

第二章 量子力学初步

波粒二象性

不确定关系

量子态

Schrödinger方程

力学量 本征方程

一维定态问题

Bohr理论的困难

1. 定态无辐射的理论基础是什么？
2. 定态跃迁的原因是什么？

Rutherford: 跃迁“必须事先知道!” 大量的光子, 不同的频率 ν , 电子如何选择 ν_i 而跃迁到 ϵ_i 上?

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

3. 不能解释H原子光谱的精细结构、谱线的宽度和强度
4. 不能解释其它许多光谱, He原子光谱也无法解释

“概念含糊、无坚实理论基础”——旧量子论

2.1 波粒二象性

经典物理中，波和粒子是完全不同的能量传播形式。

- 波：具有叠加性，特征量 λ 和 ν ，空间无限延展时， λ 和 ν 可同时测量
- 粒子：完全定域的，可视为质点，精确计算 m, p, v 等特征量

一、光的波粒二象性

光子（光量子）的物理概念，是建立在3个著名的物理实验基础上的

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

光同时具有波动性和粒子性——波粒二象性

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

光子能量： $E = h\nu$

光子动量： $p = h\nu/c = h/\lambda$

$$\begin{cases} E = h\nu \\ p = h/\lambda \end{cases} \quad \text{波粒二象性关系}$$

光在传播时显示波动性，
在和物质交换能量时显示粒子性。

二、实物粒子的波动性

1. 德布罗意(de Broglie, 法)物质波假设

- 1924年, de Broglie将Einstein的光量子概念推广, 提出了**物质波**的概念
- 所有的波都具有粒子性
- 所有的粒子都具有波动性

目的: 把实物粒子与光的理论统一起来, 更自然地理解微观粒子能量的不连续性.

$$\begin{cases} \nu = E/h \\ \lambda = h/p \end{cases} \quad \text{德布罗意关系}$$

$$\text{相对论情况下} \quad \begin{cases} E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \\ P = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \end{cases}$$

m_0 为粒子静止质量



Prince Louis-victor de Broglie
1892-1987

实物粒子包括宏观粒子和微观粒子。

宏观粒子的波动性很难观测到。

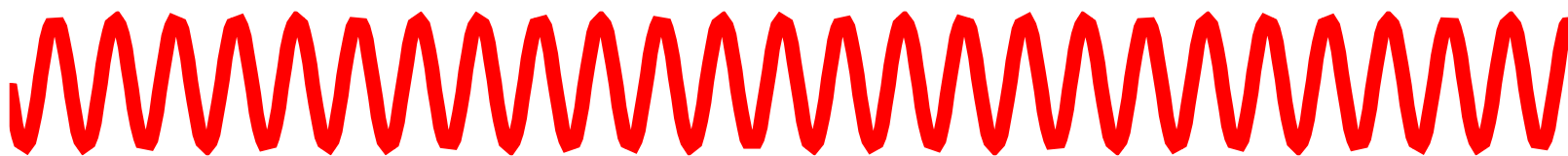
例1: 求动能为100eV的电子的德布罗意波长。

非相对论情况: $v \ll c$

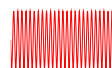
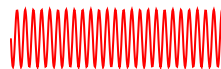
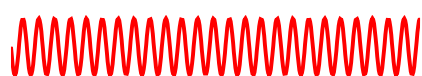
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} \sim 0.123nm$$

例2: 质量为100g的子弹以100m/s的速度运动，求它的德布罗意波长。

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



- 宏观粒子的波动性



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

2. 电子波动性的实验验证

光的波动性由干涉和衍射实验揭示的。

◆ 戴维逊-革末(Davison-Germer)实验 (1927)

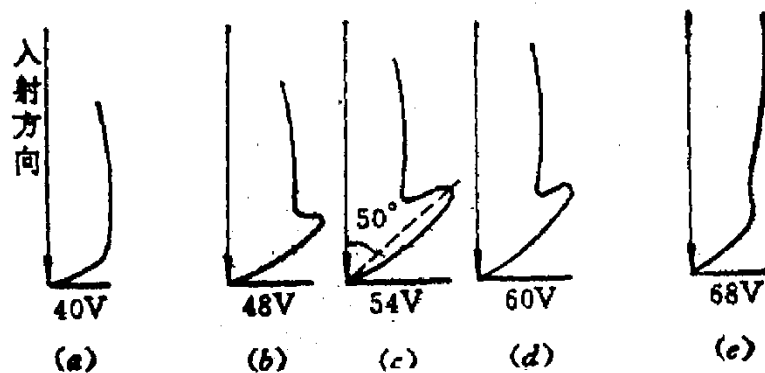
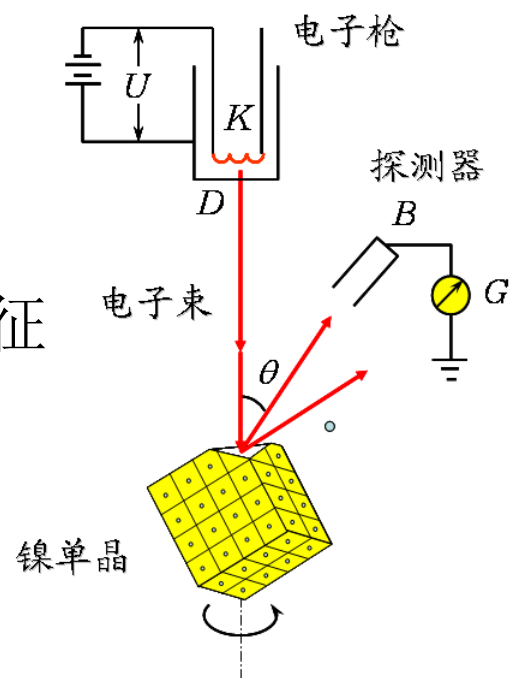
电子从晶体表面的反射，呈现波动的衍射特征

实验装置：如右图



Clinton Joseph
Davisson
1881~1958

Lester Halbert
Germer
1896~1971



实验现象：V=54eV, 散射角为50度衍射较强

实验解释：低能电子入射晶体，表面相当于一个反射光栅

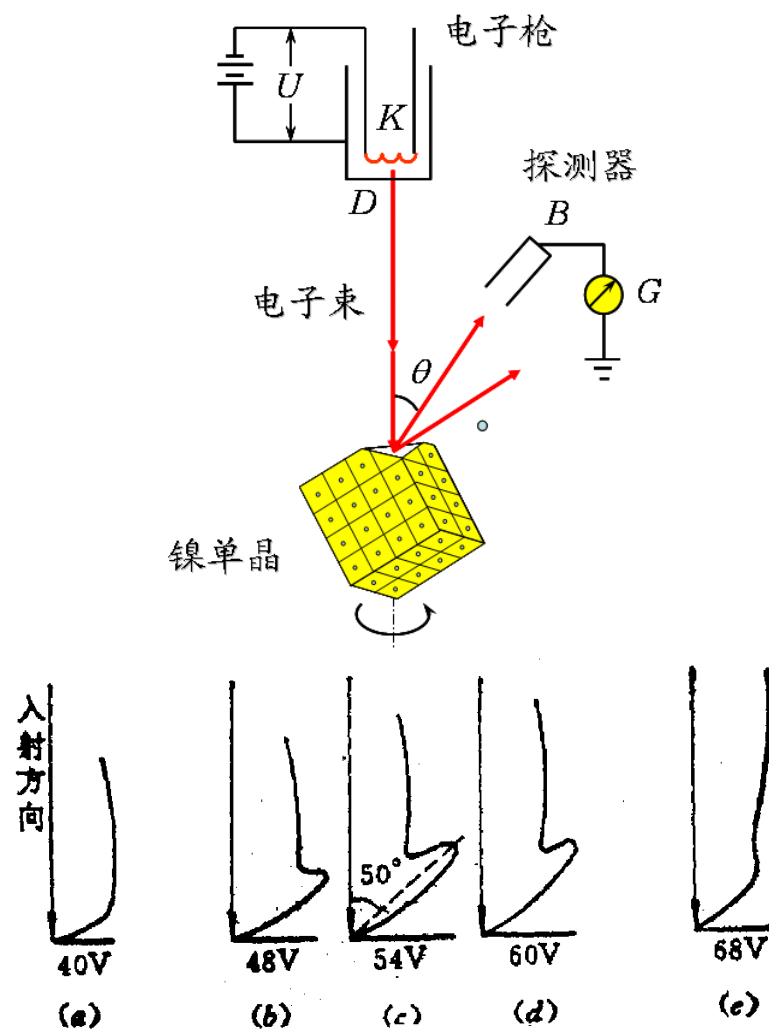
$$d \sin \theta = j \lambda$$

对于Ni单晶，晶格常数 $d=2.15 \text{ \AA}$ ，
 $E=54 \text{ eV}$ 时

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

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

$$\theta = 51^\circ$$

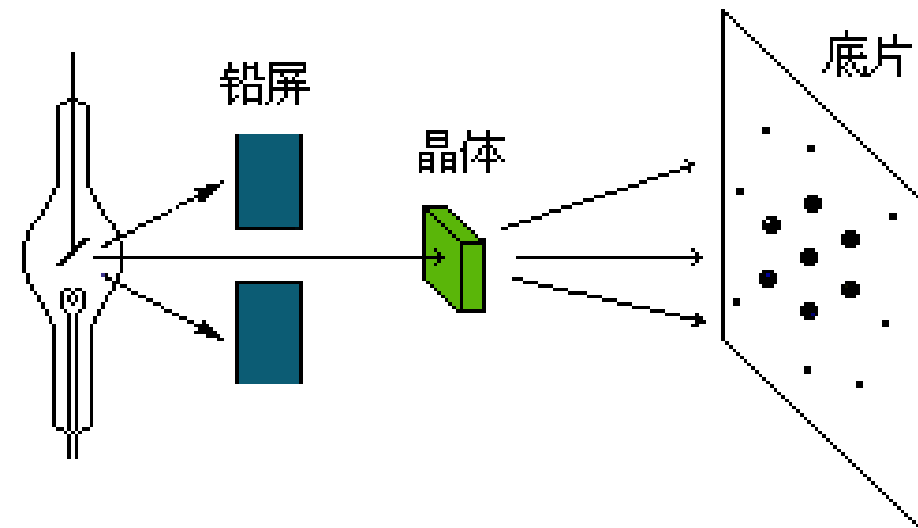


- Thomson实验（1927）——电子透过晶体薄膜的透射现象

多晶铂

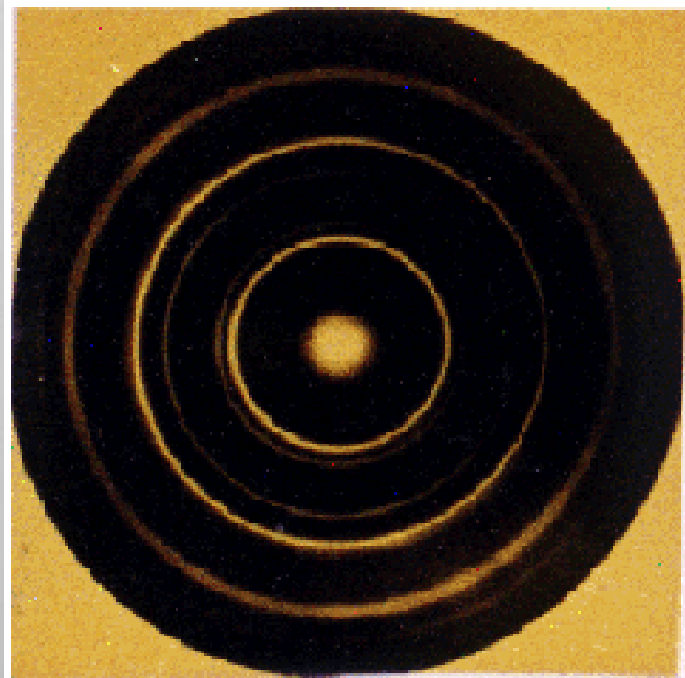
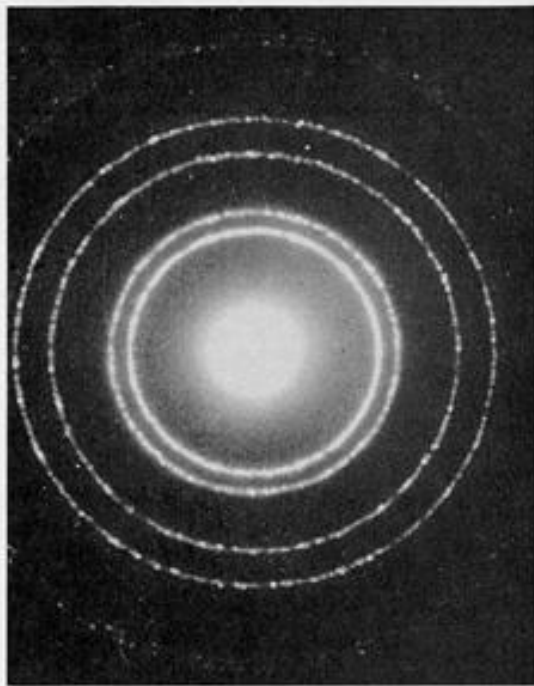
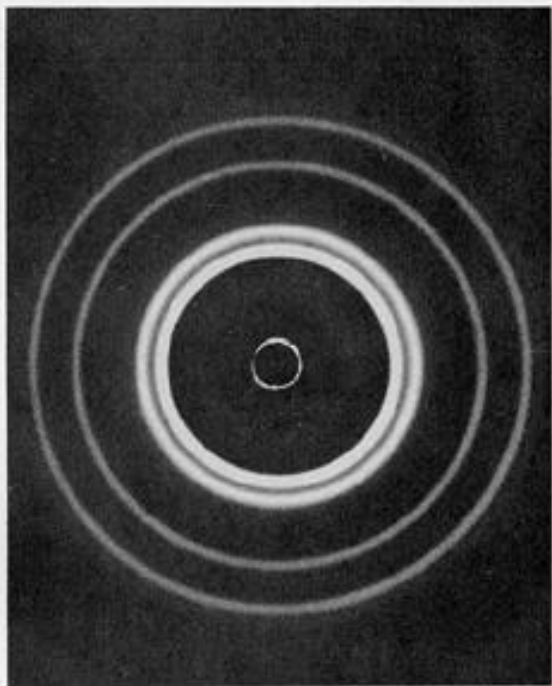


同心圆环



G. P. Thomson

The diffraction pattern on the left was made by a beam of x rays passing through thin aluminum foil. The diffraction pattern on the right was made by a beam of electrons passing through the same foil.



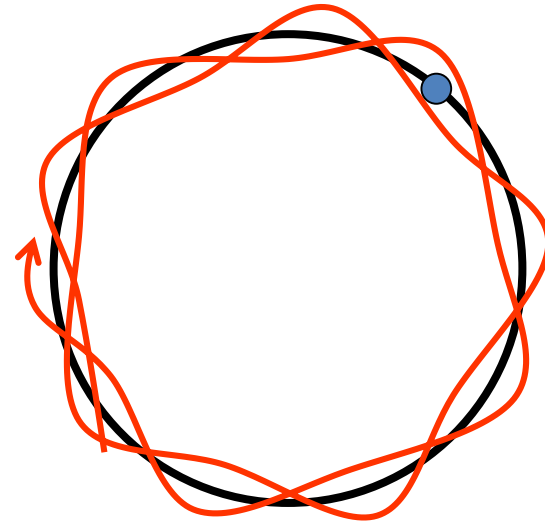
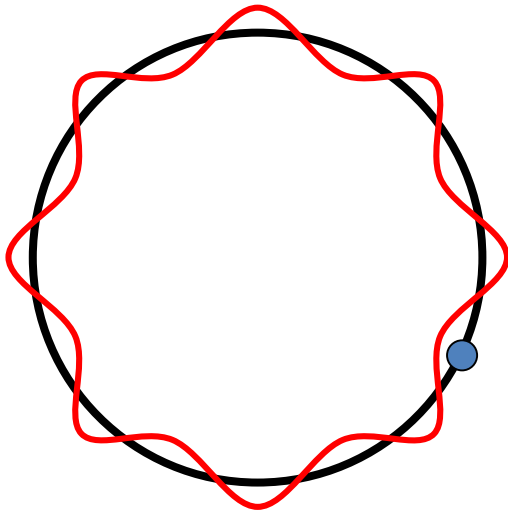
多晶体银电子衍射图

X-Ray在铝箔上的衍射 电子在铝箔上的衍射

结论：电子具有波动性，其波长可用德布罗意波长描述。

3. 德布罗意波与玻尔量子化条件（量子态）

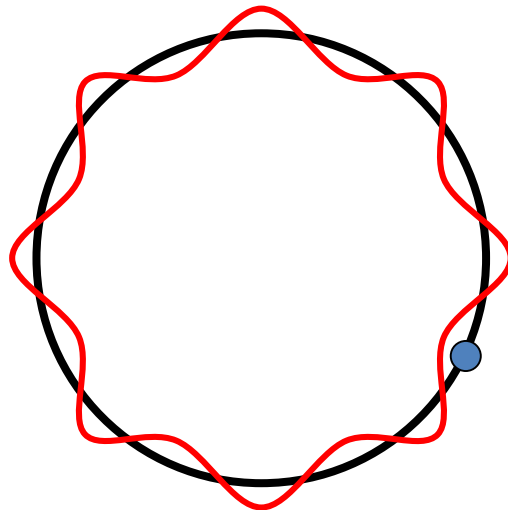
- 电子可以在其轨道上稳定地存在，而不湮灭或消失，则必须以驻波的形式存在
- 否则，会由于波的相干叠加而消失



- 形成驻波的条件：轨道周长是电子波长的整数倍。

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

$$m v r = nh / 2\pi$$



角动量 $L = mvr = nh, \quad n=1,2,3\dots$

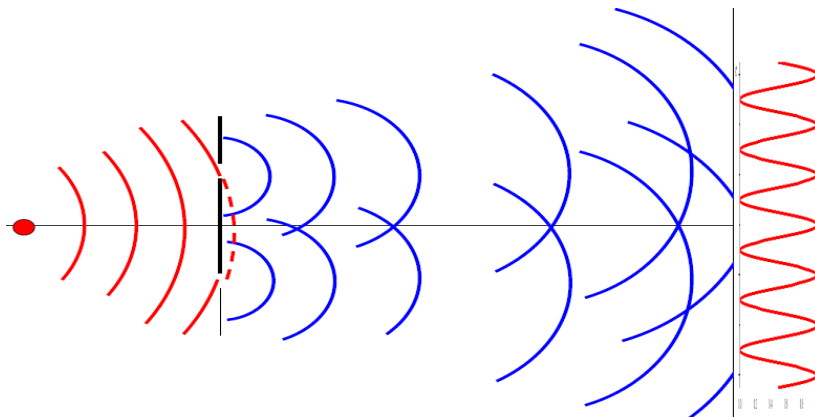
- **Bohr**模型的第三个假设

2.2 物质波的统计解释

一、波粒二象性的矛盾分析

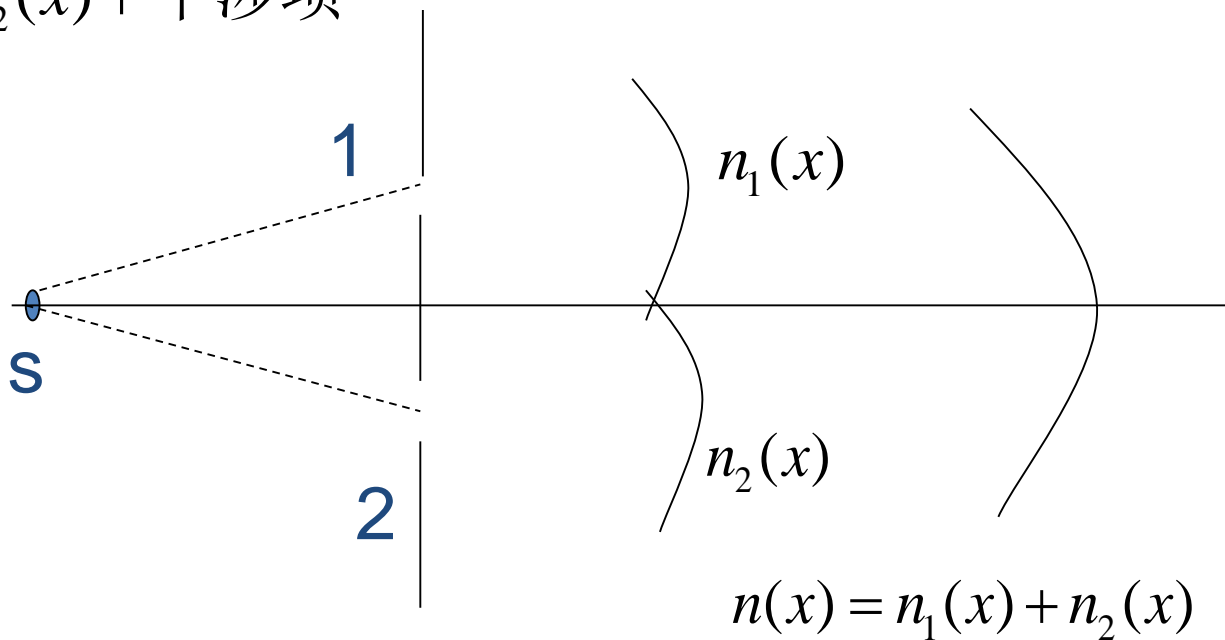
双缝干涉实验

(1) 杨氏双缝干涉



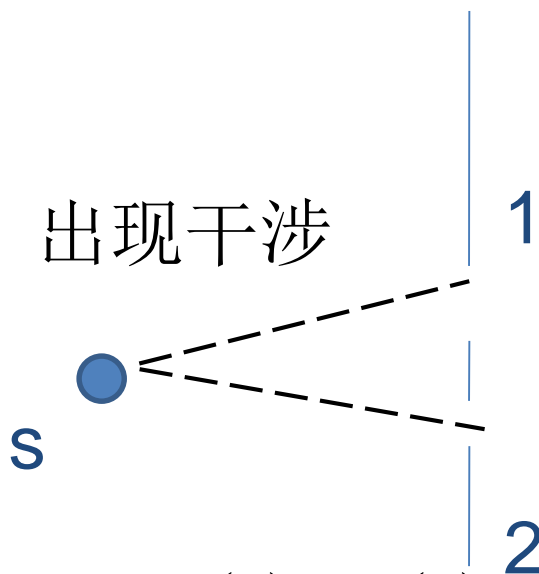
$$I(x) = I_1(x) + I_2(x) + \text{干涉项}$$

(2) 机枪射击



(3) 电子枪

电子经过双缝，出现干涉



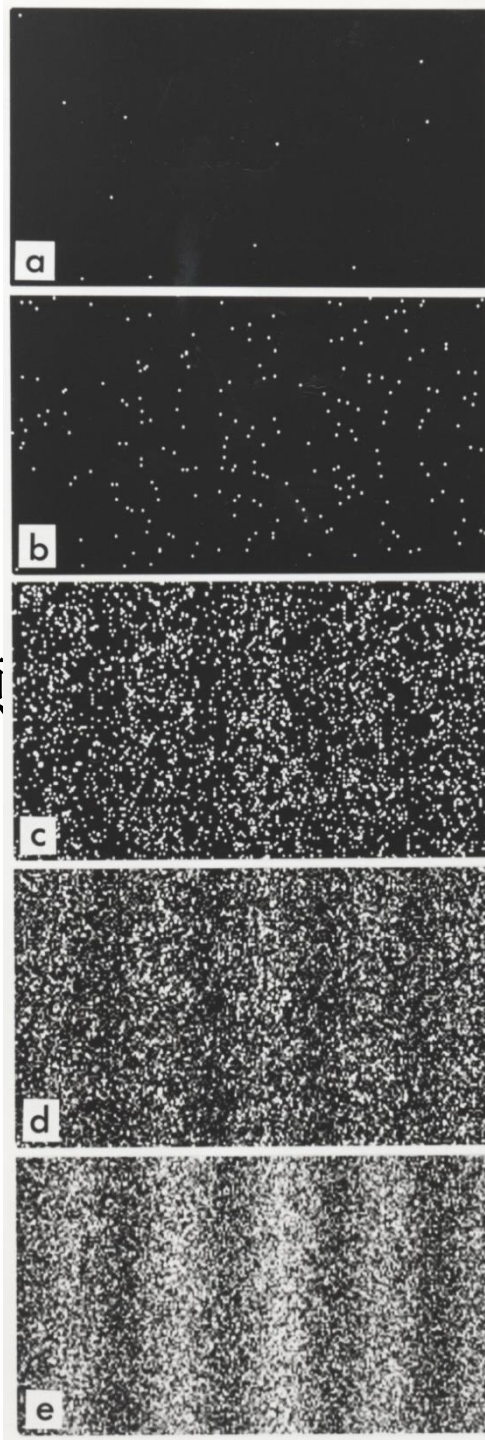
$$n(x) = n_1(x) + n_2(x) + \text{干涉项}$$

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

而此时电子之间没有干涉，故干涉不是两个电子间相互作用的结果！

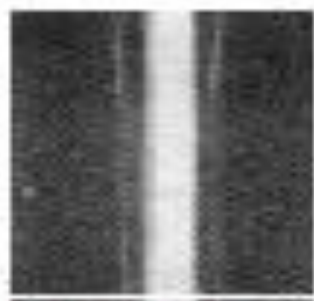
结论：电子自相干，具有波动性。

本质：一个电子几个量子态的叠加。

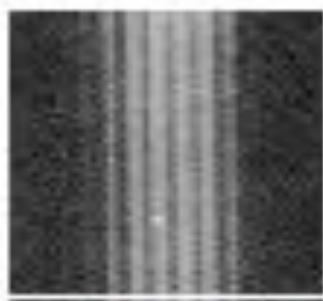


约恩逊 (Claus Jönsson, 德) 实验 (1961年)

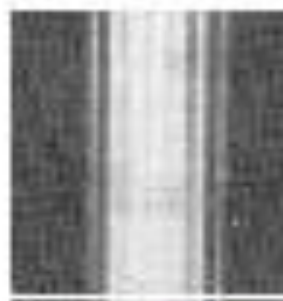
- 电子的单缝、双缝、三缝和四缝衍射实验



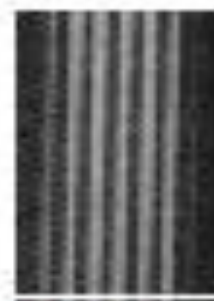
单缝



双缝



三缝



四缝

基本数据

$$a = 0.3 \mu\text{m} \quad d = 1 \mu\text{m}$$

$$V = 50 \text{ kV} \quad \lambda = 0.05 \text{ \AA}$$

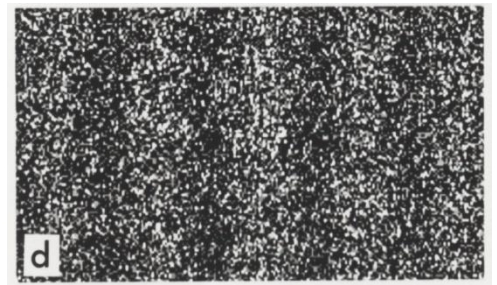
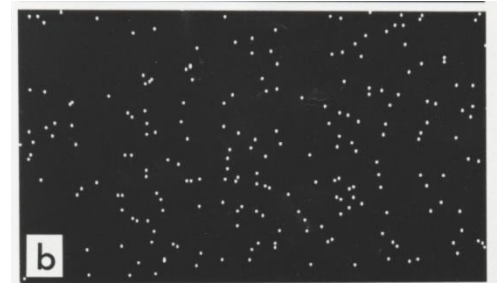
电子具有波动性，这个波是经典的波吗？

二、几率波

1. 分析

对于电子的单缝衍射或多缝干涉，观察点附近的衍射强度

- 正比于观察点附近出现电子的数目
- 正比于观察点附近出现电子的几率



描述粒子在空间的几率分布——几率波

Born的统计解释（1927）

微观体系的波粒二象性，可以用统计的观点理解

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

这就是波动性的物理含义

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

几率波：描述粒子在空间的几率分布。

几率性的观点是量子物理学中的基本观点！



Max Born,
1882-1970 德

2. 波函数

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

对波函数的要求：

(1). 波函数为**单值、连续、有界的复函数**，或平方可积。

(2). 电子 t 时刻出现在空间 \mathbf{r} 附近， $d\tau$ 内的几率大小为

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

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

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

(3).波函数的归一化条件

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

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

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

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

(4).常数因子不确定性（几率是相对的，都乘以一个常数因子后，没有变化）

$$\left| \frac{\psi_1(\mathbf{x}, t)}{\psi_2(\mathbf{x}, t)} \right|^2 = \left| \frac{c\psi_1(\mathbf{x}, t)}{c\psi_2(\mathbf{x}, t)} \right|^2 \quad \psi_1(\mathbf{x}, t) \text{和} c\psi_1(\mathbf{x}, t) \text{ 是完相同的态}$$

这与经典是完全不同的！

3. 态叠加原理

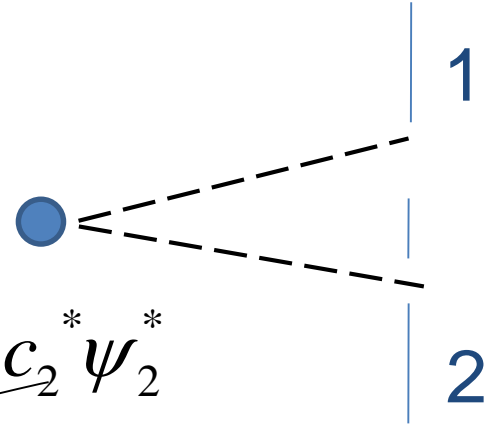
态叠加原理是量子力学中的基本原理

双缝实验

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

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

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



含义：若 ψ_1 和 ψ_2 是粒子的一种可能状态，

$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ 也是粒子的一种可能状态，粒子既处于1态，也处于2态，几率分别为 $|c_1|^2$ 和 $|c_2|^2$ 。

与经典态叠加原理含义不同！

三、波函数可表示出微观粒子的粒子性和波动性

- 粒子性

$$\int_V |\psi|^2 d^3\tau$$

一旦测定，为完整的粒子

- 波动性

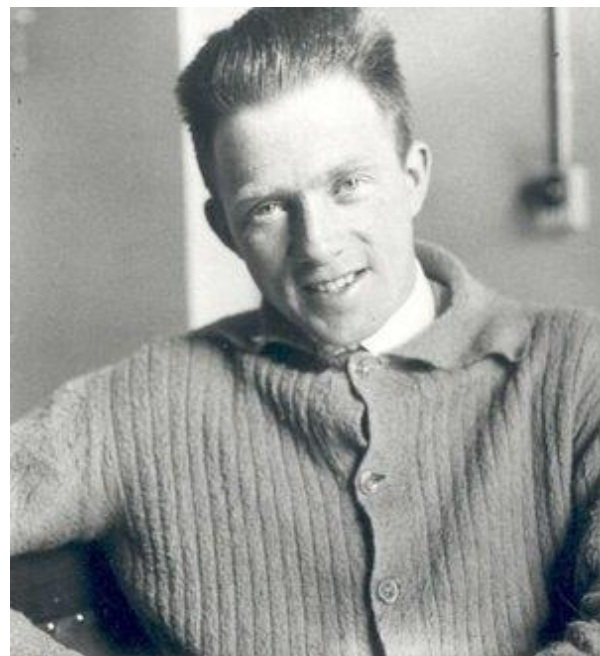
$$|\psi_1 + \psi_2|^2$$

形成干涉，态叠加原理

2.3 不确定原理（海森堡(Heisenberg,1927)

量子力学中的基本原理

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



Werner Karl Heisenberg

1901~1976 德

1925年建立了量子理论第一个数学描述——矩阵力学

1927年阐述了著名的不确定关系

一、一维自由运动的粒子

自由粒子：运动状况不受限制的粒子

- 速度不变，即动量不变，是一个完全确定的值 p_0
- $\lambda = h / p$ ，波长是完全确定的，描述的波函数为单色平面波

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

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

$$|\psi_{p_0}(x)|^2 = 1 \quad \text{粒子在一维空间各点的几率密度相同,} \\ \text{可以在任意位置出现, 即位置完全不确定}$$

动量不确定度为零

$$\Delta p \rightarrow 0$$

位置不确定度为无穷大

$$\Delta x \rightarrow \infty$$

结论：动量和位置的不确定度不同时为0. $\Delta x \Delta p = ?$

二、单缝衍射

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

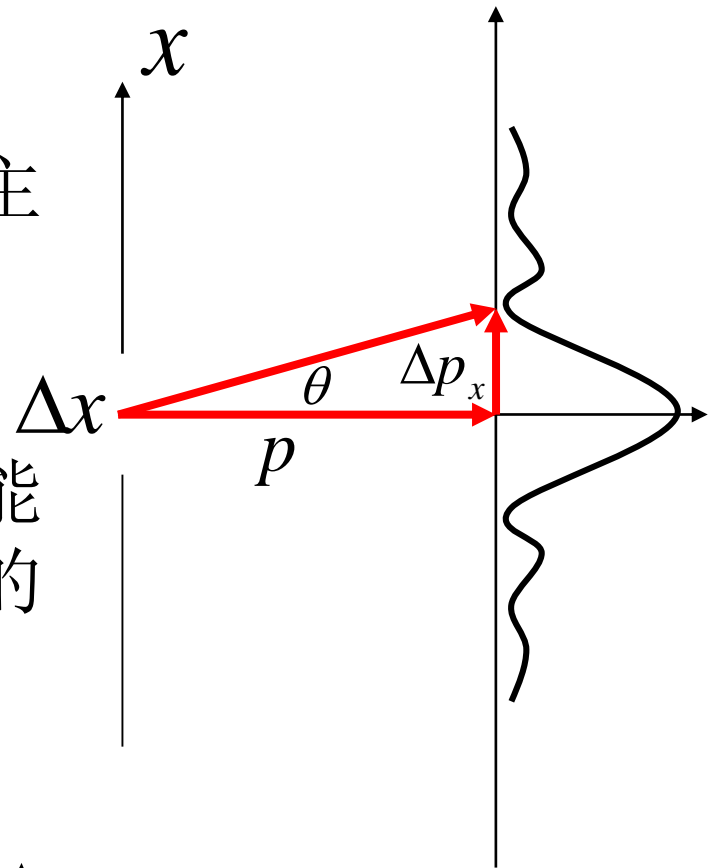
$$\Delta x = a$$

- 动量的不确定范围

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

$$ah\theta = h\lambda$$

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



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

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

三、不确定关系的严格表述

- 空间位置与相应动量的不确定关系

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

- 能量与时间的不确定关系

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

这种不确定关系与测量无关，并非“测不准”

不确定性关系是由微观粒子的波动性引起的！

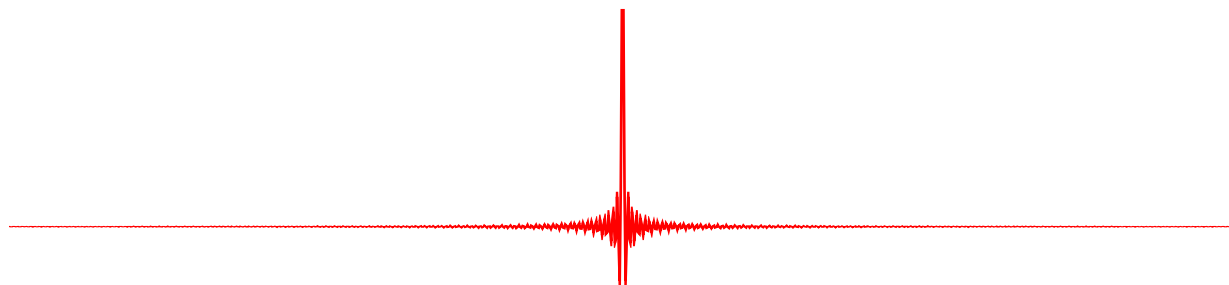
四、不确定关系的物理含义

1. 微观粒子不可能同时具有确定的空间位置和相应的动量

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

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

$$\Delta x \rightarrow 0, \Delta p_x \rightarrow \infty$$



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



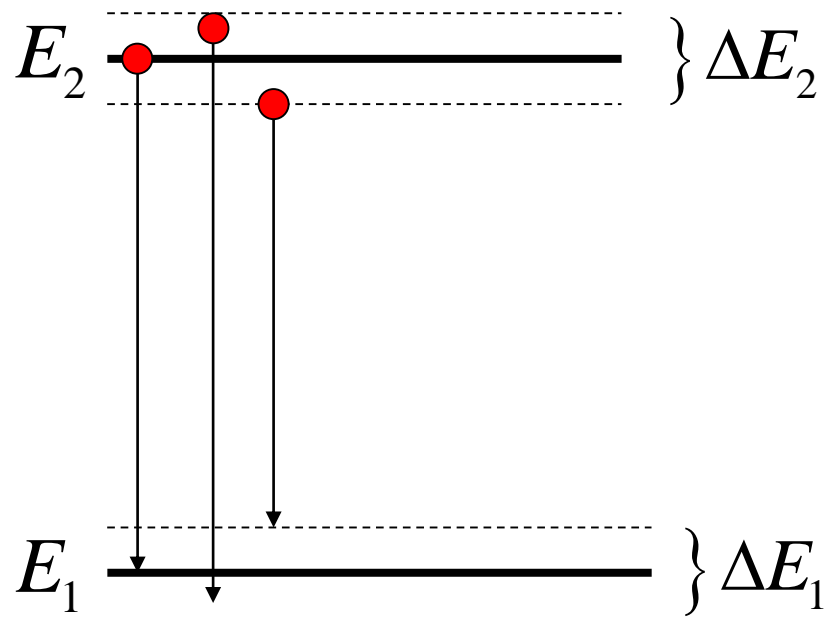
$$\psi_{P_0}(x) \sim e^{i(p_0x - Et)/\hbar}$$

2.能级的自然宽度

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

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

能级与跃迁的不确定关系



能级和谱线的自然宽度

不确定关系是波粒二象性的必然结果！

About Heisenberg's uncertainty principle

Einstein made the remark

"God does not play dice."

Bohr replied

"Einstein, stop telling God what to do."

--The 1927 Solvay Conference, Belgium

五、不确定性原理的重要意义

1.与经典不同，微观粒子具有完全不同的运动形式

- 无轨道
- 因果律不同：经典粒子满足决定论，微观粒子满足统计因果论

2.否定了用经典力学的方法研究微观粒子

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

六、不确定性原理的应用

估算氢原子的最小能量（基态能量）

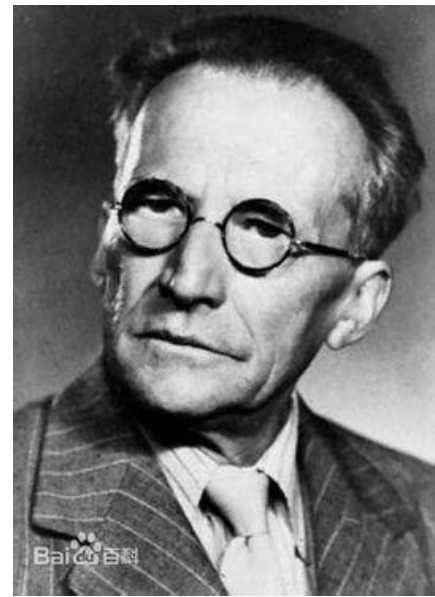
$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \left\{ \begin{array}{l} \Delta r \simeq r \\ \Delta p \simeq p \\ \Delta p \Delta r \simeq \hbar \end{array} \right. \Rightarrow r \simeq \frac{\hbar}{p}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{pe^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \quad \frac{dE}{dp} = 0 \Rightarrow p = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar}$$

$$E = -\frac{m}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 \simeq -13.6 \text{eV}$$

2.4 薛定谔(Schrödinger)方程 (1925)

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



Erwin
Schrödinger,
1887~1961),
[奥地利](#)物理学家

一、方程的引入

以自由粒子为例引入方程

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

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

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

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

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

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

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

波函数对时间一次微分

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

波函数对坐标二次偏微分

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

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

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

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

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) = E \psi(\mathbf{x}, t) \quad \text{自由粒子} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

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

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

——自由粒子的Schrödinger方程

二、Schrödinger方程的一般形式

对于处于势场中的粒子，除了动能，还有势能

$$E = E_k + E_p$$

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

哈密顿(Hamiltonian)量

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

Schrödinger方程的一般形式

三、定态Schrödinger方程

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

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

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

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} \psi(\mathbf{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \right] f(t)$$

$$1. \quad i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(\mathbf{x})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \right] = E$$

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = E \quad f(t) = C e^{-iEt/\hbar}$$

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

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

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

——定态Schrödinger方程

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

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

意义：定态时粒子在空间的几率密度分布不随时间改变。

2.5 力学量的算符表示、平均值和本征值

一、力学量的算符表示

1. 算符

算符代表对波函数的一种运算

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

2. 微观粒子运动的力学量用算符表示

$$x \rightarrow \hat{x}, \quad p \rightarrow \hat{p}, \quad F \rightarrow \hat{F}$$

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

3. 算符的运算

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

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

单位算符 $\hat{I}\psi = \psi$

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

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

4. 常见算符

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

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

Hamiltonian算符

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

定态Schrödinger方程

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



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

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

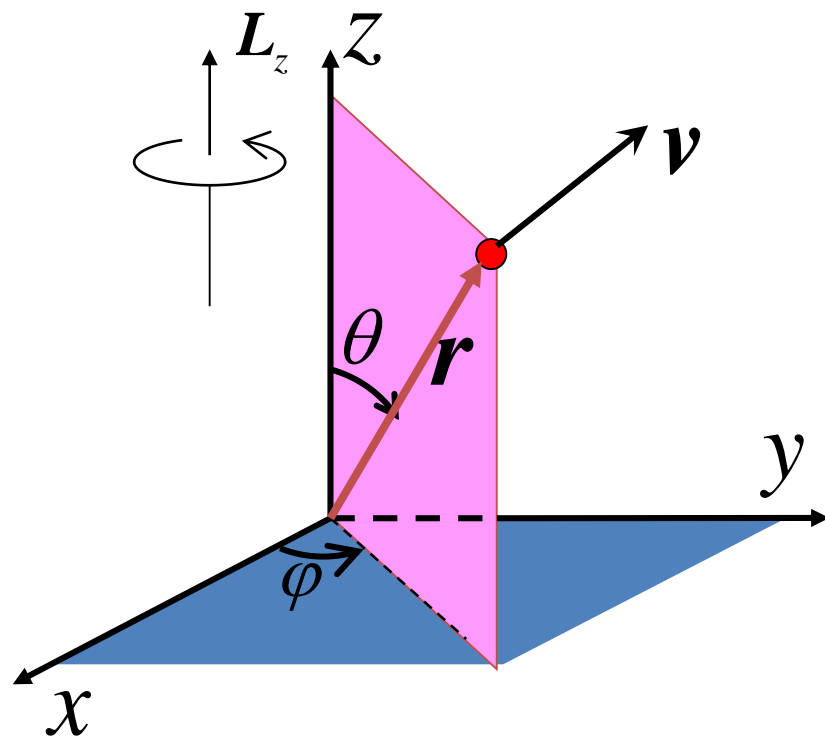
$$\begin{aligned}\mathbf{L} &= (x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z) \times (p_x\mathbf{e}_x + p_y\mathbf{e}_y + p_z\mathbf{e}_z) \\ &= (yp_z - zp_y)\mathbf{e}_x + (zp_x - xp_z)\mathbf{e}_y + (xp_y - yp_x)\mathbf{e}_z\end{aligned}$$

在直角坐标系中

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

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

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



球坐标系中的角动量算符

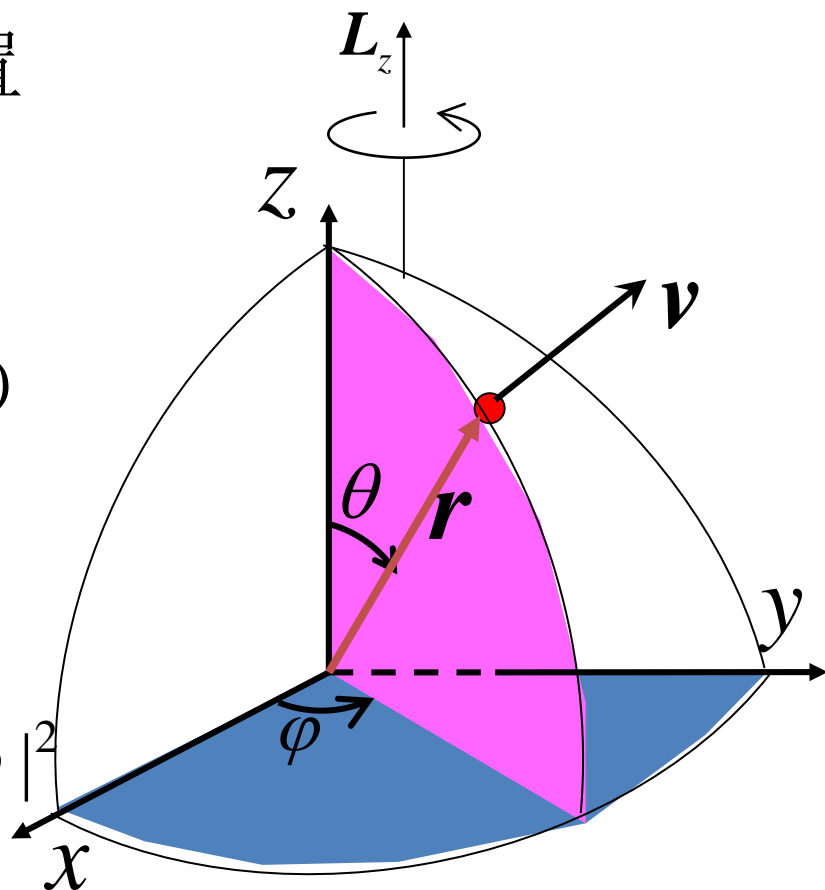
- 用 $(\mathbf{r}, \theta, \varphi)$ 表征粒子的位置

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

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

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

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



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

二、力学量的平均值

力学量的测量值或期望值

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

内积

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

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

三、力学量的本征值与本征函数

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

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

f为实数
——力学量F的本征方程



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

f_n : 力学量F的本征值

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

定态Schrödinger方程

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

Hamiltonian本征方程
或能量的本征值方程

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

E为实数

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

四、力学量对易

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

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

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

F和G是**对易**的

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

量子性小结

- 一切结论都建立在**物理实验**的基础之上

Schrödinger方程

可以用波函数（复振幅函数，几率幅）描述粒子的状态

强度 = 粒子数 = 粒子在空间某处出现的几率

束缚粒子具有量子态 用波粒二象性解释双缝干涉实验 不确定关系

波粒二象性，物质波

若干物理实验

- 玻尔：如果谁在量子理论面前不感到震惊，他就不懂得现代物理学；同样如果谁不为此理论感到困惑，他也不是一个好的物理学家。
- If people like you don't learn from what happened to people like me, then what the hell is the point of anything?