量子力学的形式理论

呜哩天才琪露诺

华中科技大学物理学院

日期：2024 年 11 月 10 日

1 希尔伯特空间

在量子力学中，我们用希尔伯特空间中的矢量表征系统的状态，我们称这样的矢量为右矢，记作 $|\alpha\rangle$. 可以对右矢进行加法和数乘运算，并且，我们认为 $c|\alpha\rangle$ 表征的状态和 $|\alpha\rangle$ 是相同的，其中 c 是任意非零的复常数.

我们还引入希尔伯特空间的对偶空间，称左矢空间. 与右矢 $|\alpha\rangle$ 对偶的左矢记作 $\langle\alpha|$，我们记 $|\alpha\rangle \xleftrightarrow{DC} \langle\alpha|$. 一般地

$$c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle \xleftrightarrow{DC} c_1^*\langle\alpha| + c_2^*\langle\beta| \tag{1}$$

我们定义右矢 $|\alpha\rangle$ 和左矢 $|\beta\rangle$ 的内积为 $\langle\beta|\alpha\rangle$（这与代数中的说法是不同的），内积满足以下两条公理：

1. $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$；
2. $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$，当且仅当 $|\alpha\rangle$ 为零向量时取等号.

我们称 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 正交，若 $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$. 称 $\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$ 为 $|\alpha\rangle$ 的模长，$|\tilde{\alpha}\rangle = \dfrac{|\alpha\rangle}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}$ 为 $|\alpha\rangle$ 的归一化矢量，显然有 $\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1$.

2 力学量算符

力学量或可观测量由希尔伯特空间上的算符 A 代表，A 作用在右矢 $|\alpha\rangle$ 上，得到另一个右矢 $A|\alpha\rangle$. 我们称算符 $X = Y$，若对任意的右矢 $|\alpha\rangle$ 都有 $X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle$. 零算符作用在任意的右矢上，得到的都是零矢量.

在初等量子力学中，除了极少数情况，力学量算符都是线性的.

算符除了可以作用在右矢上，还能作用在左矢 $\langle\alpha|$ 上，得到另一个左矢 $\langle\alpha|A$. 但 $\langle\alpha|A$ 往往不是 $A|\alpha\rangle$ 的对偶矢量，定义 A 的厄米共轭

$$A|\alpha\rangle \xleftrightarrow{DC} \langle\alpha|A^\dagger \tag{2}$$

称 A 是厄米的，若 $A = A^\dagger$.

算符可以相乘，代表两个算符相继作用在矢量上，即

$$\begin{aligned} (XY)|\alpha\rangle \equiv &\quad X(Y|\alpha\rangle) \\ \langle\alpha|(XY) \equiv &\quad (\langle\alpha|X)Y \end{aligned} \tag{3}$$

算符的乘法往往是不可对易的，即 $XY \neq YX$. 但算符乘法满足结合律

$$X(YZ) = XY(Z) \tag{4}$$

(3)和(4)可以一起看作广义的结合律，即 $(AB)C = A(BC)$，不管 A, B, C 是左矢、右矢或算符，只要它们是按合理的顺序排列的.

外积 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ 也可以看作一个算符，它作用在右矢 γ 上，得到

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|)|\gamma\rangle = |\beta\rangle(\langle\alpha|\gamma\rangle) \tag{5}$$

这里用到了广义的结合律.$\langle\alpha|\gamma\rangle$ 只是一个数，即算符 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ 把任意一个右矢投影到 $|\beta\rangle$ 方向上.

此外，还能得到 $(\langle\beta|X)|\alpha\rangle = \langle\beta|(X|\alpha\rangle)$，我们记其为 $\langle\beta|X|\alpha\rangle$

3 右矢空间的基底，算符的矩阵表示

对力学量 A，存在这样一些特殊的矢量 $|a\rangle$，使得 $A|a\rangle = a|a\rangle$，$|a\rangle$ 称为 A 的本征矢量，a 为本征矢量对应的本征值.

考察厄米算符 A，可以证明，其本征值都是实数，且对应于不同本征值的本征矢量正交. 我们要求力学量算符的本征值都是实数（其原因在下一节说明），且本征矢构成希尔伯特空间的一组基. 于是，力学量算符都是本征向量组完备的厄米算符.

对力学量算符 A，我们取其归一化的本征矢. 对非简并情况，即一个本征值只有一个线性无关的本征矢，有

$$\langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''} \tag{6}$$

$\{|a\rangle\}$ 构成希尔伯特空间的一组正交归一基底，对希尔伯特空间中的任意矢量 α，有傅里叶展开

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \tag{7}$$

因为 α 是任意的，也可以写

$$\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| \equiv \sum_{a'} \Lambda_{a'} = 1 \tag{8}$$

其中 1 为单位算符，$\Lambda_{a'} \equiv |a'\rangle\langle a'|$ 称为投影算符.

对简并情况，我们假设本征值 a' 是 n 重简并，即 a' 有 n 个线性无关的本征矢量，它们张成 a' 的 n 维本征子空间，我们总可以取本征子空间的一组正交归一化基底 $\{|a'_i\rangle\}$. 则

$$\langle a'_i|a''_j\rangle = \delta_{ij}\delta_{a'a''} \tag{9}$$

这时，完备性条件为

$$\sum_{a'}\sum_{i} |a'_i\rangle\langle a'_i| = 1 \tag{10}$$

4 测量，对易，不确定性关系

设系统处于 $|\alpha\rangle$ 所描述的状态，现在我们对系统的力学量 A 进行测量. 在非简并情形，按 A 的本征矢量对 $|\alpha\rangle$ 进行展开，即

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$$

通过插入单位算符，我们可以证明

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\alpha\rangle &= \langle\alpha|\left(\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\right)|\alpha\rangle \\ &= \sum_{a'}|\langle a'|\alpha\rangle|^2\end{aligned} \tag{11}$$

我们通常无法预言测量的结果，而将以一定的概率测到 A 的某个本征值（因为力学量的测量值一定为实数，所以我们要求力学量算符的本征值为实数），测到 a' 的概率为 $|\langle a'|\alpha\rangle|^2$，则(11)说明测得各态的概率之和为 1，我们的假设是合理的. 且测量之后，系统的状态发生改变，系统将“坍缩”到 a' 对应的本征态 $|a'\rangle$ 上去.

当系统处于 A 的本征态 $|a'\rangle$ 时，对 A 进行测量，我们却有把握测得的结果只能是 a'，因为对 A 的任意其它的本征值 a''，$\langle a''|a'\rangle = 0$，测得 a'' 的概率为 0. 所以，一旦对系统的力学量 A 进行了一次测量，得到结果 a'，再对 A 进行测量时，得到的结果仍为 a'.

对简并情形，仍对 $|\alpha\rangle$ 作傅里叶展开

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'}\sum_{i} |a'_i\rangle \langle a'_i|\alpha\rangle \tag{12}$$

由于

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\alpha\rangle &= \sum_i\sum_j\sum_{a'}\sum_{a''}\langle\alpha|a'_i\rangle\langle a'_i|a''_j\rangle\langle a''_j|\alpha\rangle \\ &= \sum_i\sum_j\sum_{a'}\sum_{a''}\langle\alpha|a'_i\rangle\delta_{a'a''}\delta_{ij}\langle a''_j|\alpha\rangle \\ &= \sum_{a'}\sum_i|\langle a'_i|\alpha\rangle|^2\end{aligned} \tag{13}$$

于是可以假设，测到本征值 a' 的概率为 $\sum\limits_i|\langle a'_i|\alpha\rangle|^2$. 本征子空间的正交归一基底是任取的，对另一组基 $|b'_i\rangle = \sum\limits_j u_{ij}\,|a'_j\rangle$，有

$$\begin{aligned}\sum_i|\langle a'_i|\alpha\rangle|^2 &= \sum_i\langle\alpha|a'_i\rangle\langle a'_i|\alpha\rangle \\ &= \sum_i\sum_j\langle\alpha|b'_j\rangle u_{ij}u^*_{ji}\langle b'_j|\alpha\rangle \\ &= \sum_j\langle\alpha|b'_j\rangle\langle b'_j|\alpha\rangle \\ &= \sum_j|\langle b'_j|\alpha\rangle|^2\end{aligned}$$

概率不依赖于基的选择，我们的假设是合理的. 现在，我们取 $|a_1\rangle$ 为 $|\alpha\rangle$ 在本征子空间上的投影 $|a_\perp\rangle$（归一化），其它基矢都与它正交，则概率变为

$$\sum_i|\langle a_i|\alpha\rangle|^2 = |\langle a_\perp|\alpha\rangle|^2 \tag{14}$$

于是，我们有理由相信测量后系统坍缩到 $|a_\perp\rangle$.

对处在 $|\alpha\rangle$ 的系统，可以定义力学量 A 的期望为

$$\langle A\rangle \equiv \langle\alpha|\,A\,|\alpha\rangle \tag{15}$$

由

$$
\begin{aligned}
\langle\alpha| A |\alpha\rangle &= \sum_{a',a''} \langle\alpha|a'\rangle \langle a'| A |a''\rangle \langle a''|\alpha\rangle \\
&= \sum_{a',a''} a'' \langle\alpha|a'\rangle\langle a'|a''\rangle\langle a''|\alpha\rangle \\
&= \sum_{a',a''} a'' \langle\alpha|a'\rangle\delta_{a'a''}\langle a''|\alpha\rangle \\
&= \sum_{a'} a' \langle\alpha|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \\
&= \sum_{a'} a' |\langle a'|\alpha\rangle|^2
\end{aligned} \tag{16}
$$

可知这个定义是符合我们对期望的直观理解的.

算符 A 与 B 的对易子及反对易子定义为

$$
\begin{aligned}
[A, B] &\equiv AB - BA \\
\{A, B\} &\equiv AB + BA
\end{aligned} \tag{17}
$$

称 A 与 B 对易，是指

$$
[A, B] = 0 \tag{18}
$$

可以证明，A 和 B 对易等价于它们有相同的完备本征矢量组. A 和 B 的本征矢量可记作 $|a'_i, b'_j\rangle$，使得

$$
\begin{aligned}
A\,|a'_i, b'_j\rangle &= a'\,|a'_i, b'_j\rangle \\
B\,|a'_i, b'_j\rangle &= b'\,|a'_i, b'_j\rangle
\end{aligned} \tag{19}
$$

譬如，设 A 和 B 是 $\mathbb{R}^3$ 上的算子，A 对应于本征值 1 的本征矢为 $\mathbf{e}_z$，对应于本征值 2 的本征子空间为 xy 平面，B 对应于本征值 3 的本征矢为 $\mathbf{e}_x$，对应于本征值 4 的本征子空间为 yz 平面，则 A 和 B 的完备本征矢量组为 $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$，可以记

$$
\begin{aligned}
\mathbf{e}_x &= |2, 3\rangle \\
\mathbf{e}_y &= |2, 4\rangle \\
\mathbf{e}_z &= |1, 4\rangle
\end{aligned}
$$

现在假设系统处在 $|\alpha\rangle$ 所表征的态，测量系统的力学量 A，则以一定概率测得 a'，系统落到 $|a'_\perp\rangle$ 态上. 再对系统的力学量 B 进行测量，则以一定概率测得 b'，系统落到 $|a', b'\rangle$ 态上，这里 $|a'_\perp, b'_i\rangle$ 是 a' 的本征子空间上 b' 的某个本征矢量. 再对 A 进行测量，因为系统在 A 的本征态上，所以仍旧给出测量结果 a'，这时 A 和 B 的测量值同时得到确定. 所以，若力学量 A 和 B 对易，则可以同时确定它们的测量值.

若 A 和 B 不对易，则 A 和 B 没有一组完备的共同本征矢量. 但是 A 和 B 还是可以有共同的本征矢量的，但是，这些本征矢量不能张成整个态矢空间，也就是说，在希尔伯特空间的某个子空间上 A 和 B 对易. 对 A 进行测量后，系统坍缩到 A 的某个本征态上，如果这不是 B 的本征态，则我们无法断言 B 的测量结果，于是，若力学量 A 和 B 不可对易，则绝大多数情况下，不可以同时确定它们的测量值.

定义算符

$$
\Delta A \equiv A - \langle A\rangle \tag{20}
$$

并定义 A 的方差为

$$
\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \tag{21}
$$

用内积空间的柯西-施瓦茨不等式可以证明不确定性关系

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2 \tag{22}$$

5　力学量的矩阵表示，表象变换

选定了希尔伯特空间的一组基 $\{|a'\rangle\}$，就确定了一个表象. 对任一态矢量 $|\alpha\rangle$，可以把它的傅里叶展开系数排成列向量，这个列向量就是它在这个表象的表示

$$|\alpha\rangle \doteq \widetilde{\alpha} \equiv \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(3)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{23}$$

这里 $\doteq$ 是“代表”的意思. 对力学量算符 X，有

$$X = \sum_{a'}\sum_{a''} |a''\rangle \langle a'| X |a'\rangle \langle a'| \tag{24}$$

则它可以用一个矩阵代表

$$X \doteq \widetilde{X} \equiv \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(1)}|X|a^{(2)}\rangle & \cdots \\ \langle a^{(2)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(2)}|X|a^{(2)}\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{25}$$

假设 $|\gamma\rangle = X|\alpha\rangle$，则

$$\langle a'|\gamma\rangle = \langle a'| X |\alpha\rangle = \sum_{a''}\langle a'|X|a''\rangle\langle a''|\alpha\rangle$$

这正是

$$\widetilde{\gamma}_{a'} = \widetilde{X}_{a'}^{a''}\widetilde{\alpha}_{a''} \tag{26}$$

符合矩阵乘法的指标缩并规则.

同样地，左矢量可以用行矢量代表

$$\langle\alpha| \doteq \widetilde{\alpha} \equiv \begin{pmatrix} \langle\alpha|a^{(1)}\rangle & \langle\alpha|a^{(2)}\rangle & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \cdots \end{pmatrix} \tag{27}$$

矢量的内积

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \sum_{a'}\langle\beta|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$$

这正是

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \sum_{a'}\widetilde{\beta}^{a'}\widetilde{\alpha}_{a'} \tag{28}$$

也是符合内积的定义的.

我们再导出一个十分有用的式子

$$A = \sum_{a'}\sum_{a''}|a''\rangle\langle a''| A |a'\rangle\langle a'| = \sum_{a'}\sum_{a''}|a''\rangle (a'\delta_{a'a''})\langle a'| = \sum_{a'} a' |a'\rangle\langle a'| \tag{29}$$

设 $\{|b'\rangle\}$ 和 $\{|a'\rangle\}$ 是希尔伯特空间的两组基底，存在这样一个算符 U 使得

$$|b^{(l)}\rangle = U|a^{(l)}\rangle \tag{30}$$

且 U 必须为幺正算符. 矩阵

$$\widetilde{U} \equiv \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}| U |a^{(1)}\rangle & \langle a^{(1)}| U |a^{(2)}\rangle & \cdots \\ \langle a^{(2)}| U |a^{(1)}\rangle & \langle a^{(2)}| U |a^{(2)}\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{31}$$

称为两表象之间的过渡矩阵. 对一个态矢量 $|\alpha\rangle$，它在两表象中的坐标之间的关系为

$$\widetilde{\alpha}_b = \widetilde{U}^\dagger \widetilde{\alpha}_a \tag{32}$$

某个力学量 X 在两个表象中的矩阵表示之间的关系为

$$\widetilde{X_b} = \widetilde{U}^\dagger \widetilde{X_a} \widetilde{U} \tag{33}$$

我们还可以通过线性代数中熟知的手续找到某个表象，使得力学量算符 X 在这个表象下的矩阵表示为对角矩阵.

设力学量算符 A 和 B，且存在某个幺正算符 U 使得 $B = UAU^{-1}$. 对 A 的某个本征矢量

$$A\,|a_i'\rangle = a'\,|a_i'\rangle$$

有

$$UAU^{-1}U\,|a_i'\rangle = a'U\,|a_i'\rangle$$

即

$$(UAU^{-1})\,|b_i'\rangle = a'\,|b_i'\rangle \tag{34}$$

说明 A 和 B 有完全相同的本征值，且其本征矢一一对应. 称 A 和 B 为幺正等价算符.

6 连续谱，位置与动量算符

之前我们考虑的力学量的谱都是离散的，即其本征值都是离散的，下面我们研究连续谱的情形. 设力学量 ξ 的本征矢为 $|\xi'\rangle$，对应本征值为 ξ'. 本征矢的正交归一关系应为

$$\langle\xi'|\xi''\rangle = \delta(\xi' - \xi'') \tag{35}$$

完备性条件为

$$\int \mathrm{d}\xi'\,|\xi'\rangle\,\langle\xi'| = 1 \tag{36}$$

设测量前系统处在 $|\alpha\rangle$ 所表征的态上，则

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}\xi' |\langle\xi'|\alpha\rangle|^2 &= \int \mathrm{d}\xi' \langle\alpha|\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle \\ &= \int \mathrm{d}\xi'\,|\xi'\rangle\,\langle\xi'|\,\langle\alpha|\alpha\rangle \\ &= \langle\alpha|\alpha\rangle \\ &= 1\end{aligned} \tag{37}$$

于是，我们可以假设测得 ξ' 的概率为

$$|\langle\xi'|\alpha\rangle|^2\mathrm{d}\xi' \tag{38}$$

一维的位置算符记为 x. 三维的位置算符记为 $\mathbf{x}$，其本征矢是 x,y,z 的共同本征矢

$$\begin{aligned}|\mathbf{x}'\rangle &\equiv |x',y',z'\rangle \\ x|\mathbf{x}'\rangle &= x'|\mathbf{x}'\rangle \\ y|\mathbf{x}'\rangle &= y'|\mathbf{x}'\rangle \\ z|\mathbf{x}'\rangle &= z'|\mathbf{x}'\rangle\end{aligned} \tag{39}$$

因而必须有

$$[x_i,x_j]=0 \tag{40}$$

我们定义无穷小平移算符

$$\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}'+\mathrm{d}\mathbf{x}'\rangle \tag{41}$$

我们要求 $|\mathbf{x}'\rangle$ 和 $|\mathbf{x}'+\mathrm{d}\mathbf{x}'\rangle$ 都是归一化的，于是 $\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}')$ 必须是幺正的，即

$$\mathcal{J}^\dagger(\mathrm{d}\mathbf{x}')\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}')=1 \tag{42}$$

其次，先平移 $\mathrm{d}\mathbf{x}'$，再平移 $\mathrm{d}\mathbf{x}''$，等价于平移 $\mathrm{d}\mathbf{x}'+\mathrm{d}\mathbf{x}''$，则

$$\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}')\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}'')=\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}'+\mathrm{d}\mathbf{x}'') \tag{43}$$

再者，反向平移 $\mathrm{d}\mathbf{x}'$，等价于平移 $-\mathrm{d}\mathbf{x}'$，于是

$$\mathcal{J}(-\mathrm{d}\mathbf{x}')=\mathcal{J}^{-1}(\mathrm{d}\mathbf{x}') \tag{44}$$

最后，平移 0 的单位即相当于恒等变换，即

$$\lim_{\mathrm{d}\mathbf{x}'\to 0}\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}')=1 \tag{45}$$

容易验证下面的算符满足上述各要求

$$\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}')=1-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{x}' \tag{46}$$

其中 $\mathbf{K}=(K_x,K_y,K_z)$ 的各分量为厄米算符.

略去二阶小量，可算出

$$[\mathbf{x}',\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}')]=\mathrm{d}\mathbf{x}' \tag{47}$$

即

$$-\mathrm{i}\mathbf{x}\mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{x}'+\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{x}'\mathbf{x}=\mathrm{d}\mathbf{x}' \tag{48}$$

即

$$[x_i,K_j]=\mathrm{i}\delta_{ij} \tag{49}$$

我们按

$$\begin{aligned}\mathbf{K}&=\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \\ \mathbf{p}&=(p_x,p_y,p_z)\end{aligned} \tag{50}$$

定义动量算符，则

$$\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}')=1-\frac{\mathrm{i}\mathbf{p}\cdot\mathrm{d}\mathbf{x}'}{\hbar} \tag{51}$$

对易关系(37)可以写为

$$[x_i,p_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij} \tag{52}$$

不确定性关系于是为

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_x)\rangle^2\geq\frac{\hbar^2}{4} \tag{53}$$

有限平移算符

$$\mathcal{J}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}}) = \lim_{n\to\infty}\left(1-\frac{\mathrm{i}p_x\Delta x'}{n\hbar}\right)^n = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}p_x\Delta x'}{\hbar}\right) \tag{54}$$

只保留高阶小量，则

$$0 = [\mathcal{J}(\Delta x_i'\mathbf{e}_i), \mathcal{J}(\Delta x_j'\mathbf{e}_j)] = -\frac{\Delta x_i'\Delta x_j'[p_i,p_j]}{\hbar^2}$$

于是

$$[p_i,p_j] = 0 \tag{55}$$

即三个方向上的动量算符彼此对易，它们有共同的完备本征矢

$$\begin{aligned} |\mathbf{p}'\rangle &\equiv |p_x,p_y,p_z\rangle \\ p_x\,|\mathbf{p}'\rangle &= p_x'\,|\mathbf{p}'\rangle \\ p_y\,|\mathbf{p}'\rangle &= p_y'\,|\mathbf{p}'\rangle \\ p_z\,|\mathbf{p}'\rangle &= p_z'\,|\mathbf{p}'\rangle \end{aligned} \tag{56}$$

我们考虑无穷小平移变换对动量本征态的影响

$$\mathcal{J}(\mathrm{d}\mathbf{x}')\,|\mathbf{p}'\rangle = \left(1-\frac{\mathrm{i}\mathrm{d}\mathbf{x}'\cdot\mathbf{p}}{\hbar}\right)|\mathbf{p}'\rangle = \left(1-\frac{\mathrm{i}\mathrm{d}\mathbf{x}'\cdot\mathbf{p}'}{\hbar}\right)|\mathbf{p}'\rangle \tag{57}$$

变换后本征矢的模为 $\left[1+\dfrac{(\mathbf{p}'\cdot\mathrm{d}\mathbf{x}')^2}{\hbar^2}\right]$，略去二阶小量，则本征矢只有相位变化.

我们总结一下位置算符与动量算符的对易关系

$$\begin{aligned} [x_i,x_j] &= 0 \\ [p_i,p_j] &= 0 \\ [x_i,p_j] &= \mathrm{i}\hbar\delta_{ij} \end{aligned}$$

这称为量子力学的正则对易关系或基本对易关系.

7 波函数

我们称

$$\psi_\alpha(x') \equiv \langle x'|\alpha\rangle \tag{58}$$

为位置表象下态 $|\alpha\rangle$ 对应的波函数，简称波函数. 两个态矢量的内积可以写为

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x'\langle\beta|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x'\psi*_\beta(x')\psi_\alpha(x') \tag{59}$$

定义力学量算符 A 对应于本征值 a' 的本征函数

$$u_{a'}(x') = \langle x'|a'\rangle \tag{60}$$

则波函数可以展开为

$$\psi_\alpha(x') = \sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle u_{a'}(x') \tag{61}$$

我们称

$$\phi_\alpha(p') \equiv \langle p'|\alpha\rangle \tag{62}$$

为动量表象下态 $|\alpha\rangle$ 对应的波函数.

8 位置表象与动量表象的联系

由

$$\begin{aligned}\left(1-\frac{\mathrm{i}p\Delta x'}{\hbar}\right)|\alpha\rangle &= \int \mathrm{d}x' \mathcal{J}(\Delta x')\,|x'\rangle\,\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x'\,|x'+\Delta x'\rangle\,\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x'\,|x'\rangle\,\langle x'-\Delta x'|\alpha\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x'\,|x'\rangle\,\langle x'|\alpha\rangle - \int \mathrm{d}x'\,|x'\rangle\,\langle \Delta x'|\alpha\rangle \\ &= |\alpha\rangle - \int \mathrm{d}x'\,|x'\rangle\,\Delta x' \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\end{aligned}$$

可知

$$p\,|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x'\,|x'\rangle\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) \tag{63}$$

两边同时左乘 $\langle x'|$ 得

$$\langle x'|\,p\,|\alpha\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle \tag{64}$$

两边同时左乘 $\langle\beta|$ 得

$$\langle\beta|\,p\,|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x' \psi_\beta^*(x')\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi_\alpha(x') \tag{65}$$

下面我们来考虑两个表象的联系，这个问题等价于求 $\langle x'|p'\rangle$，取(52)中的 $|\alpha\rangle$ 为 $|p'\rangle$ 得

$$\langle x'|\,p\,|p'\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle$$

即

$$p'\langle x'|p'\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle \tag{66}$$

解之，并通过 $\langle x'|x''\rangle = \int \mathrm{d}p'\langle x'|p'\rangle\langle p'|x''\rangle$ 求出归一化系数，得

$$\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}p'x'}{\hbar}\right) \tag{67}$$

则

$$\begin{aligned}\psi_\alpha(x') &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p' \exp\left(\frac{\mathrm{i}p'x'}{\hbar}\right)\phi_\alpha(p') \\ \phi_\alpha(p') &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}x' \exp\left(-\frac{\mathrm{i}p'x'}{\hbar}\right)\psi_\alpha(x')\end{aligned} \tag{68}$$

即两个表象中的波函数彼此通过傅里叶变换联系起来.

如果我们定义三维的位置算符以及动量算符，则一维情况的讨论都可沿用，(68)要改写为

$$\begin{aligned}\psi_\alpha(\mathbf{x}') &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int \mathrm{d}\mathbf{p}' \exp\left(\frac{\mathbf{i}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\phi_\alpha(\mathbf{p}') \\ \phi_\alpha(\mathbf{p}') &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int \mathrm{d}\mathbf{x}' \exp\left(-\frac{\mathbf{i}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\psi_\alpha(\mathbf{x}')\end{aligned} \tag{69}$$