量子力学

246页

数学补充知识

一、微分方程.

微分方程所含的导数或微分的最高阶数 称为微分方程的阶数

1. 一阶线性微分方程.

① 一阶齐次线性微分方程.

$$\frac{dy}{dx}+p(x)y=0.$$

即 $d(\ln y)=-p(x)dx$

通解: $y=Ce^{-\int p(x)dx}$

② 一阶非齐次线性微分方程.

$$\frac{dy}{dx}+p(x)y=Q(x)\quad(Q(x)\neq 0)$$

用常数变易法, 即将齐次方程解中的常数变为关于x的函数.

$$y=C(x)e^{-\int p(x)dx}$$

代回原方程. 得.

方程的解 $y=\left[\int Q(x)e^{\int p(x)dx}dx+C\right]e^{-\int p(x)dx}.$

2. 可分离变量的微分方程.

$$\frac{dy}{dx}=\varphi(x,y)=f(x)\cdot g(y).$$

即 $\int\frac{dy}{g(y)}=\int f(x)\,dx$

3. 伯努利方程.

$$\frac{dy}{dx}+P(x)y=Q(x)y^{n}.\quad(n\neq 0)$$

令 $z=y^{1-n}$. 转换成一阶非齐次线性微分方程.

4. 可降阶微分方程.

① $y^{(n)}=f(x)$. 不定积分n次

② $f(x,y',y'')=0$. 令 $y'=p$.

③ $f(y,y',y'')=0$ 令 $y'=p$

5. 二阶常系数线性微分方程

$$y''+py'+qy=0$$

特征方程: $r^2+pr+q=0$

(i) 实根 r_1, r_2. $r_1\neq r_2$. $y=C_1e^{r_1x}+C_2e^{r_2x}$

(ii) 重根 $r_1=r_2$. $y=(C_1+C_2x)e^{r_1x}$

(iii) 虚根 $r_{1,2}=\alpha\pm\beta i$ $y=C_1e^{(\alpha+\beta i)x}+C_2e^{(\alpha-\beta i)x}=e^{\alpha x}(C_1\cos\beta x+C_2\sin\beta x).$

6. 二阶常系数非齐次线性微分方程.

齐次方程通解 + 非齐次方程特解.

二. 三种矩阵乘法.

1. 普通内积. (matmul product)

$$A=\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}\\a_{21}&a_{22}&a_{23}\end{pmatrix}\quad B=\begin{pmatrix}b_{11}&b_{12}\\b_{21}&b_{22}\\b_{31}&b_{32}\end{pmatrix}$$

$$C=AB=\begin{pmatrix}a_{11}b_{11}+a_{12}b_{21}+a_{13}b_{31}&a_{11}b_{12}+a_{12}b_{22}+a_{13}b_{32}\\a_{21}b_{11}+a_{22}b_{21}+a_{23}b_{31}&a_{21}b_{12}+a_{22}b_{22}+a_{23}b_{32}\end{pmatrix}.$$

2. 哈达马积 (Hadamard product)

$$\begin{pmatrix}1&3&2\\1&0&0\\1&2&2\end{pmatrix}*\begin{pmatrix}0&0&2\\7&5&0\\2&1&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\cdot0&3\cdot0&2\cdot2\\1\cdot7&0\cdot5&0\cdot0\\1\cdot2&2\cdot1&2\cdot1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0&4\\7&0&0\\2&2&2\end{pmatrix}$$

3. 克罗内克积 (kronecker product)

$$\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}\\a_{21}&a_{22}\\a_{31}&a_{32}\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}b_{11}&b_{12}&b_{13}\\b_{21}&b_{22}&b_{23}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_{11}B&a_{12}B\\a_{21}B&a_{22}B\\a_{31}B&a_{32}B\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_{11}b_{11}&a_{11}b_{12}&a_{11}b_{13}&a_{12}b_{11}&a_{12}b_{12}&a_{12}b_{13}\\a_{11}b_{21}&a_{11}b_{22}&a_{11}b_{23}&a_{12}b_{21}&a_{12}b_{22}&a_{12}b_{23}\\a_{21}b_{11}&a_{21}b_{12}&a_{21}b_{13}&a_{22}b_{11}&a_{22}b_{12}&a_{22}b_{13}\\a_{21}b_{21}&a_{21}b_{22}&a_{21}b_{23}&a_{22}b_{21}&a_{22}b_{22}&a_{22}b_{23}\\a_{31}b_{11}&a_{31}b_{12}&a_{31}b_{13}&a_{32}b_{11}&a_{32}b_{12}&a_{32}b_{13}\\a_{31}b_{21}&a_{31}b_{22}&a_{31}b_{23}&a_{32}b_{21}&a_{32}b_{22}&a_{32}b_{23}\end{pmatrix}$$

三. 几个简单有用的张量积性质.

1. 双线性

$(\alpha+\gamma)\otimes\beta=\alpha\otimes\beta+\gamma\otimes\beta$ $\alpha,\gamma\in V.$ $\beta\in U$

$\alpha\otimes(\beta+\eta)=\alpha\otimes\beta+\alpha\otimes\eta$ $\alpha\in V.$ $\beta,\eta\in U$

$(k\alpha)\otimes\beta=k(\alpha\otimes\beta)=\alpha\otimes(k\beta)$ $\alpha\in V.$ $\beta\in U$ $k\in F$

2. α_n 是 V 的基. β_m 是 U 的基. 则 $\alpha_i\otimes\beta_j$ $i=1,2,\cdots n.$ $j=1,2,\cdots,m$ 是 $V\times U$ 的基.

3.线性变换的张量积.

设 $(A\otimes B)(\alpha\otimes\beta)=A\alpha\otimes B\beta$ 称为A与B的张量积.

有 ① $(A_1+A_2)\otimes B=A_1\otimes B+A_2\otimes B$

② $A\otimes(B_1+B_2)=A\otimes B_1+A\otimes B_2$

③ $(A_1\otimes B_1)(A_2\otimes B_2)=A_1A_2\otimes B_1B_2$.

④ $(kA)\otimes B=A\otimes(kB)=k(A\otimes B)$

⑤ $I_V\otimes I_U=I_{V\otimes U}$

⑥ 若A,B可逆,则 $A\otimes B$ 也可逆,且 $(A\otimes B)^{-1}=A^{-1}\otimes B^{-1}$

4. V,U 分别是n维,m维空间,A,B分别是V,U上的线性变换

若A,B分别可对角化,则 $A\otimes B$ 也可对角化.

且若 A的全部特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$. B的全部特征值为 $\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_m$.

则 $A\otimes B$ 的全部特征值为 $\lambda_1\mu_1,\lambda_1\mu_2,\cdots,\lambda_1\mu_m,\cdots,\lambda_n\mu_1,\cdots,\lambda_n\mu_m$.

四.积分结论

1. 点火公式(张宇)

$n>0$. $\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin^{2n}t\,dt=\frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}\frac{\pi}{2}=\frac{2n-1}{2n}\frac{2n-3}{2n-2}\cdots\frac{1}{2}\frac{\pi}{2}$ 点火

$n\geq1$ $\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin^{2n-1}t\,dt=\frac{(2n-2)!!}{(2n-1)!!}=\frac{(2n-2)!!}{(2n-1)!!}=\frac{2n-2}{2n-1}\frac{2n-4}{2n-3}\cdots\frac{2}{3}$ 熄火

2. 有关伽马函数: 注意积分上下限,记不清了就硬积; :见热学P7

$\int_0^{\infty}x^ne^{-x}dx=\Gamma(n+1)=n!$ (I)

$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}x^{2n}dx=\Gamma\left(\frac{2n+1}{2}\right)$, $\Gamma(\frac{1}{2})=\sqrt{\pi}$. $\Gamma(x+1)=x\Gamma(x)$

n为非负整数

由(I),令 $x=t^2$ 得

$\int_{0}^{+\infty}e^{-x^2}\cdot x^{2n+1}dx=\frac{\Gamma(n+1)}{2}=\frac{n!}{2}$

$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}x^{2n+1}dx\overset{奇函数}{=\!=}0$

总结: (1) $\int_0^{+\infty}x^ne^{-x}=n!$

(2) $\int_0^{+\infty}x^m\cdot e^{-x^2}\begin{cases}=\frac{m-1}{2}\cdot\frac{m-3}{2}\cdot\frac{m-5}{2}\cdots\cdots\frac{1}{2}\times\frac{\sqrt{\pi}}{2} & m为偶数\quad m=0时为\frac{\sqrt{\pi}}{2}\\ =\frac{m-1}{2}\cdot\frac{m-3}{2}\cdot\frac{m-5}{2}\cdots\cdots1\times\frac{1}{2} & m为奇数.\quad m=1时为\frac{1}{2}\end{cases}$

常系数线性微分方程组解法:

$\begin{cases}\frac{du_1}{dt}=-u_1+2u_2\\ \frac{du_2}{dt}=u_1-2u_2.\end{cases}$ $u(0)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $\Leftrightarrow$ $\begin{pmatrix}\dot u_1\\ \dot u_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&2\\1&-2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}$ 即 $\frac{du}{dt}=Au$.

类比普通一阶常系数微分方程,通解 $u(t)=e^{At}\cdot C_0$

$e^{At}=I+At+\frac{1}{2}(At)^2+\cdots$ 其特征向量 $V=(V_1\ V_2)=\begin{pmatrix}2&1\\1&-1\end{pmatrix}$ 对角阵 $\Lambda=\begin{pmatrix}0&0\\0&-3\end{pmatrix}$

则 $e^{\hat{A}t}=VV^{+}+V\Lambda tV^{+}+\frac{1}{2}V(\Lambda t)^2V^{+}+\cdots=V(1+\Lambda t+\frac{1}{2}(\Lambda t)^2+\cdots)V^{+}=Ve^{\Lambda t}V^{+}$

$=\begin{pmatrix}2&1\\1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{0t}&0\\0&e^{-3t}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1\\1&-1\end{pmatrix}^{+}=M$ 得到M矩阵特征值 $\lambda_1=e^{0t}$ $\lambda_2=e^{-3t}$ 特征向量 $V_1=\begin{pmatrix}2\\1\end{pmatrix}$ $V_2=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$

则 $u(t)=e^{At}C_0=MC_0=M(C_1V_1+C_2V_2)=C_1\lambda_1V_1+C_2\lambda_2V_2.=C_1e^{0t}\begin{pmatrix}2\\1\end{pmatrix}+C_2e^{-3t}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$

代入初始条件 $\Rightarrow C_1=\frac{1}{3}$ $C_2=\frac{1}{3}$ 得 $\begin{cases}u_1=\frac{1}{3}e^{-3t}+\frac{2}{3}\\ u_2=-\frac{1}{3}e^{-3t}+\frac{1}{3}\end{cases}$

由于 $V^{+}V=VV^{+}=I$

及 $\Lambda=V^{+}AV$

得 $V\Lambda=AV$ 展开 $A(V_1\cdots V_n)=\begin{pmatrix}\lambda_1&&\\&\ddots&\\&&\lambda_n\end{pmatrix}(V_1\cdots V_n)$

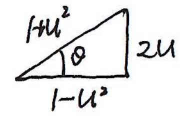
$\Rightarrow AV_i=\lambda_iV_i$

而 $A=V\Lambda V^{+}$

解三角函数积分通法 令 $u=\tan\frac{\theta}{2}$

例 $\int\frac{d\theta}{(1+\cos\theta)^2}$ 令 $u=\tan\frac{\theta}{2}$. $du=\frac{d\theta}{2\cos^2\frac{\theta}{2}}$ $\Rightarrow d\theta=\frac{2du}{u^2+1}$

$\tan\theta=\frac{2\tan\frac{\theta}{2}}{1-\tan^2\frac{\theta}{2}}=\frac{2u}{1-u^2}$



$\cos\theta=\frac{1-u^2}{1+u^2}$ $\sin\theta=\frac{2u}{1+u^2}$

量子力学(《曾谨言》卷I)背诵部分

第一章

§1.1 经典物理学碰到了哪些严重困难?

1.黑体辐射问题

Wien 韦恩:提出 Wien 公式:$E(\nu)d\nu=C_1\nu^3e^{-\frac{C_2\nu}{T}}d\nu$　低频不符合.

Rayleigh 瑞利、Jeans 金斯:提出 Rayleigh-Jeans 公式:$E(\nu)d\nu=\frac{8\pi kT}{c^3}\nu^2d\nu$　高频不符合 "紫外灾难"

Planck 普朗克:提出 Planck 公式:$E(\nu)d\nu=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}$　与实验符合最好.

2.光电效应

Hertz 赫兹:发现光电效应.

特征:(1)临界频率 ν_c.(2)光电子能量与照射光频有关,与光强无关.(3)瞬时性.

3.原子的线状光谱及其规律

Balmer 巴尔末:提出氢原子 Balmer 公式:$\tilde{\nu}=R\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right)$ $n=3,4,5,\cdots$

4.原子的稳定性.

Rutherford 卢瑟福:提出 Rutherford 模型　(1)原子的稳定性问题 (2)原子的大小问题

5.固体与分子的比热问题

Boltzmann 玻尔兹曼佯谬:极低温下,固体比热趋于 0.

§1.2 Planck-Einstein 光量子论

Planck 假设:吸收或发射电磁辐射只能以"量子"方式进行,每个量子的能量为 $\varepsilon=h\nu$

Einstein 爱因斯坦:提出光量子概念　$E=h\nu$,$p=\frac{h}{\lambda}$

解决了光电效应现象　$\frac{1}{2}mv^2=h\nu-A$

解决了 $T\to 0K$ 时固体比热趋于 0 的现象

Compton 康普顿:Compton 散射实验　$\Delta\lambda=\lambda_c(1-\cos\theta)$ 证实 Planck-Einstein 关系式

§1.3 Bohr 的量子论

Bohr 波尔:两条基本假定:(1)定态 (2)频率条件 $h\nu=E_n-E_m$.

对应原理:大量子数极限下,量子体系行为趋向与经典力学相同.

§1.4 de Broglie 的物质波.

de Broglie 德布罗意:物质波:与具有一定能量 E 及动量 P 相连系的波 $\nu=\frac{E}{h}$,$\lambda=\frac{h}{p}$

§1.5 量子力学的建立

Heisenberg 海森堡:建立矩阵力学　$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$

Schrödinger 薛定谔:建立波动力学　$i\hbar\dot{\psi}=\hat{H}\psi$

证明矩阵力学与波动力学等价

Dirac 迪拉克:提出 Dirac 相对论波动方程.

Pauli 泡利:提出 Pauli 不相容原理.　$g_s=2S+1=2$.

第二章

1.不确定关系, Heisenberg　$\Delta x\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}$　$\Delta A\Delta B\geqslant\frac{1}{2}|\langle C\rangle|$　$C=i[B,A]$

2.概率密度　$\rho=\psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$　$\vec{j}=\frac{1}{2m}(\psi^*\hat{p}\psi-\psi\hat{p}\psi^*)=-\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)=\frac{Re[\psi^*p\psi]}{m}$

电磁场中 $\vec{j}=\frac{1}{2m}\left(\psi^*[p-\frac{qA}{c}]\psi-\psi[p+\frac{qA}{c}]\psi^*\right)=\frac{Re[\psi^*(p-\frac{qA}{c})\psi]}{m}$

3.量子力学的假定:　$\vec{K}=\frac{1}{2m}\{|r\rangle\langle r|\pi+\pi|r\rangle\langle r|\}$ (电磁场)　$\vec{k}=\frac{1}{2m}\{|r\rangle\langle r|p+p|r\rangle\langle r|\}$ (标场)　$\vec{j}=\langle\psi|\vec{k}|\psi\rangle$.

描述 第一个假定:在确定的时刻 t_0,一个物理体系的态由态空间 $\mathscr{E}$ 中一个特定的右矢 $|\psi(t_0)\rangle$ 来确定.(态的描述)

第二个假定:每一个可以测量的物理量 A 都可以用在 $\mathscr{E}$ 空间中起作用的一个算符 A 来描述,这算符是观察算符(物理量的描述)

测量结果概率影响.

第三个假定:每次测量物理量 A,可能的结果,只能是对应的观察算符 A 的本征值之一 (测量的结果)

第四个假定(离散谱):若体系处于已归一化的态 $|\psi\rangle$ 中,则测量物理量 A 得到的结果为对应观察算符 A 的本征值 a_n 的概率 $P(a_n)$ 是:$P(a_n)=\sum_{i=1}^{g_n}|\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$ 式中 g_n 为 a_n 的简并度,而 $\{|u_n^i\rangle\}(i=1,2,\cdots,g_n)$ 是一组正交归一矢量,它们在对应于 A 的本征值 a_n 的本征子空间 $\mathscr{E}_n$ 中构成一个基.

第五个假定:如果对处于 $|\psi\rangle$ 态的体系测量物理量 A 得到的结果是 a_n,则刚测量之后体系的态是 $|\psi\rangle$ 在属于 a_n 的本征子空间上的归一化的投影 $\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$

演化 — 第六个假定:态矢量 $|\psi(t)\rangle$ 随时间的演变遵从薛定谔方程:$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle=H(t)|\psi(t)\rangle$

式中 $H(t)$ 是与体系的总能量相连系的观察算符.

4.叠加定理.

将对应于同一末态的诸概率幅相加.然后将对应于正交末态的诸概率相加.

第三章

1.无限深方势阱 $E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ $n=1,2,3,\cdots$ (a为势阱宽度)

$$\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx=\frac{a}{2}$$

2.散射 $\psi(x)=\begin{cases} e^{ikx}+Re^{-ikx} & x<0 \\ Se^{ikx} & x>a \end{cases}$ 反射系数: $\left|\frac{j_r}{j_i}\right|=|R|^2$ 透射系数: $\left|\frac{j_s}{j_i}\right|=|S|^2$ $|R|^2+|S|^2=1$

3.方势阱的共振透射: $E_n=-V_0+\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ 与无限深方势阱束缚能级相同. 而有限深方势阱束缚能级略低.

4.一维谐振子. $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0$, $n=0,1,2,\cdots$ $\psi_n(x)=N_n\exp(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2)H_n(\alpha x)$ $H_n(\xi)=\begin{cases}1 & n=0\\ 2\xi & n=1\\ 4\xi^2-2 & n=2\end{cases}$

$\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}}$

第四章

1. $e^{A+B}=e^Ae^Be^{-\frac{1}{2}[A,B]}$ 条件: 算符$\hat{A}$和$\hat{B}$同它们的对易关系式$[\hat{A},\hat{B}]$都对易 ②

$$e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}=\hat{B}+\lambda[\hat{A},\hat{B}]+\frac{\lambda^2}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+\frac{\lambda^3}{3!}[\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]]+\cdots \quad ①$$

①证明: 设 $F(\lambda)=e^{\lambda A}\cdot Be^{-\lambda A}$

$\frac{dF(\lambda)}{d\lambda}=[A,F(\lambda)]$ $\frac{d^2F(\lambda)}{d\lambda^2}=[A,[A,B]]$ $\cdots\cdots$

e^Ae^B 若 A,B不与[A,B]对易.

将$F(\lambda)$以泰展开 $F(\lambda)=F(0)+\lambda\frac{dF(0)}{d\lambda}+\cdots$ 代入即可

直接算 $e^{\lambda A}Be^{-\lambda A}$.

②证明: 令 $F(\lambda)=e^{\lambda A}e^{\lambda B}$ $\frac{dF(\lambda)}{d\lambda}=(A+e^{\lambda A}Be^{-\lambda A})F(\lambda)$

$\frac{de^{\lambda A}e^{\lambda B}}{d\lambda}=(A+e^{\lambda A}Be^{-\lambda A})F$

积分即可

由于 $[A,[A,B]]=0$. 则 $e^{\lambda A}Be^{-\lambda A}=B+\lambda[A,B]$

则 $\frac{dF(\lambda)}{d\lambda}=\{\hat{A}+\hat{B}+\lambda[\hat{A},\hat{B}]\}\hat{F}(\lambda)$

积分 $\frac{dF(\lambda)}{F(\lambda)}=\{A+B+\lambda[A,B]\}d\lambda$.

满足 $\hat{F}(0)=1$ 的解为 $\hat{F}(\lambda)=e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})+\frac{\lambda^2}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$ 令$\lambda=1$得证

第五章

3. $\vec{J}\times\vec{J}=i\hbar\vec{J}$

4. 证明不确定性关系, 令 $C=\xi A+iB$. 求 $\langle\psi|C^+C|\psi\rangle$

第六章

5. $e^{i\theta\vec{\sigma}}=\cos\theta+i\sin\theta\,\vec{\sigma}$

1.三维各向同性谐振子 $E_n=(N+\frac{3}{2})\hbar\omega$; $N=2n_r+l$; $n_r=0,1,2,\cdots$; $l=0,1,2,\cdots$; $N=0,1,2,\cdots$ $f(n)=\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$

2.氢原子. $E_n=-\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}$; $n=1,2,3,\cdots$ $a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$(Bohr半径) $n=n_r+l+1$ $f(n)=n^2$.

3. HF定理: $\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\lambda}\right\rangle_n$

第七章

1.质量为μ,荷电为q的粒子 $H=\frac{1}{2\mu}(\hat{\vec{p}}-\frac{q}{c}\hat{\vec{A}})^2+q\phi$

其中$\hat{\vec{p}}$为正则动量. 机械动量 $\vec{\pi}=\mu\vec{v}=\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}$

2.电子在均匀磁场$\vec{B}$中,忽略自旋影响为Landau能级 $E=(N+1)\hbar\omega_L$. $N=0,2,4,\cdots$ $\omega_L=\frac{eB}{2\mu c}$ $f(N)=\infty$

3.正常Zeeman效应. 置于强磁场中 $E_{nlm}=E_{nl}+\frac{eB}{2\mu c}m\hbar=E_{nl}+m\hbar\omega_L$

原子.

第八章 旧基$\{\psi_k\}$,新基$\{\psi'_\alpha\}$ 从旧基到新基的转换矩阵,矩阵元 $S_{k\alpha}=\langle\psi_k|\psi'_\alpha\rangle$ (左旧右新)

第九章 光子,胶子,偶偶核 → Bosen ($\hbar$)

电子(中子,质子)核子(质中)超子,夸克 → Fermi (半奇)

1. $[\sigma_i,\sigma_j]=2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$.

$\{\sigma_i,\sigma_j\}=0$.

$\sigma_i\sigma_j=i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$.

2. $(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$ 其中$\vec{A},\vec{B}$与$\vec{\sigma}$对易

3. $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2=p^2$ $S_+=\hbar\begin{pmatrix}0&\sqrt{2}&0\\0&0&\sqrt{2}\\0&0&0\end{pmatrix}$ $S_-=\hbar\begin{pmatrix}0&0&0\\\sqrt{2}&0&0\\0&\sqrt{2}&0\end{pmatrix}$

$(\vec{\sigma}\cdot\vec{l})^2=l^2-\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{l}$ $s=1$ $S_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$ $S_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix}$ $S_z=\hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$

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

5. $\vec{\mu}_s=-\frac{e}{\mu c}\vec{S}$. $\vec{\mu}_L=-\frac{e}{2\mu c}\vec{L}$ $g_l=-\frac{e}{2\mu c}$. $g_s=-\frac{e}{\mu c}$

6. $\hat{L}_\pm Y_l^m=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\,Y_l^{m\pm1}$ $\begin{cases}L_+=L_x+iL_y\\L_-=L_x-iL_y\end{cases}$

7. 正常Zeeman效应 $H=\frac{p^2}{2\mu}+V(r)+\frac{eB}{2\mu c}L_z$

反常Zeeman效应 $H=\frac{p^2}{2\mu}+V(r)+\frac{eB}{2\mu c}(L_z+2S_z)$

$E_{nljm_j}=E_{nlj}+m_j\hbar\omega_L$. $\omega_L=\frac{eB}{2\mu c}$.

8. $|1,1\rangle=|\uparrow\uparrow\rangle$

$|1,-1\rangle=|\downarrow\downarrow\rangle$

$|1,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$

$|0,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$

第十章

1. 一维谐振子 · $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega x^2=\hbar\omega\left(\frac{m\omega x^2}{2\hbar}+\frac{p^2}{2m\hbar\omega}\right)$

令 $a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+i\frac{p}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$ $\quad a^+=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-i\frac{p}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$ $\quad a$ 为降算符. a^+ 为升算符.

$a^+a=\frac{m\omega}{2\hbar}x^2+i\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}xp-i\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}px+\frac{p^2}{2m\hbar\omega}$

$=\frac{m\omega x^2}{2\hbar}+\frac{p^2}{2m\hbar\omega}-\frac{1}{2}$ $\quad$ 或 $a=\frac{p}{\sqrt{2m\hbar\omega}}-i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x$. $\quad a^+=\frac{p}{\sqrt{2m\hbar\omega}}+i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x$ $\quad [a^+,a]=-1$

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

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

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

Landau能级公式同理. $H=\frac{1}{2}(Q^2+P^2)\hbar\omega_c+\frac{1}{2m}p_z^2$. $\omega_c=2\omega_L$. $\quad Q=\sqrt{\frac{m}{\hbar\omega_c}}v_y$ $\quad P=\sqrt{\frac{m}{\hbar\omega_c}}v_x$ $\quad [Q,P]=i$ $\quad$ 守恒量: $L_3, H_\perp (p_z)$

$\Rightarrow E=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c+\frac{1}{2m}p_z^2$. $n=0,1,2,\ldots$

第十一章

1. 定态非简并微扰论. $H=H_0+H'$

$E_n=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}+E_n^{(3)}$ $\qquad \psi_n=\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}$

$E_n^{(1)}=\langle n|H'|n\rangle$ $\qquad \psi_n^{(1)}=\sum_{m\neq n}\frac{\langle m|H'|n\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}|m\rangle$

$E_n^{(2)}=\sum_{m\neq n}\frac{|\langle m|H'|n\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$

$E_n^{(3)}=\sum_{m,m'\neq n}\frac{\langle n|H'|m\rangle\langle m|H'|m'\rangle\langle m'|H'|n\rangle}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})(E_n^{(0)}-E_{m'}^{(0)})}-\sum_{m\neq n}\frac{\langle n|H'|n\rangle|\langle m|H'|n\rangle|^2}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})^2}$

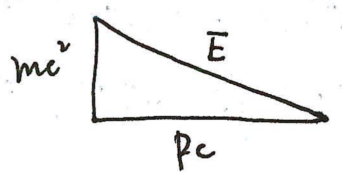
2. 定态简并微扰论.

若 $H=H_0+H'$ 在 $E_n^{(0)}$ k度简并. 对应波函数 $\psi_i^{(0)}$, $i=1,2,\ldots,k$.

通过久期方程. $\begin{vmatrix} H'_{11}-E_n^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1k} \\ H'_{21} & H'_{22}-E_n^{(1)} & \cdots & H'_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H'_{k1} & H'_{k2} & \cdots & H'_{kk}-E_n^{(1)} \end{vmatrix}=0$ $\quad$ 解出 $E_{n1}^{(1)}, E_{n2}^{(1)}\cdots E_{nk}^{(1)}$

得. $E_{n\alpha}=E_n^{(0)}+E_{n\alpha}^{(1)}$

相对论 $H=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$



第十二章.

1. 含时微扰论: $H=H_0+H'(t)$. $\psi(0)=\psi_k$.

$\psi(t)=\sum_n C_{nk}(t)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}\psi_n$

测量下得到 F_n 概率为 $P_{nk}(t)=|C_{nk}(t)|^2$

跃迁速率 $w_{nk}=\frac{d}{dt}P_{nk}(t)=\frac{d}{dt}|C_{nk}(t)|^2$.

一级近似 $C_{k'k}(t)=C_{k'k}^{(0)}+C_{k'k}^{(1)}(t)=\delta_{k'k}+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{k'k}t}H'_{k'k}dt$ $\quad \omega_{k'k}=\frac{E_{k'}-E_k}{\hbar}$

$k'\neq k$ 时

$C_{k'k}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{k'k}t}\langle k'|H'|k\rangle dt$. $\qquad$ (注意 k' 都在 k 前)

$P_{k'k}(t)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t\langle k'|H'|k\rangle e^{i\omega_{k'k}t}dt\right|^2$.

禁戒跃迁: $H'_{k'k}=\langle k'|H'|k\rangle=0$.

2. 自发辐射的Einstein理论. $n_{k'}B_{k'k}\rho(\omega_{k'k})=(B_{kk'}\rho(\omega_{k'k})+A_{k'k})n'$.

3. 非偏振自然光强度 $I(\omega)$. 跃迁速率. $w_{k\to m}=\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2}I(|\omega_{mk}|)|\vec{r}_{mk}|^2$. $|\vec{r}_{mk}|^2=|x_{mk}|^2+|y_{mk}|^2+|z_{mk}|^2$ $\quad x_{mk}=\int\psi_m^* x\psi_k d\tau$.

自发跃迁率 $A_{k\to m}=\frac{4e^2}{3\hbar c^3}\omega_{km}^3|\vec{r}_{mk}|^2$. 选择定则 $\Delta l=\pm1$. $\Delta m=0,\pm1$. (无自旋)

$\Delta l=\pm1$. $\Delta j=0,\pm1$. $\Delta m_j=0,\pm1$. (自旋)

第十三章

1. $\sigma(\theta,\varphi)=\frac{1}{j}\frac{dn(\theta,\varphi)}{d\Omega}$. $\qquad \sigma_t=\int\sigma(\theta,\varphi)d\Omega$.

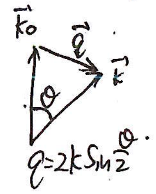
2. 质心系中. $\psi(\vec{r})\xrightarrow{r\to\infty}e^{ikz}+f(\theta,\varphi)\frac{e^{ik\cdot r}}{r}$ $\quad k=\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}$.

$\sigma(\theta,\varphi)=|f(\theta,\varphi)|^2$.

3. Born近似 (高能粒子) $f(\theta,\varphi)=-\frac{M}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'}V(\vec{r}')d\tau'$

中心力场 $f(\theta)=-\frac{2M}{q\hbar^2}\int_0^\infty rV(r)\sin qr\,dr$.

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



分波法 (低能散射)

$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)$

$\sigma(\theta)=\frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)\right|^2$.

$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l$

$R(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{r}\sin(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)$ 或 $u(r)\xrightarrow{r\to\infty}\sin(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)$

4. 全同粒子散射.

非全同粒子 $\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2$

玻色子 $\sigma(\theta)=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2$.

费米 $\sigma(\theta)=\begin{cases}|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2 & \text{自旋单态} \quad P_1 \text{ 空间对称} \\ |f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2 & \text{自旋三重态} \quad P_2 \text{ 空间反对称}\end{cases}$

总散射截面 $\sigma_t=\frac{1}{2}\int\sigma(\theta,\varphi)d\Omega$.

$\frac{1}{2}$ 因子因为散射粒子中均被记录.

非极化: $\sigma(\theta)=\frac{1}{4}P_1+\frac{3}{4}P_2$. $\qquad$ 同向极化 $\sigma(\theta)=P_2$.

反向极化: $\sigma(\theta)=\frac{1}{2}P_1+\frac{1}{2}P_2$.

第十四章.

1. 变分法.

取试探波函数 $\psi(\vec r;\alpha)$. 求出 $E(\alpha)=\langle\psi|H|\psi\rangle$.

由 $\frac{\partial E(\alpha)}{\partial\alpha}=0$ 求出 α 代入 $E(\alpha)$，再代入 $\psi(\vec r;\alpha)$. $\bar H=E(\alpha)$

此 $\bar H\geq E_0$. 变分法求出基态能量上限.

若 ϕ 为基态试探函数. E_0 为基态能量. $K_n=\langle\phi|H^n|\phi\rangle$

$$K_1-\sqrt{K_2-K_1^2}\leq E_0\leq K_1$$

2. 费米黄金规则公式: $w=\frac{2\pi}{\hbar}|H_{mk}(E)|^2\rho(E)$ 微扰作用下体系由 ψ_k 态到 ψ_m 态的跃迁概率.

3. 非偏振光 $I(\omega)$ 照射原子, $\psi_k\to\psi_m$.

$$W_{k\to m}=\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2}I(|\omega_{mk}|)|\vec r_{mk}|^2.\quad \vec r_{mk}=\langle\psi_m|\vec r|\psi_k\rangle.$$

电偶极矩跃迁选择定则 | $\Delta l=\pm1$. $\Delta m=0,\pm1$.

计自旋 $\Delta l=\pm1$ $\Delta j=0,\pm1$. $\Delta m_j=0,\pm1$.

4 原子自发跃迁速率 $A_{k\to m}=\frac{4e^2\omega_{km}^3}{3\hbar c^3}|\vec r_{mk}|^2$.

《小蓝书》补充

1. $[F,\vec A\cdot\vec B]=[F,\vec A]\cdot\vec B+\vec A\cdot[F,\vec B]$ $\quad[F,\vec A\times\vec B]=[F,\vec A]\times\vec B+\vec A\times[F,\vec B]$

2. $p_r=\frac12\left(\vec p\cdot\vec r\frac1r+\frac1r\vec r\cdot\vec p\right)$

(1) $p_r^+=p_r$ (2) $p_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac1r\right)$ (3) $[r,p_r]=i\hbar$. (4) $p_r^2=-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}$

6.4 对于中心力场束缚态, 有 $\left\langle\frac{dV}{dr}\right\rangle-\left\langle\frac{L^2}{\mu r^3}\right\rangle=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi_E(0)|^2$

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

$\Rightarrow\left[\frac{\partial}{\partial r},H\right]=\frac{\hbar^2}{\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{L^2}{\mu r^3}+\frac{dV}{dr}$ 利用算符或展开式都可

$\left\langle\psi_E\left|\left[\frac{\partial}{\partial r},H\right]\right|\psi_E\right\rangle=\left\langle\psi_E\left|\frac{\partial}{\partial r}H\right|\psi_E\right\rangle-\left\langle\psi_E\left|H\frac{\partial}{\partial r}\right|\psi_E\right\rangle=0.$

$\Rightarrow\left\langle\frac{dV}{dr}\right\rangle-\left\langle\frac{L^2}{\mu r^3}\right\rangle=-\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\right\rangle=-\frac{\hbar^2}{\mu}\int\psi_E^*\frac{1}{r^2}\frac{\partial\psi_E}{\partial r}r^2dr\quad d\Omega.$

$\int d\Omega=4\pi.\quad\int_0^\infty\psi_E^*\frac{\partial\psi_E}{\partial r}dr=\int_0^\infty\psi_E\frac{\partial\psi_E}{\partial r}dr=\psi_E^*\psi_E\Big|_0^\infty-\int\psi_E\frac{\partial\psi_E}{\partial r}dr\Rightarrow\int_0^\infty\psi_E^*\frac{\partial\psi_E}{\partial r}dr=\frac12\psi_E^*\psi_E\Big|_0^\infty=-\frac12|\psi_E(0)|^2$

实函数

S态 ($l=0$). $\psi_E(0)\neq0$. $\left\langle\frac{dV}{dr}\right\rangle=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi_E(0)|^2$. 含 $\hbar$. 量子效应. 无经典对应

$l\neq0$. $\psi_E(0)=0$. $\underbrace{\left\langle\frac{dV}{dr}\right\rangle=\left\langle\frac{L^2}{\mu r^3}\right\rangle}_{\text{记住}}=l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle$ 经典: $\overline{F_{向心}}=\overline{F_{离心}}$

6.11 类氢原子 (Ze) 计算 $|n,l,m\rangle$ 下的 $\langle r^\lambda\rangle$. $\lambda=-1,-2,-3$.

Virial: $\begin{aligned}2\langle T\rangle&=-\langle V\rangle\\ \langle T\rangle+\langle V\rangle&=E\end{aligned}\Rightarrow\langle r^{-1}\rangle=\frac{1}{n^2a_Z}=\frac{Z}{n^2a_0}$

$H\psi(\vec r)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi(\vec r)+\frac{L^2}{2\mu r^2}\psi(\vec r)+V(\vec r)\psi(\vec r)=E\psi(\vec r)$

分出 Y_l^m

$HR(r)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}R(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}R(r)+V(r)R(r)=ER(r)$

令 $R(r)=\frac{\chi(r)}{r}$

$H_l\chi(r)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}\chi(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\chi(r)+V(r)\chi(r)=E\chi(r)$

等效 $H_l=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{Ze}{r}$

本征值 $E_{nlm}=E_n=-\frac{Ze^2}{2a_Zn^2}$ $\quad n=n_r+l+1.$

H-F定理: $\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}=\left\langle nlm\left|\frac{\partial H}{\partial\lambda}\right|nlm\right\rangle$

取 $\lambda=l$ $\quad\frac{\partial E_n}{\partial l}=\frac{\partial E_n}{\partial n}\cdot\frac{\partial n}{\partial l}=\frac{\partial E_n}{\partial n}=\frac{Ze^2}{n^3a_Z}$ $\quad\frac{\partial H}{\partial l}=\frac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$

$$\langle r^{-2}\rangle=\frac{1}{(l+\frac12)n^3a_Z^2}=\frac{Z^2}{(l+\frac12)n^3a_0^2}$$

利用6.4.

$l\neq0$ 时 $\langle r^{-3}\rangle=\frac{\mu}{\hbar^2l(l+1)}\left\langle\frac{\partial V}{\partial r}\right\rangle=\frac{1}{l(l+1)(2l+1)}\frac{2Z^3}{n^3a_0^3}$

$l=0$ 时. $\langle r^{-3}\rangle_{n00}\to0=\lim\limits_{l\to0}\frac{1}{l(l+1)(2l+1)}\frac{2Z^3}{n^3a_0^3}$.

则 $\langle r^{-3}\rangle=\frac{2Z^3}{l(l+1)(2l+1)\ n^3a_0^3}$

6.12 $|n,l,m\rangle$ 下 证明递推关系:

$\frac{\lambda+1}{n^2}\langle r^\lambda\rangle-(2\lambda+1)\frac{a}{Z}\langle r^{\lambda-1}\rangle+\frac{\lambda}{4}[(2l+1)^2-\lambda^2]\frac{a^2}{Z^2}\langle r^{\lambda-2}\rangle=0$ 给出成立条件. 计算 $\langle r^\lambda\rangle=2.1.-1.-3.-4$

$\langle\vec r|n,l,m\rangle=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)=\frac1r\chi_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$

则 $\langle r^\lambda\rangle_{nlm}=\int r^\lambda|\psi_{nlm}|^2d^3x=\int_0^\infty r^\lambda|\chi_{nl}|^2dr$

$\chi_{nl}(r)$ 满足 $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi''+\left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2}{r}\right]\chi=E_n\chi$ $\quad E_n=-\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0}$ $\quad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$

$\Rightarrow\chi''+\left[\frac{2Z}{a_0r}-l(l+1)\frac{1}{r^2}-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\right]\chi=0$ (※)

为凑出 $\langle r^\lambda\rangle$. 两边乘 $r^\lambda\chi$, 积分

有 $\int_0^\infty r^\lambda\chi\chi''dr+\frac{2Z}{a_0}\langle r^{\lambda-1}\rangle-l(l+1)\langle r^{\lambda-2}\rangle-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\langle r^\lambda\rangle=0$

$\int_0^\infty r^\lambda\chi\chi''dr=r^\lambda\chi\chi'\Big|_0^\infty-\int_0^\infty(r^\lambda\chi'+\lambda r^{\lambda-1}\chi)\chi'dr=\left(r^\lambda\chi\chi'-\frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}\chi^2\right)\Big|_0^\infty+\frac{\lambda(\lambda-1)}{2}\langle r^{\lambda-2}\rangle-\int_0^\infty r^\lambda(\chi')^2dr$

$\Rightarrow\left[\frac{\lambda(\lambda-1)}{2}-l(l+1)\right]\langle r^{\lambda-2}\rangle+\frac{2Z}{a_0}\langle r^{\lambda-1}\rangle-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\langle r^\lambda\rangle=\underline{\int_0^\infty r^\lambda(\chi')^2dr}+\left(\frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}\chi^2-r^\lambda\chi\chi'\right)\Big|_0^\infty$

(※)式两边乘 $2r^{\lambda+1}\chi'$ 积分得

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\chi''dr+\frac{2Z}{a_0}\int_0^\infty 2r^{\lambda}\chi\chi'dr-l(l+1)\int_0^{+\infty}2r^{\lambda-1}\chi\chi'dr-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\int_0^{+\infty}2r^{\lambda+1}\chi\chi'=0$$

分部积分法:

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\chi''dr=\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'd\chi'=\int_0^\infty r^{\lambda+1}d(\chi')^2=r^{\lambda+1}(\chi')^2\Big|_0^\infty-\int(\chi')^2\cdot(\lambda+1)r^\lambda dr=r^{\lambda+1}(\chi')^2\Big|_0^\infty-(\lambda+1)\underline{\int r^\lambda\chi'^2dr}$$

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\chi dr=\int_0^\infty r^{\lambda+1}d\chi^2=r^{\lambda+1}\chi^2\Big|_0^\infty-\int\chi^2(\lambda+1)r^\lambda dr=r^{\lambda+1}\chi^2\Big|_0^\infty-(\lambda+1)\langle r^\lambda\rangle$$

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\frac{\chi}{r}dr=r^\lambda\chi^2\Big|_0^\infty-\lambda\langle r^{\lambda-1}\rangle$$

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\frac{\chi}{r^2}dr=r^{\lambda-1}\chi^2\Big|_0^\infty-(\lambda-1)\langle r^{\lambda-2}\rangle.$$

代入,得

$$(\lambda-1)l(l+1)\langle r^{\lambda-2}\rangle-2\lambda\frac{Z}{a_0}\langle r^{\lambda-1}\rangle+(\lambda+1)\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\langle r^\lambda\rangle=(\lambda+1)\int_0^{+\infty}r^\lambda(\chi')^2dr+Res.$$

$$Res=\left[-l(l+1)r^{\lambda-1}\chi^2+\frac{2Z}{a_0}r^\lambda\chi^2+r^{\lambda+1}(\chi')^2-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2r^{\lambda+1}\chi^2\right]\Big|_0^{+\infty}$$

当 $\lambda>-(2l+1)$ 时 $Res=0$.(此时 $\langle r^{\lambda-2}\rangle$ 有限)

再消去积分项,得

$$\frac{\lambda+1}{n^2}\langle r^\lambda\rangle-(2\lambda+1)\frac{a}{Z}\langle r^{\lambda-1}\rangle+\frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2-\lambda^2\right]\frac{a^2}{Z^2}\langle r^{\lambda-2}\rangle=0.\quad Q.E.D.$$

令 $\lambda=0$. 有 $\langle r^0\rangle=1$ 得 $\langle r^{-1}\rangle=\frac{Z}{n^2a_0}$

令 $\lambda=1,2$. 得 $\langle r\rangle=\frac{1}{2}[3n^2-l(l+1)]\frac{a_0}{Z}$

$\langle r^2\rangle=\frac{n^2}{2}[1+5n^2-3l(l+1)]\frac{a_0^2}{Z^2}$

令 $\lambda=-1$,得 $\langle r^{-3}\rangle$. 令 $\lambda=-2$.($l\geq1$)得 $\langle r^{-4}\rangle$.

《小黄》补充 5.16

简并态微扰论(二重简并) $|m\rangle,|m'\rangle$ 简并.

一阶久期方程 $\det\begin{vmatrix}\langle m|H'|m\rangle & \langle m|H'|m'\rangle\\ \langle m'|H'|m\rangle & \langle m'|H'|m'\rangle\end{vmatrix}=0.$

若很不幸 H_{ij} 均为0. 则无法求解.

则用到

二阶久期方程

$$\det\begin{vmatrix}\sum\limits_{k\neq m,m'}\frac{\langle m|H'|k\rangle\langle k|H'|m\rangle}{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}} & \sum\limits_{k\neq m,m'}\frac{\langle m|H'|k\rangle\langle k|H'|m'\rangle}{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}}\\ \sum\limits_{k\neq m,m'}\frac{\langle m'|H'|k\rangle\langle k|H'|m\rangle}{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}} & \sum\limits_{k\neq m,m'}\frac{\langle m'|H'|k\rangle\langle k|H'|m'\rangle}{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}}\end{vmatrix}=0.$$

→ 能量量纲

求解 $|\psi_m^{(0)}\rangle$.

补充 6.47.

$$e^{i\theta\vec{\sigma}}=\cos\theta+i\vec{\sigma}\sin\theta.$$

《曾》练习 9.4.2节前

$(\sigma_1\cdot\sigma_2)^2=3-2(\sigma_1\cdot\sigma_2)$ 展开

本征值为 3, -1 本征态 $|1,x\rangle$. $|0,0\rangle$

$P_{12}=\frac{1}{2}(1+\sigma_1\cdot\sigma_2)$ 为自旋交换算符 本征值 1, -1. 本征态 $|1,x\rangle$, $|0,0\rangle$ 故有 $^2=1$ $P_{12}^2=1$. $P_{12}=S^2-1$

$P_3=\frac{1}{2}(1+P_{12})$ $P_4=\frac{1}{2}(1-P_{12})$

$P_3|1,x\rangle=|1,x\rangle$. $P_3|0,0\rangle=0$

$P_1|1,x\rangle=0$ $P_1|0,0\rangle=|0,0\rangle$.

故 $P_3^2=P_3$. $P_1^2=P_1$ $P_1P_3=0$

分别为三重态. 单重态投影算符