工 程 数 学

Engineering Mathematics

李小飞
光电科学与工程学院

2022 年 5 月 20 日

总 复 习 (2 学时)

四个方程

1. 基础: 常微分方程基本解法 (15%)
2. 三大偏微分方程 (40%)
3. 一个薛定谔方程 (含氢原子) (45%)

内容	题目序号	分数
第一章 绪论	一	15
第五章 特殊函数及其应用	二	10
第二章 分离变量法	三四	25
第三章 薛定谔方程分离变量法	五	25
第四章 氢原子薛丁谔方程		25

每个方程的主要内容

1. 方程的建立
2. 方程的求解技巧
3. 解的特性 固有解的正交性和平方积 叠加解的系数
4. 应用 解的物理意义 求复杂积分,...

求實求真 大氣大為

1. 常微分方程基本解法
   - 一阶常微分方程
   - 二阶常微分方程

傅里叶变换

2. 三大偏微分方程

3. 薛定谔方程

例 1、放射性衰减模型

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

解: 分离变量

$$\frac{du}{u} = -rdt$$

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

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

初始条件定系数:

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

[X] 半衰期

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:

$$\left(\frac{1}{K-u} + \frac{1}{u}\right)du = rdt$$

$$-\ln(K-u) + \ln u = rt + C$$

$$u(t) = \frac{K}{1 + \exp(-rt - C)}$$

非齐次问题

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

解、衰减模型齐次方程有解:

$$y = C_0 exp(-px)$$

[X] 常系数变易, 设非齐次方程的解为

$$y(x) = C(x)exp(-px)$$

代入原方程, 解得系数多项式:

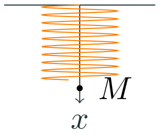
$$C(x) = \int exp(px)f(x)dx + C$$

代回, 原方程有解

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

傅里叶变换

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:

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

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

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

[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：

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

* 阻尼振动-一阶项的物理意义

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

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

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

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:

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

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

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:

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

变系数问题二例

变系数的物理含义

例 4、欧拉方程

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

解、令 $x=exp(t), t=lnx$，代回方程，转化为常系数方程：

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

是振动模型，有解：

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

原方程得解：

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

欧拉方程的变型-1

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

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

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

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:

$$y(x)=C_1x^n+C_2x^{-(n+1)}$$

欧拉方程的变型-2

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

欧拉方程的变型-3

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

例 5、n 阶厄米方程

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

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

傅里叶变换

1. 常微分方程基本解法
    - 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

三角式:

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

$$a_n=\frac{1}{l}\int_{-l}^{l}f(x)\cos\frac{n\pi}{l}xdx,\quad a_n=\frac{2}{l}\int_{0}^{l}f(x)\cos\frac{n\pi}{l}xdx$$

$$b_n=\frac{1}{l}\int_{-l}^{l}f(x)\sin\frac{n\pi}{l}xdx,\quad b_n=\frac{2}{l}\int_{0}^{l}f(x)\sin\frac{n\pi}{l}xdx$$

复数式:

$$f(x)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}c_ne^{i\omega_nx}\qquad (不连续),\qquad f(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}G(\omega)e^{i\omega x}d\omega\ (连续)$$

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

对称式:

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

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

量子形式:

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

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

* 物理意义: 找到一组正交基, 任意平滑函数都可以在这组正交基上展开.

试求 $\sin nx, \cos nx, e^{i\omega x}$ 的如下平方积

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

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

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

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

* 平方积对应傅里叶公式前的系数

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

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

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

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

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

* 正交性是求函数具体展开式的关键

Contents

求實求真 大氣大為

1. 常微分方程基本解法

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

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

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

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: * 解方程要看什么? (1) 这是什么类型的方程设 $u(x,t) = T(t)X(x)$, 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: $X_n = \sin\frac{n\pi}{l}x = \sin\omega_n x$

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):

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

代入定解条件:

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

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

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, 比如 $\varphi(x) = x^3 + 3x^2 + 1$, 问题变为求此函数的傅里叶展开式 (复杂分部积分法 P 43-44)

计算定积分 $\int_0^{\pi} x^2(\pi - x)^2 \cos nx dx$ 细节

$\psi(x) = x^2(\pi - x)^2$，则：

$$
\begin{aligned}
\psi'(x) &= 2x(2x-\pi)(x-\pi) \\
\psi''(x) &= 2\pi^2 - 12\pi x + 12x^2 \\
\psi'''(x) &= 24x - 12\pi \\
\psi^{(4)}(x) &= 24
\end{aligned}
$$

$\nu^{(4)}(x) = \cos nx$，则：

$$
\begin{aligned}
\nu'''(x) &= \frac{1}{n}\sin nx \\
\nu''(x) &= -\frac{1}{n^2}\cos nx \\
\nu'(x) &= -\frac{1}{n^3}\sin nx \\
\nu(x) &= \frac{1}{n^4}\cos nx
\end{aligned}
$$

应用分部积分公式

$$\int_0^{\pi} \psi(x)\nu^{(4)}(x)dx = [\psi\nu''' - \psi'\nu'' + \psi''\nu' - \psi'''\nu]|_0^{\pi} + \int_0^{\pi} \psi^{(4)}(x)\nu(x)dx$$
$$= [\psi\nu''' - \psi'\nu'' + \psi''\nu' - \psi'''\nu]|_0^{\pi}$$

* (1) 式中: $\int_0^{\pi} \psi^{(4)}(x)\nu(x)dx = \frac{24}{n^4}\int_0^{\pi} \cos nx dx = 0$

(2) 式中的第 1 和第 3 项等于零 $(\sin nx|_0^{\pi})$

(3) 式中第二项含 $2x(2x-\pi)(x-\pi)|_0^{\pi}$ 也为零, 因此有:

$$\int_0^{\pi} \psi(x)\nu^{(4)}(x)dx = [-\psi'''\nu]|_0^{\pi} = -\frac{12\pi}{n^4}[\cos n\pi + 1]$$

计算积分 $a_n = \frac{2}{l}\int\limits_0^l (x^3+2x-1)\cos\frac{n\pi x}{l}dx$

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:

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

积分:

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

等式右边的两项分别为零，有

$$(\lambda_n-\lambda_m)\int_0^l X_nX_m dx=0$$

$$\int_0^l X_nX_m dx=0\ ,\quad (n\neq m)$$

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

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

*(1) 将函数 $f(x) = x^3 + 2x^2 + 1$ 按第一类固有函数 $(X_n = \sin \dfrac{n\pi}{l} x)$ 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:

$+\infty$

1. 常微分方程基本解法

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

大气大考 求实求真

例 8、求解第一类边界条件下的一维热传导方程

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

解: 分离变量，一类零边界条件固有值问题

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

固有函数: $X_n = \sin\dfrac{n\pi}{l}x$

解方程 II： $T^{'} + rT = 0$

这是衰减模型[例 1]]

方程的解:

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

傅里叶变换公式，得定解系数:

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

第二类边界条件

例 9、求解第二类边界条件热传导方程

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

解: 固有值:

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

固有函数:

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

级数解:

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

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

Remark

导数边界条件导致:

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

* 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:

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

第三类边界条件

* 求第三类边界条件的固有值问题

$$III\quad \begin{cases} X''(x)+\lambda X=0\ ,\quad 0<x<L \\ X'(0)=0, X(L)=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \lambda_n=\dfrac{(2n+1)^2\pi^2}{4l^2} \\ X_n(x)=\cos\sqrt{\lambda}x \end{cases}$$

$$IV\quad \begin{cases} X''(x)+\lambda X=0\ ,\quad 0<x<L \\ X(0)=0, X'(L)=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \lambda_n=\dfrac{(2n+1)^2\pi^2}{4l^2} \\ X_n(x)=\sin\sqrt{\lambda}x \end{cases}$$

[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!

1. 常微分方程基本解法

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

例 10、求矩形域拉普拉斯方程

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

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)：

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

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, $\cdots$

例 11、求圆域拉普拉斯方程

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

解: 分离变量, 角向方程是自然边界固有值问题

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

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

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:

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

*(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:

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

[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

1. 常微分方程基本解法

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

求實求真 大氣大為

贝赛尔方程

径向固有值问题:

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

令:

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

得 n 整数阶贝塞尔方程

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

解为贝塞尔函数

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

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

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):

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

(2) 固有函数:

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

正交归一性:

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

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

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

展开系数为:

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

* 其他性质和特殊点的值

$$
\begin{aligned}
J_{-n}(x) =& (-1)^n J_n(x) \\
J_{1/2}(x) =& \sqrt{\frac{2}{\pi x}}\sin x, \quad J_{-1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos x \\
J_n'(\mu_m^n) =& -J_{n+1}(\mu_m^n) \\
\frac{d}{dx}\left[x^n J_n(x)\right] =& x^n J_{n-1}(x) \\
\frac{d}{dx}\left[x^{-n} J_n(x)\right] =& -x^{-n} J_{n+1}(x) \\
2nJ_n(x) =& xJ_{n-1}(x) + xJ_{n+1}(x) \\
2J_n'(x) =& J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x) \\
c_m =& \frac{2}{r_0^2 J_{n+1}^2(\mu_m^n)} \int_0^{r_0} f(r) J_n\left(\frac{\mu_m^n}{r_0} r\right) r dr
\end{aligned}
$$

Γ 函数的定义

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

递推式:

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

* 特殊值

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

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

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

Γ 函数与阶乘

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

$$0! = 1$$

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

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

应用

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

$$1.\ \Gamma(1) = 1, \qquad 2.(0)! = 1$$

Contents

含时薛定谔方程

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）

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

1. 常微分方程基本解法

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

一维无限深势阱

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）： $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}(n = 1, 2, 3, ...)$

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

解函数：

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

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

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

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

1. 常微分方程基本解法

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

量子谐振子方程

弹性势：

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2,\qquad V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2(x-1)^2$$

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+1,\quad V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+x$$

例 2、求解谐振子薛定谔方程

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

能量固有值（能级）

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

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

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

* 厄米多项式

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

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

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

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

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

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:

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

1. 常微分方程基本解法

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

大气大为 求实求真

球坐标系下的方程为:

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

式中

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

能量固有值

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

能量固有函数:

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

角动量固有值

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

角动量固有函数:

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

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: $n=1,2,3,\cdots$, 能级, 轨道能量 (主 K, L, M, N, O, P, Q)
- 角量子数: $l=0,1,2,\cdots,n-1$, 角动量大小, 轨道形状 (次 s, p, d, f)
- 磁量子数: $m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$, 角动量方向, 轨道空间取向
- 自旋量子数: $m_s=\pm1/2$

* 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

$$L_{n+1} = (2n+1-x)L_n - n^2 L_{n-1}$$
$$L_1 = (1-x)L_0$$

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:

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

* 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

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

勒让德方程:

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

生成函数

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

递推式

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

正交归一性:

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

* 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:

$$\int_{0}^{+\infty} (x^3 + 1) P_n(x) dx$$

”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

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