第4章 波动力学(II) —— 三维定态问题

§4.1 力学量算符

(1) 算符定义：力学量算符 $\hat{F}$ 作用在一个函数 ψ，变成另一个函数 ϕ

例：微分算符 $\frac{d}{dx}$、矢量微分算符 $\nabla=(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z})$、常数算符 c

(2)

	经典力学	量子物理
坐标	x	x
	$\vec{r}$	$\vec{r}$
动量	P_x	$\hat{P}_x=-i\hbar\frac{d}{dx}$
	$\vec{P}$	$\hat{\vec{P}}=-i\hbar\nabla$
势能	$U(x)$	$U(x)$
	$U(\vec{r})$	$U(\vec{r})$
动能	$\frac{P_x^2}{2m}$	$\frac{\hat{P}_x^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$
	$\frac{\vec{P}^2}{2m}$	$\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
能量	$\frac{P_x^2}{2m}+U(x)$	$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)$
	$\frac{\vec{P}^2}{2m}+U(\vec{r})$	$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})$
	$\vec{F}(\vec{r},\vec{P})$	$(\vec{r},-i\hbar\nabla)$
	任一力学量都是 $\vec{r},\vec{P}$ 的函数	任一力学量算符是坐标算符、动量算符的函数

(3) 最重要的力学量算符 哈密顿量(能量)算符

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})$$

最重要的方程 $\hat{H}\phi=E\phi$ (能量本征方程)

能量本征值 E_n 能量本征函数 ϕ_n

测量这个体系的能量，有一系列可能的结果

测 $\phi_1(\phi_2\cdots\phi_n)$ 得能量 $E_1(E_2\cdots E_n)$

推广：对于任意力学量算符 $\hat{F}$ 都可以定义 $\hat{F}$ 的本征方程 $\hat{F}\phi=\lambda\phi$

一定可以求得一系列本征值 λ_n 和相应的本征函数 ϕ_n

测量这个体系的物理量 F：

测 ϕ_1 结果 λ_1

ϕ_2 结果 λ_2

$\vdots$ $\vdots$ $\vdots$

ϕ_n 结果 λ_n

小结：量子物理就是求解某个力学量算符 $\hat{F}$ 的本征方程，得到一系列本征值 λ_n 和本征函数 ϕ_n

(4) 力学量算符的基本性质

(a) 量子物理中所有力学量算符都是厄米算符

厄米算符：对于任意两个函数 ψ,ϕ，如果有 $\int\psi^*\hat{F}\phi\,d\tau=\int(\hat{F}\psi)^*\phi\,d\tau$

则称 $\hat{F}$ 为厄米算符

(b) 厄米算符的本征值都是实数

proof：ψ,ϕ 为 $\hat{F}$ 的两个本征函数 $\hat{F}\psi=\lambda\psi$ $\hat{F}\phi=l\phi$

$$\int\psi^*\hat{F}\phi\,d\tau=\int(\hat{F}\psi)^*\phi\,d\tau=\int\lambda^*\psi^*\phi\,d\tau$$

$$\int\phi^*\hat{F}\psi\,d\tau=\int\lambda\phi^*\psi\,d\tau$$

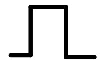
显然两者的结果是一致的 而其系数 $\lambda=\lambda^*$ 即 λ 为实数

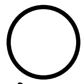
$\hat{F}$ 力学量有一系列本征值，本征值是实数，保证测量结果都是有物理意义的

§ 4.2 角动量问题

经典力学 量子物理

斜面 $\sqcup$ 束缚态

碰撞  散射态

圆周运动  角动量

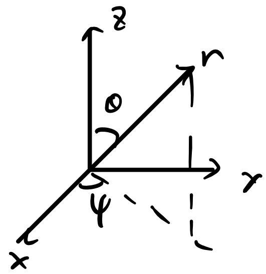
$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$ $\hat{L}=\vec{r}\times(-i\hbar\nabla)$

(1) 物理体系：量子物理中"圆周运动"即求解角动量算符问题

矢量 矢量微分

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

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



直角坐标系 → 球坐标系

$$\begin{cases}x=r\sin\theta\cos\varphi\\ y=r\sin\theta\sin\varphi\\ z=r\cos\theta\end{cases}$$

在球坐标下 可得 $\hat{L}_x$ $\hat{L}_y$ $\hat{L}_z$

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

$\hat{L}_z$ 算符(角动量 z 分量算符)代表

"粒子绕z轴圆周运动"

(2) 求解角动量 z 分量算符 $\hat{L}_z$ 问题

第1步 写下 $\hat{L}_z$ 的本征方程

$$\hat{L}_z\phi=\lambda\phi \qquad \text{即：} -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\phi=\lambda\phi$$

第2步 写下本征方程的通解

$$\phi=ce^{im\varphi} \qquad \lambda=m\hbar$$

第3步 根据边界条件定积分常数

周期性边条 $\phi(\varphi)=\phi(\varphi+2\pi)$

$$e^{im\varphi}=e^{im(\varphi+2\pi)}=e^{im\varphi}\cdot e^{im2\pi}$$

$$\therefore e^{im2\pi}=1 \qquad m=0,\pm1,\pm2\cdots$$

周期性归一化：$\int_0^{2\pi}|\phi|^2d\varphi=\int_0^{2\pi}|ce^{im\varphi}|^2d\varphi$ 得：$c=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

本征方程 $\hat{L}_z\phi=\lambda\phi$

本征值　$\lambda = m\hbar$　　$m=0,\pm1,\pm2\cdots$

本征函数　$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$　　$m=0,\pm1,\pm2\cdots$

量子数　m

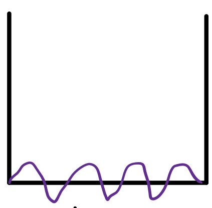
Dirahc 符号　$|m\rangle$ 代表状态

小结 (1) 思路

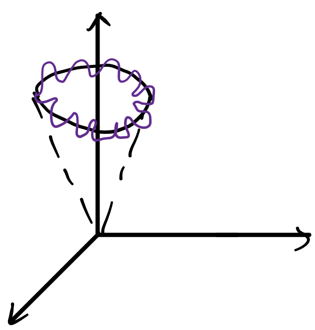
	能量问题	角动量问题
第1步	写下能量本征方程 $\hat{H}\Phi = E\Phi$	写下角动量本征方程 $\hat{L}_z \Phi = \lambda\Phi$
第2步	写下通解	写下通解
第3步	根据边界条件定常数	根据周期边界条件定常数

(2) 结果

能量本征值	E_n	角动量z分量本征值	$m\hbar$
能量本征函数	Φ_n	角动量z分量本征函数	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$
能量量子数	n	角动量z分量量子数	m
	$\|n\rangle$		$\|m\rangle$



$|n\rangle$



角动量z分量　$m\hbar$（不连续的）

测量第m个状态，得到角动量z分量为 $m\hbar$

(3) 求解一般角动量算符 $\hat{\vec{L}}$ 问题

量子物理 更关注 $\hat{\vec{L}}^2$（角动量平方算符）

经典力学	量子物理
$\frac{\vec{p}^2}{2m}$	$\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$
$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} \Rightarrow \vec{L}^2$	$\hat{\vec{L}} = \vec{r}\times\hat{\vec{p}} \Rightarrow \hat{\vec{L}}^2$

点乘 $\rightarrow$　$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$　　（矢量微分算符）

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

第1步　写下 $\hat{L}^2$ 的本征方程

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

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

2阶变系数微分方程

第2步　分离变量法写下φ的通解

$\phi=P(\theta)H(\varphi)$　　试探解

将试探解代入原方程

$$-\frac{H}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}\right)-\frac{1}{\sin^2\theta}P\frac{\partial^2 H}{\partial\varphi^2}=\lambda' PH$$

方程两边同除 $\frac{PH}{\sin^2\theta}$：　$-\frac{\sin\theta}{P}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}\right)-\frac{1}{H}\frac{\partial^2 H}{\partial\varphi^2}=\lambda'\sin^2\theta$

只含φ →　$-\frac{1}{H}\frac{\partial^2 H}{\partial\varphi^2}=\lambda'\sin^2\theta+\frac{\sin\theta}{P}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}\right)\triangleq m^2$　← 只含θ

因此 对两边分别求解：

$$\begin{cases}-\frac{1}{H}\frac{\partial^2 H}{\partial\varphi^2}=m^2 & \langle 1\rangle\\ \frac{\sin\theta}{P}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}\right)+\lambda'\sin^2\theta=m^2 & \langle 2\rangle\end{cases}$$

$\langle 1\rangle$ 二阶常系数常微分方程

通解：$H(\varphi)=ce^{im\varphi}$　　$\frac{\partial^2 H}{\partial\varphi^2}=-cm^2e^{im\varphi}=-m^2H$

第3步 根据边界条件确定常数

周期性边界条件　$c=H(0)=H(2\pi)=ce^{im2\pi}$

$m=0,\pm1,\pm2,\cdots$

周期性归一化 $\int_0^{2\pi}|H^2|d\varphi=1$　　$c=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$\langle 2\rangle$　$\frac{1}{P}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}\right)+\lambda'\sin^2\theta=m^2$

$$\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}\right)+\lambda'\sin^2\theta P=m^2P$$

$$\sin\theta\left(\cos\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}+\sin\theta\frac{\partial^2P}{\partial\theta^2}\right)+\lambda'\sin^2\theta P=m^2P$$

$$\sin^2\theta\frac{\partial^2P}{\partial\theta^2}+\sin\theta\cos\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}+(\lambda'\sin^2\theta-m^2)P=0$$

级数展开方法求解:　　　　（勒让德方程）

上述勒让德方程有解的充要条件:

$$\lambda'=l(l+1)\ ,\quad l=|m|,|m|-1,\cdots 0$$

其解为

$$P_l(\theta)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l(\cos^2\theta-1)^l}{d(\cos\theta)^l}$$　　（勒让德函数）

$$\phi(\theta,\varphi)=P(\theta)H(\varphi)=P_l(\theta)\ H_m(\varphi)$$

$$=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l(\cos^2\theta-1)^l}{d(\cos\theta)^l}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

因此定义球谐函数　$Y_{lm}=P_l(\theta)H_m(\varphi)$

l,m　量子数

l　角动量量子数

m　角动量z分量量子数

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

本征函数 $\phi(\theta,\varphi)=Y_{lm}=P_l(\theta)H_m(\varphi)$

小结:(1) 第1步:写下力学量本征方量　　$\hat{L}^2\phi=\lambda\phi$

第2步:写下通解　　分离变量法　$\phi=P(\theta)H(\varphi)$

第3步 根据边界条件定未知常数

$$\phi(\theta,\varphi)=Y_{lm}=P_l(\theta)H_m(\varphi)$$

(2)　角动量本征方程　$\hat{L}^2\phi=\lambda\phi$

角动量本征函数　$\phi(\theta,\varphi)=Y_{lm}=P_l(\theta)H_m(\varphi)$

角动量本征值 $\lambda_l = l(l+1)\hbar^2$

Dirac符号 $|lm\rangle$

测量第 lm 个本征函数 Y_{lm}

可得 角动量平方的结果 $l(l+1)\hbar^2$

作业题

2.1 证明 $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ (一般)

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi & \text{(定态)} \\ i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -E\psi^* \end{cases}$$

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}[\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi]$$

$$\frac{\partial \vec{J}}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\left[\frac{\partial\psi}{\partial t}\nabla\psi^* + \psi\nabla\frac{\partial\psi^*}{\partial t} - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\nabla\psi - \psi^*\nabla\frac{\partial\psi}{\partial t}\right]$$

$$= \frac{1}{2m}[E\psi\nabla\psi^* + \psi\nabla(-E\psi^*) + E\psi^*\nabla\psi - \psi^*\nabla E\psi] = 0$$

2.2 $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}[\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi]$

$$\psi = \frac{1}{r}e^{ikr}$$

$$\vec{J} = \frac{hk}{mr^2}\hat{e}_r$$

2.3
$$\begin{cases} \phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \\ E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \end{cases}$$

2.4 $\phi(x) = A\sin\left[\frac{n\pi}{2a}(x+a)\right]$ $-a<x<a$

$$\int_{-a}^{a}|\phi|^2 dx = \int_{-a}^{a}|A|^2\sin^2\left[\frac{n\pi}{2a}(x+a)\right] dx = 1$$

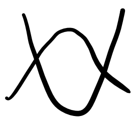
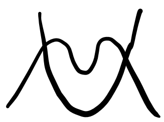
$$|A| = \frac{1}{\sqrt{2a}}$$

2.5 $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}\, 2\alpha x\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$

$$|\psi_1(x)|^2 = \frac{2\alpha^2}{\sqrt{\pi}} x^2 e^{-\alpha^2 x^2}$$

$$\frac{dP}{dx} = \frac{-4\alpha^4}{\sqrt{\pi}} x^3 e^{-\alpha^2 x^2} + \frac{4\alpha^2 x}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2} = 0$$

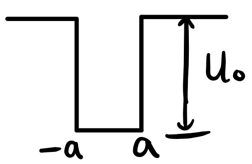
$\alpha^2 x^3 - x = 0$ $\quad x = 0$ 或 $\pm\frac{1}{\alpha}$

$n=0$  $n=1$ 

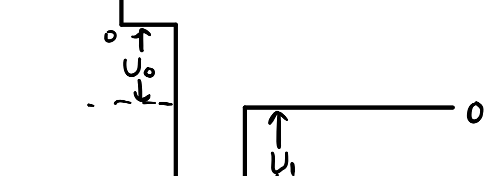
2.6 $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right]\varphi(x) = E\varphi(x)$

由于 $U(-x) = U(x)$

$\varphi(-x)$ 也是上述方程解 即：$\varphi(x)$ $\varphi(-x)$ 都上述方程的解

2.7 

1. 分区域写下定态薛定谔方程
2. 通代
3. 根据边界条件确定未知常数

2.8 

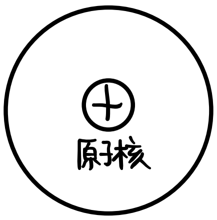
$0<x<a \quad [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U_0]\phi=E\phi$

$a<x<b \quad [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-U_1]\phi=E\phi$

$x>b \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi=E\phi$

§4.3 中心势场问题 氢原子问题

(1) 物理体系



先考虑角动量 $\hat{L}$

考虑能量/哈密顿量 $\hat{H}$

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+U(\vec{r})$$

原子核电荷数

$$=-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

球坐标下：$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{r}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$

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

$$\therefore \nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})-\frac{1}{r^2\hbar^2}\hat{L}^2$$

$$-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2$$

动能项　　只含r（径向运动）　　只含θ,φ（角向运动）

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})]+\frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

势能项

第1步　写下定态薛定谔方程

$\hat{H}\phi=E\phi$　　（二阶变系数偏微分方程）

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}]\phi=E\phi$$

第二步　写下方程通解

分离变量法 $\quad \Phi = \underbrace{R(r)}\,\underbrace{Y(\theta,\varphi)}$

猜测 （径向r待定）（角向θ,φ就是$\hat{L}^2$的本征函数 → 球谐函数）

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 R'(r)\right)Y(\theta,\varphi)\right] + \frac{R(r)}{2mr^2}\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}R(r)Y(\theta,\varphi) = E R(r)Y(\theta,\varphi)$$

方程两边同除 RY：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{1}{2mr^2}\frac{1}{Y}\hat{L}^2 Y - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} = E$$

方程两边同乘 $2mr^2$

$$\frac{1}{Y}\hat{L}^2 Y = \frac{\hbar^2}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{2mr}{4\pi\varepsilon_0}Ze^2 + 2mr^2E$$ $= 常数 \triangleq \lambda$

给 θ,φ　　　给 r

$$\begin{cases} \hat{L}^2 Y = \lambda Y & \text{<1> 角向方程} \\[2ex] \frac{\hbar^2}{2mr^2R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} + E = \frac{\lambda}{2mr^2} & \text{<2> 径向方程} \end{cases}$$

第3步　根据边界条件定积分常数

<1> 角向方程就是角动量平方算符的本征方程

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 　本征函数

$\lambda = l(l+1)\hbar^2$ 　本征值

<2> 径向方程 　二阶变系数常微分方程

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} + E - \frac{1}{2mr^2}l(l+1)\hbar^2 = 0$$

变量代换 　$U = Rr$（径向波函数变换）　$\rho = \alpha r$（坐标r变换）　$\alpha = \sqrt{\frac{8mE}{\hbar^2}}$（能量E变换）　$\beta = \frac{2mZe^2}{4\pi\varepsilon_0\alpha\hbar^2}$（各种常数）

上述方程化简为

$$\frac{d^2\bar{U}}{d\rho^2}+[\frac{1}{4}+\frac{\beta}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}]\bar{U}=0$$

当ρ很大时 $\frac{d^2\bar{U}}{d\rho^2}-\frac{1}{4}\bar{U}=0$ $\quad \bar{U}=e^{-\frac{1}{2}\rho}$

当ρ很小时 $\frac{d\bar{U}}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\bar{U}=0$ $\quad \bar{U}=\rho^{l+1}$

一般解 ←试探解 $\bar{U}=e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^{l+1}\bar{V}(\rho)$

代入原方程: $\frac{d^2\bar{V}}{d\rho^2}+[\frac{2l(l+1)}{\rho}-1]\frac{d\bar{V}}{d\rho}+\frac{\beta-(l+1)}{\rho}\bar{V}=0$ (勒盖尔方程)

级数展开法:

方程有解的充分条件 $\beta=n$ 时 有解

其解为 $\bar{V}(\rho)=\frac{e^{\rho}}{(n-l-1)!\,\rho^{2l+1}}\frac{d^{n-l-1}}{d\rho^{n-l-1}}(\frac{\rho^{n+l}}{e^{\rho}})$ (勒盖尔函数)

综上: $\hat{H}\phi=E\phi$

能量本征函数 $\phi=RY=\frac{\bar{U}}{r}\bar{Y}=\frac{e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^{l+1}}{r}Y_{lm}$

$$=\frac{e^{-\frac{1}{2}\rho}e^{\rho}}{r(n-l-1)!\,\rho^{l}}\frac{d^{n-l-1}}{d\rho^{n-l-1}}(\frac{\rho^{n+l}}{e^{\rho}})Y_{lm}$$

$Y_{lm}=P(\theta)H(\varphi)=P(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$

$$=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l(\cos^2\theta-1)^l}{d(\cos\theta)^l}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

$$\therefore \phi=\frac{e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^{l+1}}{r}\frac{e^{\rho}}{(n-l-1)!\,\rho^{2l+1}}\frac{d^{n-l-1}}{d\rho^{n-l-1}}(\frac{\rho^{n+l}}{e^{\rho}})\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l(\cos^2\theta-1)^l}{d(\cos\theta)^l}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

小结: (1) 思路

第1步 写下能量本征方程(定态薛定谔方程)

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

径向运动 角向运动 势能

第2步 写下方程的通解

$\phi = \overset{\text{径向}}{R(r)}\ \overset{\text{角向}}{Y(\theta,\varphi)}$

径向方程 角向方向

第3步 根据边条定解

$Y(\theta,\varphi)$ 球谐函数

$U = R\cdot r$ 变量代换 $U = \rho$很大 $\cdot\ \rho$很小 $\cdot\ V$

↓

$\phi = \frac{1}{r}\cdot\rho$很大 $\cdot\ \rho$很小 $\cdot\ V_{nl}\ Y_{lm} = R_{nl}\ Y_{lm}$

(2) 能量本征函数 $\hat{H}\phi = E\phi$

$\phi_{nlm} = R_{nl}\ Y_{lm} = \overset{\text{径向}}{R_{nl}(r)}\ \overset{\text{角向}}{Y_{lm}(\theta,\varphi)}$

只要知道 nl 就知道 径向 R_{nl}
只要知道 lm 就知道 角向 Y_{lm}

Dirac符号 $|nlm\rangle$

能量量子数 n
角动量量子数 l
磁量子数(角动量z分量量子数) m

波函数 $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$

$|\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 \quad r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$

该点处找到粒子几率 小体积元

全空间 $\iiint |\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi = 1$ 波函数归一性

在空间 径向r处 找到粒子的几率

$P_r = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 \sin\theta \; d\theta \, d\varphi$ （体积中角向部分积分）

在空间方位角(θ,φ)找到粒子的几率

$P_{\theta\varphi} = \int_0^{+\infty} |\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 \, r^2 dr$ （体积中径向部分积分）

径向 $P_r = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 \sin\theta \; d\theta \, d\varphi$

$= \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |R_{nl}|^2 |Y_{lm}|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \sim |R_{nl}|^2$

$n=1$ $l=0$ 1个球壳 $n=2$ $l=0$ 2个球壳

近似认为电子绕着氢原子核转，有n个“轨道”——电子云

电子绕道氢原子核运动，是以几率分布

出现在氢原子周围，像一团电子云，几率高的地方形成“轨道”

角向 $P_{\theta\varphi} = \int_0^{+\infty} |\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 r^2 dr$

$= \int_0^{+\infty} |R_{nl}|^2 |Y_{lm}|^2 r^2 dr \sim |Y_{lm}|^2$

$l=0$ $m=0$ 1个球壳 s电子云

$l=1$ $m=0,\pm1$ 3个纺锤型 p电子云

$l=2$ $m=0,\pm1,\pm2$ 5个

(3) $\hat{H}\psi = E\psi$

能量本征函数 ψ_{nlm}

能量本征值 E_n

径向方程变量代换 $\rho = \alpha r$、$\alpha = \sqrt{\frac{8mE}{\hbar^2}}$、$\beta = \frac{2mZe^2}{4\pi\varepsilon_0 \alpha \hbar^2}$

当且仅当 $\beta = n$ 时 有解

$2mZe^2 = n\, 4\pi\varepsilon_0 \sqrt{\frac{8mE}{\hbar^2}}\,\hbar^2$

$$\sqrt{E} = \frac{2mZe^2}{4n\pi\varepsilon_0 2\sqrt{2}\sqrt{m}\hbar} \Rightarrow E_n = \frac{\overset{\text{电子质量}}{m} Z^2 e^{4} \rightarrow \text{基本电荷}}{32 n^2\pi^2 \underset{\text{真介电}}{\varepsilon_0^2} \hbar^2} \propto \frac{1}{n^2}$$

当n_1能级跃迁到n_2能级：

$$\Delta E = E_{n_1} - E_{n_2} = \frac{4m^2Z^2e^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{8m}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$ 以光波的形式

$$h\nu = \Delta E \qquad \nu = R_H\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$ 巴尔末公式 与实验完全符合

(4) 测量第 nlm 个 波函数 得到他的能量 E_n

$$\psi_{nlm} = R_{nl} Y_{lm}$$

角向部分是球谐函数，就是角动量平方 $\hat{L}^2$ 的本征函数

⊗ $\hat{L}^2 \psi_{nlm} = \hat{L}^2 R_{nl} Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 R_{nl} Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 \psi_{nlm}$

$(\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm})$

$$\hat{L}^2 \psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2 \psi_{nlm}$$

ψ_{nlm} 也是 $\hat{L}^2$ 的本征函数

⊗ $\psi_{nlm} = R_{nl} Y_{lm} = R_{nl} P(\theta) H(\varphi)$

$\hat{L}_z \psi_{nlm} = \hat{L}_z R_{nl} P(\theta) H(\varphi) = \hat{L}_z R_{nl} P(\theta) e^{im\varphi} = m\hbar R_{nl} P(\theta) e^{im\varphi}$

$(\hat{L}_z \Phi = m\hbar \Phi \qquad \Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi})$

$$\hat{L}_z \psi_{nlm} = m\hbar \psi_{nlm}$$

ψ_{nlm} 也是 角动量z分量的本征函数

因此：ψ_{nlm} 是能量 $\hat{H}$ 角动量平方 $\hat{L}^2$ 和角动量z分量 $\hat{L}_z$ 三个力学量的共同本征函数

$$\begin{cases} \hat{H} \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm} \\ \hat{L}^2 \psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2 \psi_{nlm} \end{cases}$$

$\hat{L}_z \psi_{nlm} = m\hbar \psi_{nlm}$

原因：$\hat{H}$ = 径向运动 + 角向运动

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

原运动包含角向 $\hat{L}^2$ $\hat{L}_z$ 运动

$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) \underbrace{Y_{lm}(\theta,\varphi)}$ ← $\hat{L}^2$ 本征函数

$= R_{nl}(r) \; P(\theta) \; \underbrace{e^{im\varphi}}$ ← $\hat{L}_z$ 本征函数

测量第 nlm 个本征函数 ψ_{nlm} 得到

能量结果 E_n

角动量结果 $l(l+1)\hbar^2$

角动量 z 分量结果 $m\hbar$

§4.4 本征函数的性质

(1) 正交性

有两个波函数 $\psi \cdot \phi$ 如果满足 $\int \phi^* \psi \, d\tau = 0$

则称两个波函数是正交的

性质：力学量算符 $\hat{F}$ 的任意两个具有不同本征值的本征函数一定正交

证明：$\hat{F}\phi_1 = \lambda_1 \phi_1$ $\quad (\hat{F}\phi_1)^* = \lambda_1 \phi_1^*$

$\hat{F}\phi_2 = \lambda_2 \phi_2$

$$\int \phi_1^* \hat{F} \phi_2 \, d\tau = \lambda_2 \int \phi_1^* \phi_2 \, d\tau$$

所有力学量算符都是厄米算符

$$\int \phi_1^* \hat{F} \phi_2 d\tau = \int (\hat{F}\phi_1)^* \phi_2 \, d\tau = \lambda_1^* \int \phi_1^* \phi_2 d\tau = \lambda_1 \int \phi_1^* \phi_2 \, d\tau$$

$$\therefore \begin{cases} \lambda_1 \int \phi_1^* \phi_2 d\tau = \lambda_2 \int \phi_1^* \phi_2 d\tau \\ \lambda_1 \neq \lambda_2 \end{cases} \Rightarrow \int \phi_1^* \phi_2 d\tau = 0$$

例：无限深势阱 $\phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi x}{a})$

$$\int_0^a \phi_m^* \phi_n dx = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m=n \\ 0 & m\neq n \end{cases}$$

谐振子 $\phi_n = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H(\xi) \quad \xi = \alpha x$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_m^* \phi_n dx = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m=n \\ 0 & m\neq n \end{cases}$$

角动量z分量 $\phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

$$\int_0^{2\pi} \phi_m^* \phi_n d\varphi = \delta_{mn}$$

角动量 $Y_{lm} = P_l(\theta) H(\varphi)$

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

中心势场氢原子 $\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \psi_{nlm}^* \psi_{n'l'm'} r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

小结：对于任意一个力学量 $\hat{F}$

总有 $\int \phi_m^* \phi_n d\tau = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m=n & \text{归一性} \\ 0 & m\neq n & \text{正交性} \end{cases}$

满足正交归一性

(2) 完备性：一个力学量 $\hat{F}$ 的本征函数 ϕ_n 它们是正交归一的

因此他们构成函数空间的一组基，可以展开表示空间中任意波函数

$$\psi = \sum_n C_n \phi_n$$

(是波函数态叠加原理的另一种数学表示)

展开系数 C_n 也被称为波函数在基矢上投影

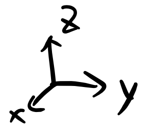
$$\psi=\sum_n C_n\phi_n$$

对于上式两边同时乘以 ϕ_m^* 并做积分

$$\int\psi\phi_m^*\,d\tau=\sum_n\int C_n\phi_n\phi_m^*\,d\tau=\sum_n C_n\delta_{nm}=C_m$$

叠加系数 $C_n=\int\phi_n^*\psi\,d\tau$ （向第 n 个基矢投影）

例：三维线性空间



（与波函数空间类比）

三个基矢 $\vec{i}=(1,0,0)$ $\vec{j}=(0,1,0)$ $\vec{k}=(0,0,1)$ （看作方向的本征矢）

满足正交归一性

完备性：三维线性空间 任一矢量一定可以用三个基矢叠加表示

$$\vec{r}=x\vec{i}+y\vec{j}+z\vec{k}=\vec{x}+\vec{y}+\vec{z}=(x,y,z)$$

其在某一坐标轴上的投影就是展开系数（$x=\vec{r}\cdot\vec{i}$ $y=\vec{r}\cdot\vec{j}$ $z=\vec{r}\cdot\vec{k}$）

小结：量子物理内容

力学量算符 $\hat{F}$ → 本征方程 $\hat{F}\phi=\lambda\phi$
本征函数 ϕ_n
本征值 λ_n
→ 测量第 k 个本征函数得到测量结果 λ_k

→ 力学量算符都是厄米算符
$\int\psi^*\hat{F}\phi\,d\tau=\int(\hat{F}\psi)^*\phi\,d\tau$
→ 厄米算符本征值都是实数 → 测量结果有意义

→ 本征函数满足正交归一性
$\int\phi_m^*\phi_n\,d\tau=\delta_{mn}$
→ 本征函数满足完备性
$\psi=\sum_n C_n\phi_n$
（态叠加原理准确描述）
→ $C_n=\int\phi_n^*\psi\,d\tau$
展开系数为波函数在基矢上投影

→ n维线性空间 → 整个量子物理就是希尔伯特空间中的线性代数问题

希尔伯特空间

(3) 平均值

(任一波函数) $\psi = \sum_n C_n \phi_n$

$= C_1\phi_1 + C_2\phi_2 + \cdots C_n\phi_n$

测量	结果	几率
ϕ_1	λ_1	$\lvert C_1\rvert^2$
ϕ_2	λ_2	$\lvert C_2\rvert^2$
$\vdots$		$\vdots$
ϕ_n	λ_n	$\lvert C_n\rvert^2$

有一系列测量结果

得到平均值公式：

$$\bar{\lambda} = \sum_n |C_n|^2 \lambda_n$$

* $\bar{F} = \bar{\lambda} = \int \psi^* \hat{F} \psi \, d\tau$

证明：

$$\int \psi^* \hat{F} \psi = \int \left(\sum_m C_m \phi_m\right)^* \hat{F} \left(\sum_n C_n \phi_n\right) d\tau$$

$$= \sum_m \sum_n \int C_m^* \phi_m^* \hat{F} C_n \phi_n \, d\tau$$

$$= \sum_m \sum_n C_m^* C_n \int \phi_m^* \hat{F} \phi_n \, d\tau$$

$$= \sum_m \sum_n C_m^* C_n \int \lambda_n \phi_m^* \phi_n d\tau$$

$$= \sum_m \sum_n C_m^* C_n \lambda_n \delta_{mn}$$

$$\bar{\lambda} = \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau = \sum_n C_n^* C_n \lambda_n = \sum_n |C_n|^2 \lambda_n$$

例：在 $t=0$ 时刻氢原子的波函数为 $\psi(\vec{r},0) = \frac{1}{\sqrt{10}}[2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1}$

问(1) t 时刻的波函数是多少

(2) t 时刻测量体系的角动量为 $2\hbar^2$ 角动量z分量 $\hbar$ 的几率

(3) t 时刻能量平均值是多少

解： $\psi(\vec{r},0)=\frac{2}{\sqrt{10}}\psi_{100}+\frac{1}{\sqrt{10}}\psi_{210}+\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{10}}\psi_{211}+\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{10}}\psi_{21-1}$

ψ_{nlm} 是氢原子本征函数

(1) t时刻 $\psi(\vec{r},t)=\frac{2}{\sqrt{10}}e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}\psi_{100}+\frac{1}{\sqrt{10}}e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}\psi_{210}+\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{10}}e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}\psi_{211}$

$+\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{10}}e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}\psi_{21-1}$

(2) t时刻测量

	能量	角动量	角动量z分量	几率
ψ_{100}	E_1	0	0	$\frac{4}{10}$
ψ_{210}	E_2	$2\hbar^2$	0	$\frac{1}{10}$
ψ_{211}	E_2	$2\hbar^2$	$\hbar$	$\frac{2}{10}$
ψ_{21-1}	E_2	$2\hbar^2$	$-\hbar$	$\frac{3}{10}$

∴ 测量到 ψ_{211} 几率为 $\frac{2}{10}$

(3)

$$\bar{E}=|C_1|^2E_1+(|C_2|^2+|C_3|^2+|C_4|^2)E_2$$

$$=\frac{4}{10}E_1+\frac{6}{10}E_2$$

§ 4.5 力学量算符性质

(1) 对易性 (Dirac 算号)

对于任意两个力学量算符 $\hat{F}$ $\hat{G}$，定义两者的对易子 $[\hat{F},\hat{G}]=\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}$

如果 $[\hat{F},\hat{G}]=0$ 则称两个力学量对易

如果 $[\hat{F},\hat{G}]\neq 0$ 则称两个力学量不对易

例 1. 一维坐标算符 $\hat{x}=x$ 动量算符 $-i\hbar\frac{d}{dx}$

$[\hat{x},\hat{p}]=\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}$

对易子是针对任意波函数 ψ 都成立的

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi = \hat{x}\hat{p}\psi - \hat{p}\hat{x}\psi$$
$$= x(-i\hbar\frac{d}{dx})\psi + i\hbar\frac{d}{dx}(x\psi)$$
$$= -i\hbar x\frac{d}{dx}\psi + i\hbar\frac{d}{dx}\psi\cdot x + i\hbar\psi$$
$$= i\hbar\psi$$

即对易子 $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$

而在经典力学 $[x,p] = 0$

例2. 对于 $\hat{L}_x$ $\hat{L}_y$ $\hat{L}_z$

$[\hat{L}_x,\hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ $[\hat{L}_y,\hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$ $[\hat{L}_z,\hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$

例3. 氢原子能量 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{ze^2}{r}$

角动量 $\hat{L}^2$

角动量z分量 $\hat{L}_z$

$[\hat{H},\hat{L}^2]=0$ $[\hat{H},\hat{L}_z]=0$ $[\hat{L}^2,\hat{L}_z]=0$

(2) 当两个力学量算符对易时，它们有共同本征函数（本征值不同）

当两个力学量算符有共同本征函数，则它们是对易的

证明：设 $\hat{F}\phi = \lambda\phi$ $\hat{G}\phi = l\phi$ 本征方程

λ_n l_n 本征值

ϕ_n ϕ_n 本征函数

$$[\hat{F},\hat{G}]\psi = [\hat{F},\hat{G}]\sum_n c_n\phi_n$$
$$= (\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F})\sum_n c_n\phi_n$$
$$= \sum_n \hat{F}\hat{G}c_n\phi_n - \sum_n \hat{G}\hat{F}c_n\phi_n$$
$$= \sum_n \hat{F}c_n l_n\phi_n - \sum_n \hat{G}c_n\lambda_n\phi_n$$
$$= \sum_n c_n\lambda_n l_n\phi_n - \sum_n c_n l_n\lambda_n\phi_n$$
$$= 0$$

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

例，氢原子 $\hat{H}$、$\hat{L}^2$、$\hat{L}_z$ 有共同本征函数

$$\hat{H}\psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm}$$
$$\hat{L}^2 \psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2 \psi_{nlm}$$
$$\hat{L}_z \psi_{nlm} = m\hbar \psi_{nlm}$$
$$\psi_{nlm} = R_{nl} Y_{lm} = R_{nl} P_l(\theta) e^{im\varphi}$$

小结：当两个力学量算符 $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$ 对易，则它们有共同本征函数

(3) 当两个力学量算符不对易时，它们无共同本征函数

衡量两者之间的差距

力学量算符	$\hat{F}$	$\hat{G}$
平均值	$\overline{F}$	$\overline{G}$
方差	$\Delta\hat{F} = \hat{F} - \overline{F}$	$\Delta\hat{G} = \hat{G} - \overline{G}$

衡量两个力学量的方差 $\Delta\hat{F}$ $\Delta\hat{G}$

$$I(\xi) = \int \left|(\xi \Delta\hat{F} - i\Delta\hat{G})\psi\right|^2 d\tau$$

ξ关系式　　拉格朗日乘子法

$$= \int (\xi\Delta\hat{F} - i\Delta\hat{G})^* \psi^* (\xi\Delta\hat{F} - i\Delta\hat{G})\psi \, d\tau$$

$$= \int (\xi \Delta\hat{F}\psi^* + i\Delta\hat{G}\psi^*)(\xi\Delta\hat{F}\psi - i\Delta\hat{G}\psi)\, d\tau$$

$$= \int [\xi^2 \Delta\hat{F}\psi^* \Delta\hat{F}\psi - i\xi\Delta\hat{F}\psi^* \Delta\hat{G}\psi + i\xi\Delta\hat{G}\psi^* \hat{F}\psi + \Delta\hat{G}\psi^* \Delta\hat{G}\psi]\, d\tau$$

$$= \xi^2 \int \psi^* (\Delta\hat{F})^2 \psi \, d\tau - i\xi \int \psi^* (\Delta\hat{F}\Delta\hat{G})\psi\, d\tau$$

$$+ i\xi \int \psi^* (\Delta\hat{G}\Delta\hat{F})\psi\, d\tau + \int \psi^* (\Delta\hat{G})^2 \psi\, d\tau$$

$$I(\xi) = \xi^2 \overline{(\Delta\hat{F})^2} - i\xi(\overline{\Delta\hat{F}\Delta\hat{G}} - \overline{\Delta\hat{G}\Delta\hat{F}}) + \overline{(\Delta\hat{G})^2}$$

令 $\overline{(\Delta\hat{F})^2} = a$　　$\overline{(\Delta\hat{G})^2} = c$

$$\Delta\hat{F}\Delta G - \Delta\hat{G}\Delta\hat{F} = [\Delta\hat{F}, \overline{\Delta\hat{G}] = ib}$$

$$\therefore -i\xi(\overline{\Delta\hat{F}\Delta\hat{G}} - \overline{\Delta\hat{G}\Delta\hat{F}}) = -i\xi\overline{[\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}]} = -i\xi ib = b\xi$$

$\therefore I(\xi) = a\xi^2 + b\xi + c$　　恒大于等于0（模平方）

充要条件：　$b^2 < 4ac$

因此　　　$b^2 \leq 4\,\overline{(\Delta\hat{F})^2}\;\overline{(\Delta\hat{G})^2}$

$$[\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}] = [\hat{F} - \overline{F}, \hat{G} - \overline{G}] = [\hat{F}, \hat{G}] = ib$$

例：　坐标 $\hat{x}$　　动量 $\hat{p}$

$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar = ib$

$\therefore \overline{(\Delta\hat{x})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{p})^2} \geq \dfrac{\hbar^2}{4}$

$$\overline{\Delta\hat{x}} \cdot \overline{\Delta\hat{p}} \geq \frac{\hbar}{2}$$

位移测量差　动量测量差

小结：当两个力学量 $[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$ 时，一定有不确定关系　$\overline{(\Delta\hat{F})^2}\;\overline{(\Delta\hat{G})^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$

$[\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}] = [\hat{F}, \hat{G}] = ib$　　　$\overline{\Delta\hat{x}} \cdot \overline{\Delta\hat{p}} \geq \frac{\hbar}{2}$

Outline　　量子物理的基本现象

↓

量子物理基本理论

{ 状态：波函数 ψ

力学量：算符 $\hat{F}$

规律：叠加态原理

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

一维问题

- 无限深势阱
- 谐振子

三维问题

- 角动量
- 氢原子

力学量算符 $\hat{F}$ 厄米算符

- 本征方程 $\hat{F}\phi=\lambda\phi$
- 本征值 λ_n
- 本征函数 ϕ_n

n维线性空间上的代数问题

本征函数

- 正交归一性 $\int\phi_m^*\phi_n\,d\tau=\delta_{mn}$
- 完备性 $\psi=\sum_n c_n\phi_n$

- $[\hat{F},\hat{G}]=0$ 对易 有共同本征函数
- $[\hat{F},\hat{G}]\neq0$ 不对易 $\overline{(\Delta\hat{F})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{G})^2}\geq\frac{\hbar^2}{4}$