第四章 量子力学的假定

- 假定的陈述

体系的态的描述、物理量的描述、物理量的测量、体系随时间的演变、量子化规则

- 关于可观测量及其测量的假定的物理解释

量子化规则与波函数的概率解释的一致性、某些物理量的量子化、测量的机制、可观测量在指定态中的平均值、方均根偏差、可观察量的相容性

- 薛定谔方程的物理意义

薛定谔方程的普遍性质、保守体系的情况

- 叠加原理和物理上的预言

概率辐与干涉效应

§ 4.1 假定的陈述

一、体系的态的描述

我们首先用一个平方可积波函数来描述粒子在指定时刻的态

然后，我们用态空间$\mathcal{E}$中的一个右矢和每一个波函数联系起来：给出$\mathcal{E}_r$空间中的右矢$|\psi\rangle$等价于给出对应的波函数 $\psi(\vec{r})=\langle\vec{r}|\psi\rangle$

因此，一个粒子在确定时刻的量子态可由 $\mathcal{E}$ 空间中的一个右矢来描述。

现在，我们就以这种形式将态的概念推广到一个任意的物理体系.

第一个假定：在确定的时刻$\boldsymbol{t_0}$，一个物理体系的态由态空间$\mathcal{E}$中一个特定的右矢 $|\psi(t_0)\rangle$来确定.

由于态空间$\mathcal{E}$为矢量空间，因此，第一个假定隐含叠加原理：若干态矢量的线性组合也是一个态矢量。

二、物理量的描述

第二个假定：每一个可以测量的物理量$\mathcal{A}$都可以用在$\mathcal{E}$空间中起作用的一个算符A来描述；这个算符是一个观察算符.

三、物理量的测量

1、可能的结果

第三个假定：每次测量物理量$\mathcal{A}$，可能得到的结果，只能是对应的观察算符$\boldsymbol{A}$的本征值之一

(i)按定义，A是厄米算符，所以测量所得的结果总是实数；

(ii)如果的谱是离散的，那么，测量可能得到的结果就是量子化的。

2、谱分解原理

已知体系在指定时刻的态由归一化右矢$|\psi\rangle$描述

如何预言在该时刻测量物理量$\mathcal{A}$所得的结果？

α、离散谱情形

设算符A的谱是纯粹离散谱。如果A的全体本征值a_n是非简并的，则只有一个本征值相联系的本征矢（除相位因子外）$|u_n\rangle$：

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$$

由于算符A是观察算符，归一化的$|u_n\rangle$的集合构成$\mathcal{E}$中的一个正交归一基

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|u_n\rangle$$

假定测量$\mathcal{A}$时得到结果a_n的概率P(a_n)为 $\mathbf{P}(a_n) = |c_n|^2 = |\langle u_n|\psi\rangle|^2$

第四个假定（非简并的离散谱的情况）：若体系处于归一化的态$|\psi\rangle$中，则测量物理量$\boldsymbol{\mathcal{A}}$得到的结果为对应观察算符$\boldsymbol{A}$的非简并本征值$\boldsymbol{a_n}$的概率$\mathbf{P}(\boldsymbol{a_n})$是

$$\mathbf{P}\left(a_n\right)=\left|\left\langle u_n \mid \psi\right\rangle\right|^2$$

其中$|u_n\rangle$为已归一化的本征矢，属于本征值$\boldsymbol{a_n}$

如果$\boldsymbol{A}$的某些本征值$\boldsymbol{a_n}$是简并的：

$$A\left|u_n^i\right\rangle = a_n\left|u_n^i\right\rangle, i = 1, 2, \cdots, g_n$$

$|\psi\rangle$可以按正交归一基$\left\{\left|u_n^i\right\rangle\right\}$展开

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \left|u_n^i\right\rangle$$

概率$\mathbf{P}(\boldsymbol{a_n})$为

$$\mathbf{P}\left(a_n\right) = \sum_{i=1}^{g_n}\left|c_n^i\right|^2 = \sum_{i=1}^{g_n}\left|\left\langle u_n^i \middle| \psi\right\rangle\right|^2$$

第四个假定（离散谱的情况）：若体系处于归一化的态$|\psi\rangle$中，则测量物理量$\mathcal{A}$得到的结果为对应观察算符$\boldsymbol{A}$的本征值$\boldsymbol{a_n}$的概率$\mathbf{P}(\boldsymbol{a_n})$是

$$\mathbf{P}\left(a_n\right) = \sum_{i=1}^{g_n}\left|\left\langle u_n^i \middle| \psi\right\rangle\right|^2$$

其中$\boldsymbol{g_n}$为简并度，$\left\{\left|u_n^i\right\rangle\right\}$为一组正交归一矢量。

β、连续谱情形

设算符A的谱是连续谱。且没有简并，算符A的广义上已正交归一化的本征矢集$\{|v_\alpha\rangle\}$构成$\mathcal{E}$空间的一个连续基：

$$A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle$$

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}\alpha c(\alpha)|v_\alpha\rangle$$

测量物理量$\mathcal{A}$的值介于α和α+dα之间的概率为

$$\mathrm{d}\,\mathbf{P}\,(\alpha) = \rho(\alpha)\mathrm{d}\alpha \qquad \rho(\alpha) = |c(\alpha)|^2 = \left|\langle v_\alpha|\ \psi\rangle\right|^2$$

第四个假定（非简并的连续谱的情况）：若体系处于归一化的态$|\psi\rangle$中，则测量物理量$\mathcal{A}$得到的结果介于α和α+dα之间的**dP(α)**是

$$\mathbf{dP}\,(\alpha) = \left|\langle v_\alpha|\ \psi\rangle\right|^2 \mathrm{d}\alpha$$

其中$|v_\alpha\rangle$为与物理量$\mathcal{A}$相联系的观察算符A的本征矢，属于本征值α

讨论：

如果假设中的归一化条件无法得到满足，则概率或概率密度应改为：

$$\mathbf{P}\left(a_n\right)=\frac{1}{\langle\psi|\ \psi\rangle}\left(\sum_{i=1}^{g_n}\left|c_n^i\right|^2\right)$$

$$\rho(\alpha)=\frac{1}{\langle\psi|\ \psi\rangle}|\,c(\alpha)\,|^2$$

γ、重要后果

考察右矢 $|\psi\rangle$ 和 $|\psi'\rangle$ ： $|\psi'\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\,|\psi\rangle$

我们从 $|\psi\rangle$ 或 $|\psi'\rangle$ 得出的概率性预言是一样的：

$$\left|\langle u_n^i|\ \psi'\rangle\right|^2 = \left|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\langle u_n^i|\ \psi\rangle\right|^2 = \left|\langle u_n^i|\ \psi\rangle\right|^2$$

考察非归一化的右矢 $|\psi''\rangle$： $|\psi''\rangle = \alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\,|\psi\rangle$

得出的概率性预言与 $|\psi\rangle$ 是一样的

互成比例的两个态矢量表示同一物理状态

3、波包的收缩

假设我们希望在指定的时刻测量物理量，如果我们已知刚要测量时描述体系状态的右矢$|\psi\rangle$，那么，就可以按第四个假定来预言得到各种可能结果的概率。

但是在实际进行一次测量时，我们所得到的结果显然只是这些可能结果中的一个，刚测量之后，就不能说“得到这个结果或得到那个结果的概率”了.

刚测量之后体系所处的状态（这个态应当包含这种信息）与$|\psi\rangle$态是不同的.

考虑测量$\mathcal{A}$得到的结果是观察算符A的一个非简并本征值a_n的情况，假定刚测量后体系的态矢量是与a_n相联系的本征矢$|u_n\rangle$

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(a_n)} |u_n\rangle$$

如果紧接着第一次测量再对$\mathcal{A}$进行第二次测量，那么一定得到同样的a_n，因为进行第二次测量时，体系的态是$|u_n\rangle$

如果测量$\mathcal{A}$得到的结果是观察算符A的一个简并本征值$\boldsymbol{a_n}$

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \left|u_n^i\right\rangle$$

测量引起的态矢量的变化为

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(a_n)} \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} \left|c_n^i\right|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \left|u_n^i\right\rangle$$

右边是$|\psi\rangle$在$\boldsymbol{a_n}$的本征子空间上的投影，可用投影算符表示

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(a_n)} \frac{P_n |\psi\rangle}{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}$$

第五个假定：如果对处于$|\psi\rangle$态的体系测量物理量$\boldsymbol{\mathcal{A}}$得到的结果$\boldsymbol{a_n}$，则刚测量之后体系的态是$|\psi\rangle$在属于$\boldsymbol{a_n}$的本征子空间上的归一化投影

$$\frac{P_n|\psi\rangle}{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}$$

四、体系随时间的演变

第六个假定：态矢量$|\psi\rangle$ 随时间的演化遵从薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$$

式中$\boldsymbol{H(t)}$是与体系的总能量相联系的观察算符。

$\boldsymbol{H(t)}$称为体系的哈密顿算符

五、量子化规则

对于经典力学中的物理量$\mathcal{A}$怎样构成量子力学钟描述该物理量的算符A？

与粒子位置$\vec{r}\left(x,y,z\right)$相联系的算符$R\left(X,Y,Z\right)$；
与粒子动量$\vec{p}\left(p_x,p_y,p_z\right)$相联系的算符 $P\left(P_x,P_y,P_z\right)$

粒子的任何一个物理量都可以表示为基本力学变量$\vec{r}$和$\vec{p}$ 的函数：$\mathbf{A}\ \left(\vec{r},\vec{p}\right)$

要得到对应的观察算符可以将$\mathbf{A}\ (\vec{r},\vec{p})$经过适当对称化，将变量 $\vec{r}$ 与 $\vec{p}$ 换成观察算符$\boldsymbol{R}$和$\boldsymbol{P}$

还存在着一些量子的物理量，它们并没有对应的经典物理量；这些量将由对应的观察算符直接定义（例如，粒子的自旋）.

§4.2 关于可观测量及其测量的假定的物理解释

一、量子化规则与波函数的概率解释的一致性

若将第四个假定应用于这些观察算符，我们便会重新得到关于波函数及其傅里叶变换的概率解释

简单起见，考虑一维问题，假定粒子处于归一化的态$|\psi\rangle$，则测量粒子位置所得到结果介于x和$x+\mathrm{d}x$之间的概率为

$$\mathbf{dP}\ (x)=\left|\langle x|\ \ \psi\rangle\right|^2 \mathrm{d}x$$

$$\psi(x)=\langle x|\psi\rangle$$

所以波函数模的平方就是粒子出现的概率密度。

二、某些物理量的量子化

根据第三个假定，便可以解释某些物理量（例如原子的能量）的量子化

但这并不是说所有的物理量都是量子化的，因为还有一些观察算符的谱是连续的

可见，以第三个假定为依据的那些物理预言，绝不是事先就是明显的

例如，研究氢原子时，我们从电子在质子的库仑势场中的总能量出发导出哈密顿算符，解出它的本征值方程后，才会发现体系的束缚态只和要计算的某些离散能量值对应，于是，我们不但解释了氢原子能级的量子化，而且预言了能量的可能值，这些值就是实验中可能测得的结果。

三、测量的机制

第四个和第五个假定提出了一些根本性的问题．尤其是怎样理解对量子体系的观察所引起的“基本”干扰的起源这样一个问题，这些问题的起因在于：我们总是离开测量仪器去孤立地研究所观察的体系，然而在观察过程中十分重要的正是体系和仪器之间的相互作用。

本来，我们应该考虑体系和测量仪器的集合，但是，这样将会引起关于测量的详细机制的一些微妙的问题，超出课程范围了。

在这里，我们只需指出这样一点：第四个和第五个假定的非决定性表述是和上面提到的那些问题有关的，例如，进行测量时一个态矢量跃变为另一个态矢量，这就是前面提到的基本干扰的反映．但是，我们不能预言这种干扰究竟是怎样的，因为它依赖于测量的结果，而这个结果又是无法事先确知的。

四、可观测量在指定态中的平均值

第四个假定所提供的预言是用概率来表示的．为了证实这些预言，必须实现在全同条件下进行的次数极多的测量，也就是说，必须对处在同样量子态的为数极多的体系测量同一个物理量。

定义：在$|\psi\rangle$这个态中，可观察量$\boldsymbol{A}$的平均值（记作$\langle A\rangle$或$\langle A\rangle_\psi$）为在处于$|\psi\rangle$这个态的诸体系中对这个可观察量进行很多次(***N***次）测量所得结果的平均值。

我们可以证明，若$|\psi\rangle$是已归一化的，则$\langle A\rangle_\psi$由下列公式给出：

$$\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

证明： 简单起见，只考虑A的谱是纯粹离散谱的情形。

在对A的N次测量中（假设每次测量时，体系都处于$|\psi\rangle$这个态），得到本征值a_n的次数$\mathbf{P}(a_n)$，则

$$\frac{\mathbf{N}(a_n)}{N} \xrightarrow[N\to\infty]{} \mathbf{P}(a_n) \quad 且 \quad \sum_n \mathbf{N}(a_n) = N$$

N次测量的平均值为 $\frac{1}{N}\sum_n a_n \mathbf{N}(a_n)$ 当 $N\to\infty$ 时 $\langle A\rangle_\psi = \sum_n a_n \mathbf{P}(a_n)$

由于 $\mathbf{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \left|\langle u_n^i | \psi\rangle\right|^2$ $\quad \langle A\rangle_\psi = \sum_n a_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi | u_n^i\rangle\langle u_n^i | \psi\rangle$

由于 $A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$ $\quad \langle A\rangle_\psi = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|A|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle = \langle\psi|A\left[\sum_n\sum_{i=1}^{g_n}|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\right]|\psi\rangle$

$$= \langle\psi|A|\psi\rangle$$

五、方均根偏差

定义方均根偏差ΔA：　$\Delta A=\sqrt{\left\langle \left(A-\langle A\rangle\right)^2\right\rangle}$

$$\left\langle \left(A-\langle A\rangle\right)^2\right\rangle=\left\langle A^2\right\rangle-2\left\langle A\langle A\rangle\right\rangle+\langle A\rangle^2=\left\langle A^2\right\rangle-\langle A\rangle^2$$

$$\Delta A=\sqrt{\left\langle A^2\right\rangle-\langle A\rangle^2}$$

设两个可观察量$\boldsymbol{P}$和$\boldsymbol{Q}$，设　$[Q,P]=\mathrm{i}\hbar$

考察　$|\varphi\rangle=(Q+\mathrm{i}\lambda P)|\psi\rangle$　　λ是一个任意的实参量，无论λ取何值 $\langle\varphi|\varphi\rangle\geq 0$

$$\langle\varphi|\varphi\rangle=\langle\psi|(Q-\mathrm{i}\lambda P)(Q+\mathrm{i}\lambda P)|\psi\rangle=\left\langle\psi\left|Q^2\right|\psi\right\rangle+\langle\psi|(\mathrm{i}\lambda QP-\mathrm{i}\lambda PQ)|\psi\rangle+\left\langle\psi\left|\lambda^2P^2\right|\psi\right\rangle$$

$$=\left\langle Q^2\right\rangle-\lambda\hbar+\lambda^2\left\langle P^2\right\rangle\geq 0 \quad\Longrightarrow\quad \hbar^2-4\left\langle P^2\right\rangle\left\langle Q^2\right\rangle\leq 0$$

$$\langle P^2\rangle\langle Q^2\rangle\geq\frac{\hbar^2}{4}$$

引入算符P'和Q'： $P'=P-\langle\psi|P|\psi\rangle$ $Q'=Q-\langle\psi|Q|\psi\rangle$

显然 $[Q',P']=[Q,P]=\mathrm{i}\hbar$

两个也是可观察算符，所以

$$\langle P'^2\rangle\langle Q'^2\rangle\geq\frac{\hbar^2}{4}$$

根据方均根偏差的定义： $\Delta P=\sqrt{\langle P'^2\rangle}$ $\Delta Q=\sqrt{\langle Q'^2\rangle}$

得： $\boxed{\Delta P\cdot\Delta Q\geq\frac{\hbar}{2}}$

海森堡测不准关系：$\begin{cases}\Delta X\cdot\Delta P_x\geq\frac{\hbar}{2}\\ \Delta Y\cdot\Delta P_y\geq\frac{\hbar}{2}\\ \Delta Z\cdot\Delta P_z\geq\frac{\hbar}{2}\end{cases}$

六、可观察量的相容性

考虑两个对易的观察算符***A***和***B***：　　$[A, B]=0$

为简单起见，假设两者的谱都是离散的。根据已证明的定理，在态空间中存在一个由和的共同本征右矢构成的基，可将它记作$|a_n, b_p, i\rangle$

$$A|a_n, b_p, i\rangle = a_n|a_n, b_p, i\rangle$$

$$B|a_n, b_p, i\rangle = b_p|a_n, b_p, i\rangle$$

对于任意的$\boldsymbol{a_n}$和$\boldsymbol{b_p}$（这两个数分别选自***A***的谱和***B***的谱），至少存在这样一个态，在这个态中测量***A***一定得到$\boldsymbol{a_n}$而测量***B***一定得到$\boldsymbol{b_p}$，像***A***、***B***这样可以同时完全确定的可观察量，叫做相容的可观察量。

反之，若***A***与***B***是不可对易的，那么一般说来，一个态矢量不可能同时成为这两个观察算符的本征矢，于是我们就说***A***、***B***这两个可观察量是不相容的。

如果两个可观察量A和B是相容的，那么，测量A所得到的信息不但不会因为对B的测量而遭受损失，而且会因此得到补充；反之亦然，此外，测量这两个可观察量和的顺序是无关紧要的。

不相容的两个可观察量是不能同时测量的，第二次测量会使第一次测量所得信息失去.

例：设态空间为二维的实矢量空间

设 $|u_1\rangle$ 和 $|u_2\rangle$都是A的本征矢, 本征值分别为a_1和a_2

设 $|v_1\rangle$ 和 $|v_2\rangle$都是B的本征矢, 本征值分别为b_1和b_2

算符A和B不对易，两对算符不重合

测量A，假设得到a_1，体系状态过渡到$|u_1\rangle$，再测量B，假设得到b_2，则体系变为 $|v_2\rangle$

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(a_1)} |u_1\rangle \xrightarrow{(b_2)} |v_2\rangle$$

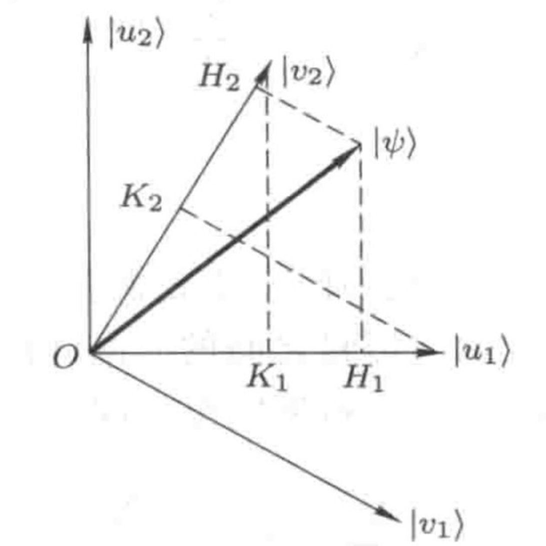
相反顺序测量

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(b_2)} |v_2\rangle \xrightarrow{(a_1)} |u_1\rangle$$

两种情况，体系的终态不同

$$\mathbf{P}\left(a_1, b_2\right) = \left|OH_1\right|^2 \times \left|OK_2\right|^2$$

$$\mathbf{P}\left(b_2, a_1\right) = \left|OH_2\right|^2 \times \left|OK_1\right|^2$$



虽然 $\left|OK_1\right| = \left|OK_2\right|$ ，但一般说来 $\left|OH_1\right| \neq \left|OH_2\right|$

$$\mathbf{P}\left(a_1, b_2\right) \neq \mathbf{P}\left(b_2, a_1\right)$$

不相容的两个可观察量是不能同时测量的，第二次测量会使第一次测量所得信息失去.

§4.3 薛定谔方程的物理意义

一、薛定谔方程的普遍性质

1、物理体系演变的确定性

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$$

是关于t的一阶微分方程。给定 $|\psi(t_0)\rangle$ 就足以决定此后任意时刻t的态

因此，物理体系随时间演变过程中，没有任何不确定性

不确定性出现再测量某个物理量的时候，态矢量发生不可预料的跃变。

两次测量之间，态矢量是按完全确定的方式演化。

2、叠加原理

设$|\psi_1(t)\rangle$ 和$|\psi_2(t)\rangle$是薛定谔方程的两个解，如果初态为

$$|\psi(t_0)\rangle = \lambda_1 |\psi_1(t_0)\rangle + \lambda_2 |\psi_2(t_0)\rangle$$

则对应***t***时刻的态为

$$|\psi(t)\rangle = \lambda_1 |\psi_1(t)\rangle + \lambda_2 |\psi_2(t)\rangle$$

3、态矢量的模方保持常数

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\ \psi(t)\rangle=\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\right]|\psi(t)\rangle+\langle\psi(t)|\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle\right]$$

利用薛定谔方程 $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle$$

取方程两端的厄米共轭 $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|H^{\dagger}(t)=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|H(t)$$

利用了***H*(*t*)**的厄米性

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\ \psi(t)\rangle=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle=0$$

4、概率的局域守恒

考虑单粒子波函数 $\psi\left(\vec{r},t\right)$ $\qquad H=\dfrac{\vec{P}^2}{2m}+V(\vec{r},t)$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t)+\operatorname{div}\vec{J}(\vec{r},t)=0$$

$$\rho(\vec{r},t)=|\psi(\vec{r},t)|^2 \qquad \vec{J}(\vec{r},t)=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left[\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right]=\frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[\psi^*\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\psi\right)\right]$$

5、可观察量的平均值演变

设 $|\psi(t)\rangle$ 为归一化的态矢量

$$\langle A\rangle(t)=\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|A(t)|\psi(t)\rangle=\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\right]A(t)|\psi(t)\rangle+\langle\psi(t)|A(t)\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle\right]+\left\langle\psi(t)\left|\frac{\partial A}{\partial t}\right|\psi(t)\right\rangle$$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|[A(t)H(t)-H(t)A(t)]|\psi(t)\rangle+\left\langle\psi(t)\left|\frac{\partial A}{\partial t}\right|\psi(t)\right\rangle$$

$$\Rightarrow\qquad\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[A,H(t)]\rangle+\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle$$

二、保守体系的情况

1、薛定谔方程的解

考虑**H**的本征值方程 $H\left|\varphi_{n,\tau}\right\rangle = E_n\left|\varphi_{n,\tau}\right\rangle$

简单起见，设**H**的谱是离散的，全体$\left|\varphi_{n,\tau}\right\rangle$构成一个基，则设

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t)\left|\varphi_{n,\tau}\right\rangle \qquad c_{n,\tau}(t) = \left\langle\varphi_{n,\tau} \mid \psi(t)\right\rangle$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_{n,\tau}(t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle\varphi_{n,\tau} \mid \psi(t)\right\rangle = \left\langle\varphi_{n,\tau}\left|\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|\psi(t)\right\rangle = \left\langle\varphi_{n,\tau}\left|H\right|\psi(t)\right\rangle$$

而**H**为厄米算符 $\langle\varphi_{n,\tau}| H = E_n\langle\varphi_{n,\tau}|$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_{n,\tau}(t) = E_n c_{n,\tau}(t) \quad \Rightarrow \quad c_{n,\tau}(t) = c_{n,\tau}\left(t_0\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n\left(t-t_0\right)/\hbar}$$

因此，已知 $|\psi(t_0)\rangle$

在由***H***的本征态构成的基中，展开 $|\psi(t_0)\rangle$

$$\left|\psi\left(t_0\right)\right\rangle=\sum_n\sum_\tau c_{n,\tau}\left(t_0\right)\left|\varphi_{n,\tau}\right\rangle$$

$$c_{n,\tau}\left(t_0\right)=\left\langle\varphi_{n,\tau}\right|\ \psi\left(t_0\right)\rangle$$

$$\Rightarrow\quad|\psi(t)\rangle=\sum_n\sum_\tau c_{n,\tau}\left(t_0\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n\left(t-t_0\right)/\hbar}\left|\varphi_{n,\tau}\right\rangle$$

2、体系的玻尔频率和选择定则

设***B***是体系的任意一个观察算符

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle B\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[B,H]\rangle+\left\langle\frac{\partial B}{\partial t}\right\rangle$$

将 $\psi(t)=\sum_{n}\sum_{\tau}c_{n,\tau}(t_0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t-t_0)/\hbar}\left|\varphi_{n,\tau}\right\rangle$ 取共轭

$$\langle\psi(t)|=\sum_{n'}\sum_{\tau'}c^{*}_{n',\tau'}(t_0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_{n'}(t-t_0)/\hbar}\langle\varphi_{n',\tau'}|$$

$$\langle\psi(t)|B|\psi(t)\rangle=\langle B\rangle(t)=\sum_{n}\sum_{\tau}\sum_{n'}\sum_{\tau'}c^{*}_{n',\tau'}(t_0)c_{n,\tau}(t_0)\left\langle\varphi_{n',\tau'}|B|\varphi_{n,\tau}\right\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(E_{n'}-E_n\right)(t-t_0)/\hbar}$$

级数各项都是振动型，频率为

$$\frac{1}{2\pi}\frac{\left|E_{n'}-E_n\right|}{\hbar}=\left|\frac{E_{n'}-E_n}{h}\right|=\nu_{nn'}$$ 称为体系的玻尔频率

各频率的权重依赖于 $\left\langle\varphi_{n',\tau'}\,|\,B\,|\,\varphi_{n,\tau}\right\rangle$

如果对于$\boldsymbol{n}$和 n' 的某些值，该矩阵元为零，则不管体系的初态如何，对应的$\nu_{nn'}$ 不会在$\langle B\rangle(t)$ 的展开式中出现，由此可得到选择定则。

$$\langle\psi(t)\,|\,B\,|\,\psi(t)\rangle=\langle B\rangle(t)=\sum_n\sum_\tau\sum_{n'}\sum_{\tau'}c^*_{n',\tau'}\left(t_0\right)c_{n,\tau}\left(t_0\right)\left\langle\varphi_{n',\tau'}\,|\,B\,|\,\varphi_{n,\tau}\right\rangle e^{\mathrm{i}\left(E_{n'}-E_n\right)\left(t-t_0\right)/\hbar}$$

3、时间–能量不确定关系式

一个保守系，如果关于能量我们知道得越不准确，那么体系的态随时间演变越快。

设$|\psi(t_0)\rangle$是$\boldsymbol{H}$的两个本征态的线性叠加 $|\psi(t_0)\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle$

$|\varphi_1\rangle$ 和 $|\varphi_2\rangle$属于不同本征值$\boldsymbol{E_1}$和$\boldsymbol{E_2}$

$$|\psi(t)\rangle = c_1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1(t-t_0)/\hbar}|\varphi_1\rangle + c_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2(t-t_0)/\hbar}|\varphi_2\rangle$$

测量能量得到$\boldsymbol{E_1}$或$\boldsymbol{E_2}$，能量的不确定度 $\Delta E \cong |E_1 - E_2|$

假设$\boldsymbol{B}$是一个任意的可观察量，与$\boldsymbol{H}$不对易

在$\boldsymbol{t}$时刻测量$\boldsymbol{B}$，得到与本征矢$|u_m\rangle$对应的本征值$\boldsymbol{b_m}$（设$\boldsymbol{b_m}$非简并）的概率：

$$\mathbf{P}\left(b_m,t\right)=\left|\langle u_m | \psi(t)\rangle\right|^2=\left|c_1\right|^2\left|\langle u_m | \varphi_1\rangle\right|^2+\left|c_2\right|^2\left|\langle u_m | \varphi_2\rangle\right|^2$$

$$+2\,\mathrm{Re}\left[c_2^* c_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(E_2-E_1\right)\left(t-t_0\right)/\hbar}\langle u_m | \varphi_2\rangle^*\langle u_m | \varphi_1\rangle\right]$$

等式以玻尔频率 $\nu_{21}=\dfrac{\left|E_2-E_1\right|}{h}$ 振荡

因而该体系的时间演化特征为 $\Delta t \simeq \dfrac{h}{\left|E_2-E_1\right|}$

即有 $\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \simeq h}$

§4.4 叠加原理和物理上的预言

一、线性叠加与混合统计的区别

设 $|\psi_1\rangle$和$|\psi_2\rangle$是两个正交归一态 $\langle\psi_1|\ \psi_1\rangle=\langle\psi_2|\ \psi_2\rangle=1$

$$\langle\psi_1|\ \psi_2\rangle=0$$

设$|u_n\rangle$ 是可观察算符$\boldsymbol{A}$的本征态，属于非简并本征值$\boldsymbol{a_n}$

体系处于$|\psi_1\rangle$ 时，测量$\boldsymbol{A}$得到$\boldsymbol{a_n}$的概率为 $\mathbf{P}_1(a_n)=\left|\langle u_n|\ \psi_1\rangle\right|^2$

体系处于$|\psi_2\rangle$ 时，测量$\boldsymbol{A}$得到$\boldsymbol{a_n}$的概率为 $\mathbf{P}_2(a_n)=\left|\langle u_n|\ \psi_2\rangle\right|^2$

考察归一化的线性叠加态$|\psi\rangle$：$|\psi\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$

$$|\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2 = 1$$

我们常说，当体系处于 $|\psi\rangle$ 态时，我们发现它处于 $|\psi_1\rangle$态的概率为 $|\lambda_1|^2$，处于$|\psi_2\rangle$态的概率为 $|\lambda_2|^2$ 。

设 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 是观察量$\boldsymbol{B}$的属于两个不同本征值$\boldsymbol{b_1}$和$\boldsymbol{b_2}$的归一化本征矢

对叠加态$|\psi\rangle$更准确的说法是:当体系处于 $|\psi\rangle$ 态时，测量$\boldsymbol{B}$得到本征值$\boldsymbol{b_1}$的概率是$|\lambda_1|^2$，得到$\boldsymbol{b_2}$的概率是 $|\lambda_2|^2$

不能认为$|\psi\rangle$态是两个态$|\psi_1\rangle$ 和$|\psi_2\rangle$各以权重 $|\lambda_1|^2$ 和 $|\lambda_2|^2$参与构成的统计混合态。

设系统处于态$|\psi\rangle$，测量可观察量A得到本征值a_n的概率为 $\mathbf{P}(a_n)$

如果认为$|\psi\rangle$态是两个态$|\psi_1\rangle$ 和$|\psi_2\rangle$ 各以权重 $|\lambda_1|^2$ 和 $|\lambda_2|^2$参与构成的统计混合态，则

$$\mathbf{P}(a_n) \overset{?}{=} |\lambda_1|^2 \mathbf{P}_1(a_n) + |\lambda_2|^2 \mathbf{P}_2(a_n)$$

而正确计算$\mathbf{P}(a_n)$的方法是$\mathbf{P}(a_n) = |\langle u_n|\psi\rangle|^2$

而 $$\langle u_n|\psi\rangle = \lambda_1\langle u_n|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle u_n|\psi_2\rangle$$

所以 $$\mathbf{P}(a_n) = |\lambda_1\langle u_n|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle u_n|\psi_2\rangle|^2 = |\lambda_1|^2|\langle u_n|\psi_1\rangle|^2 + |\lambda_2|^2|\langle u_n|\psi_2\rangle|^2 + 2\,\mathrm{Re}\left\{\lambda_1\lambda_2^*\langle u_n|\psi_1\rangle\langle u_n|\psi_2\rangle^*\right\}$$

即 $$\mathbf{P}(a_n) = |\lambda_1|^2 \mathbf{P}_1(a_n) + |\lambda_2|^2 \mathbf{P}_2(a_n) + 2\,\mathrm{Re}\left\{\lambda_1\lambda_2^*\langle u_n|\psi_1\rangle\langle u_n|\psi_2\rangle^*\right\}$$

含有的 “交叉相乘项”描述干涉效应。

二、对中间态求和

(i)实验1

假设在指定时刻我们对一个物理体系测量了可观察量$\boldsymbol{A}$，得到非简并本征值$\boldsymbol{a}$，如果与$\boldsymbol{a}$对应的本征矢为$\left|u_a\right\rangle$，那么刚刚测量之后，该体系处于$\left|u_a\right\rangle$态。

在体系的态还来不及演变时，我们接着测量另一个可观察量$\boldsymbol{C}$，$\boldsymbol{C}$与$\boldsymbol{A}$是不可对易的．我们用$\mathbf{P}_{a}(c)$来表示在第二次测量中得到c的概率。

如果$\boldsymbol{C}$的属于非简并本征值$\boldsymbol{c}$的本征矢为$\left|v_c\right\rangle$

$$\mathbf{P}_a(c)=\left|\left\langle v_c \mid u_a\right\rangle\right|^2$$

(ii)实验2

迅速先后测量三个互不对易的可观察量***A***、***B***、***C***

$\mathbf{P}_a(b,c)$ 表示在第一次测量中得到***a***，第二次、第三次测量结果分别为***b***和***c***的概率

$$\mathbf{P}_a(b,c)=\mathbf{P}_a(b)\mathbf{P}_b(c)$$

$\mathbf{P}_a(b)$表示测量***A***已知***a***，再测***B***得到***b***的概率

$\mathbf{P}_b(c)$表示测量***B***已知***b***，再测***C***得到***c***的概率

如果***B***的属于非简并本征值***b***的本征矢为$\left|w_b\right\rangle$

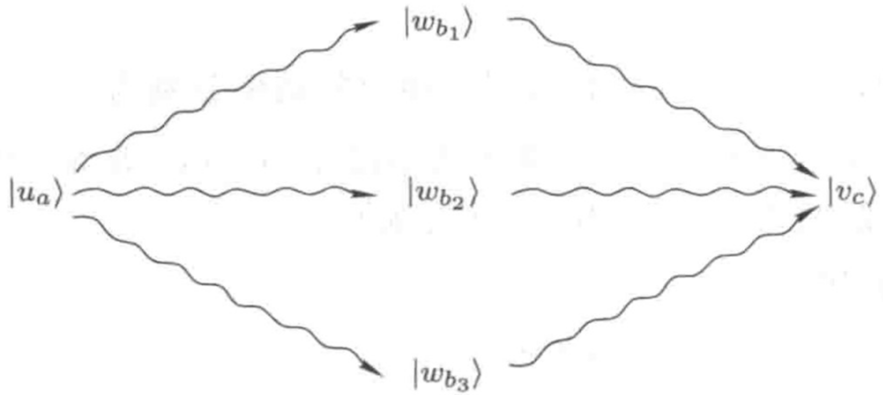
则

$$\mathbf{P}_a(b,c)=\left|\left\langle v_c \mid w_b\right\rangle\right|^2\left|\left\langle w_b \mid u_a\right\rangle\right|^2$$

在实验**1**和实验**2**中，测量可观测量A后，体系的态为$|u_a\rangle$

最后一次测量，体系态变为$|v_c\rangle$

两个实验，都可以将刚要测量C时的体系按**B**的本征态$|w_b\rangle$分解



第一个实验，没有从实验上决定体系从$|u_a\rangle$过渡到$|v_c\rangle$所经历的路径

$$\mathbf{P}_a(c) \overset{?}{=} \sum_b \mathbf{P}_a(b,c)$$

这个公式是错误的

正确做法：

$$\langle v_c | u_a \rangle = \sum_b \langle v_c | w_b \rangle \langle w_b | u_a \rangle$$

$$\mathbf{P}_a(c) = \left| \sum_b \langle v_c | w_b \rangle \langle w_b | u_a \rangle \right|^2 = \sum_b \left| \langle v_c | w_b \rangle \right|^2 \left| \langle w_b | u_a \rangle \right|^2$$

$$+ \sum_b \sum_{b' \neq b} \langle v_c | w_b \rangle \langle w_b | u_a \rangle \langle v_c | w_{b'} \rangle^* \langle w_{b'} | u_a \rangle^*$$

$$\mathbf{P}_a(c) = \sum_b \mathbf{P}_a(b,c) + \sum_b \sum_{b' \neq b} \langle v_c | w_b \rangle \langle w_b | u_a \rangle \langle v_c | w_{b'} \rangle^* \langle w_{b'} | u_a \rangle^*$$

含有的 “交叉相乘项”描述各条可能路径之间的全部干涉效应。

三、结论

(i) 量子理论中的概率型预言一概得自概率幅，计算时要取它的模的平方

(ii) 在一个确定的实验中，如果没有进行中间阶段的测量，那么，我们绝不能根据中间测量可能得到的各种结果的概率，而应根据它们的概率幅来分析问题.

(iii) 一个物理体系的态可以线性叠加，这意味着：一个概率幅往往表现为若干部分幅之稚因而对应的概率等于若干项之和的模的平方，而是那些部分幅是彼此相干的.