# 公式Ch4-7

Saturday, June 22, 2019    8:40 PM

# 第四章

**1. 态的表象**

$\Psi(x,t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int c(p,t)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp$ （坐标表象）

$c(p,t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int \Psi(x,t)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx$ （动量表象）

$\Rightarrow$

若力学量 Q 本征函数为 $u_1(x),u_2(x),\dots,u_n(x)$

本征值：$Q_1,Q_2,\dots$

$\Psi(x,t)=\sum_n a_n(t)u_n(x)$

$a_n(t)=\int u_n^*(x)\Psi(x,t)dx$

$\Rightarrow \Psi=\begin{pmatrix}a_1(t)\\a_2(t)\\\vdots\\a_n(t)\\\vdots\end{pmatrix}$

$|a_n|^2$ 是 $\Psi(x,t)$ 中测量 Q 所得的结果为 $Q_n$ 的概率．

**2. 算符的矩阵表示**

若 $\hat F\Psi(x,t)=\Phi(x,t)$ $\rightarrow \Phi(x,t)=\sum_m b_m(t)u_m(t)$

$\downarrow$

$\Psi(x,t)=\sum_m a_m(t)u_m(x)$ $\Rightarrow \boxed{\Phi=\hat F\Psi}$

$\Rightarrow$

$$\begin{cases}b_n(t)=\sum_m F_{nm}a_m(t)\\ F_{nm}=\int u_n^*(x)\hat F(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})u_m(x)dx=\langle u_n|\hat F|u_m\rangle\end{cases}$$

**3. 厄密矩阵** $\Rightarrow$

$F_{mn}=F_{mn}^{+}$

$\hookrightarrow F_{nm}^{+}=F_{mn}^{*}$

☆算符在自身表象下为对角阵

对角元素为本征值．

校训：勤奋、求实、进取、创新　　910940.06.10

**4. 幺正变换（一个表象到另一个表象）**

幺正矩阵定义：$S^+=S^{-1}$

幺正变换：

$\hat F$ 在B下　$\hat F$ 在A表象中

算符 $\hat F'=S^+FS$

态矢 $b=S^+a$

$\uparrow\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_n\end{pmatrix}$　$\uparrow\begin{pmatrix}a_1(t)\\a_2(t)\\\vdots\\a_n(t)\end{pmatrix}$

$$\begin{cases}\varphi_\beta(x)=\sum_n S_{n\beta}\psi_n\\ S_{n\beta}=\int\psi_n^*\varphi_\beta dx\end{cases}$$

不改变矩阵的迹、本征值．

☆

已知 $\hat L^2$ 和 $\hat L_z$ 的共同表象中，算符 $\hat L_x$ 和 $\hat L_y$ 的矩阵分别为

$L_x=\frac{\hbar\sqrt2}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$　$L_y=\frac{\hbar\sqrt2}{2}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix}$

$\Rightarrow$ 求它们的本征值和归一化本征函数，最后将 $L_x$、$L_y$ 对角化

**5. Drac符号**

$\langle\psi|\varphi\rangle=\int\psi^*\varphi d\tau$

若

$\hat F|n\rangle=f_n|n\rangle$，$\langle n|n'\rangle=\delta_{nn'}$

$\Rightarrow$

$|\psi\rangle=\sum a_n|n\rangle$，$a_n=\langle n|\psi\rangle$

$\Rightarrow$ $|n\rangle\langle n|$ 为投影算符

$|n\rangle\langle n|\psi\rangle=|n\rangle a_n=a_n|n\rangle$

☆归一化条件

$\boxed{\sum_n|n\rangle\langle n|=1}$

$|\psi\rangle=\begin{pmatrix}a_1\\\vdots\\a_n\\\vdots\end{pmatrix}$　$\langle\psi|=(a_1^*,a_2^*\cdots a_n^*\cdots)$

**6.** $[\hat a,\hat a^+]=1$

$$\begin{cases}\hat a|n\rangle=\sqrt n|n-1\rangle\\ \hat a^+|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle\end{cases}$$

$\hat H=\hbar\omega(\hat N+\frac12)=\hbar\omega(\hat a^+\hat a+\frac12)$

$\hat N|n\rangle=n|n\rangle$

# 第五章＋第七章

**I. 非简并定态微扰** $\hat H=\hat H^{(0)}+\hat H'$

$$\begin{cases}能量一级：E_n^{(1)}=\int\psi_n^{(0)*}\hat H'\psi_n^{(0)}d\tau=H'_{nn}\\ 能量二级：\psi_n^{(1)}=\sum_m{}'\frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)}\end{cases}$$

能量二级修正．$E_n^{(2)}=\sum_l{}'\frac{|H'_{ln}|^2}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}}$

受微扰体系能量．$E_n=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}+\cdots$

受微扰波函数：$\psi_n=\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}+\cdots$

微扰方法只能计算低能级的修正．

$\Rightarrow$ 适用条件：

1) 微扰矩阵元 $|H'_{mn}|$ 要小

2) $|E_n^{(0)}-E_m^{(0)}|$ 最大

**II. 微扰基本方程**

$(\hat H^{(0)}-E_n^{(0)})\cdot\psi_n^{(1)}=-(\hat H'-E_n^{(1)})\cdot\psi_n^{(0)}$

**III. 简并微扰论**

$\psi_n^{(0)}=\sum_{i=1}^k a_i^{(0)}\phi_i$

$\Rightarrow$

$\sum_{i=1}^k(\hat H_{li}'-E_n^{(1)}\delta_{li})a_i^{(0)}=0$ $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ $E_{nj}=E_n^{(0)}+E_{nj}^{(1)}$

$\psi_{nj}^{(0)}=\sum_i a_{ij}^{(0)}\phi_i$

$\det|H'_{li}-E_n^{(1)}\delta_{li}|=0$

**III. 变分法**

任一态 $\psi=\sum_n a_n\psi_n$ ← 本征函数

不难推出：

$E_0\le\int\psi^*\hat H\psi d\tau$

所以可选取很多 $\psi$ 并算出 $\hat H$ 的期望，这些期望的最小值最接近 $E_0$．

$\Rightarrow$ 步骤：

① 选取很多入计算 $\bar H=\int\psi^*\hat H\psi d\tau$

② $d\bar H(\lambda)/d\lambda=0$

③ 求出 $\bar H(\lambda)_{min}\simeq E_0$

☆通过试探寻找最佳近似解．

**IV. 含时微扰**

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\hat H(t)\Psi$ $\begin{cases}\hat H(t)=\hat H_0+\hat H'(t)\\ \Psi=\sum_n a_n(t)\Phi_n\end{cases}$

$\Phi_n \rightarrow \phi_n e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}$

$\Rightarrow$ $i\hbar\frac{da_m(t)}{dt}=\sum_n a_n(t)H'_{mn}(t)e^{i\omega_{mn}t}$

$H'_{mn}=\int\Phi_m^*\hat H'\Phi_n d\tau$

$\omega_{mn}=\frac1\hbar(\varepsilon_m-\varepsilon_n)$

方程的一级近似：

$a_m^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mk}(t')e^{i\omega_{mk}t'}dt'$

$\Rightarrow$

$W_{k\to m}=|a_m^{(1)}(t)|^2$

**IV. 跃迁概率**

单位时间内的跃迁概率（Fermi 黄金定则）

$w=\frac{W}{t}=\frac{2\pi}{\hbar}|H'_{mk}|^2\rho(m)$

共振现象：只有当外界微扰含有频率 $\omega_{mk}$ 时，体系才能从 $\Phi_k$ 态跃迁到 $\Phi_n$ 态，这时吸收能量 $\hbar\omega_{mk}$．

I. 两定态跃迁概率相等

II. 能量测不准关系的原因：

定态能量有一定宽度 $\Delta E$，测量事件不是无限长，而且微扰频率 $w$ 也不单一

III. $\Delta E\cdot\Delta t\sim\hbar$

跃迁选择定则：

$\Delta m=0,\pm1$

$\Delta l=\pm1$

**5.3** 未受微扰时两能级：$E_{01}$，$E_{02}$．

微扰 $\hat H'$，微扰矩阵元：$H'_{12}=H'_{21}=a$，$H'_{11}=H'_{22}=b$．

$$\begin{cases}能量一级：E_n^{(1)}=\int\psi_n^{(0)*}\hat H'\psi_n^{(0)}d\tau=H'_{nn}\\ 能量二级：\psi_n^{(1)}=\sum_m{}'\frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)}\end{cases}$$

能量二级修正．$E_n^{(2)}=\sum_l{}'\frac{|H'_{ln}|^2}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}}$

$\hat H=\hat H_0+\hat H'=\begin{bmatrix}E_{01}&0\\0&E_{02}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}b&a\\a&b\end{bmatrix}$

$=\begin{bmatrix}E_{01}+b&a\\a&E_{02}+b\end{bmatrix}$

$H_m^{(2)}=\sum_l\frac{|H'_{lm}|^2}{E_m-E_l}$

$H_1^{(2)}=\sum\frac{H'_{21}}{E_1-E_2}$

5

**1. 电子自旋．**

Stern－Gerlach 实验发现：

Uhlenback－Goud~~mist~~smit 提出：

$\Rightarrow$

电子自旋角动量在空间上任意方向上的取值

$S_z=\pm\frac\hbar2$

自旋磁矩：$\vec M_s=-\frac{e}{m_s}\vec S$　z分量：$M_{sz}=\pm\frac{e\hbar}{2m_s}$

$=\pm M_B$

**2. 自旋算符**

$\vec S\times\vec S=i\hbar\vec S$

$$\begin{cases}[\hat S_x,\hat S_y]=i\hbar\hat S_z\\ [\hat S_y,\hat S_z]=i\hbar\hat S_x\\ [\hat S_z,\hat S_x]=i\hbar\hat S_y\end{cases}$$

$S_x=S_y=S_z=\pm\frac\hbar2$

$S^2=\frac34\hbar^2$

$=s(s+1)\hbar^2$

↑

自旋量子数 $s=\frac12$

**3. pauli 算符**

$$\begin{cases}\vec S=\frac\hbar2\hat\sigma\\ \hat\sigma\times\hat\sigma=2i\hat\sigma\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}对易：[\hat\sigma_i,\hat\sigma_j]=2i\epsilon_{ijk}\hat\sigma_k\\ 反对易：\{\hat\sigma_i,\hat\sigma_j\}=0\end{cases}$$

**4. pauli 矩阵**

$$\begin{cases}\hat\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\\ \hat\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\\ \hat\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\hat S_x=\frac\hbar2\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\\ \hat S_y=\frac\hbar2\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\\ \hat S_z=\frac\hbar2\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\end{cases}$$

**5、自旋函数**

$\Psi(x,y,z,S_z,t)=\begin{pmatrix}\Psi(x,y,z,\frac\hbar2,t)\\\Psi(x,y,z,-\frac\hbar2,t)\end{pmatrix}=\Psi(x,y,z,t)\chi(S_z)$

$\chi_{\frac12}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

$\chi_{-\frac12}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

$\Rightarrow$

$\Psi=\psi_1\chi_{\frac12}+\psi_2\chi_{-\frac12}$

$\Rightarrow$ $w=\Psi^+\Psi=(\psi_1^*,\psi_2^*)\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix}$

$\Rightarrow$

**6、全同粒子**

全同粒子：质量、电荷、自旋等固有性质完全相同的粒子

全同性原理：两全同粒子相互代换不引起物理状态改变．

$\Rightarrow$ 交换反对称波函数

$\Phi(q_1,\dots,q_i,\dots q_j,\dots)=-\Phi(q_1,\dots,q_j,\dots q_i)$

交换对称波函数

$\Phi(q_1,\dots,q_i,\dots,q_j,\dots)=\Phi(q_1,\dots,q_j,\dots,q_i)$

$\Rightarrow$

☆玻色子：自旋为0或 $\hbar$ 整数倍的全同粒子体系波函数对称

→ 基态氢原子、$\alpha$粒子、光子

→ 玻色－爱因斯坦分布

☆费米子：自旋为 $\frac\hbar2$ 奇数倍的全同粒子体系波函数反对称

→ 电子、质子、中子（狄拉克费米分布）