第四章 态和力学量的表象

Monday, June 17, 2019 09:42

1. 态的表象

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int C(p,t)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\, dp \qquad \text{坐标表象}$$

$$C(p,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int \Psi(x,t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\, dx \qquad \text{动量表象}$$

若力学量 Q 本征函数是 $u_1(x), u_2(x), \cdots, u_n(x), \cdots$，本征值 $Q_1, Q_2 \cdots$

$$\Psi(x,t) = \sum_n a_n(t)\, u_n(x)$$

$$a_n(t) = \int \Psi(x,t)\, u_n^*(x)\, dx$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$|a_n|^2$ 是在 $\Psi(x,t)$ 态中测量力学量 Q 所得结果为 Q_n 的概率

2. 算符的矩阵表示

若 $\hat{F}\Psi(x,t) = \Phi(x,t)$

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

$\Phi(x,t) = \sum_m b_m(t)\, u_m(t)$

则矩阵元：

$$F_{nm} = \int u_n^*(x)\, \hat{F}\, u_m(x)\, dx = \langle u_n | \hat{F} | u_m \rangle$$

Hermite 算符的矩阵是 Hermite 矩阵：

$$F = F^\dagger$$

$F^\dagger_{mn} = F^*_{nm}$

算符在自身表象中是一个对角矩阵，对角线上的元素是其本征值。

4. 幺正变换 (一个表象到另一个表象的变换)

幺正矩阵：$S^\dagger = S^{-1}$

幺正变换 (A 表象 → B 表象)：

算符 $F' = S^\dagger F S$

$\hat{F}$ 在 B 表象中的矩阵

$\hat{F}$ 在 A 表象中的矩阵

态矢 $b = S^\dagger a$

$$b = \begin{pmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \\ \vdots \\ b_\alpha(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad a = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} u(x,t) = \sum_n a_n(t)\, \psi_n(x) \\ u(x,t) = \sum_\alpha b_\alpha(t)\, \varphi_\alpha(x) \end{cases}$$

幺正变换不改变算符的本征值和矩阵的迹。

对角化幺正矩阵的求法：

例：在 A 表象中，$F = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix}$

① 本征值方程：

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

② 久期方程：

$$\begin{vmatrix} -\lambda & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0$$

$\lambda = 1$ 或 -1

③ 求本征函数

(1) $\lambda = 1$ 代入得 $a_1 = e^{i\theta} a_2$

$$\psi_1 = a_2 \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\psi_1^\dagger \psi_1 = 1$$

$$a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}$$

(2) $\lambda = -1$ 代入

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ -1 \end{pmatrix}$$

④

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} & \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$F' = S^\dagger F S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

5. Dirac 符号

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int \psi^*(x)\, \varphi(x)\, dx$$

若 $\hat{F}|n\rangle = f_n |n\rangle$，$\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$

则 $|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$

$a_n = \langle n | \psi \rangle$ ($|\psi\rangle$ 在基矢 $|n\rangle$ 上的投影)

$|n\rangle\langle n|$ 为投影算符：$|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle n|\psi\rangle |n\rangle = a_n |n\rangle$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

6. 占有数表象

$$\hat{a} = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

$$\hat{a}^\dagger = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

在线性谐振子问题中

$$\begin{cases} \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\, |n-1\rangle \\ \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\, |n+1\rangle \end{cases}$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$$

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

$$\hat{N}|n\rangle = \hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$$