物理复习

前黑子学

一、黑体辐射

1、温度T一定，单色辐出度 $M(\lambda,T) \overset{def}{=}$ 单位面积单位时间内附近单位波长区间的能量
$$= \frac{dE_\lambda}{d\lambda} \quad (W/m^3)$$

总辐出度 $M(T) = \int_0^\infty M(\lambda,T)\,d\lambda$

2、(1) 吸收比 $\overset{def}{=}$ $\alpha(T) = \frac{E_{吸收}}{E_{入射}}$

(1) 单色吸收比 $\overset{def}{=}$ $\lambda \to \lambda + d\lambda$ 波段内，$\alpha(\lambda,T) = \frac{E_{\lambda吸收}}{E_{\lambda入射}}$

(2) 反射 $\overset{def}{=}$ $\frac{E_{反射}}{E_{入射}}$ $(r(\lambda,T))$

$r(\lambda,T) + \alpha(\lambda,T) = 1$

3、(1) 黑体 $\overset{def}{=}$ 完全吸收，无反射 $(\alpha = 1,\ r = 0)$

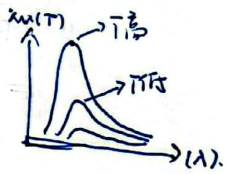
(2) 基尔霍夫 $\frac{M_1(\lambda,T)}{\alpha_1(\lambda,T)} = \frac{M_2(\lambda,T)}{\alpha_2(\lambda,T)} = \cdots = M_0(\lambda,T) \Rightarrow$ 黑体的单色辐出度

(3) 黑体辐射定律：

斯特藩-玻尔兹曼常数 ① $M(T) = \sigma T^4$ $\quad \sigma = 5.67\times10^{-8}\ W/(m^2 K^4)$

维恩常数b ② $T\lambda_m = b$ $\quad b = 2.898\times10^{-3}\ m\cdot K$ （λ_m 单色辐出度的极值波长）

③ 普朗克公式 $M_0(\nu,T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2}\left|\frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1}\right|$ $\quad h = 6.63\times10^{-34}\ J\cdot s$



推广分布 $\Longrightarrow$ $\begin{cases} M_0(\nu,T)\,d\nu = -M_0(\lambda,T)\,d\lambda \\ d\nu = -\frac{c}{\lambda^2}\,d\lambda \end{cases}$ ε ⟶ 平均能量

推物理意义计算

二、光电效应

1、截止频率 ν_0；$\nu > \nu_0 \Rightarrow$ 光电效应 $\overset{def}{\Longrightarrow}$ 逸出功 A，$\nu_0 = \frac{A}{h}$

2、动能 ~ ν；光电流大小 ~ 光强

3、遏止电压 U_a $\overset{def}{=}$ 使电流为0；$eU_a = h\nu - h\nu_0 \Rightarrow U_a = \frac{h}{e}\nu - \frac{h\nu_0}{e}$

4、代数关系 $h\nu = A + \underbrace{\frac{1}{2}mv^2}_{eU_a} = eU_a + A$

解题：

注意：金属板，截面积，单面吸

(1) 波粒二象性：

$\varepsilon = h\nu = mc^2$

$p = mc = \frac{h}{\lambda}$

(2) $Å = 10^{-10}$

(3) 求粒子数光能量

(4) 动量差分面积

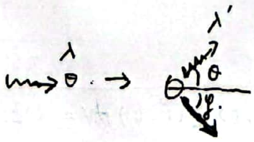
三、康普顿散射

1、有新波 $\lambda > \lambda_0$

$\theta\uparrow$，$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 \uparrow$

$\theta\uparrow$，新波谱强↑，原波谱强↓

θ 一，$\lambda - \lambda_0$ 一，与物质无关



① $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1-\cos\theta) = \frac{2h}{m_e c}\sin^2\frac{\theta}{2}$
$= 2\lambda_c \sin^2\frac{\theta}{2}$

② $\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 0.02426\ Å$

注：(1) λ_0 与 λ_c 可比拟时，有康普顿散射 ⟹ 可见光无该现象

(2) 散射，而非吸收 ⟸ 反证（P70）

(3) 光电效应中不考虑动量守恒（能量守恒）

(1) $m = m_0/\sqrt{1-v^2/c^2}$

(2) 电子动能 $E_k = \frac{hc}{\lambda_0} - \frac{hc}{\lambda}$

$E = mc^2 = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$

三、不确定性关系

1、动量、能量确定，但时间、位置完全不确定。

2、不确定关系。 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$.

四、氢原子光谱实验规律

1、波数 $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) = T(m) - T(n)$.

对应极限波长
m — 光谱系
n — 谱线

线系

$\nu_{min} = \frac{1}{\lambda} = R/k^2 \Rightarrow k = \sqrt{R\lambda_{max}}$

$\nu = \frac{R}{n^2} = \frac{1}{\lambda}$

$\frac{1}{\lambda_{min}} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{\infty}\right) = \frac{R}{m^2}$

⇒ 赖曼系 $m=1$. 紫外光

巴尔末系 $m=2$. 可见光

帕邢系 $m=3$ 红外光

2、玻尔理论

(1) 原子从一能量状态跃迁到另一能量状态，产生电磁辐射 $h\nu = E_n - E_m$.

(2) 角动量量子化. $m v_n r_n = n\hbar$. $n = 1, 2, \cdots$ $(\hbar = h/2\pi)$.

(3) 氢原子半径 $r_n = n^2 \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = n^2 r_1$.

玻尔半径 $r_1 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = a_0 = 0.053\,nm$

(4) 电子能量 $E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} = \frac{-13.6\,eV}{n^2}$

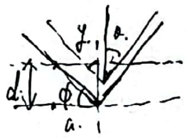
$E_1 = -13.6\,eV$ 基态能

$p = \frac{1}{c}\sqrt{E_k^2 + 2E_0E_k}$

$\lambda = hc/\sqrt{E_k^2 + 2E_0E_k}$

量子力学入门

一、实物粒子的波动性



$E = E_0 + E_k$

$E^2 = E_0^2 + E_k^2 + 2E_0E_k = E_0^2 + c^2p^2$

$E_0 = m_0c^2 = 0.51\,MeV$

动能 $E_k = mc^2 - m_0c^2$

1、物质波. $E = h\nu \Rightarrow \lambda = h/p = \frac{h}{\sqrt{2emU}}$

⇐ 实验验证. 晶体间散射光的干涉加强条件 $2d\sin\varphi = k\lambda$ — 布拉格公式

注: $\varphi = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}$. $d = a\sin\frac{\theta}{2}$ ⇒ $a\sin\theta = k\lambda$. — a 为晶格常数

二、波函数及统计解释

1、能量 E、动量 p 的"自由粒子"沿 x 方向运动对应的物质波为"单色平面波"。

驻波 $L = n\frac{\lambda}{2}$

圆 $2\pi r = n\lambda$

⤷ 跟磁动圆周半径.

$\Psi(x,t) = A e^{-i(\omega t - kx)} \xrightarrow[p=\hbar k]{E=\hbar\omega} A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$

⇒ 三维 $\Psi(\vec{r},t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\cdot\vec{r})}$

⇒ $|\Psi(\vec{r},t)|^2 dV$ 粒子 t 时刻在 dV 体积内的概率.

⇒ $\rho(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2 = \Psi(\vec{r},t)\Psi^*(\vec{r},t)$ 单位体积出现的概率(概率密度).

性质 ⇒ 有限. 单值. 连续

归一化 条件: $\boxed{\int_\Omega \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\,dV = (\Psi, \Psi) = 1}$ (全空间积分).

注: 入射电子流强度小, 显示电子的粒子性.

概率密度 $|\Psi|^2$

大, 显示 波动性.

三角函数及反函数积分

$\int e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}$.

$\int e^{-\alpha x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$

三、不确定性关系

1、粒子动量能够确定，但时间、位置完全不确定。

2、不确定关系。 (1) $\Delta x\cdot\Delta p_x \geq h$.

$\Delta x=\sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}}$ $\Delta p_x=\sqrt{\overline{(p-\bar{p_x})^2}}$

⇒ 严格的不确定性关系、 $\Delta x\cdot\Delta p_x \geq \hbar/2$

Δt：不确定量

(1) 相干长度 $\lambda^2/\Delta\lambda$

(2) $\Delta p=|-\frac{h}{\lambda^2}|\Delta\lambda$

(2) 能量、时间 $\Delta x\cdot\Delta p_x\geq\hbar/2 \Rightarrow v\cdot\Delta t\cdot\Delta\frac{h\nu}{v}\geq\hbar/2$.

$\Rightarrow \Delta E\cdot\Delta t\geq\hbar/2$

ΔE —— 激发态能级宽度

Δt —— 激发态能级寿命

四、态叠加原理

1、若 Ψ_1、Ψ_2 为体系可能的状态 ⇒ $\Psi=C_1\Psi_1+C_2\Psi_2$ 也是体系的一个可能的状态。

$\xrightarrow{explanation}$ 部分处于 Ψ_1 态、部分处于 Ψ_2 态 ……

⇒ $|C(\vec{p},t)|^2$ 为 $\Psi_p(\vec{r},t)$ 电子在 t 时刻动量为 p 的概率。

五、薛定谔方程

1、$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)$ —— 自由粒子的薛定谔方程。

此时 $E=p_x^2/2m$.

$\hat{E}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

$\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+U(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x,t)$

$\hat{E}\Psi(\vec{r},t)=\hat{H}\Psi(\vec{r},t)$.

2、电子在势场中。 $E=\frac{p_x^2}{2m}+U(x,t)$

$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x,t))\cdot\Psi(x,t)$.

$\xrightarrow{\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x,t)}$ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\hat{H}\Psi(x,t)$ (含时薛定谔方程/波动方程)

3、几率流密度矢量 $\vec{J}=\frac{i\hbar}{2\mu}[\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi]$

⇒ 粒子数守恒定律 $\frac{d}{dt}\int_\tau \rho(\vec{r},t)\,d\tau=-\oint_s\vec{J}\cdot d\vec{s}$

⇒ 全域 $\frac{d}{dt}\int_\infty\rho(\vec{r},t)\,d\tau=0$ → 粒子未产生或消失

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

4、定态薛定谔方程 (势能 U 与时间无关)。

⇒ step：1、确定哈密顿量。

2、结合问题粒子的能量本征方程。

3、利用波函数的自然条件确定能量本征值和波函数。

令 $\Psi(r,t)=\psi(r)\cdot T(t)$

$$\Rightarrow\begin{cases} i\hbar\frac{dT(t)}{dt}=ET(t). \Rightarrow T(t)\propto e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ \boxed{\hat{H}\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}). \Rightarrow \text{定态薛定谔方程（能量算符的本征方程）}} \end{cases}$$

$\Rightarrow \Psi(r,t)=\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, $\rho(r,t)=|\psi(\vec{r})|^2$.

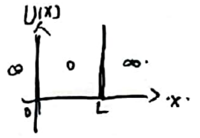
5、算符。

粒子每一量子力学中，任一力学量对应一算符。 $p_x\rightarrow\hat{p}_x=-i\hbar\frac{d}{dx}$，$\vec{p}\rightarrow\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla$

$\vec{r}\rightarrow\hat{\vec{r}}=\vec{r}$，$\hat{x}=x$.

$$\hat{p}^2=-\hbar^2\nabla^2\rightarrow\begin{cases}E_k=\frac{\hat{p}^2}{2m}=\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m}\\ E=p^2/2m+U(r)\rightarrow\hat{H}=-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+U(r)\end{cases}$$

6. 一维无限深势阱中的粒子.



阱内: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2}=E\Phi(x)$ $\xrightarrow{k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}}$ $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2}+k^2\Phi(x)=0$

$\Rightarrow \Phi(x)=C\sin(kx+\delta)$

阱外. $\Phi(x)=0$.

$\Rightarrow$ 连续性 $\Rightarrow \begin{cases}\delta=0\\ kL=n\pi\end{cases} \Rightarrow \boxed{k=\frac{n\pi}{L}}$ $\Rightarrow \Phi_n(x)=C\sin(\frac{n\pi}{L}x)$. $n=1,2,\cdots$

$\xrightarrow{归一化}$ $C=\sqrt{\frac{2}{L}}$. $\Rightarrow \Phi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L}x) & 0\le x\le L.\\ 0. & x<0或x>L\end{cases}$

$\xrightarrow{k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}}$ $E=\frac{k^2\hbar^2}{2m}=\frac{n^2\pi^2}{L^2}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}=n^2E_1$. $E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$

$\Rightarrow \Delta E=E_{n+1}-E_n=(2n+1)E_1$.

$\Rightarrow$ 动量 $p=\sqrt{2mE_n}=\frac{h}{\lambda}=n\frac{h}{2L}$ $\Rightarrow L=n\cdot\frac{\lambda}{2}$

$\Rightarrow \rho(x,t)=|\Phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|^2=|\Phi(x)|^2=\frac{2}{L}\sin^2\frac{n\pi}{L}x$.

驻波. $\Psi=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin kx\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=\sqrt{\frac{2}{L}}\cdot\frac{1}{2i}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}(e^{ikx}-e^{-ikx})$. $\Rightarrow$ 驻波

量子力学导入.

一、力学量用算符表述

1. 力学量的平均值　　注: $(\Psi,x\Psi)=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^* x\Psi\,dx$

(1) 坐标x及u(x). $\bar{x}=\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}x|\Psi(x)|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)x\Psi(x)dx=(\Psi,x\Psi)$

$\overline{u(x)}=\langle u(x)\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}u(x)|\Psi(x)|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)u(x)\Psi(x)dx=(\Psi,u\Psi)$.

(2) 动量 p_x. $\bar{p_x}=\int\Psi^*(x)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi(x)dx$

2. 算符. 指对波函数进行某种运算的符号.

eg: $\hat{O}u=v$.

3. 常用算符

(1) 动量. 坐标. 能量 见上 (四.5).

(2) 角动量. $\hat{L}=\hat{r}\times\hat{p}=-i\hbar\,\vec{r}\times\nabla$ $\Rightarrow \begin{cases}L_x=i\hbar[\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}]\\ L_y=-i\hbar[\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}]\\ L_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\end{cases}$　注意归一化

二、线性厄密算符

1. 算符的一般运算　(1) 单位算符 $\hat{I}\Psi=\Psi$.　(2) $\hat{O}\Psi=\hat{U}\Psi\Rightarrow\hat{O}=\hat{U}$

2. $(\hat{O}\hat{U})\Psi=\hat{O}(\hat{U}\Psi)$　$\hat{O}\hat{U}\ne\hat{U}\hat{O}$　满足乘法分配律和结合律.

3. 线性厄密算符. (力学量本质)

(1) 厄密. $\int\Psi^*\hat{O}\phi\,d\tau=\int(\hat{O}\Psi)^*\phi\,d\tau \Leftrightarrow (\Psi,\hat{O}\phi)=(\hat{O}\Psi,\phi)$.

注: $\frac{d\Psi^*}{dx}=(\frac{d\Psi}{dx})^*$

(2) 体系任何态下, 厄密算符的平均值为实数

$\boxed{\frac{d}{dx}\text{不是厄密.}\quad \frac{d^2}{dx^2},\ i\frac{d}{dx}\text{是}}$

三、对易关系.

1. def：$\hat{O}\hat{U}\neq\hat{U}\hat{O}$ ∴ 不对易

2. 坐标与动量的对易关系：$\begin{cases} y\hat{p}_y-\hat{p}_y y=i\hbar \\ x\hat{p}_y-\hat{p}_y x=0 \end{cases}$ ⇒ $\begin{cases} x_\alpha \hat{p}_\beta-\hat{p}_\beta x_\alpha=\delta_{\alpha\beta} i\hbar \\ \hat{p}_\alpha\hat{p}_\beta-\hat{p}_\beta\hat{p}_\alpha=0 \\ \alpha,\beta=x,y,z \end{cases}$ 其中 $\delta_{\alpha\beta}=\begin{cases}1, & \alpha=\beta \\ 0, & \alpha\neq\beta\end{cases}$

$$\boxed{\begin{aligned}[y,\hat{p}_y]&=i\hbar \\ [y,\hat{p}_x]&=0\end{aligned}}$$

注：对易没有传递性

3. 对易括号 $[\hat{O},\hat{U}]=\hat{O}\hat{U}-\hat{U}\hat{O}$

性质：$[\hat{O},\hat{U}+\hat{E}]=[\hat{O},\hat{U}]+[\hat{O},\hat{E}]$

$[\hat{O}\hat{U},\hat{E}]=\hat{O}[\hat{U},\hat{E}]+[\hat{O},\hat{E}]\hat{U}$

$[\hat{O},\hat{U}\hat{E}]=[\hat{O},\hat{U}]\hat{E}+\hat{U}[\hat{O},\hat{E}]$

注：$\nabla=\frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\vec{e}_\theta+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi$

证明方法：添项减项.

如果两力学量算符有一组共同完备的本征函数系，则二算符对易

4. 角动量的对易关系.

(1) $[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hbar\hat{L}_z$ （x→y→z）

(2) $[\hat{L}_x,\hat{L}_x]=0$

(3) $[\hat{L}_x,x]=0$. $[\hat{L}_x,y]=i\hbar z$. $[\hat{L}_x,z]=-i\hbar y$.

(4) $[\hat{L}_x,\hat{p}_x]=0$. $[\hat{L}_x,\hat{p}_y]=i\hbar\hat{p}_z$ $[\hat{L}_x,\hat{p}_z]=-i\hbar\hat{p}_y$

(5) $\hat{L}_x=y\hat{p}_z-z\hat{p}_y$

$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ — Levi-Civita 符号.

$=0,1,-1$.

↓

相等取0.

四、厄密算符的本征函数和本征值

1. $\hat{F}\Psi_n=F_n\Psi_n$ —— 本征方程.

2. 三个定理.

(1) 厄密算符的均值为实数. ($\bar{F}=\int\Psi^*\hat{F}\Psi d\tau$).

(2) 厄密算符的本征值为实数. (F_n)

(3) 厄密算符属于不同本征值的本征函数彼此正交

动量本征函数（动能） $\Phi_p(x)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{ikx}$ ($k=p/\hbar$)

$(ie^{ix})^*=-ie^{-ix}$

证明方法：1° 应用厄密性

(2) 同乘以 $\psi_m(x)$ 或 $\psi_m^*(x)$ 积分

⇒ $\int\psi_m^*\psi_n d\tau=\delta_{mn}$.

3. 厄密算符本征函数的完备性

(1) 组成完备系. $\Psi(x)=\sum_n C_n\phi_n(x)$.

$C_n=\int\phi_n^*\Psi(x)dx$.

体系状态用正交的集表示

⇓

本征函数的集

(2) $|C_n|^2$ 表示 F 取 F_n 的概率.

(3) F 有确定值 ⇔ $\Psi(x)$ 为 $\hat{F}$ 的一个本征态.

(4) 力学量的平均值.

$\bar{F}=\sum_n|C_n|^2F_n=\int\Psi^*(x)\hat{F}\Psi(x)dx$

需归一化. $\bar{F}=\frac{\sum|C_n|^2F_n}{\sum_n|C_n|^2}=\frac{\int\Psi^*(x)\hat{F}\Psi(x)dx}{\int\Psi^*(x)\Psi(x)dx}$

动能算符 $\hat{E}=\frac{+\hat{p}^2}{2m}$

$\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

$\hat{E}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

解题：法一：用三角公式展开.

法二：用定义.

注：若波函数随时间变化，则展开系数 $C_n(t)$. $\Psi(x,t)=\sum_n C_n(t)\phi_n(x)$.

正交集

$C_n(t)=\int\phi_n^*(x)\Psi(x,t)dx$.

波函数

⇒ $|C_n(t)|^2$ 随时间变化

扫描全能王 创建

一维无限深势阱

4. 角动量算符本征方程.

(1) $\hat{L}_z$ 的本征方程. $\begin{cases} L_z = m\hbar \\ \Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \end{cases}$

正交性: $\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi}e^{in\varphi}d\varphi=0$. $(m\ne n)$. $m=0,\pm1,\cdots,\pm l$.

正交归一条件: $\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi}e^{in\varphi}d\varphi=\delta_{mn}$.

(2) $\hat{L}^2$ 的本征方程.

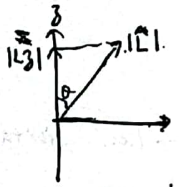
① 本征函数 ⇒ 球谐函数 $=Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^m N_{lm}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi}$. $|m|\le l$.

$$N_{lm}=\sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{4\pi(l+|m|)!}}$$

② $L=\sqrt{l(l+1)}\hbar$. l 角量子数.

③ 球谐函数为 $\hat L^2$ 和 $\hat L_z$ 的共同本征函数. ⇒ $\begin{cases}\hat L^2 Y_{lm}=(l+1)l\hbar Y_{lm} \\ \hat L_z Y_{lm}=m\hbar Y_{lm}\end{cases}$

(3) 经典模型.



$\cos\theta=L_z/L=\frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$.

解题: $\hat L_x=\frac{1}{i\hbar}[\hat L_y,\hat L_z]=\frac{1}{i\hbar}[\hat L_y\hat L_z-\hat L_z\hat L_y]$

五. 力学量完全集合.

1. 在Ψ态测F, G, 若两者同时有确定值, 则Ψ是二者的共同本征函数.

2. 若两力学量共同本征函数不止一个且构成一组完备系. ⇒ 二力学量算符可对易

3. 力学量完全集合: 元素个数最小且两两对易(完全确定状态).

⇓

一般与体系自由度数相同.

4. 不确定关系的严格推导.

(1) 偏差 $\Delta\hat F=\hat F-\bar F$.

(2) 设 $[\hat F,\hat G]=i\hat k$. 不确定度 $\overline{(\Delta\hat F)^2}$, $\overline{(\Delta\hat G)^2}$ $\xRightarrow{均方}$ $\boxed{\overline{(\Delta\hat F)^2}=\overline{F^2}-\bar F^2}$

⇒ $\overline{(\Delta\hat F)^2}\,\overline{(\Delta\hat G)^2}\ge\frac{(\bar k)^2}{4}$. $\bar k=\int\Psi^*\hat k\Psi\,d\tau$.

① F, G 对易且处于共同的本征态. $\overline{(\Delta\hat F)^2}=\overline{(\Delta\hat G)^2}=0$.

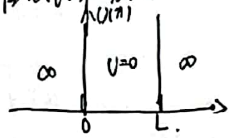
② 〃 不处于 〃 $\overline{(\Delta\hat F)^2}\cdot\overline{(\Delta\hat G)^2}\ge0$.

Zeeman 效应. $\mu_B=\frac{e\hbar}{2m}$ —玻尔磁子.

$\Delta E=-\mu_z B=m_l\mu_B B$

量子力学应用1.

一、一维无限深势阱.



$$\Psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x, & 0\le x\le L.\\ 0 & , else\end{cases}$$

$$E=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2},\quad n=1,2,\cdots$$

$E=\frac{p^2}{2m}$.

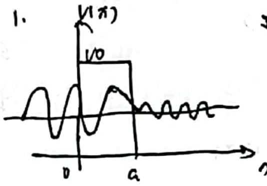
$L=n\cdot\frac{\lambda}{2}\Rightarrow\lambda=\frac{2L}{n}$.

$k=\frac{n\pi}{L}$. $\Rightarrow p=\frac{h}{\lambda}=\frac{nh}{2L}$.

$\Rightarrow E=\frac{n^2h^2}{8mL^2}$

二、一维方势垒.

1.



若 $k'a\gg1$，势垒又高又宽 $\quad k'^2=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$.

$$T\approx e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$$

(1) 隧道效应中透射率T对a变化很敏感.

(2) 透射率+反射率=1.

2. 宇称

(1) 空间反射：矢量反向 $(\vec{r}\Rightarrow-\vec{r},\quad \Psi(\vec{r},t)\Rightarrow\Psi(-\vec{r},t))$.

(2) 若有 $\Psi(-\vec{r},t)=\pm\Psi(\vec{r},t)$ 则波函数有确定的宇称.

$\Psi(-\vec{r},t)=\Psi(\vec{r},t)\Rightarrow$ 偶宇称.

$\Psi(-\vec{r},t)=-\Psi(\vec{r},t)\Rightarrow$ 奇宇称.

(3) 一维势场中的粒子. $V(x)=V(-x)\Rightarrow$ 粒子定态波函数有确定的宇称.

三、一维有限深势阱.

1.

$(\delta=0)$

(1) $$\Psi_A=\begin{cases}A\sin kx & |x|<a\\ Be^{-k'x} & , x>a\\ -Be^{k'x} & , x<-a.\end{cases}$$

$(\delta=\frac{\pi}{2})$

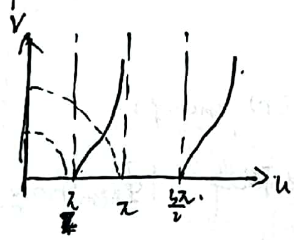
$$\Psi_S=\begin{cases}A\cos kx. & |x|<a.\\ Be^{-k'x} & x>a.\\ Be^{k'x} & x<-a.\end{cases}$$

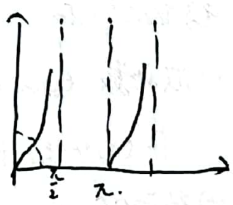
(2) $k\cot ka=-k'\xrightarrow{u=ka,\ v=k'a}$ $\qquad k\tan ka=k'$.

$\psi=A\sin(kx+\delta)$

$$\begin{cases}u\cot u=-v.\\ u^2+v^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2\end{cases}\qquad\begin{cases}u\tan u=v.\\ u^2+v^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2.\end{cases}$$

(3)





$\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2\ge\frac{\pi^2}{4}$时，存在一奇宇称的束缚态.

① 第一个交点 ⇒ 基态.

② $\frac{2mV_0}{\hbar^2}\ge\pi^2$时，偶宇称第一激发态.

两图的交点数和.

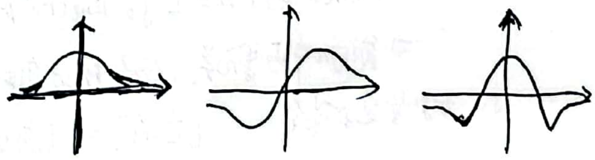
2. 几个结论.

(1) 宇称奇偶相间，最低为偶.

(2) 每个能级比无限深势阱相应能级低一点.（无限深势阱对应的是$\frac{\pi}{2}$的整数倍点）.

(3) 束缚态能级个数 $n=\left\lceil\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2\pi^2}}\right\rceil$

(4) $\boxed{\text{基态没节点}}$，n↑，波函数节点增加1个.



(5) 不论势阱如何，至少存在一个束缚态.

四. 一维谐振子

1. $U(x)=\frac{1}{2}kx^2$. $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$.

$\Rightarrow \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$.

$\Rightarrow \frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2)\Psi=0$.

$\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$

2. 主要结论. $\boxed{P39}$

(1) 谐振子能量 $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$. $n=0,1,2,\cdots$

能量间隔 ($\hbar\omega=h\nu$).

$E=\frac{1}{2}m\omega^2x^2=n\hbar\omega$ 解为经典振幅
x 即为振幅.

(2) 谐振子波函数 ① 有确切宇称, 波函数奇偶相同.
n偶, 偶宇称; n奇, 奇宇称. $U(-x)=U(x)$.

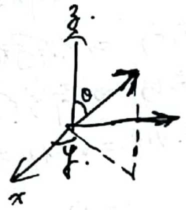
② $\Psi_n(x)$ 为实函数, 不简并. $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}=\sqrt{\frac{g}{l}}$

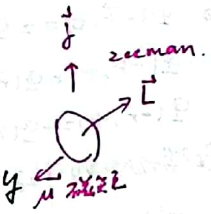
③ $\int\psi_m^*(x)\Psi_n(x)=\delta_{mn}$.

势能 $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

(3) 一维谐振跃迁: $\Delta n=\pm1$

五. 氢原子量子理论.





$\vec{\mu}=-\frac{e}{2m}\vec{L}$.
$\mu_z=-\frac{e}{2m}L_z$
$=-\frac{e}{2m}(m\hbar)$.
$=-m_l\cdot\mu_B$.
玻尔磁子.

1. $\mu=\frac{m_p m_e}{m_p+m_e}=m_e$.

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

$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{1}{n^2}$ (只与n有关).

$\Delta E=m_l\mu_B B$

3. 氢原子能量及角动量.

(1) $E_n=-\frac{13.6}{n^2}$ (eV). $h\nu=E_n-E_m$.

(2) $\hat{L}^2Y_{lm}(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}(\theta,\varphi)$. $L=\sqrt{l(l+1)}\hbar$. $l=0,1,2,\cdots,n-1$ 角量子数.

$\hat{L}_zY_{lm}(\theta,\varphi)=m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)$ $L_z=m\hbar$ $m=0,\pm1,\cdots\pm l$. 磁量子数

(3) 简并度 $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$ (不考虑自旋)

注意解题前先归一化!

4. 电子的几率分布.

(1) 波函数 $\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$.

在 (r,θ,φ) 处 dV 电子出现概率 $|\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2dV=|R_{nl}(r)|^2|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2r^2\sin\theta\, dr\cdots$
$=|R_{nl}(r)|^2|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2r^2drd\Omega$

或用
$p(r)dr=|\Psi|^2dV$
$=|\Psi|^2 4\pi r^2dr$

(2) 径向分布: $r\sim r+dr$

① $W_{nl}(r)dr=\left[\int_{4\pi}|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2d\Omega\right]R_{nl}^2(r)r^2dr.=|R_{nl}(r)|^2r^2dr$.

$\Rightarrow W_{nl}(r)=|R_{nl}(r)|^2r^2$

② 基态, $r=a_0$ 时几率最大. $W_{10}=r^2|R_{nl}(r)|^2=\frac{4r^2}{a_0^3}e^{-\frac{2r}{a_0}}$.

③ 几率随n↑而远离原子核.

(3) 角向分布 $\propto P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi}$

① $W_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega=\left[\int_0^\infty R_{nl}(r)^2r^2dr\right]|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2d\Omega=|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2d\Omega$.

$\Rightarrow$ 角向几率与φ无关, 分布绕z轴对称.

5. 力学量完全集合. $[\hat{L},\hat{H}]=0$ (通过$\hat{p}$证明). $\Rightarrow[\hat{L}^2,\hat{L}_z,\hat{H}]$ 为力学量完全集

六、电子自旋.

1. 电子自旋角动量 $S_z = m_s\hbar$. $m_s=\pm\frac{1}{2}$ 自旋磁量子数.

2. $S=\sqrt{s(s+1)}\hbar \xlongequal{s=\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$. s为自旋量子数.

3. $l=0,1,2,\cdots$ 对应 s,p,d,f,…

4. 泡利不相容原理：没有完全相同的电子.

5. $N_n=2n^2$.

6. 洪德规则：半满或全满更稳定.

量子力学应用2 双原子分子与氢分子.

一、态函数的矩阵表示.

1. $\Psi=\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \end{pmatrix}$ 其中 $\sum_n |a_n(t)|^2=1$. $\Psi^+=(a_1^*(t)\ \ a_2^*(t)\ \cdots\ a_n^*(t))$ $\boxed{\Psi^+\Psi=1}$

Q表象：$\Psi(x,t)=\sum_n a_n(t)u_n(x)$.

2. $A=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$ $\tilde{A}$(转置) $=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} \end{pmatrix}$ A^+(共轭) $=\begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix}$.

(1) 若 $A=A^+$ 为厄密矩阵.

(2) 厄密算符的对角矩阵元为实数. $A_{12}=A_{21}^*$

二、力学量算符的矩阵表示.

1. 坐标表象 $\Phi(x,t)=\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi(x,t)$

$\Rightarrow b_n(t)=\sum_m F_{nm}a_m(t)$. $F_{nm}=\int u_n^*\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})u_m(x)dx$. $\Rightarrow \Phi=F\Psi$.

$\Rightarrow F=\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1n} \\ F_{21} & F_{22} & \cdots & F_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn} \end{pmatrix}$

2. 性质：(1) $F^+=F$ (厄密矩阵)

(2) 力学量算符在自身表象中的形式 $\hat{Q}u_n(x)=Qu_n(x)$.

$Q_{nm}=\int u_n^*(x)\hat{Q}u_m(x)dx = Q_m\delta_{nm}$

$\Rightarrow$ 算符在自身表象中是一个对角矩阵，元素即为算符的本征值

三、量子力学公式的矩阵表示

1. 本征方程

$$\begin{pmatrix} F_{11} & \cdots & F_{1n} \\ F_{21} & & \\ \vdots & & \\ F_{n1} & & F_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{vmatrix} F_{11}-\lambda & F_{12} & \cdots & F_{1n} \\ F_{21} & F_{22}-\lambda & \cdots & \\ \vdots & & & \\ F_{n1} & & \cdots & F_{nn}-\lambda \end{vmatrix}=0$$

λ — 本征值 a_i — 本征态.

扫描全能王 创建

2、薛定谔

$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi(x,t)\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=H\Psi.$

$\Rightarrow H_{mn}=\int u_m(x)^*\hat{H}u_n(x)dx$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}H_{11}&\cdots&H_{1n}\\H_{21}&\ddots&\vdots\\\vdots&&\\H_{n1}&&H_{nn}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{pmatrix}$$

(四) 离散能级系统和双态系统.

1、耦合系数算符在能量表象中解答.

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a_1(t)\\a_2(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}H_{11}&H_{12}\\H_{21}&H_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1(t)\\a_2(t)\end{pmatrix}$ $H_{mn}=\int\Psi_m^*\hat{H}\Psi_n dx.$

$\xrightarrow{定态} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a_1(t)\\a_2(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}E_1&0\\0&E_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1(t)\\a_2(t)\end{pmatrix}.\Rightarrow a_n(t)=a_n(0)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$. $n=1,2$

$\Rightarrow\Psi(x,t)=a_1(0)e^{-i\frac{E_1t}{\hbar}}\Psi_1(x)+a_2(0)e^{-i\frac{E_2t}{\hbar}}\Psi_2(x)$ 非定态.

$\Rightarrow a_1(0)=1,\ a_2(0)=0.$ 定态.

2、一般表象(氨分子). $\Psi(x,t)=\sum_n a_n(t)\chi_n(x).$ $\begin{cases}\chi_L(x)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\\chi_R(x)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.\end{cases}$

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a_L(t)\\a_R(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}E_0&A\\A&E_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_L(t)\\a_R(t)\end{pmatrix}$

$\xrightarrow{a_{L,R}=\frac{1}{\sqrt2}(b_1\pm b_2)}\frac{i\hbar\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}b_1(t)\\b_2(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}E_0+A&0\\0&E_0-A\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_1(t)\\b_2(t)\end{pmatrix}$

$\Rightarrow b_n(t)=b_0(t)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}$ $E_n=E_0\pm A.$ $\Psi_S=\frac{1}{\sqrt2}(\chi_L+\chi_R)=\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}.$

$\Psi_A=\frac{1}{\sqrt2}(\chi_L-\chi_R)=\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}.$

$\Rightarrow a_{L,R}=\frac{1}{\sqrt2}(b_1(0)e^{-i\frac{(E_0+A)t}{\hbar}}\pm b_2(0)e^{-i\frac{(E_0-A)t}{\hbar}})$

$\Rightarrow$ 若 $t=0$. 在 L态, $a_L(0)=1.\ a_R(0)=0.\Rightarrow b_1(0)=b_2(0)=\frac{1}{\sqrt2}.$

$a_{L,R}=\frac{1}{2}e^{-i\frac{E_0t}{\hbar}}(e^{-i\frac{At}{\hbar}}\pm e^{i\frac{At}{\hbar}})$

$a_L(t)=e^{-i\frac{E_0t}{\hbar}}\cos\frac{At}{\hbar}$ $P=|a_L(t)|^2=\cos^2\frac{At}{\hbar}.$

$a_R(t)=-ie^{-i\frac{E_0t}{\hbar}}\sin\frac{At}{\hbar}$ $P=|a_R(t)|^2=\sin^2\frac{At}{\hbar}.$

$\xrightarrow{近似}p_1(t)=1-(\frac{At}{\hbar})^2.$

$p_2(t)=(\frac{At}{\hbar})^2.\Rightarrow$ 跃迁出的概率. $\frac{A}{\hbar}$ 单位时间内跃迁振幅

注: 幺正变换: $\lambda_1、\lambda_2$ 的本征矢排换 S, $\begin{cases}S^+S=1\\\cancel{S^+HS=1}\ S^+HS\Rightarrow 对角矩阵\end{cases}$

$\Rightarrow$ 定态能级看对角线

加入 i

(1) 归一化.

(2) 新表象 $\begin{pmatrix}b_+\\b_-\end{pmatrix}=S^+\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}$. ← 几率幅(即系数).

$S^+=S.$