Problem set 3

1. (a) $n=3$　$l=2$

(b). 节点数 $=n-1=2$.

角节点数 $=l=2$

径向节点数 $=n-l-1=0$

(c). $3\cos^2\theta-1=0$

即 $\cos^2\theta=\frac{1}{3}$, $\cos\theta=\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$

$\theta\approx54.74°$ 或 $\theta=125.26°$

2. (a). l 取 0 时, 共 2 种

l 取 1 时, m 有 3 种取值, 每个 m 对应 2 种 m_s 取值

共 $3\times2=6$ 种

∴ 一共有 $6+2=8$ 个

(b) m 可取 $-2, -1, 0, 1, 2$ 共 5 种

每个 m 对应 2 种 m_s 取值

一共有 $5\times2=10$ 个

(c). m_s 可取 $+\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$

∴ 一共有 2 个

(d). 一共有 1 个

3. (a). 4f

(b). 1s

(c). 不可能，主量子数 n 不可能为 0

(d). 不可能，角量子数 l 不能超过 $n-1$

(e). 不可能，角量子数 l 不能是负值

(f). 不可能，对于 $l=3$，m 范围为 $-3 \le m \le 3$，不可取 -4.

4. (a). 定态薛定谔方程.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi(\vec{r})-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$

球坐标下：$\psi(\vec{r})=R(r)Y(\theta,\varphi)$

$$\frac{d^2u}{dr^2}+\left[\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u=0$$

其中 $u(r)=rR(r)$，l 为角量子数

解之得能量本征值 $E_n=-\dfrac{Z^2 m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2}$

对氢原子：$Z=1$，$n=1$

$$E_1=-\frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}=-13.6\,eV$$

则 $I_H=E_\infty-E_1=13.6\,eV$

对于 1mol 氢原子

$$I_{H(mol)}=6.02\times10^{23}\times I_H=1312\,kJ$$

(b) 对 He^+ 离子 $Z=2$.

$$E_1 = -\frac{4m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} = -54.4\,eV$$

$$I_{He^+} = E_\infty - E_1 = 54.4\,eV$$

对于 1mol He^+

$$I_{He(mol)} = 6.02\times10^{23}\times I_{He^+} = 5248\,kJ$$