第三章、力学量的算符表示与表象变换

$ 3.1 力学量的定义及其算符表示

在第一章中，我们看到， Heisenberg 要求一个力学量必须是实验上可以观测的量，从而导致了力学量的矩阵表示的概念。特别是对于动量，Schrödinger 发现可以将之表示为 $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$ 。同时，我们也提到，量子力学能够告诉我们的实际上是一个被观测的体系如何同按照经典规律运行的“仪器”相互作用的。为了将这些概念有机地结合起来，Landau 和 Lifschitz 在他们合著的“Quantum Mechanics”一书的第一章中做了如下的讨论。

首先，当一个经典仪器作用到被观测的量子客体上时，我们称为进行了一次操作 (Operation) ，其目的是要得到标志该客体的状态的一些物理量的数值。这里有两种情况。一种是在做了第一次测量之后，仪器给出确定的读数。但是再用同样的仪器对同一客体做第二次测量，第三次测量，仪器可能给出确定的然而是不同的读数。这种测量我们称为第一类测量。绝大多数的测量过程属于这一类型。第二类测量则与之相反：在做了第一次测量之后，仪器给出确定的读数。再用同样的仪器对同一客体做第二次测量，第三次测量时，仪器仍以百分之百的几率给出同一确定的读数。第二种测量被称为可预测的 (Predictable) ，在量子力学中起着极为重要的作用。这种测量过程给出的读数即为标志一个量子客体所处状态的一个力学量。换句话说，第二种测量才是力学量的测量。如果对于一个态的某一种力学量的测量连续两次给出同一确定数值，我们就称这个态为该力学量的本征态，而对应的读数则称为它的一个本征值。在今后的课程中，我们将以上述的意义理解“力学量”一词的含义。

只有对于力学量的测量，我们可以引入如下的数学表达方式。令 ψ_n 为一个力学量，例如能量的本征态，并且它所对应的本征值为 E_n 。我们现在引入一个算符 (Operator) $\hat{H}$ 来表示对于能量本征态 ψ_n 进行关于“能量”这一力学量测量的操作 (Operation) 。根据上述有关力学量测量的定义，我们有

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \tag{1}$$

显然，这一表达是有确定意义的。同理，我们可以定义坐标，动量或是角动量等力学量所对应的算符及其所对应的本征值和本征态。但是，我们必须指出的是，坐标是一个极其特殊的力学量。对它的两次连续测量可能给出不同的读数。这是关于上述力学量测量定义的唯一的一个例外。

需要强调一点的是，到目前为止，我们仅仅对力学量测量的本征态定义了算符的操作。为了能更为有效的利用这一数学表达，我们需要将其定义加以扩充。首先，我们注意到，对于某一量子客体的一个力学量 $\hat{Q}$ 测量所得到读数的全体 $\{q_n\}$ 应该是穷尽了所有的可能值。换句话说，其相应的本征态族 $\{\phi_n\}$ 在该量子客体的所有可能的状态构成的线性空间中应该是完备的。也就是说，任何一个该量子客体的可能状态 Φ 都可以写成 $\{\phi_n\}$ 的一个线性组合。即我们有

$$\Phi = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \phi_n. \tag{2}$$

对于这样一个态，我们定义

$$\hat{Q}\Phi = \hat{Q} \sum_{n=1}^{\infty} C_n \phi_n = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \hat{Q} \phi_n = \sum_{n=1}^{\infty} C_n q_n \phi_n. \tag{3}$$

值得强调一点的是，这一定义与对于态 Φ 进行测量时发生的 “波函数塌缩” 过程无关 (该过程是无法用数学表达式描述的) 。在引入这一定义的过程中，指导原则是量子力学态应该满足的态叠加原理。而其物理内涵则是与力学量在状态 Φ 下的平均值有关的。换句话说，当许多个量子客体在相同的初始条件下被制备出来之后，人们对它们逐一地进行同一力学量 $\hat{Q}$ 的测量，原则上会得到不同的读数。但是，这些读数的平均值却由公式 (3) 决定下来。关于这一点，我们会在下面给出更为详细的解释。

公式 (3) 的重要性在于，它将力学量算符 $\hat{Q}$ 的定义从其本征态集合 $\{\phi_n\}$ 推广到了量子客体的所有可能的状态构成的线性空间中的一个线性变换。这样一来，我们就有可能利用数学家们已经发展起来的有关无穷维线性空间以及建立在这些空间中的线性算符的全部理论。这是我们在这一章中要讲述的内容。

$ 3.2 线性空间及线性变换

在定义线性算符之前，我们需要引入线性空间的概念。它是一个集合。在它的元素之间可以定义加法 “+” 。同时，也可以定义它的一个元素和一个复数的数乘。这些操作之间满足所谓的分配律。一个线性空间中的元素，习惯上称为向量。

例 3.1: 取空间中的一个区域 Ω(例如，在一维空间中，我们可以取 $\Omega = (0, a)$ 或是 $\Omega = (-\infty, \infty)$) 。我们定义 $L^2(\Omega)$ 为所有区域 Ω 上的平方可积函数的集合，即若 $f \in L^2(\Omega)$ ，则

$$\int_\Omega |f(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \ < \ \infty \tag{4}$$

成立。则我们可以验证， $L^2(\Omega)$ 是一个线性空间。

证明: 任意取两个 $L^2(\Omega)$ 中的函数 $f(\mathbf{r})$ 和 $g(\mathbf{r})$ 。按照定义，它们满足条件

$$\int_\Omega |f(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} < \infty, \quad \int_\Omega |g(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} < \infty. \tag{5}$$

现在，我们要证明，它们的任何一个线性组合

$$G(\mathbf{r}) = af(\mathbf{r}) + bg(\mathbf{r}) \tag{6}$$

也是平方可积的，因此也是 $L^2(\Omega)$ 中的一个向量。实际上，我们有

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega |G(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r} = \int_\Omega |af(\mathbf{r}) + bg(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r} \\
= \ & |a|^2 \int_\Omega |f(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r} + |b|^2 \int_\Omega |g(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r} + \bar{a}b \int_\Omega \overline{f(\mathbf{r})} g(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} + a\bar{b} \int_\Omega f(\mathbf{r}) \overline{g(\mathbf{r})} \, d\mathbf{r} \\
\leq \ & |a|^2 \int_\Omega |f(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r} + |b|^2 \int_\Omega |g(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r} + 2|ab| \sqrt{\int_\Omega |f(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r}} \sqrt{\int_\Omega |g(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r}} \\
\leq \ & \infty.
\end{aligned} \tag{7}$$

这里，我们用到了 Cauchy-Schwartz 不等式

$$\int_\Omega \overline{f(\mathbf{r})} g(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} \leq \sqrt{\int_\Omega |f(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r}} \sqrt{\int_\Omega |g(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r}}. \tag{8}$$

命题得证。

在一个线性空间 V 上，若一个变换 $\hat{A} : V \to V$ 满足关系

$$\hat{A} \left(c_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \mathbf{v}_2 \right) = C_1 \hat{A} \mathbf{v}_1 + c_2 \hat{A} \mathbf{v}_2, \tag{9}$$

这里 $\mathbf{v}_1$ 和 $\mathbf{v}_2$ 是 V 的任意两个向量，而 c_1 和 c_2 是两个任意的复常数，则它被称为线性算符。例如， $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ 即是线性空间 $L^2(-\infty, \infty)$ 上的一个线性算符。

线性算符具有如下的性质。

(i) $\hat{A} = \hat{B}$ 成立，意味着对于任何 V 中的向量 ψ ，我们都有 $\hat{A}\psi = \hat{B}\psi$ 。

(ii) 算符 $\hat{I}$ 称为单位元，若 $\hat{I}\psi = \psi$ 对于 V 中所有的向量 ψ 成立。

(iii) 算符之和定义作 $\left(\hat{A} + \hat{B}\right)\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi$ 。

(iv) 线性算符之积定义作 $\left(\hat{A}\hat{B}\right)\psi = \hat{A}\left(\hat{B}\psi\right)$ 。一般而言， $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ 。

在一个有限维线性空间中，我们总可以找到一组线性无关的向量组，从而将一个线性算符写成一个矩阵。但是在一个无限维的线性空间，例如 $L^2(\Omega)$ 中，我们不一定能做到这一点。特别是，算符 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}_x$ 不可能写成矩阵的形式。假定这一结论不成立。让我们对于等式

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar\hat{I} \tag{10}$$

的两边分别求迹。我们有

$$\mathrm{Tr}\left(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}\right) = \mathrm{Tr}\left(\hat{x}\hat{p}_x\right) - \mathrm{Tr}\left(\hat{p}_x\hat{x}\right) = 0. \tag{11}$$

但是，对于上式右边的求迹显然不为零。唯一的解释是这两个算符无法写成矩阵的形式。因此求迹没有意义。我们下面会看到，尽管 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}_x$ 不能写成矩阵的形式，由它们组合而成的算符 $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ 和 $\hat{L}_z$ 却可以写成矩阵。

一个算符的 n 次幂定义做

$$\hat{A}^n = \hat{A} \cdot \hat{A} \cdots \hat{A}. \tag{12}$$

当一个算符是一对一的时，我们可以定义它的逆 $\hat{A}^{-1}$ ，并且有

$$\hat{A} \cdot \hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1} \cdot \hat{A} = \hat{I}. \tag{13}$$

利用 Taylor 展开的表达式

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left.\frac{d^n}{dx^n}F(x)\right|_{x=0} x^n, \tag{14}$$

我们可以如下定义一个算符的函数

$$\hat{F}(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n}{dx^n} F(x) \right|_{x=0} \hat{A}^n. \tag{15}$$

这些定义我们下面都会用到。

现在，我们引入所谓“内积”的定义。我们将与两个向量 $\mathbf{u}$ 和 $\mathbf{v}$ 有关的双线性函数 $(\mathbf{u},\, \mathbf{v})$ 称为建立在线性空间 V 上的一个内积，若它满足以下条件。

(i) 对于任何向量 $\mathbf{u} \in V$, 都有 $(\mathbf{u},\, \mathbf{u}) \geq 0$ 。

(ii) $(\mathbf{u},\, \mathbf{v}) = \overline{(\mathbf{v},\, \mathbf{u})}$ 。

(iii) $(\mathbf{u},\, C_1\mathbf{v}_1 + C_2\mathbf{v}_2) = C_1(\mathbf{u},\, \mathbf{v}_1) + C_2(\mathbf{u},\, \mathbf{v}_2)$ 。

(iv) $(C_1\mathbf{u}_1 + C_2\mathbf{u}_2,\, \mathbf{v}) = \overline{C_1}(\mathbf{u}_1,\, \mathbf{v}) + \overline{C_2}(\mathbf{u}_2,\, \mathbf{v})$ 。

我们还要求， $(\mathbf{u},\, \mathbf{u}) = 0$ ，当且仅当 $\mathbf{u} = 0$ 时成立。

作为一个例子，我们可以取一个有限维线性空间 V 。我们任取它的一组线性无关基 $\{\mathbf{e}_i\}$ 。则 V 中的任何一个向量 $\mathbf{v}$ 都可以这组基作展开。现在我们可以定义两个向量 $\mathbf{u}$ 和 $\mathbf{v}$ 的内积为

$$(\mathbf{u},\, \mathbf{v}) = \sum_{n=1}^{N} \overline{u}_n v_n. \tag{16}$$

而对于平方可积函数空间 $L^2(\Omega)$ ，我们可以定义其中的内积为

$$(\varphi,\, \psi) = \int_{\Omega} d\mathbf{r} \overline{\varphi(\mathbf{r})} \psi(\mathbf{r}). \tag{17}$$

有了内积的定义，我们现在可以定义一个给定线性算符 $\hat{A}$ 的共轭算符 $\hat{A}^\dagger$ 。若对于线性空间 V 的任意两个向量 $\mathbf{u}$ 和 $\mathbf{v}$ ，我们都有

$$\left(\mathbf{u},\, \hat{A}\mathbf{v}\right) = \left(\hat{B}\mathbf{u},\, \mathbf{v}\right), \tag{18}$$

则我们称算符 $\hat{B}$ 为算符 $\hat{A}$ 的共轭算符，并将它记作 $\hat{A}^\dagger$ 。特别是当 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ 时，我们将 $\hat{A}$ 称为厄密算符。

例 3.2: 以一个有限维线性空间 V 为例。此时，我们可以取它的一组正交归一基底。若 $\hat{A}$ 是厄密算符，我们可以定义它的矩阵元为

$$A_{ij} = (\varphi_i,\, \hat{A}\varphi_j). \tag{19}$$

利用内积的性质，我们得到

$$A_{ij} = (\varphi_i,\, \hat{A}\varphi_j) = (\hat{A}^\dagger\varphi_i,\, \varphi_j) = \overline{(\varphi_j,\, \hat{A}^\dagger\varphi_i)} = \overline{\left(\hat{A}^\dagger\right)}_{ji}. \tag{20}$$

或是

$$A^\dagger_{ij} = A^*_{ji}. \tag{21}$$

若 $\hat{A}$ 为厄密算符，则我们进一步有

$$A^\dagger_{ij} = A^*_{ji} = A_{ij}. \tag{22}$$

但需要强调一点的是，在无穷维空间中，上面的矩阵关系一般而言是没有意义的。此时，我们必须从公式

$$\left(\varphi,\, \hat{A}\psi\right) = \left(\hat{A}\varphi,\, \psi\right) \tag{23}$$

出发来定义自共轭 (厄密) 算符。

例 3.3: 令 $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ 。在空间 $L^2(-\infty,\,\infty)$ 中，它是厄密的。

按照定义，我们有

$$\begin{aligned}
(\varphi,\, \hat{p}_x\psi) &= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(x)} \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right) dx \\
&= (-i\hbar)\overline{\varphi(x)}\psi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} + i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial}{\partial x}\overline{\varphi(x)}\right)\psi(x)\, dx \\
&= i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial}{\partial x}\overline{\varphi(x)}\right)\psi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty}\overline{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x)\right)}\psi(x)\, dx \\
&= (\hat{p}_x\varphi,\, \psi)\,.
\end{aligned} \tag{24}$$

与定义

$$(\varphi,\, \hat{p}_x\psi) = \left(\hat{p}_x^\dagger\varphi,\, \psi\right) \tag{25}$$

相比较，我们得到 $\hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x$ 。因此，在空间 $L^2(-\infty,\,\infty)$ 中， $\hat{p}_x$ 是一个厄密算符。

按照厄密算符的定义，不难验证

(1) 若 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是厄密算符，则 $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ 亦是厄密算符。

(2) 若 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是厄密算符，并且 $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$ ，则 $\hat{D}=\hat{A}\hat{B}$ 亦是厄密算符。

我们之所以要将厄密算符单独挑出来研究，是由于有如下的事实。

定理 3.1: 一个算符 $\hat{A}$ 是厄密的，当且仅当对于任何一个波函数 ψ ，平均值 $\left(\psi,\,\hat{A}\psi\right)$ 都是实值的。

证明: 首先，按照厄密算符的定义，我们有

$$\left(\psi,\,\hat{A}\psi\right)=\left(\hat{A}^{\dagger}\psi,\,\psi\right)=\left(\hat{A}\psi,\,\psi\right)=\overline{\left(\psi,\,\hat{A}\psi\right)}. \tag{26}$$

因此， $\left(\psi,\,\hat{A}\psi\right)$ 为一实数。

反之，若对于任何一个函数 ψ ，我们都有

$$\left(\psi,\,\hat{A}\psi\right)=\overline{\left(\psi,\,\hat{A}\psi\right)}=\left(\hat{A}\psi,\,\psi\right), \tag{27}$$

则我们可以任取两个函数 ψ_1 和 ψ_2 ，并且定义

$$\varphi_1=\psi_1+\psi_2,\;\;\varphi_2=\psi_1+i\psi_2. \tag{28}$$

我们有

$$\begin{aligned}\left(\varphi_1,\,\hat{A}\varphi_1\right)&=\left(\psi_1+\psi_2,\,\hat{A}(\psi_1+\psi_2)\right)=\overline{\left(\varphi_1,\,\hat{A}\varphi_1\right)}=\left(\hat{A}(\psi_1+\psi_2),\,\psi_1+\psi_2\right),\\ \left(\varphi_2,\,\hat{A}\varphi_2\right)&=\left(\psi_1+i\psi_2,\,\hat{A}(\psi_1+i\psi_2)\right)=\overline{\left(\varphi_2,\,\hat{A}\varphi_2\right)}=\left(\hat{A}(\psi_1+i\psi_2),\,\psi_1+i\psi_2\right)\end{aligned} \tag{29}$$

将它们展开后，我们有

$$\begin{aligned}&\left(\psi_2,\,\hat{A}\psi_1\right)+\left(\psi_1,\,\hat{A}\psi_2\right)=\left(\hat{A}\psi_2,\,\psi_1\right)+\left(\hat{A}\psi_1,\,\psi_2\right),\\ &-i\left(\psi_2,\,\hat{A}\psi_1\right)+i\left(\psi_1,\,\hat{A}\psi_2\right)=-i\left(\hat{A}\psi_2,\,\psi_1\right)+i\left(\hat{A}\psi_1,\,\psi_2\right).\end{aligned} \tag{30}$$

将第一个公式乘以 i ，与第二个公式相加后，我们得到

$$2i\left(\psi_1,\,\hat{A}\psi_2\right)=2i\left(\hat{A}\psi_1,\,\psi_2\right), \tag{31}$$

或是

$$\left(\psi_1,\,\hat{A}\psi_2\right)=\left(\hat{A}\psi_1,\,\psi_2\right). \tag{32}$$

由于波函数 ψ_1 和 ψ_2 的任意性，我们得到结论，算符 $\hat{A}$ 是厄密的。

从线性代数我们知道，对于任何一个复矩阵，我们总可以找到一个向量 $\mathbf{v}$，使得

$$\hat{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \tag{33}$$

成立。这里，λ 是一个复数，称为 $\hat{A}$ 的本征值，而 $\mathbf{v}$ 则称为相应的本征向量。可以证明，这一结论也可以推广到作用于无穷维线性空间中的算符。

利用上面所证明的定理和厄密算符的定义，我们可以很容易地证明

定理 3.2: 一个厄密算符的本征值必为实数。

证明: 按照厄密算符的定义，平均值 $\left(\psi, \hat{O}\psi\right)$ 必为一实数。取 ψ 为算符 $\hat{O}$ 的一个本征函数 ψ_n。则我们又有

$$\left(\psi_n, \hat{O}\psi_n\right) = (\psi_n, \lambda_n\psi_n) = \lambda_n (\psi_n, \psi_n). \tag{34}$$

因此，

$$\lambda_n = \frac{\left(\psi_n, \hat{O}\psi_n\right)}{(\psi_n, \psi_n)} \tag{35}$$

为一实数。

由于实验上可以观测的量都是实数，Dirac 要求，所有对应于力学量的算符都应该是厄密算符。

我们还有

定理 3.3: 一个厄密算符的属于不同本征值的本征函数彼此是正交的。

证明: 任取 $\hat{O}$ 的两个不同的本征值 $\lambda_m \neq \lambda_n$ 以及相应的本征函数 ψ_m 和 ψ_n。一方面我们有

$$\left(\psi_m, \hat{O}\psi_n\right) = (\psi_m, \lambda_n\psi_n) = \lambda_n (\psi_m, \psi_n). \tag{36}$$

另一方面，我们又有

$$\begin{aligned} & \left(\psi_m, \hat{O}\psi_n\right) = \left(\hat{O}^\dagger\psi_m, \psi_n\right) = \left(\hat{O}\psi_m, \psi_n\right) \\ = \ & (\lambda_m\psi_m, \psi_n) = \bar{\lambda}_m (\psi_m, \psi_n) = \lambda_m (\psi_m, \psi_n). \end{aligned} \tag{37}$$

两式相减后，我们得到

$$(\lambda_m - \lambda_n)(\psi_m, \psi_n) = 0. \tag{38}$$

由于 $\lambda_m \neq \lambda_n$ ，我们最后得到

$$(\psi_m,\, \psi_n) = 0. \tag{39}$$

定理得证。

对于算符 $\hat{O}$ 的一个本征值 λ_n ，可能只有一个本征态 ψ_n 与之对应。此时， λ_n 称为非简并的。另外一种情况是，有多个 (k 个) 线性无关的本征函数与之对应。此时， λ_n 称为 k 重简并的。而对于这些线性无关的本征函数，我们总可以利用 Schmidt 正交化程序将之正交化。因此，我们可以认为，厄密算符 $\hat{O}$ 所有本征函数构成了一组正交归一函数族。并且可以证明，它们是完备的。也就是说， Hilbert 空间 $L^2(\Omega)$ 中任何一个函数都可以用它们来展开。

量子力学的一个基本假定是，测量某一个力学量 $\hat{O}$ 时，所有可能用经典仪器读出的值，都是相应的厄密算符 $\hat{O}$ 的本征值。更精确一点讲，在进行一个确定的测量之前，该体系的波函数 Ψ 是算符 $\hat{O}$ 的所有的本征函数 $\{\psi_n\}$ 的一个线性组合，即

$$\Psi = \sum_n C_n \psi_n, \tag{40}$$

并且有 $\hat{O}\psi_n = \lambda_n \psi_n$ 。在做测量时，人们总是读出力学量 $\hat{O}$ 的一个确定的本征值 λ_m 。在此测量之后，其它测量之前，体系的波函数变到并且保持为 ψ_m 。形象地讲，测量力学量 $\hat{O}$ 使得体系的波函数 Ψ"塌缩" 到某一个确定的本征函数 ψ_m 去了。而相应的展开系数 C_m 的绝对值的平方 $|C_m|^2$ 被解释作 ψ_m 出现在 Ψ 的几率。值得强调的是，根据上述理论，在波函数塌缩发生以后，再次对于体系重复力学量 $\hat{O}$ 的测量，将只会得到读数 λ_m 了。

如果我们要对两个力学量同时进行测量，情况会如何？这里有两种情况需要分别考虑。

在第一种情况中，我们有

$$\left[\hat{A},\, \hat{B}\right] = \hat{C} \neq 0. \tag{41}$$

那么，根据 Heisenberg 的测不准原理，力学量 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 不可能同时被精确测量。也就是说，不存在力学量 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征函数族。

在第二种情况中，我们有 $\left[\hat{A},\, \hat{B}\right] = 0$ 。从物理上讲，它意味着对于力学量 $\hat{B}$ 的测量不会干扰对于力学量 $\hat{A}$ 的测量结果。这就要求函数 ψ_A 也是算符 $\hat{B}$ 的一个本征函数。因此，在这情况中，我们可以找到一组函数，它们是力学量 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征函数。实际上，我们可以证明

定理 3.4: 当 $\left[\hat{A},\, \hat{B}\right] = 0$ 时，总可以找到二者的一组共同本征函数族 $\{\psi_{nm}\}$，使得 $\hat{A}\psi_{nm} = \lambda_n \psi_{nm}$ 和 $\hat{B}\psi_{nm} = q_m \psi_{nm}$ 同时成立。

有关这一定理的详细证明，可以见教科书 140 页的 4.3.3 节的内容。

下面，让我们看一个具体的例子。

例 3.4: 按照轨道角动量的定义

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{r}} \times \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right), \tag{42}$$

我们有

$$\left[\hat{L}_x,\, \hat{L}_y\right] = i\hbar \hat{L}_z, \quad \left[\hat{L}_y,\, \hat{L}_z\right] = i\hbar \hat{L}_x, \quad \left[\hat{L}_z,\, \hat{L}_x\right] = i\hbar \hat{L}_y, \tag{43}$$

以及

$$\left[\hat{L}^2,\, \hat{L}_z\right] = \left[\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2,\, \hat{L}_z\right] = 0. \tag{44}$$

因此，算符 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 应该有一组共同的本征函数族。现在让我们看一看如何来确定它们。

先看 $\hat{L}_z$ 的表达式

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\left(\hat{x}\frac{\partial}{\partial y} - \hat{y}\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{45}$$

利用直角坐标与球坐标之间的关系

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta, \tag{46}$$

或是

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \mathrm{ctg}\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2}}, \quad \mathrm{tg}\varphi = \frac{y}{x}, \tag{47}$$

我们有

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial x} \tag{48}$$

及

$$\frac{\partial}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial y}. \tag{49}$$

将它们代入 $\hat{L}_z$ 的表达式后，我们得到

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i}x\left(\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)-\frac{\hbar}{i}y\left(\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)\\
&= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{1}{1+\left(\frac{y}{x}\right)^2}\frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial \varphi}-y\frac{1}{1+\left(\frac{y}{x}\right)^2}\frac{-y}{x^2}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\\
&= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \varphi}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi}.
\end{aligned} \tag{50}$$

同理，我们可以得到

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\
\hat{L}_y &= i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).
\end{aligned} \tag{51}$$

由此，我们有

$$\begin{aligned}
&\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2\\
=&\ -\hbar^2\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
-&\ \hbar^2\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
=&\ -\hbar^2\left(\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}-\mathrm{cosec}^2\theta\cos\varphi\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}+\mathrm{ctg}\theta\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right.\\
+&\ 2\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\varphi}+\mathrm{ctg}^2\theta\cos\varphi(-\sin\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}+\mathrm{ctg}^2\theta\cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\\
-&\ 2\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\varphi}+\cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\mathrm{cosec}^2\theta\cos\varphi\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\\
+&\ \left.\mathrm{ctg}\theta\sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}^2\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}+\mathrm{ctg}^2\theta\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\\
=&\ -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\mathrm{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)
\end{aligned} \tag{52}$$

而

$$\hat{L}_z^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{53}$$

因此，我们有

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2 \\ &= -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\left(\mathrm{ctg}^2\theta+1\right)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \\ &= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].\end{aligned} \tag{54}$$

$\hat{L}^2$ 称为总轨道角动量算符。其本征值和本征函数由下式决定

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi(\theta,\,\varphi)=E\psi(\theta,\,\varphi). \tag{55}$$

实际上，这一方程的有限解 (多项式解) 仅当 $E=l(l+1)\hbar^2$ 成立时存在。它们由下式给出

$$Y_{lm}(\theta,\,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi},\quad -l\le m\le m. \tag{56}$$

这里， $l=0,\,1,\,2,\cdots$ 称为总角动量量子数，而函数 $P_l^m(x)$ 则由下式给出。

$$\begin{aligned}P_l^m(x) &= \frac{1}{2^l l!}\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left(x^2-1\right)^l,\quad m\ge 0, \\ P_l^{-m}(x) &= (-1)^m\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(x).\end{aligned} \tag{57}$$

同时，我们亦可验证， $Y_{lm}(\theta,\,\varphi)$ 也是 $\hat{L}_z$ 的本征函数。实际上，我们有

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\,\varphi)=m\hbar Y_{lm}(\theta,\,\varphi). \tag{58}$$

本征值 m 被称为磁量子数。

利用连带 Legendre 函数 $P_l^m(\cos\theta)$ 所满足的积分关系式

$$\int_0^\pi P_l^m(\cos\theta)P_{l'}^m(\cos\theta)\sin\theta d\theta=\frac{2}{2l+1}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\,\delta_{ll'}, \tag{59}$$

我们不难验证， $\{Y_{lm}(\theta,\,\varphi)\}$ 也是一组正交归一函数族。即我们有

$$\int_0^{2\pi}\int_0^\pi Y_{l'm'}^*(\cos\theta)Y_{lm}(\cos\theta)\sin\theta d\theta\,d\varphi=\delta_{l'l}\delta_{m'm}. \tag{60}$$

有关这些函数的详细介绍，可以见教科书 516 页上附录四的内容。

\$ 3.3 同一 Hilbert 空间中的基底变换

我们已经知道，按照 Dirac 的想法，一个给定的量子力学体系的状态应由与之相对应的 Hilbert 空间 $L^2(\Omega)$ 中函数给出。而任何一个力学量则由定义在这一空间上的一个厄密算符表示。同时，我们也知道，在选取一组确定的基底后，总可以写出该算符的一个矩阵。现在的问题是，用不同的基底构造出来的矩阵表示是如何联系在一起的。

首先，让我们回顾一下，向量空间中一个矢量的展开系数在基底变换下是如何改变的。为了简单起见，我们以一个熟知的变换，二维平面变换为例。在这一空间中，每一个点是它的一个元素，记作 $\mathbf{r}$。我们可以取这一空间的一组正交基底为 $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$。它们是完备的。即平面中任何一个元素 (向量) 都可以写作

$$\mathbf{r} = x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2. \tag{61}$$

而展开系数 x 和 y 由内积

$$x = (\mathbf{e}_1, \mathbf{r}), \quad y = (\mathbf{e}_2, \mathbf{r}) \tag{62}$$

给出。

相应地，在 $L^2(\Omega)$ 中，每一个元素既是一个平方可积的函数。我们也可以取一组正交归一基底

$$\psi_1(\mathbf{r}),\, \psi_2(\mathbf{r}), \cdots, \psi_n(\mathbf{r}),\, \cdots. \tag{63}$$

它们满足关系

$$\int_\Omega \overline{\psi_m(\mathbf{r})}\psi_n(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta_{mn}. \tag{64}$$

显然，这些函数的个数为无穷。我们也要求这组基底是完备的。即任何一个属于 $L^2(\Omega)$ 的函数 $\psi(\mathbf{r})$ 都可以写作

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\psi_n(\mathbf{r}), \tag{65}$$

并且展开系数 a_n 由下式

$$a_n = \int_\Omega \overline{\psi_n(\mathbf{r})}\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r} \equiv (\psi_n,\, \psi) \tag{66}$$

给出。

从线性代数中我们知道，基底 $(\mathbf{e}_1,\, \mathbf{e}_2)$ 的选择不是唯一的。也就是说，我们可以选取另外一组正交归一基底 $(\mathbf{e}_1',\, \mathbf{e}_2')$ 。这两组基底之间是可以通过一个正交矩阵 U 联系在一起的。既我们有

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_1' \\ \mathbf{e}_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_1 \\ \mathbf{e}_2 \end{pmatrix}. \tag{67}$$

并且，矩阵 U 满足关系 $U^\dagger U = UU^\dagger = I$ 。利用同一向量 $\mathbf{r}$ 在两组不同基底下的表达式

$$\mathbf{r} = x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2 = x'\mathbf{e}_1' + y'\mathbf{e}_1' = x'\left(U_{11}\mathbf{e}_1 + U_{12}\mathbf{e}_2\right) + y'\left(U_{21}\mathbf{e}_1 + U_{22}\mathbf{e}_2\right), \tag{68}$$

我们得到

$$x = U_{11}x' + U_{21}y', \qquad y = U_{12}x' + U_{22}y', \tag{69}$$

或是

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{21} \\ U_{12} & U_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}. \tag{70}$$

利用变换矩阵的酉正性，我们可以将上式进一步改写为

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{21} \\ U_{12} & U_{22} \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overline{U}_{11} & \overline{U}_{12} \\ \overline{U}_{21} & \overline{U}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \tag{71}$$

同理，在 Hilbert 空间 $L^2(\Omega)$ 中，我们也可以找到另外一组正交归一并且完备的函数族 $\{\psi_m'\}$ ，它们满足

$$(\psi_m',\, \psi_n') = \delta_{mn}. \tag{72}$$

将 $\Psi(\mathbf{r})$ 分别用 $\{\psi_n\}$ 和 $\{\psi_m'\}$ 展开，我们得到

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum a_n\psi_n(\mathbf{r}) = \sum a_m'\psi_m'(\mathbf{r}). \tag{73}$$

假设这两组基底是如下联系的

$$\begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \vdots \\ \psi_n' \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & \cdots & \cdots \\ U_{21} & U_{22} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ U_{n1} & U_{n2} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{74}$$

这里

$$U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & \cdots & \cdots \\ U_{21} & U_{22} & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\psi_1,\, \psi_1') & (\psi_2,\, \psi_1') & \cdots & \cdots \\ (\psi_1,\, \psi_2') & (\psi_2,\, \psi_2') & \cdots & \cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \tag{75}$$

则与上面举的二维空间中基底变换的情况相类似，我们有

$$a_m' = \sum_n \overline{U}_{mn} a_n. \tag{76}$$

$ 3.4 力学量的矩阵表示

在选定 $L^2(\Omega)$ 中的一组完备基底 $\{\psi_n\}$ 后，我们可以按照下面的方法构造任一算符 $\hat{O}$ 的矩阵表示。首先，取 ψ_1 。将 $\hat{O}$ 作用在它上面后，我们得到一个新的态 $\widetilde{\psi}_1 = \hat{O}\psi_1$ 。它也属于 $L^2(\Omega)$ ，故可以按照 $\{\psi_n\}$ 做展开。即我们有

$$\widetilde{\psi}_1 = \hat{O}\psi_1 = O_{11}\psi_1 + O_{21}\psi_2 + \cdots. \tag{77}$$

同理，我们亦有

$$\widetilde{\psi}_2 = \hat{O}\psi_2 = O_{12}\psi_1 + O_{22}\psi_2 + \cdots. \tag{78}$$

将这些系数收集在一起后，我们得到

$$\underline{O} = \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} & \cdots & \cdots \\ O_{21} & O_{22} & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}, \quad O_{ij} = \left(\psi_i,\, \widetilde{\psi}_j\right) = \left(\psi_i,\, \hat{O}\psi_j\right). \tag{79}$$

这就是力学量 $\hat{O}$ 在基底 $\{\psi_n\}$ 下的矩阵。

例 3.5: 以一维谐振子为例，求力学量 $\hat{x}$ 的矩阵。

我们知道，在 $L^2(R)$ 中的一组完备正交基底是 Schrödinger 方程

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2\psi(x) \tag{80}$$

的解

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x), \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}. \tag{81}$$

根据上述程序，我们任取一个函数 $\psi_n(x)$ 并将 $\hat{x}$ 作用其上后，得到一个新的波函数 $\widetilde{\psi}_n(x)$ 。再按照下面的公式

$$\begin{aligned}\widetilde{\psi}_n(x) &= \hat{x}\psi_n(x) = x\psi_n(x) = x_{1n}\psi_1(x) + x_{2n}\psi_2(x) + \cdots\cdots \\ &= \frac{1}{\alpha}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}\right)\end{aligned} \tag{82}$$

做展开 (见教科书 85 页上的公式 (3.4.23)) 。比较系数后，我们得到

$$x_{n-1,n} = \frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{n}{2}}, \quad x_{n+1,n} = \frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{n+1}{2}}. \tag{83}$$

而第 n 列的其它元素都是零。因此，在这组基底下，我们有

$$\underline{x} = \frac{1}{\alpha}\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \cdots \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \tag{84}$$

不难验证这是一个厄密矩阵。

有了力学量的矩阵表示之后，我们就可以将 Schrödinger 方程写成一个矩阵形式了，从而直接建立波动力学和矩阵力学的联系。从 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},\, t) = \hat{H}\psi(\mathbf{r},\, t) \tag{85}$$

出发，将 $\hat{H}$ 视作 Hilbert 空间 $L^2(\Omega)$ 中的一个线性算符。我们取 $L^2(\Omega)$ 的一组完备基底 $\{\phi_n\}$ (不一定是 $\hat{H}$ 的本征函数) 。则 $\psi(\mathbf{r},\, t)$ 可以写作

$$\psi(\mathbf{r},\, t) = \sum_m a_m(t)\phi_m(\mathbf{r}). \tag{86}$$

将其代入 Schrödinger 方程后，我们得到

$$i\hbar \sum_m \frac{da_m(t)}{dt} \phi_m(\mathbf{r}) = \sum_m a_m(t) \hat{H} \phi_m(\mathbf{r}). \tag{87}$$

此式两边左乘 $\phi_k^*(\mathbf{r})$ 并对坐标 $\mathbf{r}$ 积分后，我们有

$$\begin{aligned} & i\hbar \sum_m \frac{da_m(t)}{dt} \int_\Omega \phi_k^*(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = i\hbar \sum_m \frac{da_m(t)}{dt} \delta_{km} \\ = \quad & i\hbar \frac{da_k(t)}{dt} = \sum_m a_m(t) \left(\phi_k, \, \hat{H} \phi_m \right) = \sum_m H_{km} a_m(t). \end{aligned} \tag{88}$$

因此，我们得到如下的矩阵方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{89}$$

取形如

$$a_n(t) = a_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t \right) \tag{90}$$

的解。代入上面的方程后，我们得到

$$E \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{91}$$

这是一个解矩阵本征值的问题。原则上，能量 E 可以由下式

$$\mathrm{Det} \begin{pmatrix} H_{11} - E & H_{12} & H_{13} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} - E & H_{23} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} = 0 \tag{92}$$

决定。在解得本征值 E_n 后，我们可以求出相应的向量

$$\left(a_1^{(n)}, \, a_2^{(n)}, \, \cdots\cdots \right), \quad |a_1^{(n)}|^2 + |a_2^{(n)}|^2 + \cdots + \cdots = 1. \tag{93}$$

而对应的本征函数则为

$$\psi_n(\mathbf{r},\, t) = \left(a_1^{(n)}\phi_1(\mathbf{r}) + a_2^{(n)}\phi_2(\mathbf{r}) + \cdots + a_m^{(n)}\phi_m(\mathbf{r}) + \cdots\right)\exp\left(-\frac{iE_n}{\hbar}t\right). \tag{94}$$

如上所述， Hilbert 空间 $L^2(\Omega)$ 中的基底的选取不是唯一的。因此，一个力学量 $\hat{O}$ 在两个基底下的矩阵形式也是不同的。但由于这两个矩阵是表示同一个力学量的，它们应该是酉正等价的。具体一点讲，若我们取两组基底 $\{\psi_n\}$ 和 $\{\psi'_n\}$ 。则依赖于它们，我们可以将 $\hat{O}$ 分别写成如下的矩阵形式

$$\underline{O} = \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} & \cdots \\ O_{21} & O_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}, \tag{95}$$

和

$$\underline{O}' = \begin{pmatrix} O'_{11} & O'_{12} & \cdots \\ O'_{21} & O'_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \tag{96}$$

假设两组基底是通过下面的变换

$$\begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & \cdots \\ U_{21} & U_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{97}$$

联系在一起的，则我们有

$$\begin{aligned} \underline{O}' &= \begin{pmatrix} O'_{11} & O'_{12} & \cdots \\ O'_{21} & O'_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\psi'_1,\, \hat{O}\psi'_1\right) & \left(\psi'_1,\, \hat{O}\psi'_2\right) & \cdots \\ \left(\psi'_2,\, \hat{O}\psi'_1\right) & \left(\psi'_2,\, \hat{O}\psi'_2\right) & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left(\left(\sum_m U_{1m}\psi_m\right),\, \hat{O}\left(\sum_k U_{1k}\psi_k\right)\right) & \left(\left(\sum_m U_{1m}\psi_m\right),\, \hat{O}\left(\sum_k U_{2k}\psi_k\right)\right) & \cdots \\ \left(\left(\sum_k U_{2k}\psi_k\right),\, \hat{O}\left(\sum_m U_{1m}\psi_m\right)\right) & \left(\left(\sum_m U_{2m}\psi_m\right),\, \hat{O}\left(\sum_k U_{2k}\psi_k\right)\right) & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} \sum_m \sum_k \overline{U}_{1m}\left(\psi_m,\, \hat{O}\psi_k\right) U_{1k} & \sum_m \sum_k \overline{U}_{1m}\left(\psi_m,\, \hat{O}\psi_k\right) U_{2k} & \cdots \\ \sum_m \sum_k \overline{U}_{2k}\left(\psi_k,\, \hat{O}\psi_m\right) U_{1m} & \sum_m \sum_k \overline{U}_{2k}\left(\psi_k,\, \hat{O}\psi_m\right) U_{2m} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \overline{U}_{11} & \overline{U}_{12} & \cdots \\ \overline{U}_{21} & \overline{U}_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} & \cdots \\ O_{21} & O_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & \cdots \\ U_{21} & U_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}^T \\
&= \overline{U}\underline{O}U^T = \overline{(U^T)^T}\underline{O}U^T = \widetilde{U}^\dagger \underline{O}\widetilde{U}. \qquad (98)
\end{aligned}
$$

这里， $\widetilde{U}$ 是一个酉正矩阵 (由于 U 是一个酉正矩阵) 。由此而得到的一个直接结论是，矩阵 $\underline{O}'$ 和 $\underline{O}$ 有相同的本征谱。

$ 3.5 **表象变换**

上面，我们详细研究了在同一个 Hilbert 空间中不同基底之间的变换关系。另外一种重要的变换是两个不同的 Hilbert 空间之间的表象变换。假设我们有两个空间 $L^2(\Omega)$ 和 $L^2(\Omega')$ 。则它们之间的一个线性变换 $\hat{S}: L^2(\Omega) \to L^2(\Omega')$ 称为酉正的，若关系

$$
(\phi_i,\, \phi_j)_{\Omega'} = \left(\hat{S}\psi_i,\, \hat{S}\psi_j\right)_{\Omega'} = (\psi_i,\, \psi_j)_{\Omega} \qquad (99)
$$

对于 $L^2(\Omega)$ 内的任何一对态 ψ_1 和 ψ_2 都成立。特别是，我们有

$$
(\phi_i,\, \phi_j)_{\Omega'} = (\psi_i,\, \psi_j)_{\Omega} = \delta_{ij}. \qquad (100)
$$

在量子力学中，这样一个变换称为一个表象变换。例如当 Ω 为实空间，而 Ω' 为动量空间时， $\hat{S}$ 既为从坐标空间到动量空间的表象变换。实际上，也就是我们大家熟知的 Fourier 变换

$$
\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \int d\mathbf{r}\, \Phi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}. \qquad (101)
$$

不难验证，我们有

$$
(\Psi_1,\, \Psi_2) = \int d\mathbf{p}\, \overline{\Psi_1(\mathbf{p})}\Psi_2(\mathbf{p})
$$

$$
\begin{aligned}
&= \int d\mathbf{k}\overline{\left(\frac{1}{(2\pi)^{d/2}}\int d\mathbf{r}_1\,\Phi_1(\mathbf{r}_1)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1}\right)}\left(\frac{1}{(2\pi)^{d/2}}\int d\mathbf{r}_2\,\Phi_2(\mathbf{r}_2)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2}\right)\\
&= \int\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\,\overline{\Phi_1(\mathbf{r}_1)}\Phi(\mathbf{r}_2)\left[\frac{1}{(2\pi)^d}\int d\mathbf{k}e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}\right]\\
&= \int\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\,\overline{\Phi_1(\mathbf{r}_1)}\Phi(\mathbf{r}_2)\delta^d(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)=\int d\mathbf{r}_1\,\overline{\Phi_1(\mathbf{r}_1)}\Phi_2(\mathbf{r}_1)\\
&= (\Phi_1,\,\Phi_2)\,. \qquad (102)
\end{aligned}
$$

因此， Fourier 变换是一个酉正变换。

这样，我们可以在不同的表象中研究同一个量子力学体系。这就使得我们有可能引入一套不依赖于具体表象的抽象符号，以突出该量子力学体系的内涵。为此，Dirac 引入了下面的称之为左矢 (bra) 和右矢 (ket) 的记号。他用 $|\psi\rangle$ 表示给定的量子力学体系 Hilbert 空间中的一个态，而用 $\langle\psi|$ 表示其复共扼。这样，两个态 $|\phi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 的内积就可记作

$$(\phi,\,\psi)=\langle\phi|\psi\rangle. \qquad (103)$$

因此，我们有

$$\overline{\langle\phi|\psi\rangle}=\langle\psi|\phi\rangle. \qquad (104)$$

显然,用这套记号来表示 Hilbert 空间中的态,可以不依赖于具体的表象 $L^2(\Omega)$。

作为特例，我们用 $|\mathbf{r}\rangle$ 表示一个粒子具有特定坐标 $\mathbf{r}$ 的态，而 $|\mathbf{p}\rangle$ 作为该粒子具有给定动量的态。我们要求

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),\;\;\langle\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle=\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'). \qquad (105)$$

在引入了这些记号之后，我们可以讨论量子力学态的坐标和动量表象了。Dirac 规定

$$\langle\mathbf{r}|\Psi\rangle=\Psi(\mathbf{r}) \qquad (106)$$

为 $|\Psi\rangle$ 在坐标表象中的波函数，而

$$\langle\mathbf{p}|\Psi\rangle=\Psi(\mathbf{p}) \qquad (107)$$

为其在坐标表象中的波函数。

例子 3.6: 写出记号 $\langle x|p\rangle$ 的具体表达式。

按照定义，$|p\rangle$ 代表一个一维空间中动量为 p 的单粒子态。而 $\langle x|p\rangle$ 则应解释作这个态在坐标表象中的波函数。因此，我们有

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right). \tag{108}$$

这是由于，将动量算符作用上去后，我们有

$$\hat{p}_x \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right) = p\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right). \tag{109}$$

而在三维的情况下，我们有

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\right). \tag{110}$$

利用左矢和右矢的记号，我们可以证明如下的重要关系式

$$\hat{I} = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|. \tag{111}$$

这里，$\{\psi_n\}$ 是量子力学态空间的一组正交归一并且完备的基底。为了证明这一恒等式，我们任取该体系的一个态 Ψ，并将它按照 $\{\psi_n\}$ 做展开

$$|\Psi\rangle = \sum_m a_m|\psi_m\rangle. \tag{112}$$

将 $\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ 从左边与之做内积，我们得到

$$\begin{aligned} \left(\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\right)|\Psi\rangle &= \sum_m a_m \left(\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\right)|\psi_m\rangle \\ &= \sum_m a_m \left(\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi_m\rangle\right) = \sum_m a_m \left(\sum_n |\psi_n\rangle\delta_{nm}\right) = \sum_m a_m|\psi_m\rangle = |\Psi\rangle. \end{aligned} \tag{113}$$

因此，按照单位元的定义，公式 (111) 成立。

从公式 (111) 出发，我们又可以推导出如下的重要公式

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') &= \langle\mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \langle\mathbf{r}|\hat{I}|\mathbf{r}'\rangle = \left\langle \mathbf{r}\left|\left(\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\right)\right|\mathbf{r}'\right\rangle \\ &= \sum_n \langle\mathbf{r}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\mathbf{r}'\rangle = \sum_n \psi_n(\mathbf{r})\overline{\psi_n(\mathbf{r}')}. \end{aligned} \tag{114}$$

这一公式在今后的计算中非常有用。

利用左矢和右矢的定义，我们现在可以将一个力学量 $\hat{O}$ 的矩阵元写作

$$\langle\alpha|\hat{O}|\beta\rangle = \langle\psi_\alpha|\hat{O}|\psi_\beta\rangle. \tag{115}$$

但是，为了计算这一矩阵元，我们需要取一个具体的表象。例如，我们可以取坐标表象。此时，我们有

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\hat{O}|\beta\rangle &= \int\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\,\langle\psi_\alpha|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\hat{O}|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi_\beta\rangle \\ &= \int\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\,\overline{\psi_\alpha(\mathbf{r}')}O_{\mathbf{r}',\mathbf{r}}\psi_\beta(\mathbf{r}).\end{aligned} \tag{116}$$

我们也可以取动量表象。这时，矩阵元又可以写作

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\hat{O}|\beta\rangle &= \int\int d\mathbf{p}d\mathbf{p}'\,\langle\psi_\alpha|\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'|\hat{O}|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\psi_\beta\rangle \\ &= \int\int d\mathbf{p}d\mathbf{p}'\,\overline{\psi_\alpha(\mathbf{p}')}O_{\mathbf{p}',\mathbf{p}}\psi_\beta(\mathbf{p}).\end{aligned} \tag{117}$$

自然，当算符 $\hat{O}$ 仅与空间位置有关，例如 $\hat{O} = \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{\mathbf{r}}^2$ 或 $\hat{O} = -\frac{e^2}{r}$ 时，以采用坐标表象为宜。此时，我们有

$$O_{\mathbf{r}',\mathbf{r}} = \langle\mathbf{r}'|\hat{O}|\mathbf{r}\rangle = O_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}). \tag{118}$$

同理，当算符 $\hat{O}$ 仅与体系动量有关，例如 $\hat{O} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ 时，以采用动量表象为宜。此时，

$$O_{\mathbf{p}',\mathbf{p}} = O_{\mathbf{p}}\delta(\mathbf{p}'-\mathbf{p}). \tag{119}$$

但有的时候，我们也需要计算形如 $x_{p',p}$ 或 $p_{x',x}$ 这样的量。以 $x_{p',p}$ 为例。我们有

$$\begin{aligned}x_{p',p} &= \langle p'|\hat{x}|p\rangle = \int\int dx'dx\,\langle p'|x'\rangle\langle x'|\hat{x}|x\rangle\langle x|\,p\rangle \\ &= \int\int dx'dx\,\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}p'x'}\right)\,x\delta(x'-x)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}\right) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx\,xe^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx\,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\int dx\,e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p').\end{aligned} \tag{120}$$

在上面的推导中，我们用到了 δ 函数的表达式

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int dx\, e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = \delta(p-p'). \tag{121}$$

有关的详细介绍可参考教科书 508 页上的练习 4 。

同理，我们可以证明

$$p_{x',x} = \langle x'|\hat{p}|x\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x'). \tag{122}$$

最后，我们看一看，在一个表象变换

$$\hat{S}:\ L^2(\Omega) \to\ L^2(\Omega') \tag{123}$$

下，同一个力学量 $\hat{O}$ 在不同表象中的矩阵元是如何联系的。

首先，我们可以证明，在变换 $\hat{S}$ 下， $L^2(\Omega)$ 中的任何一个线性算符 $\hat{O}_\Omega$ 变换到了 $L^2(\Omega')$ 中的线性算符 $\hat{O}'_{\Omega'} = \hat{S}\hat{O}_\Omega\hat{S}^\dagger$ 。实际上，任取 $\Psi \in L^2(\Omega)$ ，我们有 $\widetilde{\Psi} = \hat{S}\Psi \in L^2(\Omega')$ 与之对应。现在将 $\hat{O}_{\Omega'}$ 作用在 $\widetilde{\Psi}$ 上。我们得到 $\widetilde{\Phi} = \hat{O}_{\Omega'}\widetilde{\Psi}$ 。另一方面，我们又可以在 $L^2(\Omega)$ 中找到 Φ ，使得

$$\hat{S}\Phi = \widetilde{\Phi} \tag{124}$$

成立。因此，我们有

$$\Phi = \hat{S}^{-1}\widetilde{\Phi} = \hat{S}^\dagger\widetilde{\Phi} = \hat{S}^\dagger\hat{O}_{\Omega'}\widetilde{\Psi} = \hat{S}^\dagger\hat{O}_{\Omega'}\hat{S}\Psi \equiv \hat{O}_\Omega\Psi. \tag{125}$$

由此我们得到

$$\hat{O}_\Omega = \hat{S}^\dagger\hat{O}_{\Omega'}\hat{S}, \tag{126}$$

或是

$$\hat{O}_{\Omega'} = \hat{S}\hat{O}_\Omega\hat{S}^\dagger. \tag{127}$$

其次，我们选取 $L^2(\Omega)$ 中的一组基底 $\{\psi_m\}$ 和 $L^2(\Omega')$ 中的一组基底 $\{\phi_n\}$ 。先取 $|\psi_1\rangle$ 。在 $\hat{S}$ 的映射下，我们得到 $L^2(\Omega')$ 中的一个态 $|\phi\rangle = \hat{S}|\psi_1\rangle$ 。而这个态可以按照基底 $\{\phi_m\}$ 做展开。即我们有

$$\hat{S}|\psi_1\rangle = |\phi\rangle = S_{11}|\phi_1\rangle + S_{21}|\phi_2\rangle + \cdots\cdots. \tag{128}$$

这里， $S_{i1}=\langle\phi_i|\hat{S}|\psi_1\rangle$ 。同理，我们有

$$\hat{S}|\psi_2\rangle=|\widetilde{\phi}\rangle=S_{12}|\phi_1\rangle+S_{22}|\phi_2\rangle+\cdots\cdots. \tag{129}$$

由此，我们可以构造如下的矩阵

$$S=\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \tag{130}$$

这里， $S_{ij}=\langle\phi_i|\hat{S}|\psi_j\rangle$ 。由于 $\hat{S}$ 是将一组正交基底映射到另外一组正交基底的变换，它所对应的矩阵 S 应该是酉正的。

在做了这些准备之后，让我们推导 $O_{\Omega'}$ 和 O_Ω 之间的联系。按照定义，我们有

$$\begin{aligned}(O_{\Omega'})_{\alpha\beta} &\equiv \langle\alpha|\hat{O}_{\Omega'}|\beta\rangle=\langle\phi_\alpha|\left(\hat{S}\hat{S}^\dagger\right)\hat{O}_{\Omega'}\left(\hat{S}\hat{S}^\dagger\right)|\phi_\beta\rangle \\ &= \sum_m\sum_n\langle\phi_\alpha|\hat{S}|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{S}^\dagger\hat{O}_{\Omega'}\hat{S}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\hat{S}^\dagger|\phi_\beta\rangle. \end{aligned}\tag{131}$$

又由于

$$\langle\phi_\alpha|\hat{S}|\psi_m\rangle=S_{\alpha m},\quad \langle\psi_n|\hat{S}^\dagger|\phi_\beta\rangle=\left(S^\dagger\right)_{n\beta}=\overline{S_{\beta n}}, \tag{132}$$

我们可以将上式改写为

$$\langle\alpha|\hat{O}_{\Omega'}|\beta\rangle=\sum_m\sum_n S_{\alpha m}\left(\mathcal{O}_\Omega\right)_{mn}\left(S^\dagger\right)_{n\beta}. \tag{133}$$

在引入矩阵

$$\begin{aligned} O_{\Omega'} &= \begin{pmatrix} \langle\phi_1|\hat{O}_{\Omega'}|\phi_1\rangle & \langle\phi_1|\hat{O}_{\Omega'}|\phi_2\rangle & \cdots & \cdots \\ \langle\phi_2|\hat{O}_{\Omega'}|\phi_1\rangle & \langle\phi_2|\hat{O}_{\Omega'}|\phi_2\rangle & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}, \\ O_\Omega &= \begin{pmatrix} \langle\psi_1|\hat{O}_\Omega|\psi_1\rangle & \langle\psi_1|\hat{O}_\Omega|\psi_2\rangle & \cdots & \cdots \\ \langle\psi_2|\hat{O}_\Omega|\psi_1\rangle & \langle\psi_2|\hat{O}_\Omega|\psi_2\rangle & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \end{aligned}\tag{134}$$

后，我们可将这一关系写作

$$O_{\Omega'} = S O_{\Omega} S^{\dagger}. \tag{135}$$

例 3.7: 利用 Dirac 记号，推导坐标表象中的 Schrödinger 方程。

在一个量子力学体系的态空间 L^2 中，依赖 Dirac 的左矢记号， Schrödinger 方程可以被写作

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle. \tag{136}$$

根据 Dirac 的规定，它在坐标表象中的形式应由下式

$$\left\langle \mathbf{r}\left| i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right| \Psi(t)\right\rangle = \langle \mathbf{r}|\hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{137}$$

来决定。此式的左边可以直接写作

$$\left\langle \mathbf{r}\left| i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right| \Psi(t)\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{r}|\Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},\, t). \tag{138}$$

而其右边的改写则需要分几步来完成。

首先，我们有

$$\langle \mathbf{r}|\hat{H}|\Psi(t)\rangle = \left\langle \mathbf{r}\left| \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}})\right| \Psi(t)\right\rangle = \left\langle \mathbf{r}\left| \frac{\hat{p}^2}{2m}\right| \Psi(t)\right\rangle + \langle \mathbf{r}|V(\hat{\mathbf{r}})|\Psi(t)\rangle. \tag{139}$$

根据算符 $\hat{\mathbf{r}}$ 的定义，此式的最后一项可以直接写作 $V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},\, t)$ 。而为了改写第一项，我们则需要引入两个单位分解式。具体计算如下。

$$\begin{aligned}
\left\langle \mathbf{r}\left| \frac{\hat{p}^2}{2m}\right| \Psi(t)\right\rangle &= \left\langle \mathbf{r}\left| \frac{\hat{p}^2}{2m}\hat{I}\right| \Psi(t)\right\rangle = \int d\mathbf{p}' \left\langle \mathbf{r}\left| \frac{\hat{p}^2}{2m}\right| \mathbf{p}'\right\rangle \langle \mathbf{p}'|\Psi(t)\rangle \\
&= \int d\mathbf{p}'\, \frac{p'^2}{2m}\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}'\rangle\langle \mathbf{p}'|\Psi(t)\rangle = \int d\mathbf{p}'\, \frac{p'^2}{2m}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}\langle \mathbf{p}'|\hat{I}\Psi(t)\rangle \\
&= \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}'\, \frac{p'^2}{2m}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}\langle \mathbf{p}'|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|\Psi(t)\rangle \\
&= \int\int d\mathbf{p}' d\mathbf{r}'\, \frac{p'^2}{2m}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}\cdot\frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}'}\Psi(\mathbf{r}',\, t) \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^d}\int\int d\mathbf{p}' d\mathbf{r}'\, \frac{p'^2}{2m}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\Psi(\mathbf{r}',\, t) \\
&= \frac{1}{2m}\cdot\frac{1}{(2\pi\hbar)^d}\int\int d\mathbf{p}' d\mathbf{r}'\, \left[\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{r}}\right)^2 e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\right]\Psi(\mathbf{r}',\, t)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2 \int d\mathbf{r}' \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^d}\int d\mathbf{p}' e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\right]\Psi(\mathbf{r}',\, t) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2 \int d\mathbf{r}'\, \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}',\, t) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2 \Psi(\mathbf{r},\, t). \qquad (140)
\end{aligned}
$$

将这些表达式代入方程 (137) 后，我们得到

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},\, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2\Psi(\mathbf{r},\, t) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},\, t). \qquad (141)
$$

此既我们熟悉的 Schrödinger 方程。上面的推导过程与结果说明， Dirac 记号与规定是合理的和自洽的。

至于 Schrödinger 方程在动量表象中表达式的推导，可以参考教科书 278 到 279 页上的讲解。

练习：(1) 阅读教科书 4.4 节 “连续谱本征函数的归一化” 。

(2) 教科书 129 页上练习 13 的式 (4.1.52) 。

(3) 教科书 130 页上练习 15 。

(4) 教科书 152 页上例题 4.25 。

(5) 教科书 153 页上例题 4.37 。

(6) 习题集 6.2， 6.4 和 6.6 题。