高等学校教学参考书

结构化学计算

游效曾编

58/65

北京师范大学藏书

641849

图 馆

人民教育出版社

内 容 简 介

本书选编了关于"结构化学"方面的计算例题200多个，共分为量子力学基础、原子结构、分子结构、晶体结构、结构和性质、以及结构分析方法等六个部分。

本书可以作为高等学校有关"结构化学"方面课程的教学参考书，也可供对"结构化学"方面有兴趣的化学工作者的自学参考读物。

高等学校教学参考书

结构化学计算

游效曾 编

*

人民教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

长春新华印刷厂印装

*

开本787×1092 1/32 印张10.625 插页1 字数257,000

1979年4月第1版 1979年9月第1次印刷

印数 00,001—46,000

书号 13012·0347 定价 0.78 元

代化学的特点
结构化学"课程
在学习中主要的
础理论中会碰
较具体的计算
际的结果。另
一定每个人都能
得应有的结论
列题来部分弥补
选编的例题以配
过一般教学内容
用、常用而被省
，对于化学工作
分析说明。书中
则，将不再加以
料[1—5]进行
本书可以作为
供对结构化学
工作者自学参
由于笔者水平
，希同志们加以

目　录

第一章　量子力学基础

内容提要

量子力学是研究化学结构、结构和性质、以及进行结构测定的理论基础。本章通过黑体辐射、质能联系定律、光电效应、电子衍射和测不准关系等实例介绍了量子论和微观粒子二象性概念。以自由电子、一维势阱和谐振子为重点，说明如何在合理解的条件下运用薛定谔方程求解。最后介绍了常用的变分法和微扰法的一些简单实例。

1-1　普朗克于 1900 年从辐射能量的不连续性假定出发推导出黑体辐射公式，即辐射能力

$$E_\lambda=\frac{2\pi c^2h\lambda^{-5}}{e^{hc/\lambda kT}-1} \tag{1}$$

从而开创了量子理论。试计算①在波长 $\lambda=4.002$ 微米和温度 $T=634^\circ$K 时的 E_λ 值，②在 $T=2000^\circ$K 和 6000°K 时对应于辐射能力最大的波长 λ_m。

解： ①以 $\lambda=4.002$ 微米，$T=634^\circ$K 代入(1)式得到*

$$E_\lambda=\frac{2\times3.142\times(2.998)^2\times6.626\times10^{13}}{(e^{\frac{2.998\times6.626\times10}{1.380\times4.002\times6.34}}-1)\times4.002^5}$$

$$=1.26\times10^{10}\text{ 尔格/秒·厘米}^3=1.26\text{ 千瓦/厘米}^3$$

和实验值 1.27×10^{10} 千瓦/厘米^3 相当符合。

* 所用常数及单位参考附录二和三。

② 公式(1)具有图 1-1 的形式，为求在固定温度T时的最大波长λ_m，令$x=\frac{hc}{\lambda kT}$，则(1)式化为

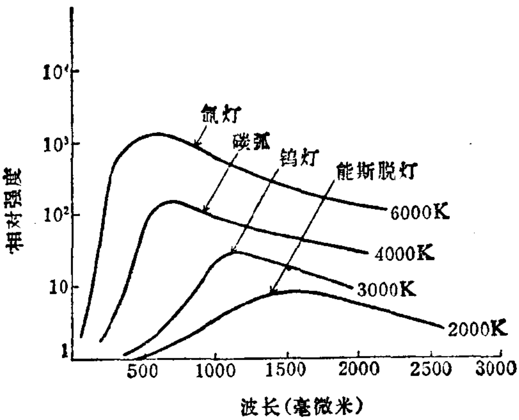

图 1-1 黑体辐射曲线

$$E_\lambda=f(x)=\frac{2\pi k^5T^5}{c^3h^4}\frac{x^5}{e^x-1} \tag{2}$$

为求函数$f(x)$的极大值，对上式微分并令其等于零

$$f'(x)=\frac{2\pi k^5T^5}{c^3h^4}\frac{5x^4(e^x-1)-x^5e^x}{(e^x-1)^2}=0$$

不考虑$x=0$的情况就得到

$$5e^x-xe^x-5=0$$

用图解法求解这个超越函数得到$x=4.9650$，因此

$$\lambda_m=\frac{hc}{4.9650kT} \tag{3}$$

将$T=2000^\circ\mathrm{K}$代入(3)式得到$\lambda_m=1.45$微米

将$T=6000^\circ\mathrm{K}$代入(3)式得到$\lambda_m=0.483$微米

和图中对应曲线的极大值是一致的。实际上，能斯脱棒常用来作为波长较长的红外光源，氙灯常用作波长较短的紫外光源。

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

1-2 当用能量为 2.623 兆电子伏的硬 γ 光子和重氢 ${}^{1}_{2}D$ 的核相互作用时得到质子和中子，即发生下列核反应

$$\gamma+{}^{1}_{2}D={}^{1}_{1}H+{}^{0}_{1}n+E_{{}^{1}_{1}H}+E_{{}^{0}_{1}n} \tag{1}$$

其中元素的左上方为原子序数或核电荷、左下方为同位素质量。结果得到质子的动能 $E_{{}^{1}_{1}H}=0.2168$ 兆电子伏，其中 $E_{{}^{0}_{1}n}$ 为中子的动能。若已知氢同位素核的质量为：${}^{1}_{1}H=1.67268\times10^{-24}$ 克/原子；${}^{1}_{2}D=3.34369\times10^{-24}$ 克/原子，试求中子的质量。

解：由于质子和中子的质量相差不多，可以假设产生的质子和中子的能量实际上相同，因此

$$\gamma+{}^{1}_{2}D={}^{1}_{1}H+{}^{0}_{1}n+2E_{{}^{1}_{1}H} \tag{1}$$

移项后得到中子的质量

$${}^{0}_{1}n=\gamma+{}^{1}_{2}D-{}^{1}_{1}H-2E_{{}^{1}_{1}H} \tag{2}$$

将同位素 ${}^{1}_{2}D$ 和 ${}^{1}_{1}H$ 的值代入上式，并将实验的光子和质子的动能数值按下列爱因斯坦质能关系转化为质量单位

$$m=\frac{E}{c^{2}} \tag{3}$$

其中 m 为质量，c 为光速，E 为能量(尔格)。代入(2)式后得到

$${}^{0}_{1}n=(3.34369+0.00468-1.67268-2\times0.00039)\times10^{-24}\text{克/原子}$$
$$=1.67492\times10^{-24}\text{克/原子}$$

而按质量的物理标度(即以 ${}_{16}O=16.0000$ 为质量标准)，中子的质量为

$${}^{0}_{1}n=1.67492\times10^{-24}\text{克/原子}\times6.0249\times10^{23}\text{原子/(克·原子)}$$
$$=1.00912\ \text{克/(克·原子)}$$

(3) 式所表达的质能联系定律表明了物质和运动密切相关的辩证关系，本题的计算也表明了该式的一个应用。

1-3 自然存在的元素钾有 0.0118% 为放射性同位素 ${}^{19}_{40}K_{21}$，

其中右下角为中子数。它在β衰变时

$$ {}^{19}_{40}K_{21} \longrightarrow {}^{20}_{40}Ca^{+}_{20} + e^{-} $$

测出发射电子（β射线）的动能为1.32兆电子伏。由质谱法测出$_{40}Ca$（它很稳定，并且在自然钙中的含量为97%）的质量为39.96259道尔顿，试求$_{40}K$的质量。

解： 忽略反应$Ca^{+}+e^{-}\longrightarrow Ca$(6电子伏)的能量。因此在反应$_{40}K\longrightarrow {}_{40}Ca$所放出的能量为1.32兆电子伏，取$e=0.1602\times10^{-18}$库时其值为$0.211\times10^{-12}$焦。

利用质能联系公式$E=mc^2$将上述动能转换成质量

$$ m=\frac{E}{c^2}=\frac{0.211\times10^{-12}}{(2.9979\times10^{8})^2}=2.35\times10^{-30}\text{ 千克} $$

在研究原子核时质量单位常采用道尔顿（符号为d）作为单位，即取碳的同位素$^{6}_{12}C_6$原子质量的$\frac{1}{12}$作为原子质量单位，1原子质量单位$d=1.66053\times10^{-27}$千克，而通常用作标准的$_{12}C$的核质量应为12.00000 d。由此得到从$_{40}K$到$_{40}Ca$的质量减少了

$$ \frac{2.35\times10^{-30}}{1.660\times10^{-27}}=0.00142\text{ d} $$

而$_{40}K$的质量则为

$$ 39.96259+0.00142=39.96401\text{ d} $$

由上可见质能联系定律在高能的核反应中有着重要的意义，但是在通常只涉及核外电子得失的化学反应中，由于相对来说能量变化不大（一般反应热约几个电子伏），所以不必考虑由此引起的质量变化。

1-4 在光电效应实验中，当用波长为650毫微米的光照射钠金属的光电池时方能产生光电流，试问用325毫米的光照射时，需要多大的抑制电压以使产生的光电流为零。

解： 按下式求出波长为650毫微米光波的频率

$$\nu=\frac{c}{\lambda}=\frac{3\times10^{8}}{650\times10^{-9}}=4.62\times10^{14}\text{ 秒}^{-1}$$

从而按照爱因斯坦的光子理论求出光子的能量

$$E_0=h\nu=0.6625\times10^{-33}\text{ 焦·秒}\times4.62\times10^{14}\text{ 秒}^{-1}$$
$$=0.306\times10^{-18}\text{ 焦}$$

这就是使电子离开金属钠所需的逸出功E_0。同理可以求出对应于波长为325毫微米的光子能量 $E=0.612\times10^{-18}$焦。

当应用能量为 $E=h\nu$ 的光子去照射逸出功为 E_0 的金属时，多余的能量转化为光电子的动能$\frac{1}{2}mv^2$，因而按能量守恒定律有

$$h\nu=E_0+\frac{1}{2}mv^2$$

由于直接测量光电子的速度有困难，因而实验时可以加抑制电压V_0使光电流为零，则有关系式

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

从而求出

$$eV_0=h\nu-E_0=(0.612-0.306)\times10^{-18}$$
$$=0.306\times10^{-18}\text{ 焦}$$
$$V_0=\frac{0.306\times10^{-18}\text{ 焦}}{0.1602\times10^{-18}\text{库}}=1.91\text{ 伏}$$

1-5 在光电效应实验中，用波长为2302到3130埃光谱区的汞谱线去照射铝金属的表面。设在用波长为λ(埃)的光去照射铝表面所产生的电流要求用电压V(伏)加以抑制(表1)。试计算铝的特征频率和普朗克常数。

解：按照光子理论，吸收光子后的能量守恒关系更准确地应写为

$$h\nu=E_i+E_0+eV_0 \tag{1}$$

其中 E_i 为从正常原子中移去一个电子所需的能量(电离能), E_0 为从金属中移去一个电子所需的逸出功, eV_0 为发射出的光电子动能。由于在金属格子中电子易于形成所谓电子气,即 $E_i\approx 0$,因而(1)式可写为

$$h\nu=E_0+eV_0 \tag{2}$$

若令 $h\nu_0=E_0$,则有

$$eV_0=h(\nu-\nu_0) \tag{3}$$

其中 ν_0 就是所谓临界频率。

由(2)式可见 V_0 和 ν 为线性关系,该线的斜率为 h/e, 截距为 $\frac{h}{e}\nu_0$。将表1的数据作图或用最小方根方法可以得到

$$\frac{h}{e}\times 10^{17}=1.3712\ \text{尔格·秒/e.s.u}$$

$$h\times 10^{27}=6.585\ \text{尔格·秒/分子}$$

$$\nu_0\times 10^{-15}=0.7259/\text{秒}$$

由此得到普朗克常数 $h=6.585\times10^{-27}$ 尔格·秒, 和精确值 6.625×10^{-27} 尔格·秒很接近。

表1 不同波长的抑制电压

λ(埃)	V_0(伏)
2734.77	1.879
2543.66	1.661
2967.28	1.172
3125.66	0.958

1-6 试证明在康普顿-吴有训的X-射线散射实验中,自由电子不能吸收光而只能散射光。

解: 按光子理论, X-射线可以看作能量为 $h\nu$ 和动量为 $h\nu/c$ 的光子。在和电子发生碰撞时(图1-2), 按照能量守恒和动量守

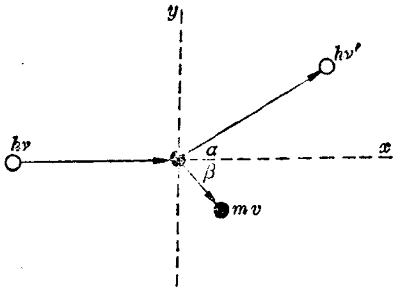

图 1-2 康普顿-吴有训效应

恒定律分别得到

$$h\nu+m_0c^2=h\nu'+m_0c^2\frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}} \tag{1}$$

$$\frac{h\nu}{c}=\frac{h\nu'}{c}\cos\alpha+\frac{m_0v}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}\cos\beta\begin{pmatrix}\text{动量的}\\ x\text{ 分量}\end{pmatrix} \tag{2}$$

$$0=\frac{h\nu'}{c}\sin\alpha-\frac{m_0v}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}\sin\beta\begin{pmatrix}\text{动量的}\\ y\text{ 分量}\end{pmatrix} \tag{3}$$

其中的 m_0 为电子的静止质量。由于电子运动的速度 v 可能相当大，故在写出上式时引用了质量 m 和运动速度 v 之间的相对论公式

$$m=\frac{m_0}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}} \tag{4}$$

完全吸收意味着 $\nu'=0$。从(2)、(3)两式利用 $\cos^2\beta+\sin^2\beta=1$ 消去 β 后得到

$$\frac{h\nu}{c}=\frac{m_0v}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}} \tag{5}$$

结合(1)和(5)式得到

$$\frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}-1=\frac{\frac{v}{c}}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}$$

解出$\frac{v}{c}=0$，从而导致$v=0$的错误结论。因而完全地被自由电子吸收是不可能的，而只能产生ν和ν'都不为零的光散射效应。

按照上述结论又如何解释在光电效应中量子整个地被吸收现象呢？这是由于电子与金属结合着，有一部分光子的能量被用于克服逸出功、而并未被电子全部吸收。

1-7 在X-射线散射实验中，用波长为λ的X-射线光子照射在由低原子量元素组成的分子上，由于其中电子引起的散射而使在散射角为α方向的X-射线波长改变到λ'，实验结果如表1所示，试计算并解释所得结果。

解： 消去上题中(1)—(3)式中的β和v就得到波长位移公式

$$\Delta\lambda=\lambda'-\lambda=\frac{2h}{m_0c}\sin^2\frac{\alpha}{2}$$

将各种基本常数代入上式后就可以求出不同角度α的波长位移，例如当$\alpha=90°$时

$$\Delta\lambda=0.048\sin^2 45°=0.0244\ 埃$$

对其它角度计算的结果也列于表1中。考虑到实验上的困难性，

表1 光电效应中的散射角

物质	散射角				
	30	45	60	75	90
	$\Delta\lambda$(埃)				
石墨	0.010	0.0013	0.015	0.021	0.027
铝	0.006	0.010	0.015	0.020	0.025
石腊	0.005	0.010	0.013	0.020	0.024
计算	0.0032	0.0071	0.021	0.018	0.024

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

可以认为这是相当符合的。

从近似的理论上看，$\Delta\lambda$ 似应与所用的实验物质无关。实际上电子在原子中的束缚愈大，则从它打出来的量子所得到的能量愈小。在石腊之类的轻原子中电子的束缚较小，而且轻原子的电子比较“自由”，比重原子得到更强的位移线，所以计算和实验更为一致。

康普顿-吴有训效应是最早证实 X-射线具有粒子性的实验之一。

1-8 在考虑到相对论效应后，试求①电子在电压为 V 伏特的高电势差下的运动速度 v，②和该电子的斗布洛衣波长 λ。

解： ① 通过 V 伏特电势差后电子具有动能

$$E_{动}=\frac{eV}{300} \tag{1}$$

而按爱因斯坦相对论其动能又可以表示为

$$E_{动}=mc^2-m_0c^2=m_0c^2\left(\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}-1\right) \tag{2}$$

因此速度可写为

$$v=c\left[1-\frac{1}{\left(\frac{eV}{300}\frac{1}{m_0c^2}+1\right)^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{3}$$

假定$\frac{eV}{300}\ll m_0c^2$，则近似地有

$$v=c\left[1-\left(\frac{eV}{300}\frac{1}{m_0c^2}+1\right)^{-2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx c\left\{1-\left[1-\frac{2eV}{300m_0c^2}+3\left(\frac{eV}{300m_0c^2}\right)^2\right]\right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx c\left(2\frac{eV}{300m_0c^2}\right)^{\frac{1}{2}}\left[1-\frac{3}{2}\left(\frac{eV}{300m_0c_2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx\sqrt{\frac{eV}{150m_0}}\left(1-\frac{3}{4}\frac{eV}{300m_0c^2}\right)$$

$$\approx\sqrt{\frac{eV}{150m_0}}\left(1-\frac{eV}{400m_0c^2}\right) \tag{4}$$

② 物质波的斗布洛衣波长

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{m_0\left(\dfrac{1}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}\right)v}=\frac{h}{m_0\left(\dfrac{1}{1-\dfrac{v^2}{2c^3}}\right)v}$$

$$=\frac{h}{m_0v\left(1+\dfrac{v^2}{2c^2}\right)}=\frac{h}{m_0v\left(1+\dfrac{E_{动}}{m_0c^2}\right)} \tag{5}$$

将(1)、(4)两式代入后

$$\lambda=\frac{h}{m_0\sqrt{\dfrac{eV}{150m_0}}\left(1+\dfrac{eV}{300m_0c^2}\right)\left(1-\dfrac{eV}{400m_0c^2}\right)}$$

$$=\sqrt{\frac{h^2}{m_0e}}\sqrt{\frac{150}{V}}\left(1-\frac{e}{1200m_0c^2}V\right)$$

$$=\frac{12.25}{\sqrt{V}}(1-0.49\times10^{-6}V)\text{埃} \tag{6}$$

应该注意，当 V 较大时（例如 $V>10^6$ 电子伏）必须应用更精确的(3)式代入(5)式进行计算。

1-9 试求①一粒重量为 0.000010 克的砂子，以 1.0 厘米/秒速度运动时的斗布洛衣波长为多少？②一个电子受 0.1 兆电子伏加速后的波长是多少？

解：①根据斗布洛衣波长公式

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

由 $h=6.63\times10^{-27}$ 尔格·秒

$=6.63\times10^{-27}$ 克·厘米^2/秒

得到

$$\lambda=\frac{6.63\times10^{-27}\ \text{克·厘米}^2/\text{秒}}{(1.0\times10^{-5}\text{克})(1.0\ \text{厘米/秒})}$$

$$=6.63\times10^{-22}\ \text{厘米}$$

这个波长是如此之小，以致无法用目前的光栅设备进行检测。

② 对于受 0.1 兆电子伏加速的电子，根据上题所导出的公式求出其斗布洛衣波长为

$$\lambda\doteq\frac{12.25}{10^3}(1-0.049)\text{埃}$$

$$=6.28\times10^{-3}\ \text{埃}$$

在用更低的加速电压时会得到波长更长的斗布洛衣波，从而可以利用晶体等作为光栅而观察到它的衍射效应。

1-10 图 1-3 为电子衍射实验的示意图，所用光栅线距 $d=7.70\times10^{-4}$ 厘米，在实验时使用的加速电压 $V=70$ 伏，其一级衍射的角度 $\alpha_1=5.30\times10^{-3}$，二级衍射角度 $\alpha_2=7.8\times10^{-3}$（指衍射线和反射线的夹角，用弧度作单位）。试求电子的波长。并将其和斗布洛衣关系式的计算值相比较。

解：按图 1-3 所示的符号及1-11题中(1)式，电子发生衍射时满足关系式

$$n\lambda=d[\cos\theta-\cos(\theta+\alpha)]$$

其中 n 为衍射级次($n=\pm1,\pm2\cdots$)，d 为光栅常数。

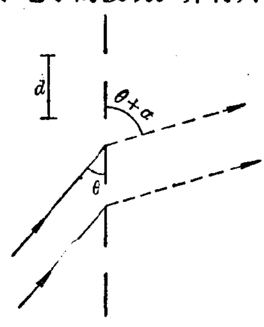

图 1-3 电子衍射实验示意图

当 θ 和 α 很小时，可以将余弦展开成级数；当略去三次项以上的项次后得到简化公式

$$n\lambda=\frac{d}{2}\alpha(\alpha+2\theta)$$

将一级衍射实验数据代入得到

$$\lambda=\frac{7.70}{2}\times10^{-4}\times5.30\times10^{-3}(5.30\times10^{-3}+2\theta)$$

将二级衍射实验数据代入得到

$$2\lambda=\frac{7.7}{2}\times10^{4}\times7.8\times10^{-3}(7.8\times10^{-3}+2\theta)$$

联立消去上二式中的 2θ 后求出

$$\lambda=1.42\text{ 埃}$$

假定斗布洛衣关系式适于电子，则电子的波长可以按 1-8 题中(6)式近似地求出

$$\lambda\approx\frac{h}{\sqrt{me}}\sqrt{\frac{150}{V}}$$

其中 V 用伏特作单位，电子的电荷 $e=0.16022\times10^{-18}$ 库仑 $=4.802\times10^{-10}$ 静电单位)。将已知数据代入后得到

$$\lambda=\left(\frac{6.625^2\times10^{-54}\times150}{9.108\times4.803\times10^{-38}\times70}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$=1.47\times10^{-8}\text{ 厘米}=1.47\text{ 埃}$$

可见实验值和理论值的差别小于 4%。电子衍射实验进一步证实了电子的波动性。

1-11 我们熟知，从光的波动性可以导出光线通过衍射光栅时必须符合光栅的衍射条件

$$n\lambda=d(\cos\phi-\cos\phi') \tag{1}$$

试从光的微粒性出发，假定光栅具有量子化性质，(即假定光栅只能接受量子化数值的动量)而导出上述衍射公式。

解：当光量子与光栅发生不改变频率而只改变方向的弹性碰撞过程时，假定以 ϕ 及 ϕ' 分别表示光量子的入射角和反射角，则

根据动量守恒定律各动量在水平方向的投影(或分量)也应守恒

即
$$\frac{h\nu}{c}\cos\phi=\frac{h\nu}{c}\cos\phi'+p \tag{2}$$

或
$$(\cos\phi-\cos\phi')=\frac{cp}{h\nu}=\frac{\lambda p}{h}$$

其中 p 为传递给光栅的动量。按题意 p 为量子化的,故可令

$$p=\frac{h}{d}n$$

其中 d 为光栅常数,n为正整数,代入上式后可得

$$n\lambda=d(\cos\phi-\cos\phi')$$

这就从微粒性角度引出了一般的光栅衍射公式。

由本题及下题均说明，从微粒性或波动性都可以解释同一物理规律。

1-12 根据多普勒效应，以速度 v 运动着的光源其辐射频率要发生改变，试根据光的微粒性概念推导出辐射的频率与光源运动速度的关系式。

解：大炮在发射炮弹时本身会受到反冲，原子在辐射光量子时也会受到反冲。设原子的初速度为 v，在与原子相对静止的参考系中被辐射的光量子频率为 ν，则根据能量守恒与动量守恒定律有

$$h\nu'=\frac{mv^2}{2}-\frac{mv'^2}{2}+h\nu \tag{1}$$

$$\overrightarrow{mv'}=\overrightarrow{mv}-\frac{\vec{h}}{\lambda'} \tag{2}$$

其中 v'为原子在辐射后的速度,ν'为在实验室参考系统中的频率。注意到动量是向量,对(2)式取平方,可按余弦定律得到

$$m^2v'^2=m^2v^2-2mv\frac{h\nu'}{c}\cos\phi+\frac{h^2\nu'^2}{c^2} \tag{3}$$

其中ϕ为向量$\vec{v}$和$\overrightarrow{\frac{1}{\lambda}}$之间的夹角。将上式和(1)式结合得到

$$h\nu'=h\nu\left(1+\frac{v}{c}\cos\phi\right)-\frac{h^2\nu'^2}{2mc^2}\approx h\nu\left(1+\frac{v}{c}\cos\phi\right) \tag{4}$$

或

$$\Delta\nu=\frac{v}{hc}\cos\phi$$

这就是通常的多普勒公式，在光谱中由此而引起的谱线变宽的效应称为多普勒变宽。

例如当初速度v为零的氢原子辐射一个频率为ν'的光子时，由(4)式得到：

$$h(\nu-\nu')=\frac{h^2}{2mc^2}\nu'^2$$

$$\frac{\Delta\nu}{\nu'^2}=\frac{h^2}{2mc^2} \tag{5}$$

1-13 对于钠蒸气发射的D黄线0.589×10^{-6}米，由实验测出其激发态平均寿命为1.6×10^{-6}秒。对于^{57}Fe，能量E_γ为14.4千电子伏的第一核激发态，其平均寿命为14.1×10^{-8}秒。试由此导出相应谱线的自然宽度。

解：激发态的平均寿命τ和谱线的自然宽度Γ之间有海森堡测不准关系式

$$\Gamma\tau=\frac{h}{2\pi} \tag{1}$$

对于波长$\lambda=0.589\times10^{-6}$米的钠原子光谱，其频率为

$$\nu=\frac{c}{\lambda}=3\times10^8/0.589\times10^{-6}=5.09\times10^{14}/\text{秒}$$

当用频率代替能量作为谱线宽度的单位时，(1)式化为

$$\Delta\nu\tau=\frac{1}{2\pi} \tag{2}$$

对应于时间的不确定性$\tau=1.6\times10^{-8}$秒，频率的不确定性为

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com