Chapter. 4

态和力学量的表象

The representation for the states and dynamical variable

引 言

按量子力学基本原理，体系的状态用波函数描述，力学量用线性厄米算符表示。前面所使用的波函数及力学量算符是以坐标这个力学量算符的本征值为变量写出它们的具体形式的。那么，是否还可以选择其它力学量算符的本征值作为变量而写出波函数及力学量算符的具体形式呢？回答是肯定的。这就是说量子力学中波函数和力学量算符的描述方式不是唯一的，这正如几何学中选用坐标系不是唯一的一样。坐标系有直角坐标系、球坐标系、柱坐标系等，但它们对空间的描写是完全是等价的。

量子力学中态和力学量的具体表示方式称为表象

常用的表象

- 坐标表象
- 动量表象
- 能量表象
- 角动量表象

研究内容

- **4.1 态的表象**
  The representation of the state
- **4.2 算符的矩阵表示**
  Matrix representation of operators
- **4.3 量子力学公式的矩阵表示**
  Matrix representation of formula for quantum mechanism
- **4.4 幺正变换**
  Unitary transformation
- **4.5 狄喇克符号**
  Dirac symbols
- **4.6 线形谐振子与占有数表象**
  Linear oscillator and occupation number representation

重点掌握的内容

- 一个定义：表象的定义
- 二个表示：
  - 态在任意表象中的表示；
  - 算符在任意表象中的表示。
- 三个公式：平均值公式、本征值方程、薛定谔方程——在任意表象中的表示
- 幺正变换的基本性质
- 狄喇克符号及应用
- 产生算符、湮灭算符、粒子数算符及它们的物理意义

主要数学工具 ← **矩　阵**

矩阵力学

§ 4.1 态的表象

1. 态的动量表象

动量算符本征函数：

$$\psi_{\vec{P}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}\cdot\vec{r}}$$

组成完备系

任一状态 ψ 可按其展开：

展开系数

$$\psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int C(\vec{P},t)\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}\cdot\vec{r}}\, d^3\vec{P}$$

$$C(\vec{P},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r},t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{P}\cdot\vec{r}}\, d^3\vec{r}$$

构成付里叶变换与逆变换

从数学上讲，知道其一，必可唯一地求出另一。

从物理角度看，$\psi(\vec{r},t)$ 描述粒子状态，那么 $C(\vec{P},t)$ 也可用于描述粒子同一状态。

$\psi(\vec{r},t)$ 称为坐标表象中的状态波函数， $C(\vec{P},t)$ 称为动量表象中的状态波函数。

$C(\vec{P},t)$ 物理意义？

$|\psi(\vec{r},t)|^2$ —— 是在 $\psi(\vec{r},t)$ 所描写的状态中，测量粒子的位置所得结果为 $\vec{r}$ 的几率。

$|C(\vec{P},t)|^2$ —— 是在 $\psi(\vec{r},t)$ 所描写的状态中，测量粒子的动量所得结果为 $\vec{P}$ 的几率。

两者从不同的侧面描写粒子的状态，给出了粒子的不同信息（力学量 $\vec{r}$ 和 $\vec{P}$ 的信息）。

命题 若 $\psi(\vec{r},t)$ 是归一化波函数，则 $C(\vec{P},t)$ 也归一。

证

$$1=\int \psi^*(x,t)\psi(x,t)dx$$

$$=\int [\int C(p',t)\psi_{p'}(x)dp']^*[\int C(p,t)\psi_p(x)dp]dx$$

$$=\int\int C(p',t)^* C(p,t)dp'dp \boxed{\int \psi_{p'}^*(x)\psi_p(x)dx}$$

$$=\int\int C(p',t)^* C(p,t)dp'dp\,\delta(p'-p)$$

$$=\int C(p,t)^* C(p,t)dp \qquad \text{（归一化条件）}$$

2. Q 表象

力学量算符 $\hat{Q}$ 的正交归一的本征函数完备系：$\{u_n(\vec{r})\}$

本征方程： $$\hat{Q}u_n(x) = q_n u_n(x)$$

任一状态 ψ 可按其展开： $$\psi(\vec{r},t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) u_n(\vec{r})$$

展开系数： $$a_n(t) = \int u_n^*(\vec{r})\psi(\vec{r},t)\, d^3\vec{r}$$

由上述两式给出了 $\psi(\vec{r},t)$ 与 $\{a_n(t)\}$ 函数集之间的相互变换关系，将 $\{a_n(t)\}$ 写成矩阵

$$\psi(q,t)=\begin{pmatrix} a_1(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \longleftrightarrow \psi(\vec{r},t)$$

对于 $\psi(\vec{r},t)$ 与 $\psi(q,t)$，知道其一就可求得另一，因而 $\psi(q,t)$ 与 $\psi(\vec{r},t)$ 描述粒子同一状态。$\psi(q,t)$ 是粒子状态波函数在 Q 表象中的表示，称为 Q 表象波函数

$|a_n(t)|^2$ 给出在 $\psi(\vec{r},t)$ 态中测量粒子的力学量 Q 取 q_n 值的几率

归一化条件 $$\int\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3\vec{r}=1 \quad \Longleftrightarrow \quad \sum_{n=1}^{\infty}\left|a_n(t)\right|^2=1$$

$$\Rightarrow \quad \psi^+(q,t)\psi(q,t)=1$$

（归一化条件的矩阵表述形式）

注 以上讨论可推广到 Q 有连续谱的情况。

Ex.1. 粒子处于一维无限深势阱的基态：

$$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x \qquad (0<x<a)$$

求该态在动量和能量表象中的表示形式。

Solve 选择动量表象：

动量本征函数 $$\psi_p(x)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

$$\psi_1(x)=\int_0^a C(p)\psi_p(x)dp$$

展开系数：$$C(p)=\int\psi_1(x)\,\psi_p^*(x)dx$$

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

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

能量表象：

本征函数 $$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

$$\psi_1(x)=\sum_n a_n(E)\psi_n(x)$$

$$a_n(E)=\int\psi_1(x)\psi_n^*(x)dx=\delta_{1,n}$$

可见能量算符的本征函数在能量自身表象中取δ符号形式。

基态的表示

$$A_1=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}$$

n 能级态的表示

$$A_n=\begin{pmatrix}0\\\vdots\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}$$

第n行

一般结论： 力学量算符属于分立本征值的本征函数在该力学量自身表象中为一δ符号，其矩阵为单位元矩阵。

Ex.2: 求自由粒子动量算符 $\hat{\vec{P}}$ 具有确定本征值 $\vec{P}'$ 的本征函数在动量自身表象中的形式

Solve:

自由粒子动量算符的本征函数

$$\psi_{\vec{P}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

动量算符 $\hat{\vec{P}}$ 具有确定本征值 $\vec{P}'$ 的本征函数：

$$\psi_{\vec{P}'}(\vec{r}) = \int C(\vec{P})\psi_{\vec{P}}(\vec{r})d^3\vec{P}$$

$$C(\vec{P}) = \int \psi_{\vec{P}'}(\vec{r})\psi^*_{\vec{P}}(\vec{r})d\tau \ = \delta(\vec{P}'-\vec{P})$$

可见，动量算符具有确定本征动量值 $\vec{P}'$ 的本征函数在动量自身表象中是以动量 $\vec{P}$ 为变量的 δ 函数。

动量算符的本征方程

$$\hat{\vec{P}}\delta(\vec{P}-\vec{P}') = \vec{P}'\delta(\vec{P}-\vec{P}')$$

同样 在坐标表象中，坐标算符 $\hat{x}$ 的本征函数

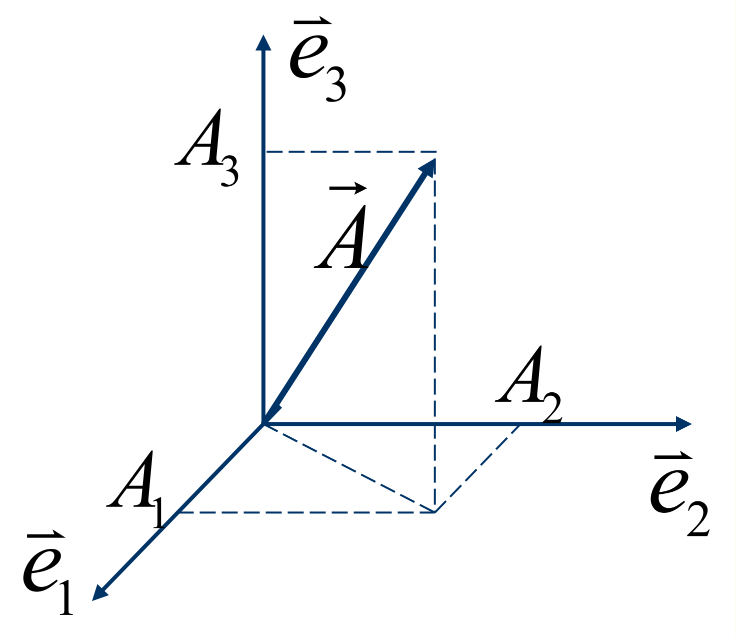
$$\psi_{x'}(x) = \delta(x'-x)$$

本征值方程：
$$\hat{x}\delta(x-x') = x'\delta(x-x')$$

一般结论：力学量算符属于连续本征值的本征函数在该力学量自身表象中为一 δ 函数。

Hilbert空间与态矢量

以上讨论与三维矢量空间矢量的表示很类似。



在三维矢量空间选一组正交归一完备基 $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3)$$ 正交归一条件

$$\vec{A} = A_1\vec{e}_1 + A_2\vec{e}_2 + A_3\vec{e}_3 = \sum_{i=1}^{3} A_i\vec{e}_i \iff A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix}$$

Hilbert空间：满足态迭加原理的状态全体构成的复线性空间

态矢量：Hilbert空间中的矢量，即体系的状态波函数视为一个矢量称为**态矢量**（简称**态矢**）

注意：由于波函数必须归一化，因而态矢的大小一定，不同的态矢只是方向不同。

力学量算符 $\hat{Q}$ 的正交归一完备函数系 $\{ u_n(x) \}$ 构成Hilbert空间中的一组正交归一完备基底。

$$\int u_m^*(x) u_n(x) dx = \delta_{mn}$$

任一态矢

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) u_n(x)$$

$$a_n(t)=\int u_n^*(x)\psi(x,t)dx$$

$$\psi(Q,t)=\begin{pmatrix} a_1(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \Longleftrightarrow \psi(x,t)$$

表象与几何空间坐标系的比较

量子力学表象	几何空间坐标系
某一表象本征态矢量	某一坐标系的一组基矢
$u_1(x),\ u_2(x),\cdots u_n(x),\cdots$	$\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \vec{e}_3$
$\int u_m^*(x)u_n(x)dx=\delta_{mn}$ 正交归一	$\vec{e}_i\cdot\vec{e}_j=\delta_{ij}$ 正交归一
$\psi(x,t)=\sum_n^{\infty}a_n(t)u_n(x)$	$\vec{A}=A_1\vec{e}_1+A_2\vec{e}_2+A_3\vec{e}_3=\sum_{i=1}^{3}A_i\vec{e}_i$
$a_n(t)=\int u_n^*(x)\psi(x,t)dx$	$A_i=\vec{A}\vec{e}_i$
量子态矢量： $\psi=\begin{pmatrix}a_1(t)\\ \vdots\\ a_n(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$	矢量： $A=\begin{pmatrix}A_1\\ A_2\\ A_3\end{pmatrix}$

结 论

1．选定一个特定 Q 表象，就相当于在Hilbert空间中选定一个特定的坐标系，力学量算符 $\hat{Q}$ 的正交归一完备函数系 $\{u_n(x)\}$ 构成Hilbert空间中的一组正交归一完备基底。

2．任意态矢量 $\psi(x)$ 在 Q 表象中的表示是一列矩阵，矩阵元 $a_n(t)$ 是态矢量 $\psi(x)$ 在 $\hat{Q}$ 算符的本征矢 $u_n(x)$ 上的投影。

3．选取不同力学量表象，就是选取不同完备正交基底，态矢的表述具有不同矩阵形式，这就是态的不同表象波函数。

作业

4．1

4．2

4.2 算符的矩阵表示

力学量算符在坐标表象与动量表象中的表示

坐 标 表 象	动 量 表 象
$\hat{x} = x$	$\hat{x} = i\hbar \dfrac{\partial}{\partial p_x}$
$\hat{P}_x = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}$	$\hat{P}_x = p_x$
$\hat{T} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$	$\hat{T} = \dfrac{p_x^{\ 2}}{2m}$

问题

力学量算符 $\hat{F}$ 在 Q 表象中如何表示？

在坐标表象中，力学量 F 用算符 $\hat{F}(x, -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x})$ 表示，设 $\hat{F}$ 作用于 $\psi(x,t)$ 得到 $\phi(x,t)$。

即 $$\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,t)=\phi(x,t) \qquad (1)$$

选定力学量 Q 表象，$\hat{Q}$ 算符的正交归一的本征函数完备系记为 $\{u_n(x)\}$

将 $\psi(x,t)$ 和 $\phi(x,t)$ 分别按函数系 $\{u_n(x)\}$ 展开

$$\psi(x,t)=\sum_m a_m(t)u_m(x) \qquad \phi(x,t)=\sum_m b_m(t)u_m(x)$$

代入坐标表象表达式（1）

$$\sum_m b_m(t)u_m(t)=\sum_m a_m(t)\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})u_m(t)$$

以 $u_n^*(x)$ 乘该式，对 x 全部范围积分

$$\sum_m b_m(t)\boxed{\int u_n^*(x)u_m(x)(dx)} = \sum_m a_m(t)\boxed{\int u_n^*(x)\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})u_m(x)dx}$$

δ_{mn}

记为 F_{mn}

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

Q表象的表达方式

$$\begin{pmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \\ \vdots \\ b_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1m} & \cdots \\ F_{21} & & & & \vdots \\ \vdots & & & & \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nm} & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_m(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

记为

$$\boxed{\phi = F\psi}$$

矩阵 ϕ 和 ψ 分别是波函数 $\phi(x,t)$ 和 $\psi(x,t)$ 在 Q 表象中的形式。

可见，算符 $\hat{F}$ 在Q表象中是一个矩阵 $F=(F_{mn})$，其矩阵元为

$$F_{nm}=\int u_n^*(x)\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})u_m(x)dx$$

讨 论

1. $F=(F_{mn})$ 是厄米矩阵

Prove:

$$F_{nm}=\int u_n^*(x)\hat{F}u_m(x)dx$$

$$F_{nm}^*=\int u_n(x)\left[\hat{F}u_m(x)\right]^*dx=\int u_m^*(x)\hat{F}u_n(x)dx=F_{mn}$$

$$F=F^+$$

即 F 是厄米矩阵。

显而易见，对角矩阵元为实数 $F_{nn}^*=F_{nn}$

2. 力学量算符在自身表象中的矩阵是一个对角矩阵。

$$\because \quad Q_{nm} = \int u_n^*(x)\hat{Q}u_m(x)dx = \int u_n^*(x)q_m u_m(x)dx = q_m\delta_{nm}$$

$$Q = \begin{pmatrix} q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

3. 当 $\hat{Q}$ 具有连续本征值谱 q 时，力学量算符的表示矩阵元

$$F_{qg} = \int u_q^*(x)\hat{F}(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})u_g(x)dx \Longrightarrow F = (F_{qg})$$

$\hat{F}$ 在Q 表象中乃是一个矩阵，不过其行列不再是可数的，故用连续变化的下脚标表示。

求力学量算符矩阵的关键是求其矩阵元

Ex: 设一维粒子Hamilton量 $H=\dfrac{p^2}{2m}+V(x)$

1、求x表象中x,p和H的“矩阵元”，

2、求p表象中x,p和H的“矩阵元”。

Solve: 1、 在 x 表象中，$\hat{x}$ 的本征函数

$$u_{x'}(x)=\delta(x-x')$$

$$(x)_{x'x''}=\int\delta(x-x')x\delta(x-x'')\,dx=x'\delta(x'-x'')$$

$$(p)_{x'x''}=\int\delta(x-x')\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\delta(x-x'')dx=-i\hbar\frac{d}{dx'}\delta(x'-x'')$$

$$(H)_{x'x''}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx'^2}\delta(x'-x'')+V(x')\delta(x'-x'')$$

2、在 p 象中，$\hat{p}$ 算符的本征函数

$$\psi_{p'}(p)=\delta(p-p')$$

$$(x)_{p'p''}=\int\psi_{p'}^{*}(p)\hat{x}\psi_{p''}(p)dp$$

$$=\int\delta(p-p')i\hbar\frac{d}{dp}\delta(p-p'')dp$$

$$=i\hbar\frac{d}{dp'}\delta(p'-p'')$$

$$(p)_{p'p''}=\int\delta(p-p')\hat{p}\delta(p-p'')dp=p'\delta(p'-p'')$$

$$(H)_{p'p''}=\frac{p'^2}{2m}\delta(p'-p'')+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\right)\delta(p'-p'')$$

1. 归一化条件

$$\psi(x,t)=\sum_n a_n(t)u_n(x)$$

$$\int \psi^*(x,t)\psi(x,t)dx=1 \rightarrow \sum_{n=1}^{\infty}|a_n(t)|^2=1$$

$$\left(a_1(t)\cdots a_n(t)\cdots\right)^* \begin{pmatrix} a_1(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}=1 \rightarrow \psi^+\psi=1$$

2、平均值公式

$$\overline{F}=\int\psi^*(x,t)\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,t)dx$$

$$=\int\sum_m a_m^*(t)u_m^*(x)\hat{F}\sum_n a_n(t)u_n(x)dx$$

$$=\sum_{nm}a_m^*(t)\left[\int u_m^*(x)\hat{F}u_n(x)dx\right]a_n(t)$$

$$=\sum_{nm}a_m^*(t)F_{mn}a_n(t)$$

$$\Rightarrow\quad \boxed{\overline{F}=\psi^+F\psi}$$

$$\bar{F}=\left(a_1^*(t),\cdots,a_m^*(t)\cdots\right)\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1n} & \cdots \\ F_{21} & F_{12} & \cdots & F_{1n} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots \\ F_{m1} & \cdots & \cdots & F_{mn} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

（续7）

其中 $F_{mn}=\int u_m^*(x)\hat{F}u_n(x)dx$ **为算符 $\hat{F}$ 的矩阵元**

在 $\hat{F}$ 表象中： $\hat{F}u_n(x)=\lambda_n u_n(x)$

$$F_{mn}=\int u_m^*(x)\hat{F}u_n(x)dx=\int u_m^*(x)\lambda_n u_n(x)dx=\lambda_n\delta_{mn}$$

$$\bar{F}=(a_1^*(t),\cdots,a_n^*(t)\cdots)\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \lambda_n & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1(t)\\ a_2(t)\\ \vdots\\ a_n(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$$

$$\bar{F}=\sum_n \lambda_n |a_n(t)|^2$$

3、本征值方程

$$\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,t)=\lambda\psi(x,t)$$

在Q表象中，其矩阵形式为：

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1m} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots & F_{2m} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots \\ F_{n1} & F_{n2} & F_{nn} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_m(t) \\ \vdots \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1)$$

移项得：

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

此式即为线性齐次方程组：

$$\sum_n (F_{mn}-\lambda\delta_{mn})a_n(t)=0 \qquad (m=1, 2, 3\ldots\ldots)$$

非零解的条件是系数行列式等于0，即久期方程：

$$\begin{vmatrix} F_{11}-\lambda & F_{12} & \cdots & F_{1n} & \cdots \\ F_{21} & F_{22}-\lambda & \cdots & F_{2n} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn}-\lambda & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{vmatrix} = 0 \xrightarrow{\text{求出本征值}} \lambda_i$$

$$(i = 1, 2, \cdots)$$

将每个 λ_i 值分别代入矩阵方程（1）或（2），求出 $a_{i1}(t), a_{i2}(t), \cdots$，即得本征函数

$$u_i = \begin{pmatrix} a_{i1} \\ a_{i2} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (i = 1, 2, \cdots)$$

这样变解微分方程为解代数方程。

Ex. 已知在 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同表象中，算符 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的矩阵分别为

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

求它们的本征值和归一化的本征函数，最后将矩阵 L_x 和 L_y 对角化。

Solve: 设 $\hat{L}_x$ 的本征值为 $\lambda = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\alpha$，本征波函数为

$$\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

本征方程为 $\hat{L}_x\psi = \lambda\psi$

$$\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\alpha\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}-\alpha&1&0\\1&-\alpha&1\\0&1&-\alpha\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=0 \qquad (1)$$

要使本征波函数不为零，亦即要求a, b, c不全为零，其条件是（1）中的系数矩阵的行列式为零。

$$\begin{vmatrix}-\alpha&1&0\\1&-\alpha&1\\0&1&-\alpha\end{vmatrix}=0 \Rightarrow -\alpha^3+2\alpha=0$$

久期方程

$$\Rightarrow \begin{cases}\alpha_1=\sqrt{2}\\ \alpha_2=0\\ \alpha_3=-\sqrt{2}\end{cases}$$

$$\lambda=\alpha\hbar/\sqrt{2} \Rightarrow$$ 本征值

$$\lambda_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\alpha_1 = \hbar,\quad \lambda_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\alpha_2 = 0,\quad \lambda_3 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\alpha_3 = -\hbar$$

当 $\alpha_1 = \sqrt{2}$ 时，由（2）有

$$\begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & -\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} a = \dfrac{b}{\sqrt{2}} \\ c = \dfrac{b}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \psi_1 = b\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

由归一化条件：

$$\psi_1^+\psi_1=1 \longrightarrow b^*\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 1 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\cdot b\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 1\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}=1$$

$$\longrightarrow b^*b=\frac{1}{2} \longrightarrow b=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

归一化常数

归一化的波函数

$$\psi_1=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}$$

当 $\alpha_2=0$ 时，由（2）有

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=0 \Rightarrow \begin{cases} b=0 \\ c=-a \end{cases}$$

归一化条件

$$\psi=\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \Rightarrow \psi_2=a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \psi_2^+\psi_2=2a^*a=1$$

$$\Rightarrow a=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

归一化的波函数：

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

当 $\alpha_3=-\sqrt{2}$，由（2）有：

$$\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & \sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=0 \longrightarrow \begin{cases} a=-\dfrac{b}{\sqrt{2}} \\ c=-\dfrac{b}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

$$\psi=\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \longrightarrow \psi_3=\frac{b}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$$

归一化条件

$$\psi_3^{+}\psi_3=1$$

$$\longrightarrow b=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

归一化的波函数：

$$\psi_3=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$$

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

构成一个正交归一本征函数完备系

正交归一化条件： $\psi_i^+\psi_j = \delta_{ij} \quad (i, j = 1,2,3)$

L_x 的对角矩阵

$$L_x = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \lambda_2 & \\ 0 & & \lambda_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

类似地，可求出 $\hat{L}_y$ 的本征值、归一化的本征函数系和对角阵。

本征值 $\lambda_1 = \hbar,\ \lambda_2 = 0,\ \lambda_3 = -\hbar$

本征波函数：

$$\varphi_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ i\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \varphi_3 = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

正交归一化条件：$\varphi_i^+ \varphi_j = \delta_{ij} \qquad (i, j = 1, 2, 3)$

L_y 的对角矩阵：

$$L_y = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

简写为：
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$$

其中
$$H_{nm} = \int u_n^*(x)\hat{H}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})u_m(x)dx$$

4.4 幺正变换

讨论波函数和力学量从一个表象变换到另一个表象的一般情况

1、幺正变换

设算符 $\hat{A}$ 的正交归一本征函数系为 $\{\psi_n(x)\}$

算符 $\hat{B}$ 的正交归一本征函数系为 $\{\varphi_\alpha(x)\}$

$$F_{mn} = \int \psi_m^*(x)\hat{F}\psi_n(x)dx \qquad F_{\alpha\beta} = \int \varphi_\alpha^*(x)\hat{F}\varphi_\beta(x)dx$$

为了找到 F_{mn} 和 $F_{\alpha\beta}$ 的联系，将 $\varphi_\alpha(x)$ 按 $\psi_m(x)$ 展开：

$$\varphi_\beta(x) = \sum_n S_{n\beta}\psi_n(x) \qquad (1)$$

$$\varphi_\alpha^*(x) = \sum_m S_{m\alpha}^*\psi_m^*(x) \qquad (2)$$

其展开系数为：
$$S_{n\beta}=\int\psi_n^*(x)\,\varphi_\beta(x)dx \qquad (3)$$

$$S_{m\alpha}^*=\int\psi_m(x)\,\varphi_\alpha^*(x)dx \qquad (4)$$

由 $S_{n\beta}$ 为矩阵元所构成的矩阵称为变换矩阵。通过（1）和（2）就把 A 表象的基矢 $\psi_n(x)$ 变换为 B 表象的基矢 $\varphi_\beta(x)$。

$$(A表象\Rightarrow B表象)$$

由 $\varphi(x)$ 和 $\psi(x)$ 的正交归一性有：

$$\delta_{\alpha\beta}=\int\varphi_\alpha^*(x)\varphi_\beta(x)dx$$
$$=\sum_{nm}\int S_{m\alpha}^*\psi_m^*(x)S_{n\beta}\psi_n(x)dx$$

$$= \sum_{nm} S^*_{m\alpha} S_{n\beta} \int \psi^*_m(x) \psi_n(x) dx$$

$$= \sum_{mn} S_{m\alpha}{}^* S_{n\beta} \delta_{mn} = \sum_m (S^+)_{\alpha m} S_{m\beta}$$

$$= (S^+ S)_{\alpha\beta} \quad \rightarrow \quad S^+ S = I$$

同理 $$\sum_\alpha S_{n\alpha} (S^+)_{\alpha m} = \sum_\alpha S_{n\alpha} S_{m\alpha}{}^*$$

$$= \sum_\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, \varphi_\alpha(x)\, dx \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x')\varphi_\alpha{}^*(x')\, dx'$$

将 $\psi_{\mathrm{m}}(\mathrm{x})$ **按** $\varphi_{\alpha}(\mathrm{x})$ **展开：** $\psi_m(x) = \sum_{\alpha} C_{\alpha m}\, \varphi_{\alpha}(x)$

$$C_{\alpha m} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\alpha}^{*}(x)\, \psi_m(x)\, dx$$

$$\sum_{\alpha} S_{n\alpha}(S^{+})_{\alpha m} = \sum_{\alpha} C_{\alpha m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{*}(x)\, \varphi_{\alpha}(x)\, d\,x$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{*}(x) \sum_{\alpha} C_{\alpha m} \varphi_{\alpha}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{*}(x)\, \psi_m(x) dx$$

$$= \delta_{mn}$$

$$\sum S_{n\alpha}(S^{+})_{\alpha m} = \delta_{nm} \longrightarrow \boxed{SS^{+} = I}$$

$$S^{+}S = SS^{+} = I \longleftrightarrow \boxed{S^{+} = S^{-1}}$$

即 S 是幺正矩阵，由幺正矩阵表示的变换称为幺正变换

结论：一个表象到另一个表象的变换是幺正变换。

2. 力学量的表象变换

力学量 $\hat{F}$ 在表象A中的表示矩阵：

$$F=\left(F_{\alpha\beta}\right)$$

$$F_{\alpha\beta}=\int\psi_{\alpha}{}^{*}(x)\hat{F}\psi_{\beta}(x)d\,x$$

在表象B中的表示矩阵：

$$F'=\left(F'_{m\,n}\right)$$

$$F'_{m\,n}=\int\varphi_{m}{}^{*}(x)\hat{F}\varphi_{n}(x)d\,x$$

$$F'_{mn} = \int \varphi_m^*(x)\hat{F}\varphi_n(x)d\,x$$

$$= \sum_{\alpha\beta} S_{\alpha m}^* S_{\beta n} \int \psi_\alpha^*(x)\hat{F}\psi_\beta(x)d\,x$$

$$= \sum_{\alpha\beta} S_{\alpha m}^* S_{\beta n} F_{\alpha\beta} = (S^+ F S)_{mn}$$

$$F' = S^+ F S$$

此为力学量$\hat{F}$从表象A变换到表象B的变换公式

3. 态的表象变换

任意态矢量 $u(x,t)$

在A表象中：$\{\psi_n\}$

在B表象中：$\{\varphi_\alpha\}$

$$a=\begin{pmatrix} a_1(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

?

如何变换

$$b=\begin{pmatrix} b_1(t) \\ \vdots \\ b_\alpha(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$u(x,t)=\sum_n a_n(t)\psi_n(x) \qquad u(x,t)=\sum_\alpha b_\alpha(t)\varphi_\alpha(x)$$

$$\sum_n a_n(t)\,\psi_n(x)=\sum_\alpha b_\alpha(t)\;\varphi_\alpha(x)$$

两边左乘 $\psi_m^*(x)$，并对 x 积分

$$\sum_n a_n(t)\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx=\sum_\alpha b_\alpha(t)\int\psi_m^*(x)\varphi_\alpha(x)dx$$

$$\int\psi_m^*(x)\,\psi_n(x)d\,x=\delta_{mn}$$

$$S_{m\alpha}=\int\psi_m^*(x)\varphi_\alpha(x)d\,x$$

$$a_m(t)=\sum_\alpha S_{m\alpha}b_\alpha(t)$$

写成矩阵形式：

$$\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \cdots\cdots \\ a_m(t) \\ \cdots\cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1\alpha} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & S_{2\alpha} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ S_{m1} & S_{m2} & \cdots & S_{m\alpha} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \\ \cdots \\ b_\alpha(t) \\ \cdots \end{pmatrix}$$

简写为 $a = Sb$ 从B表象变换到A表象

反之， $b = S^{-1}a = S^{+}a$ 从A表象变换到B表象

4. 幺正变换的两个重要性质

(1) 幺正变换不改变算符的本征值

算符 $\hat{F}$ 在 A 表象中的矩阵为 F，本征矢为 a

本征方程 $$Fa = \lambda a \qquad (1)$$

$\hat{F}$ 在 B 表象中的矩阵为 F'，本征矢为 b

本征方程 $$F'b = \lambda' b$$

$$b = S^{-1}a$$

$$F' = S^{-1}FS$$

$$\left(S^{-1}FS\right)S^{-1}a = \lambda' S^{-1}a$$

$$S^{-1}Fa = \lambda' S^{-1}a \longrightarrow Fa = \lambda' a \qquad (2)$$

比较(1)、(2)式，可知 $\lambda' = \lambda$ 本征值不变

(2) 幺正变换不改变矩阵的迹

矩阵A的对角元素之和称为矩阵A的迹，以SpA表示，则

$$\mathrm{SpA}=\sum_{n} A_{nn}$$

由此定义有：$\mathrm{Sp(AB\cdots C)=Sp(C\cdots BA)}$

$$F'=S^{+}FS$$

$$\mathrm{Sp}F'=\mathrm{Sp}\left(S^{+}FS\right)=\mathrm{Sp}\left(SS^{+}F\right)=\mathrm{Sp}F$$

故迹不变，F'的迹等于 F 的迹

4.5 狄喇克符号

一、狄喇克符号的引入

态矢量 — 微观体系的状态用一种矢量来表示，这种矢量称为态矢量 （一般是复矢量）

态矢量空间 — 由一切可能的态矢量所构成的一种抽象的线性空间，称为态矢量空间 （希尔伯特空间）。

对偶态矢量空间 — 由共轭态矢量所构成的线性空间称为对偶态矢量空间。

刃矢 $|\ \rangle$ — 表示态矢量空间中一个态矢量，又称为右矢(ket)

刁矢 $\langle\ |$ — 表示对偶态矢量空间中一个态矢量，又称为左矢 (bra)

在 ket、bra中加入符号，可用于表示某具体的态

$$|\psi\rangle \longrightarrow \psi \xrightarrow{\text{在Q表象中的表示}} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\langle\psi| \longrightarrow \psi^* \xrightarrow{\text{在Q表象中的表示}} (a_1^*, a_2^*, a_3^*, \ldots)$$

即 $|\psi\rangle$ 表示波函数 ψ 所描述的状态

$\langle\psi|$ 表示波函数 ψ^* 所描述的共轭状态

力学量的本征态，常用本征值或相应的量子数来表示：

▲ 坐标算符的本征态 $|x'\rangle$ （ x' 为 $\hat{x}$ 的本征值）

▲ 动量算符的本征态 $|P'\rangle$ （ P' 为 $\hat{P}$ 的本征值）

▲ 能量算符的本征态 $|E_n\rangle$ 或 $|n\rangle$ （ E_n 为 $\hat{H}$ 本征值）

若力学量算符 $\hat{F}$ 的本征矢记为 $|F_n\rangle$，本征值为 F_n

则其正交归一化条件为 $\langle F_m | F_n \rangle = \delta_{mn}$

对连续值谱，正交归一化条件为：$\langle F_\lambda | F_{\lambda'} \rangle = \delta(\lambda - \lambda')$

Ex: ★ 坐标算符的本征函数正交归一化条件：

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

★ 动量算符的本征函数正交归一化条件：

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

★ $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征函数正交归一化条件：

$$\langle lm | l'm' \rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

三、态矢量在具体表象中的表示

分立谱情况：

考虑 $\hat{Q}$ 表象，$\hat{Q}$ 的正交归一本征矢为 $\{\,|n\rangle\,\}$

任意态矢 $|\psi\rangle$ 按 $\{\,|n\rangle\,\}$ 展开 $|\psi\rangle=\sum_n a_n|n\rangle$

$a_n=\langle n|\psi\rangle$ 是 $|\psi\rangle$ 在基矢 $|n\rangle$ 上的分量

由 $$\psi=\begin{pmatrix} a_1\\ a_2\\ \vdots\\ a_n\\ \vdots \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle\\ \langle 2|\psi\rangle\\ \vdots\\ \langle n|\psi\rangle\\ \vdots \end{pmatrix}$$ 构成 $|\psi\rangle$ 在Q表象中的表示。

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle \qquad (1)$$

由于态矢 $|\psi\rangle$ 是任意的，由上式给出。

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

基矢的封闭性关系

连续谱情况：　基矢用 $|\lambda\rangle$ 表示

$$|\psi\rangle = \int a_\lambda |\lambda\rangle d\lambda$$

利用 $\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta(\lambda-\lambda')$ 可得 $a_\lambda = \langle\lambda|\psi\rangle$

$$\therefore \quad |\psi\rangle = \int |\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle d\lambda$$

$$\int |\lambda\rangle\langle\lambda| d\lambda = 1$$

封闭性关系：

Ex. 坐标本征函数 $|x\rangle$ 的封闭性 $\int |x\rangle\langle x| dx = 1$

Ex. 动量本征函数 $|p\rangle$ 的封闭性 $\int |p\rangle\langle p| dp = 1$

有分立谱又有连续谱的情况，封闭性关系：

$$\sum_n |n\rangle\langle n| + \int |\lambda\rangle\langle\lambda| d\lambda = 1$$

标积关系

分立谱情况： $|\psi\rangle = \sum_m |m\rangle\langle m|\psi\rangle$ $\langle\varphi| = \sum_n \langle\varphi|n\rangle\langle n|$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_n \sum_m \langle\varphi|n\rangle\langle n|m\rangle\langle m|\psi\rangle$$

$$= \sum_n \langle \varphi | n \rangle \left(\sum_m \delta_{nm} \langle m | \psi \rangle \right) = \sum_n \langle \varphi | n \rangle \langle n | \psi \rangle$$

连续谱情况 $\langle \varphi | \psi \rangle = \int \langle \varphi | \lambda \rangle \langle \lambda | \psi \rangle d\lambda$

例如坐标表象 $\langle \varphi | \psi \rangle = \int \langle \varphi | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx$

令

$$a_x = \langle x | \psi \rangle = \psi(x,t)$$

$$b_x = \langle x | \varphi \rangle = \varphi(x,t)$$

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^*(x) \psi(x) dx$$

四、公式的表示

1. 平均值 $\overline{F}=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle=\sum_m\langle\psi|m\rangle\langle m|\hat{F}\sum_n|n\rangle\langle n|\psi\rangle$

$$=\sum_{mn}\langle\psi|m\rangle\langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|\psi\rangle=\sum_{mn}a_m^*F_{mn}a_n$$

2. 本征值方程：

$$\hat{F}|\psi\rangle=F|\psi\rangle$$ （ F 为本征值 ）

在 Q 表象中，用 $\hat{Q}$ 的本征矢 $\langle m|$ 左乘

$$\langle m|\hat{F}|\psi\rangle=F\langle m|\psi\rangle$$

利用基矢 $|m\rangle$ 的封闭性： $\sum_n|n\rangle\langle n|=1$

上式可写成 $\langle m|\hat{F}\sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = F\langle m|\sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$

$$\sum_n \langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|\psi\rangle = F\sum_n \boxed{\langle m|n\rangle}\langle n|\psi\rangle$$

F_{mn}

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

δ_{nm}

$$\sum_n F_{mn}a_n = F\sum_n \delta_{mn}a_n \rightarrow \sum_n (F_{mn} - F\delta_{mn})a_n = 0$$

3. 薛定格方程 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$

在 Q 表象中，以 $\langle m|$ 左乘

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

利用封闭性 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ **可得**

$$H_{mn} = \langle m|\hat{H}|n\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle m|\psi\rangle = \sum_n \langle m|\hat{H}|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$a_m = \langle m|\psi\rangle$$

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

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

4.6 线形谐振子与占有数表象

哈密顿算符： $$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\,\omega^2x^2 \qquad (1)$$

本征能量： $$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (2)$$

1. 算符 $\hat{a}$ 、$\hat{a}^+$ 的引入

令
$$\begin{cases} x=\sqrt{\dfrac{\hbar}{2\mu\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^+) \\ \hat{p}=-i\sqrt{\dfrac{\mu\hbar\omega}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^+) \end{cases} \qquad (3)$$

记 $\alpha=\sqrt{\dfrac{\mu\,\omega}{\hbar}}$

则 $\begin{cases} x=\dfrac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\hat{a}+\hat{a}^{+}) \\ \hat{p}=-i\dfrac{\alpha\,\hbar}{\sqrt{2}}(\hat{a}-\hat{a}^{+}) \end{cases}$ $\Longleftrightarrow$ $\begin{cases} \hat{a}=\dfrac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x+\dfrac{i}{\alpha^{2}\hbar}\hat{p}\right) \\ \hat{a}^{+}=\dfrac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x-\dfrac{i}{\alpha^{2}\hbar}\hat{p}\right) \end{cases}$

或 $\begin{cases} \hat{a}=\dfrac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x+\dfrac{1}{\alpha^{2}}\dfrac{d}{dx}\right) \\ \hat{a}^{+}=\dfrac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x-\dfrac{1}{\alpha^{2}}\dfrac{d}{dx}\right) \end{cases}$ $\xrightarrow{\quad}$ 令 $\begin{cases} \hat{a}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\dfrac{d}{d\xi}\right) \\ \hat{a}^{+}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\dfrac{d}{d\xi}\right) \end{cases}$ （4）

（注意） $\hat{a}$ 不是厄米算符 $(\hat{a}^{+}\neq\hat{a})$

2. $\hat{a}$ 、$\hat{a}^+$的对易关系

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$$

Prove:

$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{2}\left[(\xi + \frac{d}{d\xi})(\xi - \frac{d}{d\xi}) - \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \xi\frac{d}{d\xi} + \xi\frac{d}{d\xi} + 1 - \frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 - \xi\frac{d}{d\xi} + \xi\frac{d}{d\xi} + 1 + \frac{d^2}{d\xi}\right) = 1$$

3. $\hat{a}$ 、$\hat{a}^{+}$的物理意义

在坐标表象中，线性谐振子哈密顿算符$\hat{H}$的本征函数

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x) \qquad N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right)^{1/2}$$

或 $$\psi_n(\xi) = N_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi)$$

$$\hat{a}\psi_n(\xi) = \frac{N_n}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi)$$

$$= \frac{N_n}{\sqrt{2}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d}{d\xi} H_n(\xi) = \frac{N_n}{\sqrt{2}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n'(\xi)$$

$$\hat{a}^{+}\psi_n(\psi)=\frac{N_n}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi)=\frac{N_n}{\sqrt{2}}\left[2\xi H_n(\xi)-H_n'(\xi)\right]e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

利用

$$2\xi H_n(\xi)=H_{n+1}(\xi)+2nH_{n-1}(\xi)$$

$$H_n'(\xi)=2nH_{n-1}(\xi)$$

$$\hat{a}\psi_n(\xi)=\sqrt{2}nN_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_{n-1}(\xi)=\sqrt{2}n\frac{N_n}{N_{n-1}}\psi_{n-1}$$

$$\hat{a}^{+}\psi_n(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2}}N_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_{n+1}(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{N_n}{N_{n+1}}\psi_{n+1}$$

因 $$\frac{N_n}{N_{n-1}}=\sqrt{\frac{1}{2n}},\qquad \frac{N_n}{N_{n+1}}=\sqrt{2(n+1)}$$

故 $$\begin{cases}\hat{a}\psi_n=\sqrt{n}\psi_{n-1}(\xi)\\ \hat{a}^{+}\psi_n=\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(\xi)\end{cases}\qquad (6)$$

如果不用具体表象，用Dirac符号表示态矢，以上两结果可写为

$$\hat{a}\left|n\right\rangle=\sqrt{n}\left|n-1\right\rangle \qquad (7)$$

$$\hat{a}^{+}\left|n\right\rangle=\sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle \qquad (8)$$

$|n\rangle$ 、$|n-1\rangle$ 和 $|n+1\rangle$ 都是谐振子哈密顿算符 $\hat{H}$ 的本征刃、分别对应于本征值 E_n 、E_{n-1} 、E_{n+1}

由可知能量等于

这个能量单位可视为一个粒子。E_n 是 n 个能量为 $\hbar\omega$ 的粒子的总能量加上零点能。

本征态 $|n\rangle$ 表示体系在这个态中有n个粒子。（7）式说明经算符 $\hat{a}$ 作用后，体系由状态$|n\rangle$ 变到状态$|n-1\rangle$ ，即粒子数减少一个，所以称 $\hat{a}$ 为粒子的湮灭符。同理，称 $\hat{a}$ 为粒子的产生算符。

由 $\hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle \xrightarrow{n=0} \hat{a}|0\rangle=0$

$$\hat{a}^{+}|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle \xrightarrow{n=0} \hat{a}^{+}|0\rangle=|1\rangle$$

$$\hat{a}^{+}\hat{a}^{+}|0\rangle=\hat{a}^{+}|1\rangle=\sqrt{2}|2\rangle$$

$$\left(\hat{a}^{+}\right)^{3}|0\rangle=\hat{a}^{+}\left(\hat{a}^{+}\right)^{2}|0\rangle=\sqrt{2}\hat{a}^{+}|2\rangle=\sqrt{3!}|3\rangle$$

$$\vdots$$

$$(\hat{a}^{+})^{n}|0\rangle=\sqrt{n!}|n\rangle \longrightarrow |n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{+})^{n}|0\rangle$$

4．粒子数算符

利用 $\hat{x} = \dfrac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\hat{a} + \hat{a}^{+})$ $\hat{P} = -i\dfrac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^{+})$

能量算符 $\hat{H} = -\dfrac{\hat{p}^2}{2\mu} + \dfrac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 = (a^{+}a + \dfrac{1}{2})\hbar\omega$

引入算符 $\hat{N} = \hat{a}^{+}\hat{a}$

则能量算符 $\hat{H} = (\hat{N} + \dfrac{1}{2})\hbar\omega$

而 $\boxed{\hat{N}|n\rangle = \hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\hat{a}^{+}|n-1\rangle = n|n\rangle}$

可见的本征值

5. 占有数表象和算符矩阵

以粒子数算符 $\hat{N}$ 的本征态矢 $|n\rangle$ 为基矢构成的表象称为占有数表象。

$\hat{a}$ 的矩阵元 $\langle n'|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\langle n'|n-1\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}$

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

$\hat{a}^{+}$的矩阵元 $\langle n'|\hat{a}^{+}|n\rangle=\sqrt{n+1}\langle n'|n+1\rangle=\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}$

$\hat{N}$ 的矩阵元 $\langle n'|\hat{N}|n\rangle=n\langle n'|n\rangle=n\,\delta_{n',n}$

$$a^{+}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \cdots \\ . & . & . & . & . & . \end{pmatrix} \qquad N=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & \cdots \\ . & . & . & . & . & . \end{pmatrix}$$

$\hat{H}$ 的矩阵元

$$\langle n'|\hat{H}|n\rangle = \langle n'|(\hat{N}+\frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega\,\delta_{n',n}$$

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\hbar\omega & 0 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

Ex1. 一维谐振子处于基态，求它的 $\overline{(\Delta x)^2}$ 及 $\overline{(\Delta p_x)^2}$ ，并验证测不准关系。

Solve:

［方法一］谐振子的波函数：$|n\rangle = N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x)$

$$\alpha = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \quad , \qquad N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2}$$

由厄米多项式的递推公式

$$H_{n+1}(\alpha x) - 2\alpha x H_n(\alpha x) + 2n H_{n-1}(\alpha x) = 0$$

推得谐振子波函数的递推公式

$$x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{n+1}|n+1\rangle)$$

$$x^2|n\rangle = \frac{1}{2\alpha^2}\left(\sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle + (2n+1)|n\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle\right)$$

由此得：

$$x|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}|1\rangle$$

$$x^2|0\rangle = \frac{1}{2\alpha^2}(|0\rangle + \sqrt{2}|2\rangle)$$

$$\overline{x} = \langle 0|\hat{x}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\langle 0|1\rangle = 0$$

$$\overline{x^2} = \langle 0|\hat{x}^2|0\rangle = \frac{1}{2\alpha^2}\left(\langle 0|0\rangle + \sqrt{2}\langle 0|2\rangle\right) = \frac{1}{2\alpha^2}$$

$$\therefore\quad \overline{(\Delta x)^2}=\overline{(x-\bar{x})^2}=\overline{x^2}-\bar{x}^2=\frac{1}{2\alpha^2}$$

又由
$$\frac{dH_n(x)}{dx}=2nH_{n-1}(x)$$

推得：
$$\frac{d}{dx}\Big|n>=\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n}\,|n-1>-\sqrt{n+1}\,|n+1>\right)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\Big|n>=\frac{\alpha^2}{2}\left(\sqrt{n(n-1)}\,|n-2>-(2n+1)|n>+\sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2>\right)$$

由此得：
$$\frac{d}{dx}\Big|0>=-\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\Big|1>,\qquad \frac{d^2}{dx^2}|0>=\frac{\alpha^2}{2}\left(\sqrt{2}\,|2>-|0\rangle\right)$$

$$\overline{P_x} = <0|\hat{P}_x|0> = -i\hbar <0\left|\frac{d}{dx}\right|0> = 0$$

$$\overline{p_x^2} = <0\left|\hat{p}_x^{\,2}\right|0> = -\hbar^2 <0\left|\frac{d^2}{dx^2}\right|0>$$

$$= -\frac{\alpha^2\hbar^2}{2} <0|\left(\sqrt{2}|2> - |0>\right) = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2}$$

$$\therefore \quad \overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2} - \overline{p}_x^2 = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2}$$

$$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p_x)^2} = \hbar^2/4$$

测不准关系

[方法二] $\hat{x}=\dfrac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\hat{a}+\hat{a}^{+}),\qquad \hat{p}_x=-i\dfrac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}}(\hat{a}-\hat{a}^{+})$

$$
\begin{cases}
\hat{x}\,|\,0>=\dfrac{1}{\sqrt{2}\alpha}\,|\,1> \\[2ex]
\hat{x}^2\,|\,0>=\dfrac{1}{2\alpha^2}(\hat{a}+\hat{a}^{+})\,|\,1>=\dfrac{1}{2\alpha^2}\left(|\,0>+\sqrt{2}\,|\,2>\right) \\[2ex]
\hat{p}_x\,|\,0>=i\dfrac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}}(\hat{a}-\hat{a}^{+})\,|\,0>=-i\dfrac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}}\,|\,1> \\[2ex]
\hat{p}_x^2\,|\,0>=+\dfrac{\alpha^2\hbar^2}{2}(\hat{a}-\hat{a}^{+})\,|\,1>=\dfrac{\alpha^2\hbar^2}{2}\left(|\,0>-\sqrt{2}\,|\,2\right)
\end{cases}
$$

$$\therefore \begin{cases} \overline{x} = <0|\hat{x}|0> = 0\,, & \overline{x^2} = <0|\hat{x}^2|0> = \dfrac{1}{2\alpha^2} \\ \overline{p_x} = <0|\hat{p}_x|0> = 0\,, & \overline{p_x^2} = <0|\hat{p}_x^2|0> = \dfrac{\alpha^2\hbar^2}{2} \end{cases}$$

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = \frac{1}{2\alpha^2}\,, \qquad \overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2} - \overline{p_x}^2 = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2}$$

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

测不准关系

Ex2. 折合质量为μ，力学量常数为K的谐振子受到微扰

$$H' = ax^3 + bx^4$$

试推导此谐振子第n个本征态的一级修正能量。

Solve:

［方法一］谐振子在物理中是一个重要的物理模型，本题处理非简谐振子问题，由于能量是非简并的，故可用非简并微扰理论讨论。

零级波函数 $$|n\rangle = N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(x)$$

$$\alpha = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \qquad \omega^2 = \frac{k}{\mu}$$

一级能量修正：

$$E_n^{(1)}=<n|\hat{H}'|n>=a<n|x^3|n>+b<n|x^4|n>$$

由厄米多项式的递推公式：

$$H_{n+1}(\alpha x)-2\alpha xH_n(\alpha x)+2nH_{n-1}(\alpha x)=0$$

可得到 $$x|n>=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left(\sqrt{n}\,|n-1)+\sqrt{n+1}|n+1>\right)$$

$$x^2|n>=\frac{1}{2\alpha^2}\left\{\sqrt{n(n-1)}\,|n-2>+(2n+1)|n>\right.$$

$$\left.+\sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2\rangle\right\}$$

$$\therefore \quad <n|x^3|n> = \sum_m <n|x|m><m|x^2|n>$$

$$= \sum_m \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left(\sqrt{m}\delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1}\delta_{n,m+1}\right) <m|x^2|n>$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left(\sqrt{n+1} <n+1|x^2|n> + \sqrt{n} <n-1|x^2|n>\right) = 0$$

$$<n|x^4|n> = \sum_m <n|x^2|m><m|x^2|n>$$

$$= \frac{1}{2\alpha^2}\sum(\sqrt{m(m-1)}\delta_{n.m-2} + (2m+1)\delta_{nm}$$

$$+\sqrt{(m+1)(m+2)}\delta_{n,m+2}) <m|x^2|n>$$

［方法二］

利用 $$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\hat{a} + \hat{a}^{+})$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^{+}] = 1 \qquad ie. \qquad \hat{a}\hat{a}^{+} - \hat{a}^{+}\hat{a} = 1$$

算得：$$\hat{x}^3 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\right)^3 \left\{ \hat{a}^3 + 4\hat{a}^{+3} + 3(a + a^{+})\hat{N} \right\}$$

$$\hat{x}^4 = \frac{1}{4\alpha^4}\left\{\hat{a}^4 + \hat{a}^{+4} + (4 + \hat{N})\hat{a}^{+2} + \hat{N}\hat{a}^2 + 6N^2 + 3(2 + a^2 + a^{+2})\hat{N} + 3\right\}$$

$$\overline{x^3} = \langle n | \hat{x}^3 | n \rangle = 0$$

$$\overline{x^4} = \langle n | \hat{x}^4 | n \rangle = \frac{1}{4\alpha^2}(6n^2 + 6n + 3)$$

$$H'_{nn} = \langle n | \hat{H}' | n \rangle = a \langle n | x^3 | n \rangle + b \langle n | x^4 | n \rangle$$

$$= \frac{3b}{4\alpha^2}(2n^2 + 2n + 1)$$

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \frac{3b}{4\alpha^2}(2n^2 + 2n + 1)$$

作业

周世勋《量子力学教程》

4.1，　4.2，　4.3，　4.5，