




Summary of Quantum Mechanics



量子力学基本假定

Fundamental Principles of Quantum Mechanics

Principle I 波函数假设

微观粒子的状态可以被一个波函数完全描述，从这个波函数可以得出体系的所有性质。波函数一般满足连续性、有限性和单值性三个条件。

说明：波函数一般是粒子坐标和时间的复函数，波函数的模方代表粒子空间分布的概率密度。

Principle II 力学量算符假定

力学量用线性 Hermite 算符表示。如果在经典力学中有相应的力学量，则在量子力学中表示这个力学量的算符，由经典表示式中将动量 \vec{p} 换为算符 $-i\hbar\nabla$ 得出。表示力学量的算符有组成完全系的本征函数。

Principle III Schrödinger 方程

能量算符的本征方程，是决定体系能量算符的本征值和本征函数的方程，是量子力学中一个基本方程。

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

Principle IV 本征值概率假定

将体系的状态波函数 Ψ 用算符 \hat{F} 的本征函数 Φ 展开
($\hat{F}\Phi_n = \lambda_n\Phi_n, \hat{F}\Phi_\lambda = \lambda\Phi_\lambda$):

$$\Psi = \sum_n c_n \Phi_n + \int c_\lambda \Phi_\lambda d\lambda$$

则在 Ψ 态中测量力学量 F 得到结果为 λ_n 的几率是 $|c_n|^2$, 测量结果在 $\lambda \rightarrow \lambda + d\lambda$ 范围内的几率是 $|c_\lambda|^2 d\lambda$ 。

Principle V 全同性原理

在全同粒子组成的体系中，两全同粒子相互调换不改变体系的状态。

全同粒子是指内禀性质，例如静质量、电荷、自旋等完全相同的一类微观粒子。例如所有的电子都是全同粒子。

第一章 绪论

1、经典物理的困难

黑体辐射，光电效应，原子光谱线系

2、旧量子论

<1>普朗克能量量子论

<2>爱因斯坦对光电效应的解释；光的波粒二象性；
光电效应的规律；

$$\frac{1}{2} \mu v_m^2 = h\nu - W_0$$

光子能量动量关系：

$$E = h\nu = \hbar \omega$$

$$\vec{P} = \frac{h}{\lambda} \vec{n} = \hbar \vec{k}$$

<3>玻尔的原子理论

量子化条件： $\oint pdq = nh$

定态的假设、频率条件： $\nu = \frac{|E_n - E_m|}{h}$

3、微观粒子的波粒二象性, 德布罗意关系

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\vec{P} = \frac{h}{\lambda} \vec{n} = \hbar \vec{k}$$

戴维孙, 革末等人的电子衍射实验验证了德布罗意关系。

4、量子力学的建立

物质波——>薛定谔方程——>非相对论量子力学
——>相对论量子力学——>量子场论

第二章 波函数和薛定谔方程

1. 量子力学中用波函数描写微观体系的状态。

2. 波函数统计解释：

若粒子的状态用 $\psi(\vec{r}, t)$ 描写, $\psi^* \psi d\tau = |\psi|^2 d\tau$ 表示在 t 时刻, 空间 \vec{r} 处 $d\tau$ 体积元内找到粒子的几率 (设 ψ 是归一化的)。

3. 态叠加原理：

设 $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ 是体系的可能状态, 那么, 这些态的线性叠加:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n$$

也是体系的一个可能状态。

若体系处于 $\psi = \sum_n c_n \psi_n$ 态，我们讲体系部分处于 $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$ 态。

4. 波函数随时间的变化规律由薛定谔方程给出：

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + V(\vec{r}, t) \psi$$

当势场 $V(\vec{r})$ 不显含 t 时，其解是定态解：

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t / \hbar}, \quad \psi_n(\vec{r})$$

满足定态薛定谔方程： $H \psi_n = E_n \psi_n$

其中

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right]$$

定态薛定谔方程即能量算符的本征方程。

5. 波函数的归一化条件:

$$\int_{(\text{全})} |\psi|^2 d\tau = 1$$

相对几率分布: $\psi(\vec{r}) \sim c\psi(\vec{r})$

波函数存在常数因子不定性; 相位因子不定性。

6. 波函数标准条件: 波函数一般应满足三个基本条件: 连续性, 有限性, 单值性。

7. 几率流密度

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

与几率密度

$$\rho = \psi^* \psi$$

满足连续性方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

8. 一维无限深方势阱

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \leq 0 \text{ 或 } x \geq a \end{cases}$$

本征值 $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$

本征函数 $\psi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, & 0 < x < a \\ 0, & x \leq 0 \text{ 或 } x \geq a \end{cases}$

若 $V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ \infty, & |x| \geq a \end{cases}$

则本征值 $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2}$

本征函数 $\psi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \sin \frac{n\pi}{2a} (x+a), & n = 1, 2, 3, \dots \quad |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases}$

9. 一维谐振子

$$V = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2$$

本征值 $E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$, $n = 0, 1, 2, \dots$

本征函数

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2} H_n(\alpha x)$$

$$N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu \omega}{\hbar}}$$

10、势垒贯穿

隧道效应： 粒子在能量 E 小于势垒高度时仍能贯穿势垒的现象，称为隧道效应。

第三章 量子力学中的力学量

1. 量子力学中的力学量用线性厄米算符表示，并且要求该算符的本征函数构成完备系。

2. 厄米算符A的定义：
$$\int \psi^* A \phi d\vec{r} = \int (A \psi)^* \phi d\vec{r}$$

厄米算符的本征值是实数。厄米算符的属于不同本征值的本征函数一定正交。

力学量算符的本征函数系满足正交、归一、完备等条件。

3. 力学量的测量值:

在力学量 F 的本征态中测量 F , 有确定值, 即它的本征值;

在非本征态 ψ 中测量 F , 可能值是 F 的本征值。将 $\psi(x)$ 用算符 F 的正交归一的本征函数 $\phi_n(x)$ 展开:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x) + \int c_\lambda \phi_\lambda(x) dx$$

则在 $\psi(x)$ 态中测量力学量 F 得到结果为 λ_n 的几率为 $|c_n|^2$, 得到结果在 $\lambda \rightarrow \lambda + d\lambda$ 范围内的几率为: $|c_\lambda|^2 d\lambda$ 。

$$\hat{F} f_n(x) = p_n f_n(x)$$

$$\hat{F} f_\lambda(x) = q_\lambda f_\lambda(x)$$

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

$$c_\lambda = \int \phi_\lambda^*(x) \psi(x) dx$$

力学量的平均值是:

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

或

$$\bar{F} = \sum_n \lambda_n |c_n|^2 + \int \lambda |c_\lambda|^2 d\lambda$$

4. 连续谱的本征函数可以归一化为 δ 函数。

5. 简并：属于算符的某一个本征值的线性无关的本征函数有若干个，这种现象称为简并。

简并度： \hat{F} 算符的属于本征值 λ_n 的线性无关的本征函数有 f 个，我们称 \hat{F} 的第 n 个本征值 λ_n 是 f 度简并的。

6. 动量算符的本征函数(即自由粒子波函数)

$$\psi_{\vec{p}} = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

正交归一性

$$\int \psi_{\vec{p}'}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) d\tau = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

7. 角动量

z 分量 $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

本征函数 $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

L_z 的本征值 $L'_z = m\hbar$

8. (L^2, L_z) 有共同的本征函数—球谐函数: $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m N_{lm} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)!}{4\pi(l+|m|)!}}, \quad (l = 0, 1, 2, \dots; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

9. 中心力场中，定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] \psi = E \psi$$

选 (H, L^2, L_z) 为体系的守恒量完全集，其共同的本征函数为

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

10. 氢原子

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$E = E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{2a} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

类氢离子 $E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2}$

$$a = \hbar^2 / \mu e^2 \text{ (玻尔半径)}$$

11. 对易式定义: $[A, B] \equiv AB - BA$

12. 对易式满足的基本恒等式:

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$$

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$$

(**Jacobi**恒等式)

13. 一些重要的对易关系:

$$[x_\alpha, x_\beta] = 0, \quad [p_\alpha, p_\beta] = 0, \quad [x_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$$

$$\begin{bmatrix} x_\beta \\ L_\alpha, p_\beta \\ L_\beta \end{bmatrix} = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar \begin{Bmatrix} x_\gamma \\ p_\gamma \\ L_\gamma \end{Bmatrix}$$

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [s_x, s_y] = i\hbar s_z, \quad [J_x, J_y] = i\hbar J_z$$

$$[L^2, L_\alpha] = 0, \quad [s^2, s_\alpha] = 0, \quad [J^2, J_\alpha] = 0$$

14. 若算符 A 、 B 对易，即 $[A, B] = 0$ 则 A 和 B 有共同的本征函数系。在 A 和 B 的共同的本征函数表示的态中测量 A 、 B ，都有确定值。

若算符 A 、 B 不对易，即 $[A, B] \neq 0$ ，则必有

简记为

$$\sqrt{(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2} \geq \frac{1}{2} |\overline{[A, B]}|$$

特别地，

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\overline{[A, B]}|$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$$

$$\overline{(\Delta \hat{x})^2} \overline{(\Delta \hat{p}_x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

第四章 态和力学量的表象

1. Q 表象是以 Q 的本征函数系 $\{u_n(x)\}$ 为基底的表象，在这个表象中，有

$$Q u_n(x) = Q_n u_n(x)$$

$$\psi = \sum a_n(t) u_n(x)$$

$$\psi = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \dots \\ a_n(t) \end{pmatrix}, \quad \psi^+ = (a_1^*(t), a_2^*(t), \dots, a_n^*(t))$$

算符 \mathbf{F} 对应一个矩阵（方阵），矩阵元是： $F_{nm} = \int u_n^* F u_m dx$

选定表象后，算符和量子态都用矩阵表示。

平均值公式是： $\bar{F} = \psi^+ F \psi$

归一化条件是： $\psi^+ \psi = I$

本征值方程是： $F \psi = \lambda \psi$

2. 在量子力学中，两个表象之间的变换是么正变换

满足 $S^+ = S^{-1}$ ；态的变换是 $b = S^+ a$ ；

算符的变换是 $F' = S^+ F S$ 。么正变换不改变算符的本征值。

3. 量子态可用狄拉克符号右矢 $|A\rangle$ 或左矢 $\langle A|$ 表示

狄拉克符号的最大好处是它可以不依赖于表象来阐述量子力学理论，而且运算简洁。

基矢的封闭性: $\sum_n |n\rangle\langle n| = I$, $\int dx |x\rangle\langle x| = I$,

坐标表象

狄拉克符号

$$(1) F\psi(x, t) = \phi(x, t)$$

$$F|\psi\rangle = |\phi\rangle$$

$$(2) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

$$(3) H u_n(x) = E_n u_n(x)$$

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$(4) \int u_m^*(x) u_n(x) dx = \delta_{mn}$$

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

$$(5) \psi(x) = \sum_n c_n u_n(x)$$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$(6) c_n = \int u_n^*(x) \psi(x) dx$$

$$c_n = \langle n|\psi\rangle$$

$$(7) \bar{F} = \int \psi^*(x) F\psi(x) dx$$

$$\bar{F} = \langle \psi|F|\psi\rangle$$

$$(8) \int \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$$

$$\langle \psi|\psi\rangle = 1$$

4. 粒子占有数表象

以线性谐振子的粒子数算符 N 或者哈密顿 H 的本征态 $|n\rangle$ 为基矢的表象。

湮灭算符:

$$a = \left(\frac{\mu\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \left(\hat{x} + \frac{i}{\mu\omega} \hat{p} \right)$$

产生算符:

$$a^+ = \left(\frac{\mu\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \left(\hat{x} - \frac{i}{\mu\omega} \hat{p} \right)$$

$$H = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

粒子数算符:

$$N = a^+ a$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

第五章 微扰理论

1. 定态微扰理论

适用范围：求分立能级及所属波函数的修正。适用条件是：
一方面要求的 H_0 本征值和本征函数已知或较易计算，另一方面又要求 H_0 把 H 的主要部分尽可能包括进去，使剩下的微扰 H' 比较小，以保证微扰计算收敛较快，即

$$\left| \frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \right| \ll 1$$

(1) 非简并情况： $H = H_0 + H'$

$$E_k = E_k^{(0)} + H'_{kk} + \sum_n' \frac{|H'_{nk}|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} + \dots$$

$$\psi_k = \psi_k^{(0)} + \sum_n' \frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_n^{(0)} + \dots$$

其中，能量的一级修正 $E_n^{(1)}$ 等于 H' 在 $\psi_n^{(0)}$ 态中的平均值。

(2) 简并情况

能级的一级修正由久期方程

$$\det | H'_{\mu\nu} - E_k^{(1)} \delta_{\mu\nu} | = 0$$

即

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - E_k^{(1)} & H'_{12} & \dots & H'_{1f_k} \\ H'_{21} & H'_{22} - E_k^{(1)} & \dots & H'_{2f_k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H'_{f_k 1} & H'_{f_k 2} & \dots & H'_{f_k f_k} - E_k^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

给出。 $E_k^{(1)}$ 有 f_k 个实根，记为

$$E_{k\alpha}^{(1)}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, f_k$$

分别把每一个根 $E_{k\alpha}^{(1)}$ 代入方程 $\sum_{\nu=1}^{f_k} (H'_{\mu\nu} - E_{k\alpha}^{(1)} \delta_{\mu\nu}) a_{\nu} = 0$ ，即可求得相应的解，记为 $a_{\alpha\nu}$ ，于是得出新的零级波函数

$$\sum_{\nu} a_{\alpha\nu} |k\nu\rangle = |\phi_{k\alpha}\rangle$$

相应能量为 $E_k = E_k^{(0)} + E_{k\alpha}^{(1)}$

2. 变分法

选择尝试波函数 $\phi(\lambda)$ ，计算 H 的平均值 $\langle H \rangle$ ，它是变分参量 λ 的函数，由极值条件 $\left. \frac{\delta \langle H \rangle}{\delta \lambda} \right|_{\lambda_0} = 0$ 定出 λ_0 ，求出 $\langle H(\lambda_0) \rangle$ ，它表示基态能量的上限。

第七章 自旋与全同粒子

1. 电子自旋

电子自旋假设的两个要点：

$$(1) \quad s_z = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (2)$$

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{\mu c} \vec{s} \left(\text{或} \left| \frac{\mu_s}{s} \right| = \frac{e}{\mu c} \right)$$

内禀磁矩的值即玻尔磁子的值： $|\mu_s| = \mu_B = e\hbar/2\mu c$

斯特恩—盖拉赫实验证明了原子具有磁矩和电子自旋。

2. 自旋算符和自旋波函数

(1) 自旋算符与**Pauli**矩阵： $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$

对易关系: $\hat{S}_x \hat{S}_x = i\hbar \hat{S}_y, \hat{S}_x \hat{S}_y = 2i\hbar \hat{S}_z;$

$$\hat{S}_a, \hat{S}_b = i\hbar \hat{S}_g, \hat{S}_a, \hat{S}_b = 2i\hbar \hat{S}_g$$

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1 \quad (\text{单位算符})$$

$$\begin{cases} \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z \\ \sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i\sigma_x \\ \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i\sigma_y \end{cases} \quad \begin{cases} \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0 \\ \sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y = 0 \\ \sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z = 0 \end{cases}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

(2) 自旋波函数

考虑电子的自旋后，电子的波函数是二行一列矩阵：

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}$$

当电子的自旋与轨道相互作用可以忽略时，电子的波函数可以写为：

$$\Psi(x, y, z, s_z, t) = \Psi_1(x, y, z, t) \chi(s_z)$$

S_z 的本征函数:

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(3) 两电子体系的自旋波函数:

$$\chi_s^{(1)} = \chi_{\frac{1}{2}}(s_{1z}) \chi_{\frac{1}{2}}(s_{2z}),$$

$$\chi_s^{(2)} = \chi_{-\frac{1}{2}}(s_{1z}) \chi_{-\frac{1}{2}}(s_{2z}),$$

$$\chi_s^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\frac{1}{2}}(s_{1z}) \chi_{-\frac{1}{2}}(s_{2z}) + \chi_{\frac{1}{2}}(s_{2z}) \chi_{-\frac{1}{2}}(s_{1z})],$$

$$\chi^A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\frac{1}{2}}(s_{1z}) \chi_{-\frac{1}{2}}(s_{2z}) - \chi_{\frac{1}{2}}(s_{2z}) \chi_{-\frac{1}{2}}(s_{1z})],$$

算符 $\hat{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2$ 和 $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$

3、全同粒子

(1) 量子力学中，把内禀属性（静质量、电荷、自旋、磁矩、寿命等）相同的粒子称为全同粒子。

(2) 全同性原理：由于全同粒子的不可区分性，使得全同粒子所组成的体系中，二全同粒子相互代换不引起物理状态的改变。

全同性原理或表述为交换对称性：任何可观测量，特别是**Hamilton**量，对于任何两个粒子交换是不变的。这就给描述全同粒子系的波函数带来很强的限制，即要求全同粒子体系的波函数具有交换对称性 $\hat{P}_{ij}\Phi_S = \Phi_S$ 或者交换反对称性 $\hat{P}_{ij}\Phi_A = -\Phi_A$

(3) 全同粒子系的波函数的交换对称性与粒子的自旋有确定的联系。

玻色子：自旋为整数倍（ $s = 0, 1, 2, \dots$ ）的粒子，波函数对于两个粒子交换总是对称的，例如介子（ $s = 0$ ），光子（ $s = 1$ ）。它们遵守Bose统计，称为Bose子。

费米子：自旋为 \hbar 半奇数倍（ $s = 1/2, 3/2, \dots$ ）的粒子，波函数对于两个粒子交换总是反对称的，例如电子，质子，中子等。它们遵守Fermi 统计，称为Fermi子。

(4) **Pauli不相容原理：**不容许有两个或两个以上的全同Fermi 子处于同一个单粒子态。

1. 简述量子力学的五个基本假设。



答：（1）微观体系的状态被一个波函数完全描述，从这个波函数可以得出体系的所有性质。波函数一般应满足连续性、有限性和单值性三个条件；（2）力学量用厄密算符表示。如果在经典力学中有相应的力学量，则在量子力学中表示这个力学量的算符，由经典表示中的将动量 \vec{p} 换为算符 $-i\hbar\nabla$ 得出。表示力学

量的算符具有组成完全系的本征函数。（3）将体系的状态波函数 ψ 用算符 \hat{F} 的本征函数展开

$(\hat{F}\varphi_m = \lambda_m\varphi_m, \hat{F}\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda): \psi = \sum_m c_m\varphi_m + \int c_\lambda\varphi_\lambda d\lambda$ ，则在 ψ 态中测量力学量 F 得到结果为 λ_m 的

几率为 $|c_m|^2$ ，得到结果在 $\lambda \sim \lambda + d\lambda$ 范围内的几率是 $|c_\lambda|^2 d\lambda$ ；（4）体系的状态波函数满足薛定谔方程：

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ ， \hat{H} 是体系的哈密顿算符。（5）在全同粒子组成的体系中，两全同粒子相互调换不改变体系的状态（全同性原理）。↵

2. 量子力学中的力学量用什么算符表示？
为什么？力学量算符在自身表象中的矩阵
是什么形式？

答：量子力学中表示力学量的算符都是厄密算符。因为所有力学量的数值都是实数，既然表示力学量的算符的本征值是这个力学量的可能值，因而表示力学量的算符，它的本征值必须是实数。力学量算符在自身表象中的矩阵是一个对角矩阵。

3. 谁提出了电子自旋的假设？表明电子有自旋的实验事实有哪些？自旋有什么特征？

答：乌伦贝克和高斯密特提出了电子自旋的假设。他们主要根据的两个实验事实是：碱金属光谱的双线结构和反常的 Zeeman 效应。他们假设的主要内容为：a. 每个电子具有自旋角动量 \hat{S} ，它在空间任何方向上的投影只能是两个数值： $s_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$ ；b. 每个电子具有自旋磁矩 \vec{M}_S ，它和它的自旋角动量 \vec{S} 的关系式是：

$$\vec{M}_S = -\frac{e}{m} \vec{S}, \text{ 式中 } -e \text{ 是电子的电荷, } m \text{ 是电子的质量。}$$

4. 什么是全同性原理和泡利不相容原理？

答：全同性原理：由全同粒子所组成的体系中，两全同粒子相互代换不引起物理状态的改变。描写全同粒子体系状态的波函数只能是对称的或反对称的，它们的对称性不随时间改变。泡利不相容原理：不能有两个或两个以上的费米子处于同一状态。↵

4.4 求线性谐振子哈密顿量在动表象中的矩阵元。

(3) 设氢原子处于状态 $\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{2} R_{21}(r) Y_{10}(\theta, \varphi) - \frac{\sqrt{3}}{2} R_{21}(r) Y_{1-1}(\theta, \varphi)$ 。求氢

原子能量，角动量平方及角动量 z 分量的可能值，这些可能值出现的概率和这些力学量的平均值。↵

解: $E_n = -\frac{e_s^2}{2a_0 n^2}$ \therefore 氢原子处在 $7(1, 0, 0)$ 态上.

$n=2, L=1, m=0$ 或 -1 .

$$\therefore E_n = -\frac{e_s^2}{8a_0}$$

$\hat{L}^2 |4\rangle = L(L+1)\hbar^2 |4\rangle \therefore \hat{L}^2$ 的可能值为 $2\hbar^2$, 概率为 1. 平均值: $2\hbar^2$

$\hat{L}_z |4\rangle = m\hbar |4\rangle$ \hat{L}_z 的可能值为 0, 或 $-\hbar$, 概率分别为 $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}$.
平均值为 $0 \times \frac{1}{4} - \hbar \times \frac{3}{4} = -\frac{3}{4}\hbar$.