

通识型研究生学位课程“高等原子分子物理” 内容设置尝试

吕珍龙, 李小红, 牛世峰, 王鑫鑫, 雍永亮
河南科技大学 物理工程学院, 河南 洛阳 471023
DOI:10.61369/ECE.2026040029

摘 要 : 高等原子分子物理是我校物理学硕士研究生的核心学位课程之一。我校物理专业研究生来源复杂, 专业背景不尽相同, 而国内外合适使用的教材较少, 较难满足当前多学科交叉融合背景下通识性课程的教学需要。本文基于国内外现有相关教材, 设计了一套高等原子分子物理教学内容体系, 详细地阐述了课程内容设置理念、体系结构特点和教学目的, 可以为一般院校该课程的建设提供参考。

关 键 词 : 高等原子分子物理; 研究生学位课程; 课程设置; 教学内容改革

Attempt at Content Design for the General Graduate Degree Course "Advanced Atomic and Molecular Physics"

Lv Zhenlong, Li Xiaohong, Niu Shifeng, Wang Xinxin, Yong Yongliang
School of Physics and Engineering, Henan University of Science and Technology, Luoyang, Henan 471023

Abstract : Advanced Atomic and Molecular Physics is one of the core degree courses for master's students in physics at our university. Our physics graduate program has a complex source of students with different professional backgrounds, and there are few suitable textbooks available both domestically and internationally, making it difficult to meet the teaching needs of general courses in the current interdisciplinary integration context. This article is based on existing relevant textbooks at home and abroad, and designs a teaching content system for advanced atomic and molecular physics. It elaborates in detail on the curriculum design concept, system structure characteristics, and teaching objectives, which can provide reference for the construction of this course in general colleges and universities.

Keywords : advanced atomic and molecular physics; graduate degree programs; course design; teaching content reform

引言

(一) 研究背景和意义

原子分子物理是研究原子分子结构、光谱及其与外加电磁场相互作用的一门学科, 是现代物理学的一个重要分支。它在量子力学的诞生过程中起着非同寻常的作用, 在交叉学科蓬勃发展的今天, 越来越多的研究领域需要利用原子分子物理相关知识对所研究的问题进行原子层面的分析^[1]。例如, 研究吸附催化过程中的电荷转移和化学键的重构、凝聚态材料拓扑性质涉及到的自旋轨道劈裂、生物大分子用的光谱探针方法、大气化学中的光化学反应路径等, 均需要研究者具备扎实的原子分子物理基础。

到目前为止, “高等原子分子物理”这一课程相关教材较少, 能搜索到的几本国内相关教材有: 中国科技大学出版社出版的徐克尊教授编著的“高等原子分子物理学”^[2], 主要内容包括原子的激发态结构, 分子的能级结构, 能级和谱线宽度及谱线线形, 激光和同步辐射光谱学, 电子能谱学和电子动量谱学等。最近, 高等教育出版社出版的浙江大学颜波教授的“原子分子与光物理”^[3], 主要内容涵盖氢原子光谱、氦原子光谱、碱金属原子光谱、超精细能级结构、角动量和跃迁选择定则、关于原子相互作用、双原子分子光谱、冷原子物理等。国外的一本经典教材是 B.H. Bransden 和 C.J. Joachain 的“Physics of Atoms and Molecules”^[4], 主要内容有量子力学基本知识、单电子原子及其精细结构、双电子原子、多电子原子及其与电磁场的作用、分子结构与分子光谱、电子及原子和原子碰撞等。

作为普通院校, 我校物理专业研究生来源具有多样性特点, 有的学生本科阶段没有学习过原子物理, 有的学生学习的内容很少很浅, 导致原子分子物理方面的知识相当欠缺。然而, 根据我校的实际, 传统的高等原子分子物理课程内容常常存在有以下问题: 一是内

容覆盖度不适合我校研究生的知识水平；二是涉及到的数学推导难度偏大，如微扰论、变分法、群论等对非物理专业出身的研究生较难；三是所教授的知识与现在的科技前沿、应用之间有鸿沟，学生学完后难以主动把所学知识迁移应用到自己的研究方向。因此，如何重构课程授课内容体系，使其既能适合我校物理类研究生教学需要，又能扩充其知识储备、培养其知识迁移应用能力，成为我们建设该课程的核心任务。

（二）通识型课程的含义

我校物理硕士点主要研究方向有：凝聚态物理理论计算，新能源材料、发光材料制备，激光光场调控。凝聚态物理理论研究方面，有时候需要分析材料的吸附、催化等性质，会用到电荷密度差分、原子轨道等知识；发光材料制备方面，需要对基底材料进行过渡金属原子掺杂，对试验样品进行理论计算研究时会涉及到掺杂原子的能级、跃迁光谱等；激光光场调控方面会涉及到原子分子发光机理、原子与光场作用等相关知识。科研实践告诉我们，上述方面都与原子分子物理有紧密的联系。原子分子物理中又有很多伟大的科学家提出的很多创新性的理论^[5, 6]，开设该门课程有利于学生创新能力的培养，这是我们开设该课程的原因。如前所述，由于我校部分物理类研究生专业背景不强，不宜把课程重点放在深度和难度上。

这里所称的“通识型”学位课程不是指降低课程培养目标，而是指学生需要掌握必要的、与研究方向相关度高的原子分子物理学知识，使他们在随后的研究工作中，能够运用原子分子物理的相关概念、原理、方法，对涉及到的问题给出合理的分析和讨论，而不是以发展原子分子物理理论本身作为本课程的教学目的。我们希望通过课程学习，学生具备以下能力：掌握原子和分子的能级结构、光谱选律、跃迁机制；能够读懂所研究领域文献中涉及原子分子物理知识部分；能够利用所学知识在原子分子层次上分析、解释研究中遇到的问题。

（三）课程体系的构成

我校于2020年开始为物理类研究生开设“高等原子分子物理”。经过多年的教学实践，参考现有教材^[2, 7, 8]和教学改革^[9-10]，我们组织了适合我校实际的教学内容体系，由十章内容构成，也就是：氢原子能级和光谱，碱金属原子结构和光谱，氦原子光谱及其选律，氦原子及多电子原子能级，原子的壳层结构，磁场中的原子，双原子分子电子结构，双原子分子光谱，分子对称性，光谱线型和加宽机制。

该课程内容从最简单的、具有解析解的氢原子开始，经可求解的、具有原子实的单电子碱金属元素、以及具有电子关联效应的氦原子，到只能使用近似方法进行求解的多电子原子，接着从讲授原子壳层结构过渡到原子在外磁场中的性质，再从原子体系内容转到分子体系，最后讨论光谱谱线型及相应的光谱加宽机制。这样设置能够使整个体系显得层次分明、条理清晰，适合作为我校通识型研究生课程的授课框架。

一、授课内容设置的思路和目的

（一）从可精确求解出发到采用近似方法：原子能级和在外场中的表现

第一章我们从最简单的原子氢原子出发，在球坐标下对薛定谔方程进行分离变量，求解径向和角向方程，得出主量子数、角量子数、磁量子数的定义和物理意义，以及波函数和电子云的空间分布图，最后介绍能够验证原子具有分立能级的弗兰克-赫兹实验。对通识型课程，本章的教学不要求学生熟练掌握全部的求解细节，重点在于其掌握该方程求解思路，建立起电子在原子中各处是按概率分布的物理图像，波函数、电子云图的具体形状是由不同的量子数组合决定的。这里学习的电子轨道图、电子云图在材料计算研究中有着非常重要的应用。

第二章过渡到具有原子实的碱金属原子，本章把单电子图像由氢原子扩展到价电子为一个电子的多电子原子，为了解释碱金属原子能级降低而引入量子数亏损的概念，并讨论了考虑自旋-轨道耦合时钠原子光谱的精细结构和单电子辐射跃迁遵守的选择定则。通过这一章的学习，学生就知道了钠黄光主线系具有双能级结构的原因，可以为后面学习磁场中的原子和双原子分子光谱奠定一定的基础，而本章不需要在自旋轨道耦合的数学推导上花

费过多精力。

第三章以氦原子为例讲授角动量耦合理论。氦原子是我们知道的多电子原子中最简单、但已具有电子关联效应的原子。对实验光谱进行的分析表明氦原子具有单重态和双重态两套能级结构，在此基础上引出自旋LS和JJ耦合概念、两个价电子组成的原子的原子态问题。对于通识型课程，本章的重点是理解氦原子双能级结构的来源，亚稳态存在的原因，掌握由双电子原子态推导原子态的方法。

第四章仍以氦原子为例，重点在于对其能量的理论计算。该章系统地教授怎样使用独立粒子模型、变分法、定态微扰法来计算氦原子的能量，随后介绍与多电子原子相关的中心力场理论，求解这类问题使用的哈特里-福克自洽场方法、密度泛函法及涉及到的电子关联作用等。这一章是本课程中理论难度最大的一章，也是对从事材料计算的研究生最重要的一章。该章的教学目标是使学生掌握微扰论、变分法、自洽迭代的基本思想，而不是这些方法中涉及到的复杂的数学计算。另外，使学生明白复杂原子的薛定谔方程是没有办法精确求解的，需要使用近似方法，而最终得到的结果的好坏直接取决于所用模型的精度。

第五章介绍元素物理和化学性质的周期性和原子内电子排布的结构规律，把原子的结构和性质与原子的化学周期性联系起

来。从本章的内容可以看得出来物理理论是研究物质结构的基础，而化学元素周期表实际上是建立在原子物理和量子力学的基础上的。教学中可要求学生从电子组态出发，推导出若干个代表性原子的光谱项和光谱支项，为学习外场中的原子能级和光谱打下基础。

第六章针对性地讨论磁场对原子能级和光谱的影响。当外加磁场强度较小时，会产生塞曼 / 反常塞曼效应；当外加磁场强度较大时，则产生自旋 - 轨道耦合被迫解耦合的帕邢 - 贝克效应。通过这一章学习，使学生认识到外磁场中原子的能级 / 谱线产生分裂的物理机制——原子具有有效磁矩，它由原子总角动量决定，后者在外磁场作用下产生不同取向，进而导致磁矩在外磁场中具有不同的取值，最终诱导出来大小不等的附加能量。学习塞曼效应可以加深我们对角动量量子化理解和对原子光子体系动量守恒的认识。

（二）从原子体系到分子体系：分子的化学键、光谱和对称性

第七章开始讲授分子物理部分。以最简单的三体分子体系，氢分子离子 H_2^+ 为例，通过变分法原理求解该体系的薛定谔方程，得到分子轨道理论的基本内容：分子轨道可由原子轨道进行线性组合而成，成键轨道和反键轨道的特点，分子中电子排布仍遵从泡利不相容原理和洪特定则。阐述分子成键三原则及其简单的证明，在此基础上系统地讲解同核和异核双原子分子的电子结构，分子的电子组态及光谱项，最后简要介绍离域和定域分子轨道概念和价键理论等。学习本章时，应重点掌握分子轨道理论的基本思想和重要概念，并能解释简单的双原子分子的磁性的来源，而不必纠结于多中心积分之类的复杂数学计算。

第八章讲解双原子分子光谱。根据玻恩 - 奥本海默近似，双原子分子的能级可以近似看作由电子能级、振动能级和转动能级复合而成，跃迁谱线分别对应于电子的可见 / 紫外谱、振动 - 转动的红外谱和转动的远红外 / 微波谱。本章的重点是讲授刚性转子模型下的转动能级和转动光谱选律，谐振子模型下的振动能级和振动跃迁选律，以及当考虑到实际分子具有非简谐性后的修正结果。以势能曲线为基础，讲解弗兰克 - 康登原理，该原理可用

来解释电子跃迁对振动光谱强度的影响。学完本章后，学生应该能够根据实验光谱求出简单双原子分子的键长、力常数等。

第九章简单介绍群论基础知识、分子对称性和分子点群。通过本章的教学，使学生掌握分子的基本对称操作及相应的对称元素；理解群的封闭性、结合律、单位元素、逆等基本概念，能够判断常见分子，如水分子、氨气、甲烷、苯等的点群及其所有的对称操作元素；能够利用对称性判定某分子是否有本征偶极矩、是否是手性分子、具有红外活性还是拉曼活性。

（三）光谱线型和加宽机制：理想光谱与实际光谱

第十章讨论光谱线型和加宽机制。精密光谱仪测得的实验光谱不是无限细的一条竖线，而有一定的展宽，其光强分布随波长变化，和某些函数曲线一样，称作线型。自然加宽和碰撞加宽属于均匀加宽，其线型为洛伦兹型，来源于激发态具有有限寿命导致的能级展宽；多普勒加宽属于非均匀加宽，其线型为高斯型，是由于发光粒子具有不同的速度产生的；而实际观测到的通常是综合加宽，是由前面说的两种叠加形成的，称为佛伊特线型。光强很强时，发光粒子与光作用时会出现非线性效应，产生饱和加宽。本章的教学目的是让学生能够识别谱线线型，能根据实验条件判断出占主导作用的加宽机制等。

二、结论

为适应我校教学实际，本文提出了由十章教学内容构成的高等原子分子物理教学体系。从能精确求解的氢原子出发，到多电子体系的碱金属、氢原子的能级和光谱，及磁场对原子的影响，再到双原子分子的电子结构、轨道和光谱，以及分子对称性，最后讨论光谱线型及其加宽机制。这样的设置对应着从原子到分子“复杂性渐进”、理想光谱到实际光谱“理想到现实”的授课逻辑。该授课内容和授课策略，可以实现保证理论严谨性的同时弱化数学推导、扩展学生视野的同时培养学生的知识应用能力的教学目标，实践表明这样能收到较好的教学效果，有利于提高我校研究生的培养质量。

参考文献

- [1] 孟庆田. 原子分子物理与光物理学研究进展概述 [J]. 山东师范大学学报 (自然科学版), 2020, 35(1): 31-39.
- [2] 徐克尊. 高等原子分子物理学 (第三版) [M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2012.
- [3] 颜波. 原子分子与光物理 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2023.
- [4] B.H. Bransden, C.J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules [M]. New York: Longman Inc., 1983.
- [5] 李明非, 景士伟, 崔士举, 刘昊迪. 近代物理实验在原子物理教学中的贡献 [J]. 吉林省教育学院学报, 2019, 35(5): 83-86.
- [6] 靳奉涛, 高城, 王小伟, 戴佳钰. 原子物理学的课程思政研究与实践 [J]. 大学物理, 2024, 43(9): 54-62.
- [7] 褚圣麟. 原子物理学 (第二版) [M]. 北京: 高等教育出版社, 2022.
- [8] 周公度, 段连运. 结构化学 (第五版) [M]. 北京: 北京大学出版社, 2017.
- [9] 张晓娟, 郑维民. 原子物理学课程教学改革初探 [J]. 甘肃高师学报, 2014, 19(2): 89-91.
- [10] 张玉青, 付响云, 谢素霞, 彭朝晖. 原子物理学教学内容和教学方法的改革探究 [J]. 当代教育理论与实践, 2017, 9(9): 55-58.