Foundation

October 14, 2017

1 量子力学的假定

[1] 对一个物理体系的经典描述可归结如下

(i) 体系在确定时刻 t_0 的态，决定于 N 个广义坐标 $q_i(t_0)$ 和 N 个共轭动量 $p_i(t_0)$ 的数值；

(ii) 如果知道了体系在指定时刻的态，各物理量在该时刻的值便完全确定。即知道了体系在时刻 t_0 的态，就可以确切地预言在该时刻进行的任何一种测量的结果；

(iii) 体系的态随时间演变由 Hamilton-Jacobi 方程组来确定。只要给定在指定时刻 t_0 的函数值 $\{q_i(t_0), p_i(t_0)\}$，此方程组的解 $\{q_i(t), p_i(t)\}$ 就是唯一的。只要知道了体系的初态，便可以确定它在任意时刻的态。

1. 体系的态的描述

用一个平方可积波函数来描述粒子在指定时刻的态。用态空间 $\mathscr{E}_r$ 中的一个右矢和每一个波函数联系起来。给出 $\mathscr{E}_r$ 空间中的右矢 $|\psi\rangle$ 等价于给出对应的波函数 $\psi(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle$。一个粒子在确定时刻的量子态可由 $\mathscr{E}_r$ 空间中的一个右矢来描述。

> 假定一：在确定的时刻 t_0，一个物理体系的态由态空间 $\mathscr{E}$ 中一个特定的右矢 $|\psi(t_0)\rangle$ 来确定。

由于 $\mathscr{E}$ 是一个矢量空间，该假定隐含着叠加原理：若干态矢量的线性组合也是一个态矢量。

2. 物理量的描述

> 假定二：每一个可以测量的物理量 $\mathscr{A}$ 都可以用在 $\mathscr{E}$ 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。

A 应当是观察算符。

与经典力学对比，量子力学是以不同的方式来描述体系的态及有关物理量的：态用矢量来表示，物理量用算符表示。

3. 物理量的测量

a. 可能的结果

> 假定三：每次测量物理量 $\mathscr{A}$，可能得到的结果，只能是对应的观察算符 A 的本征值之一。

A 是厄密算符，所以测量 $\mathscr{A}$ 所得的结果总是实数。

若 A 的谱是分立的，测量 $\mathscr{A}$ 可能得到的结果是量子化的。

b. 谱分解原理

考虑一个体系，它在指定时刻的态由右矢 $|\psi\rangle$ 描述，假设这个右矢已归一化为 1：

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{1}$$

想要预言在该时刻测量体系的物理量 $\mathscr{A}$(它与观察算符 A 相联系) 所得的结果。

α. 分立谱的情况

假设 A 的谱是分立谱。若 A 的全体本征值 a_n 都是非简并的，与一个本征值相联系的本征矢只有一个 (除相位因子以外)，即 $|u_n\rangle$

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \tag{2}$$

由于 A 是观察算符，故已归一化的 $|u_n\rangle$ 的集合构成 $\mathscr{E}$ 中的一个正交归一基，态矢量 $|\psi\rangle$ 写作

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|u_n\rangle \tag{3}$$

假定：测量 $\mathscr{A}$ 时得到结果 a_n 的几率 $\mathscr{P}(a_n)$ 是

$$\mathscr{P}(a_n) = |c_n|^2 = |\langle u_n|\psi\rangle|^2 \tag{4}$$

假定四：（非简并的离散谱）若体系处于已归一化的态 $|\psi\rangle$ 中，则测量物理量 $\mathscr{A}$ 得到的结果为对应观察算符 A 的非简并本征值 a_n 的概率 $\mathscr{P}(a_n)$ 是

$$\mathscr{P}(a_n) = |\langle u_n|\psi\rangle|^2$$

$|u_n\rangle$ 是的已归一化的本征矢，属于本征值 a_n。

若某些本征值 a_n 是简并的，与之对应的正交归一本征矢 $|u_n\rangle$ 就有若干个：

$$A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle\ ,\quad i = 1, 2, \cdots, g_n \tag{5}$$

$|\psi\rangle$ 仍然可以按正交归一基 $\{|u_n^i\rangle\}$ 展开，

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle \tag{6}$$

几率 $\mathscr{P}(a_n)$

$$\mathscr{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2 \tag{7}$$

假定四：（离散谱）若体系处于已归一化的态 $|\psi\rangle$ 中，则测量物理量 $\mathscr{A}$ 得到的结果为对应观察算符 A 的本征值 a_n 的概率 $\mathscr{P}(a_n)$ 是

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

g_n 是 a_n 的简并度，$\{|u_n^i\rangle\}(i = 1, 2, \cdots, g_n)$ 是一组正交归一矢量，它们在对应于 A 的本征值 a_n 的本征子空间空间 $\mathscr{E}_n$ 中构成一个基。

该假定要有意义，在 a_n 有简并时，几率 $\mathscr{P}(a_n)$ 必须与 $\mathscr{E}$ 中基 $\{|u_n^i\rangle\}$ 的选择无关。

β. 连续谱的情况

假定 A 的谱是连续的，且假设并没有简并。A 的广义上已正交归一化的本征矢集 $|v_a\rangle$

$$A|v_a\rangle = a|v_a\rangle \tag{8}$$

构成 $\mathscr{E}$ 空间中的一个连续基。在这个基中可将任意右矢 $|\psi\rangle$ 分解为

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}a\ c(a)|v_a\rangle \tag{9}$$

由于测量 $\mathscr{A}$ 的可能结果构成一个连续集合定义几率密度：测量 $\mathscr{A}$ 的值介于 a 和 $a+\mathrm{d}a$ 之间的几率是

$$\mathrm{d}\mathscr{P}(a_n) = \rho(a)\mathrm{d}a$$

其中

$$\rho(a) = |c(a)|^2 = |\langle v_a|\psi\rangle|^2$$

假定四：（非简并连续谱）测量处于已归一化的态 $|\psi\rangle$ 的体系的物理量 $\mathscr{A}$ 时，得到介于 a 和 $a+\mathrm{d}a$ 之间结果的概率 $\mathrm{d}\mathscr{P}(a)$ 是

$$\mathrm{d}\mathscr{P}(a) = |\langle v_a|\psi\rangle|^2\mathrm{d}a$$

$|v_a\rangle$ 是与 $\mathscr{A}$ 相联系的观察算符 A 的本征矢，属于本征值 a。

γ. 重要后果

考虑两个右矢 $|\psi\rangle$ 和 $|\psi'\rangle$

$$|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle \tag{10}$$

θ 为实数。若 $|\psi\rangle$ 是归一化的，则 $|\psi'\rangle$ 也是归一化的

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|e^{-i\theta}e^{i\theta}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \tag{11}$$

互成比例的两个态矢量表示同一个物理状态。

总的相位因子对于物理预言没有影响，但展开式中各系数的相对相位则是有影响的。

c. 波包的收缩

假定五：如果处于态 $|\psi\rangle$ 的体系测量物理量 $\mathscr{A}$ 得到的结果是 a_n，则刚测量之后体系的态是 $|\psi\rangle$ 在属于 a_n 的本征子空间上的归一化的投影 $\dfrac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$。

4. 体系随时间的演变

假定六：态矢量 $|\psi(t)\rangle$ 随时间的演变遵从薛定谔方程

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

$H(t)$ 是与体系的总能量相联系的观察算符。H 叫做体系的哈密顿算符。

5. 量子化规则

对于经典力学中已定义的物理量 $\mathscr{A}$，怎样构成在量子力学中描述该物理量的算符 A。

a. 规则的陈述

考虑处在标量势场中的一个无自旋粒子构成的体系，

与粒子的位置 $\boldsymbol{r}(x, y, z)$ 相联系的是观察算符 $\boldsymbol{R}(X, Y, Z)$。

与粒子的动量 $\boldsymbol{p}(p_x, p_y, p_z)$ 相联系的是观察算符 $\boldsymbol{P}(P_x, P_y, P_z)$。

$\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 的诸分量满足正则对易关系：

$$[R_i, R_j] = [P_i, P_j] = 0 \tag{12}$$

$$[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{13}$$

粒子的任何一个物理量 $\mathscr{A}$ 都可以表示为基本力学量 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的函数：$\mathscr{A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$。要得到对应的观察算符 A，在 $\mathscr{A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$ 的表达式中，将变量 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 换成观察算符 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{P}$：

$$A(t) = \mathscr{A}(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{P}, t)\ . \tag{14}$$

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} = xp_x + yp_y + zp_z = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} = p_x x + p_y y + p_z z \tag{15}$$

在经典力学中标量积 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 是可以对易的。但是若将 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 换成对应的观察算符 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{P}$,

$$\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}\neq\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R} \tag{16}$$

此外，$\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R}$ 都不是厄密算符

对称化规则。和 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 相联系的观察算符是

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}+\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R}) \tag{17}$$

要得到描述一个已有经典定义的物理量 $\mathscr{A}$ 的观察算符 A，只需在 $\mathscr{A}$ 的经过适当对称化的表达式中，将 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 换成观察算符 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{P}$。

References

[1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Quantum Mechanics, Volume 1.* June 1986.