

- 第一章 原子的位形
  - §3 卢瑟福散射公式
- 第二章 原子的量子态：玻尔模型
  - §6 背景知识
  - §7 玻尔模型
  - §8 实验验证之一：光谱
    - §10 玻尔模型的推广
- 第三章 量子力学导论
  - §12 波粒二象性
  - §13 不确定性关系
  - §14 波函数及其统计解释
  - §15 薛定谔方程
- 第四章 原子的精细结构：电子的自旋
  - §18 原子中电子轨道运动的磁矩
  - §19 施特恩-格拉赫实验
  - §20 电子自旋的假设
- 第五章 多电子原子：泡利原理

## 第一章 原子的位形

### §3 卢瑟福散射公式

- 库仑散射公式：

$$b = \frac{a}{2} \cot \frac{\theta}{2} \quad a \equiv \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E}$$

- 卢瑟福公式：

设一薄箔的面积为  $A$ ，厚度为  $t$ ，环的面积为  $2\pi b \cdot |db|$ ，粒子打在这个环上的概率为

$$\frac{2\pi b \cdot |db|}{A} = \frac{a^2 2\pi \sin \theta d\theta}{16A \sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

## 第二章 原子的量子态：玻尔模型

## §6 背景知识

- 爱因斯坦光电方程：

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

- 光电效应实验遏止电压与最大动能的关系：

$$eV_0 = \frac{1}{2}mv_m^2$$

- 里德伯方程：

$$\sigma \equiv \frac{1}{\lambda} \equiv R_H \left[ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right] \equiv T(n) - T(n')$$

## §7 玻尔模型

以氢原子为例

- 频率条件：

$$h\nu = E_{n'} - E_n$$

- $\uparrow$  与 §6.3 比较得出：

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}$$

- 电子从定态  $n'$  跃迁到  $n$  时释放的能量，相应的波长为  $\lambda$ ，频率为  $\nu$ ，相应波数可表示为：

$$\sigma \equiv \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{hc}(E_{n'} - E_n)$$

- 氢原子定态  $n$  电子轨道半径：

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \cdot n^2$$

- 角动量量子化条件：

$$L = n\hbar, n = 1, 2, 3, \dots$$

- 精细结构常数：

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

- 氢原子能量：

$$E_n = -\frac{1}{2}m_e(\alpha c)^2 \frac{1}{n^2}$$

- 电子在氢原子轨道中的速度：

$$v_n = \frac{\alpha c}{n}$$

## §8 实验验证之一：光谱

- 一质量为  $m_A$  的氢核相应的里德伯常量应写成：

$$R_A = R \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_A}}$$

- 类氢离子光谱的波数：

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_A = R_A \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right) Z^2$$

## §10 玻尔模型的推广

- **相对论修正**

- 物体在运动时，其质量为

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta \equiv \frac{v}{c}$$

- 运动的物体动能为：

$$E_k = (m - m_0)c^2$$

- 三角关系：

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

- 类氢原子定态  $n$  电子轨道半径：( $Z$  为原子核带有的正电荷)

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \cdot \frac{n^2}{Z}$$

- 类氢原子能量：

$$E_n = -\frac{1}{2}m_e(\alpha c Z)^2 \frac{1}{n^2}$$

- 类电子在氢原子轨道中的速度：

$$v_n = \frac{\alpha c Z}{n}$$

## 第三章 量子力学导论

### §12 波粒二象性

- 光子的能量：

$$E = h\nu$$

- 光子的动量：

$$p = \frac{h}{\lambda}, \text{ 或者 } p = \hbar k \ (k = 2\pi/\lambda)$$

- 德布罗意关系式：

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

- 相对论中的质能关系式：

$$E = mc^2$$

- 当动能  $E_k \gg mc^2$  时，要用相对论公式：

$$E = E_k + mc^2$$

- 非相对论动能公式：

$$E_k = \frac{p^2}{2m}$$

- 考虑一个微观粒子被关在一个宽度为  $d$  的匣子里作一维运动，永远存在，其德布罗意波长满足：

$$n \frac{\lambda}{2} = d, \ n=1,2,\dots$$

### §13 不确定性关系

- 不确定性关系：

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

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

- 束缚粒子（束缚在线速为  $r$  的范围内）的最小平均动能：

$$E_k = \frac{p_{\text{平均}}^2}{2m} = \frac{3\hbar^2}{8mr^2}$$

- 谱线的自然宽度：

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

## §14 波函数及其统计解释

- 对于在  $x$  方向以恒定线动量运动的粒子，其波函数为：

$$\Psi = \Phi_0 \sin 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right) = \Psi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

- 波函数满足的归一化条件：

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 1$$

## §15 薛定谔方程

# 第四章 原子的精细结构：电子的自旋

## §18 原子中电子轨道运动的磁矩

- 磁矩  $\mu$  的数值表达式：

$$\mu_l = -\gamma L = -\sqrt{l(l+1)}\hbar\gamma = -\sqrt{l(l+1)}\frac{e\hbar}{2m_e}$$

- 磁矩在  $z$  方向的投影  $\mu_{l,z}$  的表达式：

$$\mu_{l,z} = -\gamma L_z = -\gamma m_l \hbar = -\frac{e\hbar}{2m_e} m_l$$

- 玻尔磁子  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$

$$\begin{aligned} \mu_l &= \sqrt{l(l+1)}\mu_B, & l &= 0, 1, 2, \dots, n \\ \mu_{l,z} &= -m_l\mu_B, & m_l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \end{aligned}$$

## §19 施特恩-格拉赫实验

- 粒子束经过磁场区，落到屏幕时偏离  $x$  轴的距离：

$$z = \frac{\mu_z D d}{m v_0^2} \cdot \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

$d$  : 磁场区长度  $D$  : 磁场区中点到屏幕的长度

- 分子热运动：

$$\frac{1}{2} m v_0^2 = \frac{3}{2} k T$$

## §20 电子自旋的假设

- 电子自旋角动量：

$$|S| = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \quad s = \frac{1}{2}$$

- 在  $z$  方向的分量：

$$S_z = m_s \hbar, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

- 电子轨道角动量：

$$|L| = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad l = 0, 1, 2, \dots, n$$

- 在  $z$  方向的分量：

$$L_z = m_l \hbar, \quad m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

- 电子总角动量 ( $l - s$  耦合)：

$$|J| = \sqrt{j(j+1)}\hbar, \quad j = |l - s|, \dots, |l + s|$$

- 在  $z$  方向的分量：

$$J_z = m_j \hbar, \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j$$

- 朗德  $g$  因子:

$$g_j = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\hat{S}^2 - \hat{L}^2}{\hat{J}^2} \right)$$

- 总角动量对应磁矩大小关系:

$$\frac{\mu_j}{J} = \mu_B \cdot g_j$$

## 第五章 多电子原子：泡利原理