如何理解量子力学中的力学量及力学量之间的关系

左桂鸿　刘艳凤　王淑玉　张 蕾　王方标　郑友进 *
牡丹江师范学院 物理与电子工程学院　黑龙江牡丹江　157011

【摘　要】 物理量在量子体系和经典体系中，表达方式不同，具有全新的概念，引入了线性厄米算符。同时力学量之间又存在着紧密的关系，判定线性厄米算符之间的对易关系是量子力学解决这一问题最简单的方法。对易，便会有共同的本征函数，力学量能够同时被确定；不对易，则满足不确定关系。力学量的这些关系是解决量子力学问题的关键所在。

【关键词】 量子力学；力学量；厄米算符；对易关系

习近平主席主持中央政治局第二十四次集体学习中，强调量子力学是人类探究微观世界的重大成果。量子科技发展具有重大科学意义和战略价值，要加快量子科技领域人才培养力度，加快培养一批量子科技领域的高精尖人才，建立适应量子科技发展的专门培养计划，打造体系化、高层次量子科技人才培养平台 [1]。作为高等学校量子力学课程的主讲教师听到这一消息特别激动，同时也深感责任重大，我们将尽其所能讲授好量子力学课程，做好最基础的工作。本文将对量子力学中的力学量及力学量之间的关系引发的问题进行探讨、分析并给出解决这类问题的关键。

一、厄米算符

力学量在量子体系中和经典物理中的表示形式是不同的。量子体系的任何力学量（或可观测量）都能够用线性厄米算符表示 [2]。即线性厄米算符对应着量子力学中的相应的力学量。因此先要清楚什么样的算符是线性厄米算符。线性算符很容易理解，这里主要说明厄米算符。如果对于两任意波函数ψ和ϕ，算符 $\hat{F}$ 满足等式，$\int\psi^*\hat{F}\phi dx=\int\left(\hat{F}\psi\right)^*\phi dx$ 则称 $\hat{F}$ 为厄米算符 [2]。设厄米算符构成的本征方程为 $\hat{F}u_n=\lambda_n u_n$，根据厄米算符定义，λ_n本征值是实数，力学量测量值也是实数，二者相符，因此更加证明厄米算符表示量子体系中力学量的正确性。同时，厄米算符的全部本征函数组成的集合构成一组正交归一完备基，由它们构成了希尔伯特空间，将在这个空间里进行量子力学的所有研究 [3]，空间维度发生了巨大变化，对空间的认识不断提升，量子力学给我们提供了更为广阔的研究空间。

1. 力学量与算符关系

这里量子力学中的力学量用字母F表示，它所对应的厄米算符记为$\hat{F}$，相应本征方程 $\hat{F}u_n=\lambda_n u_n$。通过求解本征方程，得到全部本征值λ_n，将它们组成一个集合$\{\lambda_n\}$，称之为本征值谱。将所求出的波函数u_n被放入$\{u_n\}$中，集合表示力学量全部可能状态，它们构成一组正交归一完备基矢。假如求解算符 $\hat{F}$ 的本征态为 u_q 本征值为 λ_q，这说明此时测量力学量 F 它刚好有唯一的值 λ_q。但如果 $\hat{F}$ 所在的状态并不是$\{u_n\}$，情况就复杂些，即处于$\psi(x)$态（已归一化状态）时，再对力学量F进行测量，就不会有确定值，需要进一步处理，将波函数向算符$\hat{F}$的正交归一完备基$\{u_n\}$展开，即$\psi(x)=\sum_n C_n u_n(x)$，力学量 F 的可能取值必将在 $\hat{F}$的本征值谱$\{\lambda_n\}$中全部找到，相应的取值几率恰好就是$\psi(x)=\sum_n C_n u_n(x)$式子中的系数 C_n 的模的平方$|C_n|^2$，根据取值及取值几率最终能够求出确定的平均值。

2. 举例分析

应用力学量和算符关系可解决很多问题，举例说明。例如：一维线性谐振子，它在 $t=0$ 时，归一化波函数为 $\psi(x)=\frac{\sqrt{2}}{3}\psi_1(x)+\frac{\sqrt{3}}{3}\psi_3(x)+\frac{2}{3}\psi_5(x)$，式中$\psi_n(x)$为一维线性谐振子本征函数，求这一时刻测量能量的可能取值、取值几率及平均值。从题目可以看出 $\psi(x)$ 不是一维线性谐振子本征态，所以测量能量不能取确定值，可能取值为：$E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$，$E_3=\frac{7}{2}\hbar\omega$，$E_5=\frac{11}{2}\hbar\omega$；由于$\psi(x)$已归一化，相应的取值几率为：$\left|\frac{\sqrt{2}}{3}\right|^2=\frac{2}{9}$，$\left|\frac{\sqrt{3}}{3}\right|^2=\frac{3}{9}$，$\left|\frac{2}{3}\right|^2=\frac{4}{9}$；平均值 $\bar{E}=\frac{3}{2}\hbar\omega\times\frac{2}{9}+\frac{7}{2}\hbar\omega\times\frac{3}{9}+\frac{11}{2}\hbar\omega\times\frac{4}{9}=\frac{71}{18}\hbar\omega$。

由此可见量子力学中的力学量与经典不同，一般情况下不取确定值，但有相应的取值和取值概率，存在确定的平均值。态空间任意归一化向量都可以向一组正交归一完备基展开，展开系数模的平方代表着在这些本质态进行上测量的取值几率。

二、量子力学中力学量与力学量之间的关系

在量子力学中物理性质是用力学量加以描述的，描述某一物理性质一般需要多个力学量，这些力学量与力学量之间存在着一定的联系，研究它们之间的关系就显得尤为重要。力学量又被线性厄米算符表示着，力学量与力学量之间的关系的探究，最终演化为力学量算符之间的关系，即两个或两个以上这些线性厄米算符之间的关系决定着力学量取值情况。化简研究，引入对易括号的概念，即 $[\hat{A},\hat{B}]\equiv\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$，称为 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的对易关系。若$[\hat{A},\hat{B}]=0$，则算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是对易的；若$[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$，则算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 不对易。下面对两种对易关系进行分析，最终给出量子力学中力学量与力学量之间的关系。

1. 力学量算符对易

在量子力学中，哪些力学量可以同时取确定值呢？这是我们一直关注的问题。其实确定这个问题的判断依据就是对易关系存在于算符之间。相关定理描述如下：如果算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易，即$[\hat{A},\hat{B}]=0$，则这两个算符有组成完全系的共同本征函数 [3]。定理说明两个算符关系对易时，它们就具有相同的本征函数，即在这个本征态下对力学量 A 和 B 一起测量同时可以取确定值。

（1）完整力学数量组

如果是多个力学量算符它们之间相互对易也有共同的本征函数系。就将能够唯一确定体系波函数所需要的相互对易的力学量的集合，称为完整力学数量组。确定完整力学数量组，找到波函数，即在此状态下测量这些力学量可以同时取确定值。例如：中心力场中的氢原子，在定态时还不考虑自旋，完整力学数量组为 $\{\hat{H},\hat{L}^2,\hat{L}_Z\}$，它们的共同本征函数系为 $\{\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)\}$。若在态$\psi_{321}(r,\theta,\varphi)$这种情况下进行测量，相应的算符 $\hat{H}$ 对应的物理量能量E值为：$E_3=-\frac{m_\mu e_s^4}{18\hbar^2}$，同理，角动量数值为：$\sqrt{6}\hbar$，角动量的 z 分量的值：$\hbar$，并且它们在 $\psi_{321}(r,\theta,\varphi)$态上同时具有确定值。

（2）取值概率不随时间变化

用算符 $\hat{F}$ 表示任意力学量，而哈密顿算符用 $\hat{H}$ 表示，如果它们之间关系为：$[\hat{F},\hat{H}]=0$ ，就说明它们拥有共同本征函数系 $\{u_n(x)\}$，可以列出两个本征方程分别为：$\hat{F}u_n(x)=\lambda_n u_n(x)$、$\hat{H}u_n(x)=E_n u_n(x)$ 。这时态矢量空间的任意归一化波函数 $\psi(x,t)$ 都可以向 $\{u_n(x)\}$ 这组正交归一基做展开 $\psi(x,t)=\sum_n C_n(t)u_n(x)$ ，对应的展开系数为 $C_n(t)=\int u_n^*(x)\psi(x,t)dx$ ，对展开系数作时间的微商，$\frac{d}{dt}C_n(t)=\int u_n^*(x)\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)dx$ ，利用薛定谔方程 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{H}\psi(x,t)$ ，最终可以求出 $C_n(t)=C_n(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$ ，可以看出任意时刻 t 的展开系数和零时刻的展开系数只差一个相因子，而展开系数模的平方表示取值概率 $W(\lambda_n,t)=|C_n(t)|^2$ ，很容易证明取值概率不随时间变化 $W(\lambda_n,t)=|C_n(t)|^2=\left|C_n(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\right|^2=W(\lambda_n,0)$，任意时刻 t 与零时刻取值概率一致。即力学量算符 $\hat{F}$ 和哈密顿算符 $\hat{H}$ 对易时，任何时刻测量力学量 F 所在的体系，力学量的取值概率都不会随时间发生改变。

（3）运动恒量及守恒定律

如果力学量 $\hat{F}$ 不显含时间 t ，同时二者对易 $[\hat{F},\hat{H}]=0$ ，就有 $\frac{d\overline{F}}{dt}=0$ ，力学量 F 的平均值就被唯一的确定下来，不管粒子处于哪种状态，力学量 F 的平均值不会受到时间变化的影响将一直保持不变，力学量 F 被称为运动恒量，或者说 F 在运动中守恒 [4]。例如研究不受外力影响的自由粒子的动量问题，设粒子所处位置势能为零，其能量算符为 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$ ，这里动量算符 $\hat{p}$ 与时间 t 无关，同时 $[\hat{p},\hat{H}]=0$ ，容易证得：$\frac{d\overline{p}}{dt}=0$, 力学量动量就是运动恒量，动量平均值是个常数被唯一确定下来不在变化，以上内容被称之为动量守恒定律。同样方法还可以推出角动量守恒、能量守恒、宇称守恒等等。

2. 力学量算符不对易

两个力学量算符满足 $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$ 这一关系，这说明 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 不对易，一般情况下它们不可能拥有相同的本征函数，在同一状态想对力学量 A 和力学量 B 进行测量这也是不可能成功的，它们不可能同时具有确定值，力学量之间将满足不确定关系。即在任意归一化状态 $\psi(x)$ 下，同时测量两个线性厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对应的力学量，它们的差方平均值满足关系式 $\overline{(\Delta A)^2}\cdot\overline{(\Delta B)^2}\geq\frac{1}{4}(\overline{i[\hat{A},\hat{B}]})^2$，称为不确定关系 [3]。

（1）不确定关系分析

观察不确定关系表达式发现不等右边与两个算符的对易关系有关联，不等右边必将是一个大于零的数，即如果一个力学量的差方平均值越小，另一个力学量的差方平均值将越大，否则不等式不成立。例如最著名的海森堡关系式：$\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p_x)^2}\geq\frac{\hbar^2}{4}$ ，如果在某任意态下测量坐标有确定值即 $\Delta x=0$ ，为了满足不确定关系式动量必须取 $\Delta p=\infty$ ，这样一来都就没有办法同时确坐标和动量，即确定粒子坐标位置，动量无法确定，反之亦然。再观察不确定关系表达式，在任意态上两个算符的差方平均值之积一定不小于某个数，也就是说可以有一个状态不确定关系表达可以取等号。这个状态就是使差方平均值之积最小的状态，被称为最小不确定态。

（2）不确定关系解决相关问题

以估算一维谐振子的基态能量为例进行说明。首先来看谐振子的能量算符 $\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ ，第一项包含动量算符，第二项包含坐标算符，两者不对易 $[x,\hat{p}_x]=i\hbar$ ，因此满足不确定关系式：$\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p_x)^2}\geq\frac{\hbar^2}{4}$ ，也就是说要对能量进行测量不能有确定值，但存在最小不确定态，也就是基态，这样一来就可以根据不确定关系表达式进一步来估算谐振子的基态能量。此时，能量等于哈密顿量在定态上的平均值：$E=\overline{H}=\frac{\overline{p_x^2}}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2}$ ，因为：$\overline{(\Delta p_x)^2}=\overline{p_x^2}-\overline{p_x}^2$ ，$\overline{(\Delta x)^2}=\overline{x^2}-\overline{x}^2$ ，通过计算 $\overline{x}=0$，$\overline{p_x}=0$ ，再利用不确定关系 $\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p_x)^2}\geq\frac{\hbar^2}{4}$ 取等号，则有，$E=\frac{\hbar^2}{8m\overline{(\Delta x)^2}}+\frac{1}{2}m\omega^2\overline{(\Delta x)^2}$ ，将 E 对 $\overline{(\Delta x)^2}$ 求导，估算出基态能量 $E=\frac{1}{2}\hbar\omega$ ，与实际求解相同。还可以解释，原子核中为什么不存在电子？通过原子核的尺度，应用最小不确定态，估算原子核中电子具有的能量，发现大约为原子核和电子之间库仑能的三十多倍，这是不可能的，因此原子核中不存在电子。还可以根据原子的尺度，一方面估算出电子速度的最大变化范围即不确定度为：$\Delta v\approx 10^6 m\cdot s^{-1}$ ，另一方面估算电子在原子中的运动速度的平均值为：$\bar{v}\approx 10^6 m\cdot s^{-1}$ ，它们的数量级相同，由此可以说明原子中电子运动不存在“轨道”[5]。还可以估计微观粒子质量、谱线的自然宽度等问题。总之，不确定性关系是量子力学史上不可或缺的理论，它的诞生解释了经典物理中所遇到的困难，并且推动各个学科的发展。

三、结语

线性厄米算符用来表示量子体系中的物理量，量子力学把它作为基本原理提出可见地位重要。如果能够充分了解量子体系中各力学量算符之间的相互关系，即力学量算符之间的对易关系，就知道什么时候可以同时测量物理量并取确定值，什么时候满足不确定关系，通过最小不确定态估算并解释物理现象。处理好上述关系可以加快量子力学学习效率，使得学生更快进入量子力学学习情境，掌握这门知识。

基金项目：黑龙江省高等教育教学改革研究项目（SJGY20180528）；牡丹江师范学院学位与研究生教育教学改革研究项目（MSY-YJG-2018YB020）

参考文献

[1] 主持中央政治局第二十四次集体学习 习近平：加强量子科技发展战略谋划和系统布局《人民日报海外版》（2020 年 10 月 19 日 第 01 版）
[2] 李蕴才 . 高等量子力学 [M]. 河南：河南大学出版社，2000:11-12
[3] 井孝功 , 赵永芳 . 量子力学 [M]. 黑龙江：哈尔滨工业大学出版社，2009:151-218
[4] 周世勋 . 量子力学教程 [M] 北京：高等教育出版社，2009:83-84
[5] 姚玉洁 . 量子力学 [M]. 北京：高等教育出版社，2014:110-111