量子力学与统计物理

Quantum mechanics and statistical physics

光电科学与工程学院 王智勇

第四章：表象与矩阵力学

第二讲：算符和量子力学公式的矩阵表示

波函数在任一Q表象中，可用$\hat{Q}$ 的本征函数系展开，其展开系数所构成的列矩阵，即是波函数的矩阵表示。那么，力学量算符能用矩阵表示吗？如果可以，如何求这个矩阵？

$$\varphi = \hat{F}\psi$$

$$\begin{pmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \\ \vdots \\ b_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = F \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_m(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

1．算符的矩阵表示

在坐标表象中，力学量F的算符为$\hat{F}(x, -i\hbar\partial/\partial x)$，它作用于波函数$\psi(x,t)$得到另一波函数$\phi(x,t)$。

$$\phi(x,t) = \hat{F}\psi(x,t) \qquad (1)$$

将$\psi(x,t)$和$\phi(x,t)$分别按Q的本征函数系$\{u_n(x)\}$展开

$$\psi(x,t) = \sum_m a_m(t)u_m(x) \qquad \phi(x,t) = \sum_m b_m(t)u_m(x)$$

代回表达式（1），并整理

$$\sum_m b_m(t)u_m(x) = \sum_m [\hat{F}u_m(x)]a_m(t)$$

以 $u_n^*(x)$ 乘以上式，对 x 的全部范围积分

$$\sum_m \int u_n^*(x) b_m(t) u_m(x) \mathrm{d}x = \sum_m [\int u_n^*(t) \hat{F} u_m(x) \mathrm{d}x] a_m(t)$$

$$\sum_m b_m(t) \boxed{\int u_n^*(x) u_m(x) \mathrm{d}x} = \sum_m \boxed{[\int u_n^*(x) \hat{F} u_m(x) \mathrm{d}x]} a_m(t)$$

δ_{mn}

记为 F_{nm}

$$b_n(t) = \sum_m F_{nm} a_m(t)$$

$$F_{nm} = \int u_n^*(x) \hat{F} u_m(x) \mathrm{d}x$$

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

$$\Updownarrow$$

$$b_n(t)=\sum_m F_{nm}a_m(t)$$

$$\Updownarrow$$

$$\psi(x,t)=\sum_m a_m(t)u_m(x)$$

$$\varphi(x,t)=\sum_n b_n(t)u_n(x)$$

$$\begin{pmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \\ \vdots \\ b_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1m} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & & F_{2m} & \vdots \\ \vdots & & & & \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nm} & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_m(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{记为}} \boxed{\Phi=F\Psi}$$

矩阵元：$$F_{nm}=\int u_n^*(x)\hat{F}u_m(x)\mathrm{d}x$$

算符矩阵：

$$F_{nm}=\int u_n^*(x)\hat{F}u_m(x)\mathrm{d}x$$

平均值：

$$\bar{F}=\int \psi^*(x)\hat{F}\psi(x)\mathrm{d}x$$

在矩阵元公式中，算符作用于力学量的**两个基函数**；在平均值公式中，算符作用于系统所在的状态

对于表示力学量算符的矩阵

$$F_{nm}=\int u_n^*(x)\hat{F}u_m(x)\mathrm{d}x$$

证明如下性质

1. 表示力学量算符的矩阵是厄密矩阵

2. 表示力学量算符的矩阵，其对角元都是实数

3. 力学量算符在自身表象中是对角矩阵，对角元素就是算符的本征值

先弄清楚什么是厄密矩阵，再证明

复共轭

$$F = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1n} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & & F_{2n} & \vdots \\ \vdots & & & & \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn} & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}$$

$$F^* = \begin{pmatrix} F^*_{11} & F^*_{12} & \cdots & F^*_{1n} & \cdots \\ F^*{}_{21} & F^*{}_{22} & & F^*_{2n} & \vdots \\ \vdots & & & & \\ F^*_{n1} & F^*_{n2} & \cdots & F^*_{nn} & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}$$

$$F^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{21} & \cdots & F_{n1} & \cdots \\ F_{12} & F_{22} & & F_{n2} & \vdots \\ \vdots & & & & \\ F_{1n} & F_{2n} & \cdots & F_{nn} & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}$$

$$F^{\dagger} = \begin{pmatrix} F^*_{11} & F^*_{21} & \cdots & F^*_{n} & \cdots \\ F^*_{12} & F^*_{22} & & F^*_{n2} & \vdots \\ \vdots & & & & \\ F^*_{1n} & F^*_{2n} & \cdots & F^*_{nn} & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}$$

转置

厄米共轭

如果一个方阵的矩阵元满足 $F^*_{nm} = F_{mn}$，或者说这个矩阵与其(厄密)共轭矩阵相等 $F = F^{\dagger}$，则称为厄密矩阵

例． 下列哪些是厄密矩阵 (a, b, c是实数)

$$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & b & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a & 1 & i & 0 & 0 \\ 1 & b & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a & 1 & i & 0 & 0 \\ 1 & b & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

证明1. 表示力学量算符的矩阵是厄密矩阵

Proof:

$$F_{nm} = \int u_n^*(x)\hat{F}u_m(x)\mathrm{d}x$$

$$F_{nm}^* = \int u_n(x)[\hat{F}u_m(x)]^*\mathrm{d}x$$

$$= \int [\hat{F}u_m(x)]^* u_n(x)\mathrm{d}x$$

$$= \int u_m^*(x)\hat{F}u_n(x)\mathrm{d}x = F_{mn}$$

$$\Rightarrow \hat{F}^\dagger = \hat{F}$$

→ F是厄米矩阵

证明2．表示力学量算符的矩阵，其对角元都是实数

Proof 1：

因为是厄密矩阵

$$F_{nm}^* = F_{mn}$$

取m=n，有

$$F_{nn}^* = F_{nn}$$

所以F_{nn}是实数。

Proof 2：

$$F_{nm} = \int u_n^*(x)\hat{F}u_m(x)\mathrm{d}x$$

$$F_{mm} = \int u_m^*(x)\hat{F}u_m(x)\mathrm{d}x$$

$$= \overline{F}$$

证明 3. 力学量算符在自身表象中是一对角矩阵

Proof:

$$F_{nm} = \int u_n^*(x)\hat{F}u_m(x)\mathrm{d}x = \int u_n^*(x) f_m u_m(x)\mathrm{d}x = f_n\delta_{nm}$$

$$\rightarrow F = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

当 $\hat{Q}$ 具有连续本征值谱时，算符的对应矩阵元为

$$F_{qq'} = \int u_q^*(x)\hat{F}u_{q'}(x)\mathrm{d}x = q\delta(q-q')$$

证毕！

很明显，对角元就是本征值！

意义：

想要求解算符本征值，只要在其自身表象作对角化计算，对角元就是本征值。

求本征值＝矩阵的对角化！

2. 量子力学公式的矩阵表述

既然波函数和算符在Q表象中都具有矩阵形式，
量子力学公式也应一样具有矩阵形式

1. 平均值公式
2. 归一化条件 ⟵ $\Psi^{\dagger}\Psi = 1$
3. 本征值方程
4. 薛定谔方程
5. 算符的运动方程

$$\frac{d\overline{F}}{dt} = \overline{\frac{\partial F}{\partial t}} + \frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{F},\hat{H}]}$$

1. 平均值公式

$$\psi(x,t)=\sum_m a_m(t)u_m(x)$$

$$\bar{F}=\int\psi^*(x,t)\hat{F}\psi(x,t)\mathrm{d}x$$

$$=\int\sum_m a_m^*(t)u_m^*(x)\hat{F}\sum_n a_n(t)u_n(x)\mathrm{d}x$$

$$=\sum_{m,n} a_m^*(t)\boxed{[\int u_m^*(x)\hat{F}u_n(x)\mathrm{d}x]}a_n(t)$$

$$=\sum_{m,n} a_m^*(t)F_{mn}a_n(t)$$

$$\bar{F}=\sum_{m,n} a_m^*(t)F_{mn}a_n(t)$$

$$\bar{F} = \sum_{m,n} a_m^*(t) F_{mn} a_n(t)$$

$$\bar{F} = \left(a_1^*(t), \cdots, a_m^*(t) \cdots \right) \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1n} & \cdots \\ F_{21} & F_{12} & \cdots & F_{1n} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots \\ F_{m1} & \cdots & \cdots & F_{mn} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\bar{F} = \Psi^\dagger F \Psi}$$

这是在一般表象下

在 $\hat{F}$ 自己的表象中：

$$\begin{cases} \psi(x,t)=\sum_m a_m(t)u_m(x) \\ \hat{F}u_m(x)=f_m u_m(x) \end{cases}$$

$$\bar{F}=(a_1^*(t),\cdots,a_n^*(t)\cdots)\begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\bar{F}=\sum_n |a_n(t)|^2 f_n=\int \psi^*(x,t)\hat{F}\psi(x,t)\mathrm{d}x=\Psi^\dagger F\Psi$$

2. 利用矩阵表示求解本征值与本征态

$$F\Psi = f\Psi$$

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1n} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & & & \vdots \\ \vdots & & & & \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn} & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = f \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} F_{11}-f & F_{12} & \cdots & F_{1n} & \cdots \\ F_{21} & F_{22}-f & & & \vdots \\ \vdots & & & & \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn}-f & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = 0 \qquad (1)$$

上方程有非零解的条件：系数行列式等于零

$$\begin{vmatrix} F_{11}-f & F_{12} & \cdots & F_{1n} & \cdots \\ F_{21} & F_{22}-f & & & \vdots \\ \vdots & & & & \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn}-f & \cdots \\ \vdots & & & & \end{vmatrix} = 0 \quad (2)$$

久期方程

解久期方程可以得到所有本征值：$f_1, f_2, \ldots, f_n, \ldots$

把 f_i 代入方程（1）可得

属于本征值 f_i 的本征函数 $\Psi_i = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$

解微分方程变成了求解代数方程

例. 已知在 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同表象中，算符 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的矩阵分别为

$$L_x = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad L_y = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

求它们的本征值和归一化的本征函数，最后将矩阵 L_x 和 L_y 对角化。

解：（1）求本征值

设 $\hat{L}_x$ 的本征值为 $\lambda = \dfrac{\hbar\sqrt{2}}{2}\alpha$，本征函数为

$$\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

本征方程为 $\hat{L}_x \psi = \lambda \psi$ ⇒

$$\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}=\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\alpha\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}-\alpha & 1 & 0\\ 1 & -\alpha & 1\\ 0 & 1 & -\alpha\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}=0 \qquad (1)$$

要使本征函数不为零，亦即要求a, b, c不全为零，其条件是（1）中的系数矩阵的行列式为零。

久期方程

$$\begin{vmatrix}-\alpha & 1 & 0\\ 1 & -\alpha & 1\\ 0 & 1 & -\alpha\end{vmatrix}=0 \Rightarrow -\alpha^3+2\alpha=0$$

$$\Rightarrow \begin{cases}\alpha_1=\sqrt{2}\\ \alpha_2=0\\ \alpha_3=-\sqrt{2}\end{cases} \xrightarrow{\text{本征值}} \boxed{\lambda_i=\alpha_i\sqrt{2}\hbar/2}$$

$$\lambda_1=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\alpha_1=\hbar,\ \lambda_2=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\alpha_2=0,\ \lambda_3=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\alpha_3=-\hbar$$

解：（2）求本征函数

当 $\alpha_1=\sqrt{2}$ 时，由（1）有

$$\begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & -\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=0 \Rightarrow \begin{cases} a=\dfrac{b}{\sqrt{2}} \\ c=\dfrac{b}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

$$\psi=\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \Rightarrow$$ 本征函数 $$\psi_1=b\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

由归一化条件：

$$\psi_1^{\dagger}\psi_1 = 1 \Rightarrow b^*\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 1 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\cdot b\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix} = 1$$

$$\Rightarrow b^* b = \frac{1}{2} \Rightarrow b = \frac{1}{\sqrt{2}}$$ 归一化常数

归一化的本征函数 $$\psi_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 \\ \sqrt{2} \\ 1\end{pmatrix}$$

当 $\alpha_2 = 0$ 时，由（1）有

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} b = 0 \\ c = -a \end{cases}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \Rightarrow \psi_2 = a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

归一化条件

$$\psi_2^\dagger \psi_2 = 2a^* a = 1$$

$$\Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

归一化的波函数：

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

当 $\alpha_3 = -\sqrt{2}$，由（2）有：

$$\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0 \longrightarrow \begin{cases} a = -\dfrac{b}{\sqrt{2}} \\ c = -\dfrac{b}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \longrightarrow \psi_3 = \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$$

归一化条件

$$\psi_3^\dagger \psi_3 = 1$$

$$\longrightarrow \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

归一化的波函数：

$$\psi_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\1\\1/\sqrt{2}\end{pmatrix},\ \psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix},\ \psi_3=\frac{-1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\-1\\1/\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

构成一个正交归一本征函数完备系

正交归一化条件：$\psi_i^\dagger\psi_j=\delta_{ij}$　完备性条件：$\sum_i\psi_i\psi_i^\dagger=I$

解：（3）矩阵对角化(由本征函数构造过渡矩阵M再对L_x进行相似变换，可实现对角化) $M=(\psi_1\ \ \psi_2\ \ \psi_3)$

$$L_x=\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\Rightarrow M^{-1}L_xM=\begin{pmatrix}\lambda_1&&0\\&\lambda_2&\\0&&\lambda_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hbar&0&0\\0&0&0\\0&0&-\hbar\end{pmatrix}$$

解：（4）

类似地，可求出 $\hat{L}_y$ 的本征值、归一化的本征函数系和对角阵。

本征值 $\lambda_1 = \hbar, \quad \lambda_2 = 0, \quad \lambda_3 = -\hbar$

本征波函数：

$$\varphi_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ i\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \varphi_3 = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

正交归一化条件： $\varphi_i^\dagger \varphi_j = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3)$

对角化

$$L_y = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

思考：L_x和L_y可以同时对角化吗？为什么？

3. 薛定谔方程

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n a_n(t)u_n(x)=\hat{H}\sum_n a_n(t)u_n(x)$$

$$\int u_m^*(x)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n a_n(t)u_n(x)\mathrm{d}x=\int u_m^*(x)\hat{H}\sum_n a_n(t)u_n(x)\mathrm{d}x$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n a_n(t)\int u_m^*(x)u_n(x)\mathrm{d}x=\sum_n \boxed{\int u_m^*(x)\hat{H}u_n(x)\mathrm{d}x}\,a_n(t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}a_m(t)=\sum_n H_{mn}a_n(t)\quad(m,n=1,2,\ldots)$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}a_m(t)=\sum_n H_{mn}a_n(t)\quad (m,n=1,2,\ldots)$$

$$H_{mn}=\int u_m^*(x)\hat{H}u_n(x)\mathrm{d}x$$

写成矩阵形式：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & & & \vdots \\ \vdots & & & & \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=H\Psi}$$

作业：（**1**）若力学量F的算符不显含时间t, 试求出其方程在Q表象中的的矩阵形式

$$\frac{d\overline{F}}{dt}=\frac{\overline{\partial F}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{F},\hat{H}]}$$

作业：（**2**）求动量表象中的：x算符, p_x算符、哈密顿算符 H、平均值公式和薛定谔方程的具体形式

作业：（3）已知力学量算符 $\hat{s}_x$ 在某表象Q中的矩阵为

$$\boldsymbol{S_x}=\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

求 $\hat{s}_x$ 的本征值和归一化的本征函数

例： 在正交归一化基矢 $\{u_1(x), u_2(x), u_3(x)\}$ 所张的三维矢量空间中， t=0时的态矢为 $\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}u_1+\frac{1}{2}u_2+\frac{1}{2}u_3$ 。物理体系的能量算符H 和另外两个物理量算符A，B的矩阵为：

$$H=\hbar\omega_0\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{pmatrix} \qquad A=a\begin{pmatrix}2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix} \qquad B=b\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

问： （1）所采用的是什么表象？其基矢是什么？

（2） 能量表象中波函数 $\psi(x)$ 的矩阵表示

（3） $\psi(x)$ 态的能量可能值、相应概率及平均值

（4） $\psi(x)$ 态中算符A 、B 的可能值及相应概率

解：(1) 因为 H 矩阵为对角矩阵 $\Rightarrow$ 能量表象；此表象 $\{u_1(x), u_2(x), u_3(x)\}$ 为 $\hat{H}$ 的本征态，

基矢在能量表象中为

$$u_1(E)=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\qquad u_2(E)=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\qquad u_3(E)=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

(2) $\{u_{i=1,2,3}\}$ 表象中波函数的表示为

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}u_1(x)+\frac{1}{2}u_2(x)+\frac{1}{2}u_3(x)=a_1u_1(x)+a_2u_2(x)+a_3u_3(x)\qquad x\text{表象}$$

或利用 $a_n=\int u_n^*(x)\psi(x)dx$，可得 $a_1={}^1\!/_{\sqrt{2}}, a_2={}^1\!/_2, a_3={}^1\!/_2$

故能量表象中态矢为 $\psi_E=\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\1/2\\1/2\end{pmatrix}$

3）由对角矩阵可知，能量取值只能是$\hbar\omega_0$、$2\hbar\omega_0$、$2\hbar\omega_0$，且$2\hbar\omega_0$是两度简并的，

取$\hbar\omega_0$和$2\hbar\omega_0$的概率分别是 $|a_1|^2=\frac{1}{2}$ $|a_2|^2+|a_3|^2=\frac{1}{2}$

故 $\overline{H}=\frac{1}{2}(\hbar\omega_0)+\frac{1}{2}(2\hbar\omega_0)=\frac{3}{2}\hbar\omega_0$

或 $$\overline{H}=\psi^+H\psi=\hbar\omega_0\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ 1/2\\ 1/2\end{pmatrix}=\frac{3}{2}\hbar\omega_0$$

$$\overline{H^2}=\psi^+H^2\psi=(\hbar\omega_0)^2\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1^2 & 0 & 0\\ 0 & 2^2 & 0\\ 0 & 0 & 2^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ 1/2\\ 1/2\end{pmatrix}=\frac{5}{2}(\hbar\omega_0)^2$$

（4）$u_1(x), u_2(x), u_3(x)$ 是 $\hat{H}$ 的本征函数集，却不是 $\hat{A}$ 的本征函数集。令 $\hat{A}$ 在能量表象中的本征态为 $\varphi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$，本征值为 λ，则本征方程为

$$\begin{pmatrix} 2a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \begin{pmatrix} 2a-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & a \\ 0 & a & -\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = 0$$

解久期方程 $\begin{vmatrix} 2a-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & a \\ 0 & a & -\lambda \end{vmatrix} = 0$ 得 $\lambda = 2a, a, -a$

当 $\lambda = 2a$ 时， $c_1 = 1 \quad c_2 = c_3 = 0$ 故 $\varphi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

当 $\lambda = a$ 时， $c_1 = 0 \quad c_2 = c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 故 $\varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

当 $\lambda = -a$ 时， $c_1 = 0 \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad c_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ 故 $\varphi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

可见，由于能量表象不是$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$的自身表象，故$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$的矩阵形式不同于

$u_1(x), u_2(x), u_3(x)$

要求$\hat{A}$的可能值$(2a, a, -a)$在$\psi(x)$态中(即ψ_E态中)的概率分布，就要把$\psi(x)$或ψ_E

按$\hat{A}$的本征态展开 $\psi = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2 + a_3\varphi_3$

由H表象中φ_n及ψ可得 $a_n = \varphi_n^+\psi$ 所以

$$a_2 = \varphi_2^\dagger\psi = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$a_1 = \phi_1^\dagger\psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$a_3 = \varphi_3^\dagger\psi = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = 0$$

最后得 A 表象中态矢表达式 $\psi_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}$

所以 A 取值为 $(2a, a, -a)$ 的概率分别为 $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

也可以利用幺正变换将能量表象中的 A 和 ψ_E 变换为 A 表象（自身表象）中的对角矩阵和 ψ_A，因为 $S_{n\beta} = \int \psi_n^*(x)\varphi_\beta(x)dx$，用矩阵表示即 $S_{n\beta} = \psi_n^+\varphi_\beta$，本问题即为 $S_{n\beta} = u_n^+\varphi_\beta$　　可以证明：把算符 $\hat{A}$ 在 H 表象中的 $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ 按列排成矩阵即为幺正变换矩阵 S

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$A_A = S^{+} A_E S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} a \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}$$

$$\psi_A = S^{+} \psi_E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}$$ **结果同上**