从泡利矩阵解析量子力学中的几类典型计算问题*

王丽华

（山西大同大学物理与电子科学学院　山西 大同　037009）

（收稿日期：2017－07－03）

摘　要：通过泡利矩阵分别解析量子力学中的几类典型计算问题，即算符的本征值和本征函数、么正变换矩阵、力学量的期望值及可能取值的概率.

关键词：泡利矩阵　么正变换　算符　力学量　期望值

量子力学不仅是物理学中的重要基础理论之一，而且在材料学、化学、宇宙学和生物学等有关学科和众多近代技术中也得到了广泛应用[1]. 本文利用泡利矩阵解析了量子力学中的几类典型计算问题，较好地理解和诠释了量子力学中的一些基本概念和原理.

1　求算符的本征值和所属的本征函数

求 $\hat{\sigma}_x$，$\hat{\sigma}_y$ 及 $\hat{\sigma}_z$ 的本征值和所属的本征函数.

解析：设

$$\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

其本征值为 λ，本征函数为

$$\varphi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

则 $\hat{\sigma}_x$ 的本征值方程为

$$\hat{\sigma}_x\varphi=\lambda\varphi$$

即

$$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

移项得

$$\begin{pmatrix}-\lambda&1\\1&-\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=0$$

上式是一个线性齐次代数方程组，它有非零解的条件是系数行列式等于零，即

$$\begin{vmatrix}-\lambda&1\\1&-\lambda\end{vmatrix}=0$$

解得

$$\lambda=\pm1$$

把 $\lambda=1$ 代入本征值方程

$$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

解得

$$a=b$$

即

$$\varphi_1=\begin{pmatrix}a\\a\end{pmatrix}$$

利用波函数的归一化条件

$$\varphi_1^+\varphi_1=1$$

得到

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

即

$$\varphi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$$

把 $\lambda=-1$ 代入本征值方程

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

解得

$$-a=b$$

即

$$\varphi_{-1}=\begin{pmatrix}a\\-a\end{pmatrix}$$

利用波函数的归一化条件

$$\varphi_{-1}^+\varphi_{-1}=1$$

得到

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

即

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

同理可得

* 2016 年山西大同大学教学改革创新项目资助的课题，项目编号：XJG2016204

作者简介：王丽华（1976－　），女，博士，教授，研究方向为物理教学与计算物理.

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$$

其本征值为 ± 1,对应的本征函数为

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} \qquad \psi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -\mathrm{i} \end{pmatrix}$$

设

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

其本征值为 ± 1,对应的本征函数为

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \chi_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

本题体现了量子力学中的一个基本假定:如果算符 $\hat{F}$ 表示力学量 F,那么当体系处于 $\hat{F}$ 的本征态 φ 时,力学量 F 有确定值,这个值就是 $\hat{F}$ 在 φ 态中的本征值.

求解算符的本征值和所属的本征函数问题的一般步骤为:

(1) 根据算符的矩阵表示 F_{mn}(m 行 n 列的矩阵),设算符的本征值为 λ(λ 为实数),本征函数为 φ_n(n 行 1 列的矩阵),并写出算符的本征值方程 $\hat{F}_{mn}\varphi_n = \lambda\varphi_n$.

(2) 将等号右边部分移至左边,得到一个线性齐次代数方程组

$$\sum_n (F_{mn} - \lambda\delta_{mn})\varphi_n = 0 \quad m = 1,2,\cdots$$

式中克罗内克 δ 符号(Kronecker delta symbol)δ_{mn} 具有下面的性质:

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{当 } m = n \text{ 时} \\ 0 & \text{当 } m \neq n \text{ 时} \end{cases}$$

(3) 这个线性齐次代数方程组有非零解的条件是系数行列式等于零,即

$$\det|F_{mn} - \lambda\delta_{mn}| = 0$$

上式称为久期方程. 求解久期方程可以得到一组 λ 值:$\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n,\cdots$,它们就是 F 的本征值. 把求得的 λ_i 分别代入线性齐次代数方程组就可以求得与这 λ_i 对应的本征矢 $\varphi_i(i = 1,2,\cdots,n,\cdots)$.

(4) 根据波函数的归一化条件 $\varphi_i^{+}\varphi_i = 1$,把求得的 φ_i 归一化. 这样就把解微分方程 $\sum_n (F_{mn} - \lambda\delta_{mn})\varphi_n = 0$ 求本征值的问题变为求解久期方程的根的问题.

2　求算符的对角化矩阵及使其对角化的幺正变换矩阵

将矩阵 $\hat{\sigma}_x$ 对角化,并求出使其对角化的幺正变换矩阵.

解析:对角化的矩阵为

$$\hat{\sigma}'_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

对应的本征函数为

$$\varphi'_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \varphi'_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

由上题可知,在 σ_z 表象

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

对应的本征函数为

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \varphi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

设使得 $\hat{\sigma}_x$ 对角化的幺正变换矩阵为

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

其中

$$S_{11} = \langle \varphi'_1 | \varphi_1 \rangle = (1 \quad 0)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$S_{12} = \langle \varphi'_1 | \varphi_{-1} \rangle = (1 \quad 0)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$S_{21} = \langle \varphi'_{-1} | \varphi_1 \rangle = (0 \quad 1)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$S_{22} = \langle \varphi'_{-1} | \varphi_{-1} \rangle = (0 \quad 1)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

故

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

本题体现了量子力学中的一个重要结论:算符在其自身表象是一个对角矩阵,对角元素为其本征值,且算符的表象变换不改变它的本征值.

求解算符的对角化矩阵及使其对角化的幺正变换矩阵的一般步骤为:

(1) 将算符的本征值 $\lambda_i(i = 1,2,\cdots)$ 依次排列

为矩阵的对角元素,其他非对角元素全部为零;

(2) 将算符的本征值 λ_i 对应的本征矢量 $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$ 并列就可得到幺正变换矩阵 S.

3　算符和波函数的表象变换

试在 σ_x 表象中,求 σ_z 的本征态.

解析:在 σ_z 表象

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

σ_x 的本征值与本征态为

$$\lambda = 1 \qquad \varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda = -1 \qquad \varphi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

将 φ_1, φ_2 并列得到由 σ_z 表象到 σ_x 表象的幺正变换矩阵

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

在 σ_x 表象,σ_z 的矩阵为

$$\sigma'_z = S^+ \sigma_z S =$$

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

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

σ'_z 的本征值与本征态为

$$\lambda = 1$$

$$\chi'_1 = S^+ \chi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda = -1$$

$$\chi'_{-1} = S^+ \chi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} =$$

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

本题运用了量子力学中力学量和态的表象变换公式

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

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

满足 $S^{-1} = S^+$ 的矩阵称为幺正矩阵,由幺正矩阵所表示的变换称为幺正变换. 所以由一个表象到另一个表象的变换是幺正变换.

解这类型题直接代公式就可以.

4　求力学量的期望值及可能取值的概率

电子受哈密顿量 $\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{M}}_S \cdot \hat{B}$ 的作用,其中磁场 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 轴正向,$\hat{\boldsymbol{M}}_S = -\dfrac{e}{m}\hat{\boldsymbol{S}}$ 为电子的自旋磁矩. 自旋用泡利矩阵表示

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \qquad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(1) $t=0$ 时,电子自旋沿正 x 方向. 求 $t>0$ 时,自旋 $\hat{\boldsymbol{S}}$ 的期望值;

(2) 求 $t>0$ 时,电子自旋沿负 y 方向的概率[2,3].

解析:(1) $\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{M}}_S \cdot \hat{B} = \dfrac{e}{m}\hat{\boldsymbol{S}} \cdot \boldsymbol{B} = \dfrac{eB}{m}\hat{S}_z$

令 $\psi(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}Et}{\hbar}}\psi$,$\psi$ 满足定态薛定谔方程

$$\frac{eB}{m}\hat{S}_z\psi = E\psi$$

方程的解为

$$E_1 = \frac{e\hbar B}{2m} \qquad \psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$E_2 = -\frac{e\hbar B}{2m} \qquad \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

因此任意 t 时刻的波函数为

$$\psi(t) = c_1 \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E_1 t}{\hbar}}\psi_1 + c_2 \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E_2 t}{\hbar}}\psi_2$$

由
$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

得到
$$c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

令
$$\omega = \frac{eB}{2m}$$

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \end{pmatrix}$$

$$\bar{S}_x = \psi^+(t)\hat{S}_x\psi(t) =$$

$$\frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix}e^{i\omega t} & e^{-i\omega t}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\ e^{i\omega t}\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t$$

$$\bar{S}_y=\psi^+(t)\hat{S}_y\psi(t)=$$

$$\frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix}e^{i\omega t} & e^{-i\omega t}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\ e^{i\omega t}\end{pmatrix}=$$

$$\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t$$

$$\bar{S}_z=\psi^+(t)\hat{S}_z\psi(t)=$$

$$\frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix}e^{i\omega t} & e^{-i\omega t}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\ e^{i\omega t}\end{pmatrix}=0$$

(2) 根据算符 $\hat{S}_y$ 本征函数的完全性

$$\psi(t)=a_1\psi_+ + a_2\psi_-$$

其中

$$\psi_+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}\qquad \psi_-=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}$$

分别为 $\hat{S}_y$ 的本征值是$\frac{\hbar}{2}$，$-\frac{\hbar}{2}$ 的本征函数.

$t>0$ 时，电子自旋沿负 y 方向的概率为

$$|a_2|^2=|\psi_-^{\pm}\psi(t)|^2=\frac{1}{2}(1-\sin 2\omega t)$$

本题体现了量子力学中的一个重要定理：如果 $\hat{F}$ 是满足一定条件的厄米算符，它的正交归一本征函数是 $\varphi_n(x)$，对应的本征值是 λ_n，则任一函数 $\psi(x)$ 可以按 $\varphi_n(x)$ 展开为级数

$$\psi(x)=\sum_n c_n\varphi_n(x)$$

式中 c_n 与 x 无关，本征函数 $\varphi_n(x)$ 的这种性质称为完全性. c_n 可以由 $\psi(x)$ 和 $\varphi_n(x)$ 求得

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

$$\sum_n c_n\int\varphi_m^*(x)\varphi_n(x)\,dx=$$

$$\sum_n c_n\delta_{mn}=c_m$$

即

$$c_n=\int\varphi_n^*(x)\psi(x)\,dx$$

假设任一函数 $\psi(x)$ 已归一化，可得

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

$$\sum_{mn}c_m^*c_n\int\varphi_m^*(x)\varphi_n(x)\,dx=$$

$$\sum_{mn}c_m^*c_n\delta_{mn}=\sum_n|c_n|^2$$

因此，我们看到 $|c_n|^2$ 具有概率的意义，它表示在 $\psi(x)$ 态中测量力学量 F 得到的结果是 $\hat{F}$ 的本征值 λ_n 的概率.

另外，本题还用到了力学量期望值的计算公式

$$\bar{F}=\int\psi^*(x)\hat{F}\psi(x)\,dx$$

解这类型题只需直接代公式.

参 考 文 献

1 周世勋. 量子力学教程. 北京：高等教育出版社，2016. 174 ～ 177

2 陈鄂生. 量子力学习题与解答. 北京：科学出版社，2012. 401 ～ 404

3 史守华，谢传梅. 量子力学考研辅导. 北京：清华大学出版社，2015. 13 ～ 20

Analyzing Several Typical Computation Questions in Quantum Mechanics Using Pauli Matrix

Wang Lihua

(School of Physics and Electronics Science, Shanxi Datong University, Datong, Shanxi 037009)

Abstract: By Pauli matrix, several typical computation problems in quantum mechanics are analyzed. These computation problems include eigenvalue and eigenfunction of a functor, unitary transformation, average value of mechanical quantity, probability of possible value.

Key words: Pauli matrix; unitary transformation; functor; mechanical quantity; average value