	δ势	线性	谐振子	库仑$\kappa=Ze^2$
	$\mu=\hbar=\gamma=1$	$\mu=\hbar=F=1$	$\mu=\hbar=\omega=1$	$\mu=\hbar=\kappa=1$
能量$[E]$	$\mu\gamma^2/\hbar^2$	$\left(\hbar^2F^2/\mu\right)^{1/3}$	$\hbar\omega$	$\mu\kappa^2/\hbar^2$
长度$[L]$	$\hbar^2/\mu\gamma$	$\left(\hbar^2/\mu F\right)^{1/3}$	$\sqrt{\hbar/\mu\omega}$	$\hbar^2/\mu\kappa$
时间$[T]$	$\hbar^3/\mu\gamma^2$	$\left(\hbar\mu/F^2\right)^{1/3}$	$1/\omega$	$\hbar^3/\mu\kappa^2$
速度$[v]$	$\gamma/\hbar$	$\left(\hbar F/\mu^2\right)^{1/3}$	$\sqrt{\hbar\omega/\mu}$	$\kappa/\hbar$
动量$[p]$	$\mu\gamma/\hbar$	$\left(\hbar\mu F\right)^{1/3}$	$\sqrt{\hbar\mu\omega}$	$\mu\kappa/\hbar$

1. 数学速查

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{lmn}=\begin{vmatrix}\delta_{il}&\delta_{im}&\delta_{in}\\\delta_{jl}&\delta_{jm}&\delta_{jn}\\\delta_{kl}&\delta_{km}&\delta_{kn}\end{vmatrix}$$

$$\sum_{i=1}^{3}\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{imn}=\delta_{jm}\delta_{kn}-\delta_{jn}\delta_{km}$$

$$\left(\vec{A}\times\vec{B}\right)_k=\sum_{ij}\varepsilon_{kij}A_iB_j$$

$$\boldsymbol{\nabla}=\hat{\boldsymbol{r}}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\hat{\boldsymbol{\theta}}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r\sin\theta}\hat{\boldsymbol{\phi}}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\vec{u}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2u_r)+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta u_\theta)+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}u_\phi$$

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

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

定义 *1.1* (**连带 Legendre 多项式**):

$$(1-\xi^2)\frac{\mathrm{d}^2P}{\mathrm{d}\xi^2}-2\xi\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\xi}+\left(l(l+1)-\frac{m^2}{1-\xi^2}\right)P=0$$

$$P_l^m(x)=\frac{1}{2^l l!}(1-x^2)^{\frac{m^2}{2}}\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}(x^2-1)^l$$

定理 *1.2* (**连带 Legendre 多项式的正交性**):

$$\int_{-1}^{1}P_k^m(\xi)P_l^m(\xi)\,\mathrm{d}\xi=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{kl}$$

定义 *1.3* (**Legendre 多项式**):

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}(x^2-1)^2$$

定理 *1.4* (**Legendre 多项式的正交性**):

$$\int_{-1}^{1}P_k(x)P_l(x)\,\mathrm{d}x=\frac{2}{2l+1}\delta_{kl}$$

定理 *1.5* (**厄米多项式的正交性**):

$$\int_{-\infty}^{+\infty}H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}\,\mathrm{d}\xi=\sqrt{\pi}2^n n!\delta_{mn}$$

定理 *1.6* (**厄米多项式的递推关系**):

$$H_{n+1}(\xi)-2\xi H_n(\xi)+2nH_{n-1}(\xi)=0$$

定义 *1.7* (**合流超几何微分方程**):

$$z\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}z^2}+(\gamma-z)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}z}-\alpha y=0$$

定义 *1.8* (**合流超几何函数**):

$$F(\alpha,\gamma,z)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha_k}{\gamma_k}\frac{z^k}{k!}$$

where $\alpha_k=\alpha(\alpha+1)...(\alpha+k-1)$

$\gamma_k=\gamma(\gamma+1)...(\gamma+k-1)$

定理 *1.9* (**δ函数的性质**):

$$\delta(ax)=\frac{1}{|a|}\delta(x)$$

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ikx}\,\mathrm{d}k$$

$$x\delta(x)=0$$

$$\delta(f(x))=\sum_i\frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|}$$

定义 *1.10* (**三维δ函数**): 假设已定义一维 Dirac 函数$\delta(x)$,那么

$$\delta(\vec{r})=\delta(x)\delta(y)\delta(z)=\frac{1}{r^2\sin\theta}\delta(r)\delta(\theta)\delta(\phi)=\frac{1}{\rho}\delta(\rho)\delta(\phi)\delta(z)$$

定义 *1.11* (**球谐函数**):

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}$$

$$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_{1\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{20}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)$$

$$Y_{2\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{2\pm2}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin^2\theta e^{\pm2i\phi}$$

定理 *1.12* (**球谐函数的完备性**): 平方可积的球谐函数形成了一个希尔伯特空间

$$\iint Y_{l'm'}Y_{lm}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi=\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

$$\sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{m=-l}^{+l}Y_{lm}(\theta,\phi)Y_{l'm'}^*(\theta',\phi')=\frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')$$

定理 *1.13* (**球谐函数的递推性质**):

$$\frac{z}{r}Y_{lm}=\cos\theta Y_{lm}=a_{lm}Y_{l+1,m}+a_{l-1,m}Y_{l-1,m}$$

$$\frac{x+iy}{r}Y_{lm}=e^{+i\phi}\sin\theta Y_{lm}=b_{l-1,-(m+1)}Y_{l-1,m+1}-b_{lm}Y_{l+1,m+1}$$

$$\frac{x-iy}{r}Y_{lm}=e^{-i\phi}\sin\theta Y_{lm}=-b_{l-1,m-1}Y_{l-1,m-1}+b_{l,-m}Y_{l+1,m-1}$$

$$a_{lm}=\sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)}}$$

$$b_{lm}=\frac{\sqrt{(l+m+1)(l+m+2)}}{(2l+1)(2l+3)}$$

定理 *1.14* (**傅里叶变换**):

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{ikx}g(k)\,\mathrm{d}k$$

$$g(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-ikx}f(x)\,\mathrm{d}x$$

定理 *1.15* (**正交对角化**):

$$A=PDP^{-1}$$

$$D=\begin{pmatrix}\lambda_1&&\\&\ldots&\\&&\lambda_n\end{pmatrix},P=\begin{pmatrix}v_1&\ldots&v_n\end{pmatrix}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-a^2x^2}\,\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{\pi}}{|a|}$$

$$\int_0^{+\infty}r^ne^{-r/a}\,\mathrm{d}r=n!a^{n+1}$$

2. 算符

$$\vec{p}=-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

$$\vec{p}^2=-\hbar^2\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}$$

$$\vec{p}_r=\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$$

$$=-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r^2\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\vec{p}^2=\frac{1}{r^2}\vec{l}^2+\vec{p}_r^2$$

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

$$[l_\alpha,x_\beta]=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}i\hbar x_\gamma$$

$$[l_\alpha,p_\beta]=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}i\hbar p_\gamma$$

$$[l_\alpha,l_\beta]=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}i\hbar l_\gamma$$

$$[\vec{r},H]=\frac{i\hbar}{m}\vec{p}$$

公设 *2.1* (**Schödinger Equation**):

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

3. 中心力场

定理 *3.1* (**中心力场中运动粒子的哈密顿量**):

$$H=\frac{p^2}{2\mu}+V(r)=\frac{p_r^2}{2\mu}+\frac{\vec{l}^2}{2\mu r^2}+V(r)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\vec{l}^2}{2\mu r^2}+V(r)$$

定理 *3.2* (**中心力场中能量本征方程**):

一般将势函数分离变量为

$$\Psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

令$\chi(r)=rR(r)$,有

$$\chi_l''+\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi_l=0$$

3.1. 三维各向同性谐振子

$$V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$$

能量本征值为

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

$$N=2n_r+l$$

$$n_r,l=0,1,2,...$$

简并度为

$$f_N=\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$$

径向本征函数为

$$R_{n_rl}(r)=a^{l+3/2}\sqrt{\frac{2^{l+2-n_r}(2l+2n_r+1)!!}{\sqrt{\pi}n_r!((2l+1)!!)^2}}r^le^{-a^2r^2/2}F\left(-n_r,l+\frac{3}{2},a^2r^2\right)$$

如果在直角坐标系中求解,这两套本征态通过幺正变换联系起来

$$\varphi_{01m}=\sum_{n_xn_yn_z}\psi_{n_xn_yn_z}\int\psi_{n_xn_yn_z}^*\varphi_{01m}\,\mathrm{d}\tau$$

$$\begin{pmatrix}\varphi_{011}\\\varphi_{01-1}\\\varphi_{010}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{i}{\sqrt{2}}&0\\\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{i}{\sqrt{2}}&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_{100}\\\psi_{010}\\\psi_{001}\end{pmatrix}$$

类氢离子($He^+,Li^{++},...$)需将核电荷数+e换成+Ze,约化质量换成相应的μ

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

3.2. 氢原子

化为单体问题后有

$$V(r)=-\frac{e^2}{r}$$

定义 *3.2.1* (**Bohr 半径**): $a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$

能量本征值为

$$E_n=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}=-\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}$$

$$n=n_r+l+1$$

$$n_r=0,1,2,...$$

径向本征函数为

$$R_{nl}(r)=\frac{2}{a^{3/2}n^2(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+1)!}{(n-l-1)!}}e^{-\xi/2}\xi^lF(-n_r,2l+2,\xi)$$

where $\xi=\frac{2r}{na}$

$$R_{10}=\frac{2}{a^{3/2}}e^{-r/a}$$

$$R_{20}=\frac{1}{\sqrt{2}a^{3/2}}\left(1-\frac{r}{2a}\right)e^{-r/2a}$$

$$R_{21}=\frac{1}{2\sqrt{6}a^{3/2}}\frac{r}{a}e^{-r/2a}$$

$$R_{30}=\frac{2}{3\sqrt{3}a^{3/2}}\left(1-\frac{2r}{3a}+\frac{2}{27}\frac{r^2}{a^2}\right)e^{-r/3a}$$

本征函数为

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

简并度为

$$f_n=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$$

统计意义上,电子的电流密度(绕 z 轴的环电流密度)为

$$\vec{j}=\frac{ie\hbar}{2\mu}(\psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi-\psi\boldsymbol{\nabla}\psi^*)=-\frac{e\hbar m}{\mu}\frac{1}{r\sin\theta}|\psi_{nlm}|^2\hat{\boldsymbol{e}}_\phi$$

总的磁矩为

$$\overrightarrow{M}=-\frac{e\hbar m}{2\mu c}\hat{\boldsymbol{z}}\int|\psi_{nlm}|^2\,\mathrm{d}\tau=-\frac{e\hbar m}{2\mu c}\hat{\boldsymbol{z}}$$

定义 *3.2.2* (**Bohr 磁子**):

$$\mu_B=\frac{e\hbar}{2\mu c}$$

定义 *3.2.3* (**Larmor 频率**):

$$\omega_L=\frac{eB}{2\mu c}$$

4. 角动量和自旋

4.1. 角动量

定义 *4.1.1* (**角动量**): $\vec{l}=\vec{r}\times\vec{p}$

$$l_x=i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$l_y=i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$l_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\vec{l}\times\vec{l}=i\hbar\vec{l}$$

$$\vec{l}^2=l_z^2+l_y^2+l_z^2=-\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}l_z^2$$

定义 *4.1.2* (**角动量升降算符**):

$$J_\pm=J_x\pm iJ_y$$

$$J_\pm J_\mp=\vec{J}^2-J_z^2\pm\hbar J_z$$

$$\vec{J}^2=\frac{1}{2}(J_+J_-+J_-J_+)+J_z^2$$

$$[J_+,J_-]=2\hbar J_z,[J_z,J_\pm]=\pm\hbar J_\pm$$

$$[J_x,J_\pm]=\mp\hbar J_z,[J_y,J_\pm]=-\hbar J_z$$

$$\left[\vec{J}^2,J_\pm\right]=0$$

$$J_\pm|jm\rangle=\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}|jm\pm1\rangle$$

4.2. 自旋

定义 *4.2.1* (**Pauli 矩阵**):

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

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta=\delta_{\alpha\beta}+i\sum_\gamma\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma$$

$$\sigma_\alpha=\sigma_\alpha^\dagger$$

定义 *4.2.2* (**磁矩算符**):

$$\vec{\mu}=g\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{j}$$

$$\vec{j}=\vec{s},\vec{l},g_l=-1,g_s=-2$$

定义 *4.2.3* (**磁矩磁场相互作用能**):

$$W=-(\vec{\mu}_l+\vec{\mu}_s)\cdot\vec{B}$$

定义 *4.2.4* (**旋量波函数**):

$$\psi(\vec{r},s_z)=\begin{pmatrix}\psi_1(\vec{r},+\frac{\hbar}{2})\\\psi_2(\vec{r},-\frac{\hbar}{2})\end{pmatrix}$$

在哈密顿量不含自旋或可以表示成与自旋部分之和的时候

$$\psi(\vec{r},s_z)=\psi(\vec{r})\chi(s_z)$$

$$\alpha=\chi_{+1/2}(s_z)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$\beta=\chi_{-1/2}(s_z)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

4.3. 耦合与非耦合表象的基底变换

$$|j_1j_2jm\rangle=\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}C^{j_1j_2jm}_{j_1m_1j_2m_2}|j_1m_1j_2m_2\rangle$$

$$C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}=\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle$$

4.4. 电子耦合与非耦合表象变换

$$\Psi_{l,j=l+\frac12,m_j}=\frac{1}{\sqrt{2j}}\begin{pmatrix}\sqrt{j+m_j}Y_{l,m_j-\frac12}\\\sqrt{j-m_j}Y_{l,m_j+\frac12}\end{pmatrix}$$

$$\Psi_{l,j=l-\frac12,m_j}=\frac{1}{\sqrt{2j+2}}\begin{pmatrix}-\sqrt{j-m_j+1}Y_{l,m_j-\frac12}\\\sqrt{j+m_j+1}Y_{l,m_j+\frac12}\end{pmatrix}$$

$$Y_{lm_l}\chi_{\frac12}=\sqrt{\frac{l+m_l+1}{2l+1}}\Psi_{l,j=l+\frac12,m_l+\frac12}-\sqrt{\frac{l-m_l}{2l+1}}\Psi_{l,j=l-\frac12,m_l+\frac12}$$

$$Y_{lm_l}\chi_{-\frac12}=\sqrt{\frac{l-m_l+1}{2l+1}}\Psi_{l,j=l+\frac12,m_l-\frac12}+\sqrt{\frac{l+m_l}{2l+1}}\Psi_{l,j=l-\frac12,m_l-\frac12}$$

定义 *4.4.1* (**自旋三重态与单态**): 选择$\left\{\vec{S}^2,S_z\right\}$作为对易自旋力学量完全集

$$\vec{S}^2\chi_{SM_S}=S(S+1)\hbar^2\chi_{SM_S}$$

$$S_z\chi_{SM_S}=M_S\hbar\chi_{SM_S}$$

χ_{SM_S}	S	M_S
$\alpha_1\alpha_2$	1	1
$\frac{1}{\sqrt2}(\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2)$	1	0
$\beta_1\beta_2$	1	−1
$\frac{1}{\sqrt2}(\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2)$	0	0

$$(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)^2=3-2\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$$

5. 定态微扰

$$H=H_0+W$$

一些情况下,基态无简并,可用非简并微扰论处理基态,简并微扰论处理激发态.

5.1. 非简并微扰论

$$E_n^1=\langle\psi_n^0|W|\psi_n^0\rangle=W_{nn}$$

$$\psi_n^1=\sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_m^0|W|\psi_n^0\rangle}{E_n^0-E_m^0}|\psi_m^0\rangle$$

$$E_n^2=\langle\psi_n^0|W|\psi_n^1\rangle=\sum_{m\neq n}\frac{|W_{mn}|^2}{E_n^0-E_m^0}$$

5.2. 简并微扰论

对某能级n

$$|\psi^0\rangle=\sum_{\mu=1}^{f_n}a_\mu|\psi_{n\mu}^0\rangle$$

$$\sum_\mu(W_{\mu'\mu}-E_n^1\delta_{\mu'\mu})a_\mu=0$$

$$\det(W_{\mu'\mu}-E_n^1\delta_{\mu'\mu})=0$$

$$E_n^1=E_{n\alpha}^1,\alpha=1,2,...,f_n$$

6. 跃迁

对于哈密顿量不含时的体系,通过 Schödinger 方程可求解体系随时间的演化,含时的情况要用含时微扰处理.

6.1. 含时微扰

$$H(t)=H_0+H'(t)$$

$$\Psi(t)=\sum_nC_{nk}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}|n\rangle,C_{nk}(0)=\delta_{nk}$$

定理 *6.1.1* (**一级 Dirac 近似公式**): 从$t=0$到t时刻,体系从$|k\rangle$跃迁到$|k'\rangle$的概率幅

$$C_{k'k}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^tH'_{k'k}(t)e^{i\omega_{k'k}t}\,\mathrm{d}t$$

$$P_{k'k}(t)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^tH'_{k'k}(t)e^{i\omega_{k'k}t}\,\mathrm{d}t\right|^2$$

$$H'_{k'k}(t)=\langle k'|H'(t)|k\rangle,\omega_{k'k}=\frac{E_{k'}-E_k}{\hbar}$$

6.2. 光的吸收与辐射

$$H=-\vec{D}\cdot\vec{E}$$

7. 矩阵形式

定理 *7.1* (**幺正变换**): 对 2 套各自正交归一的基矢,存在幺正算符

$$U=\sum_n|b_n\rangle\langle a_n|$$

使得

$$|b_1\rangle=U|a_1\rangle,...,|b_n\rangle=U|a_n\rangle$$

$$\langle p|x\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$\langle x|p\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$\langle p|H|\psi\rangle=\frac{p^2}{2m}\langle p|\psi\rangle+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\langle p|\psi\rangle$$

8. 势阱的解

8.1. 一维无限深方势阱

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2\text{ where }n=1,2,3,...$$

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)&\text{if }0<x<a\\0&\text{elsewhere}\end{cases}$$

8.2. 一维谐振子

$$V(x)=\frac12kx^2$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2}+(\lambda-\xi^2)\psi=0$$

$$\text{where }\omega=\sqrt{\frac{k}{m}},\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega},\xi=x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$E_n=\left(n+\frac12\right)\hbar\omega$$

$$\psi_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac14}\frac{1}{\sqrt{2^nn!}}H_n(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\text{where }H_n(x)=(-1)^ne^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}e^{-x^2}$$

$$a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{ip}{m\omega}\right)$$

$$a^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x-\frac{ip}{m\omega}\right)$$

$$N=a^\dagger a$$

$$\left[a,a^\dagger\right]=1$$

$$H|n\rangle=\left(n+\frac12\right)\hbar\omega|n\rangle$$

$$E_n=\left(n+\frac12\right)\hbar\omega$$

$$[N,a]=-a$$

$$\left[N,a^\dagger\right]=a^\dagger$$

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

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

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle$$

$$a|0\rangle=0$$

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac14}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\langle x|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left\langle x\middle|\left(a^\dagger\right)^n\middle|0\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2^nn!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac14}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x+\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^ne^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

9. 守恒量

定理 *9.1* (**Ehrenfest**): 若力学量A不显含时间,有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle$$

证明: 考虑力学量$A(t)$在任意$|\psi(t)\rangle$上的演化,可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle=\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle$$

此外A不显含时间,有$\frac{\partial A}{\partial t}=0$. ■

定理 *9.2*: 若力学量A不显含时间,且$[A,H]=0$,则A在任何$|\psi(t)\rangle$下的平均值与概率分布均不变.

例 *9.1*: 中心力场中的守恒量为$\left\{H,\vec{l}^2,l_z\right\}$.

例 *9.2*: 自由粒子的态可以用$\{p_x,p_y,p_z\}$标记,对应能量的简并度一般是无穷大.

定理 *9.3* (**Feynman-Hellmann**): 若系统哈密顿量含有某参数λ,E_n为哈密顿量的本征值,相应归一化本征态(束缚态)为$|\psi_n\rangle$,有

$$\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}=\left\langle\psi_n\middle|\frac{\partial H}{\partial\lambda}\middle|\psi_n\right\rangle$$

定理 *9.4* (**位力(virial)**): 处于势场$V(\vec{r})$中的粒子,动能算符在定态上的平均值为

$$\langle T\rangle=\frac12\langle\vec{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}V\rangle$$

推论 *9.4.1*: 当势能为坐标的n次齐次函数时,有

$$\langle T\rangle=\frac{n}{2}\langle V\rangle$$

10. Born 近似法

定理 *10.1* (**Lippman-Schwinger 方程**):

$$\psi(\vec{r})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\int\mathrm{d}^3r'G(\vec{r},\vec{r}')V(\vec{r}')\psi(\vec{r}')=\psi_i(\vec{r})+\psi_{\mathrm{sc}}(\vec{r})$$

$$G(\vec{r},\vec{r}')=G(\vec{r}-\vec{r}')=-\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

$$\psi(\vec{r})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\mathrm{d}^3r'\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}V(\vec{r}')\psi(\vec{r}')$$

定义 *10.2* (**散射边界条件**):

$$\psi_{\mathrm{sc}}(\vec{r})\overset{r\to\infty}{\longrightarrow}f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

定理 *10.3* (**Born 近似方法**): 将$\psi(\vec{r}')$用零级近似解$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}$代替

$$\psi(\vec{r})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\mathrm{d}^3r'\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}V(\vec{r}')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}$$

$$f(\theta,\phi)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\mathrm{d}^3r'e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'}V(\vec{r}')$$

如$V(\vec{r})$只与r有关,积掉θ,ϕ有

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2q}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r'r'\sin(qr')V(r')$$

$$q=2k\sin(\theta/2)$$

定义 *10.4* (**散射截面**): $\sigma(\theta,\phi)=\frac{1}{j_1}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\Omega}$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2$$