1：对黑体辐射解释的理论中，瑞利金斯的解释在什么频率与实验相符？在什么频率与实验不符？维恩的解释在什么频率与实验相符？在什么频率与实验不符？

低频相符高频不符，高频相符低频不符。

2：对黑体辐射解释的普朗克的解释与瑞利金斯的解释的不同之处？

普朗克认为：可以将黑体看作一些带电谐振子，谐振子只能处于一系列不连续的状态，它的能量之能是 h v 的整数倍，也只能吸收或放出 h v 的整数倍的能量。存疑

3：爱因斯坦对光电效应解释中，对光子有 E=hv，和相对论导出的 E=cP，可以推导出动量 P=?

Hv/c

4：根据波尔的氢原子理论，计算赖曼线系主线的波长？（从第二个能级跃迁到第一个能级，m=1，n=2，跃迁发出的波长）

$1/\lambda=R(1/m^2-1/n^2)$

1：请回答德布罗意假设？

一切实物粒子都具有波粒二象性

2：请根据玻尔的理论计算氢原子基态能量，对应此能量的德布罗意波长？对应基态能量的轨道半径为 0.529 埃（是否可以计算出半径？），比较算出的德布罗意波长与轨道半径大小，可以看出什么问题？

4：波函数

$\Phi(x,y,z,t)=C\Psi(x,y,z,t)$

请将波函数归一化，并求出归一化常数 C=?

$$C=\frac{1}{\int_\infty |\Phi|^2 d\tau}.$$

1：何为自由粒子？，自由粒子的波函数？

自由粒子即为没有外场影响，有确定的能量 E 和动量 P 的粒子，有德布罗意关系和一定波长单色平面波表达式可推导：自由粒子波函数为 Ae^((i/h)(p*r-Et))*

2：波函数的标准条件？

波函数标准条件为：单值，有限，连续（满足薛定谔方程）

3：量子力学态迭加原理，迭加是波函数的迭加还是几率的迭加？

是波函数的线性叠加。

4：薛定谔方程：

薛定谔方程是描述非相对论性微观粒子的波动方程。

1：几率流密度？

$$\bar{J}=\frac{i\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)$$

2：几率守恒？

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla \bullet \vec{J} = 0$$

3：什么叫定态？定态薛定谔方程？

定态即为粒子所在的场不受时间影响，波函数与 t 无关，例如氢原子的核外电子。

定态薛定谔方程为 $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi + V(r)\psi$

4：定态的性质？

在定态时，几率分布和能量与时间无关。

1：一维无限深势阱能量？能级间隔？

答：能量

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8\mu a^2}$$

能级间隔

$$\Delta E_n = E_n - E_{n-1} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2} - \frac{(n-1)^2 \pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2}(2n-1)$$

$n >> 1$时，$\Delta E_n \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2} 2n$ 能级间隔与n成正比

2：一维无限深势阱波函数？基态的几率密度？

答：一维无限深势阱波函数

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi}{2a}(x+a) & |x| < a \\ 0 & |x| \geq a \end{cases}$$

基态时

$$n=1,\quad \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\frac{\pi}{2a}(x+a),\quad |\psi_1(x)|^2 = \frac{1}{a}\sin^2 \frac{\pi}{2a}(x+a)$$

3：一维线性谐振子能量？相邻的能级间隔？

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \qquad (n = 0, 1, 2 \cdots)$$

相邻的能级间隔

$$\Delta E = E_n - E_{n-1} = \hbar\omega$$

4：一维线性谐振子波函数？写出基态、第一激发态的波函数？

一维线性谐振子波函数

$$\psi_n = N_n H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

其中，$N_n = (\frac{\alpha}{2^n n! \pi^{\frac{1}{2}}})^{\frac{1}{2}}$ $H_n(\xi)$ 为n阶厄米多项式

给出n的值可以得到具体的波函数

基态的波函数

$$n=0,\quad \psi_0(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}$$

第一激发态的波函数

$$n=1,\quad \psi_1(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}2\alpha x e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}$$

1：经典物理里的势垒散射，当入射粒子能量小于势垒能量（E<U0），透射系数和反射系数是多少？当入射粒子能量大于势垒能量（E>U0），透射系数和反射系数是多少？

经典物理中

$$E<U_0,\quad D=0,\qquad R=1$$

全部反射，没有透射

$$E>U_0,\quad D=1,\qquad R=0$$

全部透射，没有反射

2：量子力学里的势垒散射，当入射粒子能量小于势垒能量（E<U0），透射系数和反射系数是多少？当入射粒子能量大于势垒能量（E>U0），透射系数和反射系数是多少？

量子力学中

$$E<U_0,\quad 0<D<1,\qquad 0<R<1$$

部分透射，部分反射

$$E>U_0,\quad 0<D<1,\qquad 0<R<1$$

部分透射，部分反射

3：隧道效应？

粒子在能量E 小于势垒高度时仍能贯穿势垒

1：请写出常用的量子力学算符，动能算符，角动量算符，能量算符（哈密顿算符）

动能算符 $\hat{T}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$

$f(r,p) \to \hat{F}($

角动量算符 $\hat{L}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}=\vec{r}\times(-i\hbar\nabla)$

能量算符（哈密顿算符）

$$\hat{H}=\hat{T}+\hat{U}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+U(r,t)$$

2：举例说明何为本征方程？本征值？本征函数？

如果一算符 $\hat{A}$ 作用于函数 ψ，所得结果等于一个常数 λ 与 ψ 的乘积，即

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi$$

则：

λ 称为算符 $\hat{A}$ 的本征值

ψ 称为算符 $\hat{A}$ 的本征函数（本征态）

上式称为算符 $\hat{A}$ 的本征方程

例如，定态薛定谔方程 $\hat{H}\psi = E\psi$

3：厄米算符的定义？

定义：如果对于两任意波函数 ψ 和 ϕ，算符 $\hat{F}$ 满足下列等式

$$\int \psi^* \hat{F}\phi dx = \int (\hat{F}\psi)^* \phi dx$$

则称 $\hat{F}$ 为厄米算符。式中x代表所有的变量，积分范围是所有变量变化的整个区域。

量子力学中，表示力学量的算符是厄米算符。

4：何为算符对易？

如果两个算符 $\hat{A},\hat{B}$ 作用于同一个任意波函数 ψ，所得结果与两个算符作用的顺序无关。即

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi$$

则称算符 $\hat{A},\hat{B}$ 对易，记为 $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

如 $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$，称 $\hat{A},\hat{B}$ 不对易

1：动量几率分布 c(p ,t)的意义？

$c(\vec{p},t)$ 是动量几率分布的意义

粒子动量在 p_x 到 $p_x + dp_x$

p_y 到 $p_y + dp_y$

p_z 到 $p_z + dp_z$

区间的几率是 $dW(\vec{p},t) = |c(\vec{p},t)|^2 dp_x dp_y dp_z$

2：已知粒子位置的波函数ψ（r，t），请写出 c(p ,t)的计算公式

$$c(\vec{p},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int\int\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(\vec{r},t)e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\bullet\vec{r}-Et)}dxdydz$$

注意一维时

$$c(\vec{p},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\int\psi(\vec{r},t)e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}x-Et)}dx$$

3：写出动量 p 的平均值公式，动量函数 f（p）的平均值公式

$$\overline{p}=\int p|c(\vec{p},t)|^2dp_xdp_ydp_z$$

$$\overline{F(\vec{p})}=\int F(\vec{p})|c(\vec{p},t)|^2dp_xdp_ydp_z$$

4：写出一维动量算符的本征方程和本征函数？

$$\hat{p}_x\psi=p_x\psi$$

$$\psi=Ae^{\frac{i}{\hbar}p_xx}$$

1：经典力学中角动量表达式，Lx=？Ly=？Lz=？

$$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$$

$$L_x=yp_z-zp_y$$
$$L_y=zp_x-xp_z$$
$$L_z=xp_y-yp_x$$

2：量子力学算符 L 及直角坐标中三个分量的表达式

$$\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times(-i\hbar\nabla)$$
$$\hat{L}_x=\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y=\frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})$$
$$\hat{L}_y=\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z=\frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})$$
$$\hat{L}_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})$$

3：L^2 及 Lz 的本征方程

$$\hat{L}^2Y(\theta,\varphi)=L^2Y(\theta,\varphi)$$
$$\hat{L}_zY(\theta,\varphi)=L_zY(\theta,\varphi)$$

1：氢原子中电子的定态薛定谔方程

$$[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+(-\frac{Ze_s^2}{r})]\psi=E\psi$$

2：出氢原子核外电子波函数径向部分和角向部分函数满足的方程

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}[r^2\frac{dR(r)}{dr}]+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E+\frac{Ze_s^2}{r})=\lambda$$

$$-[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}]=\lambda Y(\theta,\varphi)$$

3：氢原子电子波函数中三个量子数 n，l，m 的取值规则

主量子数 $n=1,2,3,\cdots,$

角量子数 $l=0,1,\cdots,n-1,$

磁量子数 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots\pm l$

4：写 n=1,l=0,m=0 时的氢原子电子基态波函数Ψ100$_{100}$=?

n=2,l=1.m=1 时的氢原子电子波函数Ψ211=?

$$R_{10}(r)=(\frac{1}{a_0})^{\frac{3}{2}}2\exp^{(-\frac{r}{a_0})} \qquad Y_{0,0}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\psi_{100}(r)=R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$R_{21}(r)=(\frac{1}{2a_0})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0\sqrt{3}}\exp^{-\frac{r}{2a_0}} \qquad Y_{1,1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin e^{i\phi}$$

$$\psi_{211}=\underline{R_{21}(r)}Y_{11}(\theta,\varphi)=(\frac{1}{2a_0})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0\sqrt{3}}\exp^{-\frac{r}{2a_0}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin e^{i\varphi}$$

1： 何为简并？主量子数 n=3，l 和 m 的可能取值？写出所有可能的氢原子中电子波函数，简并度是多少？

简并：对应着某一能级E_n，有多种状态（波函数）存在。

当n＝3， $E_3=-\frac{\mu e_s^4}{18\hbar^2}$

而波函数有九种

$\psi_{300},\psi_{311},\psi_{310},\psi_{31-1},\psi_{322},\psi_{321},\psi_{320},\psi_{32-1},\psi_{32-2}$

2： 厄米算符本征函数的正交归一性？

厄米算符的属于不同本征值的本征函数是相互正交的，属于相同本征值的本征函数是归一化的。

$$\int \phi_k^* \phi_l d\tau = \delta_{kl}$$

其中 $\delta_{kl} = \begin{cases} 1, & 当 k = l \\ 0, & 当 k \neq l \end{cases}$

3： 厄米算符本征函数的完全性？，表示完全性的公式中，其中 cn 计算公式，cn 的物理意义？

任意波函数 $\psi(x)$ 可用任何一个力学量算符 $\hat{F}$ 的本征函数 $\phi_n(x)$ 的线性迭加表示，即

$$\psi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x)$$

$$c_n = \int \phi_n^*(x) \psi(x) dx$$

c_n 的绝对值的平方 $|c_n|^2$ 表示体系处于态 $\phi_n(x)$ 的几率。

4： 在Ψ状态中，力学量 F 的平均值计算公式？

$$\overline{F} = \int \psi^*(x) \hat{F} \psi(x) dx$$

1：一个力学量何时有确定值？

答：力学量处于本征态时有确定值

2：在什么条件下，两力学量同时有确定值？

如果力学量F和G在某一状态下同时有确定值，这是指描写此状态的波函数就应该是算符 $\hat{G}$ 的共同本征函数。

逆定理：如果两个算符对易，则这两个算符有组成完全系的共同本征函数。

3：测不准关系？

算符 $\hat{F}, \hat{G}$ 的对易关系为

$$\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = i\hat{k}$$

算符 $\hat{F}, \hat{G}$ 之间有测不准关系

$$\overline{(\Delta F)^2}\,\overline{(\Delta F)^2} \geq \frac{\overline{k^2}}{4}$$

1：受到微扰后能量的表达式（修正到二级）

受到微扰后能量表达式

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots = E_n^{(0)} + H'_{nn} + {\sum_m}' \frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \cdots$$

$$H'_{mn} = \int \psi_m^{(0)*} \hat{H}' \psi_n^{(0)} \cdot d\tau$$

$$H'_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{H}' \psi_n^{(0)} \cdot d\tau$$

2：受到微扰后波函数的表达式（修正到一级）

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \cdots = \psi_n^{(0)} + {\sum_m}' \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + \cdots$$

$$\psi_n^{(1)} = {\sum_m}' \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)},$$

$$H'_{mn} = \int \psi_m^{(0)*} \hat{H}' \psi_n^{(0)} \cdot d\tau$$

1：量子跃迁几率？

量子跃迁几率：体系受微扰后，从一个量子态跃迁到另一个量子态的几率。

LED

2：体系在微扰作用下，由初态是Φk 跃迁到终态是Φm 态的几率。

体系在微扰作用下，由初态 Φ_k 跃迁到终态 Φ_m 的几率为

$$W_{k\to m} = |a_m(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t \hat{H}'_{mk} e^{i\omega_{mk}t'} dt'\right|^2$$

1：电子自旋是多大？

2：电子自旋算符的对易关系

3：全同粒子？

4：费米子？玻色子？波函数特点？

5：泡利不相容原理？

不能有 2 个及以上的费米子处于同一状态