

崔宏滨原子物理习题选解

中国科大近代物理系 尤一宁

2017 年 5 月 25 日

1 第一章

1.2 注意组合常数的使用:

$$\cot \frac{\theta}{2} = \frac{2b}{a}$$
$$a = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 E} = \frac{2Z}{E} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

其中 $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.44 fm \cdot MeV, E = 7.68 MeV$

1.6 注意斜入射相当于增大了靶原子数密度, 最终解出 Z 的值

$$\frac{dn}{n} = \frac{Ntd\sigma}{\sin 60^\circ} = \frac{\eta N_A}{A \sin 60^\circ} d\sigma$$
$$d\sigma = \frac{1}{16} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{2Z}{E} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$
$$d\Omega = \frac{dS}{L^2}$$
$$dS = 0.6 cm^2 \quad L = 0.12 m$$

1.8 使用变量的整体代换, 计算量小

$$\int_{20^\circ}^{180^\circ} \frac{dn}{n} = \frac{Nt\pi}{4} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{2Z}{E} \right)^2 \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} \Big|_{180^\circ}^{20^\circ} = 4.0 \times 10^{-3}$$

get $\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{2Z}{E} \right)^2$

$$\text{substitute } \frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{60^\circ} = \frac{1}{16} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{2Z}{E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{60^\circ}{2}}$$

1.9 第一种观点：平均场，即使用平均靶原子数 $Nt = \frac{\eta N_A}{M}$ 和平均核电荷

$$\int_{60^\circ}^{180^\circ} \frac{dn}{n} = \frac{Nt\pi}{4} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{2Z}{E} \right)^2 \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} \Big|_{180^\circ}^{60^\circ}$$

第二种观点：统计平均，30% 的可能打在银上，70% 的可能打在金上

$$\left(\int \frac{dn}{n} \right)_T = 0.3 \times \left(\int \frac{dn}{n} \right)_{Ag} + 0.7 \times \left(\int \frac{dn}{n} \right)_{Au}$$

一般只考虑单个靶粒子的单次散射，当然采用第二种；但实际上固体理论是否符合平均场，有待查证。

1.11 公式 $\int \frac{dn}{n} = \frac{Nt\pi}{4} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{2Z}{E} \right)^2 \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}$ 实际上有更简单的算法：

$$d\sigma = 2\pi b db = \pi db^2$$

$$b = \frac{1}{2} a \cot \frac{\theta}{2}$$

$$\frac{dn}{n} = Nt d\sigma$$

$$\int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{dn}{n} = Nt \pi b^2 \Big|_{\theta_1}^{\theta_2}$$

建议考试时使用这种公式来写，虽一样但是按计算器的操作更简便。

1.14 记住结论

$$r_m = a = \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 E}$$

2 第二章

常用的常数及组合常数：

$$h = 6.63 \times 10^{-34} J \cdot s$$

$$R = 1.097 \times 10^7 m^{-1}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137}$$

$$\hbar c = 1970 \text{Å} \cdot eV$$

$$hc = 1240 \text{Å} \cdot eV$$

$$m_e c^2 = 511 \times 10^3 eV$$

2.3 $E_n = -\frac{13.6}{n^2}eV$, 则基态 $-13.6eV$, 第一激发态 $-3.4eV$, 第二激发态 $-1.51eV$, 第三激发态 $-0.85eV$, 最高能够激发到第二激发态, 向下跃迁为: 第二 \rightarrow 第一, 第二 \rightarrow 基态, 第一 \rightarrow 基态。

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240\text{\AA} \cdot eV}{\lambda}$$

2.4 氢原子第一半径 $a_1 = 0.53\text{\AA}$, $r_n = a_1 n^2$, 类氢离子 $r_n = \frac{a_1 n^2}{Z}$; 氢原子基态能 (电离电势) $E_1 = -13.6eV$, 各能级为 $E_n = \frac{E_1}{n^2}$, 类氢离子能级 $E_n = \frac{E_1 Z^2}{n^2}$; 类氢离子激发能的计算:

$$\Delta E \propto \frac{1}{\lambda} \propto Z^2$$

$$\lambda \propto Z^{-2}$$

2.5 电离的意思是从原子周围拆出电子, 即将电子激发到 $n = \infty$, 而“二次电离的 Li 和一次电离的 He”只是类氢原子, 注意: 一次电离 \neq 激发到第一激发态, 切勿搞混!

$$E_{\text{photon}} = 3^2 \times (13.6eV - \frac{13.6}{4}eV) = 91.8eV$$

$$E_{\text{ionize}} = 13.6eV \times 2^2 = 54.4eV$$

另, 这类题目思路清晰, 尽量提早代入数值化简。

2.7

$$\frac{1}{\lambda} = R_{e^+e^-} (1 - \frac{1}{4})$$

$$R_{e^+e^-} = R_{\infty} \frac{1}{1 + \frac{m_e}{M}} = R_{\infty} \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_e}} = \frac{1}{2} R_{\infty}$$

2.9 注意题目的含义, 一次电离的公式已给出, 二次电离的待求, 三次电离的就是类氢原子电离:

$$Li \rightarrow Li^+ \quad \Delta E_1 = hc\tilde{\nu} = hc(\frac{R}{(1 + 0.5951)^2} - \frac{R}{(\infty)^2})$$

$$Li^+ \rightarrow Li^{++} \quad \Delta E_2 = ?$$

$$Li^{++} \rightarrow Li^{+++} \quad \Delta E_3 = Z^2 \times 13.6eV$$

$$Li \rightarrow Li^{+++} \quad 203.44eV = \Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3$$

2.10 $F = \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \mu_x \frac{\partial B}{\partial x}$ 磁场有梯度才有力, 才有偏转。

2.11 由:

$$s = \frac{1}{2}at^2 = \frac{1}{2} \frac{F}{2m} \left(\frac{L}{v}\right)^2 = \frac{1}{2m} \frac{dB}{dz} \left(\frac{L}{v}\right)^2 \mu_z$$

得到银原子在不均匀磁场和磁场边缘到屏的关于 μ_z 的纵向位移, 二者和为 0.001m。

2.12

$$\begin{aligned}\tilde{\nu}_H &= R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\infty} \right) \\ \tilde{\nu}_{H_e^+} &= R_{H_e^+} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\infty} \right) \\ \frac{\tilde{\nu}_H}{\tilde{\nu}_{H_e^+}} &= \frac{R_H}{R_{H_e^+}} = \frac{1 + \frac{m_e}{4m_p}}{1 + \frac{m_e}{m_p}}\end{aligned}$$

2.19

$$\Delta E = 13.6 \left(1 - \frac{1}{4^2} \right) = 12.75 eV$$

不考虑反冲时:

$$\begin{aligned}\tilde{\nu} &= R_H \left(1 - \frac{1}{4^2} \right) \\ \lambda &= \frac{1}{\tilde{\nu}}\end{aligned}$$

考虑反冲时:

$$\begin{aligned}h\nu &= \Delta E - \frac{1}{2}mv^2 \\ \frac{h\nu}{c} &= mv\end{aligned}$$

2.20 (1) $E = hcR_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ (2) 跃迁 $\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ 。其中, 莱曼系为 $m=1, n=2, 3, 4$; 巴尔末系为 $m=2, n=3, 4$; 帕邢系为 $m=3, n=4$ 。

2.23 (1) 使用热力学公式:

$$\begin{aligned}E_1 &= -hcR_H \\ E_2 &= -hcR_H \frac{1}{2^2} \\ \frac{N_2}{N_1} &= \frac{g_2}{g_1} e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}} \\ N_2 &= 1 \\ v &= \frac{N_1 RT}{N_A p}\end{aligned}$$

(2) H_α 为氢原子从 $n=3$ 跃迁至 $n=2$, 电子必须有从基态跃迁至 $n=3$ 的激发态的能量 $E = hcR_H(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2})$

2.26

$$s = \frac{1}{2}at^2 = \frac{1}{2} \frac{F}{2m} \left(\frac{L}{v}\right)^2 = \frac{1}{2m} \frac{dB}{dz} \left(\frac{L}{v}\right)^2 \mu_z$$

$$v = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$$

$$\Delta s = 2s$$

分开的距离注意要乘 2 倍。

3 第三章

本章需要注意判断是否需要考虑相对论情况, 当算得 E_k 对应的经典速度超光速, 则需要使用相对论的协变形式。

3.1 $W = h\nu, \nu = \frac{c}{\lambda}, E = \frac{hc}{\lambda} = E_k + W, W$ 为逸出功

3.2 $p = \frac{h}{\lambda}, E = \frac{hc}{\lambda}$

3.3 严格地, 使用相对论情况:

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$$

$$E = m_0 c^2 + eU$$

$$\text{thus } p = \sqrt{2m_0 c^2 eU + e^2 U^2}$$

即总能量为静能和电场做功的动能之和。

3.4 (1) $p = \frac{h}{\lambda}$ 普适, λ 相等则 p 相等

(2) 光子无静能

$$E_{\text{photon}} = \frac{h}{\nu} = \frac{hc}{\lambda}$$

$$E_e = E - E_0 = E - m_e c^2$$

$$E^2 = m_e^2 c^4 + p^2 c^2 = m_e^2 c^4 + \left(\frac{hc}{\lambda}\right)^2 c^2$$

3.5 (1)

$$E_k = mc^2 - m_0c^2 = m_0c^2$$

$$m = 2m_0 = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$v = \frac{\sqrt{3}}{2}c$$

(2)

$$E^2 = (mc^2)^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2$$

$$p = \sqrt{3}m_0c$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

3.7 同 3.3 的 p

3.9 (1) 康普顿散射的公式只要记住 $\Delta\lambda$ 的即可

$$\text{before } E = h\nu$$

$$\text{after } E' = h\nu' = \frac{hc}{\lambda'} = \frac{hc}{\lambda + \Delta\lambda}$$

$$= \frac{hc}{\frac{hc}{E} + \frac{1}{m_p c}(1 - \cos\theta)} = \frac{1}{\frac{1}{E} + \frac{1}{m_p c^2}(1 - \cos\theta)}$$

(2) 对于质子的初末态:

$$E_k = E - E' = mc^2 - m_0c^2 = \left(\frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - m_0\right)c^2$$

 E_k 能求出, 然后解出 v 即可。

3.11 (1)

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0c}$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$\frac{\lambda_c}{\lambda} = \frac{pc}{m_0c^2} = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2c^4}}{m_0c^2} = \sqrt{\left(\frac{E}{E_0}\right)^2 - 1}$$

(2)

$$\frac{\lambda_c}{\lambda} = 1$$

$$E = \sqrt{2}E_0$$

$$E_k = E - E_0 = (\sqrt{2} - 1)E_0$$

3.13 动能不大，可以直接用经典动能

3.15 纯计算题，注意约化康普顿波长为 $\frac{\hbar}{m_0 c}$ ，多除了一个 2π 3.17 $E_k = \frac{3}{2}kT = 0.0385\text{eV}$ ，直接用经典的 $p = \sqrt{2m_n E_k}$ 即可，当然取最概然速率等也未尝不可；衍射条件为 $n\lambda = 2d\sin\theta$

3.21/22 用不确定性关系

3.23 注意 $\Delta E = \frac{\hbar c \Delta \lambda}{\lambda^2}$

3.24

$$E_{\min} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}$$

$$\Delta x = L$$

在第二小问的情况下，计算出最小动能为 95MeV ，如果是一个真实粒子的话，已经超光速了。可以考虑相对论修正。然而我们一般以上式为估算方法，原因是：薛定谔方程是一个非相对论性方程，它的哈密顿量有经典的动能项，那么自由哈密顿量（能量）的本征值就是 $\frac{p^2}{2m}$ 。在非相对论性量子力学中， Δx 极小时， Δp 接近无穷大。但这种动量空间中的平面波并不能代表非相对论的真实粒子，真实粒子是一个波包，位置和动量都有有限的范围。

当然，对于此题可以做相对论修正，并包含量子力学的出发点：

$$p_{\min}^2 = \frac{\hbar^2}{4L^2}$$

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 = (m_0 c^2 + E_k)^2$$

量子力学里没有速度，而相对论能量的协变形式以平方出现，用以上两式求出最小动能，将符合相对论。

3.25 势能为零时，薛定谔方程的能量本征解满足：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E \Psi(x)$$

自由运动粒子的波函数:

$$\Psi(x) = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)}$$

代入上式有:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)} = \frac{p^2}{2m} \Psi = E \Psi$$

故 $E = \frac{p^2}{2m}$

3.26 详见课本 3.6.3, 即 P134-136。充分利用边界条件, 注意各部分 k 的取值。

3.27 分离变量法, 且各方向的性质相同:

$$\Psi = \Psi_x \Psi_y \Psi_z$$

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi = 0$$

$$\text{we get } \Psi_i(i) = A \cos k_i + B \sin k_i, (i = x, y, z)$$

$$\text{where } A = 0, B \sin k_i = 0$$

$$k = \frac{n_i \pi}{a} = \frac{\sqrt{2mE_i}}{\hbar}$$

$$3.28 \quad d = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

$$3.29 \quad k = \frac{n\pi}{a}, \text{ 由 } \sqrt{\frac{2}{a}} = 1, \text{ 得 } a=2. \text{ 于是 } k = \frac{n\pi}{2} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{ 则 } E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8m}.$$

3.30 (1) $(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2) u(x) = E u(x)$, (2) 将 $u_0(x), u_1(x)$ 代入薛定谔方程, 得 $E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}, E_1 = \frac{3\hbar \omega}{2}$, (3):

$$E_k = \frac{p^2}{2m} \geq \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{2\Delta x} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2}$$

$$E = E_k + V \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2 \geq \frac{\hbar \omega}{2}$$

最后一步中用到基本不等式.

$$3.31 \quad E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$3.32 \quad n=2, l=0, 1, \text{ 当 } l=0, m=0; \text{ 当 } l=1, m=\pm 1, 0$$

3.33 $3\cos^2\theta - 1$ 是 $l=2, m=0$ 的球谐函数, $(\frac{r}{a_1})^2 e^{-\frac{r}{3a_1}}$ 在 $l=2$ 是 $n=3$ 的径向函数, 故 $n=3, l=2, m=0$

$$3.34 \quad U(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r}, \bar{r} = a_1, \text{ 故 } \bar{U} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_1}$$

$$3.35 \quad P = \int_0^{10^{-13}} |R|^2 r^2 dr$$

3.36 $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar = 2\sqrt{3}\hbar$ 。沿磁场方向的分量的意思就是沿 z 方向的分量，就是说 stern-gerlach 实验中通过磁场将各本征态分开了。当然，磁场不会影响 m 的值。 $m = \pm 3, \pm 2, \pm 1, 0$

$$3.37 (1) \int |\psi|^2 dV = 1, N = \sqrt{\frac{1}{8abc}}, (2) P = \int_0^a dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz |\psi|^2 = \frac{1-e^{-1}}{2}, (3) P = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-b}^b dy \int_{-c}^c dz |\psi|^2 = (1-e^{-1})^2$$

4 第四章

4.1 主线系最长波长对应 $2s \rightarrow 2p$, 辅线系系限对应 $2p \rightarrow \infty$

4.3 主线系系限对应 $3s \rightarrow \infty$, 共振线对应 $3s \rightarrow 3p$, 漫线系第一条对应 $3p \rightarrow 3d$, 基线系第一条对应 $3d \rightarrow 4f$

4.4 同 4.1

4.5 $\frac{1}{\lambda_1} = \tilde{\nu}_1 = \frac{R_A}{(4-\Delta s)^2}$, 可求出 Δs ; $\frac{1}{\lambda_2} = \tilde{\nu}_2 = \frac{R_A}{(4-\Delta s)^2} - \frac{R_A}{(4-\Delta p)^2}$, 可求出 Δp

4.6 跃迁定则限制在 l 只能差 $0, \pm 1$, 此情况都满足, 有 $3p \rightarrow 3s, 3s \rightarrow 2p, 2p \rightarrow 2s, 3p \rightarrow 2s$

4.11 铯原子 $n=6$ 参考课本 p173-p174, 观察各组数据找出规律: A 组 3 个一组, 对应 $nd \rightarrow 6p$, 为漫线系; B 组 1 个一组, 对应 $ns \rightarrow 6p$, 为锐线系; C 组 2 个一组, 对应 $np \rightarrow 6s$, 为主线系。图略。

4.13

- (1) $D_2 = 3^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 3^2S_{\frac{1}{2}}, D_1 = 3^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 3^2S_{\frac{1}{2}}$
- (2) s 与 p 能级的差, 来自于原子实极化和轨道贯穿
- (3) p 能级内的分裂 (碱金属), 来自于自旋轨道相互作用
- (4) (期中考试题目) 双线强度之比为 $\frac{I_2}{I_1} = \frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-\frac{E_2-E_1}{kT}} = \frac{g_2}{g_1} e^{-\frac{\delta E}{kT}}$, 其中 g 是精细能级的简并度, $j = \frac{3}{2}$ 的简并度是 4, 而 $j = \frac{1}{2}$ 的简并度是 2, 故 $\frac{I_2}{I_1} = 2e^{-\frac{\delta E}{kT}}$

$$4.16 \vec{l} \cdot \vec{s} = \frac{j^2 - l^2 - s^2}{2} \hbar^2 = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2}, & j = \frac{3}{2} \\ -\hbar^2, & j = \frac{1}{2} \end{cases}$$

4.19 双重线的能级差为 $\Delta E = \frac{Rh c \alpha^2 Z^4}{n^3 l(l+1)} = hc \Delta \tilde{\nu}$, 莱曼系主线双重线为 $n=2, l=1$ 的双线, 带入求得 $Z=3$ 。

4.20 由不确定关系 $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$, 而谱线的自然宽度为 $\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta E_2 + \Delta E_1}{E}$, 用不确定关系计算即可。注意能量的不确定度是 \pm 的, 因此总不确定度是数值相加。

4.21 注意, 此处我们只计算磁矩的大小。如果考虑磁矩的方向, 则由于可观测量不相容, 只能有一个方向的。

$$\begin{cases} \mu_l = \frac{e}{2m_e} P_l, P_l = 0 \\ \mu_s = \frac{e}{m_e} P_s, P_s = \sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \end{cases}$$

故 $|\vec{\mu}| = \frac{\sqrt{3}e\hbar}{2m_e} = \sqrt{3}\mu_B$.

4.26 $\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}}$, 而氢原子只考虑 n 相同的简并度为 $2n^2$ (考虑自旋)。

5 第五章

5.1 电离第一个电子须提供结合能, 电离后是类氢离子: $E = 24.5 + \frac{13.6Z^2}{n^2} = 78.9\text{eV}$.

5.2 $l_1 = 0, l_2 = 1$, 故 $L = 1$; 当 $s=0, J=1 \rightarrow {}^1P_1$; 当 $s=1, J=2, 1, 0 \rightarrow {}^3P_{2,1,0}$.

5.3 电子组态为 $l_1 = 1, s_1 = \frac{1}{2}; l_2 = 2, s_2 = \frac{1}{2}$, 组成原子组态为 $L = 2, S = 1$.

- 轨道角动量: $P_{l_1} = \sqrt{l_1(l_1+1)}\hbar = \sqrt{2}\hbar, P_{l_2} = \sqrt{6}\hbar, P_L = \sqrt{6}\hbar$, 求夹角: $\cos\theta(l_1, l_2) = \frac{P_L^2 - P_{l_1}^2 - P_{l_2}^2}{2P_{l_1}P_{l_2}} = -\frac{1}{2\sqrt{3}}, \theta_{l_1, l_2} = 106.78^\circ$
- 同理求自旋角动量 $\cos\theta(s_1, s_2) = \frac{1}{3}$

5.4 $J=2, L=3, S=1, \theta(J, L) = \arccos \frac{P_L^2 + P_J^2 - P_S^2}{2P_L P_J} = \arccos \frac{2\sqrt{2}}{3} = 19.47^\circ$.

5.5 $J = \frac{3}{2}, L = 2, S = \frac{3}{2}, \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{P_J^2 - P_L^2 - P_S^2}{2} = -3\hbar^2$

5.6 同 5.5, 当 $J = \frac{5}{2}, \vec{L} \cdot \vec{S} = \hbar^2, J = \frac{3}{2}, \vec{L} \cdot \vec{S} = -\frac{3}{2}\hbar^2$

5.7 (1) $4s5s$ LS 耦合: $4s: l_1 = 0, s_1 = \frac{1}{2}, 5s: l_2 = 0, s_2 = \frac{1}{2}$, 形成原子态: $S = 0, 1; L = 0 \rightarrow J = 0, 1$, 为 ${}^1S_0, {}^3S_1$. (2) $4s4p$ LS 耦合: $4s: l_1 = 0, s_1 = \frac{1}{2}, 4p: l_2 = 1, s_2 = \frac{1}{2}$, 形成原子态: $S = 0, 1; L = 1 \rightarrow S = 0, {}^1P_1; S = 1, {}^3P_{2,1,0}$. (3) 能级图为 (注意 $2S+1$ 大能量低):

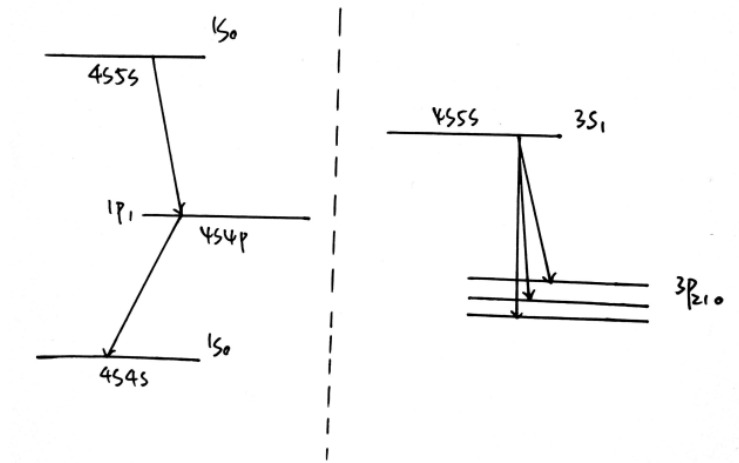


图 1: 5.7

5.9 技巧：把需要填充的层的 1 格画出，从大到小填充同向自旋的电子，填满后再填充反向自旋的电子 (使 L, S 值都最大)；小于半满选 J 最小的，大于半满选 J 最大的。

m_l	1	0	-1
m_s	↑	↑	

图 2: 5.9

如上图，将 m_l 求和得 $L = 1$ ，而 m_s 求和得 $S = 1$ ，由于小于半满，则选 J 最小的是基态 $J = 0 \rightarrow {}^3P_0$ 。

m_l	1	0	-1
m_s	↑	↑	↑

图 3: 5.9

如上图, 将 m_l 求和得 $L = 0$, 而 m_s 求和得 $S = \frac{3}{2}$, 正好半满的时候 J 只有一个值, 则基态为 $^4S_{\frac{3}{2}}$.

5.10 $1s2p$ 组成 $^1P_1, ^3P_{2,1,0}$, $1s2s$ 组成 $^1S_0, ^3S_1$, $1s1s$ 组成 1S_0 .

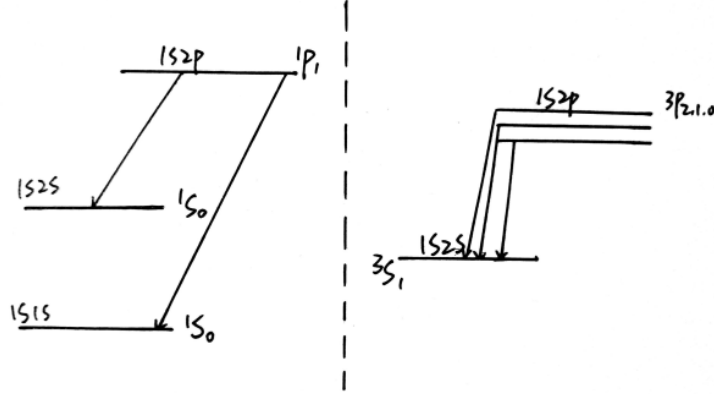


图 4: 5.10

5.11 锐线系为 p 到 s , 则锐线系三重态指 $S = 1, L = 1, J = 2, 1, 0$, 由朗德间隔定则: $E_2 - E_1 = 2(E_1 - E_0)$, 故 $\frac{\Delta\nu_2}{\Delta\nu_1} = \frac{E_2 - E_1}{E_1 - E_0} = \frac{1}{2}$

5.12 jj 耦合: $6p: l = 1, s = \frac{1}{2}, j_1 = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$; $7s: l = 0, s = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}$

$$j_1 = \frac{3}{2}, j_2 = \frac{1}{2}, J = 2, 1 \rightarrow \left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right)_{2,1}$$

$$j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}, J = 1, 0 \rightarrow \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)_{1,0}$$

5.13 查表得 P 与 P_d .

5.14 $3d$ 的 $m_l = \pm 2, \pm 1, 0$, 自旋可以填上下两个, 共 10 个.

5.15 (1) $m_s = \pm \frac{1}{2}$ 共两个; (2) m_l 有 $2l + 1$ 个, m_s 有 2 个, 共 $2(2l + 1)$ 个; (3) 共 $2n^2$ 个.(记住)

5.18

• $2s3p$ 组成 $^1P_1, ^3P_{2,1,0}$, $2s3s$ 组成 $^1S_0, ^3S_1$, $2s2p$ 组成 $^1P_1, ^3P_{2,1,0}$, $2s2s$ 组成 1S_0 . 共十条.

• 若只是指下面三个能级: $2s2p$ 组成 $^1P_1, ^3P_{2,1,0}$, $2s2s$ 组成 1S_0 . 只有一条.

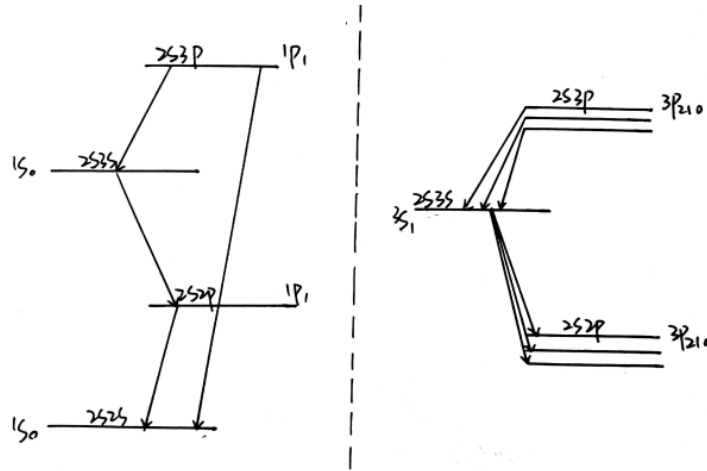


图 5: 5.18

$$5.32 \ E_{max} = 10^5 eV = h \frac{c}{\lambda}$$

5.34 标识谱 K 线系的波数 $\tilde{\nu} = R(Z-1)^2(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2})$, 则 $\lambda = \frac{1}{\tilde{\nu}}$, 波长包含在短波限范围内, 能看到.

$$5.39 \ E = h\nu = hcR(Z-1)^2(1 - \frac{1}{2^2}), \text{ 可求得 } Z=26.$$

5.42 K 的吸收限上, 相当于高能级的电子能量趋于 0, 吸收限对应电离出去的电子的能量, $E_k = -h\frac{c}{\lambda}$; 类氢离子中基态能量 $E = h\nu = -hcRZ^2$. 二者不同, 因为钨原子中有其他电子势场的贡献.

5.46 55.8keV, 33.7keV 是原子 K, L 壳层电子被电离所得 (以下能量记正值); $21.6keV = (E_K - E_M) - E_L$ 是 k_β 线产生的 L 层俄歇电子 (即 M 到 K 跃迁打出 L 层电子); $18.8keV = (E_K - E_L) - E_L$ 是 k_α 线产生的 L 层俄歇电子 (即 L 到 K 跃迁打出 L 层电子).

6 第六章

$$6.1 \ \omega = |\frac{\mu_s B}{P_s}| = \frac{eB}{m_e}, \text{ 其中银原子只有 S 轨道的电子, 无轨道角动量.}$$

6.3 熟悉的题目。

$$Ma = \mu_z \frac{dB}{dz}$$

$$y = \frac{1}{2}a(\frac{L_1}{v})^2 + a\frac{L_1 L_2}{v^2} = \frac{a}{v^2}(\frac{L_1^2}{2} + L_1 L_2)$$

6.4 (1) $\mu_s = -\frac{e}{m_e}P_s$, 则沿磁场分量 $\mu_z = \pm\frac{e}{m_e}\frac{1}{2}\hbar = \pm\mu_B$, 能量差为 $\Delta E = 2\mu_B B$; (2) $\Delta E = h\frac{c}{\lambda}$.

6.5

- $\Delta E = -\vec{\mu}_J \cdot \vec{B} = \frac{ge}{2m_e}\vec{P}_J \cdot \vec{B} = gM\mu_B B$, 对 $2^2P_{\frac{3}{2}}, l=1, s=\frac{1}{2}, j=\frac{3}{2}$; $\Delta E = \frac{4}{3}M\mu_B B$, 对 $2^2P_{\frac{1}{2}}, l=1, s=\frac{1}{2}, j=\frac{1}{2}$; $\Delta E = \frac{2}{3}M\mu_B B$
- 帕邢巴克效应下 $\Delta E = (m_l + 2m_s)\mu_B B, m_l = \pm 1, 0; m_s = \pm \frac{1}{2}$, 分别计算, 去掉重复的, 共有五个能量值.

6.6 2p 态由于 LS 耦合引起的双层能级间隔为 $\Delta E_{ls} = \frac{Rhca^2 Z^4}{n^3 l(l+1)}$, 此处 $n=2, l=1, Z=1$. 在外场下能量改变为 $Mg\mu_B B$, 而相邻能级 M 差 1, 故 $\Delta E = g\mu_B B$.

6.7 $L=3, S=\frac{3}{2}, J=\frac{3}{2}$, 从 J 看出会分成四束; $\mu_J = g\frac{e}{2m_e}P_J$, 其中 $P_J = \sqrt{J(J+1)}\hbar$.

6.8 $2J+1=9$ 支, $J=4$; 由 5D 知 $S=2, L=2$, 故可求 $\mu_{J_{max}} = g\frac{eJ\hbar}{2m_e}$, 运动学求解 d 即可.

6.10 (期中考试) 对 $3^2D_{\frac{3}{2}}, l=2, s=\frac{1}{2}, j=\frac{1}{2}$, 有 $g_2 = \frac{4}{5}$, 而 $2^2P_{\frac{1}{2}}$ 的 $g_1 = \frac{2}{3}$; $\Delta E = (M_2g_2 - M_1g_1)\mu_B B$, 去掉重复的系数, 共有六条谱线.

6.15 $g = \frac{2}{3}$, 顺磁共振 $g\mu_B B = h\nu$

6.16 由上式求得 $g=2$, 而钾原子基态是 S, 就是 $g=2$ 的态.

6.18

- $\mu_{z_{max}} = M_{max}g\mu_B$, 而 (1) 4F 分成四束, $J=\frac{3}{2}, S=\frac{3}{2}, L=3$, 可求 g ; (2) 6S 分成六束, $J=\frac{5}{2}, S=\frac{5}{2}, L=0$; (3) 5D 分成九束, $J=4, S=2, L=2$.
- 由 $\Delta E = hc\tilde{\nu} = Jg\mu_B B$, 而单重态的 $g=1$, 可求得 $J=L=6$, 故为 1I_6 .

6.23 氢原子 $s=\frac{1}{2}, j=l \pm \frac{1}{2}$, 带入 $g = 1 + \frac{j^{*2} - l^{*2} + s^{*2}}{2j^{*2}}$, 对 l 从 0 到正无穷:

$$j = l + \frac{1}{2}, g = 1 + \frac{1}{2(l + \frac{1}{2})}, 1 < g \leq 2$$

$$j = l - \frac{1}{2}, g = 1 - \frac{1}{2(l + \frac{1}{2})}, \frac{2}{3} \leq g < 1$$

6.25 氢原子基态 $s=\frac{1}{2}, l=0, j=\frac{1}{2}$, 与质子的 $j=\frac{1}{2}$ 耦合, 则总角动量量子数 $F = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} = 0, 1$, 将造成双能级劈裂.

7 第七章

7.1 NaCl 解离能 (需要给多少能量, 才能使其解离): 1. 给 Cl 离子亲和能 E_- , 把电子从 Cl 离子中拆开; 2. 电子还给 K 离子, 释放 K 的电离能 E_+ ; 3. 克服两离子的库伦力, 需要做功 E_C ; 4. 拆开过程中等效与泡利排斥力排斥做正功, 释放能量 E_P . 故消耗的能量为 $E_- - E_+ + E_C - E_P$. 考试时若不做要求, 不用计算泡利排斥能。

$$7.2 \omega = \sqrt{k}\mu = 2\pi c\tilde{\nu}_0, k = (\tilde{\nu}_0 2\pi c)^2 \mu.$$

7.3 跃迁公式: $\tilde{\nu} = \Delta v \tilde{\nu}_0 - \Delta v(v_1 + v_2 + 1)\tilde{\chi} \tilde{\nu}_0$, 其中 $\Delta v = v_2 - v_1$. 位势深度 = 解离能 + 零点能 ($\frac{1}{2}\hbar\omega_0$).

7.5 位势深度 - 零点能 = 解离能; 估算时假定势阱深度一样 (因为解离能不能解析求解, 所以题意应该是借零点能的区别估算解离能), 而 $\tilde{\nu}_0 = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$, 而 $\mu_D > \mu_H$, 因此零点能是 DCl 小一些, 解离能 DCl 高一些.

7.7 位势深度 = 解离能 + 零点能, 而除去零点能以外的振动能 $n\hbar\omega$, 若与解离能 4.5eV 相抵, 则分子被解离.

7.8 (1) 验证 $\frac{dU}{dR} = 0 \rightarrow R = R_0$. (2) 二阶导数 $k = \frac{d^2U}{dR^2} = -2\beta^2 U_0 e^{-\beta(R-R_0)} [1 - 2e^{-\beta(R-R_0)}]$, 在 $R = R_0$, $k = 2U_0\beta^2$. (3) 势深度 $U_0 =$ 解离能 4.52eV + 零点能 $\frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}$, 由 k 求 β , U_0 .

7.9 近红外的转动振动光谱带: 基线看不到, 但两侧邻近波数相差 $\Delta\tilde{\nu} = 2B = \frac{h}{4\pi^2 I_C} \rightarrow I = \frac{h}{4\pi^2 \Delta\tilde{\nu}_C}$.

$$7.10 \frac{\tilde{\nu}_1}{\tilde{\nu}_2} = \sqrt{\frac{\mu_2}{\mu_1}}$$

7.12 (1) 纯转动光谱, 波数与跃迁能级大的那个 J 成正比: $\tilde{\nu} = 2BJ$, 则 $\frac{\tilde{\nu}_6}{\tilde{\nu}_1} = \frac{\lambda_1}{\lambda_6} = 6$. (2) $\tilde{\nu}_1 = \frac{1}{\lambda_1} = 2B, I = \frac{h}{8\pi^2 Bc}$.

$$7.14 (1) B = \frac{h}{8\pi^2 \mu r^2 c}, \text{ 求 } r; (2) \text{ 间隔 } 2B \propto \frac{1}{\mu}.$$

$$7.15 \text{ 两伴线波数差 } \Delta\tilde{\nu} = 2\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}, \text{ 而 } hc\tilde{\nu} = \hbar\omega, \text{ 且 } k = \omega^2 \mu.$$

7.16 应为转动拉曼谱, 间隔为 $4B$

7.17 斯托克斯线 $\tilde{\nu}_J - \tilde{\nu}_0 = +(6+4J)B$, 而 $J = -2$, $\tilde{\nu}_J - \tilde{\nu}_0 = -6B$, $\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_0 + \Delta\tilde{\nu}$.

7.18 转动谱: 瑞利线在中心, 斯托克斯线 $-6B, -10B$, 反斯托克斯线 $+6B, +10B, +14B$