1、简述波函数的统计解释；

2、对“轨道”和“电子云”的概念，量子力学的解释是什么？

3、力学量$\hat{G}$在自身表象中的矩阵表示有何特点？

4、简述能量的测不准关系；

5、电子在位置和自旋$\hat{S}_z$表象下，波函数$\Psi=\begin{pmatrix}\psi_1(x,y,z)\\ \psi_2(x,y,z)\end{pmatrix}$如何归一化？解释各项的几率意义。

6、何为束缚态？

7、当体系处于归一化波函数$\psi(\vec{r},t)$所描述的状态时，简述在$\psi(\vec{r},t)$状态中测量力学量 F 的可能值及其几率的方法。

8、设粒子在位置表象中处于态$\psi(\vec{r},t)$, 采用 Dirac 符号时，若将$\psi(\vec{r},t)$改写为$\left|\psi(\vec{r},t)\right\rangle$有何不妥？采用 Dirac 符号时，位置表象中的波函数应如何表示？

9、简述定态微扰理论。

10、Stern—Gerlach 实验证实了什么？

11、一个物理体系存在束缚态的条件是什么？

12、两个对易的力学量是否一定同时确定？为什么？

13、测不准关系是否与表象有关？

14、在简并定态微扰论中，如$\hat{H}^{(0)}$的某一能级$E_n^{(0)}$，对应 f 个正交归一本征函数ϕ_i（i=1，2，…，f)，为什么一般地ϕ_i不能直接作为$\hat{H}=\hat{H}^{(0)}+\hat{H}'$的零级近似波函数？

15、在自旋态$\chi_{\frac{1}{2}}(s_z)$中，$\hat{S}_x$和$\hat{S}_y$的测不准关系$\overline{(\Delta\hat{S}_x)^2}\bullet\overline{(\Delta\hat{S}_y)^2}$是多少？

16、在定态问题中，不同能量所对应的态的迭加是否为定态 $Schrödinger$ 方程的解？同一能量对应的各简并态的迭加是否仍为定态 $Schrödinger$ 方程的解？

17、两个不对易的算符所表示的力学量是否一定不能同时确定？举例说明。

18 说明厄米矩阵的对角元素是实的，关于对角线对称的元素互相共轭。

19 何谓选择定则。

20、能否由 $Schrödinger$ 方程直接导出自旋？

21、叙述量子力学的态迭加原理。

22、厄米算符是如何定义的？

23、据[$\hat{a}$，$\hat{a}^+$]=1，$\hat{N}=\hat{a}^+\hat{a}$，$\hat{N}\left|n\right\rangle=n\left|n\right\rangle$，证明：$\hat{a}\left|n\right\rangle=\sqrt{n}\left|n-1\right\rangle$。

24、非简并定态微扰论的计算公式是什么？写出其适用条件。

25、自旋$\hat{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$，问$\hat{\vec{\sigma}}$是否厄米算符？$\hat{\vec{\sigma}}$是否一种角动量算符？

26、波函数的量纲是否与表象有关？举例说明。

27、动量的本征函数有哪两种归一化方法？予以简述。

28、知 $\hat{G}e^{\alpha x} = \alpha e^{\alpha x}$，问能否得到 $\hat{G} = \frac{d}{dx}$？为什么？

29、简述变分法求基态能量及波函数的过程。

30、简单 Zeemann 效应是否可以证实自旋的存在？

31、不考虑自旋，当粒子在库仑场中运动时，束缚态能级 E_n 的简并度是多少？若粒子自旋为 s，问 E_n 的简并度又是多少?

32、根据 $\frac{d\overline{F}}{dt} = \overline{\frac{\partial \hat{F}}{\partial t}} + \frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{F},\hat{H}]}$ 说明粒子在辏力场中运动时，角动量守恒。

33、对线性谐振子定态问题，旧量子论与量子力学的结论存在哪些根本区别？

34、简述氢原子的一级 stark 效应。

35、写出 $\hat{J}_+ \left| jm \right\rangle$ 的计算公式。

36、由 $\int |\psi|^2 d\tau = 1$，说明波函数的量纲。

37、$\hat{F}$ 、$\hat{G}$ 为厄米算符，问[$\hat{F}$ ， $\hat{G}$]与 i[$\hat{F}$ ， $\hat{G}$]是否厄米算符？

38、据[$\hat{a}$ ， $\hat{a}^+$]=1， $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$ ， $\hat{N}\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle$ 证明： $\hat{a}^+\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle$ 。

39、利用量子力学的含时微扰论，能否直接计算发射系数和吸收系数？

40、什么是耦合表象？

41、不考虑粒子内部自由度，宇称算符 $\hat{P}$ 是否为线性厄米算符？为什么？

42、写出几率密度与几率流密度所满足的连续性方程。

43、已知 $\hat{x} = \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\hat{a}+\hat{a}^+\right)$， $\hat{p}_x = \frac{1}{i}\left(\frac{\mu\omega\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\hat{a}-\hat{a}^+\right)$，且 $\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}$， $\hat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$，试推出线性谐振子波函数的递推公式。

44、写出一级近似下，跃迁几率的计算式。

45、何谓无耦合表象？

46、给出线性谐振子定态波函数的递推公式。

47、$\hat{G}\psi = \psi^*$， $\hat{G}$ 是否线性算符？

48、在什么样的基组中，厄米算符是厄米矩阵？

49、何谓选择定则？

50、写出 $\hat{J}_-\left|jm\right\rangle$ 公式。

51、何为束缚态？

52、写出位置表象中 $\hat{p}_x$， $\hat{\vec{p}}$ ， $\hat{x}$ 和 $\hat{\vec{r}}$ 的表示式。

53、对于定态问题，试从含时 $Schrödinger$ 方程推导出定态 $Schrödinger$ 方程；

54、对于氢原子，其偶极跃迁的选择定则对主量子数 n 是否存在限制？为什么？

55、在现阶段所学的量子力学中，电子的自旋是作为一个基本假定引入的，还是由其它假定自然推出的？

56、假如波函数应满足的方程不是线性方程，波函数是否一定能归一化？

57、试写出动量表象中 $\hat{x}$，$\hat{\vec{r}}$，$\hat{p}_x$，$\hat{\vec{p}}$ 的表式

58、幺正算符是怎样定义的？

59、我们知道，平面单色波的电场能和磁场能相等，而在用微扰论计算发射系数和吸收系数时，我们为什么忽略了磁场对电子的作用？

60、对于自旋为 3/2 的粒子，其自旋本征函数应是几行一列的矩阵？

61、写出德布罗意关系式及自由粒子的德布罗意波。

62、一维线性谐振子基态归一化波函数为 $\psi_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$，试计算积分 $\int_0^\infty e^{-\beta x^2} dx$；

63、当体系处于归一化波函数 ψ 所描述的状态时，简述在 ψ 态中测量力学量 F 的可能值及其几率的方法；

64、已知氢原子径向 $Schrödinger$ 方程无简并，微扰项只与 r 有关，问非简并定态微扰论能否适用？

65、自旋是否意味着自转？

66、光到底是粒子还是波；

67、两个对易的力学量是否一定同时具有确定值？在什么情况下才同时具有确定值？

68、不考虑自旋，求球谐振子能级 E_n 的简并度；

69、我们学过，氢原子的选择定则 $\Delta l = \pm 1$，这是否意味着 $\Delta l = \pm 3$ 的跃迁绝对不可能发生？

70、克莱布希－高登系数是为解决什么问题提出的？

)

71、在球坐标系下，波函数 $\psi(r,\theta,\phi)$ 为什么应是进动角 ϕ 的周期函数？

72、设当 $|x| <$ a 和 $|y| <$ b 时，势能为常数 U_0，试将此区域内的二维 $Schrödinger$ 方程分离变量(不求解)；

73、何谓力学量完全集？

74、定性说明为什么在氢原子的 Stark 效应中，可将 $\hat{H}' = e\vec{\varepsilon} \bullet \vec{r}$ 视为微扰项？

75、Pauli 算符 $\hat{\vec{\sigma}}$ 是否满足角动量的定义式？

76、简述量子力学产生的背景；

77、写出位置表象中直角坐标系下 $\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$、$\hat{L}^2$ 的表示式；

78、$R_{n_r l}$ 为有心力场中的径向波函数，问 $\int_0^\infty R^*_{n_r l} R_{n'_r l'} r^2 dr = \delta_{ll'}\delta_{n_r n'_r}$ 是否成立？为什么？

79、定态微扰论是否适用于主量子数 n 很大的氢原子情况？为什么？

80、有关角动量的定义，我们学过哪两种？哪一种更广泛？自旋角动量是按哪一种定义的？

81、说明 $\delta(x)$ 的量纲；

82、说明在定态问题中，定态能量的最小值不可能低于势能的最低值；

83、简述占有数表象；

84、试说明对易的厄米算符的乘积也是厄米算符；

85、何为偶极近似？

86、量子力学克服了旧量子论的哪些不足？

87、写出 $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$ 的本征值及对应本征函数；

88、一个物理体系存在束缚态的条件是什么？

89、简述态的表象变换的方法；

90、已知总角动量 $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}_1 + \hat{\vec{J}}_2$，试说明 $[\hat{J}^2, \hat{J}_1^2] = 0$。

91、旧量子论存在哪些不足？

92、对于旧量子论中氢原子的“轨道”，量子力学的解释是什么？

93、两个不对易的力学量一定不能同时确定吗？举例说明；

94、简述变分法的思想；

95、写出电子在 $\hat{S}_z$ 表象下的三个 Pauli 矩阵。

96、简述波函数的 Born 统计解释；

97、设 ψ 是定态 Schrödinger 方程的解，说明 ψ^* 也是对应同一本征能级的解，进而说明无简并能级的波函数一定可以取为实数；

98、引入 Dirac 符号的意义何在？

99、定态微扰论的适用范围是什么？

100、简述两个角动量耦合的三角形关系。

答案

1. 波函数在空间某一点的强度（振幅绝对值的平方）和在该点找到粒子的几率成正比。
2. 电子云：用点的疏密来描述粒子出现的几率。

轨道：电子径向分布几率最大之处。

3. 力学量$\hat{G}$在自身表象中的矩阵是对角的，对角线上为$\hat{G}$的本征值。
4. 能量测不准关系的数学表示式为$\Delta \mathrm{E} \bullet \Delta \mathrm{t} \geq \hbar / 2$，即微观粒子的能量与时间不可能同时进行准确的测量，其中一项测量的越精确，另一项的不确定程度越大。
5. 利用$\int\left(\left|\psi_1(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z})\right|^2+\left|\psi_2(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z})\right|^2\right) \mathrm{d} \tau=1$进行归一化，其中：$\left|\psi_1(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z})\right|^2$表示粒子在$(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z})$处$\mathrm{S}_z=\frac{1}{2}$的几率密度，$\left|\psi_2(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z})\right|^2$表示粒子在$(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z})$处$\mathrm{S}_z=-\frac{1}{2}$的几率密度。
6. 束缚态：无限远处为零的波函数所描述的状态。能量小于势垒高度，粒子被约束在有限的空间内运动。
7. 首先求解力学量F对应算符的本征方程：$\hat{\mathrm{F}} \phi_{\mathrm{n}}=\lambda_{\mathrm{n}} \phi_{\mathrm{n}} \quad \hat{\mathrm{F}} \phi_\lambda=\lambda \phi_\lambda$，然后将$\varphi(\bar{\mathrm{r}}, \mathrm{t})$按F的本征态展开：$\varphi(\bar{\mathrm{r}}, \mathrm{t})=\sum_{\mathrm{n}} \mathrm{c}_{\mathrm{n}} \phi_{\mathrm{n}}+\int \mathrm{c}_\lambda \phi_\lambda \mathrm{d} \lambda$，则F的可能值为$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{\mathrm{n}}, \lambda$，$\mathrm{F}=\lambda_{\mathrm{n}}$的几率为$\left|\mathrm{c}_{\mathrm{n}}\right|^2$，F在$\lambda \sim \lambda+\mathrm{d} \lambda$范围内的几率为$\left|\mathrm{c}_\lambda\right|^2 \mathrm{d} \lambda$
8. Dirac符号是不涉及任何表象的抽象符号。位置表象中的波函数应表示为$\langle\bar{\mathrm{r}} \mid \varphi\rangle$。
9. 求解定态薛定谔方程$\hat{H} \psi=E \psi$时，若可以把不显含时间的$\hat{H}$分为大、小两部分$\hat{H}=\hat{H^{(0)}}+\hat{H}'$，其中（1）$\hat{H^{(0)}}$的本征值$E_n^{(0)}$和本征函数$\psi_n^{(0)}$是可以精确求解的，或已有确定的结果$\hat{H^{(0)}} \psi_n^{(0)}=E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$，（2）$\hat{H}'$很小，称为加在$\hat{H^{(0)}}$上的微扰，则可以利用$\psi_n^{(0)}$和$E_n^{(0)}$构造出$\psi$和E。
10. Stein－Gerlack实验证明了电子自旋的存在。

11、条件：①能量比无穷远处的势小；②能级满足的方程至少有一个解。

12、不一定，只有在它们共同的本征态下才能同时确定。

13、无关。

14、因为作为零级近似的波函数必须保证$\left(\hat{\mathrm{H}}^{(0)}-\mathrm{E}_n^{(0)}\right) \phi_n^{(1)}=-\left(\hat{\mathrm{H}}^{(1)}-\mathrm{E}_n^{(1)}\right) \phi_n^{(0)}$有解。

15、$\frac{\hbar^4}{16}$。

16、不是，是

17、不一定，如$\hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{x}}, \hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{y}}, \hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{z}}$互不对易，但在$Y_{00}$态下，$\hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{x}}=\hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{y}}=\hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{z}}=0$。

18、厄米矩阵的定义为矩阵经转置、共轭两步操作之后仍为矩阵本身，即$A_{\mathrm{nm}}^*=A_{\mathrm{mn}}$，可知对角线上的元素必为实数，而关于对角线对称的元素必互相共轭。

19、原子能级之间辐射跃迁所遵从的规则。选择定则表明并非任何两能级之间的辐射跃迁都是可能的，只有遵从选择定则的能级之间的辐射跃迁才是可能的。

20、不能。

21、如果ψ_1和ψ_2是体系的可能状态，那么，它们的线性叠加$\psi=\mathrm{c}_1 \psi_1+\mathrm{c}_2 \psi_2$（$c_1$、$c_2$是复数）也是这个体系的可能状态。

22、如果对于两任意函数ψ和φ，算符$\hat{\mathrm{F}}$满足下列等式$\int\psi^{*}\hat{\mathrm{F}}\varphi\mathrm{d}\tau=\int\left(\hat{\mathrm{F}}\psi\right)^{*}\varphi\mathrm{d}\tau$，则称$\hat{\mathrm{F}}$为厄米算符。

23、$\because\left[\hat{\mathrm{a}},\hat{\mathrm{a}}^{+}\right]=1$即$\hat{\mathrm{a}}\hat{\mathrm{a}}^{+}-\hat{\mathrm{a}}^{+}\hat{\mathrm{a}}=1$

又$\because\hat{\mathrm{N}}=\hat{\mathrm{a}}^{+}\hat{\mathrm{a}}$

$$\therefore\hat{\mathrm{N}}\hat{\mathrm{a}}\left|\mathrm{n}\right\rangle=\hat{\mathrm{a}}^{+}\hat{\mathrm{a}}\hat{\mathrm{a}}\left|\mathrm{n}\right\rangle=\left(\hat{\mathrm{a}}\hat{\mathrm{a}}^{+}-1\right)\hat{\mathrm{a}}\left|\mathrm{n}\right\rangle=\left(\hat{\mathrm{a}}\hat{\mathrm{N}}-\hat{\mathrm{a}}\right)\left|\mathrm{n}\right\rangle=\hat{\mathrm{a}}\hat{\mathrm{N}}\left|\mathrm{n}\right\rangle-\hat{\mathrm{a}}\left|\mathrm{n}\right\rangle=\hat{\mathrm{a}}\mathrm{n}\left|\mathrm{n}\right\rangle-\hat{\mathrm{a}}\left|\mathrm{n}\right\rangle=\hat{\mathrm{a}}\left(\mathrm{n}\text{-}1\right)\left|\mathrm{n}\right\rangle$$

$$=\left(\mathrm{n}\text{-}1\right)\hat{\mathrm{a}}\left|\mathrm{n}\right\rangle$$

$$\therefore\hat{\mathrm{a}}\left|\mathrm{n}\right\rangle=\mathrm{c}\left|\mathrm{n}\text{-}1\right\rangle$$

又$\because\left\langle\mathrm{n}\left|\hat{\mathrm{N}}\right|\mathrm{n}\right\rangle=\left\langle\mathrm{n}\left|\mathrm{n}\right|\mathrm{n}\right\rangle=\mathrm{n}$且 $\left\langle\mathrm{n}\left|\hat{\mathrm{N}}\right|\mathrm{n}\right\rangle=\left\langle\mathrm{n}\left|\hat{\mathrm{a}}^{+}\hat{\mathrm{a}}\right|\mathrm{n}\right\rangle=\left\langle\mathrm{n}\left\|\mathrm{c}\right|^{2}\right|\mathrm{n}\right\rangle=\left|\mathrm{c}\right|^{2}$

$$\therefore\left|\mathrm{c}\right|^{2}=\mathrm{n}$$

取$\mathrm{c}=\sqrt{\mathrm{n}}$得$\hat{\mathrm{a}}\left|\mathrm{n}\right\rangle=\sqrt{\mathrm{n}}\left|\mathrm{n}\text{-}1\right\rangle$

24、$$\mathrm{E}_{\mathrm{n}}=\mathrm{E}_{\mathrm{n}}^{(0)}+\mathrm{H}_{\mathrm{nn}}^{'}+\sum_{\mathrm{m}}\frac{\left|\mathrm{H}_{\mathrm{nm}}^{'}\right|^{2}}{\mathrm{E}_{\mathrm{n}}^{(0)}-\mathrm{E}_{\mathrm{m}}^{(0)}}+\cdots$$

$$\psi_{\mathrm{n}}=\psi_{\mathrm{n}}^{(0)}+\sum_{\mathrm{m}}\frac{\mathrm{H}_{\mathrm{mn}}^{'}}{\mathrm{E}_{\mathrm{n}}^{(0)}-\mathrm{E}_{\mathrm{m}}^{(0)}}\psi_{\mathrm{m}}^{(0)}+\cdots$$

适用条件：$\left|\frac{\mathrm{H}_{\mathrm{mn}}^{'}}{\mathrm{E}_{\mathrm{n}}^{(0)}-\mathrm{E}_{\mathrm{m}}^{(0)}}\right|<<1$

25、$\hat{\hat{\sigma}}$是厄米算符，但不是角动量算符。

26．有关，例如$\hat{\mathrm{r}}$在位置表象和动量表象下的本征态分别为$\psi_{\hat{\mathrm{P}}}\left(\vec{r}\right)=\frac{1}{\sqrt[3]{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{r}\cdot\vec{P}}$和$\psi_{\hat{\mathrm{P}}_{0}}\left(\vec{P}\right)=\delta\left(\vec{P}-\vec{P}_{0}\right)$，它们的量纲显然不同。

27．坐标表象下动量的本征方程为$\varphi_{\vec{\mathrm{P}}}\left(\vec{\mathrm{r}}\right)=\mathrm{C}e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{\mathrm{P}}\cdot\vec{\mathrm{r}}}$，它有两种归一化方法：①归一化为$\delta$函数：由$\iiint\varphi_{\vec{\mathrm{P}}'}^{*}\left(\vec{\mathrm{r}}\right)\varphi_{\vec{\mathrm{P}}'}\left(\vec{\mathrm{r}}\right)\mathrm{d}\tau=\delta\left(\vec{\mathrm{P}}-\vec{\mathrm{P}}'\right)$得出$\mathrm{C}=\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{\frac{3}{2}}}$；②箱归一化：假设粒子被限制在一个立方体中，边长为L，取箱中心为坐标原点，要求波函数在箱相对面上对应点有相同的值，然后由$\iiint\varphi_{\vec{\mathrm{P}}'}^{*}\left(\vec{\mathrm{r}}\right)\varphi_{\vec{\mathrm{P}}'}\left(\vec{\mathrm{r}}\right)\mathrm{d}\tau=1$得出$\mathrm{C}=\frac{1}{\mathrm{L}^{\frac{3}{2}}}$。

28．不能，因为所作用的波函数不是任意的。

29．第一步:写出体系的哈密顿算符；

第二步:根据体系的特点(对称性,边界条件和物理直观知识),寻找尝试波函数$\psi\left(\lambda\right)$, λ为变分参数,它能够调整波函数(猜一个)；

第三步:计算哈密顿在$\psi\left(\lambda\right)$态中的平均值

$$\overline{H}(\lambda)=\frac{\int\psi^{*}(\lambda)H(\lambda)\psi(\lambda)d\tau}{\int\psi^{*}(\lambda)\psi(\lambda)d\tau}$$

第四步:对$\overline{\mathrm{H}(\lambda)}$求极值,即令$\frac{\mathrm{d}\overline{\mathrm{H}(\lambda)}}{\mathrm{d}\lambda}=0$,求出$\overline{\mathrm{H}_{\min}(\lambda)}$,则

$$\mathrm{E}_0 \approx \bar{\mathrm{H}}_{\min}(\lambda),\ \psi_0 \approx \psi\left(\lambda_{\bar{\mathrm{H}}_{\min}}\right)$$

30．不可以。

31 不考虑自旋时，当粒子在库仑场中运动时，束缚态能级可表示为E_n，其简并度为n^2。若考虑粒子的自旋为s，则E_n的简并度为$(2s+1)n^2$。

32 粒子在奏力场中运动时，Hamilton 算符为：$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}+U(r)$，则有：$\left[\hat{L}_\alpha,\hat{H}\right]=\left[\hat{L}^2,\hat{H}\right]=0$，又因角动量不显含时间，得$\frac{d\overline{F}}{dt}=0$、角动量守恒。

33 旧量子论给出线性谐振子的基态能量为零而量子力学认为其基态有能量，为$\frac{1}{2}\hbar\omega$；另外，量子力学表明，在旧量子论中粒子出现区域以外也有发现粒子的可能。

34 在氢原子外场作用下，谱线（$n=2\to n=1$）发生分裂（变成 3 条）的现象。

35 $\hat{J}_+\left|j,m\right\rangle=\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\hbar\left|j,m+1\right\rangle$。

36 波函数的量纲由坐标τ的维数来决定。对一维、二维、三维，τ的量纲分别为$[L]$、$[L]^2$、$[L]^3$，则波函数的量纲依次为$L^{-1/2}$、L^{-1}、$L^{-3/2}$。

37 [$\hat{F}$，$\hat{G}$]不是厄米算符，i[$\hat{F}$，$\hat{G}$]是厄米算符。

因为$(i\left[\hat{F},\hat{G}\right])^+=i\left[\hat{F},\hat{G}\right]$

38 证明：可证明算符$\hat{a},\hat{a}^+$对于能量本征态的作用结果是：

$$\hat{a}\left|n\right\rangle=\lambda(n)\left|n-1\right\rangle \qquad \hat{a}^+\left|n\right\rangle=\nu(n)\left|n+1\right\rangle \qquad (1)$$

λ,ν为待定系数。上式的共轭方程是：

$$\left\langle n\right|\hat{a}^+=\lambda^*(n)\left\langle n-1\right| \qquad \left\langle n\right|\hat{a}=\nu^*(n)\left\langle n+1\right| \qquad (2)$$

式(1)和(2)相乘（取内积）并利用已知条件，即得：

$$\lambda^*\lambda=\left\langle n\right|\hat{a}^+\hat{a}\left|n\right\rangle=n \qquad \nu^*\nu=\left\langle n\right|\hat{a}\hat{a}^+\left|n\right\rangle=\left\langle n\right|\left(\hat{a}^+\hat{a}+1\right)\left|n\right\rangle=n+1$$

适当选择态矢量$\left|n\right\rangle$的相因子($e^{i\alpha}$)，总可使λ和ν为非负实数。

因此，

$$\lambda(n)=\sqrt{n},\nu(n)=\sqrt{n+1}$$

故得证。

39 利用量子力学的含时微扰论，可以直接计算出受激发射系数和受激吸收系数；但由于没有考虑到电磁场的量子化（即量子力学中的二次量子化），自发跃迁系数不能直接被推导出来，可在量子电动力学（QED）中计算出。

40 以$\hat{J}$表示$\hat{J}_1$与$\hat{J}_2$之和：$\hat{J}=\hat{J}_1+\hat{J}_2$；算符$\hat{J},\hat{J}_z,\hat{J}_1^2,\hat{J}_2^2$相互对易、有共同本征矢$\left|j_1,j_2,j,m\right\rangle$，$j$和$m$表明$\hat{J}^2$和$\hat{J}_z$的对应本征值依次为$j(j+1)\hbar^2$和$m\hbar$。$\left|j_1,j_2,j,m\right\rangle$组成正交归一完全系，以它们为基矢的表象称为耦合表象。

41、 是。$\because \hat{P}\left[C_1u(x,y,z)+C_2v(x,y,z)\right]=C_1\left[\hat{P}u(x,y,z)\right]+C_2\left[\hat{P}v(x,y,z)\right]$且

$$\int_{-\infty-\infty-\infty}^{+\infty+\infty+\infty}\int\int u^*(x,y,z)\hat{P}v(x,y,z)dxdydz=\int_{-\infty-\infty-\infty}^{+\infty+\infty+\infty}\int\int u^*(x,y,z)v(-x,-y,-z)dxdydz$$

$$=-\int_{+\infty+\infty+\infty}^{-\infty-\infty-\infty}\int\int u^*(-X,-Y,-Z)v(X,Y,Z)dXdYdZ(令X=-x,Y=-y,Z=-z)$$

$$=\int_{-\infty-\infty-\infty}^{+\infty+\infty+\infty}\int\int u^*(-X,-Y,-Z)v(X,Y,Z)dXdYdZ$$

$$=\int_{-\infty-\infty-\infty}^{+\infty+\infty+\infty}\int\int\left[\hat{P}u(X,Y,Z)\right]^*v(X,Y,Z)dXdYdZ$$

$$=\int_{-\infty-\infty-\infty}^{+\infty+\infty+\infty}\int\int\left[\hat{P}u(x,y,z)\right]^*v(z,y,z)dzdydz$$

$\therefore \hat{P}$ 是线性厄米算符。

42、几率流密度 $\vec{J}=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)$ 与几率密度 $\omega=\psi^*\psi$ 满足的连续性方程为：$\frac{\partial\omega}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{J}=0$

43、 $x\psi_n=\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}(\hat{a}+\hat{a}^+)\psi_n=\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\hat{a}\psi_n+\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\hat{a}^+\psi_n$

$$=\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\sqrt{n}\psi_{n-1}+\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\sqrt{n+1}\psi_{n+1}$$

$$x^2\psi_n=\frac{\hbar}{2\mu\omega}(\hat{a}+\hat{a}^+)(\hat{a}+\hat{a}^+)\psi_n$$

$$=\frac{\hbar}{2\mu\omega}\left(\hat{a}\hat{a}\psi_n+\hat{a}\hat{a}^+\psi_n+\hat{a}^+\hat{a}\psi_n+\hat{a}^+\hat{a}^+\psi_n\right)$$

$$=\frac{\hbar}{2\mu\omega}\left(\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}+(n+1)\psi_n+n\psi_n+\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}\right)$$

$$=\frac{\hbar}{2\mu\omega}\left(\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}+(2n+1)\psi_n+\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}\right)$$

$$\frac{d}{dx}\psi_n=\frac{i}{\hbar}\hat{p}_x\psi_n=\left(\frac{\mu\varpi}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^+)\psi_n$$

$$=\left(\frac{\mu\varpi}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sqrt{n}\psi_{n-1}-\sqrt{n+1}\psi_{n+1}\right)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2}\psi_{\mathrm{n}}=\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{x}}\right)^2\psi_{\mathrm{n}}=\frac{\mu\varpi}{2\hbar}\left(\hat{a}-\hat{a}^{+}\right)\left(\hat{a}-\hat{a}^{+}\right)\psi_{\mathrm{n}}$$

$$=\frac{\mu\varpi}{2\hbar}\left(\hat{a}\hat{a}\psi_{\mathrm{n}}-\hat{a}\hat{a}^{+}\psi_{\mathrm{n}}-\hat{a}^{+}\hat{a}\psi_{\mathrm{n}}+\hat{a}^{+}\hat{a}^{+}\psi_{\mathrm{n}}\right)$$

$$=\frac{\mu\varpi}{2\hbar}\left(\sqrt{\mathrm{n}(\mathrm{n}-1)}\psi_{\mathrm{n}\text{-}2}-(\mathrm{n}+1)\psi_{\mathrm{n}}-\mathrm{n}\psi_{\mathrm{n}}+\sqrt{(\mathrm{n}+1)(\mathrm{n}+2)}\psi_{\mathrm{n}+2}\right)$$

$$=\frac{\mu\varpi}{2\hbar}\left(\sqrt{\mathrm{n}(\mathrm{n}-1)}\psi_{\mathrm{n}\text{-}2}-(2\mathrm{n}+1)\psi_{\mathrm{n}}+\sqrt{(\mathrm{n}+1)(\mathrm{n}+2)}\psi_{\mathrm{n}+2}\right)$$

44、一级近似下，由初态 ϕ_{k} 跃迁到终态 ϕ_{m} 的几率为：$\mathrm{W}_{\mathrm{k}\to\mathrm{m}}=\left|\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^{\mathrm{t}}\mathrm{H}'_{\mathrm{mk}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\mathrm{mk}}\mathrm{t}'}\mathrm{dt}'\right|^2$ 其中，$\mathrm{H}'_{\mathrm{mk}}=\int\phi_{\mathrm{m}}^{*}\hat{\mathrm{H}}'\phi_{\mathrm{k}}\mathrm{d}\tau$，$\varpi_{\mathrm{mk}}=\frac{1}{\hbar}\left(\varepsilon_{\mathrm{m}}-\varepsilon_{\mathrm{k}}\right)$。

45、$\hat{\mathrm{J}}_1^2,\hat{\mathrm{J}}_{1\mathrm{z}},\hat{\mathrm{J}}_2^2,\hat{\mathrm{J}}_{2\mathrm{z}}$ 相互对易，有共同的本征态 $\left|\mathrm{j}_1\ \mathrm{m}_1\ \mathrm{j}_2\ \mathrm{m}_2\right\rangle\equiv\left|\mathrm{j}_1\ \mathrm{m}_1\right\rangle\left|\ \mathrm{j}_2\ \mathrm{m}_2\right\rangle$，则该本征态对应的表象为无耦合表象。

46 线性谐振子定态波函数的递推公式：$\hat{x}\psi_n=\frac{1}{\alpha}\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}+\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}\right)$，

$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\psi_{\mathrm{n}}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{x}}\psi_{\mathrm{n}}=\left(\frac{\mu\varpi}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\hat{a}-\hat{a}^{+}\right)\psi_{\mathrm{n}}=\left(\frac{\mu\varpi}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sqrt{\mathrm{n}}\psi_{\mathrm{n}\text{-}1}-\sqrt{\mathrm{n}+1}\psi_{\mathrm{n}+1}\right)$，其中，$\psi_n$ 为线性谐振子定态波函数，$\alpha=\sqrt{\frac{\mu\varpi}{\hbar}}$。

47 不是，因为 $\hat{G}(C\psi)=C^{*}\hat{G}\psi\neq C\hat{G}\psi$。

48 在本征值分立的基组中，厄米算符是厄米矩阵。

49 为了使越迁几率不为零，一定对量子数做了某些限止，这些限止即为选择定则。

50 $\hat{J}_{-}\left|jm\right\rangle=\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\hbar\left|jm-1\right\rangle$。。

51．束缚态:能量小于势垒高度，粒子被约束在有限的空间内运动，它的波函数在无限远处为零。

52．$\hat{P}_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$，$\hat{\vec{P}}=\frac{\hbar}{i}\nabla$，$\hat{x}=x$，$\hat{\vec{r}}=x\vec{i}+y\vec{j}+z\vec{k}$

53．当 $U(\vec{r})$ 不显示时间 t，设 $\Psi(\vec{r},t)=\varphi(\vec{r})f(t)$ 代入含时薛定谔方程 $i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi(\vec{r},t)+U(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)$，分离变量得：

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\bullet\frac{df(t)}{dt}=\frac{1}{\varphi(r)}[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\varphi(\vec{r})+U(\vec{r})\varphi(\vec{r})]$$

这个等式左边只是 t 的函数，右边只是 $\vec{r}$ 的函数，而 t 和 $\vec{r}$ 是相互独立的变量，所以只有当两边都等于同一常量时，等式才能满足。以E表示这个常量，由等式右边等于E，有：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\varphi(\vec{r})+U(\vec{r})\varphi(\vec{r})=E\varphi(\vec{r})$$

此即为定态薛定谔方程。

54．对于氢原子，其偶极跃迁的选择定则对主量子数 n 没有限制，因为在计算跃迁几率时，与主量子数有关的积分 $\int_0^\infty R_{n'l'}(r)R_{nl}(r)r^3dr$ 在 n 和 n' 取任何整数值时均不恒等于零。

55．在初等量子力学中，自旋是作为一个基本假定引入的。

56 不一定能归一化，因为波函数满足的方程不是线性方程时，ψ 与 $C\psi$ 表示的就不一定是同一态。

57 在动量表象中：$\hat{x}=i\hbar\dfrac{\partial}{\partial p_x}$，$\hat{\vec{r}}=i\hbar\nabla_{\vec{p}}$，$\hat{p}_x=p_x$，$\hat{\vec{P}}=\vec{P}$

58 满足$\left(\hat{F}^{+}=\hat{F}^{-1}\right)$的算符为幺正算符。

59 因为光波中的磁场对电子作用的能量约为电场对电子作用能量的$\dfrac{1}{137}$，所以忽略了磁场对电子的作用。

60 四行一列。

61 德布罗意关系：$\vec{P}=\dfrac{h}{\lambda}\vec{n}=\hbar\vec{k}$

自由粒子的德布罗意波：$\psi=Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}$

62 由$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*\psi_0dx=\dfrac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha^2x^2}dx=1$得：$\int_0^{+\infty}e^{-\alpha^2x^2}dx=\dfrac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha^2x^2}dx=\dfrac{\sqrt{\pi}}{2\alpha}$

令$\alpha^2=\beta$得$\int_0^{+\infty}e^{-\beta x^2}dx=\dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{\pi}{\beta}}$

63 首先求解力学量 F 的本征方程：$\hat{\mathrm{F}}\phi_{\mathrm{n}}=\lambda_{\mathrm{n}}\phi_{\mathrm{n}}$ $\hat{\mathrm{F}}\phi_\lambda=\lambda\phi_\lambda$，然后将$\varphi(\vec{\mathrm{r}},\mathrm{t})$按 F 的本征态展开：$\varphi(\vec{\mathrm{r}},\mathrm{t})=\sum_{\mathrm{n}}\mathrm{c}_{\mathrm{n}}\phi_{\mathrm{n}}+\int\mathrm{c}_\lambda\phi_\lambda\mathrm{d}\lambda$，则 F 的可能值为$\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{\mathrm{n}},\lambda$，$\mathrm{F}=\lambda_{\mathrm{n}}$的几率为$|\mathrm{c}_{\mathrm{n}}|^2$，F 在$\lambda\sim\lambda+\mathrm{d}\lambda$范围内的几率为$|\mathrm{c}_\lambda|^2\mathrm{d}\lambda$。

64 可以适用。

65 自旋是一种内禀角动量，并不是自转。

66 光是粒子和波的统一。

67 不一定，只有在它们共同的本征态下才能同时确定。

68 球谐振子能级$\mathrm{E}_{\mathrm{n}}=\hbar\varpi\left(\mathrm{n}+\dfrac{3}{2}\right)$，$(\mathrm{n}=\mathrm{n}_1+\mathrm{n}_2+\mathrm{n}_3;\ \mathrm{n}_1,\mathrm{n}_2,\mathrm{n}_3=0,1,2,\cdots)$

E_{n}的简并度为$\dfrac{(\mathrm{n}+1)(\mathrm{n}+2)}{2}$。

69 不一定。偶极近似下的结果才为$\Delta\mathrm{l}=\pm1$，在多极近似下或精确解时$\Delta\mathrm{l}=\pm3$也可能会实现。

70 克莱布希－高登系数是为了实现无耦合表象和耦合表象之间的变换而提出的。

71、ϕ与$\phi+2\pi$在球坐标系下为同一点,根据波函数的单值性,同一点应具有同一值,故球坐标系下波函数$\psi(\mathrm{r},\theta,\phi)$为进动角$\phi$的周期函数.

72、二维定态薛定谔方程:$\left[-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+U_0\right]\psi=E\psi$.

令$\psi=\psi_x\psi_y,E=E_x+E_y,U_0=U_x+U_y$.

可得 $\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{d^2\psi_x}{dx^2}+U_x\psi_x=E_x\psi_x \\ -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{d^2\psi_y}{dy^2}+U_y\psi_y=E_y\psi_y \end{cases}$

73、设有一组彼此独立而又相互对易的厄米算符 $\hat{A}\left(\hat{A}_1,\hat{A}_2,\cdots\right)$,它们的共同本征函数记为 ψ_k (k 是一组量子数的笼统记号).若给定 k 之后就能够确定体系的一个可能状态,则 $\hat{A}\left(\hat{A}_1,\hat{A}_2,\cdots\right)$ 构成体系的一组力学量完全集.力学量完全集中厄米算符的数目与体系的自由度数相同.

74、氢原子在外电场作用下所产生的谱线分裂现象,称为氢原子的 stark 效应.加入外电场后,势场的对称性受到破坏,能级发生分裂,使简并部分被消除,可用简并情况下的微扰理论来处理.在一级 stark 效应中,由于通常情况下,外电场强度比起原子内部的电场强度要小得多,故可以把外电场看作微扰.

75、将 $\hat{\vec{S}}=\dfrac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$ 代入自旋角动量定义式 $\hat{\vec{S}}\times\hat{\vec{S}}=i\hbar\hat{\vec{S}}$ 得 $\hat{\vec{\sigma}}\times\hat{\vec{\sigma}}=2i\hat{\vec{\sigma}}\neq i\hbar\hat{\vec{\sigma}}$,即算符 $\hat{\vec{\sigma}}$ 不满足角动量定义式.

76 经典物理无法解释近代物理出现的黑体辐射，光电效应，原子光谱与原子结构等问题。在 Plank, Einstein, Bohr, de Broglie 等的基础上，Heisenberge, Schrodinger, 分别提出矩阵力学、波动力学，经 Dirac, Pauli 等人的完善发展形成了当今的量子力学。

77 ， $\hat{L}_y=z\hat{p}_x-x\hat{p}_z=-i\hbar z\dfrac{\partial}{\partial x}+i\hbar x\dfrac{\partial}{\partial z}$

$\hat{L}_z=x\hat{p}_y-y\hat{p}_x=-i\hbar x\dfrac{\partial}{\partial y}+i\hbar y\dfrac{\partial}{\partial x}$,

$\hat{\mathrm{L}}^2=-\hbar^2\left[\left(\mathrm{y}\dfrac{\partial}{\partial \mathrm{z}}-\mathrm{z}\dfrac{\partial}{\partial \mathrm{y}}\right)^2+\left(\mathrm{z}\dfrac{\partial}{\partial \mathrm{x}}-\mathrm{x}\dfrac{\partial}{\partial \mathrm{z}}\right)^2+\left(\mathrm{x}\dfrac{\partial}{\partial \mathrm{y}}-\mathrm{y}\dfrac{\partial}{\partial \mathrm{x}}\right)^2\right]$

78 不一定成立，仅当 $l=l'$ 时成立。因为角动量的本征态（对应量子数 l）是关于角向正交归一的。

79 不适用， n 很大时， $E_n^{(0)}-E_m^{(0)}$ 可能很小， $\left|\dfrac{\mathrm{H}'_{\mathrm{mn}}}{\mathrm{E}_{\mathrm{n}}^{(0)}-\mathrm{E}_{\mathrm{m}}^{(0)}}\right|<<1$ 不成立，

H' 不能看作微扰。对定态简并情形也一样。

80 $\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}$ ， $\hat{\vec{J}}\times\hat{\vec{J}}=i\hbar\hat{\vec{J}}$ ，自旋按后者定义 $\hat{\vec{S}}\times\hat{\vec{S}}=i\hbar\hat{\vec{S}}$

81. 由 $\int\delta(x)dx=1$ x 量纲为[L] 知， $\delta(x)$ 的量纲为[L]$^{-1}$。

82. 在定态问题中， $\hat{H}=\hat{T}+\hat{U}$ ，

$E=\overline{T}+\overline{U}=\dfrac{\overline{p^2}}{2\mu}+\overline{U}\geq\overline{U}\geq U_{\min}$ ，

即定态能量的最小值不可能低于势能的最小值。

83. 一维线性谐振子能量本征值方程 $\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$ ，其中

$E_n=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$

$\psi_n=N_n\,exp\left(-\dfrac{\alpha^2x^2}{2}\right)H_n(\alpha x)$

引入产生、消灭算符 $\hat{a}^+=\dfrac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x-\dfrac{i}{\mu\omega}\hat{p}\right)$ $\hat{a}=\dfrac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x+\dfrac{i}{\mu\omega}\hat{p}\right)$

因 $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2\mu}+\dfrac{1}{2}\mu\omega^2x^2$ 故 $\hat{H}=\left(\hat{a}^+\hat{a}+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega=\left(\hat{N}+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$ ， 以 Dirac 符号 $|n\rangle$ 表示 ψ_n ，则 $\hat{N}|n\rangle=n|n\rangle$ ，算符 $\hat{N}$ 的本征值为 n, 以 $|n\rangle$ 为基矢的表象称为占有数表象。

84．令 $\hat{A}^+=\hat{A},\hat{B}^+=\hat{B},\hat{C}=\hat{A}\hat{B}$，则 $\hat{C}^+=\left(\hat{A}\hat{B}\right)^+=\hat{B}^+\hat{A}^+=\hat{B}\hat{A}$，若 $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$ 则 $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$，有 $\hat{C}^+=\left(\hat{A}\hat{B}\right)^+=\hat{A}\hat{B}=\hat{C}$,即 $\hat{C}$ 为厄米算符。

85. 在量子跃迁问题中，一级近似时忽略光波中磁场对原子的作用能，并假设光波长远大于原子线度，得出跃迁几率 $\omega_{k\to m}\propto\left|e\vec{r}_{mk}\right|^2$，其中 $e\vec{r}$ 为电子偶极矩，故称此种近似处理方法为偶极近似。

86、旧量子理论有下列不足：其角动量量子化的假设很生硬；比氢原子稍复杂的体系解释的不好；即使是氢原子，对其谱线强度也无能为力。
量子力学的优点：量子化是解方程得出的很自然的结果；可以解释比氢原子更复杂的原子；对于氢原子不仅可以给出谱线的位置，也可以给出谱线的强度。

87、设 $\hat{L}_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ 的本征值为 $m\hbar$，本征函数 $\phi_m=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$，其中 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$.

88、一个物理体系存在束缚态的条件是：存在能量值，其大小小于无穷远处的势能，且对应该能量的方程存在满足无穷远处为零的边界条件的解。

89、一个抽象的希尔伯特空间中的矢量可以按照不同的完备基展开,称为不同的表象.设力学量完全集 A 的共同正交归一本征函数组为 $\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3,\cdots\varphi_m$，力学量完全集 B 的共同正交归一本征函数组为 $\phi_1,\phi_2,\phi_3,\cdots\phi_m$,将$\{\phi_n\}$用$\{\varphi_n\}$展开得到基矢的变换规则：$\phi_\beta=\sum_n S_{n\beta}\varphi_n$，以 $S_{n\beta}$ 为矩阵元的矩阵 S 为变换矩阵满足 $SS^+=1$。把矢量 ψ 用两组基展开, $\psi=\sum_n a_n\phi_n=\sum_n b_n\varphi_n$,坐标分量的变换规则为 $a_k=\sum_n S_{kn}b_n,b_k=\sum_n(S^{-1})_{kn}a_n$，力学量在不同表象下的矩阵元之间的变换规则为 $F^B_{\alpha\beta}=\sum_i\sum_j(S^{-1})_{\alpha i}F^A_{ij}S_{j\beta}$,即 $F^B=S^{-1}F^AS$.

90、$\hat{J}^2=\left(\hat{J}_1+\hat{J}_2\right)^2=\hat{J}_1^2+\hat{J}_2^2+\hat{J}_1\hat{J}_2+\hat{J}_2\hat{J}_1$

由于 $\hat{J}_1$ 和 $\hat{J}_2$ 对易，故 $\hat{J}^2=\left(\hat{J}_1+\hat{J}_2\right)^2=\hat{J}_1^2+\hat{J}_2^2+2\hat{J}_1\cdot\hat{J}_2$

$$\begin{aligned}\therefore\left[\hat{J}^2,\hat{J}_1^2\right]&=\left[\hat{J}_1^2,\hat{J}_1^2\right]+\left[\hat{J}_2^2,\hat{J}_1^2\right]+2\left[\hat{J}_1^2,\hat{J}_1\cdot\hat{J}_2\right]\\&=0+0+2\hat{J}_1\cdot\left[\hat{J}_1^2,\hat{J}_2\right]+2\left[\hat{J}_1^2,\hat{J}_1\right]\cdot\hat{J}_2\\&=0\end{aligned}$$

91．旧量子论即玻尔(Bohr)的量子论（稳恒轨道＆定态跃迁＆量子化条件）加上索末菲(Sommerfeld)在此基础上的推广，故亦称玻尔理论或玻尔与索末菲的理论.由于经典理论在两者的头脑中已根深蒂固，这使得他们把量子力学的研究对象——微观粒子（电子，原子等）看作经典力学中的质点，进而把经典力学的规律用在微观粒子上. 这样，就造成了旧量子论存在以下几点不足：

①“角动量是 $\hbar$ 的整数倍”这一量子化条件很生硬.

②只能很好解释氢原子或较好解释只有一个价电子（Li,Na,K 等）的光谱结构，而对于稍复杂例如简单程度仅次于氢原子的氦原子，则已无能为力.

③即使对于氢原子，也只能求其谱线频率，而不能求其强度.

92. 由于量子力学在描述微观粒子的运动时，认为它没有确定的轨道，而是用波函数绝对值的平方表示粒子在空间各处出现的（相对）几率. 因此在解释原子中电子的运动时，量子力学可用电子云图形象地表示出电子在空间各处出现的几率. 基于此，对于旧量子论中氢原子的“轨道”，量子力学解释为电子在原子核周围运动的径向几率密度最大处.

93. 由 $[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hbar\hat{L}_z$ 知，算符 $\hat{L}_x,\hat{L}_y$ 不对易. 但在态 Y_{00} 中，由① $\hat{L}_zY_{00}=0$ 得到 $L_z=0$；② $\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$

在此态中地位平等，得 $L_x = \hat{L}_y = 0$. 即两个不对易的力学量不一定不能同时确定.

实际上“在角动量 $\hat{\vec{J}}$ 的任何一个直角坐标分量（$\hat{J}_z$）的本征态下，$\hat{\vec{J}}$ 的另外两个分量（$\hat{J}_x, \hat{J}_y$）的平均值均为 0.”——参见钱伯初与曾谨言所著《量子力学习题精选与剖析》（第二版）第 165 页.

94. 在量子力学的近似方法中，微扰法有一定的适用范围，即当其中的 $\hat{H}^{(0)}$ 部分的本征值与本证函数未知，或 $\hat{H}'$ 不是很小时，微扰法就不再适用. 变分法不受上述条件的制约，但在求解基态以上近似时则相当麻烦，故只常用来求解基态能级与基态波函数. 其基本思想是：

对于某一确定体系，用任意波函数 ψ 计算出的 $\hat{H}$ 的平均值总是大于体系的基态能量 E_0，而只有当 ψ 恰好是体系的基态波函数 ψ_0 时，$\hat{H}$ 的平均值才等于基态的能量，相应的波函数为基态波函数. 这样，我们可以选取许多 ψ 并计算出相应 $\hat{H}$ 的平均值，这些平均值中最小的一个最接近于 E_0.

基于此，用变分法求基态能量和基态波函数的步骤为：

① 取含参量 λ，归一化，且有物理意义的尝试波函数 $\psi(\vec{r}, \lambda)$,

② 求平均值 $\overline{H}(\lambda) = \int \psi^* \hat{H} \psi d\tau$,

③ 求极小值 λ_0：$\dfrac{d\overline{H}}{d\lambda} = 0$,

④ 得基态能量 $E_0 = \overline{H}(\lambda_0)$,

基态波函数 $\psi_0 = \psi(\lambda_0, \vec{r})$.

需要注意的是，在选尝试波函数时，需要许多技巧.

95. 在 $\hat{S}_z$ 表象下.电子的三个泡利(Pauli)矩阵为：

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

96. 同人们理解所有基本概念的过程一样，人们对物质粒子波动性的理解也并非一帆风顺：由于深受经典概念的影响，包括波动力学的创始人在内，他们把电子衍射实验中的电子波看成三维空间中连续分布的某种物质波包，波包的大小即电子的大小，波包的群速度即电子的运动速度.但这种观点连自由粒子的运动都无法解释:随着时间的推移，与自由粒子对应的物质波包必然要扩散，即导致粒子越来越“胖”，这与实际相矛盾;物质波包的观点夸大了波动性的一面，抹杀了粒子性的一面，带有片面性;

与物质波包相反的另一种看法是，波动性是由于有大量粒子分布于空间而形成的疏密波.但电子衍射实验表明:即使是单个电子也具有波动性.这种观点夸大了粒子性的一面，而抹杀了粒子具有波动性的一面.

以上观点的局限在于试图用经典的观点给予解释.

经典力学中说到一个“粒子”时，意味着一个具有一定质量和电荷等属性的客体，物质粒子的这种“原子性”是实验证实了的.而粒子具有完全确定轨道的看法在宏观世界里则只是一个很好的近似，无限精确的轨道概念从来也没有为实验所验证过;经典力学中说到一个“波动”时，总是意味着某种实

在的物理量的周期性空间分布.但实际上,更本质的在于波的相干叠加性.

分析电子衍射实验可知,电子所呈现出来的粒子性,只是经典粒子概念中的“原子性”,而并不与“粒子具有确定的轨道”的概念相联系;电子所呈现的波动性，也只不过是波动最本质的东西——波的叠加性，而不与某种实在的物理量在空间的波动相联系.

把粒子性与波动性统一起来,更确切的说,把微观粒子的“原子性”与波的“叠加性”统一起来的是 M.Born(1928),他在用薛定谔方程处理散射问题时为解决散射粒子的角分布而提出了波函数的统计解释：波函数在空间中某一点的强度和在该点找到粒子的几率成比例.即描写粒子的波为几率波.

97．定态薛定谔方程:$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+U\right)\Psi=E\Psi$.

取其复共轭: $\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+U\right)\Psi^*=E\Psi^*$, ($\because E$ 为实数,且$U^*=U$)

即Ψ^*也是对应同一本征能级的解.

如果能级不兼并,则Ψ 与Ψ^*是同一量子态,故可设$\Psi^*=c\Psi$ (c 为常数).取复共

轭:$\Psi=c^*\Psi^*=|c|^2\Psi\Rightarrow|c|=1\Rightarrow c=e^{i\alpha}$,$\alpha$ 为实数,取相位$\alpha=0$,则$\Psi^*=\Psi$ 即Ψ 可以取为实数.

98．我们知道,几何中的矢量,经典力学中的规律,都和所选坐标系无关.同样量子力学的规律也应和所选用的表象无关,态和力学量的描述可以不涉及具体表象,为此 Dirac 最先引入了狄拉克符号.

99．前提是$\hat{H}=\hat{H}^{(0)}+\hat{H}'$中:①$\hat{H}^{(0)}\psi_n^{(0)}=E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$已解出, ②$\hat{H}'$是小量.

理论适用条件:$\left|\frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\right|\ll 1\quad\left(E_n^{(0)}\neq E_m^{(0)}\right)$.

即不仅决定于矩阵元H'_{mn}的大小,还决定于能级间的距离$\left|E_n^{(0)}-E_m^{(0)}\right|$,实际上,这一条件即$\hat{H}'$是小量的明确表示.

100．两个角动量可以是:①两个轨道角动量;②两个自旋角动量;③一个轨道角动量与一个自旋角动量. 统一用$\hat{\vec{J}}_1,\hat{\vec{J}}_2$表示. 两个角动量耦合时:

$m=m_1+m_2$,

$j=|j_1-j_2|,|j_1-j_2+1|,\cdots|j_1+j_2|$.

和j_2所满足的关系称三角关系 $\Delta(j_1,j_2,j)$.