量子力学

Chapter 2. 表象理论与测不准关系

杨焕雄

中国科学技术大学物理学院

hyang@ustc.edu.cn

September 20, 2023

目录

波函数

在量子力学的传统教材中，常引入满足平方可积条件的波函数

$$\Psi(\boldsymbol{r}), \qquad \int_V \left|\Psi(\boldsymbol{r})\right|^2 \mathrm{d}^3x < \infty$$

描写量子态，$|\Psi(\boldsymbol{r})|^2$ 被诠释为是在位置矢量为 $\boldsymbol{r}$ 的地点找到粒子的概率密度.

1. **那么，波函数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ 与态矢量 $|\Psi\rangle$ 有什么关系呢?**

假设 $|\Psi\rangle$ 所在的态矢量空间 $\mathcal{H}$ 中存在着某个力学量算符 $\hat{\mathscr{F}}$，

$$\hat{\mathscr{F}} = \hat{\mathscr{F}}^\dagger, \qquad \hat{\mathscr{F}}\,|f_i\rangle = f_i\,|f_i\rangle, \qquad \langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}, \qquad \sum_i |f_i\rangle\langle f_i| = \hat{I}$$

我们可以选择 $\hat{\mathscr{F}}$ 的本征右矢系作为 $\mathcal{H}$ 的基，称之为在量子力学理论表述中选择了 $\mathscr{F}$ **表象:**

$$|\Psi\rangle = \hat{I}\,|\Psi\rangle = \left[\sum_i |f_i\rangle\langle f_i|\right]|\Psi\rangle = \sum_i \langle f_i|\Psi\rangle\,|f_i\rangle$$

类比于 3 维欧氏空间中场点位置矢量 $\boldsymbol{r}=\sum_i x_i\boldsymbol{e}_i$ 与其笛卡尔直角坐标 x_i 的关系，展开式

$$|\Psi\rangle=\sum_i \langle f_i|\Psi\rangle\,|f_i\rangle$$

中的系数 $\langle f_i|\Psi\rangle$ 可以理解为态矢量 $|\Psi\rangle$ 在基 $|f_i\rangle$ 上的坐标. 因此，

1. 无论是使用态矢量 $|\Psi\rangle$，还是使用其在 $\mathscr{F}$ 表象中的"坐标"$\langle f_i|\Psi\rangle$，在描写量子态方面是完全等价的.

2. **习惯上把 $|\Psi\rangle$ 的"坐标"$\langle f_i|\Psi\rangle$ 称为 $\mathscr{F}$ 表象中的波函数.** 倘若 $\hat{\mathscr{F}}$ 的本征值量子化取值，常把波函数表达为列矩阵，例如：

$$\Psi=\begin{bmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\\ \Psi_3\\ \vdots\end{bmatrix},\qquad \Psi_i:=\langle f_i|\Psi\rangle$$

但若 $\hat{\mathscr{F}}$ 的本征值形成连续谱，波函数就变成了数学意义下真正的函数，例如在位置表象中，

$$\Psi(\boldsymbol{r})=\langle \boldsymbol{r}|\Psi\rangle$$

力学量矩阵

如前述，选择表象后量子态的描写手段发生了改变．例如在 $\mathscr{F}$ 表象中，

$$|\Psi\rangle \quad \rightsquigarrow \quad \Psi_i = \langle f_i|\Psi\rangle$$

力学量算符需要做什么替换？

考虑力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 及其对态矢量的作用，

$$\hat{\mathscr{A}} = \hat{\mathscr{A}}^{\dagger}, \qquad \hat{\mathscr{A}}\,|\Psi\rangle = |\Phi\rangle$$

建立了 $\mathscr{F}$ 表象后，

$$\hat{\mathscr{A}} = \hat{I}\,\hat{\mathscr{A}}\,\hat{I} = \left[\sum_i |f_i\rangle\langle f_i|\right]\hat{\mathscr{A}}\left[\sum_j |f_j\rangle\langle f_j|\right] = \sum_{ij} |f_i\rangle\,\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}|f_j\rangle\,\langle f_j|$$

亦即，

$$\hat{\mathscr{A}} = \sum_{ij} \color{red}{\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}|f_j\rangle}\,|f_i\rangle\langle f_j|$$

这个算符展开式的系数 $\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}|f_j\rangle$ 形成了一个方阵 $\mathscr{A}=(\mathscr{A}_{ij})$ 的矩阵元：

$$\mathscr{A}_{ij}=\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}|f_j\rangle$$

- $\hat{\mathscr{A}}$ 的厄米性条件

$$\sum_{ij}\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}|f_j\rangle|f_i\rangle\langle f_j|=\hat{\mathscr{A}}=\hat{\mathscr{A}}^\dagger=\sum_{ij}\langle f_j|\hat{\mathscr{A}}|f_i\rangle^*|f_i\rangle\langle f_j|$$

  意味着，

$$\mathscr{A}_{ij}=\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}|f_j\rangle=\langle f_j|\hat{\mathscr{A}}|f_i\rangle^*=\mathscr{A}_{ji}^*$$

  即 $\mathscr{A}=(\mathscr{A}_{ij})$ 是厄米矩阵.

- 算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 对态矢量的作用规则 $\hat{\mathscr{A}}|\Psi\rangle=|\Phi\rangle$ 意味着，

$$\langle f_i|\Phi\rangle=\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}|\Psi\rangle=\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}\left[\sum_j|f_j\rangle\langle f_j|\right]|\Psi\rangle=\sum_j\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}|f_j\rangle\langle f_j|\Psi\rangle$$

即:

$$\sum_j \mathscr{A}_{ij}\Psi_j = \Phi_i$$

式中 $\Psi_j := \langle f_j|\Psi\rangle$ 与 $\Phi_i := \langle f_i|\Phi\rangle$，它们分别是态矢量 $|\Psi\rangle$ 和 $|\Phi\rangle$ 在 $\mathscr{F}$ 表象中的波函数列矩阵 $\Psi = (\Psi_j)$ 和 $\Phi = (\Phi_i)$ 的矩阵元.

厄米矩阵 $\mathscr{A} = (\mathscr{A}_{ij})$ 的作用对象是波函数列矩阵.

因此,

1. 选择了 $\mathscr{F}$ 表象之后,

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &\rightsquigarrow \Psi = (\Psi_i) \\ \hat{\mathscr{A}} &\rightsquigarrow \mathscr{A} = (\mathscr{A}_{ij}) \\ \hat{\mathscr{A}}|\Psi\rangle = |\Phi\rangle &\rightsquigarrow \mathscr{A}\Psi = \Phi \end{aligned}$$

   通常称厄米矩阵 $\mathscr{A} = (\mathscr{A}_{ij})$ 为力学量矩阵 $\mathscr{A}$.

2. 在 $\mathscr{F}$ 表象中，力学量矩阵 $\mathscr{F} = (\mathscr{F}_{ij})$ 是实对角矩阵:

$$\mathscr{F}_{ij} = \langle f_i|\hat{\mathscr{F}}|f_j\rangle = \langle f_i|f_j|f_j\rangle = f_j\langle f_i|f_j\rangle = f_i\delta_{ij}$$

$\mathcal{Q}$: 选择表象后，左矢的替代物是什么？

假设选择了 $\mathscr{F}$ 表象. 如此，左矢 $\langle\Psi|$ 可以展开为：

$$\langle\Psi| = \langle\Psi|\left[\sum_j |f_j\rangle\langle f_j|\right] = \sum_j \langle\Psi|f_j\rangle\langle f_j|$$

即 $\langle\Psi| \rightsquigarrow \langle\Psi|f_j\rangle = \langle f_j|\Psi\rangle^* = \Psi_j^*$.

进一步地，波函数的复共轭 $\Psi_j^* = \langle\Psi|f_j\rangle$ 构成什么样的矩阵？ 列矩阵还是行矩阵？

考虑算符对左矢的作用规则 $\langle\Phi| = \langle\Psi|\hat{\mathscr{B}}$. 在 $\mathscr{F}$ 表象中，

$$\langle\Phi|f_i\rangle = \langle\Psi|\hat{\mathscr{B}}|f_i\rangle = \sum_j \langle\Psi|f_j\rangle\,\langle f_j|\hat{\mathscr{B}}|f_i\rangle$$

即：

$$\Phi_i^* = \sum_j \Psi_j^* \mathscr{B}_{ji}$$

表象变换

欲使上面的方程称为矩阵方程，等号右端的求和指标 j 对于 Ψ_j^* 必须是列指标. 换言之，波函数的复共轭 $\Psi_j^* = \langle \Psi | f_j \rangle$ 构成的矩阵是行矩阵

$$\begin{bmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* & \Psi_3^* & \cdots \end{bmatrix} = (\Psi_j^*) = \Psi^\dagger$$

这里的 $\Psi = (\Psi_i)$ 是波函数列矩阵：

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \vdots \end{bmatrix}, \quad \Psi_i := \langle f_i | \Psi \rangle$$

表象选择的多样性：

只要体系力学量算符的数目 $\# \geqslant 2$，一般地说表象的选择就具有不唯一性. 这就产生了波函数、力学量矩阵等在不同表象间进行变换的需要.

假设体系既拥有力学量算符 $\hat{\mathscr{F}}$,

$$\hat{\mathscr{F}} = \hat{\mathscr{F}}^{\dagger}, \quad \hat{\mathscr{F}}\,|f_i\rangle = f_i\,|f_i\rangle, \quad \langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |f_i\rangle\langle f_i| = \hat{I}$$

也拥有力学量算符 $\hat{\mathscr{G}}$:

$$\hat{\mathscr{G}} = \hat{\mathscr{G}}^{\dagger}, \quad \hat{\mathscr{G}}\,|g_i\rangle = g_i\,|g_i\rangle, \quad \langle g_i|g_j\rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |g_i\rangle\langle g_i| = \hat{I}$$

这样,我们既可以选择建立 $\mathscr{F}$ 表象,也可以选择建立 $\mathscr{G}$ 表象. 当然,也可以不建立任何表象.

1. **建立表象意味着在态矢量空间 $\mathcal{H}$ 中指定了一组完备的基矢量.**
2. 建立 $\mathscr{F}$ 表象,就把 $\mathcal{H}$ 的基矢量组取为

$$\left\{ |f_1\rangle,\ |f_2\rangle,\ |f_3\rangle,\ \cdots \right\} = \left\{ |f_i\rangle \right\}$$

3. 改建 $\mathscr{G}$ 表象,则是把同一线性空间 $\mathcal{H}$ 的基矢量组取为

$$\left\{ |g_1\rangle,\ |g_2\rangle,\ |g_3\rangle,\ \cdots \right\} = \left\{ |g_i\rangle \right\}$$

表象变换的具体内涵就是:

$$\text{either}\ \left\{\ |f_i\rangle\ \right\} \rightsquigarrow \left\{\ |g_i\rangle\ \right\}, \qquad \text{or}\ \left\{\ |f_i\rangle\ \right\} \leftsquigarrow \left\{\ |g_i\rangle\ \right\}$$

显然,表象变换可以通过态矢量空间 $\mathcal{H}$ 中的一个特殊的线性算符

$$\hat{\mathscr{U}} = \sum_i |g_i\rangle\langle f_i| : \quad \hat{\mathscr{U}}\ |f_i\rangle = |g_i\rangle, \quad \left\{\ |f_i\rangle\ \right\} \rightsquigarrow \left\{\ |g_i\rangle\ \right\}$$

及其逆算符

$$\hat{\mathscr{U}}^{-1} = \sum_i |f_i\rangle\langle g_i| : \quad \hat{\mathscr{U}}^{-1}\ |g_i\rangle = |f_i\rangle, \quad \left\{\ |g_i\rangle\ \right\} \rightsquigarrow \left\{\ |f_i\rangle\ \right\}$$

实现. 不难看出,

$$\hat{\mathscr{U}}\hat{\mathscr{U}}^{-1} = \sum_{ij} |g_i\rangle\langle f_i|f_j\rangle\langle g_j| = \sum_{ij} \delta_{ij}\ |g_i\rangle\langle g_j| = \sum_i |g_i\rangle\langle g_i| = \hat{I}$$

同理有 $\hat{\mathscr{U}}^{-1}\hat{\mathscr{U}} = \hat{I}$. 所以, $\hat{\mathscr{U}}^{-1}$ 确为 $\hat{\mathscr{U}}$ 的逆算符.

简单的观察可知：

$$\hat{\mathscr{U}}^\dagger = \left[\sum_i |g_i\rangle\langle f_i|\right]^\dagger = \sum_i [\langle f_i|]^\dagger [|g_i\rangle]^\dagger = \sum_i |f_i\rangle\langle g_i| = \hat{\mathscr{U}}^{-1}$$

所以，$\hat{\mathscr{U}}$ 是态矢量空间 $\mathcal{H}$ 中的幺正算符.

- 表象变换是通过幺正算符实现的.

下面讨论波函数列矩阵、力学量方阵等的表象变换. 为达此目的，我们先写出幺正算符 $\hat{\mathscr{U}}$ 及其逆算符在新、旧表象中的矩阵. 在 $\mathscr{F}$ 表象中，

$$\hat{\mathscr{U}} \rightsquigarrow \mathscr{U}^{(\mathscr{F})} = (\mathscr{U}_{ij}^{(\mathscr{F})}), \quad \mathscr{U}_{ij}^{(\mathscr{F})} = \langle f_i|\hat{\mathscr{U}}|f_j\rangle = \langle f_i|g_j\rangle$$

$$\hat{\mathscr{U}}^\dagger \rightsquigarrow \mathscr{U}^{\dagger(\mathscr{F})} = (\mathscr{U}^{\dagger(\mathscr{F})}_{ij}), \quad \mathscr{U}^{\dagger(\mathscr{F})}_{ij} = \langle f_i|\hat{\mathscr{U}}^\dagger|f_j\rangle = \langle g_i|f_j\rangle$$

但在 $\mathscr{G}$ 表象中，

$$\hat{\mathscr{U}} \rightsquigarrow \mathscr{U}^{(\mathscr{G})} = (\mathscr{U}_{ij}^{(\mathscr{G})}), \quad \mathscr{U}_{ij}^{(\mathscr{G})} = \langle g_i|\hat{\mathscr{U}}|g_j\rangle = \langle f_i|g_j\rangle$$

$$\hat{\mathscr{U}}^\dagger \rightsquigarrow \mathscr{U}^{\dagger(\mathscr{G})} = (\mathscr{U}^{\dagger(\mathscr{G})}_{ij}), \quad \mathscr{U}^{\dagger(\mathscr{G})}_{ij} = \langle g_i|\hat{\mathscr{U}}^\dagger|g_j\rangle = \langle g_i|f_j\rangle$$

所以，

$$\mathscr{U}_{ij}^{(\mathscr{F})} = \mathscr{U}_{ij}^{(\mathscr{G})} = \langle f_i | g_j \rangle = \mathscr{U}_{ij}, \quad \mathscr{U}^{\dagger}{}_{ij}^{(\mathscr{F})} = \mathscr{U}^{\dagger}{}_{ij}^{(\mathscr{G})} = \langle g_i | f_j \rangle = \mathscr{U}_{ij}^{\dagger}$$

- 考虑态矢量 $|\Psi\rangle$. 它在两个表象中的波函数分别为 $\Psi_i^{(\mathscr{F})} = \langle f_i | \Psi \rangle$ 与 $\Psi_i^{(\mathscr{G})} = \langle g_i | \Psi \rangle$. 显然，二者可通过下式联系起来:

$$\Psi_i^{(\mathscr{F})} = \langle f_i | \Psi \rangle = \langle f_i | \left[\sum_j | g_j \rangle \langle g_j | \right] | \Psi \rangle = \sum_j \langle f_i | g_j \rangle \langle g_j | \Psi \rangle$$

$$= \sum_j \mathscr{U}_{ij} \, \Psi_j^{(\mathscr{G})}$$

$$\Psi_i^{(\mathscr{G})} = \langle g_i | \Psi \rangle = \langle g_i | \left[\sum_j | f_j \rangle \langle f_j | \right] | \Psi \rangle = \sum_j \langle g_i | f_j \rangle \langle f_j | \Psi \rangle$$

$$= \sum_j \mathscr{U}^{\dagger}{}_{ij} \Psi_j^{(\mathscr{F})}$$

写出矩阵形式，即为

$$\boxed{\Psi^{(\mathscr{F})} = \mathscr{U} \Psi^{(\mathscr{G})}, \quad \Psi^{(\mathscr{G})} = \mathscr{U}^{\dagger} \Psi^{(\mathscr{F})}}$$

- 考虑力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$. 它在两个表象中均被厄米矩阵替代, 相应的矩阵元分别是 $\mathscr{A}_{ij}^{(\mathscr{F})} = \langle f_i|\hat{\mathscr{A}}|f_j\rangle$ 与 $\mathscr{A}_{ij}^{(\mathscr{G})} = \langle g_i|\hat{\mathscr{A}}|g_j\rangle$.

  二者的联系是:

$$\begin{aligned}
\mathscr{A}_{ij}^{(\mathscr{G})} &= \langle g_i|\hat{\mathscr{A}}|g_j\rangle = \langle g_i|\left[\sum_k |f_k\rangle\langle f_k|\right]\hat{\mathscr{A}}\left[\sum_l |f_l\rangle\langle f_l|\right]|g_j\rangle \\
&= \sum_{kl}\langle g_i|f_k\rangle\,\langle f_k|\hat{\mathscr{A}}|f_l\rangle\langle f_l|g_j\rangle \\
&= \sum_{kl}\mathscr{U}^{\dagger}{}_{ik}\mathscr{A}_{kl}^{(\mathscr{F})}\mathscr{U}_{lj}
\end{aligned}$$

  相应的矩阵形式为,

$$\boxed{\mathscr{A}^{(\mathscr{G})} = \mathscr{U}^{\dagger}\mathscr{A}^{(\mathscr{F})}\mathscr{U}, \quad \mathscr{A}^{(\mathscr{F})} = \mathscr{U}\mathscr{A}^{(\mathscr{G})}\mathscr{U}^{\dagger}}$$

  显然, 这是用幺正矩阵 $\mathscr{U}$ 构造的相似变换.

相容力学量

设 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 是体系的两个力学量算符．倘若对于体系的任一量子态 $|\Psi\rangle$，均有

$$\left[\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}\right]|\Psi\rangle = 0 \qquad \rightsquigarrow \quad \hat{\mathscr{A}}\hat{\mathscr{B}}|\Psi\rangle = \hat{\mathscr{B}}\hat{\mathscr{A}}|\Psi\rangle, \quad \forall|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$$

则称此二力学量相容(compatible)，简记为：

$$\left[\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}\right] = 0$$

倘若 $\left[\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}\right] \neq 0$, 则称此二力学量不相容.

下面我们叙述一条重要的定理：

1. 若几个力学量算符相容，则它们可以拥有完备的共同本征态系.[1]

[1]系：不是特指某一个共同本征态，而是共同本征态集合.

依照此定理,若 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 是体系的两个相容的力学量算符, $\left[\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}\right] = 0$, 则它们拥有完备的共同本征右矢集合:

$$\left\{ |a_i, b_i\rangle \middle| i = 1, 2, 3, \cdots \right\}; \quad \hat{\mathscr{A}} |a_i, b_i\rangle = a_i |a_i, b_i\rangle, \quad \hat{\mathscr{B}} |a_i, b_i\rangle = b_i |a_i, b_i\rangle$$

且,

$$\sum_i |a_i, b_i\rangle\langle a_i, b_i| = \hat{I}$$

此定理对于相容力学量的测量勾勒出了如下图像:

- 设体系被制备在量子态 $|\Psi\rangle$. 对体系的第一次测量是在 $|\Psi\rangle$ 态测量力学量 $\mathscr{A}$,

  $$|\Psi\rangle \quad \xrightarrow{\ |\langle a_i|\Psi\rangle|^2\ } \quad |a_i\rangle$$

  这里 $|a_i\rangle$ 是力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 的某个本征右矢,

  $$\hat{\mathscr{A}} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle, \qquad \langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$$

  右矢 $|a_i\rangle$ 的全体自然也形成完备基, $\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = \hat{I}$.

- 假设第一次测量完成之后 $|\Psi\rangle \to |a_2\rangle$. 对体系的第二次测量是在 $|a_2\rangle$ 态测量相容力学量 $\mathscr{B}$,

$$|a_2\rangle \xrightarrow{\quad |\langle a_2, b_i|a_2\rangle|^2 \quad} |a_2, b_i\rangle$$

此处 $|a_2, b_i\rangle$ 是相容力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 的共同本征右矢,

$$\hat{\mathscr{A}}\,|a_2, b_i\rangle = a_2\,|a_2, b_i\rangle, \quad \hat{\mathscr{B}}\,|a_2, b_i\rangle = b_i\,|a_2, b_i\rangle$$

- 假设前两次测量完成之后体系态矢量所经历的坍塌是

$$|\Psi\rangle \to |a_2\rangle \to |a_2, b_2\rangle$$

坍塌的总效果是体系处在了相容力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 的共同本征右矢 $|a_2, b_2\rangle$. 之后再测 $\mathscr{A}$ 必得 a_2, 测 $\mathscr{B}$ 必得 b_2.

若体系(系综)处在了几个相容力学量算符的某一共同本征态, 则对这几个相容力学量进行测量均可得到确定的测量值.

证明如下. 设 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 是体系的两个相容力学量算符, $\left[\hat{\mathscr{A}},\hat{\mathscr{B}}\right]=0.$

- 倘若 $\hat{\mathscr{A}}$ 的本征值 a_i 不简并,

$$\hat{\mathscr{A}}\,|a_i\rangle = a_i\,|a_i\rangle, \qquad \langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$$

则相容条件 $\left[\hat{\mathscr{A}},\hat{\mathscr{B}}\right]=0$ 意味着:

$$\begin{aligned}\hat{\mathscr{A}}\left[\hat{\mathscr{B}}\,|a_i\rangle\right] &= \left[\hat{\mathscr{A}}\hat{\mathscr{B}}\right]|a_i\rangle = \left[\hat{\mathscr{B}}\hat{\mathscr{A}}\right]|a_i\rangle = \hat{\mathscr{B}}\left[\hat{\mathscr{A}}\,|a_i\rangle\right] \\ &= \hat{\mathscr{B}}\left[a_i\,|a_i\rangle\right] \\ &= a_i\left[\hat{\mathscr{B}}\,|a_i\rangle\right]\end{aligned}$$

即 $|a_i\rangle$ 与 $\hat{\mathscr{B}}|a_i\rangle$ 均是力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 属于本征值 a_i 的本征右矢. 但因事先已假设 a_i 不简并, 我们必然有:

$$\hat{\mathscr{B}}\,|a_i\rangle \approx |a_i\rangle, \qquad \rightsquigarrow \quad \hat{\mathscr{B}}\,|a_i\rangle = b_i\,|a_i\rangle, \quad b_i = \langle a_i|\hat{\mathscr{B}}|a_i\rangle$$

所以 $|a_i\rangle$ 是相容力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 的共同本征态, 本征值分别是实数 a_i 和 b_i.

- 倘若 $\hat{\mathscr{A}}$ 的本征值 a_i 是简并的，简并度为 $D(a_i)=f$ ：

$$\hat{\mathscr{A}}\,|a_{i\alpha}\rangle = a_i\,|a_{i\alpha}\rangle, \quad \alpha = 1,2,\cdots,f$$

此情形下，力学量的相容条件 $\left[\hat{\mathscr{A}},\hat{\mathscr{B}}\right]=0$ 只能推论出 $\hat{\mathscr{B}}\,|a_{i\alpha}\rangle$ 也是算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 属于本征值 a_i 的一个本征右矢，

$$\rightsquigarrow \quad \hat{\mathscr{A}}\left[\hat{\mathscr{B}}\,|a_{i\alpha}\rangle\right] = \hat{\mathscr{B}}\left[\hat{\mathscr{A}}\,|a_{i\alpha}\rangle\right] = a_i\left[\hat{\mathscr{B}}\,|a_{i\alpha}\rangle\right]$$

但并不能确保右矢 $|a_{i\alpha}\rangle$ 与右矢 $\hat{\mathscr{B}}\,|a_{i\alpha}\rangle$ 之间的等价性. $\hat{\mathscr{B}}\,|a_{i\alpha}\rangle$ 的一般表达式应为：

$$\hat{\mathscr{B}}\,|a_{i\alpha}\rangle = \sum_{\beta=1}^{f} c_{\beta\alpha}^{(i)}\,|a_{i\beta}\rangle$$

约定 $\langle a_{i\alpha}|a_{j\beta}\rangle = \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}$， 我们有：

$$c_{\beta\alpha}^{(i)} = \langle a_{i\beta}|\hat{\mathscr{B}}|a_{i\alpha}\rangle \overset{?}{\Longrightarrow} b_i\delta_{\alpha\beta}$$

即一般情形下 $|a_{i\alpha}\rangle$ 不是算符 $\hat{\mathscr{B}}$ 的本征右矢.

虽然在 a_i 有简并的情形下，算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 属于此本征值的本征右矢 $|a_{i\alpha}\rangle$

$$\hat{\mathscr{A}}\,|a_{i\alpha}\rangle = a_i\,|a_{i\alpha}\rangle, \qquad \alpha = 1, 2, \cdots, f$$

不一定是相容力学量算符集合 $\{\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}\}$ 的共同本征右矢，但此相容力学量算符集合的确存在着共同本征右矢. 态叠加原理允许我们将其表为如下线性组合：

$$|\psi_i\rangle = \sum_{\alpha=1}^{f} \psi_{i\alpha}\,|a_{i\alpha}\rangle$$

叠加系数$\psi_{i\alpha} = \langle a_{i\alpha}|\psi_i\rangle$待定. 显然，$|\psi_i\rangle$ 是 $\hat{\mathscr{A}}$ 属于本征值 a_i 的本征右矢，

$$\begin{aligned}\hat{\mathscr{A}}\,|\psi_i\rangle &= \sum_{\alpha=1}^{f} \psi_{i\alpha}\left[\hat{\mathscr{A}}\,|a_{i\alpha}\rangle\right] = \sum_{\alpha=1}^{f} \psi_{i\alpha}[a_i\,|a_{i\alpha}\rangle] = a_i\left[\sum_{\alpha=1}^{f} \psi_{i\alpha}\,|a_{i\alpha}\rangle\right] \\ &= a_i\,|\psi_i\rangle\end{aligned}$$

现要求 $|\psi_i\rangle$ 也是 $\hat{\mathscr{B}}$ 属于本征值 b_i 的本征右矢

$$\hat{\mathscr{B}}\,|\psi_i\rangle = b_i\,|\psi_i\rangle$$

意味着：

$$b_i\psi_{i\alpha} = b_i\langle a_{i\alpha}|\psi_i\rangle = \langle a_{i\alpha}|\hat{\mathscr{B}}|\psi_i\rangle = \sum_{\beta=1}^{f}\psi_{i\beta}\langle a_{i\alpha}|\hat{\mathscr{B}}|a_{i\beta}\rangle$$

亦即，

$$\sum_{\beta=1}^{f}\psi_{i\beta}\left[\langle a_{i\alpha}|\hat{\mathscr{B}}|a_{i\beta}\rangle - b_i\delta_{\alpha\beta}\right] = 0$$

这是一个以 $\psi_{i\beta}$ 为未知数的 f 元线性齐次代数方程组．它有非零解的必充条件是：

$$\det\left[\langle a_{i\alpha}|\hat{\mathscr{B}}|a_{i\beta}\rangle - b_i\delta_{\alpha\beta}\right] = 0$$

解此代数方程组，我们可以同时求得 $\hat{\mathscr{B}}$ 的本征值 b_i 以及叠加系数 $\psi_{i\beta}$，进而确定出相容力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 的共同本征右矢．

1. 习惯上我们把相容力学量算符集合 $\{\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}\}$ 的共同本征右矢常写为：

$$|a_i, b_i\rangle \quad \rightsquigarrow \quad \hat{\mathscr{A}}|a_i, b_i\rangle = a_i|a_i, b_i\rangle, \quad \hat{\mathscr{B}}|a_i, b_i\rangle = b_i|a_i, b_i\rangle$$

力学量完全集

1. 设 $(\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}, \hat{\mathscr{C}}, \cdots)$ 是体系的一组相容力学量算符，

$$\left[\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}\right] = \left[\hat{\mathscr{B}}, \hat{\mathscr{C}}\right] = \left[\hat{\mathscr{C}}, \hat{\mathscr{A}}\right] = \cdots = 0$$

它们的本征值方程为，

$$\begin{aligned}
\hat{\mathscr{A}} \left|a_i, b_i, c_i, \cdots\right\rangle &= a_i \left|a_i, b_i, c_i, \cdots\right\rangle \\
\hat{\mathscr{B}} \left|a_i, b_i, c_i, \cdots\right\rangle &= b_i \left|a_i, b_i, c_i, \cdots\right\rangle \\
\hat{\mathscr{C}} \left|a_i, b_i, c_i, \cdots\right\rangle &= c_i \left|a_i, b_i, c_i, \cdots\right\rangle
\end{aligned}$$

倘若本征值组 $(a_i, b_i, c_i, \cdots)$ 与共同本征右矢 $\left|a_i, b_i, c_i, \cdots\right\rangle$ 之间形成了一一对应， 即可以用相容力学量集合的一组本征值准确地标记共同本征右矢， 则称这组相容力学量算符形成了体系的一个力学量完全集 (CSCO)[2].

[2]CSCO: Complete Set of Compatible Observables.

不相容力学量点评

倘若体系的两个力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 不对易,

$$\left[\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}\right] \neq 0$$

则称这两个力学量算符不相容. 因为 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 均为厄米算符, 二者的对易子必然具有如下结构:

$$\left[\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}\right] = i\hat{\mathscr{C}}, \quad \hat{\mathscr{C}} = \hat{\mathscr{C}}^{\dagger}$$

1. 若态矢量空间维数有限, 则必有 $\mathrm{tr}\,\hat{\mathscr{C}} = 0$.
2. 若 $\hat{\mathscr{C}} = c\hat{I}$, 则态矢量空间的维数必须是无限大.
3. 不相容力学量算符没有完备的共同本征右矢系. 但这并不排除它们拥有个别共同本征右矢的可能性. 事实上, 满足条件

   $$\hat{\mathscr{A}}\left|\psi\right\rangle = \hat{\mathscr{B}}\left|\psi\right\rangle = \hat{\mathscr{C}}\left|\psi\right\rangle = 0$$

   的右矢 $\left|\psi\right\rangle$ 就是不相容力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 的共同本征右矢.

例一

设某量子力学体系拥有 3 维的态矢量空间，力学量算符 $\hat{\mathscr{B}}$ 在 $\mathscr{B}$ 表象(自身表象)中表现为如下实对角矩阵:

$$\mathscr{B} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

显然,

- $\mathscr{B}$ 是厄米矩阵，本征值谱为 $b_1 = 1$, $b_2 = 0$ 与 $b_3 = -1$.
- $\mathscr{B}$ 的本征值均是非简并的，属于它们的归一化本征矢量分别为:

$$\psi_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \psi_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \psi_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

  它们彼此是正交的.
- $\mathscr{B}$ 的本征值与本征矢量之间形成了一一对应. 因此, $\mathscr{B}$ 本身就构成了体系的一个力学量完全集(CSCO).

体系也有另一个力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$, 它在 $\mathscr{B}$ 表象中由如下厄米矩阵表示:

$$\mathscr{A} = \sqrt{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

- $\mathscr{A}$ 仅有一个本征值 $a = \sqrt{2}$，但它是简并的. 任意的归一化列矩阵

  $$\Psi = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix}, \qquad |c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$$

  都是 $\mathscr{A}$ 属于本征值 $a = \sqrt{2}$ 的本征矢量.[3] $\mathscr{A}$ 本身不构成体系力学量完全集 (CSCO).
- 不难看出,

  $$[\mathscr{A}, \mathscr{B}] = 0$$

  即 $\mathscr{A}$ 与 $\mathscr{B}$ 是相容力学量矩阵, 它们可以拥有共同的本征矢量. 事实上, $(\mathscr{A}, \mathscr{B})$ 的共同本征矢量就是前页列出的 3 个列矩阵 ψ_1, ψ_2 和 ψ_3.

---

[3] 所以, $a = \sqrt{2}$ 的简并度为 3.

- $(\mathscr{A}, \mathscr{B})$ 的本征值组 $(a_i,\ b_i)$ 与共同本征矢量 ψ_i 之间形成了一一对应,

$$(\sqrt{2},\ 1)\ \Leftrightarrow\ \psi_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \qquad (\sqrt{2},\ 0)\ \Leftrightarrow\ \psi_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix};$$

$$(\sqrt{2},\ -1)\ \Leftrightarrow\ \psi_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

所以,相容力学量矩阵组 $(\mathscr{A}, \mathscr{B})$ 构成了体系另一个力学量完全集（CSCO）.

此体系也存在着另外一些力学量算符. 例如 $\hat{\mathscr{M}}$,它在 $\mathscr{B}$ 表象中表现为如下实对称矩阵:

$$\mathscr{M} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \rightsquigarrow \quad \mathscr{M} = \mathscr{M}^{\dagger}$$

- $\mathscr{M}$ 的本征值谱为 $m_1 = 1$, $m_2 = 0$ 与 $m_3 = -1$. 对应于每一个本征值 m_i, 存在着一个、且仅有一个本征矢量:

$$m_1 = 1 \Leftrightarrow \phi_1 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix}; \qquad m_2 = 0 \Leftrightarrow \phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix};$$

$$m_3 = -1 \Leftrightarrow \phi_3 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix}.$$

所以, $\mathscr{M}$ 本身构成了体系的一个力学量完全集.

- 很显然,

$$[\mathscr{M}, \mathscr{A}] = 0$$

即 $\mathscr{M}$ 与 $\mathscr{A}$ 形成了体系的一组相容力学量, 它们的共同本征矢量就是上面的列矩阵 ϕ_1, ϕ_2 和 ϕ_3. $(\mathscr{A}, \mathscr{M})$ 的本征值组 (a_i, m_i) 与共同本征矢量 ϕ_i 之间的对应关系是:

$$(\sqrt{2},\ 1) \Leftrightarrow \phi_1, \quad (\sqrt{2},\ 0) \Leftrightarrow \phi_2, \quad (\sqrt{2},\ -1) \Leftrightarrow \phi_3.$$

这是一一对应, 故 $(\mathscr{A}, \mathscr{M})$ 也构成了体系的一个力学量完全集.

- 值得注意的是 $[\mathscr{M}, \mathscr{B}] \neq 0$. 准确地说,

$$[\mathscr{M}, \mathscr{B}] = i\mathscr{W}, \quad \mathscr{W} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{bmatrix}$$

力学量矩阵 $\mathscr{M}$ 与 $\mathscr{B}$ 不相容, 它们没有完备的共同本征矢量系.

- 事实上, 找不到任何一个列矩阵

$$\phi = \begin{bmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \end{bmatrix}$$

能保证 $\mathscr{M}\phi = \mathscr{B}\phi = \mathscr{W}\phi = 0$. 所以, 也不存在个别的列矩阵能成为不相容力学量矩阵 $\mathscr{M}$ 与 $\mathscr{B}$ 的共同本征矢量.

测不准关系

两个不相容的力学量算符不拥有完备的共同本征右矢系. 因此, 对于制备在任一量子态 $|\Psi\rangle$ 的系综而言, 不相容的力学量一般不能同时具有确定的测量值.

量子力学中有一个重要的不等式, 称为测不准关系[4], 它定量地刻画了两个不相容力学量一般不能被同时测准[5]的特征. 为了讨论测不准关系方便起见, 我们引入两个辅助概念:

1. $|\Psi\rangle$ 态下力学量 $\mathscr{A}$ 的误差算符:

$$\Delta\hat{\mathscr{A}} := \hat{\mathscr{A}} - \langle\mathscr{A}\rangle$$

式中 $\langle\mathscr{A}\rangle = \langle\Psi|\hat{\mathscr{A}}|\Psi\rangle$, 它是力学量 $\mathscr{A}$ 在 $|\Psi\rangle$ 态下的系综平均值.

2. $|\Psi\rangle$ 态下力学量 $\mathscr{A}$ 的不确定度:

$$\Delta\mathscr{A} := \sqrt{\left\langle(\Delta\hat{\mathscr{A}})^2\right\rangle} = \sqrt{\langle\mathscr{A}^2\rangle - \langle\mathscr{A}\rangle^2}$$

---

[4] 有些教材里称之为不确定度关系.
[5] 这里的测准或者测不准, 都是在系综意义下说的. 切记!

现在推导测不准关系.

设 $\mathscr{A}$ 与 $\mathscr{B}$ 是体系的两个任意选择的力学量,

$$\left[\hat{\mathscr{A}}, \hat{\mathscr{B}}\right] = i\,\hat{\mathscr{C}}, \qquad \hat{\mathscr{C}} = \hat{\mathscr{C}}^{\dagger}$$

算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 与 $\hat{\mathscr{B}}$ 的厄米性, 意味着 $|\Psi\rangle$ 态下这两个力学量的误差算符也是厄米算符:

$$\Delta\hat{\mathscr{A}} = \left(\Delta\hat{\mathscr{A}}\right)^{\dagger}, \quad \Delta\hat{\mathscr{B}} = \left(\Delta\hat{\mathscr{B}}\right)^{\dagger}, \quad \left[\Delta\hat{\mathscr{A}}, \Delta\hat{\mathscr{B}}\right] = i\,\hat{\mathscr{C}}$$

因此, 对于任意指定的实数 ζ 和右矢 $|\Psi\rangle$,

$$|\eta\rangle := \left[\zeta\left(\Delta\hat{\mathscr{A}}\right) - i\left(\Delta\hat{\mathscr{B}}\right)\right]|\Psi\rangle$$

也是体系态矢量空间中的一个合格的量子态. 所以,

$$\left||\eta\rangle\right|^{2} = \langle\eta|\eta\rangle \geqslant 0$$

注意到：

$$
\begin{aligned}
\langle\eta|\eta\rangle &= \langle\Psi|\left[\zeta\Delta\hat{\mathscr{A}}+i\Delta\hat{\mathscr{B}}\right]\left[\zeta\Delta\hat{\mathscr{A}}-i\Delta\hat{\mathscr{B}}\right]|\Psi\rangle \\
&= \langle\Psi|\left[\zeta^2(\Delta\hat{\mathscr{A}})^2+(\Delta\hat{\mathscr{B}})^2+\zeta\hat{\mathscr{C}}\right]|\Psi\rangle \\
&= \zeta^2\left\langle(\Delta\hat{\mathscr{A}})^2\right\rangle+\left\langle(\Delta\hat{\mathscr{B}})^2\right\rangle+\zeta\langle\mathscr{C}\rangle \\
&= \zeta^2(\Delta\mathscr{A})^2+(\Delta\mathscr{B})^2+\zeta\langle\mathscr{C}\rangle
\end{aligned}
$$

不等式 $\langle\eta|\eta\rangle \geqslant 0$ 可改写为：

$$
\left[\zeta(\Delta\mathscr{A})+\frac{\langle\mathscr{C}\rangle}{2(\Delta\mathscr{A})}\right]^2+(\Delta\mathscr{B})^2-\frac{\langle\mathscr{C}\rangle^2}{4(\Delta\mathscr{A})^2}\geqslant 0
$$

此不等式对于任意指定的实参数 ζ 均成立．因此，

$$
(\Delta\mathscr{A})^2(\Delta\mathscr{B})^2 \geqslant \frac{\langle\mathscr{C}\rangle^2}{4}, \qquad \rightsquigarrow \qquad \boxed{\Delta\mathscr{A}\,\Delta\mathscr{B} \geqslant \frac{1}{2}\langle\mathscr{C}\rangle}
$$

这就是著名的测不准关系．

作为量子力学的一条基本原理, Heisenberg(1928) 假设:

$$\boxed{\Delta x_i \Delta p_j \geqslant \frac{\hbar}{2}\delta_{ij}}$$

式中的 x_i 与 p_j 分别是笛卡尔直角坐标系下粒子的位置坐标与动量分量. 这个不等式源于 Heisenberg 对于电子衍射实验的分析, 反映了量子力学对于微观粒子波粒二象性的理解:

- 微观粒子按概率波波动的方式在位形空间中运动, 而不是沿一条确定的轨道在时空中运动.

Heisenberg 测不准原理写成算符形式, 就是:

$$\left[\hat{x}_i,\ \hat{p}_j\right] = i\hbar\delta_{ij}\,\hat{I}$$

此式通常称为量子力学的基本对易关系, 其他对易关系原则上都可以从此式出发导出.[6]

[6] 自旋角动量例外.