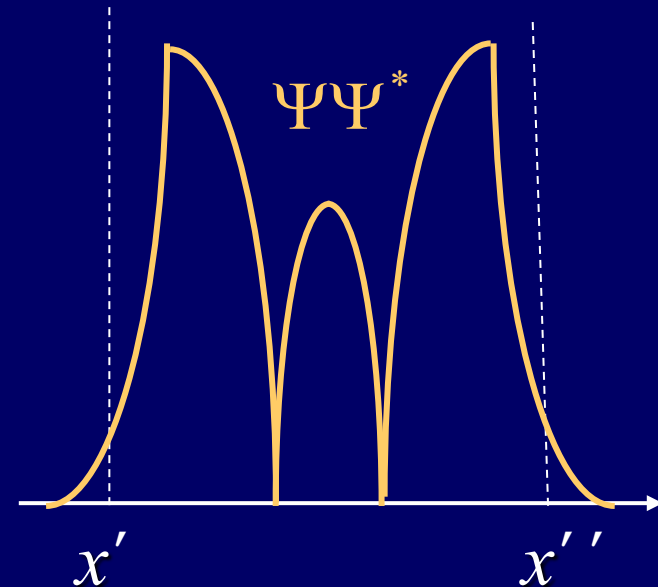
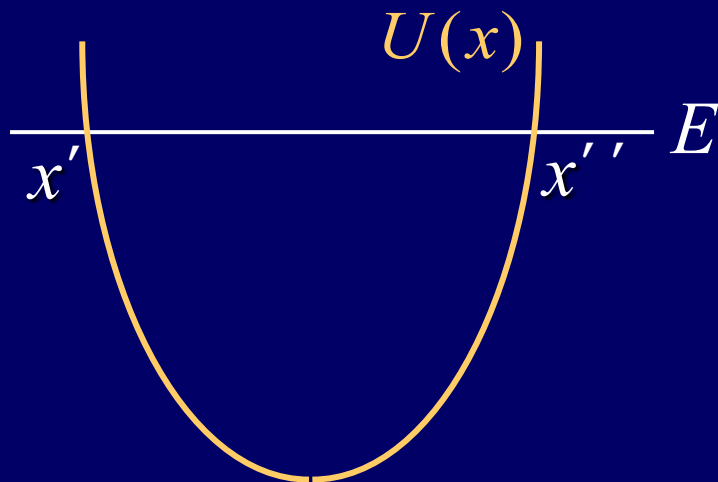


## 四. 一维谐振子

1. 势能函数 
$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$m$  — 振子质量,  $\omega$  — 固有频率,  $x$  — 位移

2. 定态薛定谔方程 
$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2)\Psi(x) = 0$$



## 3. 能量量子化

$$E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$



普朗克量子化假设

$$E_n = nh\nu$$

$$E_0 = 0$$

零点能

量子力学结果

$$E_n = (n + 1/2)h\nu$$

$$E_0 = h\nu/2$$

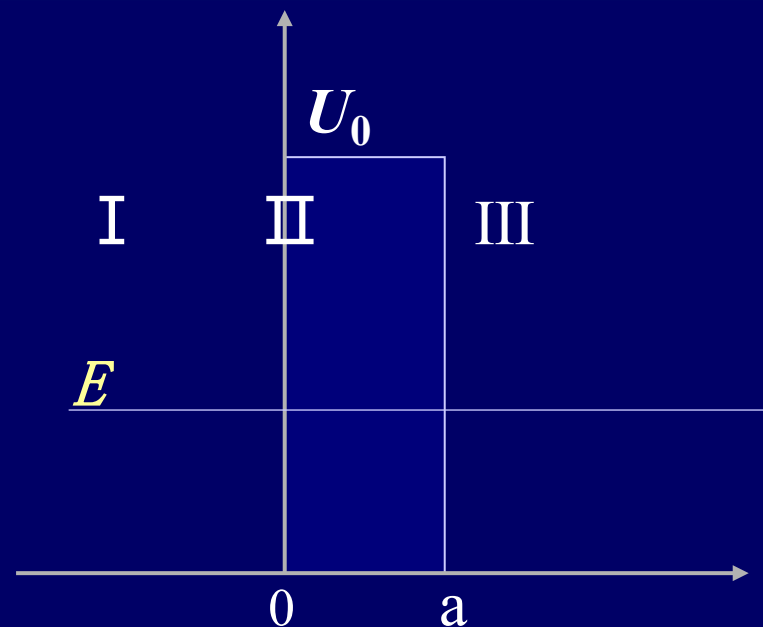
## 五. 隧道效应（势垒贯穿）

势垒

$$\text{I 区} \quad U(x) = 0 \quad x \leq 0$$

$$\text{II 区} \quad U(x) = U_0 \quad 0 \leq x \leq a$$

$$\text{III 区} \quad U(x) = 0 \quad x \geq a$$



定态薛定谔方程：

$$\text{I 区} \quad \frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2 \Psi_1(x) = 0$$

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\text{II 区} \quad \frac{d^2 \Psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2 \Psi_2(x) = 0$$

$$k_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$\text{III 区} \quad \frac{d^2 \Psi_3(x)}{dx^2} + k_1^2 \Psi_3(x) = 0$$

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

三个区域的波函数分别为

$$\text{I 区} \quad \Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

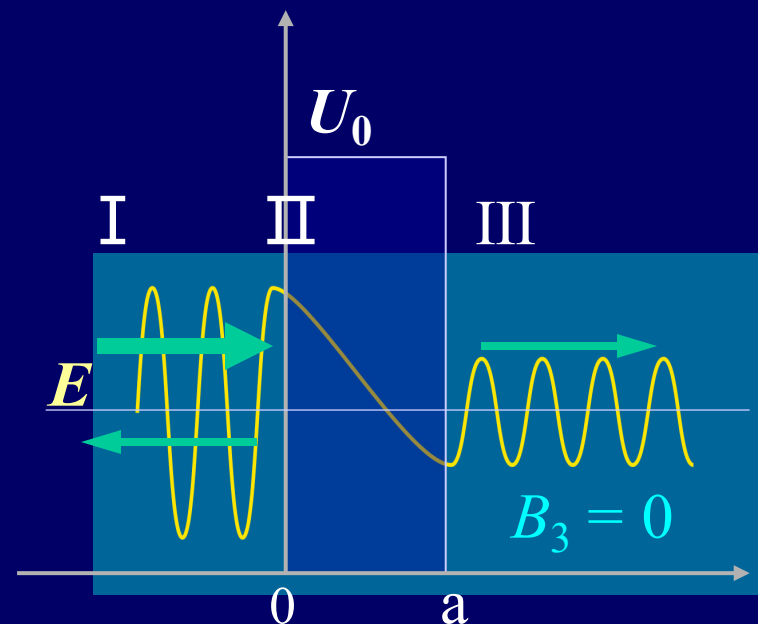
$$\text{II 区} \quad \Psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}$$

$$\text{III 区} \quad \Psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}$$

波函数在  $x=0$  ,  $x=a$  处连续

$$x=0 \text{ 处:} \quad \Psi_1(0) = \Psi_2(0)$$

$$x=a \text{ 处:} \quad \Psi_2(a) = \Psi_3(a)$$



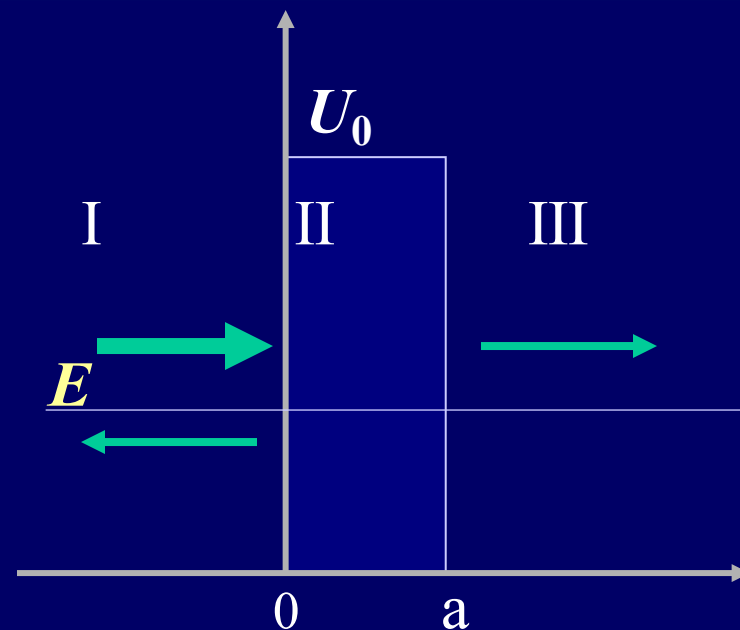
$$\left. \frac{d\Psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Psi_2}{dx} \right|_{x=0}$$

$$\left. \frac{d\Psi_2}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\Psi_3}{dx} \right|_{x=a}$$

得到4个方程, 求出常数  $A_1$ 、 $B_1$ 、 $A_2$ 、 $B_2$  和  $A_3$  间关系, 从而得到反射系数  $R = |B_1|^2 / |A_1|^2$  和透射系数  $T = |A_3|^2 / |A_1|^2$

$$T + R = 1$$

入射粒子一部分透射到达III区，  
另一部分被势垒反射回I区



### ★ 讨论

- (1)  $E > U_0$ ,  $R \neq 0$ , 即使粒子总能量大于势垒高度, 入射粒子并非全部透射进入 III 区, 仍有一定概率被反射回 I 区。
- (2)  $E < U_0$ ,  $T \neq 0$ , 虽然粒子总能量小于势垒高度, 入射粒子仍可能穿过势垒进入 III 区 — 隧道效应

(3) 透射系数 $T$ 随势垒宽度 $a$ 、粒子质量 $m$ 和能量差变化, 随着势垒的加宽、加高透射系数减小。

粒子类型	粒子能量	势垒高度	势垒宽度	透射系数
电子	1eV	2eV	$5 \times 10^{-10}\text{m}$	0.024
	1eV	2eV	$2 \times 10^{-10}\text{m}$	0.51
质子	1eV	2eV	$2 \times 10^{-10}\text{m}$	$3 \times 10^{-38}$

## 六. 氢原子

$$\left\{ \begin{array}{l} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \Psi = 0 \\ V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \end{array} \right.$$

球坐标的定态薛定谔方程

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) \\ + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0 \end{aligned}$$

## 1. 能量量子化

能量

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \left( \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \right) = -\frac{E_1}{n^2}$$

主量子数  $n = 1, 2, 3, \dots$ 

电子云

电子云密度  $\longleftrightarrow$  概率密度  $\psi_{nlm}^2(r, \theta, \varphi)$ 

$$r_1 = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

基态电子在这些地方  
出现的概率最大

非轨道运动



## 2. 角动量量子化

电子绕核转动的角动量  $\vec{L}$  的大小

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

角量子数  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

## 3. 角动量空间量子化

角动量  $\vec{L}$  的在外磁场方向  $Z$  的投影

$$L_z = m_l \hbar$$

磁量子数  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

例如  $l=2$  电子角动量的大小及空间取向？

$\vec{L}$  的大小

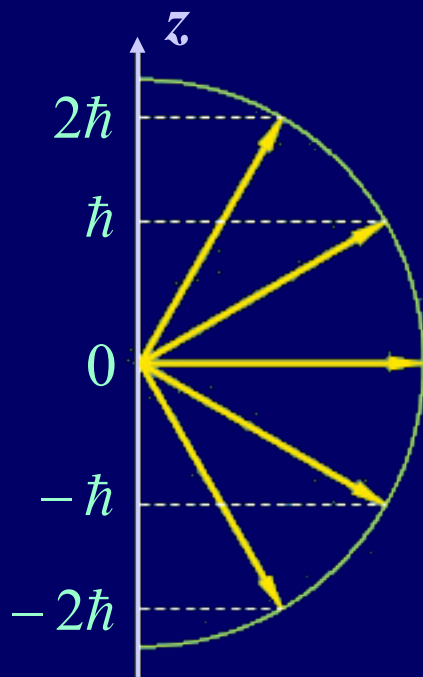
$$L = \sqrt{2(2+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$$

磁量子数

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2$$

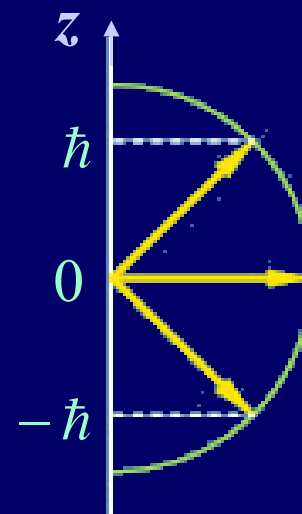
$\vec{L}$  在  $Z$  方向的投影

$$L_z = 2\hbar, \hbar, 0, -\hbar, -2\hbar$$



$$L = \sqrt{6}\hbar$$

$$l = 2$$



$$l = 1 \quad L = \sqrt{2}\hbar$$

# 4. 塞曼效应

## (1) 实验现象

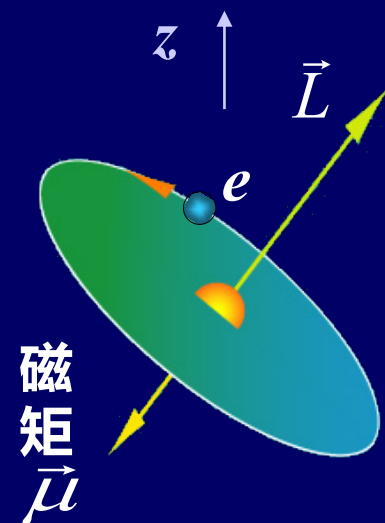
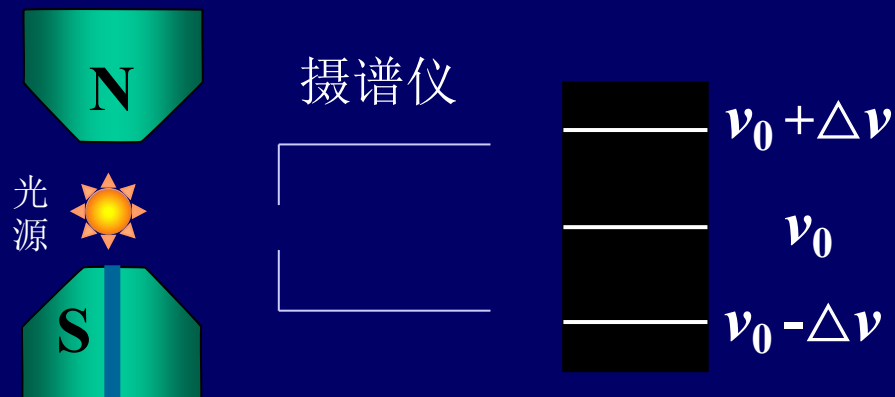
## (2) 解释

$$\left. \begin{aligned} \vec{\mu} &= -e \cdot \frac{\omega}{2\pi} \pi r^2 \vec{n} \\ \vec{L} &= m r \omega^2 \vec{n} \end{aligned} \right\}$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

$z$  轴（外磁场方向）投影

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e} L_z = -\frac{e\hbar}{2m_e} m_l = -m_l \mu_B$$



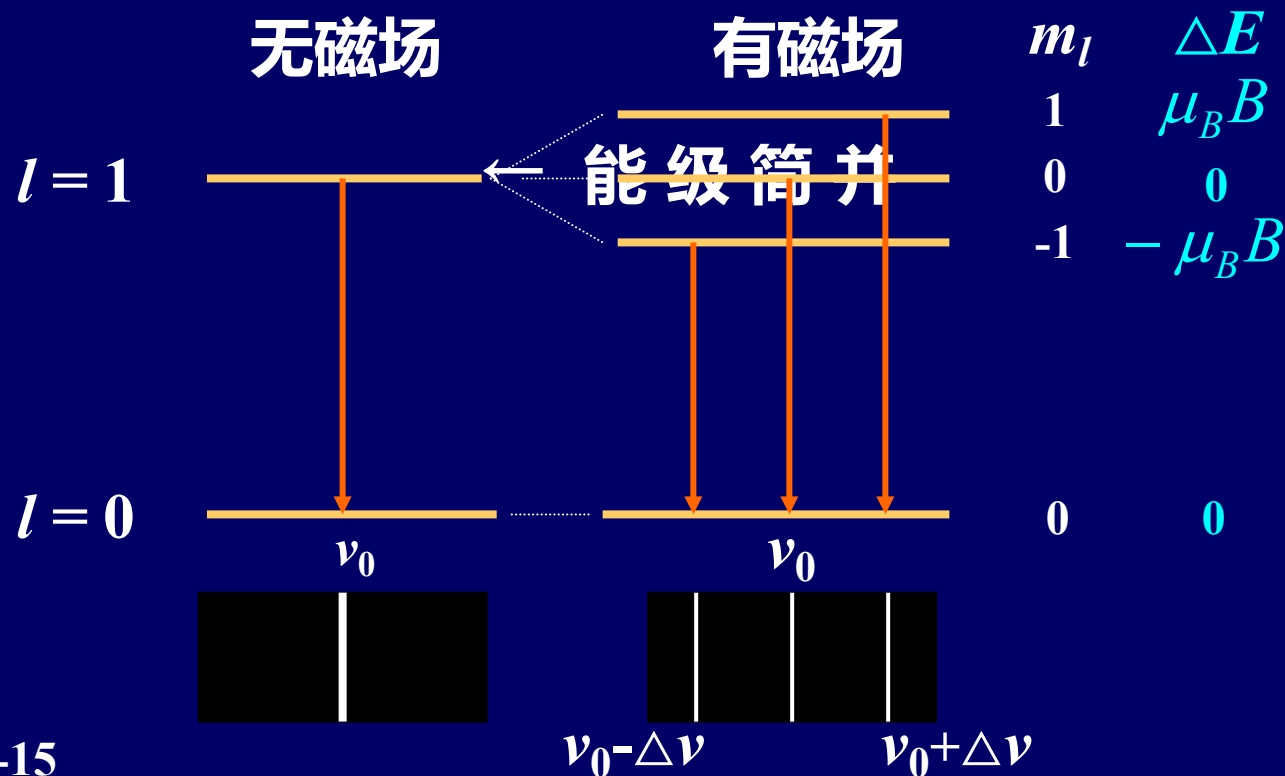
$\mu_B$  — 玻尔磁子

- 磁场作用下的原子附加能量

$$\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B = m_l \mu_B B$$

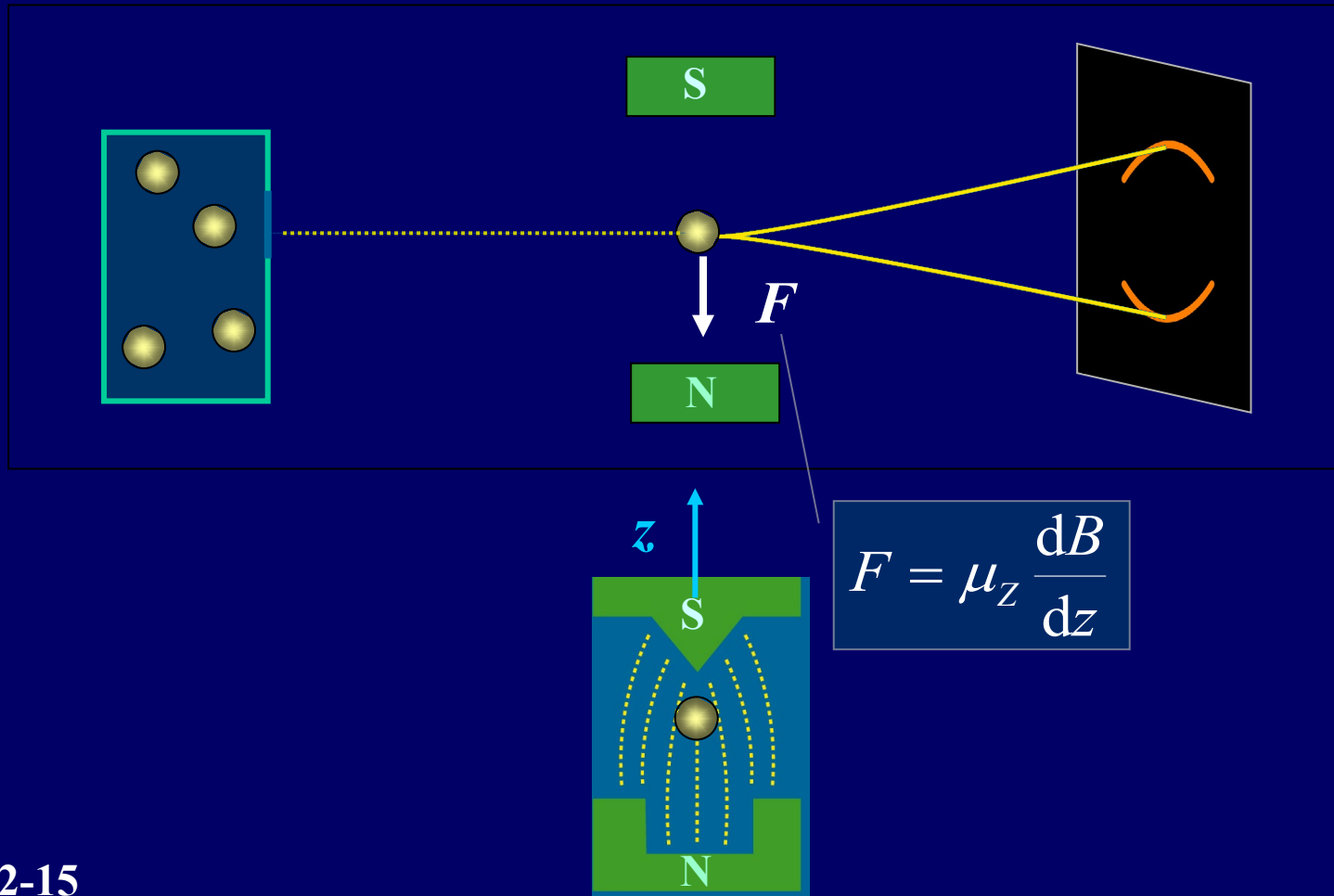
其中  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

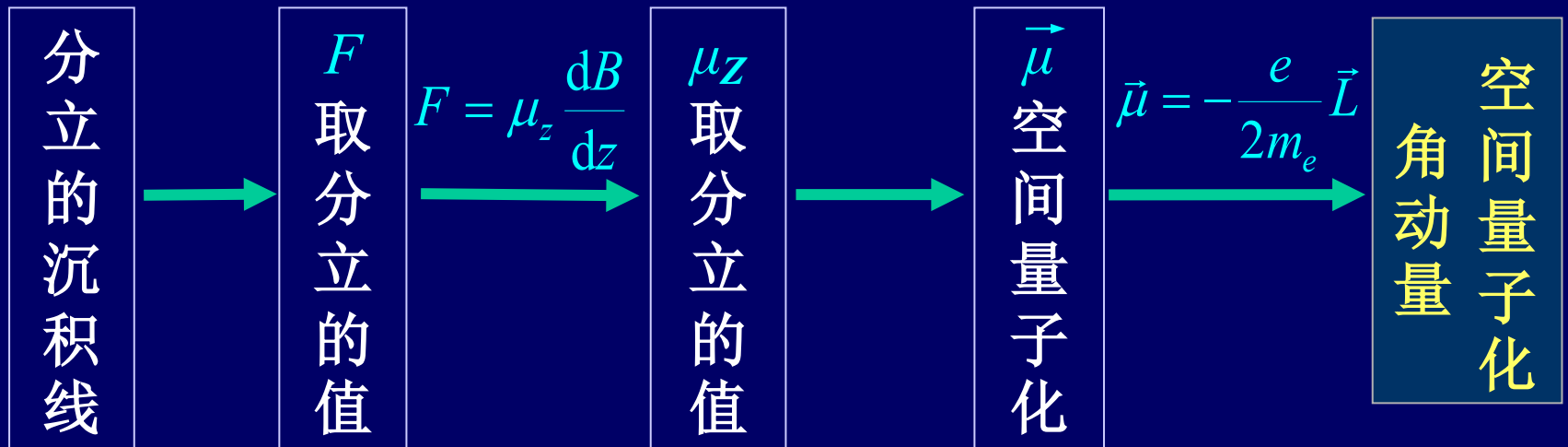
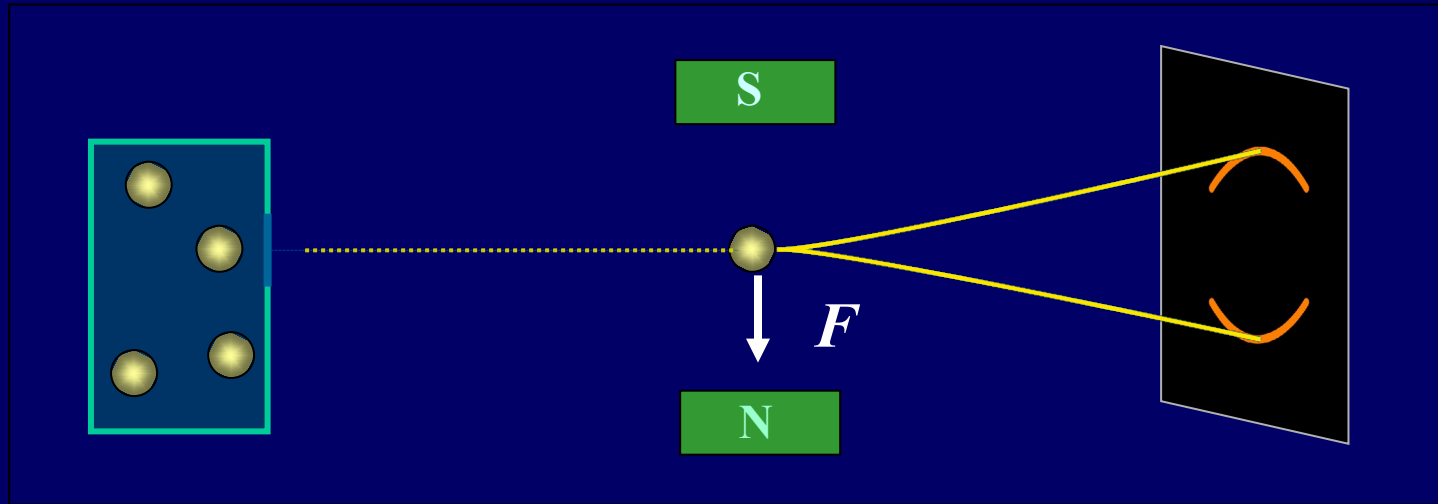
- 能级分裂

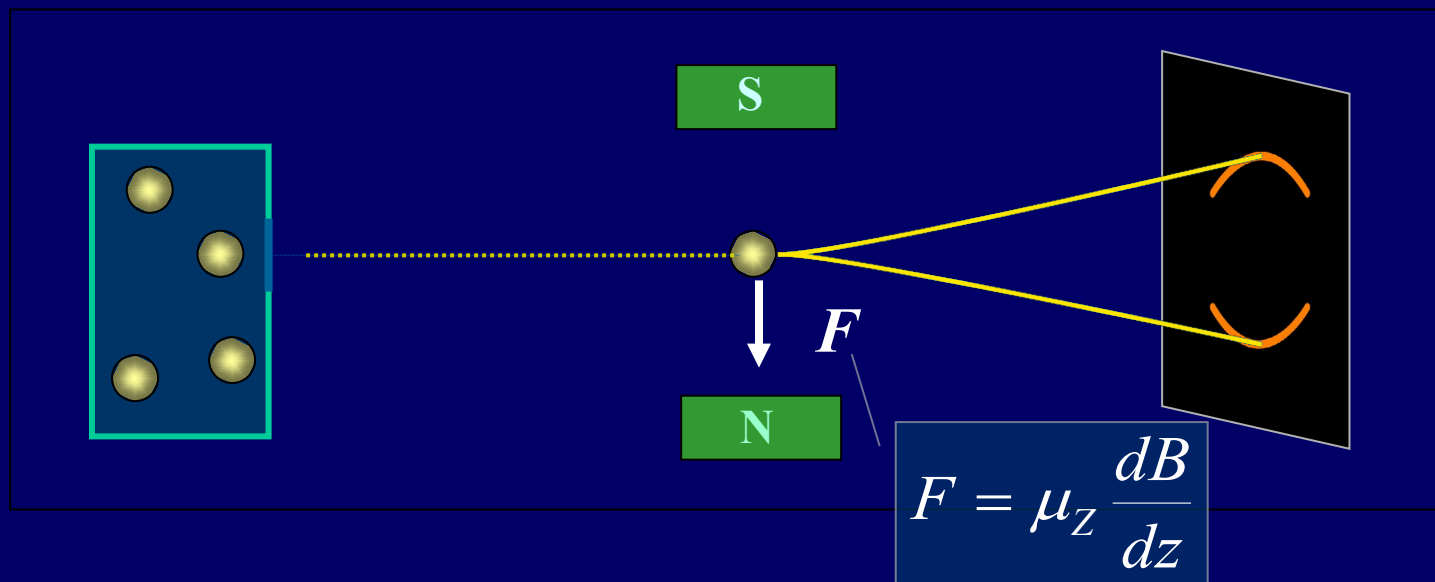


## § 15.7 电子自旋 四个量子数

### 一. 斯特恩—革拉赫实验







其 轨道磁矩在外磁场的投影 $\mu_z$  取  $(2l+1)$  个值,

原子沉积线条数是两条。?

★ 实验观察到的磁矩  $\mu_z$  是不是由轨道磁矩产生的。

## 二. 电子自旋 (1925年乌伦贝克等)

- 电子自旋角动量大小

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar$$

$s$  — 自旋量子数

- $S$  在外磁场方向的投影

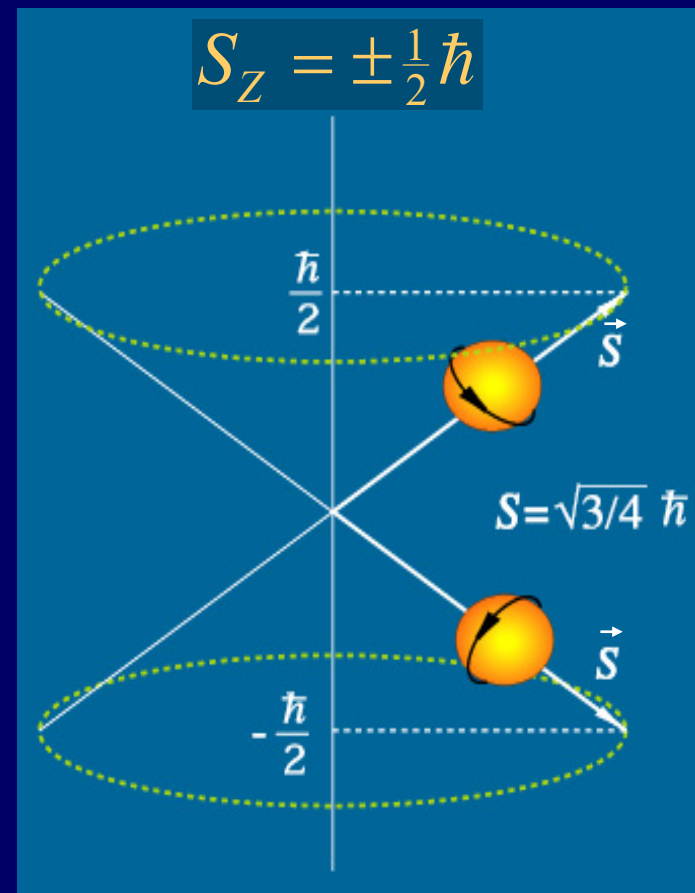
$$S_Z = m_s \hbar$$

自旋磁量子数  $m_s$  取值个数为

$$2s + 1 = 2$$

则  $s = 1/2$ ,  $m_s = \pm 1/2$

$$S = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)} \hbar = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar$$



电子自旋角动量在  
外磁场中的取向



### 三. 四个量子数 (表征电子的运动状态)

1. 主量子数  $n$  (1, 2, 3, .....)

大体上决定了电子能量

2. 角量子数  $l$  (0, 1, 2, .....,  $n-1$ )

决定电子的轨道角动量大小, 对能量也有稍许影响。

3. 磁量子数  $m_l$  (0,  $\pm 1$ ,  $\pm 2$ , .....,  $\pm l$ )

决定电子轨道角动量空间取向

4. 自旋磁量子数  $m_s$  (1/2, -1/2)

决定电子自旋角动量空间取向

## § 15.8 原子的电子壳层结构

### 一. 泡利不相容原理 (1925年)

在一个原子中，不能有两个或两个以上的电子处在完全相同的量子态，即它们不能具有一组完全相同的量子数

( $n, l, m_l, m_s$ )。

$n$	1	2				3									
$l$	0	0	1			0	1			2					
$m_l$	0	0	-1	0	1	0	-1	0	1	-2	-1	0	1	2	
$m_s$	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>	<div><div></div><div></div></div>
$Z$	2	8				18									

容纳电子的最大数目  $Z_n = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$

$$n = 1、2、3、4、5、6$$

|   |   |   |   |   |  
*K、L、M、N、O、P*

$$l = 0、1、2、3、4、5$$

|   |   |   |   |   |  
*s、p、d、f、g、h*

## 二. 能量最小原理

原子处于正常状态时，每个电子都趋向占据可能的最低能级



			1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s
1	氢	H	1						
2	氦	He	2						
3	锂	Li	2	1		$D = n + 0.7 l$			
4	铍	Be	2	2					
5	硼	B	2	2	1				
6	碳	C	2	2	2				
10	氖	Ne	2	2	6				
13	铝	Al	2	2	6	2	1		
14	硅	Si	2	2	6	2	2		
18	氩	Ar	2	2	6	2	6		
19	钾	K	2	2	6	2	6		1
20	钙	Ca	2	2	6	2	6		2
21	钪	Sc	2	2	6	2	6	1	2

4s 能级  
低于  
3d 能级

部分原子的电子排列