第8章：表象变换与量子力学的矩阵形式

2017年6月3日 9:18

- ☐ Schrödinger图像，Heisenberg图像，相互作用图像
- ☐ 量子态的不同表象
- ☐ 力学量的矩阵表示与表象变换
- ☐ 量子力学的矩阵形式
- ☐ Dirac符号

Schrödinger图像，Heisenberg图像，相互作用图像

Schrödinger图像，时间演化算符

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}=\hat{H}\psi(t)$$

假设有时间演化算符 $\hat{U}(t)$, 使得 $\psi(t)=\hat{U}(t,0)\psi(0)$, 则有

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,0)}{\partial t}\psi(0)=\hat{H}\hat{U}(t,0)\psi(0)$$

$$\Longrightarrow i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,0)}{\partial t}=\hat{H}\hat{U}(t,0)$$

$$\Longrightarrow \frac{1}{\hat{U}(t)}\frac{\partial\hat{U}(t,0)}{\partial t}=-\frac{i\hat{H}}{\hbar}$$

$$\Longrightarrow \hat{U}(t,0)=e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$$

由于 $\hat{H}=\hat{H}^{\dagger}$, 所以$\hat{U}\hat{U}^{\dagger}=1$

时间演化算符 $\hat{U}(t,0)=e^{-iHt/\hbar}$ 是幺正算符

★ Schrödinger图像中波函数显含时间，力学量算符不显含时间

但是力学量平均值含时

$$\frac{d}{dt}\bar{F}(t) = \frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{F},\hat{H}]}$$

? 能否让波函数不显含时间，力学量显含时间

$$\bar{F}(t) = \big(\psi(t), F\psi(t)\big) = \big(\hat{U}(t,0)\psi(0), F\hat{U}(t,0)\psi(0)\big)$$
$$= \big(\psi(0), \hat{U}^{\dagger}(t,0)F\hat{U}(t,0)\psi(0)\big)$$
$$= \big(\psi(0), \hat{F}(t)\psi(0)\big)$$
$$\hat{F}(t) = \hat{U}^{\dagger}(t,0)\hat{F}\hat{U}(t,0) = e^{iHt/\hbar}\hat{F}e^{-iHt/\hbar}$$

Heisenberg 图像

力学量算符 $\hat{F}(t)$ 显含时间，波函数 $\psi(0)$不显含时间

$$\frac{d}{dt}\hat{F}(t) = \left[\frac{d}{dt}\hat{U}^{\dagger}(t,0)\right]\hat{F}\hat{U}(t,0) + \hat{U}^{\dagger}(t,0)\hat{F}\frac{d}{dt}\hat{U}(t,0)$$
$$= \frac{1}{i\hbar}\left(-\hat{U}^{\dagger}\hat{H}\hat{F}\hat{U} + \hat{U}^{\dagger}\hat{F}\hat{H}\hat{U}\right)$$
$$= \frac{1}{i\hbar}\left(-\hat{U}^{\dagger}\hat{H}\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\hat{F}\hat{U} + \hat{U}^{\dagger}\hat{F}\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\hat{H}\hat{U}\right)$$
$$= \frac{1}{i\hbar}\left(-\hat{H}\hat{F}(t) + \hat{F}(t)\hat{H}\right)$$

Heisenberg方程

$$\frac{d}{dt}\hat{F}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t), \hat{H}]$$

两种图像是等价的，凡物理上可测的结果都不会因所采取图像不同而异。例如，力学量的平均值和概率分布。守恒量在两个表象中也是等价的。

处理具体问题时，可根据情况采用较方便的图像

$$F_S(t) = F_S(0) = F_S \qquad （与时间无关）$$
$$F_H(t) = e^{iHt/\hbar}F_S e^{-iHt/\hbar}$$
$$\frac{d}{dt}F_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[F_H(t), H]$$

$$\psi_H(t) = \psi_H(0) = \psi_S(0) = e^{iHt/\hbar}\psi_S(t)$$
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_S(t) = H\psi_S(t)$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_H(t) = 0$$

相互作用图像

$H = H_0 + H'$

通常H'表示体系与外界的相互作用，而H_0表示体系本身

$$\psi_I(t) = \exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)\psi_S(t)\text{，即 } \psi_S(t) = \exp(-\mathrm{i}H_0t/\hbar)\psi_I(t) \quad (5.3.21)$$

容易证明

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t) = \exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)(-H_0+H)\psi_S(t) = \exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)H'\psi_S(t)$$
$$= \exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)H'\exp(-\mathrm{i}H_0t/\hbar)\cdot\exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)\psi_S(t)$$

即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t) = H'_I(t)\psi_I(t) \quad (5.3.22)$$

式中

$$H'_I(t) = \exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)H'\exp(-\mathrm{i}H_0t/\hbar) \quad (5.3.23)$$

算符

$F_I(t) = \exp(\mathrm{i}H_0t/\hbar)F\exp(-\mathrm{i}H_0t/\hbar)$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F_I(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F_I(t), H_0]$$

在相互作用图像中，态矢 $\psi_I(t)$ 和力学量（算符） $\hat{F}_1(t)$都随时间而演化．态矢的演化由相互作用$H'(t)$来支配，而力学量（算符）随时间的演化则由H_0支配．相互作用图像是介于 Schrodinger 图像和 Heisenberg图像之间的一种图像。

量子态的不同表象，么正变换

图像：含时演化的三种图像

表象：基矢选择的不同，构造出不同的表象：坐标表象，动量表象

例如，一维无限深势阱有一系列本征函数

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right),$$

如果势阱宽度增加一倍，则变为

$$\phi_n = \sqrt{\frac{1}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$$

两组都是一系列正交归一的完备本征函数系。如果一个量子态可以表示为

$\psi = \sum C_m\psi_m$

那必然也可以表示为

$\psi = \sum C'_m\phi_m$

? 如何从一套本征函数系到另外一套本征函数系

$\sum C_m\psi_m = \sum C'_m\phi_m$

左乘 ψ_{n^*}然后积分

$C_n = \sum C'_m(\psi_n, \phi_m)$

如果定义矩阵元 $S_{nm} = (\psi_n, \phi_m)$

$$\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ C_n \end{pmatrix} = S\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ C_n \end{pmatrix}$$

S是幺正矩阵

$$(S^{\dagger}S)_{mn}=\sum_l (S^{\dagger})_{ml}S_{ln}=\sum_l S_{lm}^{*}S_{ln}=\sum_l(\phi_m,\psi_l)(\psi_l,\phi_n)$$

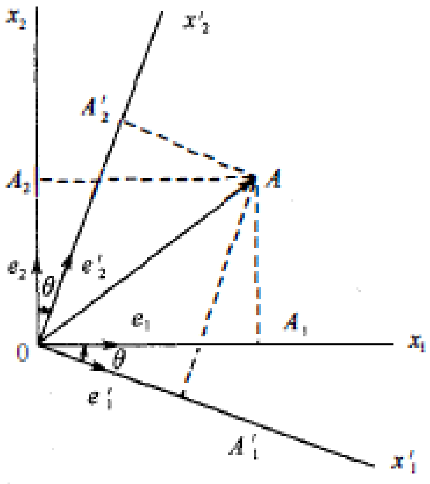
$$=\sum_l \int dx^3\int dx'^3\phi_m^{*}(\boldsymbol{r})\psi_l(\boldsymbol{r})\psi_l(\boldsymbol{r}')\phi_n(\boldsymbol{r}')$$

$$=\sum_l \int dx^3\int dx'^3\phi_m^{*}(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_n(\boldsymbol{r}')$$

$$=\sum_l \int dx^3\phi_m^{*}(\boldsymbol{r})\phi_n(\boldsymbol{r})$$

$$=\delta_{mn}$$

? 一套完备的正交归一本征函数系有何意义



如图，平面直角坐标系基矢为$\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2$, 彼此正交 $(\boldsymbol{e}_i,\boldsymbol{e}_j)=\delta_{ij}$

平面上任意矢量可以表示为

$\boldsymbol{A}=A_1\boldsymbol{e}_1+A_2\boldsymbol{e}_2$

$A_1=(\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{A}),A_2=(\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{A})$

现在假设另取一个直角坐标系 $x'_1x'_2$，相当于原来坐标系顺时针转过 θ 角，其基矢分别用 e'_1、e'_2 表示，而

$$(e'_i,e'_j)=\delta_{ij},\qquad i,j=1,2$$

同一个矢量 $\mathbf{A}$，在此新坐标系中表示为

$$\mathbf{A}=A'_1e'_1+A'_2e'_2$$

其中

$$A'_1=(e'_1,\mathbf{A}),\qquad A'_2=(e'_2,\mathbf{A})$$

$$\boldsymbol{A} = A_1\boldsymbol{e}_1 + A_2\boldsymbol{e}_2 = A_1'\boldsymbol{e}_1' + A_2'\boldsymbol{e}_2'$$

上式分别用 $\boldsymbol{e}_1'$、$\boldsymbol{e}_2'$ 点乘(取标积),得

$$A_1' = A_1(\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_1) + A_2(\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2)$$
$$A_2' = A_1(\boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_1) + A_2(\boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_2)$$

表示成矩阵形式,则为

$$\begin{pmatrix} A_1' \\ A_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_1) & (\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2) \\ (\boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_1) & (\boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A_1' \\ A_2' \end{pmatrix} = R(\theta) \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}$$

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$R^+ R = RR^+ = 1$$

任意量子态可由一组正交完备基矢(不一定是能量本征态，正交完备即可)构成

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m, \qquad (\psi_n, \psi_m) = \delta_{mn}$$

系数 $c_m = (\psi_m, \psi)$是ψ在ψ_m上的投影，也可以被称作概率幅，其模平方表示量子态处于某一本征态上的概率

这与平面空间里的基矢相类似，定义这一正交完备基矢的空间为Hilbert空间（可以使无穷维）

力学量（算符）的矩阵表示与表象变换

算符作用在量子态上等于什么

$\phi = \hat{L}\varphi$

按照态叠加原理，如果有一组正交完备基矢$\{\psi_k\}$,则可表示为

$$\phi = \sum_{\mathrm{k}} b_k \psi_k = \hat{L}\varphi = \hat{L} \sum_k a_k \psi_k$$

左乘ψ_j取标积可得

$$b_j = \sum_k a_k (\psi_j, \hat{L}\psi_k)$$

即

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & \cdots \\ L_{21} & L_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

所以矩阵 $L_{jk} = (\psi_j, \hat{L}\psi_k)$称为 $\hat{L}$ 在 F 表象中的矩阵表示（如果基矢由力学量完全集 F 确定）

第k个基矢的矩阵表示

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ 1(第k行) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

则在$\hat{L}$操作后变为

$$\begin{pmatrix} L_{1k} \\ L_{2k} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

一维谐振子坐标和动量在能量表象下的矩阵表示

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

$$x_{mn} = (\psi_m, x\psi_n) = \frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\,\delta_{m,n-1}\right]$$

$$(x_{mn}) = \frac{1}{\alpha}\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \cdots \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}$$

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

$$p_{mn} = (\psi_m, \hat{p}\,\psi_n) = \mathrm{i}\hbar\alpha\left[\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\delta_{m,n+1} - \sqrt{\frac{n}{2}}\,\delta_{m,n-1}\right]$$

$$(p_{mn}) = \mathrm{i}\hbar\alpha\begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \cdots \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & -\sqrt{\frac{3}{2}} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}$$

$$H_{mn} = (\psi_m, \hat{H}\psi_n) = E_n(\psi_m, \psi_n) = E_n\delta_{mn} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\delta_{mn}$$

$$(H_{mn}) = \hbar\omega\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

任何一个算符在其自身本征本征矢为基矢的表象下的矩阵形式是对角矩阵

力学量的表象变换

在 F 表象中(基矢 ψ_k),力学量 L 表示成矩阵(L_{kj}),

$$L_{kj} = (\psi_k, \hat{L}\psi_j)$$

设另有一个表象 F'(基矢 ψ'_α),类似可把 L 表示成矩阵$(L'_{\alpha\beta})$,

$$L'_{\alpha\beta} = (\psi'_\alpha, \hat{L}\psi'_\beta)$$

利用

$$\psi'_\alpha = \sum_k \psi_k(\psi_k, \psi'_\alpha) = \sum_k \psi_k S^*_{\alpha k}, \qquad S_{\alpha k} = (\psi'_\alpha, \psi_k)$$

$$\psi'_\beta = \sum_j \psi_j(\psi_j, \psi'_\beta) = \sum_j \psi_j S^*_{\beta j}$$

得

$$L'_{\alpha\beta} = \sum_{kj} S_{\alpha k} S^*_{\beta j}(\psi_k, \hat{L}\psi_j) = \sum_{kj} S_{\alpha k} L_{kj} S^+_{j\beta} = (SLS^+)_{\alpha\beta}$$

即

$$L' = SLS^{+} = SLS^{-1}$$

量子力学的矩阵表示

- 本征方程

$\hat{L}\psi = L'\psi$

如果有$\psi = \sum_k a_k\psi_k$

$$\sum_k a_k\hat{L}\psi_k = L'\sum_k a_k\psi_k$$

于是有本征方程的矩阵形式

$$\sum_k L_{jk}a_k = L'a_j$$

即

$$\sum_k (L_{jk} - L'\delta_{jk})a_k = 0$$

上式为线性齐次代数方程组，其有非平庸解的充要条件为

$\det|L_{jk} - L'\delta_{jk}| = 0$

即

$$\begin{vmatrix} L_{11}-L' & L_{12} & L_{13} & \cdots \\ L_{21} & L_{22}-L' & L_{23} & \cdots \\ L_{31} & L_{32} & L_{33}-L' & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} = 0$$

由此，如果$\hat{L}$是厄米算符，那么(L_{jk})是厄米矩阵,可以得出N个实根,对应N个本征值。吧本征值代入$\sum_k(L_{jk}-L'\delta_{jk})a_k=0$可求出相应的本征态矢

$$\begin{pmatrix} a_1^{(j)} \\ a_2^{(j)} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad j=1,2,\cdots,N$$

- Schrödinger 方程

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

在以 ψ_k 为基矢的 F 表象中(ψ_k 不含 t),令

$$\psi(t)=\sum_k a_k(t)\psi_k$$

代入式(8.3.8)得

$$\mathrm{i}\hbar\sum_k\frac{\mathrm{d}a_k}{\mathrm{d}t}\psi_k=\sum_k a_k\hat{H}\psi_k$$

左乘 ψ_j^*(取标积),得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_j}{\mathrm{d}t}=\sum_k H_{jk}a_k,\quad H_{jk}=(\psi_j,\hat{H}\psi_k)$$

或写成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

这就是 F 表象中的 Schrödinger 方程.

- 平均值

在态 $\psi=\sum a_k\psi_k$ 下,力学量 L 的平均值表示为

$$\bar{L}=(\psi,\hat{L}\psi)=\sum_{jk}a_j^*(\psi_j,\hat{L}\psi_k)a_k=\sum_{jk}a_j^*L_{jk}a_k$$

$$=(a_1^*,a_2^*,\cdots)\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & \cdots \\ L_{21} & L_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

特殊情况：若采用L表象（以$\hat{L}$自己的本征矢为基矢的表象）。(L_{jk})是对角矩阵
$L_{jk}=L_k\delta_{jk}$
其平均值可表示为

$$\bar{L} = \sum_k |a_k|^2 L_k$$

总　结

F 表象(基矢 ψ_k)	F′表象(基矢 ψ'_α)
态 ψ	
$a=\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, a_k=(\psi_k,\psi)$	$a'=\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, a'_\alpha=(\psi'_\alpha,\psi)$
力学量 $\hat{L}$	
$L=(L_{kj})=\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & \cdots \\ L_{21} & L_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$	$L'=(L'_{\alpha\beta})=\begin{pmatrix} L'_{11} & L'_{12} & \cdots \\ L'_{21} & L'_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$
$L_{kj}=(\psi_k,\hat{L}\psi_j)$	$L'_{\alpha\beta}=(\psi'_\alpha,\hat{L}\psi'_\beta)$

$$a' = Sa$$
$$L' = SLS^{+} = SLS^{-1}$$
$$S = (S_{\alpha k}) = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$
$$S_{\alpha k} = (\psi'_\alpha, \psi_k)$$

S 是 $F\to F'$ 表象的变换矩阵. 逆变换为 $S^{-1}=S^{+}$.

$$a = S^{+} a', \quad L = S^{+} L' S$$

Dirac 符号

既然Hilbert空间里表象是不重要的，所以如果将波函数正交归一 $(\psi_j,\psi_k)=\delta_{jk}$ 理解为两个矢量的内积，不涉及具体表象（如坐标，动量，能量）的话，可以定义

$$\overbrace{\begin{matrix} \text{Bra} & \text{Ket} \\ \langle\psi| & |\phi\rangle \end{matrix}}^{\text{Braket}}$$

行矢量　列矢量

内积：标量积(Scalar product)

$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$

正交：$\langle\psi|\phi\rangle = 0$

归一：$\langle\psi|\psi\rangle = 1$

分离谱正交归一：$\langle k|j\rangle = \delta_{jk}$

连续谱正交归一：$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$

态叠加原理：$|\psi\rangle = \sum_k a_k|k\rangle$ $a_k = \langle k|\psi\rangle$

于是有

$$|\psi\rangle = \sum_k \langle k|\psi\rangle|k\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|\psi\rangle$$

于是可以定义投影算符

$P_k = |k\rangle\langle k| = I$

满足

$\sum_k |k\rangle\langle k| = I$ (单位算符)

对连续谱有

$\int \mathrm{d}x'|x'\rangle\langle x'| \equiv I$

$\int \mathrm{d}p'|p'\rangle\langle p'| \equiv I$

内积的态矢量表示

$$|\psi\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|\psi\rangle = \sum_k a_k |k\rangle$$

$$|\varphi\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|\varphi\rangle = \sum_k b_k |k\rangle$$

$$\langle\varphi,\psi\rangle = \sum_{jk} b_j^* \langle j|k\rangle a_k = \sum_{jk} b_j^* \delta_{jk} a_k$$

$$= \sum_{jk} b_k^* a_k = (b_1^*, b_2^* \cdots) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

算符在具体表象中的表示

$|\phi\rangle = \hat{L}|\psi\rangle$

$$\langle k|\phi\rangle = \langle k|\hat{L}|\psi\rangle = \sum_j \langle k|\hat{L}|j\rangle\langle j|\psi\rangle$$

$$b_k = \sum_j L_{kj}\, a_j$$

$L_{kj} = \langle k|\hat{L}|j\rangle$

? 不需要具体的量子态能否构造算符的矩阵形式

利用投影算符

$$\hat{L} = \sum_j |j\rangle\langle j|\hat{L}\sum_k |k\rangle\langle k| = \sum_{jk}\langle j|\hat{L}|k\rangle|j\rangle\langle k|$$

矩阵元 $L_{jk} = \langle j|\hat{L}|k\rangle$,

$$|j\rangle\langle k| = \begin{pmatrix} \vdots \\ \underbrace{1}_{\text{row j}} \\ \vdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cdots & \underbrace{1}_{\text{line k}} & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & \underbrace{1}_{\substack{\text{row j} \\ \text{line k}}} & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

求和以后正好是算符 $\hat{L}$ 的矩阵形式

本征方程

$$\hat{L}|\psi\rangle = L'|\psi\rangle$$

$$\text{左边} = \langle k|\hat{L}|\psi\rangle = \sum_j \langle k|\hat{L}|j\rangle\langle j|\psi\rangle = \sum_j L_{kj} a_j$$

$$\text{右边} = L'\langle k|\psi\rangle = L' a_k$$

$$\sum_j (L_{kj} - L'\delta_{kj}) a_j = 0$$

Schrödinger 方程

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle k|\psi\rangle = \langle k|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_j \langle k|\hat{H}|j\rangle\langle j|\psi\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}a_k = \sum_j H_{kj}a_j$$

力学量平均值

$$\bar{L} = \langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle = \sum_{kj}\langle\psi|k\rangle\langle k|\hat{L}|j\rangle\langle j|\psi\rangle = \sum_{kj}a_k^* L_{kj}a_j$$

表象变换

$$\langle\alpha|\psi\rangle = \sum_k\langle\alpha|k\rangle\langle k|\psi\rangle$$

$$a'_\alpha = \sum_k S_{\alpha k}a_k$$

$$S_{\alpha k} = \langle\alpha|k\rangle$$

$$S^+ S = SS^+ = I \quad \text{（单位算符）}$$

$$(S^+ S)_{kj} = \sum_\alpha S^+_{k\alpha}S_{\alpha j} = \sum_\alpha S^*_{\alpha k}S_{\alpha j}$$

$$= \sum_\alpha\langle\alpha|k\rangle^*\langle\alpha|j\rangle = \sum_\alpha\langle k|\alpha\rangle\langle\alpha|j\rangle = \langle k|j\rangle = \delta_{kj}$$

$$L'_{\alpha\beta} = \langle\alpha|\hat{L}|\beta\rangle = \sum_{jk}\langle\alpha|j\rangle\langle j|\hat{L}|k\rangle\langle k|\beta\rangle$$
$$= \sum_{jk}\langle\alpha|j\rangle L_{jk}\langle\beta|k\rangle^* = \sum_{jk}S_{\alpha j}L_{jk}S^*_{\beta k}$$
$$= \sum_{jk}S_{\alpha j}L_{jk}S^+_{k\beta} = (SLS^+)_{\alpha\beta}$$

$$L' = SLS^+ = SLS^{-1}$$

$$a' = Sa$$

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

坐标表象和动量表象

首先讨论坐标 x，其本征方程为

$$\hat{x}\,|x'\rangle = x'|x'\rangle \quad (-\infty < x'(\text{实}) < +\infty)$$

本征态的正交"归一"关系为

$$\langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'')$$

任一量子态 $|\psi\rangle$ 在 x 表象中表示为 $\langle x|\psi\rangle$，通常记为

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$$

例如在 x 表象中，坐标本征态（本征值 x'）表示为

$$\psi_{x'}(x) = \langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$$

而动量本征态（本征值 p'）表示为

$$\langle x|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'x/\hbar} \tag{8.4.30}$$

与此类似，动量 p 的本征方程和本征态的正交"归一"关系为

$$\hat{p}\,|p'\rangle = p'|p'\rangle \quad (-\infty < p'(\text{实}) < +\infty) \tag{8.4.31}$$

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'') \tag{8.4.32}$$

任一量子态 $|\psi\rangle$ 在动量表象中表示为 $\langle p|\psi\rangle$. 为了跟 $|\psi\rangle$ 在坐标表象中的函数表示 $\psi(x)=\langle x|\psi\rangle$ 相区别，通常把 $\langle p|\psi\rangle$ 记为 $\varphi(p)$，这是通常用函数来表示量子态的缺点. 在 Dirac 符号中，这种混淆不再出现.

在 p 表象中，动量本征态（本征值 p'）表示为

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p') \tag{8.4.33}$$

而坐标本征态（本征值 x'）表示为

$$\varphi_{x'}(p) = \langle p|x'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x'p/\hbar} \tag{8.4.34}$$

Dirac符号做表象变换很方便

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int \mathrm{d}p'\langle x|p'\rangle\langle p'|\psi\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}p'\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'x/\hbar}\varphi(p') = \int \mathrm{d}p\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\varphi(p)$$

$$\varphi(p) = \langle p|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x'\langle p|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}x'\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x'p/\hbar}\psi(x') = \int \mathrm{d}x\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}xp/\hbar}\psi(x)$$

力学量的"矩阵"表示如下，例如，坐标 x"矩阵"表示为

$$\langle x'|\hat{x}|x''\rangle = x'\delta(x'-x'')$$

$$\langle x'|V(x)|x''\rangle = V(x')\delta(x'-x'')$$

而动量 p 的"矩阵"表示为

$$\langle x'|\hat{p}|x''\rangle=\iint \mathrm{d}p'\mathrm{d}p''\langle x'|p'\rangle\langle p'|\hat{p}|p''\rangle\langle p''|x''\rangle$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\iint \mathrm{d}p'\mathrm{d}p''\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'x'/\hbar}\cdot p'\delta(p'-p'')\cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p''x''/\hbar}$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}p'p'\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(x'-x'')/\hbar}=\frac{1}{2\pi\hbar}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\int \mathrm{d}p'\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(x'-x'')/\hbar}$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'') \qquad (8.4.39)$$

与此类似，可以计算出，在动量表象中动量 p 的"矩阵"表示为

$$\langle p'|\hat{p}|p''\rangle=p'\delta(p'-p'') \qquad (8.4.40)$$

而坐标 x 的"矩阵"表示为

$$\langle p'|\hat{x}|p''\rangle=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\delta(p'-p'')$$

类似，

$$\langle p'|V(x)|p''\rangle=V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\right)\delta(p'-p'')$$