力学量算符 (作业: 20230408)

1. 算符: 作用在一个函数上得出另一个函数的运算符号. 设某种运算把函数 u 变成 v, 用符号表示为 $\hat{F}u = v$;
   (a) 算符相等: $\hat{F}u = \hat{G}u \Rightarrow \hat{F} = \hat{G}$;
   (b) 算符的性质参考半群的性质或矩阵的性质;
      i. 逆算符: $(\hat{F}\hat{G})^{-1} = \hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1}$, 有的算符没有逆算符 (左右逆元不相等, 需要与群区分);
   (c) 算符的内积 (标量积): $(u, v) =< u|v >= \int u^* v d\tau = (\int uv^* d\tau)^* = (v, u)^*$;
      i. 算符的内积满足双线性: $\begin{cases} (u, c_1v_1 + c_2v_2) = c_1(u, v_1) + c_2(u, v_2) \\ (c_1u_1 + c_2u_2, v) = c_1^*(u_1, v) + c_2^*(u_2, v) \end{cases}$;
   (d) 复共轭算符: $\hat{F}^*$;
      i. $(\hat{F}\hat{G})^* = \hat{F}^*\hat{G}^*$;
   (e) 转置算符: $\tilde{\hat{F}}$, 定义为 $\int u^* \hat{F} v d\tau = \int \tilde{\hat{F}} u^* v d\tau$ 或 $(u, \tilde{\hat{F}} v) = (v^*, \hat{F} u^*)$;
      i. $\frac{\tilde{\partial}}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}$;
      ii. $\widetilde{\hat{F}\hat{G}} = \tilde{\hat{G}}\tilde{\hat{F}}$;
   (f) 厄米共轭算符: $\hat{F}^\dagger$, 定义为 $\int u^* \hat{F} v d\tau = \int (\hat{F}^\dagger u)^* v d\tau$ 或 $(u, \hat{F}^\dagger v) = (\hat{F}u, v)$;
      i. $\hat{F}^\dagger = \tilde{\hat{F}}^*$;
      ii. $(\hat{F}\hat{G})^\dagger = \hat{G}^\dagger \hat{F}^\dagger$
   (g) 线性算符: 若 $\hat{F}(c_1u_1 + c_2u_2) = c_1\hat{F}u_1 + c_2\hat{F}u_2$, 则称 $\hat{F}$ 是线性算符;

2. 对易关系判别式: $[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$, 算符对易时 $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$. 对易关系没有传递性;
   (a) 反对易判别式: $\{\hat{F}, \hat{G}\} = \hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F} = 0$;
      i. 波色子算符满足对易关系, 费米子算符满足反对易关系;

3. 算符的函数: $F(\hat{A}) = \sum\limits_{n=1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!}\hat{A}^n$, 或 $F(\hat{A}, \hat{B}) = \sum\limits_{n,m=0}^{\infty} \frac{f^{(n,m)}(0,0)}{n!m!}\hat{A}^n\hat{B}^m$;

4. 厄米算符: $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$;
   (a) 两个厄米算符的和仍然是一个厄米算符;
   (b) 厄米算符的幂也是厄米算符;
   (c) 两个对易算符的积是厄米算符;
5. 力学量的算符: 表示力学量算符都是厄米算符 (量子力学第二基本假定第一点);
   (a) 力学量的算符应该满足态叠加原理, 因此必须为一个线性算符;
   (b) 力学量算符的测量可能值必须是实数, 即期望值也必须是一个实数, 应该满足 $< F >=< F >^*$;
6. 厄米算符的性质:
   (a) 厄米算符的本征值是一个实数;
   (b) 厄米算符的期望值是一个实数;
   (c) 一个厄米算符属于不同本征值的本征函数相互正交; 属于同一本征值而线性无关的本征态可以相互正交;
      i. 简并态的正交归一化常用方法: 施密特正交化;
   (d) 一个厄米算符的本征函数系是完备的;
      i. 完备: 任意波函数都可以用这个厄米算符的线性叠加表示;
7. 广义统计诠释:
   (a) 广义统计诠释:
      i. 离散谱的广义统计诠释: 如果测量一个处于 $\Psi(\vec{r},t)$ 态的粒子的可观测量 $\hat{F}$, 那么其结果一定是厄米算符 $\hat{F}$ 的本征值中的一个, 得到本征函数 ψ_n 对应的本征值 f_n 的概率是 $|c_n(t)|^2$, $c_n(t) = \int \psi_n^*(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)d\tau$. 测量之后, 波函数 $\Psi(\vec{r},t)$ 坍缩到对应的本征态 ψ_n 上;
         A. 因为 $|c_n(t)|^2$ 具有概率的意义, 所以 $\sum\limits_n |c_n(t)|^2 = 1$;
         B. $\hat{F}$ 的期望值应该是任何可能本征值与本征值出现概率乘积的求和: $< F >= \sum\limits_n |c_n|^2 f_n$;

ii. 连续谱的广义统计诠释: 如果测量一个处于 $\Psi(\vec{r},t)$ 态的粒子的可观测量 $\hat{F}$, 那么其结果一定是厄米算符 $\hat{F}$ 的本征值中的一个, 得到结果在范围 df 的概率是 $|c(f,t)|^2 df$, $c(f,t) = \int \psi_f^*(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)d\tau$. 测量之后, 波函数 $\Psi(\vec{r},t)$ 坍缩到对应的本征态 ψ_n 上;

A. 因为 $|c(t)|^2$ 具有概率的意义, 所以 $\int |c(f,t)|^2 df = 1$;

B. $\hat{F}$ 的期望值应该是任何可能本征值与本征值出现概率乘积的求和: $< F >= \int f|c(f,t)|^2 df$;

iii. 对于混合谱: 可以分解为离散谱与连续谱的和;

8. 厄米算符之间的对易关系:

(a) 若两个厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 有完备的共同本征波函数系, 则 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 一定对易;

i. 若两个线性厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易, 则它们必有完备的共同本征波函数系;

ii. 两个厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的对易子 $i\hat{C} = [\hat{A},\hat{B}]$ 是一个反厄米算符 (满足 $-i\hat{C}^\dagger = -i\hat{C}$);

A. 如果不对易的厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的对易子中有 0, 则它们有部分共同本征函数;

(b) 力学量完全集: 确定体系状态的力学量全体;

i. 守恒量完全集: 哈密顿量 $\hat{H}$ 不显含时间的情况下, 力学量完全集称为守恒量完全集;

(c) 自由度: 构成完全集的独立力学量的个数;

9. 不确定关系: 海森伯不确定关系 $\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} < [\hat{A},\hat{B}] >\right)^2$;

(a) 不对易的力学量一般有反对易关系 $[\hat{A},\hat{B}] = ic$, 或 $[\hat{A},\hat{B}]^\dagger = -[\hat{A},\hat{B}]$;

i. 一对不对易算符的客观测量被称为不相容可观测量;

(b) 不确定关系也可以写为 $\sigma_A\sigma_B \geq \left|\frac{1}{2i} < [\hat{A},\hat{B}] >\right|$, 不确定关系的下限被称为最小不确定性;

i. 坐标与动量满足 $[x,p_x] = i\hbar$, 即 $\sigma_x\sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}$;

ii. 能量与时间也满足 $[\Delta E,\Delta t] = i\hbar$;

(c) 对于不对易的 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}([\hat{A},\hat{B}]\neq 0)$, 无法同时唯一严格地确定它们的本征值;

10. 坐标算符: 坐标算符 $\hat{x}$ 的本征值是 $\psi_{x'}(x)=\delta(x-x')$;

11. 动量算符: 动量算符 $\hat{p_x}$ 的本征态是平面波 $\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}$, 本征值是 p_x;

12. 角动量算符: 轨道角动量算符 $\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}$, 轨道角动量力学量的完全集 $\{H,L^2,L_z\}$;

    (a) 角动量的分量彼此简并, 但是 $[\hat{L}^2,\hat{L}_x]=[\hat{L}^2,\hat{L}_y]=[\hat{L}^2,\hat{L}_z]=0$;

    (b) 球坐标下的分量:

        i. 角动量的平方算符: $\hat{L}^2=-\hbar\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$;

        ii. 角动量的 z 分量算符: $\hat{L_z}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$;

        iii. 共同的本征函数: 球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)=N_{lm}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$, 其中 $N_{lm}=(-1)^m\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}$, 当 $m<0$ 时, $(-1)^m$ 项取为 1;

            A. 勒让德多项式: $P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$;

            B. 连带勒让德多项式: $P_m^l(x)=\sqrt{1-x^2}^m\frac{d^m}{dx^m}P_l(x)$;

            C. 球谐函数的正交归一性: $\int_{-1}^{1}P_l^{|m|}(\xi)P_{l'}^{|m|}(\xi)d\xi=\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}$;

    (c) 角动量升降阶算符: $\hat{L}_\pm=\hat{L_x}\pm i\hat{L}_y$;

    (d) 如果 Y 是 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L_z}$ 的共同本征函数, 那么 $\hat{L}_\pm Y$ 一定是 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L_z}$ 的共同本征函数;

        i. $L^2Y_{lm}=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}, L_zY_{lm}=m\hbar Y_{lm}$;

13. 量子力学的几个绘景: 物理上可观测的物理量不会因为采用的绘景不同而改变;

    (a) 薛定谔绘景: 体系的状态矢量即波函数随时间的演化;

        i. 波函数遵从薛定谔方程: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)=\hat{H}\Psi(\vec{r},t)$;

        ii. 时间演化算符: $\hat{U}(t)=e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$, 作用在波函数上使之随时间演化;

            A. 时间演化算符是幺正的: $\hat{U}^\dagger(t)=\hat{U}^{-1}(t)=e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$;

        iii. 波函数的一般解: $\Psi(\vec{r},t)=\sum\limits_n c_ne^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\psi_n(\vec{r})=e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\Psi(\vec{r},0)=\hat{U}(t)\Psi(\vec{r},0)$ (利用本征方程);

(b) 海森堡绘景: 波函数并不随时间演化,体系的状态矢量即算符随时间的演化;

i. 力学量的期望值: $< F >= \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau = \int [\hat{U}\Psi]^* \hat{F} \hat{U} \Psi d\tau = \int \Psi^* \hat{U}^\dagger \hat{F} \hat{U} \psi = \int \Psi^* \hat{F}(t) \Psi d\tau$;

ii. 海森堡运动方程: $\hat{F}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{F} \hat{U}(t)$, 其时间导数 $\frac{\partial}{\partial t} \hat{F}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{F}(t)] = \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger(t) [\hat{H}, \hat{F}] \hat{U}(t)$;

(c) 相互作用绘景: 体系的状态矢量即波函数和算符随时间演化的结果;

i. 相互作用的哈密顿量: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$, 其中 $\hat{H}_0$ 不显含时间, $\hat{H}'$ 描述体系与外界的相互作用;

ii. 相互作用的波函数: $\Psi(t) = e^{i \frac{\hat{H}_0}{\hbar} t} \Psi(t)$;

iii. 相互作用方程: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = \hat{H}'(t) \Psi(t)$, 其中 $\hat{H}'(t) = e^{i \frac{\hat{H}_0}{\hbar} t} \hat{H}' e^{-i \frac{\hat{H}_0}{\hbar} t} = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{H}' \hat{U}_0(t)$;

iv. 力学量算符: $\hat{F}(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{F} \hat{U}_0(t)$, $\frac{d}{dt} \hat{F}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{F}(t)]$;

14. 力学量的变换:

(a) 变换是可实现态的条件: 若对态 Ψ 进行变换 $\hat{T}\Psi$, 得到的态 $\hat{T}\Psi$ 可实现的条件是:

i. $\hat{T}\Psi$ 满足归一化条件 $\int (\hat{T}\Psi)^* \hat{T} \Psi d\tau = 1$, 即 $\hat{T}^\dagger = \hat{T}^{-1}$($\hat{T}$ 是幺正变换);

ii. 变换满足薛定谔方程: 变换与哈密顿量对易, $\hat{H}\hat{T} = \hat{T}\hat{H}$($[\hat{H}, \hat{T}] = 0$);

(b) 守恒量条件: 如果变换 $\hat{T}$ 是厄米算符 ($\hat{T}^\dagger = \hat{T}$), 则 $\hat{T}$ 是守恒量;

i. 无穷小算子: 如果变换 $\hat{T}$ 不是厄米算符, 则可以有 $\hat{T} = e^{i\epsilon \hat{G}}$, 其中 ϵ 为小的实数, $\hat{G}$ 是厄米算符 (称为变换 $\hat{T}$ 的无穷小算子);

A. $\hat{G}$ 也对哈密顿量对易, 因此 $\hat{G}$ 是某种守恒量;

(c) 常见对称性:

i. 动量守恒: 空间平移对称. 动量算符 $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, 平移算符 $\hat{D}(\delta\vec{r}) = e^{\delta\vec{r} \cdot \frac{\hat{\vec{p}}}{i\hbar}}$;

ii. 角动量守恒: 空间旋转对称性. 角动量算符 $\vec{L} = -i\hbar\vec{r} \times \vec{\nabla} = \vec{r} \times \vec{p}$, 旋转算符 $\vec{R}(\delta\vec{\varphi}) = e^{\frac{1}{i\hbar}\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{L}}$;

iii. 能量守恒: 时间平移对称性. 能量算符 $\hat{H}$,时间平移算符 $\hat{D}(\delta t) = e^{\delta t \cdot \frac{\hat{H}}{i\hbar}}$;

iv. 宇称守恒: 空间反演对称性. 空间反演运算 $\vec{r} \to -\vec{r}$, 宇称算符 $\vec{P}^2\Psi(\vec{r},t) = \vec{P}\Psi(-\vec{r},t) = \Psi(\vec{r},t)$;

15. 海尔曼-费曼定理: 设系统的哈密顿量 $\hat{H}(\lambda)$, λ 为某一参量 (如势阱宽度), 则 $\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right\rangle_n = \int \psi_n^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n d\tau$;

16. 束缚态的维里定理: 由 $\frac{d}{dt} < \hat{A}\hat{B} >=< \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt} > + < \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B} >$, 得 $\left\langle \frac{\vec{p}^2}{2m} \right\rangle_n =< \hat{T} >_n= \frac{1}{2} < \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V >_n$;

17. 动量表象: $\hat{r} = i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec{p}}, \hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec{p}}\right)$;

    (a) 能量-时间不确定关系: $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$;

18. 埃伦费斯特定理: 动量算符平均值的时间导数等于作用力的平均值, 即 $m\frac{d^2 <x>}{dt^2} = \frac{d<p_x>}{dt} =< -\frac{\partial V}{\partial x} >=< F_x >$;

    (a) 虽然埃伦费斯特定理与经典力学方程很相似, 但不能认为 $< x >= x$, 即与牛顿第二定律不同;