量子力学与统计物理

Quantum mechanics and statistical physics

李小飞

2024 年 3 月 26 日

光电科学与工程学院

第三章、量子力学中的力学量

提 纲

1. 力学量算符表示
    - 算符的引入
    - 希尔伯特空间
    - 算符表示
2. 厄密算符的性质
3. 常见算符的本征方程
4. 对易关系
5. 对易关系的物理含义
6. 算符运动方程

求實求真
大氣大為

前情回顾

- 波粒二象性
- 波函数假说
- 波函数的统计解释
- 态叠加原理
- 薛定谔方程

1.1. 量子力学五大公设

- 波函数公设：物体的状态用希尔伯特空间的态矢量（波函数）表示
- 演化公设：封闭体系的态矢量随时间的演化服从薛定谔方程
- 算符公设：体系的力学量用希尔伯特空间的厄密算符表示
- 测量公设：测量力学量 F 所得的值，必是算符 F 的本征值
- 全同性公设：全同粒子体系，交换任意两粒子体系的状态不变

提 纲

1. 力学量算符表示
   - 算符的引入
   - 希尔伯特空间
   - 算符表示
2. 厄密算符的性质
3. 常见算符的本征方程
4. 对易关系
5. 对易关系的物理含义
6. 算符运动方程

求實求真
大氣大為

位置算符和动量算符

例-1. 已知粒子的位置波函数 $\psi(x,t)$，求动量的期望值：

解： 由概率诠释，位置期望值为

$$\bar{x} = \int x|\psi(x,t)|^2 dx = \int \psi^*(x,t) x \psi(x,t) dx$$

对于动量波函数 $c(p,t)$，动量期望值为

$$\bar{p}_x = \int p_x |c(p_x,t)|^2 dp_x = \int c^*(p_x,t) p c(p_x,t) dp_x$$

很明显，有

$$\bar{p}_x \neq \int p_x |\psi(x,t)|^2 dp_x$$

变换求解 (注：为了方便，用 $p \to p_x$)

$$
\begin{aligned}
\bar{p} &= \int c^*(p) p c(p) dp \\
&= \int [\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi^*(x) e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} dx] p c\left(p\right) dp \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \int \psi^*(x) (e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} p) c\left(p\right) dx dp \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \tfrac{d}{dx} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x}\right) c(p) dx dp \\
&= \int \psi^*(x) (-i\hbar \frac{d}{dx}) (\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} c(p) dp) dx \\
&= \int \psi^*(x) (-i\hbar \frac{d}{dx}) \psi(x) dx
\end{aligned}
$$

定义如下计算符号：

$$\boxed{\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}}$$

上式变为：

$$\boxed{\bar{p}_x = \int \psi^*(x)\hat{p}_x\psi(x)dx}$$

称 $\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{d}{dx}$ 为位置表象里的动量算符表示（p_x 分量）

同理，称 $\hat{x} = x$ 为位置表象里的位置算符表示（x 分量）

设任意力学量 F 有算符表示 $\hat{F}$，有平均值公式

$$\boxed{\bar{F} = \int \psi^*(x)\hat{F}\psi(x)dx = (\psi, \hat{F}\psi)}$$

提 纲

1. 力学量算符表示

   算符的引入

   希尔伯特空间

   算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

4. 对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

希尔伯特空间

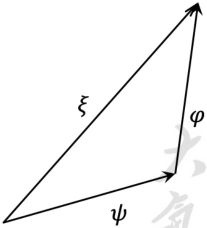
1、**定义加法** $\xi=\psi+\varphi$

$$\psi+\varphi=\varphi+\psi \qquad \text{（交换律）}$$

$$(\psi+\varphi)+\xi=\psi+(\varphi+\xi) \qquad \text{（结合律）}$$

$$\psi+\mathrm{O}=\psi \qquad \text{（零元）}$$

$$\psi+\varphi=\mathrm{O} \qquad \text{（逆元）}$$



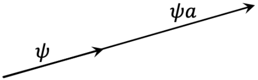
2、定义数乘 $\varphi = \psi a$

$\psi 1 = \psi$ （1 元）

$(\psi a)b = \psi(ab)$ （结合律）

$\psi(a + b) = \psi a + \psi b$ （第一分配律）

$(\psi + \varphi)a = \psi a + \varphi a$ （第二分配律）



3、定义内积 $c=(\psi,\varphi)$

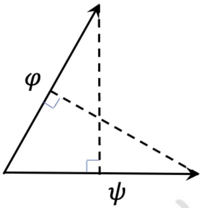
$$(\psi,\varphi)=(\varphi,\psi)^*$$

$$(\psi,\varphi+\xi)=(\psi,\varphi)+(\psi,\xi) \qquad \text{（分配律）}$$

$$(\psi,\varphi a)=(\psi,\varphi)a$$

$$(\psi a,\varphi)=a^*(\psi,\varphi)$$

$$(\psi,\psi)=c\geq 0$$



例-2. 有定义在 3 维矢量空间的两矢量，求它们的内积:

$$\psi = x_1\vec{i} + y_1\vec{j} + z_1\vec{k}, \qquad \varphi = x_2\vec{i} + y_2\vec{j} + z_2\vec{k}$$

解:矢量的内积是点乘

$$(\psi, \varphi) = \psi \cdot \varphi = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2 = c$$

例-3：有定义在 C^n 空间的两列矩阵，求内积

$$\psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}, \qquad \varphi = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$$

解:对于复数域，有

$$(\psi, \varphi) = \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* & a_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + a_3^* b_3 = c$$

$$(\varphi, \psi) = \begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* & b_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = b_1^* a_1 + b_2^* a_2 + b_3^* a_3 = c^*$$

例-4. 求定义在实数空间的两函数的内积:

$$\psi(x)=\sin\frac{n\pi}{l}x,\varphi(x)=\sin\frac{m\pi}{l}x$$

解: 设周期为 $T=2l$,

$$(\psi,\varphi)=\int_{-l}^{l}\sin\frac{n\pi}{l}\sin\frac{m\pi}{l}x=\begin{cases}0, & n\neq m\\ \frac{l}{2}, & n=m\end{cases}$$

例-5. 求定义在复数空间的两函数的内积:

解:把后者对前者做投影

$$(\psi,\varphi)=\int_a^b \psi^*(x)\varphi(x)dx=c$$

$$(\varphi,\psi)=\int_a^b \varphi^*(x)\psi(x)dx=(\int_a^b \varphi(x)\psi^*(x)dx)^*=c^*$$

4、左右矢与狄拉克记号

考察内积：$(\psi,\psi)=\int\psi^*\psi d\tau$

同一波函数放在左边还是右边，意义有所不同：

- 右边线性：$(\psi,a\psi)=(\psi,\psi)a$
- 左边反线性：$(a\psi,\psi)=a^*(\psi,\psi)$

为清楚描述线性反线性特点，定义左矢和右矢（狄拉克记号）

$$\langle\psi|,\qquad |\psi\rangle$$

数乘：

$$|a\psi\rangle=a|\psi\rangle \quad \text{线性}$$

$$\langle a\psi|=\langle\psi|a^* \quad \text{反线性}$$

内积：

$$(\psi,\varphi)\equiv\langle\psi|\varphi\rangle$$

希尔伯特空间定义

5、空间定义

- 矢量空间：满足加法和数乘两种运算的集合
- 内积空间：满足加法、数乘和内积三种运算的集合
- 希尔伯特空间：完全的内积空间

* 完全性：对给定任意小的实数 ε，总有数 N 存在，当 m, n>N 时，有

$$(\psi_m - \psi_n, \psi_m - \psi_n) < \varepsilon$$

Tips: 物体的状态用希尔伯特空间的矢量描述

提 纲

1. 力学量算符表示
   - 算符的引入
   - 希尔伯特空间
   - **算符表示**
2. 厄密算符的性质
3. 常见算符的本征方程
4. 对易关系
5. 对易关系的物理含义
6. 算符运动方程

算符的定义:

算符

描述态矢量之间的映射关系，即算符作用于一个态矢量，映射到另一个态矢量。

$$\hat{F}\,|\Psi\rangle = |\psi\rangle$$

Tips: 在不引起不明意义的条件下，为简单见可略去算符的帽子

单位算符

$$I\Psi = \Psi$$

算符相等

对任意态矢量，有

$$A\Psi = B\Psi \to A = B$$

算符的和

$$(A+B)\Psi = A\Psi + B\Psi$$

存在交换律和结合律

$$A + B = B + A$$

$$(A+B)+C = A+(B+C)$$

算符的积

$$(AB)\Psi = A(B\Psi)$$

不存在交换律，即

$AB = BA$ 或 $AB \neq BA$ 都有可能

对易子

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

若 [A,B]=0, 称两算符对易，否则不对易

逆算符

$$F\Psi = \psi$$

$$F^{-1}\psi = \Psi$$

伴算符

$$F|\Psi >= |\psi >$$

$$< \psi| =< \Psi|F^{\dagger}$$

内积形式：

$$(\varphi, F\Psi) = (\varphi, \psi)$$

$$(\Psi F^{\dagger}, \varphi) = (\psi, \varphi)$$

有性质：

$$(\Psi F^{\dagger}, \varphi)^{*} = (\varphi, F\Psi), \quad (F^{\dagger})^{\dagger} = F, \quad (aF)^{\dagger} = a^{*}F^{\dagger}$$

自伴算符

$$F^{\dagger}=F$$

性质：

$$(\Psi, F\varphi)=(\Psi F, \varphi)$$

也称厄密性，**自伴算符即厄密算符**

证明:对于自伴算符，有

$$\langle\Psi\,|(F|\,\varphi\rangle)=\langle\Psi\,|(F^{\dagger})^{\dagger}|\,\varphi\rangle=\langle\Psi\,|F^{\dagger}|\,\varphi\rangle=(\langle\Psi\,|F^{\dagger})|\,\varphi\rangle$$

即：

$$(\Psi, F\varphi)=(\Psi F, \varphi)$$

线性算符

对任意态矢量，有

$$F(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(F\psi_1) + c_2(F\psi_2)$$

幺正(酉)算符

$$F^\dagger F = FF^\dagger = I$$

性质：

$$F^\dagger = F^{-1}$$

Tips:

厄密算符 $F = F^\dagger$

幺正算符 $F^{-1} = F^\dagger$

幺正厄密算符 $F = F^{-1} = F^\dagger$

1.2. 命题:

已知位置、动量的算符,

- 位置算符(三维): $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$
- 动量算符(三维): $\hat{\vec{p}} = -i\hbar(\frac{d}{dx}, \frac{d}{dy}, \frac{d}{dz}) = -i\hbar\nabla$

求任意力学量的算符表示

Bohm 规则(1954):经典物理学存在力学量 F,它是位置与动量的函数

$$F(\vec{r}, \vec{p})$$

则其量子力学算符为:

$$\hat{F} = F(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})$$

例如

- 动能：$T=\dfrac{p^2}{2\mu}\to\hat{T}=\dfrac{\hat{p}^2}{2\mu}$
- 哈密顿量：$H=T+U(\vec{r})\to\hat{H}=\hat{T}+U(\hat{\vec{r}})$
- 角动量：$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}\to\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}$

TIPS：若 $F(\vec{r},\vec{p})$ 中存在连乘项：

$$\vec{r}^m\cdot\vec{p}^n$$

则采用如下方式进行取代

$$\frac{1}{2}(\hat{\vec{r}}^m\cdot\hat{\vec{p}}^n+\hat{\vec{p}}^n\cdot\hat{\vec{r}}^m)$$

例-6. 求经典物理量 $F = x^2 p_x$ 的量子力学算符表示:

解: 根据 Bohm 规则，有:

$$\hat{F} = \frac{1}{2}(\hat{x}^2\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x}^2)$$

算符的本征方程

在算符定义式中

$$\hat{F}\left|\Psi\right\rangle = \left|\varphi\right\rangle$$

若 $\left|\varphi\right\rangle = f\left|\Psi\right\rangle$，有：

$$\boxed{\hat{F}\left|\Psi\right\rangle = f\left|\Psi\right\rangle}$$

则称上式为算符 $\hat{F}$ 的本征方程

其中 f 是 $\hat{F}$ 的本征值，$\left|\Psi\right\rangle$ 是属于本征值 f 的本征函数。

1.3. 命题 1:

一切可观测力学量算符都是线性算符

证明: 设 ψ_1,ψ_2 是算符 $\hat{F}$ 的属于本征值 f 的两个解，有

$$\hat{F}\psi_1 = f\psi_1, \quad \rightarrow \quad c_1\hat{F}\psi_1 = c_1 f\psi_1 \cdots (1)$$

$$\hat{F}\psi_2 = f\psi_2, \quad \rightarrow \quad c_2\hat{F}\psi_2 = c_2 f\psi_2 \cdots (2)$$

(1)+(2)

$$(c_1 f\psi_1 + c_2 f\psi_2) = c_1\hat{F}\psi_1 + c_2\hat{F}\psi_2$$

$$f(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{F}\psi_1 + c_2\hat{F}\psi_2 \cdots (3)$$

由于 ψ_1, ψ_2 都是属于本征值 f 的解，则它们的线性组合 $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ 也是属于本征值 f 的解，即

$$\hat{F}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = f(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \cdots (4)$$

联立 (3)(4), 有

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

证毕!

1.4. 命题 2:

可观测力学量算符都是厄密算符

证明: 对任意态矢量 Ψ, 力学量算符 F 的期望值为

$$\bar{F} = \int \Psi^*(x)\hat{F}\Psi(x)dx = (\Psi, \hat{F}\Psi)$$

$$\bar{F}^* = \int (\hat{F}\Psi(x))^*\Psi(x)dx = (\hat{F}\Psi, \Psi)$$

可观测力学量的期望值是实数，有:

$$(\Psi, \hat{F}\Psi) = (\hat{F}\Psi, \Psi)$$

取 $\Psi = \psi_1 + c\psi_2$, 代入上式，得:

$$([\psi_1 + c\psi_2], \hat{F}[\psi_1 + c\psi_2]) = (\hat{F}[\psi_1 + c\psi_2], [\psi_1 + c\psi_2])$$

积分:

$$\begin{aligned}&\left(\psi_1, \hat{F}\psi_1\right) + c^*\left(\psi_2, \hat{F}\psi_1\right) + c\left(\psi_1, \hat{F}\psi_2\right) + |c|^2\left(\psi_2, \hat{F}\psi_2\right) \\ =&\left(\hat{F}\psi_1, \psi_1\right) + c^*\left(\hat{F}\psi_2, \psi_1\right) + c\left(\hat{F}\psi_1, \psi_2\right) + |c|^2\left(\hat{F}\psi_2, \psi_2\right)\end{aligned}$$

算符的平均值都是实数，即

$$(\psi_1, \hat{F}\psi_1) = (\hat{F}\psi_1, \psi_1), \qquad (\psi_2, \hat{F}\psi_2) = (\hat{F}\psi_2, \psi_2)$$

上式可消去第一、四项，变为:

$$\begin{aligned}&c^*\left(\psi_2, \hat{F}\psi_1\right) + c\left(\psi_1, \hat{F}\psi_2\right) \\ =\,&c^*\left(\hat{F}\psi_2, \psi_1\right) + c\left(\hat{F}\psi_1, \psi_2\right)\end{aligned}$$

分别取 $c=1, c=i$ 代入，得两等式:

$$\left(\psi_2, \hat{F}\psi_1\right) + \left(\psi_1, \hat{F}\psi_2\right) = \left(\hat{F}\psi_2, \psi_1\right) + \left(\hat{F}\psi_1, \psi_2\right), \cdots (1)$$

$$-i\left(\psi_2, \hat{F}\psi_1\right) + i\left(\psi_1, \hat{F}\psi_2\right) = -i\left(\hat{F}\psi_2, \psi_1\right) + i\left(\hat{F}\psi_1, \psi_2\right), \cdots (2)$$

第二式乘以 i, 得:

$$\left(\psi_2, \hat{F}\psi_1\right) - \left(\psi_1, \hat{F}\psi_2\right) = \left(\hat{F}\psi_2, \psi_1\right) - \left(\hat{F}\psi_1, \psi_2\right), \cdots (3)$$

(1)+(3), 两边除以 2，得

$$\left(\psi_2, \hat{F}\psi_1\right) = \left(\hat{F}\psi_2, \psi_1\right)$$

证毕!

课外作业 3-1

1. 试证明如下两个态正交

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\0\\1\end{pmatrix}, \qquad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\1\\0\end{pmatrix}$$

2. 试证明如下两个态正交

$$|\psi_1\rangle = \sin\frac{n\pi}{l}x, \qquad |\psi_2\rangle = \sin\frac{m\pi}{l}x, \qquad |x| < l$$

3. 试证明处于定态的粒子的动量平均值不随时间变化

4. 设氢原子处于基态 ψ_{100}，求径向位置 r, 动量和动能的平均值.

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

运算性质

本征性质

3. 常见算符的本征方程

4. 对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

求實求真
大氣大為

前情回顾

- 物体的状态用希尔伯特空间的矢量描述
- 力学量用希尔伯特空间的厄密算符表示

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

   运算性质

   本征性质

3. 常见算符的本征方程

4. 对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

求實求真
大氣大為

1. 两厄密算符之和仍为厄密算符
2. 当且仅当两厄密算符对易时，它们之积才是厄密算符。
3. 无论两厄密算符是否对易，算符 $\frac{1}{2}(AB+BA)$ 及 $\frac{1}{2i}(AB-BA)$ 都是厄密算符。
4. 任意算符总可以分解成 $A=A_{+}+iA_{-}$，且 A_{+} 和 A_{-}，都是厄密算符

2.1. 命题 1.

试证明两厄密算符之和仍为厄密算符

证明:设 A,B 为厄密算符，对于任意态，有

$$(\Psi, A\psi) = (A\Psi, \psi), \qquad (\Psi, B\psi) = (B\Psi, \psi)$$

它们的和有:

$$\begin{aligned}(\Psi, (A+B)\psi) &= (\Psi, A\psi) + (\Psi, B\psi) \\ &= (A\Psi, \psi) + (B\Psi, \psi) \\ &= ((A+B)\Psi, \psi)\end{aligned}$$

证毕!

2.2. 命题 2、

当且仅当两厄密算符对易时，它们之积才是厄密算符。

证明：设 A,B 为厄密算符，对于任意态，

$$
\begin{aligned}
(\Psi,(AB)\psi) &= (\Psi, A(B\psi)) \\
&= ((A\Psi),(B\psi)) \\
&= (B(A\Psi),\psi) \\
&= ((BA)\Psi,\psi) \\
&= ((AB)\Psi,\psi)
\end{aligned}
$$

证毕！

2.3. 命题 3、

无论两厄密算符是否对易，算符 $\frac{1}{2}(AB+BA)$ 及 $\frac{1}{2i}(AB-BA)$ 都是厄密算符

证明:设 A，B 为厄密算符，对于任意态，

$$
\begin{aligned}
I.\ (\Psi, \frac{1}{2}(AB+BA)\psi) &= \frac{1}{2}(\Psi, AB\psi) + \frac{1}{2}(\Psi, BA\psi) \\
&= \frac{1}{2}(A\Psi, B\psi) + \frac{1}{2}(B\Psi, A\psi) \\
&= \frac{1}{2}(BA\Psi, \psi) + \frac{1}{2}(AB\Psi, \psi) \\
&= \frac{1}{2}((BA+AB)\Psi, \psi) = (\frac{1}{2}(AB+BA)\Psi, \psi)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
II.\ (\Psi, \frac{1}{2i}(AB - BA)\psi) &= (\Psi, \frac{1}{2i}AB\psi) - (\Psi, \frac{1}{2i}BA\psi) \\
&= \frac{1}{2i}(\Psi, AB\psi) - \frac{1}{2i}(\Psi, BA\psi) \\
&= \frac{1}{2i}(A\Psi, B\psi) - \frac{1}{2i}(B\Psi, A\psi) \\
&= \frac{1}{2i}(BA\Psi, \psi) - \frac{1}{2i}(AB\Psi, \psi) \\
&= -(\frac{1}{2i}BA\Psi, \psi) + (\frac{1}{2i}AB\Psi, \psi) \\
&= (\frac{1}{2i}(AB - BA)\Psi, \psi)
\end{aligned}
$$

证毕!

2.4. 命题 4、

任意算符总可以分解成 $A = A_+ + iA_-$，且 A_+ 和 A_- 都是厄密算符

证明：令：$A_+ = \frac{1}{2}(A + A^\dagger)$，$A_- = \frac{1}{2i}(A - A^\dagger)$，有 $A = A_+ + iA_-$

问题转化为求证 $\frac{1}{2}(A + A^\dagger)$，$\frac{1}{2i}(A - A^\dagger)$ 是厄密算符

$$
\begin{aligned}
(\Psi, \frac{1}{2}(A + A^\dagger)\psi) &= \frac{1}{2}(\Psi, (A)\psi) + \frac{1}{2}(\Psi, (A^\dagger)\psi) \\
&= \frac{1}{2}((A^\dagger)\Psi, \psi) + \frac{1}{2}((A^\dagger)^\dagger\Psi, \psi) \\
&= \frac{1}{2}((A^\dagger)\Psi, \psi) + \frac{1}{2}(A\Psi, \psi) = (\frac{1}{2}(A^\dagger + A)\Psi, \psi)
\end{aligned}
$$

大气大方 求实求真

提 纲

1. 力学量算符表示
2. 厄密算符的性质
    - 运算性质
    - 本征性质
3. 常见算符的本征方程
4. 对易关系
5. 对易关系的物理含义
6. 算符运动方程

求實求真 大氣大為

《量子化就是本征值问题》

薛定谔 *(1926)*

1. 厄密算符的本征值为实数
2. 任意态下平均值为实数的算符必为厄密算符
3. 厄密算符属于不同本征值的本征函数正交
4. 简并的本征函数可通过重组变得正交
5. 厄密算符的本征函数系具有完备性
6. 厄密算符的本征函数系具有封闭性

2.5. 命题 1、

厄密算符的本征值为实数

证明: 设 A 为厄密算符，有如下本征方程

$$A\psi = a\psi$$

$$(\psi, A\psi) = (\psi, a\psi) = a(\psi, \psi) = a$$

由厄密性有:

$$(\psi, A\psi) = (A\psi, \psi) = (a\psi, \psi) = a^*(\psi, \psi) = a^*$$

有:

$$a = a^*$$

所以，本征值 a 必为实数。

2.6. 命题 2、

任意态下平均值为实数的算符必为厄密算符

证明:任意态 Ψ 下，F 的平均值

$$(\Psi, F\Psi) = \bar{F} = \bar{F}^* = (\Psi, F\Psi)^* = (F\Psi, \Psi), \qquad (1)$$

令 $\Psi = \psi_1 + c\psi_2$, 代入上式，得:

$$([\psi_1 + c\psi_2], F[\psi_1 + c\psi_2]) = (F[\psi_1 + c\psi_2], [\psi_1 + c\psi_2])$$

进行积分，得:

$$\begin{aligned} &(\psi_1, F\psi_1) + c^*(\psi_2, F\psi_1) + c(\psi_1, F\psi_2) + |c|^2\left(\psi_2, \hat{F}\psi_2\right) \\ =&(F\psi_1, \psi_1) + c^*(F\psi_2, \psi_1) + c(F\psi_1, \psi_2) + |c|^2\left(\hat{F}\psi_2, \psi_2\right) \end{aligned}$$

由（1）有：

$$(\psi_1, F\psi_1) = (F\psi_1, \psi_1), \qquad (\psi_2, F\psi_2) = (F\psi_2, \psi_2)$$

上式可消去第一、四项，变为：

$$\begin{aligned} & c^* (\psi_2, F\psi_1) + c (\psi_1, F\psi_2) \\ = & c^* (F\psi_2, \psi_1) + c (F\psi_1, \psi_2) \end{aligned}$$

分别取 $c = 1, c = i$ 代入，得到两个等式：

$$(\psi_2, F\psi_1) + (\psi_1, F\psi_2) = \left(\hat{F}\psi_2, \psi_1\right) + \left(\hat{F}\psi_1, \psi_2\right), \cdots (2)$$

$$-i (\psi_2, F\psi_1) + i (\psi_1, F\psi_2) = -i \left(\hat{F}\psi_2, \psi_1\right) + i (F\psi_1, \psi_2)$$

第二式乘以 i, 得:

$$(\psi_2, F\psi_1) - (\psi_1, F\psi_2) = \left(\hat{F}\psi_2, \psi_1\right) - (F\psi_1, \psi_2), \cdots (3)$$

(2)+(3), 并两边除以 2，得

$$(\psi_2, F\psi_1) = (F\psi_2, \psi_1)$$

证毕!

2.7. 命题 3、

厄密算符属于不同本征值的本征函数正交

证明：设 ψ_a、ψ_b 分别是厄密算符 A 属于本征值 a、b 的本征函数

$$(\psi_a, A\psi_b) = (\psi_a, b\psi_b) = b(\psi_a, \psi_b)$$

由于厄密性，有：

$$(\psi_a, A\psi_b) = (A\psi_a, \psi_b) = a(\psi_a, \psi_b)$$

由于 $a \neq b$, 有

$$(\psi_a, \psi_b) = 0$$

证毕!

本征函数的正交归一性

设 ψ_n、ψ_m 都是厄密算符 A 的本征函数

归一性：

$$(\psi_n, \psi_m) = (\psi_n, \psi_n) = 1, \qquad (n = m)$$

正交性：

$$(\psi_n, \psi_m) = 0, \qquad (n \neq m)$$

定义 δ 函数：

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}$$

正交归一性：

$$(\psi_n, \psi_m) = \delta_{nm}$$

2.8. 命题 4、

简并的本征函数可通过重组变得正交

证明:设厄密算符 A 属于本征值 a 的本征函数有 f 个

$$A\psi_{na} = a\psi_{na}, \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots, f)$$

由这 f 函数构成如下线性叠加态

$$\Psi_a = \sum_{n=1}^{f} c_n \psi_{na} \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots, f)$$

这样的叠加态也有 f 个

$$\Psi_{\beta a} = \sum_{n=1}^{f} c_{\beta n} \psi_{na} \qquad (\beta = 1, 2, 3, \cdots, f)$$

$$A\Psi_{\beta a}=\sum_{n=1}^{f}c_{\beta n}A\psi_{na}=a\Psi_{\beta a}$$

说明叠加态也是属于本征值 a 的本征函数。

选择系数 $c_{\beta n}$，让这 f 个新的本征态正交归一

$$(\Psi_{\beta a},\Psi_{\beta' a})=\delta_{\beta\beta'}$$

正交条件式数目 $\frac{1}{2}f(f-1)$，归一条件式数目 f

系数 $c_{\beta n}$ 的数目为 f^2，有：

$$f^2\geq\frac{1}{2}f(f-1)+f$$

因此，总可以找到一组系数 $c_{\beta n}$，使其满足正交归一化条件。

例-7. 试采用 Schmidt 正交化方案使能量 E 的三个简并函数 (Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3) 正交归一:

解: 取 $\psi_1 = \dfrac{\Psi_1}{(\Psi_1, \Psi_1)}$

设 $\psi_2' = \Psi_2 - (\psi_1, \Psi_2)\psi_1$

$$(\psi_1, \psi_2') = (\psi_1, \Psi_2) - (\psi_1, \Psi_2)(\psi_1, \psi_1) = 0$$

取 $\psi_2 = \dfrac{\psi_2'}{(\psi_2', \psi_2')}$

设 $\psi_3' = \Psi_3 - (\psi_1, \Psi_3)\psi_1 - (\psi_2, \Psi_3)\psi_2$

$$(\psi_1, \psi_3') = (\psi_1, \Psi_3) - (\psi_1, \Psi_3)(\psi_1, \psi_1) - (\psi_2, \Psi_3)(\psi_1, \psi_2) = 0$$

$$(\psi_2, \psi_3') = (\psi_2, \Psi_3) - (\psi_1, \Psi_3)(\psi_2, \psi_1) - (\psi_2, \Psi_3)(\psi_2, \psi_2) = 0$$

取 $\psi_3 = \dfrac{\psi_3'}{(\psi_3', \psi_3')}$

则 ψ_1, ψ_2, ψ_3 构成正交归一化组。

现求它们的本征值 ...

$$H\psi_1 = H\frac{\Psi_1}{(\Psi_1, \Psi_1)} = \frac{E\Psi_1}{(\Psi_1, \Psi_1)} = E\psi_1$$

$$H\psi_2 = H\frac{\Psi_2 - (\psi_1, \Psi_2)\psi_1}{(\psi_2', \psi_2')} = \frac{H\Psi_2 - (\psi_1, \Psi_2)H\psi_1}{(\psi_2', \psi_2')} = E\psi_2$$

同理，有 $H\psi_3 = E\psi_3$

它们依然是简并的!

2.9. 命题 5、

厄密算符的本征函数系具有完备性

完备性定义：设某个体系的厄密算符 A 具有本征方程

$$A\psi_n = a_n\psi_n,$$

则这个体系的任意态函数都可以在 A 的本征函数系上展开，

$$\Psi = \sum_n c_n\psi_n \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots)$$

本征函数系的这种性质称为完备性。

完备性证明：见文献《厄密算符本征函数完备性的一般证明》，大学物理，2012, 31(9): 16-19.

推论 1、

展开系数就是态矢量在对应本征基矢上的投影

$$c_n = \sum_m c_m \delta_{nm} = \sum_m c_m (\psi_n, \psi_m) = (\psi_n, \sum_m c_m \psi_m) = (\psi_n, \Psi)$$

推论 2、

展开系数的模方 $|c_n|^2$ 就是测得相应本征值 a_n 的概率

$$
\begin{aligned}
\bar{A} &= (\Psi, A\Psi) = (\Psi, A\sum_n c_n\psi_n) = (\Psi, \sum_n c_n A\psi_n) \\
&= (\sum_m c_m\psi_m, \sum_n c_n a_n\psi_n) \\
&= \sum_{m,n} c_m^* c_n a_n (\psi_m, \psi_n) \\
&= \sum_{m,n} c_m^* c_n a_n \delta_{mn} \\
&= \sum_n c_n^* c_n a_n \\
&= \sum_n |c_n|^2 a_n
\end{aligned}
$$

2.10. 命题 6、

厄密算符的本征函数系具有封闭性

$$
\begin{aligned}
\Psi(x) &= \sum_n c_n \psi_n(x) \\
&= \sum_n (\psi_n(x'), \Psi(x'))\psi_n(x) \\
&= (\sum_n \psi_n^*(x)\psi_n(x'), \Psi(x')) \\
\rightarrow & \sum_n \psi_n^*(x)\psi_n(x') = \delta(x - x') \\
\rightarrow & (\psi_n(x), \psi_n(x')) = \delta(x - x')
\end{aligned}
$$

态的展开系数构成的矩阵:

$$\vec{P} = \sum_i x_i \vec{e}_i, \qquad i = 1, 2, 3$$

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n, \qquad n = 1, 2, \cdots$$

正交归一的基矢组$\{\vec{e}_i\}$ 张开的空间是三维矢量空间, 任意矢量的系数矩阵

$$\vec{P} \Leftrightarrow (x_1, x_2, x_3)$$

正交归一的本征函数系$\{\psi_n\}$ 张开的空间是 Hilbert 空间, 任意态的系数矩阵

$$\Psi \Leftrightarrow (c_1, c_2, \cdots)^T$$

小结

- 希尔伯特空间的态矢量描述体系的状态
- 希尔伯特空间的厄密算符描述体系的物理量
- 物理量的取值是相应算符的本征值
- 态矢量取某本征值的概率是其按算符本征函数系展开时对应本征矢上展开系数的模方
- 态矢量随时间的演化服从薛定谔方程。

《量子化就是本征值问题》

薛定谔 (1926)

课外作业 3-2

1. 试证当且仅当两厄密算符 A,B 对易时，它们的积才是厄密的.
2. P51 3.2, 3.5, 3.6, 3.8, 3.9, 3.12, 3.13

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. **常见算符的本征方程**

   动量算符

   位置算符

   角动量算符

   能量算符

4. 对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

求實求真
大氣大為

前情回顾

- 希尔伯特空间的态矢量描述体系的状态
- 希尔伯特空间的厄密算符描述体系的物理量
- 物理量可取的值是相应算符的本征值
- 取某本征值的概率是态矢量按算符本征函数系展开时的对应本征矢前展开系数的模方

《量子化就是本征值问题》

薛定谔 *(1926)*

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

   动量算符

   位置算符

   角动量算符

   能量算符

4. 对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

求實求真
大氣大為

动量算符

例-8：求解动量算符本征方程：$\hat{\vec{p}}\psi_{\vec{p}} = \vec{p}\psi_{\vec{p}}$

解：

$$
\begin{aligned}
\hat{p}_x \psi_{p_x} &= p_x \psi_{p_x} \\
-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\vec{p}} &= p_x \psi_{p_x} \\
\frac{1}{\psi_{p_x}} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{p_x} &= \frac{i p_x}{\hbar} \\
\psi_{p_x} &= A e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \\
\psi_{p_x} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}
\end{aligned}
$$

本征函数:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

本征值谱: 连续

$$p \in (-\infty, +\infty)$$

正交归一性:

$$(\psi_{\vec{p}'}, \psi_{\vec{p}}) = \delta(\vec{p}' - \vec{p})$$

完备性:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} c(\vec{p}, t)\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) dp_x dp_y dp_z$$

封闭性:

$$(\psi_{\vec{p}}(\vec{r}''), \psi_{\vec{p}}(\vec{r}')) = \delta(\vec{r}'' - \vec{r}')$$

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

动量算符

位置算符

角动量算符

能量算符

4. 对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

大气大为 求实求真

例-9. 求解位置算符本征方程:

$$\hat{\vec{r}}\psi_{\vec{\lambda}} = \vec{\lambda}\psi_{\vec{\lambda}}$$

解:

$$\hat{\vec{r}}\psi_{\vec{\lambda}} = \vec{\lambda}\psi_{\vec{\lambda}}$$
$$\vec{r}\psi_{\vec{\lambda}} = \vec{\lambda}\psi_{\vec{\lambda}}$$

分析，$\vec{\lambda}$ 是本征值（常数），所以除 $\vec{r} = \vec{\lambda}$ 这一点外，$\psi_{\vec{\lambda}}$ 在其他位置处处为零!

本征函数:

$$\psi_{\vec{\lambda}}(\vec{r}) = A\delta(\vec{r}-\vec{\lambda}) = \delta(\vec{r}-\vec{\lambda})$$

本征值谱: 连续

$$\lambda \in (-\infty, +\infty)$$

正交归一性:

$$(\psi_{\vec{\lambda}'}, \psi_{\vec{\lambda}}) = \delta(\vec{\lambda}'-\vec{\lambda})$$

完备性:

$$\Psi(\vec{r},t) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} c_(\vec{\lambda}(\vec{r},t)\psi_{\vec{\lambda}}(\vec{r}')dx'dy'dz'$$

封闭性:

$$(\psi_{\vec{\lambda}}(\vec{r}''), \psi_{\vec{\lambda}}(\vec{r}')) = \delta(\vec{r}''-\vec{r}')$$

3.1. 课堂作业:

已知某算符为 $\hat{F} = -ie^{ix}\frac{d}{dx}$，求本征函数

解： 设本征方程为 $\hat{F}\psi_f(x) = f\psi_f(x)$

代入算符的具体形式：

$$-ie^{ix}\frac{d}{dx}\psi_f(x) = f\psi_f(x)$$

$$\frac{d\psi_f(x)}{\psi_f(x)} = ife^{-ix}dx$$

$$\frac{d\psi_f(x)}{\psi_f(x)} = d(-fe^{-ix})$$

$$\ln\psi_f(x) = -fe^{-ix} + \ln c$$

$$\psi_f(x) = ce^{-fe^{-ix}}$$

提 纲

1. 力学量算符表示
2. 厄密算符的性质
3. 常见算符的本征方程
   - 动量算符
   - 位置算符
   - 角动量算符
   - 能量算符
4. 对易关系
5. 对易关系的物理含义
6. 算符运动方程

角动量算符

例-10. 已知角动量的经典定义如下，求它的算符形式，并求解本征方程：

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

解： 根据 $Bohm$ 原则，有：

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{r} \times \nabla$$

(I) 直角坐标系

$$\begin{cases} \hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y \\ \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z \\ \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x \end{cases}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

(II) 球坐标系

$$\begin{cases} \hat{L}_x = i\hbar\left[\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] \\ \hat{L}_y = -i\hbar\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] \\ \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{cases}$$

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

相对较简单，可求解本征方程

解-1: $\hat{L}_z$ 的本征方程为

$$\hat{L}_z \Phi(\varphi) = l_z \Phi(\varphi)$$

代入算符的具体形式:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) = l_z \Phi(\varphi)$$

$$\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) = \frac{i}{\hbar} l_z$$

$$\Phi(\varphi) = A e^{\frac{i}{\hbar} l_z \varphi}$$

根据周期性边界条件: $\Phi(\varphi) = \Phi(2\pi + \varphi)$

$$\frac{A e^{\frac{i}{\hbar} l_z (2\pi + \varphi)}}{A e^{\frac{i}{\hbar} l_z \varphi}} = 1$$

因此

$$e^{\frac{i}{\hbar}l_z 2\pi} = 1$$

$$\cos\left(2\pi l_z/\hbar\right) + i\sin\left(2\pi l_z/\hbar\right) = 1$$

$$2\pi l_z/\hbar = 2\pi m, \qquad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$$

$$\rightarrow l_z = m\hbar$$

$$\rightarrow \Phi_m(\varphi) = Ae^{im\varphi}$$

归一化:

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\varphi &= \int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\varphi \\
&= A^2 \int_0^{2\pi} e^{im\varphi - im\varphi} d\varphi \\
&= A^2 2\pi \\
&= 1
\end{aligned}$$

$$\rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

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

（小结）

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

本征方程：

$$\hat{L}_z\Phi_m(\varphi) = m\hbar\Phi_m(\varphi)$$

本征函数：

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

本征值谱：分立

$$l_z = m\hbar, \qquad (m = 0, \pm1, \pm2, \cdots)$$

正交归一性：

$$(\Phi_{m'}(\varphi), \Phi_m(\varphi)) = \delta_{m'm}$$

完备性与封闭性：

$$(\Phi_m(\varphi''), \Phi_m(\varphi')) = \delta(\varphi'' - \varphi')$$

解-2: $\hat{L}^2$ 的本征方程

$$\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = L^2 Y(\theta,\varphi)$$

代入算符的具体形式，并令本征值为 $\lambda\hbar^2$，有：

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

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

这是球谐方程，

分离变量，令

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

得方程

$$-\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - m^2\right]Y(\theta) = \lambda Y(\theta) \tag{1}$$

解得：

本征值：

$$\lambda = l(l+1), \qquad (l = 0, 1, 2, \cdots)$$

本征函数：

$$Y(\theta) = P_l^m(\cos\theta)$$

式中 P_l 是勒让德多项式，是勒让德方程的解

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l}{dx}\right] + l(l+1)P_l(x) = 0 \tag{2}$$

$\hat{L}^2$ 的本征值：

$$\lambda\hbar^2 = l(l+1)\hbar^2$$

$\hat{L}^2$ 本征函数：

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

式中：

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

P_l^m 是连带勒让德多项式

$$P_l^m(\cos\theta) = (-1)^{l+m}\frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}\frac{1}{\sin^m\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{l-m}\sin^{2l}\theta$$

（小结）

算符：

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

本征方程：

$$\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y(\theta,\varphi)$$

本征函数：

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

本征值谱：分立

$$l(l+1)\hbar^2, \qquad (l=0,1,2,\cdots,n)$$

正交归一性:

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{lm}(\theta,\varphi)Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi)\sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

完备性与封闭性:

$$\psi(\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{n}\sum_{m=-l}^{l} C_{lm}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

简并度: $2l+1$

对于本征值 $l(l+1)\hbar^2$, 有 $2l+1$ 个本征函数 Y_{lm} 与之对应。

角动量量子化

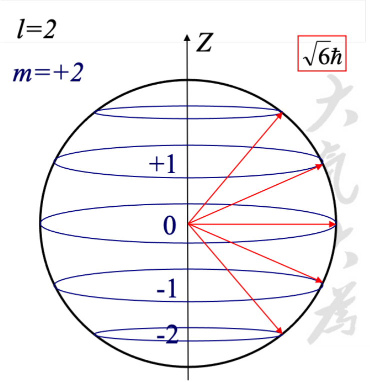
- 角动量大小：$\sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad (l=1,2,\cdots,n-1)$

对应球的半径

- 角动量 Z 投影

$l_z = m\hbar, \quad (m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l)$

- 大小和方向皆量子化



提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

动量算符

位置算符

角动量算符

能量算符

4. 对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

大气大为 求实求真

例-11. 求质量为 μ 的一维自由粒子的能量本征值和本征态:

解: 能量算子即哈密顿算子:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}$$

建立能量本征方程:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi$$

简化成数理方程标准形式：

$$\psi'' + k^2\psi = 0$$

特征方程的根为：$\lambda_{1,2} = \pm ik$

固有解（本征解）：$\psi \sim e^{\pm ikx}$

固有值（本征值）：$E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$

例-12. 求转动惯量为 I 的平面转子的能量本征值和本征态:

解: 能量算子即哈密顿算子:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{l}_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

能量本征方程:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\psi = E\psi$$

本征函数：

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \qquad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$$

本征值：

$$E_m = \frac{m^2\hbar^2}{2I}$$

课外作业

1. 设处于一维无限深势阱 (宽度为 a) 粒子，其状态可用如下波函数描述

$$\psi(x) = \frac{4}{\sqrt{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \cos^2 \frac{\pi x}{a}$$

   (1) 试写出其能量本征解

   (2) 试写出可测得能量的可能值及概率，并计算能量平均值

2. 对于处于一维无限深势阱 (宽度为 a) 粒子，试求解算符 $\hat{F} = \hat{p}_x + \hat{x}$ 的本征方程

3. 试导出力学量平均值公式

$$\overline{F} = \sum_n |c_n|^2 f_n$$

4. 设氢原子处于 $\psi = 0.5Y_{11} + 0.4Y_{20}$ 态时，试求

   (1) 能量的可能值

   (2) L_z,L^2 的可能值，取值概率及平均值

提 纲

1. 力学量算符表示
2. 厄密算符的性质
3. 常见算符的本征方程
4. **对易关系**
   - 对易子运算法则
   - 基本对易关系
   - 常见对易关系
5. 对易关系的物理含义
6. 算符运动方程

求實求真
大氣大為

前情回顾

- 希尔伯特空间的态矢量描述体系状态
- 希尔伯特空间的算符给出体系的物理量
- 算符的本征函数系构成正交归一完全基
- 常见算符本征方程求解

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

4. 对易关系

   - **对易子运算法则**
   - 基本对易关系
   - 常见对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

4.1. 对易子定义:

对易子:

$$[F, G] \equiv FG - GF$$

若 $[F, G] = 0$, 则对易

若 $[F, G] \neq 0$, 则不对易

对易子运算法则

1. $[A, B] = -[B, A]$
2. $[A, A] = 0$
3. $[A, c] = 0$
4. $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$
5. $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$
6. $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$
7. $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$

证明:

$$
\begin{aligned}
[AB, C] &= ABC - CAB \\
A[B, C] + [A, C]B &= A(BC - CB) + (AC - CA)B \\
&= ABC - ACB + ACB - CAB \\
&= ABC - CAB
\end{aligned}
$$

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

4.2. 推论：如果 A 与 B、C 分别对易

- 则 A 与 $B+C$ 对易
- 则 A 与 B^n+C^m 对易
- 则 A 与 BC 对易
- 则 A 与 B^nC^m 对易
- 则 A 与 $B^nC^m+B^{n'}C^{m'}$ 对易

证明:

$$
\begin{aligned}
[A, B^n] &= [A, BB^{n-1}] \\
&= B[A, B^{n-1}] + [A, B]B^{n-1} \\
&= B[A, B^{n-1}] \\
&= B^2[A, B^{n-2}] \\
&= \cdots \\
&= B^{n-1}[A, B] \\
&= 0
\end{aligned}
$$

同理: $[A, C^m] = 0$

$$
\begin{aligned}
[A, B^n + C^m] &= [A, B^n] + [A, C^m] \\
&= 0 \\
[A, B^n C^m] &= B^n [A, C^m] + [A, B^n] C^m \\
&= 0
\end{aligned}
$$

同理： $[A, B^{n'} C^{m'}] = 0$

$$
\begin{aligned}
[A, B^n C^m + B^{n'} C^{m'}] &= [A, B^n C^m] + [A, B^{n'} C^{m'}] \\
&= 0
\end{aligned}
$$

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

4. 对易关系

对易子运算法则

基本对易关系

常见对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

求實求真 大氣大為

例-13. 求位置-动量对易关系式:

$$[x, p_x] = ?, [x, p_y] = ?$$

解: 对任意态矢量 ψ, 有

$$\begin{aligned}
xp_x\psi &= x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi \\
&= -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi \\
p_x x\psi &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) \\
&= -i\hbar\psi - i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi
\end{aligned}$$

两式相减，

$$(xp_x - p_x x)\psi = i\hbar\psi$$

得 $xp_x - p_x x = i\hbar$

即

$$\boxed{[x, p_x] = i\hbar}$$

同理，有：

$$\begin{cases}[x, p_x] = i\hbar \\ [y, p_y] = i\hbar \\ [z, p_z] = i\hbar\end{cases} \quad \begin{cases}[x, p_y] = 0 \\ [y, p_z] = 0 \\ [z, p_x] = 0\end{cases} \quad \begin{cases}[p_x, p_y] = 0 \\ [p_y, p_z] = 0 \\ [p_z, p_x] = 0\end{cases} \quad \begin{cases}[x, y] = 0 \\ [y, z] = 0 \\ [z, x] = 0\end{cases}$$

4.3. 量子力学基本对易关系

$$
\begin{cases}
[x_\alpha, x_\beta] = 0 \\
[p_\alpha, p_\beta] = 0 \\
[x_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}
\end{cases}
$$

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

4. 对易关系

   对易子运算法则

   基本对易关系

   常见对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

求實求真
大氣大為

角动量-位置对易关系

例-14. 试证明角动量-位置对易关系:

$$[L_x, y] = i\hbar z, [L_x, x] = 0$$

证明:

$$\begin{aligned}
[L_x, y] &= [yp_z - zp_y, y] \\
&= -[y, yp_z - zp_y] \\
&= -[y, yp_z] + [y, zp_y] \\
&= -y[y, p_z] - [y, y]p_z + z[y, p_y] + [y, z]p_y \\
&= -0 - 0 + zi\hbar + 0 \\
&= i\hbar z
\end{aligned}$$

同理，有：

$$
\begin{cases}
[L_x, y] = i\hbar z \\
[L_x, x] = 0 \\
[L_x, z] = -i\hbar y
\end{cases}
\qquad
\begin{cases}
[L_y, z] = i\hbar x \\
[L_y, y] = 0 \\
[L_y, x] = -i\hbar z
\end{cases}
\qquad
\begin{cases}
[L_z, x] = i\hbar y \\
[L_z, z] = 0 \\
[L_z, y] = -i\hbar x
\end{cases}
$$

4.4. 角动量-位置对易关系

$$[L_\alpha, x_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar x_\gamma$$

角动量-动量对易关系

例-15. 试证明角动量-动量对易关系:

$$[L_x, p_y] = i\hbar p_z, [L_x, p_x] = 0$$

证明:

$$\begin{aligned}
[L_x, p_y] &= [yp_z - zp_y, p_y] \\
&= -[p_y, yp_z - zp_y] \\
&= -[p_y, yp_z] + [p_y, zp_y] \\
&= -y[p_y, p_z] - [p_y, y]p_z + z[p_y, p_y] + [p_y, z]p_y \\
&= -y[p_y, p_z] + [y, p_y]p_z + z[p_y, p_y] + [p_y, z]p_y \\
&= -0 + i\hbar p_z + 0 + 0
\end{aligned}$$

同理，有：

$$\begin{cases}[L_x, p_y] = i\hbar p_z \\ [L_x, p_x] = 0 \\ [L_x, p_z] = -i\hbar p_y\end{cases} \quad \begin{cases}[L_y, p_z] = i\hbar p_x \\ [L_y, p_y] = 0 \\ [L_y, p_x] = -i\hbar p_z\end{cases} \quad \begin{cases}[L_z, p_x] = i\hbar p_y \\ [L_z, p_z] = 0 \\ [L_z, p_y] = -i\hbar p_x\end{cases}$$

4.5. 角动量-动量对易关系

$$[L_\alpha, p_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar p_\gamma$$

角动量-角动量对易关系

例-16. 试证明角动量对易关系：

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, [L_z, L^2] = 0$$

证明方法 1: 基于运算法则

$$
\begin{aligned}
[L_x, L_y] =& [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\
=& [yp_z, zp_x - xp_z] - [zp_y, zp_x - xp_z] \\
=& y[p_z, zp_x - xp_z] + [y, zp_x - xp_z]p_z - z[p_y, zp_x - xp_z] - [z, zp_x - xp_z]p_y \\
=& y[p_z, zp_x] - y[p_z, xp_z] + [y, zp_x]p_z - [y, xp_z]p_z \\
& - z[p_y, zp_x] + z[p_y, xp_z] - [z, zp_x]p_y + [z, xp_z]p_y
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[L_x, L_y] =& yz[p_z, p_x] + y[p_z, z]p_x - yx[p_z, p_z] - y[p_z, x]p_z \\
& + z[y, p_x]p_z + [y, z]p_x p_z - x[y, p_z]p_z - [y, x]p_z p_z \\
& - zz[p_y, p_x] - z[p_y, z]p_x + zx[p_y, p_z] + z[p_y, x]p_z \\
& - z[z, p_x]p_y - [z, z]p_x p_y + x[z, p_z]p_y + [z, x]p_z p_y \\
=& 0 - yi\hbar p_x - 0 - 0 + 0 + 0 - 0 - 0 - 0 - 0 + 0 + 0 - 0 - 0 + xi\hbar p_y + 0 \\
=& i\hbar x p_y - i\hbar y p_x \\
=& i\hbar (x p_y - y p_x) \\
=& i\hbar L_z
\end{aligned}
$$

证明方法 2: 基于推论

$$
\begin{aligned}
[L_x, L_y] =& [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\
=& [yp_z, zp_x - xp_z] - [zp_y, zp_x - xp_z] \\
=& y[p_z, zp_x - xp_z] + [y, zp_x - xp_z]p_z - z[p_y, zp_x - xp_z] - [z, zp_x - xp_z]p_y \\
=& y[p_z, zp_x] + 0 - 0 - [z, -xp_z]p_y \\
=& yz[p_z, p_x] + y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y + [z, x]p_z p_y \\
=& 0 - yi\hbar p_x + xi\hbar p_y + 0 \\
=& i\hbar L_z
\end{aligned}
$$

同理，有：

$$\begin{cases} [L_x, L_y] = i\hbar L_z \\ [L_x, L_x] = 0 \\ [L_x, L_z] = -i\hbar L_y \end{cases} \quad \begin{cases} [L_y, L_z] = i\hbar L_x \\ [L_y, L_y] = 0 \\ [L_y, L_x] = -i\hbar L_z \end{cases} \quad \begin{cases} [L_z, L_x] = i\hbar L_y \\ [L_z, L_z] = 0 \\ [L_z, L_y] = -i\hbar L_x \end{cases}$$

4.6. 角动量对易关系 1

$$[L_\alpha, L_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar L_\gamma$$

证明 3:

$$
\begin{aligned}
[L_z, L^2] &= [L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] \\
&= [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] + [L_z, L_z^2] \\
&= [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] \\
&= L_x[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_x + L_y[L_z, L_y] + [L_z, L_y]L_y \\
&= i\hbar L_x L_y + i\hbar L_y L_x - i\hbar L_y L_x - i\hbar L_x L_y \\
&= 0
\end{aligned}
$$

同理，有：

$$
\begin{cases}
[L_x, L^2] = 0 \\
[L_y, L^2] = 0 \\
[L_z, L^2] = 0
\end{cases}
$$

4.7. 角动量对易关系 2

$$[L_\alpha, L^2] = 0$$

课堂作业

4.8. 角动量对易关系 3

定义升降算符：$L_\pm \equiv L_x \pm iL_y$

试证明对易关系：

$$[L_\pm, L^2] = 0$$

$$[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$$

4.9. 常见对易关系

1. $$\begin{cases} [x_\alpha, x_\beta] = 0 \\ [p_\alpha, p_\beta] = 0 \\ [x_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta} \end{cases}$$
2. $[L_\alpha, x_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar x_\gamma$
3. $[L_\alpha, p_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar p_\gamma$
4. $[L_\alpha, L_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar L_\gamma$
5. $[L_\alpha, L^2] = 0$

课外作业

1. 设体系处于 L^2 和 L_z 的共同本征态 Y_{lm}，试证明

(1) $\overline{L_x} = \overline{L_y} = 0$

(2) $\overline{L_x^2} = \overline{L_y^2} = \dfrac{1}{2}[l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2]$

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

4. 对易关系

5. **对易关系的物理含义**

   对易的物理含义

   不对易的物理含义

6. 算符运动方程

求實求真
大氣大為

前情回顾

- 希尔伯特空间的态矢量描述体系状态
- 希尔伯特空间的算符给出体系的物理量
- 算符的本征函数系构成正交归一完全基
- 常见算符本征方程求解
- 算符对易关系

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

4. 对易关系

5. 对易关系的物理含义

   对易的物理含义

   不对易的物理含义

6. 算符运动方程

对易的含义

1. 相互对易的两力学量算符，具有共同本征函数系
2. 当体系处于共同的本征态时，它们同时具有确定值
3. 构成最小完全集的一组力学量算符的数目等于体系的自由度。

例-17. 试证明如果两算符具有共同的本征函数系，则它们对易：

证明： 设它们的共同本征函数系为φ_n，有：

$$A\varphi_n = a_n\varphi_n$$
$$B\varphi_n = b_n\varphi_n$$

对任意态矢量

$$\begin{aligned}[A,B]\Psi &= [A,B]\sum_n c_n\varphi_n \\ &= \sum_n c_n[A,B]\varphi_n \\ &= \sum_n c_n(AB-BA)\varphi_n \\ &= \sum_n c_n AB\varphi_n - \sum_n c_n BA\varphi_n \\ &= \sum_n c_n a_n b_n\varphi_n - \sum_n c_n a_n b_n\varphi_n = 0\Psi\end{aligned}$$

得证：

$$[A, B] = 0$$

例-18. 试证明如果两算符对易，则它们具有共同的本征函数系：

证明：设 A 有本征函数系 $\{\varphi_n\}$，有：

$$
\begin{aligned}
A(B\varphi_n) &= AB\varphi_n \\
&= BA\varphi_n \\
&= Ba_n\varphi_n \\
&= a_n(B\varphi_n)
\end{aligned}
$$

说明 $B\varphi_n$ 和 φ_n 都是 A 的属于本征值 a_n 的本征态，当 a_n 非简并时，$B\varphi_n$ 和 φ_n 描述同一个态，两者最多只差一个常数因子，记为 b_n，

$$B\varphi_n = b_n\varphi_n$$

即：φ_n 也是 B 的本征态。

证毕！

5.1. 推论 1:

一组力学量算符具有共同本征函数完备系的充要条件是这些算符彼此两两对易

例子 1: 动量本征函数系

由于 $[p_\alpha, p_\beta] = 0$, 动量算符 (p_x, p_y, p_z) 具有共同本征函数系即平面波

$$\Psi_{\vec{p}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

例子 2: 角动量本征函数系

由于 $[L_z, L^2] = 0$, 它们具有共同的本征函数系 Y_{lm},

当体系处于共同的本征态 Y_{lm} 时，它们同时具有确定值

$$L_z = m\hbar, \qquad L^2 = l(l+1)\hbar^2$$

. 当体系处于非共同的本征态，比如 $\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{lm}+\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{lm'}$，此时，$L^2$ 具有确定值

$$L^2=l(l+1)\hbar^2$$

而 L_z 具有两个可能值（非确定）

$$L_z=m\hbar \quad \text{or} \quad m'\hbar$$

也就是说 $\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{lm}+\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{lm'}$ 是 L^2 的本征态，却不是 L_z 的本征态。

5.2. 推论 2：

一组力学量同时有确定值的条件：

1. 算符彼此两两对易
2. 体系处于它们的共同本征态

5.3. 推论 3:

完全确定体系的一个量子态所需要的彼此对易的一组力学量算符集称为力学量完全集，最小力学量完全集所含力学量的数目等于体系的自由度。

例子 1: 空间的自由度为 3

完全确定空间一个矢量（一个点）的位置，至少需要三个彼此对易的一组力学量构成的集，比如:

$$(i, j, k) \qquad or \qquad (r, \theta, \varphi)$$

当然，你可以用多于三个力学量构成的集来完全描述，但不是最小完全集!

例子 2：经典物理学

经典物理学用 $\vec{r}, \vec{p}$ 来完全描述质点的运动状态，用了六个力学量 (x, y, z, p_x, p_y, p_z)，量子力学发现这个集并不是彼此对易的

$$
\begin{cases}
[x_\alpha, x_\beta] = 0 \\
[p_\alpha, p_\beta] = 0 \\
[x_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}
\end{cases}
$$

它们不能构成一个完全集！

提 纲

1. 力学量算符表示
2. 厄密算符的性质
3. 常见算符的本征方程
4. 对易关系
5. **对易关系的物理含义**
   - 对易的物理含义
   - **不对易的物理含义**
6. 算符运动方程

不对易的含义

5.4. 不确定性原理：

若两力学量的算符不对易，则它们一般不同时具有确定值

不确定度

- 偏差：测量值与平均值之差

$$\Delta F = F - \bar{F}$$

- 不确定度：偏差的绝对值

$$|\Delta F|$$

- 均方差：偏差平方的平均值（量子涨落）

$$\overline{(\Delta F)^2} = \overline{F^2} - \overline{F}^2$$

我们通常计算（1）算符方的平均值，(2）算符平均值的平方，得到均方差，再开方得到不确定度！

证明: 对于量子涨落，由偏差的定义，有

$$
\begin{aligned}
\overline{(\Delta F)^2} &= \overline{(F-\bar{F})^2} \\
&= \overline{F^2 - 2F\bar{F} + \bar{F}^2} \\
&= \overline{F^2} - 2\overline{F\bar{F}} + \overline{\bar{F}^2} \\
&= \overline{F^2} - 2\overline{F}^2 + \overline{F}^2 \\
&= \overline{F^2} - \overline{F}^2
\end{aligned}
$$

不确定度的对易关系

例-19. 试证明不确定度有如下对易关系：

$$[\Delta F, \Delta G] = [F, G]$$

证明：

$$\begin{aligned}
[\Delta F, \Delta G] &= \Delta F \Delta G - \Delta G \Delta F \\
&= (F - \bar{F})(G - \bar{G}) - (G - \bar{G})(F - \bar{F}) \\
&= FG - F\bar{G} - \bar{F}G + \bar{F}\bar{G} - GF + G\bar{F} + \bar{G}F - \bar{G}\bar{F} \\
&= FG - GF \\
&= [F, G]
\end{aligned}$$

令 $[\hat{F},\hat{G}]=i\hat{k}$, 对任意波函数，计算含实参 ξ 的积分：

$$
\begin{aligned}
I(\xi)=&\int|(\xi\Delta\hat{F}-i\Delta\hat{G})\psi|^2 d\tau \quad (\geq 0)\\
=&\int[\xi\Delta\hat{F}\psi-i\Delta\hat{G}\psi][\xi\Delta\hat{F}\psi-i\Delta\hat{G}\psi]^* d\tau\\
=&\int[\xi\Delta\hat{F}\psi-i\Delta\hat{G}\psi][\xi(\Delta\hat{F}\psi)^*+i(\Delta\hat{G}\psi)^*]d\tau\\
=&\xi^2\int(\Delta\hat{F}\psi)(\Delta\hat{F}\psi)^* d\tau-i\xi\int(\Delta\hat{G}\psi)(\Delta\hat{F}\psi)^* d\tau\\
&+i\xi\int(\Delta\hat{F}\psi)(\Delta\hat{G}\psi)^* d\tau+\int(\Delta\hat{G}\psi)(\Delta\hat{G}\psi)^* d\tau
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
=&\xi^2 \int \psi^* (\Delta \hat{F})^2 \psi d\tau - i\xi \int \psi^* (\Delta \hat{F} \Delta \hat{G}) \psi d\tau \\
&+ i\xi \int \psi^* (\Delta \hat{G} \Delta \hat{F}) \psi d\tau + \int \psi^* (\Delta \hat{G})^2 \psi d\tau \\
=&\xi^2 \int \psi^* (\Delta \hat{F})^2 \psi d\tau - i\xi \int \psi^* (\Delta \hat{F} \Delta \hat{G} - \Delta \hat{G} \Delta \hat{F}) \psi d\tau + \int \psi^* (\Delta \hat{G})^2 \psi d\tau \\
=&\xi^2 \overline{(\Delta F)^2} - i\xi \overline{[\Delta F, \Delta G]} + \overline{(\Delta G)^2} \\
=&\xi^2 \overline{(\Delta F)^2} - i\xi \overline{[F, G]} + \overline{(\Delta G)^2} \\
=&\xi^2 \overline{(\Delta F)^2} + \xi \overline{\hat{k}} + \overline{(\Delta G)^2} \\
\geq&0
\end{aligned}
$$

$$\xi^2\overline{(\Delta F)^2} + \xi\bar{\hat{k}} + \overline{(\Delta G)^2} \geq 0$$

对比不等式：

$$a\xi^2 + b\xi + c \geq 0$$

$$b^2 - 4ac \leq 0 \Rightarrow ac \geq \frac{b^2}{4}$$

可知：

$$\overline{(\Delta\hat{F})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{G})^2} \geq \frac{(\bar{\hat{k}})^2}{4}$$

得：

$$\boxed{\overline{(\Delta\hat{F})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{G})^2} \geq \frac{1}{4}|\overline{[\hat{F},\hat{G}]}|^2}$$

证毕！

取位置与动量为例，有：

$$[x, p_x] = i\hbar$$

$$\overline{(\Delta\hat{x})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{p_x})^2} \geq \frac{1}{4}|\overline{[\hat{x}, \hat{p_x}]}|^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p_x)^2}} \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

得位置-动量不确定性关系，称为海森堡不确定性关系.

能量-时间不确定性关系：

$$\Delta x \Delta p = \Delta(vt)\Delta p = \Delta t \Delta(v p_x) = \Delta t \Delta E$$

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

- 激发态没有明确的能量，其能量不确定度 ΔE 称为能级宽度 Γ，
- 根据不确定性有理，Γ 越大（越扩展），粒子处于这个态的寿命越短；Γ 越小（越局域），粒子处于这个态的寿命越长。
- 在光谱中体现为：峰宽（1/2 峰高处的展宽）越大，对应的态寿命越短；峰宽越小，态越稳定。

海森堡

维尔纳·海森堡

(Werner Heisenberg，1901年12月5日－1976年2月1日)，德国物理学家，1932年诺贝尔物理学奖。

主要贡献：

（1）创立矩阵力学（量子力学的矩阵形式）

（2）提出“测不准原理”

（3）散射（S）矩阵。(学术伦理)

5.5. 不确定性关系式表明

- 若两力学量算符不对易（对易子不等于零），对易子平均值的平方一般会大于零，则它们的不确定度的积必大于零，说明它们一般不能同时具有确定值
- 若两个力学量算符对易，则总可以找出这样的态（比如共同的本征态），使它们同时有确定值。
-

TIPS：下列说法，正确的有：

1. 两力学量算符对易，则同时有确定值。
2. 两力学量算符不对易，则不可能同时有确定值
3. 若两力学量算符有共同的本征态，则彼此对易
4. 若两力学量算符不对易，则没有共同本征态
5. 若两力学量算符 A,B 对易，则 A 的本征函数必是 B 的本征函数.
6. 若 [A,B]= 常数，则 A 和 B 能有共同本征态

★ 例如：

在 L^2L_z 表象，有基态

$$Y_{lm_{(z)}}(\theta,\varphi_{(z)}) = Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

在 L^2L_x 表象，有基态

$$Y_{lm_{(x)}}(\theta,\varphi_{(x)}) = Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

在 L^2L_y 表象，有基态

$$Y_{lm_{(y)}}(\theta,\varphi_{(y)}) = Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

不对易力学组 L_x, L_y, L_z，它们的基态都是常函数 $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$，即它们有一个共同本征态。

小结:

对易关系的物理含义:

- 两力学量算符对易,它们具有共同本征函数系，当体系处于它们的共同本征态时，它们同时有确定值。
- 两力学量算符对易,则它们一般不同时具有确定值(不确定性原理)

一组力学量同时有确定值:

- 彼此两两对易，且体系处于它们的共同本征态
- 彼此两两不对易，但体系处于它们的共同本征态

5.6. 课堂作业 2

A wavefunction is given by

$$\psi(x,0) = A\left(a^2 - x^2\right); \qquad -a < x < a$$

and zero elsewhere.

find A

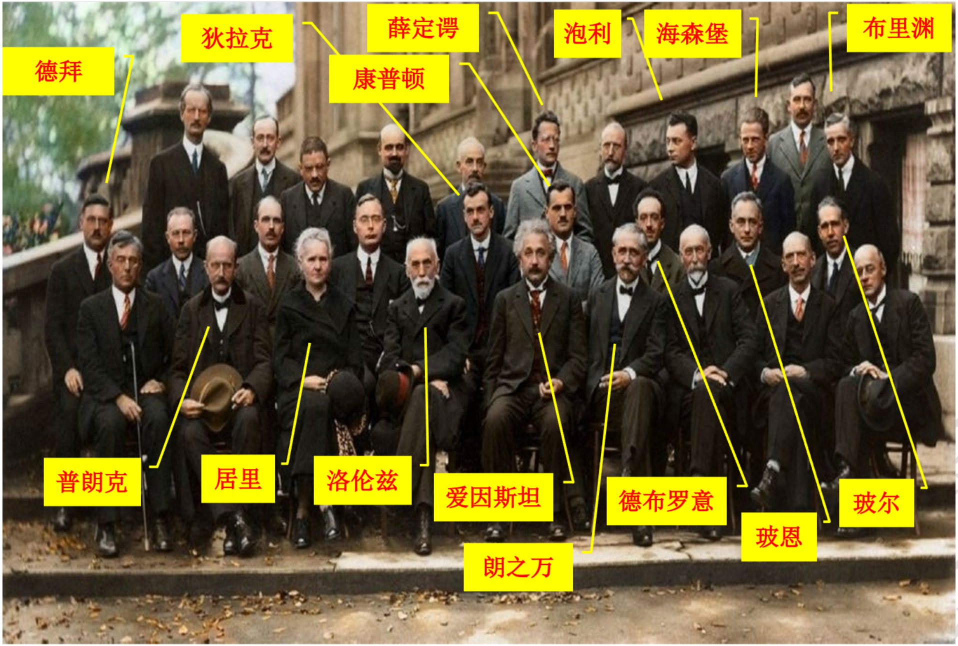
find $< x >$

find $< x^2 >$

find $< p_x >$

find $< p_x^2 >$

and verify the uncertainty principle.



狄拉克
薛定谔
泡利
海森堡
布里渊
德拜
康普顿
普朗克
居里
洛伦兹
爱因斯坦
德布罗意
玻尔
玻恩
朗之万

课外作业

1. 已知 $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, 试计算体系处于 L_z 的基态

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

时，L_x, L_y 的不确定度，并验证不确定性原理.

2. 试用不确定性原理，估算氢原子基态能量和一维谐振子的最小能量

3. 设电子在一个原子大小的无限深球型势阱中运动时，求其最小能量.

5. 已知体系的力学量 A 有两个本征态 $|a_1\rangle$, $|a_2\rangle$, B 也有两个本征态 $|b_1\rangle$, $|b_2\rangle$. 它们之间的关系如下, 试求:

$$\begin{cases} |a_1\rangle = \frac{1}{2}|b_1\rangle + \sqrt{\frac{3}{4}}|b_2\rangle \\ |a_2\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}|b_1\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}}|b_2\rangle \end{cases}$$

(1) 若测量 A 发现测量值为 a_1, 则再测 B 时的平均值是多少

(2) 若上问中某次测得值是 b_1, 则再试测量 A 的值为 a_1 的概率是多少?

1. 力学量算符表示
2. 厄密算符的性质
3. 常见算符的本征方程
4. 对易关系
5. 对易关系的物理含义
6. **算符运动方程**
    - 守恒量及守恒条件
    - 守恒量性质
    - 常见守恒定律

前情回顾

- 希尔伯特空间的态矢量描述体系状态
- 希尔伯特空间的算符给出体系的物理量
- 算符的本征函数系构成正交归一完全基
- 常见算符本征方程求解
- 算符对易关系及其物理含义

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

4. 对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

守恒量及守恒条件

守恒量性质

常见守恒定律

求实求真
大气大为

1918 年德国数学家 A. E. Noether：从自然界的每一对称性可得到一守恒律；
反之，每一个守恒律均揭示蕴含其中的一种对称性。

守恒量定义

1. 经典物理中的守恒量与对称条件

   守恒量：力学量的值不随时间变化

   - 机械能空间平移不变 $\longrightarrow$ 动量守恒
   - 机械能空间转动不变 $\longrightarrow$ 角动量守恒
   - 机械能时间平移不变 $\longrightarrow$ 能量守恒

2. 量子力学中的守恒量

   守恒量：在任意态下力学量的平均值不随时间变化

$$\bar{F}(t) = (\Psi(t), F\Psi(t)) = c.$$

守恒量及守恒条件...

由平均值公式

$$
\begin{aligned}
\bar{F}(t) &= (\Psi(t), F(t)\Psi(t)) \\
\frac{d\bar{F}}{dt} &= (\frac{\partial \Psi}{\partial t}, F\Psi) + (\Psi, \frac{\partial F}{\partial t}\Psi) + (\Psi, F\frac{\partial \Psi}{\partial t}) \\
&= -\frac{1}{i\hbar}(H\Psi, F\Psi) + (\Psi, \frac{\partial F}{\partial t}\Psi) + \frac{1}{i\hbar}(\Psi, FH\Psi) \\
&= -\frac{1}{i\hbar}(\Psi, HF\Psi) + (\Psi, \frac{\partial F}{\partial t}\Psi) + \frac{1}{i\hbar}(\Psi, FH\Psi) \\
&= (\Psi, \frac{\partial F}{\partial t}\Psi) + \frac{1}{i\hbar}(\Psi, [F, H]\Psi) \\
&= \overline{(\frac{\partial F}{\partial t})} + \frac{1}{i\hbar}\overline{[F, H]}
\end{aligned}
$$

算符运动方程

$$\boxed{\frac{d\bar{F}}{dt} = \overline{\left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)} + \frac{1}{i\hbar}\overline{[F, H]}}$$

守恒条件

由守恒量定义:

$$\bar{F}(t) = (\Psi(t), F\Psi(t)) = c.$$

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = \overline{(\frac{\partial F}{\partial t})} + \frac{1}{i\hbar}\overline{[F, H]} = 0$$

得守恒量条件:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial t} = 0 \\ [F, H] = 0 \end{cases}$$

提 纲

1. 力学量算符表示

2. 厄密算符的性质

3. 常见算符的本征方程

4. 对易关系

5. 对易关系的物理含义

6. 算符运动方程

   守恒量及守恒条件

   守恒量性质

   常见守恒定律

求實求真
大氣大為

守恒量性质 1

例-20. 试证明守恒量测量值的概率分布不随时间改变:

证明: F 是守恒量，则 $[F, H] = 0$, 设 F,H 的共同本征函数系 $\{\varphi_n\}$, 有:
任意态 $\Psi(t)$ 在 $\{\varphi_n\}$ 展开，其展开系数为:

$$C_n(t) = (\varphi_n, \Psi(t))$$

展开系数的模方即为测量值为本征值 f_n 的概率，因此要证明:

$$\frac{d}{dt}|C_n(t)|^2 = 0$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}|C_n(t)|^2 &= \frac{d}{dt}C_n^* C_n \\
&= C_n \frac{d}{dt}C_n^* + C_n^* \frac{d}{dt}C_n \\
&= [C_n^*[\frac{d}{dt}C_n]^* + [C_n^* \frac{d}{dt}C_n]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
C_n^* \frac{d}{dt}C_n &= (\varphi_n, \Psi)^* \frac{d}{dt}(\varphi_n, \Psi) \\
&= (\varphi_n, \Psi)^* (\varphi_n, \frac{d}{dt}\Psi) \\
&= \frac{1}{i\hbar}(\varphi_n, \Psi)^* (\varphi_n, H\Psi) \\
&= \frac{1}{i\hbar}(\varphi_n, \Psi)^* (H\varphi_n, \Psi) = \frac{E_n}{i\hbar} C_n^* C_n
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}|C_n(t)|^2 &= [C_n^*[\frac{d}{dt}C_n]^* + [C_n^*\frac{d}{dt}C_n] \\
&= [\frac{E_n}{i\hbar}C_n^*C_n]^* + \frac{E_n}{i\hbar}C_n^*C_n \\
&= -\frac{E_n}{i\hbar}C_n^*C_n] + \frac{E_n}{i\hbar}C_n^*C_n \\
&= 0
\end{aligned}
$$

证毕！

Tips: 无论体系处于本征态还是叠加态（任意态），守恒量的平均值及各测量值的概率分布都不随时间变化。

例-21. 试证明若体系有两个不对易守恒量，则一般存在简并能级:

证明: 设 F、G 都是体系的守恒量，则有 $[F,H]=0$, $[G,H]=0$, 设 F,H 的共同本征函数系 $\{\varphi_n\}$, 有:

$$F\varphi_n = f_n\varphi_n, \qquad H\varphi_n = E_n\varphi_n$$

$$H(G\varphi_n) = HG\varphi_n = GH\varphi_n = E_n(G\varphi_n)$$

说明 $G\varphi_n$ 和 φ_n 都是 H 的属于 E_n 的本征态。假设能级非简并，则 $G\varphi_n$ 和 φ_n 描述同一个态，两者最多只差一个常数因子，设为 g_n，有:

$$G\varphi_n = g_n\varphi_n$$

也就是说，φ_n 也是 G 的本征态，即 F 和 G 具有相同的本征函数系，即它们对易，与题设相矛盾。证毕!

6.1. 推论：

若体系有两个不对易守恒量，则一般存在简并能级，非简并能级都是守恒量的本征态，简并能级中存在守恒量的一个本征态。

根据能级简并，可找出体系的守恒量；根据能级不简并，可找到守恒量的本征态。

提 纲

1. 力学量算符表示
2. 厄密算符的性质
3. 常见算符的本征方程
4. 对易关系
5. 对易关系的物理含义
6. 算符运动方程
   - 守恒量及守恒条件
   - 守恒量性质
   - 常见守恒定律

动量守恒

例-22. 试证明自由粒子的动量是守恒量:

证明: (1) 自由粒子动量算符为:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$$

不显含时间，有

$$\frac{d}{dt}\hat{\vec{p}} = 0$$

(2), 自由粒子哈密顿算符为:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{\vec{p}}^{\,2}$$

$$[\hat{\vec{p}}, \hat{H}] = \frac{1}{2\mu}[\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{p}}^{\,2}] = 0$$

证毕!

例-23. 试证明空间平移不变性导致动量守恒:

证明: (1) 设体系沿 x 轴方向无穷小平移 a:

$$T(a)\psi(x) = \psi(x-a)$$

做 Taylor 展开，可求得

$$\begin{aligned}
\psi(x-a) =&\psi(x) - a\frac{d}{dx}\psi(x) + \frac{a^2}{2!}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - \dots \\
=& e^{-a\frac{d}{dx}}\psi(x)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T(a) =&e^{-a\frac{d}{dx}} = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x} \\
=& 1 - \frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x
\end{aligned}$$

$$T(\delta x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\delta x p_x}$$

推广到三维，有：

$$T(\delta\hat{\vec{r}}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\delta\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}}$$

对于无穷小平移，有：

$$T = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta x p_x$$

很明显，平移算符不显含时间，满足条件（1）

（2）若具空间平移不变性，则

$$[T, H] = 0$$

$$[1 - \frac{i}{\hbar}\delta x p_x, H] = 0$$

$$[1, H] - [\frac{i}{\hbar}\delta x p_x, H] = 0$$

$$[\frac{i}{\hbar}\delta x p_x, H] = 0$$

$$[p_x, H] = 0$$

证毕！

例-24. 试证明在中心力场中运动粒子的角动量是守恒量:

证明: (1) 中心力场中的角动量

$$\begin{cases} \hat{L}_x = i\hbar\left[\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] \\ \hat{L}_y = -i\hbar\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] \\ \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{cases}$$

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

很明显，角动量不显含时间，满足条件（1）

(2) 中心力场哈密顿算符为：

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + U(r)$$

哈密顿算符与角动量各分量算符及角动量方均对易因为 (a) 角动量都是 θ, φ 的函数，与 r 无关，与哈密顿算符只含 r 的项对易。(b) 角动量都与 L^2 对易。证毕！

例-25. 试证明哈密顿算符不显含时间的体系能量守恒:

证明: (1) 密顿算符不显含时间: 有

$$\frac{d}{dt}\hat{H} = 0$$

(2), 密顿算符与自己对易:

$$[\hat{H}, \hat{H}] = 0$$

证毕!

■ 6.2. 角动量守恒:

试证明: 具有空间旋转不变性的体系角动量守恒

对于无穷小平移, 有:

$$T = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta x p_x$$

同理, 对于无穷小旋转, 有:

$$R(\delta\vec{\theta})\psi(\vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\theta}\cdot\widehat{\vec{L}}}\psi(\vec{r})$$

...

6.3. 能量守恒：

试证明：具有时间平移对称性的体系能量守恒

6.4. 宇称守恒：

试证明：具有空间反射对称性的体系宇称守恒

宇称守恒

例-26. 试证明若哈密顿算符空间反射不变，则宇称守恒:

证明: (1) 宇称算符: 空间反射:

$$\vec{r} \to -\vec{r}$$

$$\Psi(\vec{r}) \to \Psi(-\vec{r})$$

定义宇称算符:

$$\hat{P}\Psi(\vec{r},t) = \Psi(-\vec{r},t)$$

(2) 解宇称算符本征方程: 对于本征函数 $\psi_p(\vec{r})$, 有:

$$\hat{P}\psi_p(\vec{r}) = p\psi_p(\vec{r})$$

$$\hat{P}^2\psi_p(\vec{r}) = \hat{P}p\psi_p(\vec{r}) = p^2\psi_p(\vec{r})$$

基于定义，有：

$$
\begin{aligned}
\hat{P}^2\psi_p(\vec{r}) &= \hat{P}[\hat{P}\psi_p(\vec{r})] \\
&= \hat{P}\psi_p(-\vec{r}) \\
&= \psi_p(\vec{r})
\end{aligned}
$$

得本征值 $p = \pm 1$，分别称为偶宇称和奇宇称。

(3) 证明宇称守恒

(a) 显然，宇称算符不显含时间 t, 满足条件（1）

(b) 当哈密顿算符具有空间反射不变性，即：

$$H(\vec{r},t) = H(-\vec{r},t)$$

对于任意态，有：

$$\begin{aligned}
\hat{P}(\hat{H}(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)) &= \hat{H}(-\vec{r},t)\Psi(-\vec{r},t) \\
&= \hat{H}(\vec{r},t)\Psi(-\vec{r},t) \\
&= \hat{H}(\vec{r},t)\hat{P}\Psi(\vec{r},t)
\end{aligned}$$

得：

$$\hat{P}\hat{H} = \hat{H}\hat{P}$$

即：

$$[\hat{P},\hat{H}] = 0$$

满足条件（2），证毕！


1957年
诺贝尔物理学奖
NAT. MDCCC XXXIII OB. MDCCC XCV.
ALFR. NOBEL
杨 李二人发现“宇称不守恒”理论，吴健雄证明了其存在的原理

求實求真
大氣大為

课外作业

1. 试证明具有空间旋转不变性的体系角动量守恒
2. 试证明球谐函数 Y_{lm} 的宇称由量子数 l 决定
3. 对于一维自由粒子，试证明
   (1) 动量，宇称都是守恒量
   (2) 动量算子与宇称算子不对易，因此存在能级简并

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