

题目一

氦原子能级结构、L-S 耦合与洪特规则

氦原子是仅含两个电子的最简单多电子体系，其光谱在历史上被分为“仲氦”和“正氦”两套独立谱线系，根源在于电子自旋耦合形成了单重态 ($S = 0$) 与三重态 ($S = 1$) 两套能级，二者之间禁戒跃迁 ($\Delta S = 0$ 选择定则)。基态 $1s1s$ 在 L-S 耦合下本可形成两个原子态，但三重态被泡利不相容原理禁戒。对于激发组态，三重态能级始终低于同组态的单重态能级，这是波函数交换对称性和库仑排斥能共同作用的结果。多电子原子的角动量耦合有 L-S 耦合和 j-j 耦合两种方式：前者适用于轻原子，后者适用于重原子，同一组态两种方式所得原子态总数相同。洪特定则为判定 L-S 耦合基态提供了简洁的经验规则。

- (1) 指出仲氦与正氦各自对应的自旋状态 (S 值) 和光谱多重数 $2S + 1$ 。两套能级之间能否发生跃迁？简述原因。
- (2) 写出 $1s1s$ 基态在 L-S 耦合下可能形成的原子态符号，指出被泡利不相容原理禁戒的态并说明理由。简要解释为何同一电子组态下三重态能级往往低于单重态能级。
- (3) 考虑 $2p3d$ 非同科电子组态 ($l_1 = 1, l_2 = 2$)。分别用 L-S 耦合和 j-j 耦合推导其可能的原子态，验证两种方式所得态数相同。简述两种耦合各自的适用条件。
- (4) 写出洪特三条规则。利用洪特定则确定碳原子 ($C, 2p^2$, p 支壳层半满电子数为 3) 在基态时的原子态符号 $^{2S+1}L_J$ ，写出推导过程。

参考答案

(1) 仲氦对应单重态 ($S = 0, 2S + 1 = 1$)，谱线全为单线；正氦对应三重态 ($S = 1, 2S + 1 = 3$)，谱线呈多线结构。两套能级之间不能跃迁——电偶极跃迁选择定则要求 $\Delta S = 0$ ，自旋状态在跃迁中保持不变，单重态与三重态之间禁戒互跃。

(2) $l_1 = l_2 = 0 \Rightarrow L = 0$ (S 态)， $S = 0$ 或 $S = 1$ ，可能的原子态为 $(1s1s)^1S_0$ 和 $(1s1s)^3S_1$ 。其中 $(1s1s)^3S_1$ 实际不存在——该态要求两电子自旋平行 ($m_{s1} = m_{s2} = +1/2$)，四个量子数 (n, l, m_l, m_s) 全同，违反泡利不相容原理。

三重态能级低于单重态的原因：电子是费米子，总波函数必须反对称。三重态 $S = 1$ 的自旋波函数交换对称，空间波函数须交换反对称，两电子倾向于彼此远离，库仑排斥能较低，能级更低。单重态 $S = 0$ 则相反：空间波函数对称，电子可彼此靠近，库仑排斥能较高。

(3) L-S 耦合： $L = 1, 2, 3$ (P, D, F)， $S = 0, 1$ 。($P, S = 0$)： 1P_1 ；($P, S = 1$)： $^3P_{0,1,2}$ ；($D, S = 0$)： 1D_2 ；($D, S = 1$)： $^3D_{1,2,3}$ ；($F, S = 0$)： 1F_3 ；($F, S = 1$)： $^3F_{2,3,4}$ 。共 12 个态。

j-j 耦合： $j_1 = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ ， $j_2 = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ 。四组 (j_1, j_2) 分别耦合得 J 值： $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}) \rightarrow J = 1, 2$ ； $(\frac{1}{2}, \frac{5}{2}) \rightarrow J = 2, 3$ ； $(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}) \rightarrow J = 0, 1, 2, 3$ ； $(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}) \rightarrow J = 1, 2, 3, 4$ 。共 $2 + 2 + 4 + 4 = 12$

个态，与 L-S 耦合相等。

L-S 耦合条件：电子间轨道-轨道和自旋-自旋耦合远强于单电子自旋-轨道耦合，适用于轻原子。j-j 耦合则相反，适用于重原子。从轻原子到重原子，耦合方式由 L-S 逐渐过渡到 j-j。

(4) 洪特规则一：取允许的最大 S 能量最低 (S 越大，自旋越平行，电子间距越大，库仑排斥能越小)。规则二： S 相同时取最大 L 最低 (L 越大，电子同向运动概率大，相遇少、排斥小)。规则三：同科电子半满及以内取最小 J 最低 (正序)，超过半满取最大 J 最低 (倒序)。

碳 $2p^2$ ($\nu = 2 \leq 3$ ，半满以内)：规则一——两电子自旋同向占不同 m_l 轨道，取 $m_l = +1, 0$ ， $M_S = 1 \Rightarrow S = 1$ 。规则二—— $M_L = 1 + 0 = 1 \Rightarrow L = 1$ (P 态)。规则三——取最小 $J = |L - S| = 0$ 。基态为 3P_0 。

题目二

X 射线谱、Bragg 衍射与激光原理

X 射线自 1895 年伦琴发现以来，成为连接原子物理基础研究与实际应用的桥梁。普通 X 光管的发射谱包含连续谱（轫致辐射，高速电子突然减速产生）和特征谱（标识谱，内壳层电子跃迁产生）两部分。连续谱的截止波长 $\lambda_{\min} = hc/(eV)$ 仅取决于加速电压，特征谱频率与原子序数的关系由莫塞莱定律 $\sqrt{\nu} = a(Z - \sigma)$ 描述，为测定原子序数和预言未知元素提供了关键方法。在内壳层退激发过程中，除 X 射线荧光外还有俄歇电子发射，对轻元素俄歇发射占主导。

X 射线的波动性由劳厄晶体衍射实验确证，Bragg 公式 $2d \sin \alpha = n\lambda$ 奠定了晶体结构分析的基石。激光的本质是受激辐射的光放大：原子与光有自发辐射、受激吸收和受激辐射三种相互作用，爱因斯坦系数满足 $B_{12} = B_{21}$ 。激光产生的核心在于实现粒子数反转 ($N_2 > N_1$)，这是热平衡态下无法达到的非平衡态，须通过泵浦维持。光学谐振腔提供定向、选频和偏振功能，He-Ne 激光器是最经典的气体激光器，输出 633 nm 红光。

- (1) 普通 X 光管发射谱由哪两部分构成？各有什么产生机制和主要特征？推导连续谱截止波长公式 $\lambda_{\min} = hc/(eV)$ ，说明为何 $\lambda_{\min}$ 与靶材的原子序数 Z 无关。
- (2) 写出莫塞莱定律的数学表达式及其一条重要贡献。解释俄歇电子的产生过程并写出能量表达式。
- (3) 推导 Bragg 公式 $2d \sin \alpha = n\lambda$ ，说明各符号含义。已知 NaCl 晶面间距 $d = 0.282 \text{ nm}$ ，以 Cu K_α ($\lambda = 0.154 \text{ nm}$) 照射，求一级衍射角 α 。
- (4) 写出三种光-原子相互作用过程的速率方程及爱因斯坦系数之间的关系。什么是粒子数反转？热平衡态下为何无法实现？实现反转对激光有何意义？
- (5) 简述光学谐振腔的主要作用。以 He-Ne 激光器为例，说明实现粒子数反转的基本物理过程，指出最强的可见激光波长。

参考答案

(1) X 射线发射谱包含连续谱和特征谱两部分。连续谱（轫致辐射）：高速电子轰击靶材突然减速，加速运动的带电粒子产生电磁辐射，波长分布在一个较宽范围，存在与加速电压有关的截止波长 $\lambda_{\min}$ 。特征谱（标识谱）：高能电子击出靶原子内壳层电子形成空穴，外壳层电子跃迁填充时发射特定波长的 X 射线光子，峰位仅取决于靶材元素，与电压无关。

截止波长推导：电子在电压 V 下获得动能 $E_k = eV$ ，与靶碰撞后最多将全部动能转化为单个光子： $h\nu_{\max} = eV \Rightarrow hc/\lambda_{\min} = eV \Rightarrow \lambda_{\min} = hc/(eV)$ 。 $\lambda_{\min}$ 仅取决于 V ，因为这是电子动能全部转化的极限情况，而电子动能只由加速电压决定，与靶材 Z 无关。历史上杜安和亨特（1915 年）借此精确测定了 h 值。

(2) 莫塞莱定律: $\sqrt{\nu} = a(Z - \sigma)$, 或 $\frac{1}{\lambda} = R(Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$, σ 为屏蔽常数 (K 线系 $\sigma = 1$)。重要贡献: 提供了精确测定原子序数的方法, 修正了周期表中若干元素的排列顺序; 预言了 $Z = 43$ (锝)、61 (钷)、75 (铼) 等未知元素的位置。

俄歇电子: L 壳层电子跃迁填充 K 壳层空穴时, 释放的能量不辐射光子而传递给另一壳层电子使其发射。能量 $E_{ae} = \Phi_K - \Phi_L - \Phi_M$ (Φ 为各壳层结合能), 与入射束能量无关。 $Z < 32$ 时俄歇产额大于荧光产额, 俄歇发射为主。

(3) 以掠射角 α 入射到间距为 d 的两相邻晶面, 反射光的光程差 $\Delta = 2d \sin \alpha$ 。相长干涉条件为 $2d \sin \alpha = n\lambda$ ($n = 1, 2, 3, \dots$)。 d 为晶面间距, α 为掠射角 (入射光线与晶面的夹角), n 为衍射级次。与透射光栅方程 $d \sin \theta = n\lambda$ 不同, 因子 2 源于反射式几何的双程光路。

计算: $\sin \alpha = \frac{1 \times 0.154}{2 \times 0.282} \approx 0.273$, $\alpha = \arcsin(0.273) \approx 15.8^\circ$ 。

(4) 设 $E_2 > E_1$, 两能级原子数为 N_1, N_2 , 辐射能量密度为 $\rho(\nu, T)$ 。

- 自发辐射: $dN_{21}/dt = A_{21}N_2$ (非相干光)
- 受激吸收: $dN_{12}/dt = B_{12}\rho(\nu, T)N_1$
- 受激辐射: $dN'_{21}/dt = B_{21}\rho(\nu, T)N_2$ (相干光放大)

爱因斯坦关系: $B_{12} = B_{21}$, $A_{21} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} B_{21}$ 。 $A_{21}/B_{21} \propto \nu^3$ 表明频率越高自发辐射越占优。

粒子数反转指 $N_2 > N_1$ 的非平衡态。热平衡下服从玻尔兹曼分布 $N_2/N_1 \propto e^{-(E_2 - E_1)/k_B T} < 1$ (因 $E_2 > E_1$) , 宏观上光吸收主导。实现反转后受激辐射超过受激吸收, 净效果为光放大——这正是激光 (LASER) 的核心原理。反转态需通过外部泵浦维持。

(5) 光学谐振腔的主要作用: (i) 定向——抑制非轴向光, 选择性放大轴向光; (ii) 选频——仅满足驻波条件 $2nL = k\lambda_k$ 的频率稳定振荡, 相邻纵模间隔 $\Delta\nu_k = c/(2nL)$; (iii) 偏振——布儒斯特窗产生线偏振光。

He-Ne 激光器工作过程: 放电中电子碰撞 He 原子使其激发到亚稳态; He 的亚稳态与 Ne 的激发态能量接近, 通过共振碰撞将能量转移给 Ne; Ne 在高能级上通过受激辐射产生激光 (633 nm 红光); Ne 的低能级寿命短, 原子迅速通过碰撞管壁无辐射跃迁回到基态, 维持 $N_2 > N_1$ 的反转分布。He 为辅助物质 (能量中转), Ne 为工作物质。

题目三

原子核基本性质、放射性衰变与核能利用

原子核由质子和中子组成，其半径服从经验公式 $R = r_0 A^{1/3}$ ($r_0 \approx 1.20 \text{ fm}$)，核物质密度近乎常数 ($\sim 2.3 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3$)，说明核是质量高度集中的区域。核子结合成原子核时释放的能量称为结合能，源于质量亏损 ΔM : $E_B = \Delta M c^2$ 。比结合能 $\varepsilon = E_B/A$ 曲线的“两头低、中间高”特征决定了获取核能的根本途径——重核裂变和轻核聚变。液滴模型用五项定量描述了结合能的系统规律。

不稳定核素通过放射性衰变自发蜕变，遵从指数衰变律 $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$ ，半衰期 $T_{1/2} = \ln 2 / \lambda$ 。 α 衰变是量子隧道效应的经典例证—— α 粒子以低于库仑势垒的能量穿透势垒逃逸。 β 衰变能谱的连续性由泡利的中微子假说 (1930 年) 得到解释，费米进一步阐明了电子的产生机制。核反应 $A(a, b)B$ 的反应能 $Q = (M_A + m_a - M_B - m_b)c^2$ 决定了反应是放热 ($Q > 0$) 还是吸热 ($Q < 0$)。 ^{235}U 裂变每次释放约 200 MeV，1 克 ^{235}U 的裂变能相当于约 2.8 吨标准煤。链式反应的维持需中子再生率 $k \geq 1$ ，缓发中子使反应堆控制成为可能。受控聚变需满足高温、高密度和长约束时间三个苛刻条件，量子隧道效应则使太阳在远低于库仑势垒阈值的温度下持续燃烧。

- (1) 写出核半径经验公式，证明核物质密度与 A 无关并估算数量级。定义质量亏损和结合能，已知氦核结合能为 2.225 MeV，求其质量亏损 ($1 \text{ u} = 931.494 \text{ MeV}/c^2$)。
- (2) 描述比结合能曲线的主要特征，据此解释为何可通过重核裂变和轻核聚变获取核能。液滴模型结合能公式包含哪几项？分别说明各项的物理意义。
- (3) 导出指数衰变律 $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$ ，推导 $T_{1/2}$ 、 τ 、 λ 三者关系。已知 ^{60}Co 半衰期为 5.27 年，求 $1 \mu\text{g}$ 纯 ^{60}Co 的活度 ($N_A = 6.02 \times 10^{23}$)。
- (4) 简述 α 衰变的隧道效应机制及 Q 值与寿命的定性关系。 β 衰变的能谱为何是连续的？电子从何而来？写出 β^- 衰变的基本过程方程。
- (5) 写出核反应 $A(a, b)B$ 的反应能 Q 方程 (靶核静止)，说明 $Q > 0$ 和 $Q < 0$ 的含义。估算 1 克 ^{235}U 完全裂变释放的能量 ($1 \text{ MeV} = 1.6 \times 10^{-13} \text{ J}$)，约合多少吨标准煤 ($1 \text{ t 煤} \approx 2.9 \times 10^{10} \text{ J}$)？什么是缓发中子？为何它对反应堆控制至关重要？

参考答案

(1) 核半径 $R = r_0 A^{1/3}$, $r_0 \approx 1.20 \text{ fm}$ 。核体积 $V = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi r_0^3 A$ 。核质量 $M \approx A \times 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$ 。密度 $\rho = M/V \approx 2.3 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3$ ，与 A 无关——所有原子核密度几乎相同，核物质不可压缩。 1 mm^3 核物质约重 20 万吨。

质量亏损 $\Delta M = ZM(^1\text{H}) + (A - Z)m_n - M(Z, A)$ 。结合能 $E_B = \Delta M \cdot c^2$ ，是孤立核子结合成原子核时释放的能量。比结合能 $\varepsilon = E_B/A$ ，越大核越稳定。氦核： $\Delta M = 2.225/931.494 \approx 0.00239 \text{ u}$ 。核结合能 ($\sim \text{MeV}$) 比化学结合能 ($\sim \text{eV}$) 高出 $10^5 \sim 10^6$ 倍。

(2) 比结合能曲线两头低、中间高：轻核区 ε 随 A 增大而上升（ ${}^4\text{He}$ 有局部峰值）； $A \approx 56$ （Fe 附近）达最大值 $\sim 8.7 \text{ MeV/核子}$ ；重核区逐渐下降至 $\sim 7.5 \text{ MeV/核子}$ 。因此：(i) 重核裂变——重核分裂为中等核，比结合能增大释放能量（如 ${}^{235}\text{U}$ 裂变 $\sim 200 \text{ MeV}$ ）；(ii) 轻核聚变——轻核聚合为更重核，比结合能增大释放能量（如 $d + T \rightarrow {}^4\text{He} + n + 17.6 \text{ MeV}$ ）。

液滴模型五项：体积能 $+a_v A$ （核力饱和性）；表面能 $-a_s A^{2/3}$ （表面核子单侧受力）；库仑能 $-a_c Z(Z-1)/A^{1/3}$ （质子间静电排斥）；对称能 $-a_a (A-2Z)^2/A$ （偏离 $N=Z$ 需额外能量）；对能 $+a_p \delta A^{-1/2}$ （核子配对效应）， $\delta = +1$ （偶偶核）、 0 （奇 A 核）、 -1 （奇奇核）。偶偶核对能为正，最稳定——自然界稳定核素中偶偶核占绝大多数。

(3) λ 为单位时间衰变概率， $dN/dt = -\lambda N$ ，积分得 $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$ 。半衰期： $N_0/2 = N_0 e^{-\lambda T_{1/2}} \Rightarrow T_{1/2} = \ln 2/\lambda \approx 0.693/\lambda$ 。平均寿命 $\tau = \frac{1}{N_0} \int_0^\infty t(-dN/dt)dt = 1/\lambda$ 。关系： $\lambda\tau = 1$ ， $T_{1/2} = \tau \ln 2$ 。

${}^{60}\text{Co}$ ： $N = \frac{10^{-6}}{60} \times 6.02 \times 10^{23} = 1.00 \times 10^{16}$ ； $\lambda = \frac{0.693}{5.27 \times 365 \times 24 \times 3600} = 4.17 \times 10^{-9} \text{ s}^{-1}$ ；活度 $R = \lambda N \approx 4.18 \times 10^7 \text{ Bq}$ 。

(4) α 粒子在 $8 \sim 60 \text{ fm}$ 范围面临高于其动能的库仑势垒。经典力学中无法逃逸，但量子隧道效应使波函数穿透势垒—— Q 越大，穿透概率指数级增大，寿命越短（ $\log \lambda \propto -1/\sqrt{Q}$ ）。

β 衰变能谱连续之谜：泡利 1930 年提出中微子假说——衰变中同时发射电子和轻的中性粒子（中微子），二者分享衰变能，电子能谱因此连续。电子来源：费米指出电子并非预先存在于核内，而是在衰变中产生的——核内中子转变为质子时伴随产生电子和反中微子。 β^- 衰变： $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$ 。

(5) $Q = (M_A + m_a - M_B - m_b)c^2 = (E_B + E_b) - E_a$ （靶核静止）。 $Q > 0$ 为放热反应， $Q < 0$ 为吸热反应（入射动能须超阈值 $|Q|$ ）。

${}^{235}\text{U}$ 裂变： $N = \frac{1}{235} \times 6.02 \times 10^{23} \approx 2.56 \times 10^{21}$ ， $E = 2.56 \times 10^{21} \times 200 = 5.12 \times 10^{23} \text{ MeV} = 8.2 \times 10^{10} \text{ J}$ 。相当于 $8.2 \times 10^{10}/(2.9 \times 10^{10}) \approx 2.8$ 吨标准煤，核能能量密度为化学能的百万倍量级。

链式反应维持条件：中子再生率 $k \geq 1$ 。缓发中子（来自裂变碎片 β 衰变，延迟毫秒至分钟）将有效中子代时间从瞬发中子的 $\sim 10^{-3} \text{ s}$ 延长至秒量级，使反应堆功率变化足够缓慢，控制棒有充足响应时间——缓发中子使人为控制链式反应成为可能。