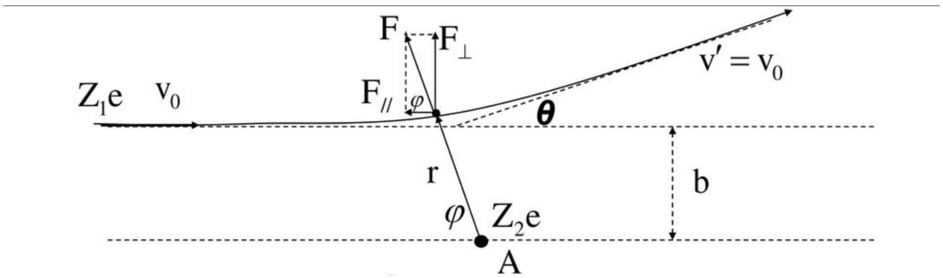
Atomic Physics Notes

Lime

2018 年 12 月 5 日

1 玻尔模型

- 库仑散射公式：



$$b = \frac{a}{2}\cot\frac{\theta}{2}, \quad a = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 E}$$

- 黑体辐射：在任意温度 T 下，从一个黑体中发射的电磁辐射的辐射率与电磁辐射的频率的关系

$$I(\nu, T)d\nu = \left(\frac{2h\nu^3}{c^2}\right)\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}\,d\nu$$

- 一个黑体表面单位面积放出的能量正比于其绝对温度的 4 次方：

$$j^\star = \sigma T^4,$$

其中 $j^\star$：单位面积所放出的总能量，T: 黑体的绝对温度，σ：斯特藩-玻尔兹曼常数，

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2h^3} = 5.67\times 10^{-8}\mathrm{J\,s^{-1}m^{-2}K^{-4}}.$$

- 里德伯方程：

$$\widetilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right]$$

$n = 1$: 莱曼系，$n = 2$: 巴耳末系 $n = 3$: 帕邢系，$n = 4$: 布拉开系

- 氢原子轨道半径

$$r_n = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{2Rhc}n^2 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}n^2$$

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2}$$

2 原子精细结构

2.1 电子态表示：

$$n^{2s+1}R_j$$

2.2 基本常量:

$$\text{轨道角动量}\begin{cases}\boldsymbol{l}=\sqrt{l(l+1)}\hbar & 0\le l\le n-1\\ \boldsymbol{l}_z=m_l\hbar & -l\le m_l\le l\end{cases}$$

$$\text{自旋角动量}\begin{cases}\boldsymbol{s}=\sqrt{s(s+1)}\hbar=\dfrac{\sqrt{3}}{2}\hbar & s=1/2\\ \boldsymbol{s}_z=\pm\dfrac{1}{2}\hbar=m_s\hbar & m_s=\pm 1/2\end{cases}$$

$$\text{电子轨道磁矩}\begin{cases}\boldsymbol{\mu}_l=-\dfrac{e}{2m_e}\boldsymbol{l}=-\gamma\boldsymbol{l}=-\sqrt{l(l+1)}\mu_B\\ \boldsymbol{\mu}_{l,z}=-m_l\mu_B\\ \text{玻尔磁子}\mu_B=\dfrac{e\hbar}{2m}=\dfrac{1}{2}\alpha c(ea_1)\end{cases}$$

$$\text{电子自旋磁矩}\begin{cases}\boldsymbol{\mu}_s=-\sqrt{3}\mu_B\\ \boldsymbol{\mu}_{s,z}=\pm\mu_B\end{cases}$$

$$\text{朗德 g 因子}\begin{cases}\boldsymbol{\mu}_j=-\sqrt{j(j+1)}g_j\mu_B & g_{e,l}=1\\ \boldsymbol{\mu}_{j,z}=-m_jg_j\mu_B & g_{e,s}=2\\ g_j=\dfrac{3}{2}+\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\widehat{s}^2-\widehat{l}^2}{\widehat{j}^2}\right) & j=l\pm\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

2.3 塞曼效应:

洛仑兹单位:

$$\mathscr{L}=\frac{eB}{4\pi m_e}=\mu_BB/h=14B(\mathrm{T})\ \mathrm{GHz}$$

$$\widetilde{\mathscr{L}}=\frac{\mathscr{L}}{c}=0.467B(\mathrm{T})\ \mathrm{cm}^{-1}$$

$$\text{正常塞曼效应}\nu' = \nu_0 + \begin{pmatrix} \mathscr{L} \\ 0 \\ -\mathscr{L} \end{pmatrix}$$

Stark 效应

$$0 \le |m_l| \le n - 1$$

$$-(n-1) \le n_F = n_1 - n_2 \le n - 1$$

2.4 选择规则:

正常/反常塞曼效应：

$$\Delta m = 0, \pm 1$$

帕邢-巴克效应

$$\Delta m_s = 0,\ \Delta m_L = 0, \pm 1$$

多电子原子：

$$\begin{aligned}
\textbf{L-S 耦合}\ & \Delta S = 0 \\
& \Delta L = 0, \pm 1 \\
& \Delta J = 0, \pm 1\,(J = 0 \implies J' = 0\,\text{除外}) \\
\textbf{j-j 耦合}\ & \Delta j = 0, \pm 1 \\
& \Delta J = 0, \pm 1\,(J = 0 \implies J' = 0\,\text{除外}) \\
\text{宇称相反}\ & \Longleftarrow\ l\,\&\,l'\,\text{奇偶相反}
\end{aligned}$$

3 量子力学导论

3.1 波函数标准条件：

$$\begin{aligned}
&\int |\Psi|^2 \mathrm{d}x = 1 \\
&\Psi, \tfrac{\partial \Psi}{\partial x}\text{连续} \\
&\Psi\text{单值有限}
\end{aligned}$$

3.2 各种关系：

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k = \sqrt{2mE_k}$$
$$E = h\nu$$
$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

3.3 Schrödinger 方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V_0\Psi$$

3.4 定态 Schrödinger 方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \boldsymbol{V}_0\right]\psi = E\psi$$

3.5 算符:

$$\widehat{p} = -i\hbar\nabla$$
$$\widehat{E} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

3.6 粒子隧穿概率：

$$P = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)D}}$$

3.7 自旋—轨道运动相互作用能：

$$\overline{\Delta E_{ls}} = \frac{hc\alpha^2 RZ^{*4}}{n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}\frac{j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)}{2} \propto \alpha^4,\ R = \frac{mc^2e^4}{4\pi(4\pi\varepsilon_0)^2(c\hbar)^3} = 1.1\times 10^7 m^{-1}$$

证明：5.1

3.8 总能量

$$E = E_0 + \Delta E_r + \Delta E_{ls}$$
$$E = -\frac{hcR(Z-\sigma)^2}{n^2} - \frac{hc\alpha^2 R(Z-s)^4}{n^3}(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n})$$

对于氢原子：$Z-\sigma = Z-s = 1$，能量与 l 无关

4 核物理导论

核磁子

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 3.152 \times 10^{-8}\ \mathrm{eV/T}$$

$$\mu_p = 2.79\mu_N$$

$$\mu_n = -1.91\mu_N$$

核磁矩与核自旋角动量 $\boldsymbol{I}$ 成正比，共 $2I+1$ 个取向：

$$\text{核磁矩}\begin{cases} \boldsymbol{\mu}_I = g_I \mu_N \boldsymbol{I} \\ \mu_{l,z} = -m_I g_I \mu_N \qquad -I \le m_I \le I \\ U = -m_I g_I \mu_N B \quad \Delta U = -m_I g_I B \end{cases}$$

电四极矩（c 为对称轴半轴，a 为旋转半轴）：

$$Q = \frac{2}{5} Z (c^2 - a^2)$$

5 证明

5.1 自旋—轨道运动相互作用能

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Z^* e}{m} \frac{\vec{L}}{r^3}$$

考虑相对论效应乘以系数 $\frac{1}{2}$

$$\Delta E_{ls} = -\frac{1}{2} \vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = \frac{\mu_0}{8\pi} \frac{Z^* e^2}{m^2} \frac{\vec{S} \cdot \vec{L}}{r^3} = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \frac{Z^* e^2}{m^2 c^2} \frac{\vec{S} \cdot \vec{L}}{r^3}$$

代入

$$\vec{S} \cdot \vec{L} = LS\cos\theta = \frac{\vec{j}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2}{2} = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} \hbar^2$$

$$\Longrightarrow \Delta E_{ls} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Z^* e^2}{2m^2 c^2 r^3} \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} \hbar^2$$

由量子力学知

$$< r^{-3} > = \frac{Z^{*3}}{a_1^3 n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

$$\overline{\Delta E_{ls}} = \frac{hc\alpha^2 R Z^{*4}}{n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} \propto \alpha^4,\ R = \frac{mc^2 e^4}{4\pi (4\pi\varepsilon_0)^2 (c\hbar)^3} = 1.1 \times 10^7 \propto \alpha^2$$

返回：3.7