

总复习

试题包含：

一. 填空题(20分)：概念，简单计算

二. 简答题(30分)：说明、证明、推理、计算

三. 计算题(50分)：综合运用知识（以计算、推导为主）

填空题和简答题

1 波粒二象性的概念，能量、动量和频率、波长的关系及相互推算。注意区分光子和微观实物粒子。

$$E = h\nu, \quad p = h/\lambda$$

上述公式对所有粒子都成立。但是，对于光子，波长和频率之间还存在关系：

$$\lambda\nu = c$$

2 测不准原理的应用。不对易的物理量是不能同时准确测定的。 $\Delta x \Delta p_x \geq h/(4\pi)$

3 线性算符的定义、厄密算符的定义和性质
掌握如何证明一个算符是线性的或厄密的。

4 厄密算符的本征函数、本征值、本征方程的定义。
物理量一定对应一个线性厄密算符，测量这个物理量，只能得到这个物理量对应算符的本征值。

5 波函数的几率解释和归一化函数：波函数绝对值的平方表示几率密度，波函数必须满足的条件。由平方可积条件，我们知道波函数在无穷远处一定等于零。



6 态的叠加原理：定义、应用，与测量的关系

如果一个态 ψ 不是某物理量的本征态，那么它一定可以表示为这个物理量本征态的叠加：

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + c_3\phi_3 + \cdots$$

对其测量这个物理量，测得的结果可以有多种，但是每种结果出现的概率是系数绝对值的平方。测量值、平均值以及确定值之间的关系。

7 氢原子薛定谔方程解的小结，原子轨道的由来，表示电子状态的所有量子数（包括自旋）：
主量子数，角量子数，磁量子数，自旋磁量子数
这些量子数的意义和取值。





8 多电子原子薛定谔方程的写法，单电子近似的含义和作用。

9 角动量的普遍性质（角量子数和磁量子数的取值），多个角动量和的计算。

10 原子的等价电子（会列表）和不等价电子（会用角动量求和规则）组态光谱项的推算，原子的基态光谱项和光谱支项的推算。组态、光谱项、光谱支项和量子态的联系。

今天
下午7:49

编辑



龚...

11 BO近似和变方法能量最低原理的简单叙述。

12 分子轨道的概念，所用的近似（BO近似，单电子近似，LCAO-MO），成键三原则，与原子轨道的区别。

13 应用双原子分子的电子组态分析键级、顺反磁性、键长、键能。

14 杂化轨道的概念，杂化轨道的构成（注意与分子轨道区别）及各杂化轨道满足的关系式（正交、归一、键角等），某些分子杂化轨道类型的判断。



15 价电子对互斥理论及应用。

16 离域 π 键，共轭效应的形成条件和表示方法。

17 休克尔分子轨道采用的近似（除了采用分子轨道理论所采用的近似外）：库仑积分为常数，相邻原子交换积分为常数，其余为零，重叠积分为零。能级，离域能的概念，轨道的填充。分子图中各物理量的计算及应用。





计算题

- 1 波函数的归一化，求粒子出现在某处的几率。请注意区分物理问题是三维的还是一维的，搞清楚球坐标中积分式的写法。
- 2 完整求解薛定谔方程：一维无限深方势阱。列出方程和边界条件，并求解。
- 3 角动量 z 轴分量（及其平方）算符的本征方程的求解。周期性边界条件的应用。
- 4 节面和径向分布函数相关的计算：根据波函数写出节面方程和径向分布函数。





5 物理量的计算：如果系统处于某物理量的本征态，那么物理量等于本征值，求出本征值，如果不是，那么求平均。态的叠加原理的应用，它们与测量之间的关系。

6 变分法的简单应用：用变分法计算近似波函数。

7 杂化轨道理论的计算：等性和不等性，要求会计算杂化轨道表达式，会计算键之间的夹角或成分。

8 休克尔分子轨道理论的计算：久期行列式（系数行列式）、能级、离域能、波函数。

