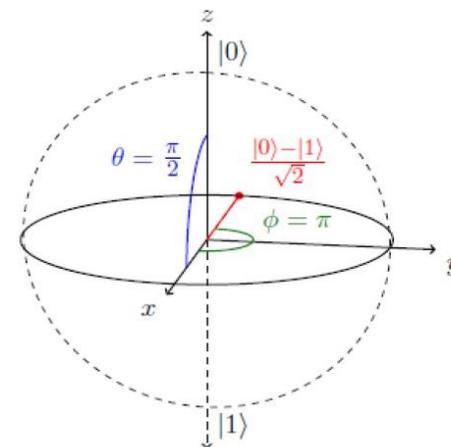


(a) Basis state $|0\rangle$



(b) Basis state $|1\rangle$

《与当下工程师们讲量子计算》之11：量子力学基础知识

煤油灯科技公司 <http://www.victorlamp.com>

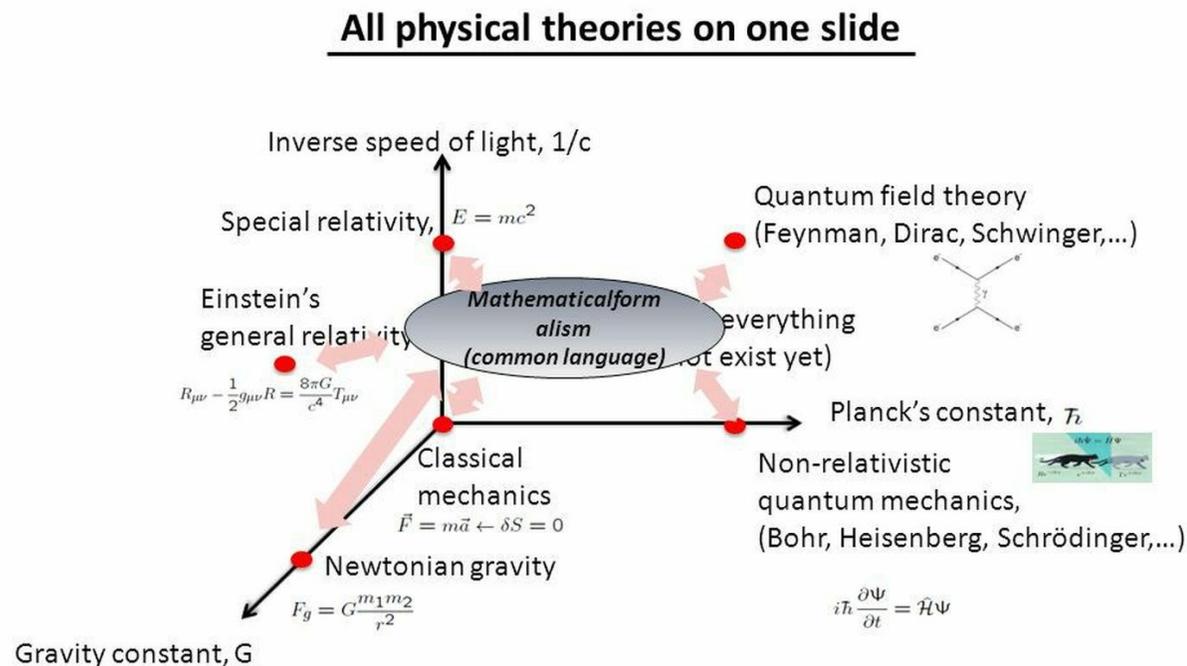
版权所有，仅供个人学习用，不许用于商业目的，不许上载到victorlamp之外的共享平台再次分发。



量子力学是什么？ 是用数学方法描述量子物理规律的一门工具类学科。

量子力学是研究微观粒子的运动规律的物理学分支学科，它主要研究原子、分子、凝聚态物质，以及原子核和基本粒子的结构、性质的基础理论，它与相对论一起构成了现代物理学的理论基础。

量子力学的基本原理包括量子态的概念，运动方程、理论概念和观测物理量之间的对应规则和物理原理。



在微观粒子世界，没有绝对静止的概念，任何粒子都是以一定的概率在波动。

只是波动的幅度和频度有大有小，绝大多数情况下这种波动是肉眼无法观察到。

巨量的微观粒子构成我们能够看到的物体，这些巨量的粒子的波动相互作用，互相牵制，组合在一起形成了一种统一的波动，形成集体行为，体现出来物体的各种性质，如：导热、导电等。



具有确定动量和确定能量的自由粒子，相当于频率为 ν 波长为 λ 的平面波，二者之间的关系如同光子与光波一样，即：

$$\text{能量} \quad E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\text{动量} \quad \vec{p} = \frac{h}{\lambda} \vec{n} = \hbar \vec{k}$$

这就是著名的德布罗意关系式，这种表示自由粒子的平面波称为德布罗意波或“物质波”。



自由粒子的波函数(德布罗意假设)

能量子 $E = h\nu = \hbar\omega$

动量 $\vec{p} = \frac{h}{\lambda} \vec{n} = \hbar \vec{k}$

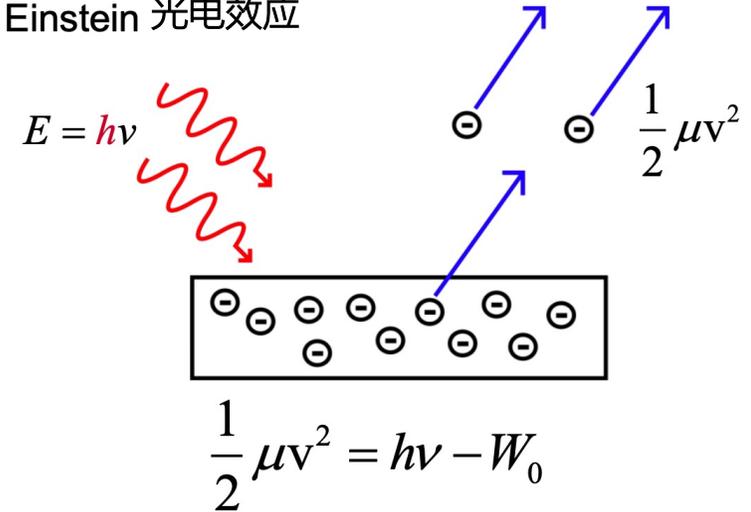
波函数 $\Psi = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) \right]$

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

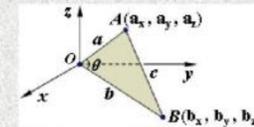
$$E^2 = \mu_0^2 c^4 + c^2 p^2, E = cp$$

$$\mathbf{p} = \frac{E}{c} \mathbf{n} = \frac{h\nu}{c} \mathbf{n} = \frac{h}{\lambda} \mathbf{n} = \hbar \mathbf{k}$$

Einstein 光电效应



§ 1-3 矢量的点乘与叉乘



$$\vec{a} = a_x \vec{i} + a_y \vec{j} + a_z \vec{k}$$

$$\vec{b} = b_x \vec{i} + b_y \vec{j} + b_z \vec{k}$$

点乘的定义 $\vec{a} \cdot \vec{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$

点乘的意义 $\vec{a} \cdot \vec{b} = ab \cos \theta$ $\vec{a} \cdot \vec{b} = 0 \Leftrightarrow \vec{a} \perp \vec{b}$

点乘的性质 性质1 $\vec{a} \cdot \vec{b} = \vec{b} \cdot \vec{a}$

性质2 $\vec{a} \cdot (\vec{b} + \vec{c}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + \vec{a} \cdot \vec{c}$



煤油灯科技

VICTORLAMP

为什么我们感觉不到这种微观粒子波？

设自由粒子的动能为 E ，当它的速度远小于光速时，其动能 $E = \frac{p^2}{2\mu}$ ，由(2)

式可知，德布罗意波长为：

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2\mu E}} \quad (3)$$

如果电子被 V 伏电势差加速，则 $E = eV$ 电子伏特，则：

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\mu eV}} \cong \frac{12.25}{\sqrt{V}} \text{ \AA} \quad (\mu \text{ 为电子质量})$$

当 $V=150$ 伏特时， $\lambda = 1 \text{ \AA}$ ，当 $V=10000$ 伏特时， $\lambda = 0.122 \text{ \AA}$ ，所以，德布罗意波长在数量级上相当于晶体中的原子间距，它宏观线度要短得多，这说明为什么电子的波动性长期未被发现，若把电子改成其他实物粒子，情况是怎样的？

可见单个粒子波动的波长是非常非常小的，完全不在人类能够直接观察的范围。



粒子或系统的哈密顿量H

动能+势能，就是这个粒子的总能量。因此，哈密顿量表示了粒子的能量。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

首先看第一项，分母m表示粒子的质量，倒三角的平方表示两个梯度算符点乘，作用于函数的效果，就是对三个自变量xyz分别求二阶导数，然后再相加起来，得到的还是一个标量函数。

第一项实际上代表了粒子的动能；第二项是一个空间位置的函数，即势能函数，表示粒子处在不同位置时的势能大小。

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{T} + \hat{V} \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t)\end{aligned}$$



为什么用哈密顿量H? 帮助理解

对于一个封闭系统来说，无论是微观还是宏观都是**能量守恒**的，在各种状态的迁移过程中终于可以找到一个等量关系，就像在茫茫大海中抓到一根救命稻草。

阿基米德由澡盆溢水找到了解决王冠问题的办法：相同质量的相同物质泡在水里，溢出的水的体积应该相同。如果把王冠放到水里了，溢出的水的体积应该与相同质量的金块的体积相同，否则王冠里肯定掺有假。阿基米德跑到王宫后立即找来一盆水，又找来同样重量的一块黄金，一块白银，分两次泡进盆里，白银溢出的水比黄金溢出的几乎要多一倍，然后他又把王冠和金块分别泡进水盆里，王冠溢出的水比金块多，显然王冠的质量不等于金块的质量，王冠里肯定掺了假。



等量关系：等量的黄金虽然形状变了，但是总体积是不变的。



量子力学的五大公设



量子力学的五大公设：波函数

一、量子态（波函数）公设

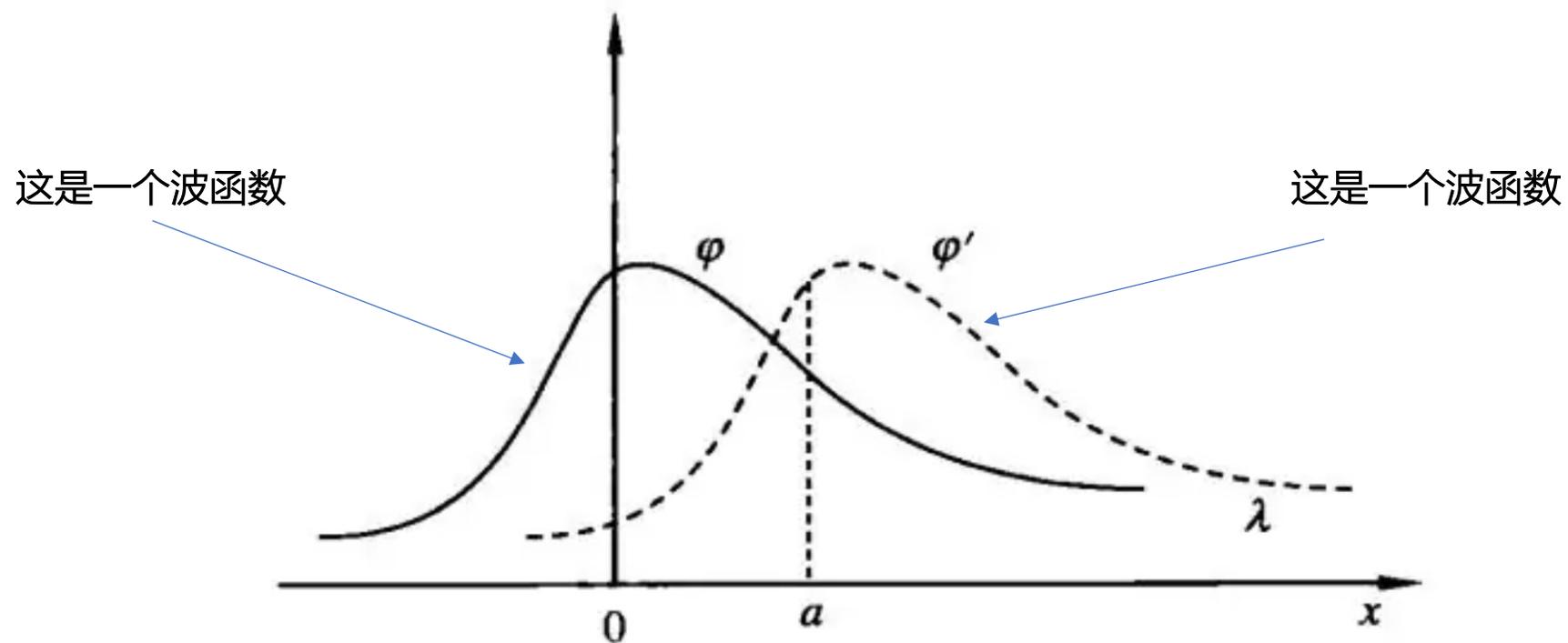
波函数公设，一个微观粒子的状态可以由波函数完全来描述，波函数的模方为粒子的概率密度，波函数满足归一化条件。

$$\omega(x, y, z, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$$

波函数三个标准条件：**有限性、单值性和连续性。**



量子力学的五大公设：什么是量子态波函数？



一个状态平移后变为另一个态



量子力学的五大公设：态叠加原理

若 $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$ 是体系的一系列可能的状态，则这些态的线性叠加 $\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2 + \dots + C_n\psi_n + \dots$

(其中 $C_1, C_2, \dots, C_n, \dots$ 为复常数)也是体系的一个可能状态。

处于 ψ 态的体系，部分的处于 ψ_1 态，部分的处于 ψ_2 态...，部分的处于 ψ_n, \dots



量子力学的五大公设：薛定谔方程

二、量子运动方程公设--薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad \text{——薛定谔方程}$$

i 即虚数单位；

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ，称为约化普朗克常数；

$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$ ，即梯度算子；

$V = V(x, y, z)$ ，是体系中的势能分布，取决于具体的物理情形；

$\psi = \psi(x, y, z, t)$ ，即名声在外的波函数(Wave Function)。

注意：

薛定谔方程是建立起来的，而不是推导出来的，它是量子力学中的一个基本假设。

地位等同于牛顿力学中的牛顿方程 $F = ma$ 。

它的正确性由方程得出的结论与实验比较来验证。



量子力学的五大公设：定态薛定谔方程

定态含义作用在粒子上的势场是不随时间改变的薛定谔方程。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad \text{定态薛定谔方程}$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad \text{定态波函数}$$

定态的性质：

- (1) 在定态中，几率密度和几率流密度不随时间改变；
- (2) 任何不显含时间t的力学量平均值与时间t 无关；
- (3) 任何不显含时间t的力学量的测量概率分布也不随时间改变。



量子力学的五大公设：厄米Hermite算符

三、算符公设

任意可观测的力学量，都可以用相应的线性厄米算符来表示。

任一可观测物理量 A ，都可以用相应的线性Hermite算符 \hat{A} 来表示， A 的测量值即是 \hat{A} 的本征值。至于为什么是Hermite算符，因为Hermite算符能够保证它的本征值，或者说期望值 $\langle \hat{A} \rangle$ 一定是实的，毕竟我们进行实验测量各种值，从来得到的都是实数。

$$\begin{aligned}\hat{A}f &= \lambda f \\ \langle f|\hat{A}f \rangle &= \langle \hat{A}^\dagger f|f \rangle = \lambda \langle f|f \rangle\end{aligned}$$

这就要求

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

读作dagger: 匕首; 短剑

也就是Hermite算符(也称 自伴算符)。

一般来说，Hermite算符的本征函数集也未见得是完备的，这里完备性是指该函数集可以对任意波函数(而非任意数学函数)作展开。所以只有那些本征函数集完备的Hermite算符对应的物理量，我们才成为可观测量。



厄米算符：转置，再取复共轭

厄米算子是一类特殊的重要算子，因为厄米算子的特征值是可观测量的可能值，这意味着测量值为实数而不是复数。在量子力学中，与伴随项相等的算子称为厄米共轭算子或自伴随算子。

换句话说，算子A是厄米算子的当且仅当满足以下等式：

$$A^\dagger = A$$

作为一个例子，推导下面表示线性算子的矩阵的伴随项，确定其是否是厄米矩阵：

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 2+i & 4 \\ 2-i & 3 & i \\ 4 & -i & 1 \end{bmatrix}$$

首先，确定矩阵的共轭复数 A^*

$$A^* = \begin{bmatrix} 2 & 2-i & 4 \\ 2+i & 3 & -i \\ 4 & i & 1 \end{bmatrix}$$

然后，对 A^* 进行转置得到：

$$A^\dagger = \begin{bmatrix} 2 & 2+i & 4 \\ 2-i & 3 & i \\ 4 & -i & 1 \end{bmatrix}$$

所以， $A^\dagger = A$ ，所以该矩阵是厄米矩阵。



量子力学的五大公设：平均值测量

四.、量子测量公设(平均值公设)

这一公设与波函数公设共同构成了量子力学关于实验观测的理论基础

$$\bar{A} = \frac{\int \psi^* \hat{A} \psi dV}{\int \psi^* \psi dV}$$

若 $\psi(r)$ 是归一化的, 则

$$\bar{A} = \int \psi^* \hat{A} \psi dV$$

这里期望值是指对大量相同的态 $\psi(r)$ (它们组成所谓量子系综)作多次测量的平均结果。



量子力学的五大公设：全同性原理

五、全同性原理公设

如果两个粒子内禀属性全部相同(质量, 电荷, 自旋, 同位旋, 内部结构以及其他), 认为它们是全同的。

在这种情况下, 比如两个电子, 我们在实验中如不做人为的标记, 是无法区分它们的。

所以全同性原理便是全同粒子的不可分辨性。

而这跟微观粒子的交换对称性扯上了关系, 两个全同粒子组成的系统, 其概率幅应当是对称的, 也就是说总的波函数要么是对称的, 要么是反对称的。

这种情况下, 总波函数对称的我们叫它玻色子, 反对称的我们叫它费米子 (Pauli不相容原理)。



典型的量子态波函数



求解定态量子问题的步骤

(1) 列出定态Schrödinger方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

(2) 求解Schrödinger方程，写出通解

(3) 根据波函数三个标准条件求解能量 E 的本征值问题，得：

本征值： $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$

本征函数： $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$

(4) 通过归一化确定归一化系数 C_n

$$\int_{-\infty}^{\infty} |C_n \psi_n(\vec{r})|^2 d\tau = 1$$



一维线性自由粒子



一维线性自由粒子的波函数

哈密顿量

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

波函数

$$\phi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}$$

能量

$$E = \frac{p_x^2}{2m}$$

对应于一个能量本征值，有两个本征态($p=0$)除外，因此其能级是二重简并的（所谓简并，也就是两个状态能量级别是相等的）。



一维无限深势阱



煤油灯科技

VICTORLAMP

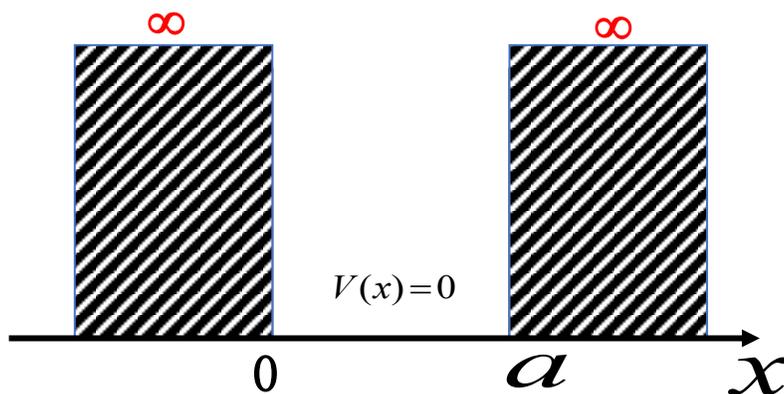
一维无限深势阱

在许多情况中，如金属中的电子、原子中的电子、原子核中的质子和中子等，粒子的运动有一个共同点，即粒子的运动都被限制在有限的空间范围内，或者说，粒子处于束缚态。

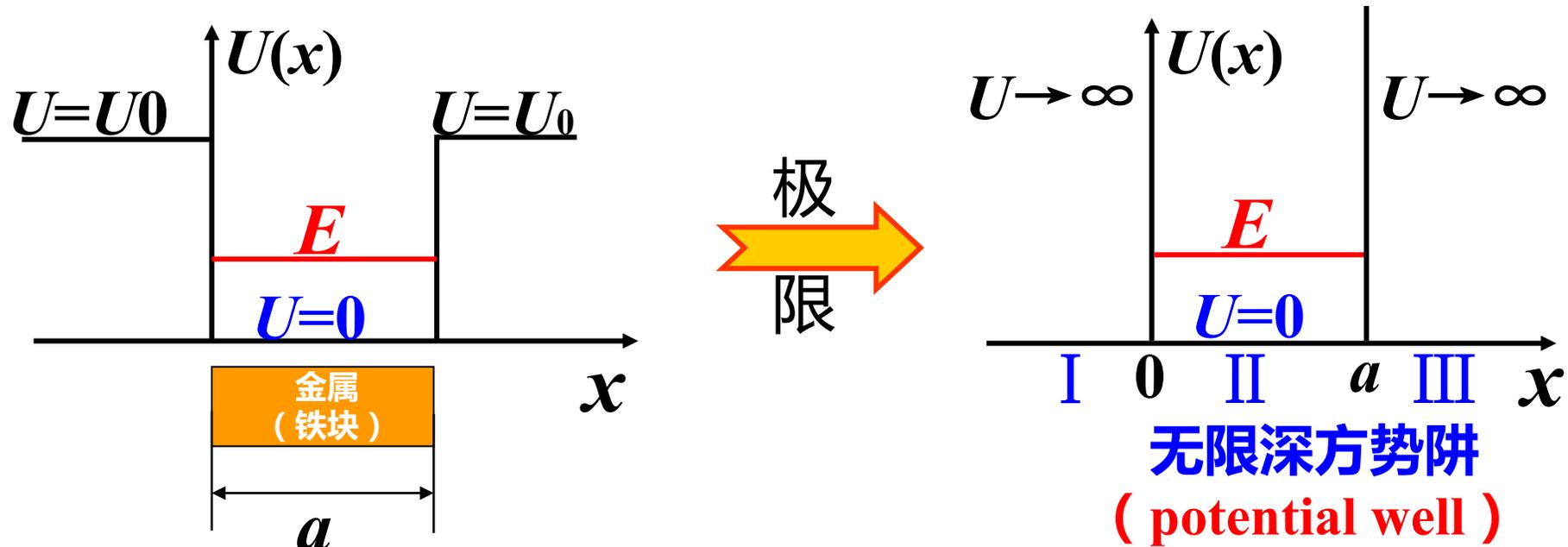
为了分析束缚态粒子的共同特点，我们可以将上述情况简单化、理想化，建立无限深势阱模型。

粒子的势能为：

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & x < 0, x > a \end{cases}$$



一维无限深势阱



是实际情况的极端化和简化。

粒子在势阱内受力为零，势能为零。在阱内自由运动在阱外势能为无穷大，在阱壁上受极大的斥力，不能到阱外。



一维无限深势阱波函数

哈密顿量

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \begin{cases} \infty & x \leq 0, \quad x \geq a \\ 0 & 0 < x < a \end{cases}$$

本征波函数

$$\psi_n = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \quad x \geq a \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x, & 0 < x < a \end{cases}$$

本征能量

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

被束缚在阱中的粒子的能量只能取一系列离散的数值，即能量是量子化的。



一维无限深势阱波函数分析

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

- 1、每个可能的值叫能量本征值
- 2、束缚态 粒子能量取值分立 (能级概念), 能量量子化

3、基态: $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu} \quad (n = 1)$

最低能量不为零--波粒二象性的必然结果, 因为静止的波是不存在的。



一维无限深势阱波函数分析

4、能级间距:

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{(n+1)^2 - n^2}{n^2} = \frac{2n+1}{n^2} \rightarrow \frac{2}{n} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

当n 很大时,能量趋于连续, 量子效应不明显。

5、通常表达式写为

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (n = 1, 2, \dots) \quad L--\text{阱宽}$$



一维无限深势阱波函数分析

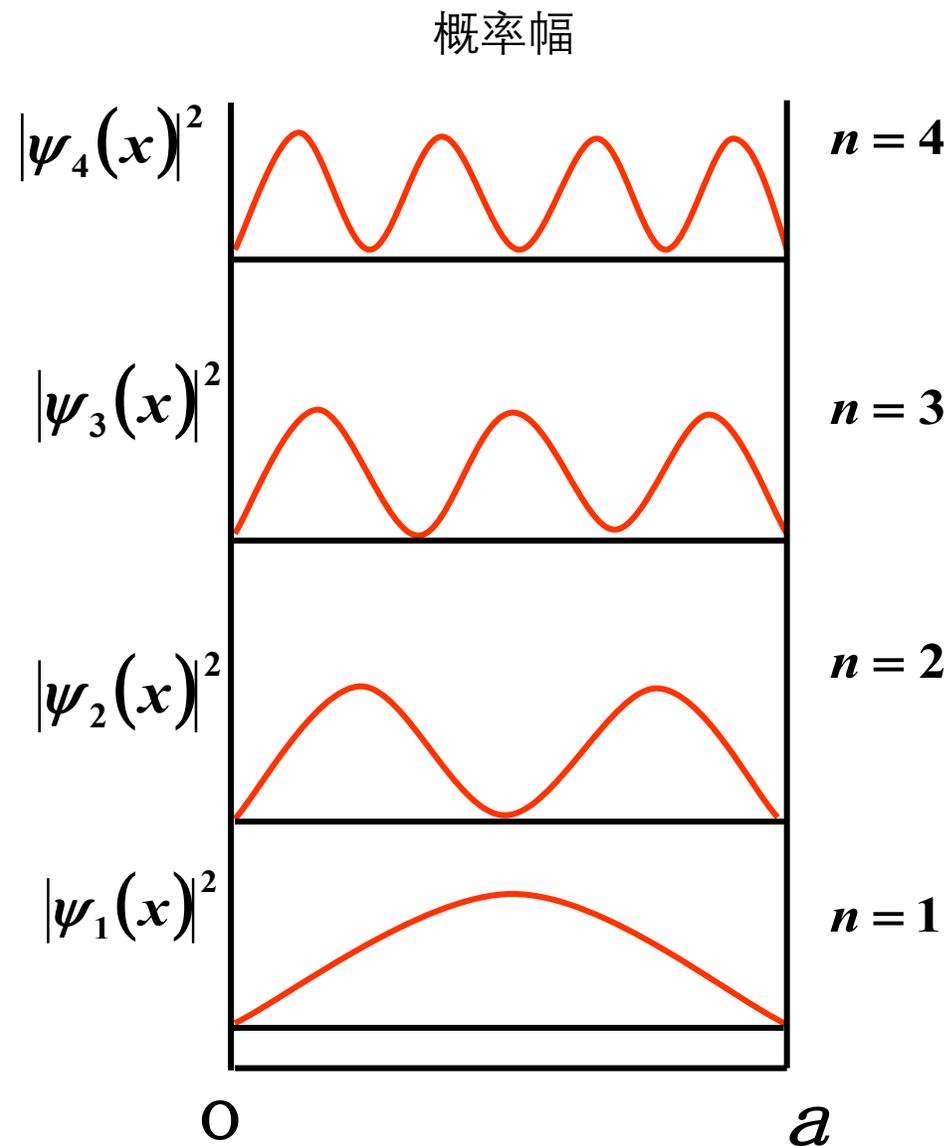
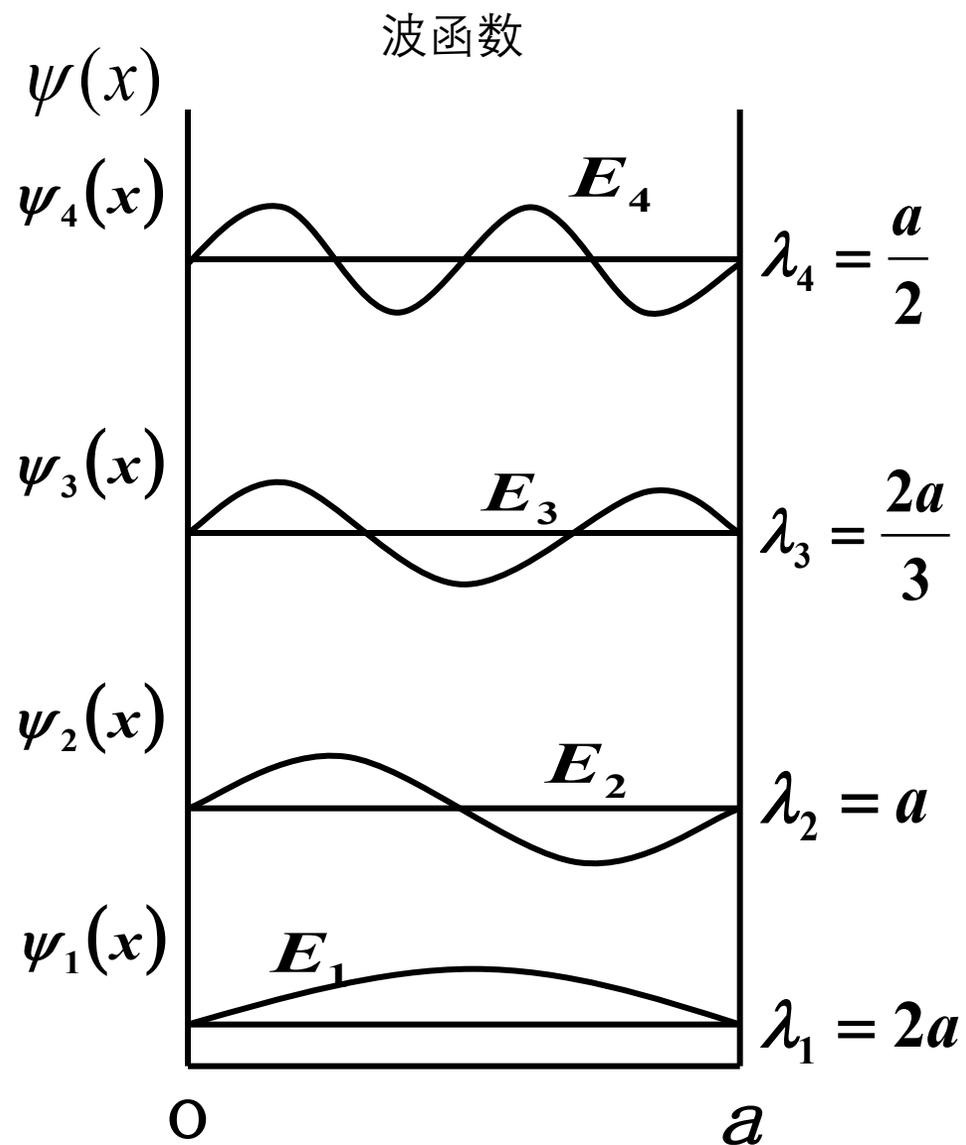
6、本征能量和本征函数的可能取值

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad \Phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x$$
$$P_n = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x \quad (n = 1, 2, \dots)$$

n	能级 E_n	几率 Φ_n	概率幅 P_n
1	$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$	$\Phi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi}{a} x$	$P_1 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi x}{a}$
2	$E_2 = 4E_1$	$\Phi_2 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi}{a} x$	$P_2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{2\pi}{a} x$
3	$E_3 = 9E_1$	$\Phi_3 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{3\pi}{a} x$	$P_3 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{3\pi}{a} x$



一维无限深势阱波函数分析



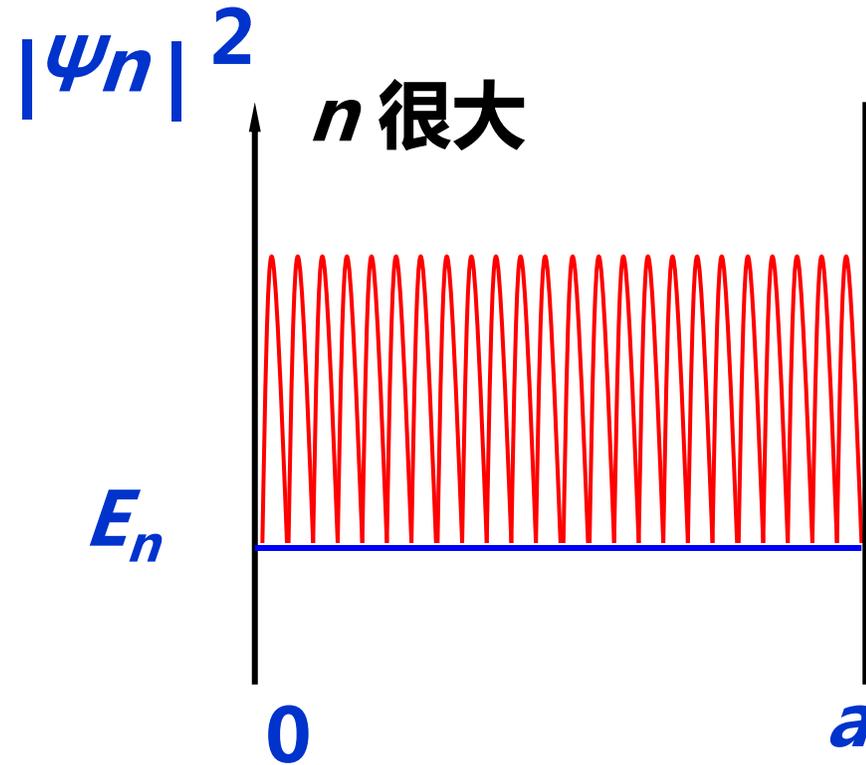
一维无限深势阱波函数分析

$n \rightarrow \infty$ 时,

量子 \rightarrow 经典

平均效应明显

符合玻尔对应原理



一维线性谐振子



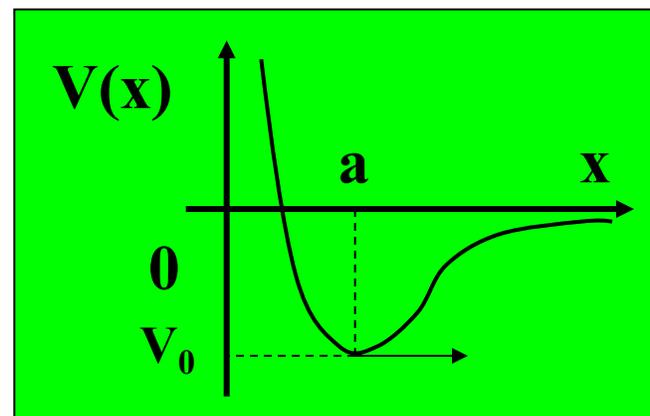
一维线性谐振子

线性谐振子是物理学中一个重要的模型，许多在平衡点附近振动的物理问题都可简化为线性谐振运动。一般说来，任何一个体系在稳定平衡点附近都可以近似地用线性谐振子来表示。

自然界广泛碰到简谐振动，任何体系在平衡位置附近的小振动，例如分子振动、晶格振动、原子核表面振动以及辐射场的振动等往往都可以分解成若干彼此独立的一维简谐振动。

一些复杂的势场下粒子的运动往往可以用线性谐振动来近似描述。例如双原子分子，两原子间的势 V 是二者相对距离 x 的函数，如图所示。在 $x = a$ 处， V 有一极小值 V_0 。

经典的弹簧谐振子



双原子相互作用势

一维线性谐振子波函数

线性谐振子的 Hamilton量：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

本征波函数

$$\begin{aligned}\psi_n &= A_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} & \xi &= \alpha x, \\ &= A_n H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2 / 2}\end{aligned}$$
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\alpha^2 x^2 / 2} H_n(\alpha x)$$

归一化系数

$$A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n \cdot n!}}$$

其中：

$$\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

本征能量

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

谐振子能量也只能取一系列离散的数值，即能量是量子化的。

值得注意的是，基态能量 $E_0 = (1/2) \hbar\omega \neq 0$ ，称为**零点能**。这与无穷深势阱中的粒子的基态能量不为零是相似的，是微观粒子波粒二象性的表现，能量为零的“静止的”波是没有意义的，零点能是量子效应。



一维线性谐振子波函数递推关系

厄密多项式的递推关系:

$$\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi)$$

$$H_{n+1} - 2\xi H_n + 2nH_{n-1} = 0$$

已知 $H_0 = 1, H_1 = 2\xi$

$$H_2 = 2\xi H_1 - 2nH_0$$

$$= 4\xi^2 - 2$$

基于厄密多项式的递推关系可以导出谐振子波函数 $\psi(x)$ 的递推关系:

$$x\psi_n(x) = \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right]$$

$$\frac{d}{dx} \psi_n(x) = \alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right]$$

下面给出前几个厄密多项式
具体表达式:

$$H_0 = 1$$

$$H_2 = 4\xi^2 - 2$$

$$H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$$

$$H_1 = 2\xi$$

$$H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$$

$$H_5 = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$$



一维线性谐振子波函数分析

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

其中： $\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$

$$\xi = \alpha x,$$

然而，量子情况与此不同

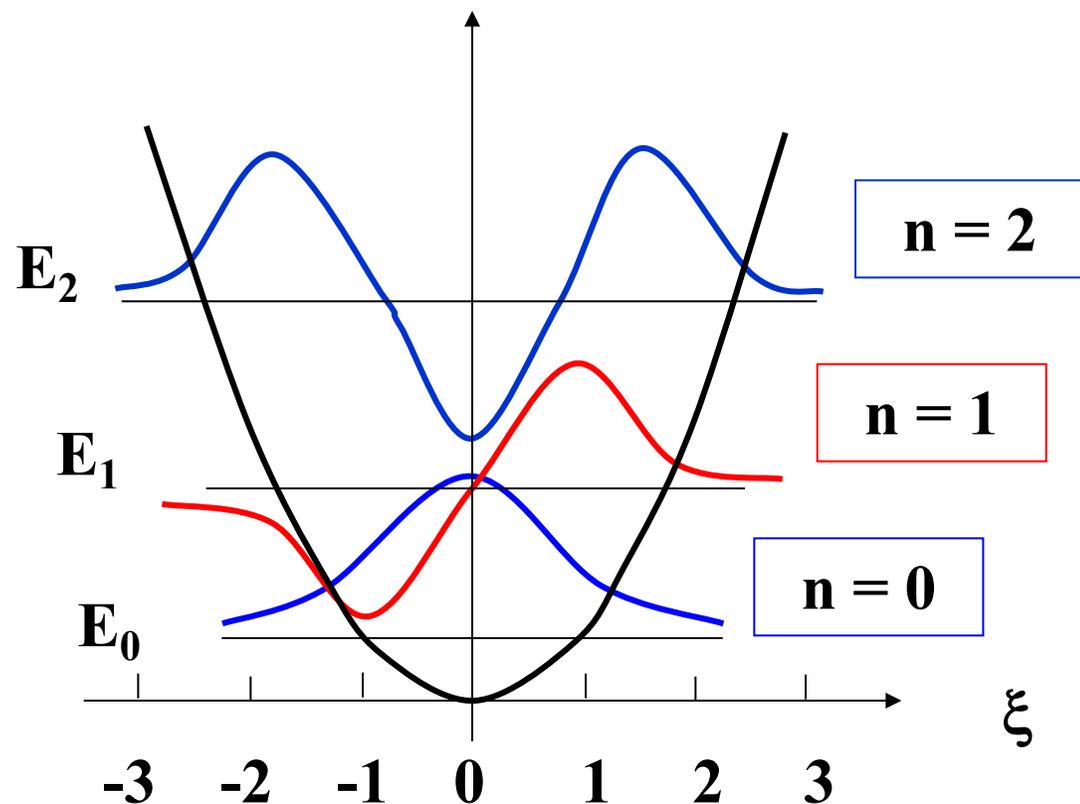
对于基态，其几率密度是：

$$\omega_0(\xi) = |\psi_0(\xi)|^2 = N_0^2 \exp[-\xi^2]$$

分析上式可知：

一方面表明在 $\xi = 0$ 处找到粒子的几率最大；

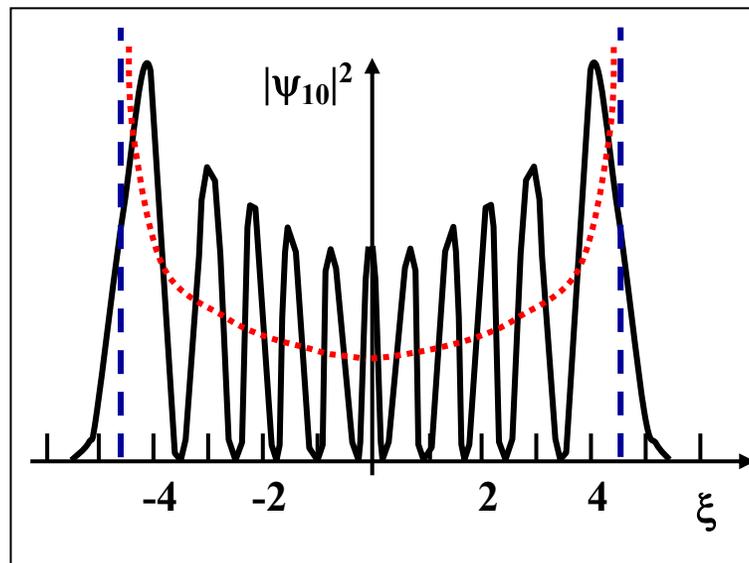
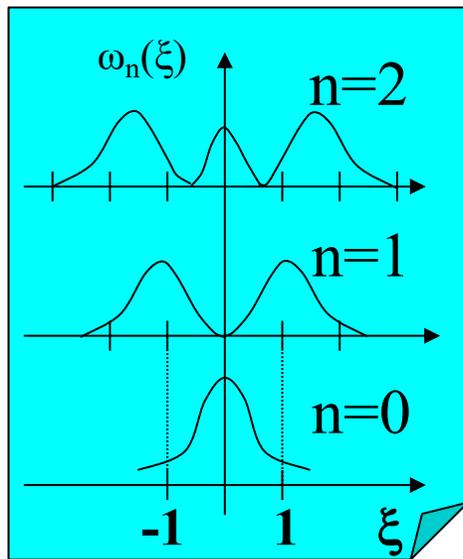
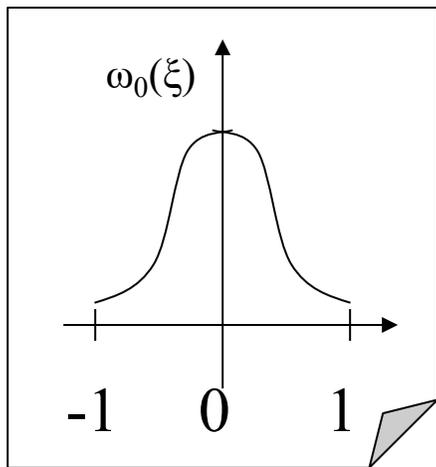
另一方面，在 $|\xi| \geq 1$ 处，**即在阱外找到粒子的几率不为零**，与经典情况完全不同。



一维线性谐振子波函数分析

几率分布

分析波函数可知量子力学的谐振子波函数 ψ_n 有 n 个节点，在节点处找到粒子的几率为零。而经典力学的谐振子在 $[-a, a]$ 区间每一点上都能找到粒子，没有节点。



$n \rightarrow \infty$ 时,

量子 \rightarrow 经典



平面转子和空间刚性转子

旋转与角动量在量子力学中具有独特的地位，平面转子和空间刚性转子用于分析原子电子的角动量和自旋。



平面转子的能量本征值与本征态

平面转子的哈密顿算符为：

$$\hat{H} = \frac{\hat{l}_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad \hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

平面转子的哈密顿算符本征值：

$$E_m = \frac{m^2 \hbar^2}{2I} \geq 0$$

相应的本征函数：

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

对应于一个能量本征值，有两个本征态($m=0$)除外，因此其能级是二重简并的。对应s/p/d/f等亚轨道电子的排布。



空间刚性转子的能量本征值与本征函数

空间转子的哈密顿算符为：

$$\hat{H} = \frac{\hat{l}^2}{2I}$$

空间刚性转子能量本征值：

$$E_l = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$$

相应的波函数为：

$$Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots; \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

能级是 $(2L+1)$ 度简并的。对应原子的外围电子分布。



量子力学中的基本概念



基本概念

能量的简并度：如果有多个状态，对应的能量等级是一样的大小，那么这些状态就是能量简并的，属于这个能量等级的状态的数量，也就是这个能量等级的简并度。

算符：算符是指作用在一个函数上得出另一个函数的运算符号。通俗地说，算符就是一种运算符号。

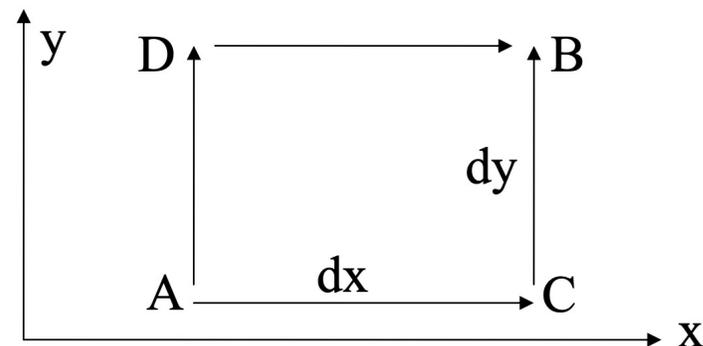
算符作用在一个函数 u 上，使之变成另一个新的函数，例如：

$$\hat{F}u = \nu, \quad \frac{d^2u}{dx^2} = \nu, \quad \frac{d}{dx} \text{ 就是微商算符。}$$

算符的对易关系：

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

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0 \quad \text{称算符 } \hat{F} \text{ 与 } \hat{G} \text{ 是对易的, 即} \quad \hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}$$



基本概念

算符的本征值和本征函数： 如果算符 \hat{F} 作用在一个函数 ψ ，结果等于 ψ 乘上一个常数 λ ：

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi$$

则称 λ 为 \hat{F} 的本征值， ψ 为属于 λ 的本征函数，上面方程叫本征方程。本征方程的物理意义：如果算符 \hat{F} 表示力学量，那么当体系处于 \hat{F} 的本征态 ψ 时，力学量有确定值，这个值就是 \hat{F} 在 ψ 态中的本征值。

若算符 \hat{F} 满足

厄米算符和厄米矩阵：

$$\int \psi^* \hat{F} \varphi d\tau = \int \varphi (\hat{F} \psi)^* d\tau \quad (1)$$

或者

$$\hat{F} = \hat{F}^\dagger$$

其中 φ 、 ψ 是任意波函数，则称算符 \hat{F} 为厄米算符。

厄米算符具有一些重要的性质：

- (1) 在任何状态下，厄米算符的本征值必为实数；
- (2) 在任何状态下平均值为实数的算符必为厄米算符；
- (3) 厄米算符的属于不同本征值的本征函数彼此正交；
- (4) 厄米算符的本征函数具有完备性。



基本概念

厄米算符和厄米矩阵：

作为一个例子，推导下面表示线性算子的矩阵的伴随项，确定其是否是厄米矩阵：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 2+i & 4 \\ 2-i & 3 & i \\ 4 & -i & 1 \end{bmatrix}$$

首先，确定矩阵的共轭复数 \mathbf{A}^* ，

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} 2 & 2-i & 4 \\ 2+i & 3 & -i \\ 4 & i & 1 \end{bmatrix}$$

然后，对 \mathbf{A}^* 进行转置得到

$$\mathbf{A}^\dagger = \begin{bmatrix} 2 & 2+i & 4 \\ 2-i & 3 & i \\ 4 & -i & 1 \end{bmatrix}$$

由于 $\mathbf{A}=\mathbf{A}^\dagger$ ，所以该矩阵是厄米矩阵。

请注意， \mathbf{A}^\dagger 中的每个元素都等于位于矩阵对角线对称位置的元素的共轭复数。



基本概念

厄米算符和厄米矩阵：

量子体系中的可观测量(力学量)用线性厄米算符来描述是量子力学的一个基本假设，其正确性应该由实验来判定。

“量子体系中的力学量用相应的线性厄米算符来描述”具有多方面的含义：

其一，算符的线性是状态叠加原理所要求的；

其二，实验上的可观测量总是实数，力学量相应的算符必须是厄米算符；实际上，这种要求是有些过分了，即使某个力学量的算符不是厄米算符，只要它的本征值是实数即可，但是这样做的结果会使本征矢变成超完备的，以致不便于使用。

其三，量子力学里测量值通常不是唯一确定的值，而是具有一定概率分布的一系列的值，这些测量值的平均值可用如下(ψ 已经归一化)来表示

$$\bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi d\mathcal{T}$$

其四，力学量之间的关系也可通过相应算符之间的关系(如对易关系)来反映出来。

基于以上几点，量子力学中的力学量用厄米算符来描述。



基本概念

厄米算符和厄米矩阵：

共轭 (Conjugate)

将一矩阵 A 的行与列互换，并取各矩阵元素的共轭复数，得一新矩阵，称为厄米特共轭，以 A^+ 表示。

厄米特矩阵 (Hermitian Matrix)

若一矩阵 H ，其厄米特共轭矩阵 H^+ 等于本身 H ，即 $H^+ = H$ ，则矩阵 H 称为厄米特矩阵（也叫自共轭矩阵）。

例如如下矩阵就是 Hermitian Matrix：

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2+i \\ 2-i & 1 \end{pmatrix}$$

在物理系统中，其可观察的物理量(例如坐标、动量、能量等等)，在量子力学中可视为一算符，此算符有对应的本征向量和本征值，**算符所对应的本征向量代表物理系统的状态，物理量的结果就是本征值。**

因此，如用矩阵表示算符，则一定是厄米矩阵，因为厄米矩阵的本征值为实数，所以也是可观察的量。



基本概念

若一n行n列的复数矩阵U满足 [1]

$$U^\dagger U = U U^\dagger = I_n$$

么正矩阵 (U矩阵) :

其中 I_n 为n阶单位矩阵, U^\dagger 为U的共轭转置, 则U称为酉矩阵 (又译作么正矩阵、么正矩阵。英文: Unitary Matrix, Unitary 是归一或单位的意思)。即, 矩阵U为酉矩阵, 当且仅当其共轭转置 U^\dagger 为其逆矩阵:

$$U^{-1} = U^\dagger$$

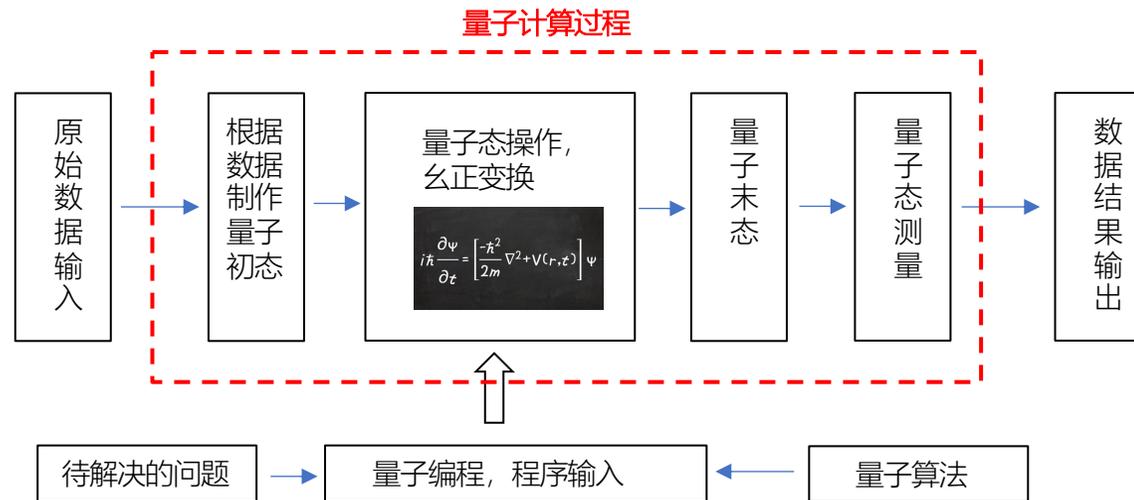
若酉矩阵的元素都是实数, 其即为正交矩阵。与正交矩阵G不会改变两个实向量的内积类似,

$$\langle Gx, Gy \rangle = \langle x, y \rangle$$

酉矩阵U不改变两个复向量的内积:

$$\langle Ux, Uy \rangle = \langle x, y \rangle$$

量子计算从输入到输出其实就是执行一系列的么正变换的过程。



基本概念

么正矩阵 (U矩阵) :

一个由 $n \times n$ 的矩阵 A 表示的算子, 如果它乘以它的共轭转置后得到一个单位矩阵, 那么就称这个矩阵 A 是酉矩阵,

$$AA^\dagger = I$$

换句话说, 如果一个矩阵 A 的共轭转置等于它的逆矩阵, 则该矩阵 A 是一个酉矩阵,

$$A^\dagger = A^{-1}$$

比如, 如下U矩阵:

$$A = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+i & 1-i \\ 1-i & 1+i \end{bmatrix}$$

该矩阵的共轭转置为:

$$A^\dagger = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1-i & 1+i \\ 1+i & 1-i \end{bmatrix}$$

所以有

$$\begin{aligned} AA^\dagger &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} (1+i)(1-i) + (1-i)(1+i) & (1+i)(1+i) + (1-i)(1-i) \\ (1-i)(1-i) + (1+i)(1+i) & (1-i)(1+i) + (1+i)(1-i) \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 2+2 & 2-2 \\ 2-2 & 2+2 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= I \end{aligned}$$



量子力学中的运算



量子力学与数学计算的基本对应

量子态 \longleftrightarrow 向量（或者叫矢量）

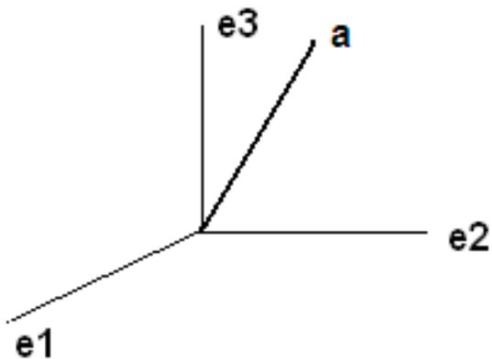
量子态跃迁 \longleftrightarrow 算符 \longleftrightarrow 矩阵（幺正矩阵）

所以说，量子力学的数学计算也就是向量和矩阵计算。



数学向量 (或者叫矢量)

三维矢量空间



任意矢量: \vec{a}

基矢: $\vec{e}_n, n=1,2,3$

基矢完备性: $\vec{a} = \sum_{n=1}^3 a_n \vec{e}_n$

内积: $\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{n,m} a_n b_m \vec{e}_n \cdot \vec{e}_m$

矢量模方: $\vec{a} \cdot \vec{a} \geq 0$

若基矢正交归一: $\vec{e}_n \cdot \vec{e}_m = \delta_{nm}$

有内积矩阵形式: $\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_n a_n b_n = \tilde{a} b$, 其中矩阵 $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$, \tilde{a} 是 $a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$ 的转置矩阵

$\tilde{a} = (a_1, a_2, a_3)$

矢量的分量 (矩阵元): $a_n = \vec{e}_n \cdot \vec{a}$

\vec{a} 是矢量的抽象形式或一般形式, 矩阵 a 是矢量 \vec{a} 在某个具体坐标系 (表象) 的表示。矩阵元与基矢的选取有关, 例如直角坐标与球坐标中的表示是不同的。

对矢量的运算, 例如平移, 旋转等 (算符): $\hat{T}\vec{a} = \vec{b}$, 仍然是 3 维空间中的一个矢量。

矢量的狄拉克(Dirac)符号(也叫“bra-ket 符号”)

右矢ket $|A\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix}$

左矢bra $\langle A| = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix}^* = (a_1^*, a_2^*, \dots, a_n^*) = \langle A|$

* 表示复共轭



矢量的狄拉克(Dirac)符号(也叫“bra-ket 符号”)

$$\langle B|A \rangle = (b_1^*, b_2^*, \dots, b_n^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix} = \sum_i^n b_i^* a_i$$

$$\begin{aligned} \langle B|A \rangle^* &= (\sum_i^n b_i^* a_i)^* = \sum_i^n (b_i^* a_i)^* = \sum_i^n a_i^* b_i \\ &= \langle A|B \rangle \end{aligned}$$



多维Hilbert 向量空间：量子态一般都是多维空间

进入具体表象，以 N 维离散空间为例。

基矢： $|n\rangle$, $n=1,2,\dots$

将三维向量空间扩展到
任意维数的复向量空间：

基矢完备性： $|a\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$, $\langle a| = \sum_n \langle n| a_n^*$ (矢量的具体表示)

内积： $\langle a|b\rangle = \sum_{n,m} a_n^* b_m \langle n|m\rangle$ 是一个复数。

=====
矢量模方： $\langle a|a\rangle \geq 0$ (只有定义 $\langle a|$ 与 $|a\rangle$ 互为复共轭，才能保证矢量模方大于零)

• 三维 ---》任意n有限
维，无限维，连续维

归一化矢量：如果定义 $|\tilde{a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle a|a\rangle}} |a\rangle$, 有 $\langle \tilde{a}|\tilde{a}\rangle = 1$, 称为归一化。

• 常矢量-----》复变函
数矢量

基矢正交归一： $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

内积矩阵形式： $\langle a|b\rangle = \sum_n a_n^* b_n = a^+ b$, 其中列矩阵 $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}$, 行矩阵 a^+ 是 $a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$

的厄米共厄 (转置复共轭) 矩阵 $a^+ = (a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_N^*)$ 。



多维Hilbert 向量空间

显然 $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$, $\langle a|\hat{F}|b\rangle = \langle b|\hat{F}^+|a\rangle^*$,

矢量的分量 (矩阵元): 将 $|a\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$ 两边左乘左矢 $\langle m|$, 有 $a_m = \langle m|a\rangle$

基矢完备性: $|a\rangle = \sum_n a_n |n\rangle = \sum_n \langle n|a\rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|a\rangle = \left(\sum_n |n\rangle \langle n| \right) |a\rangle$

由于 $|a\rangle$ 是任意矢量, 有

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1, \quad \text{此即是基矢的完备性条件。}$$

算符的表示 (矩阵形式):

设 $|b\rangle = \hat{F}|a\rangle$

$$\langle m|b\rangle = \langle m|\hat{F}|a\rangle = \sum_n \langle m|\hat{F}|n\rangle \langle n|a\rangle, \quad F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle$$

$$b_m = \sum_n F_{mn} a_n,$$

矩阵形式: $b = Fa$, F 是算符 \hat{F} 的表示, 是一个方阵, 矩阵元是 F_{mn} 。

厄米共轭算符 (左算符) 的表示:

由 $\langle b| = \langle a|\hat{F}^+$

$$\langle b|m\rangle = \langle a|\hat{F}^+|m\rangle = \sum_n \langle a|n\rangle \langle n|\hat{F}^+|m\rangle$$

$$b_m^* = \sum_n F_{nm}^+ a_n^*, \quad b_m = \sum_n (F_{nm}^+)^* a_n$$

比较有 $(F_{nm}^+)^* = F_{mn}$, $F_{nm}^+ = \tilde{F}_{nm}^*$, $F^+ = \tilde{F}^*$, 即 F^+ 是 F 的厄米共轭矩阵。

外积: $|a\rangle \langle b|$

$$\underline{\underline{=====}}$$

其表示是一个方阵 ($|a\rangle$ 是一列矩阵, $\langle b|$ 是一行矩阵), 故外积是一算符。实际上, 由于 $(|a\rangle \langle b|)|c\rangle = |a\rangle (\langle b|c\rangle)$, $|a\rangle \langle b|$ 的作用是把矢量 $|c\rangle$ 变成了另一个平行于 $|a\rangle$ 的矢量, 故外积

$|a\rangle \langle b|$ 确实是一个算符。它的具体表示是一个方阵, 矩阵元是

$$\underline{\underline{=====}}$$

$$(|a\rangle \langle b|)_{mn} = \langle m|a\rangle \langle b|n\rangle = \langle m|a\rangle \langle n|b\rangle^* = a_m b_n^*$$



狄拉克矢量内积和外积

内积:

如果有一个bra和一个ket并且它们的维度相同，可以将它们相乘（bra在左边，ket在右边）得到一个数字。假设 $\langle a|$ 和 $|b\rangle$ 都是n维的：

$$\langle a| = [a_1 \quad a_2 \quad \cdots \quad a_n], \quad |b\rangle = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

使用连接表示乘积，这意味着将它们紧挨着写在一起，中间没有任何符号。所以这个乘积写作 $\langle a|b\rangle$ 。通过挤压，竖线重合在一起得到 $\langle a|b\rangle$ ，这才是我们将使用的内积符号。

braket乘积的定义如下：

$$\langle a|b\rangle = [a_1 \quad a_2 \quad \cdots \quad a_n] \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_n b_n$$

外积： u 和 v 的外积表示为

$$|v\rangle \langle u|$$

假定 $u = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}$ ， $v = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \end{bmatrix}$ ，则 u 和 v 的外积为

$$\begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \end{bmatrix} [a_0^* \quad a_1^*] = \begin{bmatrix} a_0^* b_0 & a_1^* b_0 \\ a_0^* b_1 & a_1^* b_1 \end{bmatrix}$$

结果是一个矩阵，而不是一个复数^[6]。 u 和 v 的内积为

$$[a_0^* \quad a_1^*] \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \end{bmatrix} = a_0^* b_0 + a_1^* b_1$$

将外积 $|v\rangle \langle u|$ 看成一个运算 A 。如果 $A = |v\rangle \langle u|$

$\langle u|$ ，则 A 对状态 φ 的作用为

$$A\varphi = (|v\rangle \langle u|) \varphi = |v\rangle (\langle u|\varphi\rangle) = |v\rangle \langle u|\varphi\rangle$$



狄拉克矢量正交性

两个ket $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 是正交的当且仅当 $\langle a|b\rangle=0$ 。

令 $|a\rangle = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}$, $|b\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$, $|c\rangle = \begin{bmatrix} -2 \\ 6 \end{bmatrix}$, 我们计算 $\langle a|b\rangle$ 和 $\langle a|c\rangle$ 。

$$\langle a|b\rangle = \begin{bmatrix} 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = 3 + 2 = 5$$

$$\langle a|c\rangle = \begin{bmatrix} 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -2 \\ 6 \end{bmatrix} = -6 + 6 = 0$$

由于 $\langle a|b\rangle \neq 0$, 我们知道 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 不是正交的; 由于 $\langle a|c\rangle = 0$, 我们知道 $|a\rangle$ 和 $|c\rangle$ 是正交的。

$$\text{令 } |a\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}, |b\rangle = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}, \text{ 那么 } |a\rangle + |b\rangle = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \end{bmatrix}.$$

我们计算 $|a\rangle + |b\rangle$ 长度的平方。

$$\begin{aligned} \||a\rangle + |b\rangle\|^2 &= \begin{bmatrix} a_1 + b_1 & a_2 + b_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \end{bmatrix} \\ &= (a_1 + b_1)^2 + (a_2 + b_2)^2 \\ &= (a_1^2 + 2a_1b_1 + b_1^2) + (a_2^2 + 2a_2b_2 + b_2^2) \\ &= (a_1^2 + a_2^2) + (b_1^2 + b_2^2) + 2(a_1b_1 + a_2b_2) \\ &= \||a\rangle\|^2 + \||b\rangle\|^2 + 2\langle a|b\rangle \end{aligned}$$

显然, 这个结果等于 $\||a\rangle\|^2 + \||b\rangle\|^2$ 当且仅当 $2\langle a|b\rangle = 0$ 。回想我们之前的发现: 两个向量 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 是正交的当且仅

当 $\||a\rangle\|^2 + \||b\rangle\|^2 = \||a+b\rangle\|^2$ 。我们现在可以重述这个发现: 两个向量 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 是正交的当且仅当 $\langle a|b\rangle = 0$ 。



狄拉克矢量标准正交基

“标准正交”有两个含义：单位性和正交性。

在二维向量空间中，一组标准正交基由两个互相垂直的单位向量组成。更一般地，在n维向量空间中，一组标准正交基由n个两两垂直的单位向量组成。我们先来看看二维的情况，包含所有二维向量的集合记作 R^2 。 R^2 的一组标准正交基由两个互相垂直的单位向量 $|b_1\rangle$ 和 $|b_2\rangle$ 组成。因此，给定一对向量，想要检验它们是否组成一组标准正交基，我们必须首先检验它们是否是单位向量，然后检验它们是否是正交的。

可以使用braket乘积检验这两个条件。我们需要 $\langle b_1|b_1\rangle=1$ ， $\langle b_2|b_2\rangle=1$ ， $\langle b_1|b_2\rangle=0$ 。

标准的例子被称作标准基，取

$|b_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 和 $|b_2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ 。直接就可以检验bra-ket乘积的两个性质是满足的。尽管 $\left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right\}$ 是特别容易找到的一组基，但仍然存在无数种其他可能的选择，例

如，

$$\left\{ \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \right\} \text{ 和 } \left\{ \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{-\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \right\}$$



狄拉克矢量标准正交基

考虑测量粒子的自旋，我们观察了在垂直方向和水平方向测量的自旋。在垂直方向测量自旋的数学模型将会使用标准基，旋转测量装置的数学描述将会使用一组新的标准正交基。我们列举的三组二维的基都有非常重要的关于自旋的解释，因此我们没有使用字母来命名它们，而是使用与自旋方向相关的箭头来表示。下面是我们将会使用的符号：

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, |\rightarrow\rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, |\leftarrow\rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, |\nearrow\rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}, |\nwarrow\rangle = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

这三组基可以简洁地记作 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ 、 $\{|\rightarrow\rangle, |\leftarrow\rangle\}$ 和 $\{|\nearrow\rangle, |\nwarrow\rangle\}$ 。因为它们是标准正交基，我们有下面的bra-ket乘积的值。

$$\begin{aligned} \langle\uparrow|\uparrow\rangle &= 1 & \langle\downarrow|\downarrow\rangle &= 1 & \langle\uparrow|\downarrow\rangle &= 0 & \langle\downarrow|\uparrow\rangle &= 0 \\ \langle\rightarrow|\rightarrow\rangle &= 1 & \langle\leftarrow|\leftarrow\rangle &= 1 & \langle\rightarrow|\leftarrow\rangle &= 0 & \langle\leftarrow|\rightarrow\rangle &= 0 \\ \langle\nearrow|\nearrow\rangle &= 1 & \langle\nwarrow|\nwarrow\rangle &= 1 & \langle\nearrow|\nwarrow\rangle &= 0 & \langle\nwarrow|\nearrow\rangle &= 0 \end{aligned}$$



狄拉克矢量的标准正交基表示

给定一个向量和一组标准正交基，我们可以将这个向量表示成基向量的加权和。尽管在目前阶段看不出有什么用，但我们将后面看到这正是我们的数学模型的基本思想之一。先来看看二维的例子。R²中的任意向量|v⟩都可以写作|↑⟩的倍数加上|↓⟩的倍数。这等价于一个显然的事实，对于任意数字c和d，方程

$$\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

都有解。显然该方程有一个解x₁=c且x₂=d，并且这是唯一的解。

R²中的任意向量|v⟩是否都能表示成|→⟩的倍数加上|←⟩的倍数呢？等价地，下面的方程对于任意数字c和d是否都有解？

$$\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = x_1 |\rightarrow\rangle + x_2 |\leftarrow\rangle$$

首先，方程两边同时左乘一个bra ⟨←|，得到下面的方程。

$$\langle\leftarrow|\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \langle\leftarrow|(x_1|\rightarrow\rangle + x_2|\leftarrow\rangle)$$

接下来，对方程右边使用乘法分配律。

$$\langle\leftarrow|\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = x_1\langle\leftarrow|\rightarrow\rangle + x_2\langle\leftarrow|\leftarrow\rangle$$

我们知道方程右边的两个bra-ket乘积的值，第一个是1，第二个是0。这就告诉我们x₁等于 $\langle\leftarrow|\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}$ 。因此，我们只需要计算这个乘积。

$$\langle\leftarrow|\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)c - \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)d = \frac{c-d}{\sqrt{2}}$$

因此， $x_1 = \frac{c-d}{\sqrt{2}}$ 。

可以使用相同的方法求得x₂。我们在方程

$$\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = x_1|\rightarrow\rangle + x_2|\leftarrow\rangle$$

左右两边同时左乘 ⟨←|。

$$\langle\leftarrow|\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = x_1\langle\leftarrow|\rightarrow\rangle + x_2\langle\leftarrow|\leftarrow\rangle = x_1 \cdot 0 + x_2 \cdot 1$$

因此，

$$x_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)c + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)d = \frac{c+d}{\sqrt{2}}$$

这意味着，我们可以写出

$$\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \frac{c-d}{\sqrt{2}} |\rightarrow\rangle + \frac{c+d}{\sqrt{2}} |\leftarrow\rangle$$



狄拉克矢量的标准正交基表示

每个向量空间都有无限多个标准正交基。实际应用中，通常会选择易于运算的基集而不是某些特定的基集。这个基称为**计算基**。虽然基集可以不唯一，但集合中包含的基向量的数量是不变的。例如，假设复向量空间 C_n 中的基有 n 个线性独立的向量，那么 C_n 中的任意一个向量 $|x\rangle$ 都可以唯一地表示为这 n 个向量的线性组合：

$$|x\rangle = \sum_{i=0}^{n-1} c_i |v_i\rangle, c_i \text{ 是复数}$$

其中 $|v_i\rangle$ 是第 i 个基向量。基向量就是在特定基向量对应的位置上只有一个1的列向量

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \dots, |N-1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

在量子信息处理中，一般将量子位状态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 作为**标准计算基**，不过也可以使用其他计算基。例如，下列向量可以用作一组标准正交基

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

这些向量中的每一个都可以用标准的计算基来定义，它们一起构成备用基 $+/-$ 。

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) = |+\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle) - \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle) = |-\rangle$$

$+/-$ 基是一个完备的标准正交基。因此，任何量子位状态都可以用基状态 $+/-$ 来表示。 $+/-$ 基也被称为**哈达玛基**或**对角基** [6]。



狄拉克矢量矩阵乘法

给定一个多行多列的矩阵，我们将行视作bra，将列视作ket。在我们的例子中，A可以视作两个bra叠起来，也可以视作三个ket一个挨一个。同样，B可以视作三个bra叠起来，也可以视作两个ket一个挨一个。A与B的乘积使用了这种观点。乘积被记作AB，计算时将A看作bra的组合，将B看作ket的组合。

(记住先是bra，然后是ket。)

$$A = \begin{bmatrix} \langle a_1 | \\ \langle a_2 | \\ \vdots \\ \langle a_m | \end{bmatrix}, \text{ 其中}$$
$$\langle a_1 | = [1 \ -4 \ 2] \text{ 且 } \langle a_2 | = [2 \ 3 \ 0]. \quad B = [|b_1\rangle \ |b_2\rangle], \text{ 其中}$$
$$|b_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 7 \\ 6 \end{bmatrix} \text{ 且 } |b_2\rangle = \begin{bmatrix} 2 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

$$\begin{aligned} AB &= \begin{bmatrix} \langle a_1 | \\ \langle a_2 | \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |b_1\rangle & |b_2\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle a_1 | b_1 \rangle & \langle a_1 | b_2 \rangle \\ \langle a_2 | b_1 \rangle & \langle a_2 | b_2 \rangle \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 \times 1 - 4 \times 7 + 2 \times 6 & 1 \times 2 - 4 \times 5 + 2 \times 1 \\ 2 \times 1 + 3 \times 7 + 0 \times 6 & 2 \times 2 + 3 \times 5 + 0 \times 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -15 & -16 \\ 23 & 19 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

一般情况下，给定一个 $m \times r$ 的矩阵A和一个 $r \times n$ 的矩阵B，将A写成r维bra的组合，将B写成r维ket的组合。

$$A = \begin{bmatrix} \langle a_1 | \\ \langle a_2 | \\ \vdots \\ \langle a_m | \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} |b_1\rangle & |b_2\rangle & \cdots & |b_n\rangle \end{bmatrix}$$

$$AB = \begin{bmatrix} \langle a_1 | b_1 \rangle & \langle a_1 | b_2 \rangle & \cdots & \langle a_1 | b_j \rangle & \cdots & \langle a_1 | b_n \rangle \\ \langle a_2 | b_1 \rangle & \langle a_2 | b_2 \rangle & \cdots & \langle a_2 | b_j \rangle & \cdots & \langle a_2 | b_n \rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \langle a_i | b_1 \rangle & \langle a_i | b_2 \rangle & \cdots & \langle a_i | b_j \rangle & \cdots & \langle a_i | b_n \rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \langle a_m | b_1 \rangle & \langle a_m | b_2 \rangle & \cdots & \langle a_m | b_j \rangle & \cdots & \langle a_m | b_n \rangle \end{bmatrix}$$



量子态的矩阵表示

量子态矩阵表示的实质是选取态空间的一套基底后 用量子态的分量来表示量子态。

对于给定的力学量 A ， $\{\varphi_n\}$ 是已知的确定的函数集，故 $\{c_n\}$ 包含 $\psi(\vec{r})$ 的所有信息，可用

分量 $\{c_n\}$ 表示态 $\psi(x)$ ，记为一列矩阵

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

这种表示方式和用分量表示矢量一样，可见称量子态 ψ 为态矢是非常贴切的。因为在这种表示方式中，态空间的基底已取定为 A 的本征态，故称之为 A 表象。

态矢量的线性迭加运算规则和列矩阵的线性迭加运算规则一样。例如作为基底的正交归一态矢有矩阵形式

$$\varphi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \varphi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad \varphi_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (7.6)$$



量子态的矩阵表示

任意态是上述基底迭加

$$\psi = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} + \cdots + c_n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} + \cdots \quad (7.7)$$

每一个态矢都有一个相应的共轭态矢:

$$\psi^+ = (c_1^* \quad c_2^* \quad \cdots \quad c_n^* \quad \cdots) \quad (7.8)$$

态矢和共轭态矢是一一对应的，分别都包含了量子态的所有信息，都可以表示量子态。但是数学上态矢和共轭态矢是两个不同性质的量，一个是列矢量，另一个是行矢量，它们之和是没有意义的。引入共轭态矢是为了方便地表示内积。若基底是正交归一的，则 ψ 与另

一态矢 ϕ （它的分量为 $\{b_n\}$ ）的内积 (ψ, ϕ) 可表示成

$$\psi^+ \phi = (c_1^* \quad c_2^* \quad \cdots \quad c_n^* \quad \cdots) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_n c_n^* b_n \quad (7.9)$$

共轭态矢和态矢相乘的规则和矩阵相乘的规则一样，它们的积是两个态的内积。



量子算符的矩阵表示

设算符 \hat{F} 作用态 ψ 上得到态 ϕ ,

$$\hat{F}\psi = \phi \quad (7.10)$$

计算 φ_n 与上式的内积,

$$(\varphi_n, \hat{F}\psi) = (\varphi_n, \phi) \quad (7.11)$$

$$\sum_l c_l (\varphi_n, \hat{F}\varphi_l) = \sum_l b_l (\varphi_n, \varphi_l) = b_n \quad (7.12)$$

定义矩阵 F , 使其矩阵元为

$$F_{mn} = (\varphi_m, \hat{F}\varphi_n) \quad (7.13)$$

则前式可写成

$$\sum_l F_{nl} c_l = b_n \quad (7.14)$$

用矩阵表示即

$$F\psi = \phi \quad (7.15)$$

可见, 当量子态用矩阵表示时, 算符亦可表示为一矩阵 (方阵) F , 它对任意态矢列矩阵

=====

的作用等于算符矩阵乘以该态矢列矩阵。称 F 为算符 \hat{F} 在 A 表象中的矩阵。

=====



量子计算的Pauli矩阵

四个常用的矩阵，我们称之为Pauli矩阵

$$\sigma_0 \equiv I \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_1 \equiv \sigma_x \equiv X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_2 \equiv \sigma_y \equiv Y \equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_3 \equiv \sigma_z \equiv Z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

在数学和数学物理中，泡利矩阵是一组三个 2×2 的正厄米复矩阵，以物理学家沃尔夫冈·泡利命名的。

在量子力学中，它们出现在泡利方程中描述磁场和自旋之间相互作用的一项。所有的泡利矩阵都是厄米矩阵，它们和单位矩阵 I （有时候又被称为第零号泡利矩阵 σ_0 ），的线性张成为 2×2 厄米矩阵的向量空间。



量子计算的Pauli量子门

泡利-X 门

泡利-X 门操作一个量子比特。这个门相当于经典的逻辑非门。它将 $|0\rangle$ 换成 $|1\rangle$ 并且 $|1\rangle$ 换成 $|0\rangle$ 。这个门可以用一个 泡利 X 矩阵表示：

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

泡利-Y 门

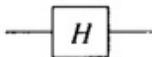
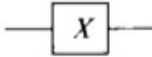
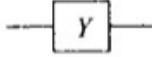
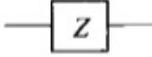
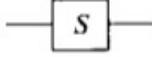
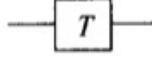
泡利-Y 门操作一个量子比特。这个门可以用一个 泡利 Y 矩阵表示：

$$Y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}.$$

泡利-Z 门

泡利-Z 操作一个量子比特。这个门保留基本状态 $|0\rangle$ 不变,并且将 $|1\rangle$ 换成 $-|1\rangle$ 。这个门可以用一个 泡利 Z 矩阵表示：

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Hadamard 门		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
Pauli-X 门		$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Y 门		$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Z 门		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
相位门		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$
$\frac{\pi}{8}$ 门		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$

常用但量子比特的名称、符号和酉矩阵。



e休, 爱编程的葫芦娃

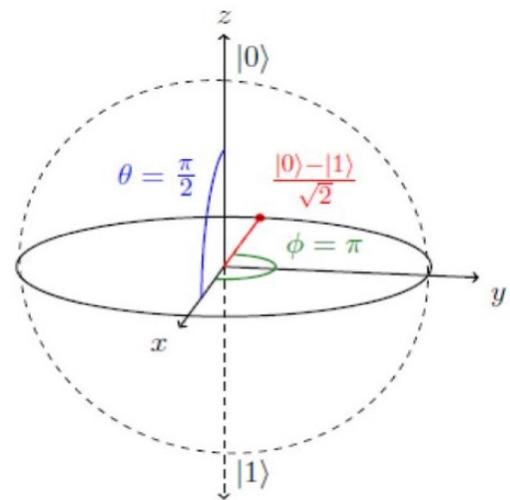
Email: exiu@victorlamp.com



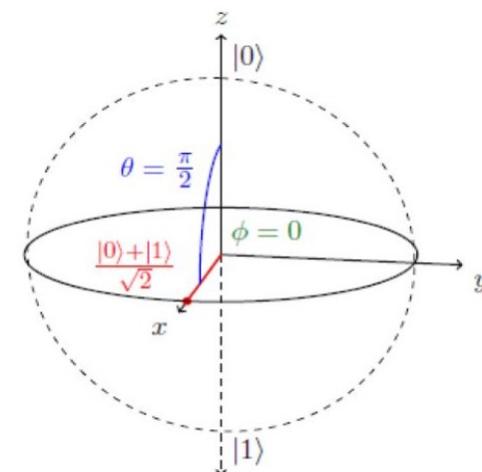
VICTORLAMP

Shenzhen VictorLamp Technologies CO. Ltd.

<http://www.victorlamp.com>



(b) Basis state $|1\rangle$



(a) Basis state $|0\rangle$

练习示例

练习示例1

例1：证明，在 \hat{l}_z 本征态 Y_{lm} 下，
 $\overline{l_x} = \overline{l_y} = 0$

证法一：

$$\because [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar\hat{l}_x$$

$$\therefore \overline{(\Delta l_y)^2} \cdot \overline{(\Delta l_z)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \overline{l_x^2} \quad \text{利用测不准关系}$$

由于在 \hat{l}_z 本征态 Y_{lm} 中，测量力学量 l_z 有确定值，

$$\overline{(\Delta l_z)^2} = 0$$

$$\overline{(\Delta l_y)^2} \cdot 0 \geq \frac{\hbar^2}{4} \overline{l_x^2} \Rightarrow 0 \geq \frac{\hbar^2}{4} \overline{l_x^2}$$

欲保证不等式成立，必有：

$$\overline{l_x} = 0$$

同理： $\overline{l_y} = 0$



练习示例1

法二： $[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar\hat{l}_x$ 利用求平均值的方法

$$\Rightarrow \hat{l}_x = \frac{1}{i\hbar}[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y)$$

$$\begin{aligned}\bar{l}_x &= \frac{1}{i\hbar} \int Y_{lm}^* (\hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y) Y_{lm} d\Omega \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int Y_{lm}^* \hat{l}_y \hat{l}_z Y_{lm} d\Omega - \frac{1}{i\hbar} \int Y_{lm}^* \hat{l}_z \hat{l}_y Y_{lm} d\Omega \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int Y_{lm}^* \hat{l}_y (\hat{l}_z Y_{lm}) d\Omega - \frac{1}{i\hbar} \int (\hat{l}_z Y_{lm})^* \hat{l}_y Y_{lm} d\Omega \\ &= \frac{1}{i\hbar} m\hbar \int Y_{lm}^* \hat{l}_y Y_{lm} d\Omega - \frac{1}{i\hbar} m\hbar \int Y_{lm}^* \hat{l}_y Y_{lm} d\Omega \\ &= \frac{m}{i} \bar{l}_y - \frac{m}{i} \bar{l}_y = 0\end{aligned}$$

同理： $\bar{l}_y = 0$



练习示例2

例2： \hat{l}^2, \hat{l}_z 共同本征态 Y_{lm} 下，求测不准关系： $\overline{(\Delta l_x)^2} \cdot \overline{(\Delta l_y)^2} = ?$

$$\text{解：} \quad \overline{(\Delta l_x)^2} = \overline{l_x^2} - \overline{l_x}^2$$

$$\overline{(\Delta l_y)^2} = \overline{l_y^2} - \overline{l_y}^2$$

$$\text{由例1可知：} \quad \overline{l_x} = \overline{l_y} = 0$$

$$\overline{l_x^2} = \int Y_{lm}^* \hat{l}_x^2 Y_{lm} d\Omega$$

$$i\hbar \hat{l}_x = [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = \hat{l}_y \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{l}_y$$

$$\text{等式两边右乘} \quad \hat{l}_x$$

$$\begin{aligned} i\hbar \hat{l}_x^2 &= \hat{l}_y \hat{l}_z \hat{l}_x - \hat{l}_z \hat{l}_y \hat{l}_x = \hat{l}_y (\hat{l}_x \hat{l}_z + i\hbar \hat{l}_y) - \hat{l}_z \hat{l}_y \hat{l}_x \\ &= \hat{l}_y \hat{l}_x \hat{l}_z + i\hbar \hat{l}_y^2 - \hat{l}_z \hat{l}_y \hat{l}_x \end{aligned}$$



练习示例2

$$i\hbar\hat{l}_x^2 = \hat{l}_y\hat{l}_x\hat{l}_z + i\hbar\hat{l}_y^2 - \hat{l}_z\hat{l}_y\hat{l}_x$$

将上式两边在 Y_{lm} 态下求平均：

$$i\hbar\int Y_{lm}^*\hat{l}_x^2Y_{lm}d\Omega = \int Y_{lm}^*\hat{l}_y\hat{l}_x\hat{l}_zY_{lm}d\Omega + i\hbar\int Y_{lm}^*\hat{l}_y^2Y_{lm}d\Omega - \int Y_{lm}^*\hat{l}_z\hat{l}_y\hat{l}_xY_{lm}d\Omega$$

$$i\hbar\overline{\hat{l}_x^2} = m\hbar\int Y_{lm}^*\hat{l}_y\hat{l}_xY_{lm}d\Omega + i\hbar\overline{\hat{l}_y^2} - \int (\hat{l}_zY_{lm})^*\hat{l}_y\hat{l}_xY_{lm}d\Omega$$

$$= m\hbar\int Y_{lm}^*\hat{l}_y\hat{l}_xY_{lm}d\Omega + i\hbar\overline{\hat{l}_y^2} - m\hbar\int Y_{lm}^*\hat{l}_y\hat{l}_xY_{lm}d\Omega$$

$$= i\hbar\overline{\hat{l}_y^2}$$

$$\Rightarrow \overline{\hat{l}_x^2} = \overline{\hat{l}_y^2}$$

$$\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = \hat{l}^2 \Rightarrow \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2$$

将上式两边在 Y_{lm} 态下求平均：

$$\int Y_{lm}^*(\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2)Y_{lm}d\Omega = \int Y_{lm}^*(\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2)Y_{lm}d\Omega$$

$$= [l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2]\int Y_{lm}^*Y_{lm}d\Omega = l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2$$



练习示例2

$$\int Y_{lm}^* (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2) Y_{lm} d\Omega = l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2$$

$$\overline{l_x^2} + \overline{l_y^2} = l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2$$

$$\therefore \overline{l_x^2} = \overline{l_y^2}$$

$$\therefore \overline{l_x^2} = \overline{l_y^2} = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2$$

则测不准关系:

$$\overline{(\Delta l_x)^2} = \overline{l_x^2} - \overline{l_x}^2 = \overline{l_y^2}$$

$$\overline{(\Delta l_y)^2} = \overline{l_y^2} - \overline{l_y}^2 = \overline{l_x^2}$$

$$\begin{aligned}\overline{(\Delta l_x)^2} \cdot \overline{(\Delta l_y)^2} &= \overline{l_x^2} \cdot \overline{l_y^2} \\ &= \frac{1}{4}[l(l+1) - m^2]^2 \hbar^4\end{aligned}$$



练习示例3

例3：一电荷为 e 的一维线性谐振子受恒定弱电场 ε 作

用，电场沿正 x 方向，其势场为：

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - e \varepsilon x$$

求能量本征值和本征函数。

解： 定态Schrödinger方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 - e \varepsilon x\right) \psi = E \psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \left(x - \frac{e \varepsilon}{\mu \omega^2}\right)^2 \psi = \left(E + \frac{e^2 \varepsilon^2}{2\mu \omega^2}\right) \psi$$

$$\text{令} \quad x' = x - \frac{e \varepsilon}{\mu \omega^2} \quad E' = E + \frac{e^2 \varepsilon^2}{2\mu \omega^2}$$



练习示例3

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x'^2 \psi = E' \psi$$

$$\begin{cases} E'_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, & n = 0, 1, 2, \dots \\ \psi_n(\alpha x') = N_n H_n(\alpha x') e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x'^2} \end{cases}$$

所求的解为：

$$\begin{cases} E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{e^2 \varepsilon^2}{2\mu\omega^2}, & n = 0, 1, 2, \dots \\ \psi_n[\alpha(x - \frac{e\varepsilon}{\mu\omega^2})] = N_n H_n[\alpha(x - \frac{e\varepsilon}{\mu\omega^2})] e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 (x - \frac{e\varepsilon}{\mu\omega^2})^2} \end{cases}$$



练习示例4

例4、若在一维无限深势阱中运动的粒子的量子数为 n ，求：

- (1) 距势阱内左壁 $1/4$ 宽度内发现粒子的几率；
- (2) n 取何值时，在此区域内找到粒子的几率最大？
- (3) 当 $n \rightarrow \infty$ 时，这个几率的极限是多少？

这个结果与经典情况比较，说明了什么问题？



练习示例4

例4. 解：一维无限深势阱本征值和本征函数

$$\begin{cases} E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, & n = 1, 2, \dots \\ \psi_n = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \quad x \geq a \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x, & 0 < x < a \end{cases} \end{cases}$$

距势阱内左壁1/4宽度内发现粒子的几率

$$\int_0^{a/4} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^{a/4} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = \frac{1}{4} - \frac{1}{2n\pi} \sin \frac{n\pi}{2}$$

当 $n=3$ 取最大值 $\frac{1}{4} + \frac{1}{6\pi}$

当 n 趋于无穷时此值为 $1/4$ 说明粒子均匀分布于势阱内和经典结果一致。



练习示例5

例5、一约束在平面上沿一定半径绕 z 轴（垂直平面）

转动的平面子，处于 $\Phi = A \cos^2 \varphi$ 态中，试确定在此态中能量及角动量的可能取值及其相应的几率，并求平均值。



练习示例5

例5. 解：平面刚性转子体系能量的本征值和本征函数为

$$E_m = \frac{m^2 \hbar^2}{2I} \quad \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad m = 0, \pm 1, \dots$$

$$\Phi = A \cos^2 \varphi = \frac{A\sqrt{2\pi}}{2} \Phi_0 + \frac{A\sqrt{2\pi}}{4} (\Phi_2 + \Phi_{-2})$$

$$\because \sum_n |C_n|^2 = 1 \quad \text{求得} \quad A = \sqrt{\frac{4}{3\pi}}$$

\therefore

$$C_0 = \sqrt{\frac{2}{3}} \quad C_2 = C_{-2} = \sqrt{\frac{1}{6}}$$



练习示例5

∴能量的可能取值为

相应几率为 $\frac{2}{3}$ $\frac{1}{3}$

$$E_0 = 0 \quad E_{\pm 2} = \frac{2\hbar^2}{I}$$

$$\overline{E} = \frac{2\hbar^2}{3I}$$

角动量的可能值为： 0 ， $2\hbar$ ， $-2\hbar$

相应的几率为 $\frac{2}{3}$ ， $\frac{1}{3}$ ， $\frac{1}{3}$

$$\overline{L_z} = \sum_n |C_n|^2 L_z = 0$$

