

第一章 量子力学基础和原子结构

一、填空题

- 1、若用波函数 ψ 来定义电子云，则电子云即为_____。
- 2、氢原子 ψ_{1s} 在 $r=a_0$ 和 $r=2a_0$ 处的比值为_____。
- 3、有两个氢原子，第一个氢原子的电子处于主量子数 $n=1$ 的轨道，第二个氢原子的电子处于 $n=4$ 的轨道。(1) 原子势能较低的是_____，(2) 原子的电离能较高的是_____。
- 4、设氢原子中电子处在激发态 $2s$ 轨道时能量为 E_1 ，氦原子处在第一激发态 $1s^1 2s^1$ 时的 $2s$ 电子能量为 E_2 ，氦离子 He^+ 激发态一个电子处于 $2s$ 轨道时能量为 E_3 ，请写出 E_1, E_2, E_3 的从大到小顺序。
_____。

5、对氢原子 $1s$ 态：

- (1) ψ^2 在 r 为_____处有最高值
- (2) 径向分布函数 $4\pi r^2 \psi^2$ 在 r 为_____处有极大值；
- (3) 电子由 $1s$ 态跃迁至 $3d$ 态所需能量为_____。

- 6、H 原子(气态)的电离能为 13.6 eV ， He^+ (气态)的电离能为_____ eV 。

二、选择题

- 1、波长为 662.6 pm 的光子和自由电子，光子的能量与自由电子的动能比为何值？

(A) $10^6: 3663$ (B) $273: 1$ (C) $1: C$ (D) $546: 1$

- 2、一电子被 1000V 的电场所加速。打在靶上，若电子的动能可转化

为光能，则相应的光波应落在什么区域？

- (A) X光区(约 10^{-10}m) (B) 紫外区 (约 10^{-7}m)
(C) 可见光区 (约 10^{-6}m) (D) 红外区 (约 10^{-5}m)

3、普通阴极管管径为 10^{-2}m 数量级。所加电压可使电子获得 10^5ms^{-1} 速度，此时电子速度的不确定量为十万分之一，可用经典力学处理。若以上其它条件保持不变则阴极管的管径在哪个数量级时必须用量子力学处理？

- (A) 约 10^{-7}m (B) 约 10^{-5}m (C) 约 10^{-4}m (D) 约 10^{-2}m

4、下列条件不是品优函数的必备条件的是

- (A) 连续 (B) 单值 (C) 归一 (D) 有限或平方可积

5、已知一维谐振子的势能表达式为 $V=kx^2/2$ ，则该体系的定态薛定谔方程应当为

- A. $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}kx^2\right]\psi = E\psi$
B. $\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{1}{2}kx^2\right]\psi = E\psi$
C. $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right]\psi = E\psi$
D. $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2}kx^2\right]\psi = E\psi$

6、粒子处于定态意味着

- (A) 粒子处于概率最大的状态
(B) 粒子处于势能为 0 的状态
(C) 粒子的力学量平均值及概率密度分布都与时间无关的状态

(D) 粒子处于静止状态

7、下列函数中 $\frac{d^2}{dx^2}$, $\frac{d}{dx}$ 的共同的本征函数是

- A. $\cos kx$ B. e^{-bx} C. e^{-ikx} D. e^{-kx^2}

8、已知一维势箱中一个自由电子处在 $\psi(x) = \sqrt{2/l} \sin(n\pi x/l)$ 态 ($0 \leq x \leq l$)，则该电子出现在 $l/2$ 和 $3l/4$ 间的概率为

- A. $P = |\psi(l/2)|^2 + |\psi(3l/4)|^2$ B. $P = \int_{\frac{3l}{4}}^{\frac{l}{2}} |\psi(x)|^2 dx$
C. $P = \int_{\frac{3l}{4}}^{\frac{l}{2}} \psi(x) dx$ D. $P = \int_{\frac{l}{2}}^{\frac{3l}{4}} |\psi(x)|^2 dx$

9、由一维势箱的薛定谔方程求解结果所得的量子数 n ，下面论述正确的是：

- A 可取任一整数 B 与势箱宽度一起决定节点数
C 能量与 n^2 成正比 D 对应于可能的简并态

10、立方势箱中在 $E \leq \frac{6h^2}{4ml^2}$ 的能量范围内，能级数和状态数为

- A 5, 20 B 6, 6 C 5, 11 D 6, 17

三、简答题

- 1、对在二维方势箱中的 9 个电子，画出其基态电子排布图。
- 2、 He^+ 中处于 ψ_{2p_x} 的电子，其角动量在 x, y, z 方向上的分量是否具有确定值？若有，其值是多少？若没有，其平均值是多少？
- 3、氢原子中 ψ_{2p_z} 状态的电子，其角动量在 x, y 方向上的分量是否具有确定值？若有，其值是多少？若没有，其平均值是多少？

4、写出中心力场近似下的单电子薛定谔方程。

四、计算题

1、已知一维势箱的长度为 0.1nm ，求（1） $n=1$ 时箱中电子的德布罗依波长；（2）电子从 $n=2$ 向 $n=1$ 跃迁时辐射电磁波的波长；（3） $n=3$ 时的箱中电子的动能？

2、已知 Li^{2+} 的 $1s$ 波函数为 $\psi_{1s} = \left[\frac{27}{\pi a_0^3} \right]^{1/2} e^{-3r/a_0}$

(1)计算 $1s$ 电子径向分布函数最大值离核的距离；

(2)计算 $1s$ 电子离核平均距离；

(3)计算 $1s$ 电子概率密度最大处离核的距离。

3、回答有关 Li^{2+} 的下列问题：

(1)写出 Li^{2+} 的薛定谔方程；

(2)比较 Li^{2+} 的 $2s$ 和 $2p$ 态能量的高低。

4、一个以 $1.5 \times 10^6 \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ 速率运动的电子，其相应的波长是多少？(电子质量为 $9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$)