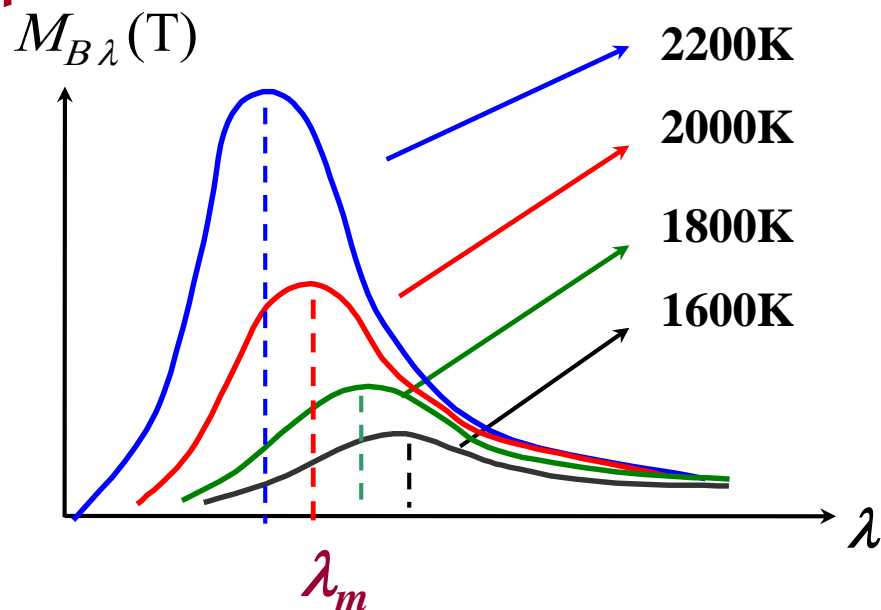


一、普朗克能量量子假说、爱因斯坦光量子假说

(一) 黑体辐射的实验定律



1、斯特藩-玻耳兹曼定律 Stefan – Boltzmann Law

$$M(T) = \sigma T^4$$

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$$

2、维恩位移定律 Wien Displacement Law

$$T \lambda_m = b$$

$$b = 2.897756 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$$

一、普朗克能量量子假说、爱因斯坦光量子假说

(二) 普朗克能量量子假说

辐射黑体中分子和原子的振动可视为线性谐振子，这些线性谐振子可以发射和吸收辐射能。这些谐振子只能处于某些分立的状态，在这些状态下，谐振子的能量不能取任意值，只能是某一最小能量 ε 的整数倍

$$\varepsilon, 2\varepsilon, 3\varepsilon, 4\varepsilon, \cdots, n\varepsilon, \cdots$$

n 为整数，称为量子数

对频率为 ν 的谐振子，
最小能量(能量量子) ε 为：

$$\varepsilon = h\nu$$

一、普朗克能量量子假说、爱因斯坦光量子假说

(三) 爱因斯坦光量子假说

- 1、一束光是一束以光速 C 运动的粒子流，
这些粒子称为光量子（光子） Photon

对于频率为 ν 的单色光，每个光子的能量：

$$\varepsilon = h\nu$$

2、爱因斯坦光电效应方程

当频率为 ν 光照射金属时，一个电子整体只吸收一个光子

根据能量守恒：

$$h\nu = \frac{1}{2}mv_m^2 + W$$

W ：逸出功

红限频率：

$$\nu_0 = \frac{W}{h}$$

遏止(截止)
电势差 U_0 ：

$$E_{k\max} = \frac{1}{2}mv_m^2 = eU_0$$

一、普朗克能量量子假说、爱因斯坦光量子假说

3、光的波粒二象性

1) 光子的能量、质量与动量

光子静止质量: $m_0 = 0$

光子的动量:

$$p = m_{\varphi} c = \frac{h\nu}{c^2} c = \frac{h\nu}{c}$$

光子的能量:

$$\varepsilon = h\nu$$

$$\varepsilon = m_{\varphi} c^2$$

$$m_{\varphi} = \frac{h\nu}{c^2}$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

$$\vec{p} = \frac{h}{\lambda} \vec{e}_n$$

2) 光具有“波粒二象性”

A) 在有些情况(干涉、衍射、偏振等)下, 光显示出波动性

B) 在另一些情况下(热辐射、光电效应等), 显示出粒子性

一、普朗克能量量子假说、爱因斯坦光量子假说

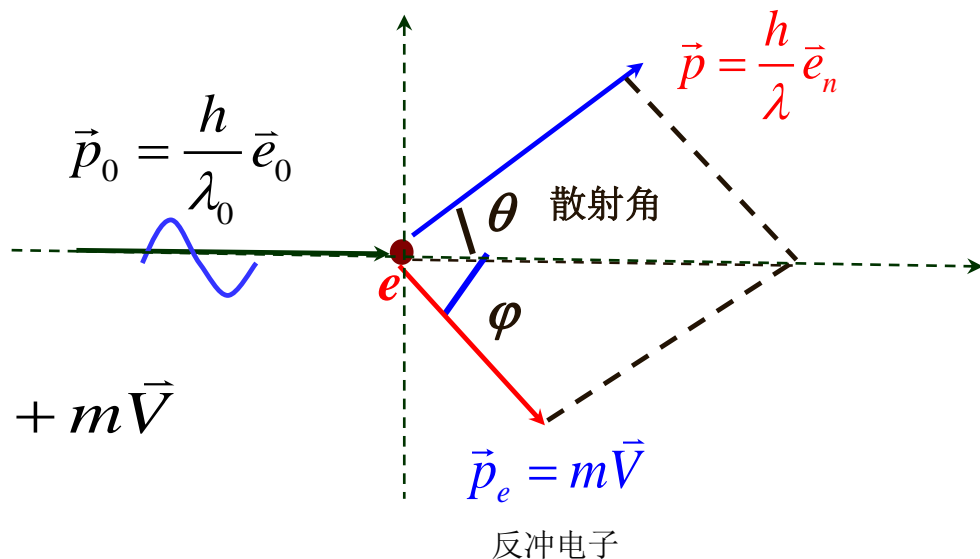
(四) 康普顿效应

碰撞过程中能量守恒

$$h\nu_0 + m_0c^2 = h\nu + mc^2$$

碰撞过程中动量守恒

$$\vec{p}_0 = \vec{p} + \vec{p}_e \Rightarrow \frac{h}{\lambda_0} \vec{e}_0 = \frac{h}{\lambda} \vec{e}_n + m\vec{V}$$



散射使波长的偏移量为:

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0c} (1 - \cos\theta)$$

$$\Delta\lambda = \lambda_c (1 - \cos\theta)$$

电子的康普顿波长: $\lambda_c = \frac{h}{m_0c} \approx 2.43 \times 10^{-12} \text{ m} = 0.00243 \text{ nm}$

二、氢原子的玻尔理论

玻尔的氢原子理论的三个重要假设

1)定态假设; 2)角动量量子化条件假设; 3)频率条件假设

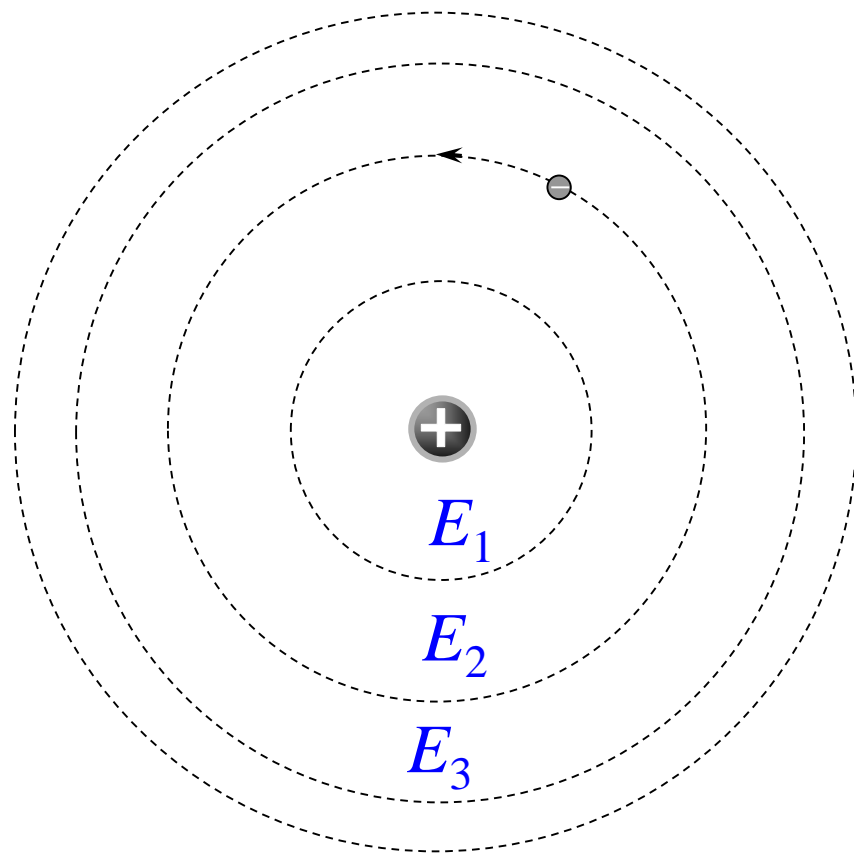
● 定态假设

原子中的电子只能在一些半径不连续的轨道上作圆周运动。

在这些轨道上运动的电子不辐射（或吸收）能量而处于稳定状态，称为**定态**。

相应的轨道称为**定态轨道**
与定态相应的能量（**能级**）
分别为： $E_1, E_2, E_3 \cdots$

$$E_1 < E_2 < E_3 < \cdots$$



二、氢原子的玻尔理论

玻尔的氢原子理论的三个重要假设

1)定态假设; 2)角动量量子化条件假设; 3)频率条件假设

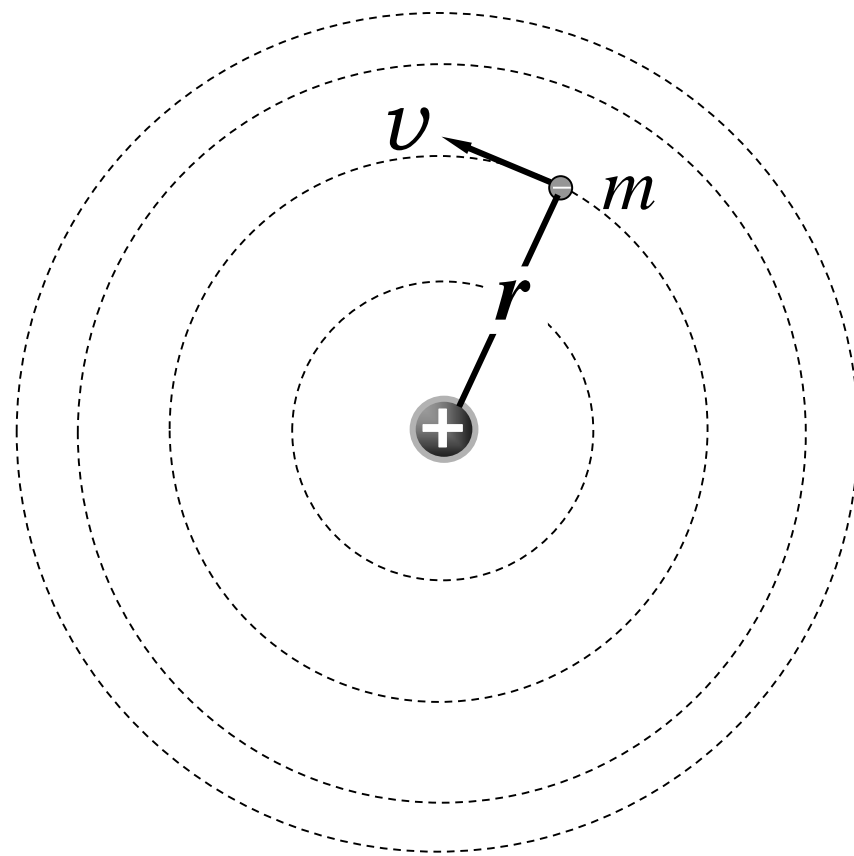
● 角动量量子化条件假设

在定态轨道上运动的电子，其**角动量**只能取 $h / (2\pi)$ 的整数倍，即

$$L = mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

称为 **角动量量子化条件**

$n = 1, 2, 3, \dots$ 为**主量子数**



二、氢原子的玻尔理论

玻尔的氢原子理论的三个重要假设

1)定态假设； 2)角动量量子化条件假设； 3)频率条件假设

● 频率条件假设

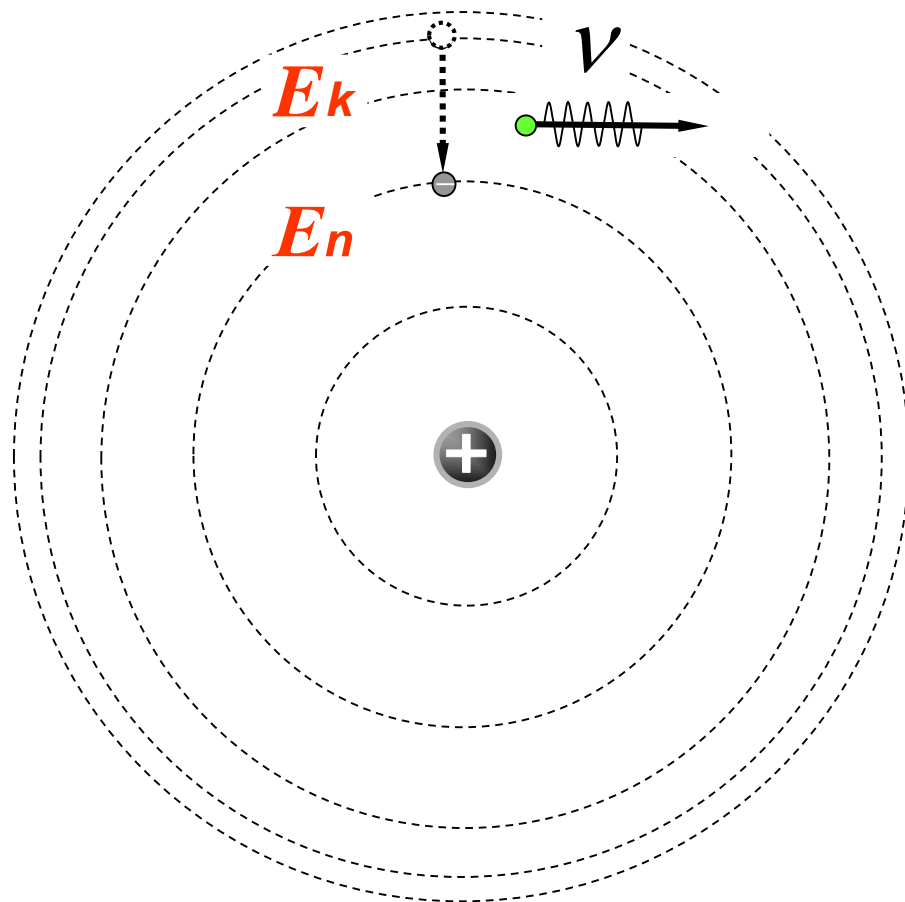
电子从某一定态向另一定态跃迁时将发射（或吸收）光子。

若初态和终态的能量分别为 E_k 和 E_n

则发射或吸收光子的频率为：

$$\nu_{kn} = \frac{|E_n - E_k|}{h}$$

称为 玻尔的频率条件



二、氢原子的玻尔理论

氢原子能级：

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

量子数： $n = 1, 2, 3, \dots$

1) **基态能量**： $n = 1$, $E_1 = -13.6 \text{ eV}$

此时能量最低，原子最稳定

2) **激发态**： $n > 1$

第一激发态： $n = 2$ ；第二激发态： $n = 3$ ；

3) **电离状态**： $n \rightarrow \infty$, $r_n \rightarrow \infty$, $E_n \rightarrow 0$

把电子从氢原子**基态**轨道移至无限远处($n \rightarrow \infty$, $E_\infty = 0$)
所需要的最少能量值，即**电离能** (Ionization Energy)。

$$E_{\text{电离能}} = 13.6 \text{ eV}$$

三、德布罗意假设

(一) 德布罗意假设:

不仅光具有波粒二象性,一切实物粒子(电子、原子、分子等)也都具有波粒二象性;具有确定动量 \boldsymbol{P} 和确定能量 E 的实物粒子相当于频率为 ν 和波长为 λ 的波,满足:

这种和实物粒子相联系的波称为德布罗意波或物质波。

$$E = mc^2 = h\nu$$

$$p = mv = \frac{h}{\lambda}$$

(二) 德布罗意波长

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m v} = \frac{h}{m_0 v} \sqrt{1 - \beta^2}$$

如果 $v \ll c$, 则:

$$\lambda = \frac{h}{m_0 v}$$

四、不确定性关系

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\text{或, } \Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$$

◆对于微观粒子不能同时用确定的位置和确定的动量来描述。

----- 微观粒子的“波粒二象”性的具体体现

五、波函数、薛定谔方程

微观粒子的状态可以用波函数来描写，而波函数随时间的演化，遵从薛定谔方程。

波函数：

1、波函数统计解释

t 时刻粒子出现在空间某点 \mathbf{r} 附近体积元 dV 中的概率，与波函数模的平方及 dV 成正比。

概率密度：

$$w = \frac{dW}{dV} = |\Psi(\bar{\mathbf{r}}, t)|^2 = \Psi(\bar{\mathbf{r}}, t)\Psi^*(\bar{\mathbf{r}}, t)$$

单位体积内粒子出现的概率

$$w = \frac{dW}{dx} = |\Psi(x, t)|^2 = \Psi(x, t)\Psi^*(x, t)$$

五、波函数、薛定谔方程

2、波函数满足的条件

一粒子在整个空间出现的**总概率等于 1**，即：

$$\iiint |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

波函数归一化条件

波函数满足的条件：单值、连续、有限、归一

其中，波函数满足的标准化条件：单值、连续、有限

对于一维空间 (x 轴) :

概率密度:

$$w = |\Psi(x, t)|^2 = \Psi(x, t)\Psi^*(x, t)$$

波函数归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

粒子出现在 $x \sim x + dx$ 区间内概率:

$$dW = |\Psi(x, t)|^2 dx$$

粒子出现在 $x_1 \sim x_2$ 区间内概率:

$$W = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx$$

粒子出现概率极大、极小的位置:

$$\text{令 } \frac{dw}{dx} = \frac{d|\Psi|^2}{dx} = 0, \text{ 解出极值点: } x = x_m$$

六、氢原子的量子理论、原子的壳层结构

(一) 量子化条件和量子数

1、能量量子化和主量子数

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad n: \text{主量子数}$$

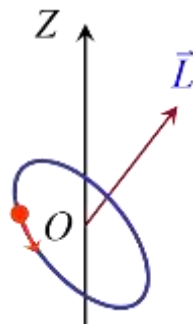
$$E_1 = -13.6\text{eV}$$

2、角动量量子化和角量子数

电子绕核运动的(轨道)角动量大小可能值:

$$L = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi} = \sqrt{l(l+1)} \hbar, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

l : (轨道)角(副)量子数



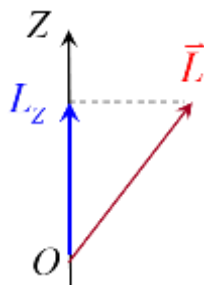
3、角动量空间量子化和磁量子数

$$L_z = m_l \hbar, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

(表征轨道角动量的空间取向)

m_l : (轨道)磁量子数,

共有 $(2l+1)$ 个可能取值



六、氢原子的量子理论、原子的壳层结构

(一) 量子化条件和量子数

(4) 电子的自旋

电子自旋角动量大小

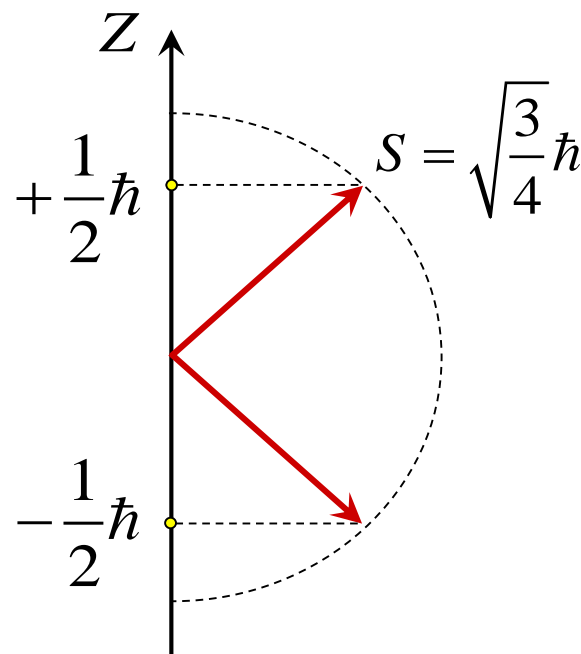
$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \quad s = \frac{1}{2}$$

s : 自旋角量子数

电子自旋角动量在 z 轴的分量

$$S_z = m_s \hbar, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

自旋磁量子数: m_s



六、氢原子的量子理论、原子的壳层结构

(二) 原子的壳层结构

1、电子状态由四个量子数(n 、 l 、 m_l 、 m_s)决定

1) 主量子数 n , $n = 1, 2, 3, \dots$

大体上决定原子中的电子的能量

2) 轨道角量子数 l , $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$

决定电子的轨道角动量, 对能量也有影响

3) 轨道磁量子数 m_l , $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

决定轨道角动量在外磁场方向上的分量

4) 自旋磁量子数 m_s , $m_s = \pm 1/2$

决定电子自旋角动量在外磁场方向上的分量

六、氢原子的量子理论、原子的壳层结构

(二) 原子的壳层结构

2、原子的壳层结构

主量子数 n 相同的电子属于同一壳层

壳层 $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$

用 K, L, M, N, O, P, \dots 表示

同一壳层中(n 相同), l 相同的电子组成同一分壳层

分壳层 $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$

用 s, p, d, f, \dots 表示

用 n, l 标记——原子组态,

若有 x 个电子处于 $n l$ 态, 记 $n l^x$

六、氢原子的量子理论、原子的壳层结构

(二) 原子的壳层结构

3、原子的壳层结构中电子的填充原则

1) 泡利不相容原理

一个多电子原子系统中，不可能有两个或两个以上的电子具有相同的状态，即不能有两个或两个以上的电子具有相同的 (n, l, m_l, m_s)

(1) 主量子数为 n 的壳层中最多能容纳电子数 Z_n 为：

$$\begin{aligned} n & \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ m_l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \\ m_s &= \pm \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$Z_n = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$

(2) 角量子数为 l 的支壳层中最多能容纳电子数为：

$$2(2l+1)$$

2) 能量最小原理

基态原子中电子先填满能量小的壳层。

原子处于未激发的正常状态时，在不违背泡利不相容原理的条件下，每个电子都趋向占据可能的最低能级，使原子系统的总能量尽可能的低。