第二章 量子物理的基本概念与框架（14）

2.1 波函数与薛定谔方程（3）
2.2 力学量与算符 （3）
2.3 基矢与表象（4）
2.4 测量与不确定原理 （2）
2.5 本章总结 （2）

2.1 波函数与薛定谔方程

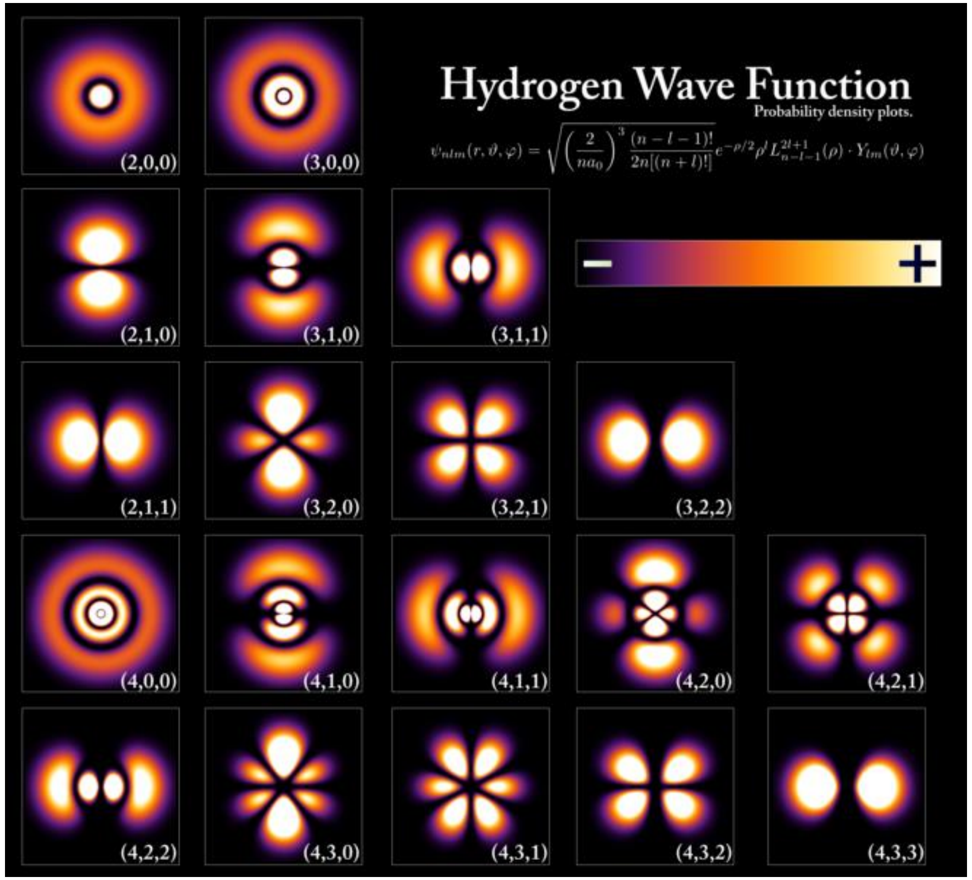
1. 波函数及其性质
   ① 离散位置空间的“波函数”： ψ_1、 ψ_2、 $\psi_3 \dots$
   ② 连续位置空间的波函数：$\psi(x,t)$
   ③ 波函数的模平方$|\psi(x,t)|^2$代表在某个时刻t，在空间中一点x找到例子的几率密度
   ④ $c\psi(x,t)$与$\psi(x,t)$代表的是相同的状态
   ⑤ 波函数的归一化
   ⑥ 多粒子体系的波函数
   ⑦ 哪些波函数是允许的？一般来说，只要能通过某种方式归一化都可以。（ “标准条件”： 有限、连续、单值）

波函数举例

- 谐振子的波函数：
  - $\psi(x) \cong e^{-m\omega x^2/2\hbar}$
  - $\psi(x) \cong xe^{-m\omega x^2/2\hbar}$
- 一维无限深势阱的波函数
  - $\psi(x) \cong \begin{cases} \sin\left(\frac{\pi}{W}nx\right) & \text{0<x<W} \\ 0 & otherwise \end{cases}$

波函数举例

- 氢原子的波函数



2.1 波函数与薛定谔方程

2. 态叠加原理

① 量子态的概念，波函数与量子态的对应关系

② 态叠加原理——如果波函数$\psi_1(x,t)$和$\psi_2(x,t)$对应的量子态是粒子可能的状态，那么对于任意复数c_1和c_2，$\psi(x,t)=c_1\psi_1(x,t)+c_2\psi_2(x,t)$也同样对应粒子的可能状态，叫做叠加态

③ 处于叠加态$\psi(x,t)$的粒子，既处于$\psi_1(x,t)$中，又处于$\psi_2(x,t)$中，并且几率分别是$|c_1|^2$和$|c_2|^2$，这是经典物理所绝不允许的，但是又是量子物理的核心

④ 态叠加原理导致了或者说反映了物质波作为一种波的可叠加性

2.1 波函数与薛定谔方程

3. 态的分解（展开）

① 态叠加原理的反向表述：只要我们可以把粒子所处的波函数$\psi(x,t)$写成$\psi(x,t)=c_1\psi_1(x,t)+c_2\psi_2(x,t)$的形式，我们就可以说粒子处于$\psi_1(x,t)$和$\psi_2(x,t)$的叠加态

② 例如$\psi(x,t)=(\mathrm{a}x^2+bx)e^{-x^2}$,可以认为是波函数$x^2e^{-x^2}$和$xe^{-x^2}$分别对应的态的叠加，也可以认为是波函数$(x^2+x)e^{-x^2}$和$(x^2-x)e^{-x^2}$分别对应的态的的叠加，... 原则上可以任意分解

高斯积分

- $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$
- $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\pi/a}$
- $\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-ax^2} dx = 0$
- $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a}\sqrt{\pi/a}$

delta函数

- 函数 $G_a(x) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-(x/a)^2}$ （a>0） 曲线形状
- 当$a \to 0$时， $G_a(x)$称为delta函数，记做$\delta(x)$
- $\delta(x) \cong \begin{cases} +\infty & x = 0 \\ 0 & x \neq 0 \end{cases}$
- $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$
- $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x) dx = f(0)$
- $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - x_0) dx = f(x_0)$
- $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$

傅里叶变换复习

1. 积分公式
   $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-ix\nu} dx = 2\pi\delta(\nu)$
2. 傅里叶变换与反变换：
   $g(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\mathrm{e}^{-ix\nu} dx \qquad f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} g(\nu)\mathrm{e}^{ix\nu} d\nu$
   或者
   $F(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\mathrm{e}^{-i2\pi x\xi} dx \qquad f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\xi)\mathrm{e}^{i2\pi x\xi} d\xi$
3. 傅里叶变换有用的本质原因：$\{\mathrm{e}^{-ix\nu}\}$是正交完备基
4. 傅里叶变换的应用：解微分方程
   $f(x) \to g(\nu)$，则$f'(x) \to i\nu g(\nu)$
5. 分离变量法

2.1 波函数与薛定谔方程

3. 态的分解（展开）

① 一类特殊的分解：平面波展开

a. 平面波$\psi_p(x) = e^{i\frac{p}{\hbar}x}/\sqrt{2\pi\hbar}$对应的物质波动量为$p$

b. $\{\psi_p(x)\}$满足归一化关系$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{p'}^*(x)\psi_p(x)dx = \delta(p-p')$

c. 任何波函数都可以用$\{\psi_p(x)\}$展开：$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p)\psi_p(x)dp$

其中$c(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^*(x)\psi(x)dx$

d. 这本质上就是傅里叶变换

e. 三维推广

2.1 波函数与薛定谔方程

4. 薛定谔方程

① 描述了波函数在空间、时间传播（演化）的方式

② 三维形式 $i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)+V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$

③ 一维形式 $i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+V(x,t)\psi(x,t)$

④ 多粒子体系的薛定谔方程

2.1 波函数与薛定谔方程

4. 薛定谔方程
   ⑤ 如何从$\psi(x,0)$ 得到$\psi(x,t)$?
   ⑥ 任意时刻的波函数在全空间的分布决定了过去和将来的波函数，所以波函数代表了量子体系的状态
   ⑦ 平面波随时间的演化
   ⑧ 定态薛定谔方程(分离变量法)
   ⑨ 通过找出所有定态薛定谔方程的解，去解任意波函数的演化
   ⑩ 几率密度守恒

2.1 波函数与薛定谔方程

4. 薛定谔方程

⑩ 几率密度守恒

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0$$

$$\rho = \psi^*\psi$$

$$\boldsymbol{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)$$

2.2 力学量与算符

1. 力学量：物理是一门实验科学，理论要能够对实验进行描述和预测，所以量子物理需要对于实验中观测的力学量进行描述，力学量举例：位置、势能、动量、动能、角动量

   ① 位置相关的力学量：

   a. x的取值和几率 $\psi^*(x)\psi(x)/\int\psi^*(x')\psi(x')dx'$

      由波函数的定义得出，也可以等价地由delta函数的展开得到

   b. x的期望值 $\int x\psi^*(x)\psi(x)dx\,/\int\psi^*(x)\psi(x)dx$

   c. 势能：V(x)的取值、几率、期望值

   d. 一般的位置函数：f(x)的取值、几率、期望值

2.2 力学量与算符

② 动量相关的力学量：

a. p的取值和几率$c^*(p)c(p)/\int c^*(p')c(p')dp'$

由波函数的平面波展开得到

b. p的期望值 $\frac{\int pc^*(p)c(p)dp}{\int c^*(p)c(p)dp}$

c. 动能：T(p)的取值、几率、期望值

d. 一般的位置函数：f(p)的取值、几率、期望值

③ 角动量 $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$ 怎么处理？需要引入算符的概念

2.2 力学量与算符

2. 算符

① 算符是作用于函数的一种操作，把一个函数变换为另外一个函数 $\hat{F}u = v$，例如求导、数乘、开根号、三次方等等

② 算符运算的定义：算符相等、单位算符、算符求和（交换律与结合律）、算符乘积（交换律与对易关系、反对易关系）

③ 线性算符：如果算符$\hat{F}$对任意函数u_1和u_2及复数c_1和c_2，均有 $\hat{F}(c_1u_1 + c_2u_2) = c_1\hat{F}u_1 + c_2\hat{F}u_2$，那么$\hat{F}$叫做线性算符
例：微商、数乘都是线性算符，开根号、三次方不是
量子物理只关注线性算符

2.2 力学量与算符

2. 算符
   ④ 有了算符，我们就可以用算符去表示力学量
   ⑤ 算符的本征值与本征函数及其物理含义
   ⑥ 量子物理中，力学量用算符表示
      a. 算符$\hat{f}$的本征态代表测量该力学量一定会得到确定结果的态$\{\psi_f(x)\}$
      b. 根据态叠加原理，任何态都可以用这些本征态展开，展开的系数$c(f)$对应于测量该力学量得到不同结果的几率幅
      c. 力学量在态$\psi(x)$中的期望值有两种写法：
      $\langle f\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\hat{f}\psi(x)dx \,/ \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx$，$\langle f\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}c^*(f)fc(f)df \,/ \int_{-\infty}^{+\infty}c^*(f)c(f)df$，
      这两种写法是等价的

2.2 力学量与算符

2. 算符

⑦ 位置及其函数的算符表示：$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$, $f(\hat{x})\psi(x) = f(x)\psi(x)$,

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\xi)\hat{x}\psi(\xi)d\xi \,/ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\xi)\psi(\xi)d\xi$$

⑧ 验证delta函数是位置算符的本征态

⑨ 动量的算符表示：

a. 三维： $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$， $\hat{\boldsymbol{p}}\psi(x) = -i\hbar\nabla\psi(x)$

一维： $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$， $\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$

b. 验证平面波是动量算符的本征态

c. 验证对于一般波函数，动量期望值可以写成

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\hat{p}\psi(x)dx \,/ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx$$

2.2 力学量与算符

2. 算符

⑩ 再谈定态薛定谔方程

a. 哈密顿算符：$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = T(\hat{p}) + V(\hat{x})$

b. $i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x,t)$

c. 定态方程是哈密顿算符的本征方程

d. 解出了哈密顿算符的本征方程，就可以得到任意波函数的演化

2.2 力学量与算符

2. 算符

⑪ 除了哈密顿算符外，还有一个重要的x,p混合算符：角动量

$$\widehat{L_x} = y\widehat{p_z} - z\widehat{p_y}$$
$$\widehat{L_y} = z\widehat{p_x} - x\widehat{p_z}$$
$$\widehat{L_z} = x\widehat{p_y} - y\widehat{p_x}$$
$$\widehat{L^2} = \widehat{L_x}^2 + \widehat{L_y}^2 + \widehat{L_z}^2$$

⑫ x,p的对易关系，Lx,Ly,Lz的对易关系（作业）