算符对易和不确定关系

定理：两个力学量F和G可以同时有确定值的充要条件是它们的算符彼此对易

$$[\hat{F},\hat{G}]=0$$

必要性： 如果F和G可以同时有确定值，那么必存在F和G的共同本征函数 ψ_{fg} 满足 $\hat{F}\psi_{fg}=f\psi_{fg},\hat{G}\psi_{fg}=g\psi_{fg}$，于是

$$[\hat{F},\hat{G}]\psi_{fg}=(fg-gf)\psi_{fg}=0$$

又因为力学量算符的本征函数构成完备集，任意波函数都可以展开为它们的叠加：

$$\psi=\sum_{fg}c_{fg}\psi_{fg}$$

于是：

$$[\hat{F},\hat{G}]\psi=\sum_{fg}c_{fg}[\hat{F},\hat{G}]\psi_{fg}=0$$

再根据 ψ 的任意性就得出了 $[\hat{F},\hat{G}]=0$

充分性：如果F和G中有一个是非简并的（比如F），也就是说对应每个本征值只有一个线性无关本征态：$\hat{F}\psi_f = f\psi_f$，那么

$$0 = [\hat{F},\hat{G}]\psi_f = \hat{F}\hat{G}\psi_f - \hat{G}\hat{F}\psi_f = \hat{F}\hat{G}\psi_f - f\hat{G}\psi_f, \quad \hat{F}(\hat{G}\psi_f) = f(\hat{G}\psi_f)$$

也就是说，ψ_f 和 $\hat{G}\psi_f$ 都是$\hat{F}$的属于本征值f的本征函数，根据非简并的前提，它们必相差一个常数因子，不妨设为g：

$$\hat{G}\psi_f = g\psi_f$$

这也就证明$\hat{F}$的本征函数也是$\hat{G}$的本征函数（本征值为g，且一定是实数），它们对应的力学量可以同时有确定值。

对于二者都简并的情况，设 $\hat{F}\psi_{fk} = f\psi_{fk},(k = 1,2...,n)$，即$\hat{F}$的本征值f是n度简并的（$\psi_{fk}$之间线性无关），同理可证

$$\hat{F}(\hat{G}\psi_{fk}) = f(\hat{G}\psi_{fk})$$

那么必有

$$\hat{G}\psi_{fk} = \sum_{m=1}^{n} c_{km}\psi_{fm}，$$（系数c_{km}可以为0）

写成矩阵形式，同时略去角标f:

$$\hat{G}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix},$$

把系数矩阵对角化，就得到了$\hat{G}$的本征值和本征函数

假设存在n×n的变换矩阵U，使得系数矩阵对角化：

$$U\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix}U^{-1} = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & g_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & g_n \end{pmatrix}$$

那么：

$$\hat{G}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

假设存在n×n的变换矩阵U，使得系数矩阵对角化：

$$U\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix}U^{-1} = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & g_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & g_n \end{pmatrix}$$

那么：

$$U\hat{G}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = U\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

$$\hat{G}U\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = U\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix}U^{-1}\,U\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

$$\hat{G}\begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \vdots \\ \psi_n' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & g_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & g_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \vdots \\ \psi_n' \end{pmatrix}, \quad \text{其中：}\begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \vdots \\ \psi_n' \end{pmatrix} = U\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

$$\hat{G}\begin{pmatrix}\psi_1' \\ \psi_2' \\ \vdots \\ \psi_n'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}g_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & g_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & g_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1' \\ \psi_2' \\ \vdots \\ \psi_n'\end{pmatrix},$$ （ψ_k' 是 ψ_k 的线性组合）

这样就得到了(再把角标f放回):

$$\hat{F}\psi_{fk}' = f\psi_{fk}'$$
$$\hat{G}\psi_{fk}' = g_k\psi_{fk}'$$

这也就找到了$\hat{F}$和$\hat{G}$的共同本征函数，体系处于这套本征函数集中任意一个态时，二者可以同时具有确定值。

这个证明过程有两点启示:

1）提供了一种消除简并的方法（找对易算符或CSCO算符集）

2）态可以用列矢量表示，算符用矩阵表示—海森堡矩阵力学

单选题 1分

设置

如果算符$\hat{F}$与$\hat{G}$不对易，它们是否一定没有共同的本征函数？

A 一定。

B 不一定。

提交

两个算符不对易，则它们不能有共同的完备的本征函数集，但不排除它们碰巧有个别共同本征函数。例：

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z, \quad \psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$ （动量$\vec{p} = 0$的三维平面波）

$$\hat{L}_x\psi(\vec{r}) = 0\cdot\psi(\vec{r}), \quad \hat{L}_y\psi(\vec{r}) = 0\cdot\psi(\vec{r})$$

以下说法都成立：

1）两个算符有一组共同 的 完备本征函数 集 ，则两个算符对易

2）两个算符对易，则这两个算符有组成共同完备集的本征函数

3）如果一组算符有共同 的 完备 的 本征函数 集 ，则这组算符中任意两个算符之间都对易。这个定理的逆定理也成立

若 $$[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$$

则F和G不能同时有确定值。例如:

$$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{x} = x, \quad \rightarrow \quad [\hat{p}_x, \hat{x}] = -\mathrm{i}\hbar.$$

这是量子力学的基本对易括号。它在本质上是波粒二象性的反映。例如在粒子的单缝衍射实验中，Δx越小, Δp_x越大,

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx \hbar$$

二者不能同时有确定值。所以，运动轨道的概念对微观粒子是不适用的

单选题 1分

设置

怎么理解物理量x测量的不确定度Δx?

A Δx表示测量值和真值之间的差异。

B Δx表示测量值和平均值之间的差异。

提交

对这种不确定性的定量描写如下。定义偏差算符为：

$$\Delta\hat{F} = \hat{F} - \overline{F}, \qquad \overline{F}\text{是}\hat{F}\text{的平均值,}$$

单选题 1分

设置

如果算符$\hat{F}$是厄密的，$\Delta\hat{F}$是否也是厄密的？

A 是的。

B 不一定。

提交

单选题 1分

设置

假设$[\hat{F},\hat{G}]=0$，那么也一定有$[\Delta\hat{F},\Delta\hat{G}]=0$吗？

A 是的。

B 不一定。

提交

对这种不确定性的定量描写如下。定义偏差算符为：

$$\Delta\hat{F} = \hat{F} - \overline{F}, \qquad \overline{F}\text{是}\hat{F}\text{的平均值,}$$

性质1：$$[\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}] = [\hat{F} - \overline{F}, \hat{G} - \overline{G}] = [\hat{F}, \hat{G}].$$

性质2：$$\overline{\Delta\hat{F}} = \overline{(\hat{F} - \overline{F})} = \overline{F} - \overline{F} = 0,$$

性质3：$$\overline{(\Delta\hat{F})^2} = \overline{(\hat{F} - \overline{F})^2} = \overline{(\hat{F}^2 - 2\hat{F}\overline{F} + \overline{F}^2)}$$

$$= \overline{\hat{F}^2} - 2\overline{F}\cdot\overline{F} + \overline{F}^2 = \overline{\hat{F}^2} - \overline{F}^2.$$

问题：如果

$$[\hat{F},\hat{G}]=\mathrm{i}\,\hat{C}\neq 0$$

那么$\overline{(\Delta\hat{F})^2}$和$\overline{(\Delta\hat{G})^2}$ 有什么关系？考查以下积分不等式：

$$\boxed{I(\xi)=\int\left|(\xi\,\Delta\hat{F}-\mathrm{i}\,\Delta\hat{G})\psi\right|^2 d\tau\geq 0,}$$

其中ψ为体系的任一态，ξ为任意实函数。

单选题 1分

设置

假设$\hat{F}$和$\hat{G}$是厄密算符，$[\hat{F},\hat{G}]=i\hat{C}$，那么$\hat{C}$也是厄密算符吗？

A 是的。

B 不是。

C 不一定。

提交

$$I(\xi)=\int[\xi(\Delta\hat{F}\psi)^*+\mathrm{i}(\Delta\hat{G}\psi)^*]\cdot[\xi(\Delta\hat{F}\psi)-\mathrm{i}(\Delta\hat{G}\psi)]d\tau$$

$$=\xi^2\int(\Delta\hat{F}\psi)^*(\Delta\hat{F}\psi)d\tau-\mathrm{i}\xi\int[(\Delta\hat{F}\psi)^*(\Delta\hat{G}\psi)-(\Delta\hat{G}\psi)^*(\Delta\hat{F}\psi)]d\tau$$

$$+\int(\Delta\hat{G}\psi)^*(\Delta\hat{G}\psi)d\tau$$

利用算符F,G的$Hermite$性质

$$=\xi^2\int\psi^*(\Delta\hat{F})^2\psi d\tau-\mathrm{i}\xi\int\psi^*(\Delta\hat{F}\Delta\hat{G}-\Delta\hat{G}\Delta\hat{F})\psi d\tau+\int\psi^*(\Delta\hat{G})^2\psi d\tau$$

$$=\overline{(\Delta\hat{F})^2}\cdot\xi^2-\mathrm{i}\,\overline{(\Delta\hat{F}\Delta\hat{G}-\Delta\hat{G}\Delta\hat{F})}\cdot\xi+\overline{(\Delta\hat{G})^2},$$

$$=\overline{(\Delta\hat{F})^2}\cdot\xi^2-\mathrm{i}\,\overline{[\hat{F},\hat{G}]}\cdot\xi+\overline{(\Delta\hat{G})^2},$$

$$[\Delta\hat{F},\Delta\hat{G}]=[\hat{F}-\overline{F},\hat{G}-\overline{G}]=[\hat{F},\hat{G}].$$

$$=\overline{\left(\Delta\hat{F}\right)^2}\cdot\zeta^2+\bar{\hat{C}}\cdot\zeta+\overline{\left(\Delta\hat{G}\right)^2}$$

根据二次三项式的判别式，在$I(\xi)\geq 0$时，I和实轴没有或只有一个交点

$$\boxed{\overline{(\Delta\hat{F})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{G})^2} \geq \frac{1}{4}\overline{\hat{C}}^2 .}$$

Heisenberg不确定关系。在数学上称为Schwarz不等式

若$\left[\hat{F},\hat{G}\right]\neq 0$,则一般说来$\Delta F$和$\Delta G$不能同时为零,

即$\hat{F}$和$\hat{G}$不能同时测定（但是注意$\overline{\left[\hat{F},\hat{G}\right]}=0$的特殊态例外），

或者说它们不能有共同的本征态。

反之，若$\left[\hat{F},\hat{G}\right]=0$，则可以找到这样的态,

使$\Delta F=0$和$\Delta G=0$同时满足,

即可以找到它们的共同本征态。

对于$[\hat{x},\hat{p}_x]=\mathrm{i}\hbar$，有 $\hat{C}=\hbar$,

$$\overline{(\Delta\hat{x})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{p}_x)^2}\geq\frac{\hbar^2}{4}.$$

设 $\delta x\equiv\sqrt{\overline{(\Delta\hat{x})^2}}$， $\delta p_x\equiv\sqrt{\overline{(\Delta\hat{p}_x)^2}}$,

$$\delta x\cdot\delta p_x\geq\frac{\hbar}{2}.$$

上面的不等式中取“=”的量子态，被称为“最小不确定态”

应用不确定关系的一个例子：谐振子的零点能。现在

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2\hat{x}^2,$$

$$\bar{E}=\frac{1}{2\mu}\overline{\hat{p}^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{\hat{x}^2}.$$

可以证明，对于谐振子任一本征态，$\bar{p}=\bar{x}=0$,

$$\overline{\hat{p}^2}=\overline{(\Delta\hat{p})^2},\ \overline{\hat{x}^2}=\overline{(\Delta\hat{x})^2}$$

$$\bar{E}=\frac{1}{2\mu}\overline{(\Delta\hat{p})^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{(\Delta\hat{x})^2}.$$

在极限情况下，不确定关系取“=”号(只考虑最小不确定态)：

$$\overline{(\Delta\hat{x})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{p})^2}=\frac{\hbar^2}{4}.$$

求 $\bar{E}$ 在这个约束条件下的极小值:

$$\bar{E}\geq 2\sqrt{\frac{1}{2\mu}\overline{(\Delta\hat{p})^2}\cdot\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{(\Delta\hat{x})^2}}=\omega\sqrt{\overline{(\Delta\hat{p})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{x})^2}}=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

谐振子的基态确实是最小不确定态。但不是所有量子系统的基态都是最小不确定态

验证一维谐振子的基态满足最小不确定原理：

$$c(p)=\sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}}\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta^2p^2}. \qquad \left(\beta=\frac{1}{\alpha\hbar}=\frac{1}{\sqrt{\mu\hbar\omega}}\right)$$

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}. \qquad \left(\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\right)$$

高斯函数形式为 $g(x)=C\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$，其中 σ 为高斯函数分布宽度。对比可得，动量和空间的分布宽度分别为

$$\delta p=\beta^{-1}, \qquad \delta x=\alpha^{-1}$$

所以

$$\delta x\cdot\delta p=(\alpha\beta)^{-1}=\hbar\neq\frac{\hbar}{2}$$

那里出错？

分布应该看模方：

$$|c(p)|^2 \propto e^{-\beta^2 p^2}. \qquad \left(\beta = \frac{1}{\alpha\hbar} = \frac{1}{\sqrt{\mu\hbar\omega}}\right) \qquad \propto e^{-\frac{p^2}{2\left(\frac{\beta^{-1}}{\sqrt{2}}\right)^2}}$$

$$|\psi(x)|^2 \propto e^{-\alpha^2 x^2}. \qquad \left(\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\right)$$

于是

$$\delta p = \beta^{-1}/\sqrt{2}, \qquad \delta x = \alpha^{-1}/\sqrt{2}$$

$$\delta x \cdot \delta p = (\alpha\beta)^{-1}/2 = \frac{\hbar}{2}$$

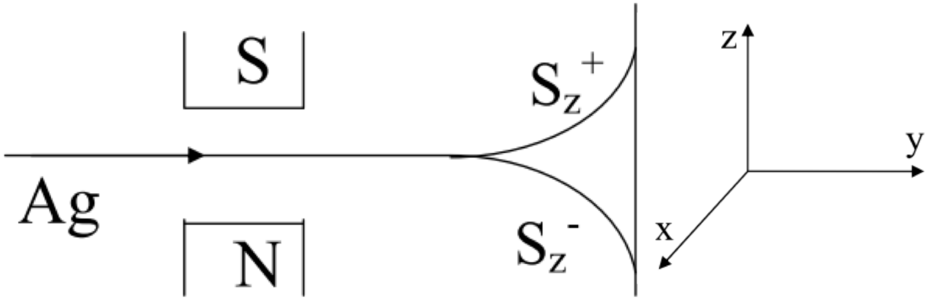
所以一维简谐振子的基态满足最小不确定原理。

可以证明，满足最小不确定原理的波函数为高斯函数形式（不一定是基态或本征态，也可以是激发态或叠加态）。

联级Stern-Gerlach实验

由于电子的自旋，银原子角动量在任意方向上有两个特征值：

$$\hat{L}_z\psi = \pm\frac{1}{2}\hbar\psi$$



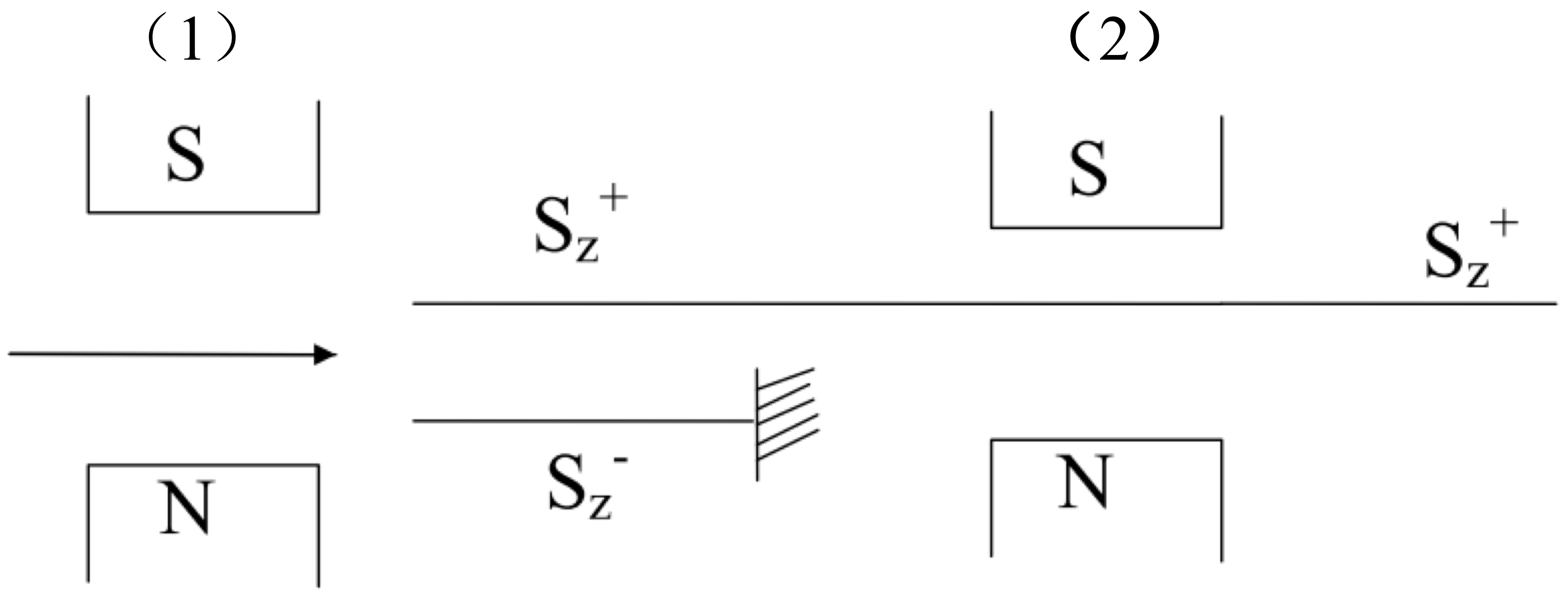
银原子通过不均匀磁场时，由于角动量不为0，银原子束分裂为两条。银原子感受的力正比于其角动量L_z

银原子束分裂条数为角动量分量L_z算符的本征值个数

由于L_x, L_y, L_z互相之间不对易，银原子波函数不可能是它们的共同本征函数

银原子处于L_z本征态时，就一定不处于L_y, L_x的本征态

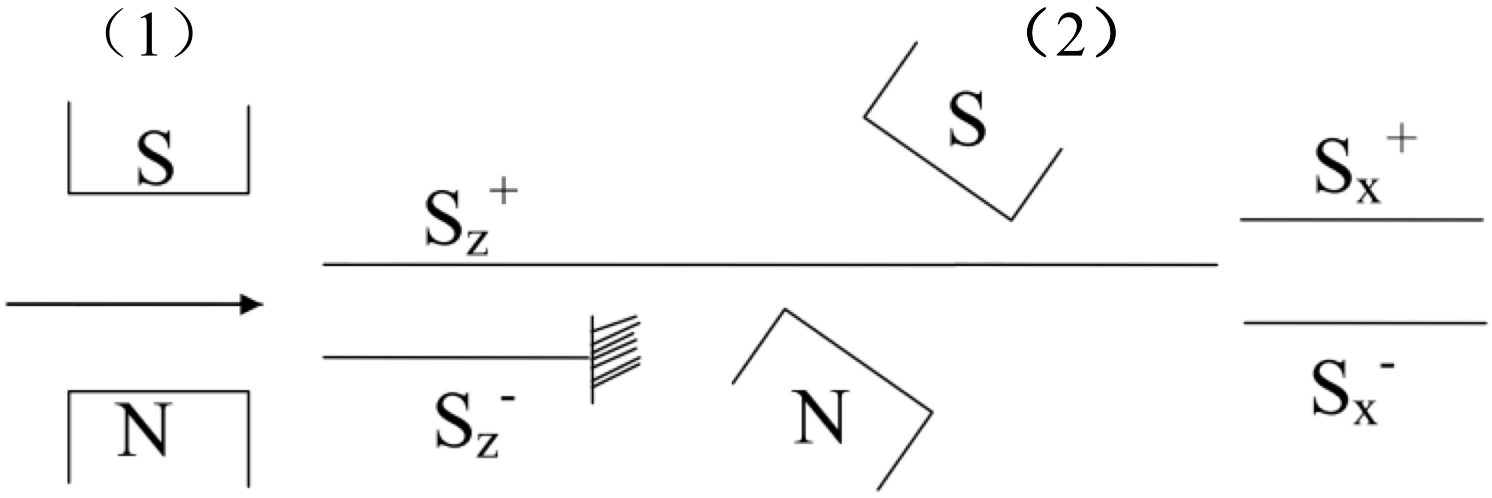
联级Stern-Gerlach实验



先让入射原子束经过两个Z方向的磁场（见图），在第二个磁场之前挡住一束原子，这样 L_z有确定值 ，在磁场中原子感受的力是确定的，故在第二个磁场之后不会分为两束

银原子在进入第一个磁场前处于L_z两个本征函数的叠加态

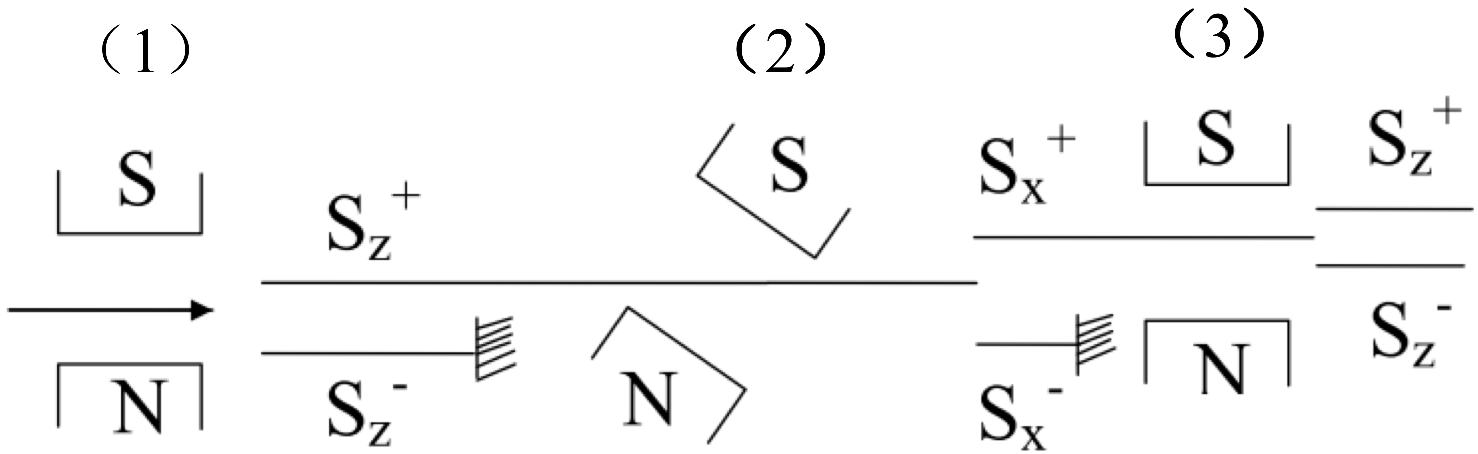
联级Stern-Gerlach实验



现在让入射原子束先后经过Z和X方向的两个磁场（见图）。在第二个磁场中原子感受的力与X方向角动量取值有关，在经过第二个磁场之后观察到原子束分裂，说明在第二个磁场之前L_x有两个值（虽然L_z有单个确定值）

量子性质：当L_z有确定值时，L_x没有确定值。L_z和L_x不能同时有确定值！

联级Stern-Gerlach实验



再让入射原子束先后经过Z，X和Z方向的三个磁场，（见图），最后观察到L_z有两个分量，说明在第三个磁场之前L_z有两个值（虽然L_x有确定值）

量子性质：当L_x有确定值时，L_z也没有确定值。L_x和L_z不能同时有确定值！