第一章

1. 散射公式：靶原子：M. Ze

射击原子：m. ze. 带有能量 E，速率 v_0.

$D=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{zZe^2}{E}$ $\left(\frac{k q_1 q_2}{E}\right)$ 瞄准距离为 $b=\frac{D}{2}\cot\frac{\theta}{2}$

= 离最小距离：$r_m=\frac{D}{2}\left(1+\frac{1}{\sin\frac{\theta}{2}}\right)$

$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{D^2}{16}\cdot\frac{1}{(\sin\frac{\theta}{2})^4}$

1 barn $=10^{-28}\,m^2$

2. 击打函数：$\frac{dn}{n}=Nt\,d\sigma$　$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\left(\frac{zZe^2}{4E}\right)^2\frac{1}{(\sin\frac{\theta}{2})^4}$ 为散射到θ方向上单位立体角的概率（散射截面 / 立体角）

射入计数器的百分数　靶厚度为 t，单位体积内有 N 个原子　$d\Omega=\frac{A}{r^2}$ ← 探测器面积，← 距离。

$N=\frac{\rho N_A}{A}$　A 为原子量数.

角度 k 个，s 秒后，在角度 α→β 之间的粒子数为 $N_0=\frac{dn}{n}\cdot s\cdot k$　$\sigma=2\pi\int_\alpha^\beta\frac{d\sigma}{d\Omega}\cdot\sin\theta\,d\theta$

3. 原子发射光的频率：$F=-\frac{Ze^2 r}{4\pi\varepsilon_0 R^3}=-kr$（电子受力）$\Rightarrow k=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 R^3}$　$f=\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}=\frac{e}{2\pi}\sqrt{\frac{Z}{4\pi\varepsilon_0 mR^3}}$

电子最低轨道半径：$r=\frac{a_0}{Z}$

$a_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$

4. 类氢原子的玻尔轨道半径 $r_n=\frac{n^2}{Z}a_0$，$a_0=0.53\,Å$，电子在轨道的速度 $v_n=\frac{\alpha c}{n}\cdot Z$　$\alpha=\frac{1}{137}$ 为精细结构常数

$E_n=-\frac{1}{2n^2}\alpha^2 m_e c^2$　$E_1=-13.6\,eV$

$E=\frac{Z^2}{n^2}E_0$.

总能量 $E=Z^2E_0$，$E_0=-13.6\,eV$ 注意：基态能量 <0！ 能量：E，$\frac{E}{4}$，$\frac{E}{9}$，… 于是第 1 激发电势为 $U_1=\frac{3}{4}E$

激发能为从基态到激发态所需的能量.

5. 类氢离子：$\tilde{\nu}=Z^2R\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right)$　这里的 $\tilde{\nu}=\frac{1}{\lambda}$ 是波数.

6. 原子核质量为 M 时，约化质量 $\mu=\frac{M\cdot m}{M+m}$，里德伯常量 $R_M=R_\infty\cdot\frac{\mu}{m_e}$　（线系限：$\tilde{\nu}=\frac{R_H}{n^2}$　n 的值取决于线系.
如：Balmer 线系 n=2，Brackett 线系 n=4.）

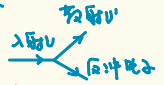
原子半径（电子相对原子运动半径）：$r_n=\frac{n^2}{Z}r_0$

电子离核：$r=\frac{a_0}{Z}$，其余类推：$r'=\frac{a_0}{Z}\cdot\frac{m_e}{m_\mu}n^2$（$m_\mu$ 为约化质量）　$E=\frac{m_\mu}{m_e}Z^2E_0$

第二章

1. $E=\frac{hc}{\lambda}=h\nu$（频率）　$p=\frac{h}{\lambda}$　最大动能 = E − 功函数

2. 散射光子：$\nu'=\frac{\nu}{1+\frac{h\nu}{m_ec^2}(1-\cos\theta)}$（频率）θ 为出射方向



$\Delta\lambda=\lambda'-\lambda=\frac{h}{m_ec}(1-\cos\theta)$　m 为入射粒子质量

$\Delta\lambda=\frac{h}{m_ec}(1-\cos\theta)$

3. 德布罗意波长：$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$ ← 是动能，不是总能.　粒子能量 $E=\frac{E_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$

又对高能粒子：$c^2p^2=E^2-m_0^2c^4$　则 $\lambda=\frac{hc}{\sqrt{E^2-m_0^2c^4}}$

(1) 位矢所对应的算符就是 r 本身，这表示以 r 相乘的运算；
(2) 只与坐标有关的势能 $V(r)$，其算符就是 $V(r)$；
(3) 动量算符：$\hat{p}=-i\hbar\nabla$；
(4) 动能算符：$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$；
(5) 能量算符：哈密顿量 $H=T+V$，它的相应算符 $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)$；
(6) 角动量算符：角动量 L 可表示为 $L=r\times p$，它是位矢 r 与动量 p 的函数，

4. 薛定谔波动方程：$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+V(r,t)\Psi$　不是从定理出发推导的

定态薛定谔方程：$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\right]u(r)=E\,u(r)$

5. 无限深势阱：$\psi(x)=\begin{cases}A\cos\frac{n\pi x}{a} & n\text{ 奇}\\ B\sin\frac{n\pi x}{a} & n\text{ 偶}\end{cases}$　归一化：$A=B=\sqrt{\frac{2}{a}}$　其中粒子能量为 $E_n=n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$（是分立值，是量子化的）

其中位置的不确定性大小 $\Delta x\approx a$，$\Delta p>\frac{\hbar}{2a}$　a 为宽.

6. 隧穿势：穿透深度 $\Delta x\approx\frac{1}{k_2}=\frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$ → 功函数.

7. 测不准关系：$\Delta E\cdot\Delta t\geq\frac{\hbar}{2}$，$\Delta p\cdot\Delta x\geq\frac{\hbar}{2}$　（$\Delta p\cdot\Delta x\approx\hbar$）

第三章

1. 氢原子的定态薛定谔方程的解 $R_{nl}=C_{nl}e^{-\frac{r}{na_0}}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$　$a_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$ 为氢原子基态的玻尔半径

氢原子的波函数：$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$　$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im\varphi}$　l 越大 sin、cos 的次方数越大.　$|m_l|$ ↑ $\sin\theta$　l ↑ $\sin\theta$ 与 $\cos\theta$

n 为主量子数，为能级数，$l=0,1,\dots,n-1$ 为角量子数，轨道磁量子数 $m=0,\pm1,\dots,\pm l$.　m 为 e 指数上 iφ 的系数

n 主量子数（能级）

l 角量子数 $l=0,1,\dots,n-1$

m_l 磁量子数 $m_l=0,\pm1,\dots,\pm l$（无自旋）

j 总角量子数 $j=|l-s|,\dots,l+s$（自旋）

m_j 总磁量子数 $m_j=-j,\dots,j$

$n^{2l+1}\chi_j$

2. 概率密度：随 θ 分布：$P(\theta)d\theta=|\Theta|^2\sin\theta\,d\theta$　角动量为 $\sqrt{l(l+1)}\hbar$　n 为 $e^{-\frac{r}{na_0}}$ 中的量　$e^{-\frac{r}{na_0}}\Rightarrow n$

随 φ 分布：$P(\varphi)d\varphi=\frac{1}{2\pi}d\varphi$　对应 s.p.a.f.…　总角动量磁量子数 $m_j=\pm\frac{1}{2},\dots,\pm j$

随 r 分布：$P(r)dr=|R|^2r^2dr$　z 轴方向分量！$L_z=m_l\hbar$　$m_l=0,\pm1,\dots,\pm l$

3. 原子波函数的宇称：l 为奇 ⇒ 奇宇称，l 为偶 ⇒ 偶宇称　氢原子的 $|P_0|\approx ea_0$

4. 一个振荡的电偶极子单位时间内辐射的平均能量为 $P=\frac{4\pi^3\nu^4}{3\varepsilon_0c^3}|P_0|^2$　ν 为振荡频率，P_0 为电偶极矩

原子在单位时间内跃迁：i → f 时发生跃迁的概率为 $\lambda_{if}=\frac{P}{h\nu}=\frac{4\pi^3\nu^3}{3\varepsilon_0hc^3}|P_0|^2$，此时初态的平均寿命 $\tau=\frac{1}{\lambda_{if}}\approx\frac{\hbar}{\Gamma}$

Γ 为能级宽度

5. 初末态量子数满足 $\Delta m=0,\pm1$；$\Delta l=\pm1$ 时，电偶极矩才不为零 ⇒ 容许跃迁　$=\frac{16\pi^3\nu^3}{3\varepsilon_0hc^3}|P_{if}|^2$　$P_{if}=ed$

$\Delta s=0$.　Ψ_{nlm} ← 注意顺序.

辐射能量：$P=\frac{4\pi^3\nu^4}{3\varepsilon c^3}|P_0|^2$

6. 电子轨道运动在原子核处产生的磁场：$\vec{B}=\frac{Ze}{8\pi\varepsilon_0m_ec^2r^3}\vec{L}$　L 为轨道角动量，$\sqrt{l(l+1)}\hbar$

总角动量：$\vec{j}=\vec{s}+\vec{l}$　$|\vec{j}|^2=|\vec{s}|^2+|\vec{l}|^2-2\vec{s}\cdot\vec{l}$

$|\vec{j}|^2=j(j+1)\hbar^2$　$j=l\pm\frac{1}{2}$，$|l-\frac{1}{2}|$　$(s=\frac{1}{2})$

不是 $s^2+l^2=j^2$！！！而是 $\vec{j}=\vec{s}+\vec{l}$

l为轨道角动量，s为自旋角动量，j为总角动量，有 $\vec{s}\cdot\vec{l}=\frac{j^2-s^2-l^2}{2}$，$\vec{s}\cdot\vec{j}=\frac{s^2+j^2-l^2}{2}$，$\vec{l}\cdot\vec{j}=\frac{l^2+j^2-s^2}{2}$

$g_s=2$，$g_l=1$

7. 单电子原子的朗德因子. $g_j=\frac{1}{j^2}\left(\frac{j^2+l^2-s^2}{2}g_l+\frac{j^2+s^2-l^2}{2}g_s\right)$ $g_l=1, g_s=2$ $\xrightarrow{j^2=\sqrt{j(j+1)}\hbar}$ $g_j=1+\frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}$ 其中 $s=\frac{1}{2}$，$j=l\pm\frac{1}{2}$（$l=0$时 $j=\frac{1}{2}$）

8. 多重态原子的符号表示：$n^{2s+1}X_j$ n为主量子数，$l=0,1,\dots,n-1$，$X=s,p,d,f\dots$ $j=l+s, l+s-1,\dots,|l-s|$.

9. 能级分裂情况：$\Delta E_{m_j}=m_j g_j \mu_B \cdot B$

实验测得磁矩值 $\mu_{jz}=g_j\cdot m_j\cdot\mu_B$

10. 精细结构常数 $\alpha=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}$

① 只考虑动能的相对论修正 $\Delta E_n'=-E_n\frac{\alpha^2Z^2}{n^2}\left(\frac{3}{4}-\frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right)$ $E_n=\frac{Z^2e^2}{4\pi\varepsilon_0\cdot 2n^2 a}$ $E_n=-\frac{\alpha^2mc^2}{2n^2}Z^2$

② 完整的精细结构修正：$\Delta E_n=-E_n\frac{\alpha^2Z^2}{n^2}\left(\frac{3}{4}-\frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right)$ ← 只与j有关，如 $n=2$时 $l=0,1$，$j=\frac{1}{2}$或$\frac{3}{2}$ ⇒ 分为2能级
$n=1$时 只有$j=\frac{1}{2}$，不分裂.

能级分裂间隔：$\Delta E=\Delta E_{j=l+\frac{1}{2}}-\Delta E_{j=l-\frac{1}{2}}=\frac{Rhc\alpha^2Z^4}{n^3 l(l+1)}$

裂距：定义为两个能级之间的能量差. $\Delta E_n=\frac{Z^2\alpha^4mc^2}{2n^3}\left(\frac{1}{j_1+\frac{1}{2}}-\frac{1}{j_2+\frac{1}{2}}\right)=E_1\frac{\alpha^2Z^2}{n^3}\left(\frac{1}{j_1+\frac{1}{2}}-\frac{1}{j_2+\frac{1}{2}}\right)$

第四章

1. L-S耦合：如1s3p：$s_1=\frac{1}{2}, s_2=\frac{1}{2}\Rightarrow S=0$或1 可能$J=1,2$.
$l_1=0, l_2=1\Rightarrow L=1$

L \ S	0	1
1	$^1P_1$	$^3P_{012}$

S=0与1的两套能级之间无跃迁.

2. Hund规则：① S大的能级位置低
L-S耦合：② S同时L大的能级位置低
③ S、L同时 J大在上为正常次序，J小在上为倒转次序
小于半满时 J小能级位置低，大于半满时 J大能级低

3. 自旋量数为半整数（如电子$s=\frac{1}{2}$）即$\frac{1}{2},\frac{3}{2}\dots$有交换反对称性，称费米子
〃 整数（如光子$s=1$）即1,2,… 〃 对称 〃，〃玻色子

4. 两同科电子能级L+S为偶数时的电子态.

5. 容许跃迁：$\begin{cases}\Delta L=\pm1\\ \Delta J=0,\pm1\ (\Delta M=0,\pm1)\end{cases}$

能级进一步分裂．此外，由于同一元素的不同同位素具有不同的核质量和电荷分布，也会引起原子能级的微小移动，这称同位素移位效应．这些效应对原子能级（原子光谱）影响的大小约为同数量级，统称为超精细结构效应．

氢原子的超精细结构主要是原子核磁矩 μ_I 和电子运动产生的磁场的相互作用结果．电子引起的磁场包括两部分，电子自旋产生的磁场及电子的轨道运动所产