# 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 4 月 11 日





第四章、态和力学量的表象 (8



# 1. 矩阵表示

波函数矩阵表示 算符的矩阵表示 算符矩阵的厄密性

## 公式的矩阵表示

- 2. 幺正变换
- 3. 狄拉克 (Dirac) 符号
- 4. 量子力学绘景 (Pictures)



0/88

# 一 前情回顾

📕 波函数:

$$\Psi(\vec{r},t)$$

■ 薛定谔方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)=(\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+U(\vec{r}))\Psi(\vec{r},t)$$

■ 力学量算符:

$$\begin{cases} \hat{\vec{r}} = \vec{r} \\ \hat{\vec{p}} = -i\hbar(\frac{d}{dx} + \frac{d}{dy} + \frac{d}{dz}) \\ \hat{F} = F(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) \end{cases}$$

可以发现: 所有函数都以位置为自变量! 我们称为位置表象



## □ 表象理论

# ● 定义:

- 表象: 波函数和力学量的具体表示形式,选择一个力学量本征函数系做为基就是选取一种表象
- 表象理论:研究量子力学具体表示形式以及它们之间的相互变换 的理论。

## 公式的矩阵表示

1. 矩阵表示

波函数矩阵表示

算符的矩阵表示

算符矩阵的厄密性

2. 幺正变换

3. 狄拉克 (Dirac) 符号

4. 量子力学绘景 (Pictures)



# ❷ 展开系数

# ■ 命题-1. 试证明波函数可用其在任意基上的展开系数构成的矩阵表示

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n(t) \psi_n(\vec{r})$$

$$\Psi \Leftrightarrow (c_1, c_2, \cdots)^T$$

## 证明: 对于任意表象 Q, 若:

本征分立谱:  $\psi_n(\vec{r}) \to u_n(\vec{r}), c_n \to a_n$ 

$$a_n(t) = (u_n(\vec{r}), \Psi(\vec{r},t))$$

本征连续谱:  $\psi_n(\vec{r}) \rightarrow u_q(\vec{r})$ ,  $c_n \rightarrow a(q)$ 

$$a(q,t) = (u_q(\vec{r}), \Psi(\vec{r},t))$$



## ☑ 波函数矩阵表示

因此,有:

$$\begin{split} \Psi(\vec{r},t) &= \sum_n a_n(t) u_n(\vec{r}) \\ &= a_1(t) u_1 + a_2(t) u_2 + \dots + a_n(t) u_n \\ &= (u_1,u_2,\dots,u_n) \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \dots \\ a_n(t) \end{pmatrix} \\ &= (u_1,u_2,\dots,u_n) (a_1(t),a_2(t),\dots,a_n(t))^T \\ \Psi &\Leftrightarrow (a_1(t),a_2(t),\dots,a_n(t))^T \Leftrightarrow \Psi \end{split}$$

4/88



# ● 例-2. 求动量本征态 (平面波) 在动量表象中的具体形式 (矩阵表示):

解: 动量的本征谱连续, 采用公式

$$a(q,t) = (u_q(\vec{r}), \Psi(\vec{r},t))$$

取

$$u_q(\vec{r}) = \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}, \qquad \Psi(\vec{r},t)) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} = \psi_{\vec{p}'} e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

$$\begin{split} a(q,t) &= (u_q(\vec{r}), \Psi(\vec{r},t)) \\ a(p,t) &= (\psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \psi_{\vec{p}'} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et}(\psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \psi_{\vec{p}'}) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\delta(\vec{p}-\vec{p}') \end{split}$$

Tips: 本征态在自身表象中的矩阵表示为  $\delta$  函数。



● 例-3. 已知如下波函数是体系的能量本征态,求其基态 (n=1) 分别在动量和能量表象中的具体形式:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x, \qquad 0 < x < a$$

解: (1) 动量的本征谱连续,采用公式

$$\begin{split} a(q,t) &= (u_q(\vec{r}), \Psi(\vec{r},t)) \\ a(p) &= (\psi_p(x), \psi_1(x)) \\ &= (\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}, \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi}{a}x) \end{split}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2}{a}} (e^{\frac{i}{\hbar}px}, \sin\frac{\pi}{a}x)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a e^{-\frac{i}{\hbar}px} \sin\frac{\pi}{a}x) dx$$

$$= \sqrt{\frac{a\pi}{\hbar}} \frac{1 + e^{\frac{i}{\hbar}pa}}{\pi^2 - p^2 a^2/\hbar^2}$$

(2) 能量本征谱分立, 采用公式

$$\begin{split} a_n(t) &= (u_n(\vec{r}), \Psi(\vec{r},t)) \\ a_{E_n} &= (\psi_n(x), \psi_1(x)) \\ &= \delta_{1n} \end{split}$$



## 公式的矩阵表示

1. 矩阵表示

波函数矩阵表示

算符的矩阵表示

算符矩阵的厄密性

- 2. 幺正变换
- 3. 狄拉克 (Dirac) 符号
- 4. 量子力学绘景 (Pictures)

**大氣大為** 形實 求真

# ☑ 算符矩阵表示

● 例-4. 算符有如下定义式,求其在 Q 表象的矩阵形式:

$$\varphi(\vec{r}) = F\Psi(\vec{r})$$

解: 把两波函数在表象 Q 中展开 (基  $u_n(\vec{r})$ ):

$$\begin{split} \sum_m b_m(t) u_m(\vec{r}) &= F \sum_m a_m(t) u_m(\vec{r}) \\ \sum_m b_m(t) u_m(\vec{r}) &= \sum_m F u_m(\vec{r}) a_m(t) \\ \sum_m b_m(t) u_n^*(\vec{r}) u_m(\vec{r}) &= \sum_m u_n^*(\vec{r}) F u_m(\vec{r}) a_m(t) \\ \sum_m b_m(t) (u_n(\vec{r}), u_m(\vec{r})) &= \sum_m (u_n(\vec{r}), F u_m(\vec{r})) a_m(t) \end{split}$$

$$\begin{split} \sum_m b_m(t) \delta_{nm} &= \sum_m (u_n(\vec{r}), Fu_m(\vec{r})) a_m(t) \\ b_n(t) &= \sum_m (u_n(\vec{r}), Fu_m(\vec{r})) a_m(t) \\ b_n(t) &= \sum_m F_{nm} a_m(t) \end{split}$$

取遍 n, m. 得矩阵形式

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

Tips: 算符矩阵元公式

$$F_{nm} = (u_n(\vec{r}), Fu_m(\vec{r}))$$



## 公式的矩阵表示

1. 矩阵表示

波函数矩阵表示

算符的矩阵表示

算符矩阵的厄密性

2. 幺正变换

3. 狄拉克 (Dirac) 符号

4. 量子力学绘景 (Pictures)



## ∅ 算符矩阵性质

- 力学量算符的矩阵是厄密矩阵
- 力学量算符的矩阵,对角元都是实数
- 力学量算符在自身表象是对角矩阵,对角元素就是算符的本征值 >

# ₫ 厄密矩阵定义:

- 对于矩阵 F,其共轭矩阵为: $F^{\dagger} = (F_{nm}^*)^T$
- 如果有 F = F<sup>†</sup>, 称 F 为厄密矩阵

Tips: 厄密矩阵的矩阵元有特点

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

#### ● 例-5. 指出下列矩阵, 哪些是厄密矩阵:

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

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



# ● 例-6. 试证明力学量算符的矩阵表示都是厄密矩阵:

#### 证明:

$$\begin{split} F_{nm} &= (u_n(\vec{r}), Fu_m(\vec{r})) \\ &= (Fu_n(\vec{r}), u_m(\vec{r})) \\ &= (u_m(\vec{r}), Fu_n(\vec{r}))^* \\ &= F_{mn}^* \end{split}$$

证毕!







证明:

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

即:对角元都是实数。

证毕!



# ╱ 性质 3:

● 例-8. 试证明力学量算符的矩阵表示, 在自身表象中是对角矩阵:

证明:

$$\begin{split} F_{nm} &= (u_n(\vec{r}), Fu_m(\vec{r})) \\ &= (u_n(\vec{r}), f_n u_m(\vec{r})) \\ &= f_n(u_n(\vec{r}), u_m(\vec{r})) \\ &= f_n \delta_{mn} \end{split}$$

即: (1) 非对角元都是 (), 是对称阵。 (2) 对角元就是本征值证毕!



#### 🚄 对角化的物理意义

- 力学量算符的表示一般不是对称阵 (不在自身表象)
- 在数学上做矩阵对角化,使其成为对角阵 (在自身表象)
- 对角化完成从任意表象回到自身表象的过程
- 对角元就是本征值 (解本征方程求本征值)

및 课堂作业:

取 Q 表象为动量表象,试求位置算符  $\hat{x}$ 、动量算符  $\hat{p}_x$  的具体形式。

19/88

#### 已知波函数取如下形式:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}u_1(x) + \frac{1}{2}u_2(x) + \frac{1}{2}u_3(x)$$

## 其系数矩阵为

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

- 此系数矩阵是波函数在位置表象的矩阵表示吗?
- 此系数矩阵是波函数在能量表象的矩阵表示的条件是什么?



- 1. 求动量表象中的位置算符和动量算符的具体形式
- 2. 求动量表象中位置算符的本征值和本征函数

**六氣六為** 

## 公式的矩阵表示

## 1. 矩阵表示

波函数矩阵表示 算符的矩阵表示 算符矩阵的厄密性

- 2. 幺正变换
- 3. 狄拉克 (Dirac) 符号
- 4. 量子力学绘景 (Pictures)



## ▲ 量子力学常用公式

- 平均值公式
- 归一化公式
- 本征方程
- 薛定谔方程
- 运动方程

# □ 平均值公式

● 例-1、求平均值公式在 Q 表象中的具体形式 (矩阵表示):

$$\bar{F} = \int \Psi^*(\vec{r},t) F \Psi(\vec{r},t) d\tau$$

解:

$$\begin{split} \bar{F} &= (\Psi(\vec{r},t), F\Psi(\vec{r},t)) \\ &= (\sum_n a_n(t) u_n(\vec{r}), \sum_m a_m(t) F u_m(\vec{r})) \\ &= \sum_{n,m} a_n^*(t) (u_n(\vec{r}), F u_m(\vec{r})) a_m(t) \\ &= \sum_{n,m} a_n^*(t) F_{nm} a_m(t) \end{split}$$



## 取遍n, m, 得到如下矩阵形式

$$\bar{F} = (a_1^*(t), a_2^*(t), \cdots, a_n^*(t)) \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1n} \\ F_{21} & F_{22} & \cdots & F_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \cdots \\ a_n(t) \end{pmatrix}$$

$$ar{F} = oldsymbol{\Psi}^\dagger oldsymbol{F} oldsymbol{\Psi}$$

#### 在自身表象中,有:

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

$$\bar{F} = \sum_{n} a_n^*(t) a_n(t) f_n = \sum_{n} |a_n(t)|^2 f_n$$



# □ 归一化公式

● 例-2、求归一化公式在 Q 表象中的具体形式 (矩阵表示):

$$\int \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)d\tau = 1$$

解:

$$\begin{split} 1 &= (\Psi(\vec{r},t), \Psi(\vec{r},t)) \\ &= (\sum_n a_n(t) u_n(\vec{r}), \sum_m a_m(t) u_m(\vec{r})) \\ &= \sum_{n,m} a_n^*(t) (u_n(\vec{r}), u_m(\vec{r})) a_m(t) \\ &= \sum_{n,m} a_n^*(t) \delta_{nm} a_m(t) \end{split}$$

$$\sum_{n}a_{n}^{\ast}(t)a_{n}(t)=1$$

取遍 n. 得到如下矩阵形式

$$(a_1^*(t), a_2^*(t), \cdots, a_n^*(t)) \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \cdots \\ a_n(t) \end{pmatrix} = 1$$

$$\mathbf{\Psi}^{\dagger}\mathbf{\Psi}=1$$



# ● 例-3、求本征方程在 Q 表象中的具体形式 (矩阵表示):

$$F\psi_n(\vec{r})=f\psi_n(\vec{r})$$

解:

$$F\psi_m(\vec{r}) = f\psi_m$$
 
$$\psi_n^* F \psi_m = \psi_n^* f \psi_m$$
 
$$(\psi_n, F\psi_m) = (\psi_n, f\psi_m)$$
 
$$(\psi_n, F\psi_m) = f(\psi_n, \psi_m)$$
 
$$F_{nm} = f\delta_{nm}$$



$$\sum_n (F_{nm} - f \delta_{nm}) a_n = 0$$

取遍 n.m. 得矩阵形式

$$\begin{pmatrix} F_{11} - f & F_{12} & \cdots & F_{1n} \\ F_{21} & F_{22} - f & \cdots & F_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn} - f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \cdots \\ a_n(t) \end{pmatrix} = 0$$
 (1) 
$$(\mathbf{F} - f\mathbf{I})\Psi = 0$$

有解条件,系数行列式等于零!

#### 得久期方程:

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

肝人物万程,得本征谱 $f_1,f_2,\cdots,f_n$  依次把  $f_i$  代回方程(1),解得第 i 个本征函数。本征方程得解 矩阵化使本征方程从微分方程变为代数六程!

● 例-4、已知算符在 () 表象中的矩阵形式如下, 求本征值和归一化本征函数, 并将矩阵对角化。:

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

#### 可选方案:

- ☑ 解久期方程,得本征值,然后代入方程 (1),得本征函数,再直接写出
  对角阵
- 对用厅 □ 直接从数学上对角化,对角元就是本征值,然后代入方程 (1),得本征 函数。

解: 第一步: 解久期方程求本征值

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 - f & 1 & 0 \\ 1 & 0 - f & 1 \\ 0 & 1 & 0 - f \end{vmatrix} = 0 \quad (2)$$
$$-f^{3} + 2f = 0$$
$$f_{1} = \sqrt{2}, f_{2} = 0, f_{3} = -\sqrt{2}$$

注意: 这只是

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

的本征值,  $L_x$  的本征值为  $\lambda_i = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} f_i$ , 即  $\hbar, 0, -\hbar$ 



第二步: 把 f: 代回方程 (1) 求本征函数

$$\begin{pmatrix} 0 - f & 1 & 0 \\ 1 & 0 - f & 1 \\ 0 & 1 & 0 - f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 0 \tag{1}$$

$$\begin{aligned} f_1 &= \sqrt{2} & f_2 &= 0 & f_3 &= -\sqrt{2} \\ \binom{1/\sqrt{2}a_2}{a_2} &= 1/\sqrt{2}a_2 \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} & \binom{a_1}{0} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \binom{-1/\sqrt{2}a_2}{a_2} \\ = 1/\sqrt{2}a_2 \end{pmatrix} = 1/\sqrt{2}a_2 \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

代入归一化公式,

$$\begin{split} \Psi^{\dagger}\Psi &= 1 \\ f_1 &= \sqrt{2} \\ f_2 &= 0 \\ \frac{1}{2}a_2^2(1,\sqrt{2},1) \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \quad a_1^2(1,0,1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \quad \frac{1}{2}a_2^2(-1,\sqrt{2},-1) \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} = 1 \\ a_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ a_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ a_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \psi_1 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \psi_3 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} \end{split}$$

#### 第三步: 写出对角阵:

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

# ≠ 薛定谔方程

# ● 例-5、求薛定谔方程在 () 表象中的具体形式 (矩阵表示):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r},t) = H \psi(\vec{r},t)$$

### 解: 波函数在 () 表象展开

$$\begin{split} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_{n}a_{n}(t)u_{n}(\vec{r}) &= H\sum_{n}a_{n}(t)u_{n}(\vec{r})\\ u_{m}^{*}(\vec{r})i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_{n}a_{n}(t)u_{n}(\vec{r}) &= u_{m}^{*}(\vec{r})H\sum_{n}a_{n}(t)u_{n}(\vec{r})\\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u_{m}^{*}(\vec{r})\sum_{n}a_{n}(t)u_{n}(\vec{r}) &= u_{m}^{*}(\vec{r})\sum_{n}a_{n}(t)Hu_{n}(\vec{r}) \end{split}$$

方意

為真

$$\begin{split} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(u_m(\vec{r}), \sum_n a_n(t)u_n(\vec{r})) &= (u_m(\vec{r}), \sum_n a_n(t)Hu_n(\vec{r})) \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \sum_n a_n(t)(u_m(\vec{r}), u_n(\vec{r})) &= \sum_n (u_m(\vec{r}), Hu_n(\vec{r}))a_n(t) \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \sum_n a_n(t)\delta_{mn} &= \sum_n H_{mn}a_n(t) \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t} a_n(t) &= \sum H_{mn}a_n(t) \end{split}$$

### 取遍 n, m, 得矩阵形式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} a_{1}(t) \\ a_{2}(t) \\ \dots \\ a_{n}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{n1} & F_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1}(t) \\ a_{2}(t) \\ \dots \\ a_{n}(t) \end{pmatrix}$$

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



# □ 算符运动方程

● 例-6、求运动方程在 Q 表象中的具体形式 (矩阵表示):

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

解: 波函数在 Q 表象展

$$\begin{split} \frac{d(\psi,F\psi)}{dt} &= (\psi,\frac{\partial F}{\partial t}\psi) + \frac{1}{i\hbar}(\psi,[F,H]\psi) \\ \frac{d(\sum_{m} a_{m}u_{m},F\sum_{n} a_{n}u_{n})}{dt} &= (\sum_{m} a_{m}u_{m},\frac{\partial F}{\partial t}\sum_{n} a_{n}u_{n}) \\ &+ \frac{1}{i\hbar}(\sum_{m} a_{m}u_{m},[F,H]\sum_{n} a_{n}u_{n}) \end{split}$$

$$\begin{split} \frac{d\sum_{mn}a_m^*(u_m,Fu_n)a_n}{dt} &= \sum_{mn}a_m^*(u_m,\frac{\partial F}{\partial t}u_n)a_n \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar}\sum_{mn}a_m^*(u_m,[F,H]u_n)a_n \\ \frac{d\sum_{mn}a_m^*F_{mn}a_n}{dt} &= \sum_{mn}a_m^*\frac{\partial F_{mn}}{\partial t}a_n \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar}\sum_{mn}a_m^*[F_{mn},H_{mn}]a_n \end{split}$$





取遍 n, m, 得矩阵形式

$$\begin{split} \frac{d\mathbf{\Psi}^{\dagger}\boldsymbol{F}\boldsymbol{\Psi}}{dt} &= \mathbf{\Psi}^{\dagger}\frac{\partial\boldsymbol{F}}{\partial t}\boldsymbol{\Psi} + \frac{1}{i\hbar}\mathbf{\Psi}^{\dagger}[\boldsymbol{F},\boldsymbol{H}]\boldsymbol{\Psi} \\ \frac{d\overline{\boldsymbol{F}}}{dt} &= \frac{\overline{\partial\boldsymbol{F}}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\overline{[\boldsymbol{F},\boldsymbol{H}]} \end{split}$$

#### 課外作业

- 1. 取 表象为动量表象, 试求平均值公式和薛定谔方程的具体形式。
- 2. 在  $L_z$  表象中, $L_x$  和  $L_y$  的矩阵表示如下, 求它们的本征值和归一化本征

$$L_x = rac{\hbar}{\sqrt{2}} egin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad L_y = rac{\hbar}{\sqrt{2}} egin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}$$



1. 矩阵表示

2. 幺正变换

幺正变换的定义

量子力学中的三种基本变换 幺正变换的性质

3. 狄拉克 (Dirac) 符号

4. 量子力学绘景 (Pictures)

八氣六萬

43/88



- ☑ 波函数, 力学量算符, 公式在 Q 表象下的矩阵表示
- □ 表象变换

六氯六為

1. 矩阵表示

2. 幺正变换 幺正变换的定义

量子力学中的三种基本变换 幺正变换的性质

3. 狄拉克 (Dirac) 符号

4. 量子力学绘景 (Pictures)

大氣大差

# ♦ 幺正矩阵和厄密矩阵

■ F 的逆算符  $F^{-1}F = FF^{-1} = I$ ,

$$F\Psi = \psi, \qquad \Psi = F^{-1}\psi$$

■ F的共轭算符(称伴算符) $F^{\dagger} = (F_{nm}^*)^T$ ,

$$(\psi, F\Psi), \qquad (F^{\dagger}\psi, \Psi)$$

如果  $F^{\dagger}=F$ ,称 F 为厄密算符(矩阵),判定:  $F_{mn}=F_{nm}^{*}$ ; 如果  $F^{\dagger}=F^{-1}$ ,称 F 为幺正算符(矩阵),判定:  $F^{\dagger}F=FF^{\dagger}=I$ 



# ◆ 幺正变换的定义

通过幺正矩阵联系起来的两矩阵之间的变换,称为幺正变换。

46/88

#### ● 例-1. 试证明二维平面矢量绕原点的旋转变换是幺正变换:

证明: 
$$\begin{cases} x' = x \cos \theta - y \sin \theta \\ y' = x \sin \theta + y \cos \theta \end{cases} \begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}_{y}$$

$$R_{\theta} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}, \qquad R_{\theta}^{\dagger} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

$$P_{\theta} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \cos \theta & -\sin \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} = I$$

$$R_{\theta}R_{\theta}^{\dagger} = R_{\theta}^{\dagger}R_{\theta} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} = I$$

证毕!

## 量子力学中的三种基本变换

幺正变换的性质

3. 狄拉克 (Dirac) 符号

4. 量子力学绘景 (Pictures)

5)

不気が真

1. 矩阵表示

2. 幺正变换

幺正变换的定义

## ● 例-2. 试证明量子力学不同表象基组之间的变换是幺正变换:

证明: 设 A 的基组为  $\psi_{\alpha}$  B 的基组为  $\varphi_{n}$ , A 归一化公式中把波函数在 B 展开:

$$\begin{split} \delta_{\alpha\beta} &= (\psi_{\alpha}, \psi_{\beta}) \\ &= (\sum_{n} S_{n\alpha} \varphi_{n}, \sum_{m} S_{m\beta} \varphi_{m}) \\ &= \sum_{nm} S_{n\alpha}^{*} S_{m\beta} (\varphi_{n}, \varphi_{m}) \\ &= \sum_{nm} S_{n\alpha}^{*} S_{m\beta} \delta_{nm} \\ &= \sum_{n} S_{n\alpha}^{*} S_{n\beta} = \sum_{n} S_{\alpha n}^{\dagger} S_{n\beta} \end{split}$$

B 归一化公式也可在 A 展开:

$$\begin{split} \sum_{\alpha} S_{n\alpha} S_{\alpha m}^{\dagger} &= \sum_{\alpha} S_{n\alpha} S_{m\alpha}^{*} \\ &= \sum_{\alpha} (\varphi_{n}, \psi_{\alpha}) (\varphi_{m}, \psi_{\alpha})^{*} \\ &= \sum_{\alpha} (\psi_{\alpha}, \varphi_{n})^{*} (\psi_{\alpha}, \varphi_{m}) \\ &= \sum_{\alpha\beta} (\psi_{\alpha}, \varphi_{n})^{*} (\psi_{\beta}, \varphi_{m}) \delta_{\alpha\beta} \\ &= \sum_{\alpha\beta} S_{\alpha n}^{*} S_{\beta m} (\psi_{\alpha}, \psi_{\beta}) \\ &= (\sum_{\alpha} S_{\alpha n} \psi_{\alpha}, \sum_{\beta} S_{\beta m} \psi_{\beta}) \\ &= (\varphi_{n}, \varphi_{m}) = \delta_{nm} \end{split}$$

因此, 我们有:

$$\sum_{\alpha} S_{n\alpha} S_{\alpha m}^{\dagger} = \delta_{nm}$$
 
$$\sum_{n} S_{\alpha n}^{\dagger} S_{n\beta} = \delta_{\alpha \beta}$$

即:

$$S^{\dagger}S = SS^{\dagger} = I$$

证毕!

 **注意到**: 
$$S_{n\alpha}=(e_n,e_\alpha)=(e_{(B)},e_{(A)})$$

得变换公式:

$$u_{(B)} = S^\dagger u_{(A)}$$



# ╱ 波函数变换

● 例-3. 试证明同一波函数在两不同表象中的矩阵之间的变换是幺正变换:

证明: 设 A 的基组为  $\psi_{\alpha}$  B 的基组为  $\varphi_{n}$  波函数  $\Psi$  在 A 表象和 B 表象中分别展开:

$$\begin{split} \sum_{\alpha} a_{\alpha} \psi_{\alpha} &= \sum_{n} b_{n} \varphi_{n} \\ \sum_{\alpha} a_{\alpha} \psi_{\beta}^{*} \psi_{\alpha} &= \sum_{n} b_{n} \psi_{\beta}^{*} \varphi_{n} \\ \sum_{\alpha} a_{\alpha} (\psi_{\beta}, \psi_{\alpha}) &= \sum_{n} b_{n} (\psi_{\beta}, \varphi_{n}) \\ \sum_{\alpha} a_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} &= \sum_{n} b_{n} (\psi_{\beta}, \varphi_{n}) \\ a_{\alpha} &= \sum_{n} S_{\alpha n} b_{n} \end{split}$$

$$\begin{split} \Psi &= \\ a_{\alpha} &= \sum_{n} S_{\alpha n} b_{n} \\ a &= S b \\ b &= S^{\dagger} a \end{split}$$

正是两基组之间的幺正矩阵 证毕!

# □ 算符变换

● 例-4. 试证明同一力学量算符在两不同表象中的矩阵变换是幺正变换:

证明: 设 A 的基组为  $\psi_{\alpha}$  B 的基组为  $\varphi_{n}$  算符 F 在 A 表象的矩阵元为  $F_{\alpha\beta}$ , 在 B 表象中的矩阵元为  $F'_{nm}$ 

$$\begin{split} F'_{nm} &= (\varphi_n, F\varphi_m) \\ &= (\sum_{\alpha} S_{\alpha n} \psi_{\alpha}, F \sum_{\beta} S_{\beta m} \psi_{\beta}) \\ &= \sum_{\alpha \beta} S^*_{\alpha n} (\psi_{\alpha}, F\psi_{\beta}) S_{\beta m} \\ &= \sum_{\alpha \beta} S^*_{\alpha n} F_{\alpha \beta} S_{\beta m} \end{split}$$

$$F'_{nm} = \sum_{\alpha\beta} S^{\dagger}_{n\alpha} F_{\alpha\beta} S_{\beta m}$$
$$= (S^{\dagger} F S)_{nm}$$
$$F' = S^{\dagger} F S$$

# 量子力学中的三种基本变换 **幺正变换的性质**

- 3. 狄拉克 (Dirac) 符号
- 4. 量子力学绘景 (Pictures)

1. 矩阵表示

2. 幺正变换

幺正变换的定义



# ╱ 幺正变换性质 1:

● 例-5. 试证明幺正变换不改变算符的本征值:

证明: 算符 F 在 A 表象的矩阵为 F, 本征矢为 a, 在 B 表象中的矩阵为 F' 本征 矢为 b, 有本征方程:

$$Fa = fa \qquad (1)$$

$$F'b = f'b$$

$$S^{\dagger}FSS^{\dagger}a = f'S^{\dagger}a$$

$$S^{\dagger}Fa = f'S^{\dagger}a$$

$$SS^{\dagger}Fa = f'SS^{\dagger}a$$

$$Fa = f'a \qquad (2)$$

比较 (1) (2) 式, 有 f = f', 证毕!

# ☑ 幺正变换性质 2:

■ 例-6. 试证明幺正变换不改变矩阵的迹:

证明: 矩阵 A 的对角元素之和称为矩阵 A 的迹,用 SP(A) 或 tr(A) 表示,则性质

$$tr(AB) = tr(BA)$$

$$tr(AB) = \sum_{i} (AB)_{ii}$$

$$= \sum_{i} \sum_{j} (A_{ij}B_{ji})$$

$$= \sum_{i} \sum_{j} (B_{ji}A_{ij})$$

$$tr(AB) = \sum_{j} \sum_{i} (B_{ji}A_{ij})$$
$$= \sum_{j} (BA)_{jj}$$
$$= tr(BA)$$

$$F' = S^{\dagger}FS$$

$$tr(F') = tr(S^{\dagger}FS)$$

$$= tr(SS^{\dagger}F)$$

$$= tr(F)$$

证毕!

**大氣大為** 

# □ 幺正变换性质 3:

 $lack \emptyset$  例-7. 幺正变换不改变物理规律,现已知在 X 表象中的基本对易关系  $xp_x-p_xx=i\hbar$ ,试求它在 P 表象中的形式,然后证明这种对易关系不随表象发生变化:

解: (1) 在 p 表象,

$$\hat{x}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}, \qquad \hat{p}_x=p_x$$

对任意波函数  $\Psi(p_x)$ 

$$\begin{split} \hat{x}\hat{p}_x\Psi &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}(p_x\Psi)\\ &= i\hbar\Psi + p_x i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\Psi \qquad (a) \end{split}$$



$$\hat{p}_x\hat{x}\Psi=p_x(i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\Psi) \qquad (b)$$

$$(a)-(b)$$

$$\begin{split} \hat{x}\hat{p}_x\Psi - \hat{p}_x\hat{x}\Psi &= i\hbar\Psi\\ \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} &= i\hbar \end{split}$$

#### (2) 在 ○ 表象,

$$\begin{split} x' &= S^\dagger x S, \qquad p_x' = S^\dagger p_x S \\ x' p_x' - p_x' x' &= S^\dagger x S S^\dagger p_x S - S^\dagger p_x S S^\dagger x S \\ &= S^\dagger x p_x S - S^\dagger p_x x S \\ &= S^\dagger (x p_x - p_x x) S \\ &= i \hbar S^\dagger S \\ &= i \hbar \end{split}$$





#### ∠ 推论:

- 量子体系进行任一幺正变换不改变它的全部物理内容
- 两个量子体系,如果能用幺正变换联系起来,则它们在物理上是 等价的

# ■构造 S矩阵的方法

● 例-8. 已知算符 F在 A 表象中的矩阵如下,求 F 表象和 A 表象之间的幺正变换矩阵 S:

$$H = \begin{bmatrix} 2\varepsilon & 0 & \varepsilon \\ 0 & 2\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 0 & 2\varepsilon \end{bmatrix}$$

解: 如果知道 A 表象的基  $\{\psi_{\alpha}\}$ , F 表象的基  $\{\varphi_n\}$ ,则可直接通过计算内积得到:

$$S_{n\alpha}=(\varphi_n,\psi_\alpha)$$

现在知道一个非对角矩阵 H, 我们可以通过解久期方程得到本征值和本征函数,得到一个对角阵 H',这相当于实现了一个从 A 表象到 H 表象的幺正变换, 关系式为:

$$H' = S^{\dagger}HS$$

● 例-9. 试证明 F 在 A 表象的本征函数系构成这个 S 矩阵:

证明: 注意到 H'的对角元是本征值

$$H' = S^{\dagger}HS$$

$$H'_{mn} = (S^{\dagger}HS)_{mn}$$

$$\sum_{\alpha\beta} S^{\dagger}_{m\alpha}H_{\alpha\beta}S_{\beta n} = h_{m}\delta_{mn}$$

$$\sum_{\alpha\beta} (\sum_{m} S_{\alpha m}S^{\dagger}_{m\alpha})H_{\alpha\beta}S_{\beta n} = h_{m}\sum_{m} S_{\alpha m}\delta_{mn}$$

$$\sum_{\beta} H_{\alpha\beta}S_{\beta n} = h_{n}S_{\alpha n}$$

上式表明, 第 n 个本征态正好是 S 矩阵的第 n 列! 即依次提列本征函数构成 S 阵。证毕!

## ♬ 课外作业

1. 算符 F 在 A 表象的矩阵如下 (其中 θ 为实常数)

$$F = \begin{pmatrix} 0 & e^{\theta} \\ e^{-\theta} & 0 \end{pmatrix}$$

- (1) 求 F 的本征值和正交归一本征矢在 A 表象的具体表示
- (2) 求使 F 对角化的幺正变换矩阵 S
- 2. 已知两可观测力学量算符 A,B. 满足  $A^2=B^2=I,\quad AB+BA=0$ , 求
  - (1) 算符 A,B 的本征值
  - (2) 在 A 表象中 A,B 及它们的本征矢的具体表示
  - (3) 在 B 表象中 A,B 及它们的本征矢的具体表示
  - (4) 从 A 到 B 的幺正变换矩阵 S



- 1. 矩阵表示
- 2. 幺正变换
- 3. 狄拉克 (Dirac) 符号

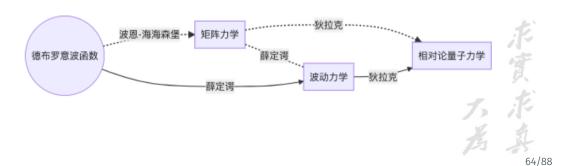
左矢与右矢 外积 狄拉克量子力学

4. 量子力学绘景 (Pictures)



## ∅ 前情回顾

- ☑ 波动力学
- ☑ 矩阵力学
- □ 两者的统一



## 左矢与右矢

外积

狄拉克量子力学

4. 量子力学绘景 (Pictures)

1. 矩阵表示

2 幺正变换

3. 狄拉克 (Dirac) 符号

64/88

## 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

- $\bullet$  加法:  $\psi + \varphi$
- 数乘: cψ
- on 内积:  $(\psi,\psi)$

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:  $(a\psi,\psi)=a^*(\psi,\psi)$ 



## □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。

- 1. 矩阵表示
- 2 幺正变换
- 3. 狄拉克 (Dirac) 符号

左矢与右矢

外积

狄拉克量子力学

4. 量子力学绘景 (Pictures) **プ** 

# 外积定义

## 考察展开式:

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

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

发现存在:  $|i\rangle\langle i$ , 称为函数的外积, 有

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

称为本征函数系的完全性(封闭性)。



\* 对于:  $\Psi = \sum a_n \varphi_n$ , 这种一般态,定义:  $\hat{p} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ 右矢的矩阵形式:

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

左矢的矩阵形式:

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

内积与外积:

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

# ┌ 密度算符

定义算符:

$$\hat{p}_i = |i\rangle\langle i|$$

有:

$$\hat{p}_{i}\Psi = |i\rangle\langle i|\Psi\rangle = \langle i|\Psi\rangle|i\rangle = a_{i}|i\rangle$$

$$\Psi = \sum_{i}^{n} a_{i}|i\rangle = \sum_{i}^{n} \hat{p}_{i}\Psi$$

可知:  $\hat{p}_i\Psi$  是矢量 $\Psi$ 在第i个本征矢上的投影,因此称为投影算符

考察其在 i 态的平均值:

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

是概率密度,因此称  $\hat{p}=|\Psi\rangle\langle\Psi|$  为密度算符,也称为测量算符。



70/88

## 考察平均值公式:

$$\begin{split} \hat{F} &= \sum_{i} |a_{i}|^{2} f_{i} \\ &= \sum_{i} \omega_{i} \langle i | \hat{F} | i \rangle \\ &= \sum_{ij} \omega_{i} \langle i | \hat{F} | j \rangle \langle j | i \rangle \\ &= \sum_{ij} \langle j | i \rangle \omega_{i} \langle i | \hat{F} | j \rangle \\ &= \sum_{j} \langle j | (\sum_{i} |i \rangle \omega_{i} \langle i |) \hat{F} | j \rangle \end{split}$$

定义密度矩阵:  $\hat{\rho} = \sum_i |i\rangle \omega_i \langle i|, \qquad \hat{\rho} = \sum_i |\Psi_i \rangle P_i \langle \Psi_i|$  (混态)

### 得新的平均值公式:

# ₹ 平均值公式-3

$$\begin{split} \bar{\hat{F}} &= \sum_{j} \langle j | \hat{\rho} \hat{F} | j \rangle \\ &= tr(\hat{\rho} \hat{F}) \end{split}$$

**Q** 例-1. 求算符  $\hat{F}$  在  $|\Psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$  上的平均值:

解: 先求算符的矩阵:

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

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

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



- 1. 矩阵表示
- 2. 幺正变换
- 3. 狄拉克 (Dirac) 符号

左矢与右矢

外积

狄拉克量子力学

4. 量子力学绘景 (Pictures)

# ✓ 狄拉克量子力学

量子态 (无表象):  $|\Psi\rangle$ , 位置表象:  $\langle x|\Psi\rangle$ , 动量表象:  $\langle p_x|\Psi\rangle$  算符: F, 位置表象:  $F(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$ , 动量表象:  $F(i\hbar\frac{\partial}{\partial n},p_x)$ 

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

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

炉一化: 
$$\langle \Psi | \Psi \rangle = (\Psi, \Psi) = \int \Psi^* \Psi d \tau = 1$$

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

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

展开系数: 
$$a_n = \langle n | \Psi \rangle$$

展开系数: 
$$a_n^* = \langle \Psi | n \rangle$$



74/88

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

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

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

投影算符:  $p_i = |i\rangle\langle i|$ , 封闭性:  $\sum_i |i\rangle\langle i| = 1$ 

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

本征方程:  $F|n\rangle = f_n|n\rangle$ 

华교为祖:  $I(n) = J_n(n)$ 薛定谔方程:

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

算符运动方程:

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



## *□* 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:

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



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:

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

六気六

### 3、求薛定谔方程的矩阵表示:

$$\begin{split} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle &= H|\Psi\rangle \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle m|\Psi\rangle &= \langle m|H|\Psi\rangle \\ &= \sum_n \langle m|H|n\rangle\langle n|\Psi\rangle \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}a_m &= \sum_n H_{mn}a_n \end{split}$$

4、求薛定谔方程在各表象中的形式:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle, \quad \text{ 无表象}$$
 
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x|\Psi(t)\rangle = H(x,\hat{p}_x)\langle x|\Psi(t)\rangle, \quad \text{ 位置表象}$$
 
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x|\Psi(t)\rangle = [-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)]\langle x|\Psi(t)\rangle, \quad \text{ 位置表象}$$
 
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle p_x|\Psi(t)\rangle = H(\hat{x},p_x)\langle p_x|\Psi(t)\rangle, \quad \text{ 动量表象}$$
 
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle p_x|\Psi(t)\rangle = [\frac{p_x^2}{2\mu} + U(i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x})]\langle p_x|\Psi(t)\rangle, \quad \text{ 动量表象}$$
 
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle n|\Psi(t)\rangle = \langle n|H|m\rangle\langle n|\Psi(t)\rangle, \quad \text{Q. 表象}$$

#### 5、求平均值公式的矩阵表示:

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

80/88

### 6、求两算符积的平均值公式的矩阵表示:

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



- 1. 矩阵表示
- 2. 幺正变换

3. 狄拉克 (Dirac) 符号

4. 量子力学绘景 (Pictures)





## 量子力学的二个基本方程:

■ 薛定谔方程:

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

🛑 算符运动方程:

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

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  $U(t,t_0)$ 

$$\begin{split} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle &= H|\Psi(t)\rangle\\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)|\Psi(t)\rangle &= HU(t,t_0)|\Psi(t)\rangle\\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) &= HU(t,t_0)\\ U(t,t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \end{split}$$



(3):  $U(t,t_0)$  是幺正算符

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

因此,有:

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

对比:

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

Note: 波函数随时间的演化服从的薛定谔方程,只是一种幺正变换。



#### (4) 分析平均值公式:

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

式中,令:

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

对式:

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

Note: 算符随时间的演化与波函数随时间的演化是等价的,他们都是幺正变换。



"我们必须把科学当艺术, 然后才能从科学中得到完整的知识"

…[德国] 歌德

86/88

## ╱ 课外作业

- 1. 试证明对于任意态  $\langle \varphi |$ , 若有  $\langle \varphi | \Psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle$ , 则  $|\Psi \rangle = |\psi \rangle$
- 2. 基于位置算符的本征矢定义算符  $\rho = |x\rangle x$ , 试对任意态计算  $\langle \psi | \rho | \psi \rangle$
- 3. 试证明在幺正变换下两个态的内积保持不变.
- 4. 试证明在幺正变换下算符的本征值保持不变.
- 5. 试写出定态薛定谔方程和平均值公式在动量表象和 Q 表象中的具体形式 (Dirac):
- 6. 设氩原子处于  $|\psi\rangle=0.5Y_{11}+0.4Y_{20}$  态, 试求  $L_x$ , $L_y$  的可能值, 取值概率 及平均值

# 期中考试!

**六氯六点** 



# Thanks for your attention!

A & Q

方氯方名