量子力学——复习

量子力学—— 研究微观粒子运动状态变化规律的一门学科。

1. 如何描述微观粒子的运动状态？
2. 怎么得到波函数ψ？

—— 第一章 第三章

3. 知道波函数ψ，怎么得到力学量？ —— 第二章

4. 复杂的 $\hat{H}$，怎么求解波函数ψ？ —— 第四章

第一章

1. 主要知识点：

（1）微观粒子的波粒二象性、德布罗意假说及关系；

粒子性

- 指它与物质相互作用的“颗粒性”或“整体性”。
- 但不是经典的粒子！因为微观粒子没有确定的轨道，应抛弃“轨道”的概念！

波动性

- 指它在空间传播有“可叠加性”，有“干涉”、“衍射”、“偏振”等现象。
- 但不是经典的波！因为它没有某种实际物理量（如质点的位移、电场、磁场等）的波动。
- 波动性是单个微观粒子的属性。

第一章

1. 主要知识点：

（1）微观粒子的波粒二象性、德布罗意假说及关系；

德布罗意假说：一切实物粒子都具有波动性。

$$E = h\nu = \hbar\omega \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

（2）状态波函数：统计解释、基本性质、态叠加原理；

统计解释：波函数在空间某一点的强度（$|\Psi|^2$）和在该点找到粒子的几率成正比。

基本性质：一般而言，波函数必须连续，单值，有界以及平方可积

态叠加原理：若波函数ψ_1是体系的一个可能状态，ψ_2是另一个可能状态，则其线性叠加$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$也是同样条件下体系的一个可能状态。其中$C_1$、$C_2$为任意复常数。

（3）薛定谔方程和定态问题：什么是定态？其特征？定态薛定谔方程、定态问题的解

定态：当势能与时间无关时，能量具有确定值，这种状态称为定态。

特征：几率密度、几率流密度不随时间变化。

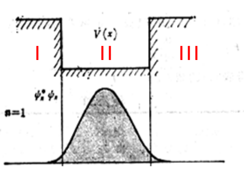
定态问题的解：

$$\psi(r,t) = \phi(r)e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \qquad \hat{H}\phi(r) = E\phi(r)$$

$$\psi(r,t) = \sum_n c_n\phi_n(r)e^{-\frac{iE_n}{\hbar}t}$$

（4）束缚态问题：一维无限深势阱（能求解，掌握波函数、能量表达式）、谐振子（掌握能量表达式及特征，和经典谐振子的区别）、半无限深势阱

一维方势阱



无限深势阱

$$\psi_n = \begin{cases} B\sin\dfrac{n\pi x}{a} & 0 < x < a \\ 0 & x \le 0 \text{或} x \ge a \end{cases}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha^2 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$$

（4）束缚态问题：一维无限深势阱（能求解，掌握波函数、能量表达式）、谐振子（掌握能量表达式及特征，和经典谐振子的区别）、半无限深势阱

谐振子：

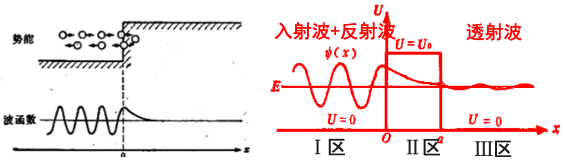
$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), n = 0,1,2\ldots$$

与经典谐振子的比较：

- 能量：零点能、分立能级
- 几率分布：几率分布呈波动、可出现在经典不允许区

（5）散射问题：能求解，并计算入射、反射几率

阶梯势、方势垒



分清楚：入射波、反射波、透射波

隧道效应：粒子穿过比它能量高的势垒

（6）简并：简并的概念，能计算简并度

简并：同一个本征值，对应了多个不同的本征态，称为简并。简并本征态的个数称为简并度。

三维无限深势阱：$E_{n_1n_2n_3}=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2\mu}\left(\dfrac{n_1^2}{a^2}+\dfrac{n_2^2}{b^2}+\dfrac{n_3^2}{c^2}\right)\to\psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z)$

$\hat{L}^2$ 本征态：$L^2=l(l+1)\hbar^2\to\psi_{lm}(\theta,\varphi)$

氢原子：$E_n\to\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$

2. 主要计算题型：

（1）波函数的归一化；

Ψ →状态

|Ψ|² → 几率密度

|Ψ|²dτ → 体积dτ内的几率

$$1=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2d\tau$$

第一章 课后习题5;

$\psi(x)=Ax(a-x),0<x<a$

第二章课后习题6（1）。

$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{1}{2}}\phi_0(x)+\sqrt{\frac{1}{3}}\phi_1(x)+c_3\phi_3(x)$

2. 主要计算题型：

（2）已知波函数，在何处找到粒子的几率最大？

在x处单位体积内找到粒子的几率为：$w(x)=|\psi|^2$

在x处找到粒子的几率出现极值满足的条件：$\dfrac{dw(x)}{dx}=0$

注意：需要判断其解为极大值还是极小值。

例：第一章 课后习题6;
第三章 课后习题3（3），习题5。

2. 主要计算题型：

（3）定态问题的求解（束缚态和散射问题）

$$\hat{H}\phi(r)=E\phi(r)$$

例：

束缚态：一维无限深势阱；第一章课后习题7、8；半无限深

散射：阶梯势、方势垒、第一章课后习题11

第二章

1. 主要知识点：

（1）力学量如何用算符表示，常见力学量的算符表示？

$$\hat{F}=F(r,\vec{p})=F(r,-i\hbar\nabla)$$

（2）力学量算符是线性厄密算符：什么是厄密算符？厄密算符本征值和本征函数的特征？

厄密算符 $\hat{F}$，对任意ψ、φ，满足

$(\psi,\hat{F}\phi)=(\hat{F}\psi,\phi)$，即$\int\psi^*\hat{F}\phi d\tau=\int(\hat{F}\psi)^*\phi d\tau$

厄密算符本征值为实数，
本征函数组成正交归一完备系。

1. 主要知识点：

（3）本征值问题：能求解本征值问题，掌握动量、Lz、L^2算符的本征值和本征函数

力学量	算符	本征值	本征函数
L_z	$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$	$m\hbar$ $(m = 0, \pm1, \pm2.....)$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$
L^2	$\hat{L}^2$	$l(l+1)\hbar^2$ $l = 0,1,2...$	$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ $(m = 0, \pm1, \pm2.....\pm l)$
$\vec{p}$	$\hat{p} = -i\hbar\nabla$	$\vec{p}$	$(2\pi\hbar)^{-3/2}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$

1. 主要知识点：

（4）力学量的测量值问题：体系处于本征态和一般态时力学量的取值，力学量取任意可能取值的几率，力学量的平均值问题

已知状态波函数ψ，力学量F=?

ψ：

- $\hat{F}$ 的本征态　$\hat{F}\psi = F_n\psi$ ⟹ $F = F_n$
- 一般态　$\hat{F}\phi_m = F_m\phi_m$，$\psi = \sum_m c_m\phi_m$ ⟹ F不确定 $\overline{F} = \sum_m F_m|c_m|^2 = (\psi, \hat{F}\psi)$

$|c_m|^2$ 代表体系处于 ϕ_m 态的几率。

1. 主要知识点：

（5）两个力学量的问题：能否同时精确测量？如何判断？若能，需要满足什么条件？若不能，服从测不准关系？测不准关系及意义？

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \begin{cases} 0 & \text{对易，可同时准确测量} \\ i\hat{C} & \text{不可对易，不能同时准确测量，} \end{cases}$$

满足测不准关系　$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{\overline{C}}{2}$

测不准关系反映了把经典概念应用于微观世界所受到的限制，是微观粒子波动性的反映，是微观粒子运动服从统计规律性的结果,比测不准关系更精确的测量是做不到的。

1. 主要知识点：

（6）对易关系：常见力学量的对易关系（动量、坐标各分量的对易关系?角动量各分量、L^2的对易关系？）

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta] = 0, \quad (\alpha, \beta = 1,2,3)$$

$$[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0, \quad (\alpha, \beta = 1,2,3)$$

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}, \quad (\alpha, \beta = 1,2,3)$$

$$\hat{L} \times \hat{L} = i\hbar\hat{L}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_{x,y,z}] = 0$$

2. 主要计算题型：

（1）对易子计算

例：第二章课后习题**3**

（2）本征值问题计算

$$\hat{F}\phi = \lambda\phi$$

例：教材第二章动量、Lz，L^2本征值问题求解、第一章能量本征值问题求解，第二章课后习题**1**

2. 主要计算题型：

（3）力学量的可能取值？各个可能取值的几率？力学量的平均值？（能量、动量、角动量）

$$\psi(r) = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + ... + c_n\phi_n + ...$$

	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_n
处于 ϕ_i 的几率	$\lvert c_1\rvert^2$	$\lvert c_2\rvert^2$	$\lvert c_n\rvert^2$
F取值	λ_1	λ_2	λ_n
$F = \lambda_i$ 的几率	$\lvert c_1\rvert^2$	$\lvert c_2\rvert^2$	$\lvert c_n\rvert^2$

$$\overline{F} = \sum_n \lambda_n|c_n|^2 = (\psi, \hat{F}\psi) = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\hat{F}\psi)d\tau$$

第二章 教材例**2.3.1, 2.3.3**；第二章 课后习题**6**、**7**、**8**、**9**、**10**。第三章 课后习题**2,3**。

第三章

1. 主要知识点：

（1）中心力场：什么是中心力场？特征？
（2）氢原子能级及其特征
（3）氢原子中，电子几率分布（径向、空间角）
（4）电流分布特征，磁矩特征
（5）电子自旋：自旋角动量、自旋磁矩

	轨道	自旋
角动量	$L=\sqrt{l(l+1)}\hbar$ 角量子数 l=0,1,2…	$S=\sqrt{s(s+1)}\hbar$ 自旋量子数 s=1/2
角动量z分量	$L_z=m\hbar$ 磁量子数 m=0, ±1, … ±l	$S_z=m_s\hbar$ 自旋磁量子数 m_s=±1/2
磁矩	$M_L=-m\mu_B$	$M_S=-2m_s\mu_B=\pm\mu_B$

第四章

1. 主要知识点：

（1）定态微扰：非简并微扰、简并微扰特点。

（2）什么是斯塔克效应，如何利用微扰理论解释；

（3）什么是全同粒子？其基本特征是?

（4）什么是费米子、玻色子及其波函数特征?

（5）什么是泡利不相容原理？是对什么粒子的限制？