

原子物理学 习题课

陶军全

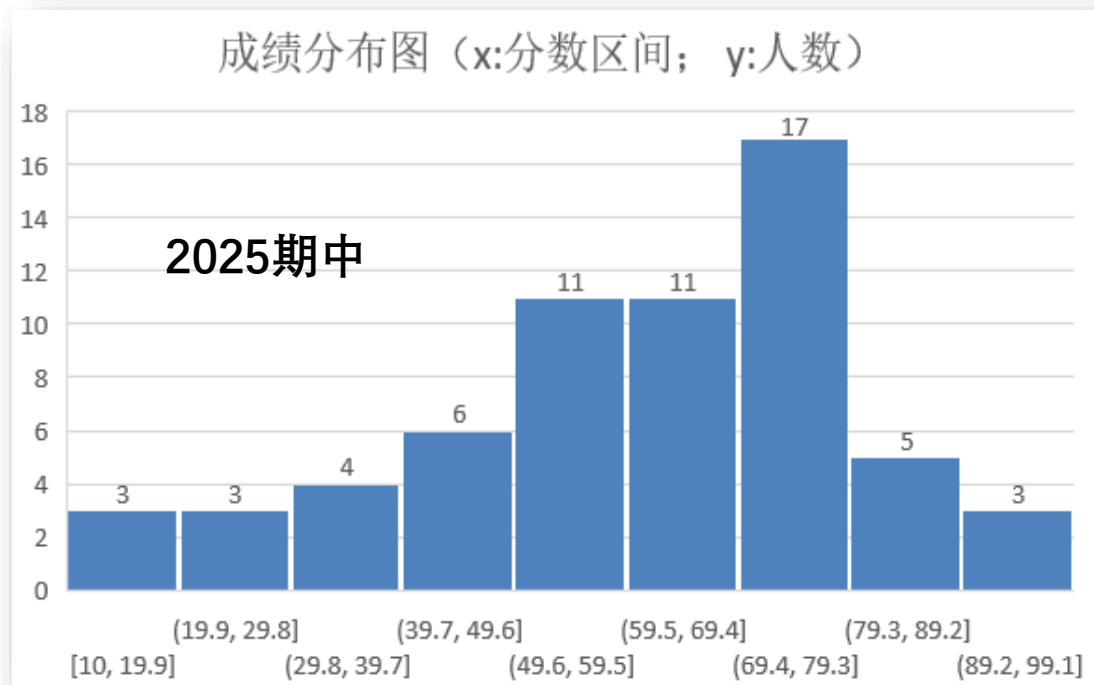
邮箱: taojq@mail.ihep.ac.cn

办公室: 高能所多学科楼431

期末考试

时间：7月8日(周二)上午9:00-11:00

地点：人文楼教一阶



期中：30%

平时（作业+考勤等）：30%

期末：40%

第六章 X射线

第六章	X 射线	257
§ 28	X 射线的发现及其波动性	257
	X 射线的发现 X 射线管 X 射线的波动性 X 射线的偏振 X 射线的衍射 * 布拉格公式的进一步推导	
§ 29	X 射线产生的机制	268
	X 射线的发射谱 连续谱——轫致辐射 特征辐射(标识辐射)——电子内 壳层的跃迁 特征辐射的标记方法 俄歇电子 电子跃迁诱发原子核激发 同步辐射	
§ 30	康普顿散射	280
	经典考虑 量子解释 物理意义 康普顿散射与基本常量 * 附注一:康普顿轮廓 * 附注二:逆康普顿效应	
§ 31	X 射线的吸收	288
	两类相互作用 光子与物质相互作用 X 射线的吸收 吸收限 扩展 X 射线吸收精细结构	
小结	296
习题	298

• X-ray的特性

- 波性是如何表现的?
- 粒子性是如何表现的?
- 布拉格公式

• X-ray的产生

- X-ray是怎么产生的?
- 什么是bremsstrahlung? 什么是标识谱? 它们产生的机理是什么?

• X-ray的吸收

- 吸收系数及其与波长的关系
- 吸收边(限)和吸收谱

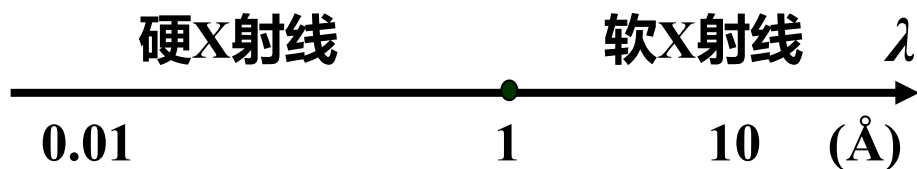
• X-ray的应用

- 成分分析
- 结构分析

X射线发现、性质和起源

- X射线的**发现**：1895年，伦琴（Wilhelm C. Röntgen）

- X射线的**性质**：核外电子产生的**短波电磁辐射**，具有反射、折射、偏振等性质



X射线波长范围及其大致分类

硬X射线: 波长较短, 能量较高, 穿透力较强, 适用于金属的无损探伤及相关分析

- X射线的**波动性**：X射线的**偏振**，X射线的晶体衍射实验 → 测量了X射线的波长

布拉格（Bragg）
公式

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

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

- X射线的**原子起源**

原子光谱 {	光学线状谱：价电子跃迁	ΔE : 10^{-1} eV	$\sim 10^1 \text{ eV}$
		红外	\sim 紫外
		10^6 Å	$\sim 10^3 \text{ Å}$
	X射线谱 {	连续谱：韧致辐射	10^{-2} Å $\sim 10^2 \text{ Å}$
		线状谱：内层电子跃迁	
		ΔE : 10^3 eV	$\sim 10^4 \text{ eV}$
		λ : 10^{-1} Å	$\sim 10^2 \text{ Å}$

- ✓ 连续谱起源于**韧致辐射**（bremsstrahlung）

特点：(1) 连续谱的最小波长 λ_{\min} 与靶材料的原子序数 Z 无关，只依赖于加速电子的电压 V

$$\lambda_{\min} = \frac{1.23981}{V(kV)} (nm)$$

(2) 强度（能流密度）正比于靶原子核电荷的平方，反比于质量平方。

$$I \propto a^2 \propto \frac{(Ze^2)^2}{m^2}$$

X射线的原子起源

莫塞莱经验

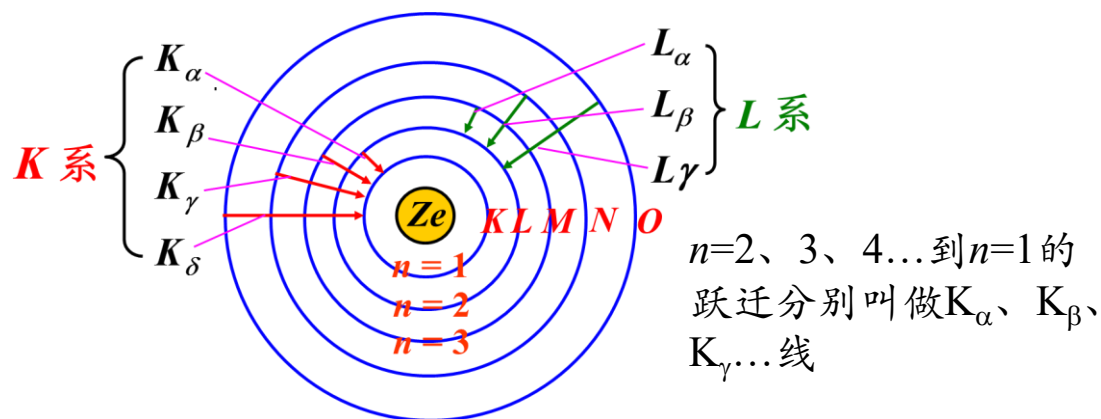
➤ X射线的原子起源

✓ 特征 X 射线谱特点 (内层电子跃迁):

- (1) 一系列分立的窄线;
- (2) 峰位(波长)与外加电压无关, 而由靶材料的元素决定。

✓ 二个过程: 激发和退激发

- (1) 原子激发: 激发原子内壳层能级上的一个电子, 而在该能级上留下一个空穴。
- (2) 退激发: 外壳层上的电子跃迁到这个空穴中, 多余能量作为 X 射线发射出去。



K, L 层电子离核近受核影响大。
不同元素 K, L 系光谱不同 —— 特征谱

对于 K_α 线, 莫塞莱得到了如下的经验公式: 公式

$$\nu_{K_\alpha} = 0.248 \times 10^{16} (Z - b)^2 \text{ Hz} \quad (b \approx 1)$$

b — 屏蔽系数 $h\nu_{K_\alpha} = Rhc(Z - b)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right)$

莫塞莱基于波尔理论 (类氢离子) 导出

$$\nu_{K_\alpha} = \frac{c}{\lambda} = RcZ^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = \frac{3}{4} RcZ^2 \approx 0.246 \times 10^{16} Z^2 \text{ Hz}$$

$(Z-1)^2$ 和 Z^2 的差异: $n=1$ 层出现 1 个空穴, 考虑电子屏蔽效应, $n=2$ 层感受到的是 $(Z-1)$ 个正电荷的吸引; $n=2$ 层电子向内跃迁

$$\nu_{K_\alpha} = 0.246 \times 10^{16} (Z - 1)^2 \text{ Hz}$$

或者

$$\Delta E_{K_\alpha} = hRc(Z - 1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) \approx \frac{3}{4} \times 13.6 \times (Z - 1)^2 \text{ eV}$$

b

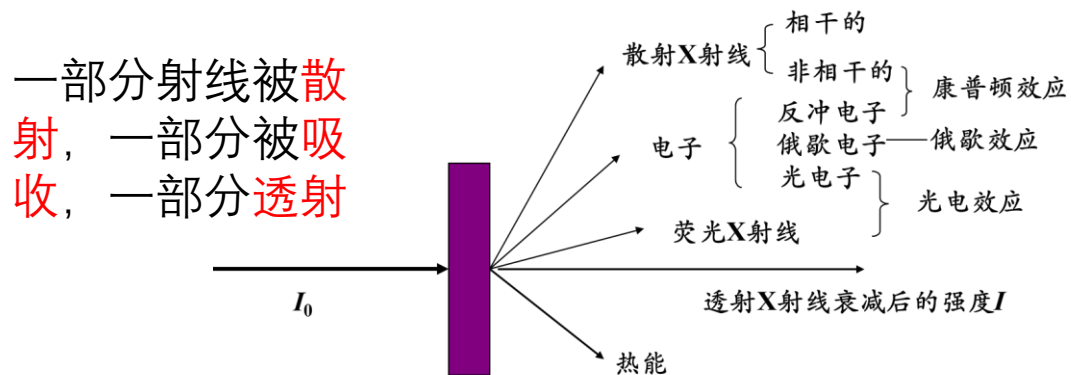
$\frac{3}{4}$ 表示 $n=2$ 到 $n=1$ 跃迁

$$\tilde{\nu}_{L_\alpha} = R(Z - 7.4)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

用莫塞莱公式来测定元素的 Z

X射线的相互作用

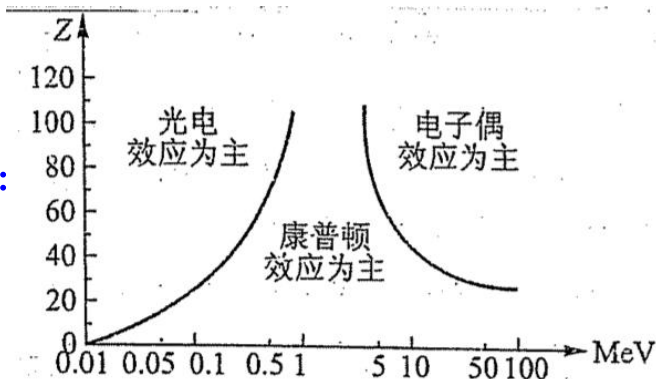
- X射线与物质相互作用时，其强度会因X射线通过物质而被减弱的现象，这就是X射线的吸收现象



1) 多次小相互作用:(典型实例:康普顿散射) 光子束与物质中电子的作用引起光子的能量损失和方向偏转.

2) 全或无相互作用:(典型实例:光电效应) 光子要么不受相互作用,要么经一次相互作用后就从射线中束中消失

3) 电子偶效应:当光子能量大于电子静止能量的两倍(即1.02MeV)时,光子的正负电子对转化



- 康普顿散射: 散射的X射线相同波长的成分 + 波长增长的部分; 增长的数量随散射角的不同而不同; 高能光子+低能电子, 光子能量给电子, 损失能量, 波长变长, 频率变低

康普顿散射公式

$$\lambda' - \lambda = \Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta)$$

散射光子的能量: 是入射光子能量的函数

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \gamma(1 - \cos \theta)}, \gamma \equiv \frac{h\nu}{m_0 c^2}$$

反冲电子的动能 $E_k = h\nu - h\nu' = h\nu \frac{\gamma(1 - \cos \theta)}{1 + \gamma(1 - \cos \theta)}$

反冲电子得到的最大能量 ($\theta=\pi$) $E_{k, \max} = h\nu \frac{2\gamma}{1 + 2\gamma}$

相应光子的最小能量 $(h\nu')_{\min} = \frac{h\nu}{1 + 2\gamma}$

电子的康普顿波长 $\lambda = \frac{hc}{m_0 c^2} = \frac{1.240 \text{ nm} \cdot \text{keV}}{511.0 \text{ keV}} = 0.002426 \text{ nm}$

康普顿散射引起的最大位移 ($\theta=180^\circ$): 入射波的波长增长的最大数值

$$\Delta\lambda = 2 \frac{h}{m_0 c} = 0.00486 \text{ nm}$$

- 逆康普顿散射: 高能电子+低能光子碰撞; 低能光子获得电子能量, 频率变高, 波长变短

X射线的吸收和激光

- X射线的吸收：经过吸收体后的强度按指数衰减

朗伯-比耳定律

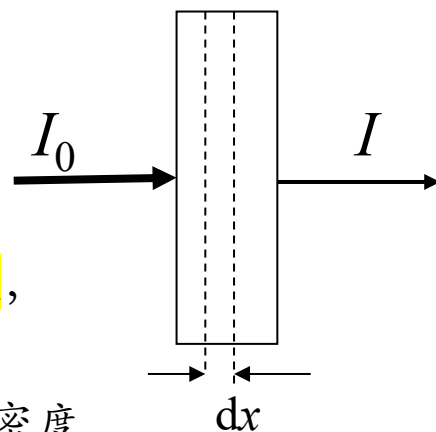
$$I = I_0 e^{-\mu x}$$

μ ---吸收系数，
单位 cm^{-1}

$$I = I_0 e^{-\left(\frac{\mu}{\rho}\right)(\rho x)}$$

ρ 为吸收体密度

ρx 称为质量厚度， μ/ρ ---质量吸收系数(单位 cm^2/g)



- 瑞利散射（相干散射）效应：粒子尺度远小于入射光波长时（小于波长的十分之一），其各方向上的散射光强度是不一样的，该强度与入射光的波长四次方成反比，这种现象称为瑞利散射

$$\mu = \mu_{\text{光电}} + \mu_{\text{康}} + \mu_{\text{相干}}$$

- X射线的应用：X射线影像学、X射线断层摄影术等

- 宇宙X射线源

- 激光

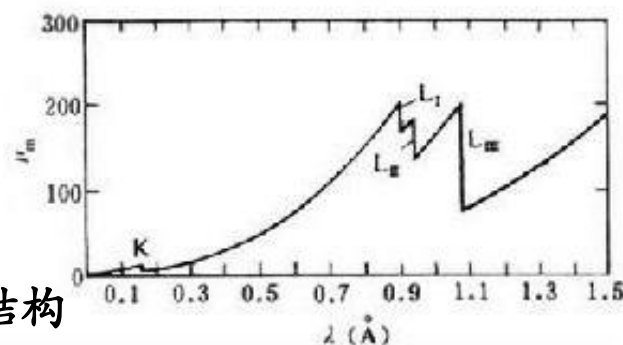
激光原理：原子两能级间存在着自发辐射、受激辐射和受激吸收等三种过程

激光器的三个主要组成部分：

- 1.工作物质：有合适的能级结构，能实现粒子数反转
- 2.激励能源：使原子激发，维持粒子数反转
- 3.光学谐振腔：保证光放大，使激光有良好的方向性和单色性

- X射线吸收谱和吸收限

低能x射线：光电+Compton Scattering
波长处会有突变：吸收限或吸收边缘
(absorption edge)



吸收限，证实了原子中电子壳层结构

K 吸收限表示光子的能量足以使一个 1S 电子脱离原子，从而引起原子的共振吸收，使吸收系数有了突然增加； L_I 吸收限表示光子的能量足以使一个 2S 电子脱离原子， L_{II} 和 L_{III} 分别表示使 $2P_{1/2}$ 和 $2P_{3/2}$ 层上的电子脱离原子。同样，我们可以理解 M 吸收限。

作业情况

总体没什么问题：6-5 (1) 个别同学忘记画能级简图

没交作业的同学，平时分会受影响

期中：30%

平时（作业+考勤等）：30%

期末：40%

6-5 已知铅的 K 吸收限为 0.014 1 nm, K 线系各谱线的波长分别为 0.016 7 nm(K_α), 0.014 6 nm(K_β), 0.014 2 nm(K_γ), 现请:

- (1) 根据这些数据描绘出有关铅的 X 射线能级简图;
- (2) 计算激发 L 线系所需的最小能量与 L_α 线的波长.

(1) K 线系的吸收限, 对应将基态电子 (K, $n=1$) 激发到无穷远处($E_\infty=0$)所需要的能量

$$\Delta E = E_\infty - E_1 = -E_1 = h\nu_\infty (\text{吸收能量}) = h \frac{c}{\lambda_\infty}$$

$$hc = 1.24 \text{ nm} \cdot \text{keV}$$

$$\text{基态能级 } E_1 = E_K = -h \frac{c}{\lambda_\infty} = -\frac{1.24 \text{ nm} \cdot \text{keV}}{0.0141 \text{ nm}} = -87.9 \text{ keV}$$

$K_\alpha, K_\beta, K_\gamma$ 谱线, 分别对应 L、M、N 跃迁到 K 层释放出光子的能量

$$\Delta E_{K_\alpha} = E_L - E_K = h \frac{c}{\lambda_{K_\alpha}} \quad E_L = h \frac{c}{\lambda_{K_\alpha}} + E_K$$

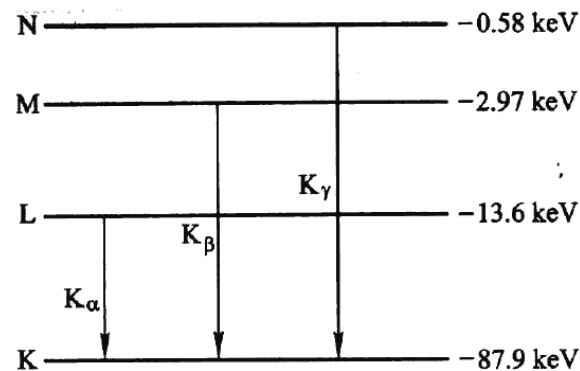
$$E_L = \frac{1.24 \text{ nm} \cdot \text{keV}}{0.0167 \text{ nm}} - 87.9 \text{ keV} = -13.6 \text{ keV}$$

$$E_M = h \frac{c}{\lambda_{K_\beta}} + E_K = \frac{1.24 \text{ nm} \cdot \text{keV}}{0.0146 \text{ nm}} - 87.9 \text{ keV} = -2.97 \text{ keV}$$

$$E_N = h \frac{c}{\lambda_{K_\gamma}} + E_K = \frac{1.24 \text{ nm} \cdot \text{keV}}{0.0142 \text{ nm}} - 87.9 \text{ keV} = -0.58 \text{ keV}$$

n	1	2	3	4	5	6	7	...
壳层名称	K	L	M	N	O	P	Q	...
L	0	1	2	3	4	5	6	...
支壳层名称	s	p	d	f	g	h	i	...

个别同学忘记画能级简图



(2) L层产生空穴→电子电离, 然后电子M→L跃迁

铅是82元素, 所以L, M, N层的轨道都填满了电子, L层的电子如果被激发, 只能激发到无穷远。所以将L层的电子激发所用的能量 $\Delta E_L = E_\infty - E_L = -E_L = 13.6 \text{ keV}$

L_α 是L层跃迁到M层的吸收的光子波长

$$\Delta E_{L_\alpha} = E_M - E_L = -2.97 \text{ keV} + 13.6 \text{ keV} = 10.6 \text{ keV}$$

$$\Delta E = h \frac{c}{\lambda_{L_\alpha}} = 10.6 \text{ keV}$$

$$\lambda_{L_\alpha} = \frac{hc}{10.6 \text{ keV}} = \frac{1.24 \text{ nm} \cdot \text{keV}}{10.6 \text{ keV}} = 0.12 \text{ nm}$$

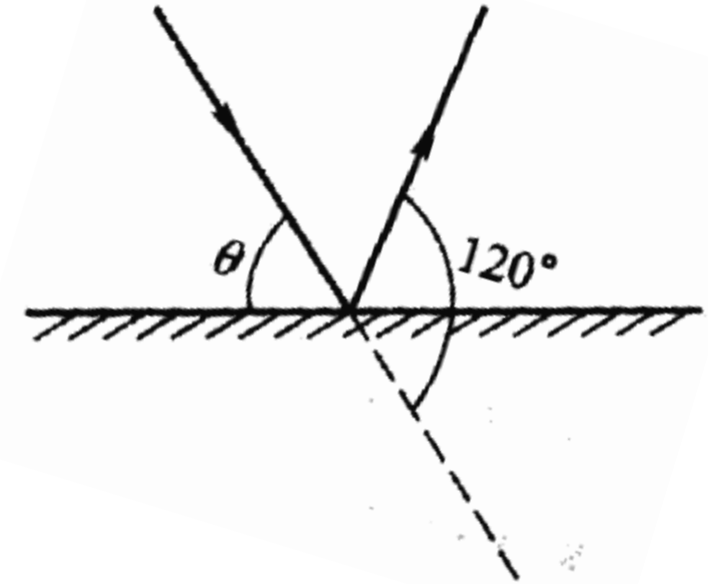
6-6 一束波长为 0.54 nm 的单色光入射到一组晶面上,在与入射束偏离为 120° 的方向上产生一级衍射极大,试问该晶面的间距为多大?

由布拉格散射公式

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

$$\theta = 120^\circ/2 = 60^\circ = \frac{\pi}{3}$$

个别同学角度计算错误



一级衍射极大, 即第一级亮条纹 $n = 1$

$2d \sin \theta = \lambda$, 带入 $\lambda = 0.54 \text{ nm}$

$$d = \frac{0.54 \text{ nm}}{2 \sin \frac{\pi}{3}} = \frac{0.54 \text{ nm}}{\sqrt{3}} = 0.31 \text{ nm}$$

6-13 已知铯($Z=45$)的电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^8 5s^1$,

现请:

- (1) 确定它的基态谱项符号;
- (2) 用它的 K_α -X 射线做康普顿散射实验,当光子的散射角为 60° 时,求反冲电子的能量.(已知 K_α 的屏蔽系数 $b=0.9$).
- (3) 在实验装置中用厚为 0.30 cm 的铅屏蔽该射线. 如果改用铝代替铅,为达到同样的屏蔽效果,需要用多厚的铝? ($\mu_{\text{Pb}}=52.5 \text{ cm}^{-1}, \mu_{\text{Al}}=0.765 \text{ cm}^{-1}$)

➤ 多电子原子

- L-S 耦合
- J-J 耦合

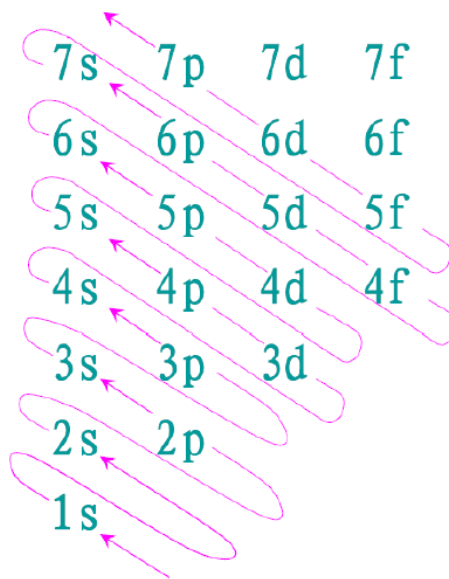
$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad \vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

➤ 泡利不相容原理

➤ 最小能量原理

原子能级填充顺序



➤ 洪特定则

7个量子数描述电子的状态,它们分别是

$$n, l, m_l, s, m_s, j, m_j$$

各量子数的取值范围是

$$n = 1, 2, 3, \dots; \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1; \quad m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l;$$

$$s = 1/2; \quad m_s = 1/2, -1/2; \quad j = l + 1/2, l - 1/2; \quad m_j = j, j-1, \dots, -j$$

n	1	2	3	4	5	6	7	...
壳层名称	K	L	M	N	O	P	Q	...
L	0	1	2	3	4	5	6	...
支壳层名称	s	p	d	f	g	h	i	...

每个支壳层可以容纳的电子数:

$$2(2l+1)$$

每个壳层可以容纳的电子数:

$$N = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$

6-13 已知铯($Z=45$)的电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^8 5s^1$,

现请:

- (1) 确定它的基态谱项符号;
- (2) 用它的 K_{α} -X 射线做康普顿散射实验, 当光子的散射角为 60° 时, 求反冲电子的能量. (已知 K_{α} 的屏蔽系数 $b=0.9$).
- (3) 在实验装置中用厚为 0.30 cm 的铅屏蔽该射线. 如果改用铝代替铅, 为达到同样的屏蔽效果, 需要用多厚的铝? ($\mu_{\text{Pb}}=52.5\text{ cm}^{-1}$, $\mu_{\text{Al}}=0.765\text{ cm}^{-1}$)

(1) 根据电子排布规律, 满壳层电子已经处于基态, 所以最终原子的基态由非满壳层决定, 即 $4d^8 5s^1$

该符号表示 $n=4$ 轨道上有 $l=2$ 的 8 个电子, 同时 $n=5$ 轨道上有 $l=0$ 的 1 个电子

先讨论 $n=4$ 主壳层 $l=2$ 这个支壳层, 由于这个对到最多可以容纳 $Y=2(2l+1)=10$ 个电子

根据洪特定则 **S 最大时能级最低, S 一定时 L 越大能级越低**

	2	1	0	-1	-2
d	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow

总自旋应该为 $S=1$, $L=2+2+1+1+0-1-2=3$

$4d^8$: 电子数大于支壳层全满的一半, 反常序, 所以 J 越大能级越低, 所以当 $S=1$ 、 $L=3$ 并且 $J=S+L=1+3=4$ 时体系能级最低。

$5s^1$ 的单电子: $S=\frac{1}{2}$, $L=0$ 。

	0				
s	<div>↑</div>				
	2	1	0	-1	-2
d	<div>↑↓</div>	<div>↑↓</div>	<div>↑↓</div>	<div>↑</div>	<div>↑</div>

这个 $5s^1$ 电子和 $4d^8$ 的多电子态再进行一次 **L-S 耦合**

$S_{\text{总}} = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$, $L_{\text{总}} = 3 + 0 = 3$,
 J 取最大, 能级最低,

$$J_{\text{总}} = S_{\text{总}} + L_{\text{总}} = \frac{3}{2} + 3 = \frac{9}{2}$$

所以基态为 $4F_{\frac{9}{2}}$

6-13 已知铯($Z=45$)的电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^8 5s^1$,

现请:

- (1) 确定它的基态谱项符号;
- (2) 用它的 K_α -X 射线做康普顿散射实验,当光子的散射角为 60° 时,求反冲电子的能量.(已知 K_α 的屏蔽系数 $b=0.9$).
- (3) 在实验装置中用厚为 0.30 cm 的铅屏蔽该射线. 如果改用铝代替铅,为达到同样的屏蔽效果,需要用多厚的铝? ($\mu_{Pb}=52.5 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_{Al}=0.765 \text{ cm}^{-1}$)

(2) 根据公式**莫塞莱公式** (29-4)

$h\nu_{K_\alpha} = Rhc(Z - b)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right)$, K_α - X射线的能量为从L层跃迁至K层的放出的光子

$$Rhc = 13.6 \text{ eV} \quad h\nu_{K_\alpha} = 13.6 \text{ eV} (45 - 0.9)^2 * \frac{3}{4} = 19.8 \text{ keV}$$

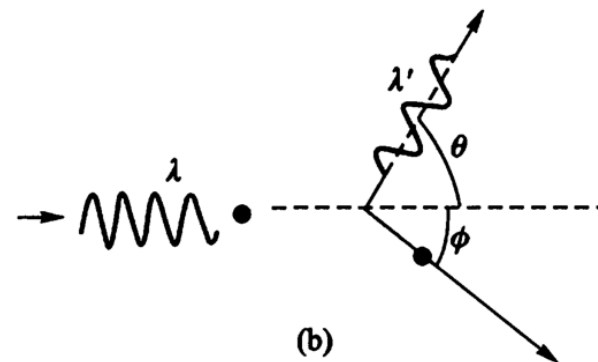
根据**康普顿散射公式**, 反冲电子的能量表达式为 (30-6)

$$E_k = h\nu \frac{\gamma(1 - \cos \theta)}{1 + \gamma(1 - \cos \theta)}$$

$$\gamma = \frac{h\nu}{m_0 c^2}$$

电子质量P9

$$m_0 c^2 = 0.511 \text{ MeV}$$



$$E_k = 19.8 \text{ keV} * \frac{\frac{19.8 \text{ KeV}}{0.511 \times 10^3 \text{ keV}} \left(1 - \frac{1}{2} \right)}{1 + \frac{19.8 \text{ keV}}{0.511 \times 10^3 \text{ keV}} \left(1 - \frac{1}{2} \right)}$$

$$= \mathbf{0.38 \text{ keV}}$$

6-13 已知铯($Z=45$)的电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^8 5s^1$,

现请:

- (1) 确定它的基态谱项符号;
- (2) 用它的 K_{α} -X 射线做康普顿散射实验,当光子的散射角为 60° 时,求反冲电子的能量.(已知 K_{α} 的屏蔽系数 $b=0.9$).
- (3) 在实验装置中用厚为 0.30 cm 的铅屏蔽该射线.如果改用铝代替铅,为达到同样的屏蔽效果,需要用多厚的铝? ($\mu_{\text{Pb}}=52.5\text{ cm}^{-1}$, $\mu_{\text{Al}}=0.765\text{ cm}^{-1}$)

(3) 根据吸收公式31-1,

$$I = I_0 e^{-\mu x}$$

为了达到同样的吸收效果
则 $\mu_{\text{Al}} x_{\text{Al}} = \mu_{\text{Pb}} x_{\text{Pb}}$

$$\mu_{\text{Al}} = 0.765\text{ cm}^{-1}$$

$$\mu_{\text{Pb}} = 52.5\text{ cm}^{-1}$$

$$x_{\text{Pb}} = 0.3\text{ cm}$$

得到

$$x_{\text{Al}} = \frac{\mu_{\text{Pb}} x_{\text{Pb}}}{\mu_{\text{Al}}} = 21\text{ cm} \quad (20.588\text{ cm})$$

P290 朗伯-比耳定律

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (31-1)$$

这就是朗伯 - 比耳 (Lambert - Beer) 定律. 依此, 透射的粒子强度按吸收体的厚度指数衰减; μ 称为吸收系数. 显然, 射程概念在这类相互作用中是没有意义的. 但是, 人们常取 $\mu x = 1$ 时的 x 称为吸收长度. 吸收长度是吸收系数的倒数, 它表示透射粒子数为入射粒子数的 $1/e$ (即 37%) 时所相应的吸收体的厚度.