



蘇州大學

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

**VB及MOT核心思想**

定域分子轨道，离域分子轨道

两大流派：VB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 $\Psi$ 性质、归一化、共轭

几率密度 $|\Psi|^2$ 运动规律，与 $\Psi$ 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

$$[x, p_x] = i\hbar$$

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

$$\begin{array}{ccc} \hat{H} & \hat{M}_l^2 & \hat{M}_{lz} \\ \downarrow & \searrow & \searrow \\ r, \theta, \varphi & \theta, \varphi & \varphi \end{array}$$

3. 理解阶梯算符的作用

例：

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

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



## 第5章 氢原子及类氢离子

1. 球极坐标与直角坐标  $\longrightarrow$  实轨道的角度波函数, 如  $3d_{x^2-y^2}$ ,  $4d_{xy}$

2. 氢原子和类氢离子体系  $\hat{H}$ ,  $\hat{M}_l^2$ ,  $\hat{M}_{l_z}$  间的对易性, 物理意义

3. 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

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

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

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

4. 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



蘇州大學

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!

