

原子物理学

复习详释·从入门到精通

目录

1 课程概述与基本概念	5
1.1 课程信息	5
1.2 教学目的与内容	5
1.3 物质结构的尺度与图像	5
1.4 基本常数与单位制	5
1.4.1 国际单位制 (SI) 基本单位的新定义 (2019)	5
1.4.2 自然单位制	5
1.5 关键常数表	6
2 原子的核式模型	6
2.1 原子概念的建立与原子大小的估计	6
2.2 电子的发现	6
2.2.1 阴极射线与荷质比测量	6
2.2.2 密立根油滴实验	7
2.3 α 粒子散射实验与原子核的发现	7
2.3.1 实验装置与结果	7
2.3.2 卢瑟福核式模型	7
2.3.3 卢瑟福散射公式的推导	7
2.4 原子核大小的估算	7
2.5 卢瑟福模型的意义与困难	8
2.6 关于“原子”存在的其他证据	8
3 玻尔的氢原子理论	8
3.1 背景：量子论的起源	8
3.1.1 黑体辐射	8
3.1.2 光电效应	8
3.2 氢原子光谱	9
3.2.1 光谱分类	9
3.2.2 氢原子光谱规律	9
3.3 玻尔氢原子理论 (1913)	9
3.3.1 三个基本假设	9

3.3.2	推导氢原子能级	9
3.3.3	氢原子光谱的理论解释	10
3.3.4	约化质量修正	10
3.3.5	类氢离子	10
3.4	夫兰克-赫兹实验 (1914)	10
3.5	里德伯原子与奇异原子	10
3.5.1	里德伯原子	10
3.5.2	奇异原子	11
3.6	玻尔理论的评价	11
4	量子力学初步：从实验基础到氢原子解的全解析	11
4.1	康普顿散射	11
4.1.1	实验基本信息	11
4.1.2	实验装置	11
4.1.3	实验结果	12
4.1.4	核心公式与物理常数	12
4.1.5	经典电磁理论的困难	12
4.1.6	量子解释	12
4.1.7	理论推导	12
4.1.8	关键讨论问题	13
4.1.9	实验意义	13
4.1.10	康普顿-吴有训效应	13
4.1.11	光子概念小结	13
4.2	波粒二象性与物质波	13
4.2.1	玻尔理论的根本困难	13
4.2.2	量子理论发展历史	13
4.2.3	光的波粒二象性	13
4.2.4	德布罗意假设 (1924)	14
4.2.5	德布罗意公式	14
4.2.6	例题：电子德布罗意波长计算	14
4.2.7	物质波的实验验证	15
4.2.8	群速度与相速度	15
4.2.9	物质波的本质理解	15
4.2.10	物质波与玻尔轨道量子化	15
4.2.11	微观粒子波动性的应用	15
4.3	海森堡不确定关系	15
4.3.1	提出者与时间	15
4.3.2	核心物理图像	15
4.3.3	位置-动量不确定关系	16
4.3.4	能量-时间不确定关系	16
4.3.5	宏观与微观对比	16
4.3.6	好量子数	16
4.3.7	关键难点解析	16

4.4	波函数及其统计解释	17
4.4.1	波函数的引入	17
4.4.2	玻恩统计解释 (1926)	17
4.4.3	波函数的标准条件 (自然条件)	17
4.4.4	归一化条件	17
4.4.5	波函数的特性	17
4.4.6	态叠加原理	17
4.4.7	单电子双缝干涉	18
4.5	量子力学的哲学争论	18
4.5.1	两大学派对立	18
4.5.2	薛定谔的猫 (1935)	18
4.5.3	Bell 不等式 (1964)	18
4.5.4	2022 年诺贝尔物理学奖	18
4.6	薛定谔方程	18
4.6.1	方程地位	18
4.6.2	含时薛定谔方程	18
4.6.3	定态薛定谔方程 (U 与时间无关)	19
4.6.4	方程的建立思路	19
4.7	一维定态问题的求解	19
4.7.1	一维无限深势阱	19
4.7.2	量子隧道效应	20
4.7.3	一维谐振子	20
4.7.4	算符与平均值	20
4.8	氢原子的薛定谔方程解	21
4.8.1	模型与势场	21
4.8.2	球坐标下的分离变量	21
4.8.3	三个量子数 (核心)	21
4.8.4	电子云与概率分布	22
4.8.5	宇称	22
4.8.6	电偶极跃迁选择定则	22
4.9	本章完整小结	22
4.10	课后作业	22
5	原子中电子的自旋	22
5.1	问题的提出: 氢原子光谱的精细结构	22
5.2	电子轨道运动的磁矩	23
5.2.1	经典理论给出的轨道磁矩	23
5.2.2	量子理论给出的轨道磁矩	23
5.2.3	空间量子化与拉莫尔进动	24
5.3	施特恩—盖拉赫实验	24
5.3.1	实验原理与设计	24
5.3.2	银原子实验与预期	24
5.3.3	实验结果: 偶数分裂	25

5.3.4 历史轶事：一根劣质雪茄	25
5.4 电子的自旋假设	25
5.4.1 乌仑贝克—古兹米特假设	25
5.4.2 自旋假设的具体内容	25
5.4.3 对施特恩—盖拉赫实验的再解释	26
5.4.4 狄拉克方程与自旋的理论基础	26
5.5 朗德 g 因子与反常磁矩	26
5.5.1 朗德因子的定义与一般形式	26
5.5.2 电子的反常磁矩与量子电动力学	27
5.6 自旋—轨道耦合	27
5.7 本章小结	27
6 原子物理学期中模拟试题	28
A 基本常数与单位换算	31
B 原子的核式模型	33
C 玻尔氢原子理论	33
D 第三章量子力学导论——重要公式（详细版）	34
D.1 一、波粒二象性与物质波	34
D.2 二、不确定关系及其应用	35
D.3 三、波函数与统计解释	36
D.4 四、薛定谔方程及其简单应用	37
D.5 五、力学量与算符	38
D.6 六、氢原子的量子力学解	39
D.7 附：常用组合常数（数值计算必备）	40

1 课程概述与基本概念

1.1 课程信息

- 学时：54 学时（48 学时授课 + 6 学时习题课）。
- 考核：平时（作业 + 讨论）40%，期中（前四章）30%，期末（全部）30%。
- 教材：杨福家《原子物理学》第四版，高等教育出版社。
- 参考书：褚圣麟《原子物理学》、Foot *Atomic Physics* 等。

1.2 教学目的与内容

原子物理学是物质结构导论，核心是阐述原子结构，揭示微观世界的基本规律。要求学生了解经典物理在原子领域遇到的困难，掌握原子的基本结构、能级和光谱的基本规律，建立量子态、电子自旋、泡利原理等基本概念，并重视实验与创新。

1.3 物质结构的尺度与图像

- 原子大小： $\sim 10^{-10} \text{ m}$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$)。
- 原子核大小： $\sim 10^{-15} \text{ m}$ ($1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$)。
- 夸克、电子： $< 10^{-18} \text{ m}$ (点粒子，迄今无结构)。
- 宇宙观测直径约 9.3×10^{10} 光年，跨越约 40 个数量级。

1.4 基本常数与单位制

1.4.1 国际单位制 (SI) 基本单位的新定义 (2019)

- 秒：铯-133 原子基态两个超精细能级间跃迁辐射周期的 9 192 631 770 倍。
- 米：光在真空中 $1/299\,792\,458$ 秒内传播的距离。
- 千克：由普朗克常数 h 定义： $h = 6.62607015 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 。
- 安培：由基本电荷 e 定义： $e = 1.602176634 \times 10^{-19} \text{ C}$ 。
- 开尔文：由玻尔兹曼常数 k 定义： $k = 1.380649 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ 。
- 摩尔：由阿伏伽德罗常数 N_A 定义： $N_A = 6.02214076 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ 。
- 坎德拉：由特定频率单色辐射的发光效率定义。

1.4.2 自然单位制

在微观物理中，常令 $\hbar = c = k = 1$ ，所有物理量用能量单位 (eV) 表示。换算关系：

$$\begin{aligned} 1 \text{ s} &= 2.99792458 \times 10^8 \text{ m} \\ 1 \text{ GeV}^{-1} &\approx 6.58211968 \times 10^{-25} \text{ s} \\ 1 \text{ eV} &\approx 11604.518 \text{ K} \\ 1 \text{ fm} \times 1 \text{ GeV} &\approx 5.06773124 \end{aligned}$$

- **公式意义：**自然单位制简化计算，最后可通过量纲恢复 SI 单位。例如，长度单位用 GeV^{-1} 表示时，实际长度需乘以 $\hbar c$ （约 $197.3 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$ ）。

1.5 关键常数表

常数	符号	数值 (SI)
光速	c	$2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s}$
普朗克常数	h	$6.62607015 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
约化普朗克常数	$\hbar = h/(2\pi)$	$1.054571817 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
基本电荷	e	$1.602176634 \times 10^{-19} \text{ C}$
电子质量	m_e	$9.1093837015 \times 10^{-31} \text{ kg}$
质子质量	m_p	$1.67262192369 \times 10^{-27} \text{ kg}$
玻尔半径	$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$	$5.29177210903 \times 10^{-11} \text{ m}$
精细结构常数	$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$	$1/137.035999084$
里德伯常数（无穷大核）	$R_\infty = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 c}$	$1.0973731568160 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$
玻尔兹曼常数	k	$1.380649 \times 10^{-23} \text{ J/K}$

2 原子的核式模型

2.1 原子概念的建立与原子大小的估计

- 化学定律（定组成、倍比定律）支持原子存在。
- **布朗运动：**微粒的随机运动，爱因斯坦理论给出阿伏伽德罗常数 N_A ，从而估算原子尺寸。
- 电解定律：电荷的原子性，引出基本电荷。
- 元素周期表：元素性质周期性，预示原子内部结构。
- **原子大小估计：**对某元素，摩尔质量 A ，密度 ρ ，原子体积 $\frac{A}{\rho N_A}$ ，若为球体，半径 $r \approx \sqrt[3]{\frac{3A}{4\pi\rho N_A}}$ ，典型值 0.1 nm 。

2.2 电子的发现

2.2.1 阴极射线与荷质比测量

- **装置：**真空管中阴极发射射线，经电场/磁场偏转。
- **公式：**在电场 E 和磁场 B 中，粒子受力 $F = e(E + v \times B)$ 。通过调节使射线不偏转，得 $v = E/B$ 。撤去电场，粒子在磁场中做圆周运动，半径 r 满足 $evB = mv^2/r$ ，从而：

$$\frac{e}{m} = \frac{v}{Br} = \frac{E}{B^2 r}$$

- **意义：**测得 e/m 约 $1.76 \times 10^{11} \text{ C/kg}$ ，比氢离子大千倍，说明粒子质量极小，命名为“电子”。
- **适用：**任何带电粒子的荷质比测定。

2.2.2 密立根油滴实验

- **原理：**带电油滴在重力、电场力、粘滞阻力作用下平衡。测量油滴在电场中的速度变化，可计算电荷。
- **公式：**油滴电荷 $q = ne$ ， n 为整数，从而确定 e 。
- **意义：**直接证明电荷量子化，精确测定电子电荷。

2.3 α 粒子散射实验与原子核的发现

2.3.1 实验装置与结果

- **放射源（镭）**发射 α 粒子（ He^{2+} ，动能约 5 MeV），轰击金箔（厚度约 10^{-6} m）。用闪烁屏或探测器测量不同角度的散射粒子数。
- **结果：**绝大部分粒子散射角很小（ $\theta < 2^\circ$ ），约 1/8000 的粒子散射角大于 90° ，极少数接近 180° （背向散射）。

2.3.2 卢瑟福核式模型

原子中心有一个带正电的、体积很小（ 10^{-14} m 量级）但质量几乎等于整个原子的核（原子核），核外电子绕核运动。该模型可定性解释大角散射：当 α 粒子与原子核正碰时，受到强库仑斥力而反弹。

2.3.3 卢瑟福散射公式的推导

- **假设：**忽略电子；仅库仑力，点电荷；单次散射；靶核静止。
- **库仑散射公式（撞击参数 b 与散射角 θ 关系）：**

$$b = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{m_\alpha v_0^2} \cot \frac{\theta}{2}$$

其中 Z 为原子序数， v_0 为 α 粒子初速， m_α 为 α 粒子质量。此式表明 b 越小， θ 越大。

- **微分散射截面：**定义 $\sigma(\theta)$ 为每个原子将 α 粒子散射到单位立体角内的有效面积。由几何关系，入射到环面积 $2\pi b db$ 的粒子被散射到 $\theta \rightarrow \theta + d\theta$ 对应的立体角 $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ 内，故：

$$\sigma(\theta) = \frac{2\pi b db}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{16\pi\epsilon_0 E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$$

其中 $E = \frac{1}{2}m_\alpha v_0^2$ 为 α 粒子动能。

- **实验可测量：**对于厚 t 、单位体积原子数 n 的靶，探测器接收立体角 $d\Omega$ 内的粒子数为：

$$dN = N_0 n t \sigma(\theta) d\Omega$$

N_0 为入射 α 粒子总数。

- **公式意义：**提供了可直接与实验比较的定量关系，验证了核式模型，并用于测定原子序数 Z 。

2.4 原子核大小的估算

当 $\theta = \pi$ （对心碰撞）， α 粒子动能全部转化为库仑势能，最小距离 r_m 即原子核半径上限：

$$\frac{1}{2}m_\alpha v_0^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_m} \Rightarrow r_m = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{E}$$

取 $E = 7.68 \text{ MeV}$ ，金 ($Z = 79$) 得 $r_m \approx 3 \times 10^{-14} \text{ m}$ 。此公式用于估计原子核大小，也用于核反应中计算近核距离。

2.5 卢瑟福模型的意义与困难

- **意义：**确立了原子核式结构，开辟了用散射研究微观结构的方法（如卢瑟福背散射谱仪 RBS 用于材料分析）。
- **困难：**经典物理框架下无法解释原子的稳定性、同一性、再生性以及线状光谱。

2.6 关于“原子”存在的其他证据

- 布朗运动的爱因斯坦-佩兰理论：测定阿伏伽德罗常数，证实分子原子存在。
- 电解定律：法拉第常数 $F = N_A e$ ，结合电子电荷得 N_A 。

3 玻尔的氢原子理论

3.1 背景：量子论的起源

3.1.1 黑体辐射

- **基尔霍夫定律：**热平衡时，物体的辐射本领与吸收本领之比是波长和温度的函数，与材料无关。
- **斯特藩-玻尔兹曼定律：**黑体总辐射出射度 $M(T) = \sigma T^4$ ， $\sigma = 5.670374419 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$ 。用于测量温度（如高温测量）。
- **维恩位移定律：**峰值波长 $\lambda_{\max} T = b$ ， $b = 2.897771955 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$ 。用于确定星体表面温度。
- **经典理论的困难：**瑞利-金斯公式 $\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT$ 在紫外区发散（“紫外灾难”）。
- **普朗克量子假说：**假设谐振子能量只能取 $\varepsilon = nh\nu$ ，导出普朗克公式：

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

其中 $h = 6.62607015 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 为普朗克常数。该公式在全波段与实验符合，标志量子论诞生。

- **公式意义：**可计算任意温度下黑体辐射谱，是量子统计的基础。

3.1.2 光电效应

- **实验规律：**
 1. 存在截止频率 ν_0 （红限）， $\nu < \nu_0$ 时无光电子，与光强无关。
 2. 光电子最大初动能 $\frac{1}{2}mv_{\max}^2 = eU_0$ 与频率 ν 成线性关系： $eU_0 = h(\nu - \nu_0)$ 。
 3. 瞬时性：光照到金属后立即产生光电子（ $< 10^{-9} \text{ s}$ ）。
- **爱因斯坦光子假说：**光由光子组成，光子能量 $E = h\nu$ ，金属中电子一次吸收一个光子，克服逸出功 $W = h\nu_0$ 后获得动能：

$$h\nu = W + \frac{1}{2}mv_{\max}^2$$

此即爱因斯坦光电效应方程。

- **意义：**证实光的粒子性，测定普朗克常数 h 。

3.2 氢原子光谱

3.2.1 光谱分类

- 线状光谱：原子发射，谱线分明（如氢光谱）。
- 带状光谱：分子发射，由密集谱线组成。
- 连续光谱：固体加热、自由电子复合等产生。

3.2.2 氢原子光谱规律

- 巴尔末系（可见光）： $\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$, $n = 3, 4, 5, \dots$, R_H 为氢的里德伯常数。
- 里德伯公式：所有线系统一为 $\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$, $n_i > n_f$ 。 $n_f = 1$ 为莱曼系（紫外）， $n_f = 2$ 为巴尔末系， $n_f = 3$ 为帕邢系（红外），等等。
- 意义：光谱线分立，暗示原子内部能量量子化。

3.3 玻尔氢原子理论（1913）

3.3.1 三个基本假设

1. 定态假设：原子中存在一系列能量不连续的状态（定态），电子在定态中运动不辐射能量。
2. 频率条件：电子从高能态 E_m 跃迁到低能态 E_n 时，辐射光子能量 $h\nu = E_m - E_n$ 。
3. 角动量量子化：电子轨道角动量是 $\hbar$ 的整数倍： $L = m_e v r = n\hbar$, $n = 1, 2, 3, \dots$ 。

3.3.2 推导氢原子能级

库仑力提供向心力：

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = m_e \frac{v^2}{r}$$

结合角动量量子化 $m_e v r = n\hbar$ ，解得：

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{n\hbar} = \frac{\alpha c}{n}, \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} n^2 = a_0 n^2, \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529 \text{ \AA}$$

总能量：

$$E_n = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n}$$

代入 r_n ：

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

基态能量 $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ ，电离能 13.6 eV 。

3.3.3 氢原子光谱的理论解释

跃迁波长:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_m - E_n}{hc} = R_{\infty} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

其中 $R_{\infty} = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 c}$ 为里德伯常数 (核质量无穷大)。计算值 $R_{\infty} = 1.0973731568160 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$, 与实验值 R_H 略有差异, 源于核质量有限。

3.3.4 约化质量修正

实际系统是电子和核绕质心运动, 用约化质量 $\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$ 替换 m_e :

$$R_H = R_{\infty} \frac{\mu}{m_e} = R_{\infty} \frac{1}{1 + m_e/M}$$

对氢 $M = m_p$, 修正约 0.054%, 与实验符合。对氘 $M_D \approx 2m_p$, R_D 略大, 导致光谱线微小位移, 尤雷据此发现氘 (1934 诺贝尔化学奖)。

3.3.5 类氢离子

核电荷数 $Z > 1$, 核外只有一个电子的离子 (如 He^+ 、 Li^{2+}), 能级:

$$E_n = -Z^2 \frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

光谱公式:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \frac{1}{1 + m_e/M}$$

3.4 夫兰克-赫兹实验 (1914)

- **实验装置:** 充有汞蒸气的真空管, 阴极 K 发射电子, 栅极 G 与阴极间电压加速电子, 接收极 A 与栅极间加小反向电压 (抑制低能电子)。测量板极电流随加速电压的变化。
- **结果:** 当加速电压达到 4.9 V 时, 电流突然下降; 此后每增加 4.9 V, 电流再次下降。说明汞原子只能吸收 4.9 eV 的能量, 对应第一激发态。同时, 汞原子退激发射波长 253.7 nm 的紫外线, 与频率条件一致。
- **意义:** 直接证实原子内部能量量子化, 验证玻尔理论。
- **改进实验:** 将加速区与碰撞区分开, 可观察到更高激发能级。

3.5 里德伯原子与奇异原子

3.5.1 里德伯原子

原子中一个电子被激发到主量子数 n 很大的态 ($n \gtrsim 30$)。性质:

- 轨道半径 $r_n \propto n^2$, 可达微米量级 ($n = 250$ 时约 $3.3 \mu\text{m}$)。
- 电离能极小 ($\propto 1/n^2$), 易电离。
- 寿命 $\tau \propto n^3$, 较长。
- 应用: 天体物理 (星际氢原子)、激光物理、量子信息。

3.5.2 奇异原子

原子中一个或多个粒子被其他粒子替换：

- μ 子原子：电子被 μ 子（质量约 $207 m_e$ ）替换。 μ 子轨道半径缩小约 207 倍，可探测核结构（如质子半径）。
- 电子偶素：正电子与电子组成的束缚态，类似氢原子但约化质量为 $m_e/2$ ，能级 $E_n = -\frac{13.6}{2n^2} \text{ eV}$ ，寿命短（湮灭）。
- 介子原子、反质子原子等，用于研究强相互作用。
- 公式：对于两粒子质量 m_1, m_2 ，约化质量 $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ ，类氢能级 $E_n = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$ （若一个粒子带 $\pm e$ ）。

3.6 玻尔理论的评价

- 成功：解释氢光谱；引入定态、能级、量子化概念；给出原子半径、电离能；预言里德伯常数。
- 局限：
 1. 半经典半量子，保留轨道概念，逻辑不自洽。
 2. 无法解释多电子原子光谱、谱线强度、选择定则、塞曼效应等。
 3. 不能处理电子自旋。

4 量子力学初步：从实验基础到氢原子解的全解析

本章为量子力学入门核心章节，完整逻辑链：

康普顿散射 → 波粒二象性 → 不确定关系 → 波函数统计解释 → 薛定谔方程 → 氢原子量子力学解

覆盖实验基础、概念建立、方程提出、模型求解、实际应用全链条，是经典物理向量子物理跃迁的核心内容。

4.1 康普顿散射

4.1.1 实验基本信息

- 时间：1922-1923 年
- 研究者：阿瑟·康普顿 (A. H. Compton, 1892-1962)
- 实验材料：X 射线 + 石墨（轻元素）
- 关键合作者：吴有训，系统验证该效应，故又称康普顿-吴有训效应
- 光子能量范围：1-1000 keV（波长 1 nm-1 pm），远大于氢原子电离能 13.6 eV

4.1.2 实验装置

装置组成：X 射线管 → 光阑 → 晶体（单色化）→ 石墨散射体 → 探测器核心：测量不同散射角 φ 下的散射光波长。

4.1.3 实验结果

1. 散射光出现 ** 两种波长 **：原入射波长 λ_0 、新波长 $\lambda > \lambda_0$ ；2. 波长偏移 $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$ 仅由散射角 φ 决定，与散射物质无关；3. 散射角 φ 增大：- $\Delta\lambda$ 单调增大；- 原波长 λ_0 强度降低；- 新波长 λ 强度升高；4. 不同轻元素散射规律一致，重元素原子核质量大，原波长成分更强。

4.1.4 核心公式与物理常数

波长偏移公式

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \lambda_c (1 - \cos \varphi)$$

- 物理含义：该公式描述了 X 射线光子与自由电子发生弹性碰撞后，其波长变长的具体数值。
- 如何使用：已知散射角 φ ，代入公式即可计算出波长的变化量 $\Delta\lambda$ 。例如，当 $\varphi = 90^\circ$ 时， $\Delta\lambda = \lambda_c$ ；当 $\varphi = 180^\circ$ （背散射）时， $\Delta\lambda = 2\lambda_c$ ，此时波长变化最大。

电子康普顿波长

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0 c} = 2.43 \times 10^{-3} \text{ nm} = 0.0241 \text{ \AA}$$

- 物理含义：这是一个基本常数，代表了光子与静止电子碰撞时，在 90° 散射角下产生的波长偏移量。
- 如何使用：作为公式中的比例常数。实验测量值为 $2.41 \times 10^{-3} \text{ nm}$ ，与理论值高度吻合，验证了公式的正确性。此外，该常数也确立了光子动量 $p = h/\lambda$ 。

4.1.5 经典电磁理论的困难

经典理论预言：电磁波照射物质 $\rightarrow$ 带电粒子受迫振动 $\rightarrow$ 散射光频率 = 入射光频率 $\rightarrow \lambda$ 不变。
完全无法解释：1. 散射波长变长；2. 波长偏移与散射角相关；3. 轻元素效应更显著。

4.1.6 量子解释

核心模型：X 射线光子与静止自由电子发生弹性碰撞
1. 光子能量 $E = h\nu \gg$ 电子束缚能（eV 量级），电子视为自由静止；2. 碰撞中光子将部分能量传递给电子；3. 光子能量降低 $\rightarrow$ 频率减小 $\rightarrow$ 波长变长；4. 碰撞过程满足：能量守恒 + 动量守恒（微观单个事件守恒律严格成立）。

4.1.7 理论推导

1. 能量守恒：

$$h\nu_0 + m_0 c^2 = h\nu + mc^2$$

2. 动量守恒（矢量）：

$$\vec{p}_0 = \vec{p} + m\vec{v}$$

3. 相对论质量：

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

联立解得波长偏移公式，与实验完全一致。

4.1.8 关键讨论问题

Q1: 为什么散射光仍有原波长 λ_0 ? 光子与原子核碰撞, 原子核质量 $M \gg m_0$, $\Delta\lambda \approx 0$, 波长不变。

Q2: 为什么是散射而非吸收光子? X 射线光子能量远大于电子束缚能, 电子为自由态, 只能弹性散射, 无法完全吸收。

Q3: 为什么可见光看不到康普顿效应? 可见光波长 $\sim 100 \text{ nm} \gg \lambda_c$, $\Delta\lambda$ 极小, 无法观测。

Q4: 为什么光电效应不考虑动量守恒? 光电效应中电子被原子束缚, 原子整体参与动量传递, 电子动量不守恒。

4.1.9 实验意义

1. 强力支持光量子假说, 验证 $E = h\nu$; 2. 首次实验证实光子具有动量 $p = \frac{h}{\lambda}$; 3. 证明微观单个碰撞事件中, 能量、动量守恒律依然成立; 4. 康普顿获 1927 年诺贝尔物理学奖。

4.1.10 康普顿-吴有训效应

1. 1923 年康普顿发现效应, 部分学者无法重复实验; 2. 吴有训系统研究 15 种元素, 严格验证效应的普遍性; 3. 1925 年完成博士论文《康普顿效应》, 奠定该效应的实验基础; 4. 国际学界认可该贡献, 称为康普顿-吴有训效应。

4.1.11 光子概念小结

光子概念建立于三大实验: 1. 黑体辐射: 能量量子化 $E = nh\nu$; 2. 光电效应: 光子被电子整体吸收; 3. 康普顿散射: 光子具有动量, 满足守恒律。

4.2 波粒二象性与物质波

4.2.1 玻尔理论的根本困难

旧量子论(玻尔理论)缺陷: 1. 无法解释定态为何不辐射; 2. 跃迁逻辑矛盾: 电子需预知末态才能吸收对应能量; 3. 无跃迁过程的物理图像; 4. 强行混合经典轨道与量子化条件, 无法自洽。

4.2.2 量子理论发展历史

1900 普朗克: 能量子 1905 爱因斯坦: 光量子

1913 玻尔: 量子态 1924 德布罗意: 物质波

1925 海森堡/玻恩: 矩阵力学 1926 薛定谔: 波动力学

1928 狄拉克: 相对论量子力学

4.2.3 光的波粒二象性

- 波动性: 干涉、衍射、偏振(经典波特征);

- 粒子性：光电效应、康普顿散射（能量/动量量子化）；
- 统一描述： $E = h\nu$, $p = \frac{h}{\lambda}$ 。

4.2.4 德布罗意假设（1924）

核心思想：自然界具有高度对称性，光有波粒二象性，实物粒子（电子、质子、原子）也必然具有波粒二象性。

德布罗意原话：“辐射研究过度偏重波动，实物研究过度偏重粒子，我们忽略了实物的波动性。”

4.2.5 德布罗意公式

通用公式

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

- 物理含义：这是连接粒子性和波动性的核心公式，它表明任何具有动量 p 的实物粒子都对应一个波长 λ 的波。
- 如何使用：已知一个粒子的动量 p ，直接用普朗克常数 h 除以它，即可得到其物质波波长。这是计算所有实物粒子波长的基本公式。

非相对论粒子 ($v \ll c$)

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$$

- 物理含义：当粒子速度远小于光速时，动量 $p = mv$ 。该公式将波长与粒子的质量、速度或动能联系起来。
- 如何使用：这是最常用的计算形式。例如，已知电子的动能 E_k ，即可计算其波长。如果电子经过电压 U 加速，则 $E_k = eU$ ，代入即可。

相对论粒子

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0E_k + \frac{E_k^2}{c^2}}}$$

- 物理含义：当粒子速度接近光速时，必须使用相对论公式。此时动量 p 与动能 E_k 的关系不再是简单的 $p = \sqrt{2mE_k}$ 。
- 如何使用：当粒子的动能 E_k 与其静能 m_0c^2 可比拟时，必须使用此公式。例如，高能加速器中的电子。
- 宏观物体： m 极大， $\lambda \rightarrow 0$ ，波动性消失；
- 微观粒子： λ 可与原子尺度比拟，波动性显著。

4.2.6 例题：电子德布罗意波长计算

已知电子动能 $E_k = 200 \text{ eV}$ ，求 λ ：

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} \approx 0.087 \text{ nm}$$

与 X 射线波长相当，可产生衍射效应。

4.2.7 物质波实验验证

1. **戴维孙-革末实验 (1927)** 电子束入射镍单晶，观测到衍射峰，直接证实电子波动性；加速电压 $U = 54 \text{ V}$ 时出现最强衍射峰，与理论计算一致。
2. **G.P. 汤姆逊实验 (1927)** 电子束穿过金属多晶薄膜，得到衍射环，与 X 射线衍射一致；戴维孙、G.P. 汤姆逊共获 1937 年诺贝尔物理学奖。
3. **约恩逊实验 (1961)** 首次实现电子双缝干涉，单电子逐个通过仍形成干涉条纹。
4. 后续验证：中子、原子、分子 (C_{70}) 均观测到波动性。

4.2.8 群速度与相速度

1. **相速度**：单色波传播速度 $v_p = \frac{\omega}{k}$ ，可超光速（不传递信息）；
2. **群速度**：波包传播速度 $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ ，等于粒子运动速度；
3. 物质波是**概率波包**，非经典波包，不会因色散解体。

4.2.9 物质波的本质理解

费曼观点：电子既不是经典粒子，也不是经典波

1. 粒子性：不可分割，以整体形式被探测；
2. 波动性：干涉、衍射，概率分布；
3. 波粒二象性：两种属性**不同时显现**，观测方式决定表现形式。

4.2.10 物质波与玻尔轨道量子化

德布罗意用驻波解释玻尔定态：电子轨道周长为物质波波长的整数倍：

$$2\pi r = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3 \cdots)$$

代入 $\lambda = \frac{h}{mv}$ ，直接导出玻尔角动量量子化条件：

$$L = mvr = n\hbar$$

4.2.11 微观粒子波动性的应用

1. **电子显微镜**：电子波长比可见光小 $10^3 \sim 10^5$ 倍，分辨率极高；
2. **扫描隧道显微镜 (STM)**：利用量子隧道效应，原子级成像；
3. **中子衍射**：研究晶体结构；
4. **量子干涉仪**：精密测量。

4.3 海森堡不确定关系

4.3.1 提出者与时间

1927 年，海森堡 (W. Heisenberg)，矩阵力学创立者之一。

4.3.2 核心物理图像

电子单缝衍射：- 缝宽 Δx ：位置不确定度；- 衍射散开：动量 x 分量不确定度 Δp_x ；- 缝越窄 (Δx 越小)，衍射越厉害 (Δp_x 越大)。

4.3.3 位置-动量不确定关系

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

- **物理含义：**这是量子力学的核心原理之一，它指出我们无法同时精确地知道一个粒子的位置和动量。对位置测量得越精确（ Δx 越小），对其动量的了解就越模糊（ Δp_x 越大），反之亦然。这不是测量技术的限制，而是粒子的内禀属性。
- **如何使用：**该关系式给出了两个不确定度的乘积下限。常用于估算微观粒子行为。例如，已知一个电子被限制在原子尺度（ $\Delta x \sim 10^{-10} \text{ m}$ ）内，则可以估算出其动量不确定度 $\Delta p_x \geq \hbar/(2\Delta x)$ ，从而知道其动能的量级。
- **根源：**波粒二象性，非测量误差；
- **宏观粒子：** h 极小，不确定量可忽略，经典力学适用。

4.3.4 能量-时间不确定关系

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

- **物理含义：**该关系式表明，一个量子态的能量不确定度 ΔE 与其寿命 Δt 成反比。寿命越短的态，其能量就越不确定。
- **如何使用：**这是解释原子光谱线宽的关键公式。例如，原子激发态的平均寿命 Δt 很短，因此其能级有一定宽度 ΔE ，导致辐射出的光子频率有一个范围，形成谱线的自然宽度。基态寿命 $\Delta t \rightarrow \infty$ ，则 $\Delta E \rightarrow 0$ ，能级完全确定。

4.3.5 宏观与微观对比

例题：子弹 $m = 10 \text{ g}$ ， $v = 200 \text{ m/s}$ ， $\Delta p/p = 0.01\%$

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p} \approx 2.6 \times 10^{-31} \text{ m}$$

远小于原子尺度，完全可忽略。

4.3.6 好量子数

位置、动量不是微观粒子的**好量子数**（无法同时确定）；用 n, l, m 等可确定的量子数描述微观状态，更符合量子力学规律。

4.3.7 关键难点解析

不确定关系是微观粒子的**固有属性**，与仪器精度、测量方法无关，是量子力学与经典力学的本质分界线。

4.4 波函数及其统计解释

4.4.1 波函数的引入

1925 年薛定谔提出：用复函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 描述微观粒子的运动状态。

4.4.2 玻恩统计解释（1926）

核心：物质波是概率波，而非经典物理波！ 1. $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ：粒子在空间 $\mathbf{r}$ 处单位体积内的概率密度； 2. 体积元 dV 内粒子出现概率：

$$dW = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$$

3. 玻恩获 1954 年诺贝尔物理学奖。

4.4.3 波函数的标准条件（自然条件）

1. **连续性：**概率不突变，波函数处处连续； 2. **单值性：**空间某点概率唯一； 3. **有限性：**概率不可能无穷大。

4.4.4 归一化条件

粒子在全空间必然出现，总概率为 1：

$$\int_{\infty} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 1$$

- **物理含义：**这个条件确保了波函数描述的统计意义是自洽的，即粒子一定存在于空间某处。
- **如何使用：**这是波函数必须满足的基本条件。如果一个波函数 Ψ 不满足此条件，可以通过乘上一个常数 C 使其归一化，即求解 $\int |C\Psi|^2 dV = 1$ ，得到 C 。归一化后， $|\Psi|^2$ 才能直接解释为概率密度。

4.4.5 波函数的特性

1. Ψ 与 $C\Psi$ (C 为常数) 描述同一状态；
2. 波函数是复函数，不可直接测量，可测量的是 $|\Psi|^2$ ；
3. 与经典波不同：经典波波幅加倍，能量变为 4 倍，状态改变。

4.4.6 态叠加原理

若 Ψ_1, Ψ_2 是粒子的可能状态，则：

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$$

也是粒子的可能状态。**关键：**量子叠加是概率振幅叠加，非经典波强度叠加。

4.4.7 单电子双缝干涉

1. 电子逐个通过双缝，长时间积累形成干涉条纹；2. 干涉是单个电子自己与自己干涉，非电子间相互作用；3. 直接证明物质波的概率本质。

4.5 量子力学的哲学争论

4.5.1 两大学派对立

1. 哥本哈根学派（玻尔、海森堡、玻恩、狄拉克）宇宙本质是概率性的，观测导致波函数坍缩。
2. 现实主义学派（爱因斯坦、薛定谔、德布罗意）“上帝不掷骰子”，量子力学不完备，存在隐变量。

4.5.2 薛定谔的猫（1935）

思想实验：放射性原子衰变 → 触发毒药 → 猫生死叠加

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{\text{活}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{\text{死}}$$

揭示量子叠加与宏观世界的矛盾，质疑波函数坍缩假设。

4.5.3 Bell 不等式（1964）

贝尔提出判据，将哲学争论转化为实验可验证问题；排除定域隐变量理论，证明哥本哈根解释的正确性。

4.5.4 2022 年诺贝尔物理学奖

Clauser、Aspect、Zeilinger：实验验证 Bell 不等式不成立，奠定量子信息科学基础。

4.6 薛定谔方程

4.6.1 方程地位

非相对论量子力学基本方程（基本假设，无法推导），地位等同于经典力学牛顿第二定律。

4.6.2 含时薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

哈密顿算符：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}, t)$$

（动能算符 + 势能算符）

- **物理含义：**这是量子力学的动力学方程，描述了波函数 Ψ 随时间演化的规律。
- **如何使用：**给定系统的哈密顿量 $\hat{H}$ （即总能量算符）和初始时刻的波函数，通过求解该方程，可以得到系统在任意时刻的波函数，从而获得所有物理信息。

4.6.3 定态薛定谔方程（ U 与时间无关）

定态波函数： $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$ 定态方程：

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

- **物理含义：**当势能 U 不显含时间时，我们可以分离变量，将问题简化为求解该方程。这是一个本征值方程，其本征值 E 就是系统的能量，本征函数 ψ 就是与该能量对应的定态波函数。
- **如何使用：**这是求解大多数原子物理问题（如氢原子、势阱）的核心方程。核心任务是找到使方程有物理上可接受的解的 E 值（能量量子化）和对应的波函数 ψ 。

定态特点： 1. 能量 E 确定； 2. 概率密度 $|\Psi|^2 = |\psi|^2$ 与时间无关； 3. 氢原子、势阱均为定态问题。

4.6.4 方程的建立思路

由自由粒子波函数 $\Psi = Ae^{i(\vec{p}\cdot\mathbf{r} - Et)/\hbar}$ ，对时间、空间求导，结合非相对论能量 $E = \frac{p^2}{2m}$ ，导出薛定谔方程。

4.7 一维定态问题的求解

4.7.1 一维无限深势阱

势场模型：

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$

定态薛定谔方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

边界条件： $\psi(0) = \psi(a) = 0$

波函数解：

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

- **物理含义：**波函数描述了粒子在势阱内的概率分布。它是一个驻波，在边界处为零。
- **如何使用：**给定量子数 n ，即可写出对应的波函数。波函数的平方 $|\psi_n|^2$ 给出了在势阱内各点找到粒子的概率密度。

能量量子化：

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$$

- **物理含义：**势阱中粒子的能量不是连续的，而是被量子化了，由主量子数 n 决定。
- **如何使用：**这是计算势阱中粒子能级的公式。例如，已知势阱宽度 a 和粒子质量 m ，可以直接计算出第 n 个能级的能量值。

关键结论： 1. 能量量子化， n 为主量子数；2. 存在零点能 $E_1 \neq 0$ ，经典粒子最低能量为 0；3. 概率密度 $|\psi_n|^2$ 分布不均匀，粒子非均匀分布。

4.7.2 量子隧道效应

核心现象： 粒子能量 $E < \text{势垒高度 } U_0$ ，仍有概率穿透势垒。

$$T \propto e^{-2a\sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}}$$

- **物理含义：** 这是波粒二象性的直接体现。粒子可以像波一样“穿透”一个在经典力学中无法逾越的势垒。其穿透概率 T 随势垒宽度 a 和势垒高度 U_0 的增加而指数衰减。
 - **如何使用：** 该公式可用于估算粒子穿透势垒的概率。例如，在扫描隧道显微镜（STM）中，通过测量隧道电流（与穿透概率成正比）随针尖-样品距离 a 的变化，可以反推样品表面的形貌。
- 影响因素：** 1. 粒子质量 m 越小，穿透概率越大；2. 势垒宽度 a 越小，穿透概率越大；3. 能量差 $U_0 - E$ 越小，穿透概率越大。

应用： 1. 扫描隧道显微镜（STM）；2. 原子核 α 衰变；3. 隧道二极管；4. 热核反应。

4.7.3 一维谐振子

势场： $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$ **能级：**

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu, \quad n = 0, 1, 2 \dots$$

- **物理含义：** 谐振子的能级也是量子化的，且是等间距的。
 - **如何使用：** 给定振动频率 $\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{k/m}$ ，即可计算各能级的能量。该公式在分子振动、固体物理等领域有广泛应用。
- 特点：** 1. 能级均匀分布；2. 零点能 $\frac{1}{2}h\nu$ ，量子力学特有；3. 量子数 n 很大时，趋近于经典谐振子（对应原理）。

4.7.4 算符与平均值

1. 坐标算符： $\hat{x} = x$ 2. 动量算符： $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 3. 动能算符： $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ 4. 哈密顿算符： $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$ 5. 物理量平均值： $\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dV$

- **物理含义：** 在量子力学中，每个可观测的物理量都对应一个算符。通过波函数可以计算该物理量的期望值（即多次测量的平均值）。
- **如何使用：** 要计算一个物理量 A 的平均值，首先找到对应的算符 $\hat{A}$ ，然后用公式 $\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dV$ 进行计算。例如，计算粒子位置的平均值，即使用 $\hat{x} = x$ 。

4.8 氢原子的薛定谔方程解

4.8.1 模型与势场

电子在库仑势中运动：

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

氢原子是**唯一**可严格求解的原子结构问题。

4.8.2 球坐标下的分离变量

波函数分离： $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ 分解为三个方程：径向方程、极角方程、方位角方程。

4.8.3 三个量子数（核心）

表 1: 氢原子量子数完整表

量子数	取值范围	物理意义	核心公式
主量子数 n	$n = 1, 2, 3, \dots$	决定能量	$E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}$
角量子数 l	$l = 0, 1, \dots, n-1$	决定角动量	$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$
磁量子数 m	$m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$	空间量子化	$L_z = m\hbar$

能量公式

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}$$

- **物理含义：**氢原子的能级完全由主量子数 n 决定，与玻尔理论结果一致。
- **如何使用：**计算氢原子各能级的能量，例如 $n = 1$ 时 $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ （基态）， $n = 2$ 时 $E_2 = -3.4 \text{ eV}$ 。该公式是分析氢原子光谱的基础。

角动量大小公式

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

- **物理含义：**角动量的大小是量子化的，由角量子数 l 决定。与玻尔理论中的 $L = n\hbar$ 不同，这里引入了 $\sqrt{l(l+1)}$ 。
- **如何使用：**给定角量子数 l ，即可计算角动量的大小。例如， $l = 0$ （s 轨道）时 $L = 0$ ； $l = 1$ （p 轨道）时 $L = \sqrt{2}\hbar$ 。

角动量空间取向公式

$$L_z = m\hbar$$

- **物理含义：**角动量在外磁场方向（通常设为 z 轴）的投影 L_z 也是量子化的，由磁量子数 m 决定。这就是“空间量子化”的体现。
- **如何使用：**给定磁量子数 m ，即可计算角动量在 z 轴上的投影。例如，对于 $l = 1$ ， m 可以取 $-1, 0, +1$ ，对应的 L_z 分别为 $-\hbar, 0, +\hbar$ 。

4.8.4 电子云与概率分布

1. 径向概率密度: $P(r) = r^2 |R(r)|^2$, 描述 r 处球壳内电子出现概率; 2. 基态 $n=1, l=0$: 概率极大值在 $r = a_0$ (玻尔半径); 3. 电子云: 电子无经典轨道, 以概率云形式分布在核外。

4.8.5 宇称

空间反演: $(r, \theta, \phi) \rightarrow (r, \pi - \theta, \phi + \pi)$ 角向波函数字称:

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi)$$

l 偶 $\rightarrow$ 偶宇称, l 奇 $\rightarrow$ 奇宇称; 吴健雄实验证实弱相互作用中宇称不守恒。

4.8.6 电偶极跃迁选择定则

允许跃迁:

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

- 物理含义: 该规则规定了原子在吸收或发射光子时, 量子数 l 和 m 可以如何变化。只有满足这些条件的跃迁才可能发生 (即 “允许跃迁”)。
- 如何使用: 用于判断氢原子光谱线是否会出现。例如, 从 $2p$ ($l=1$) 能级跃迁到 $1s$ ($l=0$) 满足 $\Delta l = -1$, 是允许的, 对应莱曼系第一条谱线。而从 $2s$ ($l=0$) 到 $1s$ ($l=0$) 的跃迁 $\Delta l = 0$, 是禁戒的, 几乎不会发生。

解释氢原子光谱 (赖曼系、巴耳末系、帕邢系) 的谱线规律。

4.9 本章完整小结

1. 两大核心概念: 量子化、波粒二象性; 2. 一个核心关系: 海森堡不确定关系; 3. 一个基本原理: 态叠加原理; 4. 两个基本假设: 波函数统计解释、薛定谔方程; 5. 关键常数: 普朗克常量 h ; 6. 核心实验: 康普顿散射、电子衍射、单电子双缝干涉; 7. 核心应用: 电子显微镜、STM、量子信息。

4.10 课后作业

习题: 3-2、3-4、3-6、3-7、3-8、3-9、3-11、3-13、3-15

5 原子中电子的自旋

5.1 问题的提出: 氢原子光谱的精细结构

玻尔理论成功解释了氢原子光谱的主要特征, 将谱线频率与能级差联系起来:

$$h\nu = E_{n_2} - E_{n_1}, \quad E_n = -\frac{R_y}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

其中 $R_y \approx 13.6 \text{ eV}$ 为里德伯能量。然而, 随着光谱仪分辨率的提高, 实验发现每一条谱线实际上由多条靠得很近的分线组成, 这就是光谱的精细结构。例如, 巴耳末系的第一条谱线 H_α ($n=3 \rightarrow n=2$) 在高分辨率下呈现出七条成分。

这一事实表明，仅用主量子数 n 描述原子态是不完备的，必然存在某种尚未计入的相互作用导致能级的进一步分裂。回顾氢原子的量子力学描述：给定一组量子数 (n, l) ，磁量子数 m 可取 $2l+1$ 个值 ($m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$)，这些态在无外场时具有相同的能量 E_n ，即能级简并。要分辨这些简并态，最直接的方法是将原子置于**磁场**中，因为磁量子数 m 的名称本身就暗示了它与磁场的密切关系。

本章将沿着这一思路展开：首先建立电子轨道运动的磁矩理论，然后介绍判决性的施特恩—盖拉赫实验，最终引入电子的自旋概念以全面解释精细结构及相关现象。

5.2 电子轨道运动的磁矩

5.2.1 经典理论给出的轨道磁矩

考虑电子（电荷 $q = -e$ ，质量 m_e ）以速率 v 在半径为 r 的圆形轨道上运动。运动周期为 $T = 2\pi r/v$ ，等效环形电流为

$$I = \frac{q}{T} = -\frac{ev}{2\pi r}.$$

根据磁矩的定义 $\boldsymbol{\mu} = I\mathbf{A}$ ，其中面积矢量 $\mathbf{A} = \pi r^2 \hat{\mathbf{n}}$ ， $\hat{\mathbf{n}}$ 为轨道面法向单位矢量（方向由电流方向按右手定则确定），可得轨道磁矩为

$$\boldsymbol{\mu}_l = \left(-\frac{ev}{2\pi r}\right)(\pi r^2)\hat{\mathbf{n}} = -\frac{evr}{2}\hat{\mathbf{n}}.$$

另一方面，电子的轨道角动量（相对于核）为

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = r(m_e v)\hat{\mathbf{n}} = m_e v r \hat{\mathbf{n}}.$$

比较两式，消去 v 和 r ，得到经典比例关系：

$$\boxed{\boldsymbol{\mu}_l = -\frac{e}{2m_e}\mathbf{L}}.$$

负号表明，由于电子带负电，轨道磁矩与轨道角动量的方向相反。比例系数 $\gamma_l = e/(2m_e)$ 称为**轨道旋磁比**。

5.2.2 量子理论给出的轨道磁矩

根据量子力学的**对应原理**，经典物理量之间的关系在量子力学中通常保留为相应算符之间的关系。因此，将上式中的 $\mathbf{L}$ 替换为轨道角动量算符 $\hat{\mathbf{L}}$ ，得到磁矩算符：

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l = -\frac{e}{2m_e}\hat{\mathbf{L}}.$$

引入**玻尔磁子** μ_B 作为原子磁矩的自然单位：

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9.274 \times 10^{-24} \text{ J/T} = 5.788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}.$$

则轨道磁矩算符可写为

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l = -\frac{\mu_B}{\hbar}\hat{\mathbf{L}}.$$

根据轨道角动量的量子化规则，角动量平方算符的本征值为 $\langle \hat{\mathbf{L}}^2 \rangle = l(l+1)\hbar^2$ ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$)， z 分量的本征值为 $\langle \hat{L}_z \rangle = m_l \hbar$ ，其中磁量子数 $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ 。因此，轨道磁矩的大小及其 z 分量分别为：

$$|\boldsymbol{\mu}_l| = \frac{\mu_B}{\hbar} \sqrt{l(l+1)}\hbar = \mu_B \sqrt{l(l+1)},$$

$$\mu_{l,z} = -\frac{\mu_B}{\hbar} L_z = -m_l \mu_B.$$

这一结果与玻尔模型给出的表达式完全相同，但量子力学赋予了它更深刻的基础。

5.2.3 空间量子化与拉莫尔进动

公式 $\mu_{l,z} = -m_l \mu_B$ 揭示了空间量子化现象：对于给定的轨道量子数 l ，磁矩在外磁场方向（取为 z 轴）的投影只能取 $2l+1$ 个分立的值。这意味着原子磁矩在空间中的取向是量子化的，无法连续变化。

在无外磁场（ $B=0$ ）时，这 $2l+1$ 个态具有相同的能量 E_n ，形成简并。若将原子置于沿 z 方向的均匀外磁场 $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{k}}$ 中，磁矩将受到力矩：

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu}_l \times \mathbf{B}.$$

根据角动量定理 $\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \boldsymbol{\tau}$ ，并结合 $\boldsymbol{\mu}_l = -(e/2m_e)\mathbf{L}$ ，可得

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}_l}{dt} = -\frac{e}{2m_e} \frac{d\mathbf{L}}{dt} = \frac{e}{2m_e} \mathbf{B} \times \boldsymbol{\mu}_l = \boldsymbol{\omega}_L \times \boldsymbol{\mu}_l,$$

其中 $\boldsymbol{\omega}_L = \frac{e}{2m_e} \mathbf{B}$ 称为拉莫尔角频率。该方程表明，磁矩矢量 $\boldsymbol{\mu}_l$ （以及角动量 $\mathbf{L}$ ）将绕外磁场方向作匀速进动，此即拉莫尔进动。进动过程中， $\boldsymbol{\mu}_l$ 与 $\mathbf{B}$ 的夹角保持不变， $\mu_{l,z}$ 是守恒量，这正是空间量子化在动力学上的体现。

5.3 施特恩—盖拉赫实验

5.3.1 实验原理与设计

1922 年，施特恩（O. Stern）和盖拉赫（W. Gerlach）设计了一个精巧的实验，旨在直接验证空间量子化。实验装置主要包括：加热炉（产生原子束）、准直狭缝、非均匀磁铁、以及探测屏。

核心物理思想是：具有磁矩 $\boldsymbol{\mu}$ 的原子在非均匀磁场中会受到净平移力。设磁场主要沿 z 方向，且存在梯度 $\frac{\partial B}{\partial z}$ ，则原子在 z 方向受到的力为

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}.$$

由于 $\mu_z = -m_l \mu_B$ 是分立的，因此力 F_z 也是分立的。原子束经过非均匀磁场区域后，不同 m_l 态的原子将获得不同的横向动量，从而在探测屏上形成空间分离的沉积条纹。根据轨道角动量理论，条纹数目应等于 $2l+1$ 条。

5.3.2 银原子实验与预期

实验选择的原子是银（Ag）。在炉温（远低于第一激发能）下，银原子几乎全部处于基态。银的原子序数为 47，基态电子组态为 $[\text{Kr}] 4d^{10}5s^1$ 。满壳层（ $4d^{10}$ ）电子的总轨道角动量和总自旋角动量均为零，因此整个原子的角动量和磁矩仅由最外层的 $5s$ 电子贡献。对于 s 电子（ $l=0$ ），其轨道磁矩为零。

基于纯轨道磁矩理论的预言：

$$l=0 \implies m_l=0 \implies \mu_{l,z}=0 \implies F_z=0 \implies \text{屏上应只有一条未偏转的条纹.}$$

5.3.3 实验结果：偶数分裂

然而，实验结果令所有人震惊：银原子束在磁场中**分裂为两条对称的细痕**！这一结果包含两个重要信息：

1. 原子**确实具有磁矩**（否则不会分裂）；
2. 磁矩在磁场方向的投影**只有两个可能的取值**（偶数分裂）。

$2l + 1$ 的奇数分裂预言完全失效。即便考虑多电子原子的总轨道角动量，基态银原子的总轨道量子数 $L = 0$ 也不应产生任何分裂。实验清晰地表明，原子内部存在一种无法用轨道运动解释的新型磁矩，且该磁矩的空间取向是二值的。

5.3.4 历史轶事：一根劣质雪茄

实验初期，由于真空系统寿命有限，收集屏上沉积的银层极薄，肉眼难以辨认。施特恩描述道，盖拉赫卸下法兰后看不到任何痕迹，便将法兰递给了施特恩。施特恩凑近仔细观察，呼出的气息中含有劣质雪茄的硫化物，将银逐渐转化为黑色的硫化银 (Ag_2S)，图案才慢慢显现。正如冲洗照片一般，这一偶然的化学反应让人类首次“看见”了空间量子化的直接证据。

5.4 电子的自旋假设

5.4.1 乌伦贝克—古兹米特假设

为了解释施特恩—盖拉赫实验的偶数分裂、碱金属光谱的双线结构（精细结构）以及反常塞曼效应，1925 年，两位年轻的荷兰物理学家乌伦贝克 (G. Uhlenbeck) 和古兹米特 (S. Goudsmit) 提出了一个大胆的假设：**电子具有内禀的自旋角动量**。

5.4.2 自旋假设的具体内容

这一假设的核心内容可概括为以下四点：

- (1) **自旋角动量**：电子除了轨道角动量 $\mathbf{L}$ 外，还具有固有的**自旋角动量 $\mathbf{S}$** 。它不是电子作为刚体绕自身轴线的机械转动，而是一种没有经典对应的纯粹量子内禀属性。
- (2) **自旋量子数**：任何电子的自旋角动量大小都是固定的，由自旋量子数 s 决定。对电子而言， $s = 1/2$ 。因此，

$$|\mathbf{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar.$$

- (3) **自旋的空间量子化**：自旋角动量在空间特定方向（如外磁场方向 z 轴）的投影 S_z 是量子化的。由自旋磁量子数 m_s 表征，其取值规则为 $m_s = -s, -s+1, \dots, s$ 。由于 $s = 1/2$ ， m_s 只能取两个值：

$$m_s = +\frac{1}{2} \quad \text{或} \quad m_s = -\frac{1}{2}.$$

相应的 z 分量为 $S_z = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar$ 。这两个状态常被称为**自旋向上** ($\uparrow$) 和**自旋向下** ($\downarrow$)。

- (4) **自旋磁矩与反常旋磁比**：与自旋角动量相联系，电子具有**自旋磁矩 $\boldsymbol{\mu}_s$** 。实验和理论均表明，自旋产生磁矩的效率是轨道运动的两倍，即

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S},$$

其中 g_s 称为电子自旋朗德因子，其值近似为 $g_s \approx 2$ 。因此，自旋磁矩的 z 分量为

$$\mu_{s,z} = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} (\pm \frac{1}{2} \hbar) = \mp \frac{g_s}{2} \mu_B \approx \mp \mu_B.$$

5.4.3 对施特恩—盖拉赫实验的再解释

运用电子自旋假设，银原子实验的谜团迎刃而解。基态银原子总轨道角动量 $L = 0$ ，总自旋角动量 $S = 1/2$ 。其总磁矩完全由未配对 $5s$ 电子的自旋磁矩贡献：

$$\mu_z = \mu_{s,z} = \mp \frac{g_s}{2} \mu_B \approx \mp \mu_B.$$

在非均匀磁场中，这两个自旋态分别受到大小相等、方向相反的偏转力，导致原子束严格分裂为两条。实验不仅证实了空间量子化的存在，更确凿无疑地证明了电子自旋假说的正确性以及电子自旋磁矩数值的准确性。

5.4.4 狄拉克方程与自旋的理论基础

尽管自旋假设在实验上取得了巨大成功，但其经典图像（如将电子视为旋转小球）会导致表面速度远超光速的荒谬结果，因而遭到包括泡利在内的一些物理学家的质疑。乌仑贝克和古兹米特一度打算撤回论文，但他们的导师埃伦菲斯特给予了鼓励和支持。

理论的最终突破来自 1928 年狄拉克 (P. A. M. Dirac) 的工作。他将量子力学与狭义相对论相结合，建立了著名的狄拉克方程。对于自由电子，狄拉克方程可写为

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta m_e c^2) \psi,$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 是 4×4 矩阵， ψ 是四分量的旋量波函数。在非相对论极限下，对方程作展开，哈密顿量中自然会出现一项

$$\hat{H}_{\text{SO}} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}},$$

其中 $V(r) = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ 是电子所处的库仑势。这一项即为自旋—轨道耦合相互作用的数学表述。它揭示了电子的自旋磁矩会与其轨道运动产生的内部磁场发生作用，导致能级的进一步分裂，从而产生原子光谱的精细结构。更为深刻的是，狄拉克方程无需任何额外假设，便自然导出了电子的自旋量子数 $s = 1/2$ 以及朗德因子 $g_s = 2$ 。自此，电子自旋从一个唯象假设上升为相对论量子力学的严格推论。

5.5 朗德 g 因子与反常磁矩

5.5.1 朗德因子的定义与一般形式

在原子物理中，磁矩与角动量的比值用一个无量纲因子——朗德 g 因子来表征。一般地，对于角动量量子数为 j 的态，磁矩算符可写为

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\mathbf{J}},$$

其中 $\hat{\mathbf{J}}$ 是总角动量算符。 g 因子的大小取决于角动量的组成：

- 纯轨道角动量 ($j = l$): $g_l = 1$ 。
- 纯自旋角动量 ($j = s = 1/2$): $g_s = 2$ 。

对于单电子原子，总角动量 $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ，其朗德 g_j 因子可由朗德公式计算：

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}.$$

这一公式在 LS 耦合情形下成立，适用于弱外磁场情形。

5.5.2 电子的反常磁矩与量子电动力学

1947 年，库什 (P. Kusch) 和弗利 (H. M. Foley) 利用微波技术对电子的 g_s 因子进行了高精度测量，发现其值并非严格的 2，而是存在一个微小的偏离。定义电子的反常磁矩为

$$a_e \equiv \frac{g_s - 2}{2} \approx 0.001\,159\,652.$$

这一偏差被称为电子的**反常磁矩**。很快，施温格 (J. Schwinger) 等人利用**量子电动力学 (QED)** 对此进行了解释：电子会与自身发出的虚光子相互作用（如顶点修正、真空极化等辐射修正过程），从而对其磁矩产生微小的修正。理论与实验的吻合达到了惊人的精度——例如 1987 年德莫尔特 (H. G. Dehmelt) 等人利用离子阱技术测得

$$a_e = 1\,159\,652\,188.4(43) \times 10^{-12}.$$

这一精度相当于测量地球到月球的距离误差不超过一根头发丝的直径。反常磁矩的精确测量与理论计算成为物理学史上理论与实验互相促进、共同精进的典范，也为粒子物理标准模型的建立奠定了坚实的实验基础。

5.6 自旋—轨道耦合

在原子内部，电子绕核运动产生的磁场 $\mathbf{B}_{\text{orb}}$ 会作用于电子的自旋磁矩 $\boldsymbol{\mu}_s$ ，导致一项附加的相互作用能：

$$\Delta E_{\text{SO}} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{orb}}.$$

通过适当的坐标变换和相对论修正，该项能量可表达为

$$\Delta E_{\text{SO}} = \xi(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S},$$

其中 $\xi(r) = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$ 。对于类氢原子， $V(r) \propto 1/r$ ，可得

$$\xi(r) = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3}.$$

$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ 项导致能级按总角动量量子数 j 发生分裂，这是产生**精细结构**的直接物理机制。精细结构常数 $\alpha \approx 1/137$ 表征了自旋—轨道耦合的相对强度，是原子物理和量子电动力学中一个核心常数。

5.7 本章小结

从玻尔模型无法解释的氢原子精细结构出发，本章系统介绍了电子轨道磁矩的量子化、施特恩—盖拉赫实验对空间量子化的判决性检验、以及电子自旋假设的提出与理论奠基。自旋的发现揭示了微观粒子具有全新的内禀自由度，它不是宏观旋转的简单类比，而是相对论量子力学的深刻结果。轨道磁矩与自旋磁矩的耦合构成了原子精细结构的物理根源，而对自旋 g 因子的精密测量则开启了量子电动力学的大门，成为现代物理学最重要的基石之一。

6 原子物理学期中模拟试题

一、基本物理常数

- 元电荷: $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
- 电子静质量: $m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} = 0.511 \text{ MeV}/c^2$
- 质子质量: $m_p = 1.673 \times 10^{-27} \text{ kg} \approx 1836 m_e$
- 普朗克常量: $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, $\hbar = h/2\pi = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
- 真空中光速: $c = 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$
- 玻尔半径: $a_1 = 0.0529 \text{ nm} = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$
- 里德伯常量 ($M \rightarrow \infty$): $R_\infty = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$
- 玻尔磁子: $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.274 \times 10^{-24} \text{ J/T} = 5.788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$
- 精细结构常数: $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137.036}$
- 玻耳兹曼常量: $k = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$

二、常用组合常数 (数值计算推荐使用)

- $hc = 1240 \text{ eV} \cdot \text{nm} = 1240 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$
- $\hbar c = 197 \text{ eV} \cdot \text{nm} = 197 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$
- $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.44 \text{ eV} \cdot \text{nm} = 1.44 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$
- 氢原子基态能量: $E_1 = -13.6 \text{ eV}$
- 电子康普顿波长: $\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 0.00243 \text{ nm}$

三、核心公式 (仅列出部分, 其余需自行掌握)

- 卢瑟福散射公式: $\sigma_c(\theta) = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$
- 玻尔能级: $E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} Z^2$ (类氢离子)
- 里德伯公式: $\frac{1}{\lambda} = RZ^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$
- 折合质量修正: $R_A = \frac{R_\infty}{1+m_e/m_A}$
- 德布罗意波长: $\lambda = \frac{h}{p}$, 非相对论电子 $\lambda = \frac{1.226}{\sqrt{E_k(\text{eV})}} \text{ nm}$
- 康普顿散射: $\Delta\lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta)$
- 不确定关系: $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$, $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$
- 一维无限深势阱能级: $E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$ ($n = 1, 2, \dots$)
- 朗德 g_J 因子: $g_J = 1 + \frac{J(J+1)-L(L+1)+S(S+1)}{2J(J+1)}$ (多电子)
- 单电子 g_j 因子: $g_j = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}$ (其中 $s = 1/2$)
- 塞曼能级移动: $\Delta E = m_J g_J \mu_B B$
- 自旋-轨道耦合分裂间距 (定性): $\Delta E_{ls} \propto \frac{Z_{\text{eff}}^4}{n^3 l(l+1)}$

第一题：原子的核式结构与玻尔模型（共 7 小问，34 分）

题干：1911 年，卢瑟福基于 α 粒子散射实验提出了原子的核式模型，彻底改变了人们对物质结构的认识。1913 年，玻尔创造性地将普朗克的量子概念引入该模型，成功解释了氢原子光谱的规律，标志着旧量子论的诞生。本题将围绕这两个里程碑式的工作展开。

- (1) (4 分) 在卢瑟福散射实验中，用能量为 5.0 MeV 的 α 粒子 ($Z_1 = 2$) 轰击金箔 ($Z_2 = 79$)。试求 α 粒子与金核对心碰撞 ($\theta = 180^\circ$) 时能到达的最小距离 r_m (以 fm 为单位)。这个距离的物理意义是什么？
- (2) (5 分) 卢瑟福散射公式 $\sigma_c(\theta) = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$ 的正确性通过四个实验关系得到了验证。请列出这四个关系，并简要说明每个关系对应的实验变量 (保持哪些量不变，改变哪些量)。
- (3) (6 分) 玻尔模型建立在三个基本假设之上。请完整写出这三个假设，并指出：若没有第三条假设 (角动量量子化)，玻尔模型能否得到分立的能级？为什么？
- (4) (5 分) 利用玻尔模型，推导氢原子基态 ($n = 1$) 的轨道半径 r_1 和能量 E_1 的表达式，并计算出具体数值 (r_1 以 nm 为单位， E_1 以 eV 为单位)。
- (5) (5 分) 氢原子光谱的巴耳末系对应于电子从 $n' \geq 3$ 的能级跃迁到 $n = 2$ 的能级。试计算巴耳末系中波长最长和最短的两条谱线的波长 (单位：nm)。(取 $R_H = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$)
- (6) (4 分) 弗兰克-赫兹实验是如何独立地验证玻尔的定态能级假设的？请简述实验装置的核心思想，并解释：为何选择电子作为轰击粒子，而不用质子或 α 粒子？
- (7) (5 分) 在玻尔理论中，为何需要对里德伯常量进行折合质量修正？已知氢原子 $R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$ ，氘原子 $R_D = 109707 \text{ cm}^{-1}$ ，试由此估算质子与电子的质量比 m_p/m_e 。(提示： $R_A = R_\infty/(1 + m_e/m_A)$ ，氘核质量为 $2m_p$)

第二题：量子力学基础（共 7 小问，33 分）

题干：玻尔模型虽然取得了巨大成功，但其逻辑上的不自洽和对复杂原子光谱的无能为力，催生了量子力学的建立。德布罗意的物质波假说、海森伯的不确定关系和薛定谔方程共同奠定了新量子论的理论基石。

- (1) (5 分) 康普顿散射实验中，用波长为 $\lambda_0 = 0.071 \text{ nm}$ 的 X 射线照射石墨，在散射角 $\theta = 90^\circ$ 处探测散射光子。试求散射后 X 射线的波长 λ ，以及反冲电子获得的动能 E_k （以 keV 为单位）。
- (2) (4 分) 一束电子经电势差 $U = 150 \text{ V}$ 加速后，垂直入射到镍单晶表面。已知镍的晶格常数 $a = 0.215 \text{ nm}$ ，在散射角 $\theta = 50^\circ$ 处探测到一级 ($n = 1$) 衍射极大。试通过定量计算验证该实验结果符合德布罗意关系式。（电子衍射公式： $n\lambda = a \sin \theta$ ）
- (3) (5 分) 简述海森伯不确定关系 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$ 的物理内涵。利用该关系，估算一维无限深势阱（宽度 $a = 0.1 \text{ nm}$ ）中电子的基态能量（数量级即可，以 eV 为单位），并说明为何宏观物体不表现量子效应。
- (4) (5 分) 一个电子被束缚在宽度为 $a = 0.2 \text{ nm}$ 的一维无限深势阱中。试写出该电子的定态薛定谔方程，并求出其基态 ($n = 1$) 和第一激发态 ($n = 2$) 的能量（以 eV 为单位）。若电子从 $n = 2$ 跃迁到 $n = 1$ ，辐射出的光子波长是多少？
- (5) (4 分) 扫描隧穿显微镜 (STM) 是利用什么量子力学效应工作的？简述其基本原理，并说明为何它能实现原子级的分辨率。
- (6) (5 分) 态叠加原理是量子力学的核心原理之一。试用该原理解释电子双缝干涉实验：为何当双缝齐开时，屏上的强度分布不是两单缝强度之和 $I_1 + I_2$ ，而是存在干涉条纹？当我们在其中一个狭缝旁放置探测器试图观察电子从哪个缝通过时，干涉条纹为何会消失？
- (7) (5 分) 求解氢原子的薛定谔方程可以得到三个量子数 n, l, m 。请写出这三个量子数的名称、取值范围，以及它们各自决定了电子的什么物理量。另外，若考虑电子自旋，还需要补充哪个量子数？

第三题：电子自旋与原子精细结构（共 7 小问，33 分）

题干：1925 年，乌伦贝克和古兹密特提出了电子自旋的大胆假设，一举解决了反常塞曼效应和碱金属双线等困扰物理学界多年的难题。电子自旋的引入，使人们对原子结构的认识从粗结构迈向了精细结构。

- (1) (5 分) 施特恩-格拉赫实验是证明空间量子化和电子自旋存在的重要实验。基态氢原子束通过极不均匀的磁场后，在探测屏上分裂成两条条纹。试解释为何分裂成两条，而不是三条或更多？若将氢原子换成基态氧原子 (3P_2)，理论上应分裂成几条？
- (2) (4 分) 写出电子自旋角动量 S 的大小和 z 分量 S_z 的表达式，以及自旋磁矩 μ_s 的 z 分量 $\mu_{s,z}$ 的表达式。为什么说电子的 g_s 因子为 2？（用公式说明）
- (3) (6 分) 钠原子的黄色 D 线是著名的双线，波长分别为 589.0 nm (D_2) 和 589.6 nm (D_1)。该双线来源于 $3P \rightarrow 3S$ 的跃迁。试分析：为何 3P 能级会发生分裂而 3S 能级不分裂？并定性解释产生这种分裂的物理根源（自旋-轨道耦合），以及分裂大小随主量子数 n 和角量子数 l 的变化趋势。
- (4) (5 分) 计算钠原子 $3^2P_{3/2}$ 和 $3^2P_{1/2}$ 态的朗德 g_j 因子。若将钠原子置于 $B = 1.0$ T 的弱磁场中，试求 $3^2S_{1/2}$ 能级的塞曼分裂大小（即相邻子能级间的能量差，以 eV 为单位）。
- (5) (5 分) 正常塞曼效应与反常塞曼效应的本质区别是什么？为什么镉 (Cd) 的 6438.47 Å 谱线 ($^1D_2 \rightarrow ^1P_1$) 表现出正常塞曼效应，而钠的 D 线表现出反常塞曼效应？请从上下能级的 g 因子角度进行解释。
- (6) (4 分) 在垂直于磁场方向观察反常塞曼效应时，对于钠的 D_1 线 ($3^2P_{1/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$)，理论上应观察到几条谱线？它们分别是何种线偏振 (π 或 σ)？若沿磁场方向观察，结果又有何不同？
- (7) (4 分) 兰姆-雷瑟福实验发现了什么现象？这一发现对量子电动力学 (QED) 的建立有何重要意义？

A 基本常数与单位换算

公式 1. 光速数值

$$c = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s}$$

- 用途：定义长度单位“米”，是狭义相对论的基础常数，用于任何涉及光速的计算。
- 符号： c ，真空中光速。
- 场景：相对论能量动量关系、自然单位制换算、电磁波传播。

公式 2. 普朗克常数

$$h = 6.62607015 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

- 用途：量子化能量的基本常数，用于光电效应、黑体辐射、康普顿散射等。
- 符号： h ，普朗克常数。
- 场景：所有量子现象中能量与频率的转换 $E = h\nu$ 。

公式 3. 约化普朗克常数

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054571817 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

- 用途：角动量量子化、不确定性原理、薛定谔方程中的标准形式。
- 符号： $\hbar$ ，读作“h-bar”。
- 场景：几乎所有量子力学公式中代替 h 出现。

公式 4. 基本电荷

$$e = 1.602176634 \times 10^{-19} \text{ C}$$

- 用途：电荷的最小单位，用于库仑定律、电磁相互作用。
- 符号： e ，元电荷。
- 场景：原子物理、粒子物理中所有带电粒子的电荷均以 e 的整数倍表示。

公式 5. 电子质量

$$m_e = 9.1093837015 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

- 用途：电子惯性质量，用于计算能级、轨道半径等。
- 符号： m_e 。
- 场景：原子结构、量子力学中电子运动。

公式 6. 质子质量

$$m_p = 1.67262192369 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

- 用途：原子核质量基准，用于约化质量修正。
- 符号： m_p 。
- 场景：核物理、氢原子能级修正。

公式 7. 玻尔半径

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5.29177210903 \times 10^{-11} \text{ m}$$

- 用途：氢原子基态电子轨道半径（量子力学中最概然半径）。
- 符号： a_0 。
- 场景：原子尺度标志，用于估算原子大小。

公式 8. 精细结构常数

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137.036}$$

- 用途：表征电磁相互作用强度，是量子电动力学的重要参数。
- 符号： α 。
- 场景：原子能级精细结构、光谱分裂、相对论修正。

公式 9. 里德伯常数（核质量无穷大）

$$R_\infty = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 c} = 1.0973731568160 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

- 用途：氢原子光谱波长计算的理论基准。
- 符号： R_∞ 。
- 场景：类氢离子光谱、能级公式。

公式 10. 自然单位制换算

$$1 \text{ s} = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m}, \quad 1 \text{ GeV}^{-1} \approx 6.58211968 \times 10^{-25} \text{ s}, \quad 1 \text{ eV} \approx 11604.518 \text{ K}$$

- 用途：在自然单位制（ $\hbar = c = k = 1$ ）与 SI 单位制之间转换。
- 符号：GeV（十亿电子伏特），K（开尔文）。
- 场景：高能物理、粒子物理计算。

B 原子的核式模型

公式 1. 阴极射线荷质比

$$\frac{e}{m} = \frac{E}{B^2 r}$$

- 用途：测量带电粒子的荷质比。
- 符号： e 电荷， m 质量， E 电场强度， B 磁感应强度， r 圆周运动半径。
- 场景：汤姆孙发现电子的实验。

公式 2. 库仑散射公式

$$b = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{m_\alpha v_0^2} \cot \frac{\theta}{2}$$

- 用途：给出 α 粒子散射角 θ 与瞄准距离 b 的关系。
- 符号： b 瞄准距离， Z 原子序数， e 元电荷， m_α α 粒子质量， v_0 初速度， θ 散射角。
- 场景：卢瑟福散射理论的基础，用于解释大角散射。

公式 3. 卢瑟福散射公式（微分散射截面）

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{Ze^2}{16\pi\epsilon_0 E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$$

- 用途：计算每个原子将 α 粒子散射到单位立体角内的有效面积。
- 符号： $\sigma(\theta)$ 微分散射截面， $E = \frac{1}{2}m_\alpha v_0^2$ α 粒子动能。
- 场景：与实验比较，验证核式模型，测定原子序数 Z 。

公式 4. 实验可观测的散射粒子数

$$dN = N_0 n t \sigma(\theta) d\Omega$$

- 用途：计算探测器接收到的散射粒子数。
- 符号： N_0 入射粒子总数， n 靶单位体积原子数， t 靶厚， $d\Omega$ 探测器立体角。
- 场景：实验数据处理。

公式 5. 原子核半径上限（对心碰撞）

$$r_m = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{E}$$

- 用途：由 α 粒子动能估算原子核半径上限。
- 符号： r_m 最小距离（核半径）， E α 粒子动能。
- 场景：卢瑟福实验估计核大小。

C 玻尔氢原子理论

公式 1. 黑体辐射普朗克公式

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

- 用途：描述黑体辐射能量密度随频率的分布。
- 符号： $\rho(\nu, T)$ 能量密度， ν 频率， T 温度， k 玻尔兹曼常数。
- 场景：量子论起源，用于计算高温物体辐射。

公式 2. 光电效应方程

$$h\nu = W + \frac{1}{2}mv_{\max}^2$$

- 用途：解释光电效应中光电子最大动能与频率的关系。

- 符号: W 逸出功 (金属表面电子束缚能), $v_{\max}$ 光电子最大速度。
- 场景: 测定普朗克常数 h , 验证光量子假说。

公式 3. 氢原子光谱里德伯公式

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad n_i > n_f$$

- 用途: 归纳氢原子所有谱线波长。
- 符号: λ 波长, R_H 氢的里德伯常数, n_f, n_i 初末态主量子数。
- 场景: 光谱分析, 验证能级跃迁。

公式 4. 玻尔角动量量子化

$$m_e v r = n \hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- 用途: 确定允许的电子轨道。
- 符号: m_e 电子质量, v 速度, r 轨道半径, n 主量子数。
- 场景: 玻尔模型的基本假设。

公式 5. 玻尔轨道半径

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} n^2 = a_0 n^2$$

- 用途: 计算氢原子中电子在第 n 轨道的半径。
- 符号: r_n 轨道半径, a_0 玻尔半径。
- 场景: 原子尺度估算。

公式 6. 玻尔能级公式

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

- 用途: 氢原子能量量子化公式。
- 符号: E_n 第 n 能级能量, n 主量子数。
- 场景: 计算电离能、跃迁能量。

公式 7. 约化质量修正

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}, \quad R_H = R_\infty \frac{\mu}{m_e} = R_\infty \frac{1}{1 + m_e/M}$$

- 用途: 考虑核运动后氢原子能级的精确修正。
- 符号: μ 约化质量, M 核质量。
- 场景: 解释氢与氘光谱微小差异, 发现同位素。

公式 8. 类氢离子能级

$$E_n = -Z^2 \frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

- 用途: 计算核电荷数 $Z > 1$ 的单电子离子 (如 He^+) 的能级。
- 符号: Z 原子序数。
- 场景: X 射线标识谱、天体物理。

D 第三章量子力学导论——重要公式 (详细版)

D.1 一、波粒二象性与物质波

1. 光子能量与动量

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

- 符号含义与单位: E : 光子能量 (J 或 eV); ν : 频率 (Hz); λ : 波长 (m); p : 光子动量 ($\text{kg} \cdot \text{m/s}$); h : 普朗克常量; c : 光速。常用组合常数 $hc \approx 1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}$ 。
- 适用范围: 所有光子, 体现光的粒子性。
- 典型用法 (应试):
 - 已知频率或波长, 求光子能量或动量。
 - 在光电效应、康普顿散射等问题中用于建立光子的粒子模型。

2. 德布罗意波长 (非相对论形式)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_k}}$$

- 符号含义与单位: λ : 实物粒子的德布罗意波长 (m); m_0 : 粒子静质量 (kg); E_k : 粒子动能 (J 或 eV); p : 粒子动量。
- 适用范围: 低速 ($v \ll c$) 的实物粒子 (电子、质子、中子、原子等)。
- 典型用法 (应试):
 - 已知粒子动能, 求其德布罗意波长, 进而判断波动性是否显著。
 - 用于戴维孙-革末实验: 将电子波长代入布拉格公式 $n\lambda = d \sin \theta$, 求解衍射条件。

3. 电子的德布罗意波长实用公式 (非相对论)

$$\lambda = \frac{1.226}{\sqrt{E_k(\text{eV})}} \text{ nm}$$

- 符号含义与单位: $E_k(\text{eV})$ 为以电子伏特为单位的电子动能。
- 适用范围: 仅适用于电子, 且动能 $E_k \ll 0.511 \text{ MeV}$ (非相对论近似)。
- 典型用法 (应试): 快速计算电子波长。注意: 当动能接近或超过 0.5 MeV 时需用相对论修正。

4. 布拉格衍射公式 (应用于物质波)

$$n\lambda = d \sin \theta \quad \text{或} \quad 2d \sin \theta = n\lambda$$

- 符号含义与单位: d : 晶面间距 (m); θ : 掠射角或散射角 (取决于几何定义); $n = 1, 2, \dots$: 衍射级次。
- 适用范围: X 射线或电子束在晶体上的衍射。
- 典型用法 (应试):
 - 已知晶格常数 d 和衍射角 θ , 求粒子波长 λ 。
 - 结合德布罗意公式, 可求粒子动能或加速电压。
 - 用于分析戴维孙-革末实验数据。

D.2 二、不确定关系及其应用

1. 位置-动量不确定关系 (严格形式)

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

- 符号含义与单位: Δx : x 坐标的不确定度 (标准差); Δp_x : x 方向动量的不确定度; $\hbar = h/2\pi$ 。
- 适用范围: 微观粒子波粒二象性的必然结果, 量子力学基本原理。
- 典型用法 (应试):
 - 理论判断: 说明坐标和动量不能同时具有确定值。
 - 数量级估算: 考试中常用 $\Delta x \cdot \Delta p_x \sim \hbar$ 或 h 进行估算。
 - 例如: 由粒子的空间约束范围 Δx , 求其最小动量或动能。

2. 能量-时间不确定关系

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

- 符号含义与单位: ΔE : 能级宽度的不确定度 (J 或 eV); Δt : 粒子处于该能态的平均寿命 (s)。
- 适用范围: 不稳定量子态 (激发态、共振态)。
- 典型用法 (应试):
 - 已知激发态平均寿命 Δt , 计算该能级的自然宽度 ΔE , 进而解释光谱线的自然展宽。
 - 反之, 已知谱线宽度, 求激发态寿命。

3. 束缚粒子最小动能估算 (不确定关系的直接推论)

$$E_{k,\min} \sim \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}$$

- 符号含义与单位: Δx 为粒子被束缚的空间尺度 (位置不确定度)。
- 适用范围: 任何被限制在有限空间内的微观粒子。
- 典型用法 (应试):
 - 估算一维无限深势阱或谐振子的基态能量 (零点能)。
 - 解释电子不能落入原子核: 若 $\Delta x \sim 10^{-15} \text{ m}$, 则动能极大, 无法被束缚。

D.3 三、波函数与统计解释

1. 概率密度 (玻恩统计解释)

$$P(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \Psi^* \Psi$$

- 符号含义与单位: $P(\mathbf{r}, t)$: t 时刻在 $\mathbf{r}$ 处单位体积内发现粒子的概率 (概率密度); Ψ 为波函数 (复数), 其量纲与具体维度有关。
- 适用范围: 一切由波函数描述的微观粒子。
- 典型用法 (应试):
 - 已知波函数 $\Psi(x)$, 求粒子在某位置的概率密度分布。
 - 计算在某区间 $[a, b]$ 内找到粒子的概率: $\int_a^b |\Psi|^2 dx$ 。

2. 归一化条件

$$\int_{\text{全空间}} |\Psi|^2 d\tau = 1$$

- 符号含义与单位: $d\tau$ 为空间体积元。
- 适用范围: 任何物理上允许的波函数必须满足归一化条件 (束缚态)。
- 典型用法 (应试):
 - 已知未归一化的波函数 $\psi(x)$, 求归一化常数 N , 使得 $\int |N\psi|^2 dx = 1$ 。
 - 验证一个波函数是否合法。

3. 态叠加原理 (概率幅叠加)

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$$

- 符号含义与单位: c_1, c_2 为复数叠加系数。
- 适用范围: 量子力学的基本原理, 描述量子态的相干叠加。
- 典型用法 (应试):
 - 解释双缝干涉现象: 总概率分布 $|\Psi|^2 = |c_1 \Psi_1|^2 + |c_2 \Psi_2|^2 + 2\text{Re}(c_1^* c_2 \Psi_1^* \Psi_2)$, 包含干涉项。
 - 说明为什么对体系进行“观测” (区分路径) 会导致干涉消失。

4. 自由粒子平面波波函数

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

- 符号含义与单位： A 为归一化常数； $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ 为波矢 (rad/m)； $\omega = E/\hbar$ 为角频率 (rad/s)。
- 适用范围： 不受外力作用的自由粒子。
- 典型用法 (应试)：
 - 描述自由粒子状态，是建立薛定谔方程的出发点。
 - 计算自由粒子的概率密度： $|\Psi|^2 = |A|^2$ ，为常数，反映位置完全不确定。

D.4 四、薛定谔方程及其简单应用

1. 含时薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

- 符号含义： $\hat{H}$ 为哈密顿算符 (能量算符)， i 为虚数单位。
- 适用范围： 非相对论量子力学的基本动力学方程。
- 典型用法 (应试)： 通常不要求求解，只需知道它是量子力学的基本假设，描述波函数随时间的演化。

2. 定态薛定谔方程

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \text{其中 } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

- 符号含义： $\psi(\mathbf{r})$ 为定态波函数 (与时间无关)； E 为定态能量本征值； ∇^2 为拉普拉斯算符； $V(\mathbf{r})$ 为势能函数。
- 适用范围： 势场 V 不显含时间，求解粒子的稳定状态 (能级与波函数)。
- 典型用法 (应试)：
 - 写出具体体系 (如一维势阱、谐振子、氢原子) 的定态薛定谔方程。
 - 结合波函数标准条件 (单值、有限、连续) 求解能量 E 和波函数 ψ 。

3. 一维无限深势阱能级

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- 符号含义： a 为势阱宽度 (m)； m 为粒子质量 (kg)； n 为主量子数。
- 适用范围： 粒子被束缚在宽度为 a 的一维刚性盒子内，势阱外 $V = \infty$ 。
- 典型用法 (应试)：
 - 已知阱宽 a 和粒子质量，求能级、基态能、激发能、跃迁发射光子能量。
 - 理解能量量子化与零点能： $E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} \neq 0$ 。

4. 一维无限深势阱波函数 (归一化后)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad 0 < x < a$$

- 符号含义： x 为阱内坐标，阱外波函数为 0。
- 适用范围： 同上。
- 典型用法 (应试)：
 - 计算粒子在阱内某区间 $[x_1, x_2]$ 出现的概率： $P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx$ 。
 - 利用波函数的对称性解释概率分布。

5. 一维线性谐振子能级

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

- 符号含义: $\omega = \sqrt{k/m}$ 为经典谐振子角频率 (rad/s)。
- 适用范围: 微观粒子在抛物线势阱 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 中运动。
- 典型用法 (应试):
 - 已知弹性系数 k 或频率 ω , 求谐振子能级。
 - 计算零点能: $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ 。
 - 能级等间距特点: 跃迁只能吸收或发射能量 $\hbar\omega$ 的光子。

6. 隧道效应透射系数 (方势垒)

$$T \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\cdot a}$$

- 符号含义: T 为透射概率 (无量纲); V_0 为势垒高度 (J 或 eV); E 为粒子能量 ($E < V_0$); a 为势垒宽度 (m); m 为粒子质量。
- 适用范围: 一维方形势垒, 且 $(V_0 - E)$ 不是特别小 ($T \ll 1$)。
- 典型用法 (应试):
 - 定性或半定量判断穿透概率: 粒子质量 m 越大、势垒越宽 a 、能差 $(V_0 - E)$ 越大, T 越小。
 - 解释 α 衰变、场致发射、扫描隧穿显微镜 (STM) 的工作原理。

D.5 五、力学量与算符

1. 动量算符 (坐标表象)

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

- 符号含义: 算符作用于波函数, 求动量在 x 方向的分量。
- 适用范围: 在坐标表象下计算动量相关物理量。
- 典型用法 (应试):
 - 已知波函数 $\psi(x)$, 计算动量平均值: $\langle p_x \rangle = \int \psi^* \hat{p}_x \psi dx$ 。
 - 判断动量是否具有确定值: 若 ψ 是 $\hat{p}_x$ 的本征函数, 则动量确定。

2. 动能算符

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

- 符号含义: ∇^2 为拉普拉斯算符。
- 适用范围: 非相对论粒子的动能算符。
- 典型用法 (应试):
 - 写出体系的哈密顿算符 $\hat{H} = \hat{T} + V(\mathbf{r})$ 。
 - 计算粒子在某状态下的平均动能。

3. 角动量算符 (直角坐标系)

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

($\hat{L}_x, \hat{L}_y$ 形式类似, 由轮换对称给出)

- 符号含义: 轨道角动量在 z 方向的分量算符。
- 适用范围: 三维空间中的角动量问题。
- 典型用法 (应试):
 - 写出角动量分量算符, 计算角动量平均值。
 - 判断波函数是否为 $\hat{L}_z$ 的本征函数。

4. 角动量平方算符 (球坐标系)

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]$$

- 符号含义: θ, ϕ 为球坐标系下的极角和方位角。
- 适用范围: 中心力场问题 (如氢原子) 的角向分离变量。
- 典型用法 (应试):
 - 用于求解氢原子角向方程, 得到球谐函数 $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ 。
 - 其本征值为 $l(l+1)\hbar^2$ 。

5. 力学量平均值公式

$$\langle A \rangle = \int_{\text{全空间}} \psi^*(\mathbf{r}) \hat{A} \psi(\mathbf{r}) d\tau$$

- 符号含义: $\hat{A}$ 为力学量 A 对应的算符; ψ 为归一化的定态波函数。
- 适用范围: 一切可以用算符表示的力学量。
- 典型用法 (应试):
 - 已知波函数和算符, 求力学量的期望值 (如位置平均值 $\langle x \rangle$ 、动量平均值 $\langle p \rangle$ 、势能平均值 $\langle V \rangle$ 等)。

6. 基本对易关系

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar$$

- 符号含义: $[\hat{A}, \hat{B}]$ 表示算符 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的对易子。
- 适用范围: 量子力学算符代数。
- 典型用法 (应试):
 - 判断两个力学量是否可同时具有确定值: 若 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, 则可同时确定; 若不对易, 则满足不确定关系。
 - 由此导出不确定关系 $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ 。

7. 角动量对易关系

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0 \quad (i = x, y, z)$$

- 符号含义: 各分量之间不对易, 但 $\hat{L}^2$ 与任意分量对易。
- 适用范围: 轨道角动量。
- 典型用法 (应试):
 - 说明角动量的三个分量不能同时有确定值, 但 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 可同时确定。
 - 这是氢原子量子数 l 和 m 同时存在的基础。

D.6 六、氢原子的量子力学解

1. 氢原子能级 (非相对论)

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2} = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- 符号含义与单位: $\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$ 为电子与原子核的折合质量; Z 为核电荷数 (类氢离子); n 为主量子数。
- 适用范围: 氢原子及类氢离子 (如 He^+ , Li^{2+}), 非相对论近似。
- 典型用法 (应试):
 - 计算基态能量 ($n=1, Z=1$ 时 $E_1 = -13.6 \text{ eV}$)、激发态能量、电离能。
 - 结合频率条件 $\Delta E = h\nu$, 计算光谱线波数或波长。

2. 轨道角动量大小

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

- 符号含义： l 为角量子数（副量子数）。
- 适用范围：中心力场中的单电子原子。
- 典型用法（应试）：
 - 已知角量子数 l ，求电子轨道角动量的大小。
 - 与玻尔理论的 $L = n\hbar$ 对比：玻尔理论只是近似，当 l 很大时两者趋于一致。

3. 轨道角动量 z 分量（空间量子化）

$$L_z = m_l \hbar, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

- 符号含义： m_l 为磁量子数，决定角动量在空间特定方向（通常为外磁场方向）的投影。
- 适用范围：存在外场或选择特定参考轴时。
- 典型用法（应试）：
 - 已知 l ，列出所有可能的 m_l 值及对应的 L_z 。
 - 解释塞曼效应、施特恩-格拉赫实验中的空间量子化现象。

4. 径向概率密度分布

$$P(r)dr = r^2 |R_{n,l}(r)|^2 dr$$

- 符号含义： $P(r)dr$ 表示在距离核 r 到 $r + dr$ 的球壳内找到电子的概率； $R_{n,l}(r)$ 为径向波函数。
- 适用范围：计算电子在径向的分布。
- 典型用法（应试）：
 - 结合具体径向波函数，求电子出现概率最大的半径（如基态最概然半径即为玻尔半径 a_1 ）。

5. 电子离核平均距离（期望值）

$$\langle r \rangle = \frac{a_1}{2Z} [3n^2 - l(l+1)], \quad a_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$

- 符号含义： $\langle r \rangle$ 为径向坐标的量子力学平均值； a_1 为第一玻尔半径（ $\approx 0.053 \text{ nm}$ ）。
- 适用范围：类氢离子。
- 典型用法（应试）：
 - 说明相同 n 下， l 越小， $\langle r \rangle$ 越大（轨道越扁长，贯穿效应越强），导致碱金属能级分裂。

6. 常用径向期望值（ $1/r^k$ 类）

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a_1 n^2}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_1^2 n^3 (l+1/2)}, \quad \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_1^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)}$$

- 符号含义：径向坐标负幂次的量子力学平均值。
- 适用范围：类氢离子。
- 典型用法（应试）：
 - 计算自旋-轨道耦合能量修正（精细结构）时，会用到 $\langle 1/r^3 \rangle$ 。
 - 计算相对论修正、兰姆移位等高阶效应时作为基础积分。

D.7 附：常用组合常数（数值计算必备）

$$1. \hbar c = 197 \text{ fm} \cdot \text{MeV} = 197 \text{ nm} \cdot \text{eV}$$

2. $hc = 1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}$
3. $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.44 \text{ fm} \cdot \text{MeV} = 1.44 \text{ nm} \cdot \text{eV}$
4. 电子静能 $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$

第四章原子的精细结构：电子的自旋

一、重要实验

1. 实验名称：施特恩-格拉赫实验 (Stern-Gerlach Experiment)

1. 物理背景：为验证原子角动量和磁矩在空间取向的量子化。在此之前，玻尔理论仅预言轨道角动量是量子化的，但其空间取向是否量子化尚未得到直接实验验证。
2. 关键装置/方法：
 - 将银（或氢、碱金属）原子在高温炉中加热，形成原子束。
 - 原子束通过狭缝准直后，进入一个极不均匀的横向磁场区域。
 - 原子束在磁场中受力偏转，最后沉积在探测器（如照相底片）上，形成可见的条纹。
3. 主要发现：
 - 原子束在非均匀磁场中分裂成几条分立的条纹，表明原子的磁矩在空间取向上是量子化的。
 - 对于氢原子和银原子等基态原子，实验观察到的是**两条**分立的条纹（偶数分裂）。
4. 结论与意义：
 - 直接证明了**空间量子化**的存在。
 - 偶数分裂（2 条）的结果无法仅用轨道角动量理论解释（轨道角动量量子数 l 为整数时，分裂数 $2l + 1$ 必为奇数）。这为**电子自旋假说**的提出提供了关键实验依据。
 - 该实验还开辟了原子束和分子束实验研究的新领域。

2. 实验名称：碱金属双线（精细结构实验）

1. 物理背景：用高分辨率光谱仪观测碱金属（如钠）的光谱时，发现原来认为的单条谱线实际上由两条或多条靠得很近的谱线组成。这暗示着原子能级存在比粗结构更精细的分裂，而当时的理论无法解释。
2. 关键装置/方法：使用高分辨率光栅光谱仪或干涉仪，观测钠（Na）等碱金属原子在无外磁场条件下的发射光谱。
3. 主要发现：
 - 钠的著名黄色 D 线实际上是双线，波长分别为 589.0nm (D_2) 和 589.6nm (D_1)。
 - 主线系和漫线系是双线的，锐线系和基线系是三线的。
 - 分析表明，能级分裂发生在 $l = 1$ 的 P 能级上，而 S 能级不分裂。
4. 结论与意义：
 - 谱线的精细结构表明，仅考虑电子与核的静电相互作用是不够的，必须考虑其他相互作用。
 - 该实验为乌伦贝克和古兹密特提出**电子自旋假说**提供了直接的光谱学证据。自旋-轨道耦合能很好地解释这种分裂。

3. 实验名称：塞曼效应 (Zeeman Effect)

1. 物理背景：1896 年塞曼发现，将光源置于强磁场中时，其发出的光谱线会分裂成多条。这为研究原子中磁矩与外场的相互作用提供了直接途径。

2. 关键装置/方法:

- 将光源（如镉灯、钠灯）置于强电磁铁产生的均匀磁场中。
- 用高分辨率光谱仪分别在垂直于磁场和平行于磁场的方向上观察谱线的分裂情况和偏振状态。

3. 主要发现:

- **正常塞曼效应**: 某些谱线（如镉的 $6438.47\text{\AA}$ 谱线）在磁场中分裂为等间距的三条，且具有特定的偏振特性（中间为 π 线，两边为 σ 线）。
- **反常塞曼效应**: 大多数谱线（如钠的 D 线）在磁场中分裂的数目不是三条，且间距不相等。这种现象在电子自旋概念提出之前长期无法解释。

4. 结论与意义:

- 正常塞曼效应可由经典电磁理论（洛伦兹）解释，对应于总自旋为零的原子态（单态）间的跃迁。
- 反常塞曼效应的解释必须引入**电子自旋**和与之相关的**朗德 g 因子**。因此，塞曼效应（特别是反常塞曼效应）是证实电子自旋存在的又一重要实验。
- 从塞曼效应的谱线分裂间隔可以精确测定电子的**比荷 e/m_e** 。

4. 实验名称: 兰姆-雷瑟福实验（兰姆移位）

1. **物理背景**: 狄拉克的相对论量子力学理论预言，氢原子的 $2^2S_{1/2}$ 和 $2^2P_{1/2}$ 能级应该严格简并（能量相同）。但精密实验发现二者之间存在微小能量差。

2. 关键装置/方法:

- 用电子束轰击氢原子，使其激发到 $n=2$ 的能态（2S 和 2P）。
- 2P 态寿命很短，迅速通过自发辐射衰变到基态。而 2S 态是亚稳态，寿命较长，可到达探测器。
- 在原子束路径上施加射频（RF）电磁场。当射频能量恰好等于 $2^2S_{1/2}$ 与 $2^2P_{3/2}$ 或 $2^2P_{1/2}$ 的能量差时，会发生共振跃迁，导致 2S 态原子数减少，探测器电流下降。

3. 主要发现:

- 实验发现 $2^2S_{1/2}$ 能级比 $2^2P_{1/2}$ 能级高出约 1058MHz （或 $4.37\mu\text{eV}$, 0.035cm^{-1} ）。
- 这个微小能级差被称为**兰姆移位**。

4. 结论与意义:

- 兰姆移位的发现，暴露了狄拉克相对论量子力学在处理电子与自身辐射场（真空涨落）相互作用方面的不足。
- 这一发现与电子反常磁矩的发现一起，直接催生了**量子电动力学**的建立和发展。

二、重要公式

(一) 原子的磁矩与空间量子化

1. 轨道磁矩与轨道角动量的关系

$$\mu_l = -\frac{e}{2m_e}L$$

- **符号含义与单位**: μ_l 为电子轨道磁矩 (J/T 或 $\text{A}\cdot\text{m}^2$)， L 为轨道角动量 ($\text{J}\cdot\text{s}$)， e 为元电荷 (C)， m_e 为电子质量 (kg)。负号表示由于电子带负电，其磁矩方向与角动量方向相反。
- **适用范围**: 经典的轨道运动图像，以及作为量子力学中轨道磁矩算符的对应经典量。
- **典型用法（应试）**:
— 定性判断电子轨道磁矩与角动量的方向关系。

- 作为引入旋磁比 $\gamma_l = \frac{e}{2m_e}$ 和玻尔磁子的基础。

2. 轨道磁矩的大小与 z 分量 (量子力学)

$$\mu_l = -\sqrt{l(l+1)}\mu_B, \quad \mu_{l,z} = -m_l\mu_B$$

- 符号含义与单位: μ_l 为轨道磁矩大小, $\mu_{l,z}$ 为其在 z 轴投影。 l 为角量子数, $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ 为磁量子数 (无量纲)。 $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 5.788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$ 为玻尔磁子, 是轨道磁矩的最小单元。
- 适用范围: 单电子原子 (或类氢离子) 的轨道磁矩。适用于描述在没有自旋或自旋可忽略时的磁相互作用。
- 典型用法 (应试):
 - 已知量子数 l 和 m_l , 计算轨道磁矩的大小和在外磁场方向的投影值。
 - 判断轨道磁矩的空间取向个数: 共 $2l+1$ 个。
 - 估算原子磁矩与外磁场相互作用的能量量级: $\Delta E = \mu_B B$ 。

3. 旋磁比 (轨道)

$$\gamma_l = \frac{\mu_l}{L} = \frac{e}{2m_e}$$

- 符号含义与单位: γ_l 为轨道运动的旋磁比 (C/kg 或 Hz/T)。它是磁矩与角动量之比。
- 适用范围: 电子的轨道运动。
- 典型用法 (应试): 用于比较不同运动形式 (轨道、自旋) 的磁效应强弱。

(二) 电子自旋假设

4. 电子自旋角动量

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \quad s = \frac{1}{2}$$

$$S_z = m_s\hbar, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

- 符号含义与单位: S 为自旋角动量大小, S_z 为其 z 分量。 s 为自旋量子数 (对于电子恒为 $1/2$), m_s 为自旋磁量子数 (只能取 $\pm 1/2$)。
- 适用范围: 所有电子。这是电子的内禀属性, 与其运动状态无关。
- 典型用法 (应试):
 - 说明施特恩-格拉赫实验中基态银原子或氢原子为何分裂成两束: 因为 $s = 1/2$, m_s 有两个取值, 对应自旋磁矩有两个空间取向。
 - 任何单电子体系的自旋角动量取值都是固定的。

5. 电子自旋磁矩与自旋角动量的关系

$$\mu_s = -\frac{e}{m_e}S, \quad \mu_{s,z} = \pm\mu_B$$

- 符号含义与单位: μ_s 为自旋磁矩大小, $\mu_{s,z}$ 为其在 z 轴的投影。与轨道运动相比, 自旋磁矩与角动量的比值是轨道运动的两倍, 此即 $g_s = 2$ 的来源。
- 适用范围: 所有电子。
- 典型用法 (应试):
 - 计算自旋磁矩的大小和投影值。特别注意: 虽然 $S_z = \pm \frac{1}{2}\hbar$, 但其对应的磁矩投影却是 $\mp\mu_B$ (即一个玻尔磁子), 这是乌伦贝克-古兹密特假设的核心内容之一。
 - 解释电子自旋磁矩在磁场中的附加能量: $\Delta E = \pm\mu_B B$ 。

6. 朗德 g 因子 (定义与一般表达式)

$$\mu = -g \frac{e}{2m_e} J = -g \frac{\mu_B}{\hbar} J$$

$$\mu_z = -gm_j \mu_B$$

- **符号含义与单位:** g 为朗德因子 (无量纲)。 J 为总角动量 (轨道 + 自旋)。 m_j 为总角动量的磁量子数。
- **适用范围:** 任何角动量 (轨道、自旋或耦合后的总角动量) 与其对应磁矩的关系。
- **典型用法 (应试):**
 - 作为统一公式, 用于计算原子态的 g 因子。
 - 已知 g 因子和 m_j , 计算磁矩在外场方向的投影, 进而计算塞曼分裂能级。
 - 对于纯轨道角动量, $g_l = 1$; 对于纯自旋角动量, $g_s = 2$ 。

7. 单电子 (L-S 耦合) 总角动量的朗德 g_j 因子公式

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{s(s+1) - l(l+1)}{j(j+1)} \right)$$

- **符号含义与单位:** g_j 为单电子总角动量的朗德因子 (无量纲)。 j, l, s 分别为总角动量、轨道和自旋量子数 ($s = 1/2$)。
- **适用范围:** 适用于 L-S 耦合下的单电子原子 (如碱金属原子、氢原子)。仅当外磁场较弱, 不足以破坏 L-S 耦合时成立。
- **典型用法 (应试):**
 - 已知原子态 (如 $^2P_{3/2}$), 计算该能级的 g_j 因子。
 - 例如, 计算 $^2S_{1/2}$ 态: $l = 0, s = 1/2, j = 1/2 \Rightarrow g_j = 2$ 。
 - 计算 $^2P_{1/2}$ 态: $l = 1, s = 1/2, j = 1/2 \Rightarrow g_j = 2/3$ 。
 - 该公式是定量解释反常塞曼效应和施特恩-格拉赫实验分裂间距的基础。

(三) 精细结构: 自旋-轨道相互作用

8. 自旋-轨道相互作用引起的附加能量 (单电子)

$$U = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{m_e^2 c^2 r^3} (S \cdot L)$$

- **符号含义与单位:** U 为自旋-轨道耦合势能 (J 或 eV)。 S 和 L 为自旋和轨道角动量算符。 r 为电子到核的距离。系数中的 $1/2$ 是托马斯进动修正因子 (相对论运动学效应)。
- **适用范围:** 单电子原子 (类氢离子、碱金属原子) 中, 电子自旋磁矩与轨道运动产生的内部磁场相互作用。用于计算精细结构能级分裂。
- **典型用法 (应试):**
 - 定性理解精细结构的来源: 是磁相互作用。
 - 说明能级分裂大小与 Z 、 n 、 l 的关系: 与 Z^4 成正比, 随 n 增大而减小, 随 l 增大而减小。

9. 自旋-轨道相互作用的能量修正 (单电子, 量子力学平均值)

$$\Delta E_{ls} = \frac{(\alpha Z)^4 m_e c^2}{4n^3} \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{l(l+1/2)(l+1)} \quad (l \neq 0)$$

- **符号含义与单位:** ΔE_{ls} 为能级移动 (eV)。 $\alpha \approx 1/137$ 为精细结构常数。其他符号意义同上。

- 适用范围：类氢离子的精细结构计算。 $l \neq 0$ (S 态自旋-轨道耦合为零)。
- 典型用法 (应试):
 - 计算 $l \neq 0$ 能级因自旋-轨道耦合引起的分裂间距。
 - 对于给定的 n 和 l , 代入 $j = l + 1/2$ 和 $j = l - 1/2$, 求二者能量差 $\Delta E = E_{j=l+1/2} - E_{j=l-1/2}$ 。
 - 解释碱金属双线: 如钠的 3P 能级分裂为 $3^2P_{3/2}$ 和 $3^2P_{1/2}$, 导致 D 双线的产生。

10. 双线分裂间距 (波数差)

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{\Delta E_{ls}}{hc} \propto \frac{Z^4}{n^3 l(l+1)}$$

- 符号含义与单位: $\Delta\tilde{\nu}$ 为波数差 (m^{-1} 或 cm^{-1})。 Z 为有效核电荷数 (对于碱金属, 需用 Z_{eff} 替代)。
- 适用范围: 类氢离子及碱金属原子的精细结构分裂。
- 典型用法 (应试):
 - 定性比较不同原子或不同能级的精细结构分裂大小。例如, 比较氢和钠的 3P 分裂: 钠的有效电荷 Z_{eff} 较大, 分裂远大于氢。
 - 解释为何主线系的双线间距随波数增加而减小 (n 增大)。

(四) 塞曼效应

11. 原子在外磁场中的附加能量 (塞曼效应)

$$\Delta E = m_j g_j \mu_B B$$

- 符号含义与单位: ΔE 为能级在外磁场 B 中的移动量 (eV)。 m_j 为总角动量的磁量子数 ($m_j = J, J-1, \dots, -J$)。 g_j 为朗德因子。 μ_B 为玻尔磁子。 B 为磁感应强度 (T)。
- 适用范围: 弱外磁场下的 L - S 耦合原子 (反常塞曼效应)。 强磁场下则需用帕邢-巴克效应公式。
- 典型用法 (应试):
 - 计算塞曼分裂能级: 已知原子态、磁场 B , 求各 m_j 子能级的能量。
 - 计算谱线分裂: 考虑上下能级的跃迁选择定则 ($\Delta m_j = 0, \pm 1$), 计算相邻谱线的频率差或波数差。
 - 解释正常塞曼效应 ($g_1 = g_2 = 1$) 时, 谱线为何等间距三分裂。
 - 解释反常塞曼效应中谱线分裂的复杂图案。

12. 塞曼谱线的偏振特性与选择定则

- 选择定则: $\Delta m_j = 0$ (产生 π 线), $\Delta m_j = \pm 1$ (产生 $\sigma^\pm$ 线)。
- 典型用法 (应试):
 - 判断谱线的偏振状态:
 - * 垂直于磁场方向观察: $\Delta m_j = 0$ 的 π 线为线偏振 (平行于磁场), $\Delta m_j = \pm 1$ 的 σ 线为线偏振 (垂直于磁场)。
 - * 平行于磁场方向观察: 只能观察到 $\Delta m_j = \pm 1$ 的 $\sigma^\pm$ 线, 且为圆偏振 (σ^+ 为左旋, σ^- 为右旋)。
 - 解释为何沿磁场方向只能看到两条谱线。

13. 洛伦兹单位（正常塞曼分裂间隔）

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{eB}{4\pi m_e c} = \frac{\mu_B B}{hc}$$

- 符号含义与单位： $\Delta\tilde{\nu}$ 为波数差 (m^{-1})。该值即为一个洛伦兹单位 L 。
- 适用范围：正常塞曼效应 ($g_1 = g_2 = 1$)。
- 典型用法（应试）：
 - 计算正常塞曼效应中相邻谱线之间的波数差或频率差 ($\Delta\nu = \frac{eB}{4\pi m_e}$ ，即拉莫尔频率)。
 - 与实验结合，可用于测定电子的比荷 e/m_e 。

(五) 施特恩-格拉赫实验的定量分析

14. 原子束在非均匀磁场中的偏转距离

$$z_2 = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \frac{dD}{3kT} = -m_j g_j \mu_B \frac{\partial B_z}{\partial z} \frac{dD}{3kT}$$

- 符号含义与单位： z_2 为原子束在探测器上的偏转距离 (m)。 μ_z 为原子磁矩在 z 方向的分量。 $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ 为磁场梯度 (T/m)。 d 为磁铁长度， D 为磁铁出口到探测器的距离。 T 为炉温 (K)， k 为玻耳兹曼常量。这里用到了从炉中出射原子的最概然动能 $E_k = \frac{3}{2}kT$ 。
- 适用范围：施特恩-格拉赫实验的定量计算。
- 典型用法（应试）：
 - 已知实验参数和原子态，求原子束分裂的条纹数目和间距。
 - 条纹数目即为 m_j 的可能取值个数，为 $2J + 1$ 。对于基态银原子或氢原子， $J = 1/2$ ，故分裂为两束。
 - 从条纹间距可反推原子的磁矩，从而求出 g_j 因子。

(六) 氢原子能谱的精细结构与兰姆移位

15. 氢原子能级的精细结构（狄拉克理论结果）

$$E_{n,j} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

- 符号含义与单位： $E_{n,j}$ 为考虑相对论和自旋-轨道耦合后的氢原子能级。 α 为精细结构常数。该式表明，能级仅依赖于主量子数 n 和总角动量量子数 j 。
- 适用范围：氢原子或类氢离子，狄拉克相对论量子力学框架下。
- 典型用法（应试）：
 - 说明相同 n, j 的能级是简并的（如 $2^2\text{S}_{1/2}$ 与 $2^2\text{P}_{1/2}$ 能量相同）。
 - 计算氢原子 $n = 2$ 能级的精细结构分裂值（ $2^2\text{P}_{3/2}$ 与 $2^2\text{P}_{1/2}$ 之差）。

16. 兰姆移位（定性）

- 现象： $2^2\text{S}_{1/2}$ 能级比 $2^2\text{P}_{1/2}$ 能级高出约 1058 MHz。
- 物理来源：量子电动力学 (QED) 效应，主要是电子与自身辐射场的相互作用（自能）和真空极化。
- 典型用法（应试）：
 - 解释为何狄拉克理论的简并预言被打破。
 - 说明量子电动力学 (QED) 对原子能级的修正。
 - 理解氢原子 H_α 线 ($n = 3 \rightarrow 2$) 为何由预期的 5 条分裂成 7 条精细结构。

三、重要概念与对比总结

1. 自旋与轨道的对比：

- 自旋角动量： $s = 1/2$, $S_z = \pm \frac{1}{2}\hbar$ 。自旋磁矩投影： $\mu_{s,z} = \pm \mu_B$ 。 $g_s = 2$ 。
- 轨道角动量： l 为整数, $L_z = m_l \hbar$ 。轨道磁矩投影： $\mu_{l,z} = -m_l \mu_B$ 。 $g_l = 1$ 。

2. 正常与反常塞曼效应：

- 正常：上下能级总自旋 $S = 0$ （单态）， $g_1 = g_2 = 1$ 。谱线三分裂，等间距。
- 反常： $S \neq 0$, $g_1 \neq g_2 \neq 1$ 。谱线分裂数目和间距由 g 因子决定，更为复杂。

3. 四个量子数：完整描述原子中电子状态的量子数为 n, l, m_l, m_s （或 n, l, j, m_j ）。