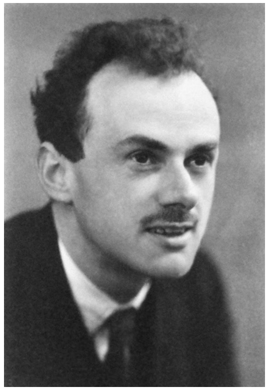
第二章 量子力学的形式理论

2.1 右矢、左矢和Hilbert空间

- 态叠加原理：任何一个量子态都是其他的两个或者更多个量子态叠加的结果，而任何两个或者多个量子态的叠加产生一个新的量子态。



- 一个系统的量子态可以看成是一个线性空间中的矢量。
  - Dirac符号：用右矢（ket）$|\alpha\rangle$ 表示一个量子态，其中α是态的标记。
- 所有的右矢构成了一个线性空间，它们遵守如下的所有线性空间的条件：

（1）两个右矢可以相加

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$$

其中$|\gamma\rangle$是另外一个右矢。这是态叠加原理的直接结果。

（2）加法满足交换律和结合律

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$$

$$(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle = |\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle)$$

2.1 右矢、左矢和Hilbert空间

（3）存在一个空矢量 $|\mathfrak{null}\rangle$ 满足

$$|\alpha\rangle + |\mathfrak{null}\rangle = |\alpha\rangle$$

每个右矢$|\alpha\rangle$都有一个相反的右矢$|\alpha'\rangle$，满足$|\alpha\rangle + |\alpha'\rangle = |\mathfrak{null}\rangle$。

（4）对$|\alpha\rangle$乘上一个复数c，其结果$c|\alpha\rangle$是另外一个右矢，并且$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c$

❖ 如果 $c = 0$，那么其结果将是一个空矢量

❖ 物理要求：如果 $c \neq 0$，那么$|\alpha\rangle$和 $c|\alpha\rangle$代表同一个量子态

（5）右矢和复数的乘法满足下列条件

$$(cd)|\alpha\rangle = c(d|\alpha\rangle)$$
$$(c+d)|\alpha\rangle = c|\alpha\rangle + d|\alpha\rangle$$
$$c(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = c|\alpha\rangle + c|\beta\rangle$$
$$1|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$$

2.1 右矢、左矢和Hilbert空间

- 定义内积，产生一个内积空间。
  - 我们首先定义左矢（Bra）空间，它是右矢空间的一个对偶空间，并且和右矢空间是一一对应关系。

与 $|\alpha\rangle$ 对应的左矢用 $\langle\alpha|$ 表示， $|\alpha\rangle \overset{\text{DC}}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|$

更一般地， $c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle \overset{\text{DC}}{\longleftrightarrow} c_\alpha^*\langle\alpha| + c_\beta^*\langle\beta|$

  - 内积通过将左矢放在左边而将右矢放在右边来表示

$$\langle\beta|\alpha\rangle = (\langle\beta|) \cdot (|\alpha\rangle)$$

其结果是一个复数。

  - 内积的三个基本性质

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 \qquad \text{（可以保证概率非负）}$$

$$\langle\gamma| \cdot (c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle) = c_\alpha\langle\gamma|\alpha\rangle + c_\beta\langle\gamma|\beta\rangle$$

2.1 右矢、左矢和Hilbert空间

➢ 通过内积，我们可以定义态矢量的模，

$$\|\alpha\| = \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$$

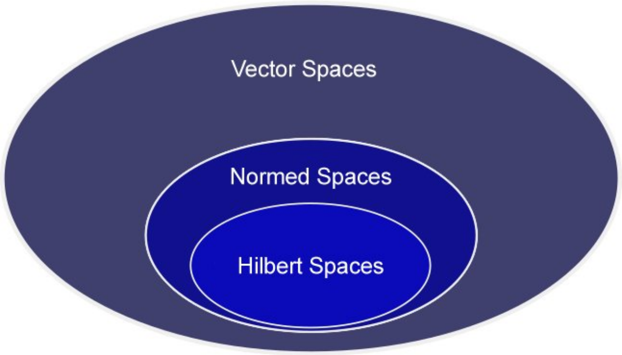
❖ 利用态矢量的模，我们可以将$|\alpha\rangle$归一化，

$$|\alpha\rangle \to \frac{1}{\|\alpha\|}|\alpha\rangle$$

➢ 两个态矢量 $|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$的正交性条件为

$$\langle\alpha|\beta\rangle = 0$$

➢ 我们要求右矢空间包含我们所研究系统的所有量子态，因此这个内积空间是完备的，于是我们称这个右矢空间为Hilbert 空间。显然，左矢空间也是一个Hilbert 空间。



2.2 线性算符和可观测量

2.2.1 线性算符的定义和运算规则

- 算符：对态矢量的操作（变换）
- 满足下面两个条件的算符称为线性算符

$$\hat{A}(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = \hat{A}|\alpha\rangle + \hat{A}|\beta\rangle$$

$$\hat{A}(c|\alpha\rangle) = c\hat{A}|\alpha\rangle$$

❖ 算符总是从左边作用到右矢上，其结果为另一个右矢。

- 算符相等

如果两个算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对任意右矢 $|\alpha\rangle$ 都有

$$\hat{A}|\alpha\rangle = \hat{B}|\alpha\rangle$$

则 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 相等，即 $\hat{A} = \hat{B}$

- 算符对左矢的作用

$$(\langle\alpha|)\hat{A} = \langle\alpha|\hat{A}$$

❖ 算符总是从右边作用到左矢上，其结果为另一个左矢。

2.2 线性算符和可观测量

- 算符的厄米共轭
  - 通常，左矢 $\langle\alpha|\hat{A}$ 并不是右矢 $\hat{A}|\alpha\rangle$ 的对偶矢量。我们定义 $\hat{A}^\dagger$ 满足

$$\hat{A}|\alpha\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha|\hat{A}^\dagger$$

  - 同时我们定义如下运算规则

$$(\hat{A}|\alpha\rangle)^\dagger = |\alpha\rangle^\dagger\hat{A}^\dagger = \langle\alpha|\hat{A}^\dagger$$

  其中，态矢量的厄米共轭的一般性定义为

$$(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle)^\dagger = c_\alpha^*\langle\alpha| + c_\beta^*\langle\beta|$$

  - 算符 $\hat{A}^\dagger$ 称为 $\hat{A}$ 的厄米共轭算符
- 如果 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$，则算符 $\hat{A}$ 称为厄米算符
- 算符的基本运算：加法、数乘和乘法
  - 两个算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的加法 $\hat{A}+\hat{B}$ 定义为

$$(\hat{A}+\hat{B})|\alpha\rangle = \hat{A}|\alpha\rangle + \hat{B}|\alpha\rangle$$

  其中，$|\alpha\rangle$ 是任意态矢量
  - 加法满足交换律和结合律：$\hat{A}+\hat{B} = \hat{B}+\hat{A}$，$(\hat{A}+\hat{B})+\hat{C} = \hat{A}+(\hat{B}+\hat{C})$

2.2 线性算符和可观测量

❖ 复数 c 与算符 $\hat{A}$ 的数乘 $c\hat{A}$ 定义为

$$(c\hat{A})|\alpha\rangle = c\hat{A}|\alpha\rangle$$

其中，$|\alpha\rangle$ 是任意态矢量。根据前面结果，我们有

$$(\hat{A}|\alpha\rangle)^\dagger = |\alpha\rangle^\dagger \hat{A}^\dagger = \langle\alpha|\hat{A}^\dagger$$

$$(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle)^\dagger = c_\alpha^*\langle\alpha| + c_\beta^*\langle\beta|$$

$$(c_a\hat{A} + c_b\hat{B})^\dagger = c_a^*\hat{A}^\dagger + c_b^*\hat{B}^\dagger$$

❖ 两个算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的乘法 $\hat{A}\hat{B}$ 定义为

$$(\hat{A}\hat{B})|\alpha\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\alpha\rangle)$$

其中，$|\alpha\rangle$ 是任意态矢量。

❖ 算符的乘法通常不满足交换律： $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

❖ 算符的乘法满足结合律： $\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}\hat{B}\hat{C}$

❖ 算符的乘积对态矢量的作用满足

$$\hat{A}(\hat{B}|\alpha\rangle) = (\hat{A}\hat{B})|\alpha\rangle \overset{\text{或}}{=\!=} \hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle$$

$$(\langle\alpha|\hat{A})\hat{B} = \langle\alpha|(\hat{A}\hat{B}) \overset{\text{或}}{=\!=} \langle\alpha|\hat{A}\hat{B}$$

2.2 线性算符和可观测量

- 由于 $\langle\alpha|(\hat{A}\hat{B})^\dagger=(\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle)^\dagger=[\hat{A}(\hat{B}|\alpha\rangle)]^\dagger=(\hat{B}|\alpha\rangle)^\dagger\hat{A}^\dagger=\langle\alpha|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$

  我们有 $(\hat{A}\hat{B})^\dagger=\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$

- 由于算符乘法不满足交换律，我们定义对易子来表示算符乘法的交换性质

$$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$$

  如果 $[\hat{A},\hat{B}]=0$，我们称 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 可对易，即它们的乘法运算可以交换顺序

- 结合律是右矢、左矢和算符之间乘法的普遍性质

$$\langle\alpha|(\hat{A}|\beta\rangle)=(\langle\alpha|\hat{A})|\beta\rangle=\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle$$

- 由于 $\langle\alpha|\hat{A}^\dagger$ 是与 $\hat{A}|\alpha\rangle$ 对偶的左矢，我们有

$$\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle=\langle\alpha|(\hat{A}|\beta\rangle)=((\langle\beta|\hat{A}^\dagger)|\alpha\rangle)^*=\langle\beta|\hat{A}^\dagger|\alpha\rangle^*$$

- 对于厄米算符 $\hat{A}$，我们有

$$\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle=\langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle^*$$

2.2 线性算符和可观测量

- 恒等算符：对任意的$|\alpha\rangle$都有 $\hat{I}|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$，$\langle\alpha|\hat{I} = \langle\alpha|$
- 逆算符：对任意的$|\alpha\rangle$，如果 $\hat{A}|\alpha\rangle = |\beta\rangle$，那么 $\hat{A}^{-1}|\beta\rangle = |\alpha\rangle$。

  根据逆算符的定义，有 $\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}$。我们经常将$\hat{I}$ 写为1。
- 态矢量的外积：$|\alpha\rangle\langle\beta|$
  - 将其与任意一个右矢$|\gamma\rangle$相乘：$(|\alpha\rangle\langle\beta|)|\gamma\rangle$
  - 因为乘法满足结合律，所以 $(|\alpha\rangle\langle\beta|)|\gamma\rangle = |\alpha\rangle(\langle\beta|\gamma\rangle)$
  - 外积与右矢相乘得到另一个右矢，因此$|\alpha\rangle\langle\beta|$可以被看作一个算符，

    并且容易验证 $(|\alpha\rangle\langle\beta|)^\dagger = |\beta\rangle\langle\alpha|$
  - 如果 $\alpha = \beta$，则 $\hat{P}_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|$ 称为投影算符。它对任意 $|\gamma\rangle$ 的作用为

$$\hat{P}_\alpha|\gamma\rangle = |\alpha\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle$$

    投影系数为$\langle\alpha|\gamma\rangle$。投影算符满足 $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$，$\hat{P}^2 = \hat{P}$
- 反线性算符：$\hat{A}(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle) = c_\alpha^*\hat{A}|\alpha\rangle + c_\beta^*\hat{A}|\beta\rangle$

2.2 线性算符和可观测量

2.2.2 厄米算符的本征值和本征态

- 线性算符的本征方程

$$\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

其中，$\hat{A}$ 是线性算符。α 是一个数，称为 $\hat{A}$ 的本征值。$|\alpha\rangle$ 是 α 对应的本征矢量。

  - 我们忽略 $|\alpha\rangle$ 为空矢量的平庸解
  - 如果没有特别说明，我们默认本征矢量是归一化的

- **定理：** 厄米算符的本征值都是实数，对应于不同本征值的本征矢量相互正交。

  - **证明：** 根据 $\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$，我们有

$$\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha\langle\alpha|\alpha\rangle$$

因为 $\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle$ 和 $\langle\alpha|\alpha\rangle$ 必然都是实数，而且 $\langle\alpha|\alpha\rangle$ 不为零，所以 α 是实数。

2.2 线性算符和可观测量

$$\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

- 由于 $\hat{A}$ 是厄米算符，我们有

$$\langle\beta|\hat{A} = \beta\langle\beta|$$

- 因此

$$(\alpha - \beta)\langle\beta|\alpha\rangle = 0$$

- 如果 $\alpha \neq \beta$，那么我们一定有

$$\langle\beta|\alpha\rangle = 0$$

两个态矢量正交

- 如果一个算符同时有几个（不同的）本征矢量对应同一个本征值，我们称这个本征值具有简并。
- 一般来讲，这些简并的本征矢量之间并不一定正交。但是，我们很容易实现它们之间的正交化，例如常用的Gram-Schmidt 正交化方法
- 根据态叠加原理，只要有两个简并态，就会有无穷多个简并态。
- 简并度：线性无关的简并态的数目。

2.2 线性算符和可观测量

- 算符函数

  - 考虑一个解析函数 $f(z)$，它的级数展开为

$$f(z)=\sum_n f_n z^n$$

  - 算符 $\hat{A}$ 的函数 $f(\hat{A})$ 定义为

$$f(\hat{A})=\sum_n f_n \hat{A}^n$$

  - 并且 $f(\hat{A})$ 满足

$$f(\hat{A})|\alpha\rangle=f(\alpha)|\alpha\rangle$$

  其中 $\hat{A}|\alpha\rangle=\alpha|\alpha\rangle$ 。如果 $\hat{A}$ 不是厄米算符，那么 α 可能是复数。

  - 一个算符的所有本征值的集合称为该算符的谱，算符函数的定义要满足 $\hat{A}$ 的谱半径（最大本征值绝对值）不大于 $f(z)$ 的收敛半径。

2.2 线性算符和可观测量

2.2.3 测量和可观测量

➢ 量子力学关于测量的假设

❖ 如果一个系统处在力学量 $\hat{A}$ 的本征态，则对 $\hat{A}$ 的测量一定给出确定的值，其值为该本征态对应的本征值。相反的，如果对一个系统的某个量子态做 $\hat{A}$ 的测量一定给出确定的值，那么该量子态为 $\hat{A}$ 的本征态，该测量值为相应的本征值。

◆ 这一假设限制了力学量算符的具体形式，即力学量的可能测量值必须为算符的本征值，同时给出了力学量算符本征值的物理意义。

❖ 对任意一个系统，力学量 $\hat{A}$ 的任何一次测量结果一定是它的某个本征值（相反地，每个本征值都是它的可能测量结果），测量后系统塌缩到该本征值所对应的本征态。

◆ 这意味着原来状态依赖于该本征态。原来状态可以是任意态，那么任何态都依赖于 $\hat{A}$ 的本征态。于是 $\hat{A}$ 的所有本征态形成一个完备集，$\hat{A}$ 称为可观测量。

2.2 线性算符和可观测量

- 因为物理量的测量值都是实数，所以可观测量都是厄米算符
- 因为 $\hat{A}$ 的本征态形成一个完备集，所以任意态 $|\alpha\rangle$ 可以用 $\hat{A}$ 的本征态展开

$$|\alpha\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle$$

其中 $|n\rangle$ 代表 $\hat{A}$ 的对应于本征值 a_n 的本征态。

- 考虑到本征态的正交性，我们有 $\phi_n = \langle n|\alpha\rangle$
- 因为 $|\alpha\rangle$ 包含 $\hat{A}$ 的多个本征态，所以在态 $|\alpha\rangle$ 下测量 $\hat{A}$ 可能会得到各种测量值，得到测量值为 a_n （即塌缩到 $|n\rangle$ ）的概率为

$$P_n = |\langle n|\alpha\rangle|^2$$

$|n\rangle$ 和 $|\alpha\rangle$ 都是归一化的。

- $|\alpha\rangle$ 可以写为：$|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\alpha\rangle$
- 态矢量的完备性条件可以写为: $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$

❖ 如果有连续本征值， $\sum_n |n\rangle\langle n| + \int dr|r\rangle\langle r| = 1$

2.2 线性算符和可观测量

- 期待值
  - 力学量 $\hat{A}$ 在量子态 $|\alpha\rangle$ 下的期待值定义为

$$\langle\hat{A}\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle$$

    其中 $|\alpha\rangle$ 是归一化的。

  - 利用 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$，我们可以将期待值写为

$$\langle\hat{A}\rangle_\alpha = \sum_{n,n'}\langle\alpha|n'\rangle\langle n'|\hat{A}|n\rangle\langle n|\alpha\rangle = \sum_n a_n \underbrace{|\langle n|\alpha\rangle|^2}_{\text{概率}}$$

  - $\hat{A}$ 的所有本征值都是可能测量值，而期待值是测量值的理论平均值
- 物理常数既可以被看做是只有一个本征值的可观测量也可以只当做一个数，两种看法是等价的。

2.2 线性算符和可观测量

2.2.4 共同本征态

- 如果两个算符满足 $[\hat{A},\hat{B}]=0$，即 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 可对易，那么一定存在 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征态，并且线性无关的共同本征态的数目等于Hilbert空间的维数。

- 设 $|\alpha\rangle$ 是 $\hat{A}$ 的本征态，即 $\hat{A}|\alpha\rangle=a|\alpha\rangle$
- 我们有 $\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle=\hat{B}\hat{A}|\alpha\rangle=a\hat{B}|\alpha\rangle$，即 $\hat{B}|\alpha\rangle$ 也是 $\hat{A}$ 的本征值为 a 的本征态
- 如果本征值 a 不简并，那么 $\hat{B}|\alpha\rangle=b|\alpha\rangle$，$b$是常数，即$|\alpha\rangle$也是$\hat{B}$的本征态
- 如果本征值 a 有简并，那么 $\hat{B}|\alpha\rangle$ 和 $|\alpha\rangle$ 不一定是同一个态，$|\alpha\rangle$ 不一定是 $\hat{B}$ 的本征态
- 由 $\hat{A}$ 的本征值 a 对应的本征态所张成的子空间是 $\hat{B}$ 的一个不变子空间，在这个子空间里 $\hat{B}$ 具有和 $\hat{A}$ 数目相同的线性无关的本征态。
- 对于有简并的情况，我们也一定能够找到 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征态

- 不对易的两个力学量是否可能有共同本征态？

2.2 线性算符和可观测量

➢ 如果力学量$\hat{F}$与两个力学量$\hat{A}$和$\hat{B}$都对易，但是$\hat{A}$与$\hat{B}$之间不对易，即

$$[\hat{F},\hat{A}]=0,\quad [\hat{F},\hat{B}]=0,\quad [\hat{A},\hat{B}]\neq 0,$$

那么力学量$\hat{F}$的本征值通常是有简并的。

❖ 充分条件

设$\hat{F}|\psi\rangle = f|\psi\rangle$，因为$\hat{F}\hat{A}|\psi\rangle = \hat{A}\hat{F}|\psi\rangle = f\hat{A}|\psi\rangle$，所以$\hat{A}|\psi\rangle$也是$\hat{F}$的本征值$f$对应的本征态。同理，$\hat{B}|\psi\rangle$也是$\hat{F}$的本征值$f$对应的本征态。根据前面讨论，总可以使$|\psi\rangle$和$\hat{A}|\psi\rangle$是同一个态。而由于$[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$，$|\psi\rangle$不可能同时也和$\hat{B}|\psi\rangle$是同一个态。因此，$\hat{F}$的本征值$f$是有简并的。

❖ 必要条件

如果一个算符的本征值有简并，那么可以构造至少两个与其对易但彼此不对易的力学量。设$\hat{F}$的本征值f有两个简并态$|\psi_1\rangle$和$|\psi_2\rangle$，可以构造两个算符$\hat{A}=a_1|\psi_1\rangle\langle\psi_1|+a_2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$，其中$a_1$和$a_2$是实数，并且$a_1\neq a_2$，和$\hat{B}=b|\psi_1\rangle\langle\psi_2|+b^*|\psi_2\rangle\langle\psi_1|$，其中$b\neq 0$。容易证明$[\hat{F},\hat{A}]=0$，$[\hat{F},\hat{B}]=0$，$[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$。

2.2 线性算符和可观测量

2.2.4 不确定关系

- 给定可观测量 $\hat{A}$，对于任意态 $|\alpha\rangle$ 定义算符

$$\Delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\alpha$$

其中 $\langle\hat{A}\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle$，而 $(\Delta\hat{A})^2$ 的期待值代表 $\hat{A}$ 的测量值的涨落，并且

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle_\alpha = \langle\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle\hat{A}\rangle_\alpha + \langle\hat{A}\rangle_\alpha^2\rangle_\alpha = \langle\hat{A}^2\rangle_\alpha - \langle\hat{A}\rangle_\alpha^2$$

如果 $|\alpha\rangle$ 是 $\hat{A}$ 的本征态，则测量值的涨落为零。

- 引理：Schwarz不等式

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2$$

证明：首先，

$$(\langle\alpha| + c^*\langle\beta|)(|\alpha\rangle + c|\beta\rangle) \geq 0$$

其中c可以是任意复数。令c等于 $-\langle\beta|\alpha\rangle/\langle\beta|\beta\rangle$，我们有

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle - |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \geq 0$$

2.2 线性算符和可观测量

- 对 $\Delta\hat{A}|\alpha\rangle$和 $\Delta\hat{B}|\alpha\rangle$应用Schwarz不等式，有

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle_\alpha\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle_\alpha \geq |\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle_\alpha|^2$$

这里，我们利用了$\Delta\hat{A}$和 $\Delta\hat{B}$ 是厄米算符。

- 容易证明

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}$$

其中$\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}$是反对易子

- 反对易子的定义为

$$\{\hat{A},\hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

- 对于厄米算符$\hat{A}$和$\hat{B}$，我们有

$$([\hat{A},\hat{B}])^\dagger = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A},\hat{B}]$$

$$(\{\hat{A},\hat{B}\})^\dagger = (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B} = \{\hat{A},\hat{B}\}$$

  - 因此，$\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle_\alpha$ 是纯虚数，$\langle\{\hat{A},\hat{B}\}\rangle_\alpha$ 是纯实数

2.2 线性算符和可观测量

- 利用这一结果，有

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}$$

$$|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle_\alpha|^2 = \frac{1}{4}|\langle[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]\rangle_\alpha|^2 + \frac{1}{4}|\langle\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}\rangle_\alpha|^2$$

- 于是，我们有

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle_\alpha\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle_\alpha \geq |\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle_\alpha|^2$$

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle_\alpha\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle_\alpha \geq \frac{1}{4}|\langle[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]\rangle_\alpha|^2 + \frac{1}{4}|\langle\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}\rangle_\alpha|^2$$

- 我们通常考虑的是它的弱化形式

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle_\alpha\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle_\alpha \geq \frac{1}{4}|\langle[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]\rangle_\alpha|^2 = \frac{1}{4}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle_\alpha|^2$$

- 如果我们定义 $\Delta a = \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle_\alpha - \langle\hat{A}\rangle_\alpha^2}$ 和 $\Delta b = \sqrt{\langle\hat{B}^2\rangle_\alpha - \langle\hat{B}\rangle_\alpha^2}$，那么我们有

$$\Delta a\Delta b \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle_\alpha|$$

- 能量-时间不确定关系：$\Delta E\Delta t \geq \hbar/2$

  ΔE：能量的涨落，Δt：多长时间量子态发生明显改变（量子态的寿命）

2.3 量子化条件

- 我们需要一个新的关系来代替乘法交换律，这个关系被称为量子化条件
- 正则量子化条件（正则对易关系）

$$[\hat{q}_\alpha, \hat{q}_\beta] = 0, \qquad [\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0, \qquad [\hat{q}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$$

其中，$\hat{\mathbf{q}}$ 是正则坐标，$\hat{\mathbf{p}}$ 是正则动量。这是量子力学的基本对易关系。

❖ 利用正则量子化条件，可以得到位置和动量的不确定关系：$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$

- 根据对易子的定义，我们有如下关系：

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}],$$
$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}],$$
$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C},$$
$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}.$$

❖ 利用这些关系以及基本对易关系，我们可以得到任意两个力学量算符的对易关系。

2.3 量子化条件

❖ 以角动量算符为例。角动量定义为

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

其三个分量为 $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$，$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$，$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$

❖ 三个分量满足如下对易关系：

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \qquad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

$$\begin{aligned}[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}, \hat{x}\hat{p}_z]\hat{p}_y = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y \\ &= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y = i\hbar\hat{L}_z\end{aligned}$$

❖ 这些对易关系也可以写成如下紧凑的形式：

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar\hat{L}_\gamma, \qquad \alpha, \beta, \gamma = x, y, z$$

其中 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 称为Levi-Civita符号，它是一个三阶反对称张量

❖ 还可以写成更简洁的形式：$\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar\hat{\mathbf{L}}$

2.4 表象和表象变换

2.4.1 态矢量的表示

- 将右矢、左矢和线性算符等抽象量用一系列数来表示，这种表示形式不唯一，每一种表示形式称为一个表象。
- 我们要选择一组正交完备基，可观测量的本征矢量可以满足这个要求。
- 假定我们选择可观测量 $\hat{A}$ 的本征态 $\{|n\rangle\}$作为Hilbert空间的基矢，我们可以将任意态矢量 $|\psi\rangle$ 表示为

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle$$

展开系数为$\psi_n = \langle n|\psi\rangle$。这些系数的集合$\{\psi_n\}$称为$|\psi\rangle$在$\hat{A}$表象的坐标

- 我们可以将态矢量表示为

$$|\psi\rangle = (|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |N\rangle)\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$$

其中我们假定了Hilbert空间维数是N。

❖ 于是，$|\psi\rangle$ 可以用一组数 $\{\psi_n\}$来表示

2.4 表象和表象变换

- 态矢量的表示依赖于基矢（即表象）的选择，利用两个表象间基矢的变换关系，我们可以得到两个表象下态矢量的表示之间的变换关系。
- 假定两个表象 $\hat{A}$ 和 $\hat{A}'$，其基矢分别为 $\{|n\rangle\}$ 和 $\{|n'\rangle\}$，在基矢 $\{|n\rangle\}$ 下可以将 $\{|n'\rangle\}$ 中每一个矢量表示为

$$|n'\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|n'\rangle$$

- 于是，我们得到如下变换关系：

$$(|1'\rangle, |2'\rangle, \cdots, |N'\rangle) = (|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |N\rangle)\,\hat{U}$$

其中 $$\hat{U} = \begin{pmatrix} \langle 1|1'\rangle & \langle 1|2'\rangle & \cdots & \langle 1|N'\rangle \\ \langle 2|1'\rangle & \langle 2|2'\rangle & \cdots & \langle 2|N'\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle N|1'\rangle & \langle N|2'\rangle & \cdots & \langle N|N'\rangle \end{pmatrix}$$

❖ 变换矩阵 $\hat{U}$ 是一个幺正矩阵

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$$

2.4 表象和表象变换

- 对任意一个态矢量$|\psi\rangle$，我们有

$$(|1\rangle,|2\rangle,\cdots,|N\rangle)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \vdots\\ \psi_N\end{pmatrix}=(|1'\rangle,|2'\rangle,\cdots,|N'\rangle)\begin{pmatrix}\psi'_1\\ \psi'_2\\ \vdots\\ \psi'_N\end{pmatrix}$$

$$=(|1\rangle,|2\rangle,\cdots,|N\rangle)\,\hat{U}\begin{pmatrix}\psi'_1\\ \psi'_2\\ \vdots\\ \psi'_N\end{pmatrix}$$

- 由于$\hat{U}$是么正矩阵，两个表象中态矢量的表示之间的变换为

$$\begin{pmatrix}\psi'_1\\ \psi'_2\\ \vdots\\ \psi'_N\end{pmatrix}=\hat{U}^\dagger\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \vdots\\ \psi_N\end{pmatrix}$$

2.4 表象和表象变换

➢ 左矢的表示为

$$\langle\psi| = (\psi_1^*, \psi_2^*, \cdots, \psi_N^*)\begin{pmatrix}\langle 1| \\ \langle 2| \\ \vdots \\ \langle N|\end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle = (|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |N\rangle)\begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N\end{pmatrix}$$

➢ 因此，在给定基矢后，右矢$|\psi\rangle$和左矢$\langle\psi|$可以分别表示为

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N\end{pmatrix}, \qquad \langle\psi| = (\psi_1^*, \psi_2^*, \cdots, \psi_N^*)$$

➢ 态矢量的内积表示为

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\phi\rangle = (\psi_1^*, \psi_2^*, \cdots, \psi_N^*)\begin{pmatrix}\phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_N\end{pmatrix}$$

➢ 力学量完全集：一组彼此之间可对易的力学量的集合，它们的共同本征态可以用来作为量子态表示的基矢。

$(\hat{A}_1、\hat{A}_2、\hat{A}_3、\cdots)$

$\{|a_1, a_2, a_3, \cdots\rangle\}$

2.4 表象和表象变换

2.4.2 算符的表示

- 考虑算符 $\hat{F}$ 对任意态矢量 $|\psi\rangle$ 的作用：$|\phi\rangle = \hat{F}|\psi\rangle$
- 在 $\hat{A}$ 表象下，有 $\langle m|\phi\rangle = \langle m|\hat{F}|\psi\rangle$
- 利用 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$，有

$$\langle m|\phi\rangle = \sum_n \langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|\psi\rangle, \quad \Rightarrow \quad \phi_m = \sum_n F_{mn}\psi_n$$

即如果态矢量 $|\psi\rangle$ 表示成 N 维列矢量，那么算符 $\hat{F}$ 可以表示成 $N \times N$ 矩阵，矩阵元为 $F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle$，其具体形式为

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{F}|1\rangle & \langle 1|\hat{F}|2\rangle & \cdots & \langle 1|\hat{F}|N\rangle \\ \langle 2|\hat{F}|1\rangle & \langle 2|\hat{F}|2\rangle & \cdots & \langle 2|\hat{F}|N\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle N|\hat{F}|1\rangle & \langle N|\hat{F}|2\rangle & \cdots & \langle N|\hat{F}|N\rangle \end{pmatrix}$$

2.4 表象和表象变换

- 算符 $\hat{F}$ 在两个不同表象下的矩阵表示之间的变换关系为

$$\langle m'|\hat{F}|n'\rangle = \sum_{mn}\langle m'|m\rangle\langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|n'\rangle = \sum_{mn} U^*_{mm'}F_{mn}U_{nn'}$$

即 $\hat{F}' = \hat{U}^\dagger \hat{F}\hat{U}$

- 如果算符 $\hat{F}$ 是厄米算符，并且基矢 $\{|n'\rangle\}$ 都是该算符的本征态，那么该算符在以 $\{|n'\rangle\}$ 为基矢的表象下的表示是对角矩阵，对角元是算符 $\hat{F}$ 的本征值。因此，计算厄米算符的本征值和本征态的过程就是将该算符的表示矩阵对角化的过程，而这个对角化的过程相当于对算符的表示做了一个幺正变换。

- 算符的复共轭 (F^*) 和转置 (F^{T})：它们分别对应于矩阵的复共轭和转置。而且算符的厄米共轭可以表示为

$$\hat{F}^\dagger = (\hat{F}^*)^{\mathrm{T}} = (\hat{F}^{\mathrm{T}})^*$$

2.4 表象和表象变换

➢ **例题：** 考虑一个2维Hilbert空间，其两个正交归一的基矢为$\{|1\rangle,|2\rangle\}$。定义在这个Hilbert空间的两个算符为

$$\hat{A}=\frac{1}{2}(|1\rangle\langle 2|+|2\rangle\langle 1|),\qquad \hat{B}=\frac{i}{2}(|1\rangle\langle 2|-|2\rangle\langle 1|)$$

（1）证明$\hat{A}$和$\hat{B}$是厄米算符。

（2）求在$\hat{B}$表象中$\hat{A}$的表示。

➢ **解：** （1） $\hat{A}^{\dagger}=\frac{1}{2}(|2\rangle\langle 1|+|1\rangle\langle 2|)=\hat{A}\qquad \hat{B}^{\dagger}=-\frac{i}{2}(|2\rangle\langle 1|-|1\rangle\langle 2|)=\hat{B}$

因此，$\hat{A}$ 和$\hat{B}$都是厄米算符。

（2）在以$\{|1\rangle,|2\rangle\}$为基的表象中$\hat{A}$和$\hat{B}$的矩阵表示为

$$\hat{A}=\begin{pmatrix}\langle 1|\hat{A}|1\rangle & \langle 1|\hat{A}|2\rangle\\ \langle 2|\hat{A}|1\rangle & \langle 2|\hat{A}|2\rangle\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\qquad \hat{B}=\frac{i}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}$$

2.4 表象和表象变换

❖ $\hat{B}$ 表象中的基矢是 $\hat{B}$ 的本征态，我们将 $\hat{B}$ 对角化求出其本征态。

$$\frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{vmatrix} \lambda & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & \lambda \end{vmatrix} = 0$$

解得本征值和相应的本征态为

$$\lambda_1 = \frac{1}{2}\,,\quad |\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix};\qquad \lambda_2 = -\frac{1}{2}\,,\quad |\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

❖ 在 $\hat{B}$ 表象中 $\hat{A}$ 的表示为

$$\hat{A}' = \begin{pmatrix} \langle\lambda_1|\hat{A}|\lambda_1\rangle & \langle\lambda_1|\hat{A}|\lambda_2\rangle \\ \langle\lambda_2|\hat{A}|\lambda_1\rangle & \langle\lambda_2|\hat{A}|\lambda_2\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

或者利用 $\hat{A}' = \hat{U}^\dagger \hat{A}\hat{U}$

其中变换矩阵为 $\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix}$

$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \quad \hat{A}'^\dagger = \hat{A}'$

不依赖表象

$\hat{A}^* = \hat{A} \quad \hat{A}'^* \neq \hat{A}$

$\hat{A}^{\mathrm{T}} = \hat{A} \quad \hat{A}'^{\mathrm{T}} \neq \hat{A}$

依赖表象

2.4 表象和表象变换

2.4.3 坐标和动量表象

- 与前面的讨论不同，这坐标和动量算符的本征值都是连续的。
- 坐标算符：$\hat{\mathbf{r}} = \hat{x}\mathbf{e}_x + \hat{y}\mathbf{e}_y + \hat{z}\mathbf{e}_z$，动量算符：$\hat{\mathbf{p}} = \hat{p}_x\mathbf{e}_x + \hat{p}_y\mathbf{e}_y + \hat{p}_z\mathbf{e}_z$
- $\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$和 $\{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z\}$都是力学量完全集，我们下面只考虑一个自由度
- 我们将坐标算符 $\hat{x}$ 的本征态标记为 $|x\rangle$，其本征方程为

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$$

- 本征态 $|x'\rangle$ 在 $\hat{x}$ 表象下的表示为

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

- 坐标算符 $\hat{x}$ 的表示为

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

- 坐标算符的本征态满足完备性条件

$$\int dx|x\rangle\langle x| = 1$$

- 任意态矢量 $|\psi\rangle$在坐标表象下的表示为

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

2.4 表象和表象变换

➢ 下面我们利用正则量子化条件导出动量算符 $\hat{p}_x$ 在坐标表象下的表示

❖ 引入辅助的线性算符 $\hat{\alpha}$，其定义为 $\langle x|\hat{\alpha}|\psi\rangle = \dfrac{\partial}{\partial x}\psi(x)$

其中 $|\psi\rangle$ 是任意态矢量。于是，我们有

$$\langle x|\hat{\alpha}\hat{x}|\psi\rangle = \frac{\partial}{\partial x}\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = \frac{\partial}{\partial x}[x\langle x|\psi\rangle] = x\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle + \langle x|\psi\rangle = \langle x|\hat{x}\hat{\alpha}|\psi\rangle + \langle x|\psi\rangle$$

所以 $\qquad \hat{\alpha}\hat{x} = \hat{x}\hat{\alpha} + 1 \qquad \Rightarrow \qquad [\hat{x},\hat{\alpha}] = -1$

❖ 根据 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}_x$ 的对易关系 $[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar$，我们可以将 $\hat{p}_x$ 写为 $\quad \hat{p}_x = -i\hbar\hat{\alpha}$

$$\langle\phi|\hat{\alpha}|\psi\rangle = \int\langle\phi|x\rangle\langle x|\hat{\alpha}|\psi\rangle dx = \int\langle\phi|x\rangle\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle dx = \langle\phi|x\rangle\langle x|\psi\rangle|_{-\infty}^{\infty} - \int\langle x|\psi\rangle\frac{\partial}{\partial x}\langle\phi|x\rangle dx$$

$$= -\int\langle x|\psi\rangle\frac{\partial}{\partial x}\langle\phi|x\rangle dx = -\int\langle\psi|x\rangle^*\left(\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\phi\rangle\right)^* dx = -\int\langle\psi|x\rangle^*\langle x|\hat{\alpha}|\phi\rangle^* dx$$

$$= -\left(\int\langle\psi|x\rangle\langle x|\hat{\alpha}|\phi\rangle dx\right)^* = -\langle\psi|\hat{\alpha}|\phi\rangle^* = -\langle\phi|\hat{\alpha}^\dagger|\psi\rangle$$

$\hat{\alpha} = -\hat{\alpha}^\dagger$

反厄米算符

保证 $\hat{p}_x$ 是厄米算符

❖ 于是，动量算符 $\hat{p}_x$ 在坐标空间的表示为

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

2.4 表象和表象变换

- $\hat{p}_x$的本征方程为

$$\hat{p}_x|p_x\rangle = p_x|p_x\rangle$$

在 $\hat{x}$ 表象中

$$\langle x|\hat{p}_x|p_x\rangle = \langle x|p_x|p_x\rangle \Rightarrow \int \langle x|\hat{p}_x|x'\rangle\langle x'|p_x\rangle dx' = p_x\langle x|p_x\rangle$$

$$\Rightarrow -i\hbar\int\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')\langle x'|p_x\rangle dx' = p_x\langle x|p_x\rangle \Rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|p_x\rangle = p_x\langle x|p_x\rangle$$

其解为 $\langle x|p_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip_x x/\hbar}$

- 在动量表象下，动量算符 $\hat{p}_x$ 的表示为

$$\langle p_x|\hat{p}_x|p_x'\rangle = p_x\delta(p_x - p_x')$$

坐标算符 $\hat{x}$ 在动量空间的表示为

$$\langle p_x|\hat{x}|p_x'\rangle = \int dxdx'\langle p_x|x\rangle x\delta(x-x')\langle x'|p_x'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dxe^{-ip_x x/\hbar}xe^{ip_x' x/\hbar}$$

$$= \frac{i}{2\pi}\int dx\frac{d}{dp_x}e^{-ip_x x/\hbar}e^{ip_x' x/\hbar}$$

$$= \frac{i}{2\pi}\frac{\partial}{\partial p_x}[\int dxe^{-ip_x x/\hbar}e^{ip_x' x/\hbar}] = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\delta(p_x - p_x')$$

2.4 表象和表象变换

➢ $\hat{x}$ 和 $\hat{p}_x$ 的本征函数在动量表象下的表示分别为

$$\langle p_x|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ip_x x/\hbar}, \qquad \langle p_x|p_x'\rangle = \delta(p_x - p_x')$$

➢ 任意态矢量 $|\psi\rangle$ 在坐标和动量之间的变换为

$$\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp_x e^{-ip_x x/\hbar}\langle p_x|\psi\rangle, \quad \langle p_x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{ip_x x/\hbar}\langle x|\psi\rangle$$

➢ 上面的结果可以推广到三维

坐标表象	动量表象
$\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$	$\langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{p}'\rangle = i\hbar\nabla\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$
$\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$	$\langle \mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$
$\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}'\rangle = -i\hbar\nabla\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$	$\langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$
$\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$	$\langle \mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$

2.5 运动方程

- 只要系统不被干扰，因果律是成立的，系统从一个时刻的状态到下一时刻状态的演化通过运动方程支配。
- 我们定义时间演化算 $\hat{U}$，将不同时刻的两个量子态联系起来，即

$$|\psi(t')\rangle = \hat{U}(t', t)|\psi(t)\rangle$$

  根据定义，显然 $\hat{U}(t, t) = 1$
- 时间演化算符依赖于系统，但是不依赖于具体的态，因此

  如果 t 时刻 $|\gamma(t)\rangle = c_1|\alpha(t)\rangle + c_2|\beta(t)\rangle$

  那么 $\hat{U}(t', t)|\gamma(t)\rangle = c_1\hat{U}(t', t)|\alpha(t)\rangle + c_2\hat{U}(t', t)|\beta(t)\rangle$，即 $\hat{U}(t', t)$是线性算符
- 任何时刻量子态都是归一化的，因此

$$\langle\psi(t)|\hat{U}^\dagger(t', t)\hat{U}(t', t)|\psi(t)\rangle = 1$$

  所以 $\hat{U}^\dagger(t', t)\hat{U}(t', t) = 1$，即 $\hat{U}(t', t)$是幺正算符

2.5 运动方程

- 考虑一个无穷小时间间隔δt，即 $t' = t + \delta t$，我们有

$$\hat{U}(t+\delta t, t) = 1 + \delta t \hat{\Omega}(t)$$ 其中$\hat{\Omega}(t)$是线性算符

因为$\hat{U}$是幺正算符，所以 $[1+\delta t\hat{\Omega}^\dagger(t)][1+\delta t\hat{\Omega}(t)] = 1$，即

$$\delta t[\hat{\Omega}^\dagger(t) + \hat{\Omega}(t)] = 0$$ （忽略 $\delta^2 t$ 项）

因此，$\hat{\Omega}(t)$是一个反厄米算符。利用$\hat{U}$的性质，我们有

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle &= \lim_{\delta t\to 0}\frac{|\psi(t+\delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\delta t} \\ &= \lim_{\delta t\to 0}\frac{\hat{U}(t+\delta t, t) - 1}{\delta t}|\psi(t)\rangle = \hat{\Omega}(t)|\psi(t)\rangle\end{aligned}$$

显然$\hat{\Omega}(t)$具有频率量纲，如果方程两边都乘以$i\hbar$，则 $i\hbar\hat{\Omega}(t)$是具有能量量纲的厄米算符，因此$i\hbar\hat{\Omega}(t)$的一个自然选择是Hamiltonian算符。

- 所以，我们有如下的运动方程，即Schrödinger 方程：

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

2.5 运动方程

- 在一个给定的表象下，Schrödinger 方程可以写成矩阵形式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_n(t) \end{pmatrix}$$

其中 $H_{ij} = \langle i|\hat{H}|j\rangle$。对于连续表象，我们要用积分形式，例如坐标表象，利用 $\int d^3r|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = 1$，有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \int d^3r'\langle\mathbf{r}|\hat{H}|\mathbf{r}'\rangle\psi(\mathbf{r}',t)$$

如果坐标表象中势是局域的，即 $\langle\mathbf{r}|\hat{H}|\mathbf{r}'\rangle = H(\mathbf{r},t)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$，则我们可以得到如下形式的坐标表象的Schrödinger 方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = H(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$$

2.5 运动方程

- 如果 $\hat{H}$ 不含时，那么时间演化算符 $\hat{U}(t',t)$ 为

$$\hat{U}(t,t_0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$$

- 由于 $\hat{U}(t',t)$ 是线性算符，根据态叠加原理，我们也可以用基矢的时间演化来表示态矢量的时间演化。例如，$t=0$ 时刻系统的状态为

$$|\psi(0)\rangle=\sum_n c_n|\phi_n(0)\rangle$$

那么 $t>0$ 时刻系统的状态可以表示为

$$|\psi(t)\rangle=\hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle=\sum_n c_n\hat{U}(t,0)|\phi_n(0)\rangle=\sum_n c_n|\phi_n(t)\rangle$$

通常选择Hamiltonian的本征态作为基矢（能量表象），其时间演化很简单

$$|\phi_n(t)\rangle=e^{-iE_nt/\hbar}|\phi_n(0)\rangle$$

- **定态：** 不含时Hamiltonian的本征态（能量本征态）。定态不随时间演化。不含时Hamiltonian的本征方程也称为定态Schrödinger 方程

2.5 运动方程

➢ **例题：**考虑一个Hilbert 空间为三维的系统。选择基矢组 $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$，系统的Hamiltonian $\hat{H}$ 以及另外两个力学量算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 为

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = b \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

假定 $t=0$ 时刻系统的状态为 $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle$。

（1）计算 $t=0$ 时刻 $\Delta H = \sqrt{\langle \hat{H}^2\rangle - \langle \hat{H}\rangle^2}$

（2）求 $t=0$ 时刻 $\hat{A}$ 的可能测量值、相应概率以及测量后的状态

（3）证明 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易，并求出它们的共同本征态

（4）求在 $(\hat{A}, \hat{B})$ 表象下 $\hat{H}$ 的表示

（5）计算任意时刻 $\hat{B}$ 的期待值 $\langle \hat{B}\rangle(t)$

2.5 运动方程

➢ 解：（1）为了计算方便，最好先将态矢量归一化，这里$|\psi(0)\rangle$已经归一化

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle \psi(0)|H|\psi(0)\rangle = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\left\langle \hat{H}^2 \right\rangle = \hbar^2\omega^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{5}{2}\hbar^2\omega^2$$

$$\Delta H = \sqrt{\left\langle \hat{H}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{H} \right\rangle^2} = \hbar\omega\sqrt{\frac{5}{2} - \frac{9}{4}} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

（2）求$\hat{A}$的可能测量值，需要先求解本征方程 $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$，即

$$a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$$

2.5 运动方程

由 $\det(\hat{A}-\lambda)=0$ 得 $\lambda=-a$ 或者 $\lambda=a$（二重简并），三个本征矢量为

$$\lambda=-a,\ |\varphi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\-1\end{pmatrix};\quad \lambda=a,\ |\varphi_2\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\ |\varphi_3\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$$

测量值 a 的概率为 $P_1=|\langle\varphi_2|\psi(0)\rangle|^2+|\langle\varphi_3|\psi(0)\rangle|^2=1$

$\boxed{|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle+\frac{1}{2}|2\rangle+\frac{1}{2}|3\rangle}$

测量值 $-a$ 的概率为 $P_2=|\langle\varphi_1|\psi(0)\rangle|^2=0$

因此，可能测量值为 a，概率为1，测量后的状态仍然为 $|\psi(0)\rangle$

（3）很容易证明 $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$。$|\varphi_1\rangle$已经是共同本征态。在 $|\varphi_2\rangle$和 $|\varphi_3\rangle$构成的子空间中，$\hat{B}$ 的表示为

$$\hat{B}=\begin{pmatrix}\langle\varphi_2|\hat{B}|\varphi_2\rangle & \langle\varphi_2|\hat{B}|\varphi_3\rangle\\ \langle\varphi_3|\hat{B}|\varphi_2\rangle & \langle\varphi_3|\hat{B}|\varphi_3\rangle\end{pmatrix}=b\begin{pmatrix}0 & \sqrt{2}\\ \sqrt{2} & 1\end{pmatrix}$$

解得两个本征值为 $-b$ 和 $2b$，相应的两个本征态为 $-\sqrt{\frac{2}{3}}|\varphi_2\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}|\varphi_3\rangle$

和 $\sqrt{\frac{1}{3}}|\varphi_2\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|\varphi_3\rangle$

2.5 运动方程

在题目所给的表象下，$\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征态为

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

（4）从题目所给的表象到 $(\hat{A}, \hat{B})$ 表象的变换矩阵为

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{6}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{6}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix}$$

$$\hat{H} = \hbar\omega\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

于是，在 $(\hat{A}, \hat{B})$ 表象下，$\hat{H}$ 的表示为

$$\hat{H}' = \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \hbar\omega\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3} & \frac{\sqrt{2}}{3} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} & \frac{5}{3} \end{pmatrix}$$

2.5 运动方程

（5）在时刻t，系统的状态$|\psi(t)\rangle$ 为

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle e^{-i\omega t} + \frac{1}{2}|2\rangle e^{-i2\omega t} + \frac{1}{2}|3\rangle e^{-i2\omega t} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t} \\ \frac{1}{2}e^{-i2\omega t} \\ \frac{1}{2}e^{-i2\omega t} \end{pmatrix}$$

于是，

$$\begin{aligned} \langle\hat{B}\rangle(t) &= \langle\psi(t)|\hat{B}|\psi(t)\rangle \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\omega t}, \frac{1}{2}e^{i2\omega t}, \frac{1}{2}e^{i2\omega t}\right) b \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t} \\ \frac{1}{2}e^{-i2\omega t} \\ \frac{1}{2}e^{-i2\omega t} \end{pmatrix} \\ &= (\frac{1}{2} + \sqrt{2}\cos\omega t)b \end{aligned}$$