量子力学的矩阵形式与狄拉克(Dirac)符号

力学量 $\hat{Q}$，设它的本征值是离散的，本征值集为

$$\{q_1, q_2, \cdots\},$$

本征函数系（不含时）为

$$\{u_1(x), u_2(x), \cdots\},$$

先假设所有本征值都是非简并的，这个本征函数系的正交归一性就是

$$\left(u_m(x), u_n(x)\right) = \delta_{mn}$$

如果是连续本征值系统，那么：

$$\left(u_q(x), u_{q'}(x)\right) = \delta(q - q')$$

在$\hat{Q}$表象中，态函数ψ可表示为态展开系数的列矩阵形式

$$\psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

它称为Q表象中的态矢量

这就是系统在$\hat{Q}$表象中的“波函数”。加入时间因子后

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

厄密共轭态矢量排成行矩阵的形式：

$$\psi^{+}(t)=\left(a_{n}^{*}(t),a_{n}^{*}(t),\cdots a_{n}^{*}(t),\cdots\right)$$

$$\psi^{+}(t)\psi(t)=\sum_{n}\left|a_{n}(t)\right|^{2}=\int\psi^{*}(x,t)\psi(x,t)dx$$

这个式子的运算是矩阵乘法，即行乘以列

这些方法和概念不难推广到连续谱和多自由度情形

有时直接称 $\psi(x,t)$ 是态矢量

$u_n(x)$ 是表象的基矢或基底

$a_n(t)$ 是态矢量的分量或投影

算符的矩阵表示

坐标表象中算符表示为 $\hat{F}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$

算符作用式 $\varphi(\mathbf{x},\mathbf{t}) = \hat{\mathbf{F}}\psi(\mathbf{x},\mathbf{t})$ ，变换到Q表象中为

$$\psi(x,t) = \sum_n a_n(t)u_n(x)$$

$$\varphi(x,t) = \sum_n b_n(t)u_n(x)$$

代入上面的方程得: $\sum_n b_n(t)u_n(x) = \sum_n a_n(t)\hat{F}u_n(x)$

左乘以 $u_m^*(x)$ 并积分:

$$b_m(t) = \sum_n a_n(t)\int u_m^*(x)\hat{F}u_n(x)dx$$

现在记 $$F_{mn}=\int u_m^*(x)\hat{F}u_n(x)dx$$

于是 $$b_m(t)=\sum_n F_{mn}a_n(t)$$

也可以写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

简写为 $\varphi(\mathbf{t})=\mathbf{F}\psi(\mathbf{t})$

在离散表象中算符用（方）矩阵代表

算符的厄米性在矩阵形式中的表现：

$$F_{mn}^* = \left(\int u_m^*(x)\hat{F}u_n(x)dx\right)^* = \left[\int (\hat{F}u_m)^* u_n dx\right]^* = \int (\hat{F}u_m)u_n^* dx$$

$$= \int u_n^*\hat{F}u_m dx = F_{nm} = F_{mn}^T$$

即$F^* = F^T$，或 $\boxed{F^\dagger = F}$

恒等算符（或称为单位算符）：

$$\hat{I}\psi = \psi, \quad \forall\,\psi$$

其在任何离散表象中的矩阵都是单位矩阵，即是

$$\mathrm{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

表象变换

仍以一维情形为例。

设我们再取另一个与算符 $\hat{Q}$ 函数独立的算符 $\hat{R}$，

求出它的本征值集 $\{r_n\}$ 和本征函数系$\{u'_n(x)\}$,

我们就构造了 $\hat{R}$ 表象。

原来的基底$\{u_n(x)\}$也可以用新的基底$\{u'_n(x)\}$来展开：

$$u_n = \sum_m u'_m S_{mn} \quad 或 \quad (u_1, u_2, \dots) = (u'_1, u'_2, \dots) \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

其中 $S_{mn} = (u'_m, u_n)$

如果一个态ψ在$\hat{Q}$表象中的矩阵元是$\{a_n\}$，

在$\hat{R}$表象中的矩阵元是$\{a_n'\}$，那么

$$\psi=\sum_n a_n u_n=\sum_{m,n} a_n u_m' S_{mn}=\sum_m\left(\sum_n S_{mn}a_n\right)u_m'=\sum_m a_m' u_m'$$

$$\Rightarrow\quad a_m'=\sum_n S_{mn}a_n$$

把$\{a_n\}$和$\{a_n'\}$都排成矩阵，就有

$$\psi'=S\psi \quad \text{或} \quad \begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ \vdots \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

矩阵 $S=(S_{mn})$ 应该满足什么条件？考虑到量子力学态矢量为可观测量，应该要求其标积在表象变换下保持不变。设态ψ和φ在$\hat{Q}$表象中的矩阵元分别是$\{a_n\}$和$\{b_n\}$，在$\hat{R}$表象中的矩阵元分别是$\{a_n'\}$和$\{b_n'\}$，那么

$$(\psi,\varphi)=\sum_m a_m'^* b_m' = \sum_{mjk} S_{mj}^* a_j^* S_{mk} b_k = \sum_{jk}\left(\sum_m S_{mj}^* S_{mk}\right) a_j^* b_k$$

又因 $(\psi,\varphi)=\sum_k a_k^* b_k = \sum_{jk}\delta_{jk} a_j^* b_k$，所以 $\sum_m S_{mj}^* S_{mk} = \delta_{jk}$,

或者 $\sum_m S_{jm}^\dagger S_{mk} = \left(S^\dagger S\right)_{jk} = \delta_{jk}$，其中用到了$\left(S^+\right)_{mn} = S_{nm}^*$,

于是 $S^+S = SS^+ = I$

$$S^{\dagger} = S^{-1}.$$

满足这个条件的矩阵称为幺正矩阵

$\boxed{\text{表象变换是幺正变换}}$

幺正变换不改变态矢量的内积，

因而算符的本征值、力学量的几率分布和平均值等等都保持不变。

幺正变换完全不改变量子力学理论的结构和理论对实验观察的预言。

基底的变换矩阵和态矢量的变换矩阵之间有什么关系呢？

$$(u_1, u_2, \dots) = (u_1', u_2', \dots)\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$S^{T\dagger}S^T = I$

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^{T\dagger} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^{T\dagger} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \Longleftrightarrow \boxed{u_m' = \sum_n S_{mn}^* u_n\,, \qquad u_m = \sum_n S_{mn}^T u_n'}$$

$$\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \Longleftrightarrow \boxed{a_m' = \sum_n S_{mn} a_n} \qquad \boxed{S_{mn} = (u_m', u_n)}$$

注意：基底的变换矩阵和态矢量的变换矩阵互为复共轭或转置。

在表象变换下，一个算符所对应的矩阵的变换是

$$\boxed{F' = SFS^{+} = SFS^{-1}}$$

幺正变换不改变任何量子力学方程，即，如果

$$\phi = F\psi,$$

那么也有

$$\phi' = S\phi = SF\psi = SFS^{-1}S\psi = F'\psi'.$$

量子力学理论的幺正不变性，即量子力学理论的表象无关性。幺正变换不变性是量子力学的最根本的不变性

量子力学的矩阵形式

离散表象中的量子力学诸方程

坐标表象与离散表象的关系和对比如下表

	坐标表象	离散表象
态	波函数 $\Psi(x,t)$ 复共轭波函数 $\Psi^*(x,t)$	列矢量 $\Psi(t)$ 行矢量 $\Psi^+(t)$
算符	$\hat{F}\left(x,-i\hbar\partial_x\right)$	矩阵 $F=(F_{mn})$
算符作用于态	$\phi(x,t)=\hat{F}\psi(x,t)$	（矩阵乘法） $\Phi(t)=F\Psi(t)$
态的标积	$\int\phi^*(x)\psi(x)dx$	（矩阵乘法） $\Phi^+\Psi$

(1) 态的归一：$\Psi^+\Psi=1$，两态正交：$\Phi^+\Psi=0$

(2) 力学量的平均值（若 Ψ 已归一）：$\overline{F}=\Psi^+F\Psi$

(3) 本征方程：$F\psi=\lambda\psi$，

(4) 含时间的薛定鄂方程：$i\hbar\dfrac{d\psi}{dt}=H\psi(t)$

乘法均理解为矩阵（包括列、行矢量）乘法

离散表象中的本征方程的解法

设 $$\psi=\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix},\qquad F=\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

本征方程：
$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} F_{11}-\lambda & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22}-\lambda & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0$$

简写为
$$(F-\lambda I)\psi = 0$$

这是一个齐次线性方程组，它有非零解的充要条件是：

$$\begin{vmatrix} F_{11}-\lambda & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22}-\lambda & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0$$

或简记为 $\left|F-\lambda I\right|=0$, 即久期方程。

如果$\hat{F}$是n×n矩阵，则它是关于λ的n次代数方程。

根据“代数基本定理”，在复数域内，n次代数方程一定有n个根，这些根就是本征值。k重根算k个根。另外，矩阵$\hat{F}$的的厄密性保证了这些根都是实数

把这些本征值记为$\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}$，再代回方程，假设没有重根

$$\begin{pmatrix} F_{11}-\lambda_i & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22}-\lambda_i & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}=0, \quad (i=1,2\cdots n)$$

就可以对各个本征值求出 $\{a_1,a_2,\cdots,a_n\}$，但有一个整体的常数因子未定，再利用归一化条件把它定出，就得到了完全归一化的本征态矢量

例子：矩阵 $F=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ 的“对角化”

首先不难验证F的厄米性：

$$F^{+}=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^{+}=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}=F$$

它的久期方程： $\begin{vmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{vmatrix}=\lambda^2-1=0,$

本征值是： $\lambda_1=1, \quad \lambda_2=-1.$

$\lambda_1=1,$ 本征方程成为 $\begin{pmatrix} -1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}=0$ ⇨ $a_2=i\,a_1,$

它的本征矢量是 $$\psi_1 = a_1\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$$

归一化条件是： $$\psi_1^+\psi_1 = |a_1|^2 + |ia_1|^2 = 2|a_1|^2 = 1,$$

$$|a_1|^2 = \frac{1}{2},$$

可以取 $a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, 归一化的本征矢量是： $\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ i/\sqrt{2}\end{pmatrix}$

同理, $\lambda_2 = -1$, 归一化的本征态矢量是：

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ -i/\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

现在我们把 ψ_1,ψ_2 排成一个方矩阵，

$$U=\begin{pmatrix}1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2}\\ i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

它的厄米共轭是： $$U^\dagger=\begin{pmatrix}1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2}\\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

$$U^\dagger U=\begin{pmatrix}1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2}\\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2}\\ i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}=1$$

满足条件　　$U^{+}U = I$

所以矩阵U为幺正矩阵。此外，

$$U^{+}FU=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

矩阵U把算符（矩阵）F对角化了，对角元素正是F的本征值。 所以，F的对角化运算就是F的幺正变换，变换矩阵由本征矢量排列组成。

设已经求出了属于本征值$\{\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n\}$（没有重根）

的归一化本征矢量分别为$\{\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n\}$，

现在把它们排成一个矩阵（注意每一个ψ都是n个分量的列矢量）

$$S = \left((\psi_1), (\psi_2), \cdots, (\psi_n)\right),$$

它的 Hermitian 共轭矩阵是（注意每一个$\psi^\dagger$都是n个分量的行矢量）

$$S^\dagger = \begin{pmatrix} (\psi_1^\dagger) \\ (\psi_2^\dagger) \\ \vdots \\ (\psi_n^\dagger) \end{pmatrix}.$$

首先我们发现 $$S^\dagger S=\begin{pmatrix}(\psi_1^\dagger)\\(\psi_2^\dagger)\\\vdots\\(\psi_n^\dagger)\end{pmatrix}\big((\psi_1),(\psi_2),\cdots,(\psi_n)\big)$$

$$=\begin{pmatrix}\psi_1^\dagger\psi_1 & \psi_1^\dagger\psi_2 & \cdots & \psi_1^\dagger\psi_n\\ \psi_2^\dagger\psi_1 & \psi_2^\dagger\psi_2 & \cdots & \psi_2^\dagger\psi_n\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \psi_n^\dagger\psi_1 & \psi_n^\dagger\psi_2 & \cdots & \psi_n^\dagger\psi_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 1 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & 1\end{pmatrix},$$

正是 $\{\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_n\}$ 的正交归一关系，所以 S 是幺正矩阵。

对F做幺正变换：

$$S^{\dagger}FS=\begin{pmatrix}(\psi_1^{\dagger})\\(\psi_2^{\dagger})\\\vdots\\(\psi_n^{\dagger})\end{pmatrix}(F)\big((\psi_1),(\psi_2),\cdots,(\psi_n)\big)$$

$$=\begin{pmatrix}(\psi_1^{\dagger})\\(\psi_2^{\dagger})\\\vdots\\(\psi_n^{\dagger})\end{pmatrix}\big(\lambda_1(\psi_1),\lambda_2(\psi_2),\cdots,\lambda_n(\psi_n)\big)$$

$$
=\begin{pmatrix}
\lambda_1\psi_1^\dagger\psi_1 & \lambda_2\psi_1^\dagger\psi_2 & \cdots & \lambda_n\psi_1^\dagger\psi_n \\
\lambda_1\psi_2^\dagger\psi_1 & \lambda_2\psi_2^\dagger\psi_2 & \cdots & \lambda_n\psi_2^\dagger\psi_n \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\lambda_1\psi_n^\dagger\psi_1 & \lambda_2\psi_n^\dagger\psi_2 & \cdots & \lambda_n\psi_n^\dagger\psi_n
\end{pmatrix}
$$

$$
=\begin{pmatrix}
\lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & \lambda_n
\end{pmatrix},
$$

求算符本征值问题归结为寻找一个幺正变换把F从某个表象变换到其自身表象，使F的矩阵表示对角化

练习：幺正变换不改变矩阵*F*的迹

Dirac符号

不同的量子力学表象所表达的物理内容是完全相同的，但是从表面上看来，不同表象中的算符和量子态具体表达式却可能很不一样。为了避免不同表象带来的形式上的差异，Dirac引入了一种与表象无关的符号体系，被称为Dirac符号

量子体系的状态用态矢量表示。态矢量有

左矢(bra) $\langle \ |$

右矢(ket) $| \ \rangle$

$$\langle \psi | = | \psi \rangle^{\dagger}, \quad | \psi \rangle = \langle \psi |^{\dagger}$$

可以把 † （Hermitian共轭）看成一种“形式运算符号”，即转置加复共轭

两个态的标积（即过去的(φ,ψ)）：

$$\langle \varphi | \psi \rangle \qquad \text{是一个数}$$

满足关系

$$\langle \varphi | \psi \rangle^{*} = \langle \varphi | \psi \rangle^{+} = \langle \psi | \varphi \rangle \quad \text{互为共轭复数}$$

于是$\langle\psi|\psi\rangle$一定是实数，而且

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0,$$

其中=号只对$|\psi\rangle = 0$成立.

态的归一是 $$\langle \psi | \psi \rangle = 1,$$

两态正交是 $$\langle \phi | \psi \rangle = 0.$$

算符（例如$\hat{F}$）对右矢的作用直接写为$\hat{F}|\psi\rangle$，结果还是一个右矢

算符$\hat{F}$也可以作用于左矢，写为$\langle\psi|\hat{F}$，结果还是一个左矢：$\langle\psi|\hat{F} = \left(\left(\langle\psi|\hat{F}\right)^\dagger\right)^\dagger = \left(\hat{F}^\dagger|\psi\rangle\right)^\dagger$，其中$\hat{F}^\dagger$为算符$\hat{F}$的Hermitian共轭算符，定义为

$$\left(\langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle\right)^\dagger = \langle\psi|\hat{F}^\dagger|\varphi\rangle, \quad \text{for } \forall\ |\psi\rangle, |\varphi\rangle$$

$$|\phi\rangle\langle\psi| \quad \text{是一个算符}$$

如果

$$\hat{F}|\psi\rangle = |\varphi\rangle,$$

那么

$$\langle\psi|\hat{F}^\dagger = \langle\varphi|$$

算符乘积的 Hermitian 共轭满足等式

$$(\hat{F}\hat{G})^\dagger = \hat{G}^\dagger\hat{F}^\dagger$$

如果算符$\hat{F}$具有性质

$$\boxed{\hat{F} = \hat{F}^\dagger}$$

它就称为自 Hermitian 共轭算符，或简称为 **Hermitian 算符**。

对于Hermitian算符$\hat{F}$有下面关系：

$$\left(\langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle\right)^{\dagger}=\left(\langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle\right)^{*}=\langle\psi|\hat{F}|\varphi\rangle$$

推论：$\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle$ 是实数

厄密算符的本征方程是 $\hat{F}|\psi_\lambda\rangle=\lambda|\psi_\lambda\rangle$.

或者写成左矢的形式

$$\langle\psi_\lambda|\hat{F}=\langle\psi_\lambda|\lambda,$$

力学量（算符）的平均值

$$\bar{F}=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle \qquad （|\psi\rangle \text{ 已经归一}）$$

$$\bar{F}=\frac{\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\quad（|\psi\rangle\text{没有归一}）$$

基矢量集 $\{|n\rangle, n=1,2,\cdots\}$ 的正交归一可表为:

$$\langle m|n\rangle=\delta_{mn},\quad(m,n=1,2,\cdots)$$

完备性可表为

$$\sum_n |n\rangle\langle n|=I,\ （I\text{是单位算符}）$$

上式中的某一项

$$P_n=|n\rangle\langle n|$$

称为属于态 $|n\rangle$ 的**投影算符**。它的主要性质是

$$P_n^2=P_n,\quad \sum_n P_n=I.$$

对于连续谱，狄拉克态矢的正交归一表示为

$$\langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle = \delta(\lambda_1 - \lambda_2)$$

比如坐标算符x的本征方程为：

$x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0)$，狄拉克符号表示：$x|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$

练习：验证 $\langle x_1 | x_2 \rangle = \delta(x_1 - x_2)$

一个抽象的态$|n\rangle$在坐标表象中的函数表示：$\langle x|n\rangle = \psi_n(x)$

基矢完备性在坐标表象中的表现：

$$\langle x_1 | x_2 \rangle = \sum_n \langle x_1 | n \rangle \langle n | x_2 \rangle = \sum_n \psi_n(x_1)\psi_n^*(x_2) = \delta(x_1 - x_2)$$

这正是本征函数ψ_n完备性的必要条件

态矢量在具体表象中的表示

在F表象中（基矢量$|\mathrm{k}\rangle$），任何一个态矢量$|\psi\rangle$可以用基矢量$|\mathrm{k}\rangle$展开：

$$\boxed{|\psi\rangle=\sum_k|k\rangle\langle k|\psi\rangle=\sum_n a_k|k\rangle}$$

其中系数（利用基矢量的正交归一性）

$$\boxed{a_k=\langle k|\psi\rangle}$$

代表$|\psi\rangle$在基矢量$|k\rangle$上的“投影”。

$\{a_k\} = \{\langle k|\psi\rangle\}$是态$|\psi\rangle$在$F$表象中的表示。

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

在基矢量的量子数为连续谱时，完备性关系表示为：

$$\int dx|x\rangle\langle x| = I,$$

$$\int dp|p\rangle\langle p| = I$$

在具体的F表象下，态矢量展开为：

$$|\psi\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k||\psi\rangle = \sum_k a_k |k\rangle,$$

$$|\varphi\rangle = \sum_j |j\rangle\langle j||\varphi\rangle = \sum_j b_j |j\rangle$$

$\Rightarrow$

态矢量的标积为：

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_{j,k} b_j^* a_k \langle j|k\rangle$$

$$= \sum_{j,k} b_j^* a_k \delta_{jk}$$

$$= \sum_k b_k^* a_k$$

$$= \begin{pmatrix} b_1^*, & b_2^*, & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

算符在具体表象下的表示

算符代表着对态的一种运算：

$$\hat{L}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$$

在F表象中，

$$\langle j|\hat{L}|\psi\rangle = \sum_k \langle j|\hat{L}|k\rangle\langle k|\psi\rangle = \langle j|\varphi\rangle$$

即

$$\sum_k L_{jk} a_k = b_j$$

其中$L_{jk} = \langle j|\hat{L}|k\rangle$称为算符$\hat{L}$在$F$表象中的**矩阵元**

算符$\hat{L}$的完整表示为：

$$\hat{L} = \sum_{j,k} |j\rangle\langle j|\hat{L}|k\rangle\langle k| = \sum_{j,k} L_{jk}|j\rangle\langle k|$$

算符$\hat{F}$在其自身F表象中的矩阵元和完整表示为：

$$F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle = \langle m|f_n|n\rangle = f_n\langle m|n\rangle = f_n\delta_{mn}$$

$$\hat{F} = \sum_{m,n} F_{mn}|m\rangle\langle n| = \sum_{m,n} f_n\delta_{mn}|m\rangle\langle n| = \sum_{n} f_n|n\rangle\langle n|$$

其中f_n和$|n\rangle$为$\hat{F}$的本征值和对应的本征态。可见，任何算符在其自身表象中自然就是对角化的