

21 世纪高等院校教材
普通物理教程之五

原子物理学

陈宏芳 编著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书是普通物理之原子物理学课程的教材,全书注重通过基本的物理现象和实验事实的介绍、简单的理论推导,用量子的观点和方法将物理概念解释清楚.全书包括原子、原子核、基本粒子以及分子物理等部分.

本书适合于理工科以及师范院校物理、应用物理专业的本科生使用,也可作为理科非物理专业相关课程的教材.

图书在版编目(CIP)数据

原子物理学/陈宏芳编著.—北京:科学出版社,2006

21世纪高等院校教材·普通物理教程之五

ISBN 7-03-016032-0

I.原… II.陈… III.原子物理学-高等学校-教材 IV.O562

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 085556 号

责任编辑:张邦固 昌 盛 / 责任校对:李奕莹

责任印制:张克忠 / 封面设计:陈 敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2006 年 4 月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2006 年 4 月第一次印刷 印张: 21 3/4

印数: 1—5 000 字数: 412 000

定价: 28.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

序

今年是世界物理年. 中国科学技术大学的几位教授编写的这套普通物理教材即将与读者见面, 是对物理年的一份厚礼.

物理学是整个近代科学技术的基础, 它是培养和提高学生科学素质、创新思维方法和科学研究能力的重要基础课. 中国科学技术大学创办几十年来, 培养出了大批的优秀人才, 他们基础厚实、思维活跃、具有开拓精神、后劲足, 受到了国内外用人单位的称赞. 科大办学的成功经验之一就是科大自创办以来一直十分重视数学、物理等基础课教学. 几十年来科大积累了丰富的基础课教学经验, 编写这一套普通物理教材的几位教授都已在科大执教几十年, 他们一边从事教学, 一边从事科研, 这套教材是他们几十年教学成果的结晶. 在这套书中作者较好地处理了下面几个关系:

一、经典物理和近代物理的关系. 在书中他们强调经典物理的基本理论和基本规律的系统性和完整性, 但尽量砍去枝蔓、压缩篇幅, 同时对内容结合紧密又较易延伸的有关近代物理内容增加了有关章节和段落.

二、理论与实际的关系. 在保持物理学基本规律和基本理论的系统性的同时, 在选择例题和习题时, 作为基本原理和基本规律的应用, 尽可能联系实际, 特别是增加与近代高技术相联系的内容.

三、物理和数学的关系. 作为普通物理, 他们既重视物理图像、物理概念的阐述, 同时也具有一定的数学深度, 以提高学生解决实际问题的能力.

四、传播知识和培养学生素质之间的关系. 在书中他们注重对学生的科学素质和创新力思维方法的培养, 使学生逐步领悟和掌握物理学中每解决一个关键问题时, 如何提出问题、建立模型、发现规律、创立理论等一整套思维方法和实验分析手段, 使学生既要看到物理学发展史中科学家的作用, 又要懂得科学的发展是一个继承和积累的过程. 在书中介绍了一些重要科学家在为科学做出重大贡献时所表现出来的特殊品格和献身精神, 使学生得到启迪.

今天, 这套书与读者见面了, 我对科大几十年来物理教学的这一成果感到由衷的高兴, 盼望今后更多的好教材层出不穷.

杨国桢

2005年11月

前 言

本书是普通物理之原子物理学课程的教材,其内容是关于物质的微观结构.

微观物理的研究引起了物理领域思想和概念的革命,一些基本的经典物理概念不得被放弃.在原子和量子物理的基础上发展出一些与物理相关的前沿学科,并且它也是其他领域的重要基础.原子和亚原子物理中的一些实验方法和技术,例如,由讨论电子自旋和原子核自旋的概念引入的自旋共振,在近代物理、化学、材料科学和生物的研究中成为了一种基本的实验技术和方法,核磁共振断层扫描和正电子发射断层扫描在医学诊断中也已被广泛使用.微观物理发展中产生的一些新技术和新方法已广泛应用于其他学科,与工农业生产和日常生活都密切相关.各学科的相互交融和渗透已是普遍的现象,因此掌握微观物理的实验及理论的基本知识对于理工科学生来说,是非常重要的.

本教材的内容包含有原子、原子核、基本粒子和分子物理部分.全书注重通过基本的物理现象和实验事实、简单的理论推导,用量子观点和方法把物理概念解释清楚.对于量子力学的基本内容,本书只作简要地介绍,并不要求学生掌握量子力学中过多的数学计算和证明.教材中注意介绍近代物理发展中一些具有创新精神的重要实验及一些大胆的新思想的形成和发展过程,希望能对培养学生思维能力和独立思考能力有所启发.

教材中原子物理和分子结构是基本内容,原子核物理和粒子物理中取材略广一些,可根据学时安排和各专业的要求选择内容.

由于时间仓促,加之编者的水平有限,错误在所难免,欢迎读者批评指正.

陈宏芳

2005年5月

目 录

序 前言

第 1 章 玻尔原子模型	1
1.1 原子的核式结构	1
1.1.1 电子的发现	1
1.1.2 α 粒子散射实验	4
1.1.3 卢瑟福核式模型	6
1.2 原子光谱.....	12
1.2.1 光谱	12
1.2.2 氢原子光谱和光谱项	12
1.3 玻尔氢原子理论.....	15
1.3.1 原子行星模型的困难	16
1.3.2 玻尔假设.....	18
1.3.3 玻尔氢原子模型	19
1.4 类氢原子.....	24
1.4.1 原子核质量的影响	24
1.4.2 类氢离子光谱	27
1.4.3 特殊的类氢原子	28
1.5 弗兰克-赫兹实验	29
习题	33
第 2 章 量子力学的初步介绍	35
2.1 波粒二象性.....	35
2.1.1 光的二象性	35
2.1.2 实物粒子的波动性	41
2.2 物质波的统计解释和海森伯不确定原理.....	45
2.2.1 波函数的统计解释	45
2.2.2 海森伯不确定原理	48
2.3 薛定谔方程.....	51
2.3.1 薛定谔方程的建立	51
2.3.2 定态薛定谔方程	54

2.4	力学量的平均值、算符表示和本征值	55
2.4.1	力学量的平均值	55
2.4.2	力学量的算符表示	57
2.4.3	力学量的本征值	58
2.5	定态薛定谔方程解的几个简例	59
2.5.1	阶跃势、势垒和隧道效应	59
2.5.2	一维无限深势阱	65
2.5.3	一维谐振子势	68
	习题	71
第3章	单电子原子	74
3.1	氢原子的定态薛定谔方程解	74
3.1.1	中心力场薛定谔方程及其解	74
3.1.2	概率密度	80
3.1.3	原子波函数的宇称	84
3.2	量子数的物理解释	84
3.2.1	主量子数 n 、单电子原子的能级	84
3.2.2	轨道角动量及量子数 l	87
3.2.3	磁量子数 m_l	88
3.2.4	角动量的矢量模型	89
3.3	跃迁概率和选择定则	90
3.3.1	原子处在定态时不发射电磁辐射	90
3.3.2	原子跃迁和混合态	90
3.3.3	跃迁率、平均寿命	92
3.4	电子自旋	96
3.4.1	轨道磁矩	96
3.4.2	塞曼效应	98
3.4.3	施特恩-格拉赫实验	100
3.4.4	电子自旋	102
3.5	自旋和轨道相互作用	104
3.5.1	自旋-轨道耦合能	105
3.5.2	总角动量和原子磁矩	106
3.6	单电子原子能级的精细结构	109
3.6.1	精细结构	109
3.6.2	兰姆移位及超精细结构	114
	习题	118

第 4 章 氦原子和多电子原子	121
4.1 氦原子的能级	121
4.1.1 氦原子的光谱和能级	121
4.1.2 氦原子能级的简单讨论	122
4.2 全同粒子和泡利不相容原理	125
4.2.1 全同粒子与波函数的交换对称性	125
4.2.2 泡利不相容原理	127
4.2.3 交换效应	128
4.3 多电子原子的电子组态	131
4.4 原子的壳层结构和元素周期表	134
4.4.1 原子中电子的壳层结构	135
4.4.2 电子壳层的填充	136
4.4.3 满支壳层电子组态	142
4.5 多电子原子的原子态和能级	143
4.5.1 LS 耦合	144
4.5.2 jj 耦合	154
4.6 多电子原子的光谱	155
4.6.1 选择定则	155
4.6.2 碱金属原子的光谱	156
4.6.3 碱土金属原子光谱	158
4.7 原子的内层能级和 X 射线	159
4.7.1 X 射线谱	159
4.7.2 原子的内层能级	162
4.7.3 X 射线的吸收	164
4.7.4 同步辐射	165
习题	167
第 5 章 原子核物理	170
5.1 原子核的基本性质	170
5.1.1 原子核的组成	170
5.1.2 原子核的大小	172
5.1.3 原子核的自旋和核磁矩	174
5.1.4 原子核的电四极矩	177
5.1.5 原子核的宇称	179
5.2 原子核的稳定性和结合能	180
5.2.1 核素图和 β 稳定线	180

5.2.2	原子核的结合能	181
5.3	核力与核结构模型	186
5.3.1	核力	186
5.3.2	原子核结构的模型	189
5.4	核衰变及放射性	194
5.4.1	原子核衰变的一般规律	194
5.4.2	α 衰变	200
5.4.3	β 衰变	203
5.4.4	γ 衰变	207
5.4.5	放射性的应用	210
5.5	核反应	215
5.5.1	核反应中的守恒定律及反应能 Q	217
5.5.2	反应截面	219
5.6	原子核的裂变和聚变	220
5.6.1	原子核的裂变	220
5.6.2	核聚变	225
	习题	230
第 6 章	粒子物理	232
6.1	高能加速器和粒子探测器	232
6.1.1	加速器简介	233
6.1.2	粒子探测器	236
6.2	粒子的基本性质和分类	236
6.2.1	粒子的基本性质	236
6.2.2	粒子的分类	238
6.3	强子的夸克模型	249
6.3.1	夸克的基本性质	254
6.3.2	重子和介子的夸克组成	256
6.3.3	夸克的色量子数	258
6.4	相互作用与守恒定律	260
6.4.1	电磁相互作用	261
6.4.2	弱相互作用	262
6.4.3	强相互作用	267
6.4.4	守恒定律与对称性	271
6.5	标准模型及新物理	277
6.5.1	基本粒子和基本相互作用	277

6.5.2 大统一理论及超对称	278
6.6 粒子物理与宇宙学	280
6.6.1 宇宙微波背景和氦的相对丰度	282
6.6.2 粒子宇宙学中的一些疑难问题	284
习题	286
第 7 章 分子结构和双原子分子光谱	288
7.1 分子的化学键	288
7.1.1 离子键	288
7.1.2 共价键	290
7.2 分子能级	297
7.3 双原子分子的光谱	298
7.3.1 转动能级和光谱	298
7.3.2 振动能级和光谱	302
7.3.3 分子的电子能级和光谱带	306
7.4 拉曼散射和拉曼光谱	310
7.4.1 拉曼光谱	311
7.4.2 拉曼散射的量子解释	312
7.4.3 双原子分子气体的拉曼谱	313
7.4.4 原子核自旋对分子能态的影响——同核双原子分子的拉曼谱	315
习题	319
附录	321
I 物理常数	321
II 元素周期表	323
III 诺贝尔物理学奖获得者(1901~2005)	324
习题答案	331

第 1 章 玻尔原子模型

中国古代的哲学家早在周代就提出五行说,即万物都是由金、木、水、火、土五种物质构成的学说.古希腊人认为水、火、空气和泥土是构成物质的基本元素.原子这个名词最早是在公元前四五世纪由希腊哲学家德谟克利特(Democritus)提出的,“原子”在希腊语中是“不可再分割”的意思,也就是认为原子是物质分割的极限,是组成物质的最小单元.直到 18、19 世纪,在气体分子运动理论和化学反应实验中发现的定比定律、倍比定律的基础上,道尔顿(J. Dalton)于 1803 年提出物质由分子组成,分子是保持物质化学性质的最小单元,而分子又由一种或几种化学元素的原子组成.原子是化学元素的最小单元.1811 年,阿伏伽德罗(A. Avogadro)在道尔顿的原子论及盖·吕萨克(J. Gay-Lussac)的关于化学反应气体的体积有简单的比例关系的基础上提出阿伏伽德罗定律,即在同样的温度和压力条件下,同体积的任何气体含有的分子数相同.实验给出,在标准条件下(0°C 和 1 个大气压),1 克分子质量(1 mol 质量)气体的体积为 22.4 升,且在这体积中总是含有一定数目的分子,这个数称阿伏伽德罗常量,即

$$N_{\text{A}} = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

这些思想形成了物质的原子论.可测得原子的质量及估算原子的大小(约 10^{-10} m).1869 年,门捷列夫(D. I. Mendeleev)指出,假如将元素按原子量大小的次序排列,则元素的性质呈现出周期性的行为.对这种现象,原子论几乎不可能对它作出解释.元素周期表显示出原子似乎并不是简单地不可分的物质最小单元.今天我们已经清楚知道,原子只是物质结构的一个层次,原子本身也是有结构的.本章主要讨论原子的构成及一些早期的原子模型和原子光谱的基本规律,在这基础上再介绍玻尔的氢原子理论.

1.1 原子的核式结构

1.1.1 电子的发现

气体放电管在早期现代原子物理的发展中起了特殊的重要作用,今天仍然用在激发原子和粒子束产生等方面.图 1.1.1 是气体放电管的示意图.一般在管子内充以几毫米汞柱(mmHg)压力的气体,在阴极和阳极之间加上几百到几千伏的电压,管内在两个电极间的区域就会出现辉光,这取决于气体的种类及气压.在阳极附近的荧光屏上可以观察到荧光,其斑点的大小和阳极上小孔的大小有关.1859

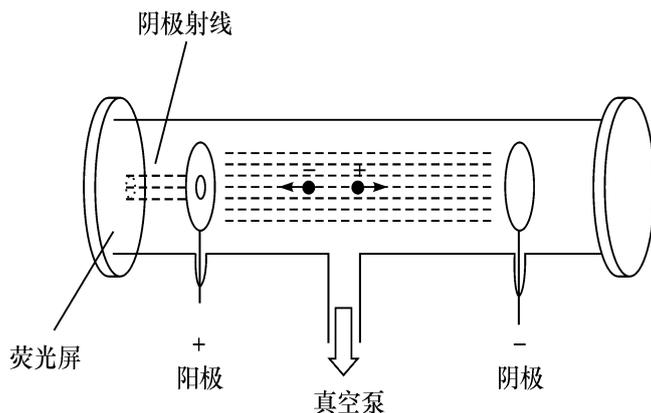


图 1.1.1 气体放电管示意图

年,普吕克(J.Plucker)首先发现了这种射线,并称它为阴极射线.他认为它是由阴极发出的射线,后来进一步的研究才知道实际上这是在气体放电区产生的.实验还发现阴极射线在电场和磁场中会偏转,由偏转的方向证明阴极射线是带负电的,当时对射线的性质到底是粒子还是波,存在有不同的观点,英国物理学家汤姆孙(J.Thomson)认为阴极射线是高速运动的带负电的粒子流.他设计了如图 1.1.2

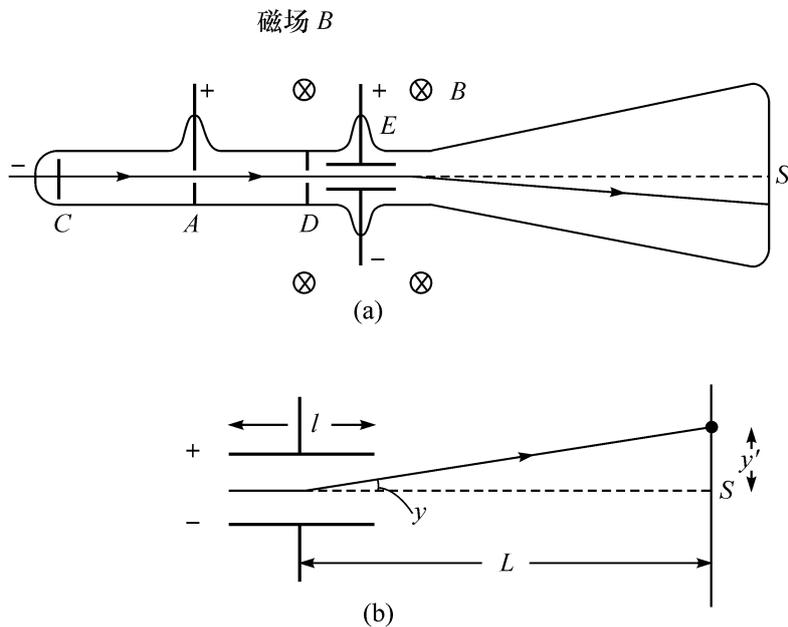


图 1.1.2 汤姆孙测量电子荷质比实验装置示意图

的实验装置,一个充以稀薄气体的玻璃管中有几个电极,在阴极 C 和阳极 A 之间加上高压,阴极射线穿过空心阳极和狭缝 D,通过平行板电极中间的电场区,到达管子右端带有标尺的荧光屏 S 上.当平行板间电场为零时,射线打在标尺的零点.如果在平行板空间加一个方向由纸面向下的磁场,则细束向下偏转.若在平行板之间加上如图示极性的电压 V,电场为 E 时,则细束向上偏转 h.调节磁场强度 B,使细束在电场和磁场的作用下回到标尺零点.由电场、磁感应强度和几何尺寸可测

定射线粒子的荷质比. 设平行电极板长度为 l , 极板中点到荧光屏的距离为 L , 则可以证明

$$\frac{e}{m} = \frac{Eh}{LlB^2} \quad (1.1.1)$$

式中, e 、 m 分别是带电粒子的电荷和质量. 在 1897 年他测定了组成阴极射线的粒子的荷质比. 当时的测量值为

$$\frac{e}{m} = 7.6 \times 10^{10} \text{ C/kg}$$

他在各种不同条件下, 如放电管中充不同的气体、用不同的电极材料进行实验, 测量的结果都是相同的值. 这些结果说明这种粒子是各种元素的原子都共有的. 而它的荷质比值却比氢离子的荷质比值(可用电解方法测得)

$$\frac{e}{m} = 9.6 \times 10^7 \text{ C/kg}$$

约大 1000 倍. 因此这种粒子不可能是离子, 只能是一种新粒子, 这种粒子叫电子, 它应是物质的一个组成成分.

1899 年, 汤姆孙利用威耳逊(T. Wilson)发明的云雾室测定电子的电荷. 测量结果表明电子电荷和氢离子电荷相近, 为 $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$. 更精确的测量给出电子的荷质比为 $1.758 \times 10^{11} \text{ C/kg}$, 由此可得电子的质量 $m_e \approx 1/1836$ 氢原子质量.

实际上, 电子的发现是一个长期的工作, 经历了许多物理学家的努力, 在改进阴极射线管装置, 确定它的电荷性质等方面, 很多人做了工作. 1894 年, 斯托尼(J. Stoney)就给阴极射线的粒子命名为电子. 但电子的发现最后是以 1897 年汤姆孙对电子荷质比的测定为标志的, 汤姆孙因此而获得 1906 年的诺贝尔物理学奖.

电子是组成原子的一个成分. 电子带负电而原子又是中性的, 那么原子中一定有带正电的部分, 而且电荷大小和电子的总电荷相等. 此外, 电子质量很小, 只占原子质量的很小的一部分, 原子质量几乎全由带正电的部分承担. 那么原子中的正、负电荷是怎样分布的呢?

汤姆孙提出了一个原子模型, 他认为原子中的正电荷分布在整个原子空间, 即在一个半径 $R \approx 10^{-10} \text{ m}$ 的区间, 电子则嵌在布满正电荷的球内, 由于电子间的相互作用, 电子均匀分布在正电荷球内. 当原子处于最低的能量状态时, 电子处在其平衡位置上. 当原子被激发时, 电子偏离平衡位置, 由于和正电荷之间的静电力, 使它在平衡位置附近作简谐振动. 按照经典的电磁理论, 作加速运动的带电物体将发射电磁辐射, 所发射的电磁辐射的频率应等于简谐振动的频率. 简单的估算可给出辐射频率约在紫外和可见光区, 因此能定性解释原子的辐射特征. 但是根据这样的估算, 原子只发射一种频率的电磁辐射. 而实验测到的原子辐射却是一系列不同频率的线谱.

1.1.2 α 粒子散射实验

为研究原子内部的结构和电荷分布,人们很自然地想利用高速粒子去轰击原子,根据入射粒子的散射情况来了解原子内部的情形.物理学家曾尝试过用电子撞击原子,1890年勒纳德(P. Lenard)研究阴极射线时,在射线管上装一薄铝窗,使阴极射线从管内穿出进入空气,发现电子在空气中射程约为几厘米.如果认为原子是一个实体,电子不能穿过原子,电子在空气中散射的自由程应该是在 10^{-5} cm 的量级.勒纳德的实验结果显示原子并不是完全不可穿透的,但难以得出定量的结论.

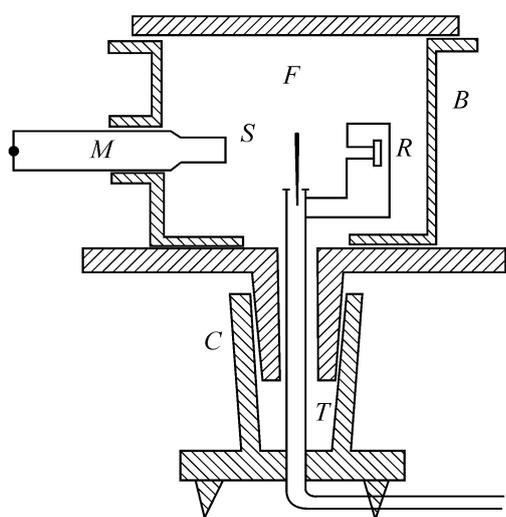


图 1.1.3 α 粒子散射实验装置

R— α 放射源; B—真空容器;

F—铅箔金属条; S—荧光屏; M—显微镜

1896年,贝克勒尔(H. Becquerel)发现了放射性现象,并将一种带正电的射线称 α 射线.卢瑟福(E. Rutherford)对 α 射线进行了系统的研究.其中一个重要工作是确认了 α 射线实际上是高速运动的带两个正电荷的氦离子,它的质量 $M_\alpha \approx 7300 m_e$.他曾因此项工作而在1908年获得了诺贝尔化学奖.卢瑟福还首先发明用 α 粒子打在荧光屏上,通过对发光次数的计数来确定入射 α 粒子的数目的方法.1909年卢瑟福和他的助手盖革(H. Geiger)及学生马斯登(E. Marsden)在做 α 粒子和薄箔散射实验时,观察到绝大部分 α 粒子几乎是直接穿过铅箔,但偶然有一些 α 粒子发生大角度散射.为了得到

更精确的结果,他们用如图 1.1.3 的装置进行实验测量.得到的结果可归纳如下:

- (1) 绝大多数 α 粒子经铅箔散射后,只有很小角度的偏转,偏转角小于 2° .
- (2) 有约 $1/8000$ 的 α 粒子,它的散射角大于 90° .

为何会出现这样的实验结果?用当时在英国被公认的汤姆孙原子模型根本无法解释,因为他认为原子是一个半径为 R 的球,正电荷 Ze 是均匀分布在球内的.若不考虑原子内电子的影响, α 粒子在($r < R$)处受到的库仑力为 $F_c = \frac{2Ze^2 r}{4\pi\epsilon_0 R^3}$,即离球心越近所受库仑力越小,因此若在中心附近穿过原子, α 粒子几乎不偏转.而在原子外,因为原子是中性的, α 粒子和原子间几乎没有相互作用力,但在球面处它受的库仑力为 $F_c = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R^2}$,这时受到的作用力为最大.由运动学的计算,可以得到,即使 α 粒子在球面处也只能发生小角度散射.而且多次小角度散射也不可能引起大角度散射.

例 1.1.1 设入射 α 粒子的能量 5 MeV, 散射体为厚 $1 \mu\text{m}$ 的铂箔, 用汤姆孙原子模型估计散射 α 粒子的偏转角, 及发生大于 90° 角散射的概率.

解 设原子的半径 $R \approx 10^{-10} \text{ m}$.

(1) 计算 α 粒子和原子的单次碰撞.

由上文已知 α 粒子只有在原子表面处受到的库仑力最大, 因此它的散射角也最大.

我们对这种情形作估算:

α 粒子穿过原子时, 动量 p 的改变量可近似为

$$\Delta p \approx p\theta$$

θ 为偏转角. 根据牛顿定理

$$\Delta p \approx p\theta = F\Delta t$$

其中, Δt 为 α 粒子飞越原子的时间, 可近似为 $\frac{R}{v}$, v 是 α 粒子的速度, 对 5 MeV 的 α 粒子可用非相对论运动学处理, 能量 $E = \frac{1}{2}mv^2$, 于是

$$\theta \approx \frac{F\Delta t}{p} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 Rmv^2} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 RE}$$

铂原子的 $Z=78$, 将数字代入得到 $\theta_1 = 2 \times 10^{-4} \text{ rad} = 0.01^\circ$.

由此可见, 散射角是非常小的.

(2) 在 α 粒子穿过铂箔时会和许多原子碰撞, 实际是一个多次散射过程, 因此最后穿过散射体时的偏转方向是随机的, 它服从统计规律. 多次散射后的偏转角的分布应服从高斯分布, 于是 α 粒子散射在 $(\theta, \theta + d\theta)$ 之间的概率为

$$f(\theta)d\theta = \frac{1}{\sqrt{2\pi\overline{\theta^2}}} \exp\left(-\frac{\theta^2}{\overline{\theta^2}}\right)d\theta$$

其中 $\overline{\theta^2}$ 是散射角的均方值, 由(1)的估算可得单次碰撞的偏转角 θ_1 , 多次散射后散射角的均方值

$$\overline{\theta^2} = N\theta_1^2$$

其中, N 是碰撞次数, 若设原子排满在铂箔内, 由箔厚可算得

$$N \approx 10^{-6}/10^{-10} = 10^4$$

所以 $\sqrt{\overline{\theta^2}} = 100 \times 0.01^\circ = 1^\circ$. 可见散射的 α 粒子分布在很小偏转角范围内.

(3) 由上式积分可计算经多次散射后发生大角散射的频率:

若 $\theta > 6^\circ$, 概率小于 2×10^{-8} ;

若 $\theta > 90^\circ$, 概率小于 10^{-2000} . □

1.1.3 卢瑟福核式模型

1. 原子的核式模型

对散射实验的结果经过近两年的分析,卢瑟福在 1911 年提出原子的核式模型;原子中的正电荷集中在原子中心很小的区域内,并且原子的几乎全部质量也集中在这一区域,电子则分布在这一区域外面.这个正电荷部分称为原子核.

当 α 粒子射向原子时,由于 α 粒子质量比电子大得多,它和电子的相互作用几乎对它的运动没有影响,因此可暂不考虑.由于原子中的正电荷是集中在很小的区域内, α 粒子进入原子时,它基本上总是在原子核外,因此受到全部正电荷的作用,然而它与正电荷的距离可以很小.这样正电荷对它的库仑作用力可以很大,因而有可能发生大角度散射.

2. 散射公式

由核式模型可定量地解释散射实验的结果.我们先计算单个靶原子对入射 α 粒子的散射角.设靶原子的质量为 M ,具有正电荷 Ze .质量为 m 、能量为 E 、带有 ze 正电荷的 α 粒子以速率 v_0 射向靶原子,如图 1.1.4 的所示.如上所述,由于原子内的电子和 α 粒子的库仑作用所引起的散射角度极小,所以对大角度散射,只要考虑 α 粒子和原子核的相互作用. α 粒子和原子核都可看作是点电荷粒子,两者间的相互作用力为点电荷间的库仑力. α 粒子以 v_0 从 ∞ 处射向靶原子,设 α 粒子入射方向与原子核之间的垂直距离为 b , b 称作瞄准距离或碰撞参数.对由重原子组成的靶, $m \ll M$,可以假定在散射过程中原子核基本上不运动.我们将坐标原点取在原子核上, α 粒子和原子核间的矢径为 r ,库仑力 F 是有心力,其作用力沿 r 方向,在散射过程中作用在 α 粒子上的力矩为零,因此 α 粒子对原点的角动量守恒.具体计算表明, α 粒子的轨迹是一双曲线.双曲线的两条渐近线的夹角 θ 即散射角.我们只要算出 α 粒子散射到无穷远处其垂直于入射方向上的速率分量 $v_{\perp\infty}$,即可求得散射角.

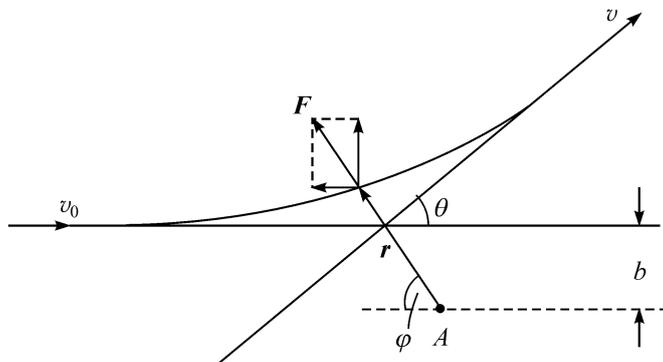


图 1.1.4 α 粒子库仑散射示意图

已知 α 粒子初速度为 v_0 , 所以动量为 mv_0 , 角动量 $L = mv_0 b$. 在散射过程中原子核对 α 粒子的作用力 F 在垂直于入射方向上的分量

$$F_{\perp} = F \sin \varphi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{zZe^2}{r^2} \sin \varphi$$

$$F_{\perp} dt = m dv_{\perp}$$

$$dv_{\perp} = \frac{F_{\perp}}{m} dt = \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 m} \frac{\sin \varphi}{r^2} dt$$

由角动量守恒

$$L = mr^2 \frac{d\varphi}{dt} = mv_0 b$$

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{v_0 b} \frac{d\varphi}{dt}$$

$$dv_{\perp} = \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0 b} \sin \varphi d\varphi$$

由图 1.1.4 可知, α 粒子入射时 $v_{\perp} = 0$. α 粒子和靶原子是弹性散射, 而且 $M \gg m$ 可认为原子核在散射过程中不动, 由于动量守恒, α 粒子散射到无穷远处, 其动量值为 mv_0 , 散射角为 θ , 所以它在垂直方向的速率为

$$v_{\perp\infty} = v_0 \sin \theta$$

$$v_0 \sin \theta = \int_0^{\pi-\theta} \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0 b} \sin \varphi d\varphi = \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0 b} (1 + \cos \theta)$$

$$\frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} = 4\pi\epsilon_0 \frac{m v_0^2}{zZe^2} b = \cot \frac{\theta}{2}$$

整理后得

$$\cot \frac{\theta}{2} = 4\pi\epsilon_0 \frac{m v_0^2}{zZe^2} b = \frac{2b}{D} \quad (1.1.2)$$

$$D = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{2zZe^2}{m v_0^2} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{zZe^2}{E} \right) \quad (1.1.3)$$

在 E 一定时, 瞄准距离 b 越小则散射角越大. 但实验时不可能测量单个 α 粒子对单个靶原子的瞄准距离, 实验测到的是大量 α 粒子和大量靶原子的散射事件, 实验的数据应服从事件的统计规律. 所以, 我们要由模型推出散射的 α 粒子数和散射角的关系, 这才能和实验结果比较. 由式(1.1.2)可知, 如果 α 粒子打在瞄准距离($b, b+db$)的圆环内, 则 α 粒子必定散射在张角为($\theta, \theta-d\theta$)的锥壳所对应的立体角内. 如图 1.1.5 所示. 显然, α 粒子射在($b, b+db$)区域的概率和圆环的面积成正比, 圆环面积为

$$d\sigma = 2\pi b |db| \tag{1.1.4}$$

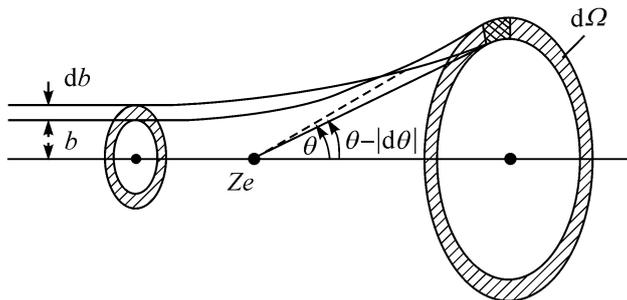


图 1.1.5 瞄准距离与散射角的关系

由式(1.1.2)微分得

$$db = -\frac{D}{4} \cdot \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} d\theta$$

将它代入式(1.1.4),则得

$$d\sigma = 2\pi b |db| = \frac{\pi D^2}{4} \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{\sin^3 \frac{\theta}{2}} d\theta$$

由几何关系可知 $(\theta, \theta - d\theta)$ 所对应的立体角 $d\Omega$ 为

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

代入上式得

$$d\sigma = \frac{D^2}{16} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} d\Omega \tag{1.1.5}$$

$d\sigma$ 代表入射粒子被一个靶原子散射到 θ 方向的 $d\Omega$ 内概率, 那 $\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}$ 就表示散射到 θ 方向上单位立体角内的概率, 式(1.1.5)称作原子的微分散射截面公式. 所以, $\frac{\sigma}{1}$ 就代表入射粒子被一个靶原子散射的概率. σ 的量纲是面积, 通常以靶恩作单位, 1 靶恩(b)等于 10^{-24} cm^2 .

如果 α 粒子射在一个薄靶上, 靶的厚度为 t , 面积为 A , 单位体积中所含有的原子数为 N (原子数/ cm^3). 如果靶很薄, 可以认为对入射 α 粒子来说靶内的原子核相互不重叠. 因此在瞄准距离为 b 时, 所有原子的有效面积为

$$dA = 2\pi b(db) NtA$$

入射 α 粒子射在有效面积的概率为

$$\frac{dA}{A} = 2\pi bNt(db) = Nt(d\sigma)$$

若入射 α 粒子数为 n , 散射到 θ 方向上的粒子数为 dn , 则散射到 θ 方向上的概率为

$$\frac{dn}{n} = Ntd\sigma$$

粒子散射在单位立体角内的概率

$$\frac{dn}{nd\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot Nt = \frac{D^2}{16} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \cdot Nt$$

用式(1.1.3)代入, 则

$$\frac{dn}{nd\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{zZe^2}{4E}\right)^2 \cdot Nt \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (1.1.6)$$

这样, 由实验条件给定的参数 (n, E, N, t, Z), 就可给出理论预期值. 而通过实验测量散射粒子的数目, 就可以由实验验证公式的正确性. 而且由实验数据测得的 (dn), 也可以推得原子的散射微分截面

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dn}{n \cdot Nt \cdot d\Omega}$$

例 1.1.2 设将 10^6 个能量为 5.3 MeV 的 α 粒子打在厚 $1 \mu\text{m}$ 的金箔上, 金的原子序数 $Z=79$, 原子量 $A=197$, 密度 $\rho=1.93 \times 10^4 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$. 离金箔距离 L 为 10 cm 处, $\theta=20^\circ$ 方向有一个面积 S 为 1 cm^2 的计数器. 求散射进计数器的 α 粒子的数目.

解 计数器对散射靶所张的立体角

$$\Delta\Omega = \frac{S}{L^2} = 0.01$$

而

$$\begin{aligned} \frac{dn}{nNt} &= \frac{d\sigma}{d\Omega} \times \Delta\Omega = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{zZe}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \Delta\Omega \\ &= (1.44 \text{ eV} \cdot \text{nm})^2 \left(\frac{2 \times 79}{4 \times 5.3 \times 10^6}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(10^\circ)} \times 0.01 \\ &= 1.27 \times 10^{-27} \text{ m}^2 = 0.00127 \text{ b(靶恩)} = 1.27 \text{ mb(毫靶恩)} \end{aligned}$$

单位面积内的靶原子数为

$$Nt = \frac{\rho N_A}{A} t = 5.9 \times 10^{22} \text{ m}^{-2}$$

所以

$$dn = nNt \times \frac{d\sigma}{d\Omega} \times \Delta\Omega = 75$$

即散射进计数器的粒子数为 75 个。

3. 散射公式讨论

由公式(1.1.6)可得到如下的结论：

(1) 在同一粒子源和同一散射物的情况下， $\frac{dn}{d\Omega}$ 和 $\sin^4 \frac{\theta}{2}$ 成反比。这是卢瑟福散射理论最重要的特点。这也是点粒子间库仑作用散射的基本特点（设靶粒子质量 $\rightarrow \infty$ ）。

(2) 在相同散射角 θ 情形下，散射粒子数和靶厚成正比，即 $\frac{dn}{d\Omega} \propto t$ 。

(3) 对同一散射物，在同样散射角 θ 时，散射粒子数和入射粒子能量的平方成反比，即

$$\frac{dn}{d\Omega} \propto \frac{1}{E^2}$$

(4) 对同一 α 源，在同一散射角下，对不同的靶材料，只要 Nt 相同，则

$$\frac{dn}{d\Omega} \propto Z^2$$

1913 年，盖革和马斯登用能量 ~ 5 MeV 的 α 粒子打靶的实验来检验散射公式，证实当散射角在 $5^\circ \sim 15^\circ$ 的范围内，前三个结论都和实验相符。1920 年查德威克(J. Chadwick)在改进了盖革和马斯登所用仪器的基础上，利用此公式测定了几种原子的 Z ，所得的 Z 值与这些元素的原子序数相符。从而证实了原子核的电荷数 Z 就等于该元素在周期表中的原子序数。 α 粒子散射实验表明卢瑟福散射公式是正确的，从而确立了原子的核式结构模型。

由卢瑟福散射公式与实验数据相符的角度范围，可以对原子核的大小作出估计。由图 1.1.5 可知散射角越大，入射粒子能达到的和原子核的最小距离 r_m 就越小。由 r_m 可以给出原子核半径的上限。设入射粒子的电荷为 z ，入射粒子离原子核最近处，即 $r = r_m$ 时的速率为 v' 。由角动量守恒，得

$$mv_0 b = mv' r_m$$

$$v' = \frac{v_0}{r_m} b = \frac{v_0}{r_m} \cdot \frac{D}{2} \cot \frac{\theta}{2}$$

代入能量守恒公式

$$\frac{1}{2} m v'^2 + \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 r_m} = \frac{1}{2} m v_0^2$$

得

$$r_m = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{1}{\sin \frac{\theta}{2}} \right) \quad (1.1.7)$$

由上式可知, D 就是 $\theta=180^\circ$ 时, 即对心碰撞时能达到的最小距离. 对金靶 (Au), $Z=79$, α 粒子 $E=5.3 \text{ MeV}$, $D=4.3 \times 10^{-12} \text{ cm}$. 若散射实验数据在 150° 时仍和理论公式符合, 则 $r_m=4.4 \times 10^{-12} \text{ cm}$. 而原子半径 $R \approx 10^{-8} \text{ cm}$, $\frac{r_m}{R} \approx 10^{-4}$. 所以在 E 不是很大时, 可以把原子核看作是点粒子. 这也说明卢瑟福散射公式推导时假设原子核互不遮挡是合理的.

由于在散射公式的推导过程中曾作了一些简化, 下面对两种情形分别来讨论由简化带来的影响:

(1) 在散射角很小的情况, 由公式(1.1.6)可得, 当 $\theta \rightarrow 0$ 时, $\frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \rightarrow \infty$, 因而

截面 $\rightarrow \infty$, 这结论在物理上是荒谬的. 出现这样不合理的结果是由于在公式推导中, 重点是讨论大角度散射, 所以忽略了电子的影响. 对 θ 很小的情况, 其相应的瞄准距离 b 就很大, 而当 b 大于原子半径时, α 粒子在原子外面穿过, 上面讨论的单原子微分截面已无意义. 因为原子是电中性的, α 粒子和原子间已无库仑作用. 另外这时也不再可以假设靶原子之间互不遮蔽, 所以卢瑟福散射公式不再成立. 小角度散射实际上必定是多次散射的结果. 因此, 在很小角度时实验数据和公式不符并不影响核式模型.

(2) 散射公式(1.1.6)是在假设原子核不动即无反冲的简化条件下推出的. 当考虑核反冲的实际情况时, 卢瑟福散射公式在质心坐标系仍然成立. 式中所有物理量都用质心系的数值. 这时散射粒子的能量 E 也不再是入射能量 E_0 了. 对弹性散射, 若入射粒子的质量为 m , 靶原子的质量为 M , 则由动量和能量守恒可导出

$$E = \left(\frac{m \cos \theta + \sqrt{M^2 - m^2 \sin^2 \theta}}{m + M} \right)^2 E_0 \quad (1.1.8)$$

由式可知, E 和散射角及靶原子质量 M 有关, 在散射角大于 90° 时, E 和 E_0 的差别比较大. 当 E_0 一定时, 在固定散射角下测量散射粒子的能量 E , 可以确定靶原子的质量, 由此可确定靶物质的成分. 对散射角大于 90° 的散射称作卢瑟福背散射. 这种方法在材料分析中有很多的应用.

1.2 原子光谱

1.2.1 光谱

牛顿在 1666 年观察到,通过小孔的太阳光在透过棱镜时其后面形成一条彩色带.他称这条彩色带为太阳光的光谱.电磁辐射的强度按频率(或波长)分布的记录称为光谱.通常用棱镜或光栅作为分光器测定光的波长,并通过光探测器记录其相应的强度,测量光谱的仪器叫光谱仪.光谱可以提供的信息的多少主要取决于光谱测量的灵敏度和分辨率.近年来,发展了利用光干涉原理的傅里叶变换光谱仪,它能有效地利用光源的辐射能量,有较高的光谱分辨率和测量精度.激光的出现,以激光器代替传统光源的激光光谱技术,使光谱的分辨率,时间分辨率和光谱灵敏度都有数量级的提高.伴随调谐激光器的发展,其中最重要的是染料激光器,使光谱可覆盖 300~1000 nm 的波长,倍频和混频技术又进一步扩充了这个范围.稳定的单模激光器提供谱线非常窄的单色光,并且单色亮度高,时间特性好的光源,可用来研究快速、动态过程.光谱包含的信息十分丰富.

19 世纪时,人们已经积累了丰富的关于光谱的知识,基尔霍夫(G. Kirchhoff)和本生(R. Bunsen)提出,太阳光谱中的许多暗线是太阳外表较低温度大气的吸收谱线.这些暗线有的与地球上的一些元素的谱线相对应.由光源发射出的光谱一般称为发射光谱.研究发现,固体加热后发出的是连续光谱.通常原子发射的是线光谱,就是说只包含一系列分立波长的光,在光谱仪的屏幕上出现一系列分立的狭缝的像,像一系列分立的细线.分子发射的光谱,其谱线是分段密集的,呈一系列宽度不等的光带,故称带光谱.波长连续分布的光通过物质时,其中某些波长的光被物质所吸收.把要研究的物质放在发射连续光谱的光源和光谱仪之间,在光谱仪上所测得的光谱将是在连续的背景上出现由暗线或暗带组成的光谱.这种光谱称为该物质的吸收光谱.对于每一种元素都具有它自己的特征光谱.用光谱仪测得的光谱大致有三种类型(如图 1.2.1):连续光谱、线状发射谱(在暗的背景下有一系列明亮的线)和线状吸收谱(在亮的背景下有系列暗的线).

光谱不仅提供关于物质成分的信息,对光谱谱线结构规律性、强度等的研究为研究物质结构提供丰富的信息,在近代物理的发展中,光谱的实验和理论研究都占有重要地位.

1.2.2 氢原子光谱和光谱项

由测量氢气放电管发射出的光的光谱可获得氢光谱,由某些星体的光谱中也可获得氢光谱.图 1.2.2 是氢原子发射光谱的一部分,光谱从可见光区延伸到紫外光区.谱线的波长以埃(\AA)为单位表示在图中.

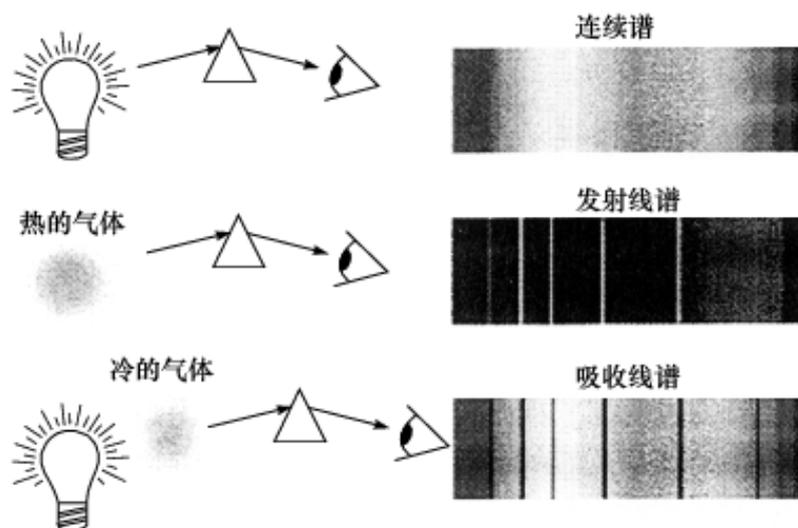


图 1.2.1 光谱仪及测得光谱的示意图

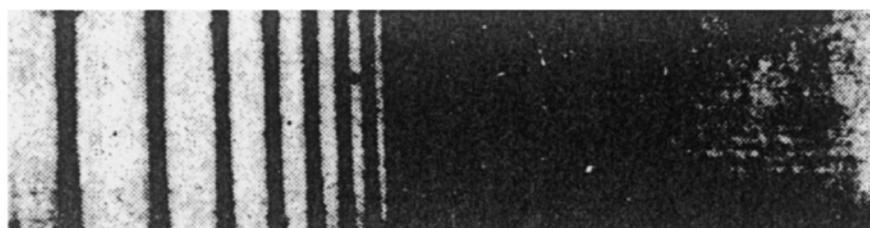
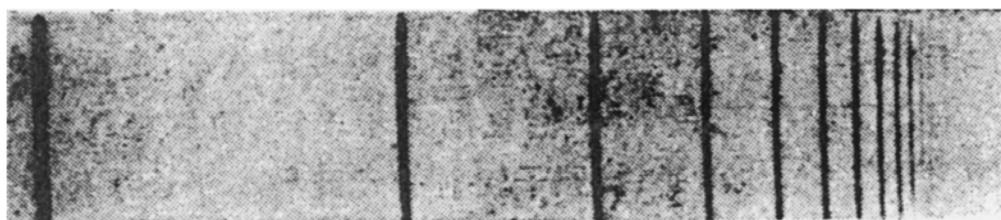


图 1.2.2 氢原子光谱(巴耳末谱系)

1885 年,巴耳末(J. J. Balmer)对已观察到的 14 条氢光谱线的研究,发现它们的波长有一定的规律,并可以用下式来表示:

$$\lambda_n = B \frac{n^2}{n^2 - 4}, \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad (1.2.1)$$

氢原子在可见光区的发射谱谱线的波长列表如下：

谱线名称	H _α	H _β	H _γ	H _δ	H _ε	...	H _∞
波长/nm	656.3	486.1	434.1	410.2	397.0	...	364.6

可以定出 $B = 364.56 \text{ nm}$ ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$).

巴耳末开创了探索原子光谱线系规律性的研究. 1896 年里德伯 (J. R. Rydberg) 将巴耳末公式改写为用波数 $\tilde{\nu}$ 来表示, 波数

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} \quad (1.2.2)$$

它表示在单位长度波列中所包含波的数目, 于是

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{B} \frac{n^2 - 4}{n^2} = R_H \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right], \quad \text{其中 } n = 3, 4, \dots \quad (1.2.3)$$

式中, $R_H = \frac{4}{B} = 1.0967758 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ 称为里德伯常量. 当 $n = 3$ 时, 该式给出巴耳末线系中波长最长的谱线, 即 H_α 线. 当 n 越来越大时, 短波长谱线之间的间隔越来越小. 在 $n \rightarrow \infty$ 时, 给出该系中短波长的极限值, 称为线系限.

后来, 发现氢原子光谱在紫外、红外光区也有谱线, 它们分别以发现者的名字来标记. 这些谱线也分别组成光谱线系. 它们也可以用类似的公式来表示. 氢原子的各光谱线系、其波数表示式和发现的年代均列在下表:

莱曼系(紫外区)	$\tilde{\nu} = R_H \left[\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right],$	$n = 2, 3, 4, \dots$	1916 年
巴耳末系(可见光区)	$\tilde{\nu} = R_H \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right],$	$n = 3, 4, 5, \dots$	1885 年
帕邢系(近红外区)	$\tilde{\nu} = R_H \left[\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right],$	$n = 4, 5, \dots$	1908 年
布拉开系(红外区)	$\tilde{\nu} = R_H \left[\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right],$	$n = 5, 6, 7, \dots$	1922 年
普丰德系(远红外区)	$\tilde{\nu} = R_H \left[\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right],$	$n = 6, 7, 8, \dots$	1924 年

综合氢原子光谱谱系的波数, 可用下面的普遍表示式来描述:

$$\tilde{\nu} = R_H \left[\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right] \quad (1.2.4)$$

其中, $m=1, 2, 3, \dots$; $n=m+1, m+2, \dots$. 上式中每一个 m 相应于一个谱系.

光谱线系的波数可用更一般的形式表示

$$\tilde{\nu} = T_m - T_n \quad (1.2.5)$$

其中, $T_n = \frac{R}{n^2}$ 称为谱项. 对原子光谱的进一步研究发现, 其他原子的光谱也具有氢原子光谱的这种特点. 只是各种原子的谱项的具体形式不同, 如有的原子其谱项的分母可能不是整数, 而是 $(n - \delta)^2$. 由式(1.2.5)可知原子光谱中的任一谱线的波数是两个谱项之差. 这样由一个线系求得的 T_m 和另一线系中得到的 T_n , 就可以预言一条新的谱线. 这样, 原子谱线的频率 $\nu = c \tilde{\nu}$, 可从独立的一系列谱项所构成的差来得到.

这些在光谱研究中得到的经验公式, 并没有引起物理学家们的重视, 似乎只是一些数字规律. 原子光谱的这种普遍规律是否反映了物质内部结构的规律性呢? 丹麦物理学家玻尔(N. Bohr)第一个将这两个方面联系起来, 并提出了他的氢原子理论.

1.3 玻尔氢原子理论

卢瑟福关于原子的核式模型认为, 在原子的中心有一个非常小的原子核, 周围环绕着一个或多个电子, 原子核的半径约为 10^{-14} m, 是原子半径的十万分之一. 原子的质量几乎都集中于原子核. 这使人联想起一个非常熟悉的图像——太阳系模型, 人们把电子在核外绕原子核的运动和行星绕太阳的运动相类比, 电子和原子核之间由静电引力(类似于太阳系的万有引力)作用, 维持着电子在一定的轨道上不停地绕原子核旋转. 这就是原子的行星模型.

例 1.3.1 请对原子核与电子间的静电力和万有引力作一估算.

解 原子中电子和核之间的万有引力为 $G \frac{M \cdot m_e}{r_0^2}$, 其中 G 是引力常数, $G \approx 6.67 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$, M 是原子核的质量, 对氢原子核, $M = 1.7 \times 10^{-27} \text{ kg}$, m_e 是电子的质量, $m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$, r_0 是原子的尺寸 $\approx 10^{-10} \text{ m}$. 将这些数值代入, 得电子和核之间的引力

$$G \frac{M \cdot m_e}{r_0^2} \approx 1.03 \times 10^{-47} \text{ N}$$

原子中电子和核之间的电场为

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{r_0^2} = 9 \times 10^9 \times \frac{1.6 \times 10^{-19}}{(10^{-10})^2} = 1.4 \times 10^{11} \text{ V} \cdot \text{m}^{-1}$$

它们之间的静电力为 eE , 即

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_0^2} \approx 2.3 \times 10^{-8} \text{ N}$$

可以看出, 在原子系统内, 万有引力和静电力之比近似为 10^{-39} , 所以在原子内完全可以忽略不计万有引力.

1.3.1 原子行星模型的困难

(1) 原子核和电子将在相互间的静电作用下运动, 原子内的大部分空间是空的, 因此原子的大小一般指的就是最外层电子轨道的半径. 那么由什么决定最外层电子轨道的大小呢? 考虑一个氢原子, 电子带电荷 $-e$, 而原子核带电荷 $+Ze$ (对氢原子 $Z=1$). 已知原子核的质量远远大于电子质量, 所以讨论它们的运动时, 可以近似地看作只是电子绕原子核的运动, 而不考虑原子核的运动. 假定电子的速度足够小, 可以在非相对论力学的范围内进行讨论. 和力学中行星运动的解一样, 电子的轨道是圆锥曲线, 而圆周运动是最简单的形式, 暂就以此来讨论. 电子作圆周运动受到的向心力为

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

电子动能为

$$\frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (1.3.1)$$

式中, r 是电子与原子核之间的距离, m_e 是电子的质量. 原子内部系统的总能量为电子的动能和体系的势能之和. 而势能 V 为

$$V = K - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

其中, K 是 $r \rightarrow \infty$ 时的势能, 若将它定为零, 则

$$V = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

因此总能量

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \\ &= - \frac{1}{2} \times \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

由上式可知电子绕原子核的轨道半径 r 与原子的能量 E 有关, 轨道半径 r 越大, 能量越大 (它的绝对值越小, 因为 E 是负数); 而 r 越小, 则能量越小, 原子中的

电子束缚越紧.由 E 和 r 的对应关系,并不能确定电子轨道的大小,找不到理由能选出一个特定的轨道半径 r .而每一种原子应有一个确定的大小,即有一确定的 r 值.

另外,电子绕原子核旋转时,电子的运动是一种加速运动.根据经典电磁理论,带电粒子作加速运动时要发射电磁辐射,也就是原子会发射光.由于电磁波带走了能量,电子的能量将逐渐减小,由(1.3.2)式可知,电子绕核运动的半径就将逐渐缩小,电子最终将因不断损失能量而落到原子核上,整个原子塌缩成只有原子核那样大小.显然,这是与实际观察的事实不符,实验表明原子的大小是稳定的,其大小约为 10^{-10} m.

(2) 经典理论认为,原子所发射光的频率应等于原子中电子运动的频率

$$f = \frac{v}{2\pi r} = \frac{e}{2\pi} \sqrt{\frac{Z}{4\pi\epsilon_0 m_e r^3}}$$

由上段的讨论可知,随着原子能量的减小,电子运动的轨道半径 r 不断变小,因此频率 f 也将不断增大,且是连续变化的.因此原子发射的应是连续光谱.但是实验观察到的原子光谱是一系列的线光谱,其谱线具有确定的分立的频率.

例 1.3.2 设氢原子中电子绕原子核作圆周运动,并且原子的初始半径为 10^{-10} m,请由经典电磁理论估计电子落到核上的时间.

解 根据经典电磁理论,一个以加速度为 a 运动的粒子,它每秒发射的能量为

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{3} \frac{e^2 a^2}{c^3}$$

而

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dr} \times \frac{dr}{dt} \Rightarrow \frac{dr}{dt} = \frac{dE/dt}{dE/dr}$$

由式(1.3.2)得

$$\frac{dE}{dr} = \frac{1}{2} \times \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$$

圆轨道运动的加速度

$$a = \frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{1}{mr^2}$$

设 $Z=1$,得

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dt} &= -\frac{4}{3} \times \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \times \frac{1}{m^2 r^2 c^3} \\ t &= \frac{1}{4} \times \left(\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}\right)^2 \times m^2 c^3 r_0^3 \approx 10^{-10} \text{ s} \end{aligned}$$

□

上面的讨论说明,氢原子行星模型的经典理论既不能说明氢原子有稳定的大小,也不能说明氢原子光谱具有分立的线光谱.经典物理在原子的结构问题上遇到了难以克服的困难.

1.3.2 玻尔假设

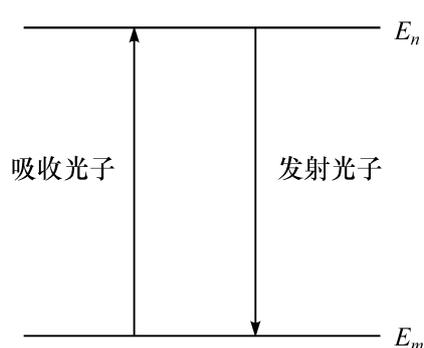
丹麦物理学家玻尔(N. Bohr)在普朗克关于黑体辐射的量子论和爱因斯坦关于光子的概念的启发下,他把量子概念应用到原子系统.他认为尽管经典理论在解决各种宏观问题上取得了很大成就,但它不适用于发生在原子范围内的过程.在原子行星模型的基础上,即原子中电子在原子核库仑引力的作用下,在以原子核为中心的圆轨道上运动,其运动服从经典力学规律,1913年他提出了如下的假设:

(1) 原子存在一系列具有确定能量的稳定状态,称为定态.

玻尔注意到了原子发射波长分立的线光谱这一事实.也就是说原子发射出的光子具有分立的,确定的能量.由此,他假设原子的能量状态也是分立的,不连续的,可分别以 $E_1, E_2, \dots, E_m, \dots, E_n$ 表示这些能量.处于一定能量状态的原子是稳定的,即使电子绕原子核作加速运动也不发生电磁辐射,这就是玻尔的定态假设.

(2) 当原子从一个定态跃迁到另一个定态时,原子的能量状态发生改变,这时原子才发射或吸收电磁辐射,所发射或吸收的电磁辐射的频率由下式决定:

$$\nu = \frac{|E_n - E_m|}{h} \quad (1.3.3)$$



E_n 和 E_m 分别为跃迁前后原子的能量, h 为普朗克常量,其值为 $6.62 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$. 式(1.3.3)称为玻尔的频率规则.

通常用一条水平线表示一个能量状态.原子的辐射和吸收过程可以用图 1.3.1 表示.能量最低的状态称为基态.

玻尔通过这条假设将原子的状态和原子光谱联系起来.

图 1.3.1 光的发射及吸收过程

(3) 角动量量子化.

玻尔假设原子中电子的轨道角动量是量子化的,它的值只能是 \hbar 的整数倍.这里 $\hbar = h/2\pi$,一般也叫约化普朗克常量.所以电子绕原子核作圆周运动的角动量的值为

$$mrv = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.3.4)$$

其中, n 是正整数,因此角动量只能有不连续的值.

1.3.3 玻尔氢原子模型

玻尔将这三个假设和行星模型结合在一起,推导出了氢原子的大小和能级.

1. 氢原子的大小

将式(1.3.1)和式(1.3.4)联立求解,得

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \times \frac{Z}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.3.5)$$

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \times \frac{n^2}{Z}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.3.6)$$

其中, m_e 是电子的静止质量, $m_e c^2 \approx 0.511 \times 10^6 \text{ eV}$.

由式(1.3.6)及(1.3.5)可知,在原子中电子的轨道和速度都是不连续的,和 n 有关. n 称作主量子数.氢原子的电子运动轨道半径不仅是量子化的,而且其数值仅由几个基本常数 m_e 、 h 、 c 决定.氢原子的原子序数 $Z=1$,所以

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} n^2 = a_0 n^2 \quad (1.3.7)$$

其中

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.53 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (1.3.8)$$

是氢原子的第一轨道半径($n=1$),也就是基态时的电子轨道半径,称为玻尔半径.氢原子的轨道半径和 n^2 成正比,可取的值分别为 $a_0, 4a_0, 9a_0, \dots$.图 1.3.2 给出不同 n 值的氢原子的圆形轨道.

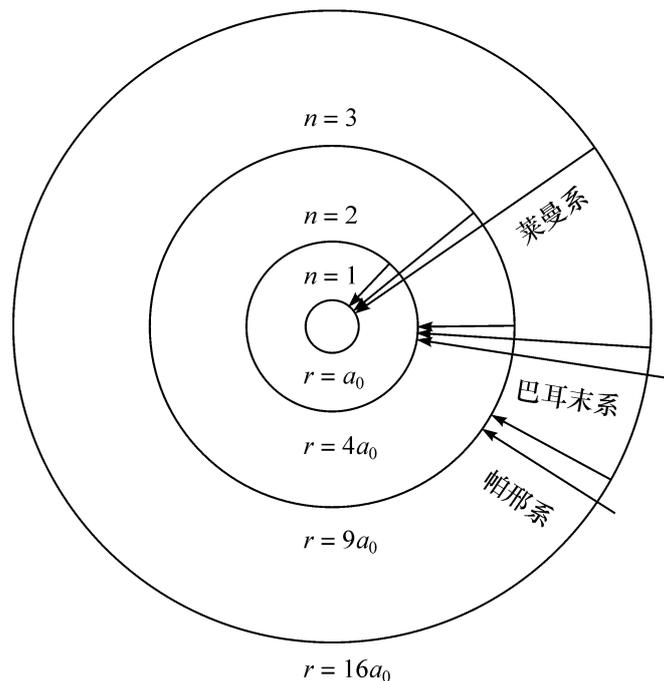


图 1.3.2 氢原子的玻尔轨道

式(1.3.5)给出氢原子中电子的运动速度,可改写为

$$v_n = \frac{\alpha c}{n} \quad (1.3.9)$$

其中

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = 7.29735308 \times 10^{-3} \approx \frac{1}{137} \quad (1.3.10)$$

α 是一个无量纲的量,称为精细结构常数.由式(1.3.9)可知氢原子中电子的运动速度约为光速的 α 倍或更小,所以用非相对论近似来描绘原子中的电子运动所引起的误差不是很大.

2. 氢原子的定态能量

由式(1.3.7)和式(1.3.2)得

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.3.11)$$

由于 n 只能是正整数,所以 E_n 只能取分立的值,这是量子化条件式(1.3.4)的必然结果,称为能量的量子化.若用精细结构常数表示,则 E_n 为

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} m_e \alpha^2 c^2 \quad (1.3.12)$$

能量最低的定态是当 $n=1$ 时,原子处于最低能量时的状态称为基态.

$$E_1 = -\frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 \approx -13.6 \text{ eV}$$

所以氢原子中电子能量的绝对值约为电子静质量能的 α^2 倍,比电子静质量能小得多.对 $n \geq 2$ 的状态称为原子的激发态.

一般用能级图来形象地表示原子量子化的能量值,在能级图上用一条横线表示原子可能有的一个能量值,称为一个能级.其高度是按能量大小成比例画出来的.能量随 n 增加而迅速升高,其绝对值反比于 n^2 .氢原子可以具有的能量分别为 $E_1, E_1/4, E_1/9, \dots$.由于我们是以静止电子在无限远处,即与原子核无相互作用时的能量为零点的,所以原子中电子的能量均是负值.图 1.3.3 给出氢原子的能级图.

由上面的讨论可知,量子数 n 决定了原子的状态,即其大小和能量.当 $n \rightarrow \infty$ 时, $r_n \rightarrow \infty$,电子已远离原子核,不再受到核电场束缚作用,成为一个自由电子,这时的原子处于电离状态,相应的势能量为零.已知基态的能量为 -13.6 eV ,所以将一个基态电子电离至少需要 13.6 eV 的能量,这个能量称为电离能.相反,当一个自由电子与原子核结合为一个基态氢原子时,至少释放 13.6 eV 的能量,这个能量又称为氢原子的结合能.自由电子的能量由它的动能决定,等于 $\frac{1}{2} m_e v^2$,所以能量

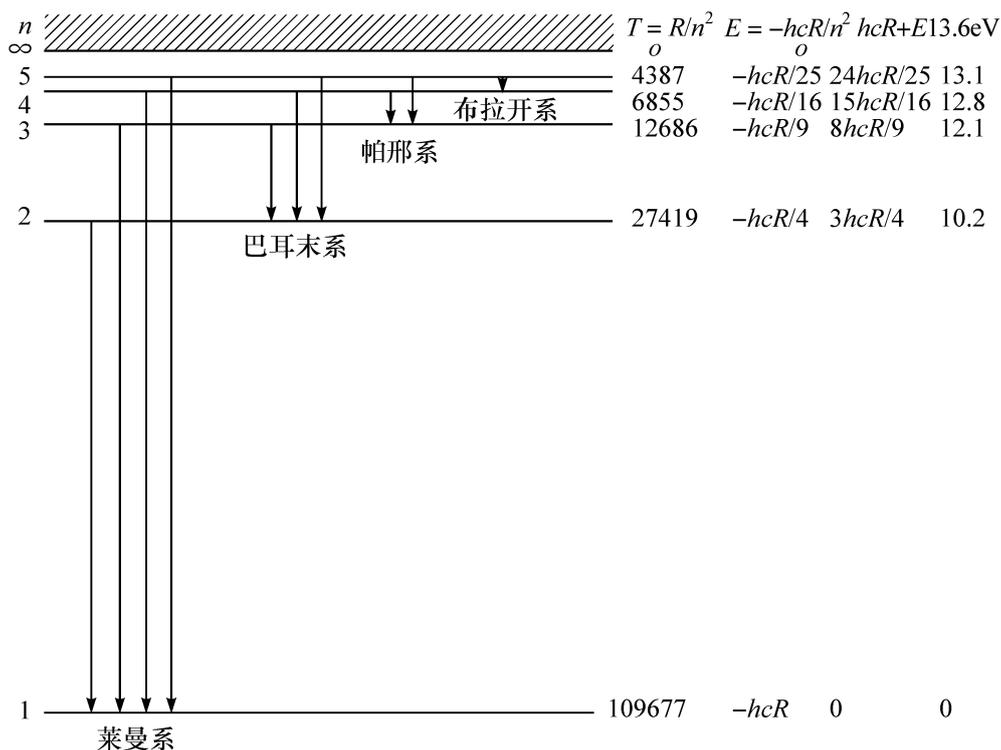


图 1.3.3 氢原子能级示意图

是正值,并可以连续地变化.这相当于能级图上的连续能量区.

3. 氢原子的光谱

原子中的电子由较高能级 E_n 跃迁到较低能级 E_m 时便会产生电磁辐射,即发射光子.光子的能量为 $hc\tilde{\nu} = E_n - E_m$,即

$$\tilde{\nu} = \frac{E_n - E_m}{hc} \quad (1.3.13)$$

其中 $n > m$,由式(1.3.12)可得波数

$$\tilde{\nu} = \frac{\alpha^2 m_e c}{2h} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.3.14)$$

与上一节的式(1.2.4)比较,可求得里德伯常量

$$R_\infty = \frac{\alpha^2 m_e c}{2h} \quad (1.3.15)$$

或

$$R_\infty = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^3 c} \quad (1.3.16)$$

由上式可知道, R_∞ (在原子核质量为无穷大的近似下)是完全由基本常数 m_e 、 h 、 c 等定出的,由这些物理常数可得出玻尔理论推出的 R_∞ 理论值

$$R_\infty = 1.0973731534(13) \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$