【大学物理（2）：量子物理复习（Chapter 17）】

Galaxies

1. **黑体辐射和普朗克的量子假设** 任何物体在任何情况下都能进行热辐射（热辐射和光辐射都是一定范围内的电磁波），各种物体的差别是热辐射的能量大小和能量按照波长的分布（能谱分布）不同，热辐射的能量的能谱是连续能谱，存在着一定的规律性。设温度为T，物体表面dS，在波长λ到$\lambda+d\lambda$的范围内，辐射出能量为$dE(T,\lambda)$，则称**单色辐出度**为

$$M(\lambda,T)=\frac{dE(T,\lambda)}{d\lambda dS}$$

其物理意义为单位时间内从物体单位面积上辐射出的波长在λ处单位波长范围内的能量。

考虑所有波长的辐射，则定义辐出度$M(T)$为

$$M(T)=\int_0^{+\infty}M(\lambda,T)d\lambda$$

其物理意义为单位时间内从物体单位面积上辐射出的总能量。

物体在热辐射的同时，也从周围物体吸收辐射能，单位时间内辐射到物体单位面积上λ到$\lambda+d\lambda$波长范围内的能量为dE_λ，被物体吸收的部分为dE'_λ，则定义单色吸收比

$$\alpha(\lambda,T)=\frac{dE'_\lambda}{dE_\lambda}$$

对于不同材料和不同物体，有基尔霍夫定律：

$$M(\lambda,T)=M_0(\lambda,T)\alpha(\lambda,T)$$

其中，$M_0(\lambda,T)$为普适函数，对于黑体$\alpha(\lambda,T)=1$。因此只需要找到黑体，确定出普适函数即可。

- **斯忒藩-玻尔兹曼定律**：黑体的辐出度与温度的四次方成正比

$$M_0(T)=\sigma T^4$$

  其中，σ为斯忒藩-玻尔兹曼常量，$\sigma=5.6704\times10^{-8}W\cdot m^{-2}\cdot K^{-4}$。

- **维恩定律**：维恩根据热力学理论指出，黑体单色辐出度的最大值对应的波长λ_m与温度 T 成反比。

$$\lambda_m T=b$$

  其中，b为维恩常量，$b=2.8978\times10^{-3}m\cdot K$。

- 维恩公式——红外灾难；瑞利-金斯公式——紫外灾难。普朗克结合了维恩公式和瑞利-金斯公式，在 1900 年的德国物理学会作报告时给出了普朗克公式，这也被称为量子力学的诞生日。

$$M_0(\lambda,T)=\frac{2\pi hc^2}{\lambda^5}\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1}$$

  和实验曲线在全波段吻合！要推导出这个结果，必须用到一个假设：物体发射或吸收的电磁辐射能量是不连续的，只能以能量子$\varepsilon=h\nu$为单位。其中，ν为电磁辐射的频率，$h=6.6261\times10^{-34}J\cdot s$为普朗克常数。电磁辐射的能量只能是不连续的、分立的，取值为ε的整数倍，即$E=n\varepsilon$（n 为正整数）。

2. 光的粒子性

   a) **光电效应**：用光照射阴极 K，则会产生光电流，且光电流与外加电压的关系如下右图所示，其中U_0称为遏制电压，即光电子恰好不能到达阳极时所加的反向电压值，于是有

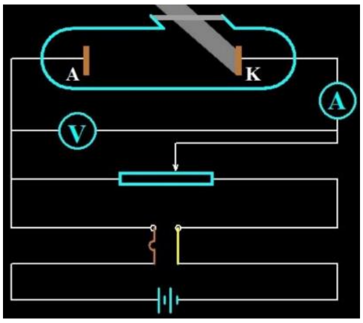
$$\frac{1}{2}mv_m^2=eU_0$$

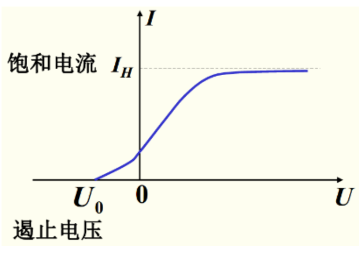
   遏止电压的大小与入射光强度无关，即光电子最大初始动能与入射光强度无关！但是阴极逸出的光电子数与入射光强度成正比，从而饱和电流和光强有关。

   遏止电压和入射光频率有关系，$U_0=k\nu-U_i$，因此$\nu_0=\frac{U_i}{k}$，$U_0=k\nu-k\nu_0$，

   其中$\nu\geq\nu_0$才会发生光电效应（最大初始动能$\frac{1}{2}mv_m^2=ek\nu-ek\nu_0\geq0$），

   ν_0被称为截止频率或频率的红限。



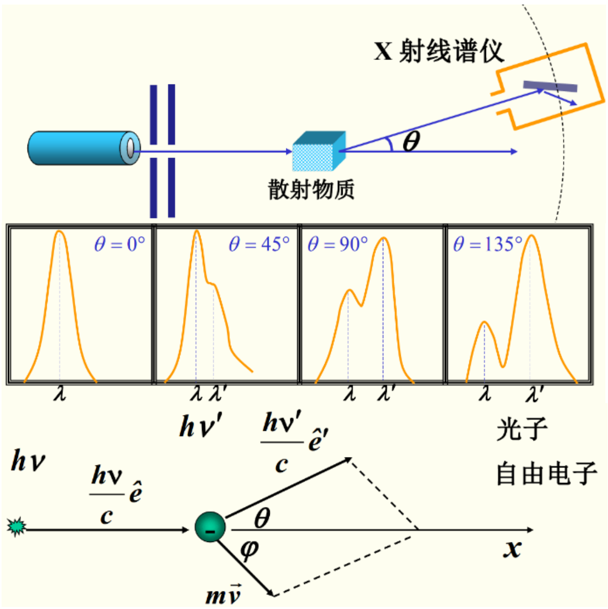


- 经典理论解释光电效应的困难：① 光电子的最大初始动能不随入射光强度增加而增大；② 存在频率的红限；③ 光电效应瞬时发生。
- 解释：光的能量子假说（光子假说），爱因斯坦光电方程：

$$\frac{1}{2}mv_m^2 = h\nu - W_0$$

其中，W_0为逸出功，于是$\nu_0 = \frac{W_0}{h}$为红限，$k = \frac{h}{e}$。

b) **康普顿散射**。实验装置如右图所示，实验结果：



- 散射光中除了和原波长λ相同的谱线外，还有波长$\lambda' > \lambda$的谱线；
- 波长该变量$\lambda' - \lambda$随着散射角θ的增加而增加，且散射光中波长为λ的谱线强度随着θ的增加而减小，波长为λ'的谱线强度随着θ的增加而增大。
- 对于不同的散射物质，在同一个散射角下，波长该变量$\lambda' - \lambda$都相同，与散射物质无关。
- 解释：光子和散射物质中的自由电子碰撞，有能量守恒和动量守恒：

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

$$\frac{h\nu}{c}\hat{e} = \frac{h\nu'}{c}\hat{e'} + m\vec{v}$$

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

联立解得

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{c}{\nu'} - \frac{c}{\nu} = \frac{2h}{m_0c}\sin^2\frac{\theta}{2} = 2\lambda_c\sin^2\frac{\theta}{2}$$

其中，康普顿波长$\lambda_c = \frac{h}{m_0c} = 2.43 \times 10^{-12}m$

3. **光的波粒二象性**

a) 波动性：光满足叠加原理，能产生干涉、衍射、偏振这些体现光波动性的现象；

b) 粒子性：光子作为整体行为的不可分割性，光子只能作为单个整体被吸收或发射，交换光子的能量或动量只能以上式给出的单元进行。

4. **玻尔的氢原子理论**

a) 氢原子光谱：

i. 巴耳末系（巴耳末公式）

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{4}{B}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

其中，$B = H_\infty = 364.56nm$；

ii. 里德伯公式

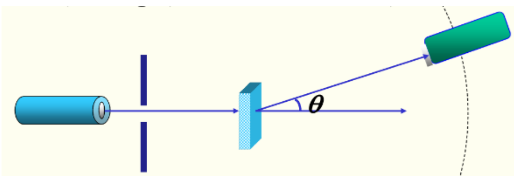
$$\tilde{\nu} = R_H\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) = T(m) - T(n) \quad (n > m)$$

其中，$T(n) = \frac{R_H}{n^2}$称光谱项，里德伯常量$R_H = \frac{4}{B} = 1.0968 \times 10^{-7}m^{-1}$；

谱线的波数可表示成两光谱项之差！

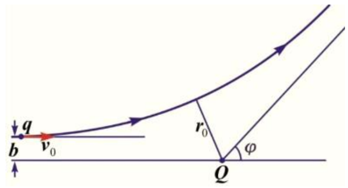
iii. 另外的，还有莱曼系$m = 1$，帕邢系$m = 3$，布拉开系$m = 4$，普丰德系$m = 5$。

b) **α粒子散射实验**：用α例子轰击极薄的金属箔，出现了散射角大于 90° 的粒子。根据角动量守恒、机械能守恒可以推出



$$\cot\frac{\theta}{2} = \frac{1}{k}\frac{mv_0^2}{qQ}b$$

其中，b为瞄准距离，测得最大散射角$b\approx 10^{-14}m$，于是卢瑟福提出**原子核式结构模型**：原子内部有一个带正电荷 Ze 原子核，线度不超过$10^{-15}m$，却集中了大部分原子质量，原子核外有 Z 个带负电 e 的电子，在核库仑力的作用下沿一定轨道运动。



c) 玻尔的氢原子理论：三个假定

i. **定态假定** 电子绕核运动时原子既不辐射出能量也不吸收能量，而是处于一定的能量状态（定态）。原子的定态能量不能连续取值，只能取某些分立值（能级）。

ii. **跃迁假定** 只有当原子从某一定态跃迁到另一定态时，原子的能量才发生变化，在此过程中原子辐射或吸收一个光子的能量，即

$$h\nu = E_n - E_m$$

iii. **角动量的量子化** 氢原子容许的定态是电子绕核圆周运动的角动量满足

$$rm_e v = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad (n = 1,2,3,\dots)$$

- 由角动量的量子化可知道电子绕核运动半径的量子化

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \Longrightarrow r = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e v^2} = \frac{\varepsilon_0 h^2 n^2}{\pi m_e e^2} = r_1 n^2 \quad (n = 1,2,3,\dots)$$

  其中，$r_1 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} = 0.529\times 10^{-10}m$玻尔半径；于是电子轨道半径为$r_1, 4r_1, 9r_1, \dots$。

- 同理，能量也能量子化，由于

$$E = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0 h^2 n^2} = \frac{E_1}{n^2} \quad (n = 1,2,3,\dots)$$

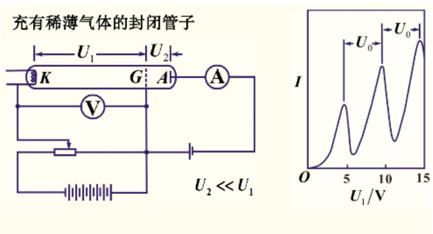
  其中，$E_1 = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0 h^2} = -13.6eV$；于是电子轨道能量为$E_1, \frac{E_1}{4}, \frac{E_1}{9}, \dots$，分别称作基态、第一激发态、第二激发态……

- 从基态跃迁到第一激发态所需要的能量称为氢原子的第一激发电势，$E_2 - E_1 = 10.2eV$。
- 氢原子从基态激发到E_∞时，相当于电子从第一轨道跃迁到无穷远处，脱离原子核的束缚，称为**电离**。使氢原子电离所需要的能量称电离能，即$E_\infty - E_1 = 13.6eV$，于是由于$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = E_n - E_m$可得

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) = \frac{1}{hc}(E_n - E_m) = \frac{m_e e^4}{4\pi(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^3 c}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

  计算出的R_H和实验测得非常接近！

- **弗兰克-赫兹实验** 证明了玻尔理论中的重要结论——原子中存在能量不连续的定态。电子只将固定的动能eU_0转移给原子！



5. **电子的波动性** 德布罗意波：粒子的频率ν和波长λ和动量p的关系为：

$$\nu = \frac{E}{h} \quad or \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

于是一个沿 x 轴正方向运动、能量为 E、动量为 p 的自由粒子对应 x 轴正方向传播的单色平面物质波。由于

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}, \qquad \vec{k} = \frac{2\pi}{\vec{\lambda}} = \frac{2\pi}{h}\vec{p} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

波函数：

$$\Psi = A\cos(\omega t - kx) = A\cos\frac{1}{\hbar}(Et - px) = A\cos(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})$$

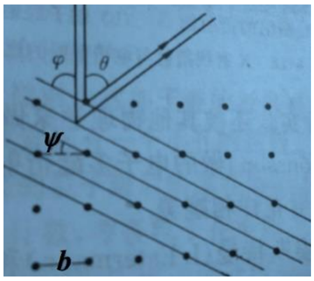
写成复数形式，

$$\Psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)}$$

德布罗意把氢原子的定态和驻波联系在一起（由于驻波具有稳定性），于是氢原子轨道长度必须为波长整数倍。

$$2\pi r = k\lambda = k\frac{h}{p} = k\frac{h}{m_0 v} \quad \Rightarrow \quad rm_0 v = k\hbar \ (k = 1,2,3,\dots)$$

和玻尔的假设相符。



- **电子衍射实验 （戴维孙-革末）**设d为晶面间距离（斜线的相邻点距离），φ为掠射角，有布拉格公式

$$2d\sin\varphi = n\lambda$$

由几何关系，$\varphi+\psi=\frac{\pi}{2},\varphi+\frac{\theta}{2}=\frac{\pi}{2},b=d\sin\psi$，于是

$$\lambda = 2d\sin\varphi = 2b\sin\psi\cos\psi = b\sin 2\psi = b\sin\theta = 0.165nm$$

又$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mK}}=\frac{h}{\sqrt{2meU}}$，测得加速电压$U=54V$，从而$\lambda=0.167nm$，二者吻合！

6. 【注】相对论能量关系：

$$E^2=c^2p^2+m_0^2c^4$$

7. 粒子具有波-粒二象性
   a) 粒子性：整体性、不可分割性，不是经典粒子，没有轨道概念。
   b) 波动性：可叠加性、干涉、衍射、具有频率和角波数，不是经典的波，不存在物理量的波动。
8. **波函数的统计解释** 物质波（德布罗意波）是一种概率波，其中$\psi(\vec{r},t)$为概率幅，$|\psi(\vec{r},t)|^2=\psi(\vec{r},t)\psi^*(\vec{r},t)$为概率密度，即在 t 时刻，$\vec{r}$附近单位体积内找到粒子的概率，$|\psi(\vec{r},t)|dV$为 t 时刻粒子出现在 dV 体积元内的概率。**一维情况下，**dV用dx代替即可。

- **自由粒子的波函数** $\psi(\vec{r},t)=Ae^{\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})},|\psi(\vec{r},t)|^2=A^2$。
- **波函数的基本条件：**①标准条件：单值、连续、有限；②归一化条件：

$$\int_\Omega |\psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$$

9. **不确定关系** 微观粒子具有波动性，$p=\frac{h}{\lambda},E=h\nu$，因此波长$\lambda$不可能是坐标的函数，即动量 p 不可能由 x 决定，不能同时确定粒子的坐标和动量，只能给出一个大概的确定范围。

海森堡不确定度关系（解题用这个关系）

$$\Delta x\Delta p_x \ge h$$

海森堡不确定度关系（精确）

$$\Delta x\Delta p_x \ge \frac{\bar{h}}{2}=\frac{h}{4\pi}$$

其中，$\Delta x=\sqrt{<(x-<x>)^2>},\Delta p_x=\sqrt{<(p-<p>)^2>}$

从而，如果粒子具有完全确定的动量，则它的空间位置就完全不确定。

【注】不确定度关系不是由实验误差引起的！

能级宽度和平均寿命的不确定度关系 （解题用）设体系处于某能量状态的平均寿命为Δt，能级宽度ΔE，则

$$\Delta E\Delta t \ge h$$

能级宽度和平均寿命的不确定度关系（精确）

$$\Delta E\Delta t \ge \frac{\hbar}{2}$$

因此，能级有一定的宽度，谱线也有一定的宽度，称为谱线的自然宽度。

- 用不确定度关系估算氦原子基态能量

$$E=\frac{p^2}{2m}+\frac{p^2}{2m}+\frac{(-e)2e}{4\pi\varepsilon_0 r}+\frac{(-e)2e}{4\pi\varepsilon_0 r}+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ee}^2}$$

设两电子排斥，趋于远离，则$r_{ee}\approx 2r$，从而

$$E(r,p)=2\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0(2r)}$$

电子平均动量为零，故$\Delta p=p$，由不确定度关系$\Delta p\Delta x\sim p\cdot r\sim h$，因此

$$E(r,p)=2\left(\frac{h^2}{2mr^2}-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0(2r)}=E(r)$$

基态能量即E_{min}，$\frac{dE}{dr}=0$，从而$r=\frac{16\pi\varepsilon_0 h^2}{7me^2},E=-\frac{49me^4}{16h^2(4\pi\varepsilon_0)^2}=-84eV$。

10. **薛定谔方程** 微观粒子的运动状态可以用波函数来描述。薛定谔提出了处于势场 V 中的非自由粒子的方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t)$$

其中，$\nabla^2=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$为拉普拉斯算符。如果势能函数不含时间，则$V(\vec{r},t)=V(\vec{r})$，此时粒子处于定态，定态波函数写成

$$\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

则 $|\Psi(\vec{r},t)|^2=|\psi(\vec{r})|^2$，于是

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$

即为定态薛定谔方程。

令能量算符$\widehat{H}$为

$$\widehat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})$$

则定态薛定谔方程为

$$\widehat{H}\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$

其解$\psi_n(\cdot)$为能量算符的本征函数，E_n为能量算符的本征值。

11. **一维定态问题**

a) **一维无限深势阱** 势能函数

$$V(x)=0\ (0<x<a);\qquad V(x)=\infty(o.w.)$$

在势阱外，$\psi(x)=0$，即在$x\le 0$或$x\ge a$处，粒子出现概率为 0，粒子的位置被束缚在阱内：束缚态。

$0<x<a$时，定态薛定谔方程为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$$

令$k=\frac{2mE}{\hbar^2}$，则解方程有$\psi(x)=A\sin(kx+\delta)$，由于波函数连续，故$\psi(0)=\psi(a)=0$，于是$\delta=0$，且

$$ka=n\pi\ (n=1,2,\dots)$$

即$k=\frac{n\pi}{a}$，又由于$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$，即$E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}(n=1,2,3,\dots)$ 即能量是分立的，且有归一化条件有

$$A=\sqrt{\frac{2}{a}}$$

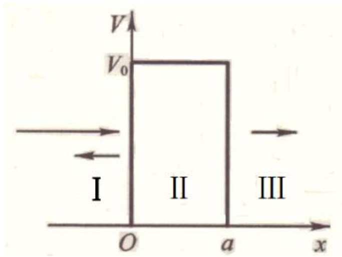
从而$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}$。由于$E_1\neq 0$，粒子具有零点能。

b) **势垒贯穿（隧道效应）** 势能函数

$$V(x)=V_0\ (0<x<a);\qquad V(x)=0\ (o.w.)$$

能量为 E 的粒子沿 x 轴正方向射向势垒，$0<E<V_0$，从而

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$



I 区域：$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x)=E\psi_I(x)$

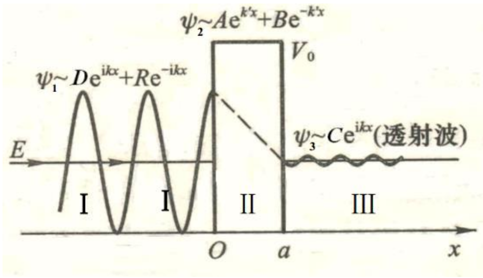
II 区域：$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V_0\right]\psi_{II}(x)=E\psi_{II}(x)$

III 区域：$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{III}(x)=E\psi_{III}(x)$

解方程：$\psi_I(x)=De^{ikx}+Re^{-ikx},\psi_{II}(x)=Ae^{k'x}+Be^{-k'x},\psi_{III}(x)=Ce^{ikx}-C'e^{-ikx}$。

III 区域介质均匀，不存在从右向左传播的波，$C'=0$，根据**连续性条件、且一阶导数连续**可以得到几个方程，解方程可知：

从左边入射的粒子，当能量$E < V_0$时，可以有一定的概率穿透势垒进入势垒的另一边去，这称为势垒贯穿，也称为隧道效应。



- 粒子从区域 I 经过区域 II 到达区域 III 的穿透概率：

$$T = \frac{|C|^2}{|D|^2}$$

如果粒子能量比势垒高度小很多，同时势垒宽度不太小，有

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

势垒宽度a出现在指数上，因此穿透概率 T 对于势垒宽度 a 十分敏感，越宽穿透概率越低。

- 应用：扫描隧道显微镜（STM）。

c) **一维谐振子** 势能函数

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

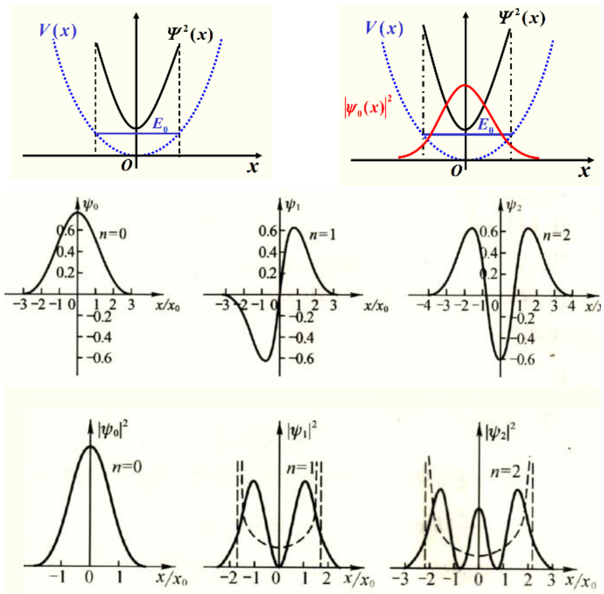
能量本征值：$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu$ （$n = 0,1,2,\dots$），能量量子化。

本征函数：

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}, \qquad \alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}$$

其中，$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}$为厄米多项式。

能量本征值之间的差值：$\Delta E = h\nu$，说明能量间隔$h\nu$，正是普朗克解释黑体辐射时引入的假设！



- 经典谐振子的概率密度分布：中间最小（由于动能最大，导致时间停留最短，概率密度最小），两边最大（由于动能为 0，停留时间最长，概率密度最大）。
- 量子谐振子的概率密度分布：能量为E_0的微观粒子在经典禁区外的概率密度非 0，用经典理论无法解释！
  - $n \to +\infty$时候，量子谐振子概率密度分布趋近于经典概率密度分布；
  - n个谐振子的概率密度分布有$(n+1)$个峰；
  - n为奇数的时候，ψ_n关于原点对称是奇函数，原点概率密度ψ_n^2为 0，奇宇称态；n为偶数的时候，ψ_n关于ψ轴对称是偶函数，原点概率密度ψ_n^2为峰，偶宇称态。故**谐振子的定态波函数有确定的宇称！**

12. 算符的引进

a) 能量算符$\hat{E} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$；

b) 动量算符$\hat{p} = -i\hbar\nabla$；

c) 角动量算符$\hat{L} = \vec{r} \times (-i\hbar\nabla)$。

d) 算符的本征值为算符对应力学量的一个可能取值，对应的本征函数为波函数，如果属于同一本征值的本征态不止一个（本征函数不止一个），而是f_n个，则称这个本征值是f_n重简并的。f_n称简并度。

13. **氢原子和角动量** 氢原子的电子在原子核的库伦电场中运动，势能

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

在球坐标系下解定态薛定谔方程，有

$$\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$$

其中，$R_{n,l}(\cdot)$为拉盖尔函数，$Y_{l,m_l}(\cdot)$为球谐函数。

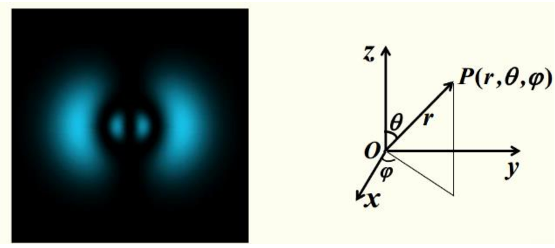
$n=1,2,3,\ldots$为主量子数；$l=0,1,2,\ldots(n-1)$为角量子数；$m_l=0,\pm1,\pm2,\ldots\pm l$为轨道磁量子数。

$$Y_{0,0}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},\quad Y_{1,0}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\,,\quad Y_{1,1}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi},\quad Y_{1,-1}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\varphi}$$

$$R_{1,0}(r)=\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}2e^{-\frac{r}{a_0}},\quad R_{2,0}(r)=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}},\quad R_{2,1}(r)=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0\sqrt{3}}e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

这个波函数$\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)=R_{n,l}(r)Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$是归一化的，即

$$\int_\infty \left|\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)\right|^2=1$$



- $\left|\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)\right|^2dV=\left|\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)\right|^2r^2\sin\theta\, drd\theta d\varphi$为在$(r,\theta,\varphi)$附近体积元内发现量子态为$(n,l,m_l)$电子的概率；
- $\left|R_{n,l}(r)\right|^2r^2dr$为在$(r,r+dr)$壳层发现电子的概率；
- $\left|Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)\right|^2\sin\theta\, d\theta d\varphi$ 为在(θ,φ)附近的立体角$d\Omega=\sin\theta\, d\theta d\varphi$内发现电子的概率。

在各种量子态中，概率分布和φ没有关系，因此氢原子的电子云是绕 z 轴旋转对称的！

- 氢原子的能量本征值：$E_n=-\frac{me^4}{8\varepsilon_0h^2n^2}$，和玻尔理论完全相同！
- 氢原子的轨道角动量：$L=\sqrt{l(l+1)}\hbar\ \left(l=0,1,\ldots(n-1)\right)$，$l$为角量子数，和玻尔的$L=n\hbar$有些差别！这也解释了玻尔的理论无法解释除氢原子外的其他现象。
- 电子轨道角动量空间取向的量子化：$L_z=m_l\hbar\ (m_l=0,\pm1,\ldots,\pm l)$，其中$m_l$为轨道磁量子数。指角动量在空间的一个确定方向上的投影式量子化的。
  - 证实：塞曼效应。磁场中一条原子光谱分裂为三条谱线（根据m_l取向看是否受到磁场 B 的影响（整项、反向、不影响，故有三条谱线））。
- 氢原子能级的简并度：$f_n=\sum_{i=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$。
- 电子自旋角动量$\vec{S}$，$S=\sqrt{s(s+1)}\hbar$，其中s为自旋量子数。在外磁场投影方向$s=\pm\frac{1}{2}$；自旋角动量（内禀角动量）无经典对应，纯粹是量子特性。
  - 现象：反常塞曼效应。弱磁场中光谱分裂为偶数条。

14. 多电子原子
    a) 主量子数$n=1,2,3,\ldots$；
    b) 角量子数$l=0,1,2,\ldots,(n-1)$；
    c) 轨道磁量子数$m_l=0,\pm1,\ldots,\pm l$；
    d) 自旋磁量子数$m_s=\pm\frac{1}{2}$；

- **泡利不相容原理** 不能存在两个及以上的原子含同样的(n,l,m_l,m_s)。
- **能量最小原理** 当原子处于稳定状态时，每个电子总是尽可能占据最低的能量状态。
- **原子的电子壳层结构** 主量子数相同的属于同一个主壳层（K,L,M,N,...），不同的角量子数l构成不同的支壳层（子壳层）(s,p,d,f,...)。同一子壳层上可容纳$2(2l+1)$个电子，同一主壳层上可容纳$2n^2$个电子。当一个原子中每个电子的量子数 n 和 l 被指定后，则称该原子有确定的**电子组态**。用并排写出 n 的数值和 l 的字母表示电子。能级排布一般按照 n 从小到大，l 从小到大，也有特殊情况。