

中国科学技术大学

2025 ~ 2026 学年第二学期考试试卷

☒A 卷 ☐B 卷课程名称: 现代原子与分子物理导论 课程代码: PHYS5101P.01开课院系: 物理学院 考试形式: 半开卷

姓 名: _____ 学 号: _____ 专 业: _____

题 号	1	2	3	4	5	6	7	总 分
满 分	19	17	10	16	18	10	10	100
得 分								

注: 共六道大题, 请勿漏答。请在首页写上姓名和学号, 并在每道题下方空白处答题, 答题时要注意写上必要的计算步骤。本次考试允许携带一张写满笔记的 A4 纸。在考试过程中, 不允许使用计算器或手机等任何电子产品。

超精细结构 A、B 系数: $E = A\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + B \frac{3(I \cdot J)^2 + \frac{3}{2}(I \cdot J) - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)J(2J-1)}$

Pauli 矩阵性质: $\sigma_i^2 = I$, $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 0$ ($i \neq j$)

氢原子 $n=1, 2$ 态波函数

径向 $R_{10} = 2(1/a_0)^{3/2}e^{-r/a_0}$ $R_{21} = \frac{2}{\sqrt{3}}(1/2a_0)^{3/2}(r/2a_0)e^{-r/2a_0}$

这里, a_0 为玻尔半径

角向 $Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ $Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}$

Breit-Rabi 公式 (忽略核磁矩): $E_{F=I \pm 1/2} = -\frac{\Delta E_{hfs}}{2(2I+1)} \pm \frac{\Delta E_{hfs}}{2} \left(1 + \frac{4mx}{2I+1} + x^2\right)^{\frac{1}{2}}$, 这里, $x = \frac{g_J \mu_B B}{\Delta E_{hfs}}$.

Rb 原子参数:

^{85}Rb 核自旋 $I=5/2$, ^{87}Rb 核自旋 $I=3/2$,

Note: A square-root sign is to be understood over every coefficient, e.g., for $-8/15$ read $-\sqrt{8/15}$.

Notation:

J	J	...
M	M	...
m_1	m_2	
m_1	m_2	Coefficients

$1/2 \times 1/2$

1	0
$+1/2 + 1/2$	0

 $1 \times 1/2$

$3/2$	$1/2$
$+1 + 1/2$	$+1/2 + 1/2$

 2×1

3	2
$+2 + 1$	$+1 + 2$

 1×1

2	1
$+1 + 1$	$+1 + 1$

 $Y_l^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
 $Y_l^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$
 $Y_l^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$
 $Y_l^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$
 $Y_l^2 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$
 $3/2 \times 1$

$5/2$	$3/2$
$+3/2 + 1$	$+3/2 + 3/2$

 $3/2 \times 1/2$

$5/2$	$3/2$
$+3/2 + 1/2$	$+3/2 + 1/2$

 $2 \times 1/2$

$3/2$	$1/2$
$+1 + 1/2$	$+1/2 + 1/2$

 $1 \times 1/2$

$3/2$	$1/2$
$+1 + 1/2$	$+1/2 + 1/2$

 $Y_l^{-m} = (-1)^m Y_l^{m*}$
 $d_{m,0}^l = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^m e^{-im\phi}$
 $d_{m',m}^l = (-1)^{m-m'} d_{m,m'}^l = d_{-m,-m'}^l$
 $3/2 \times 3/2$

3	2	1
$+3/2 + 3/2$	$+1 + 2$	$+2 + 1$

 $2 \times 3/2$

$7/2$	$5/2$	$3/2$
$+5/2 + 1/2$	$+3/2 + 3/2$	$+1/2 + 1/2$

 2×2

4	3	2
$+3 + 1$	$+2 + 2$	$+1 + 3$

 $d_{0,0}^1 = \cos \theta$
 $d_{1/2,1/2}^1 = \cos \frac{\theta}{2}$
 $d_{1/2,-1/2}^1 = -\sin \frac{\theta}{2}$
 $d_{1,1}^1 = \frac{1 + \cos \theta}{2}$
 $d_{1,0}^1 = \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}}$
 $d_{1,-1}^1 = \frac{1 - \cos \theta}{2}$
 $d_{3/2,3/2}^1 = \frac{1 + \cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$
 $d_{3/2,1/2}^1 = -\sqrt{3} \frac{1 + \cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$
 $d_{3/2,-1/2}^1 = \sqrt{3} \frac{1 - \cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$
 $d_{3/2,-3/2}^1 = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$
 $d_{1/2,1/2}^2 = \frac{3 \cos \theta - 1}{2} \cos \frac{\theta}{2}$
 $d_{1/2,-1/2}^2 = -\frac{3 \cos \theta + 1}{2} \sin \frac{\theta}{2}$
 $d_{2,2}^2 = \left(\frac{1 + \cos \theta}{2} \right)^2$
 $d_{2,1}^2 = \frac{1 + \cos \theta}{2} \sin \theta$
 $d_{2,0}^2 = \frac{\sqrt{6}}{4} \sin^2 \theta$
 $d_{2,-1}^2 = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \sin \theta$
 $d_{2,-2}^2 = \left(\frac{1 - \cos \theta}{2} \right)^2$
 $d_{1,1}^2 = \frac{1 + \cos \theta}{2} (2 \cos \theta - 1)$
 $d_{1,0}^2 = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta \cos \theta$
 $d_{1,-1}^2 = \frac{1 - \cos \theta}{2} (2 \cos \theta + 1)$
 $d_{0,0}^2 = \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$

图 1 CG 系数表

1. (5分) (a) 氢原子 $2P$ 态分裂成 $2P_{3/2}$ 和 $2P_{1/2}$ 态的主要物理机制是什么?

(6分) (b) 氢原子 $2P_{1/2}$ 态能级分裂为 $F=1$ 和 $F=0$ 两个态的主要物理机制是什么?

(8分) (c) 对氢原子 $2P$ 态, 超精细分裂的 A 系数正比于 $\frac{L(L+1)}{J(J+1)} \langle \frac{1}{r^3} \rangle$, 这里, L 和 J 分别为电子的轨道角动量和总角动量。求氢原子 $2P_{3/2}$ 超精细分裂和 $2P_{1/2}$ 态超精细分裂的比值是多少?

(a) 氢原子 $2P$ 态分裂成 $2P_{3/2}$ 和 $2P_{1/2}$ 态是精细分裂, 它产生的主要物理机制是自旋-轨道耦合 (或者核绕电子相对运动产生的磁场与电子角动量的耦合)。

(b) 氢原子 $1S_{1/2}$ 态分裂成 $F=1$ 和 $F=0$ 态是超精细分裂, 它产生的主要物理机制是氢原子核自旋的磁偶极与电子自旋的磁偶极之间的偶极-偶极相互作用 (3分) 以及电子绕核自旋运动产生的磁场与核自旋的耦合 (3分)

(c) 由题干可得, $2P_{3/2}$ 与 $2P_{1/2}$ 的 A 系数比值为 $A_{3/2}/A_{1/2}=1/5$ (2分)

由超精细作用的能级表达式为 $E = A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = \frac{A}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)]$,

所以, 超精细分裂为: $\Delta E = \frac{A}{2} [F(F+1) - F'(F'+1)]$

对 $2P_{1/2}$, $F=1$, $F'=0$, 有: $\Delta E_{1/2} = A_{1/2}$ (2分)

对 $2P_{3/2}$, $F=2$, $F'=1$, 有: $\Delta E_{3/2} = 2A_{3/2}$ (2分)

从而有 $\frac{\Delta E_{3/2}}{\Delta E_{1/2}} = \frac{2}{5}$ (2分)

2. (9 分) (a) 请利用 CG 系数表将⁸⁷Rb 耦合表象下的三个态 $|5P_{3/2} F = 1, m_F = 1\rangle$ 、 $|5S_{1/2} F = 1, m_F = 0\rangle$ 与 $|5S_{1/2} F = 1, m_F = 1\rangle$ 分别展开为非耦合表象下的态 ($|J, m_J, I, m_I\rangle$) 组合。

(8 分) 请计算⁸⁷Rb $|5P_{3/2} F = 1, m_F = 1\rangle$ 自发辐射到 $|5S_{1/2} F = 1, m_F = 0\rangle$ 与 $|5S_{1/2} F = 1, m_F = 1\rangle$ 的几率比

解：

(a) 根据 CG 系数表，有：

$$|5P_{3/2} F = 1, m_F = 1\rangle = \sqrt{\frac{3}{10}} |J = 3/2, m_J = 3/2, I = 3/2, m_I = -1/2\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |J = 3/2, m_J = 1/2, I = 3/2, m_I = 1/2\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |J = 3/2, m_J = -1/2, I = 3/2, m_I = 3/2\rangle \quad (3 \text{ 分})$$

$$|5S_{1/2} F = 1, m_F = 0\rangle = -\sqrt{\frac{1}{2}} |J = 1/2, m_J = 1/2, I = 3/2, m_I = -1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}} |J = 1/2, m_J = -1/2, I = 3/2, m_I = 1/2\rangle \quad (3 \text{ 分})$$

$$|5S_{1/2} F = 1, m_F = 1\rangle = -\frac{1}{2} |J = 1/2, m_J = 1/2, I = 3/2, m_I = 1/2\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} |J = 1/2, m_J = -1/2, I = 3/2, m_I = 3/2\rangle \quad (3 \text{ 分})$$

(b) $|5P_{3/2} F = 1, m_F = 1\rangle$ 到 $|5S_{1/2} F = 1, m_F = 0\rangle$ 的跃迁为 σ^- 跃迁，跃迁矩阵元为：

$$\begin{aligned} & \langle 5S_{1/2} F = 1, m_F = 0 | \hat{T}_{-1}^1 | 5P_{3/2} F = 1, m_F = 1 \rangle \\ &= -\sqrt{\frac{3}{20}} \langle J = 1/2, m_J = 1/2 | \hat{T}_{-1}^1 | J = 3/2, m_J = 3/2 \rangle - \sqrt{\frac{1}{5}} \langle J = 1/2, m_J = -1/2 | \hat{T}_{-1}^1 | J = 3/2, m_J = 1/2 \rangle = -\sqrt{\frac{5}{24}} C \quad (3 \text{ 分}) \end{aligned}$$

$|5P_{3/2} F = 1, m_F = 1\rangle$ 到 $|5S_{1/2} F = 1, m_F = 1\rangle$ 的跃迁为 π 跃迁，跃迁矩阵元为：

$$\langle 5S_{1/2} F = 1, m_F = 1 | \hat{T}_0^1 | 5P_{3/2} F = 1, m_F = 1 \rangle$$

$$= \sqrt{\frac{1}{10}} \langle J = 1/2, m_J = 1/2 | \hat{T}_0^1 | J = 3/2, m_J = 1/2 \rangle + \frac{3}{2} \sqrt{\frac{1}{10}} \langle J = 1/2, m_J = -1/2 | \hat{T}_0^1 | J = 3/2, m_J = -1/2 \rangle = -\sqrt{\frac{5}{24}} C \quad (3 \text{ 分})$$

所以，两者的跃迁几率正比于矩阵元的模平方，均为 $\frac{5}{24} |C|^2$ ，跃迁几率比值为：

$$\boxed{W(m_F = 1 \rightarrow m_F = 0): W(m_F = 1 \rightarrow m_F = 1) = 1:1} \quad (2 \text{ 分})$$

3. (5 分) (a) 考虑一振荡电场 $E = \hat{e}E_0\cos(\omega t)$ 与一团原子相互作用, 结合二能级系统, 简要解释旋转波近似。

(5 分) (b) 请举一例, 在什么情况下旋转波近似不再适用。

解:

(a) 电场的振荡项 $\cos(\omega t)$ 可以写成

$$\cos(\omega t) = \frac{1}{2}(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t})$$

其中第一项代表原子吸收光子到更高能级态, 第二项代表原子放出光子到更低的状态。因此, 在二能级系统的演化方程中, 涉及到从高能级到低能级的跃迁, 只保留电场中的 $e^{i\omega t}$ 项; 反之, 只保留电场中的 $e^{-i\omega t}$ 项。(类似意思都可以算正确, 如保留振荡频率较小的项, 舍去快速振荡项等) (5 分)

(b) 比如: 在远失谐的偶极阱中, 因为在旋转波近似中舍去的项与保留的项大小可比, 在计算阱深的时候不能做旋转波近似。 (5 分)

4. (8分) (a) 在偶极跃迁条件下, $^{87}\text{Rb } |5S_{1/2}, F=2, m_F=1\rangle$ 可以激发到 $5P_{3/2}$ 上的哪些态?

(4分) (b) ^{87}Rb 磁光阱 (MOT) 中冷却光的偏振与波长应作什么要求?

(4分) (c) 对 ^{87}Rb 的基态进行光抽运, 一般会将抽运光放在哪个跃迁波长? 为什么?

解:

(a) 在偶极跃迁情况下, $^{87}\text{Rb } |5S_{1/2}, F=2, m_F=1\rangle$ 可以激发到 $5P_{3/2}$ 上的以下态:

$$|F'=1, m_F=0,1\rangle, |F'=2, m_F=0,1,2\rangle, |F'=3, m_F=0,1,2\rangle$$

(写对一个态给一分, 写错扣一分, 最低分为 0 分)

(b) 冷却光偏振为圆偏振光 (σ^+ 或 σ^- , 两者均可)。(2分)

波长在较

$$|5S_{1/2}, F=2, m_F=2\rangle \rightarrow |5P_{3/2}, F=3, m_F=3\rangle \quad (|5S_{1/2}, F=2, m_F=-2\rangle \rightarrow |5P_{3/2}, F=3, m_F=-3\rangle \text{ 也可以})$$

跃迁红失谐 3Γ 左右。(2分, 写出红失谐就可以给 2 分)

(c) 一般激光波长会选择与 $^{87}\text{Rb } |5S_{1/2}, F=2\rangle$ 到 $|5P_{1/2}, F=2\rangle$ 跃迁共振 (2分)

因为这个跃迁存在暗态 $|5S_{1/2}, F=2, m_F=2\rangle$ (或者 $|5S_{1/2}, F=2, m_F=-2\rangle$) (2分)

5. 在忽略核磁矩的情况下，考虑下面问题：

(6分) (a) 请解释 ^{87}Rb 原子 $|5S_{1/2}, F=2, m_F=2\rangle$ 态是否有非线性塞曼效应？

(4分) (b) 请解释 ^{87}Rb 原子基态的哪两个态之间的跃迁是可以被磁偶极跃迁驱动的钟跃迁？

(8分) (c) 在塞曼效应远小于超精细效应情况下，设 (b) 问题提到的中 ^{87}Rb 原子基态间钟跃迁能量中的二阶塞曼效应因子(B^2 的系数)前为 c_1 ； ^{87}Rb $|5S_{1/2}, F=1, m_F=-1\rangle$ 到 $|5S_{1/2}, F=2, m_F=1\rangle$ 跃迁能量中二阶塞曼效应因子为 c_2 。用超精细分裂 ΔE_{hfs} 和玻尔磁矩 μ_B 来表示这两个系数。

(a) ^{87}Rb 原子 $|5S_{1/2}, F=2, m_F=2\rangle$ 没有非线性塞曼效应 (2分)

因为非线性塞曼效应来自于塞曼效应将不同 F ，但相同 m_F 态耦合产生的。但基态 $m_F=2$ 的只有 $|5S_{1/2}, F=2, m_F=2\rangle$ ，没有其他态可以通过塞曼效应与之耦合，所以它没有非线性塞曼效应。(4分)

(b) ^{87}Rb 原子的 $|5S_{1/2}, F=2, m_F=0\rangle$ 与 $|5S_{1/2}, F=1, m_F=0\rangle$ 之间的跃迁是钟跃迁 (2分)

因为这个跃迁的一阶塞曼效应为零 (跃迁频率对磁场大小一阶无关)。(2分)

(c) 根据卷首给出的 Breit-Rabi 公式，有：

$$\begin{aligned} E_{F,m_1} - E_{F',m_2} &= \frac{\Delta E_{\text{hfs}}}{2} \left(1 + \frac{4m_1x}{2I+1} + x^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{\Delta E_{\text{hfs}}}{2} \left(1 + \frac{4m_2x}{2I+1} + x^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \Delta E_{\text{hfs}} + \Delta E_{\text{hfs}} \frac{(m_1 + m_2)x}{2I+1} + \frac{\Delta E_{\text{hfs}} x^2}{2} - \Delta E_{\text{hfs}} \frac{m_1^2 + m_2^2}{(2I+1)^2} x^2 \\ &= \Delta E_{\text{hfs}} + \frac{(m_1+m_2)}{2I+1} g_s \mu_B B + \left[1 - 2 \frac{m_1^2+m_2^2}{(2I+1)^2} \right] \frac{(g_s \mu_B B)^2}{2\Delta E_{\text{hfs}}} \quad (4 \text{ 分}) \end{aligned}$$

对钟跃迁，有： $c_1 = 2 \frac{\mu_B^2}{\Delta E_{\text{hfs}}}$ (2分)

对 $|5S_{1/2}, F=1, m_F=-1\rangle$ 到 $|5S_{1/2}, F=2, m_F=1\rangle$ 跃迁： $c_2 = \frac{3}{2} \frac{\mu_B^2}{\Delta E_{\text{hfs}}}$ (2分)

6. (10 分) 在不考虑电子和核自旋时, 氢原子的态可以用 $|n, L, m_L\rangle$ 表示, 这里 L 是轨道量子数。设系统量化轴为 z 轴, 根据试卷首页的氢原子波函数表示形式, 计算 $\langle n=1, L=0, m_L=0 | x | n=2, L=1, m_L=1 \rangle$ 。

$$x = r \sin \theta \cos \varphi = -r \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{11} - Y_{1-1}) = -r \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{11}^* - Y_{1-1}^*) \quad (3 \text{ 分})$$

$$\begin{aligned} \langle n=1, L=0, m_L=0 | x | n=2, L=1, m_L=1 \rangle &= \iiint R_{10}^* Y_{00}^* x R_{21} Y_{11} r^2 dr d\Omega \\ &= -\frac{1}{\sqrt{6}} \int_0^\infty R_{10}^* R_{21} r^3 dr \int (Y_{11}^* - Y_{1-1}^*) Y_{11} d\Omega \\ &= -\frac{1}{\sqrt{6}} \int_0^\infty R_{10}^* R_{21} r^3 dr = -\frac{1}{6a_0^4} \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_0}} dr \quad (4 \text{ 分}) \end{aligned}$$

利用 $L_n = \int_0^\infty r^n e^{-r} dr = n! L_{n-1} = n!$ 可得:

$$\langle n=1, L=0, m_L=0 | x | n=2, L=1, m_L=1 \rangle = -\frac{2^4 a_0}{3^6} \int_0^\infty r^4 e^{-r} dr = -\frac{128 a_0}{243} \quad (3 \text{ 分})$$

7. (10 分) 对于自旋 $1/2$ 系统, 其希尔伯特空间是 2 维的。在这个空间中, 任何 2×2 的厄米矩阵 ρ 都可以用四个线性独立的基展开。最方便的基是单位矩阵 I 和三个泡利矩阵。这样, ρ 可以表示为: $\rho = aI + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 。a 和 $\mathbf{b}=(b_x, b_y, b_z)$ 是待定的实系数。请证明, 自旋 $1/2$ 系统的密度矩阵可以表示为: $\rho = I/2 + 2\langle \mathbf{S} \rangle \cdot \mathbf{S}$, 这里 $\mathbf{S}$ 是自旋算符, $\langle \mathbf{S} \rangle$ 是自旋的期望值。

根据密度矩阵的归一化性质, 有:

$$\text{Tr}(\rho) = a\text{Tr}(I) + \mathbf{b} \cdot \text{Tr}(\boldsymbol{\sigma}) = 1 \quad (3 \text{ 分})$$

根据泡利矩阵的性质 $\text{Tr}(\sigma_i)=0$, $\text{Tr}(I) = 2$ (2 分)

有 $a=1/2$ 。

根据算符期望值的定义有:

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \text{Tr}(\rho \mathbf{S}) = a \text{Tr}(\mathbf{S}) + \text{Tr}[(\sum_i b_i \sigma_i) \mathbf{S}] \quad (2 \text{ 分})$$

考虑 $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$, 有: $\text{Tr}(\mathbf{S}) = 0$ 。另根据 Pauli 矩阵性质 $\sigma_i^2 = I$, $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 0 \ (i \neq j)$, 有:

$$\text{Tr}[(\sum_i b_i \sigma_i) S_j] = \langle S_j \rangle = \sum_i b_i \text{Tr}(\sigma_i S_j) = \frac{\hbar}{2} \sum_i b_i \text{Tr}(\sigma_i \sigma_j) = \frac{\hbar}{2} b_j \text{Tr}(I) = \hbar b_j \quad (3 \text{ 分})$$

所以, $b_j = \langle S_j \rangle / \hbar$, 从而有 $\mathbf{b} = \langle \mathbf{S} \rangle / \hbar$

$$\text{代入原表达式有: } \rho = aI + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{I}{2} + \frac{\langle \mathbf{S} \rangle}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{I}{2} + \frac{2}{\hbar^2} \langle \mathbf{S} \rangle \cdot \mathbf{S}$$