



苏州大学
SOOCHOW UNIVERSITY

樊建芬

量子化学基础

期中复习

《量子化学基础》

期中复习提纲

樊建芬

苏州大学

2025.10





绪论

VBT及MOT核心思想

定域分子轨道，离域分子轨道

两大流派：VBT和MOT

了解量子化学的发展概况、现状及其在化学研究中的应用

六个不同的方面



第1章 简单体系的薛定谔方程及其解

1. 波函数 Ψ 性质、归一化、共轭

几率密度 $|\Psi|^2$ 运动规律，与 Ψ 相关的几个重要物理量

2. 定态薛定谔方程（单粒子、多粒子体系）

原子单位制

3. 一维谐振子的薛定谔方程及其解

能级公式（量子数）、零点能、

波形特征、节面、几率密度分布（节点、最可几位置）

→ 对双分子分子的应用（跃迁选律）

→ 二维、三维

简并态、简并度、波函数的奇偶性等



第2章 算符代数和量子力学基础

1. 算符及其运算规则（如共轭），**引入算符的必要性**
2. 本征方程及其量子力学意义
3. 线性厄米算符，算符书写规则
4. 厄米算符本征值和本征函数的性质
5. 力学量测量（有确定值、无确定值时求**平均值**）
6. 括号标记法（左矢、右矢）
7. 量子力学基本假设
8. **态叠加原理**



第3章 对易子

1. 算符对易性、对易子运算规则

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

2. 算符对易性的量子力学意义

3. 算符对易时的取值分析（四种情况）

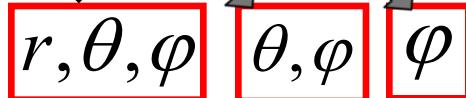
4. 力学量同时有确定值的条件



第4章 角动量

1. 角动量的定义，分量算符和平方算符对易关系、物理意义、取值分析

2. \hat{H} 、 \hat{M}_l^2 、 \hat{M}_{l_z} 的本征方程及其物理意义



3. 理解阶梯算符的作用

例：
$$\hat{M}_{l_z}(\hat{M}_+ \Psi_{3d_{+1}}) = 2\hbar (\hat{M}_+ \Psi_{3d_{+1}})$$

$$\hat{M}_l^2(\hat{M}_+ \Psi_{4d_{z2}}) = 6\hbar^2 (\hat{M}_+ \Psi_{4d_{z2}})$$



第5章 氢原子及类氢离子

- 球极坐标与直角坐标 → 实轨道的角度波函数，如 $3d_{x^2-y^2}$, $4d_{xy}$
- 氢原子和类氢离子体系 $\hat{H}, \hat{M}_l^2, \hat{M}_{lz}$ 间的对易性，物理意义
- 氢原子和类氢离子的定态薛定谔方程及其解

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\phi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

这些函数的特征 \longleftrightarrow 对应的原子轨道

$$E_n = -13.6Z^2 / n^2 \text{ (eV)}$$

$$|\vec{M}_l| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

$$M_{lz} = m\hbar$$

- 实波函数与复波函数，如： $\frac{1}{\sqrt{2}}(d_{+2} + d_{-2}) \sim d_{x^2-y^2}$
态叠加原理



苏州大学

SOOCHOW UNIVERSITY

樊建芬

量子化学基础

期中复习

第6章 量子力学中的近似方法 — 变分法和微扰法

1. 变分原理、变分过程，变分法分类
2. 线性变分法，库伦积分、交换积分、重叠积分
久期方程、久期行列式

Good luck to you!

