

New modern physics Review—

The fourth part: atom, electron physics (chapter 15 ~ 20)

Huang Zhenqiang Huang Yuxiang

China Institute of Water Resources and Hydropower Research

Email: kexuetansuoze@126.com

Abstract

This article is the author of "cold fusion reactor" [1] patent and the "new modern physics" [2] Summary monograph content. We do expectations and mainstream fusion of modern physics and engineering academia academic exchanges. This monograph based on Einstein's idea of determinism, first create a classic elementary quantum spin fluctuations vertical double elliptical orbit motion model, combined with Newtonian mechanics, the basic equations of motion electrodynamics, quantum mechanics, elementary particle velocity along the track combined with the relation between the energy, the use of a unified self-consistent mathematical physics equations were solved derivation and precise. It can accurately answer all the elementary particles, nuclei, the internal structure of the atom, composition, movement characteristics law decay reason, energy, quality source of strong, weak and electromagnetic interaction between and intensity of the interaction. It can to microscopic, macroscopic electromagnetic field and gravitational field of the propagation medium and principles. We eventually demonstrated the infinite eternal cosmology, absolute time and space and a large unified field.

Keywords

Cold fusion reactor; Neutrinos field medium characteristics; Elementary particle structure; The quality of formation energy principle; Determinism of quantum physics; Electromagnetic propagation principle; Neutrinos energy shock; Graviton; Dark matter; The unified field

Subject Areas: Math & Physics

新现代物理学综述—

第四部分：原子、电子物理学（第15~20章）

黄振强 黄宇翔

中化地质矿山总局福建化工地质勘查院

Email: kexuetansuoze@126.com

收稿日期：2016年3月30日；发布日期：2016年4月5日

摘要

本文是笔者《冷核聚变堆》[1]发明专利和《新现代物理学》[2]专著的综合内容。期望与主流核聚变工程学界和现代物理学界进行学术交流。本专著依据爱因斯坦决定论思路，先建立经典基本粒子量子化波动自旋垂直双椭圆轨道运动模型，结合牛顿力学、电动力学、量子力学最基本的运动方程，结合基本粒子沿轨道运动速度与能量的相对论关系，运用统一自洽的数学物理方程组进行推导和精确求解的。它能精确解答所有基本粒子、原子核、原子的内部结构、组成、运动特征规律，衰变原因、能量、质量来源，强、弱相互作用与电磁相互作用的关系和强度。微观、宏观领域的电磁场和万有引力场的传播介质和原理。最终论证了无限永恒宇宙论、绝对时空观和大统一场。

关键词

冷核聚变堆；中微子场介质特征；基本粒子结构；质量能量形成原理；决定论量子物理学；电磁场传播原理；中微子能量震荡；引力子；暗物质；大统一场

第 15 章非能量相对论条件下的电子自旋椭圆轨道运动方程

15.1 非能量相对论条件下的电子自旋椭圆轨道运动方程

15.1.1 电子自旋椭圆轨道运动特点

电子在以原子核为中心的电场力作用下沿自旋椭圆轨道运动特征，既类似于牛顿力学中地球在以太阳为中心的万有引力场作用下沿椭圆轨道运动，又具有如下特点：

1. 太阳系内各行星之间的相互作用力仍然是万有引力，所以各行星可以分布在几乎相同的自旋椭圆轨道平面上。电子之间的相互作用是电场排斥力，使各个电子在原子核和各个电子间综合电场力作用下分别占据不同的自旋椭圆轨道平面。原子核位于各个电子自旋椭圆轨道的同一个焦点上。各个电子自旋椭圆轨道由于相互间电场排斥力、磁场侧向力作用，总会绕着各自旋椭圆轨道长轴附加旋转，形成旋转椭球曲面，这就是科学界通过实验已经观察到的“s、p、d、f 型电子云壳层”。

2. 地球或其它行星绕太阳沿自旋椭圆轨道运动时不存在自旋量子数 $N_{\theta i}$ 的取值问题， $N_{\theta i}$ 值都是 1。各个电子绕原子核沿自旋椭圆轨道运动时， $N_{\theta i}$ 取 ≥ 1 的某个自然数或简单的分数。

3. 地球绕太阳沿自旋椭圆轨道运动时，速度远小于光速 c ，不必考虑速度引起的能量相对论质量效应。电子本身的波动速度 v_a 已趋于光速，自旋速度 $v_{\theta i}$ 也比行星大得多，尤其是重原子的内层电子，自旋速度 $v_{\theta i}$ 最高接近 $0.7c$ 。这时自旋运动速度对电子自身质量和电场作用强度就有显著的能量相对论效应。

4. 太阳对地球引力，因二者质量不变，其它行星相互影响较小，引力大小只与地球绕太阳自旋运动的轨道半径平方成反比。原子核对每个电子的核电场引力，由于众多电子的屏蔽效应，综合电场作用的电荷强度系数 Z_i 将是个相当复杂的变数。变化范围将在 1~5 倍之间，使电场作用力成为多变量的函数。

综合上述特征，将使电子自旋椭圆轨道变得相当复杂，甚至严重变形。正因为如此，我们必须将原子物理分成两部分：第一部分讨论非能量相对论条件下的电子自旋椭圆轨道运动方程，它可以解决原子外层、次外层电子自旋椭圆轨道运动特征，原子形态、大小、电子逐步电离或跃迁时吸收或发射光谱的各能级计算；“s、p、d、f 型电子云壳层”形成原理；第二部分讨论能量相对论条件下的电子自旋椭圆轨道运动特征，相应的各能级 x 射线能量计算；它可以解决原子内层 K、L 层众多电子轨道组合运动特征。

15.1.2 非能量相对论条件下的电子自旋椭圆轨道运动方程

对轻原子和重原子外层、次外层的单个电子，因为自旋速度远小于光速，所以在不考虑能量相对论的前提条件下，可以对其进行简化分析。先以电子静止质量 m_{e0} 代表低速自旋运动中的电子运动质量 m_e ；同时，我们假设电子综合电场作用的电荷强度系数 Z_i 值不变，或变化很小，在允许的误差范围内；不考虑电子的波动运动，当电子的波动半径 R_a 及原子核半径都远小于电子自旋椭圆轨道半径 R_{θ} 时，我们可以将电子和原子核当作两个质点来处理。

当电子绕原子核沿椭圆轨道作自旋运动时，由于相互间电场力的吸引作用，原子核也会相对电子作微

汉斯预印本

未经同行评审

弱的运动。由理论力学可知：电子自旋运动的质量应以折合质量 $m_{e0}K_m$ 表示。 $m_{e0}K_m = Mm_{e0}/(M + m_{e0})$ ， M 为原子核质量。 K_m 仅对原子外层单个电子才有意义。本文仅对氢、氦、锂三种原子考虑修正系数：

$${}^1_1H : K_m = 0.9994556793 \quad {}^4_2He : K_m = 0.9998629254 \quad {}^7_3Li : K_m = 0.9999218102$$

其它原子或同层成对电子 $K_m = 1$ 。

由本书 (1.2) 方程组和牛顿力学、库仑定律，见图 15.1，电子绕原子核沿自旋椭圆轨道运动的方程组为：

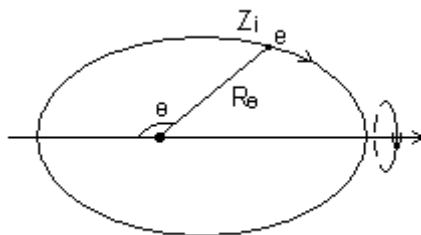


图 15.1 电子绕原子核自旋轨道

$$\begin{cases} R_\theta = \frac{N_{\theta i} h}{2\pi m_{e0} K_m v_\theta} & (15.1-1) \\ m_{e0} K_m (\ddot{R}_\theta - R_\theta \dot{\theta}^2) = \frac{-Z_i e^2}{4\pi \epsilon_0 R_\theta^2} & (15.1-2) \\ m_{e0} K_m (R_\theta \ddot{\theta} + 2\dot{R}_\theta \dot{\theta}) = 0 & (15.1-3) \end{cases}$$

与 (1.2) 方程组比较，(15.1-1) 式仅仅多了一个自旋量子数 $N_{\theta i}$ 。当年玻尔应用该量子数在推导氢原子光谱模型中立过奇功，获得 1922 年诺贝尔物理学奖，其意义不言自明，这里不再解释。(15.1-2)、(15.1-3) 两式对学过牛顿力学、经典电动力学的人都知道，是万有引力定律引用到原子内的库仑定律表达式。(15.1-1) 式是电子在原子核和其它各个电子综合电场力作用下沿自旋椭圆轨道运动时的量子化动量矩守恒公式。当动量矩为常数时，电子与原子核、其它电子综合电场作用力的合力将沿自旋运动轨道半径指向原子核的中心。由万有引力定律和 (1.2) 方程组证明，(15.1-1) 式中的动量矩 $N_{\theta i} h$ 为常数，所以，(15.1-2)、(15.1-3) 式成立。

由 (15.1-1) 式，电子自旋运动的角速度 $\dot{\theta}$ 为：

$$\dot{\theta} = \frac{v_\theta}{R_\theta} = \frac{N_{\theta i} h}{2\pi m_{e0} K_m R_\theta^2} \quad (15.2)$$

令 $R_\theta = 1/u$ ，则 $dR_\theta = -du/u^2$ ，代入 (15.2) 式，得：

$$\dot{\theta} = \frac{N_{\theta i} h}{2\pi m_{e0} K_m} u^2 \quad (15.3)$$

由图 15.1、(15.3) 式，电子的径向速度 v_r (\dot{R}_θ) 和加速度 a_r (\ddot{R}_θ) 分别为：

$$v_r = \frac{dR_\theta}{d\theta} \dot{\theta} = -\frac{N_\alpha h}{2\pi m_{e0} K_m} \frac{du}{d\theta} \quad (15.4)$$

$$\alpha_r = -\frac{N_\alpha h}{2\pi m_{e0} K_m} \frac{du^2}{d\theta^2} \dot{\theta} = -\left(\frac{N_\alpha h}{2\pi m_{e0} K_m}\right)^2 u^2 \frac{du^2}{d\theta^2} \quad (15.5)$$

将 (15.4)、(15.5) 式代入 (15.1-2) 式整理得:

$$\frac{du^2}{d\theta^2} + u = \frac{Z_i K_m}{N_\alpha^2 r_0} \left(r_0 = \frac{h}{2\pi m_{e0} a_c c} a_c = \frac{e^2}{2h\epsilon_0 c} \right) \quad (15.6)$$

解 (15.6) 式微分方程得:

$$R_\theta = \frac{N_\alpha^2 r_0}{Z_i K_m (1 + E_\theta \cos \theta)} \quad (15.7)$$

这是大家所熟悉的圆锥截线轨道运动方程。在所有原子内部, 电子所受的综合电场作用力都是吸引力, 电子的电离能均是负值, 所以, $0 \leq E_\theta \leq 1$, 该方程表示电子绕原子核沿自旋椭圆轨道运动的椭圆方程。

由 (15.1-1)、(15.2)、(15.7) 式, 电子沿半径方向、自旋方向及轨道切线方向的运动速度 v_{ri} 、 $v_{\theta i}$ 、 v_{ei} 分别为:

$$\begin{cases} v_{ri} = \frac{Z_i a_c c}{N_\alpha} E_\theta \sin \theta & (15.8-1) \\ v_{\theta i} = \frac{Z_i a_c c}{N_\alpha} (1 + E_\theta \cos \theta) & (15.8-2) \\ v_{ei} = \frac{Z_i a_c c}{N_\alpha} \sqrt{1 + 2E_\theta \cos \theta + E_\theta^2} & (15.8-3) \end{cases}$$

下标“i”表示电子沿不同自旋椭圆轨道运动层次, (下同)。电子沿不同自旋椭圆轨道运动的动能 W_{mi} , 由 (15.8) 方程组和牛顿力学得:

$$W_{mi} = \frac{m_{e0} K_m}{2} \left(\frac{Z_i a_c c}{N_\alpha} \right)^2 (1 + 2E_\theta \cos \theta + E_\theta^2) \quad (15.9)$$

电子沿自旋椭圆轨道运动中, 在原子核和其它电子综合作用下的电势能 W_{ei} , 由库仑定律和 (15.7) 式, 得:

$$W_{ei} = \frac{-Z_i e^2}{4\pi\epsilon_0 R_\theta} = -\left(\frac{Z_i a_c c}{N_\alpha}\right)^2 m_{e0} K_m (1 + E_\theta \cos \theta) \quad (15.10)$$

原子在外电场或外来能量作用下某电子的电离能 ΔW_{ei} , 显然应为其动能和电势能之和。由 (15.9)、(15.10) 式, 得: (以后为计算方便, 我们均取正值)

$$\Delta W_{ei} = \frac{m_{e0} K_m}{2} \left(\frac{Z_i a_c c}{N_\alpha} \right)^2 (E_\theta^2 - 1) \quad (15.11)$$

由 (15.11) 式, 可以看出: 电子电离能只与自旋椭圆轨道上综合电场作用的电荷强度系数 Z_i 、自旋量子数 $N_{\theta i}$ 及椭圆轨道参数离心率 $E_{\theta i}$ 有关, 与其所在轨道位置 $R_{\theta i(\theta)}$ 无关。

如果我们换一种方式表达, 由 (15.7) 式, 令 $\theta=0, \pi$, 自旋椭圆轨道长轴 $A_{\theta i}$ 为:

$$A_{\theta i} = \frac{N_{\theta i}^2 r_0}{\bar{Z}_i K_{mi} (1 - E_{\theta i}^2)} \quad (\bar{Z}_i \text{ 为自旋轨道上的平均值}) \quad (15.12)$$

将 (15.12) 式代入 (15.11) 式, 得:

$$\Delta W_{ei} = m_{e0} (a_c c)^2 \frac{r_0 \bar{Z}_i}{2A_{\theta i}} \quad (15.13)$$

上式表明, 电子电离能只与综合电场作用的电荷强度平均系数 \bar{Z}_i 及椭圆轨道长轴 $A_{\theta i}$ 有关, 这个与万有引力定律完全相同的性质多数读者是熟悉的。

15.2 椭圆轨道离心率 $E_{\theta i}$ 的求解

15.2.1 电子激发跃迁过程中的能量守恒原理

从本书粒子物理部分我们已经证明: 光子的波动、自旋速度均是光速。由光子的波粒二象性特点, 我们可以写出光子动量 P_γ 、能量 W_γ 与波长 λ 的关系式:

$$\begin{cases} P_\gamma = \frac{h}{\lambda} & (15.14-1) \\ W_\gamma = \frac{hc}{\lambda} & (15.14-2) \end{cases}$$

根据人造地球卫星发射变轨特点, 电子由低能自旋椭圆轨道往高能轨道转移时必须沿如图 15.2 所示的 abc 转移椭圆轨道运行, 其能量利用效率才能最大。在光子与电子的碰撞点 a 处, $\theta=0, Z_i=Z_a$, 其自旋速度增量 $\Delta v_e = \Delta v_\theta$ 。由动量、动量矩和能量增量守恒定律, (15.11) 式、(15.14) 方程组, 我们有:

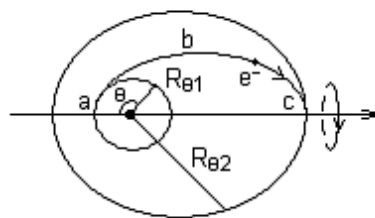


图 15.2 电子激发中转移轨道

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{h}{\lambda} &= m_{e0} K_m \Delta v_{\alpha\alpha} & (15.15-1) \\ \frac{h}{\lambda} R_{\alpha\alpha} &= m_{e0} K_m (R_{\alpha\alpha} v_{\alpha\alpha} - R_{\theta1} v_{\theta1}) & (15.15-2) \\ \frac{hc}{\lambda} &= \frac{1}{2} m_{e0} K_m (v_{\alpha\alpha}^2 - v_{\theta1}^2) & (15.15-3) \text{ 分别联立(15.15-1)、(15.15-2)和(15.15-3)、(15.15-4)} \\ \frac{hc}{\lambda} &= \frac{m_{e0} K_m (Z_1 a_c c)^2}{2} \left(\frac{E_{\alpha\alpha}^2 - 1}{N_{\alpha\alpha}^2} - \frac{E_{\theta1}^2 - 1}{N_{\theta1}^2} \right) & (15.15-4) \end{aligned} \right.$$

式，将 (15.7) 式和 (15.8) 方程组代入，得同一个结果：

$$\frac{N_{\alpha\alpha}^2}{1 + E_{\alpha\alpha}} = \frac{N_{\theta1}^2}{1 + E_{\theta1}} \quad (15.16)$$

电子沿 abc 转移轨道运行时，令自旋量子数 $N_{\theta abc}$ 和离心率 $E_{\theta abc}$ 值均保持不变，在 c 点变轨处， $\theta = \pi$ 、 $Z_2 = Z_c$ 自旋椭圆轨道半径应相等，由 (15.7) 式，得：

$$\frac{N_{\alpha\alpha}^2}{1 - E_{\alpha\alpha}} = \frac{N_{\theta2}^2}{1 - E_{\theta2}} \quad (15.17)$$

联立 (15.16)、(15.17) 式，得：

$$N_{\alpha\alpha} = \frac{\sqrt{2} N_{\theta1} N_{\theta2}}{\sqrt{N_{\theta1}^2 (1 - E_{\theta2}) + N_{\theta2}^2 (1 + E_{\theta1})}} \quad (15.18)$$

第 2 章基本粒子内部结构和能量形成原理中我们已经证明：光子和中微子都是由一对荷电粒子组成；波动、进动轨道都是圆柱螺旋线，速度均是光速 c ；其差别是中微子受超高频电磁场激发后就转变成光子。电子 e^- 由一对荷电粒子和一个负电荷粒子组成。在逐级激发过程中，只能吸收光子能量，不能最终增加自身的荷电粒子数。当光子与电子在转移轨道起点 a 处碰撞瞬间，光子不但将自身的动量传递给电子，还会吸附在电子身上，将自身大部分电、磁场能量传递给电子，以增加电子的动能，进入转移轨道。当电子运行至变轨位置 c 点的瞬间，光子剩余能量将再次传递给电子，自身以极低能量的光子或中微子形式反向喷射离开，以保持电子原有的荷电粒子数。这两种综合作用可以再次提高电子自身自旋速度，促使电子 e^- 完成最终变轨。

下面以氢原子内电子由 $N_{\theta1} \rightarrow N_{\theta2}$ 激发过程为例，详细分析变轨过程中自旋椭圆轨道参数变化，这样做更直观明了。

15.2.2 电子激发、跃迁中能量守恒计算实例

如果氢原子内的电子在 $N_{\theta1} = 1$ 的基态自旋椭圆轨道中运动时，其离心率 $E_{\theta1} = 0$ 、 $Z_1 = Z_i = 1$ 为常数。当电子被能量较高的光子碰撞后，一次性电离，自旋轨道变成抛物线，这时 $N_{\theta2} = \infty$ 、 $E_{\theta2} = 1$ ，电子电离能 ΔW_e ，

由 (15.11) 式, 得:

$$\Delta W_{ei} = \frac{m_{e0} K_m}{2} (Z_i a_c c)^2 \left(\frac{E_{\theta 2}^2 - 1}{N_{\theta 2}^2} - \frac{E_{\theta 1}^2 - 1}{N_{\theta 1}^2} \right) \quad (15.19)$$

将 $K_m=0.9994556793\dots$ 等值代入 (15.19) 式, 得: $\Delta W_{ei}=13.59829196\text{eV}$ 。

如果电子在 $N_{\theta i}=1\sim 2$ 之间激发, 先假定 $E_{\theta 1}=E_{\theta 2}=0$, 由 (15.15-4) 式, 电子应吸收的光子波长 λ 为:

$$\lambda = \frac{2hc}{m_{e0} K_m (Z_1 a_c c)^2 \left(\frac{E_{\theta 2}^2 - 1}{N_{\theta 2}^2} - \frac{E_{\theta 1}^2 - 1}{N_{\theta 1}^2} \right)} \quad (15.20)$$

将 $N_{\theta 1}=1$ 、 $N_{\theta 2}=2\dots$ 等值代入 (15.20) 式, 得: $\lambda=1215.684489\text{\AA}$ 。将 λ 值代入 (15.14-2) 式, 求得光子能量: $W_\gamma=10.19871898\text{eV}$ 。

将 λ 值代入 (15.15-1) 式, 求得碰撞点 a 处的电子自旋速度增量: $\Delta v_{\theta a}=5986.633654\text{m/s}$ 。

由 $N_{\theta 1}=1$ 、 $N_{\theta 2}=2$, $E_{\theta 1}=E_{\theta 2}=0$, 代入 (15.18) 式, 得: $N_{\theta abc}=1.264911064$ 。

将 $N_{\theta abc}$ 值代入 (15.16) 式, 得: $E_{\theta abc}=0.6$ 。

由 (15.8-2) 式, 电子在碰撞点 a 处自旋速度增量 $\Delta v_{\theta a}$ 为:

$$\Delta v_{\theta a} = Z_1 a_c c \left(\frac{1 + E_{\theta ac}}{N_{\theta ac}} - \frac{1 + E_{\theta 1}}{N_{\theta 1}} \right) \quad (15.21)$$

将 $E_{\theta abc}$ 、 $N_{\theta abc}$ 等值代入 (15.21) 式, 得: $\Delta v_{\theta a}=579543.6558\text{m/s}$ 。

它是 (15.15-1) 式动量守恒定律求出的速度增量的 96.8 倍! 同理, 由 (15.15-3) 式, 得: 电子新增的动能 $\Delta W_{ma}=8.158975179\text{eV}$, 是前者的 1.5913 倍!

当电子沿 abc 转移轨道运行至 c 点时, $\theta=\pi$ 。由 (15.8-2) 式, 自旋速度 $v_{\theta c}$ 为:

$$v_{\theta c} = Z_1 a_c c \left(\frac{1 - E_{\theta ac}}{N_{\theta ac}} \right) \quad (15.22)$$

将 $E_{\theta abc}=0.6$, $N_{\theta abc}=1.264911064$ 代入 (15.22) 式, 得: $v_{\theta c}=691808.7631\text{m/s}$ 。同理, 由 (15.22) 式, 得: 变轨 c 处的速度 $v_{\theta 2}=1093845.698\text{m/s}$, 是 $v_{\theta c}$ 的 1.58 倍。所以, 电子在 c 点变轨时, 仍然需要光子提供剩余能量。由 (15.15-3) 式, 算得 c 点变轨时需要能量 ΔW_{mc} 为:

$$\Delta W_{mc} = \frac{1}{2} m_{e0} K_m (v_{\theta 2}^2 - v_{\theta c}^2) \quad (15.22)$$

将 $v_{\theta 2}$ 、 $v_{\theta c}$ 数据代入 (15.23) 式, 得: $\Delta W_{mc}=2.039743792\text{eV}$, 与 ΔW_{ma} 之和刚好等于 (15.14-2) 式中光子全部能量 W_γ 。说明沿 abc 转移轨道能量利用率达 100%。(在 c 点的光子或中微子反向喷射出剩余极低的能量忽略不计)。

通过上述计算结果分析, 我们必须将光子能量分成两部分: 第一部分为光子动能, 与电子碰撞中遵循

动量和动量矩守恒定律，后面计算证明，它将增大电子自旋椭圆轨道的离心率；第二部分为光子自身电、磁场能量，占总能量绝大部分，它将以质量形式附在电子身上，提供电子激发过程中在转移轨道 a、c 点变轨瞬间所需的主要动能。

(本节后续内容对电子自旋椭圆轨道的离心率 E_{θ_i} 推导、计算过程相当复杂，与本书主要内容关系不大，读者可以先跳过去。)

以科学界现有实验、测试水平，还无法直接测定原子内部各个电子自旋椭圆轨道离心率 E_{θ_i} 、半径 R_{θ_i} 等参数。所以，本书目前只能从电子基态电离能 ΔW_{e0} 测试值或吸收、发射光谱能量值 W_{γ} ，由能量守恒定律、(15.11)、(15.14-2)、(15.15-4) 式，来模拟计算各个电子自旋运动椭圆轨道的离心率 E_{θ_i} ：

$$E_{\alpha} = \sqrt{1 + N_{\alpha}^2 \left[\frac{2h}{m_{e0} K_m \lambda (Z_i a_c)^2 c} + \frac{E_{\theta_1}^2 - 1}{N_{\theta_1}^2} \right]} \quad (15.24)$$

对氢原子中 $N_{\theta_2}=2$ 的 E_{θ_2} 值，将实验值 $\lambda=1215.68 \text{ \AA}$ 代入 (15.24) 式，令 $E_{\theta_1}=0$ ，得： $E_{\theta_2}=0.003328476546$

如果电子沿转移轨道 abc 激发或跃迁过程中 Z_i 有微小的变化，则仍由 (15.11)、(15.14-2)、(15.15-4) 式，先令电子的自旋量子数 $N_{\theta_{abc}}$ 为常数，仅离心率 $E_{\theta_a} \rightarrow E_{\theta_c}$ 发生微小的变化，得：

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{hc}{\lambda} &= \frac{1}{2} m_{e0} K_m (Z_1 a_c c)^2 \left[\frac{E_{\theta_a}^2 - 1}{N_{\theta_a}^2} - \frac{E_{\theta_1}^2 - 1}{N_{\theta_1}^2} \right] \end{aligned} \right. \quad (15.25-1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{hc}{\lambda} &= \frac{1}{2} m_{e0} K_m (a_c c)^2 \left[\left(\frac{Z_2}{N_{\theta_a}} \right)^2 (E_{\theta_a}^2 - 1) - \left(\frac{Z_1}{N_{\theta_1}} \right)^2 (E_{\theta_1}^2 - 1) \right] \end{aligned} \right. \quad (15.25-2)$$

解 (15.25) 方程组得：

$$E_{\alpha} = \sqrt{\left(\frac{Z_1}{Z_2} \right)^2 (E_{\theta_1}^2 - 1) + 1} \quad (15.26)$$

在转移轨道 a 点，光子与电子碰撞瞬间，由 (15.16)、(15.21) 式，电子自旋速度增量 Δv_{θ_a} 为：

$$\Delta v_{\theta_a} = Z_1 a_c c \left(\frac{1 + E_{\theta_1}}{N_{\theta_1}} \right) \left(\frac{N_{\theta_a}}{N_{\theta_1}} - 1 \right) \quad (15.27)$$

由 (15.15-1)、(15.15-4) 式，仅光子动量碰撞对电子自旋速度影响为：

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{hc}{\lambda} &= m_{e0} K_m \Delta v_{\theta_a} c \end{aligned} \right. \quad (15.28-1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{hc}{\lambda} &= \frac{1}{2} m_{e0} K_m (a_c c)^2 \left[\left(\frac{Z_2}{N_{\theta_2}} \right)^2 (E_{\theta_2}^2 - 1) - \left(\frac{Z_1}{N_{\theta_1}} \right)^2 (E_{\theta_1}^2 - 1) \right] \end{aligned} \right. \quad (15.28-2)$$

简化为：

$$\Delta v_{\theta a} = \frac{a_c^2 c}{2} \left[\left(\frac{Z_2}{N_{\theta 2}} \right)^2 (E_{\theta 2}^2 - 1) - \left(\frac{Z_1}{N_{\theta 1}} \right)^2 (E_{\theta 1}^2 - 1) \right] \quad (15.29)$$

联立 (15.27)、(15.29) 式, 令 $\Delta N_{\theta a} = N_{\theta a} - N_{\theta 1}$, 得:

$$\Delta N_{\theta a} = \frac{a_c \left[\left(\frac{Z_2 N_{\theta 1}}{N_{\theta 2}} \right)^2 (E_{\theta 2}^2 - 1) - Z_1^2 (E_{\theta 1}^2 - 1) \right]}{2Z_1(1 + E_{\theta 1})} \quad (15.30)$$

同理, 当电子在 c 点变轨时, $\theta_2 = \pi$, 光子剩余能量对电子自旋椭圆轨道量子数增量 $\Delta N_{\theta c}$ 的影响, 参照 (15.28) 方程组、(15.27) 式, 得:

$$\left\{ \begin{aligned} \Delta v_{\theta c} &= \frac{a_c^2 c}{2} \left[\left(\frac{Z_2}{N_{\theta 2}} \right)^2 (E_{\theta 2}^2 - 1) - \left(\frac{Z_1}{N_{\theta c}} \right)^2 (E_{\theta c}^2 - 1) \right] \end{aligned} \right. \quad (15.31-1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \Delta v_{\theta c} &= Z_2 a_c c \left(\frac{1 - E_{\theta 2}}{N_{\theta 2}} \right) \left(1 - \frac{N_{\theta c}}{N_{\theta 2}} \right) \end{aligned} \right. \quad (15.31-2)$$

解 (15.31) 方程组, 令 $\Delta N_{\theta c} = N_{\theta 2} - N_{\theta c}$, 得:

$$\Delta N_{\theta c} = \frac{a_c \left[Z_2^2 (E_{\theta 2}^2 - 1) - \left(\frac{Z_1 N_{\theta 2}}{N_{\theta c}} \right)^2 (E_{\theta c}^2 - 1) \right]}{2Z_2(1 - E_{\theta 2})} \quad (15.32)$$

由 (15.16)、(15.17) 式, 因电子自旋量子数增量 $\Delta N_{\theta a}$ 、 $\Delta N_{\theta c}$ 导致自旋椭圆轨道离心率增量 $\Delta E_{\theta a}$ 、 $\Delta E_{\theta c}$ 为:

$$\left\{ \begin{aligned} \Delta E_{\theta a} &= \left[\left(\frac{N_{\theta a}}{N_{\theta 1}} \right)^2 - 1 \right] (1 + E_{\theta 1}) \end{aligned} \right. \quad (15.33-1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \Delta E_{\theta c} &= \left[1 - \left(\frac{N_{\theta c}}{N_{\theta 2}} \right)^2 \right] (1 - E_{\theta 2}) \end{aligned} \right. \quad (15.33-2)$$

显然:

$$E_{\theta 2} = E_{\theta 1} + \Delta E_{\theta a} + \Delta E_{\theta c} \quad (15.34)$$

详细计算程序如下:

1. 先令 $N_{\theta 1} = 1$ 、 $N_{\theta 2} = 2$ 、 $E_{\theta 1} = E_{\theta 2} = 0$, 代入 (15.18) 式, 求出 $N_{\theta abc}$ 值。
2. 将 $N_{\theta abc}$ 等值代入 (15.16) 式, 求出 $E_{\theta abc}$ 值。当 Z_a 、 Z_c 有变化时, 应由 (15.26) 式, 分别求出 $E_{\theta a}$ 、 $E_{\theta c}$ 值。
3. 将相关参数分别代入 (15.30)、(15.32) 式, 求出 $\Delta N_{\theta a}$ 、 $\Delta N_{\theta c}$ 值。

4. 将 $\Delta N_{\theta a}$ 、 $\Delta N_{\theta c}$ 值代入(15.33)方程组, 求出 $\Delta E_{\theta a}$ 、 $\Delta E_{\theta c}$ 值, 再代入(15.34)式, 求出 $E_{\theta 2}$ 值。

5. 以 $E_{\theta 2}$ 值代入(15.18)式, 重复1~4计算程序, 直到 $E_{\theta 2}$ 为不变值:

$E_{\theta 2}=0.00330554$, 与(15.24)式由实验测定光谱波长 λ , 直接计算的 $E_{\theta 2}$ 值吻合。

由该增量 $E_{\theta 2}$, 我们可以找出氢原子逐级激发过程中自旋椭圆轨道离心率的变化规律, 详见16.1节计算实例。同时我们也看到, 单个电子逐级激发过程中自旋椭圆轨道离心率的变化就相当复杂。今后我们都是避开这样复杂的计算, 直接通过实验测定的原子各能级变化, 由(15.11)、(15.24)式, 直接求出各能级椭圆轨道的离心率。

15.3 原子外层电子自旋椭圆轨道运动周期的相关性

由(15.12)式, 电子自旋椭圆轨道的半长轴 $A_{\theta i}$ 、半短轴 $B_{\theta i}$ 分别为:

$$\begin{cases} A_{\alpha} = \frac{N_{\alpha}^2 r_0}{\bar{Z}_i K_{mi} (1 - E_{\alpha}^2)} & (15.35-1) \\ B_{\alpha} = \frac{N_{\alpha}^2 r_0}{\bar{Z}_i K_{mi} \sqrt{1 - E_{\alpha}^2}} & (15.35-2) \end{cases}$$

椭圆的面积 S 为:

$$S = \frac{1}{2} \oint R_{\alpha}^2 d\theta = \pi A_{\alpha} B_{\alpha} = \pi \left(\frac{N_{\alpha}^2 r_0}{\bar{Z}_i K_{mi}} \right)^2 (1 - E_{\alpha}^2)^{-1.5} \quad (15.36)$$

电子沿自旋椭圆轨道运动的周期为 $T_{\theta i}$, 由(15.1-1)、(15.7)式, 得:

$$T_{\alpha} = \frac{\oint R_{\alpha} d\theta}{v_{\alpha}} = \oint \frac{2\pi m_{e0} K_{mi} R_{\alpha}^2}{N_{\alpha} h} d\theta = \frac{4\pi m_{e0} K_{mi}}{2N_{\alpha} h} \oint R_{\alpha}^2 d\theta \quad (15.37)$$

将(15.36)式代入(15.37)式, 得:

$$T_{\alpha} = \frac{N_{\alpha}^3 h}{(\bar{Z}_i a_c c)^2 m_{e0} K_{mi} (1 - E_{\alpha}^2)^{1.5}} \quad (15.38)$$

原子内最外层某相邻两个电子沿轨道参数不同的轨道运动时, 它们之间的距离、空间相对位置是不断变化的, 必然导致各自旋椭圆轨道参数 Z_i 、 $E_{\theta i}$ 、 $R_{\theta i}$ 的变化。为了简化分析计算, 我们只能求出各自旋椭圆轨道各参数的平均值 \bar{Z}_i 、 \bar{E}_{α} 、 \bar{R}_{α} 。并假设 \bar{Z}_i 、 \bar{E}_{α} 、 $N_{\theta i}$ 值均不变。由于综合电场力的相互作用, 与粒子波动、自旋椭圆轨道类似, 维持它们之间沿轨道运动的条件也是: 内层电子的自旋椭圆轨道运动周期 $T_{\theta 1}$ 必须是外层电子 $T_{\theta 2}$ 的 $N_{1,2}$ 倍! $N_{1,2}$ 为自然数或简单的分数。

由(15.38)式, 得:

$$N_{1,2} = \left(\frac{N_{\theta 2}}{N_{\theta 1}} \right)^3 \left(\frac{\bar{Z}_1}{\bar{Z}_2} \right)^2 \frac{K_{m1}}{K_{m2}} \left(\frac{1-E_{\theta 1}^2}{1-E_{\theta 2}^2} \right)^{1.5} \quad (15.39)$$

令自旋椭圆轨道的半长轴 $A_{\theta i} = \bar{R}_{\theta i}$ ，由 (15.12)、(15.39) 式，得：

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\bar{Z}_2}{\bar{Z}_1} = \left(\frac{N_{\theta 2}}{N_{\theta 1}} \right)^2 \frac{\bar{R}_{\theta 1} K_{m1}}{\bar{R}_{\theta 2} K_{m2}} \left(\frac{1-E_{\theta 1}^2}{1-E_{\theta 2}^2} \right) \end{array} \right. \quad (15.40-1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\bar{Z}_2}{\bar{Z}_1} \right)^2 = \left(\frac{N_{\theta 2}}{N_{\theta 1}} \right)^3 \frac{K_{m1}}{K_{m2} N_{1,2}} \left(\frac{1-E_{\theta 1}^2}{1-E_{\theta 2}^2} \right)^{1.5} \end{array} \right. \quad (15.40-2)$$

解 (15.40) 方程组得：

$$N_{1,2} = \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^{1.5} \sqrt{\frac{\bar{Z}_1 K_{m2}}{\bar{Z}_2 K_{m1}}} \quad (15.41)$$

$N_{1,2}$ 是关键的边界限制条件，使相邻层之间电子自旋椭圆轨道建立量子化联系，为后面计算原子能级和光谱能级提供关键的依据。

第 16 章氢、氦、锂原子内部结构模型、参数、光谱能级计算

16.1 氢原子内部结构模型、光谱能级计算

16.1.1 氢原子内部结构模型

氢原子内只有一个电子，电子的综合电场作用电荷强度系数 $Z_i=1$ 是不变量。实验室测定氢原子电离能 $\Delta W_{e1}=13.599\text{eV}$ ，电子在质子外围形成“s 型球壳状电子云层”。

由 (15.7)、(15.12) 式，“s 型球壳状电子云层”的平均半径，电子自旋椭圆轨道的半长轴 $A_{\theta i}$ 为：

$$A_{\theta i} = \frac{N_{\theta i}^2 r_0}{\bar{Z}_i K_{mi} (1 - E_{\theta i}^2)} \quad (16.1)$$

令 $N_{\theta 1}=1$ 、 $\bar{Z}_1=1$ 、 $E_{\theta 1}=0$ ，代入 (16.1) 式，得： $A_{\theta 1}=5.294655 \times 10^{-11}\text{m}$ 。

电子绕质子沿自旋椭圆轨道运动中形成的磁矩 U_h ，由电动力学原理和 (15.1-1)、(15.7)、(15.8-2) 式，得：

$$U_h = IS = \frac{eh}{4\pi m_{e0} K_{mi}} \quad (16.2)$$

将 K_{mi} ……等值代入得： $U_h=9.279066276 \times 10^{-24}\text{J/T}$ 。

氢原子在外电场或外来光子碰撞作用下，电子自旋量子数 $N_{\theta i}=1、2、3、4、\dots$ 逐步激发增大，电子逐级吸收某特定波长能量的光子逐步激发电离，则由 (15.20) 式，令各能级的自旋椭圆轨道的离心率 $E_{\theta i}=0$ ，我们可以导出当年玻尔氢原子吸收光谱模型：

$$\lambda = \frac{2h}{m_{e0} K_{mi} a_c^2 c \left(\frac{1}{N_{\theta 1}^2} - \frac{1}{N_{\theta 2}^2} \right)} \quad (16.3)$$

其中 $\frac{1}{\lambda} = 10967758.04 \left(\frac{1}{N_{\theta 1}^2} - \frac{1}{N_{\theta 2}^2} \right) m^{-1}$ ，是大家所熟悉的“里德伯常数”。

16.1.2 氢原子光谱能级计算

由 (16.3) 式，令 $N_{\theta i}=1、2、3、4、\dots$ ，我们可以求出氢原子内电子在各能级自旋椭圆轨道之间逐步激发或跃迁时吸收或发射光谱的波长，见表 16.1，B 行。

从表 16.1 中数据比较得：玻尔氢原子光谱模型有很高的精度，但总体上都略大于实验测定的波长。由 15.2 节对氢原子内电子变轨过程的参数计算分析可以看出：微小误差是自旋椭圆轨道离心率的变化所致。

氢原子光谱波长计算结果比较表 (A°) 表 16.1

$N_{\theta i}$	λ_{1-i}	λ_{2-i}	λ_{3-i}	λ_{4-i}	λ_{5-i}
----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------

2	A: 1215.68 B: 1215.684 C: 1215.680				
3	A: 1025.73 B: 1025.734 C: 1025.728	6562.79 6564.696 6562.760			
4	A: 972.54 B: 972.548 C: 972.541	4861.33 4862.738 4861.374	18751.1 18756.275 18751.562		
5	A: B: C:	4340.47 4341.730 4340.486	12818.1 12821.672 12818.687	40500 40522.816 40505.555	
6	A: B: C:	4101.74 4102.935 4101.725	10938 10941.160 10938.571	26250 26258.785 26248.747	74000 74598.821 74045.421
7	A: B: C:	3970.07 3971.236 3970.034			

说明：A 行是实验测定波长，B 行是玻尔模型计算值，C 行本书模型计算值。

由 (15.24) 式和实验测定的氢原子内各能级光谱波长 λ_i ，我们可以直接求出电子逐级激发电离过程中自旋椭圆轨道离心率 $E_{\theta i}$ 值，见表 16.2 中 A 行。它们与 15.2 节最后求出的氢原子内原始离心率增量 $\Delta E_{\theta i}$ 存在如下关系：见表 16.2 中 C 行。

由表 16.2 中 C 行所示的 $E_{\theta i}$ 修正值，代入 (15.20) 式，求出氢原子内电子逐级激发过程中的吸收光谱波长，见表 16.1 中 C 行，其精度比玻尔氢原子光谱模型更高。

氢原子内电子自旋椭圆轨道离心率的变化表($E_{\theta 1}=0$) 表 16.2

$N_{\theta i}$	$E_{\theta i}$				
	$(N_{\theta i}-1)\Delta E_{\theta}$	$3(N_{\theta i}-1)\Delta E_{\theta}$	$(2N_{\theta i}-3)\Delta E_{\theta}$	$2N_{\theta i}-4)\Delta E_{\theta}$	$3N_{\theta i}\Delta E_{\theta}$
2	A: 0.0033284765 B: C: 0.0033055403				
3	A: 0.0054353795 B: C: 0.0066110806	0.019697843 0.019833242			
4	A: 0.010820727 B: C: 0.009916621	0.030218982 0.029749863	0.016345480 0.016527701		
5	A: B: C: 0.013222161	0.039920633 0.039666483	0.024031726 0.023138782	0.02235718 0.019833242	

6	A:	0.049302363	0.031384513	0.02611092	0.061743872
	B:	0.04958310	0.029749863	0.026444322	0.059499725
	C:				
7	A:	0.058649886			
	B:	0.059499725			
	C:				

16.2 氦原子内部结构模型、光谱能级计算

16.2.1 氦原子内部结构模型

根据实验室对氦原子探测结果，氦原子内有两个电子，形成一层“s 型球壳状电子云层”。一、二级电离能均只有一个， $\Delta W_{e1}=24.587\text{eV}$ 、 $\Delta W_{e2}=54.416\text{eV}$ 。电子在各能级轨道激发或跃迁过程中吸收或发射的各光谱波长见表 16.3~6，③（下同）。

经过比较分析，氦原子内两个电子自旋椭圆轨道的空间分布必须如图 16.1 所示。为保持两个电子与原子核之间综合电场力、轨道离心力的平衡，它们必须各占据一条能级、参数都相同、与中心原子核对称的自旋、侧向旋转运动的椭球曲面轨道。这时两个成对电子折合质量系数 $K_m=1$ 。由库仑定律，每个电子在另一个电子和原子核电场力作用下，平均电荷强度系数 \bar{Z}_i 为：

$$\frac{\bar{Z}_i e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta}^2} = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta})^2} \quad (16.4)$$

解（16.4）式，得： $\bar{Z}_i=1.75$ 。当一个电子完全电离后，剩余另一个电子时， $\bar{Z}_i=2$ 。

当氦原子中第一个电子逐步电离时，由于另一个电子和原子核电场力的相互作用，两个电子自旋椭圆轨道必须以图 16.2 所示的空间分布，轨道运动才能维持平衡。（图 16.2 所示的电子空间分布，是根据实验测定原子外层“电子云”呈“s、p、d、f”型的具体形状来推测的，下同。） Z_1 电子自旋动量矩矢量指向 Y 轴，在 Z_2 电子、原子核电场力作用下，自旋椭圆轨道平面将绕着 Z 轴附加旋转。同理， Z_2 电子在 Z_1 电子、原子核电场力、电子自旋椭圆轨道形成磁场力作用下，将产生侧向附加运动和沿 XOY 轨道平面上、下摆动。综合作用使 Z_1 、 Z_2 电子自旋椭圆轨道平面在保持互相垂直状态下又一起绕 X 轴附加旋转。叠加运动结果就形成两层“s 型球壳状电子云层”。由（15.41）式可知，两层电子自旋椭圆轨道周期 $T_{\theta 1}$ 、 $T_{\theta 2}$ 之间还应存在倍数 $N_{1,2}$ 的关系。

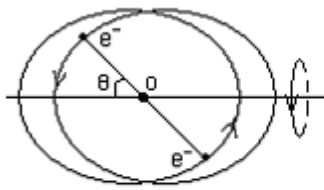


图16.1 氦原子内成对电子自旋轨道组合图

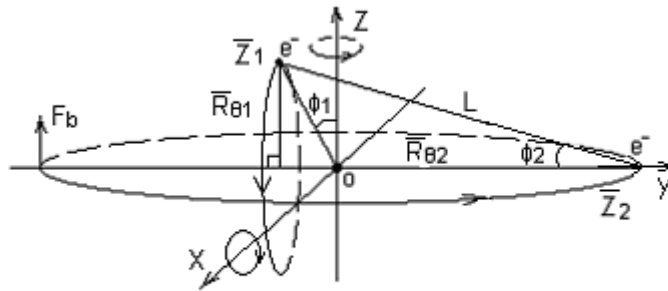


图16.2 氦原子激发过程中电子自旋轨道组图

综合上述分析，若再考虑电子原始波动运动；内、外层两个电子沿各自椭圆轨道运动至不同位置时，自旋轨道半径变化、相互间空间位置变化；由此导致各自综合电场作用的电荷强度系数 Z_1 、 Z_2 发生复杂变化和椭圆轨道的周期性变形。读者不难想象，电子的实际运动轨道，将复杂到什么程度！所以，我们只能抓住主要的电子沿椭圆轨道运动规律，自旋椭圆轨道周期 $T_{\theta 1}$ 、 $T_{\theta 2}$ 之间存在倍数 $N_{1,2}$ 的关系，以平均参数 \bar{Z}_i 、 $\bar{R}_{\theta i}$ 、 $E_{\theta i}$ 值进行简化模拟分析计算。后面至 18 章的所有插图中，为作图方便、直观，在图上成对电子我们均以 $R_{\theta i(m)}$ 值代替 $\bar{R}_{\theta i}$ 值，请读者注意识别。

由(15.7)、(15.12)式，电子自旋椭圆轨道平均半径 $\bar{R}_{\theta i}$ 与平均电荷强度系数 \bar{Z}_i 、关系为：

$$\bar{R}_{\theta i} = \frac{N_{\theta i}^2 r_0}{\bar{Z}_i K_{mi} (1 - E_{\theta i}^2)} \quad (16.5)$$

根据牛顿力学、库仑定律、图 16.2 所示，两个电子与原子核之间电场力相互作用的平衡关系，我们有：

$$L = \sqrt{\bar{R}_{\theta 1}^2 + (\bar{R}_{\theta 2} + \bar{R}_{\theta 1} \tan \phi_1)^2} \quad (16.6-1)$$

$$\frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} = \frac{2e^2 \cos^3 \phi_1}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{e^2 \sin \phi_2}{4\pi\epsilon_0 L^2} \quad (16.6-2)$$

$$\frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{e^2 \cos \phi_2}{4\pi\epsilon_0 L^2} \quad (16.6-3)$$

$$\frac{2e^2 \cos^2 \phi_1}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} \sin \phi_1 = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} \quad (16.6-4)$$

将 (16.6) 方程组简化为：

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{Z}_1 &= 2 \cos^3 \phi_1 - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} + \operatorname{tg} \phi_1 \right)^2 \right]^{-1.5} \end{aligned} \right. \quad (16.7-1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{Z}_2 &= 2 - \left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \operatorname{tg} \phi_1 \right) \left[\left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 + \left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \operatorname{tg} \phi_1 \right)^2 \right]^{-1.5} \end{aligned} \right. \quad (16.7-2)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} &= \frac{1}{\cos \phi_1 \sqrt{\sin \phi_1}} \end{aligned} \right. \quad (16.7-3)$$

将 (15.41) 式代入 (16.7) 方程组得:

$$\frac{1}{(\sin \phi_1)^{1.5} N_{1,2}^2} = \frac{2 \left[1 + \sin \phi_1 + 2(\sin \phi_1)^{1.5} \right]^{1.5} - \left[1 + (\sin \phi_1)^{1.5} \right]}{2 \left[1 + \sin \phi_1 + 2(\sin \phi_1)^{1.5} \right]^{1.5} - (\sin \phi_1)^{1.5}} \quad (16.8)$$

由 (16.5) 式, 相邻两个电子自旋椭圆轨道平均半径比值 $\bar{R}_{\theta 2} / \bar{R}_{\theta 1}$ 为:

$$\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} = \left(\frac{N_{\theta 2}}{N_{\theta 1}} \right)^2 \frac{\bar{Z}_1 K_{m1}}{\bar{Z}_2 K_{m2}} \left(\frac{1 - E_{\theta 1}^2}{1 - E_{\theta 2}^2} \right) \quad (16.9)$$

与 (16.7) 方程组结合, 可以估算 (16.8) 式中的 $N_{1,2}$ 取值范围, 为后续模拟计算作准备。同理, 由 (16.9) 式, 可导出 $E_{\theta 2}$ 与 $N_{\theta 2}$ 等参数关系式:

$$E_{\theta 2} = \sqrt{1 - \left(\frac{N_{\theta 2}}{N_{\theta 1}} \right)^2 \frac{\bar{Z}_1 K_{m1}}{\bar{Z}_2 K_{m2}} \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} (1 - E_{\theta 1}^2)} \quad (16.10)$$

由能量守恒定律, (15.11)、(15.25-2)、(16.3) 式, 某电子自旋量子数从 $N_{\theta a} \rightarrow N_{\theta c}$ 变化激发过程中, 吸收光子的能量 ΔW_{γ} 应等于这两个原子能级中各个电子总电离能之差:

$$\Delta W_{\gamma} = \sum \Delta W_{eia} - \sum \Delta W_{eic} \quad (16.11)$$

吸收光子的波长 λ_{a-c} 为:

$$\lambda_{a-c} = \frac{hc}{e \left(\sum \Delta W_{eia} - \sum \Delta W_{eic} \right)} \quad (16.12)$$

16.2.2 氦原子光谱能级计算

综上所述, 氦原子内电子自旋椭圆轨道参数和吸收光谱波长计算程序如下:

1. 由实验室测定的氦原子第一、二电离能之和, 作为原始总电离能:

$\sum \Delta W_{e0} = 79.003 \text{eV}$ 。令 $K_{m1} = 1$ 、 $\bar{Z}_1 = 1.75$ 、 $N_{\theta 1} = 1$, 见图 16.1, 代入 (15.11) 式, 求得电子自旋椭圆轨道的原始离心率: $E_{\theta 0} = 0.227995205$

2. 将上述参数代入 (15.7)、(15.12) 式, 令 $\theta = 0, \pi$, 得“s 型球壳状电子云层”的内、外半径 $R_{\theta 1(0)}$ 、 $R_{\theta 1(\pi)}$ 、平均半径 $\bar{R}_{\theta 1}$ 及厚度 $\Delta R_{\theta 1} = R_{\theta 1(\pi)} - R_{\theta 1(0)}$ 分别为:

$$R_{\theta_{1(0)}}=0.2462A^\circ, R_{\theta_{1(m)}}=0.3917A^\circ, \bar{R}_{\theta_1}=0.3190A^\circ, \Delta R_{\theta_1}=0.1455A^\circ。$$

(上述数据明显小于实验值 $R_{\theta_{1(m)}}=1\sim 1.1A^\circ$ ，其原因在于：多数原子半径是以化合物或单质的液态或固态的比重计算的；原子之间外层电子自旋椭圆轨道或“电子云”已有不同程度重叠；氦原子是惰性气体，不跟其它原子化合，就是在液态超低温状态下，“s 型球壳状电子云层”外边缘显示出来的同号负电场也能阻止氦原子之间进一步靠近，导致实验值变大)。

3. 当一个电子由开始到完全电离，内层电子的平均电荷强度系数变化为 $\bar{Z}_1=1.75\rightarrow 2$ 。令 $K_{m1}=0.9998629254, N_{\theta_1}=1, \bar{Z}_1=2, E_{\theta_1}=0$ ，代入(15.11)式，算得内层电子电离能为： $\Delta W_{e1}=54.41533133eV$ ，仍小于实验值 $54.416eV$ 。所以，在氦原子外层电子逐步电离过程中，内层电子自旋椭圆轨道离心率的变化将由 $E_{\theta_0}\rightarrow 0$ 。

4. 由(16.9)、(15.41)式，令 $E_{\theta_1}=E_{\theta_2}=0, N_{\theta_1}=1, N_{\theta_2}=2, \bar{Z}_1=1.95, \bar{Z}_2=1$ ，代入估算得： $N_{1,2}=30.42$ ，同理，若令 $\bar{Z}_1=2, \bar{Z}_2=1$ ，则 $N_{1,2}=32$ 。

5. 取 $N_{1,2}=31$ ，代入(16.8)式，得： $\Phi_1=0.916733834^\circ$ ，将该值代入(16.7)方程组得： $\bar{Z}_1=1.997268498, \bar{Z}_2=1.027369561$

6. 将 $\bar{R}_{\theta_2}/\bar{R}_{\theta_1}, \bar{Z}_i, N_{\theta_i}$ 等值代入(16.10)式，算得 $E_{\theta_2}=0.1285330284$ 。

7. 将 $\bar{Z}_i, N_{\theta_i}, E_{\theta_i}$ 等值代入(15.11)式，算得氦原子激发态的原子能级总电离能：

$$\sum \Delta W_{eic} = 57.79716452eV。$$

8. 令 $\sum \Delta W_{eia} = 79.003eV$ ，将 $\sum \Delta W_{eic} = 57.79716452eV$ 一起代入(16.12)式，得： $\lambda_{a-c} = 584.670A^\circ$ ，与实验值 $584.3A^\circ$ 比较，略大。

9. 适当调整 E_{θ_1} 取值范围，重复 6~8 计算程序，最终得：当 $E_{\theta_1}=0.01525$ 时，

$$E_{\theta_2}=0.129419704, \sum \Delta W_{eic} = 57.78372307eV, \lambda_{a-c} = 584.300A^\circ。$$

10. 同理，令 $N_{\theta_2}=1.5, 2.5, 3, 4, 5, 6, N_{1,2}=11, 62, 108, 256, 500, 864$ ，分别重复 4~9 计算程序，我们可以求出氦原子全部远紫外线光谱波长，见表 16.3。

说明：因收集到的实验数据有限， $N_{\theta_2} > 6$ 的未计算（下同）。

氦原子远紫外线光谱波长计算结果表(A°) 表 16.3

N_{θ_1}	N_{θ_2}	$N_{1,2}$	E_{θ_1}	E_{θ_2}	$\sum \Delta W_{eic} eV$	计算值 $\lambda_{a-c} A^\circ$	实验值 $\lambda_{a-c} A^\circ$
1	1.5	11	0.198890	0.2350068249	58.03846134	591.400	591.4
	2	31	0.01525	0.129419704	57.78372307	584.300	584.3
	2.5	62	0.101903	0.1390334447	55.99608629	538.900	538.9

1	3	108	0.0105	0.08235517544	55.91469054	537.000	537.0
	4	256	0.0088	0.04610406155	55.26032413	522.200	522.2
	5	500	0.0072	0.02962118787	54.95639484	515.600	515.6
	6	864	0.005	0.02048134594	54.79176748	512.094	

11. 由表 16.3, 分别令: $N_{\theta 2a}=1.5、2、\sum \Delta W_{eia}=58.03846134eV、57.78372307eV$, $N_{\theta 2}=3、4、5$, 分别重复 4~9 计算程序, 可求出部分可见光谱波长, 见表 16.4。

氦原子部分可见光谱波长计算结果表(A°) 表 16.4

$N_{\theta 1}$	$N_{\theta 2}$	$N_{1,2}$	$E_{\theta 1}$	$E_{\theta 2}$	$\sum \Delta W_{eic} eV$	计算值 $\lambda_{a-c}A^{\circ}$	实验值 $\lambda_{a-c}A^{\circ}$
1	1.5	11	0.19889	0.2350068249	58.03846134		
	3	107	0.0057	0.02474674815	55.92832058	5875.639	5875.6
	4	256	0	0.04525818282	55.26460382	4469.741	4471.6
	5	500	0	0.02873356175	54.95924392	4026.486	4026.2
1	2	31	0.01525	0.129419704	57.78372307		
	3	107	0.00732	0.02516906259	55.92714088	6678.091	6678.1
	4	256	0	0.04525818282	55.26460382	4921.730	4921.9
	5	500	0	0.02873356175	54.95924392	4389.632	

氦原子几个远红外光谱波长计算结果表(A°) 见表 16.5

$N_{\theta 1}$	$N_{\theta 2}$	$N_{1,2}$	$E_{\theta 1}$	$E_{\theta 2}$	$\sum \Delta W_{eic} eV$	计算值 $\lambda_{a-c}A^{\circ}$	实验值 $\lambda_{a-c}A^{\circ}$
1	2.5	62	0.101903	0.1390334447	55.99608629		
	3	107	0.00448	0.02449467588	55.92901521	184854.99	184859.06
	3	107	0.01078	0.02638316495	55.92363819	171135.27	171129.148
	3	107	0.01149	0.02668096556	55.92275384	169071.47	169082.189
	3	107	0.01241	0.02708965064	55.92152405	166282.89	166271.70
	3	107	0.01441	0.02806168321	55.91852396	159851.11	159850.318

12. 由表 16.3, 令 $N_{\theta 2a}=2.5、N_{\theta 2}=3、N_{1,2}=107、\sum \Delta W_{eia}=55.99608629eV$, 重复 5~9 计算程序, 可求出氦原子几个远红外光谱波长, 见表 16.5。

13. 由表 16.4, 令 $N_{\theta 2a}=2、\sum \Delta W_{eia}=57.78372307eV$, $N_{\theta 2}=2、3、4、7、8$, $N_{1,2}=42、59、92、97、229、316、1694、2628$, 分别重复 4~9 计算程序, 可求出氦原子剩余可见光谱和红外光谱波长, 见表 16.6。

氦原子剩余可见光谱和红外光谱波长计算结果表(A°) 表 16.6

$N_{\theta 1}$	$N_{\theta 2}$	$N_{1,2}$	$E_{\theta 1}$	$E_{\theta 2}$	$\sum \Delta W_{eic} eV$	计算值 $\lambda_{a-c}A^{\circ}$	实验值 $\lambda_{a-c}A^{\circ}$
1	2	31	0.01525	0.129419704	57.78372303		
	2	42	0.0205	0.4319577419	57.18142959	20585.354	20582.0
	2	59	0.0168	0.587643035	56.6389549	10830.511	10830.3
	2	92	0.0119	0.713861862	56.08096694	7281.386	7281.3
	2	92	0.0119	0.713861862	56.08096694	7281.386	7281.3

2	97	0.0067	0.725447722	56.02899709	7065.733	7065.7
3	229	0.0066	0.6289540292	55.32752142	5047.804	5047.7
4	316	0.0024	0.363745375	55.15327507	4713.427	4713.4
7	1694	0	0.3622944219	54.65653834	3964.724	3964.7
8	2628	0	0.3914481215	54.59532809	3888.610	3888.6

16.3 锂原子内部结构模型、光谱能级计算

16.3.1 锂原子内部结构模型

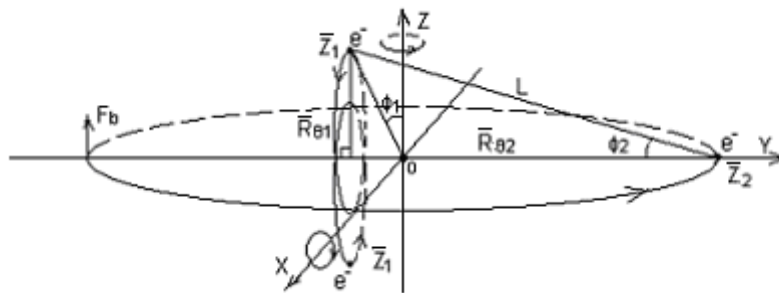


图 16.3 锂原子内电子自旋椭圆轨道组合图

经实验探测：锂原子由两层“s 型球壳状电子云层”组成。共有 3 个电子，3 级电离能分别为：5.392、75.638、122.451eV。

。原子半径 1.5~1.6Å，原子吸收和发射光谱各能级波长见表 16.8~表 16.11。

参照图 16.2 氦原子逐步电离过程中电子自旋椭圆轨道组合模型，锂原子内 3 个电子应以图 16.3 的自旋椭圆轨道组合模型才能处于稳定运动状态。同理，各个电子之间的电、磁场相互作用将导致附加旋转和侧向运动，综合叠加结果就形成旋转椭球曲面组合的两层“s 型球壳状电子云层”。

根据牛顿力学、库仑定律，我们有：

$$L = \sqrt{\bar{R}_{\theta 1}^2 + (\bar{R}_{\theta 2} + \bar{R}_{\theta 1} \tan \phi_1)^2} \tag{16.13-1}$$

$$\frac{\bar{z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} = \frac{3e^2 \cos^3 \phi_1}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 1})^2} - \frac{e^2 \sin \phi_2}{4\pi\epsilon_0 L^2} \tag{16.13-2}$$

$$\frac{\bar{z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} = \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{2e^2 \cos \phi_2}{4\pi\epsilon_0 L^2} \tag{16.13-3}$$

$$\frac{2 \times 3e^2 \cos^2 \phi_1}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} \sin \phi_1 = \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} \tag{16.13-4}$$

简化为：

$$\bar{Z}_1 = 3 \cos^3 \phi_1 - \frac{1}{4} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} + \operatorname{tg} \phi_1 \right)^2 \right]^{-1.5} \quad (16.14-1)$$

$$\bar{Z}_2 = 3 - 2 \left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \operatorname{tg} \phi_1 \right) \left[\left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 + \left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \operatorname{tg} \phi_1 \right)^2 \right]^{-1.5} \quad (16.14-2)$$

$$\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} = \frac{1}{\cos \phi_1 \sqrt{2 \sin \phi_1}} \quad (16.14-3)$$

将 (15.41) 式代入 (16.14) 方程组, 因 $K_{m1}=1$, 所以:

$$\frac{K_{m2}}{(2 \sin \phi_1)^{1.5} N_{1,2}^2} = \frac{3 \left[1 + 2 \sin \phi_1 + (2 \sin \phi_1)^{1.5} \right]^{1.5} - \left[2 + (2 \sin \phi_1)^{1.5} \right]}{\left(3 - \frac{1}{4 \cos^3 \phi_1} \right) \left[1 + 2 \sin \phi_1 + (2 \sin \phi_1)^{1.5} \right]^{1.5} - (2 \sin \phi_1)^{1.5}} \quad (16.15)$$

由 (16.9)、(15.41) 式, 内、外层相邻电子自旋椭圆轨道周期倍数 $N_{1,2}$ 的关系为:

$$N_{1,2} = \left(\frac{N_{\theta 2}}{N_{\theta 1}} \right)^3 \left(\frac{\bar{Z}_1}{\bar{Z}_2} \right)^2 \frac{K_{m1}}{K_{m2}} \left(\frac{1 - E_{\theta 1}^2}{1 - E_{\theta 2}^2} \right)^{1.5} \quad (16.16)$$

16.3.2 锂原子光谱能级计算

综上所述, 参照氢原子内电子自旋椭圆轨道参数和光谱能级波长计算方法, 锂原子内的光谱能级波长计算程序如下:

1. 当锂原子外层电子完全电离后, 内层两个电子自旋椭圆轨道组合与氢原子相同。由 (16.4) 式: $\bar{Z}_1 = 2.75$ 。
2. 由第二、三级电子电离能之和 $\sum \Delta W_e = 198.089 \text{eV}$, 令 $N_{\theta 1}=1$ 、 $K_{m1}=1$ 、 $\bar{Z}_1=2.75$, 代入 (15.11) 式, 得: $E_{\theta 1} = 0.1934005519$ 。
3. 外层电子在逐步电离过程中, 对内层的电子自旋椭圆轨道参数影响较小, 我们可以将它们作为计算依据适当微调即可。
4. 令 $N_{\theta 1}=1$ 、 $N_{\theta 2}=1.5$ 、 $E_{\theta 1}=0.1934005519$ 、 $E_{\theta 2}=0$ 、 $\bar{Z}_1=2.75$ 、 $\bar{Z}_2=1$ 、 $K_{m1}=1$ 、 $K_{m2}=0.9999218102$, 代入 (16.16) 式, 得: $N_{1,2}=24.1068$ 。
5. 取 $N_{1,2}=24$, 代入 (16.15) 式, 得: $\Phi_1=0.768043708^\circ$ 。将 Φ_1 值代入 (16.14) 方程组得: $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1} = 6.107997833$ 、 $\bar{Z}_1=2.745000742$ 、 $\bar{Z}_2=1.085882032$ 。
6. 将 $N_{\theta i}$ 、 $E_{\theta i}$ 、 \bar{Z}_i 、 K_{mi} 等值代入 (16.10) 式, 得: $E_{\theta 2}=0.321806274$ 。
7. 将 $N_{\theta i}$ 、 $E_{\theta i}$ 、 \bar{Z}_i 、 K_{mi} 各参数分别代入 (15.11) 式算得总电离能:

$\sum \Delta W_{eia} = 203.7607675 \text{eV}$ ，与实验值 $\sum \Delta W_{eia} = 203.481 \text{eV}$ 相比，略大。

8. 微调 E_{θ_1} 取值范围，重复 6~7 计算程序，最终得：当 $E_{\theta_1} = 0.1967877968$ 、

$E_{\theta_2} = 0.3237130035$ 时， $\sum \Delta W_{eia} = 203.481 \text{eV}$

9. 由 (15.7)、(15.12) 式、分别令 $\theta = 0、\pi$ ，锂原子内电子自旋椭圆轨道内、外半径、平均半径分别为：

$$R_{\theta_1(0)} = 0.1611 \text{A}^\circ \quad R_{\theta_1(\pi)} = 0.2400 \text{A}^\circ \quad \bar{R}_{\theta_1} = 0.2005 \text{A}^\circ$$

$$R_{\theta_2(0)} = 0.8284 \text{A}^\circ \quad R_{\theta_2(\pi)} = 1.6215 \text{A}^\circ \quad \bar{R}_{\theta_2} = 1.2249 \text{A}^\circ$$

当然，我们如果变化 $N_{1,2}$ 的取值范围，同样也可以找到相应的自旋椭圆轨道参数，但原子半径与实验值差别较大，见表 16.7。

锂原子内电子自旋椭圆轨道参数计算结果表(R_θ 单位: A°) 表 16.7

$N_{1,2}$	20	22	23	24	27
E_{θ_1}	0.2039826921	0.200206942	0.198456041	0.1967877968	0.1922230755
E_{θ_2}	0.1416428756	0.2542468475	0.2919388194	0.3237130035	0.3975299812
\bar{Z}_1	2.742886747	2.744081026	2.7445696	2.745000742	2.746028199
\bar{Z}_2	1.108166703	1.09592591	1.090665912	1.085882032	1.073844193
$R_{\theta_2(0)}$	0.9412	0.8663	0.8451	0.8284	0.7934
$R_{\theta_2(\pi)}$	1.2518	1.4569	1.5419	1.6215	1.8405
\bar{R}_{θ_2}	1.0965	1.1616	1.1935	1.2249	1.3170
备注	实验值 $R_{\theta_2(\pi)} = 1.5 - 1.6 \text{A}^\circ$ 。所以， $N_{1,2} = 23, 24$ 这两组数据均可使用				

10. 令 $N_{\theta_2} = 2$ 、 $\bar{Z}_1 / \bar{Z}_2 = 2.75$ 、 $E_{\theta_2} = 0$ 、 $E_{\theta_1} = 0.1935$ ，代入 (16.16) 式，得： $N_{1,2} = 57.134$ ，取 $N_{1,2} = 57$ ，

重复 5~7 计算程序得： $\sum \Delta W_{eic} = 201.4193956 \text{eV}$ 。

11. 令 $\sum \Delta W_{eia} = 203.481 \text{eV}$ ，与 $\sum \Delta W_{eic} = 201.4193956 \text{eV}$ 一起代入 (16.12) 式，得： $\lambda_{a-c} = 6013.969 \text{A}^\circ$ 。

12. 微调 E_{θ_1} 取值范围，重复 6~7、11 计算程序，最终得：

$$E_{\theta_1} = 0.190848437 \quad E_{\theta_2} = 0.1832293863$$

$$\sum \Delta W_{eic} = 201.6326517 \text{eV} \quad \lambda_{a-c} = 6707.840 \text{A}^\circ$$

13. 令 $N_{\theta_2} = 2、3、4、5、6、7、8$ ， $\bar{Z}_1 / \bar{Z}_2 = 2.75$ 、 $E_{\theta_2} = 0$ 、 $E_{\theta_1} = 0.1935$ ，分别代入 (16.16) 式，得： $N_{1,2} = 57、193、457、892、1543、2450、3657$ 。

14. 以不同的 $N_{1,2}$ 值，分别代入 (16.15) 式，重复 5~7、11~12 计算程序，可求出锂原子全部主线系光谱，它相当于氢原子的“赖漫线系”，见表 16.8。

锂原子主线系光谱计算结果表(A°) 表 16.8

$N_{\theta 1}$	$N_{\theta 2}$	$N_{1,2}$	$E_{\theta 1}$	$E_{\theta 2}$	$\sum \Delta W_{eic}$ eV	计算值 $\lambda_{a-c} \text{A}^\circ$	实验值 $\lambda_{a-c} \text{A}^\circ$
1	1.5	23	0.198456041	0.2919388194	203.481		
	2	57	0.190848437	0.1832293863	201.6326517	6707.840	6707.84
	3	193	0.19276	0.08619620946	199.6454801	3232.528	3232.61
	4	457	0.19315	0.04432574063	198.958488	2741.491	2741.31
	5	892	0.19328	0.01566138316	198.6428922	2562.660	2562.50
	6	1543	0.19333	0.02206354654	198.4724202	2475.437	2475.30
	7	2450	0.19340	0.01576806866	198.3666534	2424.244	
	8	3657	0.19340	0.01111312169	198.3016049	2393.798	

15. 同理, 令 $N_{\theta 2}=3、4、5、6、7、8$, 由表 16.8, $\sum \Delta W_{eia} = 201.6326517 \text{eV}$, 以与 $N_{\theta 2}$ 值对应的 $N_{1,2}$ 值, 分别代入 (16.15) 式, 重复 14 计算程序, 可算得锂原子“漫线系”全部光谱, 相当于氢原子的“巴尔末线系”, 见表 16.9。

16. 由表 16.8, 令 $\sum \Delta W_{eia} = 199.6454801 \text{eV}$, $N_{\theta 2}=4、5$, $N_{1,2}=457、892$, 分别代入 (16.15) 式, 重复 14 计算程序, 可算得锂原子基线系光谱, 相当于氢原子的“帕邢线系”, 见表 16.10。

17. 令 $N_{\theta 2}=2.5、3.5、4.5、5.5、6.5、7.5$, $\bar{Z}_1/\bar{Z}_2 = 2.75$, $E_{\theta 2}=0$, $E_{\theta 1}=0.1935$, 分别代入 (16.16) 式, 得: $N_{1,2}=112、306、651、1188、1961、3013$ 。

锂原子“漫线系”光谱计算结果表(A°) 表 16.9

$N_{\theta 1}$	$N_{\theta 2}$	$N_{1,2}$	$E_{\theta 1}$	$E_{\theta 2}$	$\sum \Delta W_{eic}$ eV	计算值 $\lambda_{a-c} \text{A}^\circ$	实验值 $\lambda_{a-c} \text{A}^\circ$
1	2	57	0.190848	0.1832293863	201.6326517		
	3	193	0.19331	0.08745673627	199.6014517	6103.990	6103.53
1	4	457	0.19339	0.04539764991	198.9393154	4603.370	4603.0
	5	892	0.19341	0.01724780055	198.6325189	4132.625	4132.3
1	6	1543	0.19341	0.02277992403	198.4660412	3915.361	3915.0
1	7	2450	0.19342	0.01602083031	198.3650591	3794.361	3794.7
	8	3657	0.19343	0.01164284397	198.2992142	3719.411	

锂原子基线系光谱波长计算结果表(A°) 表 6.10

$N_{\theta 1}$	$N_{\theta 2}$	$N_{1,2}$	$E_{\theta 1}$	$E_{\theta 2}$	$\sum \Delta W_{eic}$ eV	计算值 $\lambda_{a-c} \text{A}^\circ$	实验值 $\lambda_{a-c} \text{A}^\circ$
1	3	193	0.19276	0.08619620946	199.6454801		
	4	457	0.19285	0.04295020444	198.9824202	18698.801	18697.0
	5	892	0.19287	0.0089918741	198.675562	12782.961	12782.2
	6	1543	0.19289	0.0176167807	198.5074576	10894.709	

18. 令 $\sum \Delta W_{eia} = 201.6326517 \text{eV}$, 将 $N_{1,2}=112$ 等值分别代入 (16.15) 式, 重复 14 计算程序, 可求出锂原子“锐线系”全部光谱, 见表 16.11。

锂原子“锐线系”光谱波长计算结果表(A°) 表 6.11

$N_{\theta 1}$	$N_{\theta 2}$	$N_{1,2}$	$E_{\theta 1}$	$E_{\theta 2}$	$\sum \Delta W_{eic} \text{ eV}$	计算值 $\lambda_{a-c} \text{ A}^\circ$	实验值 $\lambda_{a-c} \text{ A}^\circ$
1	2	57	0.190848437	0.1832293863	201.6326517		
	2.5	112	0.19509	0.1335764277	200.1068834	8126.020	8126.52
	3.5	306	0.19414	0.0603233854	199.138651	4971.299	4971.90
	4.5	651	0.19376	0.0408945626	198.7315359	4273.674	4273.3
	5.5	1188	0.19361	0.0224304931	198.5219727	3985.761	3985.8
	6.5	1961	0.1935	0.01285992717	198.4030833	3839.035	

通过本章对氢、氦、锂三种原子光谱波长模拟计算，可以看出：内层电子自旋椭圆轨道的离心率取值范围， $0 \leq E_{\theta 1} \leq 1$ 可作为边界限制条件考虑； $E_{\theta 1}$ 值将从原子的原始状态向电子完全电离后的离子状态过渡；只要进一步微调 $E_{\theta 1}$ 值，可使光谱波长计算值与实验值相等，但已无此必要。

原子光谱或能级，是以原子作为一个能量团整体考虑。当一个电子在逐步电离过程中，本身和同层、内层剩余电子的各综合电场作用的平均电荷强度系数 \bar{Z}_i 及各轨道、能量参数都会随之逐步改变。与原子核内的 γ 射线形成原理类似，是在总能量守恒的条件下，对整个系统进行重复模拟计算累加而已。

第 17 章铍、硼、碳原子内部结构、参数和原子能级计算

17.1 铍原子内部结构、参数和原子能级计算

17.1.1 铍原子内部结构和参数计算

铍原子内有 4 个电子,组成内、外两层“s 型球壳状电子云层”。实验测定 4 个电子电离能分别为:9.322、18.211、153.893、217.713eV, 原子半径 1.0–1.1A°。

铍原子外层第一个电子电离前,内、外层电子自旋椭圆轨道组合均属氢原子型。第一个电子完全电离后的铍离子 B⁺电子自旋椭圆轨道组合属锂原子型, 所以相关参数分析计算应分 3 步进行。

参照图 16.2, 铍原子内 4 个电子自旋椭圆轨道组合应如图 17.1 所示, 才能维持稳定。内层电子自旋椭圆轨道平面在外层电子电、磁场力作用下将绕自旋椭圆轨道长轴附加旋转, 形成两个对称的旋转椭球曲面, 外层电子在内层的电子电、磁场力作用下自旋椭圆轨道将出现侧向附加运动。这种相互影响结果就形成内、外两层“s 型球壳状电子云层”。根据牛顿力学、库仑定律, 我们有:

$$\left\{ \begin{array}{l} L = \sqrt{\bar{R}_{\theta 1}^2 + \bar{R}_{\theta 2}^2} \end{array} \right. \quad (17.1-1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} = \frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 1})^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 L^3} \end{array} \right. \quad (17.1-2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} = \frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 2})^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 L^3} \end{array} \right. \quad (17.1-3)$$

简化得:

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{Z}_1 = 3.75 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5} \end{array} \right. \quad (17.2-1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{Z}_2 = 3.75 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} \end{array} \right. \quad (17.2-2)$$

由 (15.41)、(16.16) 式, 因 K_m=1, 得:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\bar{Z}_2}{\bar{Z}_1} = \frac{1}{N_{1,2}^2} \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^3 \end{array} \right. \quad (17.3-1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} N_{1,2} = \left(\frac{N_{\theta 2}}{N_{\theta 1}} \right)^3 \left(\frac{\bar{Z}_1}{\bar{Z}_2} \right)^2 \left(\frac{1 - E_{\theta 1}^2}{1 - E_{\theta 2}^2} \right)^{1.5} \end{array} \right. \quad (17.3-2)$$

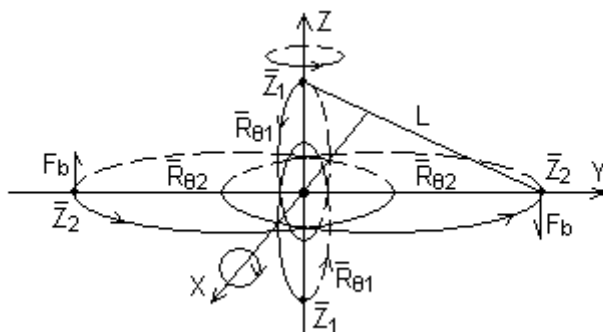


图 17.1 铍原子内电子自旋、侧向附加运动轨道组合模型

联立 (17.2)、(17.3) 方程组得：

$$\frac{1}{N_{1,2}^2} \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^3 = \frac{3.75 - 2 \left[1 + \left(\bar{R}_{\theta 1} / \bar{R}_{\theta 2} \right)^2 \right]^{-1.5}}{3.75 - 2 \left[1 + \left(\bar{R}_{\theta 2} / \bar{R}_{\theta 1} \right)^2 \right]^{-1.5}} \quad (17.4)$$

由(15.11)式，内、外两层电子自旋椭圆轨道的离心率 $E_{\theta i}$ 为：

$$E_{\theta} = \sqrt{1 - \frac{\Delta W_{ei} e N_{\theta}^2}{(\bar{Z}_i a_c c)^2 m_{e0}}} \quad (17.5)$$

铍原子内电子自旋椭圆轨道参数模拟计算程序如下：

1. 由铍原子内、外两层电子的电离能，令 $\sum \Delta W_{e2} = 27.533\text{eV}$ 、 $\sum \Delta W_{e1} = 371.606\text{eV}$ ， $N_{\theta 1} = 1$ 、 $N_{\theta 2} = 1.5$ 。

由 (16.4) 式，令 $\bar{Z}_1 = 3.75$ 、 $\bar{Z}_2 = 1.75$ ，分别代入 (17.5) 式，得：

$$E_{\theta 1} = 0.1699644106, \quad E_{\theta 2} = 0.5065796762。$$

2. 将上述各参数代入 (17.3-2) 式，得： $N_{1,2} = 23.139$ ，取 23。

3. 将 $N_{1,2} = 23$ 代入 (17.4) 式，得： $\bar{R}_{\theta 2} / \bar{R}_{\theta 1} = 6.3621652$ ，代入 (17.2) 方程组得： $\bar{Z}_1 = 3.742512847$
 $\bar{Z}_2 = 1.821891263$ 。

4. 令 $E_{\theta 1} = 0.1699644106$ ，将 $N_{\theta i}$ 、 \bar{Z}_i 、 $\bar{R}_{\theta 2} / \bar{R}_{\theta 1}$ 一起代入 (16.10) 式，得： $E_{\theta 2} = 0.5426923566$ 。

5. 将 $N_{\theta i}$ 、 \bar{Z}_i 、 $E_{\theta i}$ 值分别代入(15.11)式，求出铍原子原始状态的总电离能：

$$\sum \Delta W_{eia} = 398.4441085\text{eV}，与实验值 \sum \Delta W_{ei0} = 399.139\text{eV} 比较，略小。$$

6. 微调 $E_{\theta 1}$ 值，重复 4~5 计算程序，最后得：当 $E_{\theta 1} = 0.16490685$ 时，

$$E_{\theta 2} = 0.5415575863 \quad \sum \Delta W_{eia} = 399.139\text{eV}$$

7. 令 $\theta_i = 0、\pi$ ，将上述各参数分别代入 (15.7)、(15.12) 式，算得铍原子外层“s 型电子云层”内、外半径和平均半径。

铍原子 Be 内部结构、参数计算结果表 (半径单位 A°)表 17.1

$N_{1,2}$	17	18	19	20	21
-----------	----	----	----	----	----

$E_{\theta 1}$	0.2012983478	0.194591632	0.188181261	0.1820344636	0.1761226983
$E_{\theta 2}$	0.4112049615	0.4398212558	0.4648951917	0.4871497652	0.5071027948
\bar{Z}_1	3.736786778	3.738120189	3.739262476	3.740248373	3.741105084
\bar{Z}_2	1.85469143	1.847584016	1.84127354	1.83563886	1.830581641
$R_{\theta 2(0)}$	0.4549	0.4476	0.4414	0.4362	0.4316
$R_{\theta 2(\pi)}$	1.090	1.1504	1.2084	1.2648	1.3196
$\bar{R}_{\theta 2}$	0.7726	0.7990	0.8249	0.8505	0.8756

8. 同理，令 $N_{1,2}=17、18、19、20、21$ ，分别重复 3~7 计算程序，结果见表 17.1。

由表 17.1 计算结果可以看出： $N_{1,2}=17、18$ 时，“s 型球壳状电子云层”外半径与实验值原子半径 $1.0-1.1A^\circ$ 很接近，它们将作为后续原子能级计算依据。

17.1.2. 铍离子 Be^+ 内部结构和参数计算

铍离子 Be^+ 内电子自旋椭圆轨道参数计算结果表表 17.2

$N_{1,2}$	Φ_1°	$E_{\theta 1}$	$E_{\theta 2}$	\bar{Z}_1	\bar{Z}_2
16	1.039281	0.170251801	0.5142742949	3.741544867	2.116412676
17	0.9613	0.165470325	0.5369154899	3.742515504	2.107660264
18	0.89306	0.1609317267	0.5570420175	3.743330151	2.099977322
19	0.832814	0.1566126991	0.5750910309	3.744020279	2.09318866

铍原子外层第一个电子完全电离后，其电子自旋椭圆轨道组合与锂原子相同，但核电荷数应取 4。参照图 16.3、方程组 (16.13)、(16.14) 和 (16.15) 式，得：

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{Z}_1 &= 4 \cos^3 \phi_1 - \frac{1}{4} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} + \operatorname{tg} \phi_1 \right)^2 \right]^{-1.5} & (17.6-1) \\ \bar{Z}_2 &= 4 - 2 \left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \operatorname{tg} \phi_1 \right) \left[\left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 + \left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \operatorname{tg} \phi_1 \right)^2 \right]^{-1.5} & (17.6-2) \\ \frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} &= \frac{1}{\cos \phi_1 \sqrt{2 \sin \phi_1}} & (17.6-3) \\ \frac{1}{N_{1,2}^2 (2 \sin \phi_1)^{1.5}} &= \frac{4 \left[1 + 2 \sin \phi_1 + (2 \sin \phi_1)^{1.5} \right]^{1.5} - \left[2 + (2 \sin \phi_1)^{1.5} \right]}{\left(4 - 1/4 \cos^3 \phi_1 \right) \left[1 + 2 \sin \phi_1 + (2 \sin \phi_1)^{1.5} \right]^{1.5} - (2 \sin \phi_1)^{1.5}} & (17.6-4) \end{aligned} \right.$$

参照本节 1~8 计算程序，令 $N_{\theta 1}=1、N_{\theta 2}=1.5、\sum \Delta W_{eia} = 389.817eV、N_{1,2}=16、17、18、19$ ，可分别求出铍离子 Be^+ 各个电子自旋椭圆轨道参数，见表 17.2。

17.1.3. 铍原子能级计算

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} &= \frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 1})^2} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,2}^3} \end{aligned} \right. \quad (17.7-1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} &= \frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,2}^3} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 L_{2,3}^3} \end{aligned} \right. \quad (17.7-2)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\bar{Z}_3 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 3}^2} &= \frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 3}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (\bar{R}_{\theta 3} + \bar{R}_{\theta 1})^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (\bar{R}_{\theta 3} - \bar{R}_{\theta 1})^2} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta 3}}{4\pi\epsilon_0 L_{2,3}^3} \end{aligned} \right.$$

(17.7-3)

铍原子外层第一个电子在逐步电离过程中，由于原子核和各个电子之间电场相互作用强度，随着各个电子自旋椭圆轨道位置变化，计算难度较大，我们必须先对其作简化处理。见图 17.2，内层电子对外层电子 \bar{Z}_i 值有影响，最外层电子对最内层电子 \bar{Z}_1 值影响可以忽略不计。见方程组 (17.7)。

简化得：

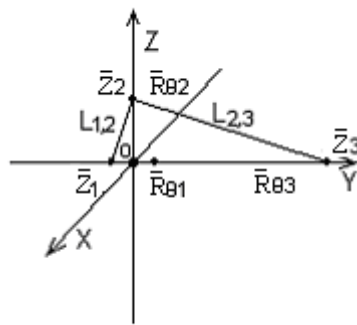


图 17.2 铍原子内电子
相对位置图

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{Z}_1 &= 3.75 - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5} \end{aligned} \right. \quad (17.8-1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{Z}_2 &= 4 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 3}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} \end{aligned} \right. \quad (17.8-2)$$

由 (17.3)、(17.8) 方程组得：

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{Z}_3 &= 4 - \left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^{-2} - \left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^{-2} \\ &\quad - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^2 \right]^{-1.5} \end{aligned} \right. \quad (17.8-3)$$

$$\frac{1}{N_{2,3}^2} \left(\frac{\bar{R}_{\theta 3}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^3 = \frac{4 - \left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^{-2} - \left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^{-2} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^2 \right]^{-1.5}}{4 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 3}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5}} \quad (17.9)$$

铍原子在原始状态下， $N_{1,2}$ 取什么值？因实验探测铍原子半径为： $1.0 \sim 1.1 \text{ \AA}$ ，若再考虑金属性元素单质的外层，能形成“自由电子云层”，化合物原子外层“电子云”都有部分重叠现象，由表 17.1、 $R_{\theta 2(\pi)}$ 、值，我们应取 $17 \leq N_{1,2} \leq 20$ 。由第 16 章可知：在原子光谱能级计算中，内层电子的 $E_{\theta 1}$ 、 $E_{\theta 2}$ 值有从原子状态向电子完全电离后的离子状态过渡趋势，所以，应经过几种方案对原子能级计算结果比较分析后，才能确定。我们选择如下铍原子能级模拟计算程序：

9. 令铍原子原始状态 $N_{1,2}=19$ 、 $N_{\theta 1}=1$ 、 $N_{\theta 2}=N_{\theta 3}=1.5$ ；离子状态 $N_{1,2}=18$ ，查表 17.2 得： $E_{\theta 1}=0.1609317267$ 。电子逐步电离初期， $N_{1,2}=19$ ，设 $\bar{Z}_1=3.75$ 、 $\bar{Z}_2=2$ 、 $\bar{Z}_3=1$ 、 $E_{\theta 3}=0$ ，将相关值分别代入 (17.3-1)、(16.9) 式，得： $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}=5.774335008$ ， $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}=0.1216696431$ 。

10. 令 $N_{2,3}=2$ ，同 $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}$ 、 $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}$ 一起代入 (17.9) 式，得： $\bar{R}_{\theta 3}/\bar{R}_{\theta 2}=1.421541032$ 。

11. 将 $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}$ 、 $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}$ 、 $\bar{R}_{\theta 3}/\bar{R}_{\theta 2}$ 一起代入 (17.8) 方程组得：

$$\bar{Z}_1=3.745031289 \quad \bar{Z}_2=1.896247359 \quad \bar{Z}_3=1.361799586$$

12. 将 \bar{Z}_i 、 $N_{1,2}=19$ 值代入 (17.3-1) 式，得新值： $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}=5.675214056$ ，一起代入 (16.10) 式，得： $E_{\theta 2}=0.48711471$ 。同理，将 \bar{Z}_2 、 \bar{Z}_3 、 $E_{\theta 2}$ 、 $\bar{R}_{\theta 3}/\bar{R}_{\theta 2}$ 、 $N_{\theta i}$ 值代入 (16.10) 式，得： $E_{\theta 3}=0.5028773261$

13. 将相应的 \bar{Z}_i 、 $E_{\theta i}$ 、 $N_{\theta i}$ 值分别代入 (15.11) 式，得原子总电离能： $\sum \Delta W_{eib} = 396.7249634 \text{ eV}$ 。

14. 以新的 \bar{Z}_i 、 $E_{\theta i}$ 等值重复 9~13 计算程序，直至 $\sum \Delta W_{eic} = 396.6746814 \text{ eV}$ 为常数。

15. 因 $\sum \Delta W_{ei0} = 399.139 \text{ eV}$ ，由 (16.11) 式，得原子能级： $\Delta W_{ei} = 2.464318621 \text{ eV}$ 。

16. 适当微调 $E_{\theta 1}$ 值，重复 9~15 计算程序，最后得：当 $E_{\theta 1}=0.16291$ 时，

$$\sum \Delta W_{eic} = 396.4137961 \text{ eV}, \quad \text{原子能级 } \Delta W_{ei} = 2.7252 \text{ eV}。$$

17. 同理，令 $N_{1,2}=19$ 、 $N_{\theta 1}=1$ 、 $N_{\theta 2}=1.5$ ， $E_{\theta 1}=0.1609317267$ 均为不变值， $N_{2,3}=3, 4, 5, \dots, 17$ ， $N_{\theta 3}=1.5, 2, 3$ ，分别重复 9~15 计算程序，求得各原子能级数据见表 17.3。

18. 令 $N_{1,2}=18.5$ 、 $N_{\theta 1}=1$ 、 $N_{\theta 2}=1.5$ ， $E_{\theta 1}=0.1609317267$ 均为常数， $N_{\theta 3}=3, 4, 5$ ， $N_{2,3}=19, 20, 46, 91, \dots$ (46、91 值是由 (17.3-2) 等式中模拟计算求出)，分别重复 9~15 计算程序，得相应的原子能级见表 17.4。

19. 令 $N_{1,2}=20$ 、 $N_{\theta 1}=1$ 、 $N_{\theta 2}=1.5$ ；离子状态 $N_{1,2}=19$ ，查表 17.2 得：

$E_{\theta 1}=0.1566126991$ 均为常数， $N_{\theta 3}=1.5, 2, 3$ ， $N_{2,3}=2, 3, \dots, 17$ ，分别重复 9~17 计算程序，得

铍原子、离子为另一种状态下，外层电子逐步电离过程中原子能级，见表 17.5。

铍原子能级计算结果表表 17.3

N_{e3}	$N_{2,3}$	E_{e2}	E_{e3}	$\sum \Delta W_{eib}$ eV	ΔW_{ei} eV	实验值 eV
1.5	2	0.4885102797	0.5007187202	396.6746814	2.46431862	2.7252
	2	0.4890225186	0.5012105588	396.4137961 ($E_{e1}=0.16291$)	2.7252	
	3	0.5257743248	0.614642384	394.8973346	4.24166542	
2	4	0.5423980572	0.1703480027	393.9081965	5.23080346	5.277
	5	0.5514043688	0.3534888217	393.2697172	5.86928278	
	6	0.5568658315	0.4458191133	392.8190209	6.31997907	6.457
	7	0.5604365389	0.5081348784	392.4813773	6.65762267	6.779
	8	0.5629017353	0.5545636931	392.2174938	6.92150621	6.997
	9	0.5646758664	0.5910803536	392.0046365	7.13436350	7.289
	10	0.5659953146	0.6208284993	391.8286858	7.31031422	7.401
	11	0.5670031918	0.645677859	391.6803794	7.45862057	7.462
	12	0.5677903612	0.6668330452	391.5533719	7.58562806	
	13	0.5684168028	0.6851154238	391.4431596	7.69584041	7.694
	14	0.5689234196	0.7011093504	391.3464508	7.79254916	
3	15	0.5693388871	0.7152445721	391.2607798	7.87822017	
	16	0.569683793	0.7278456763	391.1842599	7.95474011	7.988
	17	0.5699732282	0.7391632732	391.1154209	8.02357909	7.998
3	18	0.5702184581	0.1165424905	391.053099	8.08590100	8.089

铍原子能级计算结果表表 17.4

N_{e3}	$N_{2,3}$	E_{e2}	E_{e3}	$\sum \Delta W_{eib}$ eV	ΔW_{ei} eV	实验值 eV
3	19	0.5608957448	0.1670646209	391.3062219	7.83277807	8.335
4	46	0.5625401157	0.0871176480	390.6100692	8.52893079	
5	91	0.5628081284	0.0783784698	390.2953222	8.84367777	

20. 同理，令 $N_{1,2}=19.5$ 、 $N_{e1}=1$ 、 $N_{e2}=1.5$ ， $E_{e1}=0.1566126991$ 均为常数， $N_{e3}=3、4、5、6$ ， $N_{2,3}=18、44、86、149$ ，（ $N_{2,3}$ 值均是由（17.3-2）等式中模拟计算求得），分别重复 9~15 计算程序，可求出相应的铍原子各能级，见表 17.6。

通过表 17.3~表 17.6 计算结果比较可以看出：铍原子原始状态， $N_{1,2}=20$ ，离子状态 $N_{1,2}=19$ 计算结果与实验值更吻合，只要我们微调 E_{e1} 取值，就能与实验值相等，但已无此必要。

铍原子能级计算结果表表 17.5

N_{e3}	$N_{2,3}$	E_{e2}	E_{e3}	$\sum \Delta W_{eib}$ eV	ΔW_{ei} eV	实验值 eV
1.5	2	0.5105035709	0.5278616424	396.4879154	2.65108456	2.725
	3	0.5452401981	0.632230023	394.7520959	4.38690412	
	4	0.5608293013	0.2497425916	393.7890729	5.34992714	5.277

2	5	0.5692968151	0.393149501	393.1683692	5.97063081	
	6	0.5744387584	0.4749794477	392.7306094	6.40839063	6.457
	7	0.5778034894	0.531872743	392.4028537	6.73614630	6.779
	8	0.5801278393	0.5748638351	392.1468091	6.99219089	6.997
	9	0.5818013026	0.608960831	391.9403429	7.19865711	7.289
	10	0.5830462663	0.6368931379	391.7697191	7.36928086	7.401
	11	0.583997472	0.6603191363	391.6259327	7.51306734	7.462
	12	0.5847405177	0.680322739	391.5028169	7.63618312	7.694
	13	0.5853319329	0.6976506922	391.3959968	7.74300320	
	14	0.5858102814	0.7128384159	391.302276	7.83672404	
	15	0.586202606	0.7262820654	391.2192604	7.91973963	7.988
	16	0.5865283271	0.7382823124	391.1451188	7.99388120	7.998
3	17	0.5868016826	0.1117841642	391.0784246	8.06057538	8.089

铍原子能级计算结果表表 17.6

N_{e3}	$N_{2,3}$	E_{e2}	E_{e3}	$\sum \Delta W_{eib}$ eV	ΔW_{ei} eV	实验值 eV
3	18	0.5784419544	0.1710758722	391.3049719	7.83402811	7.988
4	44	0.5801639669	0.1121071297	390.6006239	8.53837613	
5	86	0.5804371661	0.0509308779	390.2913574	8.84764257	8.865
6	149	0.5805030462	0.0216456788	390.1232882	9.01571181	

21. 令 $N_{1,2}=19.5$ 、 $N_{e1}=1$ 、 $N_{e2}=1.5$ 、 $N_{e3}=5$ 、 $N_{2,3}=86$ 、87、..... 92， $E_{e1}=0.1566126991$ ，分别重复 9~15 计算程序，可求出铍原子能级的另一组数据，其中 $N_{2,3}$ 不一定要取连续的自然数，它可以是 2、3、4、..... 的倍数，视具体实验值而定，见表 17.7。

综上所述，对多个电子原子的能级计算，根据本书的模型，选择适当的 $N_{1,2}$ 、 $N_{2,3}$ 量子数，微调 E_{e1} 参数，我们可以计算出所有原子能级值。不足之处是实验室目前还无法直接测定电子自旋椭圆轨道各参数，我们只能从实验测定的原子能级或光谱能量来反向模拟计算。

铍原子能级计算结果表表 17.7

N_{e3}	$N_{2,3}$	E_{e2}	E_{e3}	$\sum \Delta W_{eib}$ eV	ΔW_{ei} eV	实验值 eV
5	86	0.5804371661	0.0509308779	390.2913574	8.84764257	
	87	0.5804394137	0.1006931801	390.2871485	8.85185147	
	88	0.5804415857	0.1324521788	390.2830196	8.8559804	
	89	0.5804436855	0.1575166242	390.2789684	8.86003163	
	90	0.5804457163	0.1787367217	390.2749924	8.86400762	8.865
	91	0.580447681	0.1973661221	390.2710895	8.86791052	
	92	0.5804495825	0.2140907961	390.2672575	8.87174246	

17.2. 硼原子内部结构、参数和原子能级计算

17.2.1. 硼原子内部结构和参数计算

根据实验测定，硼原子内 5 个电子电离能分别为：8.298、25.154、37.930、259.368、340.217eV，

总电离能 $\sum \Delta W_{ei0} = 670.967 \text{eV}$ 。原子半径 $0.8 \sim 1.0 \text{\AA}$ ，原子能级见表 17.10、表 17.11。参照 17.1 节、图 17.2，硼原子内电子自旋椭圆轨道组合应如图 17.3 所示，才能稳定。我们略去 Φ_1 角偏移效应，由牛顿力学、库仑定律导出 (17.10) 方程组。

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} &= \frac{5e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 1})^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,2}^3} \end{aligned} \right. \quad (17.10-1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} &= \frac{5e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 2})^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,2}^3} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 L_{2,3}^3} \end{aligned} \right. \quad (17.10-2)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\bar{Z}_3 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 3}^2} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{5}{\bar{R}_{\theta 3}^2} - \frac{2\bar{R}_{\theta 3}}{L_{2,3}^3} - \frac{1}{(\bar{R}_{\theta 3} + \bar{R}_{\theta 1})^2} - \frac{1}{(\bar{R}_{\theta 3} - \bar{R}_{\theta 1})^2} \right] \end{aligned} \right. \quad (17.10-3)$$

简化得：

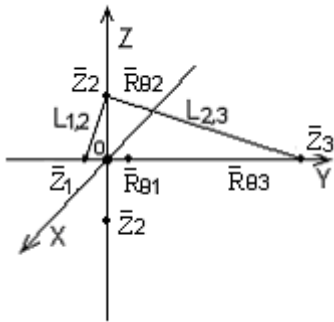


图 17.3 硼原子内电子
相对位置图

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{Z}_1 &= 4.75 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5} \end{aligned} \right. \quad (17.11-1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{Z}_2 &= 4.75 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 3}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} \end{aligned} \right. \quad (17.11-2) \quad (17.11-3) \text{ 将 (15.41) 式代入 (17.11-2)、}$$

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{Z}_3 &= 5 - \left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^{-2} - \left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^{-2} - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^2 \right]^{-1.5} \end{aligned} \right.$$

(17.11-3) 式，得：

$$\frac{1}{N_{2,3}^2} \left(\frac{\bar{R}_{\theta 3}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^3 = \frac{5 - \frac{1}{\left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}}\right)^2} - \frac{1}{\left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}}\right)^2} - \frac{2}{\left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 3}}\right)^2\right]^{1.5}}}{4.75 - \frac{2}{\left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}}\right)^2\right]^{1.5}} - \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 3}}{\bar{R}_{\theta 2}}\right)^2\right]^{1.5}}} \quad (17.12)$$

由 (15.41)、(15.12) 式:

$$\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} = \sqrt[3]{N_{1,2}^2 \frac{\bar{Z}_2}{\bar{Z}_1}} \quad (17.13-1)$$

$$E_{\theta 2} = \sqrt{1 - \left(\frac{N_{\theta 2}}{N_{\theta 1}}\right)^2 (1 - E_{\theta 1}^2) \frac{\bar{Z}_1 \bar{R}_{\theta 1}}{\bar{Z}_2 \bar{R}_{\theta 2}}} \quad (17.13-2)$$

$$E_{\theta 3} = \sqrt{1 - \left(\frac{N_{\theta 3}}{N_{\theta 2}}\right)^2 (1 - E_{\theta 2}^2) \frac{\bar{Z}_2 \bar{R}_{\theta 2}}{\bar{Z}_3 \bar{R}_{\theta 3}}} \quad (17.13-3)$$

$$\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}} = \frac{\bar{Z}_3 (1 - E_{\theta 3}^2) N_{\theta 1}^2}{\bar{Z}_1 (1 - E_{\theta 1}^2) N_{\theta 3}^2} \quad (17.13-4)$$

硼原子内部结构、各个电子自旋椭圆轨道参数模拟计算程序如下:

1. 令 $N_{\theta 1}=1$ 、 $N_{\theta 2}=N_{\theta 3}=1.5$ 、 $N_{1,2}=17$ 、 $\bar{Z}_1=4.75$ 、 $\bar{Z}_2=2.75$ 、 $\bar{Z}_3=1$ 、 $E_{\theta 1}=0.1$ 、 $E_{\theta 3}=0$ ，分别代入(17.13-1)、(17.13-4) 式，得： $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}=5.510347347$ $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}=0.09451237521$ 。
2. 令 $N_{2,3}=1$ ，将 $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}$ 、 $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}$ 一起代入 (17.12) 式，得： $\bar{R}_{\theta 3}/\bar{R}_{\theta 2}=0.971354264$ 。
3. 将 $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}$ 、 $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}$ 、 $\bar{R}_{\theta 3}/\bar{R}_{\theta 2}$ 值分别代入 (17.11) 方程组得：

$$\bar{Z}_1=4.738613655 \quad \bar{Z}_2=2.475810775 \quad \bar{Z}_3=2.269083104$$
4. 将 \bar{Z}_i 、 $N_{\theta i}$ 、 $N_{1,2}=17$ 、 $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}$ 、 $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}$ 、 $E_{\theta 1}=0.1$ 值分别代入 (17.13) 方程组得： $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}=5.325021063$ $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}=0.2135021$ ， $E_{\theta 2}=0.4465120303$ ， $E_{\theta 3}=0.3172835642$ 。
5. 将 \bar{Z}_i 、 $N_{\theta i}$ 、 $E_{\theta i}$ 值分别代入(15.11)式，算得 5 个电子总电离能： $\sum \Delta W_{ei0}=692.2587889\text{eV}$ 。
6. 以新的 \bar{Z}_i 、 $E_{\theta 3}$ 值，代入 (17.13-1)、(17.13-4) 式，重复 1~5 计算程序，直至 $\sum \Delta W_{eia}=690.3705144\text{eV}$ 为常数，略大于实验值 $\sum \Delta W_{ei0}=670.967\text{eV}$ 。
7. 适当调整 $E_{\theta 1}$ 取值范围，重复 1~6 计算程序，最后得：当 $E_{\theta 1}=0.1944862044$ 时，

$$\sum \Delta W_{eia}=670.967\text{eV}$$
。

8. 同理，令 $N_{1,2}=16、18、19、20$ ，重复 1~7 计算程序，求得电子 \bar{Z}_i 、 $E_{\theta i}$ 值。

9. 将各 \bar{Z}_i 、 $E_{\theta i}$ 、 $N_{\theta i}$ 值分别代入(15.7)、(15.12)式，令、 $\theta_i=0、\pi$ ，可求出电子自旋椭圆轨道参数值，见表 17.8。

硼原子内部结构、参数计算结果表 (半径单位 A°) 表 17.8

$N_{1,2}$	16	17	18	19	20
\bar{Z}_1	4.735866103	4.737393859	4.738687511	4.739792467	4.740743642
\bar{Z}_2	2.474483909	2.468725932	2.463593351	2.458999284	2.454870288
\bar{Z}_3	2.076414537	2.097001777	2.114482795	2.12949919	2.142527476
$E_{\theta 1}$	0.2049905362	0.1944862044	0.1841990858	0.1740809	0.1640807263
$E_{\theta 2}$	0.4397305292	0.4681501595	0.4928926473	0.514732940	0.5342219851
$E_{\theta 3}$	0.138390543 i	0.1713469525	0.2680612289	0.330936171	0.3784422718
$R_{\theta 2(0)}$	0.334210	0.328504	0.323732	0.319661	0.316131
$R_{\theta 2(\pi)}$	0.858820	0.906821	0.953048	0.997802	1.041301
$\bar{R}_{\theta 2}$	0.596514	0.617663	0.638390	0.658731	0.678716
$R_{\theta 3(0)}$		0.484729	0.444058	0.420096	0.403152
$R_{\theta 3(\pi)}$		0.685192	0.769316	0.835677	0.894079
$\bar{R}_{\theta 3}$	0.562640	0.584961	0.606687	0.627887	0.648615

17.2.2. 硼离子 B^+ 内部结构和参数计算

参照 17.1 节图 17.1 铍原子内部结构计算模型，因为核电荷数为 5，我们有：

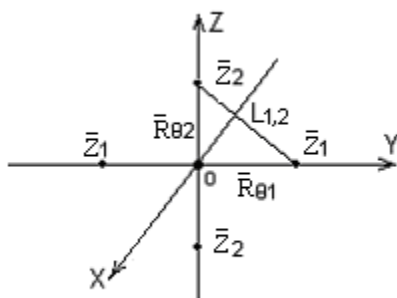


图 17.4 硼离子内电子
相对位置图

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} &= \frac{5e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 1})^2} \\ &\quad - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,2}^3} \quad (17.14-1) \\ \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} &= \frac{5e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 2})^2} \\ &\quad - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,2}^3} \quad (17.14-2) \end{aligned} \right.$$

简化得:

$$\begin{cases} \bar{Z}_1 = 4.75 - 2 \left[1 + (\bar{R}_{\theta 2} / \bar{R}_{\theta 1})^2 \right]^{-1.5} & (17.15-1) \\ \bar{Z}_2 = 4.75 - 2 \left[1 + (\bar{R}_{\theta 1} / \bar{R}_{\theta 2})^2 \right]^{-1.5} & (17.15-2) \end{cases}$$

由 (17.3-1) 式, 联立 (17.15) 方程组得:

$$\frac{1}{N_{1,2}^2} \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^3 = \frac{4.75 - 2 \left[1 + (\bar{R}_{\theta 1} / \bar{R}_{\theta 2})^2 \right]^{-1.5}}{4.75 - 2 \left[1 + (\bar{R}_{\theta 2} / \bar{R}_{\theta 1})^2 \right]^{-1.5}} \quad (17.16)$$

根据 (17.13)、(17.15) 方程组, (17.16)、(15.7)、(15.12) 式, 参照 17.1 节铍原子 1~9 计算程序, 令 $\sum \Delta W_{ei0} = 662.669\text{eV}$, 得硼离子 B^+ 内部结构参数, 见表 17.9。

硼离子 B^+ 内部结构参数计算结果表 (半径单位 A°) 表 17.9

$N_{1,2}$	17	18	19	20	21
\bar{Z}_1	4.738998376	4.740129133	4.741094833	4.741926007	4.742646456
\bar{Z}_2	2.842752291	2.83633042	2.830643113	2.825576514	2.821038609
$E_{\theta 1}$	0.1448008043	0.1330941967	0.1213038073	0.1092638506	0.0967493541
$E_{\theta 2}$	0.5843090113	0.6015065491	0.6170099394	0.6310771482	0.643913695
$R_{\theta 1(0)}$	0.0975404	0.098525	0.099540	0.100603	0.101736
$R_{\theta 1(\pi)}$	0.130571	0.128777	0.127023	0.125284	0.123530
$\bar{R}_{\theta 1}$	0.114056	0.113651	0.113282	0.112944	0.112633
$R_{\theta 2(0)}$	0.264366	0.262119	0.260127	0.258346	0.256741
$R_{\theta 2(\pi)}$	1.007567	1.053430	1.098275	1.142197	1.185276
$\bar{R}_{\theta 2}$	0.635966	0.657774	0.679201	0.700272	0.721008

17.2.3. 硼原子能级计算

硼原子最外层一个电子在逐步电离过程中, 内层 $N_{\theta 1}$ 、 $N_{\theta 2}$ 、 $N_{1,2}$ 值将维持不变。令: $\sum \Delta W_{ei0} = 670.967\text{eV}$ 、 $N_{1,2}=17$ 、 $N_{\theta 1}=1$ 、 $N_{\theta 2}=1.5$ 、 $N_{\theta 3}=1.5$ 、 2 、 2.5 、 3 、 4 、 5 和 10^5 , $E_{\theta 1}=0.1944862044 \sim 0.1448008043$, $N_{2,3}$ 值由 (17.3-2) 式插入 1~7 计算程序模拟计算, 成立条件是: $0 \leq E_{\theta 3} \leq 1$ 。参照 1~7 计算程序, 算得

硼原子在外层电子逐步电离各状态中的 $\sum \Delta W_{eic}$ 值, 进而由(16.11)式算得各原子能级 ΔW_{ei} 值, 详见表 17.10。

硼原子能级计算结果表表 17.10

N_{e3}	$N_{2,3}$	E_{e1}	E_{e2}	E_{e3}	$\sum \Delta W_{eib}$ eV	ΔW_{ei} eV	实验值 eV
1.5	4	0.144801	0.56149478	0.621531	669.674	1.29299995	
	5	0.144801	0.56786633	0.653430	668.598496	2.36850389	
2	6	0.144801	0.57185724	0.201196	667.852777	3.11422315	3.572
	6	0.147100	0.57226043	0.202824	667.395	3.572	
	7	0.144801	0.57453711	0.301624	667.301818	3.66518230	4.9642
	11	0.144801	0.57968227	0.490741	666.022431	4.94456875	
	12	0.144801	0.58032630	0.519210	665.823213	5.14378664	
2.5	18	0.144801	0.58237156	0.248970	665.048042	5.91895780	5.9335
	19	0.144801	0.58255340	0.296526	664.961054	6.00594614	
3	32	0.144801	0.58364601	0.128716	664.274596	6.69240384	6.7900
	36	0.144801	0.58377951	0.287142	664.151456	6.81554380	6.8202
4	80	0.144801	0.58419703	0.074386	663.535165	7.43183530	7.4377
	84	0.144801	0.57420729	0.190009	663.507301	7.45969898	7.4572
5	158	0.144801	0.58427989	0.021236	663.218348	7.74865180	7.7467
	162	0.144801	0.58428130	0.129211	663.209248	7.75775188	
10^5		0.144801	0.58430901	1.2×10^{-7}	662.669	8.298	8.2983

同理, 令: $\sum \Delta W_{ei0} = 670.967\text{eV}$ 、 $N_{1,2} = 19$ 、 $E_{e1} = 0.1740809 \rightarrow 0.1213038073$, 重复上述计算程序,

我们可以求出另一个系列的硼原子各能级值, 详见表 17.11。

硼原子能级计算结果表表 17.11

N_{e3}	$N_{2,3}$	E_{e1}	E_{e2}	E_{e3}	$\sum \Delta W_{eib}$ eV	ΔW_{ei} eV	实验值 eV
2	5	0.12130381	0.60237754	0.224922	668.232679	2.73432124	3.572
	6	0.12130381	0.60592103	0.324466	667.530163	3.43683736	
	7	0.12130381	0.60830322	0.389918	667.011653	3.95534718	4.9642
	10	0.12130381	0.61215807	0.511650	666.028987	4.93801256	
	11	0.12130381	0.61288327	0.539633	665.809381	5.15761938	
2.5	16	0.12130381	0.61487097	0.264517	665.084565	5.88243464	5.9335
	17	0.12130381	0.61509214	0.312709	664.985160	5.98184009	
3	28	0.12130381	0.61624762	0.085725	664.313641	6.65335869	6.7900
4	72	0.12130381	0.61688692	0.075813	663.538296	7.42870380	7.4377
5	143	0.12130381	0.61697823	0.049277	663.218088	7.74891189	7.7467
10^5		0.12130381	0.61700994	0.0	662.669	8.298	8.2983

从表 17.10、表 17.11 中可以看出: $N_{1,2} = 17、19$ 两个系列的参数在 E_{e1} 变化极小时, 与实验值都很吻合。

17.3. 碳原子内部结构、参数和原子能级计算

17.3.1. 碳原子内部结构、参数计算

实验测定碳原子外层 4 个电子电离能分别为：11.260、24.383、47.887、64.492eV。原子半径 0.7~0.8A°。

因为碳原子外层 4 个电子自旋椭圆轨道参数完全相同，“电子云层”组成两对旋转椭球曲面，见图 17.5，我们有：

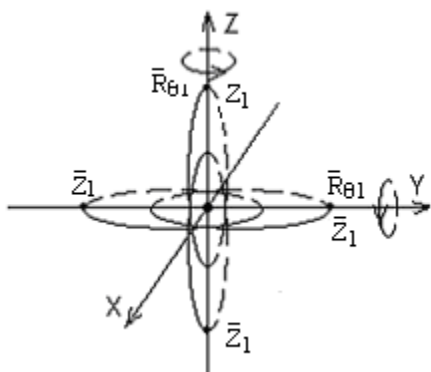


图 17.5 碳原子外层 4 个电子
自旋轨道组

$$\frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} = \frac{3.75e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 1}^2)^{1.5}} \quad (17.17)$$

由 (17.17) 式，得：

$$\bar{Z}_1 = 3.75 - \frac{1}{\sqrt{2}} = 3.042893219$$

由 (15.11) 式，令同层的电子数为 N_e 个，

$$\text{得: } E_\alpha = \sqrt{1 - \frac{2\sum \Delta W_{eia} N_\alpha^2 e}{m_{e0} N_e (\bar{Z}_i a_c)^2}} \quad (17.18) \text{ 令 } N_{\theta 1}=1.5, \sum \Delta W_{ei0}=148.022\text{eV}, N_e=4, \text{ 将 } \bar{Z}_1 \text{ 值代入 (17.18)}$$

式，得：

$E_{\theta 1}=0.5822983738$ 。由 (15.7)、(15.12) 式，令 $\theta_1=0, \pi$ ，求得碳原子外层 4 个电子自旋椭圆轨道参数为： $R_{\theta 1(0)}=0.247291A^\circ$ 、 $R_{\theta 1(\pi)}=0.936765A^\circ$ 、 $\bar{R}_{\theta 1}=0.592028A^\circ$ 。

17.3.2. 碳离子内部结构、参数计算

碳原子外层一个电子完全电离后，电子自旋椭圆轨道组合类似锂原子，但 $N_{\theta 1}=1.5$ 、 $N_{1,2}=1$ ，核电荷数为 4，见图 17.6。因为内层电子对外层电子的对称性电场排斥力平衡作用， \bar{Z}_1 电子的平移角 Φ_1 可以忽

略不计，我们有：

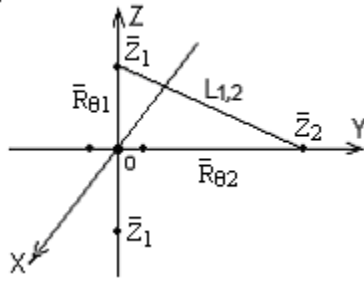


图 17.6 碳离子 C⁺内 5 个电子相对位置图

简化得：

$$\begin{cases} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} = \frac{3.75 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,2}^3} & (17.19-1) \\ \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} = \frac{4 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{2 e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,2}^3} & (17.19-2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \bar{Z}_1 = 3.75 - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5} & (17.20-1) \\ \bar{Z}_2 = 4 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} & (17.20-1) \end{cases}$$

由 (15.12)、(16.9) 式与 (17.20) 方程组联立得：

$$\frac{1}{N_{1,2}^2} \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^3 = \frac{4 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5}}{3.75 - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5}} \quad (17.21)$$

由 (17.13) 方程组得：

$$E_{\theta 2} = \sqrt{1 - \left(\frac{N_{\theta 2}}{N_{\theta 1}} \right)^2 \frac{\bar{Z}_1 \bar{R}_{\theta 1}}{\bar{Z}_2 \bar{R}_{\theta 2}} (1 - E_{\theta 1}^2)} \quad (17.22)$$

碳离子内部结构、参数模拟计算程序如下：

1. 令 $N_{1,2}=1$ ，代入 (17.21) 式，得： $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}=0.9911356941$ 。
2. 将 $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}$ = 值代入(17.20)方程组得： $\bar{Z}_1=3.391714272$ 、 $\bar{Z}_2=3.302315853$ 。

3. 令 $N_{\theta_1}=N_{\theta_2}=1.5$ 、 $E_{\theta_1}=0.5$ ，与 \bar{Z}_1 、 \bar{Z}_2 、 $\bar{R}_{\theta_2}/\bar{R}_{\theta_1}$ 一起代入 (17.22) 式，得： $E_{\theta_2}=0.4720245236$ 。

4. 将上述各式分别代入 (15.11) 式，算得总电离能 $\sum \Delta W_{ei0} = 155.5953768 \text{eV}$ ，与碳离子外层 3 个电子总电离能 $\sum \Delta W_{ei0} = 136.762 \text{eV}$ 比，略大。

5. 适当调整 E_{θ_1} 值，重复 2~4 计算程序，最后得：当 $E_{\theta_1}=0.583764115$ 时， $\sum \Delta W_{ei0} = 136.762 \text{eV}$ 。

6. 由 (15.7)、(15.12) 式，令 $\theta_i=0$ 、 π ，求得碳离子电子自旋椭圆轨道参数为：

$$E_{\theta_1}=0.583764115 \quad E_{\theta_2}=0.5629201852$$

$$R_{\theta_1(0)}=0.221653\text{A}^\circ \quad R_{\theta_1(\pi)}=0.843383\text{A}^\circ \quad \bar{R}_{\theta_1}=0.532518\text{A}^\circ$$

$$R_{\theta_2(0)}=0.230690\text{A}^\circ \quad R_{\theta_2(\pi)}=0.824906\text{A}^\circ \quad \bar{R}_{\theta_2}=0.527798\text{A}^\circ$$

17.3.4. 碳原子能级计算

碳原子外层一个电子在逐步电离过程中，其电子自旋椭圆轨道组合模型如图 17.7 所示，我们有：

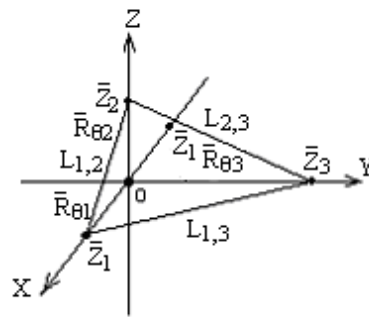


图 17.7 碳离子中电子位置图

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta_1}^2} &= \frac{3.75e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta_1}^2} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta_1}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,2}^3} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta_1}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,3}^3} \\ & \quad (17.23-1) \\ \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta_2}^2} &= \frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta_2}^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta_2}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,2}^3} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta_2}}{4\pi\epsilon_0 L_{2,3}^3} \quad \text{简化为:} \\ & \quad (17.23-2) \\ \frac{\bar{Z}_3 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta_3}^2} &= \frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta_3}^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta_3}}{4\pi\epsilon_0 L_{1,3}^3} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta_3}}{4\pi\epsilon_0 L_{2,3}^3} \\ & \quad (17.23-3) \end{aligned} \right.$$

$$\begin{cases} \bar{Z}_1 = 3.75 - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 3}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5} & (17.24-1) \\ \bar{Z}_2 = 4 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 3}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} & (17.24-2) \\ \bar{Z}_3 = 4 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^2 \right]^{-1.5} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^2 \right]^{-1.5} & (17.24-3) \end{cases}$$

联立 (15.41)、(17.24-2)、(17.24-3) 式, 得:

$$\frac{1}{N_{2,3}^2} \left(\frac{\bar{R}_{\theta 3}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^3 - \frac{4 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^2 \right]^{-1.5} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 3}} \right)^2 \right]^{-1.5}}{4 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 3}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5}} \quad (17.25)$$

由 (15.41)、(15.12) 式, 得:

$$N_{2,3} = \left(\frac{N_{\theta 3}}{N_{\theta 2}} \right)^3 \left(\frac{\bar{Z}_2}{\bar{Z}_3} \right)^2 \left(\frac{1 - E_{\theta 2}^2}{1 - E_{\theta 3}^2} \right)^{1.5} \quad (17.26)$$

碳原子能级模拟计算程序如下:

7. 令 $N_{\theta 1}=N_{\theta 2}=N_{\theta 3}=1.5$ 、 $N_{1,2}=N_{2,3}=1$ 、 $E_{\theta 1}=0.58$ 、 $E_{\theta 2}=E_{\theta 3}=0$ 、 $\bar{Z}_1=3.4$ 、 $\bar{Z}_2=3.3$ 、 $\bar{Z}_3=1$, 依次代入 (17.13-4)、(17.13-1) 式, 得: $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}=0.4432152608$ $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}=0.9900983595$ 。

8. 将 $N_{2,3}$ 、 $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}$ 、 $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}$ 一起代入 (17.25) 式, 得: $\bar{R}_{\theta 3}/\bar{R}_{\theta 2}=0.907849102$ 。

9. 将 $\bar{R}_{\theta 1}/\bar{R}_{\theta 3}$ 、 $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}$ 、 $\bar{R}_{\theta 3}/\bar{R}_{\theta 2}$ 值分别代入 (17.24) 方程组得:

$$\bar{Z}_1=3.32462785 \quad \bar{Z}_2=2.897543763 \quad \bar{Z}_3=2.168058568$$

10. 将 $N_{\theta i}$ 、 $\bar{R}_{\theta 2}/\bar{R}_{\theta 1}$ 、 $\bar{R}_{\theta 3}/\bar{R}_{\theta 2}$ 、 $E_{\theta 1}$ 值及新求的 \bar{Z}_i 值分别代入 (17.13-2)、(17.13-3) 式, 得: $E_{\theta 2}=0.4504219205$ $E_{\theta 3}=0.416487862i$ (出现虚数)。

11. 将 $N_{\theta i}$ 、 \bar{Z}_i 、 $E_{\theta i}$ 值分别代入 (15.11) 式, 得 4 个电子总电离能: $\sum \Delta W_{eic} = 162.5306605 \text{eV}$ 。

12. 将 $N_{\theta i}$ 、 \bar{Z}_i 、 $E_{\theta i}$ 重新代入 (17.13-4)、(17.13-1) 式, 重复 7~11 计算程序, 最后得: $\sum \Delta W_{eic} = 146.2870955 \text{eV}$ 为常数。

13. 因实验测定碳原子外层 4 个电子原始总电离能为 $\sum \Delta W_{ei0} = 148.022 \text{eV}$, 适当调整 $E_{\theta 1}$ 取值范围, 重复 7~12 计算程序, 最后得: $E_{\theta 1}=0.5731753467$ 时, $\sum \Delta W_{ei0} = 148.022 \text{eV}$ 。

碳原子能级计算结果表表 17.12

$N_{\theta 3}$	$N_{2,3}$	$E_{\theta 1}$	$E_{\theta 2}$	$E_{\theta 3}$	$\sum \Delta W_{eib}$ eV	ΔW_{ei} eV	实验值 eV
1.5	1	0.5781556	0.5558214	0.555821	146.758	1.264	1.264
	1	0.5836997	0.5618043	0.561804	145.338	2.684	2.684
	2	0.5801173	0.5586506	0.604947	143.839	4.183	4.183
2	8	0.5837641	0.5629032	0.295976	140.6249309	7.39706906	7.480
	12	0.5837641	0.5629144	0.435772	139.9865155	8.03548455	8.537
	18	0.5837641	0.5629183	0.553313	139.3881452	8.63385476	8.771
2.5	22	0.5837641	0.5629192	0.092219	139.1157914	8.90620856	
	24	0.5837641	0.5629194	0.220092	139.003486	9.01851404	9.003
	30	0.5837641	0.5629198	0.385714	138.7325458	9.28945424	9.172
3	44	0.5837641	0.5629201	0.069410	138.326576	9.69542398	9.713
	59	0.5837641	0.5629201	0.401584	138.0650824	9.95691758	
4	113	0.5837641	0.5629202	0.047909	137.6206096	10.4013904	
	128	0.5837641	0.5629202	0.280214	137.5535977	10.4684023	
5	225	0.5837641	0.56292018	0.028301	137.3084413	10.7135588	
	240	0.5837641	0.56292018	0.205222	137.2856393	10.7363607	
10^3		0.5837641	0.56292019	1.2×10^{-5}	136.7620136	11.2599864	11.268
备注	本表仅算出 $N_{2,3}$ 间隔值和部分实验值，从趋势上可看出能级分布						

从上面计算结果可以看出：碳原子外层第一个电子逐步电离过程中，随着 $N_{2,3}$ 、 $N_{\theta 3}$ 量子数逐步增大，内层电子自旋椭圆轨道离心率将由临界状态 $E_{\theta 1}=0.5731753467$ 趋于离子状态 $E_{\theta 1}=0.583764115$ 过渡。所以，令 $N_{\theta 1}=N_{\theta 2}=1.5$ 、 $N_{1,2}=1$ 、 $N_{\theta 3}=1.5$ 、2、2.5、3、4、5、…… 1000， $N_{2,3}=1$ 、2、3、…… ∞ ， $E_{\theta 1}$ 在趋于 $0.5731753467 \sim 0.583764115$ 之间调整取值，重复 7~13 计算程序，我们可以找出碳原子的所有能级，详见表 17.12。经过计算比较还知道： \bar{Z}_i 只与 $N_{2,3}$ 取值有关，与 $N_{\theta 3}$ 、 $E_{\theta 1}$ 取值无关； $\sum \Delta W_{eic}$ 只与 $N_{2,3}$ 、 $E_{\theta 1}$ 取值有关，与 $N_{\theta 3}$ 取值无关； $N_{\theta 3}$ 取值仅体现该电子自旋椭圆轨道离心率值必须 $E_{\theta 3} \rightarrow 0$ 。

第18章. 原子内同层的电子“s、p、d、f 型电子云壳层”形成原理和自旋椭圆轨道各参数变化分析

18.1. 原子内同层的电子“s、p、d、f 型电子云壳层”形成原理和自旋椭圆轨道各参数变化分析

在第 16 章中我们已经对氢、锂、氦三种原子内“s 型球壳状电子云层”形成原理作了阐述和计算。由此可知：每个电子在原子核和其它电子的电、磁场力作用下，不但绕原子核沿自旋椭圆轨道运动，还存在不同程度的侧向附加运动，如图 18.2、18.4、18.6 所示。这就形成自旋椭圆轨道旋转曲面。当同一层 n 对旋转椭球曲面“电子云壳层”在电场排斥力作用下分别对称地占据不同空间位置和方向时，就分别组成“s、p、d、f 型电子云壳层”。从 (1.2-1) 式可知，电子波动半径：

$$R_a \approx h/2\pi m_{e0}c \approx 3.8613 \times 10^{-13} \text{m}, \text{ 直径 } D_a = 2R_a \approx 7.7232 \times 10^{-13} \text{m}$$

假如电子自旋椭圆轨道其它各参数不变， D_a 就代表“s、p、d、f 型电子云壳层”自旋椭圆轨道旋转曲面的平均“厚度”。

当原子表层有 2 对或 2 对以上电子时，每对电子内单个电子沿各自自旋椭圆轨道运动是对称、同步的。多对电子在自旋椭圆轨道运动的相互空间位置可能是非对称或非同步的，否则原子半径将会随着外层电子对沿自旋椭圆轨道运动从近核点 $R_{\theta(0)}$ 至远核点 $R_{\theta(\pi)}$ 呈周期性大幅度变化。我们取每对电子自旋椭圆轨道的平均半径 \bar{R}_{θ} 和平均电荷强度系数 \bar{Z}_i 作为计算依据。随着同层的电子对数的增多，相互之间的电场排斥力增大。如果每对电子沿各自自旋椭圆轨道以非同步运动，将使每对电子自旋椭圆轨道参数随着运动的位置不同呈较大幅度变化。为了简化计算分析，当原子表层内有偶数个 n 对电子时，我们先令 n-1 对电子位于自旋椭圆轨道平均半径 \bar{R}_{θ} 位置，相应的电荷强度系数为 \bar{Z}_i ，由于对称性，电子各自自旋椭圆轨道参数相同，只要计算剩余一对电子自旋椭圆轨道参数变化既可。同理，当原子表层电子为奇数时，我们先令 n 对电子位于自旋椭圆轨道平均半径 \bar{R}_{θ} 位置，只要计算落单那个电子自旋椭圆轨道参数变化既可。

18.2 原子表层 $N_e=3$ 的电子“s+p 型电子云壳层”形成原理和自旋椭圆轨道参数变化

当原子表层为 3 个电子时，各个电子自旋椭圆轨道半径相互位置应如图 18.1 所示。

考虑到内层电子电场排斥力对外层成对电子的影响，将会消除单个电子对成对电子电场排斥力偏移作用，参见图 16.3，偏移角度 Φ_1 可以忽略不计。所以，令成对电子自旋椭圆轨道旋转曲面长轴为 Z 轴。由于成对电子以对称性电场排斥力，影响落单的电子，其强度远大于相互间的磁场力，使其无法形成自旋椭圆轨道旋转椭球曲面，只能形成自旋椭圆轨道平面。我们有：

$$\begin{cases} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} = \frac{2.75e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 (\bar{R}_{\theta 1}^2 + \bar{R}_{\theta 2}^2)^{1.5}} & (18.1-1) \\ \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} = \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 (\bar{R}_{\theta 1}^2 + \bar{R}_{\theta 2}^2)^{1.5}} & (18.1-2) \end{cases}$$

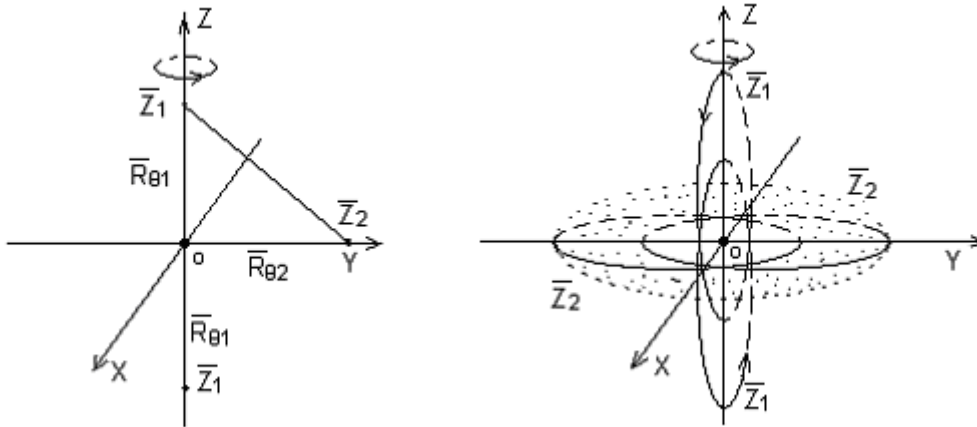


图 18.1 原子表层 3 个电子自旋椭圆图 18.2 原子表层 3 个电子“s+p 轨道平均半径相互位置图型电子云”形成原理示意图

简化得:

$$\bar{Z}_1 = 2.75 - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5} \quad (18.2-1)$$

$$\bar{Z}_2 = 3 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} \quad (18.2-2)$$

令 $N_{1,1}$ 、 $\bar{R}_{\theta 2}$ 值不变, 由 (15.41) 式, 联立 (18.2) 方程组得:

$$\left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^3 = \frac{3 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5}}{2.75 - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5}} \quad (18.3)$$

由 (15.7) 式, 电子自旋椭圆轨道的半短轴 $R_{\theta b}$ 为:

$$R_{\theta b} = \frac{r_0 N_{\alpha}^2}{\bar{Z}_i \sqrt{1 - E_{\alpha}^2}} \quad (18.4)$$

由 (15.12) 式, 电子自旋椭圆轨道长轴为 \bar{R}_{θ} , 其比值与离心率 $E_{\theta i}$ 的关系为:

$$E_{\theta_2} = \sqrt{1 - \frac{\bar{Z}_1 \bar{R}_{\theta_1} N_{\theta_2}^2 (1 - E_{\theta_1}^2)}{\bar{Z}_2 \bar{R}_{\theta_2} N_{\theta_1}^2}} \quad (18.5)$$

假设内层电子对外层电子自旋椭圆轨道参数影响不计，由 (15.11) 式，外层的各电子总电离能为：

$$\sum \Delta W_{eia} = \frac{m_{e0}}{2e} \left(\frac{a_c c}{N_{\alpha}} \right)^2 \left[N_{e1} \bar{Z}_1^2 (1 - E_{\theta_1}^2) + N_{e2} \bar{Z}_2^2 (1 - E_{\theta_2}^2) \right] \quad (18.6)$$

由能量守恒定律和 (18.6) 式，电子在自旋椭圆轨道某特征点的离心率 $E_{\theta_2(\theta)}$ 为：

$$E_{\theta_2(\theta)} = \sqrt{1 - \frac{2 \sum \Delta W_{eia} N_{\alpha}^2 e - N_{e1} \bar{Z}_1^2 (1 - E_{\theta_1}^2)}{m_{e0} (a_c c)^2 N_{e2} Z_{2(\theta)}^2}} \quad (18.7)$$

以硼原子为例，表层 3 个电子总电离能 $\sum \Delta W_{ei0} = 71.382\text{eV}$ ，电子自旋椭圆轨道各个平均值参数模拟计算程序如下：

1. 由 (18.3) 式，解出 $\bar{R}_{\theta_2} / \bar{R}_{\theta_1} = 0.988075244$
2. 将 $\bar{R}_{\theta_2} / \bar{R}_{\theta_1}$ 值分别代入 (18.2-1)、(18.2-2) 式，得： $\bar{Z}_1 = 2.390065808$ ， $\bar{Z}_2 = 2.305578505$ 。
3. 令 $N_{\theta_1} = N_{\theta_2} = 1.5$ ， $E_{\theta_1} = 0.5$ 、连同 \bar{Z}_1 、 \bar{Z}_2 、 $\bar{R}_{\theta_2} / \bar{R}_{\theta_1}$ 一起代入 (18.5) 式，得： $E_{\theta_2} = 0.4616635773$ 。
4. 令 $N_{e1} = 2$ 、 $N_{e2} = 1$ 、将上述各值一起代入 (18.6) 式，得： $\sum \Delta W_{ei0} = 77.1071982\text{eV}$ 。
5. 适当调整 E_{θ_1} 值，重复 3~4 计算程序，最后得：当 $E_{\theta_1} = 0.552890034$ 时， $\sum \Delta W_{ei0} = 71.382\text{eV}$ 。
6. 分别令 $\theta_1 = 0, \pi$ ，由 (15.12)、(15.7)、(18.4) 式，将上述各参数代入，求得各个电子自旋椭圆轨道参数见表 18.1。

电子自旋椭圆轨道参数的变化模拟计算程序如下：

7. 先令表 18.1 中 \bar{R}_{θ_1} 、 E_{θ_1} 值不变，取 $R_{\theta_2(0)} / \bar{R}_{\theta_1}$ 值分别代入 (18.2-1)、(18.2-2) 式，得 \bar{Z}_1 、 $\bar{Z}_{2(0)}$ 值。
8. 将 E_{θ_1} 、 $Z_{2(0)}$ 、 \bar{Z}_1 值及 $\sum \Delta W_{ei0}$ 值代入 (18.7) 式，得 $E_{\theta_2(0)}$ 值。
9. 将 \bar{Z}_1 、 $Z_{2(0)}$ 、 E_{θ_1} 、 $E_{\theta_2(0)}$ 值分别代入 (15.12)、(15.7) 式，重新求 $R_{\theta_2(0)} / \bar{R}_{\theta_1}$ 值。

原子表层 $N_e = 3$ 时各个电子自旋椭圆轨道参数变化计算结果表表 18.1

参数	单位	各个电子同步运动		各个电子非同步运动			
		$\theta_1 = \bar{\theta}_1$	$\theta_2 = \bar{\theta}_2$	$\theta_1 = \bar{\theta}_1$	$\theta_2 = 0$	$\theta_1 = \bar{\theta}_1$	$\theta_2 = \pi$
\bar{Z}_1		2.390065808		1.873906429		2.673715103	
\bar{Z}_2		2.305578505					
$Z_{2(0)}$				2.950950744			
$Z_{2(\pi)}$						1.51456401	

$E_{\theta 1}$		0.552890034	0.552890034	0.552890034
$E_{\theta 2}$		0.5211122705		
$E_{\theta 2(0)}$			0.4520793475	
$E_{\theta 2(\pi)}$				0.4259882855
$\bar{R}_{\theta 1}$	A°	0.7174948319	0.9151256643	0.6413771846
$R_{\theta 1(0)}$		0.3207990899		
$R_{\theta 1(\pi)}$		1.114190574		
$R_{\theta 1b}$		0.597855603	0.7625323299	0.5344302515
$\bar{R}_{\theta 2}$		0.7089388815		
$R_{\theta 2(0)}$		0.3395021313	0.2778634222	
$R_{\theta 2(\pi)}$		1.078375632		1.369541829
$R_{\theta 2b}$		0.6050709258		

10. 以新的 $R_{\theta 2(0)}/\bar{R}_{\theta 1}$ 值分别代入 (18.2-1)、(18.2-2) 式, 重复 7~9 计算程序, 直到 $R_{\theta 2(0)}/\bar{R}_{\theta 1}$ 值为常数。

11. 将第 10 程序中的 \bar{Z}_1 、 $Z_{2(0)}$ 、 $E_{\theta 1}$ 、 $E_{\theta 2(0)}$ 值分别代入 (15.12)、(15.7) 式, 算得各个电子自旋椭圆轨道各参数变化结果见表 18.1。

12. 令: 表 18.1 中 $\bar{R}_{\theta 1}$ 、 $E_{\theta 1}$ 值不变, 取 $\bar{R}_{\theta 2(\pi)}/\bar{R}_{\theta 1}$ 值分别代入 (18.2-1)、(18.2-2) 式, 重复 7~11 计算程序, 得 $\theta_2 = \pi$ 时, 各个电子自旋椭圆轨道参数变化, 见表 18.1。

由表 18.1 中的计算结果, 我们绘出硼原子表层“s+p”型电子云”图 18.2, 虚线部分表示变化范围。因为同层成对电子自旋椭圆轨道半径与单个电子接近, 由成对电子对单个电子的对称性电场排斥力远大于磁场力, 从而限制了单个电子的侧向附加运动, 无法形成旋转椭球曲面, 将单个电子的自旋椭圆轨道平面限制在 XOY 平面一定范围内。这与锂、铍原子的内层电子的自旋椭圆轨道半径远小于外层电子自旋椭圆轨道半径有本质差别。

18.3 原子表层 $N_e=4$ 的电子“s+p 型电子云壳层”形成原理和自旋椭圆轨道参数变化

当原子表层为 4 个电子时, 组成两对自旋椭圆轨道旋转曲面, 长轴正交。令长轴分别为 Z、Y 轴, 如图 18.3、图 18.4 所示, 我们有:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} = \frac{3.75e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 (\bar{R}_{\theta 1}^2 + \bar{R}_{\theta 2}^2)^{1.5}} \end{array} \right. \quad (18.8-1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} = \frac{3.75e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 (\bar{R}_{\theta 1}^2 + \bar{R}_{\theta 2}^2)^{1.5}} \end{array} \right. \quad (18.8-2)$$

简化得:

$$\begin{cases} \bar{Z}_1 = 3.75 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5} & (18.9-1) \\ \bar{Z}_2 = 3.75 - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} & (18.9-2) \end{cases}$$

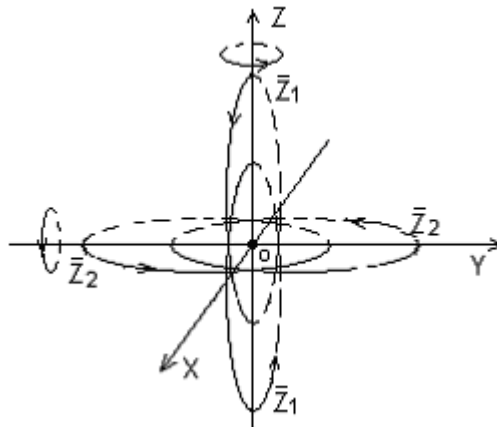
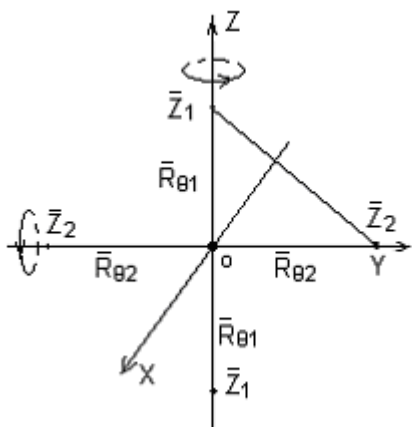


图 18.3 原子表层 4 个电子自旋图 18.4 原子表层 4 个电子椭圆轨道平均半径相互位置图 “s+p 型电子云” 形成原理图

令 $N_{1,1}=1$, 由 (15.41) 式, 联立 (18.9) 方程组得:

$$\left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^3 = \frac{3.75 - \frac{1}{\sqrt{2}}}{3.75 - \frac{1}{\sqrt{2}}} = 1 \quad (18.10)$$

以碳原子为例, 外层 4 个电子总电离能 $\sum \Delta W_{er0} = 148.022\text{eV}$. 由 (18.9) 方程组和 (18.4) ~ (18.7)、(18.10) 式, 参照 18.2 节, 1~12 计算程序, 求得碳原子外层 4 个电子自旋椭圆轨道参数变化见表 18.2. 以表 18.2 相关参数, 绘出“s+p 型电子云” 见图 18.4.

原子表层 $N_e=4$ 的各个电子自旋椭圆轨道参数变化计算结果表表 18.2

参数	单位	各个电子同步运动		各个电子非同步运动			
		$\theta_1 = \bar{\theta}_1$	$\theta_2 = \bar{\theta}_2$	$\theta_1 = \bar{\theta}_1$	$\theta_2 = 0$	$\theta_1 = \bar{\theta}_1$	$\theta_2 = \pi$
\bar{Z}_1		3.042893219		1.883344748		3.615823698	
\bar{Z}_2			3.042893219				
$Z_{2(0)}$				3.730935226			
$Z_{2(\pi)}$						2.224273457	
$E_{\theta 1}$		0.5822983728		0.5822983728		0.5822983728	
$E_{\theta 2}$			0.5822983728				
$E_{\theta 2(0)}$				0.5377207746			
$E_{\theta 2(\pi)}$						0.5222067743	

$\bar{R}_{\theta 1}$		0.592028247	0.9565315859	0.4982208449
$R_{\theta 1(0)}$		0.2472911621		
$R_{\theta 1(m)}$		0.9367653318		
$R_{\theta 1b}$	A°	0.4813042567	0.7776364157	0.4050411694
$\bar{R}_{\theta 2}$		0.592028247		
$R_{\theta 2(0)}$		0.2472911621	0.2075336376	
$R_{\theta 2(m)}$		0.9367653318		1.120354653
$R_{\theta 2b}$		0.4813042567		

18.4 原子表层 $N_e=5$ 的电子“s+p 型电子云壳层”形成原理和自旋椭圆轨道参数变化

当电子表层为 5 个电子时，略去落单电子静电场排斥力，导致成对电子空间平移效应。令两对电子组成的自旋椭圆轨道旋转曲面的长轴正交，分别为 Z、Y 轴。落单电子的自旋椭圆轨道平面在两对电子对称性电场排斥力的共同作用下只能位于对称平面 $Z^2 = Y^2$ 上，见图 18.5、图 18.6。我们有：

$$\begin{cases} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} = \frac{4.75e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 1}^2)^{1.5}} - \frac{e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 (\bar{R}_{\theta 1}^2 + \bar{R}_{\theta 2}^2)^{1.5}} \end{cases} \quad (18.11-1)$$

$$\begin{cases} \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} = \frac{5e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{4e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 (\bar{R}_{\theta 1}^2 + \bar{R}_{\theta 2}^2)^{1.5}} \end{cases} \quad (18.11-2)$$

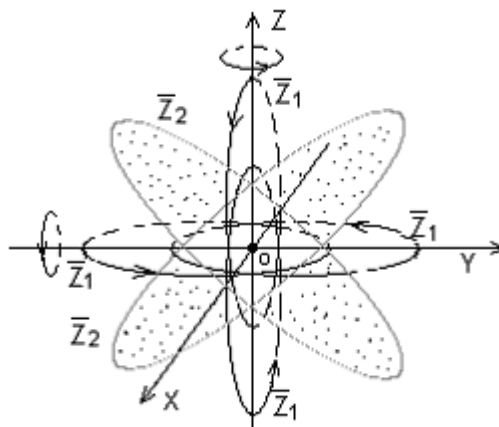
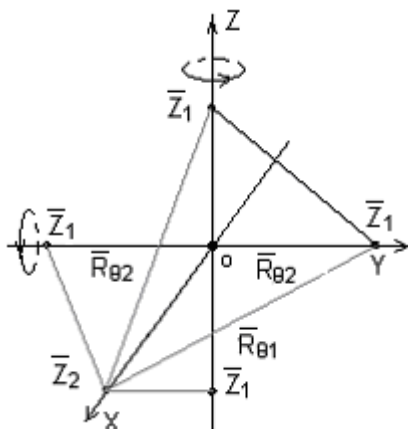


图 18.5 原子表层 5 个电子图 18.6 原子表层 5 个电子

自旋椭圆轨道平均半径相互位置图

“s+p 型电子云”形成原理图。

简化得：

$$\bar{Z}_1 = 4.75 - \frac{1}{\sqrt{2}} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5} \quad (18.12-1)$$

$$\bar{Z}_2 = 5 - 4 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} \quad (18.12-2)$$

由 (15.41) 式, 令 $N_{1,1}=1$ 、 $R_{\theta_2} = \bar{R}_{\theta_2}$, 联立 (18.12-1)、(18.12-2) 式, 得:

$$\left(\frac{\bar{R}_{\theta_2}}{\bar{R}_{\theta_1}}\right)^3 = \frac{5 - 4 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta_1}}{\bar{R}_{\theta_2}}\right)^2\right]^{-1.5}}{4.75 - \frac{1}{\sqrt{2}} - \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta_2}}{\bar{R}_{\theta_1}}\right)^2\right]^{-1.5}} \quad (18.13)$$

原子表层 $N_e=5$ 的各个电子自旋椭圆轨道参数变化计算结果表表 18.3

参数	单位	各个电子同步运动		各个电子非同步运动	
		$\theta_1 = \bar{\theta}_1$ $\theta_2 = \bar{\theta}_2$	$\theta_1 = \bar{\theta}_1$ $\theta_2 = 0$	$\theta_1 = \bar{\theta}_1$ $\theta_2 = \pi$	
\bar{Z}_1		3.685287886	3.149186373	3.997903958	
\bar{Z}_2		3.601932526			
$Z_{2(0)}$			4.922430344		
$Z_{2(\pi)}$				1.73443558	
E_{θ_1}		0.5898687787	0.5898687787	0.5898687787	
E_{θ_2}		0.572493059			
$E_{\theta_2(0)}$			0.4956293072		
$E_{\theta_2(\pi)}$				0.4280450466	
\bar{R}_{θ_1}	A°	0.4954823145	0.5798307102	0.4567380783	
$R_{\theta_1(0)}$		0.2032127668			
$R_{\theta_1(\pi)}$		0.7877518623			
R_{θ_1b}		0.4001015314	0.4682127865	0.3688155949	
\bar{R}_{θ_2}		0.4917181158			
$R_{\theta_2(0)}$		0.2102129075	0.0161726111		
$R_{\theta_2(\pi)}$		0.7732233241		1.200227822	
R_{θ_2b}		0.4031643872			

以氮原子为例, 表层 5 个电子总电离能 $\sum \Delta W_{ei0} = 266.943\text{eV}$ 。由 (18.12-1)、(18.12-2)、(18.13)、(18.4) ~ (18.7) 式, 参照 18.2 节 1~12 计算程序, 求得氮原子外层 5 个电子自旋椭圆轨道参数变化见表 18.3。以表 18.3 相关参数, 绘出“s+p 型电子云”见图 18.6。

18.5 原子表层 $N_e=6$ 的电子“p 型电子云壳层”

形成原理和自旋椭圆轨道壳参数变化

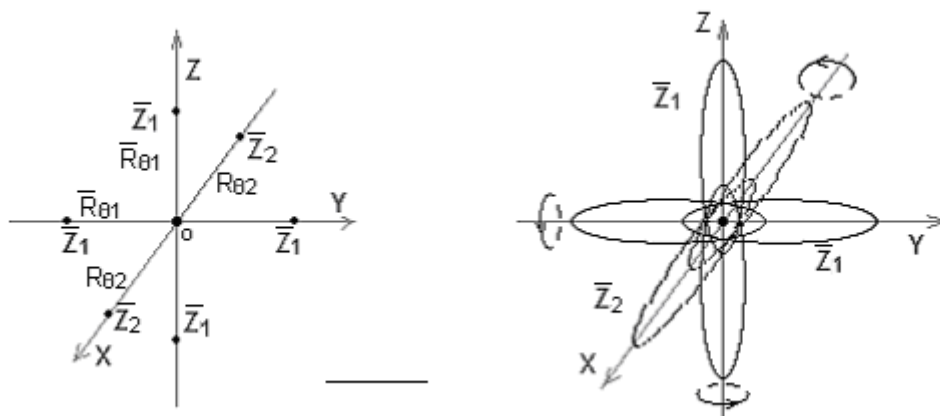


图 18.7 原子表层 6 个电子自旋图 18.8 原子表层 6 个电子

椭圆轨道平均半径相互位置图

“p 型电子云”形成原理图

当原子表层有 6 个电子时，可组成 3 对自旋椭圆轨道旋转曲面，长轴分别为 X、Y、Z 轴，见图 18.7、

图 18.8，令 $R_{\theta 2} = \bar{R}_{\theta 2}$ ，我们有：

$$\begin{cases} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} = \frac{5.75e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 (2\bar{R}_{\theta 1}^2)^{1.5}} - \frac{2e^2 \bar{R}_{\theta 1}}{4\pi\epsilon_0 (\bar{R}_{\theta 1}^2 + \bar{R}_{\theta 2}^2)^{1.5}} & (18.14-1) \\ \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} = \frac{5.75e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{4e^2 \bar{R}_{\theta 2}}{4\pi\epsilon_0 (\bar{R}_{\theta 1}^2 + \bar{R}_{\theta 2}^2)^{1.5}} & (18.14-2) \end{cases}$$

简化得：

$$\bar{Z}_1 = 5.75 - \frac{1}{\sqrt{2}} - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5} \quad (18.15-1)$$

$$\bar{Z}_2 = 5.75 - 4 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5} \quad (18.15-2)$$

由 (15.41) 式，令 $N_{1,1}=1$ ，联立 (18.15-1)、(18.15-2) 式，得：

$$\left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^3 = \frac{5.75 - 4 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\bar{R}_{\theta 2}} \right)^2 \right]^{-1.5}}{5.75 - \frac{1}{\sqrt{2}} - 2 \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}} \right)^2 \right]^{-1.5}} - 1 \quad (18.16)$$

以氧原子为例，表面 6 个电子总电离能为 $\sum \Delta W_{ei0} = 433.092\text{eV}$ 。由 (18.16)、(18.15-1)、(18.15-2)、(18.4) ~ (18.7) 式，参照 18.2 节 1~12 计算程序，求得氧原子外层 6 个电子自旋椭圆轨道参数变化见表 18.4。以表 18.4 的相关参数，绘出“p 型电子云”见图 18.8。

原子表层 $N_e=6$ 的各个电子自旋椭圆轨道参数变化计算结果表表 18.4

参数	单位	各个电子同步运动		各个电子非同步运动			
		$\theta_1=\bar{\theta}_1$	$\theta_2=\bar{\theta}_2$	$\theta_1=\bar{\theta}_1$	$\theta_2=0$	$\theta_1=\bar{\theta}_1$	$\theta_2=\pi$
\bar{Z}_1		4.335786438		3.191587114		4.941044071	
\bar{Z}_2		4.335786438					
$Z_{2(0)}$				5.705010024			
$Z_{2(\pi)}$						2.54533553	
E_{θ_1}		0.604175147		0.604175147		0.604175147	
E_{θ_2}		0.604175147					
$E_{\theta_2(0)}$				0.5451451743			
$E_{\theta_2(\pi)}$						0.5080773644	
\bar{R}_{θ_1}	A°	0.4324749568		0.5875193079		0.3794985483	
$R_{\theta_1(0)}$		0.1711843362					
$R_{\theta_1(\pi)}$		0.6937655774					
R_{θ_1b}		0.3446183394		0.4681656708		0.3024040062	
\bar{R}_{θ_2}		0.4324749568					
$R_{\theta_2(0)}$		0.1711843362		0.1350697163			
$R_{\theta_2(\pi)}$		0.6937655774				0.9509153166	
R_{θ_2b}		0.3446183394					

18.6. 原子表层 $N_e = 7、8$ 的电子“p+d 型电子云壳层”形成原理和电子自旋椭圆轨道参数变化

当原子表层为 7 个电子时，为简化计算，我们应虚增一个电子，组成 4 对自旋椭圆轨道旋转曲面，长轴为过立方体中心点与顶点的连线，如图 18.9 所示，原子核位于立方体中心点。设立方体边长为 2d，则 $\bar{R}_{\theta_1} = \sqrt{3}d$ ，在 DOB 和 DOC 三角形中： $\beta_1 = 2\arcsin(1/\sqrt{3})$ ， $\beta_2 = 2\arcsin \sqrt{2/3}$ 。在 AOB 和 AOC 任意三角形中：

$$\begin{cases} L_1^2 = \bar{R}_{\theta_1}^2 + R_{\theta_2}^2 - 2\bar{R}_{\theta_1}R_{\theta_2} \cos \beta_1 & (18.17-1) \\ L_2^2 = \bar{R}_{\theta_1}^2 + R_{\theta_2}^2 - 2\bar{R}_{\theta_1}R_{\theta_2} \cos \beta_2 & (18.17-2) \end{cases}$$

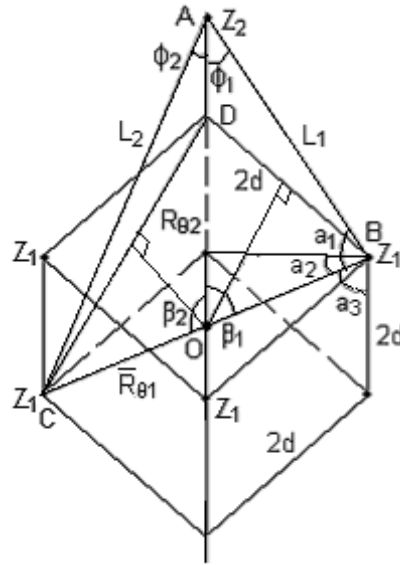


图 18.9 7 个电子自旋轨道
半径相对位置图

$$\begin{cases} \cos \phi_1 = \frac{R_{\theta 2}^2 + L_1^2 - \bar{R}_{\theta 1}^2}{2R_{\theta 2}L_1} & (18.18-1) \\ \cos \phi_2 = \frac{R_{\theta 2}^2 + L_2^2 - \bar{R}_{\theta 1}^2}{2R_{\theta 2}L_2} & (18.18-2) \end{cases}$$

将方程组 (18.17) 代入 (18.18) 方程组得:

$$\begin{cases} \cos \phi_1 = \frac{R_{\theta 2} - \bar{R}_{\theta 1} \cos \beta_1}{L_1} & (18.19-1) \\ \cos \phi_2 = \frac{R_{\theta 2} - \bar{R}_{\theta 1} \cos \beta_2}{L_2} & (18.19-2) \end{cases}$$

同理:

$$\begin{cases} \cos \alpha_1 = \frac{\bar{R}_{\theta 1} - R_{\theta 2} \cos \beta_1}{L_1} & (18.20-1) \\ \cos \alpha_2 = \sqrt{\frac{2}{3}} & (18.20-2) \\ \cos \alpha_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} & (18.20-3) \end{cases}$$

由图 18.9 得:

$$\begin{cases} \frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} = \frac{6.75e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 1}^2} - \frac{e^2 \cos a_1}{4\pi\epsilon_0 L_1^2} - \frac{2e^2 \cos a_2}{4\pi\epsilon_0 (2\sqrt{2}d)^2} - \frac{2e^2 \cos a_3}{4\pi\epsilon_0 (2d)^2} & (18.21-1) \\ \frac{\bar{Z}_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} = \frac{7e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta 2}^2} - \frac{3e^2 \cos \phi_1}{4\pi\epsilon_0 L_1^2} - \frac{3e^2 \cos \phi_2}{4\pi\epsilon_0 L_2^2} & (18.21-2) \end{cases}$$

将方程组 (18.17)、(18.19)、(18.20) 代入 (18.21) 方程组简化得:

$$\begin{cases} \bar{Z}_1 = 6.75 - \frac{1 - \frac{R_{\theta 2}}{R_{\theta 1}} \cos \beta_1}{\left[1 + \left(\frac{R_{\theta 2}}{R_{\theta 1}}\right)^2 - 2\frac{R_{\theta 2}}{R_{\theta 1}} \cos \beta_1\right]^{1.5}} - \frac{\sqrt{6}}{4} - \frac{\sqrt{3}}{2} & (18.22-1) \\ \bar{Z}_2 = 7 - \frac{3\left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_1\right)}{\left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}}\right)^2 - 2\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_1\right]^{1.5}} - \frac{3\left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_2\right)}{\left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}}\right)^2 - 2\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_2\right]^{1.5}} & (18.22-2) \end{cases}$$

令 $N_{1,1}=1$ 、 $R_{\theta 2} = \bar{R}_{\theta 2}$ ，将 (15.41) 式、(18.22) 方程组联立得:

$$\left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{\bar{R}_{\theta 1}}\right)^3 = \frac{7 - \frac{3\left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_1\right)}{\left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}}\right)^2 - 2\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_1\right]^{1.5}} - \frac{3\left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_2\right)}{\left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}}\right)^2 - 2\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_2\right]^{1.5}}}{6.75 - \frac{1 - \frac{\bar{R}_{\theta 2}}{R_{\theta 1}} \cos \beta_1}{\left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{R_{\theta 1}}\right)^2 - 2\frac{\bar{R}_{\theta 2}}{R_{\theta 1}} \cos \beta_1\right]^{1.5}} - \frac{\sqrt{6}}{4} - \frac{\sqrt{3}}{2}} \quad (18.23)$$

以氟原子为例，表层 7 个电子总电离能 $\sum \Delta W_{ei0} = 658.820 \text{ eV}$ 。内部电子自旋椭圆轨道参数模拟计算程序如下:

1. 解 (18.23) 式，得: $\bar{R}_{\theta 2} / \bar{R}_{\theta 1} = 0.997055596$ 。
2. 将 $\bar{R}_{\theta 2} / \bar{R}_{\theta 1}$ 值代入 (18.22) 方程组得: $\bar{Z}_1 = 4.836033903$, $\bar{Z}_2 = 4.793441857$ 。
3. 令 $E_{\theta 1} = 0.8$ 、将 $\bar{R}_{\theta 2} / \bar{R}_{\theta 1}$ 、 \bar{Z}_1 、 \bar{Z}_2 值代入 (18.5) 式，得: $E_{\theta 2} = 0.797325946$ 。
4. 令 $N_{\theta 1} = N_{\theta 2} = 1$ 、 $N_{e1} = 6$ 、 $N_{e2} = 1$ ，连同 \bar{Z}_1 、 \bar{Z}_2 、 $E_{\theta 1}$ 、 $E_{\theta 2}$ 一起代入 (18.6) 式，算得:

$$\sum \Delta W_{ei0} = 801.1891634 \text{ eV}.$$

5. 适当调整 E_{θ_1} 取值范围, 重复 3~4 计算程序, 最后得:

当 $E_{\theta_1}=0.8390298168$ 时, $\sum \Delta W_{ei0}=658.820\text{eV}$ 。

6. 以第 5 计算程序的 \bar{Z}_1 、 \bar{Z}_2 、 E_{θ_1} 、 E_{θ_2} 值, 令 $\theta_i=0$ 、 π , 分别代入 (15.7)、(15.12)、(18.4) 式, 算得电子自旋椭圆轨道参数见表 18.5。

当原子表层有 8 个电子时, 若为对称同步自旋运动, 可组成 4 对自旋椭圆轨道旋转椭球曲面。长轴为立方体过中心点的对角线, 8 个电子刚好对称地分布于立方体的 8 个顶点, 见图 18.10。假如立方体的边长为 $2d$, 则 $\bar{R}_{\theta_1} = \sqrt{3}d$, 在直角三角形中 AOC, AOB 中: $\cos \alpha_1 = 1/\sqrt{3}$ 、 $\cos \alpha_2 = \sqrt{2/3}$ 。

由库仑定律, 我们有:

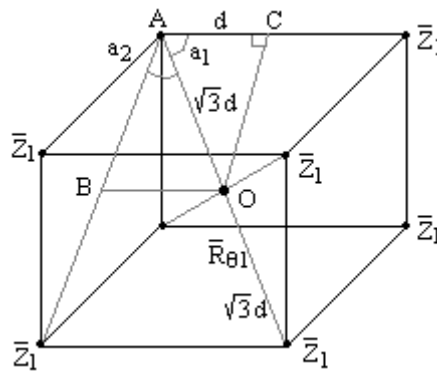


图 18.10 8 个电子自旋轨道
平均半径相对位置图

$$\frac{\bar{Z}_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta_1}^2} = \frac{7.75 e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_{\theta_1}^2} - \frac{3e^2 \cos \alpha_1}{4\pi\epsilon_0 (2d)^2} - \frac{3e^2 \cos \alpha_2}{4\pi\epsilon_0 (2\sqrt{2}d)^2} \quad (18.24)$$

解 (18.24) 式得:

$$\bar{Z}_1 = 7.75 - \frac{3\sqrt{3}}{4} - \frac{3\sqrt{6}}{8} \quad \text{以氦原子为例, 表层 8 个电子总电离能 } \sum \Delta W_{ei0} = 953.586 \text{ eV}。 \text{ 令 } N_{\theta_1}=1, =5.532403241$$

由 (15.11) 式, 得: $E_{\theta_1}=0.8448466598$ 。

令 $\theta_i=0$ 、 π , 将 \bar{Z}_1 、 E_{θ_1} 、 N_{θ_1} 值分别代入 (15.7)、(15.12)、(18.4) 式, 算得电子自旋椭圆轨道参数变化也见表 18.5。

原子表层 $N_e=7、8$ 的电子自旋椭圆轨道参数变化表 18.5

N_{ei}	\bar{Z}_1	$E_{\theta i}$	长度单位 A°			
			$\bar{R}_{\theta i}$	$R_{\theta i(0)}$	$R_{\theta i(\pi)}$	$R_{\theta ib}$
7	4.836033903	0.839029817	0.3696389	0.0595008	0.6797769	0.2011151
	4.793441857	0.836934109	0.3685505	0.0600980	0.6770030	0.2017090
8	5.532403241	0.844846660	0.3341688	0.0518474	0.6164903	0.1787832

18.7. 原子表层 $N_e=9\sim 14$ 的电子“d+f 型电子云壳层”形成原理

18.7.1 原子表层 $N_e=9、10$ 的电子“d+f 型电子云”形成原理

笔者未收集到镍系和镧系原子表层、内层的 10~14 个电子总电离能资料，要精确计算这些原子该层电子自旋椭圆轨道参数缺乏依据。这里只能按照本章的模型、思路，给出“d+f 型电子云”的空间分布特征。

当原子表层为 9、10 个电子时，（9 个电子则虚增一个电子），组成 5 对电子自旋椭圆轨道旋转曲面。我们可以将立方体“压扁”，4 个长轴通过立方体中心指向 8 个顶点，一个长轴与压扁的立方体垂直，见图 18.11。

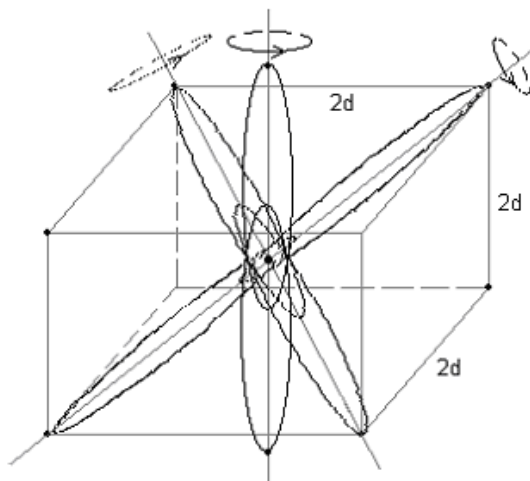


图 18.11 $N_e=9、10$ 个电子自旋椭圆轨道半径相互位置图

这种“d+f 型电子云”自旋椭圆轨道参数 \bar{Z}_1 、 $E_{\theta 1}$ 、 $\bar{R}_{\theta 1}$ 与 \bar{Z}_2 、 $E_{\theta 2}$ 、 $\bar{R}_{\theta 2}$ 均有微小的差别，因为 8 个电子仅与中心轴、中心点 O 对称，与上下相邻 2 个电子之间是不对称的。这里，我们参照表 18.5 的计算数据，大致绘出其中 3 对电子自旋椭圆轨道旋转曲面“d+f 型电子云层”。

18.7.2 原子表层 $N_e=11、12$ 的电子“d+f 型电子云层”形成原理

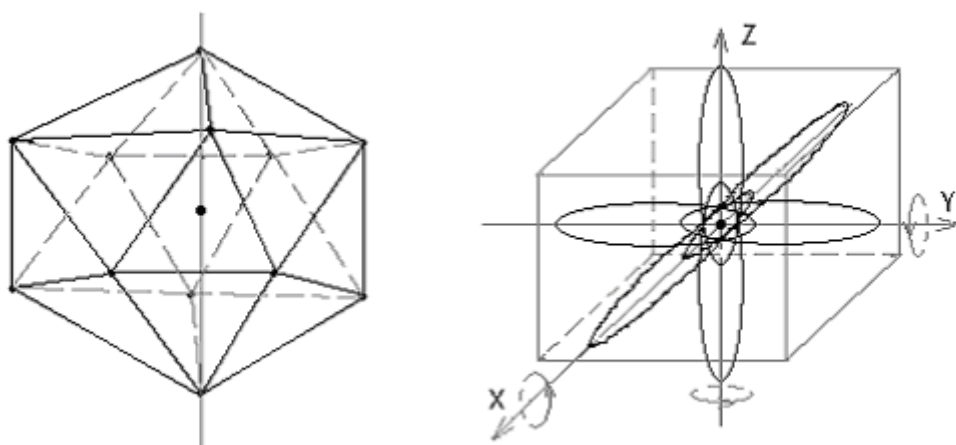


图 18.12 $N_e=11、12$ 个电子自旋图 18.13 $N_e=13、14$ 个电子
轨道半径相互位置图 “f 型电子云”形成原理图

当原子表层电子为 11、12 个时，（11 个电子则虚增一个电子），可组成 6 对电子自旋椭圆轨道旋转曲面。由球内接多边形的几何特征可知：球内接正 20 面体的顶点刚好是 12 个，每个面都是等边三角形。6 个长轴刚好过中心对称地与 12 个顶点联接，这时 12 个电子完全对称同步自旋运动，自旋椭圆轨道参数完全相同，见图 18.12。

18.7.3 原子表层 $N_e=13、14$ 的电子“d+f 型电子云层”形成原理

当原子表层为 13、14 个电子时，（13 个电子则虚增一个电子），组成 7 对电子自旋椭圆轨道旋转曲面。3 个长轴过立方体中心垂直立方体 6 个表面，分别为 X、Y、Z 轴，4 个长轴为过立方体中心与 8 个顶点的连线，（参见图 18.10）见图 18.13。

这时，8 个顶点的电子自旋椭圆轨道参数与长轴垂直立方体表面的 6 个电子自旋椭圆轨道参数略有不同。图 18.13 中参照表 18.5 参数绘出 X、Y、Z 轴线方向 3 对电子自旋椭圆轨道旋转曲面的“d+f 型电子云层”。

18.8 内、外层电子之间的相互屏蔽作用及参数计算

由原子半径随着元素周期数变大而逐渐增大，外层电子电离能逐渐降低的现象，学术界早就注意到内层电子对外层电子的屏蔽作用。这里以 8 个电子为例，计算 2 种状态内、外层电子之间相互屏蔽效果，以便比较。

18.8.1 外层电子与内层某一对电子和原子核处在同一直线上

参照图 18.9 和 (18.21-2)、(18.22-2) 式，我们有：

$$\frac{Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{\theta_2}^2} = \frac{9e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{\theta_2}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (R_{\theta_2} + \bar{R}_{\theta_1})^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (R_{\theta_2} - \bar{R}_{\theta_1})^2} - \frac{3e^2 \cos \phi_1}{4\pi\epsilon_0 L_1^2} - \frac{3e^2 \cos \phi_2}{4\pi\epsilon_0 L_2^2} \quad (18.25)$$

简化得：

$$Z_2 = \left\{ \begin{array}{l} 9 - \left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}}\right)^{-2} - 3 \left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_1\right) \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}}\right)^2 - 2 \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_1\right]^{-1.5} \\ - 3 \left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_2\right) \left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}}\right)^2 - 2 \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}} \cos \beta_2\right]^{-1.5} - \left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}}\right)^{-2} \end{array} \right\} \quad (18.26)$$

内、外层电子相互间屏蔽作用计算结果表表 18.6

由 (18.26) 式							
$\bar{R}_{\theta 1}/R_{\theta 2} Z_2$	5	3	2	1.5	1.3	1	0.9
	8.87790	8.54316	7.43276	3.88195	-3.63169	$-\infty$	-93.8972
$\bar{R}_{\theta 1}/R_{\theta 2}$	0.8	0.7	0.6	0.5	0.2	0.1	0.05
Z_2	-19.385	-6.0308	-1.733996	-0.049736	0.98198	0.99894	0.99994
由 (18.29) 式							
$\bar{R}_{\theta 1}/R_{\theta 2}$	$3^{1/2}$	1.5	1.25	1.1	1	0.9	0.8
Z_2	8.45567	8.04223	7.20073	6.390549	5.69864	4.89650	4.02452
$\bar{R}_{\theta 1}/R_{\theta 2}$	0.7	0.6	0.5	0.2	0.1	0.05	0.02
Z_2	3.15351	2.37156	1.755686	1.024067	1.001543	1.00010	1.00000

分别令 $\bar{R}_{\theta 1}/R_{\theta 2} = 0.9、0.8、\dots\dots 0.001$ ，代入 (18.26) 式，可求出 Z_2 参数变化，详见表 18.6。请注意， Z_2 值在相当大的范围内都为负值，这是不现实的，由此即可断定，该方案不成立。

18.8.2 外层电子与立方体表面的垂线通过原子核的中心

如图 18.14 所示，设立方体的边长为 $2d$ ，在直角三角形 ABC、ADE 中，

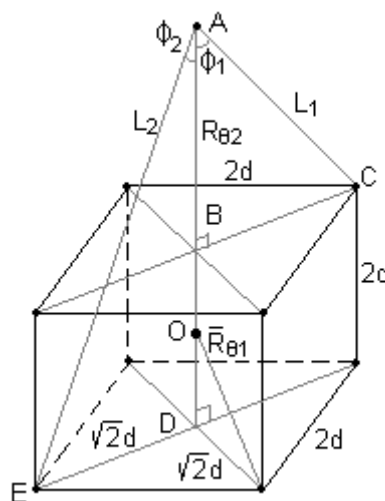


图 18.14 内层电子对外层电子屏蔽作用示意图

$$\begin{cases} L_1^2 = 2d^2 + (R_{\theta 2} - d)^2 & (18.27-1) \\ L_2^2 = 2d^2 + (R_{\theta 2} + d)^2 & (18.27-2) \\ \cos \phi_1 = \frac{R_{\theta 2} - d}{L_1} & (18.27-3) \\ \cos \phi_2 = \frac{R_{\theta 2} + d}{L_2} & (18.27-4) \end{cases}$$

由库仑定律得：

$$\frac{Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{\theta 2}^2} = \frac{9e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{\theta 2}^2} - \frac{4e^2 \cos \phi_1}{4\pi\epsilon_0 L_1^2}$$

$-\frac{4e^2 \cos \phi_2}{4\pi\epsilon_0 L_2^2}$ (18.28) 因为 $\bar{R}_{\theta 1} = \sqrt{3}d$ ，既 $d = \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\sqrt{3}}$ ，将 (18.27) 方程组代入(18.28)式简化得：

$$Z_2 = 9 - \frac{4\left(1 - \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\sqrt{3}R_{\theta 2}}\right)}{\left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}}\right)^2 - \frac{2\bar{R}_{\theta 1}}{\sqrt{3}R_{\theta 2}}\right]^{1.5}} - \frac{4\left(1 + \frac{\bar{R}_{\theta 1}}{\sqrt{3}R_{\theta 2}}\right)}{\left[1 + \left(\frac{\bar{R}_{\theta 1}}{R_{\theta 2}}\right)^2 + \frac{2\bar{R}_{\theta 1}}{\sqrt{3}R_{\theta 2}}\right]^{1.5}} \quad (18.29)$$

分别令 $\bar{R}_{\theta 1}/R_{\theta 2} = \sqrt{3}$ 、1.5……1、…… 0.02，代入 (18.29) 式，求得 Z_2 值见表 18.6。

由于电子之间电场排斥力作用，尤其是近距离的范围内，各层、各个电子自旋椭圆轨道旋转曲面必须尽量错开，在有限的原子空间范围内占据不同的空间和方位。所以，第二种由 (18.29) 式计算的内层电子屏蔽作用模型成立。

18.9 电子自旋椭圆轨道与自旋似流线形旋转体曲面轨道的关系

综合前面对原子内电子自旋椭圆轨道参数、能级变化计算结果比较，不难看出：“s、p、d、f 型电子云壳层”都是电子绕原子核沿自旋椭圆轨道运动和附加侧向运动形成的旋转椭球曲面；（ $N_e=3、5$ 时落单的电子自旋椭圆轨道没有形成旋转曲面）；其中差别仅在于“电子云类型”从 $s \rightarrow p \rightarrow d \rightarrow f$ 演变过程中同层中电子数增多，自旋量子数 $N_{\theta i} = 1 \rightarrow 1.5 \rightarrow 1$ 、离心率 $E_{\theta i}$ 变大，椭球旋转曲面变细长而已；如果同层中电子沿椭圆轨道旋转椭球曲面呈对称、同步运动，各个电子之间的夹角均为同步变化；各个电子电荷强度系数 Z_i 、椭圆轨道离心率 $E_{\theta i}$ 也均为常数；轨道为规则的旋转椭球曲面，外层与次外层电子沿自旋椭圆轨道运动的周期倍数关系才能成立；每个电子综合电场引力，都由自旋轨道半径指向原子核中心，动量矩守恒的量子化轨道运动才能成立；但原子半径和表层电子轨道半径将会出现大幅度周期性变化。

由 (15.13) 式、能量守恒定律，原子内某层中电子电离能为常数时，平均电荷强度系数 \bar{Z}_i ，自旋椭

圆轨道长轴 \bar{R}_{α} 就是定值，与离心率 $E_{\theta i}$ 大小无关。同层中每个电子的电离能、电荷强度系数应是原子核、内、外层和同层中所有电荷电场共同综合作用的结果。由表 18.6 中的 Z_i 变化不难看出：由于内层电子的屏蔽作用，外层电子 Z_i 系数随着自旋椭圆轨道半径 $R_{\theta i}$ 减小而增大；因原子核中心位置、椭圆轨道长轴、电子电离能均不变，所以，由 (15.13) 式可知， \bar{R}_{α} 直接与 Z_i 成反比；整个椭圆轨道旋转曲面将会变形，形成内尖外钝的似流线型旋转曲面，实验室观察到的“s.p.d.f 型电子云壳层”，可以看作电子沿该曲面呈螺旋线轨道运动的外观特征反映，见图 18.15。

我们将电子沿椭圆轨道的运动速度 v_e ，当作沿螺旋线运动的总速度进行矢量分解。令： $\vec{v}_e = \vec{v}_{\phi} + \vec{v}_{\theta}$ 且 $\vec{v}_{\phi} \perp \vec{v}_{\theta}$ 由牛顿力学和库仑定律、(15.1-2) 式得：

$$\frac{m_{e0} v_{\phi i}^2}{R_{\alpha} \sin \theta} = \frac{Z_i e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{\alpha}^2} \sin \theta \quad (18.30)$$



图 18.15 电子沿似流线型旋转曲面螺旋线运动轨道速度矢量分解图

将 (15.6) 式中的玻尔半径 r_0 ，精细结构常数 a_c 关系式和 (15.7) 式代入 (18.30) 式整理得：

$$v_{\phi i} = \frac{Z_i a_c c}{N_{\alpha}} \sin \theta \sqrt{1 + E_{\alpha} \cos \theta} \quad (18.31)$$

由 (15.8-3)、(18.31) 式和图 18.15，得：

$$v_{\theta i} = \sqrt{v_{ei}^2 - v_{\phi i}^2} = \frac{Z_i a_c c}{N_{\alpha}} \sqrt{E_{\alpha} \cos \theta (1 + \cos^2 \theta) + \cos^2 \theta + E_{\alpha}^2} \quad (18.32)$$

令电子沿螺旋线轨道旋转运动、自旋运动的周期分别为： $T_{\phi i}$ 、 $T_{\theta i}$ 。由 (18.31)、(18.32) 式得：

$$\left\{ \begin{aligned} T_{\phi i} &= \oint \frac{R_{\alpha} \sin \theta}{V_{\phi i}} d\phi & (18.33-1) \end{aligned} \right.$$

$$\left\{ \begin{aligned} T_{\theta i} &= \oint \frac{R_{\alpha}}{V_{\theta i}} \sqrt{\frac{1 + 2E_{\alpha} \cos \theta + E_{\alpha}^2}{(1 + E_{\alpha} \cos \theta)^2}} d\theta & (18.33-2) \end{aligned} \right.$$

其周期 $T_{\theta i} / T_{\phi i}$ 比值为：

$$\frac{T_{\phi_i}}{T_{\varphi_i}} = \frac{\int \frac{\sqrt{1 + 2E_{\alpha} \cos \theta + E_{\alpha}^2}}{(1 + E_{\alpha} \cos \theta)^2 \sqrt{E_{\alpha} \cos \theta (1 + \cos^2 \theta) + \cos^2 \theta + E_{\alpha}^2}} d\theta}{\int \frac{1}{(1 + E_{\alpha} \cos \theta)^{1.5}} d\theta} \quad (18.34)$$

T_{ϕ_i}/T_{φ_i} 比值与离心率 E_{θ_i} 的关系，经模拟计算结果如下：

$E_{\theta_i}=0.9$	$T_{\phi_i}/T_{\varphi_i} = 2.663235$
0.5	1.705330
0.2	2.056792
0.1	2.457654
0.01	3.889634

本模型没有限制 T_{ϕ_i}/T_{φ_i} 的周期比值必须是简单的分数或自然数。实验室实际观测到的所谓“电子云”就是电子运动轨道覆盖似流线型回转体的整个曲面。从前面几章对原子外层电子的椭圆轨道离心率 E_{θ_i} 的计算结果，激发或跃迁过程中吸收或发射光谱时模拟计算的各激发态或能级的椭圆轨道离心率 E_{θ_i} 都显示：由 (18.34) 计算的 T_{ϕ_i}/T_{φ_i} 值不是简单的分数或自然数。

我们所见到的物质均是原子单质或不同原子组成的分子集合体。可以这样设想：单个原子的同层中电子均呈同步自旋运动。原子、分子集合体中的每个位于中心的原子，与其相邻的上下左右、四面八方的其它原子，表层电子的自旋椭圆轨道属非同步自旋运动，或者相位都刚好与其相差 180° 。这样，即能起到互相补充维持固定体积的作用，又能形成电、磁场力互相牵制、电子共用的各种类型的化学键。

如果同层中电子是非同步运动，则 Z_i 、 E_{θ_i} 、 $N_{1,2}$ 、 $N_{2,3}$ 等值都是非常复杂的变数，每个电子自旋椭圆轨道旋转曲面将严重不规则变形。每个电子综合电场引力都不能保证始终沿自旋轨道半径指向原子核中心，动量矩守恒的量子化运动也难以成立；如果我们再考虑其它层中电子非同步自旋运动的电场排斥力、磁场力相互作用，读者不难想象，这时各个电子的波动、自旋、侧向附加运动的总体轨道叠加运动将复杂到什么程度！更不用说能否求解了。

第 19 章能量相对论条件下的电子自旋椭圆轨道运动方程

19.1 能量相对论条件下的电子波动、自旋轨道运动特征

由本书 1.1 节 (1.2) 方程组，能量相对论条件下的电子波动、自旋轨道运动方程组应扩展为：

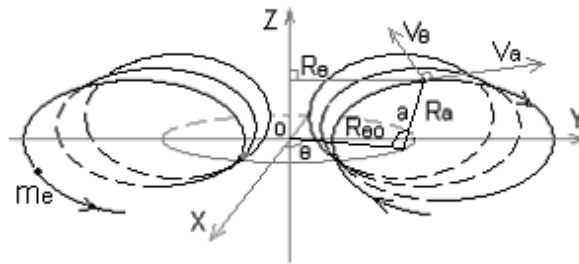


图 19.1 电子波动、自旋轨道运动特征示意图

$$R_\alpha = \frac{h}{2\pi m_e v_\alpha} \quad (19.1-1)$$

$$R_\theta = \frac{h N_\theta}{2\pi m_e v_\theta} \quad (19.1-2)$$

$$R_\theta = R_{\theta 0} - R_\alpha \cos \alpha \quad (19.1-3)$$

$$\alpha = N_\alpha \theta \quad (19.1-4)$$

$$v_e = \sqrt{v_\theta^2 + v_r^2} \quad (19.1-5)$$

$$\int_{\theta_0}^{\theta_0 + \frac{2\pi}{N_\alpha}} \frac{1}{v_e} dl = \int_0^{2\pi} \frac{R_\alpha}{v_\alpha} d\alpha \quad (19.1-6)$$

与 (1.2) 方程组不同的是 (19.1-2) 式中多了一个自旋量子数 N_θ ，(19.1-5)、(19.1-6) 式中自旋轨道长度和自旋速度将 R_θ 径向长度 dR_θ 、速度 v_r 都计入。因为波动量子数 N_α 、离心率 E_α 、速度 v_α 及电子运动质量 m_e 等参数都将随着综合电荷作用强度系数 Z_i 、自旋角度 θ 位置而变化，所以，(19.1-6) 式表示电子在每一个波动轨道与之对应自旋轨道上 $d\theta = 2\pi / N_\alpha$ 上的各参数平均值。联立 (19.1-1)~(19.1-3) 式，参照 (1.2) 方程组解法，令 $R_\alpha / R_\theta = v_\theta / v_\alpha N_\theta = E_{\alpha\theta}$ ，得：

$$R_\alpha = \frac{R_{\theta 0} E_{\alpha\theta}}{1 + E_{\alpha\theta} \cos \alpha} \quad (19.2-1)$$

$$R_\theta = \frac{R_{\theta 0}}{1 + E_{\alpha\theta} \cos \alpha} \quad (19.2-2)$$

二者仍然都为相互垂直的波动、自旋椭圆轨道方程。由 (19.1)、(19.2) 方程组，参照 (15.8) 方

程组解法得：

$$dl = \frac{R_{\theta 0}}{1 + E_{\alpha\theta} \cos N_{\alpha} \theta} \sqrt{1 + \left(\frac{N_{\alpha} E_{\alpha\theta} \sin N_{\alpha} \theta}{1 + E_{\alpha\theta} \cos N_{\alpha} \theta} \right)^2} d\theta \quad (19.3-1)$$

$$v_{\theta} = \frac{N_{\theta} h (1 + E_{\alpha\theta} \cos N_{\alpha} \theta)}{2\pi m_e R_{\theta 0}} \quad (19.3-2)$$

$$v_r = \frac{N_{\theta} h (N_{\alpha} E_{\alpha\theta} \sin N_{\alpha} \theta)}{2\pi m_e R_{\theta 0}} \quad (19.3-3)$$

$$v_e = v_{\theta} \sqrt{1 + \left(\frac{N_{\alpha} E_{\alpha\theta} \sin N_{\alpha} \theta}{1 + E_{\alpha\theta} \cos N_{\alpha} \theta} \right)^2} \quad (19.3-4)$$

将 (19.3) 方程组代入 (19.1-6) 式，得：

$$E_{\alpha\theta} = \frac{1}{\sqrt{N_{\alpha} N_{\theta}}} \quad (19.4)$$

上式表明：电子波动、自旋椭圆轨道离心率 $E_{\alpha\theta}$ 与原子核内的 π^{\pm} 介子波动、自旋垂直双椭圆轨道运动的离心率类似，但是电子自旋运动应以合速度 v_e 表示。由能量相对论，电子沿自旋方向的运动质量 m_e 应表示为：

$$m_e = \frac{m_{e0}}{\sqrt{1 - (v_e/c)^2}} \quad (19.5)$$

与电子平均质量 \bar{m}_e 对应的平均波动半径 \bar{R}_{α} ，平均波动角度 $\bar{\alpha}$ 等参数，是推导电子沿自旋轨道运动的基准参数。由 (19.1-1)、(19.2-1)、(19.5) 式，设波动轨道的长度为 L_{α} ，参照 (1.6) 式解法得：

$$L_{\alpha} = \int_0^{2\pi} R_{\alpha} d\alpha = \int_0^{2\pi} \frac{R_{\theta 0} E_{\alpha\theta}}{1 + E_{\alpha\theta} \cos \alpha} d\alpha = \frac{2\pi R_{\theta 0}}{\sqrt{N_{\alpha} N_{\theta} - 1}} \quad (19.6)$$

$$\bar{m}_e = \int_0^{2\pi} \frac{m_e}{L_{\alpha}} dl_{\alpha} = \int_0^{2\pi} \frac{h R_{\alpha}}{2\pi R_{\alpha} v_{\alpha} L_{\alpha}} d\alpha = \frac{h \sqrt{N_{\alpha} N_{\theta} - 1}}{2\pi R_{\theta 0} v_{\alpha}} \quad (19.7)$$

令 $\bar{R}_{\alpha} = R_{\theta 0} E_{\alpha\theta} / (1 + E_{\alpha\theta} \cos \bar{\alpha})$ ，由图 19.2、(19.1-1)、(19.4)、(19.5)、(19.7) 式，得：

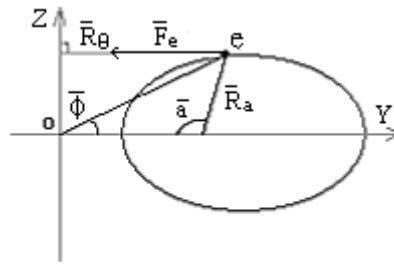


图19.2 电子波动、自旋轨道平均半径示意图

$$\begin{cases} R_{\theta 0} = \frac{r_0 a_c}{\beta_\alpha} \sqrt{(N_\alpha N_\theta - 1) \left[1 - \left(\frac{v_e}{c} \right)^2 \right]} & (19.8-1) \\ \cos \bar{\alpha} = \sqrt{N_\alpha N_\theta - 1} - \sqrt{N_\alpha N_\theta} & (19.8-2) \\ \bar{R}_\theta = \frac{R_{\theta 0} \sqrt{N_\alpha N_\theta}}{\sqrt{N_\alpha N_\theta - 1}} & (19.8-3) \\ \sin \bar{\alpha} = \sqrt{1 - \cos^2 \bar{\alpha}} & (19.8-4) \end{cases}$$

由图 19.2 所示，电子在自旋轨道中每一波动轨道内所受的综合电场平均作用力 \bar{F}_e 为：

$$\bar{F}_e = \frac{-Ze^2 \cos^3 \bar{\phi}}{4\pi\epsilon_0 \bar{R}_\theta^2 \sqrt{1 - \left(\frac{v_\theta}{c} \right)^2}} \quad (19.9)$$

其中，由 (19.8) 方程组得：

$$\cos \bar{\phi} = \frac{\bar{R}_\theta}{\sqrt{\bar{R}_\theta^2 + (\bar{R}_\alpha \sin \bar{\alpha})^2}} = \frac{1}{\sqrt{2 \sqrt{1 - \frac{1}{N_\alpha N_\theta}} - 1 + \frac{2}{N_\alpha N_\theta}}} \quad (19.10)$$

19.2 能量相对论条件下的电子自旋椭圆轨道运动方程

在多层、多个电子的原子内层，每个电子在原子核和其它电子综合电场作用下电荷强度系数 Z_i 是个变数。电子沿自旋轨道运动时自身质量和电场力作用强度都会出现能量相对论速度效应。由电子沿自旋轨道运动的动量矩守恒定律，(19.5)、(19.9) 和 (15.1) 方程组，电子沿自旋轨道运动的方程组应扩展为：

$$\left\{ \begin{aligned} R_\theta &= \frac{N_\theta h}{2\pi m_e v_\theta} & (19.11-1) \\ m_e (\ddot{R}_\theta - R_\theta \dot{\theta}^2) &= \frac{-Z_i e^2 \cos^3 \bar{\phi}}{4\pi \epsilon_0 R_\theta^2 \sqrt{1 - (v_\theta/c)^2}} & (19.11-2) \\ m_e (R_\theta \ddot{\theta} + 2\dot{R}_\theta \dot{\theta}) &= \frac{m_e}{R_\theta} \frac{d(R_\theta^2 \dot{\theta})}{dt} = 0 & (19.11-3) \\ m_e &= \frac{m_{e0}}{\sqrt{1 - (v_e/c)^2}} & (19.11-4) \end{aligned} \right.$$

参照 (15.1) ~ (15.7) 方程组和各式推导、解法。我们先假定 m_e 、 v_θ 、 v_e 、 $\cos \bar{\phi}$ 、 Z_i 、5 个参数在电子自旋轨道内每一小段 dl_θ 中均保持不变。

令： $R_\theta = \frac{1}{u}$ ，则： $\frac{dR_\theta}{dt} = \frac{dR_\theta}{d\theta} \dot{\theta}$ ， $dR_\theta = -\frac{du}{u^2}$ ， $\dot{\theta} = \left(\frac{N_\theta h}{2\pi m_e}\right) u^2$ ， $\dot{R}_\theta = -\left(\frac{N_\theta h}{2\pi m_e}\right) \frac{du}{d\theta}$ ，

$$\ddot{R}_\theta = -\left(\frac{N_\theta h}{2\pi m_e}\right)^2 u^2 \frac{du^2}{d\theta^2}$$

将这些过渡结果都代入 (19.11) 方程组得：

$$\frac{du^2}{d\theta^2} + u = \frac{Z_i \cos^3 \bar{\phi}}{r_0 N_\theta^2 \sqrt{\left[1 - (v_\theta/c)^2\right] \left[1 - (v_e/c)^2\right]}} = \frac{1}{R_{\theta 0}} \quad (19.12)$$

(19.12) 式微分方程的解为： $u = C_1 \cos \theta + C_2$

因为： $\frac{du}{d\theta} = -C_1 \sin \theta$ ， $\frac{du^2}{d\theta^2} = -C_1 \cos \theta$ ，代入 (19.12) 得： $C_2 = \frac{1}{R_{\theta 0}}$

又因为： $R_\theta = \frac{1}{u}$ ，所以，电子自旋椭圆轨道运动方程为：

$$R_\theta = \frac{1}{C_2 + C_1 \cos \theta} = \frac{R_{\theta 0}}{1 + E_\theta \cos \theta} \quad (19.13)$$

其中：

$$R_{\theta 0} = \frac{r_0 N_\theta^2 \sqrt{\left[1 - (v_\theta/c)^2\right] \left[1 - (v_e/c)^2\right]}}{Z_i \cos^3 \bar{\phi}} \quad (19.14)$$

由 (19.13)、(19.14) 式可知：对电子每一小段自旋运动轨道 dl_θ 而言，电子自旋运动轨道仍然是

椭圆，但它与地球绕太阳运动的椭圆轨道不同， R_θ 是 m_e 、 v_θ 、 v_e 、 $\bar{\phi}$ 、 Z_i 参数的函数；这些参数又都是变量，无疑比众多行星绕太阳运动还复杂的多。在能量相对论条件下，整个电子自旋椭圆轨道运动方程、应称为变椭圆轨道方程。

19.3 电子自旋变椭圆轨道方程离心率 E_θ 变化分析

由 (19.11-1)、(19.13)、(19.14) 式，电子沿变椭圆轨道自旋运动的速度 v_θ 为：

$$v_\theta = \frac{Z_i a_c c \cos^3 \bar{\phi} (1 + E_\theta \cos \theta)}{N_\theta \sqrt{1 - \left(\frac{v_\theta}{c}\right)^2}} \quad (19.15)$$

因为 $v_\theta = \beta_\alpha c \sqrt{\frac{N_\theta}{N_\alpha}}$ ，由 (19.10) 式，代入 (19.15) 式，求得电子波动速度系数 β_α 为：

$$\beta_\alpha = \sqrt{\frac{N_\alpha}{2N_\theta} \left\{ 1 - \sqrt{1 - \frac{4}{N_\theta^2} [Z_i a_c (1 + E_\theta \cos \theta)]^2 \left(2 \sqrt{1 - \frac{1}{N_\alpha N_\theta}} - 1 + \frac{2}{N_\alpha N_\theta} \right)^{-3}} \right\}} \quad (19.16)$$

令 (19.16) 式中 N_θ 、 θ 、 E_θ 、 Z_i 为某一已知确定值，代入 (19.16) 式，并与 (4.9) 式联立，可求出电子在该位置的波动量子数 N_α ，作为后续精确计算的依据。

参照 (19.3) 方程组的推导，电子沿自旋轨道运动的两个速度 v_θ 、 v_r 、和合速度 v_e 分别为：

$$\begin{cases} v_\theta = \frac{N_\theta h (1 + E_\theta \cos \theta)}{2\pi m_e R_{\theta 0}} & (19.17-1) \\ v_r = \frac{N_\theta h E_\theta \sin \theta}{2\pi m_e R_{\theta 0}} & (19.17-2) \\ v_e = v_\theta \sqrt{1 + \left(\frac{E_\theta \sin \theta}{1 + E_\theta \cos \theta} \right)^2} & (19.17-3) \end{cases}$$

理论力学中已经证明：太阳系内各大行星在太阳万有引力场作用下，绕太阳沿椭圆轨道运动中，每个行星在轨道上的任何点，其自身动能和太阳对其万有引力势能之和是不变值；该值与椭圆轨道离心率或长轴有关，与所在轨道位置无关。本书 (15.9) ~ (15.13) 式表明，当 Z_i 为常数，电子自旋速度 $v_\theta \ll c$ 时，可以不计能量相对论速度效应。电子在以原子核为中心的电场引力作用下，绕原子核沿自旋椭圆轨道运动时，其自身动能、电势能之和也是不变值。只与椭圆轨道离心率或长轴有关，与所在轨道位置无关。这二者都是非能量相对论条件下能量守恒定律的具体表现形式。

我们刚好可以利用能量守恒定律，导出电子在不同 N_θ 、 θ 、 E_θ 、 Z_i 条件下，以能量相对论速度沿自旋变椭圆轨道运动的能量变化，进而确定离心率的变化规律。计算程序如下：

1. 先设某一电子沿自旋变椭圆轨道运动中 N_θ 、 E_θ 、 Z_i 各为某一不变值，并分别令 $\theta_i = 0, \pi/3, \dots, \pi$,

代入 (19.16) 式, 与 (4.9) 式联立, 分别求出电子在这几个位置的波动量子数 $N_{a(0)}$ 、 $N_{a(\pi/3)}$ 、…… $N_{a(\pi)}$ 的值。

2. 将 $N_{a(0)}$ 、 $N_{a(\pi/3)}$ 、…… $N_{a(\pi)}$ 等值分别代入 (4.9) 式, 求出电子波动速度系数 $\beta_{a(0)}$ 、 $\beta_{a(\pi/3)}$ 、…… $\beta_{a(\pi)}$ 的值。

3. 由 $v_{\theta} = \beta_{a}c\sqrt{N_{\theta}/N_{\alpha}}$ 、(19.17) 方程组, 分别求出电子在 $\theta_i = 0$ 、 $\pi/3$ 、…… π 位置的自旋速度 v_{θ} 、 v_e 值。

4. 电子在自旋轨道各位置动能 $W_{m(0)}$ 、 $W_{m(\pi/3)}$ 、…… $W_{m(\pi)}$, 由能量相对论、(19.11-4) 式, 得:

$$W_{m(\theta)} = \frac{m_{e0}c^2}{e} \left[\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v_{\theta(\theta)}}{c}\right)^2}} - 1 \right] \quad (19.18)$$

5. 电子在自旋轨道某位置 $\theta=0$ 、 $\pi/3$ 、…… π 的电势能 $W_{e(\theta)}$, 由 (19.9)、(19.10)、(19.13)、(19.14) 式, 得:

$$W_{e(\theta)} = \frac{-Z_i e^2 \cos \bar{\phi}}{4\pi\epsilon_0 R_{\theta} \sqrt{1 - \left(\frac{v_{\theta(\theta)}}{c}\right)^2}} = \frac{-Z_i^2 e^2 \cos^4 \bar{\phi} (1 + E_{\theta} \cos \theta)}{4\pi\epsilon_0 r_0 N_{\theta}^2 \left[1 - \left(\frac{v_{\theta(\theta)}}{c}\right)^2 \right] \sqrt{1 - \left(\frac{v_{e(\theta)}}{c}\right)^2}} \quad (19.19)$$

6. 参照 (15.9) ~ (15.13) 式推导结果, 电子在各轨道位置的电离能 $\Delta W_{e(\theta)}$ 应为常数:

$$\Delta W_{e(\theta)} = W_{m(\theta)} + W_{e(\theta)} \quad (19.20)$$

令 $N_{\theta 1}=1$, Z_i 分别为 1、10、30、50、70、90, 在每一组设定值中, 再令 E_{θ} 、 θ 为某一组值, 依次代入 1~6 计算程序, 结果见表 19.1。

由表 19.1 看出: $E_{\theta}=0$ 是唯一解, 所以, 在多层、多个电子的原子内部, Z_i 的空间变化规律将决定电子自旋轨道各参数的变化。对 $Z_i \leq 10$ 的原子外层电子, 以非能量相对论条件计算误差很小。电子自旋椭圆轨道的离心率允许有一定的取值范围。但是总能量必须完全守恒, (前面电子自旋运动和侧向旋转运动中的磁场能量均未参与计算)。

电子自旋变椭圆轨道离心率、电离能变化计算结果表表 19.1

$E_{\theta i}$	0	$\pi/3$	$2\pi/3$	π
$Z_i = 1$		$N_{\theta} = 1$		
0.0	13.6058	13.6058	13.6058	13.6058
0.1	13.4700	13.4699	13.4698	13.4697
0.5	10.2064	10.2053	10.2044	10.2042
$Z_i = 10$		$N_{\theta} = 1$		
0.0	1362.38	1362.38	1362.38	1362.38
0.1	1350.55	1349.66	1348.21	1347.63

汉斯预印本

未经同行评审

0.5	1041.08	1030.73	1021.44	1020.09
$Z_i=30$		$N_\theta=1$		
0.0	12401.5	12401.5	12401.5	12401.5
0.1	12409.5	12344.4	12235.2	12190.3
0.5	10550.1	9916.19	9268.97	9158.87
$Z_i=50$		$N_\theta=1$		
0.0	35385.9	35385.9	35385.9	35385.9
0.1	35972.5	35510.1	34713.3	34374.7
0.5	34522.6	30543.0	26213.4	25354.3
$Z_i=70$		$N_\theta=1$		
0.0	72997.0	72997.0	72997.0	72997.0
0.1	76013.9	74146.7	70954.0	69595.9
0.5	87961.3	69487.8	52980.3	49576.5
$Z_i=90$		$N_\theta=1$		
0.0	132556	132556	132556	132556
0.1	144762	137691	126666	122266
0.5		155929	91931	82024
备注	空格部分无法求解，能量单位：eV			

综合第 15~19 章的分析、计算结果比较，可以看出原子内部的电子自旋轨道各参数变化规律：1. 自旋量子数 $N_{\theta i}$ 表层取 1、1.5，逐步电离过程中， $N_{\theta i}=1 \rightarrow \infty$ ，内部全部取 $N_{\theta i}=1$ ；2. 原子内层电子自旋椭圆轨道离心率 $E_\theta=0$ ，次外层和表层在非能量相对论自旋运动近似的前提条件下 E_θ 可在 0~1 之间变动；3. 原子内各层电子都必须是同步自旋运动，只有这样，各层内各个电子的 \bar{Z}_i 、 E_θ 值在不计内层电子屏蔽作用时才能维持常数，自旋椭圆轨道运动才能成立，每个电子综合电场力的合力才能沿自旋轨道运动的矢径指向原子核中心，角动量守恒的量子化波动、自旋轨道运动才能成立；4. 原子表层电子对内层电子的电场力作用可以忽略不计，内层电子对表层电子的电场力屏蔽作用会使表层电子自旋椭圆轨道旋转曲面变成内小外大的流线形旋转曲面“电子云层”。前 3 条规律为后续原子内层电子自旋轨道参数计算提供了依据和便利。

第 20 章原子内 K、L 层的电子波动、自旋轨道运动特征和参数计算

20.1 原子内 K、L 层的电子 x 射线性质和特征

实验室已经精确测定了原子内 K、L 层的电子 x 射线临界吸收和发射能量。以 ^{100}Fm 、 ^{40}Zr 元素为例，详见表 20.1。

原子内 K、L 层的电子 x 射线临界吸收和发射能量表 (eV) 表 20.1

^{100}Fm	L 层能级		K 层能级	K 层内各层电子电离能级差			
K_{ab}			141510				
$K_{\beta 2}$			140122	1388			
$K_{\beta 1}$			136075	5435	4047		
K_{a1}			120598	20912	19524	15477	
K_{a2}			114926	26584	25196	21149	5672
L 层能级				20912	19879	16113	
	27503	16379		26584	25475	21785	
^{40}Zr	L 层能级		K 层能级	K 层内各层电子电离能级差			
K_{ab}			17998				
$K_{\beta 2}$			17969	29			
$K_{\beta 1}$			17666	332	303		
K_{a1}			15774	2224	2195	1892	
K_{a2}			15690	2308	2279	1976	84
L 层能级				2220	2219	2040	
	2547	2042		2305	2302	2124	

类似氢原子光谱计算和原子能级特征，暂不考虑原子核和各层各个电子之间的电、磁场相互作用对各个电子电离能级的影响。原子内层电子对 x 射线临界吸收和发射能量应视为直接由高能 x 射线光子将 K、L 层的电子一次性碰撞激发发射至原子外面的能量，或外界静止电子直接跃迁至 K、L 层的电子自旋轨道时所发射的光子能量。代表 K、L 层内各层电子在自旋轨道运动的自身原始电离能。表 20.1 右边 L 层中 6 个 x 射线能级是 K 层内各层电子在自旋轨道之间激发或跃迁时吸收或发射的 x 射线能量。左边两个能量值，几乎相等，其余 4 个，系统偏小(1~7)/100，显然，它们应该是电子在激发、跃迁过程中存在其它形式能量转化和相互电、磁场作用对能级的影响。表 20.1 左边栏中 2 个 L 层的电子射线能级应真正代表该层内 2 个电子的原始电离能。

20.2 原子内 K、L 层的电子波动、自旋轨道

运动特征及参数计算

20.2.1 原子内层 K、L 层的电子波动、自旋轨道参数计算

因为整个原子内各层、各个电子和原子核之间电、磁场相互作用影响，使每层、各层的各个电子沿波

汉斯预印本

未经同行评审

动、自旋轨道运动中电荷作用强度系数值 Z_i 始终是个相当复杂的变量。笔者未曾收集到原子内各个电子综合磁矩参数的实验值，磁场能量的计算也缺乏依据，所以，本章暂不考虑各个电子沿自旋轨道运动相互作用的磁场能量、内外层电子的屏蔽作用。先由原子的 K、L 层的电子在各层自旋轨道中激发、跃迁时吸收或发射的 x 射线光子能量，来模拟计算各层电子的电荷作用平均强度系数 \bar{Z}_i ，相应的各波动、自旋轨道参数。

因为原子内 K、L 层的电子自旋轨道中， $N_\theta=1$ 、 $v_\theta=v_e$ 、 $E_\theta=0$ ，所以相关的各参数计算公式可以简化。由 (9.16) 式，电子波动速度系数 β_a 为：

$$\beta_a = \sqrt{\frac{N_\alpha}{2} \left\{ 1 - \sqrt{1 - (2\bar{Z}_i a_c)^2 \left(2\sqrt{1 - \frac{1}{N_\alpha}} - 1 + \frac{2}{N_\alpha} \right)^{-3}} \right\}} \quad (20.1)$$

将 (20.1)、(4.9) 式联立得：

$$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{N_\alpha}{2} \left[1 - \sqrt{1 - (2\bar{Z}_i a_c)^2 \left(2\sqrt{1 - \frac{1}{N_\alpha}} - 1 + \frac{2}{N_\alpha} \right)^{-3}} \right]} \\ &= \frac{\sqrt{32N_\alpha + a_c^2(N_\alpha - 1) - a_c\sqrt{N_\alpha - 1}}}{4\sqrt{2N_\alpha}} \end{aligned} \quad (20.2)$$

由能量相对论和 (19.5) 式，电子沿自旋轨道运动的动能 \bar{W}_m 为：

$$\bar{W}_m = \frac{m_{e0}c^2}{e} \left\{ \left[1 - \left(\frac{v_\theta}{c} \right)^2 \right]^{-0.5} - 1 \right\} \quad (20.3)$$

由图 (19.2)、(19.10) 式：

$$\cos \bar{\phi} = \left(2\sqrt{1 - \frac{1}{N_\alpha}} - 1 + \frac{2}{N_\alpha} \right)^{-0.5} \quad (20.4)$$

由 (19.19) 式，电子沿自旋轨道运动的平均电势能 \bar{W}_e 为：

$$\bar{W}_e = \frac{\bar{Z}_i^2 e^2 \cos^4 \bar{\phi}}{4\pi\epsilon_0 r_0 \left[1 - \left(\frac{v_\theta}{c} \right)^2 \right]^{1.5}} \quad (20.5)$$

电子的电离能 $\Delta\bar{W}_e$ 为：

$$\Delta\bar{W}_e = \bar{W}_e - \bar{W}_m \quad (20.6)$$

由 (19.8-1) 式，电子波动、自旋轨道参数 $R_{\theta 0}$ 为：

$$R_{\theta 0} = \frac{a_c r_0}{\beta_\alpha} \sqrt{(N_\alpha - 1) \left[1 - \left(\frac{v_\theta}{c} \right)^2 \right]} \quad (20.7)$$

由 (19.2) 方程组, 令 $\mathbf{a} = 0$ 、 π , 电子波动、自旋轨道内、外侧半径分别为:

$$\begin{cases} R_\theta = \frac{R_{\theta 0} \sqrt{N_\alpha}}{\sqrt{N_\alpha \pm 1}} & (20.8-1) \\ R_\alpha = \frac{R_{\theta 0}}{\sqrt{N_\alpha \pm 1}} & (20.8-2) \end{cases}$$

以 ${}_{100}\text{Fm}$ 原子为例, 原子内 K、L 层的电子波动、自旋轨道参数计算程序如下:

1. 设 $\bar{Z}_i = 95$, 代入 (20.2) 式, 得: $N_a = 3.038122032$ 。
2. 将 N_a 值代入 (4.9) 式, 得: $\beta_a = 0.998943977$ 。
3. 因 $v_\theta / c = \beta_\alpha / \sqrt{N_\alpha}$, 将 \bar{Z}_i 、 N_a 、 β_a 、 $\beta_\alpha / \sqrt{N_\alpha}$ 值分别代入 (20.3) ~ (20.6) 式, 求得电子电离能 $\Delta \bar{W}_e = 152955.3887 \text{eV}$, 比实验值 141510eV 略大。
4. 适当调整 \bar{Z}_i 取值范围, 重复 1~3 计算程序, 直至 $\Delta \bar{W}_e = 141510 \text{eV}$ 为止。
5. 将最后的 \bar{Z}_i 、 N_a 、 β_a 、 $\beta_\alpha / \sqrt{N_\alpha}$ 值分别代入 (20.7) 式和 (20.8) 方程组, 求得电子波动、自旋轨道参数见表 20.2。其它原子模拟计算实例见表 20.3、表 20.4、表 20.5。

${}_{100}\text{Fm}$ 原子内层 K、L 层的
电子波动、自旋轨道参数计算结果表 (单位: eV、 A°) 表 20.2

能级 参数	K_{ab}	$K_{\beta 2}$	$K_{\beta 1}$	K_{a1}	K_{a2}	L_{lab}	L_{a1}
$\Delta \bar{W}_{ei}$	141510	140122	136075	120598	114926	27503	16379
\bar{Z}_i	92.28574	91.94110	90.91620	86.70329	85.03313	44.29352	34.40190
N_a	3.200082	3.221373	3.285732	3.568394	3.689546	11.17994	17.58303
$R_{\theta(0)}$	0.003051	0.003074	0.003143	0.003438	0.003561	0.009062	0.012347
$R_{\theta(\pi)}$	0.010786	0.010809	0.010878	0.011173	0.011296	0.016796	0.020081
$R_{a(0)}$	0.001706	0.001713	0.001734	0.001820	0.001854	0.002710	0.002946
$R_{a(\pi)}$	0.006030	0.006022	0.006001	0.005915	0.005881	0.005023	0.004789

如果参照原子核内 π^\pm 介子波动量子数 N_a 的取值范围, N_a 也应是简单的分数或自然数。表 20.2~表 20.5 中的 \bar{Z}_i 、 N_a 值是不计电子自旋方向综合磁场能量的情况下, 各层众多电子的综合作用值。因磁场能量比电场能量、电子动能小得多, 所以表 20.2~表 20.5 中的 \bar{Z}_i 值接近实际值。

${}_{80}\text{Hg}$ 原子内层 K、L 层的电子波动、自旋轨道参数计算结果表 (单位: eV、 A°) 表 20.3

能级 参数	K_{ab}	$K_{\beta 2}$	$K_{\beta 1}$	K_{a1}	K_{a2}	L_{lab}	L_{a1}
----------	----------	---------------	---------------	----------	----------	-----------	----------

$\Delta\bar{W}_{ei}$	83106	82526	80258	70821	68894	14841	9987
\bar{Z}_i	74.13319	73.90621	73.00723	69.057804	68.20656	32.77473	26.95634
N_a	4.650707	4.674640	4.771362	5.236431	5.346212	19.21285	27.61807
$R_{\theta(0)}$	0.004473	0.004494	0.004580	0.004982	0.005074	0.013082	0.016454
$R_{\theta(\pi)}$	0.012207	0.012228	0.012314	0.012716	0.012809	0.020815	0.024187
$R_{a(0)}$	0.002074	0.002079	0.002097	0.002177	0.002195	0.002985	0.003131
$R_{a(\pi)}$	0.005660	0.005656	0.005638	0.005557	0.005540	0.004749	0.004602

⁶⁰Nd 原子内层 K、L 层的电子波动、自旋轨道参数计算结果表（单位：eV、A°）表 20.4

能级 参数	K_{ab}	$K_{\beta 2}$	$K_{\beta 1}$	K_{a1}	K_{a2}	L_{lab}	L_{a1}
$\Delta\bar{W}_{ei}$	43571	43298	42269	37359	36845	7144	5230
\bar{Z}_i	55.19302	55.02962	54.40810	51.31143	50.97375	22.83278	19.55529
N_a	7.639382	7.678098	7.828379	8.655758	8.754746	37.81120	50.89352
$R_{\theta(0)}$	0.006821	0.006848	0.006952	0.007510	0.007575	0.019910	0.023718
$R_{\theta(\pi)}$	0.014555	0.014582	0.014686	0.015244	0.015308	0.027643	0.031451
$R_{a(0)}$	0.002468	0.002471	0.002485	0.002553	0.002560	0.003238	0.003325
$R_{a(\pi)}$	0.005266	0.005262	0.005249	0.005181	0.005174	0.004495	0.004409

从表 20.2~表 20.5 中 K、L 层的电子自旋轨道的空间分布范围，可以看出：1. 当核电荷数 $Z_i \leq 80$ 时，K 层和 L 层的电子波动、自旋轨道没有重叠，中间还有一定的间隔；2. K、L 层中内各亚层的电子波动、自旋轨道组成的螺线环包围的空间大部分重叠、交错在一起。前者侧面反映自然界稳定核素 $Z_i \leq 83$ ；后者说明电子内电偶极子自转半径系数 K_r 是 10^{-4} 数量级，以 $K_r \bar{R}_\alpha$ 值作为电子的粒子半径，加上同号电荷相排斥作用，各亚层的电子对称同步运动，所以，在电子极小的波动、自旋轨道重叠区内，几十个电子仍然可以象高速公路立交桥一样各行其道，永远不会相互碰撞。

20.2.2 电子自旋椭圆轨道运动特征总结

原子内层电子应成对运动，自旋运动方向完全对称相同，波动方向相反。就是说：每一对电子波动、自旋轨道运动都由两条波动、自旋相对原子核中心完全对称、自旋周期相差 $T/2$ （相位相差 π ）的轨道组成。这样，我们可以肯定，成对电子波动运动方向磁场应互相抵消。

由能量守恒定律和能量相对论条件下推导出来的电子自旋椭圆轨道运动方程，椭圆轨道的离心率 $E_\theta=0$ ，转化为圆轨道。它实际上是向原子核内的粒子螺线环轨道特征回归，应是完全成立、正确的。非能量相对论条件下推导出的电子自旋椭圆轨道方程，虽然 $0 \leq E_\theta \leq 1$ ，相对总能量守恒定律，它只能是一个近似结果。当我们将电子沿椭圆轨道旋转曲面附加侧向运动的速度、动能、磁场能量也考虑进去时，我们完全有理由相信：电子的能量相对论动能、相对核电场、综合电场的电势能、磁场能量总和也完全符合总能量守恒定律。

决定原子、分子化学性质、物理特征的是原子外层电子自旋、附加侧向椭球旋转曲面的轨道运动特征。内层的 x 荧光射线谱特征只能作为测定原子的标识谱。轨道内转换核物理中已论述。表 20.2~表 20.5 中数据只是各亚层的电子综合作用的模拟计算参数。要确定各亚层的电子数、波动量子数，必需考虑相互屏

蔽作用，再联立方程组用模拟计算方法求解。因时间和笔者手中计算工具的限制，不再深入研究。