物理笔记 | 量子力学

Siyan Dong

Introduction

本笔记主要汇集我学 QM 时候的一些感悟、总结；材料主要来自 Fll’s Slides, 田光善老师的网课、一些经典教材（Griffiths、Sakurai（Modern QM）等) 还有学习笔记 by 知乎、github 上；具体应用后面列出。

食用注意：期末备考时期整理完成，不适合当学习材料（单独列出），详细程度介于笔记与公式表之间。

第 1 章　绪论：数学基础、物理学史

1.1　数学基础

见下, 引用自[1]

	δ势	线性	谐振子	库仑$\kappa = Ze^2$
	$\mu = \hbar = \gamma = 1$	$\mu = \hbar = F = 1$	$\mu = \hbar = \omega = 1$	$\mu = \hbar = \kappa = 1$
能量$[E]$	$\mu\gamma^2/\hbar^2$	$(\hbar^2F^2/\mu)^{1/3}$	$\hbar\omega$	$\mu\kappa^2/\hbar^2$
长度$[L]$	$\hbar^2/\mu\gamma$	$(\hbar^2/\mu F)^{1/3}$	$\sqrt{\hbar/\mu\omega}$	$\hbar^2/\mu\kappa$
时间$[T]$	$\hbar^3/\mu\gamma^2$	$(\hbar\mu/F^2)^{1/3}$	$1/\omega$	$\hbar^3/\mu\kappa^2$
速度$[v]$	$\gamma/\hbar$	$(\hbar F/\mu^2)^{1/3}$	$\sqrt{\hbar\omega/\mu}$	$\kappa/\hbar$
动量$[p]$	$\mu\gamma/\hbar$	$(\hbar\mu F)^{1/3}$	$\sqrt{\hbar\mu\omega}$	$\mu\kappa/\hbar$

1. 数学速查

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{lmn} = \begin{vmatrix} \delta_{il} & \delta_{im} & \delta_{in} \\ \delta_{jl} & \delta_{jm} & \delta_{jn} \\ \delta_{kl} & \delta_{km} & \delta_{kn} \end{vmatrix}$$

$$\sum_{i=1}^{3} \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}$$

$$\left(\vec{A} \times \vec{B}\right)_k = \sum_{ij} \varepsilon_{kij} A_i B_j$$

$$\boldsymbol{\nabla} = \hat{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\hat{\boldsymbol{\theta}}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \vec{u} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 u_r) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta u_\theta) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}u_\phi$$

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$
$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

定义 *1.1* (**连带 Legendre 多项式**):

$$(1-\xi^2)\frac{\mathrm{d}^2 P}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\xi} + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)P = 0$$

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

定理 *1.2* (**连带 Legendre 多项式的正交性**):

$$\int_{-1}^{1} P_k^m(\xi)P_l^m(\xi)\,\mathrm{d}\xi = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{kl}$$

定义 *1.3* (**Legendre 多项式**):

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

定理 *1.4* (**Legendre 多项式的正交性**):

$$\int_{-1}^{1} P_k(x)P_l(x)\,\mathrm{d}x = \frac{2}{2l+1}\delta_{kl}$$

定理 *1.5* (**厄米多项式的正交性**):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}\,\mathrm{d}\xi = \sqrt{\pi}2^n n!\delta_{mn}$$

定理 *1.6* (**厄米多项式的递推关系**):

$$H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0$$

定义 *1.7* (**合流超几何微分方程**):

$$z\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}z^2} + (\gamma - z)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}z} - \alpha y = 0$$

定义 *1.8* (**合流超几何函数**):

$$F(\alpha, \gamma, z) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha_k}{\gamma_k}\frac{z^k}{k!}$$

where $\alpha_k = \alpha(\alpha+1)...(\alpha+k-1)$

$\gamma_k = \gamma(\gamma+1)...(\gamma+k-1)$

定理 *1.9* (**δ函数的性质**):

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$$
$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\,\mathrm{d}k$$
$$x\delta(x) = 0$$
$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|}$$

定义 *1.10* (**三维δ函数**): 假设已定义一维 Dirac 函数$\delta(x)$,那么

$$\delta(\vec{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z) = \frac{1}{r^2\sin\theta}\delta(r)\delta(\theta)\delta(\phi) = \frac{1}{\rho}\delta(\rho)\delta(\phi)\delta(z)$$

定义 *1.11* (**球谐函数**):

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

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$
$$Y_{1\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$$
$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$$
$$Y_{2\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\phi}$$
$$Y_{2\pm2} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$$

定理 *1.12* (**球谐函数的完备性**): 平方可积的球谐函数形成了一个希尔伯特空间

$$\iint Y_{l'm'}Y_{lm}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

$$\sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\theta,\phi)Y^*_{l'm'}(\theta',\phi') = \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')$$

定理 *1.13* (**球谐函数的递推性质**):

$$\frac{z}{r}Y_{lm} = \cos\theta Y_{lm} = a_{lm}Y_{l+1,m} + a_{l-1,m}Y_{l-1,m}$$

$$\frac{x+iy}{r}Y_{lm} = e^{+i\phi}\sin\theta Y_{lm} = b_{l-1,-(m+1)}Y_{l-1,m+1} - b_{lm}Y_{l+1,m+1}$$

$$\frac{x-iy}{r}Y_{lm} = e^{-i\phi}\sin\theta Y_{lm} = -b_{l-1,m-1}Y_{l-1,m-1} + b_{l,-m}Y_{l+1,m-1}$$

$$a_{lm} = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}}$$

$$b_{lm} = \frac{\sqrt{(l+m+1)(l+m+2)}}{(2l+1)(2l+3)}$$

定理 *1.14* (**傅里叶变换**):

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{ikx}g(k)\,\mathrm{d}k$$
$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-ikx}f(x)\,\mathrm{d}x$$

定理 *1.15* (**正交对角化**):

$A = PDP^{-1}$

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \dots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}, P = (v_1 \ \dots \ v_n)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{|a|}$$
$$\int_0^{+\infty} r^n e^{-r/a}\,\mathrm{d}r = n!a^{n+1}$$

2. 算符

$$\vec{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$
$$\vec{p}^2 = -\hbar^2\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}$$
$$\vec{p}_r = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\vec{p} + \vec{p}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$
$$= -\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r^2\frac{\partial}{\partial r}$$
$$\vec{p}^2 = \frac{1}{r^2}\vec{l}^2 + \vec{p}_r{}^2$$
$$[x_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$$
$$[l_\alpha, x_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}i\hbar x_\gamma$$
$$[l_\alpha, p_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}i\hbar p_\gamma$$
$$[l_\alpha, l_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}i\hbar l_\gamma$$
$$[\vec{r}, H] = \frac{i\hbar}{m}\vec{p}$$

公设 *2.1* (**Schödinger Equation**):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

3. 中心力场

定理 *3.1* (**中心力场中运动粒子的哈密顿量**):

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\vec{l}^2}{2\mu r^2} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\vec{l}^2}{2\mu r^2} + V($$

[1]笔记来自：https://note.adamanteye.cc/

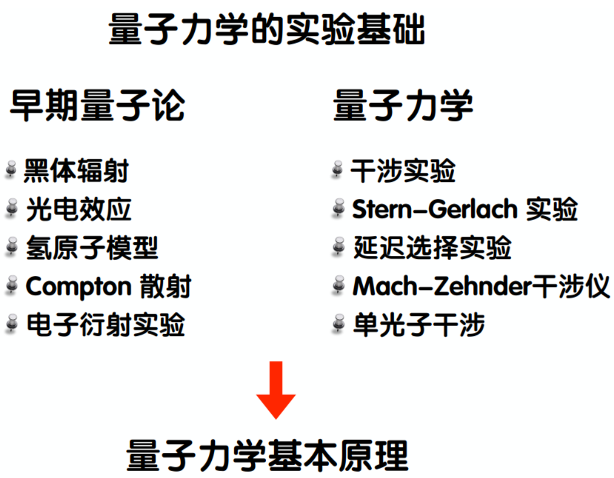
1.2 物理学史

量子力学发展史也是物理群星闪耀时[2]；这里举一个例子（后期打算写故事推文）：

文章标题：斯特恩与盖拉赫：一只劣质卷烟是如何帮助重新规划原子物理的[3]

在验证轨道空间角动量量子化（S-G 实验）尽管斯特恩做了精心的设计和可行性计算，实验还是花了一年多的时间才完成，设备的使用寿命只有几个小时’所以，最后收集板上得到的银的镀层非常薄，肉眼根本看不见’斯特恩这样描述早先的一段插曲：给真空系统充气后，盖拉赫卸掉了用于收集银原子束的法兰’但是，他连一点银镀层的痕迹都看不到，就把法兰递给了我’我凑近法兰仔细观察，盖拉赫就站在我身后，奇怪的是束斑的痕迹渐渐显现出来……后来我们知道是怎么回事了’我那时相当于一个助教，收入不多，抽不起好烟，净抽劣质烟卷’劣质烟含硫，我呼出的气息慢慢地把收集板上的银变成了黑色的硫化银，所以就可见了’这就像是冲洗相片。

另外需要注意的（来自老师课件）：



基本原理包括：

- 叠加原理 - Hilbert 空间量子态，Dirac 的 Bra 和 Ket
- 量子规则 - 可测量物理量的厄米算符表示
- 测量原理 - 量子几率、同时测量和对易关系、测不准关系
- 量子动力学 - 演化算子和么正性；Schrodinger 演化方程
- 对应原理 - Heinsenberg 绘景下的运动方程，经典对应

Note 另外是一些个人体会：算符[4]作用对应于测量操作，测量的本质是做投影（内积概念）。如果一个物理状态可观测，那么测量之后坍缩到本征态（实际我们也只能测量到本征态）

1.3 公式概念梳理

1.3.1 算符

1. **伴随算符**：A 的伴随算符 [1] 定义为 $A^\dagger$ ，有

$$A|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger$$

[2]建议看田光善老师网课，第一次引入某位物理学家必讲故事。

[3]本文原载于 Physics Today,December 2003, 美国物理学会授权翻译转载.”Reprinted with permission from Physics Today, Decem- ber 2003, Copyright 2003, American Institute of Physics. ”

[4]Operator，可以理解为“操作”子, 本笔记为了书写方便常常省略 $\hat{A}$ 的 hat

2. **厄米算符**：称 A 为厄米算符当且仅当

$$A = A^\dagger \Longleftrightarrow \langle\psi|A|\varphi\rangle = (\langle\varphi|A|\psi\rangle)^*$$
$$\text{for arbitray } \psi, \varphi$$

   - 厄米算符的本征值总是实的
   - 厄米算符对应不同本征值的本征态正交

3. **投影算符**：对某表象中的基矢 $|k\rangle$ ，称 P_k 为投影算符，作用在任意 $|\psi\rangle$ 上可得到 $|\psi\rangle$ 在 $|k\rangle$ 方向上的部分

$$P_k = |k\rangle\langle k|$$

4. **（单位算符）**：完备的情况下有

$$I = \sum_n |k_n\rangle \langle k_n|$$
$$I = \int |x\rangle\langle x|\mathrm{d}x$$

5. **平均值**：算符 A 的平均值定义为

$$\langle A\rangle_{|\psi\rangle} = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

6. **对易子**：算符 A, B 的对易子为

$$[A, B] = AB - BA$$

7. **不确定关系**：对任意 ψ 有

$$\left\langle(\Delta A)^2\right\rangle\left\langle(\Delta B)^2\right\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A, B]\rangle|^2$$

1.3.2 狄拉克符号总结：

狄拉克符号	$\psi(\mathbf{r})$
$\|\psi\rangle$	$\psi(\mathbf{r}, t)$
$\|\psi(t)\rangle$	$\int \psi_2^*(\mathbf{r})\psi_1(\mathbf{r})d^3r$
$\langle\psi_2 \mid \psi_1\rangle$	$\int \|\psi(\mathbf{r})\|^2 d^3r$
$\\|\psi\\|^2 = \langle\psi \mid \psi\rangle$	$\int \psi_2^*(\mathbf{r})\hat{A}\psi_1(\mathbf{r})d^3r$
$\langle\psi_2\| \hat{A} \|\psi_1\rangle$	$\int \psi^*(\mathbf{r})\hat{A}\psi(\mathbf{r})d^3r$
$\langle a\rangle = \langle\psi\|\hat{A}\|\psi\rangle$	
波函数 (右列对比)	.

1.4 量子动力学

1.4.1 随时间演化

- **Schödinger 图像:** $|\psi(t)\rangle$ 随时间演化, 其变化遵守 Schrödinger 方程, 力学量算符 (不显含时间) 与时间无关, 这种描述方式称为 Schrödinger 图像.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

- **Heisenberg 图像:** $|\psi\rangle$ 不随时间变化, 力学量算符 $A(t)$ 随时间演化, 这种描述方式称为 Heisenberg 图像. 算符 $A(t)$ 随时间的变化用 Heisenberg 方程描述。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A(t) = \frac{1}{i\hbar}[A(t), H]$$

Ehrenfest 定理: 若力学量 A 不显含时间，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[A, H]\rangle$$

考虑力学量 $A(t)$ 在任意 $|\psi(t)\rangle$ 上的演化，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[A, H]\rangle$$

此外 A 不显含时间，有 $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$.

1.5 基本常数与自然单位

$$c = 3\times 10^8\mathrm{m/s}$$
$$h = 6.625\times 10^{-34}\mathrm{Js}$$
$$\hbar = 1.054\times 10^{-34}\mathrm{Js}$$
$$m_p = 1.67\times 10^{-27}\mathrm{kg}$$
$$m_e = 9.11\times 10^{-31}\mathrm{kg}$$
$$e = 1.6\times 10^{-19}\mathrm{C}$$
$$\kappa = 1.38\times 10^{-23}\mathrm{J\ K^{-1}}$$

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$$
$$m_e c^2 = 0.511\mathrm{Mev}$$
$$m_p c^2 = 0.94\mathrm{Gev}$$
$$\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c} = 3.86159323\times 10^{-13}\mathrm{m}$$

第 2 章 Wave Function and Schrödinger's Equation

课程中对应应用部分，主要包含占有数表象下的一维谐振子 - 非厄米的产生和湮灭算子一维束缚态问题：环上的自由粒子；无限方势阱；有限方势阱；δ 势阱等；下面做一个结论式的概括：

2.1 态与波函数

1. 概率密度

$$\rho = \psi^* \psi$$

2. 概率流密度

$$\begin{aligned} \vec{j} &= -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right) \\ &= \frac{1}{2m}\left(\psi^* p \psi - \psi p \psi^*\right) \end{aligned}$$

3. 概率守恒：概率（粒子数）守恒的微分式

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

接下来是实际应用解题 $\bar{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ 首先阐述一下一维 Schrodinger 方程的普遍性质：

- 能量本征态总可以表示为实函数。一维势函数如果为实函数，除去一个整体相因子，束缚态的波函数总是实的。
- 如果势函数为偶函数，则能量本征态可以表示为偶函数或者奇函数。

2.2 占有数表象下的一维谐振子

对于 $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ 我们分解因式 $(A+iB)(A-iB)$ 可以定义出

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right) \\ a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{ip}{m\omega}\right) \\ N &= a^\dagger a (\text{粒子数算符}) \end{aligned}$$

他们有实际的物理含义（产生湮灭/升降算符）Note the difference here

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle \\ a|0\rangle &= 0 \end{aligned}$$

满足一些对易关系：

$$
\begin{gathered}
\left[a, a^{\dagger}\right]=1 \\
[N, a]=-a \\
\left[N, a^{\dagger}\right]=a^{\dagger}
\end{gathered}
$$

再去解题：

$$
\begin{gathered}
H|n\rangle=\left(n+\frac{1}{2}\right) \hbar \omega|n\rangle \\
E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right) \hbar \omega \\
\langle x \mid n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|\left(a^{\dagger}\right)^n|0\rangle \\
=\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m \omega}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \\
\left(\sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} x+\sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d} x}\right)^n e^{-\frac{m \omega \omega^2}{2 n} x^2}
\end{gathered}
$$

附上幂级数法：

$$
\begin{gathered}
\frac{\mathrm{d}^2 \psi}{\mathrm{d} \xi^2}+\left(\lambda-\xi^2\right) \psi=0 \\
\text { where } \omega=\sqrt{\frac{k}{m}}, \lambda=\frac{2 E}{\hbar \omega}, \xi=x \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} \\
E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right) \hbar \omega \\
\psi_n(x)=\left(\frac{m \omega}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\epsilon^2}{2}} \\
\text { where } H_n(x)=(-1)^n e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d} x^n} e^{-x^2}
\end{gathered}
$$

2.3 一维束缚态问题

2.3.1 一维无限深方势阱

$$
\begin{gathered}
V(x)= \begin{cases}0 & \text { if } 0<x<a \\
\infty & \text { elsewhere }\end{cases} \\
E_n=\frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} n^2 \text { where } n=1,2,3, \ldots \\
\psi_n(x)= \begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{n \pi x}{a}\right) & \text { if } 0<x<a \\
0 & \text { elsewhere }\end{cases}
\end{gathered}
$$

比较好理解，满足驻波条件；

环上的自由粒子也比较简单，增加一个周期性边界条件 $\psi(\phi)=\psi(\phi+2\pi)$

Note: 当一维无限深势井包含的区间为 [-a,a] 时候，由奇偶宇称可知：

$$
\psi_n(x)= \begin{cases}\sqrt{\frac{1}{a}} \sin \left(\frac{n \pi x}{2 a}\right) & \text { if }-a<x<a \text { when n is even } \\
\sqrt{\frac{1}{a}} \cos \left(\frac{n \pi x}{2 a}\right) & \text { if }-a<x<a \text { when n is odd } \\
0 & \text { elsewhere }\end{cases}
$$

2.3.2 三维无限深方势阱

放在这里对比的原因是可以分离变量，实质还是一维的问题。

$$V(r)=\begin{cases}0 & \text{if } (x,y,z)\in[0,a]\times[0,b]\times[0,c]\\ \infty & \text{elsewhere}\end{cases}$$

$$\psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z)=$$
$$\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\left(\frac{n_1\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{n_2\pi y}{b}\right)\sin\left(\frac{n_3\pi z}{c}\right)$$
$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right)$$

在 TestC 里面我们做过一个 XY 无限深 +Z 谐振子题目，注意那题还有个平移变换。

2.3.3 一维有限深方势阱

$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{if } |x|<\frac{a}{2}\\ V_0 & \text{if } |x|>\frac{a}{2}\end{cases}$$

势阱外的波函数为平面波

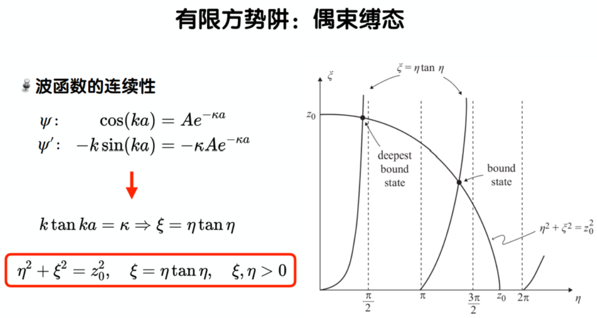
$$\psi(x)=\begin{cases}Ce^{\beta x} & \text{if } x<-\frac{a}{2}\\ A\sin(kx)+B\cos(kx) & \text{if } |x|<\frac{a}{2}\\ De^{-\beta x} & \text{if } x>\frac{a}{2}\end{cases}$$
$$\beta=\frac{\sqrt{2m\left(V_0-E\right)}}{\hbar},k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

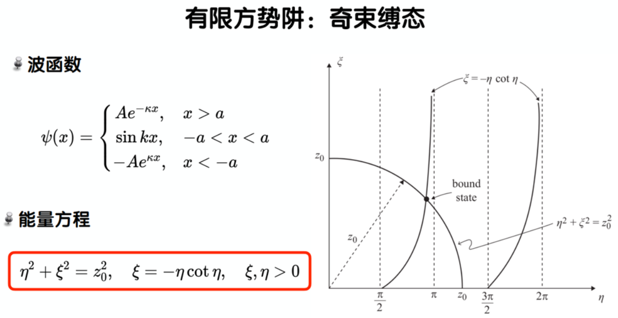
无量纲数 $\xi=\frac{ka}{2},\eta=\frac{\beta a}{2}$ 满足

$$\eta^2+\xi^2=\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}$$

偶宇称态 $\xi\tan(\xi)=\eta$ 基态宇称为偶奇宇称态 $-\xi\cot(\xi)=\eta$ 在 $V_0a^2\geq\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}$ 时才可能出现最低的奇宇称能级

$$E_n=\frac{2\hbar^2}{ma^2}\xi^2$$





2.3.4 一维 δ 势垒

$$V(x) = \gamma\delta(x)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = (E - \gamma\delta(x))\psi$$

在 Schödinger 方程的奇点 $x = 0$ 处 ψ'' 不存在，ψ 不连续，对 Schödinger 方程积分可得跃变条件

$$\psi'\left(0^+\right) - \psi'\left(0^-\right) = \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$$
$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} \\ \text{ if } x < 0 \\ Se^{ikx} \end{cases}$$
$$\text{if } x > 0$$

由连续性与跃变条件有

$$S = \frac{1}{1 + \frac{im\gamma}{\hbar^2 k}}$$
$$R = S - 1 = -\frac{im\gamma}{\hbar^2 k}\frac{1}{1 + \frac{im\gamma}{\hbar^2 k}}$$
$$T = |S|^2 = \frac{1}{1 + \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2 E}}$$
$$|R|^2 + |S|^2 = 1$$

2.4 一维散射问题

见原 Slides，期末不要求

2.4.1 一维有限高方势垒 *

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{if } 0 < x < a \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}$$

取波函数

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & \text{if } x < 0 \\ Se^{ikx} & \text{if } x > 0 \end{cases}$$

透射系数为

$$T = |S|^2 = \left(1 + \frac{1}{\left(\frac{4E}{V_0}\right)\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)}\sinh^2(\kappa a)\right)^{-1}$$
$$\text{where } \kappa = \frac{\sqrt{2m\left(V_0 - E\right)}}{\hbar}$$

在 $\kappa a \gg 1$ 的情况下，

$$T=\frac{16E\left(V_0-E\right)}{V_0^2}e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$$

反射系数为

$$|R|^2+|S|^2=1$$

2.5 高维问题

- 二维问题：Cartesian 系统和对称系统 - 自由粒子；谐振子；中心势场
- 维圆对称问题 - 自由粒子；中心力场；无限势阱；谐振子
- 3 维球对称问题 - 自由粒子；有限势阱；各向同性谐振子；氢原子

具体解法可以翻教材或者参考 北大曹庆宏老师讲义
We introduce 空间转动变换和角动量

第 3 章 角动量与自旋

3.1 旋转

绕 z 轴旋转

与平移对称运算相似，算子有

$$\hat{R}_z(\varphi) = \exp\left[-\frac{i\varphi}{\hbar}\hat{L}_z\right]$$

三维旋转

同理可得

$$\hat{R}_n(\varphi) = \exp\left[-\frac{i\varphi}{\hbar}\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}\right]$$

3.2 角动量

满足以下性质就可以定义为角动量算符：

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$$

在角动量空间 $|l,m\rangle$ 中特征方程有：

$$\hat{J}_z|l,m\rangle = m\hbar|l,m\rangle$$

$$\hat{J}^2|l,m\rangle = l(l+1)\hbar|l,m\rangle$$

Ladder operator: 角动量的升降算符 $\hat{L_\pm} \equiv \hat{L_x} \pm i\hat{L_y}$

$$\hat{L_\pm}|l,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}|l,m\pm 1\rangle$$

轨道角动量 $\hat{L}$ 自旋角动量 $\hat{S}$ 都满足，然后对易关系总结如下：

$$\begin{array}{lll}
[J_i, v_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}v_k & \vec{v}\text{ 是矢量或赝矢量} & \\
[J_i, s] = 0 & s\text{ 是数或标量} & \\
[L_i, \omega_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\omega_k & \vec{\omega}(\vec{r},\vec{p}) & \\
[L_i, f] = 0 & f(\vec{r},\vec{p})\text{ 是标量函数} & \\
[S_i, g] = 0 & g(\vec{r},\vec{p}) & \\
[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k & \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} & \\
[J_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k & [J_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k & \\
[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k & [S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k & [L_i, S_j] = 0 \\
\left[J_i, \vec{J}^2\right] = 0 & \left[J_i, \vec{L}^2\right] = 0 & \left[J_i, \vec{S}^2\right] = 0 \\
\left[L_i, \vec{L}^2\right] = 0 & \left[L_i, \vec{L}^2\right] = 0 & \left[S_i, \vec{L}^2\right] = 0 \\
\left[S_i, \vec{S}^2\right] = 0 & \left[\vec{L}^2, \vec{J}^2\right] = 0 & \left[\vec{S}^2, \vec{J}^2\right] = 0
\end{array}$$

3.3 自旋

目前自然界中已知粒子的自旋共有三种:

- 自旋为 0: 希格斯 (Higgs) 粒子, 又称作为“上帝粒子”[5], 于 2012 年 7 月 4 日发现, 是有质量粒子

[5]美国物理学家莱德曼写过一本书，讲到了这个寻找历程困难重重的希格斯粒子，他原本打算叫它「该死的粒子」（Goddamned Particle），但出版社不同意书名有粗话，顺手删掉了「该死的」（damned）这个词，就这样变成了「上帝粒子」（God Particle）

的质量起源。目前人们正在精确检验它的各种属性;

- 自旋为 1/2: 电子、正电子、质子、中子、muon 轻子、中微子、夸克以及各种复合粒子等;
- 自旋为 1: 光子、W 和 Z 玻色子、胶子等传播相互作用的媒介粒子。
- 此外还有尚未被实验证实的自旋为 2 的引力子。

3.3.1 单个粒子 1/2 自旋

$$\chi = a\chi_+ + b\chi_-, \quad |a|^2+|b|^2 \equiv 1$$

The operators for S are:

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Note 我们引入 Pauli 矩阵来简化：

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

3.3.2 任意方向自旋

设任意方向的单位向量 $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 其中

$$\begin{cases} n_x = \cos\phi\sin\theta \\ n_y = \sin\phi\sin\theta \\ n_z = \cos\theta \end{cases}$$

将自旋写成三分量的形式：$\vec{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$
定义在 $\vec{n}$ 方向的自旋算符 (spin operator in the direction of $\vec{n}$)：

$$\hat{S}_{\vec{n}} = \vec{n}\cdot\vec{S} = n_x\hat{S}_x + n_y\hat{S}_y + n_z\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}(n_x\hat{\sigma}_1 + n_y\hat{\sigma}_2 + n_z\hat{\sigma}_3)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

本征值为 $\lambda = +1$ 和 -1；本征向量分别对应为

$$\begin{cases} |\vec{n};+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|z;+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|z;-\rangle \\ |\vec{n};-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi}|z;+\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|z;-\rangle \end{cases}$$

3.3.3 两个自旋 1/2 粒子耦合

In the z direction, we easily obtain:

$$m = m_1 + m_2$$

For the overall system, which is more complex, we have:
Triplet States ($s = 1$)

$$\begin{cases} |1\ 1\rangle & = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1\ 0\rangle & = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1\ -1\rangle & = |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

Singlet State ($s = 0$)

$$|0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

General Rules for s

$$s = (s_1 + s_2),\ (s_1 + s_2 - 1),\ (s_1 + s_2 - 2), \dots, |s_1 - s_2|$$

We can express the general state as:

$$|sm\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C^{s_1 s_2 s}_{m_1 m_2} |s_1 s_2 m_1 m_2\rangle = \sum_s C^{s_1 s_2 s}_{m_1 m_2} |sm\rangle$$

第 4 章 全同粒子

4.1 玻色子和费米子

假设我们有两个不相互作用的粒子，有波函数

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2)$$

这是经典做法，但实际上量子力学我们并不能区分两个粒子是否处于 a 还是 b 态，我们无法区分两个粒子。对于全同粒子就有了如下表示

$$\psi_\pm(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \pm \psi_b(r_1)\psi_a(r_2)]$$

该理论承认两种相同的粒子：玻色子 *（正号）和费米子（负号）。玻色子态在交换下是对称的，

$$\psi_+(r_1, r_2) = \psi_+(r_2, r_1)$$

费米子态是反对称的，

$$\psi_-(r_1, r_2) = -\psi_-(r_2, r_1)$$

特别是，两个相同的费米子 +（例如，两个电子）不能占据相同的状态。若 $\psi_a = \psi_b$，就有

$$\psi_-(r_1, r_2) = 0$$

加上自旋后的整体概率波函数为

$$\psi(\mathbf{r})\chi$$

它满足反对称性

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\chi(1,2) = -\psi(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1)\chi(2,1)$$

第 5 章 不含时的非简并微扰

首先，我们把新的哈密顿量写成两项的和

$$H = H^0 + \lambda H'$$

波函数写成

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \dots$$

有

$$\lambda^1 : H^0\psi_n^1 + H'\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^1 + E_n^1\psi_n^0$$
$$\lambda^2 : H^0\psi_n^2 + H'\psi_n^1 = E_n^0\psi_n^2 + E_n^1\psi_n^1 + E_n^2\psi_n^0$$

一阶算子作用在初始波函数 ψ_n^0 上，有

$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle$$

更加通式的结果

$$(H^0 - E_n^0)\psi_n^1 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0 \Rightarrow \psi_n^1 = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\psi_m^0$$

$$\sum_{m\neq n}(E_m^0 - E_n^0)c_m^{(n)}\langle\psi_l^0|\psi_m^0\rangle = -\langle\psi_l^0|H'|\psi_n^0\rangle + E_n^1\langle\psi_l^0|\psi_n^0\rangle$$

当 $l = n$ 的时候，为之前的式子，如果 $l \neq n$，则

$$(E_l^0 - E_n^0)c_l^{(n)} = -\langle\psi_l^0|H'|\psi_n^0\rangle \Rightarrow c_m^{(n)} = -\frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle}{(E_m^0 - E_n^0)}$$

通解为

$$\psi_n^1 = \sum_{m\neq n} -\frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle}{(E_m^0 - E_n^0)}\psi_m^0$$

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^2\rangle + \langle\psi_n^0|H'\psi_n^1\rangle = \langle\psi_n^0|E_n^0\psi_n^2\rangle + \langle\psi_n^0|E_n^1\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^0|E_n^2\psi_n^0\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'\psi_n^1\rangle - E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = \langle\psi_n^0|H'\psi_n^1\rangle$$

$$E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} -\frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle}{(E_m^0 - E_n^0)}\langle\psi_n^0|H'\psi_n^0\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^2 = \sum_{m\neq n} -\frac{|\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle|^2}{(E_m^0 - E_n^0)}$$