第二章 量子力学初步

波粒二象性

不确定关系

量子态

Schrödinger方程

力学量 本征方程

一维定态问题

Bohr理论的困难

1. 定态无辐射的理论基础是什么？
2. 定态跃迁的原因是什么？

Rutherford：跃迁"必须事先知道!" 大量的光子，不同的频率,电子如何选择某个频率而从E_i跃迁到 E_j上？

Schrödinger："糟透了的跃迁"，电子从一个轨道向另一轨道上跃迁，中间处于什么状态？

3. 不能解释H原子光谱的精细结构、谱线的宽度和强度

4. 不能解释其它许多光谱，He原子光谱也无法解释

"概念含糊、无坚实理论基础"——旧量子论

2.1 波粒二象性

经典物理中，波和粒子是完全不同的能量传播形式。

波：具有叠加性，特征量λ和ν，空间无限延展时，

λ和ν可同时测量

粒子：完全定域的，可视为质点，精确计算m,p,v等特征量

一、光的波粒二象性

光子（光量子）的物理概念，是建立在3个著名的物理实验基础上的

- 黑体辐射实验：黑体空腔中的光波，其能量只能取$\varepsilon=nh\nu$的形式，能量分立。
- 光电效应实验：光波由一个个光子组成，每个光子是一个整体，被电子吸收。
- 康普顿散射实验：光子具有动能、动量，与电子作用过程中，满足守恒律。

光同时具有波动性和粒子性——波粒二象性

- 波动性： 具有波的特征， λ， ν,波的叠加性
- 粒子性： 一个光子是一个不可分割的主体

光子能量：$E=h\nu$

光子动量：$p=h\nu/c=h/\lambda$

$$\begin{cases} E = h\nu \\ p = h/\lambda \end{cases}$$

波粒二象性关系

二、实物粒子的波动性

1.德布罗意(de Broglie，法)物质波假设

- 1924年，de Broglie将Einstein的光量子概念推广，提出了**物质波**的概念
- 波具有粒子性
- 粒子具有波动性

目的: 把实物粒子与光的理论统一起来,更自然地理解微观粒子能量的不连续性.

Prince Louis-victor de Broglie
1892-1987

$$\begin{cases} \nu = E/h \\ \lambda = h/p \end{cases}$$

德布罗意关系

相对论情况下

$$\begin{cases} E = \dfrac{m_0 c^2}{\sqrt{1-(\mathrm{v}/c)^2}} \\ P = \dfrac{m_0 \mathrm{v}}{\sqrt{1-(\mathrm{v}/c)^2}} \end{cases}$$

m_0为粒子静止质量

实物粒子包括宏观粒子和微观粒子。

宏观粒子的波动性很难观测到

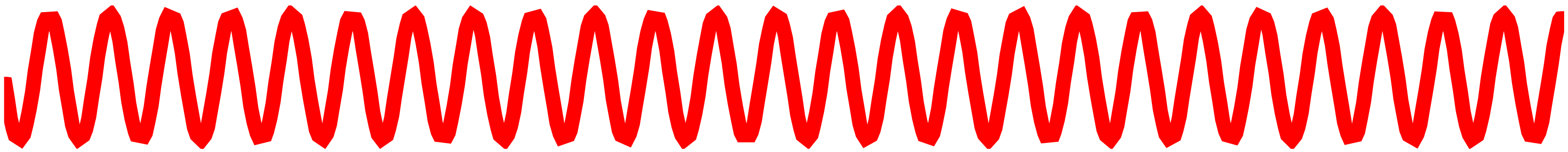
例1:求动能为100eV的电子的德布罗意波长.

非相对论情况: v<<c

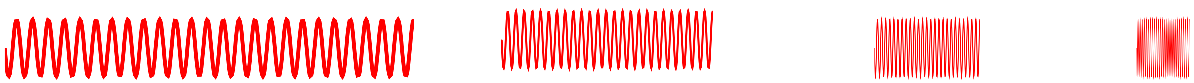
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} \sim 0.123nm$$

例2:质量为100g的子弹以100m/s的速度运动，求它的德布罗意波长.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\mathrm{v}} \sim 6.6 \times 10^{-35} m$$



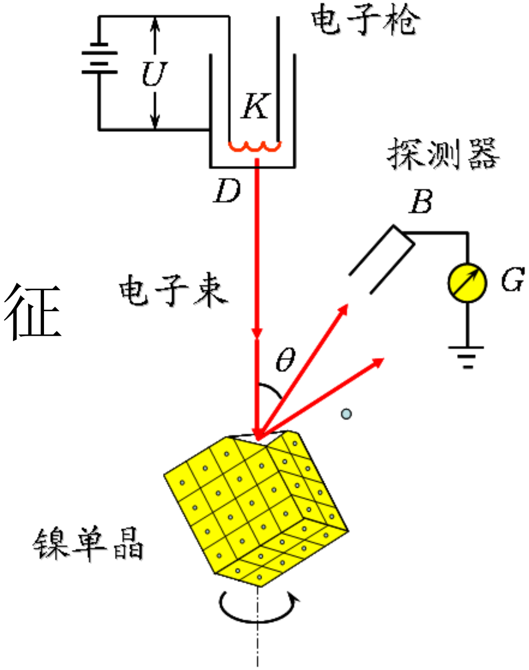
- 宏观粒子的波动性



- 如果波长太小，用现有仪器无法分辨物理量的周期性变化
- 如果波长太大，在有限的空间尺度内无法测量物理量的周期性变化

2. 电子波动性的实验验证

光的波动性由干涉和衍射实验揭示的。



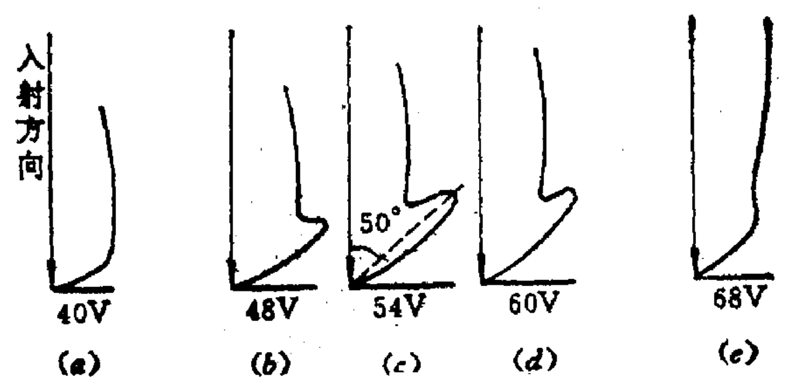
◆ **戴维逊-革末(Davison－Germer)实验**（1927）

电子从晶体表面的反射，呈现波动的衍射特征

实验装置：如右图

Clinton Joseph Davisson 1881～1958

Lester Halbert Germer 1896～1971



实验现象：电压为54V,散射角为50度衍射较强

实验解释：低能电子入射晶体，表面相当于一个反射光栅

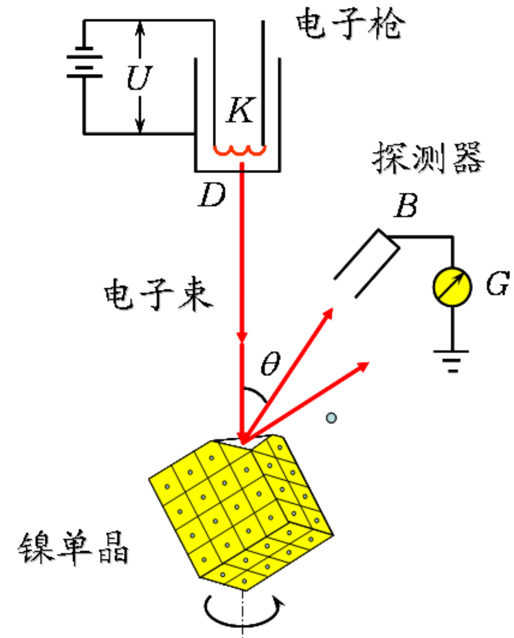
$$d\sin\theta = j\lambda$$

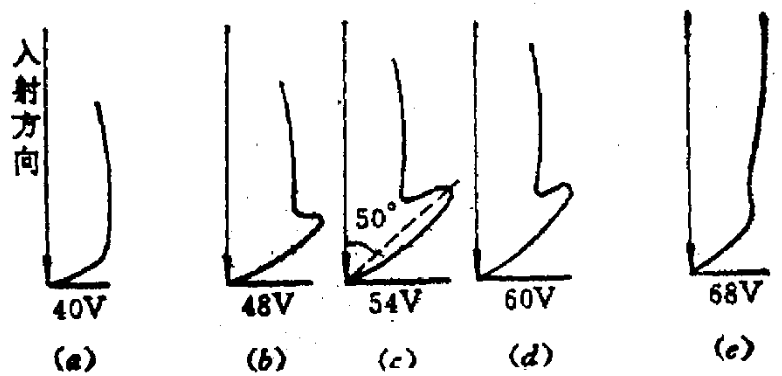
对于Ni单晶，晶格常数d=2.15 Å, E=54 eV时

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} = 1.67\,\text{Å}$$

取 $j = 1, \sin\theta = \dfrac{\lambda}{d}$

$$\theta = 51^\circ$$



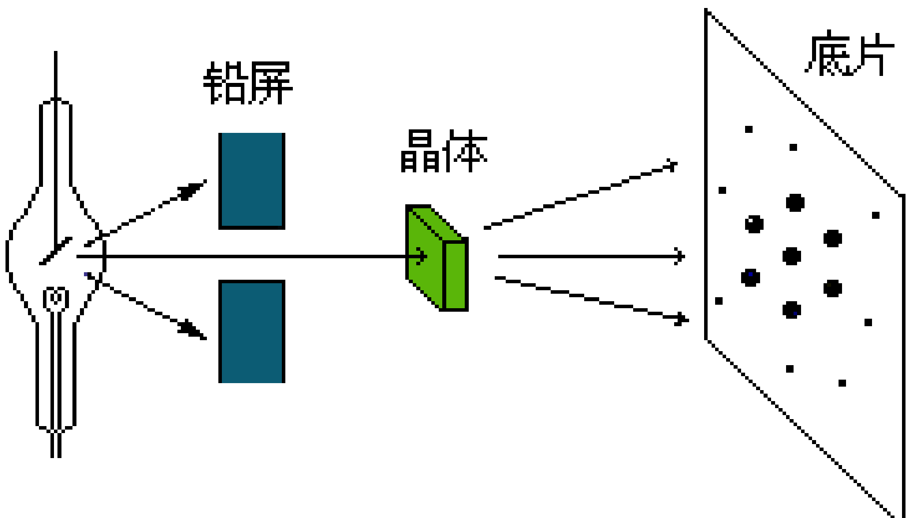


- Thomson实验（1927）——电子透过晶体薄膜的透射现象

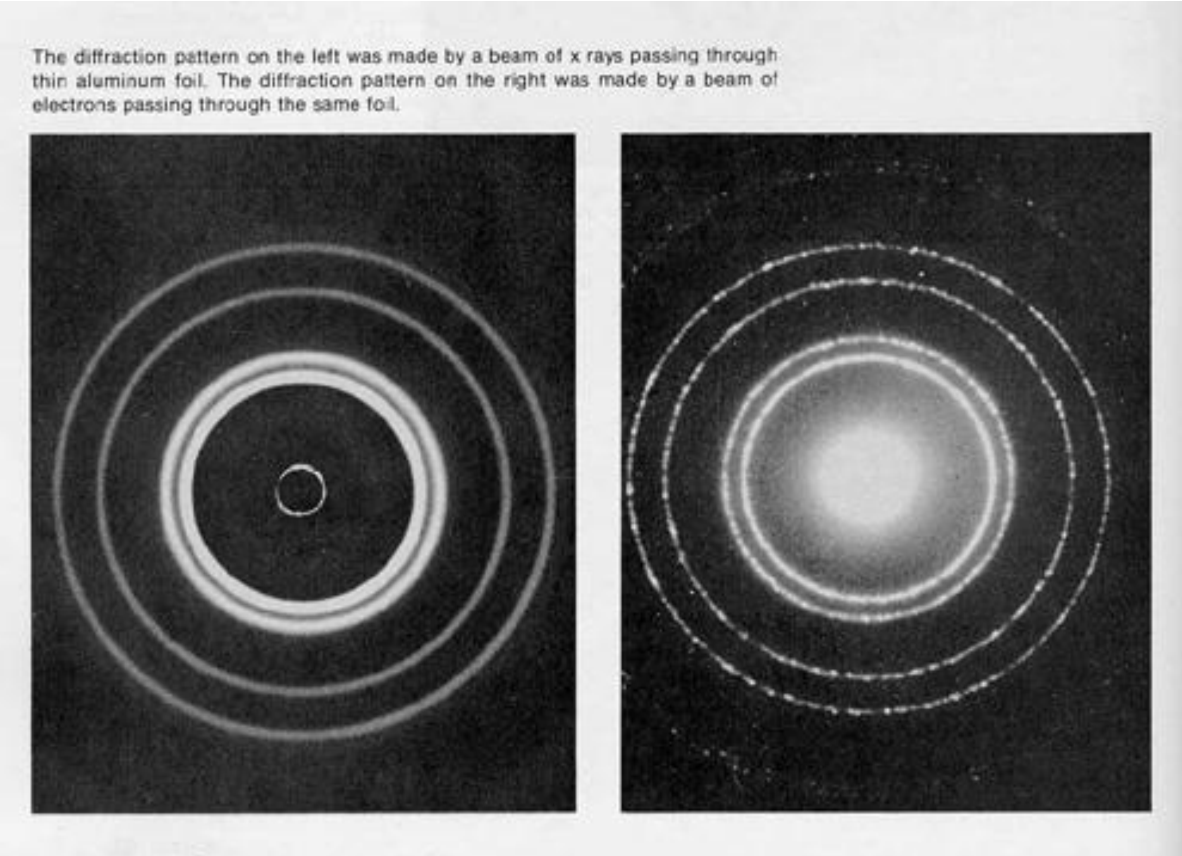
多晶铂

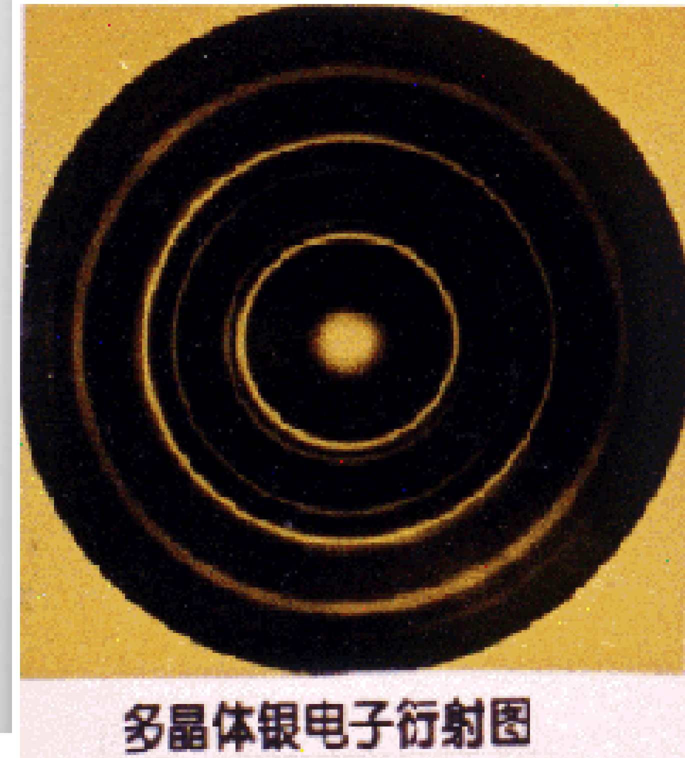
↓

同心圆环



G. P. Thomson



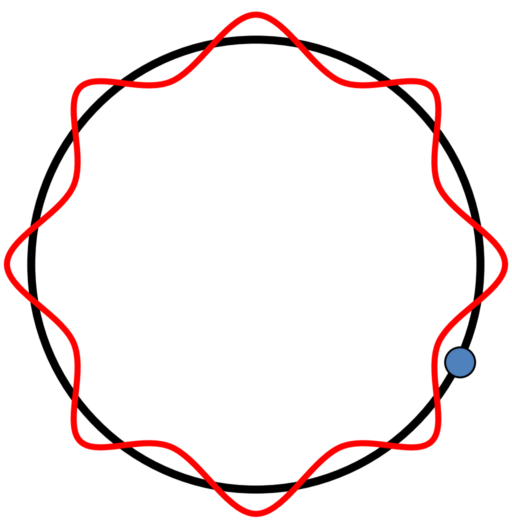


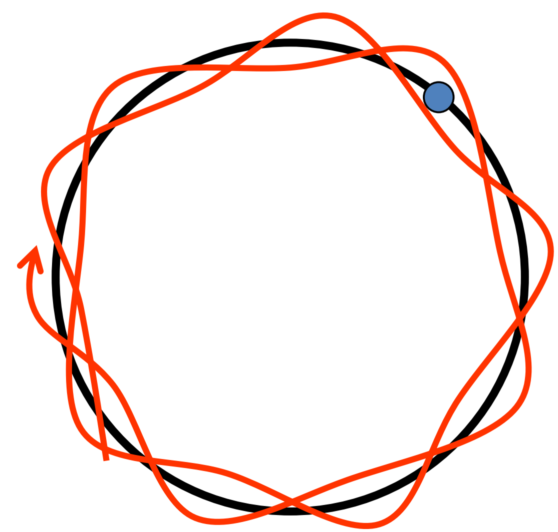
X-Ray在铝箔上的衍射　　电子在铝箔上的衍射

结论：电子具有波动性，其波长可用德布罗意波长描述。

3. 德布罗意波与玻尔量子化条件（量子态）

- 电子可以在其轨道上稳定地存在，而不湮灭或消失，则必须以驻波的形式存在
- 否则，会由于波的相干叠加而消失

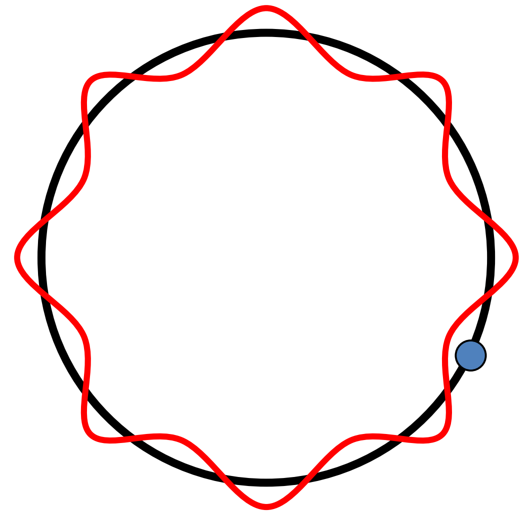




- 形成驻波的条件：轨道周长是电子波长的整数倍。

$$\mathbf{2\pi r = n\lambda = n\ (h/p) = nh\ /(m\ v)}$$

$$\mathbf{m\ vr = nh\ /2\pi}$$



角动量 $L=mvr=n\hbar$，$n=1,2,3\ldots$

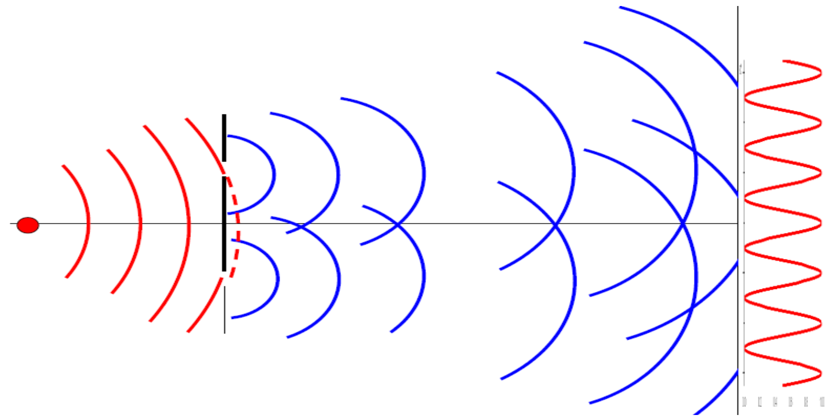
- **Bohr模型的第三个假设**

2.2 物质波的统计解释

一、波粒二象性的矛盾分析

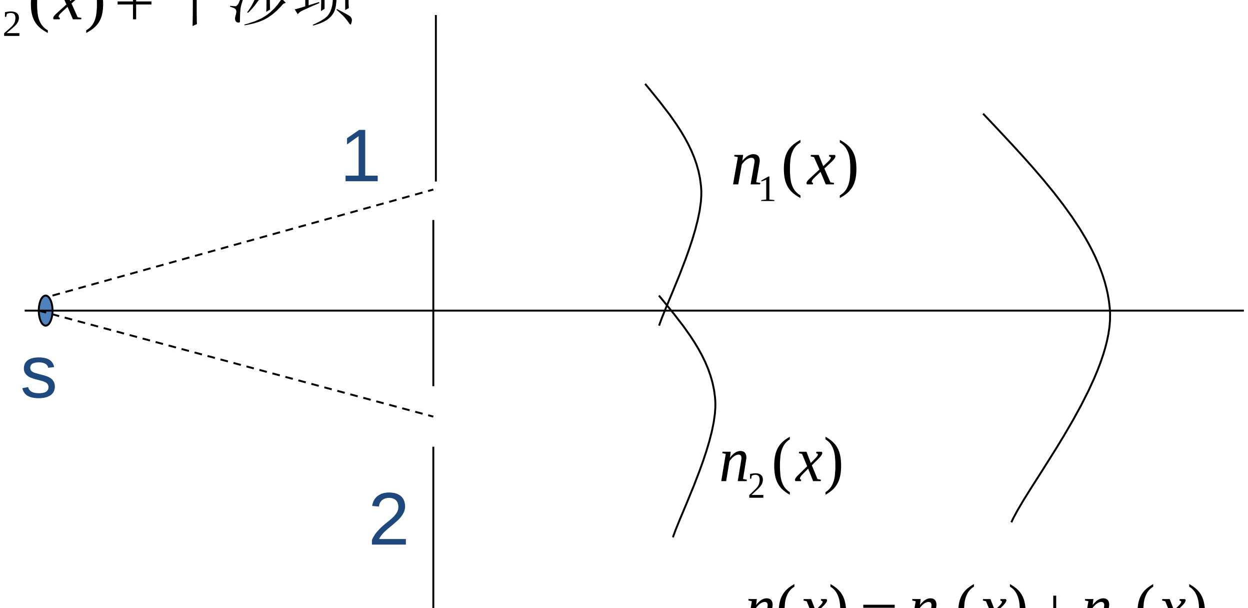
双缝干涉实验

（1）杨氏双缝干涉



$$I(x) = I_1(x) + I_2(x) + \text{干涉项}$$

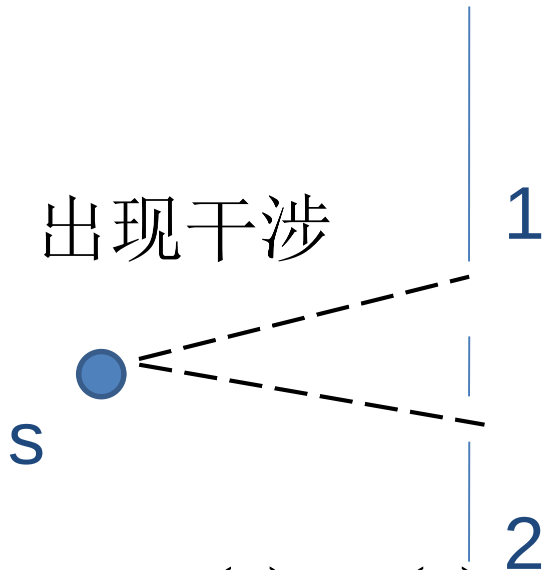
（2）机枪射击



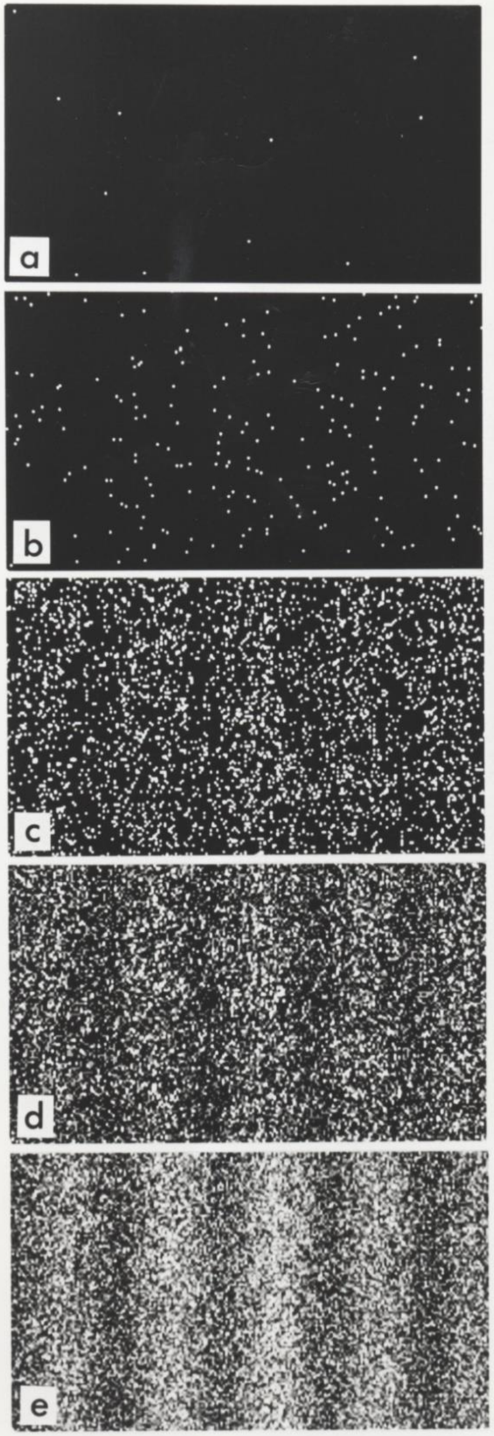
$$n(x) = n_1(x) + n_2(x)$$

（3）电子枪

电子经过双缝，出现干涉



$$n(x) = n_1(x) + n_2(x) + \text{干涉项}$$



如果让入射电子数减弱，每次仅有一个电子射出，经过一段时间后，仍能得到稳定的双缝干涉花样。

而此时电子之间没有干涉，

故干涉不是两个电子间相互作用的结果！

结论：电子自相干，具有波动性。

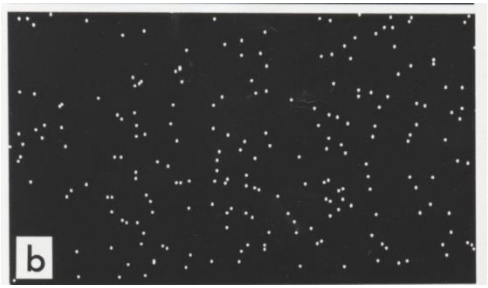
本质：一个电子几个量子态的叠加。

电子具有波动性，这个波是经典的波吗？

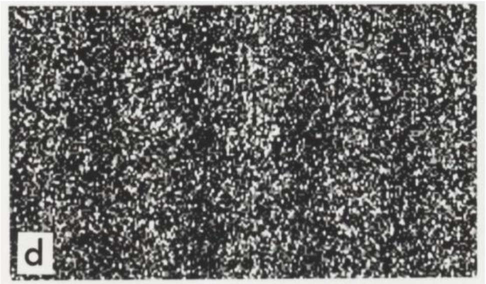
二、几率波

1. 分析

对于电子的单缝衍射或多缝干涉，观察点附近的衍射强度



- 正比于观察点附近出现电子的数目



- 正比于观察点附近出现电子的几率

描述粒子在空间的几率分布——几率波

Born的统计解释（1927）

微观体系的波粒二象性，可以用统计的观点理解

- 用波的表达式描述粒子的行为
- 微观粒子的状态由波函数描述，几率波
- 波的强度或振幅，反映的是粒子在时刻t、空间点P处出现、或被发现的几率或几率幅
- 振幅就是几率波幅

Max Born，
1882-1970 德

这就是波动性的物理含义

经典意义下的描述波动的函数或复振幅就成了量子意义下描述粒子分布几率的函数-波函数

几率波：描述粒子在空间的几率分布。

几率性的观点是量子物理学中的基本观点！

2. 波函数

微观粒子的状态可由一个波函数来**完全描述**。 $\psi(\boldsymbol{x},t)$

对波函数的要求：

(1).波函数为单值、连续、有界的复函数，或平方可积。

(2).电子t时刻出现在空间r附近，$d\tau$ 体积元内的几率为

$|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 \Delta x \Delta y \Delta z$ 即$d\tau=\Delta x\Delta y\Delta z$ 内找到粒子的几率

$\psi(\boldsymbol{x},t) \longrightarrow$ 几率幅

$|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 \longrightarrow$ 几率密度

(3).波函数的归一化条件

粒子不能湮灭，即总能在空间某处发现该粒子，全空间找到粒子的几率为1（非相对论情形）

$$\int_V |\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 \mathrm{d}^3x = 1$$ 全空间找到粒子的几率为1

若 $$\int_V |\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 \mathrm{d}^3x = A$$ $A>0$ 常数

则 $$\int_V \left|\frac{\psi(\boldsymbol{x},t)}{\sqrt{A}}\right|^2 \mathrm{d}^3x = 1$$ $\frac{1}{\sqrt{A}}$ 归一化因子

(4).常数因子不确定性（几率是相对的，都乘以一个常数因子后，没有变化）

$$\left|\frac{\psi_1(\boldsymbol{x},t)}{\psi_2(\boldsymbol{x},t)}\right|^2 = \left|\frac{c\psi_1(\boldsymbol{x},t)}{c\psi_2(\boldsymbol{x},t)}\right|^2$$

$\psi_1(\boldsymbol{x},t)$和c$\psi_1(\boldsymbol{x},t)$ 是完相同的态

这与经典是完全不同的！

3. 态叠加原理

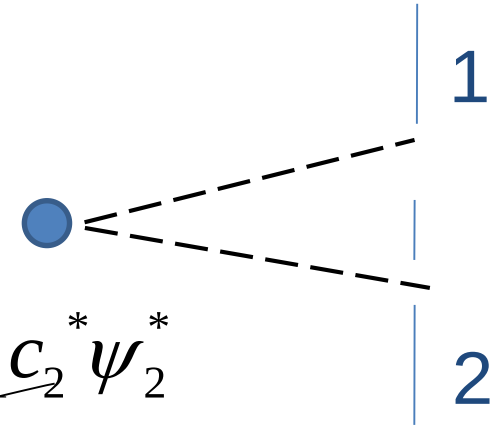
态叠加原理是量子力学中的基本原理

双缝实验

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

$$|\psi|^2 = |c_1\psi_1 + c_2\psi_2|^2$$

$$= |c_1\psi_1|^2 + |c_2\psi_2|^2 + \underbrace{c_1^*\psi_1^*c_2\psi_2 + c_1\psi_1c_2^*\psi_2^*}_{\text{干涉项}}$$



含义：若 ψ_1 和 ψ_2 是粒子的一种可能状态，

$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ 也是粒子的一种可能状态，粒子既处于

1态，也处于2态，几率分别为 $|c_1|^2$ 和 $|c_2|^2$.

与经典态叠加原理含义不同！

三、波函数可表示出微观粒子的粒子性和波动性

- 粒子性

$$\int_V |\psi|^2 \mathrm{d}^3\tau$$ 一旦测定，为完整的粒子

- 波动性

$$|\psi_1 + \psi_2|^2$$ 形成干涉，态叠加原理

2.3 不确定原理（海森堡(Heisenberg,1927)

量子力学中的基本原理

- 经典粒子：可以同时有确定的位置、速度、动量、能量……
- 经典波：有确定的波长，但总是在空间扩展，没有确定的位置。
- 微观粒子波粒二象性：不可能同时具有确定的位置和动量。

Werner Karl Heisenberg
1901～1976 德
1925年建立了量子理论第一个数学描述——矩阵力学
1927年阐述了著名的不确定关系

一、一维自由运动的粒子

自由粒子：运动状况不受限制的粒子

- 速度不变，即动量不变，是一个完全确定的值P0
- $\lambda = h/p$，**波长是完全确定的，描述的波函数为单色平面波**

$$e^{ikx-i\omega t}, \quad k = 2\pi/\lambda = p_0/\hbar, \omega = 2\pi\nu = E/\hbar$$

$$\psi_{p_0}(x, \ t) \sim e^{i(p_0x-Et)/\hbar}$$

$\nu = E/h$，$\lambda = h/p$

$$\left|\psi_{p_0}(x, \ t)\right|^2 = 1$$

粒子在一维空间各点的几率密度相同，可以在任意位置出现，即位置完全不确定

动量不确定度为零 $\Delta p \to 0$

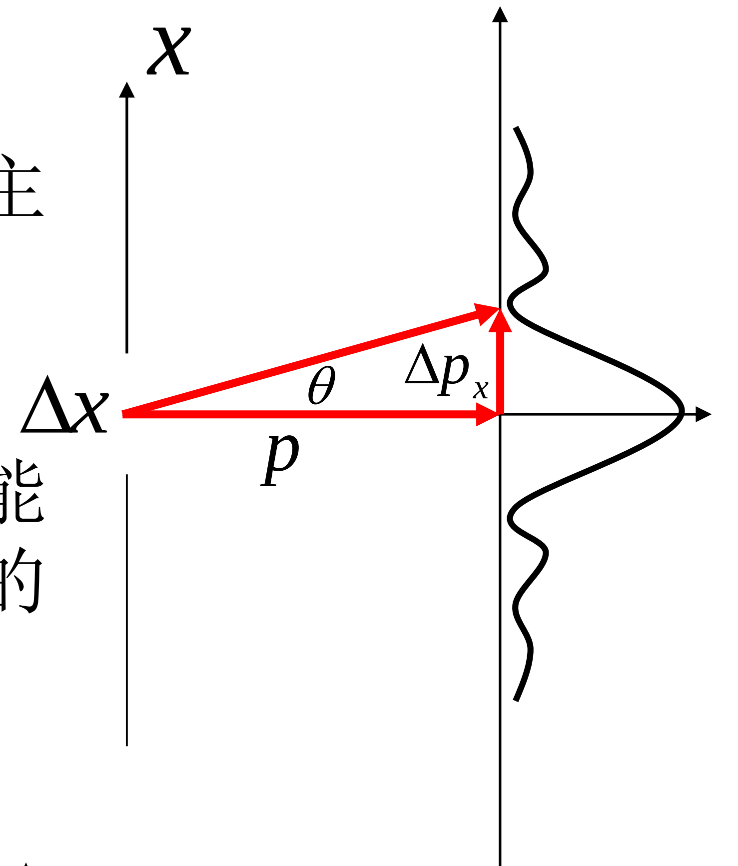
位置不确定度为无穷大 $\Delta x \to \infty$

结论：动量和位置的不确定度不同时为0.

$$\Delta x \Delta p = ?$$

二、单缝衍射

- 衍射后的粒子主要散布到中央主极大的范围中
- 第一级极小 $a\sin\theta=\lambda$
- 粒子通过狭缝才能发生衍射，能通过狭缝的粒子，其空间位置的分布范围，即位置的不确定度 $\Delta x=a$
- 动量的不确定范围



$$a\theta=\lambda,\sin\theta\sim\theta$$

$$ah\theta=h\lambda$$

$$a\frac{h}{\lambda}\theta=h$$

$$\begin{cases}\Delta x=a\\ \Delta p_x=p\theta=\dfrac{h}{\lambda}\theta\end{cases}$$

$$\Delta x\Delta p_x\sim h$$

三、不确定关系的严格表述

- 空间位置与相应动量的不确定关系

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

- 能量与时间的不确定关系

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

这种不确定关系与测量无关，并非“**测不准**”

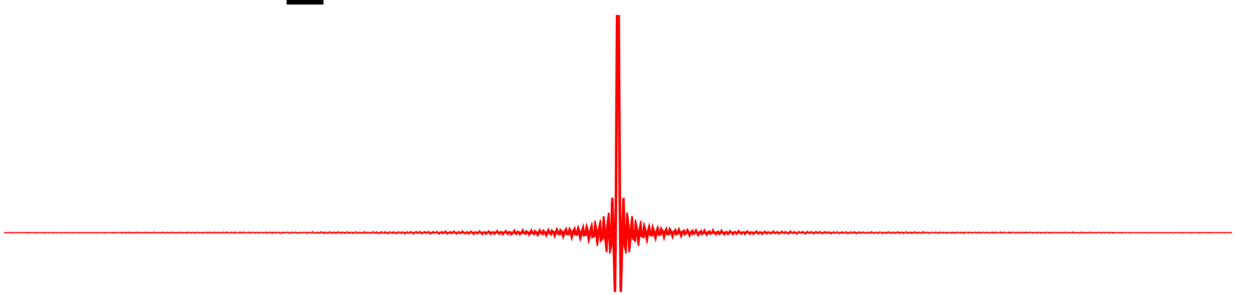
不确定性关系是由微观粒子的波动性引起的！

四、不确定关系的物理含义

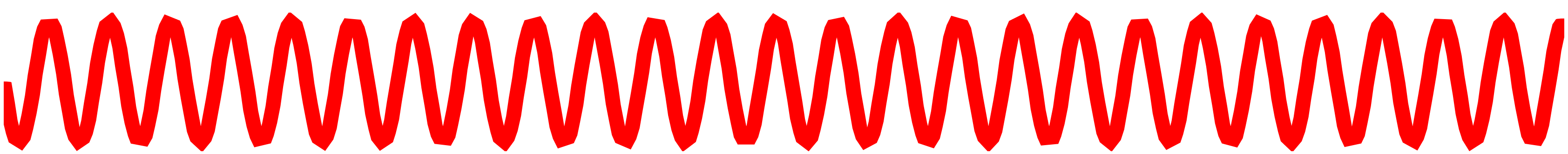
1.微观粒子不可能同时具有确定的空间位置和相应的动量

- 位置完全确定的粒子，对应于一个无限窄的波包
- 无限窄的波包是含有各种波长成分的单色波的叠加，其动量是完全不确定的。

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta x \to 0, \Delta p_x \to \infty$$



- **动量**完全确定的粒子，对应于波长完全确定的单色波。
- 而该单色波在空间的波列无限长，等效为粒子，该粒子在空间位置是完全不确定的。



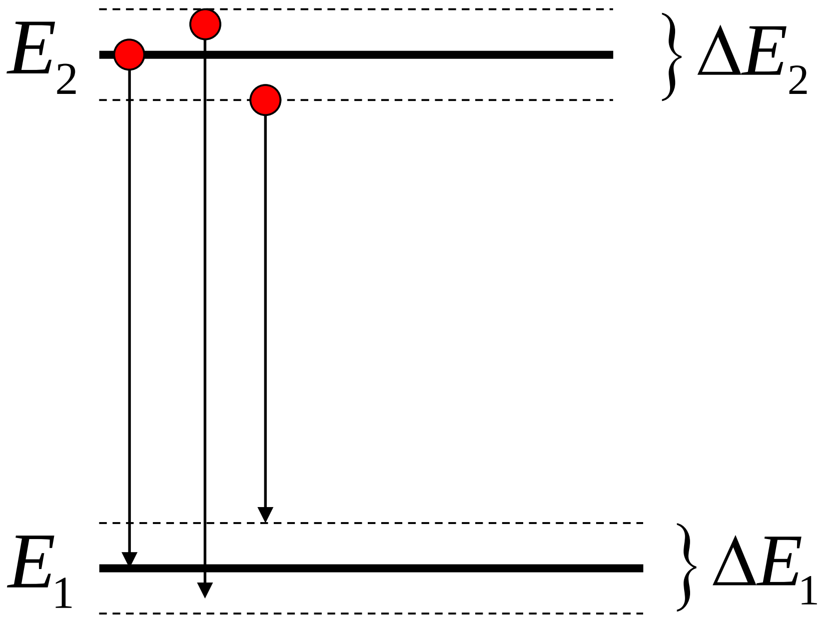
$$\psi_{P_0}(x) \sim e^{i(p_0 x - Et)/\hbar}$$

2.能级的自然宽度

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

- ΔE：粒子在某一状态时能量的不确定度
- Δt：粒子处于这一状态的时间，就是粒子处于该状态的“**寿命**”
- 粒子在某一状态的能量不能具有确定的值，因为粒子在该状态的寿命不可能无穷大。
- 原子激发态能级总是有一定分布宽度的。
- 辐射跃迁发出的光波不能是严格的单色波，谱线有一定的宽度（自然宽度）。

能级与跃迁的不确定关系



能级和谱线的自然宽度

不确定关系是波粒二象性的必然结果！

About Heisenberg's uncertainty principle

Einstein made the remark

"God does not play dice."

Bohr replied

"Einstein, stop telling God what to do."

--The 1927 Solvay Conference, Belgium

五、不确定性原理的重要意义

1.与经典不同，微观粒子具有完全不同的运动形式

- 无轨道
- 因果律不同：经典粒子满足决定论，微观粒子满足统计因果论

2.否定了用经典力学的方法研究微观粒子

- 经典力学(CM)：力学量与运动状态直接联系，运动过程与轨道联系；
- 量子力学(QM)：微观粒子的状态由波函数描述，即用几率波描述。

六、不确定性原理的应用

估算氢原子的最小能量（基态能量）

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\begin{cases} \Delta r \simeq r \\ \Delta p \simeq p \\ \Delta p \Delta r \simeq \hbar \end{cases} \Rightarrow r \simeq \frac{\hbar}{p}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{pe^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar}$$

$$\frac{dE}{dp} = 0 \Rightarrow p = \frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar}$$

$$E = -\frac{m}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar}\right)^2 \simeq -13.6eV$$

2.4 薛定谔(Schrödinger)方程（1925）

- 不是经过严格的推导而获得的
- 是用试探方法找到的,
  或者说是“猜”出来的
- Schrödinger方程是量子力学的最基本方程

Erwin Schrödinger，1887~1961），奥地利物理学家

一、方程的引入

以自由粒子为例引入方程

$$\psi(\boldsymbol{x},t) \sim \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)} = \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)/\hbar}$$ 单色平面波

$$\boldsymbol{x} = (x\boldsymbol{e}_x, y\boldsymbol{e}_y, z\boldsymbol{e}_z)$$ 位矢

$$\boldsymbol{p} = (p_x\boldsymbol{e}_x, p_y\boldsymbol{e}_y, p_z\boldsymbol{e}_z)$$ 动量

$$\boldsymbol{k} = (k_x\boldsymbol{e}_x, k_y\boldsymbol{e}_y, k_z\boldsymbol{e}_z)$$ 波矢

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi}2\pi\nu = \hbar\omega$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

$$\psi(\boldsymbol{x},t) \sim \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)} = \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)/\hbar}$$

波函数对时间一次微分

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} = E\psi(\boldsymbol{x},t)$$

波函数对坐标二次偏微分

$$-i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial x} = p_x\psi(\boldsymbol{x},t)$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial x}p_x = p_x^2\psi(\boldsymbol{x},t)$$

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial x^2} = p_x^2\psi(\boldsymbol{x},t)$$

$$\left.\begin{aligned}-\hbar^2\frac{\partial^2\psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial x^2}&=p_x^2\psi(\boldsymbol{x},t)\\-\hbar^2\frac{\partial^2\psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial y^2}&=p_y^2\psi(\boldsymbol{x},t)\\-\hbar^2\frac{\partial^2\psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial z^2}&=p_z^2\psi(\boldsymbol{x},t)\end{aligned}\right\}\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x},t)=\frac{p^2}{2m}\psi(\boldsymbol{x},t)$$

$$p^2=p_x^2+p_y^2+p_z^2$$

拉普拉斯算符: $\nabla^2=\nabla_x^2+\nabla_y^2+\nabla_z^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x},t)=E\psi(\boldsymbol{x},t)$$

自由粒子 $E=\frac{p^2}{2m}$

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}=E\psi(\boldsymbol{x},t)$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x},t)$$

——自由粒子的Schrödinger方程

二、Schrödinger方程的一般形式

对于处于势场中的粒子，除了动能，还有势能

$$E = E_k + E_p$$

$$= \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{x}, t) = H$$

哈密顿(Hamiltonian)量

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} = [-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{x}, t)]\psi(\boldsymbol{x}, t)$$

Schrödinger方程的一般形式

三、定态Schrödinger方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x},t)]\Psi(\boldsymbol{x},t)$$

若势场不显含时间 $V(\boldsymbol{x},t)=V(\boldsymbol{x})$

分离变量 $\Psi(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x})f(t)$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}\psi(\boldsymbol{x})=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x})+V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})]f(t)$$

1. $$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\psi(\boldsymbol{x})}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x})+V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})]=E$$

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}=E \qquad f(t)=C\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$$

S方程的解 $\Psi(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$

2. $$\frac{1}{\psi(\boldsymbol{x})}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x})+V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})]=E$$

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})]\psi(\boldsymbol{x})=E\psi(\boldsymbol{x})$$

——定态Schrödinger方程

$$\Psi(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$$

$$\left|\Psi(\boldsymbol{x},t)\right|^2=\left|\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\right|^2=\left|\psi(\boldsymbol{x})\right|^2$$

意义：定态时粒子在空间的几率密度分布不随时间改变。

2.5 力学量的算符表示、平均值和本征值

一、力学量的算符表示

1. 算符

算符代表对波函数的一种运算

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}=p_x\psi \qquad \boldsymbol{x}\psi(\boldsymbol{x},t) \qquad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

2. 微观粒子运动的力学量用算符表示

$$\boldsymbol{x}\rightarrow\hat{\boldsymbol{x}}, \qquad \boldsymbol{p}\rightarrow\hat{\boldsymbol{p}}, \qquad F\rightarrow\hat{F}$$

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{x} \qquad \hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\nabla \qquad \hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad \hat{p}_y=-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$$

3. 算符的运算

$$\hat{F}\psi(\boldsymbol{x},t)=\varphi(\boldsymbol{x},t)$$

线性算符 $\hat{F}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1\hat{F}\psi_1+c_2\hat{F}\psi_2$

单位算符 $\hat{I}\psi=\psi$

算符相加 $(\hat{A}+\hat{B})\psi=\hat{A}\psi+\hat{B}\psi$

算符相乘 $\hat{A}\hat{B}\psi=\hat{A}(\hat{B}\psi)$ 一般地 $\hat{A}\hat{B}\psi\neq\hat{B}\hat{A}\psi$

4. 常见算符

位置算符 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 动量算符 $\hat{p}_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ $\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\nabla,$

势能算符 $\hat{V}(\boldsymbol{r})=V(\boldsymbol{r})$ 动能算符 $\hat{T}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

哈密顿（Hamiltonian）算符

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\boldsymbol{x})=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})$$

定态Schrödinger方程

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})]\psi(\boldsymbol{x})=E\psi(\boldsymbol{x})$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{x})=E\psi(\boldsymbol{x})$$

角动量算符 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ $\hat{L}=\hat{r}\times(-i\hbar\nabla)$

$$\boldsymbol{L}=(x\boldsymbol{e}_x+y\boldsymbol{e}_y+z\boldsymbol{e}_z)\times(p_x\boldsymbol{e}_x+p_y\boldsymbol{e}_y+p_z\boldsymbol{e}_z)$$

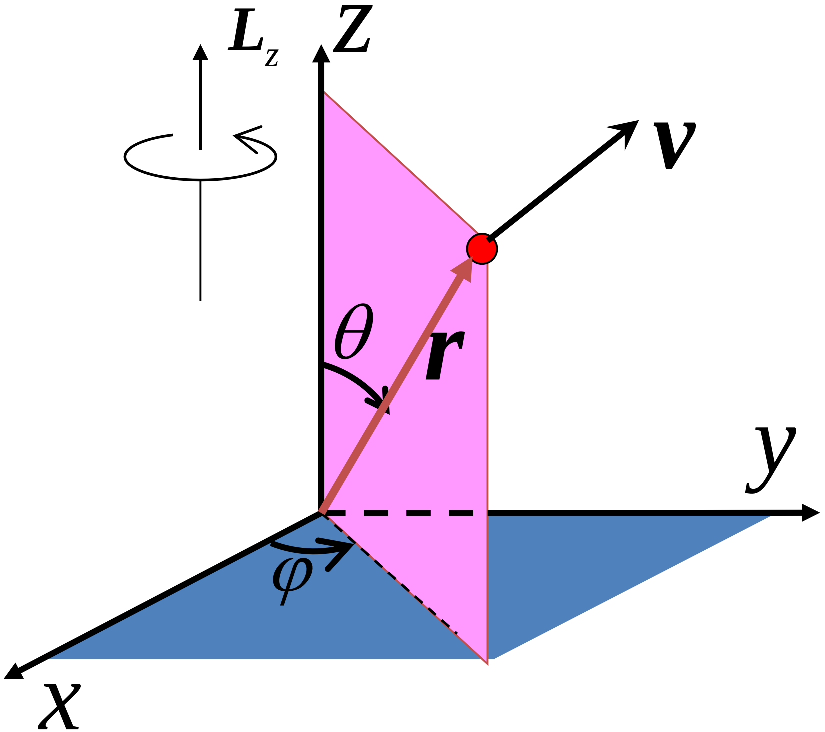
$$=(yp_z-zp_y)\boldsymbol{e}_x+(zp_x-xp_z)\boldsymbol{e}_y+(xp_y-yp_x)\boldsymbol{e}_z$$

在直角坐标系中

$$\hat{L}_x=yp_z-zp_y=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\hat{L}_y=zp_x-xp_z=-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{L}_z=xp_y-yp_x=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$



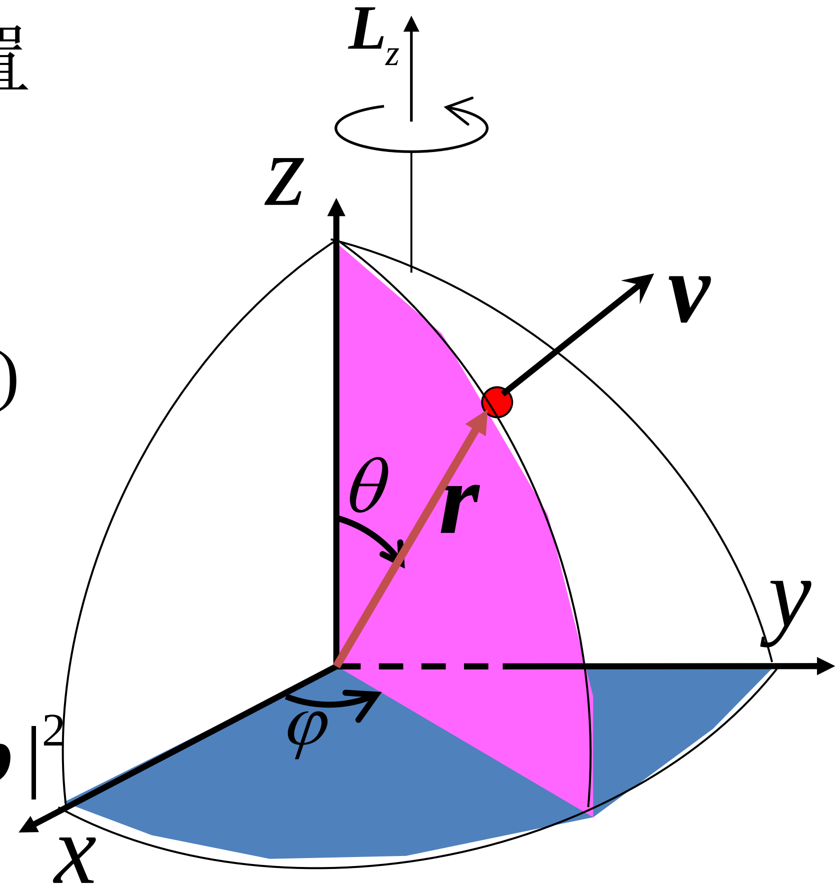
球坐标系中的角动量算符

- 用（$\boldsymbol{r}, \theta, \varphi$）表征粒子的位置

$$\hat{L}_x = i\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

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



角动量平方算符 $L^2 = |\boldsymbol{L}|^2 = |\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}|^2$

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

二、力学量的平均值

力学量的测量值或期望值

$$< A >= \bar{A} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \psi \, d\tau}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, d\tau} = \frac{(\psi, \hat{A}\psi)}{(\psi, \psi)}$$

内积 $$(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \psi \, d\tau$$

$$(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, d\tau = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \, d\tau$$

三、力学量的本征值与本征函数

一般地 $\hat{F}\psi(\boldsymbol{x}) = \varphi(\boldsymbol{x})$

若 $\hat{F}\psi(\boldsymbol{x}) = f\psi(\boldsymbol{x})$

f为实数

——力学量F的本征方程

⇓

$$\hat{F}\psi_n(\boldsymbol{x}) = f_n\psi_n(\boldsymbol{x})$$

f_n：力学量F的本征值

$\psi_n(\boldsymbol{x})$: F的第n个本征值fn对应的本征波函数

定态Schrödinger方程

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{x})]\psi(\boldsymbol{x}) = E\psi(\boldsymbol{x})$$

Hamiltonian本征方程

或能量的本征方程

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{x})$$

E为实数

$$\hat{H}\psi_n(\boldsymbol{x}) = E_n\psi_n(\boldsymbol{x})$$

四、力学量对易

如果 $$\hat{F}\psi(\boldsymbol{x}) = f\psi(\boldsymbol{x})$$

$$\hat{G}\psi(\boldsymbol{x}) = g\psi(\boldsymbol{x})$$

$\psi(\boldsymbol{x})$ 既是力学量F的本征态，也是力学量G的本征态，两个力学量具有共同的本征态，在这一状态下F和G具有确定的值

F和G是对易的

$$[\hat{F},\hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = 0$$

量子性小结

- 一切结论都建立在**物理实验**的基础之上

Schrödinger方程

可以用**波函数**（**复振幅函数，几率幅**）描述**粒子**的状态

强度＝粒子数＝粒子在空间某处出现的几率

束缚粒子具有量子态

用波粒二象性解释双缝干涉实验

不确定关系

波粒二象性，物质波

若干物理实验

- 玻尔：如果谁在量子理论面前不感到震惊，他就不懂得现代物理学；同样如果谁不为此理论感到困惑，他也不是一个好的物理学家。

- If people like you don’t learn from what happened to people like me, then what the hell is the point of anything?