

3.2 基矢(Basis)

定理: 厄密算符 \hat{A} 的本征值为实; 不同本征值的本征矢正交.

证明:

$$\hat{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle. \quad (3.41)$$

由于 \hat{A} 厄密, 所以

$$\langle a'|\hat{A} = a'^*\langle a'|. \quad (3.42)$$

分别左乘 $\langle a'|$, 右乘 $|a'\rangle$ 上面两式, 相减

$$(a' - a'^*)\langle a'|a'\rangle = 0. \quad (3.43)$$

一个非空右矢和它的左矢的内积大于零, 于是 $a' = a'^*$, 所以本征值是实的.

现在考虑另一个本征值 $a'' \neq a'$,

$$\hat{A}|a''\rangle = a''|a''\rangle. \quad (3.44)$$

其对偶方程是:

$$\langle a''|\hat{A} = a''^*\langle a''|. \quad (3.45)$$

容易得到

$$(a' - a''^*)\langle a''|a'\rangle = 0. \quad (3.46)$$

因为 a', a'' 都是实的, 也就是 $a' \neq a''^*$, 所以 $\langle a''|a'\rangle = 0$.

注: 一个特殊情况需要注意, 如果 $a' = a''$, 仍然有可能 $|a'\rangle$ 与 $|a''\rangle$ 不同, 这就是简并矢量. 原则上定理不保证 $\langle a'|a''\rangle = 0$. 但是我们总可以通过‘构造’使得简并矢量正交. 后面我们会讨论这个问题.

根据这一定理, 我们总可以要求所有本征矢正交归一(约定每个基矢都是归一化的):

$$\langle a'|a''\rangle = \delta_{a', a''} \quad (3.47)$$

(注: 对于 $a' = a''$, 但是 $|a'\rangle \neq |a''\rangle$, 我们‘视为’ $a' \neq a''$).

3.2.1 力学量算符本征矢作为基矢

根据 \hat{A} 的本征矢的正交归一性, 容易证明他们彼此线性无关。假设这些本征矢有 N 个, 那么它们张开一个 N 维空间。给定一个任意的态矢量 $|\alpha\rangle$, 总可以把它展开成这些本征矢的叠加。这相当于选取 \hat{A} 的本征矢为基矢。称为**A表象**。

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle. \quad (3.48)$$

其中,

$$\hat{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle. \quad (3.49)$$

左乘 $\langle a'|$, 利用本征矢的正交归一性, 可以得到

$$c_{a'} = \langle a'|\alpha\rangle. \quad (3.50)$$

于是Eq. (3.48)可以改写成

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle. \quad (3.51)$$

非常类似于一般欧几里德空间的矢量展开。

$$\vec{V} = \sum_i c_i \hat{e}_i \quad (3.52)$$

其中 $\hat{e}_i, i = 1, 2, \dots$ 是正交归一单位矢量. $c_i = \hat{e}_i \cdot \vec{V}$.

利用结合公理, 上式可理解为 $\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|$ 作用到 $|\alpha\rangle$. 由于 $|\alpha\rangle$ 任意, 实际上这要求

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = 1, \quad (3.53)$$

1为恒等(或单位)算符. 这就是完备性关系(的Dirac理论表示). 量子力学理论假设力学量的本征矢满足完备性关系。

我们看到

$$|a'\rangle \langle a'| \cdot |\alpha\rangle = c_{a'} |a'\rangle \quad (3.54)$$

可以理解把 $|a'\rangle \langle a'|$ 把 $|\alpha\rangle$ 投影到 $|a'\rangle$ 方向, 因此可以定义投影算符 $P_{a'}$

$$P_{a'} \equiv |a'\rangle \langle a'| \quad (3.55)$$

完备性关系Eq.(3.53)也可以写为

$$\sum_{a'} P_{a'} = 1. \quad (3.56)$$

完备性关系非常有用. 例如可用来证明展开系数 $c_{a'}$ 满足的要求. 在内积中插入完备性关系, 在利用结合公理:

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = \langle \alpha|(\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|)|\alpha\rangle = \sum_{a'} |\langle a'|\alpha\rangle|^2. \quad (3.57)$$

如果 $|\alpha\rangle$ 是归一的, 那么

$$\sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1. \quad (3.58)$$

这给出了展开系数的几率解释.

3.3 测量原理或广义统计诠释

对于处于状态 $|\alpha\rangle$ 的粒子，测量力学量 A ，所有可能的测量值只能是对应厄密算符 A 的本征值 a' ，得到该测量值的几率为 $|c_{a'}|^2$ ，

$$c_{a'} = \langle a' | \alpha \rangle \quad (3.59)$$

是展开系数，又称几率幅，其中 $|a'\rangle$ 是 A 的属于本征值 a' 的本征态。测量之后粒子的状态坍缩到相应的本征态 $|a'\rangle$ 。

换言之，如果制备大量(N 个) $|\alpha\rangle$ 态的粒子，测量力学量 A ，我们会发现有 $N|c_{a'}|^2$ 个粒子得到 a' ，并处于 $|a'\rangle$ 态。

如果对这些已经处于 $|a'\rangle$ 态的粒子再进行测量 A ，会百分之百得到测值 a' ，并处于 $|a'\rangle$ 态。

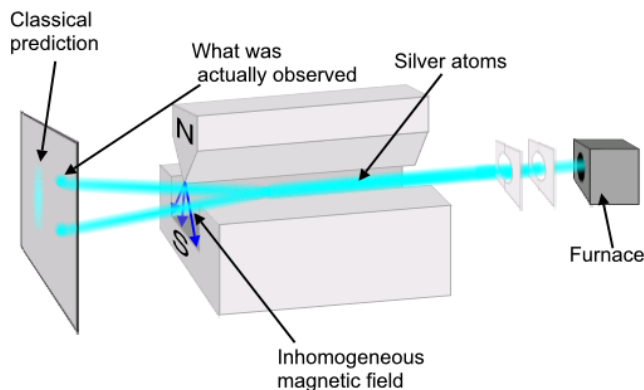


Figure 3.1: Stern-Gerlach实验(图取自Wiki百科) . 经典预期与实验事实是不一样的.

3.4 自旋1/2系统, Stern-Gerlach实验

我们结合自旋1/2系统来说明量子力学原理.

银原子有47个电子. 忽略其核自旋, 再考虑46个内层电子的总角动量(自旋与轨道之和)为零. 原子的总自旋是由其最外层的(5S) 电子的自旋提供. 其磁矩为

$$\vec{\mu} = \frac{-e}{m_e c} \mathbf{S}. \quad (3.60)$$

其中 \mathbf{S} 为自旋角动量.

由于原子很重, 是电子质量的 5×10^5 倍, 可以认为按一定轨道运动. 由于原子不带电, 所以不受洛仑兹力. 但是, 磁场是非均匀的, 原子在其中运动还是受到正比于磁矩的偏转力. 可以根据势能 $V = -\vec{\mu} \cdot \mathbf{B}$ 的梯度来计算. 磁场是 z 方向的, 受力为

$$f_z = -\frac{\partial}{\partial z}(-\mu_z B_z) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (3.61)$$

可以看到, 磁矩在 z 方向的投影不同, 受力就不同.

- 按照经典图像, 银原子从炉子里出来, 自旋(磁矩)的方向是随机的. 在 z 方向的大小可以表示成 $|\mu| \cos \theta$. 因此我们预期在屏幕上看到如图3.1所示的原子的连续分布.
- 事实上我们看到两个斑! 这表明原子的 z 方向磁矩只有两个值, 对应 $S_z = \pm \hbar/2$.
- 如果我们把实验装置旋转, 调整入射方向, 可以发现 S_x, S_y 的测量值也是 $\pm \hbar/2$.

我们现在来根据量子力学原理进行分析. 在此我们只考虑原子的自旋自由度, 而不考虑其质心的空间运动. 设炉子中出来原子的自旋状态是 $|\alpha\rangle$.

根据量子力学基本原理, 测量值是力学量算符的本征值, 对应的状态是本征态. 实验实际上告诉我们, 自旋角动量的三个分量(可以看作三个力学量)的本征值和对应的本征态是:

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |S_z; +\rangle &= \frac{\hbar}{2} |S_z; +\rangle, & \hat{S}_z |S_z; -\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |S_z; -\rangle. \\ \hat{S}_x |S_x; +\rangle &= \frac{\hbar}{2} |S_x; +\rangle, & \hat{S}_x |S_x; -\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |S_x; -\rangle. \\ \hat{S}_y |S_y; +\rangle &= \frac{\hbar}{2} |S_y; +\rangle, & \hat{S}_y |S_y; -\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |S_y; -\rangle. \end{aligned} \quad (3.62)$$

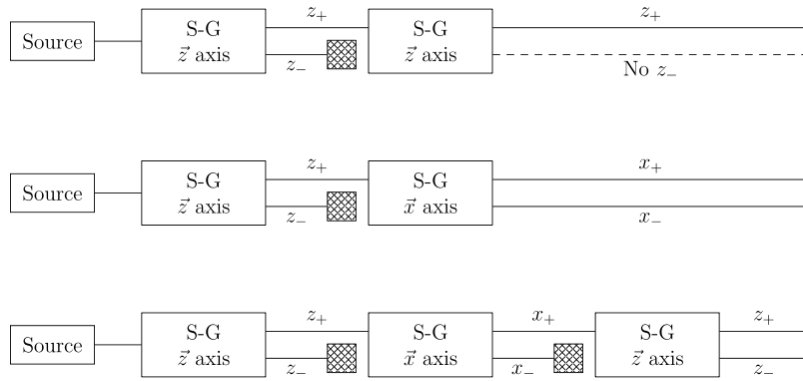


Figure 3.2: 级联SG实验.

对应到左矢空间, 考虑到力学量算符是厄密的:

$$\langle S_z; + | \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \langle S_z; + |, \quad \langle S_z; - | \hat{S}_z = -\frac{\hbar}{2} \langle S_z; - |. \quad (3.63)$$

取 $|+; z\rangle, |-; z\rangle$ 为基矢(简写为 $|+\rangle, |-\rangle$), 我们可以建立 S_z 表象.

基矢满足正交归一性:

$$\langle \pm | \pm \rangle = 1, \quad \langle \pm | \mp \rangle = 0. \quad (3.64)$$

和完备性:

$$|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = 1. \quad (3.65)$$

那么任意态 (自旋状态) 可以展开

$$|\alpha\rangle = c_1|+\rangle + c_2|-\rangle. \quad (3.66)$$

利用正交性关系, 可以算出

$$c_1 = \langle + | \alpha \rangle; \quad c_2 = \langle - | \alpha \rangle. \quad (3.67)$$

$|c_1|^2$ 和 $|c_2|^2$ 就是分别是测量 S_z 得 $\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$ 得几率! 两束原子的自旋状态分别塌缩成 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$.

这可以从多个SG装置的实验结果看到, 如图3.2. 最上面的结果感觉不奇怪: 朝上的自旋被第一个装置选出来了, 通过第二个装置当然就没有朝下的一支了。

第二个实验稍有些奇怪: 通过第二个装置, 原子分成了朝x正和x负的两束! 指向z正方向的自旋矢量‘分解’成了指向x正和x负的矢量和?? 不可能, 也许是自旋没有严格指向z正, 一半有些偏x+, 一半偏x-?

第三个实验说明这种猜想是错误的。实际上

$$|S_z; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_x; +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_x; -\rangle \quad (3.68)$$

类似的

$$|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; -\rangle \quad (3.69)$$

这是‘态矢量’的叠加或分解, 不是自旋矢量的叠加或分解! 具体为什么上式成立, 我们会在后面论证。