

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

- ① 欧式空间是人类居住的空间，也是最熟悉的空间，它是位置矢量 \mathbf{r} 的集合。现在假设我们来到了一个新的世界，从零开始去建立一个空间。那么我们首先需要有一个集合，这个集合里面的元素我们称为矢量，用记号 $|u\rangle$ 表示
- ② 欧式空间有一个很好的性质，就是我们可以对矢量进行任意的叠加（高中课程：力的合成），那么在我们建立的新空间中，首先要求这些矢量也要可以合成
- ③ 我们就得到了线性空间
 - a. 加法和数乘运算封闭: $\mathbf{u} + \mathbf{v}, a\mathbf{u}$
 - b. 矢量加法满足交换律和结合律
 - c. 对于加法运算，有零矢量和逆矢量
 - d. 数乘满足结合律: $(ab)\mathbf{u} = a(b\mathbf{u})$
 - e. 数乘和加法满足分配律: $(a + b)\mathbf{u} = a\mathbf{u} + b\mathbf{u}, a(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = a\mathbf{u} + a\mathbf{v}$
 - f. $1\mathbf{u} = \mathbf{u}$
- ④ 满足这些性质的空间有很多个，例如函数组成的空间，或者数列（元素个数固定）组成的空间。

线性空间的例子

- 实数
 - 三维矢量
 - 二维矢量
 - 函数
 - 多项式函数
 - 矩阵
-
- 反例：整数，正实数， ...

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

- ⑤ 基矢与维度：这是线性叠加性质的自然推论
 - a. 一组矢量，互相线性独立，并且所有矢量都可以表达为它们的叠加，这组矢量就叫做基矢
 - b. 对于确定的矢量空间，基矢的个数总是确定的，叫做这个空间的维度：例如欧式空间是三维
 - c. 函数空间的基矢可以选为 δ 函数，或者幂函数（对应泰勒展开）等等
- ⑥ 欧式空间还有一个很好的性质，就是矢量有长度、夹角等概念，这样就可以和各种几何性质联系起来
 - a. 这些概念的关键是内积的定义：这个内积要是可交换的，线性的，并且正定的，即非零矢量自己和自己的内积要是正实数（模长）
 - b. 内积可以记作 $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{v}, \mathbf{u})$
 - c. 欧式空间中的矢量点乘
 - d. 欧式空间中夹角和垂直的概念
- ⑦ 有了内积，我们就可以把基矢正交归一化，使得 $(\mathbf{e}_m, \mathbf{e}_n) = \delta_{mn}$

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

⑧ 基矢展开：任意矢量都可以用基矢展开

a. $\mathbf{u} = \sum_n u_n \mathbf{e}_n$, 展开系数 $u_n = (\mathbf{u}, \mathbf{e}_n)$

b. 把展开系数写成列矢量（右矢）形式 $|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}$, 基矢也可写成这种形式

c. 左矢定义成右矢的转置： $\langle u| = (u_1, u_2, \dots, u_N)$

d. 也可以写成紧凑的形式 $1 = \sum |e_n\rangle \langle e_n|$

e. 欧式空间下的基矢展开：坐标分解内积： $\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle = \sum_n u_n v_n$

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

⑨ 线性映射：矢量到矢量的映射，且满足线性要求

a. $\hat{f}(a|u\rangle + b|v\rangle) = a\hat{f}|u\rangle + b\hat{f}|v\rangle$

b. 由于线性性质，只要找到每个基矢的映射方式就可以知道全部空间的映射方式

c. $\hat{f}|e_n\rangle = \sum_m f_{mn}|e_m\rangle, f_{mn} = \langle e_m|\hat{f}|e_n\rangle,$

--> $\hat{f}|u\rangle = \sum_n \hat{f}|e_n\rangle\langle e_n|u\rangle = \sum_{mn} f_{mn}|e_m\rangle\langle e_n|u\rangle = \sum_m \{\sum_n f_{mn}\langle e_n|u\rangle\}|e_m\rangle$

d. 写成矩阵形式

$$\hat{f} = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & \cdots & f_{1N} \\ f_{21} & f_{22} & \cdots & f_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_{N1} & f_{N2} & \cdots & f_{NN} \end{bmatrix}, \quad |u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, \quad \hat{f}|u\rangle = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & \cdots & f_{1N} \\ f_{21} & f_{22} & \cdots & f_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_{N1} & f_{N2} & \cdots & f_{NN} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}$$

e. 线性代数就是矩阵代数

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

⑩ 矩阵的运算：转置、加法、乘法

- 举例 $\hat{f} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $\hat{g} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$, 计算 $\hat{f}\hat{g}$ 和 $\hat{g}\hat{f}$
- 对易关系
- 单位矩阵 \hat{I} , 矩阵元 δ_{mn}
- 逆矩阵

⑪ 基矢变换与正交矩阵

- 把一组正交归一基映射成另外一组: $(|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_N\rangle)\hat{O} = (|g_1\rangle, |g_2\rangle, \dots, |g_N\rangle)$

b. 坐标变换: $(|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_N\rangle) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} = (|g_1\rangle, |g_2\rangle, \dots, |g_N\rangle) \begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ \vdots \\ u'_N \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} = \hat{O} \begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ \vdots \\ u'_N \end{pmatrix}$

- \hat{O} 对应的矩阵是正交矩阵: $\hat{O}^\tau \hat{O} = \hat{I}$, 即逆矩阵等于转置矩阵

- 证明: $O_{mn} = \langle e_m | g_n \rangle$, $(\hat{O}^\tau)_{mn} = O_{nm} = \langle e_n | g_m \rangle = \langle g_m | e_n \rangle$,

$$(\hat{O}^\tau \hat{O})_{ml} = \sum_n (\hat{O}^\tau)_{mn} O_{nl} = \sum_n \langle e_n | g_m \rangle \langle g_l | e_n \rangle = \sum_n \langle g_l | e_n \rangle \langle e_n | g_m \rangle = \langle g_l | g_m \rangle = \delta_{ml}$$

- 正交变换对矩阵的作用: 原先 $\hat{f}|u\rangle = |v\rangle$, 现在要满足 $\hat{g}\hat{O}^\tau|u\rangle = \hat{O}^\tau|v\rangle = \hat{O}^\tau\hat{f}|u\rangle$, 故 $\hat{g} = \hat{O}^\tau\hat{f}\hat{O}$

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

⑫ 实对称矩阵的本征值与本征矢量

- a. 矩阵的本征值与本征矢量: $\hat{f}|u\rangle = \lambda|u\rangle \quad |u\rangle \neq 0$
- b. 本征方程的求解: $(\hat{f} - \lambda\hat{I})|u\rangle = 0 \quad \det(\hat{f} - \lambda\hat{I}) = 0$
- c. 实对称矩阵不同本征值对应的本征矢量正交: $\langle u|\hat{f}|v\rangle = \lambda_u\langle u|v\rangle = \lambda_v\langle u|v\rangle$
- d. 实对称矩阵的本征态可以组成正交归一基: $\{|f_i\rangle\}$
- e. 在基 $\{|f_n\rangle\}$ 下, \hat{f} 是对角矩阵: $f_{mn} = \langle f_m|\hat{f}|f_n\rangle = \lambda_n\langle f_m|f_n\rangle = \lambda_n\delta_{mn}$

2.3 基矢与表象

2. 酉空间

- ① 欧氏空间对应的数乘是用实数，如果我们要用复数去数乘，这时矩阵表示中矢量对应的分量可以是复数
- ② 为了满足内积的正定性要求， $\langle u|v\rangle$ 中的左矢不能再只等于右矢的转置，而应该是它的共轭转置：

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, \quad \langle u| = (u_1^*, u_2^*, \dots, u_N^*) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}^+$$

从而保证内积的正定性： $\langle u|v\rangle = \sum_n u_n^* v_n$, $\langle v|u\rangle = \sum_n v_n^* u_n = \langle u|v\rangle^*$,
 $\langle u|v\rangle = \sum_n |u_n|^2 \geq 0$

- ③ 这是欧氏空间的扩展，当矢量的分量都是实数时，回到欧氏空间
- ④ 矩阵的共轭转置(厄米共轭)： $\{\hat{f}|u\rangle\}^+ = \langle u|\hat{f}^+$, 从而 $\hat{f}^+ = (\hat{f}^T)^*$

2.3 基矢与表象

2. 酉空间

- ⑤ 基矢变换不再对应于正交矩阵，而是么正矩阵： $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$
证明： $U_{mn} = \langle e_m | g_n \rangle$, $(\hat{U}^\dagger)_{mn} = U_{nm}^* = \langle e_n | g_m \rangle^* = \langle g_m | e_n \rangle$

$$(\hat{U}^\dagger \hat{U})_{ml} = \sum_n (\hat{U}^\dagger)_{mn} U_{nl} = \sum_n \langle e_n | g_m \rangle \langle g_l | e_n \rangle = \sum_n \langle g_l | e_n \rangle \langle e_n | g_m \rangle \\ = \langle g_l | g_m \rangle = \delta_{ml}$$

当矩阵元都是实数时，么正矩阵就是正交矩阵

- ⑥ 基矢变换下，矩阵的变换： $\hat{f} \xrightarrow{\hat{U}} \hat{g} = \hat{U}^\dagger \hat{f} \hat{U}$
⑦ 厄米矩阵的定义： $\hat{f}^\dagger = \hat{f}$
⑧ 厄米矩阵的本征值都是实数，本征态可以构成正交归一基
证明： $\langle u | \hat{f} | u \rangle = \lambda \langle u | u \rangle = \lambda^* \langle u | u \rangle$, $\langle u | \hat{f} | v \rangle = \lambda_u \langle u | v \rangle = \lambda_v \langle u | v \rangle$
⑨ 以 \hat{f} 的这组正交归一基作为基矢，矩阵 \hat{f} 本身变换为实对角矩阵
⑩ 当矩阵元都是实数时，厄米矩阵就是实对称矩阵

2.3 基矢与表象

2. 酉空间

- ⑪ 线性代数中基矢变换的实质：
矢量具有绝对的意义，而矢量的展开系数是随着基矢选取的不同而不同，是相对的。
同样的，（线性）算符具有绝对意义，算符的矩阵元也是随着基矢选取的不同而不同，是相对的。
基矢变换就类似于解析几何中的坐标变换。

2.3 基矢与表象

3. 量子力学的线性代数表述

① 离散空间的波函数（假设空间离散且有限）

a. 某一状态下，粒子位于 n 点的几率幅为 ψ_n （复值数列）， i 点的位置坐标为 $x_n = n\Delta x$

b. 记作态矢（右矢） $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$ ，左矢 $\langle\psi| = (\psi_1^*, \psi_2^*, \dots, \psi_N^*) = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}^+$

c. 内积： $\langle\phi|\psi\rangle = \sum_n \phi_n^* \psi_n$

d. 基矢 $|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ ， $|e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ ，...， $|e_N\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ 。正交归一： $\langle e_m | e_n \rangle = \delta_{mn}$

② 离散空间的力学量（算符）

a. 算符成为矩阵 $\hat{f} = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & \cdots & f_{1N} \\ f_{21} & f_{22} & \cdots & f_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{N1} & f_{N2} & \cdots & f_{NN} \end{bmatrix}$ ，其中 $f_{mn} = \langle e_m | \hat{f} | e_n \rangle$

2.3 基矢与表象

3. 量子力学的线性代数表述

② 离散空间的力学量（算符）

b. 位置算符（矩阵）

$$\hat{x} = \begin{bmatrix} x_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & x_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & x_N \end{bmatrix} = \Delta x \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & N \end{bmatrix}, \quad \hat{x}|\psi\rangle = \begin{pmatrix} x_1\psi_1 \\ x_2\psi_2 \\ \vdots \\ x_N\psi_N \end{pmatrix}$$

分量形式: $x_{mn} \equiv (\hat{x})_{mn} = x_n \delta_{mn}$, $(\hat{x}|\psi\rangle)_m = \sum_n x_{mn} \psi_n = \sum_n x_m \delta_{mn} \psi_n = x_m \psi_m$

c. 势能算符（矩阵）

$$V(\hat{x}) = \begin{bmatrix} V(x_1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & V(x_2) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & V(x_N) \end{bmatrix}$$

2.3 基矢与表象

3. 量子力学的线性代数表述

② 离散空间的力学量（算符）

d. “动量” 算符（循环矩阵）

$$\hat{p} = -i \frac{\hbar}{2\Delta x} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & \ddots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad |p_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} p_m x_1} \\ e^{\frac{i}{\hbar} p_m x_2} \\ \vdots \\ e^{\frac{i}{\hbar} p_m x_N} \end{pmatrix},$$

其中 $p_m = m\Delta p = m \frac{2\pi\hbar}{N\Delta x}$, $m = 1, 2, \dots, N$

e. 验证当 $N \rightarrow \infty$ 时, $\hat{p}|p_m\rangle = p_m|p_m\rangle$

f. 验证 $\{|p_m\rangle\}$ 构成正交归一基

g. 取 $\{|p_m\rangle\}$ 为基矢时, \hat{x} 和 \hat{p} 的矩阵形式

h. 动能算符（循环矩阵）

i. 这些矩阵都是厄米矩阵

2.3 基矢与表象

3. 量子力学的线性代数表述

③ 离散空间的薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \cdots & H_{NN} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$$

2.3 基矢与表象

3. 量子力学的线性代数表述

④ 表象变换

- a. 由于酉空间是可以任意变换基矢的，量子力学中我们也可以变换基矢。量子态和力学量通过对基矢展开，分别表示为列矢量（行矢量）以及矩阵。
- b. 特别的，由于力学量的本征态可以构成基矢，我们可以使用这组基矢。这时量子态和力学量的表示方式称为这个力学量的表象。
- c. 力学量在自己的表象下是实对角矩阵。
- d. 举例一：坐标表象：基矢 $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_N\rangle$
量子态（右矢、左矢）

$$\text{力学量 } \hat{x} = \begin{bmatrix} x_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & x_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & x_N \end{bmatrix}, \quad \hat{p} = -i \frac{\hbar}{2\Delta x} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & \ddots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

- e. 举例二：“动量”表象：基矢、量子态（右矢、左矢）、力学量 (x,p)
- f. 两者之间的表象变换：离散傅里叶变换 (DFT)

2.3 基矢与表象

3. 量子力学的线性代数表述

⑤ 连续空间的量子力学：

- a. 与离散空间没有本质区别，空间的维度变为无限维，下标 $\{1, 2, \dots, N\}$ 成为连续坐标 x ，差分变成微分，求和变成积分，归一化的 δ_{mn} 变成 $\delta(x_1 - x_2)$
- b. 量子态的表示从离散的列（行）矢量变为连续的函数（波函数），力学量的表示从离散的矩阵变为(微分)算符
- c. 基矢、表象的概念不变。力学量在自己的表象下依然是对角矩阵（函数乘算符）
- d. 举例：坐标表象、动量表象、傅里叶变换

2.3 基矢与表象

3. 量子力学的线性代数表述

⑥ 基矢与表象的意义：

- a. 2.1和2.2都是在坐标表象下介绍量子力学的形式，缺乏一个几何认识
- b. 2.3告诉我们，态矢是绝对的，波函数和算符的具体形式是相对的，随着基矢的选取不同而不同：量子力学的数学语言是Hilbert空间（可以微分的酉空间）上的线性代数
- c. 系统的状态是客观实在，不依赖具体表象的选取，所以用态矢的语言更加简洁（类似于很多几何关系，如果用解析几何去描述，会异常复杂而且掩盖了问题的实质）
- d. 利用酉空间上线性代数的语言，量子力学的核心内容可以高度概括成简单的几句话，包括薛定谔方程和测量塌缩原理

$$\bullet i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

其余的包括表象变换等等复杂形式内容全部是酉空间上线性代数的体现，成为这一数学结构的必然要求

- e. 实用角度，如果我们主要希望考虑某个力学量，那么就想办法把它对角化，具体说就是找到它的本征态，然后用它的正交归一本征态进行表象变换。特别的，对于哈密顿量算符的对角化可以方便地得到系统的演化方式（通过薛定谔方程）



2.4 测量与不确定原理

1. 前面内容总结：

- ① 量子世界，粒子的状态由态矢表示，态矢是Hilbert空间（一种特殊的酉空间）中的矢量（所以有态叠加原理）
- ② 力学量对应这个Hilbert空间中的厄米算符（矩阵表示是厄米矩阵）
- ③ 可以把态矢根据某个力学量的基矢去展开，即形成不同表象下的描述。通常的波函数描述是位置表象下的描述
- ④ 量子态的演化遵循薛定谔方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$
- ⑤ 最后一条其实有一个前提：粒子与宏观体系没有相互作用

2.4 测量与不确定原理

2. 测量与塌缩

① 回顾量子物理的基本假设

- a. 量子世界发生的事件，其不确定性对应一个复数 ψ ，叫做几率幅。这个事件发生的几率 $P = |\psi|^2$
- b. 如果一个事件可以通过几种不同的方式完成，并且每种方式完成的几率幅分别是 ψ_1 、 ψ_2 、...，那么 $\psi = \psi_1 + \psi_2 + \dots$ ， $P = |\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2 + \dots|^2$
- c. 如果可以通过某种方式观察到这个事件到底是以哪种方式发生的，那么观测之前事件发生的几率为 $P = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \dots$

② 我们前面三节的内容，都没有详细展开第三条基本假设

③ 第三条基本假设的核心是测量：什么是测量？宏观体系（测量仪器）与微观粒子的一种相互作用。既然有宏观体系的参与，就必须符合宏观世界的几率方式，这就是第三条的思想

④ 由于宏观世界的仪表不可能以无限快的速度转动，所以假想时间间隔趋于零的两次测量，必须要得到相同的结果

⑤ 这要求微观的量子态必须发生改变：塌缩到对应于测量结果的本征态

2.4 测量与不确定原理

2. 测量与塌缩

⑥ 举例：

- 力学量 \hat{f} ，本征态 $|f_1\rangle$ 、 $|f_2\rangle$ 、... $|f_N\rangle$ ，本征值 f_1 、 f_2 、... f_N ，即 $\hat{f}|f_n\rangle = f_n|f_n\rangle$
- 假设系统一开始处于叠加态 $|\psi\rangle = c_1|f_1\rangle + c_2|f_2\rangle + \dots$
- 假设我们通过某种手段，可以测量出力学量 \hat{f} ，那么系统的状态成为经典的几率叠加态（不是几率幅）：系统有 $|c_1|^2$ 的几率处于 $|f_1\rangle$ 态，有 $|c_2|^2$ 的几率处于 $|f_2\rangle$ 态
- 假设我们执行了测量，那么系统的状态将会塌缩成为 $|f_1\rangle$ 、 $|f_2\rangle$ 、... $|f_N\rangle$ 中的一个，相应的几率为 $|c_1|^2$ 、 $|c_2|^2$ 、... $|c_N|^2$
- 注意这个几率是intrinsic的
- 如果我们立即再去测量力学量 \hat{f} ，将会得到确定性的结果
- 假如过一段时间再去测量呢？

⑦ 塌缩机制的理解

- 定性理解：测量必将影响微观粒子的状态
- 精确机制：Just accept it
- 多宇宙观点

2.4 测量与不确定原理

4. 不确定原理

① 共同测量与对易关系

- a. 前面说到，假如我们对量子体系测量了一个力学量，然后立即再去测量这个力学量，那么将会得到确定性的结果，原因是量子态的塌缩
- b. 那么假如立即再去测量的是另外一个力学量呢？有没有可能仍然得到确定性的结果，取决于这个力学量和原先的力学量是否对易
- c. 对易关系的定义： $[\hat{f}, \hat{g}] = \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$
- d. 证明对易的力学量可以有完备的共同本征态集
- e. 例子：x y z互相对易，有完备共同本征态集； p_x p_y p_z 互相对易，有完备共同本征态集；x p_x 不对易，没有完备共同本征态集
- f. 依次立即测量对易的各力学量，就可以让系统塌缩到它们的共同本征态上，再去立即测量这些量，就总会得到确定性的结果

2.4 测量与不确定原理

4. 不确定原理

② 非对易力学量与不确定原理（只举 \hat{x} 、 \hat{p} 的例子）

- a. 证明 \hat{x} 、 \hat{p} 不对易： $[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar$
- b. 写出 \hat{x} 、 \hat{p} 各自的本征态
- c. 假如首先测量 \hat{x} ，再立即测量 \hat{p} ，测量值的分布（无限范围均匀分布）
- d. 假如首先测量 \hat{p} ，再立即测量 \hat{x} ，测量值的分布（无限范围均匀分布）
- e. 不确定原理：非对易的力学量不可能同时精确测量，一个测得越精确，另一个测得越不精确（分布越宽）
- f. 定量关系：教材P79-P80 $\overline{(\Delta x)^2} \overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$
- g. 直观理解：傅里叶变换中的时间带宽积或者空间带宽积

2.4 测量与不确定原理

5. 力学量期望值的时间演化

①
$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

② 守恒力学量

2.5 本章总结

1. 量子物理的基本假设

- ① 量子世界发生的事件，其不确定性对应一个复数 ψ ，叫做几率幅。这个事件发生的几率 $P = |\psi|^2$
- ② 如果一个事件可以通过几种不同的方式完成，并且每种方式完成的几率幅分别是 ψ_1 、 ψ_2 、 \dots ，那么 $\psi = \psi_1 + \psi_2 + \dots$ ， $P = |\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2 + \dots|^2$
- ③ 如果可以通过某种方式观察到这个事件到底是以哪种方式发生的，那么观测之前事件发生的几率为 $P = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \dots$

2. 量子力学的框架概要

- ① 线性代数：来自基本假设①② （态叠加原理，力学量是算符）
- ② 物理内容： $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ ， $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$
- ③ 测量与塌缩：来自基本假设③

2.5 本章总结

3. 量子力学的主要内容

① 量子态

- a. 量子系统的状态由态矢 $|\psi\rangle$ 表示，它是Hilbert空间（一种可以对矢量做微分的酉空间）中的矢量（称为态矢量，或者态矢），或者说一个体系所有可能的态矢构成一个Hilbert空间（也叫做这个体系的态矢空间）
- b. 由于所有态矢构成一个线性空间（Hilbert空间），那么如果 $|\psi\rangle$ 是体系可能的态矢，则任意 $c|\psi\rangle$ 一定也是体系可能的态矢
- c. 由于后面得出的各种几率或者几率密度的相对值都与 c 无关， $|\psi\rangle$ 与任意 $c|\psi\rangle$ 对应于同一个物理状态，或者说Hilbert空间用于表示体系的物理状态是存在冗余的
- d. 由于所有态矢构成一个线性空间（Hilbert空间），那么如果 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_N\rangle$ 都是体系可能的态矢，则任意 $c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle + \dots + c_N|\psi_N\rangle$ 一定也是体系可能的态矢

2.5 本章总结

3. 量子力学的主要内容

② 力学量

- a. 力学量对应于线性算符 \hat{f} ，更具体地说所有可以测量的力学量都对应于某个相应的厄米算符
- b. 线性算符具有本征值和本征态（本征矢量），可观测量（厄米算符）的本征值都是实数，并且其线性无关的本征态可以组成一组正交归一完备基矢
- c. 对易的力学量，有正交归一完备的共同本征态集合；不对易的力学量，则没有这样的集合
- d. 位置和动量算符之间满足对易关系

$$[\hat{r}_m, \hat{p}_n] = i\hbar\delta_{mn} \quad , \quad [\hat{r}_m, \hat{r}_n] = [\hat{p}_m, \hat{p}_n] = 0$$

2.5 本章总结

3. 量子力学的主要内容

③ 表象

- a. 由于力学量 \hat{f} 的所有线性无关本征态可以组成正交归一完备基矢 $\{|f_n\rangle\}$ ，那么可以用这组基矢去展开任意态矢量

$$|\psi\rangle = \sum_n |f_n\rangle \langle f_n | \psi \rangle$$

展开系数 $\langle f_n | \psi \rangle$ 对应于线性代数中的列矢量，称为 \hat{f} 表象下的波函数

- b. 任意线性算符 \hat{g} 在这组基矢下成为矩阵，矩阵元为 $g_{mn} = \langle f_m | \hat{g} | f_n \rangle$
- c. 态矢和态矢之间，算符和态矢之间，以及算符和算符之间的运算成为线性代数中的矩阵运算
- d. 可以用任意（可观测）力学量 \hat{f} 的正交归一完备本征态集合作为基矢，相应地，各种态矢/算符（即力学量）的列矢量/矩阵具体形式随着所选择的力学量 \hat{f} 的不同而发生变化；给定了 \hat{f} ，对应的具体列矢量/矩阵形式通常简称为该力学量 \hat{f} 的表象
- e. 力学量在自己的表象下成为对角矩阵，互相对易的力学量在它们共同本征态组成的正交归一基矢所对应的表象下，全部成为对角矩阵

2.5 本章总结

3. 量子力学的主要内容

④ 量子态的演化（非相对论量子力学）

- a. 如果没有与宏观体系发生作用，量子态的演化遵循薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

- b. 解薛定谔方程等价于对角化 \hat{H} 矩阵
- c. 如果体系处于量子态 $|\psi\rangle$ ，并且去测量力学量 \hat{f} （即与宏观体系发生作用），那么测量的结果将以 $|\langle f|\psi\rangle|^2 / \langle \psi|\psi\rangle$ 的几率(密度)，得到值 f ；与此同时，体系的状态瞬间从原来的 $|\psi\rangle$ 塌缩到 $\langle f|\psi\rangle|f\rangle$ ；或者简单说，测量将以 $|\langle f|\psi\rangle|^2$ 的相对几率(密度)，得到 $|f\rangle$ 对应的结果
- d. 互相对易的力学量可以同时测量得到确定的值，并且通过这种同时测量使得体系塌缩到它们的共同本征态；而互相不对易的力学量，则存在不确定关系，一般不能同时测得确定的值