第8章：表象变换与量子力学的矩阵形式

2017年6月3日　　9:18

- ☐ Schrödinger图像，Heisenberg图像，相互作用图像
- ☐ 量子态的不同表象
- ☐ 力学量的矩阵表示与表象变换
- ☐ 量子力学的矩阵形式
- ☐ Dirac符号

Schrödinger图像，Heisenberg图像，相互作用图像

Schrödinger图像，时间演化算符

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

假设有时间演化算符 $\hat{U}(t)$, 使得 $\psi(t)=\hat{U}(t,0)\psi(0)$, 则有

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,0)}{\partial t}\psi(0)=\hat{H}\hat{U}(t,0)\psi(0)$$

$$\Longrightarrow i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,0)}{\partial t}=\hat{H}\hat{U}(t,0)$$

$$\Longrightarrow\frac{1}{\hat{U}(t)}\frac{\partial\hat{U}(t,0)}{\partial t}=-\frac{i\hat{H}}{\hbar}$$

$$\Longrightarrow\hat{U}(t,0)=e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$$

由于 $\hat{H}=\hat{H}^{\dagger}$, 所以$\hat{U}\hat{U}^{\dagger}=1$

时间演化算符 $\hat{U}(t,0)=e^{-iHt/\hbar}$ 是幺正算符

★ Schrödinger图像中波函数显含时间，力学量算符不显含时间

但是力学量平均值含时

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

? 能否让波函数不显含时间，力学量显含时间

$$\bar{F}(t) = \big(\psi(t), F\psi(t)\big) = \big(\hat{U}(t,0)\psi(0), F\hat{U}(t,0)\psi(0)\big)$$
$$= \big(\psi(0), \hat{U}^\dagger(t,0)F\hat{U}(t,0)\psi(0)\big)$$
$$= \big(\psi(0), \hat{F}(t)\psi(0)\big)$$
$$\hat{F}(t) = \hat{U}^\dagger(t,0)\hat{F}\hat{U}(t,0) = e^{iHt/\hbar}\hat{F}e^{-iHt/\hbar}$$

Heisenberg 图像

力学量算符 $\hat{F}(t)$ 显含时间，波函数 $\psi(0)$不显含时间

$$\frac{d}{dt}\hat{F}(t) = \left[\frac{d}{dt}\hat{U}^\dagger(t,0)\right]\hat{F}\hat{U}(t,0) + \hat{U}^\dagger(t,0)\hat{F}\frac{d}{dt}\hat{U}(t,0)$$
$$= \frac{1}{i\hbar}\left(-\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{F}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{F}\hat{H}\hat{U}\right)$$
$$= \frac{1}{i\hbar}\left(-\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{F}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{F}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}\right)$$
$$= \frac{1}{i\hbar}\left(-\hat{H}\hat{F}(t) + \hat{F}(t)\hat{H}\right)$$

Heisenberg方程

$$\frac{d}{dt}\hat{F}(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{F}(t),\hat{H}\right]$$

两种图像是等价的，凡物理上可测的结果都不会因所采取图像不同而异。例如，力学量的平均值和概率分布。守恒量在两个表象中也是等价的。

处理具体问题时，可根据情况采用较方便的图像

$$F_S(t) = F_S(0) = F_S \qquad \text{（与时间无关）}$$
$$F_H(t) = e^{iHt/\hbar}F_S e^{-iHt/\hbar}$$
$$\frac{d}{dt}F_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[F_H(t), H]$$

$$\psi_H(t) = \psi_H(0) = \psi_S(0) = e^{iHt/\hbar}\psi_S(t)$$
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_S(t) = H\psi_S(t)$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_H(t) = 0$$

相互作用图像

$H = H_0 + H'$

通常H'表示体系与外界的相互作用，而H_0表示体系本身

$$\psi_I(t)=\exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)\psi_S(t)\text{，即 }\psi_S(t)=\exp(-\mathrm{i}H_0t/\hbar)\psi_I(t) \quad (5.3.21)$$

容易证明

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t)=\exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)(-H_0+H)\psi_S(t)=\exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)H'\psi_S(t)$$
$$=\exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)H'\exp(-\mathrm{i}H_0t/\hbar)\cdot\exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)\psi_S(t)$$

即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t)=H_I'(t)\psi_I(t) \quad (5.3.22)$$

式中

$$H_I'(t)=\exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)H'\exp(-\mathrm{i}H_0t/\hbar) \quad (5.3.23)$$

算符

$F_I(t)=\exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)F\exp(-\mathrm{i}H_0t/\hbar)$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F_I(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F_I(t),H_0]$$

在相互作用图像中，态矢 $\psi_I(t)$ 和力学量（算符）$\hat{F}_1(t)$都随时间而演化．态矢的演化由相互作用$H'(t)$来支配，而力学量（算符）随时间的演化则由H_0支配．相互作用图像是介于 Schrodinger 图像和 Heisenberg图像之间的一种图像。

量子态的不同表象，么正变换

图像：含时演化的三种图像

表象：基矢选择的不同，构造出不同的表象：坐标表象，动量表象

例如，一维无限深势阱有一系列本征函数

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right),$$

如果势阱宽度增加一倍，则变为

$$\phi_n=\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$$

两组都是一系列正交归一的完备本征函数系。如果一个量子态可以表示为

$\psi=\sum C_m\psi_m$

那必然也可以表示为

$\psi=\sum C_m'\phi_m$

? 如何从一套本征函数系到另外一套本征函数系

$\sum C_m\psi_m=\sum C_m'\phi_m$

左乘 ψ_{n^*}然后积分

$C_n=\sum C_m'(\psi_n,\phi_m)$

如果定义矩阵元 $S_{nm}=(\psi_n,\phi_m)$

$$\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\\cdot\\\cdot\\\cdot\\C_n\end{pmatrix}=S\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\\cdot\\\cdot\\\cdot\\C_n\end{pmatrix}$$

S是幺正矩阵

$$(S^\dagger S)_{mn} = \sum_l (S^\dagger)_{ml} S_{ln} = \sum_l S^*_{lm} S_{ln} = \sum_l (\phi_m, \psi_l)(\psi_l, \phi_n)$$

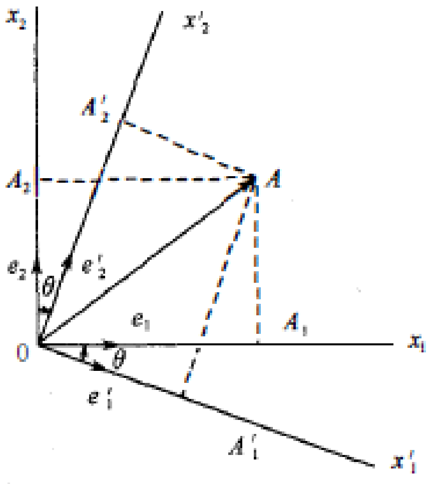
$$= \sum_l \int dx^3 \int dx'^3 \phi^*_m(\boldsymbol{r}) \psi_l(\boldsymbol{r}) \psi_l(\boldsymbol{r}') \phi_n(\boldsymbol{r}')$$

$$= \sum_l \int dx^3 \int dx'^3 \phi^*_m(\boldsymbol{r}) \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \phi_n(\boldsymbol{r}')$$

$$= \sum_l \int dx^3 \phi^*_m(\boldsymbol{r}) \phi_n(\boldsymbol{r})$$

$$= \delta_{mn}$$

? 一套完备的正交归一本征函数系有何意义



如图，平面直角坐标系基矢为$\boldsymbol{e_1}, \boldsymbol{e_2}$, 彼此正交 $(\boldsymbol{e_i}, \boldsymbol{e_j}) = \delta_{ij}$

平面上任意矢量可以表示为

$\boldsymbol{A} = A_1 \boldsymbol{e}_1 + A_2 \boldsymbol{e}_2$

$A_1 = (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{A}), A_2 = (\boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{A})$

现在假设另取一个直角坐标系 $x_1' x_2'$，相当于原来坐标系顺时针转过 θ 角，其基矢分别用 $\boldsymbol{e}_1'$、$\boldsymbol{e}_2'$ 表示，而

$$(\boldsymbol{e}_i', \boldsymbol{e}_j') = \delta_{ij}, \qquad i, j = 1, 2$$

同一个矢量 $\mathbf{A}$，在此新坐标系中表示为

$$\mathbf{A} = A_1' \boldsymbol{e}_1' + A_2' \boldsymbol{e}_2'$$

其中

$$A_1' = (\boldsymbol{e}_1', \mathbf{A}), \qquad A_2' = (\boldsymbol{e}_2', \mathbf{A})$$

$$\boldsymbol{A} = A_1\boldsymbol{e}_1 + A_2\boldsymbol{e}_2 = A_1'\boldsymbol{e}_1' + A_2'\boldsymbol{e}_2'$$

上式分别用 $\boldsymbol{e}_1'$、$\boldsymbol{e}_2'$ 点乘(取标积),得

$$A_1' = A_1(\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_1) + A_2(\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2)$$
$$A_2' = A_1(\boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_1) + A_2(\boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_2)$$

表示成矩阵形式,则为

$$\begin{pmatrix} A_1' \\ A_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_1) & (\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2) \\ (\boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_1) & (\boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A_1' \\ A_2' \end{pmatrix} = R(\theta) \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}$$

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$R^+ R = RR^+ = 1$

任意量子态可由一组正交完备基矢构成，与平面空间里的基矢相类似，定义这一正交完备基矢的空间为Hilbert空间