极跃迁方式为主。本课程只考虑这种方式。  
电偶极跃迁携带的字称信息为 负宇称。  
偶极跃迁携带的角动量的量子数为 1。

2：假设第四章所学习的自旋轨道相互作用的原理依然适用于 2p7p 的 jj 耦合，并假设正常次序。请分析前述第 1 题中各原子态的最可能的能级次序，并仿照 LS 耦合时所采用的通过画图（例如下图）展示能级分裂过程的方法，来画图展示 2p7p 发生 jj 耦合时的能级分裂过程。



## 例，p<sup>3</sup> 同科电子原子态的推导

$$l_1 = l_2 = l_3 = 1, L = 3, 2, 1, 0$$

$$s_1 = s_2 = s_3 = 1/2, S = 3/2, 1/2$$

列表如右（粉色代表合格的微观态）

$$M_S (\max) = 3/2$$

$$\left. \begin{array}{l} M_S = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2 \\ M_L = 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} S = 3/2 \\ L = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow {}^4S_{3/2}$$

余下微观态中  $M_S (\max) = 1/2$

在此前提下， $M_L (\max) = 2$

$$M_S = 1/2, -1/2$$

$$M_L = 2, 2$$

$$1, 1$$

$$0, 0$$

$$-1, -1$$

$$-2, -2$$

$$\left\{ \begin{array}{l} S = 1/2 \\ L = 2 \end{array} \right\} \Rightarrow {}^2D_{5/2,3/2}$$

余下微观态中  $M_S (\max) = 1/2$

在此前提下， $M_L (\max) = 1$

$$M_S = 1/2, -1/2$$

$$M_L = 1, 1$$

$$0, 0$$

$$-1, -1$$

$$\left\{ \begin{array}{l} S = 1/2 \\ L = 1 \end{array} \right\} \Rightarrow {}^2P_{3/2,1/2}$$

$$m_l \in \{1, 0, -1\}, m_s \in \pm 1/2$$

$$M_L = \sum m_l, \quad M_S = \sum m_s$$

$(m_{l1}, m_{l2}, m_{l3})$ $(m_{s1}, m_{s2}, m_{s3})$	$M_S = 3/2$	$1/2$
$M_L = 3$	$(1,+)(1,+)(1,+)$	$(1,+)(1,+)(1,-)$
$= 2$	$(1,+)(0,+)(1,+)$	$(1,+)(0,-)(1,+)$ $(1,+)(0,+)(1,-)$
$= 1$	$(1,+)(0,+)(0,+)$ $(1,+)(1,+)(-1,+)$	$(1,-)(0,+)(0,+)$ $(1,+)(0,-)(0,+)$ $(1,+)(1,-)(-1,+)$ $(1,+)(1,+)(-1,-)$
$= 0$	$(0,+)(0,+)(0,+)$ $(1,+)(0,+)(-1,+)$	$(0,+)(0,+)(0,-)$ $(1,+)(0,+)(-1,-)$ $(1,+)(0,-)(-1,+)$ $(1,-)(0,+)(-1,+)$

## 各壳层最多容纳的电子数

给定  $n, l, m_l$  的状态,

$m_s = \pm 1/2$ ,  
最多可容纳 2 个电子。

给定  $n, l$  的状态(亚壳层),  $m_l = l, l-1, \dots, -l$ ,

最多可容纳  $2(2l+1)$  个电子。  $s^2, p^6, d^{10}, f^{14}, \dots$

给定  $n$  的状态 (主壳层),  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ ,

最多可容纳  $2(2l+1) = 2n^2$  个电子。

若换成  $n, l, j, m_j$  这组表象,

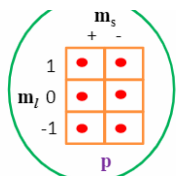
$j$  有 2 个:  $j = l + 1/2, j = l - 1/2$

$m_j$  有  $2j + 1$  个:  $m_j = j, j-1, \dots, -j$

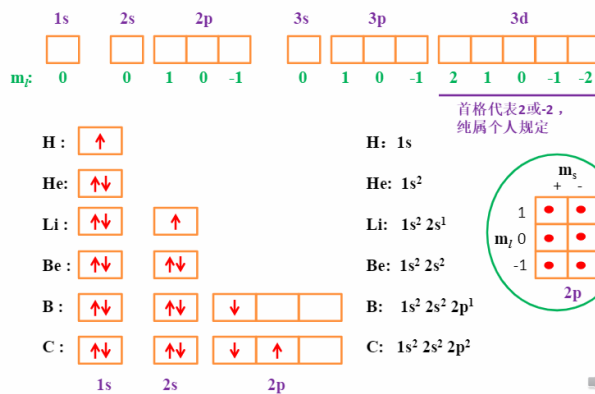
$[2(l + 1/2) + 1] + [2(l - 1/2) + 1] = 2(2l+1)$

同理证明相同的结论。即

亚壳层最多容纳  $2(2l+1)$  个, 主壳层最多容纳  $2n^2$  个电子。



## 核外电子排布的轨道方框图展示



例如 求  $f^{12}$  同科电子可生成的原子态:

$f^{12}$  与  $f^2$  互补

对于  $f^2$ , 非同科假设下 可生成原子态有  $L = 6, 5, 4, 3, 2, 1, 0$  情况下的三重态和单重态。

考虑偶数定则:  $L = 6, 5, 4, 3, 2, 1, 0$   
 $S = 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0$

得到  $^1I_6, ^3H_6, ^5G_4, ^1G_4, ^3F_4, ^3F_2, ^1D_2, ^3P_2, ^1D_0, ^3S_0$

例如  $d^9$  同科电子可生成的原子态。

$d^9$  与  $d^1$  互补。

故 原子态为  $^2D_{5/2, 3/2}$ 。

例题: 求  $Z=5$  的 B 原子 和  $Z=8$  的 O 原子的基态原子态。

基态核外电子排布

B:  $1s^2 2s^2 2p^1$

O:  $1s^2 2s^2 2p^4$

对于 B 原子, p 电子可生成原子态为  $^2P_{3/2, 1/2}$

(注意 基态只能有一个, 不能是 2 个, 问题还没完)

思路 1: 根据第四章知识, 双层精细结构能级中,  $j = l - 1/2$  能级在下。

故 B 原子基态为  $^2P_{1/2}$ 。

思路 2: p 壳层 小于半满状态, 故  $^2P_{1/2}$ 。

对于 O 原子,  $p^4$  与  $p^2$  互补。根据 斯莱特方法或者 偶数定则, 推出可生成的原子态有  $^1D_2, ^3P_2, ^1D_0, ^3P_0$ 。

根据洪特规则, 知道 基态在  $^3P_{2, 1, 0}$  之中。

根据大于半满, 知反常次序, 故  $^3P_2$ 。

PS: 体会基态核外电子排布式 与 基态原子态的含义。

问题: 本期 8 和 0

按照 LS 耦合 推导  $p^2s$  可生成的原子态。

A 给定  $n, l, m_s$  的状态上最多能容纳多少个电子?

B 前 4 个主壳层 最多容纳多少个 d 电子?

C 纯假设, 假设电子自旋是  $3/2$ , 其它规律不变。那么 N 主壳层最多容纳多少个电子?

写出  $Z=9$  的 F 原子的基态核外电子排布式。

写出这种排布式可以生成的原子态。

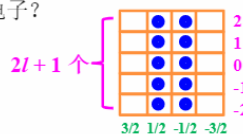
写出基态原子态

A 给定  $n, l, m_s$  的状态上最多能容纳多少个电子?

B 前 4 个主壳层 最多容纳多少个 d 电子?

1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 4f .....

没有 d 亚壳



C 纯假设, 假设电子自旋是  $3/2$ , 其它规律不变。那么 N 主壳层最多容纳多少个电子?  $4n^2 = 64$  个

写出  $Z=9$  的 F 原子的基态核外电子排布式。  $1s^2 2s^2 2p^5$

写出这种排布式可以生成的原子态。  $P^5$  与  $p^1$  互补,  $^2P_{1/2, 3/2}$

写出基态原子态。 大于半满 反常次序,  $^2P_{3/2}$ 。

再例: 价电子组态为  $d^6$ , 求基态原子态。

洪特定则:

(1) S 越大能级越低

(2) S 给定时, L 越大能级越低。

为了得到最大的 S, 即要得到最大的  $M_S(\max)$

同时要兼顾泡利不相容原理。

前 5 个电子填布方式应如右图。

下一电子的填布方式不得不自旋向下, 以保障泡利不相容原理。

洪特定则第二句, S 给定时, L 越大能级越低。

所以要使得最后一个电子的填布方式能够得到最大可能的  $M_L(\max)$

其填布方式应如右图所示。

$M_L(\max) = \sum m_l = 2 = L$

$M_S(\max) = \sum m_s = 2 = S$

大于半满, 逆序, 则  $^5D_4$ 。



$M_L = \sum m_l$

$M_S = \sum m_s$

宇称基本含义回顾:

运动一维时, 波函数关于原点对称, 则宇称为奇。

Y 轴对称, 则宇称为偶。

经空间反射后, 若波函数不变, 则宇称为偶, 若波函数相反, 则为奇宇称。

若波函数  $u(x, y, z) = u(-x, -y, -z)$ , 则宇称为偶。

若波函数  $u(x, y, z) = -u(-x, -y, -z)$ , 则宇称为奇。

二、(各小题4分, 合计12分) Be (铍, Z=4) 原子基态价电子组态是  $2s2s$ , 若其中一个电子最高被激发到  $3p$  态。

(1) 写出  $2s2s$ 、 $2s2p$ 、 $2s3s$ 、 $2s3p$  各电子组态按 LS 耦合可形成的原子态;

(2) 以能级图的形式画出上述原子态的能级次序;

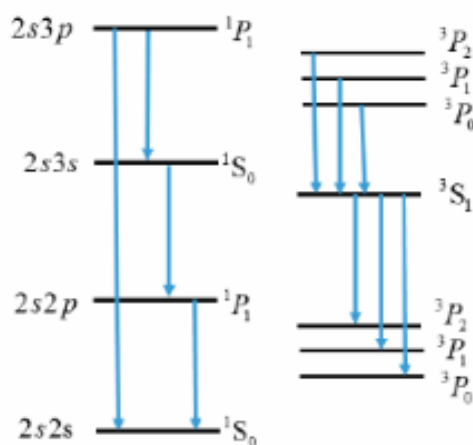
(3) 在图中标出可发生的电偶极跃迁。|

解:

$$(1) \quad 2s2s: {}^1S_0, \quad 2s2p: {}^1P_1, {}^3P_{2,1,0}$$

$$2s3s: {}^1S_0, {}^3S_1, \quad 2s3p: {}^1P_1, {}^3P_{2,1,0}$$

(2)  $2s2p, 2s3p$  非同科电子, 不知道三重态为正常次序还是倒转次序, 假设为正常次序



亚稳态的另一个成因: 电偶极跃迁速率与跃迁能量的3次方成正比。跃迁能量很小时, 也可导致亚稳态出现。

亚稳态的退激方式:

- (1) 通过其它辐射跃迁如磁偶极和电四极方式以及禁戒跃迁方式退激。
- (2) 通过与其它粒子碰撞, 将能量转化成其它粒子的动能或内能(无辐射跃迁)。
- (3) 以上几种方式概率很低时, 存在发生双光子跃迁的概率。

$$\vec{\mu}_J = -g \frac{e}{2m} \vec{P}_J$$

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m} \vec{P}_L \quad \vec{\mu}_S = -\frac{e}{m} \vec{P}_S$$

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m} \vec{P}_L \quad \vec{\mu}_S = -\frac{e}{m} \vec{P}_S$$

对比以上各式, 则可把磁矩和角动量的关系配成如下统一的形式

$$\mu_x = g_x \frac{e}{2m} P_x = g_x \sqrt{x(x+1)} \mu_B$$

当谈论原子总磁矩时,  $x$  替换为  $J$ 。

$$\mu_J = g_J \frac{e}{2m} P_J = g_J \sqrt{J(J+1)} \mu_B \quad \text{其中} \quad g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

当谈论轨道磁矩时,  $x$  替换为  $L$  (或  $l$ )。

$$\mu_L = g_L \frac{e}{2m} P_L = g_L \sqrt{L(L+1)} \mu_B \quad \text{其中} \quad g_L = 1 \quad \text{亦称} \quad \text{轨道} \quad g \quad \text{因子。}$$

当谈论自旋磁矩时,  $x$  替换为  $S$  (或  $s$ )。

$$\mu_S = g_S \frac{e}{2m} P_S = g_S \sqrt{S(S+1)} \mu_B \quad \text{其中} \quad g_S = 2 \quad \text{亦称} \quad \text{自旋} \quad g \quad \text{因子}$$

1、右上图, 如果认为孙悟空不是处在亚稳态上, 请指出他可以

进行哪些电偶极跃迁。如果认为是处于亚稳态上, 请帮忙插入

新的原子态, 教他可以通过2次电偶极跃迁回到基态。

2、假设价电子组态为  $f^5$ , 推导其生成的基态原子态。(需要过程)

3、Z=6 碳原子价电子之间遵从LS耦合。考虑一个电子被激发到  $2p3p$ 。

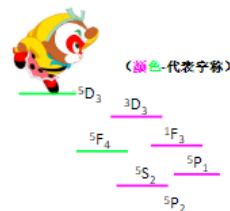
考虑精细结构,

画出从最高态到基态之间的全部原子能级,

标明每个能级的原子态,

标出可以发生的电偶极跃迁,

标出哪些态是亚稳态。



例題, 求  $Z=7$  和  $8$  的氮原子和氧原子的基态总磁矩。

**基态核外电子排布式**  
N:  $1s^2 2s^2 2p^3$ ,

**轨道方框图法**

$m_l$     1    0    -1  
 $L = \sum m_l = 0$   
 $S = 3/2$   
 基态原子态  $4S_{3/2}$   
 因为  $L = 0$ ,  
 所以  $g = g_S = 2$

**基态总磁矩**  
 $\mu_J = g\sqrt{J(J+1)}\mu_B$   
 $= 2 \sqrt{\frac{3}{2}(\frac{3}{2}+1)}\mu_B$   
 $= \sqrt{15}\mu_B$

O:  $1s^2 2s^2 2p^4$

$m_l$     1    0    -1  
 $L = 1$   
 $S = 1$   
 超半满, 逆序, 故基态为  $3P_2$   
 $g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$   
 $= 1 + \frac{2 \times (2+1) - 1 \times (1+1) + 1 \times (1+1)}{2 \times 2 \times (2+1)}$   
 $= 3/2$   
 基态总磁矩  $\mu_J = g\sqrt{J(J+1)}\mu_B$   
 $= \frac{3}{2} \sqrt{2(2+1)}\mu_B$   
 $= \frac{3\sqrt{6}}{2}\mu_B$

洪特定则 (给定电子组态下生成诸原子态的能级次序)

- (1)  $S$  越大能级越低
- (2)  $S$  给定时,  $L$  越大能级越低。
- (3)  $S$  和  $L$  给定时, 若  $J$  小能级低, 称正常次序, 若  $J$  大能级低呈反常次序。

当价电子全部来自于同一亚壳层时,  
 若  $\square$  半满, 则正常次序,  
 反之若  $>$  半满, 则呈现反常次序。

- 1、不要借助网络或现成的数据表, 简析, 哪种元素的第二电离能最大。
- 2、针对电子偶素, 写出基态时的电子组态。这个电子组态下, 形成怎样的“原子”态? 基态是什么原子态。简析。

十三、用偶数定则 推导  $s^2 p^2 d^2 f g^2$  等两个同科电子时的原子态  
 暂时不考虑泡利原理, 直接推原子态, 然后保留其中  $L+S = \text{偶数}$  的原子态, 即为符合泡利原理的原子态。例如  $p^2$  情况



十四、利用互补原理求原子态

由于填满的亚壳层  $L=S=J=0$ , 所以, 假想 把填满的亚壳层 拆成两部分, 这两部分的电子可生成的原子态相同。例如  $p^1$  与  $p^5$ ,  $p^2$  与  $p^4$ ,  $d^1$  与  $d^9$ ,  $d^2$  与  $d^8$ ,  $d^3$  与  $d^7$ ,  $d^4$  与  $d^6$  等等生成原子态相同。

2: 从磁学公式  $W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$  出发, 推导 磁能级公式

$$\Delta E = M g \mu_B B$$

(包含 自己手动画  $B \backslash P_1 \backslash J$  矢量关系图。  
 总之 模拟考场上回答, 不看任何资料)

3: 针对单个价电子的原子, 并指考虑单电子激发, 求  $g$  因子的最小值。

4: 针对惰性气体原子氦原子的基态,  
 求总自旋磁矩、总磁矩,  
 求在斯特恩-盖拉赫实验中分裂为几束。

随堂练习题: 本期 2 和 3

1、已知  $Z=27$  钴原子 基态核外电子排布为  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$   
 A 推导基态原子态 (简要过程)  
 B 求基态时的总轨道磁矩、总自旋磁矩、总磁矩

2、假设 存在同科电子  $h^{12}$ , 它所生成的原子态中, 具有最大  $L$  值的原子态是什么? (给出简要过程)

3、推导 单电子原子的有效磁矩的公式。

随堂练习题: 本期必答同学 5 & 8

- 1、简单谈谈利用塞曼效应测量天体磁场的原理。
- 2、针对  $Z=15$  的 P 元素的基态
  - 1) 写出核外电子排布式
  - 2) 推导原子态 (简要过程)
  - 3) 求  $g$  因子
  - 4) 求总轨道磁矩、总自旋磁矩、总磁矩
  - 5) 使用本课件中展示过的斯特恩-盖拉赫实验仪器, P 原子在接收屏上分裂为多少束?
  - 6) 分裂后的 P 原子束在屏上留下了黑斑, 请分析, 哪条黑斑最黑?

问题练习7:

本期 1 & 4

A 原子从 CD 到 EF 的跃迁, 在磁场 B 中发生塞曼效应。

- 1) 计算新旧谱线的波数差。
- 2) 画出相关的塞曼效应能级图, 标出跃迁及其偏振态。
- 3) 自己提出的一个问题。

其中 A 代表原子, C 和 E 代表电子组态, D 和 F 代表原子态。请自行设计合理的 ACDEF, 以及 3), 然后完成解答。  
 为避免与现成的题目发生重复, A 不可以是 硼 B、钠 Na、镉 Cd、镁 Mg, F 不可以是  $^1P_1$ 、 $^2S_{1/2}$ 。

塞曼效应, 年年期末必出题

随堂练习题8-A

本期必交学号 0 & 6

- 六、(21 分, 各 3 分) 2016 年 6 月, 理论与应用化学国际联合会 IUPAC 接受了 113、115、117 和 118 号元素发现者对这些新元素的命名提案, 名称简写分别为 Nh、Mc、Ts、Og。这也标志这些新元素的发现获得了科学界的正式认可。假设这些元素与前面大多数元素具有相同的核外电子排布特征。
- (1) 估算下 Og 元素的  $K_\alpha$  特征 X 射线的能量;
  - (2) 直接写出 Og 元素完整的基态核外电子排布式;
  - (3) 直接写出 Og 元素的基态原子态; (按照 LS 耦合, 下同)
  - (4) 计算 Og 元素的基态原子磁矩;
  - (5) 直接写出 Mc 元素的基态价电子组态及原子态;
  - (6) 计算 Mc 元素的基态原子总磁矩及总轨道磁矩;
  - (7) 考虑精细结构, 直接回答 Og 元素 K 和 L 线系 X 射线分别有多少条特征谱线?

本题为 2014 级期末试题。请在复习好相关基础知识后, 尽量闭卷回答。包含读题时间, 建议回答用时 15—30 分钟。

8-B 简要分析并回答:

- 1、Li 原子  $3d$ 、 $4s$  激发态, 哪个能级更高。
- 2、 $Z=13$  Al 原子,  $3d$  和  $4s$  激发态, 哪个能级更高。
- 3、 $Z=21$  Sc 原子基态价电子组态,  $3d^1 4s^2$ , 对应第一电离能的电子是哪个电子。
- 4、对于 118 号元素而言, 分别电离 1 个  $4f$  和  $5s$  电子的电离能, 哪个大。

9-A 问题练习

1、当 X 射线管的加速电压从 10 kV 增加到 20 kV 时, 发射谱中  $K_\alpha$  X 射线与连续谱短波限之间的波长差, 增加了 2 倍。求阳极为何种元素。

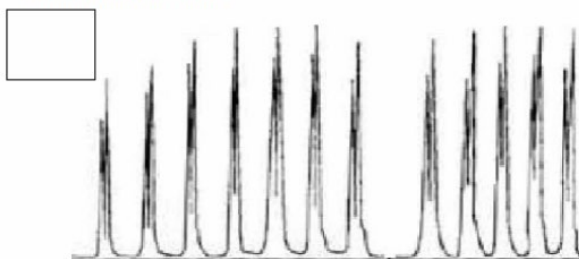
五、(6 分) 对某种元素的与 X 射线相关的吸收限进行测量。探测仪器的测量范围足够宽, 分辨本领足够好 (不考虑可能因原子核引起的超精细结构)。一共测得 4 个吸收限, 能量值 (eV 单位) 分别为 853、48、23、22。

- (1) 求此元素的  $K_\alpha$  X 射线的能量的平均值;
- (2) 判断此元素为何种元素;
- (3) 求此元素的基态时的第一电离能。



七、(合计 8 分, 各 1, 3, 2, 1, 1 分)  $^{35}\text{Cl}$  和  $^{37}\text{Cl}$  是 Cl 元素中的两种稳定同

位素, 含量比为  $Q(^{35}\text{Cl})/Q(^{37}\text{Cl})=P$ 。它们与 H 原子结合成 HCl 分子, 分子的力平衡常数均为  $k$ , 正负离子的核间平衡距离均为  $r$ 。  $\text{H}^{35}\text{Cl}$  和  $\text{H}^{37}\text{Cl}$  的折合质量分别为  $M_x$  和  $M_y$ , 若视为刚性转子时的转动惯量分别为  $I_x$  和  $I_y$ , 转动常数分别为  $B_x$  和  $B_y$  ( $=\frac{h}{4\pi I c}$ )。实测的近红外区 1-0 振转光谱带如下图 (部分)。



这张图是从完整光谱中截取的一部分, 它分成两个区域, 左区包含 7 条谱线峰, 右侧包含 5 条谱线峰。为叙述方便, 我们称这 12 个峰为 大峰。同时每个大峰实际上是有 2 个小峰构成, 简称为 小峰。图中横轴为波数, 从左向右, 波数增加。

- (1) 给出 形成最左侧大峰的初态和末态的转动量子数
- (2) 分析每个大峰内 2 个小峰的成因, 给出左右两个小峰的面积比。
- (3) 给出最右侧大峰之中 靠右侧小峰的波数表达式。
- (4) 左区每个大峰内的两个小峰的间隔 设为  $a$ ; 同理, 右区每个大峰内的两个小峰的间隔设为  $b$ 。论证比较  $a$  和  $b$  的大小。
- (5) 即使肉眼也能看出左区内大峰之间的间隔 大于 右区内大峰之间的间隔。这显然与理想振转光谱的等间隔特点不一致。请分析原因。

$^{35}\text{Cl}$   
 $^{37}\text{Cl}$

激  
转

10-A 随堂练习题 本期必答学号 1 & 4

五、(9 分, 各 2、2、4、1 分) 目前地球上天然存在的最重元素是铀。其中  $^{238}\text{U}$  的原子量、半衰期以及现今在地球上的天然同位素丰度分别为:  $M_u=238.0508$ 、 $T_{1/2}=45$  亿年、 $A_u=99.27\%$ ; 而对于  $^{235}\text{U}$ ,  $M_u=235.0439$ 、 $T_{1/2}=7$  亿年、 $A_u=0.72\%$ 。二者的丰度比  $R=A_u/A_{235}$  = 137.88。(1) 估算  $^{238}\text{U}$  的质量亏损; (2) 试图从  $^{238}\text{U}$  中分离出 1 个中子, 粗略估算下需要提供多少能量; (3) 假设地球产生于宇宙大爆炸后的星云积聚, 形成初期  $^{238}\text{U}$  和  $^{235}\text{U}$  的丰度比为  $R_0$ 。给出地球的天文年龄的表达式。(4) 您认为  $R_0$  值大约为多少比较合理? 为什么这么认为? 并按您的设想, 估算下地球的年龄。

## 附录: 试卷中可能会用到的参数及公式

原子质量单位:  $u=1.66055\times 10^{-27}\text{kg}=931.48\text{MeV}/c^2$ ;

电子静止质量  $m_e=9.1096\times 10^{-31}\text{kg}$ ;

电子静止质量能  $m_0c^2=511\text{keV}$ ; 质子静止质量  $m_p=1.6726\times 10^{-27}\text{kg}\approx 1836m_e$ ;

玻尔磁子  $\mu_B=\frac{\hbar e}{2m}=0.92732\times 10^{-23}\text{J/T}=5.788\times 10^{-5}\text{eV}\cdot\text{T}^{-1}$ ;

里德堡常数  $R_\infty=\frac{2\pi^2me}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^3c}=10973731\text{m}^{-1}$ ; 精细结构常数:  $\alpha=\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}=\frac{1}{137}$ ;

真空介电常数  $\epsilon_0$ :  $\frac{1}{4\pi\epsilon_0}=8.99\times 10^9\text{牛顿}\cdot\text{米}^2/\text{库仑}^2$ ;

氢原子第一玻尔半径  $a_1=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{4\pi^2me^2}=0.529\text{\AA}$ ;  $\hbar c R=13.6\text{eV}$ ,  $\hbar c=1.241\times 10^{-6}\text{eV}\cdot\text{m}$ ;

康普顿散射公式提示:  $\Delta\lambda=\frac{h}{mc}(1-\cos\phi)$ ; 电子的康普顿波长  $\lambda_{ec}=\frac{h}{m_e c}=0.0243\text{\AA}$ ;

单价电子体系精细结构能级提示:  $E=-\frac{Rhc(Z-\sigma)^2}{n^2}-\frac{Rhc\alpha^2(Z-s)^4}{n^4}\left(-\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)$