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 2 日

第四章、态和力学量的表象（8 学时）

Contents

求實求真
大氣大為

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

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。

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)

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: $\psi_n(\vec{r}) \to u_q(\vec{r})$, $c_n \to a(q)$

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

波函数矩阵表示

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

因此，有：

$$
\Psi \Leftrightarrow (a_1(t), a_2(t), \cdots, a_n(t))^T \Leftrightarrow \boldsymbol{\Psi}
$$

	矢量空间	希尔伯特空间
基	$\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$	$\{u_1, u_2, \cdots, u_n\}$
正交归一	$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}$	$(u_m, u_n) = \delta_{mn}$
完备性	$\vec{P} = \sum_{i=1}^{3} x_i \vec{e}_i$	$\Psi = \sum_n a_n(t) u_n$
投影	$x_i = \vec{e}_i \cdot \vec{P}$	$a_n(t) = (u_m, \Psi)$
矩阵	$(x_1, x_2, x_3)^T$	$(a_1(t), a_2(t), \cdots, a_n(t))^T$

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

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

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

Tips: 本征态在自身表象中的矩阵表示为 δ 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

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

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{2}{a}}(e^{\frac{i}{\hbar}px}, \sin\frac{\pi}{a}x) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a e^{-\frac{i}{\hbar}px}\sin\frac{\pi}{a}x)dx \\
&= \sqrt{\frac{a\pi}{\hbar}}\frac{1+e^{\frac{i}{\hbar}pa}}{\pi^2 - p^2a^2/\hbar^2}
\end{aligned}
$$

(2) 能量本征谱分立，采用公式

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

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)

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 $u_n(\vec{r})$）:

$$\sum_m b_m(t)u_m(\vec{r}) = F\sum_m a_m(t)u_m(\vec{r})$$

$$\sum_m b_m(t)u_m(\vec{r}) = \sum_m Fu_m(\vec{r})a_m(t)$$

$$\sum_m b_m(t)u_n^*(\vec{r})u_m(\vec{r}) = \sum_m u_n^*(\vec{r})Fu_m(\vec{r})a_m(t)$$

$$\sum_m b_m(t)(u_n(\vec{r}), u_m(\vec{r})) = \sum_m (u_n(\vec{r}), Fu_m(\vec{r}))a_m(t)$$

$$\sum_m b_m(t)\delta_{nm} = \sum_m (u_n(\vec{r}), Fu_m(\vec{r}))a_m(t)$$

$$b_n(t) = \sum_m (u_n(\vec{r}), Fu_m(\vec{r}))a_m(t)$$

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

取遍 n, m, 得矩阵形式

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

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 $F = F^{\dagger}$，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:

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

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

性质 1:

例-6. 试证明力学量算符的矩阵表示都是厄密矩阵:

证明:

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

证毕!

例-7. 试证明力学量算符的矩阵表示，对角元都是实数:

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:

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

即： (1) 非对角元都是 0， 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）

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。

课堂讨论

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?

课外作业

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
3.

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

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:

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

取遍 n, m, 得到如下矩阵形式

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

$$\bar{F} = \mathbf{\Psi}^\dagger \boldsymbol{F} \mathbf{\Psi}$$

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:

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

$$\sum_n a_n^*(t)a_n(t) = 1$$

取遍 n, 得到如下矩阵形式

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

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

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

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

$$(\boldsymbol{F} - f\boldsymbol{I})\boldsymbol{\Psi} = 0$$

有解条件，系数行列式等于零!

得久期方程:

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

解久期方程，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方程!

例-4、已知算符在 Q 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:

- [x] 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
- [ ] 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

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} 0-f & 1 & 0 \\ 1 & 0-f & 1 \\ 0 & 1 & 0-f \end{vmatrix} = 0 \qquad (2)$$

$$-f^3 + 2f = 0$$

$$f_1 = \sqrt{2}, f_2 = 0, f_3 = -\sqrt{2}$$

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_i 代回方程 (1) 求本征函数

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

$$f_1 = \sqrt{2} \qquad\qquad f_2 = 0 \qquad\qquad f_3 = -\sqrt{2}$$

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2}a_2 \\ a_2 \\ 1/\sqrt{2}a_2 \end{pmatrix} = 1/\sqrt{2}a_2 \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ a_1 \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2}a_2 \\ a_2 \\ -1/\sqrt{2}a_2 \end{pmatrix} = 1/\sqrt{2}a_2 \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$$

代入归一化公式，

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

$$f_1 = \sqrt{2} \qquad f_2 = 0 \qquad f_3 = -\sqrt{2}$$

$$\frac{1}{2}a_2^2(1, \sqrt{2}, 1)\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \quad a_1^2(1, 0, 1)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \quad \frac{1}{2}a_2^2(-1, \sqrt{2}, -1)\begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} = 1$$

$$a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

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

第三步：写出对角阵:

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

例-5、求薛定谔方程在 Q 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 Q 表象展开

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

$$u_m^*(\vec{r})i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n a_n(t)u_n(\vec{r})=u_m^*(\vec{r})H\sum_n a_n(t)u_n(\vec{r})$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u_m^*(\vec{r})\sum_n a_n(t)u_n(\vec{r})=u_m^*(\vec{r})\sum_n a_n(t)Hu_n(\vec{r})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(u_m(\vec{r}), \sum_n a_n(t) u_n(\vec{r})) = (u_m(\vec{r}), \sum_n a_n(t) H u_n(\vec{r}))$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n a_n(t)(u_m(\vec{r}), u_n(\vec{r})) = \sum_n (u_m(\vec{r}), H u_n(\vec{r})) a_n(t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n a_n(t) \delta_{mn} = \sum_n H_{mn} a_n(t)$$

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

取遍 n, m, 得矩阵形式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \cdots \\ a_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H_{n1} & F_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \cdots \\ a_n(t) \end{pmatrix}$$

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

例-6、求运动方程在 Q 表象中的具体形式 (矩阵表示):

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

解: 波函数在 Q 表象展

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

$$\frac{d(\sum_m a_m u_m,F\sum_n a_n u_n)}{dt}=(\sum_m a_m u_m,\frac{\partial F}{\partial t}\sum_n a_n u_n)+\frac{1}{i\hbar}(\sum_m a_m u_m,[F,H]\sum_n a_n u_n)$$

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

取遍 n, m, 得矩阵形式

$$\frac{d\boldsymbol{\Psi}^\dagger \boldsymbol{F}\boldsymbol{\Psi}}{dt} = \boldsymbol{\Psi}^\dagger \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial t}\boldsymbol{\Psi} + \frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\Psi}^\dagger [\boldsymbol{F}, \boldsymbol{H}]\boldsymbol{\Psi}$$

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

1. 取 Q 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矢

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

Contents

求實求真
大氣大為

前情回顾

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

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) $F^{\dagger} = (F^*_{nm})^T$,

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

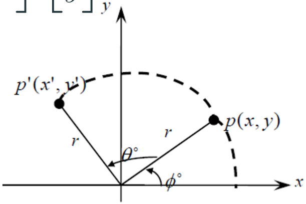
如果 $F^{\dagger} = F$, 称 F 为厄密算符（矩阵），判定: $F_{mn} = F^*_{nm}$;
如果 $F^{\dagger} = F^{-1}$, 称 F 为幺正算符（矩阵）, 判定: $F^{\dagger}F = FF^{\dagger} = I$

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。

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



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

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

证毕!

量子力学中的三种基本变换

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 ψ_α B 的基组为 φ_n, A 归一化公式中把波函数在 B 展开:

$$
\begin{aligned}
\delta_{\alpha\beta} &= (\psi_\alpha, \psi_\beta) \\
&= (\sum_n S_{n\alpha}\varphi_n, \sum_m S_{m\beta}\varphi_m) \\
&= \sum_{nm} S_{n\alpha}^* S_{m\beta}(\varphi_n, \varphi_m) \\
&= \sum_{nm} S_{n\alpha}^* S_{m\beta}\delta_{nm} \\
&= \sum_n S_{n\alpha}^* S_{n\beta} = \sum_n S_{\alpha n}^\dagger S_{n\beta}
\end{aligned}
$$

B 归一化公式也可在 A 展开:

$$
\begin{aligned}
\sum_{\alpha} S_{n\alpha} S^{\dagger}_{\alpha m} &= \sum_{\alpha} S_{n\alpha} S^{*}_{m\alpha} \\
&= \sum_{\alpha} (\varphi_n, \psi_\alpha)(\varphi_m, \psi_\alpha)^* \\
&= \sum_{\alpha} (\psi_\alpha, \varphi_n)^*(\psi_\alpha, \varphi_m) \\
&= \sum_{\alpha\beta} (\psi_\alpha, \varphi_n)^*(\psi_\beta, \varphi_m)\delta_{\alpha\beta} \\
&= \sum_{\alpha\beta} S^{*}_{\alpha n} S_{\beta m}(\psi_\alpha, \psi_\beta) \\
&= (\sum_{\alpha} S_{\alpha n}\psi_\alpha, \sum_{\beta} S_{\beta m}\psi_\beta) \\
&= (\varphi_n, \varphi_m) = \delta_{nm}
\end{aligned}
$$

因此，我们有：

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

$$\sum_{n} S^{\dagger}_{\alpha n} S_{n\beta} = \delta_{\alpha\beta}$$

即：

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

证毕！

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

得变换公式：

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

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 ψ_α B 的基组为 φ_n
波函数 Ψ 在 A 表象和 B 表象中分别展开:

$$\sum_\alpha a_\alpha \psi_\alpha = \sum_n b_n \varphi_n$$

$$\sum_\alpha a_\alpha \psi_\beta^* \psi_\alpha = \sum_n b_n \psi_\beta^* \varphi_n$$

$$\sum_\alpha a_\alpha (\psi_\beta, \psi_\alpha) = \sum_n b_n (\psi_\beta, \varphi_n)$$

$$\sum_\alpha a_\alpha \delta_{\alpha\beta} = \sum_n b_n (\psi_\beta, \varphi_n)$$

$$a_\alpha = \sum_n S_{\alpha n} b_n$$

$$\Psi =$$

$$a_\alpha = \sum_n S_{\alpha n} b_n$$

$$a = Sb$$

$$b = S^\dagger a$$

正是两基组之间的幺正矩阵

证毕!

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 ψ_α B 的基组为 φ_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}

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

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

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

1. 矩阵表示

量子力学中的三种基本变换

2. 幺正变换

幺正变换的定义

幺正变换的性质

3. 狄拉克 (Dirac) 符号

4. 量子力学绘景 (Pictures)

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!

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

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

$$tr(AB) = \sum_i (AB)_{ii}$$

$$= \sum_i \sum_j (A_{ij} B_{ji})$$

$$= \sum_i \sum_j (B_{ji} A_{ij})$$

$$
\begin{aligned}
tr(AB) &= \sum_j \sum_i (B_{ji} A_{ij}) \\
&= \sum_j (BA)_{jj} \\
&= tr(BA)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
F' &= S^\dagger F S \\
tr(F') &= tr(S^\dagger F S) \\
&= tr(S S^\dagger F) \\
&= tr(F)
\end{aligned}
$$

证毕!

幺正变换性质 3:

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 $xp_x - p_x x = i\hbar$，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 $\Psi(p_x)$

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

$$= i\hbar\Psi + p_x i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\Psi \qquad (a)$$

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

(a)-(b)

$$\hat{x}\hat{p}_x\Psi - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar\Psi$$

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar$$

(2) 在 Q 表象,

$$x' = S^\dagger x S, \qquad p'_x = S^\dagger p_x S$$

$$\begin{aligned} x'p'_x - p'_x x' &= S^\dagger x S S^\dagger p_x S - S^\dagger p_x S S^\dagger x S \\ &= S^\dagger x p_x S - S^\dagger p_x x S \\ &= S^\dagger(xp_x - p_x x)S \\ &= i\hbar S^\dagger S \\ &= i\hbar \end{aligned}$$

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

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:

$$H = \begin{bmatrix} 2\varepsilon & 0 & \varepsilon \\ 0 & 2\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 02\varepsilon & \end{bmatrix}$$

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:

$$H' = S^\dagger H S$$

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

$$H' = S^\dagger H S$$

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

$$\sum_{\alpha\beta} S^\dagger_{m\alpha} H_{\alpha\beta} S_{\beta n} = h_m \delta_{mn}$$

$$\sum_{\alpha\beta} (\sum_m S_{\alpha m} S^\dagger_{m\alpha}) H_{\alpha\beta} S_{\beta n} = h_m \sum_m S_{\alpha m} \delta_{mn}$$

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

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!

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

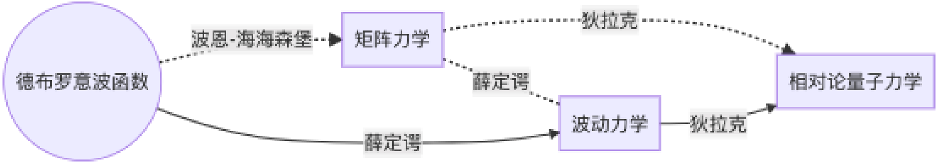
(3) 在 B 表象中 A,B 及它们的本征矢的具体表示

(4) 从 A 到 B 的幺正变换矩阵 S

Contents

大气大为 求实求真

- [x] 波动力学
- [x] 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：$(a\psi, \psi) = a^*(\psi, \psi)$

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：$(\psi, \Psi) \quad \Leftrightarrow \quad |\Psi\rangle = \langle\psi|\Psi\rangle$

平均值：$\bar{F} = (\Psi, F\Psi) \quad \Leftrightarrow \quad \bar{F} = \langle\Psi|F|\Psi\rangle$

态叠加原理：$\Psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 \quad \Leftrightarrow \quad |\Psi\rangle = a_1|1\rangle + a_2|2\rangle$

展开式 1：$$\Psi = \sum_{i=1}^{n} a_i\psi_i \quad \Leftrightarrow \quad |\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i|i\rangle$$

展开式 2：$$\Psi = \sum_{i=1}^{n} (\psi_i, \Psi)\psi_i \quad \Leftrightarrow \quad |\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle i|\Psi\rangle|i\rangle$$

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)

外积定义

考察展开式:

$$
\begin{aligned}
\Psi\rangle &= \sum_{i=1}^{n} \langle i|\Psi\rangle |i\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|\Psi\rangle
\end{aligned}
$$

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

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

称为本征函数系的完全性。

外积的矩阵表示

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：

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

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 Ψ 在第 i 个本征矢上的投影，因此称为**投影算符**

一般地，可定义： $\hat{p} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$

考察其在 i 态的平均值：

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

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。

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

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

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)

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:

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

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：

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

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：

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

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle m|\Psi\rangle &= \langle m|H|\Psi\rangle \\ &= \sum_n \langle m|H|n\rangle\langle n|\Psi\rangle \end{aligned}$$

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

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:

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

Contents

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:

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

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

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

因此，有：

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

对比：

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

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:

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

式中，令:

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

对式:

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

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。

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. 试证明在么正变换下两个态的内积保持不变.
4. 试证明在么正变换下算符的本征值保持不变.

期中考试!

Thanks for your attention!

A & Q

求實求真
大氣大爲