**第七章：中心力场**

中心力场势函数球对称，即其与无关，具有转动对称性，其轨道角动量手守恒

力学量完全集的选取：，利用表示共同本征态

有三个本征方程：

中心力场哈密顿量：

球坐标中拉普拉斯算子表示为

其中

径向动能算符

求解能量本征方程：

1. 分离变量
2. 代入能量本征方程，得到径向方程
3. 令，可以得到径向方程化为

中心力场的能级简并度一般为，注意归一化条件为

球谐函数归一化条件

离心势能：r方向的有效势能为（势能加上切向动能）

其中离心势能为

宇称被这样决定：

两体问题：

对质量为、的二粒子体系，引入相对坐标，质心坐标（），质心质量，约化质量

那么有，（的相关式子与之对称），

这样原薛定谔方程就变为：

再进行分离变量，可以得到方程组

含时间的解：

单体问题（质心运动）的解：（为质心运动能量）

相对运动（内部结构）：（E为相对运动能量）

可证明：

（证明未写）

无限深球方势阱：  
考虑质量为m的粒子在半径为a的球形匣子中运动，相当于其处于一个球方势阱（半径为a以内，势能为0，以外为）

此时中心力场的方程组适用，其径向方程为（令）：

1. l=0(s态)

，边界条件

解得，归一化波函数为

径向方程：

边界条件

引入无量纲变量，则方程化为

其两个特解为球Bessel函数和球Neumann函数：

,

(部分内容未整理)

氢原子：

氢原子是电子和原子核构成的两体体系，相互作用是coulomb势（无穷远处为势能零点）（CGS制度，1esu=1.51891）

能量本征方程：

(为原子核质量，为电子质量，为总能量，包括质心动能和体系内能)

如此可以将两体问题转化为单体问题（利用前面的两体问题推导）：

质心运动方程描述氢原子的整体自由运动（质心动能）

相对运动方程通过能量本征值和相应的本征波函数描述了氢原子的结构，相对运动能量E即为电子能级（氢原子内能）

由此可以推知，当氢原子内部电子处于游离态，反之处于束缚态

对于径向方程，采取自然单位，（相当于取，，其中，）那么径向方程化为无量纲形式：

利用级数解法，可以得到：能量本征值（CGS制度，即取），径向波函数（）

本征波函数（主量子数，，）

氢原子性质：

由于能级只跟n相关，故而考虑自旋时，能级简并度为

总体概率密度分布：（当电子处于该态时，在（）周围的体元内部的概率）

径向概率分布（在到的球壳内出现的概率）：

角向概率分布（在方向立体角中的概率）：，也就是说电子概率分布关于z轴对称（图像的具体含义）

本征态轨道电流分布与磁矩：电流密度为，电子在原子内部运动形成电流

（其中取球坐标为便）

计算氢原子内部电子电流密度矢量为，这是绕z轴的环电流密度

对于截面为的环形电流的磁矩为，其中为环形电流的体积，已知电子的概率分布的情况下对其积分可以得到，其中为玻尔磁子，m为磁量子数

这样可以得到轨道磁矩算符为，轨道磁矩与外磁场作用能为

类氢离子：电离到只剩一个电子的例子成为类氢离子，如

对类氢离子进行计算时，需要进行一些替换：

径向方程为，这样再取长度单位和能量单位为，

可得到能级为（相当于将氢原子的结果做替换）

（对精细结构的和超精细结构的修正）

三维各向同性谐振子

势函数为

哈密顿量，

这样利用分离变量法

其能量本征值为，

能级简并度为

在球坐标中求解三维各向同性谐振子

取完全集为{}

分离变量，令

径向方程为

本征值为，

解得，

基底的变换

上面对三维各向同性谐振子的两个表象进行了论述{}与{}

这两种表象基底都是完备的，他们之间的变换（幺正变换）为：

而对于不简并的能级，两种表象的本征波函数应该是相同的

（合流超几何函数、Bessel函数、自然单位）

**第八章：量子力学的矩阵形式与表象理论**

表象：量子力学中描写量子态和力学量的方式不是唯一的

量子力学的规律与所选表象无关

Hensenberg、Born、Jodan的矩阵力学，赋予每个物理量以一个矩阵

（矩阵的基本知识）

矩阵的迹：矩阵的对角元之和

设力学量，其本征值为{…}，本征函数系{…}，有，则称为表象中的波函数，表示测得量为的概率

那么有矩阵表示…，其共轭为

这是离散情况，连续情况类似

坐标的本征函数在自身表象中的表示：

具有动量的自由粒子，在动量表象下，在坐标表象下

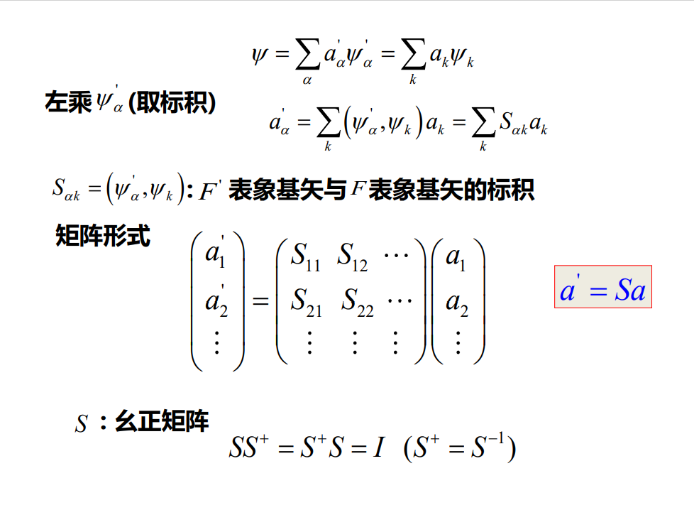
算符的矩阵表示：

在坐标表象下，设，若在表象下，存在本征函数，有，就可以用矩阵的形式表示出该表象下的算符

力学量在自身表象中为对角的厄米矩阵，其对角元素就是各本征值

本征值构成既有分离谱又有连续谱

表象变换

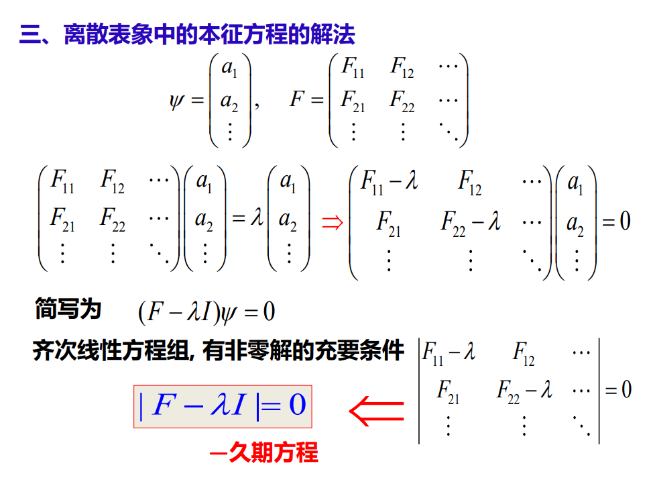


表象变换不改变算符的本征值

8.2 量子力学的矩阵形式

平均值公式：

离散表象中的本征方程解法：



如果F是矩阵，则其是关于的n次代数方程，必有n个根，这些根就是本征值{}，进而代入原方程可以得到对应的a因子

对于薛定谔方程：，设，代入方程，并左乘，同时对全空间积分，得到，，也可以写为矩阵形式

8.3狄拉克（Dirac）符号

Dirac符号表示态：右矢（刃矢，ket）和左矢（刁矢，bra）

量子体系的一切可能状态构成一个Hilbert空间,希尔伯特空间中的态矢量表示成“右矢”和“左矢”

右矢，左矢，左矢与右矢互为共轭空间，，那么，同时左矢与右矢满足厄米共轭

内积表示：

规定算符对态矢的作用：对右矢向右作用仍为右矢，对左矢向左作用仍为左矢

力学量平均值：

投影算符：，

对于共轭算符，有 的共轭为

表示基底：

对于分立谱，本征方程： ，正交归一：，封闭关系：

利用封闭关系，有展开

对于连续谱，本征方程： ，正交归一：，封闭关系：

相应地，其展开为

力学量的矩阵表示：

在坐标表象中，坐标x矩阵表示

动量p的矩阵表示

在动量表象中，动量p矩阵表示

坐标x的矩阵表示

薛定谔方程在不同表象中的表示：

X表象：

P表象：

**第九章：自旋与角动量理论初步**

Stern-Gerlach实验：

分裂是由于粒子磁矩与磁场相互作用引起的，磁偶极矩在均匀外磁场中的势能，力可以表示为

这样磁矩在z在z方向的受力可以写成

在很小线度内非均匀磁场的作用下（设磁场及其梯度的方向为z方向），有，

受力仅在z方向，大小为

设原子束沿水平（x方向）速度进入磁场区，而在垂直方向受到力的作用

原子束到达出口处与x轴的偏角为，落在屏幕P处偏离x轴的距离为，（是z轴与磁矩的夹角）

其中一般实验条件下，满足

当且仅当磁矩为量子化的，的值才可能分立

磁矩与角动量相关，，这样，其中

基态银原子束分离成两个空间成分，射线的偏转表明电子除具有轨道角量子数外还有自旋角动量，

自旋角动量与电子的坐标与动量无关，是描述电子状态的第四个变量

9.2电子自旋的描述与自旋算符

电子不是质点，存在一种内禀运动，自旋，相应地，有自旋角动量和自旋磁矩

自旋角动量大小为

自旋角动量在z方向投影：

自旋算符，

对易关系：

，，，

对于{}其共同本征态为，有，，其中，

Pauli算符：令

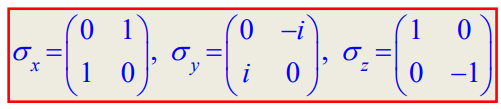
对易关系，有，，，

的本征值均为，故而，

同时有性质，，，归纳为，以上性质可以使用来概括

自旋算符的矩阵形式-Pauli矩阵

在{}表象或{}上，Pauli矩阵为



（未整理完）

9.3角动量的本征值与本征态

若矢量算符三个分量算符满足下列对易关系，则称之为角动量算符，，，，即为

定义其平方算符为，有

升降算符：

定义，有，所以其不是哈密顿算符，不代表力学量

升降算符满足对易关系：，，

常用公式：，，

，

算符使量子数m增或减1，故而被称为升算符和降算符

量子数m取值限制的推导 未整理

量子数m的上确界可能为非负整数或者半奇数，记为

而的本征值为，的本征值为

该结论适用于任何角动量

对于轨道角动量，

对于电子自旋角动量，

9.4角动量的合成

角动量合成的一般规则：

设角动量和互相独立，意为其分量分别满足角动量的对易关系，而它们互相之间是对易的，，那么矢量和也是一个角动量算符，称为总角动量

有对易关系，，同时有，，但是与和不对易

两个角动量体系的力学量完全集：

为6个算符中相互对易的算符

{}为非耦合表象

{}为耦合表象

对于非耦合表象：其力学完备集为{}，基底，维数为

只对作用，只对作用

（测量值未整理）

对于耦合表象：其力学完备集为{}，其基底为

（测量值未整理）

非耦合表象基底和耦合表象基底的变换：

对于给定和，在维子空间中，进行坐标变换是，定义Clebsch-Gordan系数（矢量耦合系数）为，这样有

由于表象变换不改变维数（相当于不同态的个数），所以有：

总角动量{}的本征值谱：

对于确定的和，总角动量的取值系列为

首先有总磁量子数，另外，（由表象变换，空间维数不变得到）

9.5碱金属原子能谱的双线结构和Zeeman效应

碱金属原子价电子的Hamilton量：碱金属原子的原子实（原子核及其内层满壳电子）比较稳定，低激发能级来自价电子的激发，价电子的哈密顿量为，其中屏蔽Coulomb场为

此时，选取力学量完全集（角动量非耦合表象）{}，能量本征值问题的解，能级简并度为

而耦合表象为{}，本征值为

除了Coulomb作用外，价电子的自旋磁矩还受到电子轨道运动的内磁场的作用，电子自旋磁矩与内磁场的相互作用能（Thomas项）为，其中

自旋-轨道耦合项对能级的贡献很小，电子总哈密顿量为，其中引起能级劈裂，形成双线结构

耦合表象的基底为单态、三重态

注意简并度，据此判定用什么微扰论求解