第三章 数学基础2

- 态空间中的表象

正交归一基的特征关系式、右矢和左矢的表示法、算符的表示法、表象的变换

- 本征值方程

算符的本征值和本征矢、观察算符、可对易观察算符的集合

- 表象和观察算符的两个重要例子

§ 3.3 态空间中的表象

一、引言

- 选择一种表象就是在态空间中选择一个离散的或连续的正交归一基
- 在选定的基中，矢量和算符都是用数来表示的：对于矢量，这些数就是它的分量；对于算符，这些数就是它的矩阵元.
- 矢量运算就变成了对这些数进行矩阵运算.
- 原则上，表象的选择是任意的；实际上，当然要看所研究的问题而定，在每一个问题中，都以最大限度地简化运算为目的来进行选择.
- 我们将用狄拉克符号写出一个基的两个特征关系式，即正交归一关系式和封闭性关系式，从这两个关系式出发，介绍怎样在一种表象中解决各种具体问题，又怎样从一种表象变换到另一种表象，

二、一个正交归一基的特征关系式

a、正交归一关系式

我们说右矢的离散集合$\{|u_i\rangle\}$ 或连续集合$\{|w_\alpha\rangle\}$ 是正交归一的，如果集合中的右矢满足下列的正交归一关系式

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} \qquad \text{或} \qquad \langle w_\alpha | w_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$$

注：对于连续集合，$\langle w_\alpha | w_{\alpha'} \rangle$ 并不存在，就是说$|w_\alpha\rangle$ 的模为无穷大，它并不属于$\mathcal{E}$空间.
但是我们却可以将$\mathcal{E}$空间中的矢量按这些 $|w_\alpha\rangle$展开，因而应将这些 $|w_\alpha\rangle$看作广义右矢。

b、封闭性关系式

离散集合$\{|u_i\rangle\}$ 或连续集合 $\{|w_\alpha\rangle\}$ 构成一个基的条件：

态空间$\mathcal{E}$中的一个右矢 $|\psi\rangle$都可以用 $|u_i\rangle$ 或 $|w_\alpha\rangle$ 唯一地展开：

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad \text{或} \quad |\psi\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\, c(\alpha) |w_\alpha\rangle$$

设集合是正交归一的，则上式左乘$\langle u_j|$ 或$\langle w_{\alpha'}|$ 得

$$\langle u_j | \psi\rangle = c_j \quad \text{或} \quad \langle w_{\alpha'} | \psi\rangle = c(\alpha')$$

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

$$= \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right)|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\, c(\alpha)|w_\alpha\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}\alpha |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\psi\rangle = \left(\int \mathrm{d}\alpha |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\right)|\psi\rangle$$

可定义两个算符：

$$\boxed{\begin{aligned} P_{\{u_i\}} &\equiv \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathrm{I} \\ P_{\{w_\alpha\}} &\equiv \int \mathrm{d}\alpha |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| = \mathrm{I} \end{aligned}}$$

封闭性关系

I 表示恒等关系

如果构成正交归一基的态集合满足封闭性关系，则态空间的任意矢量可唯一地用这些基展开

$$|\psi\rangle = \mathrm{I}\,|\psi\rangle = P_{\{u_i\}}\,|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\ \psi\rangle$$

$$= \sum_i c_i\,|u_i\rangle \qquad\qquad c_i = \langle u_i|\ \psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \mathrm{I}\,|\psi\rangle = P_{\{w_\alpha\}}\,|\psi\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\,|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\ \psi\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}\alpha\, c(\alpha)\,|w_\alpha\rangle \qquad\qquad c(\alpha) = \langle w_\alpha|\ \psi\rangle$$

表象 $\{\vert u_i\rangle\}$	表象 $\{\vert w_\alpha\rangle\}$
$\langle u_i\vert u_j\rangle = \delta_{ij}$ $P_{\{u_i\}} = \sum_i \vert u_i\rangle\langle u_i\vert = \mathbb{1}$	$\langle w_\alpha\vert w_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha-\alpha')$ $P_{\{w_\alpha\}} = \int \mathrm{d}\alpha \vert w_\alpha\rangle\langle w_\alpha\vert = \mathbb{1}$

三、右矢和左矢的表示法

1、右矢的表示法

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad \text{或} \quad |\psi\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\, c(\alpha) |w_\alpha\rangle$$

$$c_i = \langle u_i | \psi\rangle \quad \text{或} \quad c(\alpha) = \langle w_\alpha | \psi\rangle$$

表示为

$$\begin{pmatrix} \langle u_1 | \psi\rangle \\ \langle u_2 | \psi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_i | \psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \text{或} \quad \alpha \downarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle w_\alpha | \psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

2、左矢的表示法

在基矢$\{|u_i\rangle\}$ 中

$$\langle\varphi| = \langle\varphi|\mathrm{I} = \langle\varphi|P_{\{u_i\}} = \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|$$

$\langle\varphi|u_i\rangle$ 就是与左矢 $\langle\varphi|$ 相联系的右矢 $|\varphi\rangle$的展开系数的复共轭。

在基矢$\{|w_\alpha\rangle\}$ 中

$$\langle\varphi| = \langle\varphi|\mathrm{I} = \langle\varphi|P_{\{w_\alpha\}} = \int \mathrm{d}\alpha \langle\varphi|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|$$

$\langle\varphi|w_\alpha\rangle$ 就是与左矢 $\langle\varphi|$ 相联系的右矢 $|\varphi\rangle$的展开系数的复共轭。

再考察左矢与右矢的标量积

$$\langle\varphi|\psi\rangle=\langle\varphi|\mathrm{I}|\psi\rangle=\left\langle\varphi\middle|P_{\{u_i\}}\middle|\psi\right\rangle$$

$$=\sum_i\left\langle\varphi\middle|u_i\right\rangle\left\langle u_i\middle|\psi\right\rangle=\sum_i b_i^* c_i$$

$$\langle\varphi|\psi\rangle=\langle\varphi|\mathrm{I}|\psi\rangle=\left\langle\varphi\middle|P_{\{w_\alpha\}}\middle|\psi\right\rangle$$

$$=\int\mathrm{d}\alpha\left\langle\varphi\middle|w_\alpha\right\rangle\left\langle w_\alpha\middle|\psi\right\rangle=\int\mathrm{d}\alpha\, b^*(\alpha)c(\alpha)$$

左矢可表示为

$$\left(\langle\varphi|\;u_1\rangle\ \langle\varphi|\;u_2\rangle\cdots\cdots\langle\varphi|\;u_i\rangle\cdots\cdots\right)\quad \text{或}\quad \underset{\alpha}{\xrightarrow{\left(\cdots\cdots\cdots\langle\varphi|\;w_\alpha\rangle\cdots\cdots\cdots\cdots\right)}}$$

四、算符的表示法

1、用方阵表示算符

在基矢$\{|u_i\rangle\}$或$\{|w_\alpha\rangle\}$ 中，线性算符$\boldsymbol{A}$表示为

$$A_{ij}=\langle u_i\,|\,A\,|\,u_j\rangle \quad \text{或} \quad A(\alpha,\alpha')=\langle w_\alpha\,|\,A\,|\,w_{\alpha'}\rangle$$

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \quad \text{或} \quad \begin{array}{cc} & \xrightarrow{\quad\quad \alpha' \quad\quad} \\ \alpha \Big\downarrow & \begin{pmatrix} & \vdots \\ \cdots & A(\alpha,\alpha') \end{pmatrix} \end{array}$$

算符***AB***的表示

$$\langle u_i \mid AB \mid u_j \rangle = \langle u_i \mid A\mathrm{I}B \mid u_j \rangle$$

$$= \left\langle u_i \middle| AP_{\{u_k\}}B \middle| u_j \right\rangle$$

$$= \sum_k \langle u_i \mid A \mid u_k \rangle \langle u_k \mid B \mid u_j \rangle$$

与算符***A***的表示和算符***B***的表示的规则一致：

表示算符***AB***的矩阵就是表示***A***的矩阵和表示***B***的矩阵的乘积。

2、右矢$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$的矩阵表示

在基矢$\{|u_i\rangle\}$中， $c_i' = \langle u_i | \psi' \rangle = \langle u_i | A | \psi \rangle$

利用封闭性关系 $c_i' = \langle u_i | A\mathrm{I} | \psi \rangle = \left\langle u_i \middle| A P_{\{u_j\}} \middle| \psi \right\rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \sum_j A_{ij} c_j$

在基矢$\{|w_\alpha\rangle\}$中， $c'(\alpha) = \langle w_\alpha | \psi' \rangle = \langle w_\alpha | A | \psi \rangle = \int \mathrm{d}\alpha' \langle w_\alpha | A | w_{\alpha'} \rangle \langle w_{\alpha'} | \psi \rangle$

$$= \int \mathrm{d}\alpha' A_{\alpha\alpha'} c(\alpha')$$

表示$|\psi'\rangle$的列矩阵就是表示$\boldsymbol{A}$的方阵与表示$|\psi\rangle$的列矩阵的乘积

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \\ c_i' \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix}$$

3、数 $\langle\varphi|A|\psi\rangle$ 的矩阵表示

在基矢$\{|u_i\rangle\}$中， $$\langle\varphi|A|\psi\rangle=\left\langle\varphi\middle|P_{\{u_i\}}AP_{\{u_j\}}\middle|\psi\right\rangle$$

$$=\sum_{i,j}\langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle=\sum_{i,j}b_i^*A_{ij}c_j$$

在基矢$\{|w_\alpha\rangle\}$中， $$\langle\varphi|A|\psi\rangle=\left\langle\varphi\middle|P_{\{w_\alpha\}}AP_{\{w_{\alpha'}\}}\middle|\psi\right\rangle=\iint\mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\alpha'\langle\varphi|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|A|w_{\alpha'}\rangle\langle w_{\alpha'}|\psi\rangle$$

$$=\iint\mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\alpha' b^*(\alpha)A(\alpha,\alpha')c(\alpha')$$

$\boxed{\text{数}\langle\varphi|A|\psi\rangle\text{ 的矩阵表示可用矩阵相乘表示}}$

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle=\left(b_1^*b_2^*\cdots b_i^*\cdots\right)\begin{bmatrix}A_{11}&A_{12}&\cdots&A_{1j}&\cdots\\A_{21}&A_{22}&\cdots&A_{2j}&\cdots\\\vdots&\vdots&&\vdots&\\\vdots&\vdots&&\vdots&\\A_{i1}&A_{i2}&&A_{ij}&\cdots\\\vdots&\vdots&&\vdots&\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\\vdots\\c_j\\\vdots\\\vdots\end{bmatrix}$$

$|\psi\rangle\langle\psi|$可以用方阵表示

$$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{bmatrix} \left(c_1^* c_2^* \cdots c_j^* \cdots \right) = \begin{bmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* & \cdots & c_1 c_j^* & \cdots \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* & \cdots & c_2 c_j^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ c_i c_1^* & c_i c_2^* & \cdots & c_i c_j^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{bmatrix}$$

4、A的伴随算符$A^{\dagger}$的矩阵表示

$$\left(A^{\dagger}\right)_{ij}=\left\langle u_i\middle|A^{\dagger}\middle|u_j\right\rangle=\left\langle u_j\,|\,A\,|\,u_i\right\rangle^{*}=A_{ji}^{*}$$

或 $$A^{\dagger}\left(\alpha,\alpha'\right)=\left\langle w_{\alpha}\middle|A^{\dagger}\middle|w_{\alpha'}\right\rangle=\left\langle w_{\alpha'}\,|\,A\,|\,w_{\alpha}\right\rangle^{*}=A^{*}\left(\alpha',\alpha\right)$$

在指定的表象中，表示A和$A^{\dagger}$的两个矩阵互为厄米共轭矩阵

如果A为厄米算符，即 $A=A^{\dagger}$，可得

$$A_{ij}=A_{ji}^{*} \qquad \text{或} \qquad A\left(\alpha,\alpha'\right)=A^{*}\left(\alpha',\alpha\right)$$

一个厄米算符由厄米矩阵来表示

五、表象的变换

1、问题的梗概

在一种指定的表象中，一个右矢（或左矢，或算符）用一个矩阵来表示.

如果换一种表象，也就是换一个基，则同一右矢（或左矢，或算符）将由另一个矩阵来表示。

这两个矩阵是怎样联系起来的呢？

这里我们假定从一个离散正交归一基$\{|u_i\rangle\}$变换到另外一个离散的正交归一化基 $\{|t_k\rangle\}$

给出了新基的每一个右矢在旧基的每一个右矢上的分量$\langle u_i|t_k\rangle$，就确定了基的变换。

令 $S_{ik}=\langle u_i|\ t_k\rangle$ $\qquad$ $\boldsymbol{S}$即为变换矩阵，它的厄米共轭矩阵$S^\dagger$为

$$\left(S^\dagger\right)_{ki}=\left(S_{ik}\right)^*=\langle t_k|\ u_i\rangle$$

注：变换矩阵是幺正矩阵

$$S^\dagger S=SS^\dagger=I$$

2、右矢分量的变换

在新基$\{|t_k\rangle\}$中 $\langle t_k|\psi\rangle=\langle t_k|\mathrm{I}|\psi\rangle=\left\langle t_k\left|P_{\{u_i\}}\right|\psi\right\rangle=\sum_i\langle t_k|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle=\sum_i S_{ki}^{\dagger}\langle u_i|\psi\rangle$

在旧基$\{|u_i\rangle\}$中 $\langle u_i|\psi\rangle=\langle u_i|\mathrm{I}|\psi\rangle=\left\langle u_i\left|P_{\{t_k\}}\right|\psi\right\rangle=\sum_k\langle u_i|t_k\rangle\langle t_k|\psi\rangle=\sum_k S_{ik}\langle t_k|\psi\rangle$

3、左矢分量的变换

$$\langle\psi|t_k\rangle=\langle\psi|\mathrm{I}|t_k\rangle=\left\langle\psi\left|P_{\{u_i\}}\right|t_k\right\rangle=\sum_i\langle\psi|u_i\rangle\langle u_i|t_k\rangle=\sum_i\langle\psi|u_i\rangle S_{ik}$$

4、算符的矩阵元的变换

在新基$\{|t_k\rangle\}$中 $\langle t_k|A|t_l\rangle = \left\langle t_k \left| P_{\{u_i\}} A P_{\{u_j\}} \right| t_l \right\rangle = \sum_{i,j} \langle t_k| u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j| t_l\rangle$

或写作 $$A_{kl} = \sum_{i,j} S_{ki}^{\dagger} A_{ij} S_{jl}$$

同样地，在旧基$\{|u_i\rangle\}$中

$$A_{ij} = \langle u_i|A|u_j\rangle = \left\langle u_i \left| P_{\{t_k\}} A P_{\{t_l\}} \right| u_j \right\rangle = \sum_{k,l} \langle u_i| t_k\rangle\langle t_k|A|t_l\rangle\langle t_l| u_j\rangle$$

$$= \sum_{k,l} S_{ik} A_{kl} S_{lj}^{\dagger}$$

§3.4 本征值方程；观察算符

一、算符的本征值和本征矢

1、定义

如果 $A|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle$

λ为复数，则称$|\psi\rangle$为线性算符$\boldsymbol{A}$的本征矢

方程为线性算符$\boldsymbol{A}$的本征值方程

一般来说，只有当λ取某些特殊值，即$\boldsymbol{A}$的本征值时，方程才有解，本征值的集合称为算符$\boldsymbol{A}$的谱。

显然，如果$|\psi\rangle$是线性算符$\boldsymbol{A}$的本征矢，则 $\alpha|\psi\rangle$也是$\boldsymbol{A}$属于同一本征值的本征矢。

为了避免不确定性，规定本征矢为归一化矢量 $\langle\psi|\psi\rangle=1$

如果本征值λ只对应于一个本征矢（除个倍乘因子以外），也就是说对应的全体本征矢是共线的，我们便称这个本征值是非简并的（或简单的）.

如果至少有两个线性无关的右矢都是A的属于同一本征值的本征矢，我们便称这个本征值是简并的；

属于这个本征值的线性无关本征矢的个数，叫做该本征值的简并度（一个本征值的简并度可以是有限的，也可以是无限的

例如：设λ是g重简并，对应g个线性无关的右矢 $\left|\psi^i\right\rangle (i=1,2,\cdots,g)$

$$A\left|\psi^i\right\rangle = \lambda\left|\psi^i\right\rangle$$

则所有右矢 $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g} c_i \left|\psi^i\right\rangle$ 都是A的属于本征值λ的本征矢

$$A|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g} c_i A\left|\psi^i\right\rangle = \lambda \sum_{i=1}^{g} c_i \left|\psi^i\right\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

A的属于同一本征值的本征右矢集合构成一个g维矢量空间，称为本征值λ的本征子空间。

例：投影算符 $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ 设 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

本征方程 $P_\psi |\varphi\rangle = \lambda |\varphi\rangle$

即 $|\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = \lambda |\varphi\rangle$

方程左边：或与$|\psi\rangle$线性相关，或为零

因此，本征矢或者就是 $|\psi\rangle$，本征值为1，非简并

或者与$|\psi\rangle$ 不正交，本征值为0，简并（如果态空间为无穷维，则简并度为无穷大）

2、求算符的本征值和本征矢

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

在基$\{|u_i\rangle\}$中 $$\langle u_i|A|\psi\rangle = \lambda\langle u_i|\psi\rangle$$

$$\sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \lambda\langle u_i|\psi\rangle$$

令： $\langle u_i|\psi\rangle = c_i$

$\langle u_i|A|u_j\rangle = A_{ij}$

方程改写为： $$\sum_j A_{ij}c_j = \lambda c_i$$

或 $$\sum_j \left[A_{ij} - \lambda\delta_{ij}\right]c_j = 0$$

$$\sum_j \left[A_{ij} - \lambda \delta_{ij} \right] c_j = 0$$

算符的本征值问题转化为数组的本征值问题

设态空间为***N***维空间

特征方程：$\mathrm{Det}[\mathscr{A} - \lambda I] = 0$

$\mathscr{A}$ 为以$\boldsymbol{A_{ij}}$为元素的***N*x*N***矩阵

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & A_{13} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & A_{23} & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & A_{N3} & \cdots & A_{NN} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

一个算符的本征值就是它特征方程的根。

对于厄米算符，可以证明，本征值λ的简并度总是等于特征方程的重根的重数$\boldsymbol{q}$.

量子力学里，大多数情况下，只研究厄米算符，于是，只要知道特征方程的每一个根的重数，就可知道对应的本征子空间的维数。

因此，在维数$\boldsymbol{N}$为有限的空间中，一个厄米算符永远具有$\boldsymbol{N}$个线性无关的本征矢。

二、观察算符

1、厄米算符的本征值和本征矢的性质

设 A 为厄米算符 $\quad A = A^{\dagger}$

a、厄米算符的本征值都是实数

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow \langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle$$

将上式左右取复共轭

利用 $\left(\langle\psi|A|\psi\rangle\right)^{*} = \langle\psi|A^{\dagger}|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$

由于 $\langle\psi|\psi\rangle$ 为实数得 $\quad \lambda^{*} = \lambda$

对于一般算符的本征方程

$$A|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle$$

将该式换成厄米共轭，得 $\langle\psi|A^{\dagger}=\lambda^{*}\langle\psi|$

如果$|\psi\rangle$是$\boldsymbol{A}$属于本征值λ的本征右矢，则$\langle\psi|$是$A^{\dagger}$的属于本征值λ^{*}的本征左矢

如果$\boldsymbol{A}$不是厄米共轭，$\langle\psi|A$无意义（$\boldsymbol{A}$向右作用， $A^{\dagger}$向左作用）。

如果$\boldsymbol{A}$是厄米算符，$|\psi\rangle$是$A^{\dagger}$属于本征值λ的本征右矢，而$\langle\psi|$是$\boldsymbol{A}$的属于本征值λ的本征左矢

b、厄米算符的属于两个不同本征值的本征矢相互正交。

$|\psi\rangle$和$|\varphi\rangle$是算符A分别属于λ和μ的两个本征矢

$$A|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle$$

$$A|\varphi\rangle=\mu|\varphi\rangle$$

$$\langle\varphi|A=\mu\langle\varphi|$$

左乘 $\langle\varphi|$

右乘 $|\psi\rangle$

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle=\mu\langle\varphi|\psi\rangle$$

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle=\lambda\langle\varphi|\psi\rangle$$

两式相减 $\quad(\lambda-\mu)\langle\varphi|\psi\rangle=0$

由于 $\lambda-\mu\neq0$ 得 $\langle\varphi|\psi\rangle=0$

2、观察算符的定义

如果ε是有限多维空间，就一定可以用一个厄米算符的全体本征矢来构成一个基。

如果是ε无限多维空间，情况就未必如此，需引入一个新概念---观察算符

设厄米算符$\boldsymbol{A}$的本征值集合构成一个离散谱：$\{a_n; n = 1, 2, \cdots\}$

本征值$\boldsymbol{a_n}$的简并度为$\boldsymbol{g_n}$

$\left|\psi_n^i\right\rangle (i = 1, 2, \cdots, g_n)$ 表示$\boldsymbol{a_n}$的本征子空间$\varepsilon_{\boldsymbol{n}}$中选出的$\boldsymbol{g_n}$个线性无关的矢量

$$A\left|\psi_n^i\right\rangle = a_n\left|\psi_n^i\right\rangle; \quad i = 1, 2, \cdots, g_n$$

对于不同本征值，$n \neq n'$ $\quad \left\langle \psi_n^i \middle| \psi_{n'}^j \right\rangle = 0$

本征子空间$\mathcal{E}_{\boldsymbol{n}}$中，总可选择$\left|\psi_n^i\right\rangle$正交归一

$$\left\langle\psi_n^i\right|\left.\psi_n^j\right\rangle=\delta_{ij}$$

由此建立了算符$\boldsymbol{A}$本征矢的正交归一系：

$$\left\langle\psi_n^i\middle|\psi_{n'}^j\right\rangle=\delta_{ij}\delta_{nn'}$$

如果本征矢的正交归一系在态空间中构成一个基，则厄米算符$\boldsymbol{A}$就是一个观察算符，即还要求满足

$$\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{i=1}^{g_n}\left|\psi_n^i\right\rangle\left\langle\psi_n^i\right|=\mathbf{I}$$

设厄米算符***A***的本征值集合一部分为离散谱： $\{a_n; n=1,2,\cdots\}$ （$\boldsymbol{a_n}$的简并度为$\boldsymbol{g_n}$），还有一部分为连续谱：$\boldsymbol{a(\nu)}$，假设为非简并

$$A\left|\psi_n^i\right\rangle = a_n\left|\psi_n^i\right\rangle \qquad \begin{array}{l} n=1,2,\cdots \\ i=1,2,\cdots,g_n \end{array}$$

$$A\left|\psi_\nu\right\rangle = a(\nu)\left|\psi_\nu\right\rangle; \quad \nu_1<\nu<\nu_2$$

总可以适当选择这些矢量构成“正交归一”系：

$$\left\langle\psi_n^i\middle|\ \psi_{n'}^{i'}\right\rangle=\delta_{nn'}\delta_{ii'}; \qquad \left\langle\psi_\nu\middle|\ \psi_{\nu'}\right\rangle=\delta\left(\nu-\nu'\right); \qquad \left\langle\psi_n^i\middle|\ \psi_\nu\right\rangle=0$$

如果这个矢量系构成一个基，即 $\displaystyle\sum_n\sum_{i=1}^{g_n}\left|\psi_n^i\right\rangle\left\langle\psi_n^i\right|+\int_{\nu_1}^{\nu_2}\mathrm{d}\nu\left|\psi_\nu\right\rangle\langle\psi_\nu| = \mathbf{I}$

则称***A***为一个观察算符

3、投影算符$\boldsymbol{P_\psi}$

可证明投影算符$\boldsymbol{P_\psi}$是一个观察算符

已知投影算符$\boldsymbol{P_\psi}$是一个厄米算符，本征值为**1**和**0**，

本征值为**1**是非简并的，对应的本征矢为 $|\psi\rangle$

对于任意一矢量 $|\varphi\rangle$，总可写成 $|\varphi\rangle = P_\psi|\varphi\rangle + \left(\mathbf{I} - P_\psi\right)|\varphi\rangle$

$= |\psi\rangle$

投影算符$\boldsymbol{P_\psi}$本征值为**1**的本征矢量

投影算符$\boldsymbol{P_\psi}$本征值为**0**的本征矢量

$$P_\psi\left[\left(\mathbf{I} - P_\psi\right)|\varphi\rangle\right] = P_\psi|\varphi\rangle - P_\psi\left(P_\psi|\varphi\rangle\right)$$

$$= |\psi\rangle - |\psi\rangle = 0$$

所以投影算符$\boldsymbol{P_\psi}$是一个观察算符

三、可对易观察算符的集合

1、重要定理

a、定理1

如果两个算符***A***和***B***是可对易的，而且$|\psi\rangle$是***A***的一个本征矢，则$B|\psi\rangle$ 也是***A***的一个本征矢，且属于同一本征值。

证明：$|\psi\rangle$是***A***的一个本征矢　$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$

两边作用算符***B***　$BA|\psi\rangle = aB|\psi\rangle$

算符***A***和算符***B***对易：　$BA = AB$

$$\Downarrow$$

$$A\left(B|\psi\rangle\right) = a\left(B|\psi\rangle\right)$$

可见，$B|\psi\rangle$ 也是算符***A***属于本征值***a***的本征矢。

讨论：

1、如果$|\psi\rangle$是非简并的本征矢，则$B|\psi\rangle$正比于$|\psi\rangle$，即

$$B|\psi\rangle = b|\psi\rangle$$

所以$|\psi\rangle$ 也是算符**B**的本征矢。

2、如果***a***是简并的本征值，则 只能说 $B|\psi\rangle$ 属于算符***A***对应本征值***a***的本征子空间$\varepsilon_{\boldsymbol{a}}$，对于任意 $B|\psi\rangle \in \mathbf{E}_a$，有

$$B|\psi\rangle \in \mathbf{E}_a$$

本征子空间$\varepsilon_{\boldsymbol{a}}$在算符***B***作用下整体不变

b、定理2

如果两个算符***A***和***B***是可对易的，且$|\psi_1\rangle$和$|\psi_2\rangle$是***A***的两个本征矢，属于不同的本征值，则矩阵元$\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$

证明：$|\psi_1\rangle$和$|\psi_2\rangle$是算符***A***的本征矢

$$A|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle \qquad A|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle$$

根据定理**1**，$B|\psi_2\rangle$也是算符***A***属于本征值$\boldsymbol{a_2}$的本征矢

根据厄米算符属于不同本征值的本征矢彼此正交，得

$$\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$$

c、定理3

如果两个观察算符***A***和***B***可对易，则***A***和***B***的共同本征矢构成态空间的一个正交归一基。

证明：设两个算符***A***和***B***可对易，为了简化符号，设两个算符的谱是离散的

因为***A***是观察算符，有一个***A***的正交归一本征矢集合构成态空间ε的基，记为 $\left|u_n^i\right\rangle$

$$A\left|u_n^i\right\rangle = a_n\left|u_n^i\right\rangle \qquad \begin{array}{l} n = 1, 2, \cdots \\ i = 1, 2, \cdots, g_n \end{array}$$

$$\left\langle u_n^i \middle| u_{n'}^j \right\rangle = \delta_{ij}\delta_{nn'}$$

当 $n \neq n'$ 时 $\left\langle u_n^i \middle| B \middle| u_{n'}^j \right\rangle = 0$

将基矢按下列顺序排列

$$\left|u_1^1\right\rangle, \left|u_1^2\right\rangle, \cdots, \left|u_1^{g_1}\right\rangle; \quad \left|u_2^1\right\rangle, \left|u_2^2\right\rangle, \cdots, \left|u_2^{g_2}\right\rangle; \quad \left|u_3^1\right\rangle, \cdots$$

B的矩阵是一个分块对角矩阵

	ε_1	ε_2	ε_3	$\cdots$
ε_1		0	0	0
ε_2	0		0	0
ε_3	0	0		0
$\vdots$	0	0	0	

只有画线部分才有非零矩阵元

(i) 如果$\boldsymbol{a_n}$是$\boldsymbol{A}$的非简并本征值，对应的子块为**1x1**的矩阵,$\left|u_n\right\rangle$对应于的那一列中，其他矩阵元为零，表明$\left|u_n\right\rangle$是$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$共同的本征矢。

(ii) 如果$\boldsymbol{a_n}$是$\boldsymbol{A}$的简并本征值，对应的子块不是对角的,$\left|u_n^i\right\rangle$一般并不是$\boldsymbol{B}$的本征矢。

在本征子空间 $\varepsilon_{\boldsymbol{n}}$ 中，任意选择一组 $\left\{\left|u_n^i\right\rangle; i=1,2,\cdots,g_n\right\}$

算符$\boldsymbol{A}$的矩阵表示都是对角的

算符$\boldsymbol{B}$的矩阵表示：

$$\beta_{ij}^{(n)}=\left\langle u_n^i \mid B \mid u_n^j\right\rangle$$

算符$\boldsymbol{B}$是厄米算符，这个矩阵是厄米的。因而可以对角化。

在本征子空间 $\varepsilon_{\boldsymbol{n}}$ 中，找到一个新的基$\left\{\left|v_n^i\right\rangle; i=1,2,\cdots,g_n\right\}$ ，表示$\boldsymbol{B}$的矩阵对角：

$$\left\{\left|v_n^i\right\rangle; i=1,2,\cdots,g_n\right\}$$

$$B\left|v_n^j\right\rangle=\beta_i^{(n)}\left|v_n^j\right\rangle$$

在本征子空间 $\mathcal{E}_n$ 中，找到一个新的基$\left\{\left|v_n^i\right\rangle; i=1,2,\cdots,g_n\right\}$ ，表示**B**的矩阵对角：

$$\left\{\left|v_n^i\right\rangle; i=1,2,\cdots,g_n\right\}$$

$$B\left|v_n^j\right\rangle=\beta_i^{(n)}\left|v_n^j\right\rangle$$

即在**A**的每一个本征子空间中，总可以选出这样一个基，它是由**A**和**B**的共同本征矢构成的。

即证明了定理。

需要强调的是：**A**的属于简并本征值的本征矢不一定是**B**的本征矢。

共同的基表示为 $\left|u_{n,p}^i\right\rangle$ ，指标**n**和**p**用来标记**A**和**B**的本征值a_n和b_p，同属a_n和b_p的各基矢用上标**i**加以区别

$$A\left|u_{n,p}^i\right\rangle=a_n\left|u_{n,p}^i\right\rangle \qquad B\left|u_{n,p}^i\right\rangle=b_p\left|u_{n,p}^i\right\rangle$$

定理3的逆定理也成立：如果存在由A和B的共同本征矢构成的一个基，则两个观察算符A和B可对易。

$$AB\left|u_{n,p}^{i}\right\rangle = b_p A\left|u_{n,p}^{i}\right\rangle = b_p a_n \left|u_{n,p}^{i}\right\rangle$$

$$BA\left|u_{n,p}^{i}\right\rangle = a_n B\left|u_{n,p}^{i}\right\rangle = a_n b_p \left|u_{n,p}^{i}\right\rangle$$

两式相减即得

$$[A,B]\left|u_{n,p}^{i}\right\rangle = 0$$

由于该式对于全体基矢都成立，即有 $[A,B]=0$

2、可对易观察算符的完全集合

考察算符$\boldsymbol{A}$在$\mathcal{E}$中全体本征矢构成的基：$\left\{\left|u_n^i\right\rangle\right\}$

如果本征值非简并，给定的本征值唯一地决定了本征矢，即由$\boldsymbol{A}$本征矢构成的基只有一个（可相差一个相位），我们说观察算符$\boldsymbol{A}$本身单独构成一个可对易观察算符的完全集合

如果算符$\boldsymbol{A}$的本征值存在简并，给定的本征值不能唯一地决定了本征矢，在维数大于**1**的每一个本征子空间中，基可以随意选择。

如果另外一个观察算符$\boldsymbol{B}$，与$\boldsymbol{A}$对易，用$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$的共同本征矢构成一个正交归一基，如果这个基唯一（可相差一个相位），我们说观察算符$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$构成可对易观察算符的完全集合

或者说，如果对于本征值的每一对可能值(a_n,b_p)，只有一个对应的基矢，则$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$构成可对易观察算符的完全集合

如果至少对于每一对可能值(a_n,b_p)中的一组，存在多个独立矢量，都属于这一组本征值的本征矢，则集合$\{A,B\}$不完全

需要增加算符C，同时与A和B对易，构建算符A、B和C的共同本征矢量的正交归一基，如果他们的每一个本征值组(a_n,b_p,c_r)仅对应一个基矢，则算符A、B、C构成可对易观察算符的完全集合

如果情况并非如此，则需要算符D…

按定义，把观察算符A、B、C…的一个集合叫做可对易观察算符的完全集合的条件是:

(i)所有的这些观察算符A、B、C…是两两对易的;

(ii)给出了全体算符A、B、C…的本征值的一个数组，便足决定唯一的一个共同本征矢（除倍乘因子以外）。

讨论：

(i) 我们通常约定只考虑“最小的”可对易观察算符的完全集合，就是说，如果从算符集中去掉任意一个观察算符，它就不成其为完全集合了。

(ii) {$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$…}是可对易观察算符的完全集合，给出本征值$\boldsymbol{a_n}$,$\boldsymbol{b_p}$,$\boldsymbol{c_r}$…的一个可能数组，便足以决定一个共同本征矢（除倍乘因子以外），所以有时右矢记作$\left|a_n, b_p, c_r, \cdots\right\rangle$

(iii) 对于一个给定的物理体系，可对易观察算符的完全集合不止一个。

§ 3.5 表象和观察算符的两个重要例子

我们回到单粒子波函数空间，或者说回到与它相联系的态空间$\mathcal{E}$

然后，我们用态空间$\mathcal{E}$中的一个右矢和每一个波函数联系起来：给出$\mathcal{E}$空间中的右矢$|\psi\rangle$等价于给出对应的波函数$\psi(\vec{r})$

态空间$\mathcal{E}$的标量积与对应函数的标量积对应：

$$\psi \quad \left(\vec{r} \right)$$

一、$\{|\vec{r}\rangle\}$表象和$\{|\vec{p}\rangle\}$表象

在单粒子波函数空间有两个特殊的基 $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$ $\{v_{\vec{p}_0}(\vec{r})\}$

$$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_0) \qquad v_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0\cdot\vec{r}}$$

每一个充分正规的平方可积函数都可以按这两个基中的任意一个展开

对应于$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$的右矢简单记作$|\vec{r}_0\rangle$，对应于$v_{\vec{p}_0}(\vec{r})$的右矢简单记作$|\vec{p}_0\rangle$

$$\boxed{\begin{gathered}\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \Leftrightarrow |\vec{r}_0\rangle \\ \{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}\end{gathered}}$$

从单粒子波函数空间的基$\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$和$\{v_{\vec{p}_0}(\vec{r})\}$出发，可以在$\mathcal{E}$空间定义两种表象： $\{|\vec{r}_0\rangle\}$表象和$\{|\vec{p}_0\rangle\}$表象

1、正交归一关系式和封闭性关系式

$$\langle \vec{r}_0 | \vec{r}_0' \rangle = \int \mathrm{d}^3 r \xi^*_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \xi_{\vec{r}_0'}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0')$$

正交归一关系式

$$\langle \vec{p}_0 | \vec{p}_0' \rangle = \int \mathrm{d}^3 r v^*_{\vec{p}_0}(\vec{r}) v_{\vec{p}_0'}(\vec{r}) = \delta(\vec{p}_0 - \vec{p}_0')$$

封闭性关系式

$$\int \mathrm{d}^3 r_0 |\vec{r}_0\rangle \langle \vec{r}_0| = \mathbf{I}$$

$$\int \mathrm{d}^3 p_0 |\vec{p}_0\rangle \langle \vec{p}_0| = \mathbf{I}$$

2、右矢的分量

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3 r_0 \, |\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}_0|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3 p_0 \, |\vec{p}_0\rangle\langle\vec{p}_0|\psi\rangle$$

其中的系数 $\langle\vec{r}_0|\psi\rangle$和 $\langle\vec{p}_0|\psi\rangle$ 是态 $|\psi\rangle$ 在 $\{|\vec{r}_0\rangle\}$和 $\{|\vec{p}_0\rangle\}$中的表象，因此可以定义

$$\langle\vec{r}_0|\psi\rangle = \psi(\vec{r}_0)$$

$$\langle\vec{p}_0|\psi\rangle = \bar{\psi}(\vec{p}_0)$$

$\bar{\psi}(\vec{p}_0)$是$\psi(\vec{r}_0)$的傅里叶变换

如果：$|\psi\rangle = |\vec{r}_0'\rangle$

$$\langle\vec{r}_0|\vec{r}_0'\rangle = \psi_{\vec{r}_0'}(\vec{r}_0) = \xi_{\vec{r}_0'}(\vec{r}_0) = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0')$$

如果：$|\psi\rangle = |\vec{p}_0\rangle$

$$\langle\vec{r}_0|\vec{p}_0\rangle = \psi_{\vec{p}_0}(\vec{r}_0) = v_{\vec{p}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0\cdot\vec{r}_0}$$

这些性质与封闭性关系一致：

$$\psi(\vec{r}_0)=\langle\vec{r}_0|\psi\rangle=\langle\vec{r}_0|\left[\int \mathrm{d}^3r|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\right]|\psi\rangle=\int \mathrm{d}^3r\langle\vec{r}_0|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle$$

$$=\int \mathrm{d}^3r\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\psi(\vec{r})$$

$$\langle\vec{p}_0|\psi\rangle=\langle\vec{p}_0|\left[\int \mathrm{d}^3r|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\right]|\psi\rangle=\int \mathrm{d}^3r\langle\vec{p}_0|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle$$

$$\bar{\psi}(\vec{p}_0)=\int \mathrm{d}^3r\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0\cdot\vec{r}}\psi(\vec{r})$$

$$\langle\vec{r}_0|\psi\rangle=\psi(\vec{r}_0)$$

$$\langle\vec{p}_0|\psi\rangle=\bar{\psi}(\vec{p}_0)$$

$\bar{\psi}(\vec{p}_0)$是$\psi(\vec{r}_0)$的傅里叶变换

$$\langle\vec{r}_0|\vec{r}\,'_0\rangle=\xi_{\vec{r}\,'_0}(\vec{r}_0)=\delta(\vec{r}_0-\vec{r}\,'_0)$$

$$\langle\vec{r}_0|\vec{p}_0\rangle=v_{\vec{p}_0}(\vec{r}_0)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0\cdot\vec{r}_0}$$

3、矢量的标量积

$$\langle\varphi|\psi\rangle=\int \mathrm{d}^3 r\langle\varphi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle=\int \mathrm{d}^3 r\varphi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

$$\langle\varphi|\psi\rangle=\int \mathrm{d}^3 p\langle\varphi|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi\rangle=\int \mathrm{d}^3 p\bar{\varphi}^*(\vec{p})\bar{\psi}(\vec{p})$$

4、从$\{|\vec{r}\rangle\}$表象变换到$\{|\vec{p}\rangle\}$表象

利用 $\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle=\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle^*=v_{\vec{p}}(\vec{r})=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$

$$\psi(\vec{r})=\langle\vec{r}|\psi\rangle=\langle\vec{r}|\left[\int \mathrm{d}^3 p|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\right]|\psi\rangle=\int \mathrm{d}^3 p\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi\rangle$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3 p e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\bar{\psi}(\vec{p})$$

反过来

$$\langle\vec{p}|\psi\rangle=\langle\vec{p}|\left[\int \mathrm{d}^3 r\,|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\right]|\psi\rangle=\int \mathrm{d}^3 r\,\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle$$

$$\overline{\psi}(\vec{p}) \quad =\int \mathrm{d}^3 r\,\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\psi(\vec{r})$$

算符***A***矩阵元 $A(\vec{r}\,',\vec{r})=\langle\vec{r}\,'|A|\vec{r}\rangle \;=\langle\vec{r}\,'|\left[\int \mathrm{d}^3 p'\,|\vec{p}\,'\rangle\langle\vec{p}\,'|\right]A\left[\int \mathrm{d}^3 p\,|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\right]|\vec{r}\rangle$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{d}^3 p'\mathrm{d}^3 p\,e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\,'\cdot\vec{r}\,'-\vec{p}\cdot\vec{r})}\langle\vec{p}\,'|A|\vec{p}\rangle$$

二、算符***R***和算符***P***

定义 $$|\psi'\rangle = X|\psi\rangle$$

在 $\{|\vec{r}\rangle\}$ 表象中

$$\langle\vec{r}|X|\psi\rangle = x\langle\vec{r}|\psi\rangle$$

$$\langle\vec{r}|Y|\psi\rangle = y\langle\vec{r}|\psi\rangle$$

$$\langle\vec{r}|Z|\psi\rangle = z\langle\vec{r}|\psi\rangle$$

如果计算矩阵元

$$\langle\varphi|X|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3 r\langle\varphi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|X|\psi\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}^3 r\varphi^*(\vec{r})x\psi(\vec{r})$$

在 $\{|\vec{p}\rangle\}$ 表象中

$$\langle\vec{p}\,|\,P_x\,|\,\psi\rangle = p_x\langle\vec{p}|\ \ \psi\rangle$$

$$\langle\vec{p}\,|\,P_y\,|\,\psi\rangle = p_y\langle\vec{p}|\ \ \psi\rangle$$

$$\langle\vec{p}\,|\,P_z\,|\,\psi\rangle = p_z\langle\vec{p}|\ \ \psi\rangle$$

P在$\{|\vec{r}\rangle\}$表象中

$$\left\langle\vec{r}\left|P_x\right|\psi\right\rangle = \int \mathrm{d}^3 p\langle\vec{r}|\ \vec{p}\rangle\left\langle\vec{p}\left|P_x\right|\psi\right\rangle \quad = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3 p e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} p_x\overline{\psi}\left(\vec{p}\right)$$

$p_x\overline{\psi}\left(\vec{p}\right)$ 的逆傅里叶变换也就是 $\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial\psi\left(\vec{r}\right)}{\partial x}$

$$\left\langle\vec{r}\left|P\right|\psi\right\rangle = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\left\langle\vec{r}\left|\psi\right.\right\rangle$$

在 $\{|\vec{r}\rangle\}$ 表象中

$$\left\langle\varphi\left|P_x\right|\psi\right\rangle = \int \mathrm{d}^3 r\langle\varphi|\ \vec{r}\rangle\left\langle\vec{r}\left|P_x\right|\psi\right\rangle = \int \mathrm{d}^3 r\varphi^*(\vec{r})\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right]\psi(\vec{r})$$

在 $\{|\vec{r}\rangle\}$ 表象中 $\langle\vec{r}|[X,P_x]|\psi\rangle=\langle\vec{r}|(XP_x-P_xX)|\psi\rangle$

$$=x\langle\vec{r}|P_x|\psi\rangle-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\langle\vec{r}\mid X\mid\psi\rangle$$

$$=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}x\frac{\partial}{\partial x}\langle\vec{r}|\ \ \psi\rangle-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}x\langle\vec{r}|\ \ \psi\rangle$$

$$=\mathrm{i}\hbar\langle\vec{r}|\ \ \psi\rangle$$

$$[X,P_x]=\mathrm{i}\hbar$$

$$\left.\begin{aligned}[R_i,R_j]&=0\\ [P_i,P_j]&=0\\ [R_i,P_j]&=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\end{aligned}\right\}i,j=1,2,3$$