



结构化学习题参考答案



2025/3/26





第二章习题参考答案 (1)

已知类氢离子某一激发态的径向波函数 $R_{n,l}(r)$
及球谐函数 $Y_{l|m|}(\theta, \varphi)$ 分别为：

$$R_{n,l} = \frac{4}{81\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(6 \frac{Z r}{a_0} - \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} \right) e^{-Z r / 3a_0} \quad Y_{l,m} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

请回答下列问题：

- (1) 确定轨道名称；
- (2) 计算原子轨道能、势能 $\langle V \rangle$ 与动能 $\langle T \rangle$ ；
- (3) 计算轨道角动量 $|\vec{M}_l|$ 、轨道磁矩 $|\vec{u}_l|$
- (4) 列出计算电子离核平均距离的公式（不需要运算）



解：(1) $3p_z$ ($n=3$, $l=1$, $m=0$)

$$(2) E = -13.606 \frac{z^2}{n^2} = -13.606 \frac{z^2}{9} = -1.51z^2$$

$$\langle T \rangle = -E = 1.51z^2$$

误把z当成1

$$\langle V \rangle = 2E = -3.02z^2$$

注意±

T, V,
E关系

$$(3) |\vec{M}_l| = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{2}\hbar,$$

$$|\vec{\mu}_l| = \sqrt{l(l+1)}\mu_B = \sqrt{2}\mu_B$$

都是在根
号外的



(4)

$$\langle r \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{r} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau}$$

归一化的
波函数

$$\langle r \rangle = \int \Psi^* \hat{r} \Psi d\tau$$

$$\begin{aligned}\hat{r} &= r \\ d\tau &= r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi\end{aligned}$$

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Psi^* r \Psi r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

波函数为实函数

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Psi^2 r^3 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

错误写法：

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Psi r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$



另一种写法：

$$\begin{aligned}< r > &= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \Psi^2 r^3 \sin \theta dr d\theta d\varphi \\&= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} R^2 Y^2 r^3 \sin \theta dr d\theta d\varphi \\&= \int_0^{\infty} R^2 r^3 dr \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y^2 \sin \theta d\theta d\varphi \\&= \int_0^{\infty} R^2 r^3 dr\end{aligned}$$



$$\langle r \rangle = \frac{n^2 a_0}{z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\} \quad P41 - 式(2-59)$$

对 $3p_0$ ($3p_z$) 轨道：

$$\langle r \rangle = \frac{25a_0}{2z}$$

对H原子($z=1$)的 $1s$ 轨道：

电子距核的平均距离： $\langle r \rangle = 1.5a_0$

单选题 2分



已知 $\Psi = R \times Y = R \times \Theta \times \Phi$, 其中 R, Θ, Φ, Y 皆
已归一化, 则下列何式成立? ()

- A $\int_0^\pi \Theta^2 d\theta = 1$
- B $\int_0^\pi \Theta^2 \sin \theta d\theta = 1$
- C $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y^2 d\theta d\phi = 1$
- D $\int_0^\infty R^2 dr = 1$



结构化学

P42: 式2-60

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi =$$

$$\int_0^\infty R^2 r^2 dr \cdot \int_0^{2\pi} \Theta^2 \sin \theta d\theta \cdot \int_0^\pi \Phi^2 d\varphi = 1$$