### 氢原子基态的波函数

2014/11/24

预备知识： [波函数简介](#_波函数简介)

由于波函数的统计诠释，统计在量子力学中经常碰到，所以这里举一个例子让你熟悉一下统计的一些常见计算．

氢原子是唯一有解析解的物理实例，因为它结构简单，只有一个核外电子．由于核外电子质量又远小于原子核的质量，忽略核的运动，且不计万有引力．量子力学在氢原子中的应用可以说是量子力学最重要的成果了．

氢原子基态的波函数为 ，其中是量子理论中一个重要的常数，**波尔半径**．由于这是个球对称函数，所以氢原子的波函数通常在球坐标中表示，即表示成三个球坐标的函数．其模长平方同样表示粒子在某点出现的概率密度．由于氢原子基态的波函数是球对称的，所以只是*r*的函数．

1．**归一化**

概率密度必须归一化，也就是说，在所有地方找到电子的概率之和为必为1．所以可以用归一化来确定波函数前面的系数．把概率密度对整个空间体积分

．所以，

．

2．**位置的平均值**

根据[连续概率分布中平均值](#_连续概率分布的平均值(数学期望))(或数学期望)的定义，．积分显然为零，因为波函数关于中心呈球对称分布，各个方向的互相抵消了．所以如果对足够多个处于基态的氢原子测量电子的位置，并求平均位置(矢量)，一定会在原子核处．

3．**电子离原子核距离的平均值**

如果在上题中，求平均值的不是位置矢量，而是位置的大小，那么结果显然是大于零的．



注意这比波尔半径要大．

4．**电子最可能出现的位置**

一个位置的波函数模长平方越大，电子越有可能出现在这个位置．所以现在要求的是概率密度出现最大值的位置．

根据指数函数的性质，最大值，最大值位置为．

**5．电子与原子核最有可能的距离**

若定义径向概率密度为．要求最可能出现的半径，可以对其求导(见[导数与极值](#_导数与极值))．即．

即，解得．

这个重要结论说明，**波尔半径就是氢原子基态中电子与原子核最有可能的距离**．