

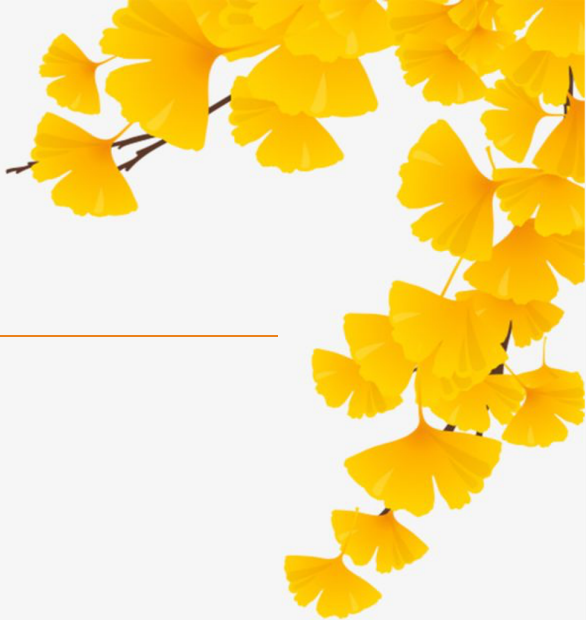
工程数学

Engineering Mathematics

李小飞

光电科学与工程学院

2022 年 4 月 12 日





电子科技大学

University of Electronic Science and Technology of China

总复习 (2 学时)



1. 常微分方程 (20%)
2. 偏微分方程 (三大) (40%)
3. 薛定谔方程 (含氢原子) (40%)

求實求真
大氣大為

傅里叶变换

1. 常微分方程

一阶常微分方程

二阶常微分方程

2. 三大偏微分方程

3. 薛定谔方程

求實求真
大氣大為

1. 一阶常微分方程
2. 二阶常微分方程

求實求真
大氣大為

傅里叶变换

1. 常微分方程

一阶常微分方程

二阶常微分方程

2. 三大偏微分方程

3. 薛定谔方程

求實求真
大氣大為

例 1、放射性衰减模型

$$\frac{du}{dt} = -ru, \quad u(t_0) = u_0$$

解: 分离变量

$$\frac{du}{u} = -r dt$$

$$\ln u = -rt + C$$

$$u(t) = C' \exp(-rt)$$

初始条件定系数:

$$u(t) = u_0 \exp(-rt)$$

[X] 半衰期

大氣大為
求實求真

例 2、人口增长的逻辑斯蒂模型

$$\frac{du}{dt} = ru(1 - u/K)$$

解: 分离变量:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{K-u} + \frac{1}{u}\right)du &= rdt \\ -\ln(K-u) + \ln u &= rt + C \\ u(t) &= \frac{K}{1 + \exp(-rt - C)} \end{aligned}$$

大氣大學
求實求真

$$y' + py = f(x)$$

解、衰减模型齐次方程有解:

$$w = C_0 \exp(-px)$$

[X] 常数变易, 设非齐次方程的解为

$$y(x) = u(x) \exp(-px)$$

代入原方程, 解得:

$$u(x) = \int \exp(px) f(x) dx + C$$

原方程得解

$$y(x) = C \exp(-px) + \exp(-px) \int \exp(px) f(x) dx$$

大氣大學
求實求真

傅里叶变换

1. 常微分方程

一阶常微分方程

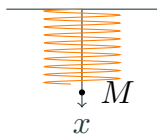
二阶常微分方程

2. 三大偏微分方程

3. 薛定谔方程

求實求真
大氣大為

例 3、建立简谐振动微分方程并求解



解、牛顿第二定律建立方程:

$$-kx = F = Ma = M \frac{d^2x}{dt^2}$$
$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{M}x = 0,$$

大氣大為
求實求真

整理, 得:
$$\begin{cases} \frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 \\ x(t)|_{t=0} = x_0, \quad \frac{dx}{dt}|_{t=0} = 0 \end{cases}$$

[X]辅助方程: $u^2 + \omega^2 = 0$, 有两虚根: $u_{1,2} = \pm i\omega$
方程通解:

$$x(t) = C_1 \cos \omega t + C_2 \sin \omega t$$

代入初始条件得解:

$$x(t) = x_0 \cos \omega t$$

大氣大學
求實求真

$$\frac{d^2u}{dt^2} + 2\varepsilon \frac{du}{dt} + \omega^2 u = 0, \quad (\varepsilon < \omega)$$

解、[X] 消一阶项! 令 $u(t) = \exp(-\varepsilon t)v(t)$, 代回原方程, 整理得:

$$\frac{d^2v}{dt^2} + (\omega^2 - \varepsilon^2)v = 0, \quad (\varepsilon < \omega)$$

令 $k^2 = \omega^2 - \varepsilon^2$, 得简谐振动微分方程标准型, 得解

$$v(t) = C_1 \cos kt + C_2 \sin kt$$

代回, 方程得解:

$$u(t) = \exp(-\varepsilon t)[C_1 \cos \sqrt{\omega^2 - \varepsilon^2}t + C_2 \sin \sqrt{\omega^2 - \varepsilon^2}t]$$

大氣大學
求實求真

$$\frac{d^2u}{dt^2} + \omega^2 u = p \sin \omega_0 t$$

解、齐次方程有解:

$$u(t) = C_1 \cos \omega t + C_2 \sin \omega t$$

设非齐次方程有特解: [?] 为什么这么设

$$u(t) = C_0 \sin \omega_0 t$$

代回原方程, 得系数:

$$C_0 = \frac{p}{\omega^2 - \omega_0^2}$$

原方程得解:

$$u(t) = C_1 \cos \omega t + C_2 \sin \omega t + \frac{p}{\omega^2 - \omega_0^2} \sin(\omega_0 t)$$

大氣大學
求實求真

例 4、欧拉方程

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + n^2 y = 0$$

解、令 $x = \exp(t)$, $t = \ln x$, 代回方程, 转化为常系数方程:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + n^2 y = 0$$

是振动模型, 有解:

$$y(t) = C_1 \cos nt + C_2 \sin nt$$

原方程得解:

$$y(x) = C_1 \cos(n \ln x) + C_2 \sin(n \ln x)$$

大氣大學
求實求真

欧拉方程的变型-1

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + 2x \frac{dy}{dx} - n(n+1)y = 0$$

解、令 $x = \exp(t)$, ($t = \ln x$), 代回, 原方程可转化常系数方程:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + \frac{dy}{dt} - n(n+1)y = 0$$

特征方程有两相异实根, 方程的解为:

$$y(t) = C_1 \exp(nt) + C_2 \exp(-(n+1)t)$$

代回 $t = \ln x$, 方程得解:

$$y(x) = C_1 x^n + C_2 x^{-(n+1)}$$

大氣大學
求實求真

🍃 欧拉方程的变型-2

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + 2x \frac{dy}{dx} - n^2 y = 0$$

🍃 欧拉方程的变型-3

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + 2x \frac{dy}{dx} + (n\pi)^2 y = 0$$

大氣
求實
求真

例 5、n 阶厄米方程

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + 2ny = 0$$

解、设方程有级数解

$$y = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k$$

求导, 对齐脚标, 代回原方程, ...

[X] 必须会

大氣大為
求實求真

傅里叶变换

1. 常微分方程

一阶常微分方程

二阶常微分方程

2. 三大偏微分方程

3. 薛定谔方程

求實求真
大氣大為

三角式:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi}{l} x + b_n \sin \frac{n\pi}{l} x \right)$$

$$a_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos \frac{n\pi}{l} x dx, \quad a_n = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \cos \frac{n\pi}{l} x dx$$

$$b_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin \frac{n\pi}{l} x dx, \quad b_n = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \sin \frac{n\pi}{l} x dx$$

复数式:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{i\omega_n x} \quad (\text{不连续}), \quad f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\omega) e^{i\omega x} d\omega \quad (\text{连续})$$

$$c_n = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) e^{-i\omega_n x} dx, \quad G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx$$

大氣求實求真

对称式:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} G(\omega) e^{i\omega x} d\omega$$

$$G(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx$$

量子:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(p_x) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} dp_x$$

$$c(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x} dx$$

大氣大學
求實求真

试证明 $\sin nx, \cos nx, e^{i\omega x}$ 平方积

$$\int_{-l}^l \left| \sin \frac{n\pi x}{l} \right|^2 dx = l$$

$$\int_{-l}^l \left| \cos \frac{n\pi x}{l} \right|^2 dx = l$$

$$\int_{-l}^l \left| e^{i \frac{n\pi}{l} x} \right|^2 dx = 2l$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |e^{i\omega x}|^2 dx = 2\pi$$

大氣大為
求實求真

试证明 $\sin nx, \cos nx, e^{i\omega x}$ 正交性 ($n \neq m$)

$$\int_{-l}^l \sin \frac{n\pi x}{l} \sin \frac{m\pi x}{l} dx = 0$$

$$\int_{-l}^l \cos \frac{n\pi x}{l} \cos \frac{m\pi x}{l} dx = 0$$

$$\int_{-l}^l e^{-i\frac{n\pi}{l}x} e^{i\frac{m\pi}{l}x} dx = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n x} e^{i\omega_m x} dx = 0$$

[X] 作业与例题一定要会!

大氣大為
求實求真

1. 常微分方程

2. 三大偏微分方程

波动导方程

热传导方程

拉普拉斯场方程

贝赛尔函数与伽马函数

3. 薛定谔方程

大氣大為
求實求真

热传导方程

拉普拉斯场方程

贝赛尔函数与伽马函数

3. 薛定谔方程

1. 常微分方程

2. 三大偏微分方程

波动导方程

求實求真
大氣大為

波动方程的建立

解: 建立坐标系, 取任意微元 ds , 临近拉力 T_1, T_2 :

水平: $T_2 \cos \alpha_2 = T_1 \cos \alpha_1 = T_0$

竖直: $T_2 \sin \alpha_2 - T_1 \sin \alpha_1 = ma = \rho ds u_{tt}$

有: $T_0(\tan \alpha_2 - \tan \alpha_1) = \rho ds u_{tt}$

$$T_0[u_x(x+dx, t) - u_x(x, t)] = \rho dx u_{tt}$$

$$\frac{T_0}{\rho} \times \frac{u_x(x+dx, t) - u_x(x, t)}{dx} = u_{tt}$$

Tips: (1) 斜率就是一阶导, (2) 小角度条件下, $ds \simeq dx$, 整理, 得:

波动方程

$$u_{tt} = a^2 u_{xx}$$

大氣大學
求實求真

例 6、求一维波动方程

$$\begin{cases} u_{tt} = a^2 u_{xx} \\ u(x, t)|_{t=0} = \psi(x), \quad u_t(x, t)|_{t=0} = \Psi(x) \\ u(x, t)|_{x=0} = 0, \quad u(x, t)|_{x=l} = 0 \end{cases}$$

解: 设 $u(x, t) = T(t)X(x)$, 分离变量, 得一类零边界条件固有值问题

- 固有值: $\lambda_n = \frac{n^2 \pi^2}{l^2}$

- 固有函数: $X_n = \sin \frac{n\pi}{l} x = \sin \omega_n x$

大氣大為
求實求真

方程 (II)

$$T'' + \omega_n^2 a^2 T = 0$$

类似于振动模型[例 3]:

叠加解 (解函数):

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi at}{l} + b_n \sin \frac{n\pi at}{l} \right) \sin \frac{n\pi x}{l}$$

代入定解条件:

$$(1) u(x, 0) = \varphi(x) \Rightarrow \varphi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{n\pi x}{l}$$

$$(2) u_t(x, 0) = \Psi(x) \Rightarrow \Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \frac{n\pi a}{l} \sin \frac{n\pi x}{l}$$

大氣大學
求實求真

由傅里叶变换公式, 写出系数:

$$a_n = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx$$

$$b_n = \frac{l}{n\pi a} \frac{2}{l} \int_0^l \Psi(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx = \frac{2}{n\pi a} \int_0^l \Psi(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx$$

[X] 对于具体函数, 问题变为求此函数的傅里叶展开式 (如何展开?), 然后基于固有函数的正交性 (如何证明?) 计算得各系数 (见作业).

大氣
求實
大為
求真

例 7、试证明固有函数的正交性

$$X_n = \sin \frac{n\pi}{l} x$$

解：固有函数是固有方程的解：

$$X_n'' + \lambda_n X_n = 0$$

$$X_m'' + \lambda_m X_m = 0$$

用 X_m 乘第一式， X_n 乘第二式，

$$X_m X_n'' + \lambda_n X_m X_n = 0$$

$$X_n X_m'' + \lambda_m X_n X_m = 0$$

两式相减：

$$(\lambda_n - \lambda_m) X_n X_m = X_n X_m'' - X_m X_n''$$

大氣大學
求實求真

积分:

$$\begin{aligned}(\lambda_n - \lambda_m) \int_0^l X_n X_m dx &= \int_0^l [X_n X_m'' - X_m X_n''] dx \\&= [X_n X_m' - X_m X_n']_0^l - \int_0^l [X_n' X_m' - X_m' X_n'] dx\end{aligned}$$

等式右边的两项分别为零, 有

$$\begin{aligned}(\lambda_n - \lambda_m) \int_0^l X_n X_m dx &= 0 \\ \int_0^l X_n X_m dx &= 0, \quad (n \neq m)\end{aligned}$$

大氣大學
求實求真

当 $n = m \neq 0$ 时, 有归一化系数:

$$\begin{aligned}\int_0^l X_n X_m dx &= \int_0^l X_n X_n dx \\ &= \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx = \frac{l}{2}\end{aligned}$$

正交归一性的统一描述

$$\int_0^l X_n X_m dx = \begin{cases} 0, & (n \neq m) \\ \frac{l}{2}, & (n = m) \end{cases}$$

*(1) 将函数 $f(x) = x^3 + 2x^2 + 1$ 按第一类固有函数 ($X_n = \sin \frac{n\pi}{l} x$) 展开
(复杂分部积分! 见 P 43-44)

(2). 基于固有函数的正交归一性求积分:

大氣求實求真
為

热传导方程

拉普拉斯场方程

贝赛尔函数与伽马函数

3. 薛定谔方程

1. 常微分方程

2. 三大偏微分方程

波动导方程

求實求真
大氣大為

例 8、求解第一类边界条件下的一维热传导方程

$$\begin{cases} u_t = a^2 u_{xx}, & (0 < x < l, t > 0) \\ u(x, t)|_{t=0} = \psi(x) \\ u(x, t)|_{x=0} = 0, \quad u(x, t)|_{x=l} = 0 \end{cases}$$

解：分离变量，一类零边界条件固有值问题

$$\text{固有值: } \lambda_n = \frac{n^2 \pi^2}{l^2}$$

$$\text{固有函数: } X_n = \sin \frac{n\pi}{l} x$$

大氣大為
求實求真

解方程 II: $T' + rT = 0$

这是衰减模型[例 1]

方程的解:

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \exp\left(-\left(\frac{n\pi a}{l}\right)^2 t\right) \sin \frac{n\pi}{l} x$$

傅里叶变换公式, 得定解系数:

$$B_n = \frac{2}{l} \int_0^l \psi(x) \sin \frac{n\pi}{l} x dx, \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

大氣大學
求實求真

例 9、求解第二类边界条件热传导方程

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} , & 0 < x < l, t > 0 \\ u_x(0, t) = 0, u_x(l, t) = 0 \\ u(x, 0) = \psi(x) \end{cases}$$

解: 固有值:

$$\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 , \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

固有函数:

$$X_n = \cos \frac{n\pi}{l} x , \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

大氣大學
求實求真

级数解:

$$u(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \exp\left(-\left(\frac{n\pi a}{l}\right)^2 t\right) \cos \frac{n\pi}{l} x$$

系数:
$$\begin{cases} B_0 &= \frac{1}{l} \int_0^l \psi(x) dx \\ B_n &= \frac{2}{l} \int_0^l \psi(x) \cos \frac{n\pi}{l} x dx, \quad (n = 1, 2, \dots) \end{cases}$$

Remark

导数边界条件导致:

- 固有函数: $X_n = \sin \frac{n\pi}{l} x \rightarrow X_n = \cos \frac{n\pi}{l} x$
- 存在 $n=0$ 项: $\cos \frac{n\pi}{l} = \cos \frac{0\pi}{l} = 1$

大氣大為
求實求真

* 证明第二类固有函数 ($X_n = \cos \frac{n\pi}{l}x$) 的正交归一性

(1) 将函数 $f(x) = x^3 + 2x^2 + 1$ 按第二类固有函数展开 (复杂分部积分! 见 P 43-44)

(2). 基于固有函数的正交归一性求积分:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (x^3 + 1) X_n(x) dx$$

大氣大為
求實求真

* 求第三类边界条件的固有值问题

$$III \quad \begin{cases} X''(x) + \lambda X = 0, & 0 < x < L \\ X'(0) = 0, X(L) = 0 \\ \lambda_n = \frac{(2n+1)^2 \pi^2}{4l^2} \\ X_n(x) = \cos \sqrt{\lambda} x \end{cases}$$

$$IV \quad \begin{cases} X''(x) + \lambda X = 0, & 0 < x < L \\ X(0) = 0, X'(L) = 0 \\ \lambda_n = \frac{(2n+1)^2 \pi^2}{4l^2} \\ X_n(x) = \sin \sqrt{\lambda} x \end{cases}$$

大氣大學
求實求真

- [X] 波动方程的三类边界条件!
- [X] 热传导方程的三类边界条件!
- [X] 拉普拉斯方程的三类边界条件!
- [X] 三类边界条件固有函数正交归一性!

大氣大為
求實求真

热传导方程

拉普拉斯场方程

贝赛尔函数与伽马函数

3. 薛定谔方程

1. 常微分方程

2. 三大偏微分方程

波动导方程

求實求真
大氣大為

例 10、求矩形域拉普拉斯方程

$$\begin{cases} u_{xx} + u_{yy} = 0, & (0 < x < 1, 0 < y < 1) \\ u(x, 0) = 0, u(x, 1) = 0 \\ u(0, y) = \sin \pi y, u(1, y) = 0 \end{cases}$$

解: 令 $u(x, y) = X(x)Y(y)$, 代回原方程, 得

方程 (1):

$$\begin{cases} Y'' + \lambda Y = 0, & 0 < y < 1 \\ Y(0) = 0, & Y(1) = 0 \end{cases}$$

方程 (2):

$$\begin{cases} X' - \lambda X = 0, & 0 < x < 1 \\ X(0) = \sin \pi y, & X(1) = 0 \end{cases}$$

大氣大學
求實求真

方程 (1) 是一类零边界固有值问题. 固有值: $\lambda_n = \frac{n^2 \pi^2}{l^2} = n^2 \pi^2$

固有函数: $Y_n = \sin \frac{n\pi}{l} y = \sin n\pi y$

方程 (2): 代入固有值 λ_n

$$X'' - n^2 \pi^2 X = 0$$

与振动模型 ([例 3]) 类似, 特征方程法解得

$$X_n(x) = C_n \exp(n\pi x) + D_n \exp(-n\pi x)$$

结合 (1)(2), 得叠加解:

$$u(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cosh(n\pi x) + b_n \sinh(n\pi x)] \sin(n\pi y)$$

[X] 代入定解条件, 得展开式, 基于固有函数 $\sin(n\pi y)$ 的正交性, 确定系数, ...

例 11、求圆域拉普拉斯方程

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} = 0, & 0 < r < r_0 \\ u(r_0, \theta) = f(\theta), & 0 < \theta < 2\pi \end{cases}$$

解: 分离变量, 角向方程是自然边界固有值问题

固有值: $\lambda_n = n^2$, ($n = 0, 1, 2, \dots$)

固有函数: $\Theta(\theta) = A_n \cos n\theta + B_n \sin n\theta$

径向方程是欧拉方程 ([例 4]),

$$r^2 R'' + rR' - n^2 R = 0$$

因此很容易被考

大氣
大為
求實
求真

叠加解:

$$u(r, \theta) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} r^n (a_n \cos n\theta + b_n \sin n\theta)$$

代入定解条件: $u(r_0, \theta) = f(\theta) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} r_0^n (a_n \cos n\theta + b_n \sin n\theta)$

系数公式:

$$a_n = \frac{1}{r_0^n \pi} \int_0^{2\pi} f(\theta) \cos n\theta d\theta, \quad b_n = \frac{1}{r_0^n \pi} \int_0^{2\pi} f(\theta) \sin n\theta d\theta$$

*(1) 将函数 $f(\theta) = \theta^3 + 2\theta^2 + 1$ 按固有函数系展开

(2). 基于固有函数的正交归一性求积分:

$$\int_0^{2\pi} (\theta^3 + 1) \cos n\theta d\theta$$

大氣大學
求實求真

- [X] 矩形域波动方程
- [X] 矩形域热传导方程
- [X] 圆域波动方程
- [X] 圆域热传导方程
- [X] 高维三大方程

求實求真
大氣大為

热传导方程

拉普拉斯场方程

贝赛尔函数与伽马函数

3. 薛定谔方程

1. 常微分方程

2. 三大偏微分方程

波动导方程

求實求真
大氣大為

径向固有值问题:

$$\begin{cases} r^2 R''(r) + rR'(r) + (\lambda r^2 - n^2)R(r) = 0 \\ R(r_0) = 0 \end{cases}$$

令:

$$x = \sqrt{\lambda}r, \quad y(x) = R(r) = R\left(\frac{x}{\sqrt{\lambda}}\right)$$

得 n 整数阶贝塞尔方程

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - n^2)y = 0$$

大氣大學
求實求真

解为贝塞尔函数

$$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!(n+m)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2m}$$

$$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!\Gamma(n+m+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2m}$$

零点近似值

$$\mu_m^n \approx m\pi + \frac{n\pi}{2} + \frac{3\pi}{4}$$

(1) 固有值 (零边界条件):

$$\sqrt{\lambda}r_0 = \mu_m^n \quad \rightarrow \quad \lambda_m^n = \left(\frac{\mu_m^n}{r_0}\right)^2$$

(2) 固有函数:

$$R_m^n(r) = J_n\left(\frac{\mu_m^n}{r_0}r\right)$$

大氣大為
求實求真

正交归一性:

$$\int_0^{r_0} r J_n\left(\frac{\mu_m^n}{r_0} r\right) J_n\left(\frac{\mu_{m'}^n}{r_0} r\right) dr = \begin{cases} 0, & (m \neq m') \\ \frac{r_0^2}{2} [J_{n+1}(\mu_m^n)]^2, & (m = m') \end{cases}$$

*(1) 将函数 $f(x) = x^3 + 2x^2 + 1$ 按贝塞尔函数展开

$$f(x) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m J_n\left(\frac{\mu_m^n}{x_0} x\right)$$

展开系数为:

$$c_m = \frac{2}{r_0^2 J_{n+1}^2(\mu_m^n)} \int_0^{x_0} f(x) J_n\left(\frac{\mu_m^n}{x_0} x\right) x dx$$

大氣大為
求實求真

* 其他性质和特殊点的值

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x)$$

$$J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x, \quad J_{-1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x$$

$$J'_n(\mu_m^n) = -J_{n+1}(\mu_m^n)$$

$$\frac{d}{dx} [x^n J_n(x)] = x^n J_{n-1}(x)$$

$$\frac{d}{dx} [x^{-n} J_n(x)] = -x^{-n} J_{n+1}(x)$$

$$2nJ_n(x) = xJ_{n-1}(x) + xJ_{n+1}(x)$$

$$2J'_n(x) = J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x)$$

$$c_m = \frac{2}{r_0^2 J_{n+1}^2(\mu_m^n)} \int_0^{r_0} f(r) J_n\left(\frac{\mu_m^n}{r_0} r\right) r dr$$

大氣大學
求實求真

Γ 函数的定义

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt, \quad (x > 0)$$

递推式:

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x), \quad (x > 0)$$

* 特殊值

$$\Gamma(1) = 1, \quad \frac{1}{\Gamma(-n)} = 0, \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) = -2\sqrt{\pi}, \quad \Gamma\left(-\frac{3}{2}\right) = \frac{4}{3}\sqrt{\pi}$$

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi}$$

大氣大為
求實求真

Γ 函数与阶乘

$$n! = \Gamma(n + 1)$$

$$0! = 1$$

$$\left(\frac{1}{2}\right)! = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\left(m - \frac{1}{2}\right)! = \frac{(2m)!}{2^{2m}m!}\sqrt{\pi}$$

应用

$$\int_0^\infty x^2 e^{-x^2} dx, \quad \int_0^\infty x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} dx$$

大氣大為
求實求真

1. 常微分方程

2. 三大偏微分方程

3. 薛定谔方程

一维无限深势阱

量子谐振子方程

氢原子

求實求真
大氣大為

标准形式:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

若势函数 $V(\vec{r}, t)$ 不显含时间 t , 时间可分离变量

I、演化问题 (方程)

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(t) = E$$

解方程, 得: $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$

II、固有值问题 (定态薛定谔方程)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

大氣大學
求實求真

3. 薛定谔方程

一维无限深势阱

量子谐振子方程

氢原子

1. 常微分方程

2. 三大偏微分方程

求實求真
大氣大為

例 1、一维无限深势阱

一粒子处于如下一维无限深势阱，求解含时薛定谔方程

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ +\infty & x < 0, x > a \end{cases}$$

固有值 (能级): $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} (n = 1, 2, 3, \dots)$

固有函数: $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$

解函数:

$$\psi_n(x, t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

大氣大為
求實求真

叠加解:

$$\Psi(x, t) = \sum_n A_n \psi_n(x, t)$$

*(1) 将函数 $f(x) = x^3 + 2x^2 + 1$ 按固有函数系 $\psi_n(x)$ 展开

(2). 基于固有函数的正交归一性求积分:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (x^3 + 1) \psi_n(x) dx$$

(3) 势阱有变化. 如何解方程

$$V(x) = \begin{cases} 0 + 1 & 0 < x < a \\ +\infty & x < 0, x > a \end{cases}; \quad V(x) = \begin{cases} 0 & -a < x < a \\ +\infty & x < -a, x > a \end{cases};$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ +\infty & x < -\frac{a}{2}, x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

大氣大學
求實求真

3. 薛定谔方程

一维无限深势阱

量子谐振子方程

氢原子

1. 常微分方程

2. 三大偏微分方程

求實求真
大氣大為

弹性势:

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2, & V(x) &= \frac{1}{2}\mu\omega^2 (x-1)^2 \\ V(x) &= \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + 1, & V(x) &= \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + x \end{aligned}$$

例 2、求解谐振子薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \right] \Psi(x, t)$$

能量固有值 (能级)

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

大氣大為
求實求真

能量固有解(函数)

$$\psi_n(\xi) = N_n \exp(-\frac{\xi^2}{2}) H_n(\xi), \quad \xi = \alpha x = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

定态波函数

$$\psi_n(x, t) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2} \exp(-\frac{\alpha^2 x^2}{2} - \frac{i}{\hbar} E_n t) H_n(\alpha x)$$

叠加解

$$\Psi_n(x, t) = \sum_n A_n \psi_n(x, t)$$

大氣大學
求實求真

* 厄米多项式

$$H_n(x) = \sum_{m=0}^M (-1)^m \frac{n!}{m!(n-2m)!} 2^{n-2m} x^{n-2m} = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

厄密方程

$$H'' - 2\xi H' + 2nH = 0$$

生成函数

$$w(x, t) = e^{2xt-t^2}$$

递推公式

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$$

$$H_n(x) - 2xH_{n-1}(x) + 2(n-1)H_{n-2}(x) = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_n^2(x) dx = 2n \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_{n-1}^2(x) dx$$

大氣大學
求實求真

正交归一性:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx = \begin{cases} 0, & (m \neq n) \\ 2^n n! \sqrt{\pi}, & (m = n) \end{cases}$$

* 厄米多项式展开 (记住 P 73 的表 3.1)

(1) 将函数 $f(x) = x^3 + 2x^2 + 1$ 按厄米多项式展开

(2). 基于厄米多项式的正交归一性求积分:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (x^3 + 1) e^{-x^2} H_n(x) dx$$

大氣大學
求實求真

3. 薛定谔方程

一维无限深势阱

量子谐振子方程

氢原子

1. 常微分方程

2. 三大偏微分方程

求實求真
大氣大為

球坐标系下的方程为:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} L^2 - \frac{e_s^2}{r} \right] \Psi = E \Psi$$

式中

$$L^2 = - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

大氣大學
求實求真

能量固有值

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

能量固有函数:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}} \left(\frac{2}{na_0}r\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2}{na_0}r\right) e^{-\frac{r}{na_0}}$$

角动量固有值

$$\begin{cases} m\hbar, & (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l) \\ l(l+1)\hbar^2, & (l = 1, 2, \dots, n-1) \end{cases}$$

角动量固有函数:

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

大氣大為
求實求真



氢原子的解

● 氢原子波函数:

$$\Psi_{nlmm_s}(r, \theta, \varphi, s) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)S_{m_s}(s)$$

- 主量子数: $n = 1, 2, 3, \dots$, 能级, 轨道能量 (主 K, L, M, N, O, P, Q)
- 角量子数: $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$, 角动量大小, 轨道形状 (次 s, p, d, f)
- 磁量子数: $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$, 角动量方向, 轨道空间取向
- 自旋量子数: $m_s = \pm 1/2$

* 式中 $L_n^m(x)$ 为连带拉盖多项式

$$L_n^m(x) = \frac{x^{-m} e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^{m+n} e^{-x})$$

拉盖多项式

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n (-1)^k C_n^k \frac{n!}{k!} x^k = e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$$

拉盖方程

$$xL_n'' + [1-x]L_n' + nL_n = 0$$

生成函数

$$w(t, x) = \frac{e^{-xt/(1-t)}}{1-t}$$

拉盖多项式递推式

$$L_{n+1} = (2n+1-x)L_n - n^2 L_{n-1}$$

$$L_1 = (1-x)L_0$$

大氣大學
求實求真

正交归一性:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} L_n L_m dx = \begin{cases} 0, & (m \neq n) \\ (n!)^2, & (m = n) \end{cases}$$

* 拉盖多项式展开 (记住 P 88)

(1) 将函数 $f(x) = x^3 + 2x^2 + 1$ 按拉盖多项式展开

(2). 基于拉盖多项式的正交归一性求积分:

$$\int_0^{+\infty} (x^3 + 1)e^{-x} L_n(x) dx$$

大氣大學
求實求真

* 式中 $P_l^m(x)$ 是连带勒让德多项式

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

勒让德多项式

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

勒让德方程:

$$(1-x^2) \frac{d^2 y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + l(l+1)y = 0$$

生成函数

$$w(x, z) = (1 - 2zx + z^2)^{-1/2}$$

递推式

$$(n+1)P_{n+1}(x) - (2n+1)xP_n(x) + nP_{n-1}(x) = 0$$

大氣大學
求實求真

正交归一性:

$$\int_{-1}^1 P_m P_n dx = \begin{cases} 0, & (m \neq n) \\ \frac{2}{2n+1}, & (m = n) \end{cases}$$

* 勒让德多项式展开 (记住 P 99)

(1) 将函数 $f(x) = x^3 + 2x^2 + 1$ 按勒让德多项式展开

(2). 基于勒让德多项式的正交归一性求积分:

$$\int_0^{+\infty} (x^3 + 1) P_n(x) dx$$

大氣大學
求實求真

“我们必须把科学当艺术, 然后才能从科学中得到完整的知识”

... [德国] 歌德

求實求真
大氣大為



电子科技大学

University of Electronic Science and Technology of China

考试成功，学有所成！

求實求真
大氣大為



电子科技大学

University of Electronic Science and Technology of China

Thanks for your attention!

A & Q

求實求真
大氣大為