第5卷 第11期
2013年11月

当代教育理论与实践
Theory and Practice of Contemporary Education

Vol. 5 No. 11
Nov. 2013

量子力学中的傅利叶变换解析

邵希吉,侯章林,何林李
(温州大学 物理与电子信息工程学院,浙江 温州 325035)

摘　要: 量子力学作为现阶段物理研究的基础学科,其重要性不言而喻。但国内很多教材对傅利叶变换的本质及其具体的物理图像总是三言两语一笔带过,这种情况使得初学者对傅利叶变换的理解只存在于表面,而对其本质的含义似是而非,从而增加了在量子力学以后内容学习的难度,因此,对傅利叶变换的本质讨论和物理图像的分析成为了必需。针对这种情况,本文对傅利叶变换本质含义和物理图像进行了详细的讨论,并以经典的例子为例进行实际论证,总结出了完整易懂的傅利叶变换物理图像。

关键词: 傅利叶变换;物理图像;实际论证

中图分类号: O46　　**文献标识码:** A　　**文章编号:** 1674 - 5884(2013)11 - 0141 - 03

量子力学是物理学专业中理论性极强的一门基础理论课程,它要求学生有扎实的数学和物理学的基础知识及建立数学物理模型的头脑,建立相应的物理图像对知识点进行系统的理解,要求学生有极强的抽象思维能力。由于量子力学研究的是微观系统的理论,也就是说它研究的是看不见摸不着的粒子的运动状态。这样使得学习量子力学的理论知识的难度加大,对于初学者尤甚。但是,伴随着物理学研究深度的不断发展、技术应用方面的研究不断进步,在技术应用领域的作用中,量子力学作为现代科学技术研究的基础理论的重要性已经完全的凸显出来,如现在进展比较喜人的量子器件和量子信息技术的研究[1-3]、有望代替传统半导体对计算机进行技术改革的碳纳米管 $p-n$ 特性的研究[4-5]、低维材料生长中的理论研究[6-7]、在医学领域中的应用[8-10]等。这些无疑都见证了量子力学的重要性,这就要求研究者要有扎实的量子力学基础知识。但是,由于量子力学的学习对初学者的数学功底和抽象思维及逻辑思维能力要求较高,所以,对于如何有效地学习量子力学便成了一个难题,笔者在初学时也遇到了相应的理解性的问题,纵观国内比较经典的几本本科生量子力学教材,如曾谨言、苏汝铿、周世勋等编著的教材中,对量子力学的基本框架都进行了逻辑上的严格推导,具体地描述了量子力学的理论框架,但是,并没有对其理论构造的物理图像进行相应的分析[11-13]。因此,初学者在学习过程中往往理解得似是而非,学习过程极为缓慢,需要花费大量的时间,往往不能完成量子力学的教学任务。

在基础量子力学中,包含了很多重要的板块,而傅利叶变换作为其基础框架中的一个基本理论思想,其地位不言而喻。因为它不仅涉及了 δ 函数的理解、初步的表象变换、态叠加的应用等,而且在后来对态叠加和表象变换的严格推导的学习理解中也处于一个基础的作用。所以其对初学者来说是一个很难于理解的知识,往往不能得到灵活的运用,但是国内的教材对其本质含义及应用都没有具体的介绍,这对初学者来说不能不说是一个障碍。本文主要针对傅利叶变换的本质及其物理图像进行具体分析,并简要地论述了在傅利叶变换基本理论思想中应用到的一些量子力学的理论基础,即表象、态叠加等,为了有一个深刻的理解,笔者通过经典的习题进行具体的讨论,以加深和提高初学者在初步学习时的理解与应用能力,也为随之而来的其它的理论推导做好铺垫。

一　傅利叶变换由来及物理图像

傅利叶变换的变换式为

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int\varphi(\vec{p})\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)d^3p \qquad (1)$$

收稿日期: 2013 - 08 - 15
基金项目: 温州大学教改项目(lljg48B)
作者简介: 邵希吉(1982 -),男,辽宁建昌人,硕士生,主要从事低维材料物理研究。

上式中的变换涉及了两个量，初步的定义为平面波 $\psi(\vec{r})$ 以波幅 $\varphi(\vec{p})$ 展开。进一步分析可以发现，第一个量 $\psi(\vec{r})$ 为坐标表象（即以坐标为基础变量）下的粒子状态波函数，第二个量 $\varphi(\vec{p})$ 为动量表象下的表示。由此可见，傅利叶变换的本质为坐标表象下的状态波函数与动量表象下的表示之间的转化，为两个表象间的转化。下面将对这个转化的由来进行具体的分析。

在普遍的情况下，我们对物质的波动都是用坐标表象下的状态波函数 $\psi(\vec{r})$ 进行描述，它反映了在空间坐标中波动物质的运动状态，当然，由于量子力学描述微观粒子的特性，则 $\psi(\vec{r})$ 在量子力学中表现出的性质为反映微观物质运动的一种统计规律，其具体性质这里不作相应的介绍。既然物质的这个规律可以由空间坐标来描述，那么我们也可以相应的利用其他的变量来对其进行描述。这里我们以物质的动量为基础来描述其规律。那么，以动量为基础来描述物质的统计规律，首先我们就需要找到在动量下的本征函数。这就需要借助于由狄拉克所定义的 δ 函数。

由于波函数的归一性，在定义表象相应的本征波函数时需要应用 δ 函数进行归一化，坐标表象的 δ 表达式表达为

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dke^{ik(x-x_0)} \tag{2}$$

上式为坐标关系式，同时有 $k=p_x/\hbar$，则 $dk=dp_x/\hbar$，于是上式可以改写为 $\delta(x-x_0)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dp_x e^{\frac{i}{\hbar}p_x(x-x_0)}$，对其做代换，$p_x\Leftrightarrow x, p'_x\Leftrightarrow x_0$。则有动量的 δ 表达式

$$\delta(p_x-p'_x)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dxe^{\frac{i}{\hbar}x(p_x-p'_x)}。\tag{3}$$

于是，利用式（3）讨论动量表象下的本征函数有下面的关系

$$\delta(p_x-p'_x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{p'_x}(x)\phi_{p_x}dx, \tag{4}$$

上式中，$\varphi_{p_x}(x)$ 为 $t=0$ 的波函数，它在随时间变化波函数中表达为 $\psi_{p_x}(x,t)=\varphi_{p_x}(x)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_x t)=A\exp(\frac{i}{\hbar}(p_x x-E_x t))$，其中 $E_x=\frac{p_x^2}{2m}$。将上式带入式（4）中，并利用动量的 δ 表达式（3），可得 $A^2 2\pi\hbar\delta(p_x-p'_x)=\delta(p_x-p'_x)$。由此，得到动量本征函数为 $\psi_{p_x}(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\frac{i}{\hbar}(p_x x-E_x t))$，这是在一维情况下的动量本征函数，相比较可知，三维情况下的动量本征函数为

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\exp(\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)), \tag{5}$$

相应于一维的情况，式中 $E=\frac{\vec{p}^2}{2m}$。

在得到了动量本征函数的情况下，可以利用动量本征函数为基矢的表象，对粒子的状态进行描述。这个描述与利用坐标本征态为基矢的表象对粒子进行的描述是等效的。因此，根据态叠加原理[14]，可以认为，在以动量本征函数为基矢描述粒子状态中，粒子的状态 $\psi(\vec{r},t)$ 由 $\vec{p}$ 取各种可能值的本征函数的线性叠加，即 $\psi(\vec{r},t)=\sum_p\varphi(\vec{p})\psi_{\vec{p}}(\vec{r},t)$。由于 $\vec{p}$ 是连续变化的，所以求和应该由积分代替，于是得 $\psi(\vec{r},t)=\int\varphi(\vec{p})\,\psi_{\vec{p}}(\vec{r},t)d\vec{p}$，式中的 $d\vec{p}=d^3p$。然后将动量本征函数式（5）带入上式，有

$$\psi(\vec{r},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int\varphi(\vec{p})\exp(\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et))\,d\vec{p}。\tag{6}$$

上式为由动量本征函数对粒子状态进行的描述。可以发现，上式在形式上与式（1）是相同的，即为傅利叶变换。

通过上述分析，我们认为，本质为坐标表象和动量表象的变换的傅利叶变换由此而来。在此基础上，利用动量本征函数的正交归一性，可以得到在动量表象下的分布 $\varphi(\vec{p},t)$，直接得出傅利叶变换的逆变换 $\varphi(\vec{p},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(\vec{r},t)\exp(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r})d\vec{r}$。

总结前文，傅利叶变换为通过描述粒子状态的等效性，利用动量表象对平面波进行展开，从而实现坐标表象下的状态波函数与动量表象下的表示之间的转化。具体物理图像如下：在确定傅利叶变换本质的前提下，利用 δ 的性质找出坐标表象下的动量本征函数，通过动量本征函数为基矢的表象即动量表象对平面波函数进行展开，即得傅利叶变换式，同时，根据动量本征函数的正交归一性，得其逆变换。

二　经典例子分析

设一维自由粒子初态为 $\psi(x,0)$，求 $|\psi(x,t)|^2$。[14] 对于这个例子来说，主要的任务是找出状态 $\psi(x,0)$ 随时间变化的时间项，而波函数中时间项由能量决定，因为 $E=\frac{\vec{p}^2}{2m}$，因而，时间项最终是由动量来决定的。因此，在讨论时间的时候，必须在动量表象中来进行。所以第一步我们需要利用傅利叶变换的逆变换将状态的表达转换到动量的表象中，$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)\exp(-\frac{i}{\hbar}px)dx$，得出零时刻动量表象下的状态分布。

通过傅利叶变换将状态由坐标表象转化到了动量表象后，直接可以在此基础上对波函数随时间变化进行讨论，加上时间项即可。而例子中要求最终的表达需要用坐标表象的波函数进行描述，所以还需要在此基础上对动量表象下的状态分布进一步进行傅利叶变换 $\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi ?}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\exp(\frac{i}{\hbar}(px-Et))dp$ 将其转换至坐标表象，即得坐标表象下随时间变化的波函数，最终将得到的坐标

表象下随时间变化的波函数进行取模之后再平方,即是例子的解。

这个例子能很好的说明傅利叶的本质,并对其应用进行了实践。在仅知道粒子在 $t=0$ 时刻的波函数的情况下,对随时间变化的粒子的状态进行分析,需要确定其由动量所决定的时间项,那么,就需要利用傅利叶变换式将波函数变换至动量表象的表示,然后加入时间项,通过其逆变换转换为经典的坐标表达即可。

三 结 语

本文通过对傅利叶变换的本质进行分析,并在此基础上,描述出了傅利叶变换的物理图像,并利用经典的例子对傅利叶变换的应用进行了探讨。

1. 对于傅利叶变换,其本质为利用以动量本征函数为基矢的动量表象对波函数进行描述,其逆变换正好与上述描述进行互补,从而达到了在动量表象和坐标表象之间相互转换的目的,以期更灵活的对粒子的状态进行描述。

2. 在坐标表象的状态下,利用动量表象进行展开描述,那么,首先就需要找出对动量表象进行定义的基矢,即动量本征函数。通过 δ 函数性质找出动量的本征函数,以其为基矢进行展开,得到了傅利叶变换式,并利用动量本征函数的正交归一性,得出其逆变换。

3. 对经典例子的分析,得出在仅知道粒子在坐标表象下零时刻的波函数时,可以利用傅利叶变换及其逆变换对粒子随时间变化的状态进行探讨。具有很强的实用性。

综上所述,傅利叶变换为表象之间的相互转换,具有很强的实用性。

参考文献:

[1] 彭英才,赵新为,傅广生.低维量子器件物理[M].北京:科学出版社,2012.

[2] 郭光灿.量子信息技术[J].重庆邮电大学学报(自然科学版).2010,22(5):521-525.

[3] 吕 欣,马 智,钟淑琴.量子密码理论研究进展[J].计算机工程与应用.2009,45(23):28-32.

[4] Huang L, Lai Y, David K F, et al. Transmission and scarring in graphene quantum dots[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 21, 344203 (2009).

[5] Jiang L L, Huang L, Yang R, et al. Control of transmission in disordered graphene nanojunctions through stochastic resonance[J]. APPLIED PHYSICS LETTER, 96, 262114 (2010).

[6] 王占国,陈涌海,叶小玲.纳米半导体技术[M].北京:化学工业出版社,2006.

[7] 王占国.半导体材料研究的新进展[J].半导体技术.2002,27(3):8-14.

[8] 安会波,王青霞,魏艳苏,等.量子医学临床应用进展[J].河北医药,2009,31(7):856-858.

[9] 陈 创,陈良冬,张志凌,等.量子点在肿瘤标志物研究中的应用进展[J].中国癌症杂志,2007,17(10):813-818.

[10] 王占科,宋 涛,胡晓璐.量子点技术及其在生物医学检验中的应用[J].生物医学工程与临床,2011,15(5):489-492.

[11] 曾谨言.量子力学(卷一第三版)[M].北京:科学出版社,2000.

[12] 苏汝铿.量子力学(第二版)[M].北京:高等教育出版社,2002.

[13] 周世勋.量子力学教程[M].北京:高等教育出版社,2008.

[14] 曾谨言.量子力学导论[M].北京:北京大学出版社,2009.

(责任编校 罗 渊)