第4章 力学量用算符表达

2017年4月9日 15:03

- ☐ 算符运算规则
- ☐ 谐振子代数解法
- ☐ Hermite 算符，Observable
- ☐ 不确定度关系
- ☐ 共同本征函数，角动量算符
- ☐ 力学量完全集
- ☐ 连续谱本征函数“归一化”

He lies somewhere here

——海森堡 (W. Heisenberg)

坐标空间中的Operator

- ☐ 动量算符 $\hat{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$
- ☐ 动能算符 $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
- ☐ 角动量算符 $\hat{l} = r \times \hat{p}$
- ☐ Hamilton量 $\hat{H} = \hat{T} + V(\boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})$

! 在量子力学中，力学量用算符表示。即在某一表象中，所有力学量表示为这一表象中的某种操作。

算符的运算规则

? 态叠加原理中的算符，算符作用在叠加态 $\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$ 上会怎样

- ☐ 线性算符：满足 $\hat{O}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) = C_1\hat{O}\psi_1 + C_2\hat{O}\psi_2$ 的算符。线性操作对应的都是线性算符，比如求导。非线性操作，比如开方，平方，取复共轭等不是线性算符。

最简单的算符 → 单位算符：$\hat{I}\psi = \psi$

算符的运算

- ☐ 算符相等：$\hat{A}\psi = \hat{B}\psi \xrightarrow{\psi\text{任意}} \hat{A} = \hat{B}$
- ☐ 算符求和：$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi$
- ☐ 算符乘积：$(\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi)$

? 乘法交换律 $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$?

两个操作不一定能交换顺序： $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

例：$x\hat{p} - \hat{p}x$

考虑到

$$x\hat{p}_x\psi = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}\psi$$

但

$$\hat{p}_x x\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar\psi - i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}\psi$$

所以

$$(x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)\psi = i\hbar\psi$$

ψ是任意的波函数,所以

$$x\hat{p}_x - \hat{p}_x x = i\hbar$$

类似还可以证明

$$y\hat{p}_y - \hat{p}_y y = i\hbar, \qquad z\hat{p}_z - \hat{p}_z z = i\hbar$$

但

$$x\hat{p}_y - \hat{p}_y x = 0, \qquad x\hat{p}_z - \hat{p}_z x = 0, \cdots$$

概括起来,就是

$$x_\alpha \hat{p}_\beta - \hat{p}_\beta x_\alpha = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$$

对易式（commutator, 对易关系）

$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

- [ ] $[\hat{A},\hat{B}] = -[\hat{B},\hat{A}]$
- [ ] $[\hat{A},\hat{A}] = 0$
- [ ] $[\hat{A},c] = 0$
- [ ] $[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{C}]$
- [ ] $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$
- [ ] $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B},\hat{C}]$
- [ ] $[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] + [\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]] + [\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$ (Jacobi恒等式)

按照定义，于是有 $[x,\hat{p}] = i\hbar$

? 为什么要讨论对易关系，再论一维谐振子

一维谐振子的代数解法

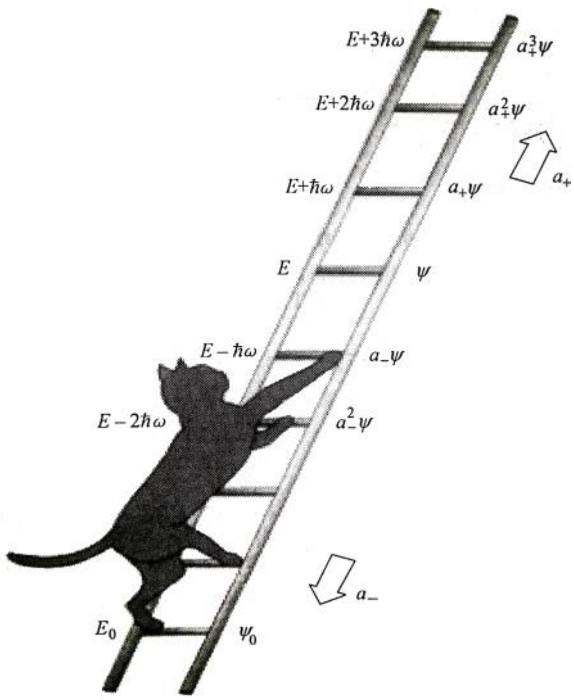
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

因式分解：$u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v)$

? $\hat{H} \xrightarrow{?} \frac{1}{2m}(-i\hat{p} + m\omega x)(i\hat{p} + m\omega x)$

$$\frac{1}{2m}(-i\hat{p} + m\omega x)(i\hat{p} + m\omega x)$$
$$= \frac{1}{2m}[\hat{p}^2 + m^2\omega^2x^2 + im\omega(x\hat{p} - \hat{p}x)]$$
$$= \hat{H} + \frac{i\omega}{2}[x,\hat{p}]$$

$$= \hat{H} - \frac{1}{2}\hbar\omega$$
$$\frac{1}{2m}(i\hat{p} + m\omega x)(-i\hat{p} + m\omega x)$$
$$= \frac{1}{2m}[\hat{p}^2 + m^2\omega^2x^2 - im\omega(x\hat{p} - \hat{p}x)]$$
$$= \hat{H} - \frac{i\omega}{2}[x, \hat{p}]$$
$$= \hat{H} + \frac{1}{2}\hbar\omega$$
定义 $\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp i\hat{p} + m\omega x)$，则有
$$\hat{H} = \hbar\omega\left[(\hat{a}_+\hat{a}_-) + \frac{1}{2}\right] = \hbar\omega\left[(\hat{a}_-\hat{a}_+) - \frac{1}{2}\right]$$
如果波函数 ψ 满足定态 Schrödinger 方程
$$\hat{H}\psi = E\psi$$
则对于 $\hat{a}_+\psi$ 有
$$\hat{H}(\hat{a}_+\psi)$$
$$= \hbar\omega\left[(\hat{a}_+\hat{a}_-) + \frac{1}{2}\right](\hat{a}_+\psi)$$
$$= \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_-a_+\psi + \frac{1}{2}\hat{a}_+\psi\right)$$
$$= \hat{a}_+\hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+\psi + \frac{1}{2}\psi\right)$$
$$= \hat{a}_+\left(\hat{H} + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi$$
$$= \left(E + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\hat{a}_+\psi$$
也就是说如果 ψ 是对应于能量本征值 E 的能量本征态，那么 $\hat{a}_+\psi$ 则是对应于能量本征值 $E + \frac{1}{2}\hbar\omega$ 的能量本征态。



同理有 $\hat{H}(\hat{a}_-\psi) = \left(E - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\hat{a}_-\psi$

于是有
$$\psi \to E$$
$$\hat{a}_+\psi \to E + \frac{1}{2}\hbar\omega$$
$$\hat{a}_-\psi \to E - \frac{1}{2}\hbar\omega$$
所以，这是一种生成新解的极好方法，如果我们得到了一个解，通过升降能量就可以得到其他的解。

! 升降算符 $\hat{a}_{\pm}$: 升算符$\hat{a}_+$，降算符 $\hat{a}_-$

如果我们反复应用降算符,能量逐渐下降。然而对于谐振子来说，能量不会小于0，于是必然存在一个本征态（基态）有
$$\hat{a}_-\psi_0 = 0$$
即
$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega x)\psi_0 = 0$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\hbar d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0 = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar d\psi_0}{dx} = -m\omega x\psi_0$$

$$\Rightarrow \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}xdx$$

$$\Rightarrow \ln\psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + C$$

$$\Rightarrow \psi_0 = Ae^{-\frac{\alpha^2}{2}x^2} \quad \left(\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}\right)$$

- 基态能量本征方程

$$\hat{H}\psi_0 = \hbar\omega\left[(\hat{a}_+\hat{a}_-) + \frac{1}{2}\right]\psi_0 = E_0\psi_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

- 激发态能量本征方程

$$\hat{H}\hat{a}_+^n\psi_0 = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})\hat{a}_+^n\psi_0$$

$$\begin{cases} \psi_n = \hat{a}_+^n\psi_0 = A\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)^n e^{-\frac{\alpha^2}{2}x^2} \\ E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \end{cases}$$

★ 常用对易关系

- $[x, \hat{p}] = i\hbar$
- $[x_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$
- $[\hat{p}, f(x)] = -i\hbar\dfrac{\partial f}{\partial x}$
- $[\hat{l}_\alpha, x_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar x_\gamma$ $\left(\text{Levi}-\text{Civita 符号 } \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}: \begin{cases} \varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1 \text{ 正序} \\ \varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = -1 \text{ 逆序} \\ \text{other cases} = 0 \end{cases}\right)$
- $[\hat{l}_\alpha, \hat{p}_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar\hat{p}_\gamma$
- $[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar\hat{l}_\gamma$
- $\hat{\boldsymbol{l}} \times \hat{\boldsymbol{l}} = i\hbar\hat{\boldsymbol{l}}$

★ 算符自己叉乘自己可以不为0，原因是分量之间可能不对易

- $[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hbar\hat{l}_z \quad (\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y)$
- $[\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] = \pm\hbar\hat{l}_\pm$
- $[\hat{\boldsymbol{l}}, V(\boldsymbol{r})] = 0$

★ 角动量算符

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{p}}$$

$$\begin{cases} \hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ \hat{l}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ \hat{l}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \end{cases}$$

球坐标

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases} \qquad \begin{cases} r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} \\ \theta = \arctan\left(\dfrac{\sqrt{x^2+y^2}}{z}\right) \\ \varphi = \arctan\left(\dfrac{y}{x}\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{l}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \hat{l}_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \hat{l}_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi} \end{cases}$$

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

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2}$$

$$\hat{p}_r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

- [ ] 逆算符 $\hat{A}^{-1}$

$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = I \Longrightarrow [\hat{A}, \hat{A}^{-1}] = 0$

★ $(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$

- [ ] 算符的函数

$$F(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{F^{(n)}(0)}{n!}\hat{A}^n$$

例如，$F(x)=e^{ax}$，$\hat{A}=\dfrac{d}{dx}$，则可定义

$$F(\hat{A}) = \exp\left(a\frac{d}{dx}\right) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}$$

波函数的标积 (scalar product)

$$(\psi, \varphi) \equiv \int d\tau\, \psi^* \varphi$$

$$(\psi,\psi) \geqslant 0$$
$$(\psi,\varphi)^* = (\varphi,\psi)$$
$$(\psi, c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2) = c_1(\psi,\varphi_1) + c_2(\psi,\varphi_2)$$
$$(c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \varphi) = c_1^*(\psi_1,\varphi) + c_2^*(\psi_2,\varphi)$$

算符的复共轭 $\hat{O}^*$ （算符里的所有量取复共轭）

$$\hat{p}^* = -\hat{p}$$

算符的转置

- $(\psi, \tilde{\hat{O}}\varphi) = (\varphi^*, \hat{O}\psi^*)$
- $\int d\tau\psi^* \tilde{\hat{O}}\varphi = \int d\tau\varphi \hat{O}\psi^*$
- $\dfrac{\tilde{\partial}}{\partial x} = -\dfrac{\partial}{\partial x}$
- $(\widetilde{\hat{A}\hat{B}}) = \tilde{\hat{B}}\tilde{\hat{A}}$

算符的厄米 (Hermite) 共轭: 转置复共轭

- $(\psi, \hat{O}^+\varphi) = (\hat{O}\psi, \varphi)$
- $\hat{O}^+ = \tilde{\hat{O}}^*$
- $(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots)^* = \hat{A}^*\hat{B}^*\hat{C}^*\cdots$

  $(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots)^+ = \cdots\hat{C}^+\hat{B}^+\hat{A}^+$

厄米算符

$\hat{O}^\dagger = \hat{O}$ or $(\psi, \hat{O}\psi) = (\hat{O}\psi, \psi)$ †: dagger

- 厄米算符之和为厄米算符

? 若 $\hat{A}, \hat{B}$ 都是厄米算符,那么乘积 $\hat{A}\hat{B}$ 是否是厄米算符?

$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A},$

所以需要 $[\hat{A},\hat{B}] = 0$, 才有 $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{A}\hat{B}$

所以 $\frac{1}{2}[\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}]$ 和 $\frac{1}{2i}[\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}]$ 是厄米算符。由此对于任意算符可以分解为

$\hat{O} = \hat{O}_+ + i\hat{O}_-$

其中 $\hat{O}_+ = \frac{1}{2}(\hat{O} + \hat{O}^\dagger)$ 和 $\hat{O}_+ = \frac{1}{2}(\hat{O} + \hat{O}^\dagger)$是厄米算符

- 在任何量子态下，厄米算符的平均值必为实数。
- 在体系的任何量子态下平均值均为实数的算符， 必为厄米算符。

实验上可以观测的力学量：可观测量（Observable）要求平均值为实数。

可观测量的算符必然为厄米算符，如坐标，动量，动能，势能

对于厄米算符有

$$\overline{\hat{O}^2} = (\psi, \hat{O}^2\psi) \geqslant 0$$

幺正算符 (Unitary operator)

$$\hat{A}^{-1} = \hat{A}^\dagger \Longrightarrow \hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{A} = 1$$

幺正算符乘积还是幺正算符

$$\hat{A}\hat{B}(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{A}\hat{B}\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{A}\hat{A}^\dagger = 1$$

若$\hat{O}$为厄米算符，则 $\hat{A} = e^{i\hat{O}}$ 为幺正算符

$$\left(e^{i\hat{O}}\right)^\dagger e^{i\hat{O}} = e^{-i\hat{O}}e^{i\hat{O}} = 1$$

算符的指数乘积不等于算符乘积的指数，除非二者对易

Schrödinger方程的形式解，时间演化算符

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(t)$$

假设有时间演化算符 $\hat{U}(t)$, 使得 $\psi(t) = \hat{U}(t)\psi(0)$, 则有

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t}\psi(0) = \hat{H}\hat{U}(t)\psi(0)$$

$$\Longrightarrow i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}(t)$$

$$\Longrightarrow \frac{1}{\hat{U}(t)}\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t} = -\frac{i\hat{H}}{\hbar}$$

$$\Longrightarrow \hat{U}(t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$$

由于 $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$, 所以$\hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$

时间演化算符 $\hat{U}(t) = e^{-iHt/\hbar}$ 是幺正算符

厄米算符的本征问题

平均值与涨落 (fluctuation)

力学量的平均值是由多次测量得到的结果，趋于一个确定值。然而每次测量结果围绕平均值有一个涨落.其定义为（均方差，标准差）

$$\overline{\Delta O^2} = \overline{(\hat{O}-\bar{O})^2} = \int \psi^*(\hat{O}-\bar{O})^2\psi d\tau = \int \left|(\hat{O}-\bar{O})\psi\right|^2 d\tau \geq 0$$

与能量对应类似，总可以找到特殊的态，使得 $\overline{\Delta O^2} = 0$。即 $(\hat{O}-\bar{O})\psi = 0$

于是有

$\hat{O}\psi_n = O_n\psi_n$

此即厄米算符的本征方程

厄米算符的本征值必为实数

厄米算符对应于不同本征值的本征函数，彼此正交

上面两个性质证明见课本136页。137-139页4个例子需要掌握。

$$\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

本征值 $m\hbar,\ m = 0, \pm1. \pm2, \ldots$

本征态 $\Phi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$

力学量的本征问题与简并

如果算符 $\hat{O}$ 的第 n 个本征态有 f_n 重简并，则有

$\hat{O}\psi_{n\alpha}=O_n\psi_{n\alpha}\ \ (\alpha=1,2,\dots,f_n)$

此时这 f_n 个本征态不一定正交，但总可以通过线性叠加

$\phi_{n\beta}=\sum_{\alpha=1}^{f_n}a_{\beta\alpha}\psi_{n\alpha}$,

使得彼此正交

$(\phi_{n\beta},\phi_{n\gamma})=\delta_{\beta\gamma}$

在处理实际问题 时，如出现简并 时，为了要把 $\hat{O}$ 的本征态确定下来，往往是用 $\hat{O}$ 以外的其他某力学量的本征值来区分这些简并态．此时，正交性问题可自动得到解决．这 就涉及两个（或多个）力学 量的共同本征态,也涉及不同 的 力学量的不确定度的关系．

不确定度关系的严格证明

回想一下谐振子的代数解法，假设有两个厄米算符组成的算符 $\hat{A}+i\gamma\hat{B}$ 作用在量子态

$\varphi=(\hat{A}+i\gamma\hat{B})\psi$上

则其模必为正，即

$(\varphi,\varphi)=\left((\hat{A}+i\gamma\hat{B})\psi,(\hat{A}+i\gamma\hat{B})\psi\right)$

$=\left(\psi,\hat{A}^2\psi\right)+\left(\psi,i\gamma[\hat{A},\hat{B}]\psi\right)+\left(\psi,\gamma^2\hat{B}^2\psi\right)$

$=\overline{\hat{A}^2}+i\gamma\overline{[\hat{A},\hat{B}]}+\gamma^2\overline{\hat{B}^2}\geq 0$

于是有

$\bar{\hat{C}}^2-4\overline{\hat{A}^2}\,\overline{\hat{B}^2}\leq 0\quad \hat{C}=i\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ 为厄米算符

即 $\sqrt{\overline{\hat{A}^2}\,\overline{\hat{B}^2}}\geq\frac{1}{2}\left|\bar{\hat{C}}\right|$

定义新厄米算符

$\hat{A}‘=\hat{A}-\bar{\hat{A}}$

$\hat{B}‘=\hat{B}-\bar{\hat{B}}$

同样满足 $\hat{C}=i\left[\hat{A}‘,\hat{B}’\right]$

于是有

$\Delta A\cdot\Delta B\geq\frac{1}{2}\left|\overline{[\hat{A},\hat{B}]}\right|$

此即推广的 Heisenberg 不确定度关系。其中$\Delta A=\sqrt{\overline{A^2}-\bar{A}^2}$ 为标准差

共同本征态

如果两个算符的不确定度为0，那么也就意味着二者可以同时得到确定值而不出现涨落，而得到确定值即对应相应的本征值。如果两力学量 A 与 B 对易，那么可以找到而这不确定度都为0的态，即它们的共同本征态

若两个厄米算符有共同本征态，是否它们就彼此对易

若两个算符不对易，是否就一定没有共同本征态

例1，2需要算算

角动量的共同本征函数，球谐函数

为解决氢原子问题，我们需要考虑角动量的本征态问题。由于角动量三分量不对易，并不

存在共同本征函数。然而，由于在球坐标下动能项可写为

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}=\frac{\hat{p}_r^2}{2m}+\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}$$

$$\hat{p}_r=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$$

包含了 $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ 项，并且 $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ 与角动量任意分量对易

$[\hat{\boldsymbol{l}}^2,\hat{l}_\alpha]=0,$

可以求 $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ 与任意分量的共同本征态。又由于

$$\begin{cases}\hat{l}_x=\mathrm{i}\hbar\left(\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{l}_y=\mathrm{i}\hbar\left(-\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{l}_z=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\end{cases}$$

其中 $\hat{l}_z$ 形式较为简单，所以可以求 $(\hat{\boldsymbol{l}}^2,\hat{l}_z)$ 的共同本征函数。

首先注意到 $\hat{l}_z$ 的

本征值 $m\hbar,\ m=0,\pm1.\pm2,\dots$

本征态 $\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$

所以

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

设 $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ 的本征函数为 $Y(\theta,\varphi)$, 满足本征方程

$\hat{\boldsymbol{l}}^2Y(\theta,\varphi)=\lambda\hbar^2Y(\theta,\varphi)$ (其中λ无量纲)

由 $\hat{l}_z$ 的本征态可知，$Y(\theta,\varphi)$ 可以分离变量为

$Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi_m(\varphi)$

于是本征方程可写为

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0,\qquad 0\leqslant\theta\leqslant\pi$$

令

$$\cos\theta=\xi\qquad(|\xi|\leqslant1)$$

则有

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

此即连带 Legendre 方程。通过分析求解可得，其解为球谐函数

$$\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\frac{2l+1}{4\pi}}\mathrm{P}_l^m(\cos\theta)\mathrm{e}^{im\varphi}$$

具有下列性质

$$Y_l^{m*} = (-1)^m Y_l^{-m}$$

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_l^{m*} Y_{l'}^{m'} \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

于是$(\hat{l}^2, \hat{l}_z)$的本征值和本征函数为

$$\hat{l}^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$$

$$\hat{l}_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$$

$$l = 0,1,2,\cdots$$

$$|m| \leqslant l, \text{即 } m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l$$

共同本征函数的一般讨论

- 如果两个力学量算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易，则它们有共同本征函数

$\hat{A}$ 的本征方程

$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n$

于是有

$\hat{A}(\hat{B}\psi_n) = \hat{B}\hat{A}\psi_n = A_n\hat{B}\psi_n$

可见 $\hat{B}\psi_n$ 也是 $\hat{A}$ 的本征态，同样对应本征值 A_n，如果 A_n 不简并，那么 $\hat{B}\psi_n$ 和 ψ_n 表示同一本征态，最多只差一常系数 B_n 于是有

$\hat{B}\psi_n = B_n\psi_n$

ψ_n 是二者的共同本征函数

对于简并情况同样可以证明上述结论

- 反之，如果 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 具有完整的共同本征函数系，那么二者对易

(对易)力学量完全集（Complete set of commuting observables）

设有一组彼此独立而且互相对易的厄米算符，它们的共同本征态记为 ψ_α, α 表示一组完备的量子数．设给定一组量子数α之后，就能够确定体系的唯一一个可能状态，则我们称这组算符构成体系的一组对易可观测量完全集.

不随时间变化——对易守恒量完全集

关于CSCO：

(1) CSCO是限于最小集合，即从集合中抽出任何一个可观测量后，就不再构成体系的CSCO. 所以要求CSCO中各观测量是函数独立的．

(2) 一个给定体系的CSCO中，可观测量的数目一般等于体系自由度的数目，但也可以大于体系自由度的数目

(3) 一个给定体系往往可以找到多个CSCO. 在处理具体问题时，应视其侧重点来进行选择，涉及体系的对称性．

练习 1，2，3需要算算

连续谱本征态的“归一化”

平面波 $\psi(x) = Ce^{ipx/\hbar}$

$\int |\psi(x)|^2 dx = |C|^2 \int dx = \infty$

? 如何归一化

归一化为 δ 函数

动量本征函数的归一化

$$\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}$$

$$\left(\psi_p(x),\psi_{p'}(x)\right)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{i(p-p')x/\hbar}dx=\delta(p'-p)$$

坐标本征函数的归一化

坐标本征方程：$x\delta(x-x_0)=x_0\delta(x-x_0)$

坐标本征函数：$\delta(x-x')=\delta(x'-x)$

$$(\psi_{x'},\psi_{x''})=\int\delta(x'-x)\delta(x''-x)dx=\delta(x'-x'')$$

箱归一化

先限定上下限为 $\pm L$ 再推广到无穷大

$$\psi_p(x)=Ce^{ipx/\hbar}$$

$$\psi_p\left(-\frac{L}{2}\right)=\psi_p\left(\frac{L}{2}\right)\Rightarrow\frac{pL}{\hbar}=2n\pi,n=0,\pm1,\pm2,\dots$$

$$p_n=\frac{2\pi\hbar n}{L}=\frac{nh}{L}$$

$$\psi_{p_n}(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{i2\pi nx/L}$$

$$\left(\psi_{p_n},\psi_{p_m}\right)=\frac{1}{L}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}|C|^2dx=\delta_{mn}$$