量子力学与统计物理

Quantum mechanics and statistical physics

光电信息学院　王智勇

第三章：量子力学中的力学量

第五讲：　不确定性原理

常用算符对易关系：

⟨1⟩ $[\hat{A},\hat{B}]=-[\hat{B},\hat{A}]$；

⟨2⟩ $[\hat{A},\hat{A}]=0$；

⟨3⟩ $[\hat{A},c]=0$ （c 为复常数）；

⟨4⟩ $[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}]$；

⟨5⟩ $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}$；

⟨6⟩ $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$。

$$[x_\alpha, x_\beta]=0$$

$$[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta]=0$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}^2]=0$$

$$[x_\alpha, \hat{p}_\beta]=\mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta}$$

$$[\hat{L}_\alpha, x_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma$$

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{p}_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{p}_\gamma$$

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma$$

算符不对易的物理含义

两不对易力学量算符，一般不同时具有确定值

--海森堡

一：不确定度的定量描述

定义：

$$\overline{A}=\overline{\hat{A}}=\langle\hat{A}\rangle=\int\psi^{*}\hat{A}\psi\,\mathrm{d}V=(\psi,\hat{A}\psi),\quad \hat{A}=\hat{F},\ \hat{F}^{2}$$

1. 偏 差： 测量值与平均值之差 $\Delta\hat{F}=\hat{F}-\overline{F}$

2. 不确定度： 偏差的大小（绝对值） $|\Delta\hat{F}|=|\hat{F}-\overline{F}|$

3. 均方差： 偏差平方的平均值

$$\overline{(\Delta F)^{2}}=\overline{(\hat{F}-\overline{F})^{2}}=\overline{(\hat{F}^{2}-2\hat{F}\overline{F}+\overline{F}^{2})}$$

$$=\overline{\hat{F}^{2}}-\overline{2\hat{F}\overline{F}}+\overline{\overline{F}^{2}}=\overline{\hat{F}^{2}}-2\overline{\hat{F}}\,\overline{F}+\overline{F}^{2}$$

$$=\overline{F^{2}}-2\overline{F}^{2}+\overline{F}^{2}\Rightarrow\overline{(\Delta F)^{2}}=\overline{(\hat{F}-\overline{F})^{2}}=\overline{F^{2}}-\overline{F}^{2}$$

$$\overline{F}=\overline{\hat{F}}=\langle\hat{F}\rangle,\ \overline{F^{2}}=\overline{\hat{F}^{2}}=\langle\hat{F}^{2}\rangle,\ \overline{F}^{2}=\langle\hat{F}\rangle^{2},\ c\overline{F}=\langle c\hat{F}\rangle$$

二、不确定性原理的严格证明

令 $\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}=[\hat{F},\hat{G}]=\mathrm{i}\hat{k}$

是算符或数

对任意波函数，引入实参量 ξ 的辅助积分：

$$I(\xi)=\int|\xi(\Delta\hat{F}-\mathrm{i}\Delta\hat{G})\psi|^2\,\mathrm{d}\tau\geq 0$$

$$=\int[\xi\Delta\hat{F}\psi-\mathrm{i}\Delta\hat{G}\psi]^*[\xi\Delta\hat{F}\psi-\mathrm{i}\Delta\hat{G}\psi]\mathrm{d}\tau$$

$$=\int[\xi(\Delta\hat{F}\psi)^*+\mathrm{i}(\Delta\hat{G}\psi)^*][\xi\Delta\hat{F}\psi-\mathrm{i}\Delta\hat{G}\psi]\mathrm{d}\tau$$

$$=\xi^2\int(\Delta\hat{F}\psi)^*(\Delta\hat{F}\psi)\mathrm{d}\tau-\mathrm{i}\xi\int(\Delta\hat{F}\psi)^*(\Delta\hat{G}\psi)\mathrm{d}\tau$$

$$+\mathrm{i}\xi\int(\Delta\hat{G}\psi)^*(\Delta\hat{F}\psi)\mathrm{d}\tau+\int(\Delta\hat{G}\psi)^*(\Delta\hat{G}\psi)\mathrm{d}\tau$$

$$I(\xi)=\int|\xi(\Delta\hat{F}-\mathrm{i}\Delta\hat{G})\psi|^2\,\mathrm{d}\tau\geq 0$$

$$=\xi^2\int(\Delta\hat{F}\psi)^*(\Delta\hat{F}\psi)\mathrm{d}\tau-\mathrm{i}\xi\int(\Delta\hat{F}\psi)^*(\Delta\hat{G}\psi)\mathrm{d}\tau$$

$$+\mathrm{i}\xi\int(\Delta\hat{G}\psi)^*(\Delta\hat{F}\psi)\mathrm{d}\tau+\int(\Delta\hat{G}\psi)^*(\Delta\hat{G}\psi)\mathrm{d}\tau$$

$\because \Delta\hat{F}=\hat{F}-\bar{F},\ \Delta\hat{G}=\hat{G}-\bar{G}$ 为厄密算符

$$=\xi^2\int\psi^*(\Delta\hat{F})^2\psi\mathrm{d}\tau-\mathrm{i}\xi\int\psi^*(\Delta\hat{F}\Delta\hat{G})\psi\mathrm{d}\tau$$

$$+\mathrm{i}\xi\int\psi^*(\Delta\hat{G}\Delta\hat{F})\psi\mathrm{d}\tau+\int\psi^*(\Delta\hat{G})^2\psi\mathrm{d}\tau$$

$$=\xi^2\int\psi^*(\Delta\hat{F})^2\psi\mathrm{d}\tau-\mathrm{i}\xi\int\psi^*(\Delta\hat{F}\Delta\hat{G}-\Delta\hat{G}\Delta\hat{F})\psi\mathrm{d}\tau+\int\psi^*(\Delta\hat{G})^2\psi\mathrm{d}\tau$$

$$=\xi^2\overline{\Delta F^2}-\mathrm{i}\xi\overline{[\Delta F,\Delta G]}+\overline{\Delta G^2}$$

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

$$= (\hat{F} - \overline{F})(\hat{G} - \overline{G}) - (\hat{G} - \overline{G})(\hat{F} - \overline{F})$$

$$= \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = [\hat{F},\ \hat{G}] = \mathrm{i}\hat{k}$$

故有

$$I(\xi) = \int |\xi(\Delta\hat{F} - \mathrm{i}\Delta\hat{G})\psi|^2 \,\mathrm{d}\tau$$

$$= \xi^2\overline{\Delta F^2} - \mathrm{i}\xi\overline{[\Delta F, \Delta G]} + \overline{\Delta G^2}$$

$$= \xi^2\overline{(\Delta F)^2} + \xi\overline{k} + \overline{(\Delta G)^2}$$

$$\Rightarrow \xi^2\overline{(\Delta F)^2} + \xi\overline{k} + \overline{(\Delta G)^2} \geq 0$$

$$\xi^2\overline{(\Delta F)^2}+\xi\overline{k}+\overline{(\Delta G)^2}\geq 0$$

对比方程： $$a\xi^2+b\xi+c\geq 0$$

$$\Delta=b^2-4ac\leq 0\Rightarrow ac\geq b^2/4$$

$$\overline{(\Delta\hat{F})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{G})^2}\geq\frac{(\overline{k})^2}{4}$$

或 $$\overline{(\Delta\hat{F})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{G})^2}\geq\frac{1}{4}\left|\overline{[\hat{F},\hat{G}]}\right|^2$$

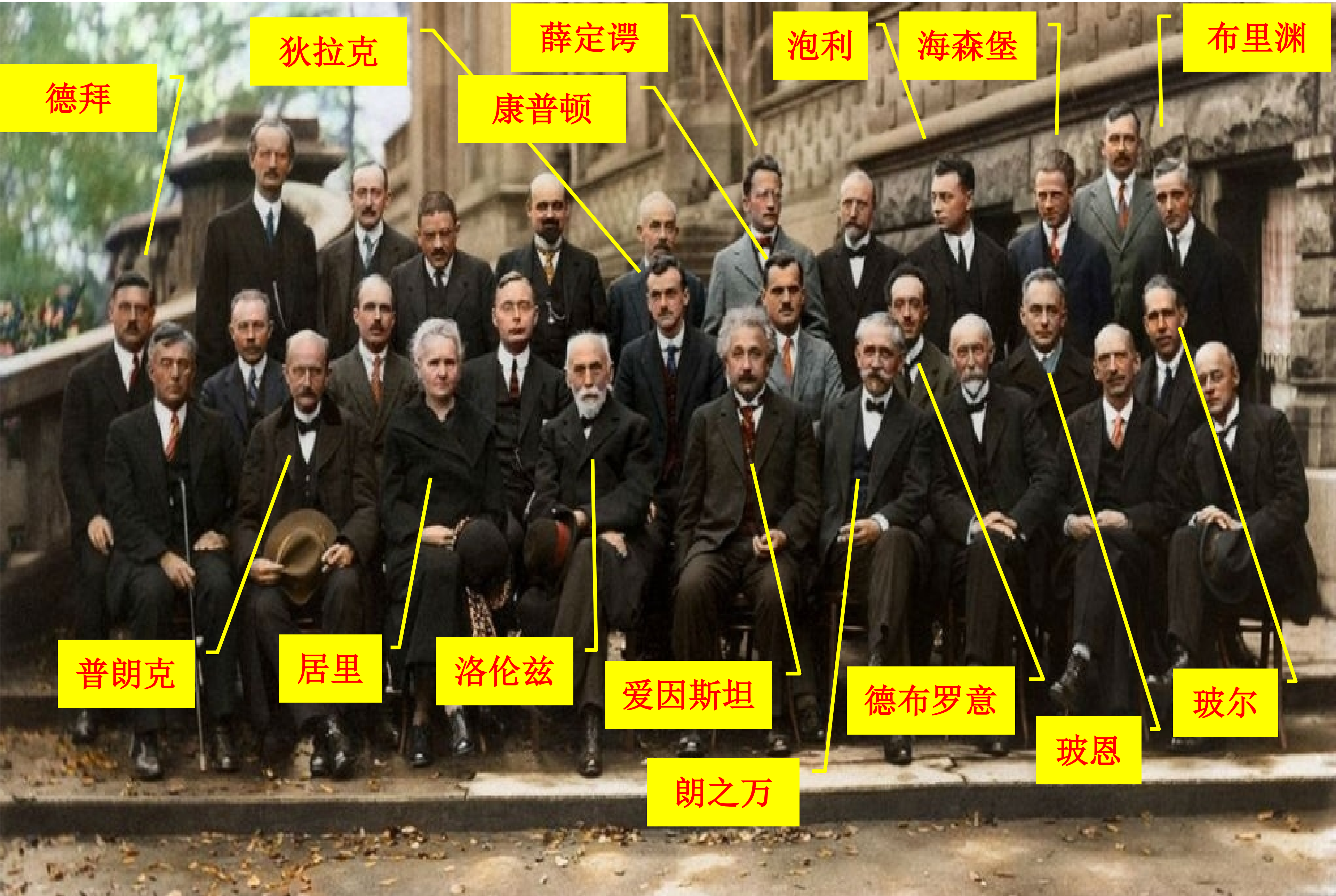
称为**不确定性关系(uncertainty relation)**

结束！

$$\overline{(\Delta\hat{F})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{G})^2}\geq\frac{1}{4}\left|\overline{[\hat{F},\hat{G}]}\right|^2$$

由不确定性关系看出：若两个力学量算符 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 不对易，则一般说来 $\overline{\Delta F}$ 与 $\overline{\Delta G}$ 不能同时为零，即 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 一般不能同时测准（但 $\overline{[F, G]}=0$ 的特殊态是可能存在的）。反之，若两个厄米算符对易，则可以找出这样的态，使 $\overline{\Delta F}=0$ 和 $\overline{\Delta G}=0$ 同时满足，这就是它们的共同本征态。

第五届索尔维会议，不确定性原理和互补原理；宣告量子革命完成！



三、海森堡不确定性关系（1927）

坐标和动量的不确定性关系

$$[x,\ \hat{p}_x]=\mathrm{i}\hbar \Rightarrow \overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p_x)^2} \geq \frac{1}{4}\left|\overline{[x, p_x]}\right|^2=\frac{\hbar^2}{4}$$

定义方均根偏差：$\Delta F=\sqrt{\overline{(\Delta F)^2}}=\sqrt{\overline{(\hat{F}-\overline{F})^2}}=\sqrt{\overline{F^2}-\overline{F}^2}$

位置与动量方均根偏差 $\Delta x=\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}},\ \Delta p_x=\sqrt{\overline{(\Delta p_x)^2}}$

于是有位置与动量不确定关系：$\Delta x\Delta p_x \geq \hbar/2$

说明：Δp_x 和 Δx 不能同时为零，坐标 x 的均方差越小，则与它共轭的动量 p_x 的均方偏差越大，亦就是说，坐标测量愈准，动量就愈测不准。所以也称**测不准原理**

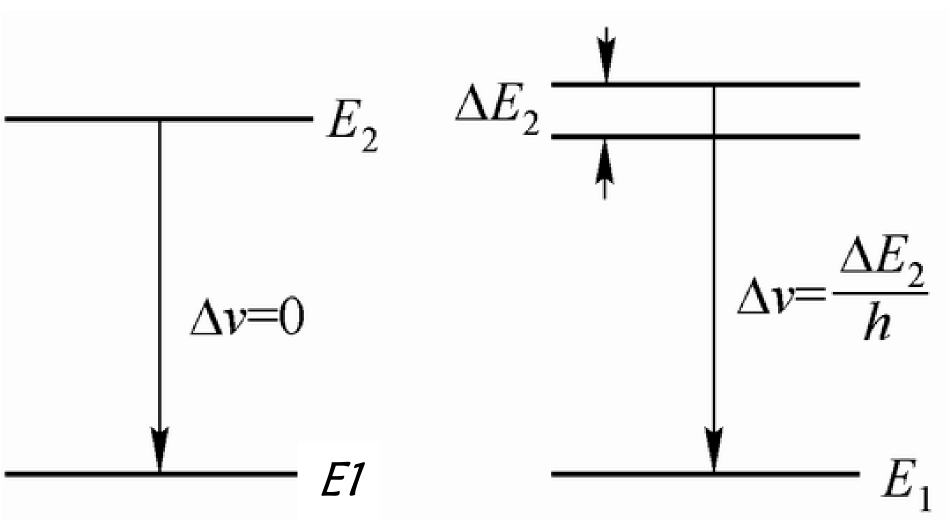
能量－时间不确定性关系

$$\overline{\Delta E}\ \overline{\Delta t} \geq \hbar/2$$

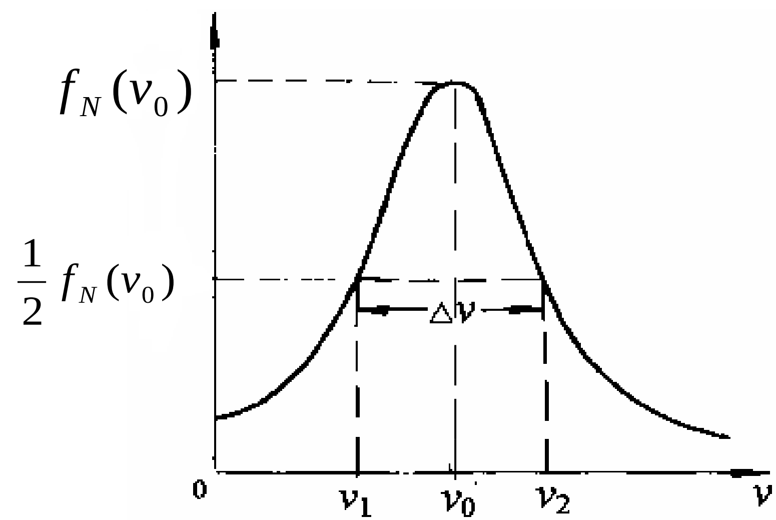
$$\Delta E \sim v\Delta p \Rightarrow \Delta E\Delta t \sim v\Delta t\Delta p \sim \Delta x\Delta p$$

根据能量-时间不确定性原理，激发态没有确定的能量，其能量不确定度△E也称为能级宽度Γ能级宽度越大，粒子处于这个态的寿命就越短。

在光谱中，峰宽（自然线度△ν）越大，对应的态就衰减得越快，寿命越短；峰宽越小，态越稳定。



(a) (b)



维尔纳·海森堡

维尔纳·海森堡（Werner Heisenberg，1901年12月5日—1976年2月1日），德国物理学家，量子力学的创始人之一，“哥本哈根学派”代表性人物。1932年，海森堡因“创立量子力学以及由此导致的氢的同素异形体的发现”而荣获诺贝尔物理学奖。

主要贡献：（1）创立矩阵力学（量子力学的矩阵形式）；（2）提出“测不准原理”（又称“海森堡不确定性关系”）；（3）散射（S）矩阵。

1922年夏，玻尔去哥廷根大学讲学，最大的收获是遇到当时还是学生的泡利和海森堡.....

1939年，铀俱乐部，德，海森堡

54厘米？

哥本哈根会晤之谜！

1941年，曼哈顿计划，美，奥本海默，爱因斯坦，玻尔，费米，康普顿，古德施密特，......

说谎者得不了诺贝尔奖！

例题1 动量 $\vec{p}(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ 的共同本征态

解： 由于 $[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0,$ 则它们可以有共同的本征态，即平面波

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \psi_{p_x}(x)\psi_{p_y}(y)\psi_{p_z}(z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)} e^{\mathrm{i}(p_x x + p_y y + p_z z)/\hbar}$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)} e^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

例题：一粒子处于如下波函数所描述的状态

$$\psi(x)=\begin{cases} Axe^{-\lambda x}, \quad (\lambda>0) & \text{当}x>0 \\ 0 & \text{当}x\le 0 \end{cases}, \quad \text{求}\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p_x)^2}=?$$

解：归一化

$$\mathbf{1=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2dx=\int_0^{\infty}A^2x^2e^{-2\lambda x}dx=\frac{1}{4\lambda^3}A^2 \quad \therefore A=2\lambda^{3/2}}$$

利用 $\int_0^{\infty}x^ne^{-2\lambda x}dx=\dfrac{n!}{(2\lambda)^{n+1}}$ 有

$$\bar{x}=\int_0^{\infty}\psi^* x\psi dx=A^2\int_0^{\infty}x^3e^{-2\lambda x}dx=4\lambda^3\cdot\frac{3}{8\lambda^4}=\frac{3}{2\lambda}$$

$$\overline{x^2}=\int_0^{\infty}\psi^* x^2\psi dx=A^2\int_0^{\infty}x^4e^{-2\lambda x}dx=4\lambda^3\cdot\frac{3}{4\lambda^5}=\frac{3}{\lambda^2}$$

所以 $\overline{(\Delta x)^2}=\overline{x^2}-\bar{x}^2=\dfrac{3}{\lambda^2}-\dfrac{9}{4\lambda^2}=\dfrac{3}{4\lambda^2}$

$$\overline{p} = \int_0^\infty \psi^* \hat{p} \psi dx = -i\hbar A^2 \int_0^\infty x e^{-\lambda x} \frac{d}{dx}(x e^{-\lambda x}) dx$$

$$= -i\hbar A^2 \int_0^\infty (x - \lambda x^2) e^{-2\lambda x} dx = 0$$

$$\overline{p^2} = \int_0^\infty \psi^* \hat{p}^2 \psi dx = -\hbar^2 A^2 \int_0^\infty x e^{-\lambda x} \frac{d^2}{dx^2}(x e^{-\lambda x}) dx$$

$$= \hbar^2 A^2 \int_0^\infty (2\lambda x - \lambda^2 x^2) e^{-2\lambda x} dx$$

$$= \hbar^2 A^2 \left[2\lambda \cdot \frac{1}{(2\lambda)^2} - \lambda^2 \cdot \frac{2}{(2\lambda)^3} \right] = \lambda^2 \hbar^2$$

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} - \overline{p}^2 = \lambda^2 \hbar^2$$

所以：$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p_x)^2} = \dfrac{3}{4\lambda^2} \cdot \lambda^2 \hbar^2 = \dfrac{3}{4} \hbar^2$

作业1：粒子处于如下波函数描述的状态时，计算位置和动量的不确定度，并验证不确定关系

$$(1)\ \psi(x)=\exp(\mathrm{i}kx) \qquad (2)\ \psi(x)=\delta(x-x_0)$$

$$(3)\ \psi(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}}\exp(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2)$$

$$(4)\ \psi(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}\exp(-|x|/L)$$

先请考虑，由于波函数一阶导数在***x*=0**处不连续，动量平方期望值计算时应如何处理。

$$(5)\ \psi(x)=\begin{cases}Axe^{-\lambda x}, & x>0\\ 0\qquad\quad, & x\le 0\end{cases} \qquad (\lambda>0)$$