本征方程

本征方程

$$Q|q\rangle = q|q\rangle \tag{3.219}$$

有

$$\langle x|Q|q\rangle = q\langle x|q\rangle \tag{3.220}$$

得到

$$\hat{Q}\psi_q(x) = q\psi_q(x) \tag{3.221}$$

这里$\hat{Q} = Q(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$.

波函数的叠加

态叠加是说一个态可以写成其他态的叠加，即

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \tag{3.222}$$

$|n\rangle$一般是某个力学量的本征态。那么

$$\langle x|\alpha\rangle = \sum_n c_n\langle x|n\rangle \tag{3.223}$$

即

$$\psi_\alpha(x) = \sum_n c_n\psi_n(x) \tag{3.224}$$

态的波函数可以写成其他态的波函数的叠加。

完备性的波函数形式

考虑某表象的一组基矢(离散谱), 满足完备性关系

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = 1 \tag{3.225}$$

这些基矢可以在坐标表象下写成波函数$\psi_i(x) = \langle x|i\rangle$. 利用

$$\sum_i \langle x|i\rangle\langle i|x'\rangle = \delta(x - x') \tag{3.226}$$

又

$$\sum_i \langle x|i\rangle\langle i|x'\rangle = \sum_i \psi_i(x)\psi_i^*(x') \tag{3.227}$$

所以

$$\sum_i \psi_i(x)\psi_i^*(x') = \delta(x - x') \tag{3.228}$$

例子：无限深势阱.
本征方程的解$\psi_n(x)$ 是$|n\rangle$对应波函数. $|n\rangle$可以选为基矢.
正交归一性

$$\langle n|n'\rangle = (\psi_n, \psi'_n) = \delta_{nn'} \tag{3.229}$$

完备性

$$\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') = \delta(x - x') \tag{3.230}$$

如果是一个连续谱的表象, 基矢$|a\rangle$, a连续。

$$\int \mathrm{d}a|a\rangle\langle a| = 1 \tag{3.231}$$

上述结果自然为

$$\int \mathrm{d}a\psi_a(x)\psi_a^*(x') = \delta(x-x') \tag{3.232}$$

比如动量表象,

$$\int \mathrm{d}p\psi_p(x)\psi_p^*(x') = \int \mathrm{d}p\frac{1}{2\pi\hbar}e^{\mathrm{i}px/\hbar}e^{-\mathrm{i}px'/\hbar} = \delta(x-x') \tag{3.233}$$

此外$\langle p|p'\rangle$ 可以通过波函数验证.

$$\langle p|p'\rangle = \int \mathrm{d}x\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = \int \mathrm{d}x\psi_p^*(x)\psi_{p'}(x) = \int \mathrm{d}x\frac{1}{2\pi\hbar}e^{-\mathrm{i}px/\hbar}e^{\mathrm{i}p'x/\hbar} = \delta(p-p') \tag{3.234}$$

3.9 能量表象

考虑能量本征态

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{3.235}$$

选$|n\rangle$为基矢，就得到能量表象。

在能量表象下哈密顿量算符的矩阵自然是对角矩阵

$$H_{mn} = \langle m|H|n\rangle = E_n\delta_{mn} \tag{3.236}$$

根据薛定鄂方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha(t)\rangle = \hat{H}|\alpha(t)\rangle \tag{3.237}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle m|\alpha(t)\rangle = \sum_n \langle m\hat{H}|n\rangle\langle n|\alpha(t)\rangle \tag{3.238}$$

$$\mathrm{i}\hbar\dot{c}_m(t) = E_m c_m(t) \tag{3.239}$$

解为

$$c_m(t) = c_m(0)e^{-\mathrm{i}E_m t/\hbar} \tag{3.240}$$

$c_m(0)$由初始条件定

$$|\alpha(0)\rangle = \sum_m c_m(0)|m\rangle \tag{3.241}$$

所以

$$|\alpha(t)\rangle = \sum_m c_m(t)|m\rangle = \sum_m c_m(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m t/\hbar}|m\rangle \tag{3.242}$$

若

$$|\alpha(0)\rangle = |n\rangle \tag{3.243}$$

则

$$c_m = \delta_{mn} \tag{3.244}$$

系统处于之前我们研究过定态.

可以看到选取能量算符$\hat{H}$的本征矢作为基矢是非常方便的。

3.9.1 借助波函数完成计算

如果考虑粒子的空间运动，利用坐标（或位置）表象波函数来计算是方便的。

比如计算能量表象下力学量A的矩阵元$\langle m|A|n\rangle$

$$\langle m|A|n\rangle = (\psi_m, \hat{A}\psi_n) \tag{3.245}$$

其中

$$\hat{H}\psi_m(x) = E_m\psi_m(x) \tag{3.246}$$

是H的本征函数。

$\langle m|\alpha(t)\rangle$的计算也类似

$$\langle m|\alpha(t)\rangle = (\psi_m, \psi_\alpha) \tag{3.247}$$

例：一维谐振子问题. 我们来计算能量表象下，算符x的矩阵元

$$x_{n,m} = \langle n|x|m\rangle = \int \langle n|x\rangle\langle x|x|m\rangle \mathrm{d}x \tag{3.248}$$

其中插入了完备性关系。$\langle n|x\rangle = \psi_n^*$, $\langle x|x|m\rangle = x\psi_m$, 利用前面学过的

$$x\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\sqrt{n}\psi_{n-1} + \sqrt{n+1}\psi_{n+1}) \tag{3.249}$$

和

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\psi_{n-1} - \sqrt{n+1}\psi_{n+1}) \tag{3.250}$$

容易算出x_{nm} 和p_{nm}

3.10 力学量算符的共同本征函数

我们知道力学量的属于不同本征值的本征矢是正交归一的。但是, 严格的说我们并没有仔细研究简并(同一个本征值有两个以上本征矢)情况。如果出现简并, 怎么保证本征矢正交呢? 利用两个或多个力学量的共同本征函数, 我们可以解决简并带来的问题。

假设$\hat{A}$与$\hat{B}$是两个力学量的算符. 存在一种可能: 它们具有共同的本征函数

$$\hat{A}|nl\rangle = a_n|nl\rangle, \qquad \hat{B}|nl\rangle = b_l|nl\rangle. \tag{3.251}$$

$|nl\rangle$称作$\hat{A},\hat{B}$的共同本征态. 如果粒子处于这样的状态, 测量A得a_n, 测量B得b_l. 测量之后的状态不变. 先测后测无所谓.

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|nl\rangle = (a_n b_l - b_l a_n)|nl\rangle = 0. \tag{3.252}$$

注意: $\hat{A},\hat{B}$对易是在上式对任意波函数都成立的情况下. 上式不足以说他们对易, 但是这意味着$\hat{A}$与$\hat{B}$**很可能是对易的**.

这是可以证明的, 前提是$|nl\rangle$构成完备函数系, 任何态都可以用它展开

$$|\Psi\rangle = \sum_{nl} C_{nl}|nl\rangle, \tag{3.253}$$

于是

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\Psi\rangle = \sum_{nl} C_{nl}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|nl\rangle = \sum_{nl} C_{nl}(a_n b_l - b_l a_n)|nl\rangle = 0. \tag{3.254}$$

因此, $[\hat{A},\hat{B}] = 0$.

反过来, 我们可以证明: **如果厄密算符$\hat{A},\hat{B}$对易, 则它们必定存在一系列共同本征函数.**

证明: 假设$|\Psi_n\rangle, n = 1,2,\cdots,$与$|\Phi_l\rangle, l = 1,2,\cdots,$分别是算符$\hat{A},\hat{B}$的一组本征态, 由于A, B 都是力学量, 所以这两组本征态**各自**都是完备的.

$$\begin{aligned} \hat{A}|\Psi_n\rangle &= a_n|\Psi_n\rangle, n = 1,2,3,\cdots, \\ \hat{B}|\Phi_l\rangle &= b_l|\Phi_l\rangle, l = 1,2,3,\cdots. \end{aligned} \tag{3.255}$$

考虑到可能的简并, 我们将$|\Phi_l\rangle$按本征值分组($b_i \neq b_j$, 如果$i \neq j$)

$$\hat{B}|\Phi_{i\nu}\rangle = b_i|\Phi_{i\nu}\rangle, i = 1,2,3,\cdots; \nu = 1,\cdots,f_i. \tag{3.256}$$

f_i就是b_i的简并度。

任意取一个$\hat{A}$的本征函数$|\Psi_n\rangle$, 展开成$|\Phi_{i\nu}\rangle$的叠加

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{i\nu} c_{i\nu}^{(n)}|\Phi_{i\nu}\rangle = \sum_i |\tilde{\Phi}_{ni}\rangle \tag{3.257}$$

其中$|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle = \sum_\nu c_{i\nu}^{(n)}|\Phi_{i\nu}\rangle$, 仍然是$\hat{B}$的本征函数, 属于本征值$b_i$. 考虑

$$(\hat{A} - a_n)|\Psi_n\rangle = \sum_i (\hat{A} - a_n)|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle = 0. \tag{3.258}$$

由于$\hat{A}$与$\hat{B}$对易, 我们有

$$\hat{B}(\hat{A} - a_n)|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle = (\hat{A} - a_n)\hat{B}|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle = b_i(\hat{A} - a_n)|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle. \tag{3.259}$$

如果$(\hat{A} - a_n)|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle$不为零, 它就是$\hat{B}$的本征态, 属于本征值$b_i$. 但是(3.258)表明这些态是线性相关的. 一个厄密算符的属于不同本征值的本征函数是正交的, 不可能线性相关. 所以

$$(\hat{A} - a_n)|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle = 0. \tag{3.260}$$

也就是说$|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle$是$\hat{A}$的本征态, 属于本征值$a_n$.

至此，我们证明了$|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle$是$A,B$的共同本征态.

由于Eq.(3.257)对任意一个A的本征态都成立，即每一个本征态都可以表示为A,B共同本征态的叠加, 而且$|\Psi_n\rangle$是完备的，所以$|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle$**也是完备的**.

同时，我们惊喜地发现$|\tilde{\Phi}_{ni}\rangle, i=1,2,\cdots$,都属于$a_n$, 而且彼此正交的, 因为他们属于$B$的不同本征值$b_i$. 这使得建立完备的正交归一基矢成为可能。

3.10.1 简并与力学量完全集

- 如果$\hat{A}$的全部本征态(或本征函数)都是非简并的, 那么测量A得到的本征值就可以确定系统塌缩到的本征态$|a\rangle$.

  这时也可能有算符$\hat{B}$与之对易. 但是由于非简并, A的每个本征态都是$\hat{B}$的本征态. 其实$\hat{B}$必定是$\hat{A}$的函数. 例如: 一维系统的动能$\hat{T}$与动量$\hat{p}$.

- 如果$\hat{A}$的一部分或全部本征值是简并的, 那么给定$\hat{A}$的本征值并不足以确定本征态. 我们可以找与$\hat{A}$对易的另一力学量算符$\hat{B}$, 它们存在共同本征态, 在确定a_n后, 再测B, 确定b_l后, 就**可能**确定本征态了, 比如$|a_n,b_l\rangle$.

- 如果$\hat{A},\hat{B}$的共同本征态在确定a_n,b_l后仍然有简并, 即仍然无法确定本征态. 这时我们需要找第三个力学量C.

- 一组相互对易又彼此独立的力学量, 如果它们的共同本征态不再简并(唯一确定), 那么这组力学量称为系统的**力学量完全集**. 测量它们之后得到的所有本征值就可以完全确定系统的状态(共同本征态).

- 完全集中的力学量的个数其实就是系统的**自由度**.

  例子: 对于一维束缚态粒子运动, 一般能量就可以构成力学量完全集. 对于非束缚态可以选动量为力学量完全集. 三维粒子的运动需要三个力学量构成完全集. 对于非束缚态可以选p_x,p_y,p_z. 对于中心力束缚态，可以选能量, 角动量平方和角动量某个分量. 这在后面的内容里会讲到.

原则上如果找到了力学量完全集，就可以以它们的共同本征态为基矢建立表象, 这些基矢是正交归一的。

例如：力学量A, B的共同本征态是$|lm\rangle$, $A|lm\rangle=a_l|lm\rangle, B|lm\rangle=b_m|lm\rangle$. 确定$a_l,b_m$就可以确定**唯一的** 共同本征态$|lm\rangle$. 则A，B构成力学量完全集. 我们可以采用$|lm\rangle$为基矢建立(A,B)表象. 由于$\langle lm|l'm'\rangle=\delta_{ll'}\delta_{mm'}$, 基矢是正交归一的. 我们可以给这些基矢按一定规则排序$|lm\rangle=|i\rangle, i=1,2,\ldots,$, 就可以回到我们熟悉的正交归一形式$\langle i|j\rangle=\delta_{ij}$.

任意状态$|\alpha\rangle$可以用$|lm\rangle$展开.

$$|\alpha\rangle=\sum_{lm}c_{lm}|lm\rangle \tag{3.261}$$

系数$c_{lm}=\langle lm|\alpha\rangle$是唯一确定的。