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 13 日

目录

第十四讲、表象变换

前情回顾

- [x] 波函数，力学量算符，公式在 Q 表象下的具体形式
- [ ] 表象变换

幺正矩阵和厄密矩阵

1. F 的逆算符 $F^{-1}F = FF^{-1} = I$,

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

2. F 的共轭算符 (称伴算符) $F^{\dagger} = (F^{*})^{T}$,

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

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:

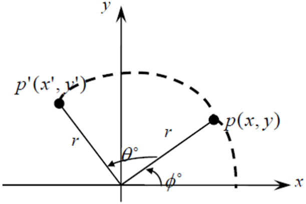
通过一个幺正矩阵联系起来的两个矩阵之间的变换，称为幺正变换。

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!

1、基矢变换

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:

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

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：

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

2、波函数变换

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!

3、算符变换

试证明：同一力学量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}

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

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

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

幺正变换性质 1:

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：

$$
\begin{aligned}
Fa &= fa \qquad (1)\\
F'b &= f'b\\
S^\dagger FSS^\dagger a &= f'S^\dagger a\\
S^\dagger Fa &= f'S^\dagger a\\
SS^\dagger Fa &= f'SS^\dagger a\\
Fa &= f'a \qquad (2)
\end{aligned}
$$

比较 (1) (2) 式，有 $f = f'$，证毕！

幺正变换性质 2:

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

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

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

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

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

证毕!

幺正变换性质 3:

幺正变换不改变物理规律，已知在 x 表象中有基本对易关系 $xp_x - p_x x = i\hbar$ 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，

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

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,

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

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

推论：

1. 量子体系进行任一幺正变换不改变它的全部物理内容
2. 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

已知一个算符 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:

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

现在证明：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！

THE END

A & Q