量子力学与统计物理

Quantum mechanics and statistical physics

李小飞

光电科学与工程学院

2022 年 1 月 19 日

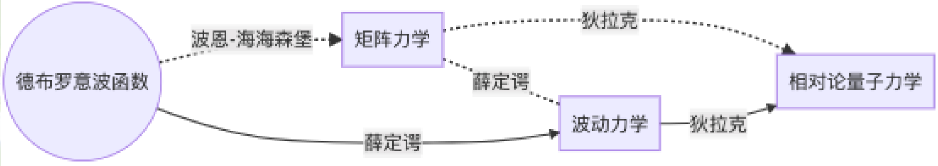
第十五讲、狄拉克 (Dirac) 符号

主要内容

大氣大為 求實求真

前情回顾

- ☑ 波动力学
- ☑ 矩阵力学
- ☐ 两者的统一



量子力学用希尔伯特空间描述，希尔伯特空间是内积空间

希尔伯特空间

- 加法：$\psi + \varphi$
- 数乘：$c\psi$
- 内积：(ψ, ψ)

考察内积：$(\psi, \psi) = \int \psi^* \psi d\tau$

同一波函数放在左边还是右边，意义有所不同：

放右边是线性矢量：$(\psi, a\psi) = a(\psi, \psi)$

放左边是反线性矢量：$(a\psi, \psi) = a^*(\psi, \psi)$

1、左矢和右矢

定义:

为了清楚地描述这种线性反线性特点，特定义左矢和右矢

$$\langle\psi|, \qquad |\psi\rangle$$

内积:

$$(\psi,\psi) \equiv \langle\psi|\psi\rangle$$

有性质:

$$\langle a\psi| = \langle\psi|a^*$$

$$|a\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

考察加法和数乘：发现其中的矢量通常是线性的，因此用右矢来代替。

内积:	(ψ, Ψ)	$\Leftrightarrow$	$\lvert\Psi\rangle = \langle\psi\lvert\Psi\rangle$
平均值:	$\bar{F} = (\Psi, F\Psi)$	$\Leftrightarrow$	$\bar{F} = \langle\Psi\lvert F\rvert\Psi\rangle$
态叠加原理:	$\Psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2$	$\Leftrightarrow$	$\lvert\Psi\rangle = a_1\lvert 1\rangle + a_2\lvert 2\rangle$
展开式 1:	$\Psi = \sum_{i=1}^{n} a_i\psi_i$	$\Leftrightarrow$	$\lvert\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i\lvert i\rangle$
展开式 2:	$\Psi = \sum_{i=1}^{n} (\psi_i, \Psi)\psi_i$	$\Leftrightarrow$	$\lvert\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle i\lvert\Psi\rangle\lvert i\rangle$

2、外积

考察展开式：

$$\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle i|\Psi\rangle |i\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|\Psi\rangle$$

定义算符： $\rho_i = |i\rangle\langle i|$ 有：

$$\sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i = \sum_{i=1}^{n} \rho_i = 1$$

外积矩阵表示

若: $\Psi = \sum a_n \varphi_n$

右矢的矩阵形式:

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

左矢的矩阵形式:

$$\langle\Psi| = (a_1^*, a_2^*, \cdots, a_n^*)$$

内积与外积:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = (a_1^*, a_2^*, \cdots, a_n^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ a_n \end{pmatrix}, \qquad |\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ a_n \end{pmatrix} (a_1^*, a_2^*, \cdots, a_n^*)$$

3、密度算符

算符的意义：

$$\rho_i\Psi = |i\rangle\langle i|\Psi\rangle = \langle i|\Psi\rangle|i\rangle = a_i|i\rangle$$

$$\Psi = \sum_i^n a_i|i\rangle = \sum_i^n \rho_i\Psi$$

可知： $\rho_i\Psi$ 是矢量 Ψ 在第 i 个本征矢上的投影，因此称为**投影算符**

对于非本征态，也可定义：$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$

考察其在 i 态的平均值：

$$\begin{aligned}\bar{\rho} &= \langle i|\rho|i\rangle \\ &= \langle i|\Psi\rangle\langle\Psi|i\rangle \\ &= (\langle i|\Psi\rangle)(\langle\Psi|i\rangle) \\ &= a_i^* a_i = \omega_i\end{aligned}$$

是概率密度，因此称 $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ 为**密度算符**，也称为测量算符。

4、密度矩阵

考察平均值公式:

$$
\begin{aligned}
\bar{\hat{F}} &= \sum_i |a_i|^2 f_i \\
&= \sum_i \omega_i \langle i|\hat{F}|i\rangle \\
&= \sum_{ij} \omega_i \langle i|\hat{F}|j\rangle\langle j|i\rangle \\
&= \sum_{ij} \langle j|i\rangle\omega_i\langle i|\hat{F}|j\rangle \\
&= \sum_j \langle j|(\sum_i |i\rangle\omega_i\langle i|)\hat{F}|j\rangle
\end{aligned}
$$

定义密度矩阵: $\hat{\rho} = \sum_i |i\rangle\omega_i\langle i|$

得新的平均值公式:

平均值公式-3

$$\bar{\hat{F}} = \sum_j \langle j|\hat{\rho}\hat{F}|j\rangle$$
$$= tr(\hat{\rho}\hat{F})$$

例: 求算符 $\hat{F}$ 在 $|\Psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$ 上的平均值

解: 先求算符矩阵:

$$F_{nm} = \langle n|F|m\rangle$$

再求密度矩阵:

$$\hat{\rho} = \sum_n |n\rangle a_n^* a_n \langle n|$$

对两矩阵的积求迹得平均值

$$\bar{\hat{F}} = tr(\hat{\rho}\hat{F})$$

大氣大為 求實求真

6、狄拉克型量子力学

量子态: $|\Psi\rangle$, 位置波函数: $\langle x|\Psi\rangle$

展开式: $|\Psi\rangle = \sum\limits_{n=1}^{n} a_n|n\rangle$

内积: $\langle\varphi|\Psi\rangle = (\varphi, \Psi) = \int \varphi^*\Psi d\tau$

归一化: $\langle\Psi|\Psi\rangle = (\Psi, \Psi) = \int \Psi^*\Psi d\tau = 1$

正交归一: $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

$\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta(\lambda - \lambda')$

表象: $\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$

展开系数: $a_n = \langle n|\Psi\rangle$

展开系数: $a_n^* = \langle\Psi|n\rangle$

平均值: $\bar{F} = \langle\Psi|F|\Psi\rangle$

矩阵元: $F_{nm} = \langle n|F|m\rangle$

本征方程: $F|n\rangle = f_n|n\rangle$

幺正变换: $S_{m\alpha} = \langle m|\alpha\rangle$

密度算符: $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$

密度矩阵: $\hat{\rho} = \sum_i |i\rangle\omega_i\langle i|$

薛定谔方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle$$

算符运动方程:

$$\frac{d\bar{A}(t)}{dt} = \overline{(\frac{\partial A(t)}{\partial t})} + \frac{1}{i\hbar}\overline{[A(t), H(t)]}$$

大氣大為 求實求真

8、应用实例

1、求波函数的矩阵表示:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{n} a_n |n\rangle$$

$$a_n = \langle n|\Psi\rangle$$

展开系数构成矩阵表示:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

2、求算符的矩阵表示:

$$|\varphi\rangle = F|\Psi\rangle$$

$$|\varphi\rangle = \sum_n F|n\rangle\langle n|\Psi\rangle$$

$$\langle m|\varphi\rangle = \sum_n \langle m|F|n\rangle\langle n|\Psi\rangle$$

$$b_m = \sum_n F_{mn} a_n$$

取遍 n, m:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1n} \\ F_{21} & F_{22} & \cdots & F_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

3、求薛定谔方程的矩阵表示:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle m|\Psi\rangle = \langle m|H|\Psi\rangle$$

$$= \sum_n \langle m|H|n\rangle\langle n|\Psi\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}a_m = \sum_n H_{mn}a_n$$

4、求平均值公式的矩阵表示:

$$
\begin{aligned}
\bar{F} &= \langle\Psi|F|\Psi\rangle \\
&= \langle\Psi|1\cdot F\cdot 1|\Psi\rangle \\
&= \sum_{mn}\langle\Psi|m\rangle\langle m|F|n\rangle\langle n|\Psi\rangle \\
&= \sum_{mn} a_m^* F_{mn} a_n
\end{aligned}
$$

5、求两算符积的平均值:

$$
\begin{aligned}
\overline{GF} &= \langle\Psi|GF|\Psi\rangle \\
&= \langle\Psi|1\cdot G\cdot 1\cdot F\cdot 1|\Psi\rangle \\
&= \sum_{mln}\langle\Psi|m\rangle\langle m|G|l\rangle\langle l|F|n\rangle\langle n|\Psi\rangle \\
&= \sum_{mln} a_m^* G_{ml} F_{ln} a_n
\end{aligned}
$$

大氣大為 求實求真

三种绘景

量子力学二个基本方程:

1. 薛定谔方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle$$

2. 算符运动方程:

$$\frac{d\bar{A}(t)}{dt} = \overline{(\frac{\partial A(t)}{\partial t})} + \frac{1}{i\hbar}\overline{[A(t), H(t)]}$$

这个世界到底什么在变?

- ☑ 薛定谔绘景: 只有波函数 (态) 在变, 服从薛定谔方程
- ☑ 海森堡绘景: 只有算符 (力学量) 在变, 服从算符运动方程 (海森堡方程)
- ☑ 狄拉克绘景: 波函数和算符都在变, 一切都只是幺正变换。

定义时间演化算符:

$$U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t)\rangle$$

分析: (1) 因为 $U(t_0,t_0)|\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t_0)\rangle$

有:

$$U(t_0,t_0) = I$$

(2): 求 $U(t,t_0)$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)|\Psi(t)\rangle = HU(t,t_0)|\Psi(t)\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0)$$

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$$

(3): $U(t,t_0)$ 是幺正算符

$$
\begin{aligned}
U(t,t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \\
U^\dagger(t,t_0) &= e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \\
U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0) &= U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0) \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \\
&= e^0 \qquad = I
\end{aligned}
$$

因此，有：

$$|\Psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$

对比：

$$|\psi_{(B)}\rangle = S^\dagger|\psi_{(A)}\rangle$$

可知，波函数随时间的演化服从薛定谔方程，但也只是一种幺正算符。

(4) 分析平均值公式:

$$\begin{aligned}\bar{F} &= \langle\Psi(t)|F(t_0)|\Psi\rangle(t) \\ &= \langle\Psi(t_0)|U^\dagger(t,t_0)|F(t_0)|U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle \\ &= \langle\Psi(t_0)|U^\dagger(t,t_0)F(t_0)U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle \\ &= \langle\Psi(t_0)F(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle\end{aligned}$$

式中，令:

$$F(t,t_0) = U^\dagger(t,t_0)F(t_0)U(t,t_0)$$

对式:

$$F' = S^\dagger F S$$

可知，算符随时间的演化与波函数随时间的演化是等价的，也只是一种幺正算符。

期中考试!

Thanks for your attention!

A & Q

求實求真
大氣大為