Ⅲ. 连续谱本征函数的“归一化”

A. 连续谱本征函数“归一化”

1. 本征函数，本征谱

φ_n A_n（取分立值） φ_λ λ（取连续值）

2. 任一波函数可按其展开

$$\psi(x) = \sum_m c_m \varphi_m(x) \qquad \psi(x) = \int c_{\lambda'} \varphi_{\lambda'} d\lambda'$$

$$c_n = \int \varphi_n^* \psi dx \qquad c_\lambda = \int \varphi_\lambda^* \psi dx$$

（φ_n 已归一化）　　（φ_λ 已归一化）

3. 连续谱本征函数"归一化"

$$c_n = \sum_m c_m \int \varphi_n^* \varphi_m dx \qquad \int \varphi_n^* \varphi_m dx = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ 1 & n = m \end{cases}$$

$$c_\lambda = \int c_{\lambda'} \left(\int \varphi_\lambda^* \varphi_{\lambda'} dx \right) d\lambda'$$

$$\int \varphi_\lambda^* \varphi_{\lambda'} dx = \begin{cases} 0 & \lambda' \neq \lambda \\ \infty & \lambda' = \lambda \end{cases}$$

所以，$\int \varphi_\lambda^* \varphi_{\lambda'} dx$ 是一“奇异函数”。

我们引入一个奇异函数，即 $\delta(x)$ ，其定义

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0 & x - x_0 \neq 0 \\ \infty & x - x_0 = 0 \end{cases}$$

以及

$$\int_a^b f(x)\delta(x-x_0)dx = \begin{cases} f(x_0) & a < x_0 < b \\ 0 & (a,b) \notin x_0 \end{cases}$$

因此，如

$$\int \varphi_\lambda^* \varphi_{\lambda'} dx = \delta(\lambda - \lambda'),$$

则

$$\int c_{\lambda'}\left(\int \varphi_\lambda^* \varphi_{\lambda'} dx\right)d\lambda' = \int c_{\lambda'}\delta(\lambda-\lambda')d\lambda' = c_\lambda$$

这就保证获得我们所需结果。

所以，连续谱“归一化”的本征函数 φ_λ 应使其有

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

例1 求“正交归一”的动量本征函数

设：$\psi(x)$ 是平方可积，即可进行傅里叶展开

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int F(k') e^{ik'x} dk'$$

$$F(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-ikx}\psi(x)dx$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int F(k')e^{i(k'-k)x}dxdk'$$

于是应有

$$\mathbf{F(k)=\int F(k')\delta(k'-k)dk'}$$

所以，

$$\frac{1}{2\pi}\int e^{i(k'-k)x}dx=\delta(k'-k)$$

“正交归一”的动量本征函数为

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

事实上，由于物理波函数在无穷远为 0

$$(u_k, u_{k'}) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon \to 0^+} \int e^{i(k'-k)x - \varepsilon|x|} dx$$

$$= \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon \to 0^+} [\int_0^{+\infty} e^{i(k'-k)x - \varepsilon x} dx + \int_{-\infty}^{0} e^{i(k'-k)x + \varepsilon x} dx]$$

$$=\frac{1}{2\pi}\lim_{\varepsilon\to0^+}\left[\frac{-1}{i(k'-k)-\varepsilon}+\frac{1}{i(k'-k)+\varepsilon}\right]$$

$$=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to0^+}\left[\frac{\varepsilon}{(k'-k)^2+\varepsilon^2}\right]$$

$$=\delta(k'-k)$$

于是有 $$u_k(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\lim_{\varepsilon\to0^+}e^{ikx-\varepsilon|x|/2}$$

例2 求"正交归一"的坐标本征函数

由坐标本征方程

$$\hat{x}\varphi_{x'}(x) = x'\varphi_{x'}(x)$$

$\hat{x}$ 的"正交归一"的坐标本征函数为

$$\varphi_{x'}(x) = \delta(x - x')$$

它是完备的：$\psi(x) = \int \psi(x')\delta(x' - x)dx'$

4．因

$$\overline{\hat{A}} = \sum_n A_n |c_n|^2$$

$|c_n|^2$ 表示在态 $\psi(x)$ 中测量力学量 $\hat{A}$ 取 A_n 的概率。

而由

$$\overline{\lambda} = \int \psi^*(x)\hat{\lambda}\psi(x)dx$$

$$= \int \int c_\lambda^* \varphi_\lambda^* d\lambda \hat{\lambda} \int c_{\lambda'} \varphi_{\lambda'} d\lambda' dx$$

$$= \int c_{\lambda}^{*} c_{\lambda'} \lambda' \varphi_{\lambda}^{*} \varphi_{\lambda'} dx d\lambda d\lambda'$$

$$= \int c_{\lambda}^{*} c_{\lambda'} \lambda' \delta(\lambda - \lambda') d\lambda d\lambda'$$

$$= \int \lambda |c_{\lambda}|^{2} d\lambda$$

由这可见（如 $\psi(x)$ 已归一化），$|c_{\lambda}|^{2} d\lambda$ 为测量 $\hat{\lambda}$ 取值在区域 $\lambda - \lambda + d\lambda$ 中的概率

Delta函数性质
详见程老师课件

↑ C. 本征函数的封闭性

已经讨论过厄密算符本征态的正交、归一和完备性，即

$$(u_n, u_m) = \delta_{nm}$$ （正交，归一）

$$\psi = \sum_n c_n u_n$$ （完备）

对于连续谱 $$(\varphi_\lambda, \varphi_{\lambda'}) = \delta(\lambda - \lambda')$$

$$\psi(x) = \int c_\lambda \varphi_\lambda d\lambda$$

下面我们来讨论**本征函数的封闭性**

$$\psi(x) = \sum_n c_n u_n(x) \qquad c_n = \int u_n^*(x')\psi(x')dx'$$

u_n已归一化

所以

$$\psi(x) = \int \left(\sum_n u_n(x) u_n^*(x') \right) \psi(x') dx'$$

由此可见，

$$\sum_n u_n(x) u_n^*(x') = \delta(x - x')$$

上述表示式称为本征函数的封闭性，

它表明本征函数组可构成一 δ 函数

例1 $\hat{L}_z$ 的本征函数

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \cdots$$

有 $$\sum_m \psi_m(\phi)\psi_m^*(\phi') = \delta(\phi - \phi')$$

即 $$\frac{1}{2\pi}\sum_m e^{im(\phi-\phi')} = \delta(\phi - \phi')$$

另一形式：$\frac{1}{2l}\sum_m e^{i\frac{\pi}{l}(x-x')m} = \delta(x-x')$　　$\phi = \frac{\pi}{l}x$

例2　$\hat{p}_x$ 的本征函数

$$\psi_{p_x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_x x/\hbar}$$

$$\int \psi_{p_x}(x)\psi^*_{p_x}(x')dp_x = \delta(x-x')$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{ip_x(x-x')/\hbar}dp_x = \delta(x-x')$$

1. 封闭性是正交、归一的本征函数完备性的充分必要条件。

若

φ_n 是完备的 $\xrightarrow{\text{必有}}$ 封闭性（必要条件）

有封闭性 $\xrightarrow{\text{则是}}$ 完备的（充分条件）

a．必要条件已证过

b．充分条件：

有封闭性:

$$\sum_m \varphi_m(x)\varphi_m^*(x') = \delta(x-x')$$

$$\psi(x) = \int \delta(x-x')\psi(x')dx'$$

$$= \int \sum_m \varphi_m(x)\varphi_m^*(x')\psi(x')dx'$$

$$= \sum_m c_m \varphi_m(x)$$

2. 本征函数的封闭性也可看作 $\delta(x)$ 函数按本征函数展开，而展开系数恰为本征函数的复共轭。

$$\delta(x - x') = \sum_n c_n^{x'} \varphi_n(x)$$

$$c_n^{x'} = \int \varphi_n^*(x)\delta(x - x')dx = \varphi_n^*(x')$$

$$\delta(x - x') = \sum_n \varphi_n(x)\varphi_n^*(x')$$

Ⅳ．算符的共同本征函数

一次测量有一“涨落”

$$\Delta A = \sqrt{\overline{\Delta \hat{A}^2}} = \sqrt{(\psi, \Delta \hat{A}^2 \psi)} = \sqrt{(\psi, (\hat{A} - \overline{\hat{A}})^2 \psi)}$$

两个算符，在一个态中，一般都有涨落，$\overline{\Delta \hat{A}^2}$ ，$\overline{\Delta \hat{B}^2}$ 不同时为零。在什么条件下，$\hat{A}$，$\hat{B}$ 有共同本征函数组

↑

A. 算符“涨落”之间的关系

1. Schwartz不等式

如果 ψ_1, ψ_2 是任意两个平方可积的波函数，则

$$(\psi_1,\psi_1)(\psi_2,\psi_2) \ge |(\psi_1,\psi_2)|^2$$

证：令

$$\psi_3 = \psi_2 - \psi_1 \frac{(\psi_1,\psi_2)}{(\psi_1,\psi_1)}$$

而

$$(\psi_3,\psi_3)=\left(\psi_2-\psi_1\frac{(\psi_1,\psi_2)}{(\psi_1,\psi_1)},\psi_2-\psi_1\frac{(\psi_1,\psi_2)}{(\psi_1,\psi_1)}\right)\geq 0$$

得

$$(\psi_2,\psi_2)-(\psi_2,\psi_1)\frac{(\psi_1,\psi_2)}{(\psi_1,\psi_1)}-\frac{(\psi_1,\psi_2)^*}{(\psi_1,\psi_1)}(\psi_1,\psi_2)$$

$$+\left(\frac{(\psi_1,\psi_2)^*}{(\psi_1,\psi_1)}\frac{(\psi_1,\psi_2)}{(\psi_1,\psi_1)}(\psi_1,\psi_1)\right)\geq 0$$

从而证得:

$$(\psi_1,\psi_1)\cdot(\psi_2,\psi_2)\geq|(\psi_2,\psi_1)|^2$$

2．算符“涨落”之间的关系－不确定

关系：

$$\overline{\Delta\hat{A}^2}\cdot\overline{\Delta\hat{B}^2}\geq\frac{1}{4}\left|\int\psi^*[\hat{A},\hat{B}]\psi dx\right|^2$$

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

证明： 如令

$$\psi_1=(\hat{A}-\overline{A})\psi \qquad \psi_2=(\hat{B}-\overline{B})\psi$$

$$\left|(\psi_1,\psi_2)\right|^2$$

$$\geq\left|\frac{1}{2i}\left[(\psi_1,\psi_2)-(\psi_2,\psi_1)\right]\right|^2$$

$$=\left|\frac{1}{2i}\left[\left((\hat{A}-\bar{A})\psi,(\hat{B}-\bar{B})\psi\right)-\left((\hat{B}-\bar{B})\psi,(\hat{A}-\bar{A})\psi\right)\right]\right|^2$$

$$=\left|\frac{1}{2i}\left[\left(\psi,(\hat{A}-\bar{A})(\hat{B}-\bar{B})\psi\right)-\left(\psi,(\hat{B}-\bar{B})(\hat{A}-\bar{A})\psi\right)\right]\right|^2$$

$$=\left|\frac{1}{2i}\left[\left(\psi,\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{A}\bar{B}-\bar{A}\hat{B}+\bar{A}\bar{B}\right)\psi\right)-\left(\psi,\left(\hat{B}\hat{A}-\bar{B}\hat{A}-\hat{B}\bar{A}+\bar{B}\bar{A}\right)\psi\right)\right]\right|$$

$$=\left|\frac{1}{2i}[(\psi,(\hat{A}\hat{B})\psi)-(\psi,(\hat{B}\hat{A})\psi)]\right|$$

$$=\left|\frac{1}{2i}\left(\psi,[\hat{A},\hat{B}]\psi\right)\right|^2$$

由

$$(\psi_1,\psi_1)\cdot(\psi_2,\psi_2)\geq\left|\frac{1}{2i}\left(\psi,[\hat{A},\hat{B}]\psi\right)\right|^2$$

$$\overline{\Delta\hat{A}^2}\cdot\overline{\Delta\hat{B}^2}\geq\frac{1}{4}\left|\int\psi[\hat{A},\hat{B}]\psi dx\right|^2$$

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

例1　$\hat{A} = x$ ，$\hat{B} = \hat{p}_x$

$$[\hat{A},\hat{B}] = [x,\hat{p}_x] = i\hbar$$

由于是一常数，所以在任何态下平均都不可能为零。我们有

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

这即为海森伯（Heisenberg）的不确定关系的严格证明。

例2

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

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

$$\overline{[\hat{L}_x, \hat{L}_y]} = \overline{i\hbar \hat{L}_z} = 0 \qquad \overline{\Delta\hat{L}_x^2} \cdot \overline{\Delta\hat{L}_y^2} = 0$$

即

$$\overline{\Delta\hat{L}_x^2} = \overline{\Delta\hat{L}_y^2} = 0$$

但这仅是某一特殊态。

↑ B. 算符的共同本征函数组

定理 1. 如果两个力学量相应的算符有一组正交，归一，完备的共同本征函数组，则算符 $\hat{A}$ ，$\hat{B}$ 必对易，$[\hat{A},\hat{B}]=0$ 。

证：

设 $V_{nm}^{(t)}(x)$ 为算符 $\hat{A}$ ，$\hat{B}$ 的共同本征函数组。

$$\hat{A}V_{nm}^{(t)}=A_n V_{nm}^{(t)} \qquad \hat{B}V_{nm}^{(t)}=B_m V_{nm}^{(t)}$$

对于任一波函数 $\psi(x)$ 都有

$$\psi(x)=\sum_{n,m,t} C_t^{nm} V_{nm}^{(t)}$$

于是

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]\psi(x) = \sum_{n,m,t} C_t^{nm}\left[\hat{A},\hat{B}\right]V_{nm}^{(t)}$$

$$=\sum_{n,m,t} C_t^{nm}\left[A_n,B_m\right]V_{nm}^{(t)}=0$$

因 $\psi(x)$ 是任意的，所以，$[\hat{A},\hat{B}]=0$，即 $\hat{A}$ ，$\hat{B}$ 对易。

定理 2：如果两力学量所相应算符对易，$[\hat{A},\hat{B}]=0$，则它们有共同的正交，归一和完备的本征函数组。

证：设 $\varphi_n^{(s)}$ 是 $\hat{A}$ 的本征函数组。

$$\hat{A}\varphi_n^{(s)}=A_n\varphi_n^{(s)}$$

如 $s=1$，即不简并，于是

$$\hat{A}\hat{B}\varphi_n = \hat{B}\hat{A}\varphi_n = A_n\hat{B}\varphi_n$$

当 $\hat{A}$ 的本征函数不简并时，就有

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

则 $\{\varphi_n\}$ 是它们的共同完备的本征函数组。

当 $s > 1$，即有简并。无妨设 $\hat{B}$ 的本征函数组为 $u_m^{(r)}$（这也是一完备组）。

$$\hat{B}u_m^{(r)} = b_m u_m^{(r)}$$

将 $\varphi_n^{(s)}$ 展开

$$\varphi_n^{(s)} = \sum_{r,m} c_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}$$

$$\hat{A}\varphi_n^{(s)} = A_n \varphi_n^{(s)}$$

即 $$\hat{A}\sum_{m,r} c_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)} = A_n \sum_{m,r} c_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}$$

$$\sum_m \hat{A}\left(\sum_r c_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right) = \sum_m A_n \left(\sum_r c_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right)$$

而 $$\hat{B}\left(\hat{A}\sum_r c_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right) = \hat{A}\hat{B}\sum_r c_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}$$

$$= b_m \left(\hat{A}\sum_r c_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right)$$

$$\hat{B}A_n\sum_r(c_{nr}^{(s)m}u_m^{(r)}) = b_m A_n\sum_r(c_{nr}^{(s)m}u_m^{(r)})$$

所以 $$\hat{A}\sum_r c_{nr}^{(s)m}u_m^{(r)} = A_n\sum_r c_{nr}^{(s)m}u_m^{(r)}$$

这表明， $$\sum_r c_{nr}^{(s)m}u_m^{(r)}$$

是算符 $\hat{A}$，$\hat{B}$ 的本征值为 A_n，B_m 的共同本征函数。对任一波函数有

$$\psi = \sum_{n,s} d_s^n \varphi_n^{(s)}$$

$$= \sum_{n,s} d_s^n \sum_{m,r} c_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}$$

$$= \sum_{n,s,m} d_s^n \left(\sum_{r} c_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right)$$

所以它们是完备的（对所有 **n,m,s** 的集合）。

即，两力学量所相应算符对易，$[\hat{A},\hat{B}]=0$ 则它们有共同的正交，归一和完备的本征函数组

4.10　4.11

同理 $$V_a^{(b_2)} = c_1^{(1)}\left[u_a^{(1)} + \frac{(b_2 - b_{11})}{b_{12}} u_a^{(2)}\right]$$

$\hat{A},\hat{B}$ 的本征值就唯一地决定波函数 $v_a^{(b_i)}$。它们的共同本征态没有一个是简并的。

力学量完全集：设力学量 $\hat{A},\hat{B},\hat{C}\cdots$ 彼此对易；它们的共同本征函数 $u_{abc\cdots}$ 是不简并的，也就是说，本征值 $a,b,c\cdots$ 仅对应一个独立的本征函数，则称这一组力学量为力学量完全集 。

所以，以后要描述一个体系所处的态时，我们首先集中注意力去寻找一组独立的完全集，以给出特解，然后得到通解。

有了力学量完全集，$u_{nabc\cdots}$ ，则可得

$$\psi(\underline{r},t)=\sum_{n,a,b,c\cdots} c_{nabc\cdots}u_{nabc\cdots}e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$c_{nabc\cdots}=\int u^*_{nabc\cdots}(\underline{r})\psi(\underline{r},0)d\underline{r}$$

$\hat{L}^2,\hat{L}_z$ 完全集相应的本征函数组为 $Y_{lm}(\theta,\phi)$

↑ C. 角动量的共同本征函数组—球谐函数

因 $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ ，它们有共同本征函数组

1. 本征值:

设：u_{lm} 是它们的共同本征函数，则

$$\hat{L}^2 u_{lm} = \eta_l \hbar^2 u_{lm}$$

$$\hat{L}_z u_{lm} = m\hbar u_{lm}$$

$$(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2)u_{lm} = (\eta_l - m^2)\hbar^2 u_{lm}$$

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

$$\eta_l \geq m^2 \qquad |m| \leq \eta_l^{1/2}$$

固定 η_l 时，m 有上，下限。

$$[\hat{L}_z, \ \hat{L}_-] = \hat{L}_z\hat{L}_- - \hat{L}_-\hat{L}_z = -\hbar\hat{L}_-$$

其中 $\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$.

$$[\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_-] = \hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_- - \mathbf{L}_-\hat{\mathbf{L}}_z$$

$$= \hat{\mathbf{L}}_z\hat{\mathbf{L}}_x - \mathbf{i}\hat{\mathbf{L}}_z\hat{\mathbf{L}}_y - \mathbf{L}_x\hat{\mathbf{L}}_z + \mathbf{i}\mathbf{L}_y\hat{\mathbf{L}}_z$$

$$= \mathbf{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_y + \mathbf{i}\cdot\mathbf{i}\hbar\mathbf{L}_x = -\hbar\hat{\mathbf{L}}_-$$

$$[\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_+] = \hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_+ - \mathbf{L}_+\hat{\mathbf{L}}_z$$

$$= \hat{\mathbf{L}}_z\hat{\mathbf{L}}_x + \mathbf{i}\hat{\mathbf{L}}_z\hat{\mathbf{L}}_y - \mathbf{L}_x\hat{\mathbf{L}}_z - \mathbf{i}\mathbf{L}_y\hat{\mathbf{L}}_z$$

$$= \mathbf{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_y - \mathbf{i}\cdot\mathbf{i}\hbar\mathbf{L}_x = \hbar\hat{\mathbf{L}}_+$$

$$\hat{L}_z\hat{L}_-u_{lm} = \hat{L}_-(\hat{L}_z - \hbar)u_{lm} = (m-1)\hbar\hat{L}_-u_{lm}$$

$$u_{lm} \quad \hat{L}_-u_{lm} \quad (\hat{L}_-)^2u_{lm} \quad (\hat{L}_-)^3u_{lm}\cdots$$

$$m\hbar \quad (m-1)\hbar \quad (m-2)\hbar \quad (m-3)\hbar\cdots$$

称 $\hat{L}_-$ 为降算符。

类似地，由 $\left[\hat{L}_z, \hat{L}_+\right] = \hbar\hat{L}_+$ 得

$$\hat{L}_z\hat{L}_+u_{lm} = \hat{L}_+(\hat{L}_z + \hbar)u_{lm} = (m+1)\hbar\hat{L}_+u_{lm}$$

$$u_{lm} \qquad \hat{L}_+ u_{lm} \qquad (\hat{L}_+)^2 u_{lm} \qquad (\hat{L}_+)^3 u_{lm} \cdots$$

$$m\hbar \qquad (m+1)\hbar \qquad (m+2)\hbar \qquad (m+3)\hbar \cdots$$

称 $\hat{L}_+$ 为升算符（对 $\hat{L}_z$ 而言）。

◉ 由于 $|m| \le \eta_l^{1/2}$，η_l 固定时，m 有上、下限。若设 m_+ 为上限，m_- 为下限，则

$$\hat{L}_+ u_{lm_+} = 0 \qquad \hat{L}_- u_{lm_-} = 0$$

$$\hat{L}_{-}\hat{L}_{+}u_{lm_{+}} = 0 \qquad \hat{L}_{+}\hat{L}_{-}u_{lm_{-}} = 0$$

$$\hat{\mathbf{L}}_{-}\hat{\mathbf{L}}_{+} = (\hat{\mathbf{L}}_{x} - \mathbf{i}\hat{\mathbf{L}}_{y})(\hat{\mathbf{L}}_{x} + \mathbf{i}\hat{\mathbf{L}}_{y})$$

$$= \hat{\mathbf{L}}_{x}^{2} + \hat{\mathbf{L}}_{y}^{2} + \mathbf{i}\hat{\mathbf{L}}_{x}\hat{\mathbf{L}}_{y} - \mathbf{i}\hat{\mathbf{L}}_{y}\hat{\mathbf{L}}_{x}$$

$$= \hat{\mathbf{L}}^{2} - \hat{\mathbf{L}}_{z}^{2} - \hbar\hat{\mathbf{L}}_{z}$$

$$\hat{\mathbf{L}}_{+}\hat{\mathbf{L}}_{-} = (\hat{\mathbf{L}}_{x} + \mathbf{i}\hat{\mathbf{L}}_{y})(\hat{\mathbf{L}}_{x} - \mathbf{i}\hat{\mathbf{L}}_{y})$$

$$= \hat{\mathbf{L}}_{x}^{2} + \hat{\mathbf{L}}_{y}^{2} - \mathbf{i}\hat{\mathbf{L}}_{x}\hat{\mathbf{L}}_{y} + \mathbf{i}\hat{\mathbf{L}}_{y}\hat{\mathbf{L}}_{x}$$

$$= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z$$

$$(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z) u_{lm_+} = (\eta_l - m_+^2 - m_+) \hbar^2 u_{lm_+} = 0$$

$$(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) u_{lm_-} = (\eta_l - m_-^2 + m_-) \hbar^2 u_{lm_-} = 0$$

$$\left.\begin{array}{l} \eta_l = m_+(m_+ + 1) \\ \eta_l = m_-(m_- - 1) \end{array}\right. \Rightarrow \begin{array}{l} m_+ = m_- - 1 \\ m_+ = -m_- \end{array}$$

m_+ 为上限，m_- 为下限，

所以，只能取

$$m_+ = -m_- = l$$

$\hat{L}^2$ 的本征值可取

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

$\hat{L}_z$ 的本征值可取

$$-l\hbar, (-l+1)\hbar, (-l+2)\hbar, \cdots, 0, \cdots (l-2)\hbar, (l-1)\hbar, l\hbar$$

即，取 $m\hbar$

$-l \le m \le l \qquad l = 0, 1, 2, 3, \cdots$

这表明，角动量的本征值是量子化的。它与能量量子化不同在于它并不需要粒子是束缚的。自由粒子的角动量是量子化的。

2．本征函数

◉ $$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}u_{lm}=m\hbar u_{lm}$$

于是有解 $$u_{lm(\theta,\phi)}=A_{lm}(\theta)e^{im\phi}$$

◉ $\hat{L}_+=\hbar e^{i\phi}(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi})$ ，所以有

$$\hat{L}_+u_{ll}=\hat{L}_+A_{ll(\theta)}e^{il\phi}=0$$

$$e^{i(l+1)\phi}\left(\frac{d}{d\theta}-l\cot\theta\right)A_{ll}(\theta)=0$$

而 $\left(\frac{d}{d\theta}-l\cot\theta\right)=\sin^l\theta\frac{d}{d\theta}\frac{1}{\sin^l\theta}$，即得

$$\sin^l\theta\frac{d}{d\theta}\frac{1}{\sin^l\theta}A_{ll}(\theta)=0 \qquad A_{ll(\theta)}=c\sin^l\theta$$

- 现求归一化系数

$$c^2\int_0^{\pi}\sin^{2l+1}\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi=1$$

$$2\pi c^2(-1)^{2l}\frac{2^{2l+1}(l!)^2}{(2l+1)!}=1$$

得归一化的本征函数

- $$u_{ll(\theta,\phi)} = (-1)^l \frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \sin^l \theta e^{il\phi}$$

- $$u_{lm(\theta,\phi)} \propto c(\hat{L}_-)^{l-m} \sin^l \theta e^{il\phi}$$

现先讨论 u_{lm} 的归一化问题，然后给出 u_{lm} 的具体形式。

若 u_{lm} 是归一化的，则

$$u_{lm-1} \propto \hat{L}_- u_{lm}$$

$$\int (\hat{L}_- u_{lm})^* \hat{L}_- u_{lm} d\Omega$$

- $$= \int u_{lm}^* \hat{L}_+ \hat{L}_- u_{lm} d\Omega$$

$$= [l(l+1) - m^2 + m]\hbar^2$$

- ⦿ $$u_{lm-1} = \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar} \hat{L}_- u_{lm}$$

现求归一化的波函数

$$\hat{L}_{-}=\hbar e^{-i\phi}(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi})$$

- $$\hat{L}_{-}u_{ll}=c\hat{L}_{-}\sin^{l}\theta e^{il\phi}$$

$$=c\hbar e^{-i\phi}(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi})\sin^{l}\theta e^{il\phi}$$

$$=c\hbar(-\frac{d}{d\theta}-l\cot\theta)\sin^{l}\theta e^{i(l-1)\phi}$$

$$= -c\hbar\left(\frac{1}{\sin^{l}\theta}\frac{d}{d\theta}\sin^{l}\theta\right)\sin^{l}\theta e^{i(l-1)\phi}$$

所以，

- $$u_{ll-1} = \frac{c}{\sqrt{2l \cdot 1}}(-1)\frac{1}{\sin^{l}\theta}\frac{d}{d\theta}\sin^{2l}\theta e^{i(l-1)\phi}$$

$$\hat{L}\_e^{i(m'+1)\phi} = (-1)\hbar e^{-i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)e^{i(m'+1)\phi}$$

$$= (-1)\hbar e^{im'\phi}\left(\frac{1}{\sin^{m'+1}\theta}\frac{d}{d\theta}\sin^{m'+1}\theta\right)$$

$$\hat{L}_{-}u_{ll-1} = \frac{c\hbar}{\sqrt{2l \cdot 1}}(-1)^2 e^{-i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\frac{1}{\sin^l\theta}\frac{d}{d\theta}\sin^{2l}\theta e^{i(l-1)\phi}$$

$$= \frac{c\hbar}{\sqrt{2l \cdot 1}}(-1)^2 e^{i(l-2)\phi}\left(\frac{1}{\sin^{(l-1)}\theta}\frac{d}{d\theta}\sin^{(l-1)}\theta\right)\frac{1}{\sin^l\theta}\frac{d}{d\theta}\sin^{2l}\theta$$

$$u_{ll-2} = \frac{c}{\sqrt{2l \cdot (2l-1) \cdot 1 \cdot 2}}(-1)^2 \frac{1}{\sin^{(l-1)}\theta}\frac{d}{d\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\sin^{2l}\theta e^{i(l-2)\phi}$$

以此类推

$$u_{lm}=\frac{c}{\sqrt{2l\cdot(2l-1)\cdots(l+m+1)\cdot 1\cdot 2\cdots(l-m)}}(-1)^{l-m}\frac{1}{\sin^{m+1}\theta}\cdot$$

$$\cdot\overbrace{\frac{d}{d\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\cdots\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}}^{l-m}\sin^{2l}\theta e^{im\phi}$$

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

于是得 $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ 的共同本征函数组-球谐函数

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

.

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

称为连带勒让德函数。

当 l, m 给定，也就是 $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ 的本征值给定，那就唯一地确定了本征函数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$

其性质：

a. 正交归一

$$\int Y_{lm}^*(\theta,\phi)Y_{l'm'}(\theta,\phi)d\Omega = \delta_{ll'}\delta mm'$$

b．封闭性

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

c. 因

$$P_l^{-m}(\cos\theta) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos\theta) \qquad m \geq 0$$

所以，

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

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

因此，$Y_{l-m} = (-1)^m Y_{lm}^*$

d. Y_{lm} 宇称 $(-1)^l$

· $\underline{r} \rightarrow -\underline{r}$，即 $\theta \rightarrow \pi - \theta$ $\phi \rightarrow \pi + \phi$

$(-1)^{l-m}$ $(-1)^m$

e. 递推关系

$$\hat{L}_- Y_{lm} = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar Y_{lm-1}$$

$$\hat{L}_+ Y_{lm} = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hbar Y_{lm+1}$$

↑ ## D. 力学量的完全集

在量子力学中，是**确定体系所处的状态**而不是轨道。是确定对体系测量某力学量的可能值及相应概率。所以，若能充分确定状态，则认为是完全描述了。但是，如何才能将状态描述完全确定呢?

设：$\hat{A}, \hat{B}$ 是力学量所对应的算符，并且对易。显然，如 $u_a(x)$ 是 $\hat{A}$ 的本征函数

，则 $\hat{B}u_a$ 也是 $\hat{A}$ 的本征函数。

★ $\hat{A}$ 的本征函数不简并，则

$$\hat{B}u_a = bu_a$$

★ 当 $\hat{A}$ 的本征值是两重简并。测量 $\hat{A}$ 取值 a 时，并不知处于那一态，可能为

$$\alpha_1 u_a^{(1)} + \alpha_2 u_a^{(2)}$$

尽管 $\hat{B}u_a^{(1)}$，$\hat{B}u_a^{(2)}$ 都是 $\hat{A}$ 的本征态。但一般而言

$$\hat{B}u_a^{(1)} = b_{11}u_a^{(1)} + b_{21}u_a^{(2)}$$

$$\hat{B}u_a^{(2)} = b_{12}u_a^{(1)} + b_{22}u_a^{(2)}$$

$$\hat{B}\begin{pmatrix} u_a^{(1)} \\ u_a^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{21} \\ b_{12} & b_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_a^{(1)} \\ u_a^{(2)} \end{pmatrix}$$

$$\hat{B}v_a^{(b_1)} = b_1 v_a^{(b_1)}$$

$$\hat{B}v_a^{(b_2)} = b_2 v_a^{(b_2)}$$

$$v_a^{(b_i)} = c_1^{(i)} u_a^{(1)} + c_2^{(i)} u_a^{(2)}$$

代入

$$\hat{B}\left(c_1^{(i)} u_a^{(1)} + c_2^{(i)} u_a^{(2)}\right) = \left(c_1^{(i)}, c_2^{(i)}\right) \hat{B} \begin{pmatrix} u_a^{(1)} \\ u_a^{(2)} \end{pmatrix}$$

- $$= \left(c_1^{(i)}, c_2^{(i)}\right) \begin{pmatrix} b_{11} & b_{21} \\ b_{12} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_a^{(1)} \\ u_a^{(2)} \end{pmatrix}$$
- $$= \left(b_{11} c_1^{(i)} + b_{12} c_2^{(i)}, b_{21} c_1^{(i)} + b_{22} c_2^{(i)}\right) \begin{pmatrix} u_a^{(1)} \\ u_a^{(2)} \end{pmatrix}$$

- $$= b_i\left(c_1^{(i)}u_a^{(1)} + c_2^{(i)}u_a^{(2)}\right) = b_i(c_1^{(i)}, c_2^{(i)})\begin{pmatrix} u_a^{(1)} \\ u_a^{(2)} \end{pmatrix}$$

- $$(b_{11}c_1^{(i)} + b_{12}c_2^{(i)}, b_{21}c_1^{(i)} + b_{22}c_2^{(i)}) = b_i(c_1^{(i)}, c_2^{(i)})$$

$$\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1^{(i)} \\ c_2^{(i)} \end{pmatrix} = b_i\begin{pmatrix} c_1^{(i)} \\ c_2^{(i)} \end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} b_{11} - b & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} - b \end{vmatrix} = 0$$

可求得 $\hat{B}$ 的本征值。若 $b_1 \neq b_2$，有

$$b_{11}c_1^{(1)} + b_{12}c_2^{(1)} = b_1 c_1^{(1)}$$

$$b_{21}c_1^{(1)} + b_{22}c_2^{(1)} = b_1 c_2^{(1)}$$

则

$$c_2^{(1)} = \frac{(b_1 - b_{11})}{b_{12}} c_1^{(1)}$$

$$V_a^{(b_1)} = c_1^{(1)}\left[u_a^{(1)} + \frac{(b_1 - b_{11})}{b_{12}} u_a^{(2)}\right]$$

同理 $$V_a^{(b_2)}=c_1^{(1)}\left[u_a^{(1)}+\frac{(b_2-b_{11})}{b_{12}}u_a^{(2)}\right]$$

$\hat{A},\hat{B}$ 的本征值就唯一地决定波函数 $v_a^{(b_i)}$。它们的共同本征态没有一个是简并的。

力学量完全集：设力学量 $\hat{A},\hat{B},\hat{C}\cdots$ 彼此对易；它们的共同本征函数 $u_{abc\cdots}$ 是不简并的，也就是说，本征值 $a,b,c\cdots$ 仅对应一个独立的本征函数，则称这一组力学量为力学量完全集。

所以，以后要描述一个体系所处的态时，我们首先集中注意力去寻找一组独立的完全集，以给出特解，然后得到通解。

有了力学量完全集，$u_{nabc\cdots}$，则可得

$$\psi(\underline{r},t)=\sum_{n,a,b,c\cdots}c_{nabc\cdots}u_{nabc\cdots}e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$c_{nabc\cdots}=\int u^{*}_{nabc\cdots}(\underline{r})\psi(\underline{r},0)d\underline{r}$$

$\hat{L}^2,\hat{L}_z$ 完全集相应的本征函数组为 $Y_{lm}(\theta,\phi)$

V．力学量平均值随时间的变化，运动常数，埃伦费斯脱定理（Ehrenfest Theorem ）

↑

A. 力学量的平均值随时间变化，运动常数

$$\overline{A} = \left(\psi(t), \hat{A}\psi(t)\right)$$

它随时间演化为

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = \frac{d}{dt}\int \psi^*(t), \hat{A}\psi(t)d\underline{r}$$

$$= \int \frac{\partial \psi^*(t)}{\partial t}\hat{A}\psi(t)d\underline{r} + \int \psi^*(t)\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi(t)d\underline{r} + \int \psi^*(t)\hat{A}\frac{\partial \psi(t)}{\partial t}d\underline{r}$$

$$= \int \psi^*(t)\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi(t)d\underline{r} + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^*(t)\hat{A}\hat{H}\psi(t)d\underline{r} - \frac{1}{i\hbar}\int \left(\hat{H}\psi(t)\right)^* \hat{A}\psi(t)d\underline{r}$$

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = \overline{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}} + \overline{\frac{[\hat{A},\hat{H}]}{i\hbar}}$$

若 $\hat{A}$ 不显含 t，则

$$\frac{d\overline{A}}{dt}=\frac{\overline{[\hat{A},\hat{H}]}}{i\hbar}$$

当 $[\hat{A},\hat{H}]=0$，则 $\overline{A}$（对体系处于任何态）不随 t 变，而取 A_s 的概率 $\sum_n |c_{ns}|^2$ 也不随 t 变。

$$\frac{d\overline{A}}{dt}=0$$

我们称与体系 $\hat{H}$ 对易的不显含时间的力学量算符为体系的运动常数。

运动常数并不都能同时取确定值。因尽管它们都与 $\hat{H}$ 对易，但它们之间可能不对易。如

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(r)$$

$\hat{L}^2,\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$ 都是运动常数，但 $\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$ 彼此不对易，不能同时取确定值。

↑ B. 位力定理 (virial Theorem)

不显含 t 的力学量，在定态上的平均与 t 无关。

$$\frac{d\overline{\underline{r}\cdot\hat{\underline{p}}}}{dt} = \frac{\overline{[\underline{r}\cdot\hat{\underline{p}},\hat{H}]}}{i\hbar} = 0,$$

$$\frac{\left[\underline{r}\cdot\hat{\underline{p}},\hat{H}\right]}{i\hbar} = \frac{1}{i\hbar}\left[\underline{r}\cdot\hat{\underline{p}},\frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m}\right] + \frac{1}{i\hbar}\left[\underline{r}\cdot\hat{\underline{p}},V(\underline{r})\right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}[\underline{r}, \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m}] \cdot \hat{\underline{p}} + \frac{1}{i\hbar}\underline{r} \cdot [\hat{\underline{p}}, V(\underline{r})]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\sum_i [x_i, \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m}] \cdot \hat{p}_i + \frac{1}{i\hbar}\sum_i x_i [\hat{p}_i, V(\underline{r})]$$

$$= \frac{\hat{\underline{p}}^2}{m} - \underline{r} \cdot \nabla V(\underline{r})$$

所以 $\overline{2\hat{T}} = \overline{\underline{r} \cdot \nabla V(\underline{r})}$

称为 virial Theorem 位力定理

若 $V(x,y,z)$ 是 x,y,z 的 **n** 次齐次函数，则

$$2\overline{\hat{T}} = n\overline{V(\underline{r})}$$

例：谐振子势是 x,y,z 的二次齐次函数

$$\overline{\hat{T}} = \overline{V(\underline{r})}$$

例：库仑势是 x,y,z 的 －1 次齐次函数

$$2\overline{\hat{T}} = -\overline{V(\underline{r})}$$

↑ ## C. 能量-时间不确定关系

由算符间测量值的不确定关系，

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

取 $\hat{B}=\hat{H}$ ，则有

$$\Delta A\cdot\Delta E\geq\frac{1}{2}\left|\overline{i\left[\hat{A},\hat{H}\right]}\right|=\frac{\hbar}{2}\left|\overline{\frac{\left[\hat{A},\hat{H}\right]}{i\hbar}}\right|$$

若 $\hat{A}$ 是不显含时间的算符，则有

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = \frac{\overline{[\hat{A}, \hat{H}]}}{i\hbar}$$

取

$$\tau_A = \frac{\Delta A}{\left| \frac{d\overline{A}}{dt} \right|}$$

则有

$$\tau_A \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

这即为能量和时间的不确定关系。