对易括号的运算

（1）对易括号是交换反对称的，即

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$$

（2）对易括号是线性的，即

$$[\hat{A}+\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$$

$$[\hat{A}, \hat{B}+\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$$

$$[c\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, c\hat{B}] = c[\hat{A}, \hat{B}]$$

（3）算符乘积的对易括号展开法则：

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\,[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\,\hat{B}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}\,[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\,\hat{C}$$

（4）量子力学的基本对易括号是

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

其中 $\hat{p}_i = -\mathrm{i}\hbar\partial/\partial x_i$ (坐标表象)

证明：

$$\left[\hat{x}_i, \hat{p}_j\right]\psi = \hat{x}_i\hat{p}_j\psi - \hat{p}_j\hat{x}_i\psi$$

test function

$$= -i\hbar\left(x_i\frac{\partial\psi}{\partial x_j} - \frac{\partial(x_i\psi)}{\partial x_j}\right)$$

$$= -i\hbar\left(\cancel{x_i\frac{\partial\psi}{\partial x_j}} - \delta_{ij}\psi - \cancel{x_i\frac{\partial\psi}{\partial x_j}}\right)$$

$$= i\hbar\delta_{ij}\psi$$

利用上面给出的基本对易括号和对易括号的运算法则，

可证： $[\hat{x}, \hat{F}] = i\hbar \widehat{\frac{\partial F}{\partial p_x}}, \quad [\hat{p}_x, \hat{F}] = -i\hbar \widehat{\frac{\partial F}{\partial x}},$

其中 $\hat{F} = F(\hat{x}, \hat{p}) = \sum_{m,n=0}^{\infty} c_{mn} \hat{x}^m \hat{p}^n$ 是算符 $\hat{x}, \hat{p}$ 的函数

总结： 角动量算符的对易关系

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \mathrm{i}\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = \mathrm{i}\hbar \hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = \mathrm{i}\hbar \hat{L}_y,$$

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x,$$

$$\widehat{L^2} = \hat{L}_x^{\ 2} + \hat{L}_y^{\ 2} + \hat{L}_z^{\ 2}$$

$$[\widehat{L^2}, \hat{L}_x] = [\widehat{L^2}, \hat{L}_y] = [\widehat{L^2}, \hat{L}_z] = 0,$$

角动量各分量之间互相不对易有深刻的物理结果。

量子力学的基本公设

公设1：微观体系的状态由波函数描述，波函数满足单值、有限、连续条件

公设2：波函数的动力学演化满足薛定鄂方程

公设3：力学量用厄密算符表示，且有组成完备集的本征函数系

公设4：**任一波函数可以展开为力学量算符本征函数的线性叠加，测得力学量为本征值λ_n的几率(密度)为展开式中对应本征函数系数的模方$|c_n|^2$**

算符的本征方程

设 $\hat{F}$ 是某个力学量算符，则

$$\hat{F}\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$$

称为$\hat{F}$ 的本征方程，λ称为本征值，ψ_λ称为 $\hat{F}$ 的属于 λ 的本征函数

量子力学关于测量问题的基本假设是：

算符$\hat{F}$ 的本征值集 $\{\lambda\}$ 就是力学量 F 的测量值集

$\hat{F}$的本征函数 ψ_λ代表力学量 F有确定值λ 的量子状态

$\psi = \sum_\lambda c_\lambda \psi_\lambda$，处于$\psi_\lambda$态的概率为 $|c_\lambda|^2$

波函数按本征函数系展开

一维情形。假设力学量算符 $\hat{F}$ 的本征值集是 $\{\lambda_n, n=1,2,\cdots\}$，（离散的、非简并的），本征函数系是 $\{\phi_n(x), n=1,2,\cdots\}$ 按叠加原理，

$$\boxed{\psi(x)=\sum_n c_n\phi_n(x).}$$

注意到 $\{\phi_n(x)\}$ 是正交归一的，

$$\int\phi_m^*(x)\phi_n(x)\,dx=\delta_{mn},\qquad (m,n=1,2,\cdots)$$

$$\boxed{c_m=\int\phi_m^*(x)\psi(x)\,dx.\qquad (m=1,2,\cdots)}$$

注意：只有当 $\{\phi_n(x)\}$ 是完备的函数系时，才能用它来展开任意的连续函数

$$\psi(x)=\sum_n\left(\int\phi_n^*(x')\psi(x')\,dx'\right)\phi_n(x)=\int\left(\sum_n\phi_n(x)\phi_n^*(x')\right)\psi(x')\,dx'$$

$$\Updownarrow$$

$$\psi(x)=\int\delta(x-x')\psi(x')dx'$$

两边对x'求导得 $$\sum_n\phi_n(x)\phi_n^*(x')\cancel{\psi(x')}=\delta(x-x')\cancel{\psi(x')}$$

于是： $$\boxed{\sum_n\phi_n(x)\phi_n^*(x')=\delta(x-x')}$$

这个条件就称为函数系 $\{\phi_n(x)\}$ 的完备性条件

补充说明：

(1) 本征值是连续谱，本征函数系是 $\phi_\lambda(x)$(λ连续变化),

$$\psi(x)=\int c_\lambda\phi_\lambda(x)\cdot d\lambda,$$

$$\int \phi_\lambda^*(x)\phi_{\lambda'}(x)\cdot dx=\delta(\lambda-\lambda'),$$

$$c_\lambda=\int \phi_\lambda^*(x)\psi(x)\cdot dx.$$

$$\boxed{\int\phi_\lambda^*(x)\phi_\lambda(x')d\lambda=?}$$

(2) 多自由度体系（例如三维运动）。这时要按CSCO算符集的共同本征函数系展开。系数的计算方法是类似的

(3) 与时间有关的波函数

$$c_n,c_\lambda\to c_n(t),c_\lambda(t)$$

(4) 任何状态ψ都可以展开为ψ_k的线性组合

$\{\psi_k\}$这个函数系必须是“完备的”

从物理上说，函数系的完备性尽管很重要，

我们却经常不对它做严格的证明。

这是因为有些函数系的完备性已经由数学家证明过，

也是因为物理上的“完备性”通常只意味

着取这些基本函数来展开我们要研究的波函数已经“足够多”了

量子力学量的测量-波包坍缩

量子力学的测量结果是几率性的，比如我们测一个非定态系统的能量，其波函数为：

$$\Psi(\vec{r},t)=\sum_n c_n\psi_n(\vec{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar},$$

在测量以前，系统的状态是许许多多本征态的叠加。测量之后，系统坍缩为某一个本征态：

$$\sum_n c_n\psi_n\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\xrightarrow{\text{测量并读数}}\psi_i\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_i t/\hbar},$$

这一过程称为“波包坍缩”（von Neumann，1932年）。波包坍缩的动力学过程至今仍在研究（不服从薛定谔方程）。量子力学关于测量的假定是理论的基本假定之一，是量子力学目前无法解释的。比如，在对粒子做空间位置测量后的一刻，其波函数坍缩为

$$\delta(\vec{\mathrm{r}}-\vec{\mathrm{r}}_0)$$

力学量的测量几率

一维离散情形：

量子力学的测量几率假设（公设4）：若任何量子态 $\psi(x)$ 按力学量F的本征函数系 $\{\phi_n(x)\}$ 展开的结果是：

$$\psi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x),$$

那么对这状态测量F得到测量值 λ_n 的几率是 ：

$$w(\lambda_n) = |c_n|^2,$$

$$c_n = \int \phi_n^*(x)\psi(x)\,dx$$

总几率不变的验证：测量F得到各种可能测量值的总几率为

$$\sum_n w(\lambda_n) = \sum_n \left| \int \phi_n^*(x)\psi(x)\,dx \right|^2 = \sum_n \int \phi_n(x)\psi^*(x)\,dx \cdot \int \phi_n^*(x')\psi(x')\,dx'$$

$$= \int\int \left(\sum_n \phi_n(x)\phi_n^*(x') \right) \psi^*(x)\psi(x')\,dx\,dx' = \int\int \delta(x-x')\psi^*(x)\psi(x')\,dx\,dx'$$

$$= \int \delta(x-x') \left(\int \psi^*(x)\psi(x')dx \right) dx' = \int \psi^*(x)\psi(x)\,dx$$

它也就是测量粒子的坐标x得到各种可能测量值的总几率

推广：

(1) 本征值是连续的。此时要引入几率密度：记测量值在

$\lambda \to \lambda + d\lambda$ 间的几率为 $dW(\lambda)$,

$$w(\lambda) \equiv \frac{dW(\lambda)}{d\lambda} = |c_\lambda|^2$$

是λ的测量几率密度，它的计算公式是

$$c_\lambda = \int \phi_\lambda^*(x)\psi(x)\cdot dx.$$

(2) 对多自由度体系，只问某一个力学量的测量几率，经常会有简并。这时要找到一个包含 $\hat{F}$ 的CSCO完全集，并求出它们的共同本征函数。 设力学量F的离散的本征值 λ_n的简并度为k，简并的本征态是$\phi_{n1},\phi_{n2},\cdots,\phi_{nk}$

$$\psi(x) = \cdots + c_{n1}\phi_{n1} + c_{n2}\phi_{n2} + \cdots + c_{nk}\phi_{nk} + \cdots,$$

$$w(\lambda_n) = |c_{n1}|^2 + |c_{n2}|^2 + \cdots + |c_{nk}|^2.$$

对连续谱的情况也做类似的推广

力学量的平均值

$$\overline{F}=\sum_n \lambda_n W(\lambda_n),\qquad \text{（对离散谱）}$$

$$=\int \lambda w(\lambda)\cdot d\lambda.\qquad \text{（对连续谱）}$$

$$\overline{F}=\sum_n \lambda_n W(\lambda_n)=\sum_n \lambda_n |c_n|^2=\sum_n \lambda_n \int \phi_n(x)\psi^*(x)\,dx\cdot\int \phi_n^*(x')\psi(x')\,dx'$$

$$=\sum_n \int \varphi_n(x)\psi^*(x)\,dx\cdot\int \left(\hat{F}\varphi_n(x')\right)^*\psi(x')\,dx'$$

$$=\sum_n \int \varphi_n(x)\psi^*(x)\,dx\cdot\int \varphi_n^*(x')\left(\hat{F}\psi(x')\right)dx'$$

$$=\iint\left(\sum_n \varphi_n(x)\varphi_n^*(x')\right)\psi^*(x)\left(\hat{F}\psi(x')\right)dx\,dx'$$

$$=\iint \delta(x-x')\psi^*(x)\left(\hat{F}\psi(x')\right)dx\,dx'$$

$$=\int \psi^*(x)\hat{F}\psi(x)\,dx$$

$$\boxed{\overline{F} = \int \psi^*(x) \hat{F} \psi(x)\, dx}$$

这个计算式的条件是 $\psi(x)$ 已经归一，即

$$\int \psi^*(x) \psi(x)\, dx = 1$$

如果没有归一，则

$$\boxed{\overline{F} = \frac{\int \psi^*(x) \hat{F} \psi(x)\, dx}{\int \psi^*(x) \psi(x)\, dx}}.$$

对连续谱情形也很容易进行类似的推导，所以这个式子实际上并不依赖于F的本征值谱是离散的还是连续的

例子：一维谐振子基态的动量测量几率和动量平均值

一维谐振子的基态波函数是

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2},\quad \left(\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\right)$$