量子力学与统计物理

Quantum mechanics and statistical physics

光电科学与工程学院 王智勇

第四章：表象与矩阵力学

第四讲：狄拉克(Dirac)符号

一对奇妙的组合

狄拉克：沉默寡言，追求精确。

剑桥大学同事定义了“一个小时说一个字”为一个“狄拉克”单位

海森堡与狄拉克

海森堡：活泼开朗，喜唱歌跳舞，是团队中的开心果。

狄拉克其人

狄拉克（Dirac，1902年8月8日～1984年10月20日），英国理论物理学家，量子力学的奠基者之一，因1928年发表相对论量子力学之**狄拉克方程**获1933年诺贝尔物理学奖。他的三篇科研论文奠定了“量子物理”“量子场论”以及“粒子物理”的基础。

狄拉克

他一生著作不少，他的《量子力学原理》(1930年出版)，一直是该领域的权威性经典名著，甚至有人称之为“量子力学的圣经”。

“在所有的物理学家中，狄拉克拥有最纯洁的灵魂。”

--玻尔

“狄拉克的文章给人以“秋水文章不染尘”的感受，没有任何渣滓，直达宇宙的奥秘”

--杨振宁

海森堡矩阵力学基本内容：

- 量子体系的状态用波函数描述，一组完备的基函数（例如厄米算符的本征函数集合）构成一个Hilbert空间

- 波函数可以在任一力学量本征函数系（表象）上展开，

  展开系数构成的列矩阵，是波函数的矩阵表示

- 描述量子力学的波函数、算符和方程等在不同表象中虽具有不同的矩阵形式，却可相互转换（幺正变换）

狄拉克：

要这么复杂吗？我认为量子力学的波函数，算符和方程等与具体表象无关。

1、狄拉克(Dirac)符号

描述体系的量子力学状态的，是状态矢量，简称为态矢

定义：左矢(bra)、右矢(ket)　（源于词：bracket）

- 态矢量用右矢表示：$|\ \rangle$, 例如 $|\psi\rangle$, $|t\rangle$, $|n\rangle$

可以在右矢内填上力学量算符的本征值或量子数，以表示该力学量算符的某个本征态矢，如：$|E_n\rangle$, $|x\rangle$, $|p\rangle$, $|lm\rangle$

- 与右矢对偶的状态矢量用左矢表示：$\langle\ |$, 例如 $\langle\psi|$, $\langle t|$, $\langle n|$

定义了左矢和右矢，才能定义内积，内积是从矢量到数的一种映射。三维空间与它的对偶空间碰巧重合，不必区分矢量与对偶矢量。Hilbert空间是完备的内积空间。

2. 狄拉克(Dirac)符号表述的量子力学

展开式：对态矢$|\psi>$、$|\phi>$用基矢集合$\{|m>, m=1,2,\ldots\}$展开，

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n|n\rangle,\ \langle\psi| = \sum_n \langle n|a_n^*$$

$$|\phi\rangle = \sum_n b_n|n\rangle,\ \langle\phi| = \sum_n \langle n|b_n^*$$

(例如能量算符$\hat{H}$
本征方程$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$
本征矢满足$\langle n|m\rangle = \delta_{mn}$)

标积 $\langle\phi|\psi\rangle$

$$\langle\phi|\psi\rangle = (\sum_n \langle n|b_n^*)(\sum_m a_m|m\rangle)$$

$$= \sum_{m,n} b_n^* a_m \langle n|m\rangle = \sum_{m,n} b_n^* a_m \delta_{mn}$$

$$= \sum_n b_n^* a_n = (\sum_n a_n^* b_n)^* = (\langle\psi|\phi\rangle)^*$$

$$\Rightarrow \langle\phi|\psi\rangle = (\langle\psi|\phi\rangle)^*$$

状态矢量的归一化 $\langle\psi|\psi\rangle=1$

本征矢的正交归一化

连续变量 $\langle\lambda|\lambda'\rangle=\delta(\lambda-\lambda')$，例如位置与动量本征矢满足

三维情形 $\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle=\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle, \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle=\mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle$

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle=\delta^{(3)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$$

$$\langle\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle=\delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')=\delta(p_x-p_x')\delta(p_y-p_y')\delta(p_z-p_z')$$

一维情形 $\hat{x}|x\rangle=x|x\rangle, \hat{p}|p\rangle=p|p\rangle$

$\langle x|x'\rangle=\delta(x-x'),\ \langle p|p'\rangle=\delta(p-p')$, and so on

离散变量 $\langle m|n\rangle=\delta_{mn}$，例如轨道角动量本征矢

$$\hat{L}^2|lm\rangle=\hbar^2 l(l+1)|lm\rangle,\ \hat{L}_z|lm\rangle=m\hbar|lm\rangle,$$

$$(l=1,2,\ldots;\ m=0,\pm1,\pm2,\ldots\pm l,\ )$$

$$\langle lm|l'm'\rangle=\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

本征矢集合的完备性关系(1或者I表示单位矩阵)

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1,\ \int |\lambda\rangle\langle\lambda| \mathrm{d}\lambda = 1$$

例如：$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},\ |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},\ |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\ \text{and so on}$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I_{3\times 3}$$

本征矢集合是完备的，意味着任意态矢可以用其展开

$$|\psi\rangle = 1|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle,\ c_n = \langle n|\psi\rangle$$

态矢量|ψ>在具体表象中的表示

1) 位置表象$\{|x\rangle\}$: $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \int |x\rangle\langle x| \mathrm{d}x = 1$

态矢$|\psi\rangle$在位置表象$\{|x\rangle\}$下的表示: $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$

即态矢$|\psi\rangle$在位置本征矢$|x\rangle$上的投影—位置波函数

2) 动量表象$\{|p\rangle\}$: $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \langle p|p'\rangle = \delta(p-p'), \int |p\rangle\langle p| \mathrm{d}p = 1$

态矢$|\psi\rangle$在动量表象$\{|p\rangle\}$下的表示: $\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$

即态矢$|\psi\rangle$在动量本征矢$|p\rangle$上的投影—动量波函数

3) 能量表象$\{|n\rangle\}$: $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle,\ \langle m|n\rangle = \delta_{mn},\ \sum_n |n\rangle\langle n| = 1$

态矢$|\psi\rangle$在能量表象$\{|n\rangle\}$下的表示: $\psi_n = \langle n|\psi\rangle$

即态矢$|\psi\rangle$在能量本征矢$|n\rangle$上的投影—能量本征函数

例如：当态矢量|ψ>=|p>时，得到|p>在位置表象下的表示

$$\langle x|p\rangle = \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} px),\ \langle p|x\rangle = \psi_p^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} px)$$

态矢在本征矢集合上的展开

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \Rightarrow |\psi\rangle = 1|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$$

即$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$, 其中 $c_n = \langle n|\psi\rangle$是

1）态矢$|\psi\rangle$与本征矢$|n\rangle$之间的内积

2）态矢$|\psi\rangle$在本征矢$|n\rangle$上的投影

3）态矢$|\psi\rangle$在表象$\{|n\rangle\}$下的波函数

显然有：$c_n^* = (\langle n|\psi\rangle)^* = \langle\psi|n\rangle$

在基$\{|n\rangle\}$下，态矢$|\psi\rangle$的矩阵表示为：

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n|n\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdots \\ c_N \end{pmatrix}, \quad \langle\psi| = \sum_{n=1}^{N}\langle n|c_n^* = \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & \dots & c_N^* \end{pmatrix}$$

位置本征矢与动量本征矢

$$\langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{p} \rangle = (\langle \boldsymbol{p} | \boldsymbol{r} \rangle)^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r})$$

动量本征矢$| \boldsymbol{p} \rangle$在位置表象$\{| \boldsymbol{r} \rangle\}$下的表示：

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{p} \rangle, \psi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{p} | \boldsymbol{r} \rangle$$

（此时动量$\boldsymbol{p}$给定，位置$\boldsymbol{r}$是变量）

位置本征矢$| \boldsymbol{r} \rangle$在动量表象$\{| \boldsymbol{p} \rangle\}$下的表示：

$$\psi_{\boldsymbol{r}}(\boldsymbol{p}) = \langle \boldsymbol{p} | \boldsymbol{r} \rangle, \psi_{\boldsymbol{r}}^*(\boldsymbol{p}) = \langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{p} \rangle$$

（此时位置$\boldsymbol{r}$给定，动量$\boldsymbol{p}$是变量）

一维下的动量本征态

$$\langle x | p \rangle = \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} px), \ \langle p | x \rangle = \psi_p^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} px)$$

投影算符 $$|\psi\rangle=\sum_n a_n|n\rangle=\sum_n|n\rangle a_n=\sum_n\underline{|n\rangle\langle n|}\psi\rangle$$

定义投影算符：$P_n=|n\rangle\langle n|\quad (P_nP_m=P_n\delta_{mn})$

$$\boldsymbol{a}=a_x\boldsymbol{e}_x+a_y\boldsymbol{e}_y+a_z\boldsymbol{e}_z=\sum_i a_i\boldsymbol{e}_i$$

更一般地：$P_\psi=|\psi\rangle\langle\psi|$

$$P_n|\psi\rangle=|n\rangle\langle n|\psi\rangle=a_n|n\rangle\Rightarrow|\psi\rangle=\sum_n a_n|n\rangle=\sum_n P_n|\psi\rangle$$

一个矢量与它的全部投影集合等价（矢量的基底展开）

完备性关系

$$\sum_n P_n=\sum_n|n\rangle\langle n|=1 \text{（1相当于单位矩阵）}$$

氢原子能量本征矢满足：$\sum_{nlm}|nlm\rangle\langle nlm|=1$

$$\int|\lambda\rangle\langle\lambda|\mathrm{d}\lambda=1\ \ (\text{e.g., }\int|x\rangle\langle x|\mathrm{d}x=1,\int|p\rangle\langle p|\mathrm{d}p=1)$$

一般地：$\sum_n|n\rangle\langle n|+\int|\lambda\rangle\langle\lambda|\mathrm{d}\lambda=1$

3. 应用于计算

波函数的矩阵

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle,\ a_n = \langle n|\psi\rangle$$

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots\cdots \\ a_n \\ \cdots\cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \cdots\cdots \\ \langle n|\psi\rangle \\ \cdots\cdots \end{pmatrix}$$

算符的矩阵

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle,\ |\phi\rangle = \sum_n b_n |n\rangle,\ a_n = \langle n|\psi\rangle,\ b_n = \langle n|\phi\rangle$$

设态矢$|\psi\rangle$经算符$\hat{F}$的作用后变成态矢$|\phi\rangle$,即

$$|\phi\rangle = \hat{F}|\psi\rangle \qquad \sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \Rightarrow |\psi\rangle = 1|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$|\phi\rangle = \sum_n \hat{F}|n\rangle\langle n|\psi\rangle \Leftarrow \text{同时左乘}\langle m|$$

$$\Downarrow$$

$$\langle m|\phi\rangle = \sum_n \langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|\psi\rangle \qquad \text{令}\ F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$b_m = \sum_n F_{mn} a_n \Rightarrow \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Schrödinger方程的矩阵形式

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle, \quad a_n = \langle n|\psi\rangle$$

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

$$\Downarrow$$

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

$$= \langle m|\hat{H}\cdot 1|\psi\rangle$$

$$= \sum_n \langle m|\hat{H}|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_m = \sum_n H_{mn} a_n \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ a_m \\ \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H_{m1} & H_{m2} & \cdots & H_{mn} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ a_n \\ \cdots \end{pmatrix}$$

平均值公式的矩阵形式

$$\bar{F}=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle=\langle\psi|1\cdot\hat{F}\cdot 1|\psi\rangle$$
$$=\sum_{mn}\langle\psi|m\rangle\langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$
$$=\sum_{mn}a_m^*F_{mn}a_n$$

例如

$$\bar{F}=\begin{pmatrix}a_1^* & a_2^* & a_3^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}F_{11} & F_{12} & F_{13}\\ F_{21} & F_{22} & F_{23}\\ F_{31} & F_{32} & F_{33}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ a_3\end{pmatrix}$$

用狄拉克符号表示的矩阵元$\langle A|\hat{\Omega}|B\rangle$可以有两种理解

$$\langle A|\hat{\Omega}|B\rangle=\langle A|\{\hat{\Omega}|B\rangle\}\text{，或}\{\langle A|\hat{\Omega}\}|B\rangle$$

若$\hat{\Omega}$是厄米和幺正这两类算符 两种理解结果相同

两算符之积的平均值：

$$\overline{GF} = \langle \psi | GF | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \cdot 1 \cdot G \cdot 1 \cdot F \cdot 1 | \psi \rangle$$

$$= \sum_{n,m,l} \langle \psi | m \rangle \langle m | G | l \rangle \langle l | F | n \rangle \langle n | \psi \rangle$$

$$= \sum_{mln} a_m^* G_{ml} F_{ln} \, a_n$$

附：基于Dirac符号的量子力学公理化表述

1. 量子力学系统在任一时刻的状态，可以用Hilbert空间中的矢量（状态矢量或态矢）$|\varphi>$完备地描述。

1) $|\varphi>$是Dirac 右矢，定义左矢$<\psi|$为右矢$|\psi>$的复共轭转置（即互为厄米共轭）；

2）按内积定义有$<\psi_2|\psi_1>=<\psi_1|\psi_2>^*$；

3）设λ是一个常数因子，则$|\psi>$和$\lambda|\psi>$描述相同的量子态，可以选择λ，使得$|\psi>$归一化$<\psi|\psi>=1$。

2. 若量子力学系统可能处在$|\psi_1>$和$|\psi_2>$描述的状态中，那么它们的线性组合（又称为它们的线性叠加状态）

$$|\psi>=c_1\,|\psi_1>+c_2\,|\psi_2>$$

也是系统的一个可能态，此即态叠加原理。

同理，如果量子力学状态可以处于一系列状态中的一个，那么这些状态所有可能的线性组合（包括部分组合和全部组合），也是系统的一个可能的状态。

3. 物理系统的可观测量(力学量)F，它由 Hilbert 空间上的线性厄米算符 $\hat{F}$ 来描述。

$$\hat{F}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{F}|\psi_1\rangle + c_2\hat{F}|\psi_2\rangle,\ \hat{F}^\dagger = \hat{F}$$

线性厄米算符有以下特征：

1) 所有本征值为实数：$\hat{F}|\psi_n\rangle = f_n|\psi_n\rangle \Rightarrow f_n^* = f_n$

2) 属于不同本征值的本征矢正交：$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{mn}$

3) 本征矢量集合是完备的，可以选为Hilbert空间的一组基矢：$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = I$

4. 系统处在状态$|\psi\rangle$时，对力学量F进行测量，每次测得值必为它的某一本征值f_i，且测得值$F=f_i$的概率，等于状态$|\psi\rangle$处于相应本征态$|\varphi_i\rangle$上的概率$|\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2$，即有：

$$\begin{cases} \hat{F}\left|\varphi_i\right\rangle = f_i\left|\varphi_i\right\rangle, \sum_i \left|\varphi_i\right\rangle\left\langle\varphi_i\right| = I, \left\langle\varphi_i\middle|\varphi_j\right\rangle = \delta_{ij} \\ \left|\psi\right\rangle = \sum_i \left|\varphi_i\right\rangle\left\langle\varphi_i\middle|\psi\right\rangle = \sum_i c_i\left|\varphi_i\right\rangle, c_i = \left\langle\varphi_i\middle|\psi\right\rangle \\ F = f_i \text{ with the probability } \left|c_i\right|^2 = \left|\left\langle\varphi_i\middle|\psi\right\rangle\right|^2 \\ \bar{F} = \left\langle\psi\middle|\hat{F}\middle|\psi\right\rangle = \sum_i \left|c_i\right|^2 f_i \end{cases}$$

$$\hat{F}|\varphi_i\rangle = f_i|\varphi_i\rangle,\ |\psi\rangle = \sum_i c_i|\varphi_i\rangle,\ c_i = \langle\varphi_i|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|\varphi_i\rangle \xrightarrow[\text{波包坍塌}]{\text{测量}F} \begin{pmatrix} |\psi\rangle = & |\varphi_1\rangle, & |\varphi_2\rangle, & \cdots & |\varphi_n\rangle \\ F = & f_1, & f_2, & \cdots & f_n \\ p = & |c_1|^2, & |c_2|^2, & \cdots & |c_n|^2 \end{pmatrix}$$

当系统处于状态$|\psi>$时，对该系统测量力学量F，多次测量得到的平均值为

$$\bar{F} = \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle = \sum_i |c_i|^2 f_i$$

当系统处于某一本征态$|\psi>=|\varphi_i>$时，对该系统重复测量的结果，是同一个本征值f_i

选择 $\hat{F}$的本征矢量集合{|φ_i>}作为Hilbert 空间的基矢时，称为在F表象中的描述（例如在位置表象下，系统状态|ψ>按照{|r>}展开时，展开系数即为位置波函数）。

物理内容与表象的选择无关

$$\left|\varphi_1\right\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\ \left|\varphi_2\right\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\ \left|\varphi_3\right\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix},\ \left\langle\varphi_i\right|=\left(\left|\varphi_i\right\rangle\right)^\dagger$$

$$\left|\psi\right\rangle=\sum_i c_i\left|\varphi_i\right\rangle=\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix},\ \left\langle\psi\right|=\begin{pmatrix}c_1^* & c_2^* & c_3^*\end{pmatrix}$$

由展开式 $|\psi\rangle=\sum_i c_i|\varphi_i\rangle$ 的展开系数c_i构成的列矩阵，即是$|\psi>$在F表象下的矩阵表示。

同理，力学量算符 $\hat{G}$ 在F表象下有矩阵表示，矩阵元为 $G_{ij}=\langle\varphi_i|\hat{G}|\varphi_j\rangle$

例如

$$|\psi\rangle=\sum_i c_i|\varphi_i\rangle=\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix},\ \langle\psi|=\begin{pmatrix}c_1^* & c_2^* & c_3^*\end{pmatrix},$$

$$|\phi\rangle=\sum_i a_i|\varphi_i\rangle=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix},\ \langle\phi|=\begin{pmatrix}a_1^* & a_2^* & a_3^*\end{pmatrix},$$

Inner Product: $\langle \psi | \phi \rangle = \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & c_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = c_1^* a_1 + c_2^* a_2 + c_3^* a_3$

Outer Product: $| \phi \rangle \langle \psi | = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & c_3^* \end{pmatrix}$

$$= \begin{pmatrix} a_1 c_1^* & a_1 c_2^* & a_1 c_3^* \\ a_2 c_1^* & a_2 c_2^* & a_2 c_3^* \\ a_3 c_1^* & a_3 c_2^* & a_3 c_3^* \end{pmatrix}$$

例如：在位置表象{|$\boldsymbol{r}$>}下，利用完备性关系 $\int |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = I$ ，态矢|$\psi_1(t)$>与|$\psi_2(t)$>之间的内积表达为（积分对应连续求和）：

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int\langle\psi_1|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\psi_2\rangle\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$= \int\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\psi_2(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

右边是常见的两位置波函数之间的内积表达式。

类比：$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} = \sum_i a_i b_i$ (坐标分量乘积求和)

$$\boldsymbol{a} = a_1\boldsymbol{e}_1 + a_2\boldsymbol{e}_2 + a_3\boldsymbol{e}_3,\ \boldsymbol{b} = b_1\boldsymbol{e}_1 + b_2\boldsymbol{e}_2 + b_3\boldsymbol{e}_3$$

同理： 在位置表象$\{|\boldsymbol{p}>\}$下，利用完备性关系$\int|\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}|\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}=I$，态矢$|\psi_1(t)>$与$|\psi_2(t)>$之间的内积表达为:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle=\int\langle\psi_1|\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}|\psi_2\rangle\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$$

$$=\int\psi_1^*(\boldsymbol{p},t)\psi_2(\boldsymbol{p},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$$

右边是常见的两动量波函数之间的内积表达式。

在上面两个例子中，左边$<\psi_1|\psi_2>$是态矢内积的抽象表达，不依赖于任何表象；而右边则是内积在给定表象下的具体表示，即位置表象下的表示和动量表象下的表示。

可见，位置波函数，是态矢$|\psi>$在以位置本征矢$|\boldsymbol{r}>$为基矢展开时的展开系数("坐标分量")；动量波函数，是态矢$|\psi>$在以动量本征矢$|\boldsymbol{p}>$为基矢展开时的展开系数("坐标分量")

5. 系统状态$|\psi(t)>$随时间的变化规律，是由Schrödinger方程来描述：

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

其中$\hat{H}$是系统的Hamiltonian算符（当它不显含时间时，可看作系统的总能量算符）。

4. 量子力学的三种图象

对同一个物理内容，可以存在多种不同的数学描述方式，这些不同的描述方式是完全等价的。量子力学对微观系统随时间的演化规律，存在三种等价的描述方式，这些描述方式称为“图像”(picture，有的翻译成“表象”或者“绘景”)，它们是：

1．Schrödinger图像

2．Heisenberg图像

3．相互作用(Interaction)图像

•在量子力学中，可观测量不是力学量算符和态矢，而是力学量的平均值和概率分布。尽管如此，量子力学系统随时间演化的规律，可以通过力学量算符和态矢随时间的演化方程来描述。

•关于量子力学系统随时间的演化，存在以下三种等价观点：

1）全都归之为态矢随时间的演化，而力学量算符不随时间演化，这种描述方式就是Schrödinger图像；

2）全都归之为力学量算符随时间的演化，而态矢保持不变，得到Heisenberg图像；

3）部分归之为态矢变化，部分归之为算符变化，则是相互作用图像。

4.1 Schrödinger图像

在该图像中，体系的状态矢量$|\varphi(t)>$是随时间t演化的，其演化的方式遵守Schrödinger方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\varphi(t)\right\rangle=\hat{H}\left|\varphi(t)\right\rangle \qquad (1)$$

而力学量算符$\hat{F}$不随时间演化：$\mathrm{d}\hat{F}/\mathrm{d}t=0$。力学量平均值随时间的演化由态矢来承载：

$$\bar{F}(t)=\left\langle\hat{F}\right\rangle=\left\langle\varphi(t)\right|\hat{F}\left|\varphi(t)\right\rangle$$

令

$$\left|\varphi(t_1)\right\rangle = \hat{U}(t_1, t_0)\left|\varphi(t_0)\right\rangle \qquad (2)$$

其中算符$\hat{U}(t_1, t_0)$把t_0时刻的态$|\varphi(t_0)>$变换成t_1时刻的态$|\varphi(t_1)>$，称为时间演化算符，它代表一个连续变换（t_0和t_1任意），把态矢随时间变化而变化用一个变换算符的作用来体现。

由于概率守恒$<\varphi(t_1)|\varphi(t_1)>=<\varphi(t_0)|\varphi(t_0)>$，即

$$\langle\varphi(t_0)|\varphi(t_0)\rangle=\langle\varphi(t_1)|\varphi(t_1)\rangle$$

$$=\langle\varphi(t_0)|\hat{U}^{\dagger}(t_1,t_0)\hat{U}(t_1,t_0)|\varphi(t_0)\rangle$$

故 $$\hat{U}^{\dagger}(t_1,t_0)\hat{U}(t_1,t_0)=1$$

由于Hamiltonian算符是厄米算符，由后面的(8)式，可以进一步给出

$$(3)\begin{cases}\hat{U}^{\dagger}(t_1,t_0)\hat{U}(t_1,t_0)=\hat{U}(t_1,t_0)\hat{U}^{\dagger}(t_1,t_0)=1\\ \hat{U}^{\dagger}(t_1,t_0)=\hat{U}^{-1}(t_1,t_0)\end{cases}$$

满足(3)式的算符成为幺正算符，它所代表的变换称为幺正变换（正交变换可看作是一种特殊的幺正变换，即实的幺正变换），该变换保持矢量的内积不变，相当于Hilbert空间中的旋转变换。时间演化算符还满足以下性质：

$$\left|\varphi(t_0)\right\rangle = \hat{U}(t_0,t_0)\left|\varphi(t_0)\right\rangle \Rightarrow \hat{U}(t_0,t_0) = 1 \quad (4)$$

$$\left.\begin{aligned}
&\left|\varphi(t_1)\right\rangle = \hat{U}(t_1,t_0)\left|\varphi(t_0)\right\rangle \\
&\left|\varphi(t_0)\right\rangle = \hat{U}(t_0,t_1)\left|\varphi(t_1)\right\rangle \\
&= \hat{U}(t_0,t_1)\hat{U}(t_1,t_0)\left|\varphi(t_0)\right\rangle
\end{aligned}\right\} \Rightarrow \hat{U}(t_0,t_1) = \hat{U}^{-1}(t_1,t_0) \quad (5)$$

由

$$\begin{cases} |\varphi(t_1)\rangle = \hat{U}(t_1,t_0)|\varphi(t_0)\rangle \\ |\varphi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2,t_1)|\varphi(t_1)\rangle = \hat{U}(t_2,t_1)\hat{U}(t_1,t_0)|\varphi(t_0)\rangle \\ |\varphi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2,t_0)|\varphi(t_0)\rangle \end{cases}$$

有

$$\hat{U}(t_2,t_0) = \hat{U}(t_2,t_1)\hat{U}(t_1,t_0) \quad (6)$$

下面令$t_1=t$，$t_0=0$，且采用简写

$$\hat{U}(t_1,t_0) = \hat{U}(t,0) = \hat{U}(t)$$

把 $|\varphi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\varphi(0)\rangle$ 代入Schrödinger方程，有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t)|\varphi(0)\rangle = \hat{H}\hat{U}(t)|\varphi(0)\rangle$$

由于$|\varphi(0)>$是任意的，故

$$\mathrm{i}\hbar\,\partial\hat{U}(t)/\partial t = \hat{H}\hat{U}(t) \qquad (7)$$

如果Hamiltonian算符不显含t（此时对应能量算符），(7)式有以下形式解

$$\begin{cases} \hat{U}(t_1,t_0) = \exp[-\mathrm{i}\,\hat{H}(t_1-t_0)/\hbar] \\ \hat{U}(t) = \hat{U}(t,0) = \exp(-\mathrm{i}\,\hat{H}t/\hbar) \end{cases} \qquad (8)$$

4.2 Heisenberg图像

在下面，Schrödinger图像和Heisenberg图像下的态矢和力学量算符分别带有上标S和H。在Heisenberg图像中，力学量平均值随时间的演化，完全归之于力学量算符随时间的演化，而态矢保持不变。对于力学量平均值，有

$$\bar{F}(t)=\left\langle \hat{F}^{S}\right\rangle=\left\langle \varphi^{S}(t)\middle|\hat{F}^{S}\middle|\varphi^{S}(t)\right\rangle$$

$$=\left\langle \varphi^{S}(0)\middle|\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{F}^{S}\hat{U}(t)\middle|\varphi^{S}(0)\right\rangle$$

$$\equiv\left\langle \varphi^{H}\middle|\hat{F}^{H}(t)\middle|\varphi^{H}\right\rangle$$

其中

$$(9)\begin{cases}\left|\varphi^H\right\rangle \equiv \left|\varphi^S(0)\right\rangle = \hat{U}^{-1}(t)\left|\varphi^S(t)\right\rangle \\ \hat{F}^H(t) \equiv \hat{U}^{\dagger}(t)\hat{F}^S\hat{U}(t) = \hat{U}^{-1}(t)\hat{F}^S\hat{U}(t)\end{cases}$$

分别是Heisenberg图像下的态矢和力学量算符。不显含时间的Hamiltonian算符，在两种图像下是相等的，这是因为Hamiltonian算符与时间演化算符是对易的。

$$\hat{U}(t) = \exp(-\mathrm{i}\,\hat{H}^S t/\hbar)$$

$$\hat{H}^H = \hat{U}^{\dagger}(t)\hat{H}^S\hat{U}(t) = \hat{H}^S = \hat{H} \quad (10)$$

因此，对Schrödinger图像下的态矢和力学量算符，利用演化算符进行幺正变换，可以得到Heisenberg图像下的态矢和力学量算符。这种幺正变换不改变态矢内积和力学量平均值，不改变算符之间的对易关系，因此不改变物理内容，两种图像等价。

利用(9)式有

$$\hat{F}^H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{F}^S\hat{U}(t) \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{F}^H}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial \hat{U}^\dagger}{\partial t}\right)\hat{F}^S\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{F}^S\left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t}\right) + \hat{U}^\dagger\left(\frac{\partial \hat{F}^S}{\partial t}\right)\hat{U}$$

定义 $$\frac{\partial \hat{F}^H}{\partial t} \equiv \hat{U}^\dagger\left(\frac{\partial \hat{F}^S}{\partial t}\right)\hat{U}$$

利用(7)式 $i\hbar\,\partial\hat{U}(t)/\partial t = \hat{H}\hat{U}(t)$ 即

$$\partial\hat{U}/\partial t = \hat{H}^S\hat{U}/i\hbar,\ \partial\hat{U}^\dagger/\partial t = -\hat{U}^\dagger\hat{H}^S/i\hbar$$

其中已经考虑到(10).于是我们有

$$\mathrm{d}\hat{F}^H/\mathrm{d}t = (\partial\hat{U}^\dagger/\partial t)\hat{F}^S\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{F}^S(\partial\hat{U}/\partial t) + \partial\hat{F}^H/\partial t$$

$$= (-\hat{U}^\dagger\hat{H}^S\hat{F}^S\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{F}^S\hat{H}^S\hat{U})/i\hbar + \partial\hat{F}^H/\partial t \xrightarrow[\hat{H}^H=\hat{H}^S=\hat{H}]{\hat{U}\hat{U}^\dagger=1}$$

$$= (1/i\hbar)[\hat{U}^\dagger\hat{F}^S\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{H}^S\hat{U} - \hat{U}^\dagger\hat{H}^S\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{F}^S\hat{U}] + \partial\hat{F}^H/\partial t$$

$$= (1/i\hbar)[\hat{U}^\dagger\hat{F}^S\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{H}^S\hat{U} - \hat{U}^\dagger\hat{H}^S\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{F}^S\hat{U}] + \partial\hat{F}^H/\partial t$$

$$= (1/i\hbar)[\hat{F}^H\hat{H}^H - \hat{H}^H\hat{F}^H] + \partial\hat{F}^H/\partial t$$

$$\Rightarrow \mathrm{d}\hat{F}^H/\mathrm{d}t = (1/i\hbar)[\hat{F}^H, \hat{H}] + \partial\hat{F}^H/\partial t$$

于是，我们得到在Heisenberg图像下，力学量算符随时间演化的Heisenberg方程。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{F}^H(t)=\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}^H+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F}^H,\hat{H}] \qquad (11)$$

其中

$$\hat{F}^H(t)\equiv\hat{U}^\dagger(t)\hat{F}^S\hat{U}(t),\quad \frac{\partial\hat{F}^H}{\partial t}\equiv\hat{U}^\dagger\left(\frac{\partial\hat{F}^S}{\partial t}\right)\hat{U}$$

总之，在Heisenberg图像中，态矢不随时间演化，而力学量算符是随时间演化的，其演化的方式遵守Heisenberg方程。

4.3 相互作用图像

当一个量子系统的Hamiltonian算符可以分成两部分：

$$\hat{H}^S = \hat{H}_0^S + \hat{H}'^S \quad (12)$$

其主要部分 $\hat{H}_0^S$ 不含时间（通常是不包含相互作用的自由部分），而微扰部分 $\hat{H}'^S$ 只对系统产生较小的影响（通常是相互作用部分），这时就可以采用相互作用图像。

相互作用图像下的态矢和算符（带上标I），可由Schrödinger图像下的态矢和算符作如下幺正变换得到：

$$\begin{cases} \hat{U}_0(t) = \exp(-\mathrm{i}\hat{H}_0^S t/\hbar) \\ \left|\varphi^I(t)\right\rangle = \hat{U}_0^{-1}(t)\left|\varphi^S(t)\right\rangle \\ \hat{F}^I(t) = \hat{U}_0^{-1}(t)\hat{F}^S\hat{U}_0(t) \end{cases} \quad (13)$$

其中的幺正变换算符 $\hat{U}_0(t)$ 是由Hamiltonian算符的主要部分来定义的时间演化算符，它同样满足前面给出的演化算符的一切性质。由(13)第一式有

$$\mathrm{i}\hbar\partial\hat{U}_0(t)/\partial t = \hat{H}_0^S\hat{U}_0(t) \quad (14)$$

课外阅读： 如果Hamiltonian算符的主要部分和微扰部分对易，即有

$$[\hat{H}_0^S, \hat{H}'^S] = 0 \Rightarrow [\hat{H}_0^S, \hat{H}^S] = [\hat{H}_0^S, \hat{H}_0^S + \hat{H}'^S] = 0$$

$$\Rightarrow \exp(\mathrm{i}\hat{H}_0^S t/\hbar)\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar) = \exp[\mathrm{i}(\hat{H}_0^S - \hat{H})t/\hbar]$$

则相互作用图像下的态矢又可以表达为

$$\left|\varphi^I(t)\right\rangle = \exp(\mathrm{i}\hat{H}_0^S t/\hbar)\left|\varphi^S(t)\right\rangle$$

$$= \exp(\mathrm{i}\hat{H}_0^S t/\hbar)\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar)\left|\varphi^S(0)\right\rangle$$

$$= \exp[\mathrm{i}(\hat{H}_0^S - \hat{H})t/\hbar]\left|\varphi^S(0)\right\rangle = \exp(-\mathrm{i}\hat{H}'^S t/\hbar)\left|\varphi^S(0)\right\rangle$$

End

由定义(13)，在相互作用图像下，Hamiltonian算符的微扰项与自由项分别为

$$\begin{cases} \hat{H}'^{I} = \hat{U}_0^{-1}(t)\hat{H}'^{S}\hat{U}_0(t) \\ \hat{H}_0^{I} = \hat{U}_0^{-1}(t)\hat{H}_0^{S}\hat{U}_0(t) = \hat{H}_0^{S} \end{cases} \qquad (15)$$

利用(12)—(15)式，并且利用Schrödinger方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\varphi^{s}(t)\right\rangle = (\hat{H}_0^{S} + \hat{H}'^{S})\left|\varphi^{s}(t)\right\rangle$$

不难验证，在相互作用图像下，态矢和算符分别满足以下方程（假定其中的算符不显含时间）：

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}\left|\varphi^{I}(t)\right\rangle = \hat{H}'^{I}\left|\varphi^{I}(t)\right\rangle \\ \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{F}^{I}(t) = \dfrac{1}{i\hbar}[\hat{F}^{I}(t), \hat{H}_0^{I}] \end{cases} \qquad (16)$$

因此，在相互作用图像下，态矢和算符都随时间演化，其中态矢的演化遵从Schrödinger方程，且由Hamiltonian算符中的相互作用项（微扰项）推动；算符的演化遵从Heisenberg方程，且由Hamiltonian算符中的自由项推动。

•以上三种图像，是对同一物理内容的不同描述方式，在物理上是相互等价的。

•例如，在三种图像中，算符之间的对易关系不会变，算符的平均值不会变，态矢之间的内积不会变，测不准关系不会变，等等。

•如果对未微扰系统（$\hat{H}^S = \hat{H}_0^S$）已经有充分了解，加上微扰$\hat{H}'^S$之后，取相互作用图像是合适的，此时算符(包括场算符在内)的运动方程，由未微扰系统的Heisenberg方程来描述，它的解是熟悉的、已知的；而态矢量的运动方程只含一个影响较小的微扰算符，便于近似求解。

*量子力学到经典力学的过渡

在海森堡绘景中，只是算符随时间演化，现考察自由粒子的位置算符随时间的演化

现令t_0=0

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\boldsymbol{r}}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\boldsymbol{r}}(t),\hat{H}]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}e^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}[\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{p}}^2/2m]e^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}$$

$$=e^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}e^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}$$

解微分方程，得： $\hat{\boldsymbol{r}}(t)=\hat{\boldsymbol{r}}(0)+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}t$

与经典力学对比： $\boldsymbol{r}(t)=\boldsymbol{r}(0)+\boldsymbol{v}t$

作业： 1.试用Dirac符号证明以下不依赖了具体表象的薛定谔方程是成立的

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})\right]|\psi(t)\rangle.$$

2.试用Dirac符号求证动量表象中的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\boldsymbol{p},t) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\varphi(\boldsymbol{p},t) + \iiint \mathrm{d}\boldsymbol{p}' V_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'}\varphi(\boldsymbol{p}',t),$$