

§ 7 位置表象和动量表象

在这一节和以后的两节里，我们根据量子力学的五条基本原理，讨论几个重要的算符—— \hat{x} , \hat{p} , \hat{L} 以及各种情况下 \hat{H} 的本征值、本征矢量以及相关的问题；同时建立一些常见的表象。

§ 7.1 本征值谱和本征矢量

一、算符 \mathbf{X} 的本征值和本征矢

对一维运动。令 $\mathbf{X} | x \rangle = x | x \rangle$ (7.1)

$$\mathbf{P} | p \rangle = p | p \rangle \quad (7.2)$$

求位置和动量算符的其它本征值和本征矢。

用动量 \mathbf{P} 构造一个么正算符 $Q^+(\xi)$:

$$Q^+(\xi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\xi P}$$

式中 ξ 是一个实数, $Q^+(\xi)$ 的伴算符为

$$Q(\xi) = [Q^+(\xi)]^{-1} = e^{\frac{i}{\hbar}\xi P}$$

利用对易关系

$$[X, f(P)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial P} f(P)$$

则

$$[X, Q^+(\xi)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial P} Q^+(\xi) = \xi Q^+(\xi)$$

即

$$XQ^+(\xi) = Q^+(\xi)X + \xi Q^+(\xi)$$

将式 $XQ^+(\xi) = Q^+(\xi)X + \xi Q^+(\xi)$
作用到 $|x\rangle$ 上，得

$$\begin{aligned} XQ^+(\xi)|x\rangle &= Q^+(\xi)X|x\rangle + \xi Q^+(\xi)|x\rangle \\ &= Q^+(\xi)x|x\rangle + \xi Q^+(\xi)|x\rangle \\ &= (x + \xi)Q^+(\xi)|x\rangle \end{aligned}$$

由此可见，若 $|x\rangle$ 是 \mathbf{X} 的属于本征值 x 的本征矢量，则 $Q^+(\xi)|x\rangle$ 也是 \mathbf{X} 的本征矢量，属于本征值 $x + \xi$ 。

既然 ξ 为任意实数时上述推论均能成立，就可以得出结论：

位置算符 X 的本征值可取一切实数。

这一结论说明，在量子力学中粒子位置的可取值与经典力学的情况并无不同。

由式 $XQ^+(\xi)|x\rangle = (x+\xi)Q^+(\xi)|x\rangle$
可令：

$$Q^+(\xi)|x\rangle = |x+\xi\rangle$$

由 $Q^+(\xi)$ 的么正性可知， $|x+\xi\rangle$ 也是归一化的。

根据其表现形式，我们形象地称 $Q^+(\xi)$ 为作用于位置本征矢量上的上升算符。

写出上式的左矢形式，有

$$\langle x | Q(\xi) = \langle x + \xi |$$

称 $Q(\xi)$ 为作用左矢上的上升算符。

将 $Q(\xi)$ 作用于 $|x\rangle$ ，由于 $Q(\xi) = Q^+(-\xi)$ ，则

$$Q(\xi) |x\rangle = |x - \xi\rangle$$

两边取复共轭，有 $\langle x | Q^+(\xi) = \langle x - \xi |$

可见 $Q(\xi)$ 是右矢 $|x\rangle$ 的下降算符，而 $Q^+(\xi)$ 为左矢 $\langle x |$ 的下降算符。

有了 $Q^+(\xi)$ 和 $Q(\xi)$ ，就可以从任何一个本征矢量出发，求出位置算符 \mathbf{X} 全部本征矢量 $\{|x\rangle\}$ 。

二、动量算符P的本征值和本征矢

类似地，引入算符

$$T^+(\pi) = e^{\frac{i}{\hbar}\pi X}, \quad T(\pi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\pi X}$$

式中 π 为一实数，则可得到

$$T^+(\pi) | p \rangle = | p + \pi \rangle, \quad T(\pi) | p \rangle = | p - \pi \rangle$$
$$\langle p | T^+(\pi) = \langle p - \pi |, \quad \langle p | T(\pi) = \langle p + \pi |$$

由此可知动量算符P的本征值也可取全部实数，而其全部本征矢量 $\{| p \rangle\}$ 也可由一个本征矢量出发，用上升算符 $T^+(\pi)$ 或下降算符 $T(\pi)$ 构造出来。

§ 7.2 位置表象和动量表象

算符 \mathbf{X} 和 \mathbf{P} 都具有连续的本征值谱，对其本征矢量的完全性目前我们没法讨论。

这里假定 \mathbf{X} 和 \mathbf{P} 的本征矢量组 $\{|x\rangle\}$ 和 $\{|p\rangle\}$ 都是完全的，即有

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| = 1$$

故可建立 x 表象和 p 表象。这里主要讨论前者。

一、位置表象的正交归一关系

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

二、矢量和算符在位置表象的表示

由于坐标算符的本征值是连续的，这里只能用本征值本身作为矩阵行和列的编号，因而这种矩阵的行和列将不是离散的而是连续的，故叫连续矩阵。

1. 矢量在x表象中的表示

设 $|\psi\rangle$ 是归一化矢量，则有

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x | \psi \rangle = \int |x\rangle \psi_x dx, \quad \psi_x = \langle x | \psi \rangle$$

x 取一切值的 ψ_x 的全体完全等价于矢量 $|\psi\rangle$,
称为矢量 $|\psi\rangle$ 的位置表象, 常写为

$$|\psi\rangle \rightarrow \psi_x \rightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_{x'} \\ \vdots \\ \psi_{x''} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

类似地, 左矢 $\langle\psi|$ 可以写成形式

$$\langle\psi| = \int dx \langle\psi|x\rangle \langle x| = \int \psi_x^* \langle x| dx$$

ψ_x^* 可以写成一连连续的行矩阵

$$\langle\psi| \rightarrow \psi_x^* \rightarrow (\cdots \psi_{x'}^* \cdots \psi_{x''}^* \cdots)$$

而内积 $\langle \varphi | \psi \rangle$ 也可以写成矩阵的形式

$$\begin{aligned}\langle \varphi | \psi \rangle &= \int dx \langle \varphi | x \rangle \langle x | \psi \rangle \\ &= \int \varphi_x^* \psi_x dx\end{aligned}$$

即

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \left(\cdots \quad \varphi_{x'}^* \quad \cdots \quad \varphi_{x''}^* \quad \cdots \right) \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_{x'}^* \\ \vdots \\ \psi_{x''}^* \\ \vdots \end{pmatrix}$$

2. 算符在x表象中的表示

算符A在x表象中的表示为

$$A_{x'x} = \langle x' | A | x \rangle$$

算符对矢量的作用也可写成矩阵形式，如对

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

$$\langle x' | \varphi \rangle = \langle x' | A | \psi \rangle = \int dx \langle x' | A | x \rangle \langle x | \psi \rangle$$

即

$$\varphi_{x'} = \langle x' | A | \psi \rangle = \int dx A_{x'x} \psi_x$$

或

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \varphi_{x'} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & A_{xx'} & \dots \\ \dots & A_{x'x} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_x \\ \vdots \end{pmatrix}$$

3. 几个最基本的矢量和算符在位置表象中的具体形式

①位置表象中的基矢

讨论一个具体基矢 $|x_0\rangle$ 。

令 $|\nu\rangle = |x_0\rangle$ ，则其位置表象为

$$\nu_x = \langle x | x_0 \rangle = \delta(x - x_0)$$

x : 列矩阵的行序号

x_0 : 常数，基矢所固有

此矩阵只在第 x_0 行是一个 δ 函数型的无穷大，其余都是零。

②位置算符在自身表象中的表示

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

这是一个对角矩阵，其对角元是相同的行或列序号乘以 δ 型的无穷大；

由于连续矩阵是以本征值本身作为行和列序号的，故所有的对角元都是本征值（乘以 δ 函数）。这与离散情况有类似之处。

③动量本征矢量 $|p\rangle$ 在 x 表象中的形式

令 $|O_x\rangle$ 表示算符 X 的本征值为0的本征矢量，
 $|O_p\rangle$ 表示算符 P 的本征值为0的矢量，则

$$\begin{aligned}
\langle x | p \rangle &= \langle x | T^+(p) | O_p \rangle \\
&= \langle x | e^{\frac{i}{\hbar} p X} | O_p \rangle \\
&= \langle x | e^{\frac{i}{\hbar} p x} | O_p \rangle \\
&= e^{\frac{i}{\hbar} p x} \langle x | O_p \rangle \\
&= e^{\frac{i}{\hbar} p x} \langle O_x | Q(x) | O_p \rangle \\
&= e^{\frac{i}{\hbar} p x} \langle O_x | e^{\frac{i}{\hbar} x P} | O_p \rangle \\
&= e^{\frac{i}{\hbar} p x} \langle O_x | e^{\frac{i}{\hbar} x \cdot 0} | O_p \rangle \\
&= e^{\frac{i}{\hbar} p x} \langle O_x | O_p \rangle
\end{aligned}$$

现在关键问题是求 $\langle O_x | O_p \rangle = ?$

$$\therefore \delta(p - p') = \langle p' | p \rangle$$

$$= \int \langle p' | x \rangle \langle x | p \rangle dx$$

$$\text{(利用式 } \langle x | p \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} px} \langle O_x | O_p \rangle \text{)} = \int e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} e^{\frac{i}{\hbar} px} |\langle O_x | O_p \rangle|^2 dx$$

$$= |\langle O_x | O_p \rangle|^2 \int e^{-\frac{i}{\hbar} (p' - p)x} dx$$

$$\text{(利用 } \delta(p - p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{i}{\hbar} (p - p')x} dx \text{)} = |\langle O_x | O_p \rangle|^2 2\pi\hbar \delta(p - p')$$

$$\therefore \langle O_x | O_p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

即

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px}$$

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}$$

这就是动量本征矢量在 x 表象的矩阵形式。

这里， p ：指定的本征值，固定不变

x ：坐标，变化

$\langle x | p \rangle$ ：由 p 表象到 x 表象的么正变换矩阵

④动量算符 P 在位置表象中的形式

这是一个连续矩阵，即

$$\begin{aligned} P_{x'x} &= \langle x' | P | x \rangle \\ &= \iint \langle x' | p' \rangle \langle p' | P | p \rangle \langle p | x \rangle dp' dp \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint e^{\frac{i}{\hbar}p'x'} p < p' | p > e^{-\frac{i}{\hbar}px} \mathrm{d} p' \mathrm{d} p$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint e^{\frac{i}{\hbar}p'x'} p \delta(p'-p) e^{-\frac{i}{\hbar}px} \mathrm{d} p' \mathrm{d} p$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{i}{\hbar}(x'-x)p} p \mathrm{d} p$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x'} \int e^{\frac{i}{\hbar}(x'-x)p} \mathrm{d} p \quad (\text{利用式 } \frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} \mathrm{d} k = \delta(x))$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x'} [2\pi\hbar \delta(x'-x)]$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x'-x)$$

或

$$P_{x'x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x'-x)$$

二、动量表象

可以类似地进行讨论。特别是讨论动量表象中矢量 $|x\rangle$ 和算符 \mathbf{X} 的矩阵形式时，有

$$\langle p | x \rangle = \langle x | p \rangle^*$$

$$\begin{aligned} X_{p'p} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p'-p) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(p'-p) \end{aligned}$$

#

§ 7.3 位置表象的函数形式

我们已经建立了位置表象的矩阵形式，其特点是：算符 X 和 P 的矩阵中都带有一个 δ 函数。正是由于这一特点，我们再向前稍跨一步，就可以得到一种简洁且实用的表现形式，即位置表象的函数形式。

一、位置表象和算符 X 的函数形式

1. δ 函数对连续矩阵相乘的优点

讨论下列关系的位置表象

$$|\varphi\rangle = X |\psi\rangle$$

则

$$\begin{aligned}\langle x | \varphi \rangle &= \langle x | X | \psi \rangle \\ &= \int dx \langle x | X | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle \\ &= \int dx' X_{xx'} \psi_{x'}\end{aligned}$$

即

$$\varphi_x = \int dx' X_{xx'} \psi_{x'}$$

但是

$$\begin{aligned}X_{xx'} &= \langle x | X | x' \rangle \\ &= x \langle x | x' \rangle \\ &= x \delta(x - x')\end{aligned}$$

这就使得上述积分很容易计算，即

$$\varphi_x = \int dx' x \delta(x - x') \psi_{x'} = x \psi_x$$

与式 $|\varphi\rangle = X |\psi\rangle$ 进行比较，上式正是我们所希望的关系。由此可以建立...

2. 位置表象的函数形式

如果将描写矢量的 ψ_x, φ_x 不看成一系列矩阵，而看成是 x 的不同的函数 $\psi(x), \varphi(x)$ ，称之为态函数或波函数。

如果将算符 \mathbf{X} 和 \mathbf{P} 等也不看成矩阵，而看成是一种对函数 $\psi(x)$ 的作用，其结果可得出另一新函数。这种作用仍称为算符，用 \hat{X}, \hat{P} 表示。

于是式 $|\varphi\rangle = X|\psi\rangle$ 位置表象的函数形式可以写成

$$\varphi(x) = \hat{X}\psi(x)$$

而从式 $\varphi_x = x\psi_x$ 可以看出，算符 \mathbf{X} 的函数形式可以定义为

$$\hat{X}\psi(x) = x\psi(x) \quad (\text{for all } \psi(x))$$

二、动量算符 \mathbf{P} 的函数形式

对
有

$$|\varphi\rangle = P|\psi\rangle$$

$$\varphi(x) = \varphi_x = \langle x | \varphi \rangle$$

$$= \int \langle x | P | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx'$$

$$= \int P_{xx'} \psi_{x'} dx'$$

$$\begin{aligned}
&= \int [i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x-x')] \psi_{x'} dx' \\
&= i\hbar \delta(x-x') \psi_{x'} \Big|_{x'=-\infty}^{x'=+\infty} - \int \delta(x-x') [i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \psi_{x'}] dx' \\
&= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_x
\end{aligned}$$

结合 $\varphi = \hat{P} \psi$ 则有 $\varphi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$

故动量算符在坐标表象中的表示是： $\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

（现在请考虑：如何求坐标算符在动量表象中的表示？）

容易证明坐标算符和动量算符的对易关系是

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \quad \#$$

三、算符的函数形式的应用及厄米算符

由于所有算符都可以写成 \mathbf{X} 和 \mathbf{P} 的函数,所以在 x 表象的函数形式中,一切量子力学公式都可以避免矩阵乘积的积分,使公式大大简化。

无经典对应的物理量,一般无连续本征值谱,不存在这一问题,唯一需要保留积分运算的是内积,即

$$\begin{aligned}\langle \varphi | \psi \rangle &= \int \langle \varphi | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx \\ &= \int \varphi^*(x) \psi(x) dx\end{aligned}$$

在函数形式中，算符 \hat{A} 的伴算符 \hat{A}^+ 的定义是对任意 $\varphi(x), \psi(x)$ ，满足

$$\int [\hat{A}^+ \varphi(x)]^* \psi(x) dx = \int \varphi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

厄米算符 \hat{H} 满足

$$\int [\hat{H} \varphi(x)]^* \psi(x) dx = \int \varphi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx$$

对于动量算符 \hat{P} 来说，由于要经过一个分部积分

$$\begin{aligned} & \int \varphi^* (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x) dx \\ &= -i\hbar \varphi \psi \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} + \int [-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi]^* \psi(x) dx \end{aligned}$$

所以， $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 只对于满足一定的边界条件的函数组成的函数空间才是厄米的。

量子力学的位置表象的函数形式，就是初等量子力学一开始所用的表示形式。

四、函数空间

以上建立的实变量 x 复函数空间，同Hilbert空间一一对应，此空间就是函数空间。

此空间中每一个函数就是函数空间中的一个矢量，并与Hilbert空间中的一个矢量相对应。

两空间中各有相对应的算符，都可以描写相应的物理量，并给出量子力学的各种关系。

§ 7.4 xyz 表象和 $r_{\theta\varphi}$ 表象

一、 xyz 表象

比照三维运动位置矢量的表达式，相应的算符可以写成下列形式

$$\vec{X} = \vec{R} = \sum_i X_i \vec{e}_i = X\vec{i} + Y\vec{j} + Z\vec{k}$$

三个位置算符 X, Y, Z 是相互对易的，各自有一组本征矢量，并各自构成一个Hilbert空间，即

$$X |x\rangle = x |x\rangle,$$

$$Y |y\rangle = y |y\rangle,$$

$$Z |z\rangle = z |z\rangle.$$

描写单粒子三维运动状态的Hilbert空间就是这三个空间的直积空间，其基矢为

$$|\vec{r}\rangle = |xyz\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$$

$|xyz\rangle$ 是位置算符 X, Y, Z 的共同本征矢量，本征值分别为 x, y, z 。

按照直积空间算符的写法， \vec{R} 可严格定义为

$$\vec{R} = X\vec{i} \otimes I \otimes I + I \otimes Y\vec{j} \otimes I + I \otimes I \otimes Z\vec{k}$$

上式中， $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ 是单位矢量，而 I 是单位算符。从这里可以理解矢量和算符的细微差别：

前者有方向性，后者是作用算符；
矢量往往以本征值的形式出现。

若令 $|\vec{r}\rangle$ 是算符 \vec{R} 的本征矢量，本征值为 \vec{r} ，即

$$\vec{R}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle$$

以后为方便起见将省去直积号 \otimes ，比如

$$|\vec{r}\rangle = |x\rangle|y\rangle|z\rangle = |xyz\rangle$$

$$\vec{R} = X\vec{i} + Y\vec{j} + Z\vec{k}$$

微观粒子的状态由直积空间中的一个归一化矢量 $|\psi\rangle$ 来描写，其在 $|xyz\rangle$ 上的分量是

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

即是位置表象中的态函数。

总之，取单粒子基矢 $\{|xyz\rangle\}$ 构成的表象称为 xyz 表象。

二、 $r\theta\varphi$ 表象

取 r 为 \vec{r} 的长度， \vec{n} 为径矢方向上的单位矢量，如右图

则

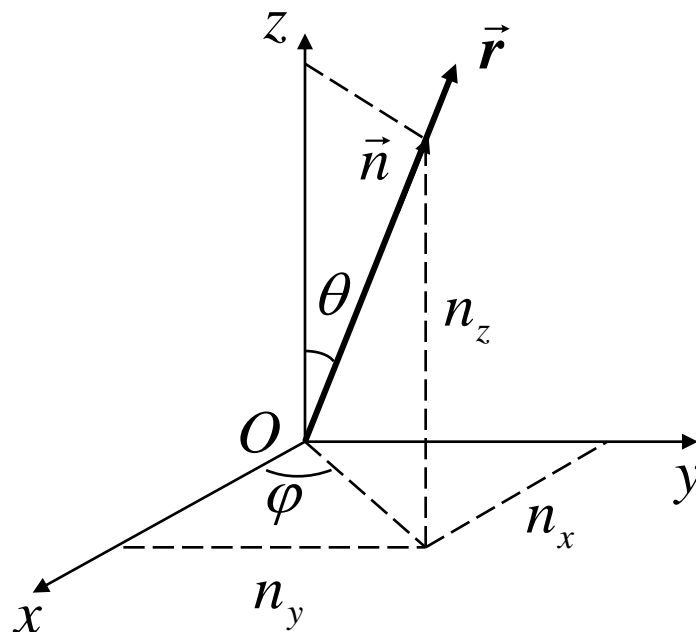
$$\vec{r} = r\vec{n}$$

若以 z 轴为极轴取球坐标，
则

$$n_x = \sin \theta \cos \varphi,$$

$$n_y = \sin \theta \sin \varphi,$$

$$n_z = \cos \theta$$



与 r 和 \vec{n} 对应的算符为 \mathbf{R} 和 \vec{N}

$$R^2 = X^2 + Y^2 + Z^2$$

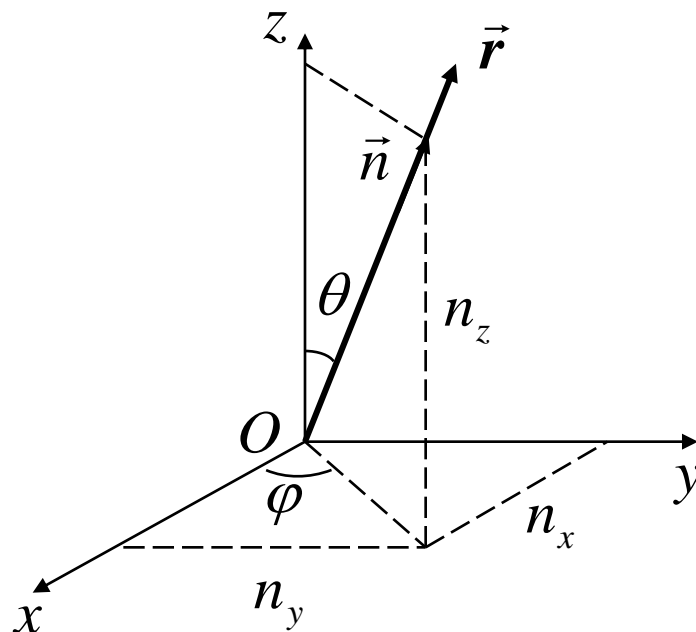
$$\vec{N} = \frac{\vec{R}}{R}$$

后者称为方向算符。

设 \mathbf{R} 和 \vec{N} 的本征矢量为 $|r\rangle$ 和 $|\theta\varphi\rangle$, 则

$$R|r\rangle = r|r\rangle \quad \vec{N}|\theta\varphi\rangle = \vec{n}(\theta, \varphi)|\theta\varphi\rangle$$

可见算符 \mathbf{R} 的本征矢量 $|r\rangle$ 就是 $R^2 = X^2 + Y^2 + Z^2$ 本征矢量, 其本征值取 R^2 的本征值开方即可;



$$\vec{N} | \theta \varphi \rangle = \vec{n}(\theta, \varphi) | \theta \varphi \rangle$$

而方向算符 \vec{N} 的本征值是三维物理空间中的一个单位矢量，用 $\vec{n}(\theta, \varphi)$ 表示，本征矢量 $| \theta \varphi \rangle$ 是 $| \vec{n}(\theta, \varphi) \rangle$ 的简写，于是有

$$\vec{R} = R\vec{N}$$

$$R\vec{N} | r \rangle | \theta \varphi \rangle = r\vec{n}(\theta, \varphi) | r \rangle | \theta \varphi \rangle$$

$$= \vec{r}(r, \theta, \varphi) | r \theta \varphi \rangle$$

即
$$\vec{R} | r \theta \varphi \rangle = \vec{r}(r, \theta, \varphi) | r \theta \varphi \rangle$$

到此为止，我们发现位置算符 \vec{R} 有两种直积分解形式：

$$\vec{R} = X\vec{i} + Y\vec{j} + Z\vec{k} = R\vec{N}$$

而 \vec{R} 的本征矢量 $\{|\vec{r}\rangle\}$ 所张成的空间相应的也有两种直积分解方式，即

$$|\vec{r}\rangle = |xyz\rangle$$

$$|\vec{r}\rangle = |r\theta\varphi\rangle$$

因此，全体 $|xyz\rangle$ 和全体 $|r\theta\varphi\rangle$ 分别是这个空间的一组基矢，它们是一一对应的，即

当 $x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$, $z = r \cos \theta$ 时，有

$$|r\theta\varphi\rangle = |xyz\rangle$$

我们已经介绍，单粒子基矢 $\{|xyz\rangle\}$ 构成的表象为 xyz 表象。类似地，基矢 $\{|r\theta\varphi\rangle\}$ 构成的表象称为 $r\theta\varphi$ 表象。

2、归一化关系

本征矢量 $|x,y,z\rangle$ 的归一化关系为

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

下面看 $|r\rangle, |\theta\varphi\rangle$ 的归一化关系。

利用 $|r\rangle$ 的完全性关系，则

$$|r'\rangle = \int |r\rangle \langle r | r'\rangle r^2 dr$$

但

$$|r'\rangle = \int |r\rangle \delta(r - r') dr$$

以上两式比较，得

$$\langle r | r'\rangle = \left(\frac{1}{r^2} \right) \delta(r - r')$$

这就是 $|r\rangle$ 的归一化关系。

同样利用 $|\theta\varphi\rangle$ 的完全性关系，有

$$|\theta'\varphi'\rangle = \iint |\theta\varphi\rangle \langle\theta\varphi|\theta'\varphi'\rangle \sin\theta d\theta d\varphi$$

又根据 δ 函数的定义

$$|\theta'\varphi'\rangle = \iint |\theta\varphi\rangle \delta(\theta - \theta')\delta(\varphi - \varphi') d\theta d\varphi$$

以上两式比较，得

$$\langle\theta\varphi|\theta'\varphi'\rangle = \frac{1}{\sin\theta} \delta(\theta - \theta')\delta(\varphi - \varphi')$$

这就是 $|\theta\varphi\rangle$ 的归一化关系。

三、基矢的正交归一完全性关系

1、完全性关系

本征矢量组 $\{|x,y,z\rangle\}$ 的完全性关系是

$$\iiint |xyz\rangle \langle xyz| dx dy dz = 1$$

而本征矢量组 $\{|r\theta\varphi\rangle\}$ 的完全性关系是

$$\iiint |r\theta\varphi\rangle \langle r\theta\varphi| r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = 1$$

分解开写有

$$\int |r\rangle \langle r| r^2 dr \iint |\theta\varphi\rangle \langle \theta\varphi| \sin\theta d\theta d\varphi = 1$$

即

$$\int |r\rangle \langle r| \textcircled{r^2} dr = 1$$

$$\iint |\theta\varphi\rangle \langle \theta\varphi| \textcircled{\sin\theta} d\theta d\varphi = 1$$

3. 任意态函数按照基矢的展开

(1) 按基矢 $|xyz\rangle$ 展开

在函数空间中，算符 \mathbf{X} 的本征值为 x' 的本征矢量 $|x'\rangle$ 的函数形式为

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

由于在函数空间中 x, y, z 是自变量，所以这里 x' 表示本征值，即

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

同样对于算符 \mathbf{R} ，有

$$\hat{R} \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \vec{r}' \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

任意态函数 $\psi(x, y, z)$ 按位置表象基矢的展开式为

$$\psi(x, y, z) = \int \psi(x', y', z') \delta(x - x') \delta(y - y') \times \\ \times \delta(z - z') dx' dy' dz'$$

(2) 按基矢 $|r\theta\varphi\rangle$ 展开

在 $r\theta\varphi$ 表象中，基矢 $|r\theta\varphi\rangle$ 的函数形式为

$$\langle r' \theta' \varphi' | r \theta \varphi \rangle = \frac{1}{r^2} \delta(r - r') \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi')$$

任意态函数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 按此基矢的展开式为

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \int \psi(r', \theta', \varphi') \delta(r - r') \delta(\theta - \theta') \times \\ \times \delta(\varphi - \varphi') dr' d\theta' d\varphi'$$

另外描写同一状态的矢量 $\psi(x, y, z)$ 与 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 之间的关系可以这样得出：

令前者中

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, y = r \sin \theta \sin \varphi, z = r \cos \theta$$

即可得后者。

而 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 的归一化条件是

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int \psi^*(r, \theta, \varphi) \psi(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi = 1$$

§ 7.5 函数空间的性质

（自己阅读）