《原子物理 B》公式集与重要概念

为什么整理《公式集》？

《公式集》最初产生于我个人备考《原子物理 B》时整理的知识点整理，内容主要来自于该课程的教学 PPT 与教材相互对照，并在整理过程中与老师交流，删去了一些繁琐且考试不会涉及的部分。在整理好知识点后，我发现同学们考前突击使用的主要是邓谊宇同学的《原子物理提纲》和开心英语书店的《原子物理复习资料》。《提纲》整理了《光学与原子物理》课程原子物理部分的知识点，而在课程改革后，《原子物理 B》的教学内容有所变化，且《提纲》并未罗列原子物理的一些重要考点概念。而《复习资料》是 10 年左右整理出来的，过于老旧，且比较繁琐，不适合考前突击使用。因此，我将个人整理的知识点校对成《公式集》，供学弟学妹们考前突击《原子物理 B》使用。

如何使用《公式集》？

《公式集》只是考点公式与概念的罗列，并不会帮助你理解知识点。如果你在期末周之前完全没有学习，那我建议你先阅读完课程组的教学 PPT，《原子物理 B》的教学 PPT 编写的比较清晰明了，且重点突出，远比该课程的教材好。在阅读 PPT 中应当尽可能把概念理解清楚，不需要背诵。

如果你已经了解了 PPT 上的基本概念，那么就可以开始背诵《公式集》了。《公式集》上的公式与概念都很重要，务必要背熟背牢，在背诵的同时可以与课程 PPT 对照以加深理解。《公式集》的前半部分是公式集，后半部分是重要概念整理，其中部分公式标为灰色，说明这些公式不会直接考察，但是背诵它们有助于理解相关题目。

需要注意，《公式集》虽然整理了考点，但并不能直接教你这些公式与概念如何在解题中使用。对于一些考察比较灵活的考点，例如画能级图、多/双电子原子的耦合与找原子态基态和电子组态基态等，需要自己多加练习。

2020 级 少转地空 徐小航

2021.11

1. 汤姆逊实验测荷质比：

$$\frac{e}{m_e}=\frac{Eh}{LlB^2}$$

E为电场强度，B为磁场强度，L为接收屏与电磁场边缘的距离，l为电磁场长度，h为接收屏上射线偏离距离。

2. 库仑散射公式：

$$b=\frac{D}{2}\cot\frac{\theta}{2}$$

b是瞄准距离，θ是出射方向与入射方向角度，D是库仑散射因子：

$$D=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Z}{E}$$

其中Z是原子序数，E是入射粒子动能。

3. Rutherford 卢瑟福散射公式：

$$\mathrm{d}\,\sigma=2\pi b|\mathrm{d}\,b|=\frac{D^2}{16}\frac{1}{\sin^4\dfrac{\theta}{2}}\mathrm{d}\,\Omega$$

$\mathrm{d}\,\sigma$为入射α粒子散射到θ方向内的$\mathrm{d}\,\Omega$的概率。$\mathrm{d}\,\sigma/\mathrm{d}\,\Omega$被称为微分散射截面。

4. 多原子散射公式：

$$\mathrm{d}\,n=Nnt\,\mathrm{d}\,\sigma$$

其中N为靶物质的粒子数密度，n为入射粒子总数，t为靶厚，$\mathrm{d}\,n$为入射到$\mathrm{d}\,\Omega$内的粒子数目。

5. 库仑散射中入射α粒子与原子核的最短距离为：

$$r_m=\frac{D}{2}\left(1+\frac{1}{\sin\dfrac{\theta}{2}}\right)$$

*在以上散射相关结论中，若入射的不是α粒子而是电荷量为qe的某粒子，则D中的 $2Z$改为qZ，其他结论不变。

6. 氢原子光谱波数：

$$\tilde{\nu}=R_H\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right)$$

$\tilde{\nu}=\lambda^{-1}$是波数，R_H是氢原子的里德伯常数。

7. 单色辐出度定义：

$$r(\nu,T)=\frac{\mathrm{d}\,E(\nu,T)}{\mathrm{d}\,\nu\,\mathrm{d}\,S}$$

$r(\nu,T)$是(ν,T)状态下的单色辐出度，$E(\nu,T)$是辐射能量，S是面积。

吸收比定义：

$$A(\nu,T)=\frac{\mathrm{d}\,E^{'}(\nu,T)}{\mathrm{d}\,E(\nu,T)}$$

$E^{'}$是辐射能量，E为吸收能量。

8. 基尔霍夫热辐射定律：

$$\frac{r}{A}=f(\nu,T)$$

9. Plunk 普朗克黑体辐射公式：

$$E(\nu,T)=\frac{2\pi h}{c^2}\frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)-1}$$

10. 光电效应的反向截止电压：$eV_0=E=h(\nu-\nu_0)$，其中V_0为反向截止电压，ν_0为激发光电效应的最低频率。

11. 玻尔氢原子模型下电子轨道半径：

$$r_n=a_0\frac{n^2}{Z}$$

能级：

$$E_n=-\frac{Z^2}{n^2}\frac{1}{2}m_e\alpha^2c^2=-\frac{Z^2}{n^2}hcR_\infty$$

其中α为精细结构常数，a_0为玻尔半径：

$$a_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$$

12. 里德伯常数的核致偏移：

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

其中R_A为核质量为M时的里德伯常数，R_∞为核质量无穷大时的里德伯常数，μ为核与电子的约化质量。

13. 类氢离子的光谱：（对 Pickering 线系$m=4,Z=2$）

$$\tilde{\nu}=Z^2R_M\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right)$$

14. 光子的能量与动量：

$$E=h\nu\,,P=\frac{h\nu}{c}=\frac{h}{\lambda}$$

实物粒子的能量与动量：

$$E=h\nu=\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\,,P=\frac{h}{\lambda}=\frac{m_0v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

15. 戴维逊-革末实验：$d\sin\theta=j\lambda$，d为 Ni 单晶的光栅常数，θ为入射角，j取 1。

16. 不确定性关系：

$$\Delta x\Delta p_x\leq\frac{\hbar}{2}\,,\Delta E\Delta t\leq\frac{\hbar}{2}$$

17. Schrödinger 薛定谔方程：

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

18. 定态薛定谔方程:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi(\vec{r})=E\,\psi(\vec{r})\text{ , }\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})\,e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

19. 一些常见力学量的算符表示:

$$\hat{\vec{r}}=\vec{r}$$
$$\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla$$
$$\widehat{p_x}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$
$$\hat{V}=V$$
$$\hat{T}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$
$$\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})$$
$$\hat{L}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}$$

20. 力学量的期望值与测量值:

$$\langle A\rangle=\overline{A}=\frac{(\psi,\hat{A}\psi)}{(\psi,\psi)}=\int\psi^*\hat{A}\psi\,\mathrm{d}\,\tau$$

21. 对一维无限深势阱:

$$V(x)=\begin{cases}0,0\le x\le a\\ +\infty,x<0\text{ or }x>a\end{cases}$$

阱内波函数为:

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}\right)\text{ , }n\ge 1$$

阱内能量为:

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2\text{ , }n\ge 1$$

E_1为零点能。

22. 对单电子原子，$\Psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)$。其中:

$$\Phi_{m_l}(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im_l\varphi}$$

$\Theta_{l,m_l}(\theta)$含有$|m_l|$个$\sin\theta$，$l-|m_l|$个$\cos\theta$；$R(r)$含有:

$$e^{-\frac{r}{na_0}}\text{和}P_n\left(\frac{r}{a_0}\right)$$

其中r为球心距，θ为天顶距，φ为经度；$l=0,1,\dots,n-1$，$m_l=-l,-l+1,\dots,l$，能量的简并度为n^2。(学会根据单电子原子波函数判断电子组态)

23. $(r,\theta,\varphi)\to(r,\pi-\theta,\pi+\varphi)$，而$Y(-\vec{r})=(-1)^l\,Y(\vec{r})$。故$l$偶，波函数空间对称；$l$奇，波函数空间反对称。

24. $L=\sqrt{l(l+1)}\hbar,L_z=m_l\hbar,\langle L_x\rangle=\langle L_y\rangle=0$

25. 电子轨道磁矩为:

$$\vec{\mu_l}=-\gamma g_l\vec{L}=-\sqrt{l(l+1)}\mu_B g_l\hat{L}$$

其中$g_l = 1$ 为轨道g因子，$\gamma = e/2m_e$为旋磁比，$\mu_B = \hbar\gamma$为玻尔磁子。又有：

$$\mu_{l,z} = m_l \mu_B g_l$$

26. 斯特恩-格拉赫实验中，原子在z方向受力为：

$$F_z = \mu_z \frac{\mathrm{d}\,B}{\mathrm{d}\,z}$$

根据此式可计算原子束分裂宽度。

27. 电子自旋：

$$\overrightarrow{L_s} = \vec{S} = \sqrt{s(s+1)}\hbar\hat{S}\,, S_z = m_s\hbar\,, s = \frac{1}{2}\,, m_s = \pm\frac{1}{2}$$

$$\mu_s = -\sqrt{s(s+1)}\mu_B g_s\,, \mu_{s,z} = m_s \mu_B g_s\,, g_s = 2$$

28. 若s与l合为j，则：

$$\mu_j = -\sqrt{j(j+1)}g_j\mu_B\,, J = \sqrt{j(j+1)}\hbar\,, J_z = m_j\hbar$$

$$j = l+s, l+s-1, \dots, |l-s|\;,\; m_j = -j, -j+1, \dots, j$$

对单电子原子，$j = |l \pm 0.5|$。朗德g因子为：

$$g_j = g_l\frac{J^2 + L^2 - S^2}{2J^2} + g_s\frac{J^2 + S^2 - L^2}{2J^2}$$

29. 原子态表示为$n^{2s+1}L_j$或$^{2s+1}L_j$的形式。L随着 0,1,2,3,4,5,6 表示为 SPDFGHI。

30. 电偶极跃迁的选择定则：

$$\begin{cases} \Delta l = \pm 1 \\ \Delta m_l = 0, \pm 1 \end{cases} \quad \text{（不考虑自旋）}$$

$$\begin{cases} \Delta l = \pm 1 \\ \Delta j = 0, \pm 1 \\ \Delta m_j = 0, \pm 1 \end{cases} \quad \text{（考虑自旋）}$$

31. 正常 Zeeman 塞曼效应的谱线分裂：

$$E_n^{'} = E_n + mg\mu_B B\,, \Delta\tilde{\nu} = \frac{\mu_B B}{hc}$$

32. 单电子原子的精细结构：

$$\Delta E_n = -E_n\frac{\alpha^2 Z^2}{n^2}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right)$$

33. LS 耦 合 中 ， $S = s_1 + s_2, \dots, |s_1 - s_2|$ ， $L = l_1 + l_2, \dots, |l_1 - l_2|$ ， $J = L+S, \dots, |L-S|$ ，$m_S, m_L, m_J = \dots$。LS耦合的轨道自旋相互作用能为：

$$\Delta E_{LS} = \frac{\hbar^2}{2}\xi_{L,S}\big(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\big)$$

在L,S相同时J的分裂会引起精细结构，J有 $2(\min\{L,S\}+1)$个值。

34. 朗德间隔定则：

$$E_{J+1} - E_J = \hbar^2\xi_{L,S}(J+1) \propto (J+1)$$

35. LS耦合的跃迁定则：

$$\begin{cases} \Delta S = 0 \\ \Delta L = 0, \pm 1 \\ \Delta J = 0, \pm 1\text{，但不能}J = J' = 0 \\ \Delta m_J = 0, \pm 1 \end{cases}$$

36. jj耦合下，$j_1 = l_1 \pm s$，$j_2 = l_2 \pm s$，$J = j_1 + j_2, \ldots, |j_1 - j_2|$。轨道自旋相互作用能为：

$$\Delta E_{jj} = \sum_i \Delta E_i \ , \Delta E_i = \frac{\hbar^2}{2} \xi_{l_i,s_i} \big(j_i(j_i+1) - l_i(l_i+1) - s_i(s_i+1) \big)$$

jj耦合的原子态表示为$(j_1, \ldots, j_n)_J$。

37. jj耦合的跃迁定则：

$$\begin{cases} \Delta j = 0, \pm 1 \\ \Delta J = 0, \pm 1\text{，但不能}J = J' = 0 \\ \Delta m_J = 0, \pm 1 \end{cases}$$

38. 同科电子的原子态必须满足$L + S = 0 \ (\mathrm{mod}\ 2)$。同科电子每个$(n, l)$有$C_{2(2l+1)}^{\nu}$个原子态。$(nl)^{\nu}$与$(nl)^{N-\nu}$的原子态相同，其中$N = 2(2l+1)$。

39. Hund 洪德定则：在LS耦合下，① S越大能量越低，② S相同时L越大能量越低，③ L, S相同时若$\nu \le 2l+1$ 则J越小能量越低。

40. 莫塞莱定律：对 X 射线，K_{α}系标识谱与$L_{\beta 1}$系分别为：

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

R为阳极靶物质的里德伯常数，Z为阳极靶物质的原子序数。

重要概念

1. 阴极射线管汤姆逊实验：
实验现象：无电场时，射线在中间；加电场，射线偏向阳极；加磁场，射线又回到中间。
实验意义：测量到电子荷质比，发现电子并发现阴极射线是电子束。

2. 卢瑟福散射公式的推导
假设条件：① 单次散射；② 只有库仑相互作用；③ 核外电子作用可忽略；④ 原子核静止。
1° 求库仑散射公式
由于冲量定理，$F_\perp dt = mdv_\perp$，$F_\perp = F\sin\varphi$；由于角动量守恒，$L = mv_0 b = mr^2 d\varphi/dt$；
由于机械能守恒，$mv_0^2 = mv^2$，故$v_\perp = v_0\sin\theta$，有：

$$v_0\sin\theta = \int \mathrm{d}\,v_\perp = \int \frac{\mathrm{d}\,v_\perp}{\mathrm{d}\,t}\frac{\mathrm{d}\,t}{\mathrm{d}\,\varphi}\mathrm{d}\,\varphi = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 m}\int_0^{\pi-\theta}\frac{\sin\varphi}{r^2}\frac{r^2}{v_0 b}\mathrm{d}\,\varphi = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 m v_0 b}(1+\cos\theta)$$

该式可化为库仑散射公式。但无法测量入射粒子的瞄准距离，所以无法实验验证。
2° 求卢瑟福散射公式
根据库仑散射公式，每个$\mathrm{d}\,b$对应一个$\mathrm{d}\,\theta$，故每一个"$\mathrm{d}\,b$对应的圆环$\mathrm{d}\,\sigma = 2\pi b|\mathrm{d}\,b|$"对应"$\mathrm{d}\,\theta$的对应的立体角$\mathrm{d}\,\Omega$"。而：

$$\mathrm{d}\,\Omega = \frac{2\pi r\sin\theta\, r\,\mathrm{d}\,\theta}{r^2} = 4\pi\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{d}\,\theta$$

$$\mathrm{d}\,b = -\frac{D}{4}\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}}\mathrm{d}\,\theta \Longrightarrow \mathrm{d}\,\sigma = 2\pi b|\mathrm{d}\,b| = \frac{D^2}{16}\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}\mathrm{d}\,\Omega$$

微分散射截面$\mathrm{d}\,\sigma/\mathrm{d}\,\Omega$的含义是入射粒子被散射到$\theta$方向的单位立体角的概率，单位是靶恩，$1\ \mathrm{b} = 10^{-24}\ \mathrm{cm}^2$。
3° 求多原子散射公式
靶上总原子数为NAt，总微分截面为$NAt\,\mathrm{d}\,\sigma$。假设入射粒子单次散射，原子核互不遮挡，则$\mathrm{d}\,n/n\ = NAt\,\mathrm{d}\,\sigma/A$。得证。
*小角度时卢瑟福散射公式发散，这是因为在b很大时，需要考虑入射粒子受核作用被核外电子屏蔽，Z应用有效电荷替代。

3. 卢瑟福模型的意义与不足
意义：解释了大角度散射，提供了一种分析物质微观结构的方法（粒子散射），提供了一个测Z的方法。
不足：无法描述原子的稳定性，无法解释氢原子光谱（卢瑟福模型得出原子光谱是连续的，原子辐射光的频率等于原子中电子运动频率）

4. 氢原子的光谱：$m = 1,2,3,4,5$ 分别对应**莱曼系、巴尔末系、帕邢系、布喇开系、普丰特系**。$n = m+1$ 的谱线称为共振线，$n\to\infty$称为线系限。

5. Bohr 玻尔氢原子模型
玻尔假设：① **定态条件（分立轨道假设）**，核外电子只能处于一系列分立轨道上绕核转动，电子在固定轨道运动不辐射电磁波，处于一系列定态；② **频率条件**，电子可以在不同轨道上跃迁，并以电磁波形式辐射或吸收能量；③ **角动量量子化假设**，电子轨道运动的角动量是量子化的，$P = n\hbar$。
Bohr 模型可以解释：氢原子的大小、氢原子的能级、氢原子的光谱规律。

Bohr 处理氢原子结构的方法：用经典理论描述电子的绕核运动，用量子化条件处理电子的轨道半径

*Rydberg 常数理论值与实验值的偏差：由于核实际上并非静止，所以应该采用质心坐标系，用折合质量代替电子质量，即：

$$R_\infty = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 h^3 c} \to R = \frac{2\pi^2 \mu e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 h^3 c} = \frac{\mu}{m_e} R_\infty$$

*氢原子的连续光谱区由非量子化轨道的电子跃迁产生，因为原子能量较高时，体系能量为正，此时电子同时有动能和势能。

*He 的 Pickering 线系和氘的发现（Rydberg 常数偏移）

Bohr 理论的困难：不能解释定态无辐射和定态跃迁的原因，不能解释 H 原子光谱精细结构以及谱线的宽度和强度；不能解释其他原子光谱。

6. Franck 弗兰克-Hertz 赫兹实验

实验目的：用光谱学方法之外的方法证明原子分立能级存在，验证 Bohr 模型。

实验原理：电子撞击原子致使原子激发，测量电子损失的能量。若原子只有分立能级，则只有某种能量的电子能引起激发。让电流随着电压匀速增大，原子如果吸收能量，发生非弹性碰撞，此时电子动能降低，回路电流降低；如果原子不吸收能量，电流会随着电压继续增大。

实验现象：随加速电压增加，电流增强，但在 4.9V 的倍数出现峰值，随后有短暂降低。

改进实验：将电子加速区与碰撞区（Hg 蒸汽）分离，让 Hg 更稀薄。改进后电子动能更大。

*电离电势、第一电离电势。

7. 波粒二象性的实验基础：黑体辐射实验（黑体空腔光波能量分立）、光电效应实验（光波只能以光子的形式被电子吸收）、康普顿散射实验（光子有动能和动量，与电子作用时满足守恒律）

8. Davison 戴维逊-Germer 革末实验

实验原理：电子束在 Ni 单晶表面上衍射，低能电子入射晶体，表面相当于一反射光栅。

实验现象：电子从晶体表面反射呈现波动的衍射特征。

结论：电子具有波动性。

*Thomson 实验是电子透过 Pt 晶体薄膜透射，出现同心圆环，证实电子具有波动性且波长符合德布罗意波长。

*约恩逊实验是电子的双缝干涉。

9. 波函数为了稳定存在，必须在电子轨道上形成驻波，而形成驻波的条件是轨道周长是电子波长的整数倍，这恰巧符合 Bohr 模型的角动量量子化假设。

波函数必须是单值、连续、有界、平方可积的复函数，有常数因子不确定性（空间归一化）。

态叠加原理：若ψ_1和ψ_2都是粒子的可能状态，则$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$也是粒子的一种可能态，粒子同时处于两种状态，几率分别为$|c_1|^2$和$|c_2|^2$。

10. 不确定性关系的物理解释：当一维粒子的p确定，λ确定，是单包平面波，位置完全不确定；当粒子的x确定，是无限窄的波包，由所有波长单色波叠加，λ完全不确定。

*能量与同态时长的不确定性关系导致了能级的自然宽度。

11. 若$\widehat{F}\psi(x)=f\psi(x), f\in\mathbb{R}$，则称该方程为本征方程，$f$为值。不是所有的$\widehat{F}$都有对应的$f$，但若有$f$，一个$f$对应一个本征态$\psi(x)$。若$F,G$有同样的本征态，则称两者对易，记作$[\widehat{F},\widehat{G}]=\widehat{F}\widehat{G}-\widehat{G}\widehat{F}=0$。

12. 一维定态问题的求解步骤：
1° 利用势能函数与定态薛定谔方程求出波函数通解。要注意势能与能量本征值E的关系。
2° 利用波函数的物理性质（单值有界连续）求出边界条件。
*隧道效应

13. Stern 斯特恩-Gerlach 格拉赫实验：
实验目的：验证原子轨道空间取向的量子化
实验预言：不加磁场时，Ag 原子束不分裂；加磁场时，由于m_l有 $2l+1$ 种取值，分裂为 $2l+1$ 束。
实验现象：加磁场时，分裂为 2 束（偶数），与预言不符。
实验解释：Ag 原子受力不是只由电子轨道磁矩导致，还有电子自旋磁矩作用，总有效磁矩作用为：

$$F_z=\mu_z\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}z}=-m_jg_j\mu_B\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}z}$$

而$m_j=-j,\dots,j$，j为半整数，因此裂为偶数条线。对 Ag 原子，基态$j=0.5$，分裂为 2 束。
实验意义：证明原子轨道空间取向量子化，证明了电子自旋假设，证实了电子自旋磁矩描述正确性；证实L从 0 开始取值是正确的。

14. Zeeman 塞曼效应：光谱在弱磁场中分裂为多条
正常塞曼效应（等间隔分裂）：因为$S=0$，原子光谱为单重态，有$g_1=g_2=1$，上下能级分裂间隔$\Delta mg\mu_BB$相等。
反常塞曼效应（不等间隔分裂）：多重态，$g_1\neq g_2$，上下能级分裂间隔不等。
光谱线的偏振特征：垂直于磁场观察，光谱线分裂为等间隔的三条，分别为σ^-,π,σ^+，其中π线偏振方向与磁场平行，σ线偏振方向与磁场垂直；沿着磁场观察，则观察不到π线，σ^-,σ^+分别为右旋与左旋。

15. 单电子原子的精细结构是由相对论效应与自旋-轨道相互作用产生的。
超精细结构 Lamb 兰姆移位是电子与其本身辐射场作用的结果，导致量子电动力学建立。

16. He 原子的光谱特征：① 有 2 个主线系，2 个第一辅线系，2 个第二辅线系；② 每个线系都有两套，一套为单重，一套为三重，被称为仲氦和正氦；③ 二价电子的第二主族元素光谱特征类似，只是价电子最低的n不同。
He 原子的能级特征：有两套能级，其中一套单层，一套三层，两套之间不跃迁；有亚稳态 2^1S_0和 2^3S_1；基态电离能为 24.58eV，与第一激发态差 19.77eV。
He 原子中，价电子和原子实作用，和价电子间作用同样重要。

17. Pauli 泡利不相容原理：多电子体系中，任何 2 电子不能处于相同量子态，即n,l,m_l,m_s相同。
全同粒子指内禀属性（质量、电荷、大小、自旋）全同，全同粒子波函数间有交换对称性。其中空间交换对称的称为**玻色子**，如光子；空间反交换对称的称为**费米子**，如电子。
交换效应：在多电子体系中，费米子的交换反对称性使得自旋反平行的电子相互吸引，自

旋平行的电子相互排斥，两个自旋平行的电子在空间上重叠的几率极小。因此，单重态电子反平行，彼此吸引，能量升高多；三重态电子自旋平行，彼此排斥，能量升高少，三重态能级低于单重态能级。

18. LS耦合是”两电子的自旋间作用”与”两电子的轨道间作用”的耦合，jj耦合是“同电子的自旋与轨道相互作用”与“一个电子的自旋与另一个电子的轨道间的相互作用”的耦合。
电子组态、等效电子、不等效电子。
LS耦合的原子态表示为$n^{2S+1}L_J$的形式，jj耦合后的原子态表现为$(j_1,j_2,\dots,j_n)_J$的形式。同样的电子组态，jj耦合与LS耦合得到的原子态数目相同，为：

$$G=\prod_{i=1}^{\nu}\left(2(2l_i+1)\right)$$

其中ν为价电子数，l_i为第i个价电子的角量子数。

19. 对同科电子，n,l分别相同，由泡利不相容原理，m_l,m_s不能全同，因此原子态数目缩为$G=C_{2(2l+1)}^{\nu}$.由于电子的交换反对称性，只有$L+S=$偶数的原子态才是可能的。

20. 周期律源于原子中电子组态导致的价电子周期性，是 Pauli 不相容原理的直接证明。
光谱、电离电势、原子半径、力学性质（如压缩系数、体胀系数）都有周期性。
主壳层 KLMNOPQ、支壳层 SPDFGHI。

21. 核外电子排列规则：首先要满足 Pauli 不相容原理，其次要满足能量最小原理。
支壳层能量按$n+0.7l$排列，有能级交错。若各电子自旋平行，即m_l尽可能大，则能量最低。
*按元素周期表，奇偶多重态交替出现；Z 原子与 Z+1 的+1 价离子相似。

22. X 射线的发现：阴极射线管放电使得 $BaPt(CN)_6$发出荧光。（伦琴）
X 射线的产生：高速电子轰击靶物质
X 射线在晶体中的衍射可以标定 X 射线的波长，也可以测量晶体的晶格常数。
X 射线的特性：波长极短，能量极高，波粒二象性显著。
X 射线的光谱由带状连续谱与细锐线状谱（特征谱、标识谱）组成。连续谱的谱强度随波长变化，有管压决定的短波限，与靶材料无关；产生的机制是韧致辐射，由于高速电子与原子核碰撞突然减速产生的辐射，强度反比于入射带电粒子质量的平方。标识谱在管压达到一定值时产生，与阳极靶材料有关，Moselay 定律。
标识谱位置随元素依次变化，没有周期性，说明来自于非价电子跃迁辐射。谱系线结构与元素所处化学环境无关，因为内壳层电子受外层电子屏蔽，说明来自于内壳层电子跃迁。
K 线系来自于$n=1$ 壳层 1 电子被电离，产生 1 空位，然后一个外壳层电子跃迁填补此空位，多余能量以 X 射线辐射，有效电荷$Z-1$。L 线系来自$n=2$ 壳层电子被电离，$Z-7.4$。

23. 多电子耦合方式：先把两个电子耦合，把耦合后的电子对当成一个新电子，再与其他电子耦合，以此类推。