

## 复习课：单电子原子与多电子原子

- 实验基础：原子的总角动量可以被观测
- 总角动量 $\mathbf{J}$  (量子数 $j$ 表征)  $\xrightarrow{\text{比例 } g_j}$  磁矩 $\boldsymbol{\mu}$

# 复习课：单电子原子与多电子原子

1. 作业题选讲热身
2. 角动量耦合
3. 原子能级图
4. 串联知识点的重要实验: Stern-Gerlach实验与磁场下的光谱分裂

- 1.1 作业题选讲: g因子公式(记特例)? 原子态表示?

3.19 已知 $s=1/2$ ,  $j=5/2$ ,  $g=6/7$ , 试写出原子态.

$$\left\{ \begin{array}{l} g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad \text{课本 P109 式 3.5.14} \\ \\ {}^{2s+1}L_j \text{ 原子态表示} \end{array} \right.$$

其中关于原子态表示, 量子数  $l=0, 1, 2, 3, 4, 5\dots$  时, 其表达  $L$  为 S, P, D, F, G, H...

解得物理解  $l=3$ , 对应  $L=F$ , 即原子态为  ${}^2F_{5/2}$

## • 1.2 作业题选讲: Stern-Gerlach实验, 外场下角动量的磁矩?

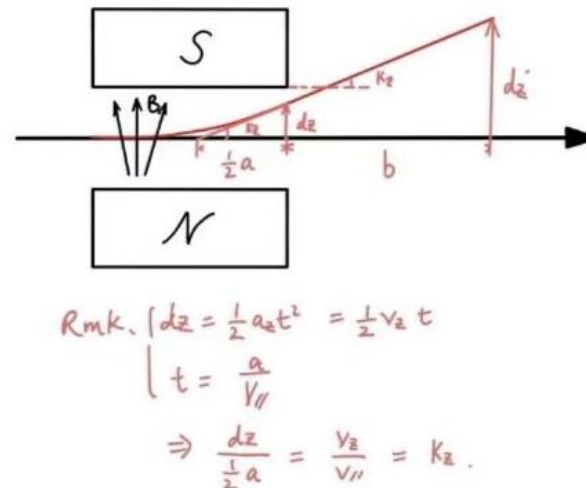
3.13 Stern-Gerlach实验中, 窄银原子束通过不均匀磁场而射到屏上. 已知磁场区长度  $a=10\text{cm}$ , 屏和磁场边缘的距离  $b=20\text{cm}$ ,  $v=300\text{m/s}$ , 裂距为  $2\text{mm}$  时, 磁场梯度多大?

$$\begin{cases} F_z = \mu_z \frac{dB_z}{dz} & (1) \text{ 课本 P100} \\ \mu_z = -m_j g_j \mu_B & (2) \text{ 课本 P109, 式 3.5.16} \end{cases}$$

除此以外, 考虑场区内的匀加速运动和场区外的匀速运动:

其中,  $d'_z$  为裂距的一半; 而(6)式的证明是非常简明的. 详参下图图解.

$$\begin{cases} F_z = m_{Ag} a_z & (3) \\ d_z = \frac{1}{2} a_z t^2 & (4) \\ t = \frac{a}{v_{\parallel}} = \frac{1}{3000} \text{ s} & (5) \\ \text{出射斜率 } k_z = \frac{d_z}{\frac{1}{2} a} & (6) \\ d'_z = d_z + k_z * b & (7) \end{cases}$$



## • 1.3 作业题选讲: Hund定则 Pauli原理 Lande间隔定则

### 4.4 Fe, $[\text{Ar}]3d^64s^2$ , 根据Hund定则求其基态原子态

简单理解Hund定则: 画Ml框图, 放入电子. 需要记住正常次序与倒转次序.

$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$
----------------------	------------	------------	------------	------------

### 4.6 两个等效d电子的简并度? 能形成几个原子态?

对l轨道中的v个电子, 对电子有 $2(2l+1)$ 个状态. 简并度 $G=C(v, 2l(1+1))$ .

对于两个等效电子, 有简单判定方法:  $L+S$ 必须为偶数.

### 4.12 一个多重态的三层精细结构中, 分别比基态高出 $60333$ , $60353$ 和 $60393\text{cm}^{-1}$ .

试求三个能级原子态?

对自旋量子数为S的原子, 在LS耦合下有 $2S+1$ 个状态.  $S=1$

而 $E(J+1, J)/E(J, J-1)=(J+1)/J$ . 在这里, 比值为 $2/1$ . 因此 $J=0, 1, 2$ .

## • 2.1 角动量耦合: 单电子原子LS耦合

- 基本角动量物理量的取值:

$$\hat{L}^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad \hat{L}_z = m_l\hbar, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$$\hat{S}^2 = s(s+1)\hbar^2, \quad \hat{S}_z = m_s\hbar, \quad s = \frac{1}{2}$$

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}, \quad \hat{J}^2 = j(j+1)\hbar^2, \quad \hat{J}_z = m_j\hbar, \quad j = |l-s|, \dots, l+s$$

- 角动量·角动量(相互作用)的取值: 凑成上述已知角动量的线性组合.

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{\hat{J}^2 - \hat{S}^2 - \hat{L}^2}{2} = \frac{j(j+1) - s(s+1) - l(l+1)}{2} \hbar^2$$

$$\hat{J} \cdot \hat{L} = \frac{\hat{J}^2 - \hat{S}^2 + \hat{L}^2}{2}$$

$$\hat{J} \cdot \hat{S} = \frac{\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2}{2}$$

- 切记\hbar单位!

## • 2.2 角动量耦合: 单电子LS→非同科多电子LS?

- 相当于各自的轨道/自旋角动量先耦合成总的轨道/自旋角动量:

$$\hat{L}^2 = L(L+1)\hbar^2, \quad \hat{L}_z = m_L\hbar, \quad L = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2$$

$$\hat{S}^2 = S(S+1)\hbar^2, \quad \hat{S}_z = m_S\hbar, \quad S = |s_1 - s_2|, \dots, s_1 + s_2$$

$$\hat{J}^2 = J(J+1)\hbar^2, \quad \hat{J}_z = m_J\hbar, \quad J = |L - S|, \dots, L + S$$

- 对于同科电子, 还需考虑Pauli原理带来的限制, 在此不赘述.
- 若是三价电子乃至更多价电子, 也是逐步确定总的轨道/自旋角动量.
- 例: 铑原子Rh, [Kr] **4d<sup>8</sup>5s<sup>1</sup>**, 可能组成的原子态与基态?  
(1.看成4d<sup>8</sup>状态和一个s电子的耦合, 列出各自的l和s. 2. 4d<sup>8</sup>等效为4d<sup>2</sup>)

## • 2.3 角动量耦合: 多电子jj耦合

- 相当于每一个电子的自旋/轨道角动量先耦合成单电子总角动量, 然后单电子角动量再耦合成原子总角动量

$$\hat{J}_1^2 = j_1(j_1 + 1)\hbar^2, \quad \hat{J}_{1z} = m_{j_1}\hbar, \quad j_1 = |l_1 - 1/2|, \dots, l_1 + 1/2$$

$$\hat{J}_2^2 = j_2(j_2 + 1)\hbar^2, \quad \hat{J}_{2z} = m_{j_2}\hbar, \quad j_2 = |l_2 - 1/2|, \dots, l_2 + 1/2$$

$$\hat{J}^2 = J(J + 1)\hbar^2, \quad \hat{J}_z = m_J\hbar, \quad J = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2$$

- 对于同科电子, 还需考虑Pauli原理带来的限制, 在此不赘述.
- 实验中, 不论是LS耦合还是jj耦合, 观测都和总角动量J有关. 一般而言, 给定J值的能级将按MJ分裂成2J+1条能级, 与LS耦合不同的是, jj耦合的g因子表达式不同, 课程不涉及.



## • 2.4 角动量耦合: 外场下的LS耦合原子 实验观测

- 不管是单电子还是多电子原子, LS耦合下, 外场观测下有总角动量磁矩:

$$\mu_J = -g_J \frac{\mu_B}{\hbar} J \qquad g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

- 在磁场中的取向势能:

$$U = -\mu_J \cdot \mathbf{B} = -\mu_{Jz} B = m_J g_J \mu_B B$$

- 因此引起的能级分裂按 $m_J$ 分裂, 为 $2J+1$ 条等间隔的能级.

## • 2.4 角动量耦合: 外场下的LS耦合原子 实验观测

- 对于LS耦合, 塞曼分裂谱线需要满足选择定则:

单电子选择定则:

$$\Delta m_j = 0, \pm 1$$

多电子选择定则:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta S = 0 \\ \Delta L = 0, \pm 1 \\ \Delta J = 0, \pm 1 \text{ (} J = 0 \rightarrow J = 0 \text{ 除外)} \\ \Delta M_J = 0, \pm 1 \text{ (} \Delta J = 0 \text{ 时 } M_J = 0 \rightarrow M_J = 0 \text{ 除外)} \end{array} \right.$$

- 能否证明单电子为多电子特例?

## • 2.4 角动量耦合: 外场下的LS耦合原子 实验观测

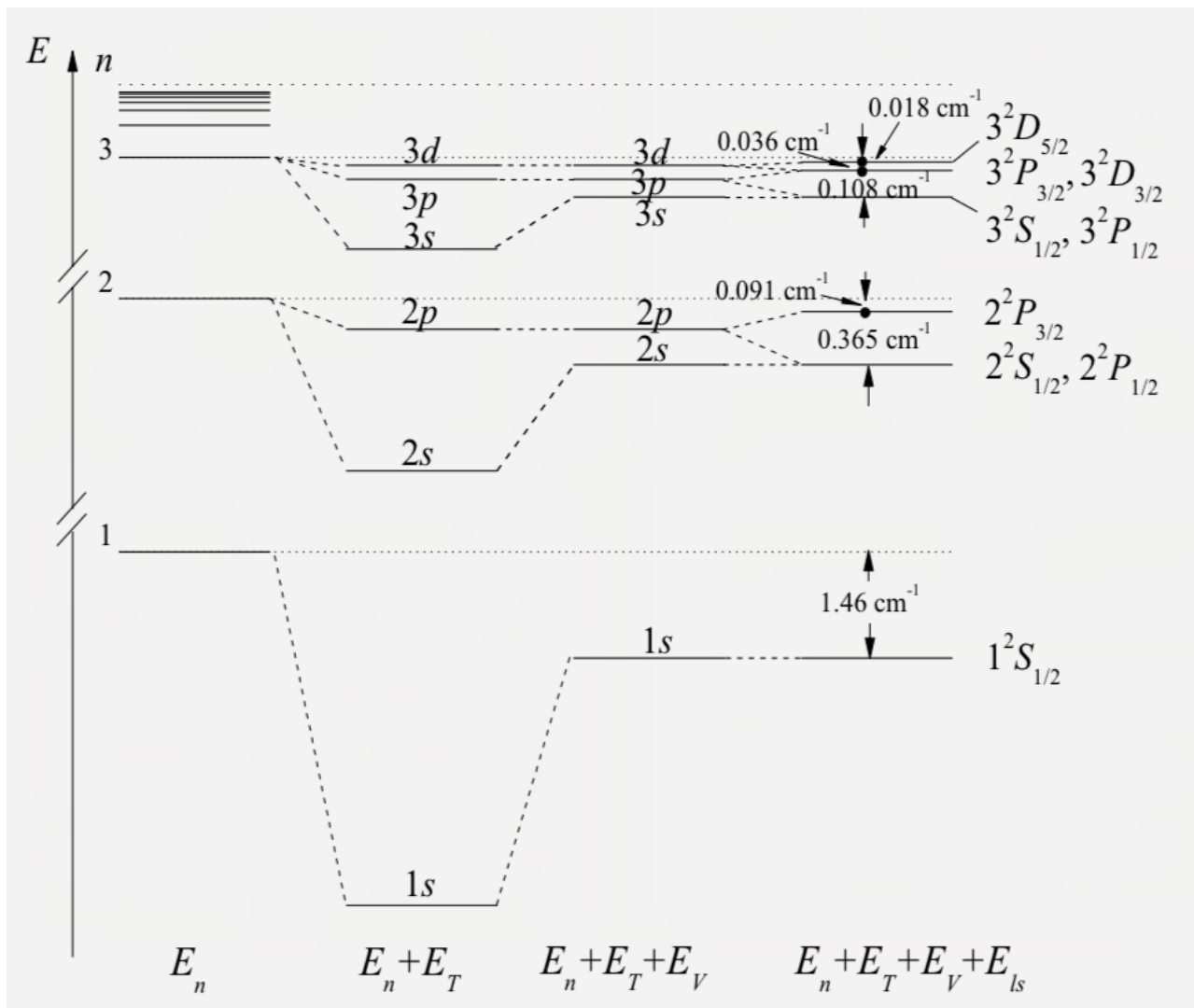
- 对于LS耦合, 塞曼分裂谱线的求解:

1. 确定跃迁上下能级的L, S, J
2. 计算g因子, 按MJ画能级分裂
3. 列出 $Mg\mu_B$
4. 选择定则, 确定允许跃迁的能级

5. 
$$\nu = \frac{E'_2 - E'_1}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h} + \frac{\mu_B B}{h} \Delta(M_J g_J) = \nu_0 + \frac{\mu_B B}{h} \Delta(M_J g_J)$$

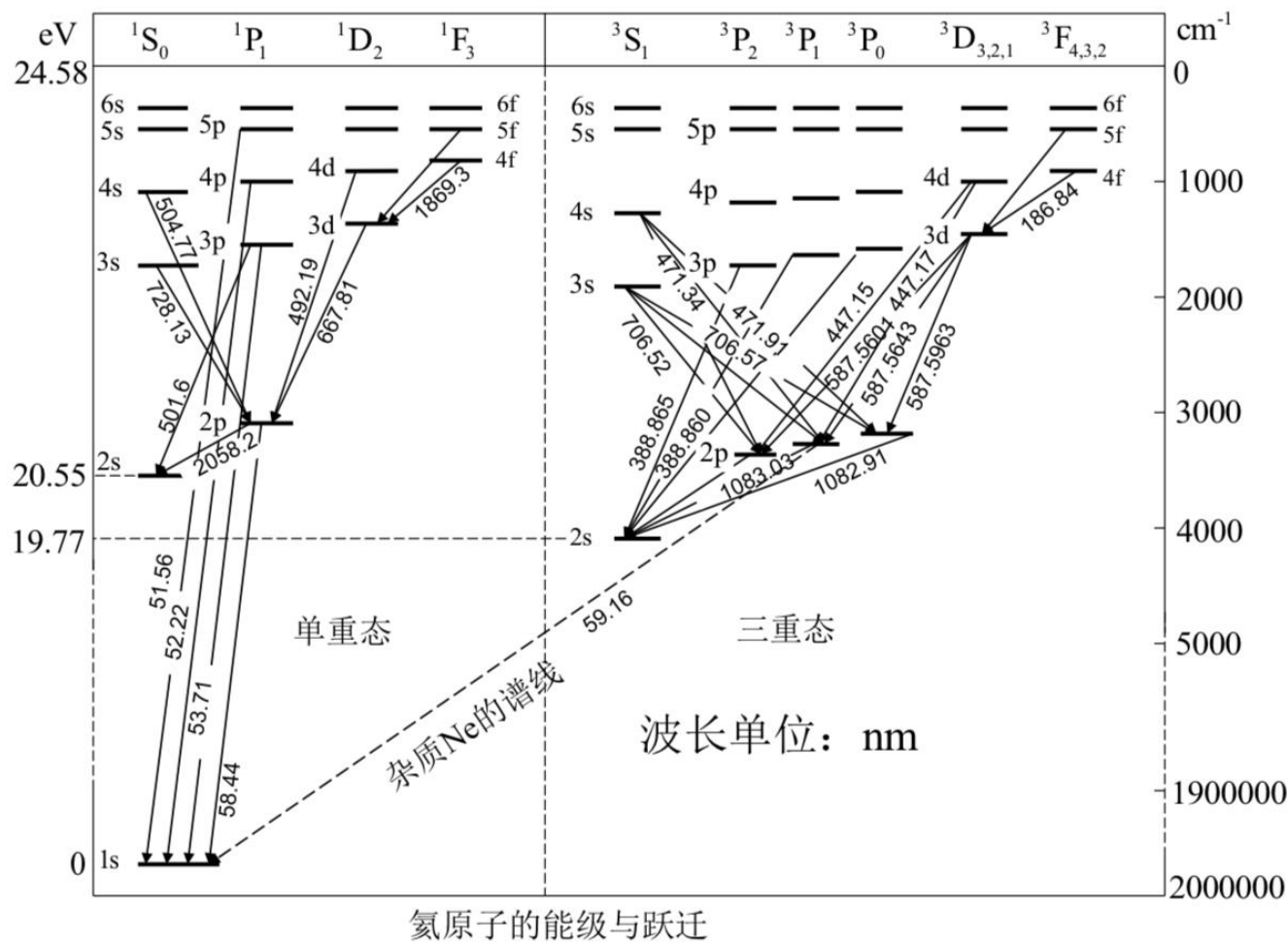
- 例: Stern-Gerlach, 为什么银原子是两条? 换成氯原子?

### • 3.1 原子能级: 氢原子能级谱



- 具体修正数值?
- 前后简并度?
- 跃迁选择定则?
- 哪一部分引起能级上升/下降?

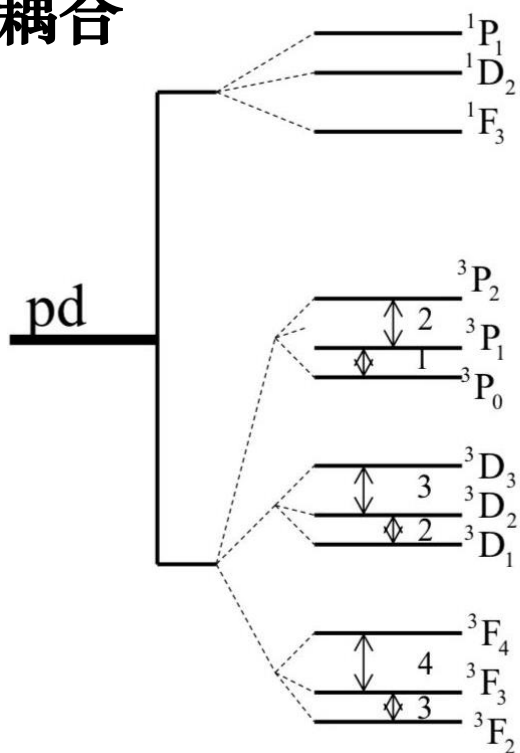
## • 3.2 原子能级: 氦原子能级谱



- 有什么特征?
- 三重态如何产生?
- 哪一套高?
- 和单电子相比的修正从何产生?
- 预测铝的能级谱?

### • 3.3 原子能级: 磁场下分裂能级谱

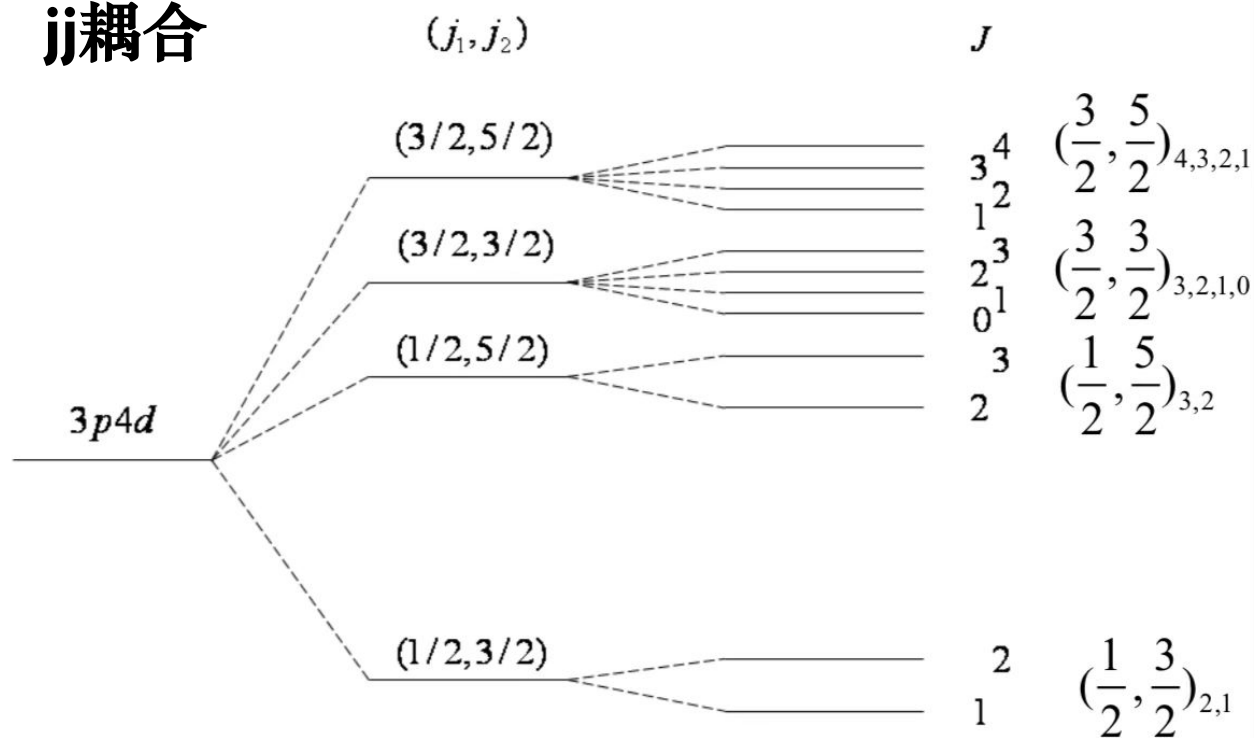
#### LS耦合



#### jj耦合

单重态

三重态



• 尝试画出允许的跃迁?

## • 4. Stern-Gerlach实验与塞曼分裂

- 1. 写出原子光谱项 $\longleftrightarrow$ 角动量如何耦合, 能写出 $L, S, J$ .
- 2. 求磁矩在磁场下分量 $\longleftrightarrow$ 角动量如何与磁矩联系, 角动量具体取值
- 3. 求分裂条数 $\longleftrightarrow$ 磁矩(也即角动量)按 $M_j$ 分裂
- 4. 找出允许跃迁 $\longleftrightarrow$ 跃迁选择定则
- 5. 计算分裂波数/频率

## • REMARK.

- 本次复习课只是尝试将第3章和第4章的重要知识点串起来, 帮助各位加深整体的理解, 方便各位自己安排复习. 实际上该PPT中忽略了很多细节, 比如, 塞曼分裂谱线的偏振问题, 以及jj耦合的选择定则; 还有第1、2章的内容, 例如力学量的期望计算以及类氢离子的光谱计算, 也十分重要. 这些都是需要各位自己回去再看的.
- 因此, 本PPT只能起到辅助复习、检测是否复习好了的作用.
- 强烈建议各位再看一遍课程PPT!



---

- **REMARK.**

- 考试时间: **3.03, 19:30-21:30**
- 考试地点: **5104**
- 考前还会安排一次答疑课, 具体时间待定.  
何老师也会来, 给务请各位参加.



**预祝各位考试顺利!**