第三章　力学量的表示和表象变换

前面我们已经提到了在量子力学中力学量应该用算符表示，这就是所谓的量子化(一次量子化)，如在坐标空间中，动量算符$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}_x$，动能算符$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$，位置算符$\hat{\vec{x}} = \vec{x}$等，在动量空间中，$\hat{\vec{x}} = i\hbar\vec{\nabla}_p$，$\hat{\vec{p}} = \vec{p}$，$\hat{T} = \frac{p^2}{2m}$等。这里我们要强调的是量子力学中的算符必须与波函数相结合才有真实意义。它包含了几个信息：1)算符表示了一种操作(*operator*)(运算)，必须有操作对象，这个对象就是波函数，否则就无物理意义；2)选取不同的波函数表示(表象)，算符的表现形式是不同的，如坐标、动量表象；3) 不同表象的物理实质是一样的，即力学量算符(可测量量)的平均值不变。

3.1 算符及其运算规则

1．*Hilbert*空间及其算符

所谓*Hilbert*空间，是定义在某个数域上的完备线性内积空间。我们知道波函数ψ是描述微观物理系统的运动状态的，它所遵循的规律决定了我们应该用怎样的函数空间来描述微观系统。波函数的叠加原理说明ψ满足线性叠加原理，因此我们可以用一个线性空间来描述。也就是说，一个系统在一定时刻的一切可以实现的纯态的波函数ψ_n，来构成复数域上的一个线性空间，每一个纯态对应于线性空间的一个基矢。每一个混合态对应于一个态矢量，即可以表示为基矢的线性叠加$\psi = \sum_n c_n\psi_n$，其中系数$|c_n|^2$是系统处于某个纯态（基矢）的可能几率，这样的线性空间就是*Hilbert*空间。因此量子力学所表达的是一种统计规律，与力学量$\hat{A}$相对应的是它的平均值，或者说是期待值

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

即平均值是ψ与$\hat{A}\psi$的内积。定义内积为$(\psi_1, \psi_2) = \langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int \psi_1^*\psi_2 d\tau$。我们看到，算符的作用是使波函数$\psi$变成了另一个波函数$\psi'$。这也是为什么算符是"*operator*"。

我们以一维无限深势阱作为例子来说明这个概念。我们知道本征方程的解-本征波函数为$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$ $(n = 1, 2, ...)$，这些本征函数就是基矢，它们共同构成的线性空间就是*Hilbert*空间。所谓线性空间是与态的叠加原理相应的，因为这些本征（波）函数的线性组合也是本征方程的解。从某种程度上，可以与坐标空间作类比。基矢是$\vec{i}\ (x)$，$\vec{j}\ (y)$，$\vec{k}\ (z)$，任何一个矢量总是可以表示为$\vec{r} = a_1\vec{i} + a_2\vec{j} + a_3\vec{k}$。只是，这儿的基矢只有三个，而在量子力学中，基矢可能是无限多的的。可见，

1) *Hilbert*空间一般是无限维的，基矢之间必须是正交的，$\int \psi_n^*\psi_m dx = \delta_{mn}$；

2) 任何一个矢量(波函数)可以表示为基矢（本征波函数）的线性组合，基矢必须是完备的；

3) 定义内积$(\psi_1, \psi_2) = \langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int \psi_1^*\psi_2 d\tau$。

应当注意到*Hilbert*空间与坐标空间是不同的。前者是所有可能状态的集合构成的，其基矢是波函数，当然波函数可以用坐标表象来表示，但也可以是动量表象的。

2. 算符的运算规则

我们前面已经讲到了所有力学量都可以用算符表示，我们先讲一些算符的基本运算关系。

1) 算符之和：两个算符之和定义为

$$(\hat{A}+\hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi$$

再次注意到算符一定是作用在某个波函数上面，算符的运算满足加法的交换律和结合律

$$\begin{aligned}\hat{A}+\hat{B} &= \hat{B}+\hat{A} \\ \hat{A}+(\hat{B}+\hat{C}) &= (\hat{A}+\hat{B})+\hat{C}\end{aligned}$$

2) 算符之积：两个算符$\hat{A}$和$\hat{B}$之积记为$\hat{A}\hat{B}$，定义为

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi)$$

一般情况下，算符之积不满足交换律，即

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

实际上算符的运算完全可以看成是矩阵的运算，因为后面会讲到算符可以用矩阵表示。当两个算符有共同的本征函数时，它们是可以交换的。我们以具体的例子来进一步说明这个结果。

Example: 计算两个算符的交换差值：$\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}$，以及$\hat{T}\hat{p}-\hat{p}\hat{T}$

采用坐标表象$\psi(x)$，这里我们再次强调，一定是选择某个表象，算符一定是作用在波函数上的，尽管这样的一个结果与表象无关。

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{p}\psi &= x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi) = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi \\ \hat{p}\hat{x}\psi &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -xi\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi - i\hbar\psi \\ &\rightarrow \quad \hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x} = i\hbar\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{T}\hat{p}\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi) = \frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\psi \\ \hat{p}\hat{T}\psi &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi) = \frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\psi \\ &\rightarrow \quad \hat{T}\hat{p}-\hat{p}\hat{T} = 0\end{aligned}$$

采用动量表象$\varphi(p)$

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{p}\varphi &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}(p\varphi) = i\hbar\varphi + i\hbar p\frac{\partial}{\partial p}\varphi \\ \hat{p}\hat{x}\varphi &= p(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\psi) = i\hbar p\frac{\partial}{\partial p}\varphi \\ &\rightarrow \quad \hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x} = i\hbar\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{T}\hat{p}\psi &= \frac{p^2}{2m}(p\varphi) = \frac{p^3}{2m}\varphi \\ \hat{p}\hat{T}\psi &= p(\frac{p^2}{2m}\varphi) = \frac{p^3}{2m}\varphi \\ &\rightarrow \quad \hat{T}\hat{p}-\hat{p}\hat{T} = 0\end{aligned}$$

我们可以看到交换律是否成立。另外，它们的差值不随表象而变化。自己证明

$$\hat{E}\hat{t} - \hat{t}\hat{E} = i\hbar$$

其中$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$，$\hat{t} = t$。

3) 算符的乘幂：定义算符$\hat{A}$的n次幂$\hat{A}^n$为

$$\hat{A}^n \equiv \hat{A} \cdot \hat{A} ... \hat{A}$$

3.2 对易关系

如果我们定义对易式

$$[A, B] = AB - BA$$

显然，上面结果表明$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$，$[\hat{T}, \hat{p}] = 0$，$[\hat{E}, \hat{t}] = i\hbar$。如果$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$，我们说算符$\hat{A}$和$\hat{B}$是对易的，否则两者就是不对易的。对易式满足下面的重要恒等式：

$$\begin{aligned} [A, BC] &= [A, B]C + B[A, C] \\ [AB, C] &= A\,[B, C] + [A, C]\,B \end{aligned}$$

对易关系在量子力学有着非常重要的地位，是量子力学的基本假定，这个我们前面介绍过。需要指出的是对易式的结果与表象的选择无关，但是理解的时候必须选择某个表象，否则算符无意义。

从对易关系我们可以严格证明$Heisenberg$测不准关系。

Proof: 假定我们有$[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2] \neq 0$，可以证明

$$(\Delta\Omega_1)(\Delta\Omega_2) \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2]\rangle|$$

其中$\langle\Omega_1\rangle = \int \psi^* \hat{\Omega}_1 \psi d^3x$为在某个态$\psi$中的平均值，$\Delta\Omega = \sqrt{\langle(\hat{\Omega} - \langle\Omega\rangle)^2\rangle}$是力学量$\Omega$对应的算符$\hat{\Omega}$在态$\psi$中的均方根偏差。

证：令$\hat{A} = (\hat{\Omega}_1 - \langle\Omega_1\rangle)$，$\hat{B} = (\hat{\Omega}_2 - \langle\Omega_2\rangle)$，则

$$\begin{aligned} (\Delta\Omega_1)^2 &= \langle(\hat{\Omega} - \langle\Omega\rangle)^2\rangle = \langle\hat{A}^2\rangle = \int \psi^* \hat{A}^2 \psi d^3x \\ &= \int (\psi^* \hat{A})(\hat{A}\psi) d^3x = \int (\hat{A}\psi)^* (\hat{A}\psi) d^3x \equiv \|\hat{A}\psi\|^2 \end{aligned}$$

其中$\|\hat{A}\psi\|^2$是态$\hat{A}\psi$的模长。即

$$(\Delta\Omega_1) = \|\hat{A}\psi\|$$

同理，我们有

$$(\Delta\Omega_2) = \|\hat{B}\psi\|$$

又

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{\Omega}_1 - \langle\Omega_1\rangle, \hat{\Omega}_2 - \langle\Omega_2\rangle] = [\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2]$$

所以我们只要能够证明下式即可。

$$(\Delta\Omega_1)(\Delta\Omega_2) = \|\hat{A}\psi\|\|\hat{B}\psi\| \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2]\rangle| = \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|$$

即

$$\|\hat{A}\psi\| \cdot \|\hat{B}\psi\| \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|$$

由*Cauchy-Schwarz*不等式可知

$$|(\psi, \varphi)| \leq \|\psi\| \cdot \|\varphi\|$$

可见

$$\|\hat{A}\psi\| \cdot \|\hat{B}\psi\| \geq |(\hat{A}\psi, \hat{B}\psi)| = |\int(\hat{A}\psi)^*(\hat{B}\psi)d^3x| = |\int \psi^* \hat{A}\hat{B}\psi d^3x|$$

因为

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) + \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]_+ + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]$$

其中$[\hat{A}, \hat{B}]_+ \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$是两个算符的反对易关系，显然有下面的关系满足

$$\begin{aligned}
([\hat{A}, \hat{B}]_+)^+ &= (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+ + \hat{A}^+\hat{B}^+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]_+ \\
([\hat{A}, \hat{B}])^+ &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+ - \hat{A}^+\hat{B}^+ = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}]
\end{aligned}$$

即$[\hat{A}, \hat{B}]_+$是厄米不变的，而$[\hat{A}, \hat{B}]$是厄米反号的，得到

$$(\Delta\Omega_1)(\Delta\Omega_2) \geq |\int \psi^*(\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]_+ + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}])\psi d^3x|$$

取右边包含反对易关系的第一项为实的(原因是上面说到的厄米不变)，包含对易关系的第二项为纯虚的(厄米反号)，而因为对于任意实数，有

$$|a + ib| = \sqrt{|a|^2 + |b|^2}$$

所以得到

$$\begin{aligned}
(\Delta\Omega_1)(\Delta\Omega_2) &\geq |\int \psi^*(\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]_+ + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}])\psi d^3x| \\
&= \frac{1}{2}\{|\int \psi^*[\hat{A}, \hat{B}]_+\psi d^3x|^2 + |\int \psi^*[\hat{A}, \hat{B}]\psi d^3x|^2\}^{1/2} \\
&\geq \frac{1}{2}|\int \psi^*[\hat{A}, \hat{B}]\psi d^3x| \\
&= \frac{1}{2}|\int \psi^*[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2]\psi d^3x|
\end{aligned}$$

即

$$(\Delta\Omega_1)(\Delta\Omega_2) \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2]\rangle|$$

这个结果表明，只要两个算符不对易，在任何态中都不可能同时测得它们的准确值，本质原因是两者没有共同的本征态。它们的量子涨落(测得值的均方根偏差)应当满足上述不等式。这就是**广义的测不准原理**。具体到我们前面讲到的*Heisenberg*测不准关系，则有

$$\begin{aligned}
(\Delta x)(\Delta p) &\geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{x}, \hat{p}]\rangle| = \frac{\hbar}{2} \\
(\Delta E)(\Delta t) &\geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{E}, \hat{t}]\rangle| = \frac{\hbar}{2}
\end{aligned}$$

3.3 升降算符–一维谐振子的代数解

一维谐振子的**本征方程**: $\hat{H}\psi = E\psi$

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \frac{\hbar\omega}{2}[(\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p})^2 + (\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x})^2] \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}[-(\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\frac{\hbar d}{dx})^2 + (\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x})^2]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\xi &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x = \alpha x \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \\ \frac{d}{dx} &= \frac{d}{d\xi}\frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{d\xi} = \alpha\frac{d}{d\xi}\end{aligned}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}[-(\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hbar\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{d\xi})^2 + \xi^2] = \frac{\hbar\omega}{2}[\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2}]$$

定义**升降算符**

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + \frac{d}{d\xi}) \\ \hat{A}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \frac{d}{d\xi}) \\ \xi &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{A} + \hat{A}^+) \qquad \frac{d}{d\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{A} - \hat{A}^+)\end{aligned}$$

$$H = \frac{\hbar\omega}{4}[(\hat{A} + \hat{A}^+)^2 - (\hat{A} - \hat{A}^+)^2] = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{A}\hat{A}^+ + \hat{A}^+\hat{A})$$

现在我们证明**量子条件**$[\hat{A}, \hat{A}^+] = 1$

$$\begin{aligned}[\hat{A}, \hat{A}^+] &= \frac{1}{2}[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}, \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}] \\ &= \frac{1}{2}[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, -i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}] + \frac{1}{2}[i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}, \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}] \\ &= \frac{-i}{2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}([\hat{x}, \hat{p}] - [\hat{p}, \hat{x}]) \\ &= \frac{-i}{2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}2i\hbar \equiv 1\end{aligned}$$

即

$$\hat{A}\hat{A}^+ - \hat{A}^+\hat{A} = 1 \qquad \hat{A}\hat{A}^+ = \hat{A}^+\hat{A} + 1$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(2\hat{A}^+\hat{A} + 1) = \hbar\omega\hat{A}^+\hat{A} + \frac{\hbar\omega}{2}$$

定义

$$\hat{N} = \hat{A}^+\hat{A}$$

则

$$\hat{N}^+ = (\hat{A}^+\hat{A})^+ = \hat{A}^+\hat{A} = \hat{N}$$

又

$$\langle\hat{N}\rangle = (\psi, \hat{N}\psi) = (\psi, \hat{A}^+\hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \hat{A}\psi) \geq 0$$

所以$\hat{N}$是正定厄米算符，实际上是粒子数算符。

假定算符$\hat{N}$的本征方程为：$\hat{N}|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle$。又$[\hat{N},\hat{A}] = [\hat{A}^+\hat{A},\hat{A}] = -\hat{A}$，则

$$[\hat{N},\hat{A}]|\psi_n\rangle = \hat{N}\hat{A}|\psi_n\rangle - \hat{A}\hat{N}|\psi_n\rangle = \hat{N}\hat{A}|\psi_n\rangle - n\hat{A}|\psi_n\rangle = -\hat{A}|\psi_n\rangle.$$

也就是说：$\hat{N}\hat{A}|\psi_n\rangle = (n-1)\hat{A}|\psi_n\rangle$，即$\hat{A}|\psi_n\rangle$也是$\hat{N}$的本征态，对应的本征值为$(n-1)$。可见，从$\hat{N}$的某个本征态$|\psi_n\rangle$出发，逐次应用，可得到的一系列本征态$|\psi_n\rangle$,$\hat{A}|\psi_n\rangle$,$\hat{A}^2|\psi_n\rangle$,...，相应的$\hat{N}$的本征值分别为$n$,$n-1$,$n-2$,...。所以称$\hat{A}$为降算符。同样的道理，可以证明$\hat{N}\hat{A}^+|\psi_n\rangle = (n+1)\hat{A}|\psi_n\rangle$，即$\hat{A}^+$也是$\hat{A}$的本征态，相应的本征值为$(n+1$，所以称$\hat{A}^+$为升算符。

基态能量和本征波函数:

由于$\langle\hat{A}^+\hat{A}\rangle \geq 0$，可见基态–最小能量

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

这里我们再次看到基态能量不为零，静止的粒子是不存在的，存在零点能量。这一点从不确定关系可以看出

$$\begin{aligned}
\Delta x\Delta p &\geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p} \\
\Delta E &= \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2 = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar^2}{4}\frac{1}{(\Delta p)^2} \\
&= \frac{1}{2m}[(\Delta p - \frac{m\hbar\omega}{2}\frac{1}{\Delta p})^2 + m\hbar\omega] \geq \frac{1}{2}\hbar\omega
\end{aligned}$$

基态波函数$\psi(\xi)$：基态，这意味着

$$\hat{A}\psi_0(\xi) = 0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + \frac{d}{d\xi})\psi_0(\xi)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\psi_0(\xi)}{d\xi} &= -\xi\psi_0(\xi) \implies \frac{d\psi_0(\xi)}{\psi_0(\xi)} = -\xi d\xi \\
\psi_0(\xi) &= C_0 e^{-\xi^2/2}
\end{aligned}$$

由归一化条件，注意：是x的积分，不是ξ的积分，两者不同($\int e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}$)：

$$\int \psi_0^*(x)\psi_0(x)dx = 1 \qquad \implies C_0 = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}$$

递推关系–激发态:

能量本征值(能量的量子化)

$$\hat{H} = \hat{N}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{2} \implies E_n = n\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{2} \quad (n = 0, 1, 2, ...)$$

递推关系

$$\hat{A}^+\psi_n(\xi) \longrightarrow \psi_{n+1}(\xi)$$

$$\begin{aligned}
\hat{A}^+\psi_0(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \frac{d}{d\xi})\psi_0(\xi) = \frac{C_0}{\sqrt{2}}(\xi - \frac{d}{d\xi})e^{-\xi^2/2} \\
&= \frac{c_0}{\sqrt{2}}2\xi e^{-\xi^2/2} = C_0(\frac{1}{\sqrt{2}})(2\xi)e^{-\xi^2/2} \\
&= C_0(\frac{1}{\sqrt{2}})H_1(\xi)e^{-\xi^2/2} \qquad \text{with } H_1(\xi) = 2\xi
\end{aligned}$$

所以

$$\psi_1(\xi) = C_1 H_1(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

根据归一条件，我们有

$$\begin{aligned}
1 &= \int \psi_1^*(x)\psi_1(x)dx = \frac{1}{\alpha}\int \psi_1^*(\xi)\psi_1(\xi)d\xi = \frac{C_1^2}{\alpha}\int (H_1(\xi)e^{-\xi^2/2})^*(H_1(\xi)e^{-\xi^2/2})d\xi \\
&= \frac{C_1^2}{\alpha}\frac{2}{C_0^2}\int (\hat{A}^+\psi_0(\xi))^*(\hat{A}^+\psi_0(\xi))d\xi = \frac{C_1^2}{\alpha}\frac{2}{C_0^2}\int \psi_0^*(\xi)\hat{A}\hat{A}^+\psi_0(\xi)d\xi \\
&= \frac{C_1^2}{\alpha}\frac{2}{C_0^2}\int \psi_0^*(\xi)(\hat{A}^+\hat{A}+1)\psi_0(\xi)d\xi = \frac{C_1^2}{\alpha}\frac{2}{C_0^2}(1)\int \psi_0^*(\xi)\psi_0(\xi)d\xi = C_1^2\frac{2}{C_0^2}(1)\int \psi_0^*(x)\psi_0(x)dx
\end{aligned}$$

$$C_1^2 = \frac{C_0^2}{2} \Longrightarrow C_1 = \frac{C_0}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{aligned}
(\hat{A}^+)^2\psi_0(\xi) &= \hat{A}^+\psi_1(\xi) = C_0(\frac{1}{\sqrt{2}})\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \frac{d}{d\xi})[(2\xi)e^{-\xi^2/2}] \\
&= C_0(\frac{1}{\sqrt{2}})^2[2(2\xi^2-1)]e^{-\xi^2/2} \\
&= C_0(\frac{1}{\sqrt{2}})^2 H_2(\xi)e^{-\xi^2/2} \quad \text{with } H_2(\xi) = 2(2\xi^2-1)
\end{aligned}$$

所以

$$\psi_2(\xi) = C_2 H_2(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

$$(\hat{A}^+)^n\psi_0(\xi) = C_0(\frac{1}{\sqrt{2}})^n H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

即

$$\psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

其中是$H_n(\xi)$是n阶的厄米($Hermite$)多项式。

$$e^{-\xi^2/2}H_n(\xi) = (\xi - \frac{d}{d\xi})^n e^{-\xi^2/2}$$

正交归一性

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi)H_m(\xi) = \delta_{n,m}2^n n!\sqrt{\pi}$$

递推关系**1**:

$$\begin{aligned}
\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} &= 2nH_{n-1}(\xi) \\
2\xi H_n(\xi) &= H_{n+1}(\xi) + 2nH_{n-1}
\end{aligned}$$

递推关系**2**:

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0$$

波函数

$$\psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} = c_n H_n(x)e^{-\alpha^2x^2/2}$$

归一化条件

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\psi_n^*(x)\psi_m(x) = c_n^2\delta_{n,m}2^n n!\sqrt{\pi}/\alpha \\
c_n &= (\frac{1}{2^n n!})^{1/2}(\frac{m\omega}{\hbar\pi})^{1/4} = (\frac{1}{2^n n!})^{1/2}C_0
\end{aligned}$$

其中c_n，和H_n均已经知道。

$$\begin{aligned}
\hat{A}\psi_n(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+\frac{d}{d\xi})\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+\frac{d}{d\xi})C_nH_n(\xi)e^{-\xi^2/2} \\
&= \frac{C_n}{\sqrt{2}}(\xi H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} + \frac{dH_n(\xi)}{d\xi}e^{-\xi^2/2} + H_n(\xi)\frac{de^{-\xi^2/2}}{d\xi}) \\
&= \frac{C_n}{\sqrt{2}}(\xi H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} + \frac{dH_n(\xi)}{d\xi}e^{-\xi^2/2} - \xi H_n(\xi)\frac{de^{-\xi^2/2}}{d\xi}e^{-\xi^2/2}) \\
&= \frac{C_n}{\sqrt{2}}\frac{dH_n(\xi)}{d\xi}e^{-\xi^2/2} = \frac{C_n}{\sqrt{2}}2nH_{n-1}(\xi)e^{-\xi^2/2} \\
&= \sqrt{n}\frac{C_n}{C_{n-1}}\sqrt{2n}\psi_{n-1}(\xi)
\end{aligned}$$

可见

$$C_n = C_{n-1}\frac{1}{\sqrt{2n}}$$

同理得到，递推关系**3**

$$\begin{aligned}
\hat{A}\psi_n(\xi) &= \sqrt{n}\psi_{n-1}(\xi) \\
\hat{A}^+\psi_n(\xi) &= \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(\xi) \\
\hat{A}^+\hat{A}\psi_n(\xi) &= n\psi_n(\xi)
\end{aligned}$$

这正是说明$\hat{A}^+\hat{A} = \hat{N}$，是粒子数算符。

一维谐振子的图像：见上一章的图。基态，DOS (*density of state*)集中于0点附近；激发态，DOS在边界附近比较大。

3.4 量子力学中的常用算符

1. 线性算符

凡满足下述条件的算符$\hat{A}$，称为线性算符

$$\hat{A}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = a_1\hat{A}\psi_1 + a_2\hat{A}\psi_2$$

其中，ψ_1和ψ_2是任意两个波函数，a_1和a_2是任意的复常数。力学量算符一定是线性算符，原因是要满足态的线性叠加原理。但是，并否所有算符都是线性的，如时间反演算符。

2. 逆算符

线性算符$\hat{A}$，$\hat{B}$，若有以下关系成立，

$$\hat{A}\psi = \psi' \qquad \hat{B}\psi' = \psi$$

则$\hat{A}$和$\hat{B}$互为逆算符

$$\hat{B}=\hat{A}^{-1} \qquad \hat{A}=\hat{B}^{-1}$$

由此可以推出

$$\begin{aligned}
\hat{A}\hat{A}^{-1} &= \hat{A}^{-1}\hat{A}=\hat{I} \qquad (\hat{A}^{-1})^{-1}=\hat{A} \\
(\lambda\hat{A})^{-1} &= \frac{1}{\lambda}\hat{A}^{-1} \qquad (\hat{A}_1\hat{A}_2)^{-1}=\hat{A}_2^{-1}\hat{A}_1^{-1}
\end{aligned}$$

其中$\hat{I}$为单位算符。

3. 算符的复共轭，转置以及厄米共轭

所谓算符的复共轭$\hat{A}^*$是指把$\hat{A}$的表示式中所有的复量换成共轭复量，所以它是与表象相关的。如在坐标表象中，$\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Longrightarrow\hat{p}_x^*=i\hbar\frac{\partial}{\partial x}=-\hat{p}_x$。

算符$\hat{A}$的转置$\hat{A}^T$满足

$$\begin{aligned}
(\psi,\hat{A}^T\varphi) &= (\varphi^*,\hat{A}\psi^*) \\
\int d\tau\psi^*\hat{A}^T\varphi &= \int d\tau\varphi\hat{A}\psi^*
\end{aligned}$$

如，可以证明在坐标表象中有$\hat{p}_x^T=-\hat{p}_x$成立。可以类比矩阵的运算，转置矩阵。所以有

$$(\hat{A}\hat{B})^T=\hat{B}^T\hat{A}^T$$

实际上以后我们会讲到波函数、算符的矩阵表示，这里先提一下，作为了解。

$$(c_1^*,c_2^*,...,c_n^*)\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & ... & A_{1n} \\ A_{21} & & & \\ ... & & & \\ A_{n1} & & & A_{nn}\end{pmatrix}^T(d_1,d_2,...,d_n)^T=(d_1,d_2,...,d_n)\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & ... & A_{1n} \\ A_{21} & & & \\ ... & & & \\ A_{n1} & & & A_{nn}\end{pmatrix}(c_1^*,c_2^*,...,c_n^*)^T$$

算符$\hat{A}$的厄米共轭$\hat{A}^+$定义为

$$(\psi,\hat{A}^+\varphi)=(\hat{A}\psi,\varphi)$$

实际上这里包含了复共轭+转置，即

$$(\psi,\hat{A}^+\varphi)=(\varphi,\hat{A}\psi)^*\longrightarrow \qquad \hat{A}^+=(\hat{A}^*)^T$$

厄米共轭算符满足下列关系

$$\begin{aligned}
(\hat{A}^+)^+ &= \hat{A} \qquad (\hat{A}+\hat{B})^+=\hat{A}^++\hat{B}^+ \\
(\lambda\hat{A})^+ &= \lambda^*\hat{A}^+ \qquad (\hat{A}\hat{B})^+=\hat{B}^+\hat{A}^+
\end{aligned}$$

当$\hat{A}^+=\hat{A}$时称$\hat{A}$为自共轭算符，或称$\hat{A}$为**厄米算符**。即

$$(\psi,\hat{A}\varphi)=(\hat{A}\psi,\varphi)$$

这是量子力学中最重要的一个算符，有以下几点性质：

1) 厄米算符的本征值都是实数

$$\begin{aligned}\hat{A}\psi &= \lambda\psi \\ (\psi, \lambda\psi) &= \lambda(\psi, \psi) = (\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi) = (\lambda\psi, \psi) = \lambda^*(\psi, \psi)\end{aligned}$$

即$\lambda = \lambda^*$，所以本征值必为实数。这实际上是与下面讲到的表示力学量(可测量量)的算符都是厄米算符是直接连在一起的，能够观测，必为实数。

2) 厄米算符相应于不同本征值的本征矢量必正交

$$\hat{A}\psi_1 = \lambda_1\psi_1 \quad \hat{A}\psi_2 = \lambda_2\psi_2$$

$$(\psi_2, \hat{A}\psi_1) = \lambda_1(\psi_2, \psi_1)$$

$$(\hat{A}\psi_2, \psi_1) = \lambda_2^*(\psi_2, \psi_1) = \lambda_2(\psi_2, \psi_1)$$

故

$$(\lambda_1 - \lambda_2)(\psi_2, \psi_1) = 0$$

因为$\lambda_1 \neq \lambda_2$，所以只能

$$(\psi_2, \psi_1) \equiv 0$$

这就证明了不同本征值的本征矢量相互之间是正交的。

3) 表示力学量的算符都是线性厄米算符。厄米性是可观测的保证，线性性是线性叠加原理的要求。但是并否所有的算符都是厄米算符，如时间反演算符。

4. 幺正算符

幺正算符的定义是：对任意两个波函数$\varphi(\vec{x})$、$\psi(\vec{x})$，算符$\hat{U}$满足下式

$$(\hat{U}\varphi, \hat{U}\psi) = (\varphi, \psi)$$

而且$\hat{U}$算符有逆算符$\hat{U}^{-1}$存在，使得$\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}\hat{U} = I$，称这个$\hat{U}$为幺正算符。由于任一算符的厄米算符是如下定义的：对任意φ、ψ，$\hat{A}$的厄米算符$\hat{A}^+$被定义为

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^+\varphi, \psi)$$

因此，上面的幺正算符$\hat{U}$的另一个等价的定义是：如果$\hat{U}$是幺正的，其充要条件是

$$\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = I$$

或者说

$$\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$$

幺正算符的性质: 1) 幺正算符的逆算符是幺正算符；2) 两个幺正算符的乘积算符仍是幺正算符。

5. 算符的函数

如果一个函数$F(x)$，其各阶导数均存在，幂级数收敛，

$$F(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{F^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

则可定义算符$\hat{A}$的函数$F(\hat{A})$为

$$F(\hat{A})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{F^{(n)}(0)}{n!}\hat{A}^n$$

如$F(x)=e^{\alpha x}$，可定义

$$F(\frac{d}{dx})=e^{\alpha\frac{d}{dx}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}(\frac{d}{dx})^n$$

3.5 力学量用算符表示

1. 力学量F在某一状态下的期望值

$$\langle F\rangle=(\psi,\hat{F}\psi)=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle$$

2. 力学量的本征值和本征态

假定系统处于某个量子态ϕ，当测量力学量F时，一般情况下，由于态的叠加原理，每次的测量值可能出现不同的结果，各有一定的几率被测量到。对于多次测量完全相同的体系(系综)得到的值会趋于一个确定的值–平均值。而每次测量的结果则是围绕平均值有一个涨落，定义为

$$\langle(\Delta F)^2\rangle=\langle(\hat{F}-\langle F\rangle)^2\rangle=(\phi,(\hat{F}-\langle F\rangle)^2\phi)$$

由于力学量算符是厄米算符，而平均值是实数，所以$(\hat{F}-\langle F\rangle)$也是厄米算符，则

$$\langle(\Delta F)^2\rangle=((\hat{F}-\langle F\rangle)\phi,(\hat{F}-\langle F\rangle)\phi)\geq 0$$

特殊情况下，$\langle(\Delta F)^2\rangle=0$，即测量结果是唯一确定的，称这种状态为力学量$F$的本征态，即满足

$$(\hat{F}-\langle F\rangle)\phi=0$$

方面起见，$\langle F\rangle$改写成常数λ，并记这种特殊状态为ϕ_λ，则

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

我们称λ为$\hat{F}$的一个本征值，ϕ_λ则是相应的本征态。上式也就是力学量算符$\hat{F}$的本征方程。

3. 力学量在体系某一状态可能取值的几率分布

应该注意的是一个力学量算符的本征值一般不止一个，相应的本征态也不止一个，分别标记为λ_n和ϕ_{λ_n}。所有的可能本征态共同构建了一个完备正交的基矢组$\{\phi_{\lambda_n}\}$，这是我们前面讲Hilbert空间的时候提到的。一个任意的态由这些基矢的线性组合构成，即

$$\psi(x,t)=\sum_n C_n(t)\phi_{\lambda_n}(x)$$

其中系数$C_n(t)$由下式决定

$$C_n(t) = (\phi_{\lambda_n}(x), \psi(x,t)) = \int \phi^*_{\lambda_n}(x)\psi(x,t)d\tau$$

因为

$$1 = (\psi(x,t), \psi(x,t)) = \sum_{nm} C_n(t)C^*_m(t)(\phi_{\lambda_m}(x), \phi_{\lambda_n}(x)) = \sum_n |C_n(t)|^2$$

表明了总几率一定是1。又

$$\begin{aligned}
\langle F \rangle &= (\psi(x,t), \hat{F}\psi(x,t)) = \sum_{nm} C_n(t)C^*_m(t)(\phi_{\lambda_m}(x), \hat{F}\phi_{\lambda_n}(x)) \\
&= \sum_{nm} C_n(t)C^*_m(t)\lambda_n(\phi_{\lambda_m}(x), \phi_{\lambda_n}(x)) \\
&= \sum_n \lambda_n |C_n(t)|^2
\end{aligned}$$

因此，$|C_n(t)|^2$实际代表了测量到各个本征值的几率。

综合起来，有以下以下几点关于力学量的算符表示、本征值和本征函数

1) 力学量的期望值

$$\bar{A} = \langle A \rangle = (\psi, \hat{A}\psi)/(\psi,\psi) = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle/\langle\psi|\psi\rangle$$

2) 力学量的所有本征值给出它所有可能的取值

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$$

3)体系的任意一个微观状态的归一化波函数Φ都可以由力学量的$\hat{A}$本征函数集$\{\psi_n\}$展开，展开系数C_n给出了状态所有取值的几率幅。

$$\begin{aligned}
\Phi &= \sum_n C_n(t)\psi_n(x) \\
C_n &= (\psi_n(x), \Phi(x,t))
\end{aligned}$$

Example：一维无限深势阱，粒子的波函数是$\Phi(x) = A\cos\frac{\pi x}{2a} + A\sin\frac{\pi x}{a} + \frac{A}{4}\cos\frac{3\pi x}{2a}$，$x \in [-a, a]$，求能量的可能取值和相应的几率。

$$V(x) = \{ \begin{array}{cc} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| > a \end{array} .$$

解：我们前面讲过$[0,a]$的一维无限深势阱的波函数是$A'\sin\frac{n\pi x}{a}$，因此对于现在对称的情况，波函数可以表示为

$$\psi\prime(x) = \{ \begin{array}{cc} A'\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a) & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{array} .$$

可见原来没有确定宇称的波函数变成了有确定的宇称，$n = 0, 2, 4, ...$，为偶函数，$n = 1, 3, 5, ...$，为奇函数。相应的能量本征值为

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \qquad n = 1,\ 2,\ 3,\ ...$$

则现在的波函数可以写成

$$\Phi = A\psi'_1 - A\psi'_2 + \frac{A}{4}\psi'_3$$

是基态、第一激发态、第二激发态的线性组合。根据前面讲得内容知道，“展开系数C_n给出了状态所取值的几率幅”，可见粒子处于基态ψ_1'，即取能量值为$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$的几率为

$$P_1 = \frac{|A|^2}{|A|^2 + |A|^2 + |\frac{A}{4}|^2} = \frac{16}{33}$$

同样，处于第一激发态，$E_2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$的几率为$\frac{16}{33}$，处于第二激发态，$E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$的几率为$\frac{1}{33}$。

3.6 两个力学量的共同本征函数

两个力学量算符相互对易是它们具有共同本征函数的充要条件。

1. 如果两个力学量算符有共同的本征函数，则它们必相互对易。

设力学量算符$\hat{F}$，$\hat{G}$有共同的本征函数$\{\phi_n\}$，则有

$$\hat{F}\phi_n = f_n\phi_n \qquad \hat{G}\phi_n = g_n\phi_n$$

因此

$$[\hat{F}, \hat{G}]\phi_n = (\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})\phi_n = (f_n g_n - g_n f_n)\phi_n \equiv 0$$

即$[\hat{F}, \hat{G}] = 0$，$\hat{F}$，$\hat{G}$必相互对易。

进一步假定一个任意的波函数可以表示为$\psi = \sum_n c_n\phi_n$，其中$\{\phi_n\}$是一完备的正交基矢组，此时如果$[\hat{F}, \hat{G}] = 0$，严格讲应该是作用在任意波函数上，即$[\hat{F}, \hat{G}]\psi = \sum_n [\hat{F}, \hat{G}]\phi_n = 0$。

2. 假定有正交完备的基矢组ϕ_n是$\hat{F}$的本征函数，即有$\hat{F}\phi_n = f_n\phi_n$，如果$[\hat{F}, \hat{G}] = 0$，有两种可能：

1) ϕ_n无简并，则

$$\hat{F}\hat{G}\phi_n = \hat{G}\hat{F}\phi_n = f_n\hat{G}\phi_n$$

可见新的波函数$\hat{G}\phi_n$仍然是$\hat{F}$的本征函数，又因为无简并，故$\hat{G}\phi_n = g_n\phi_n(\hat{G}\phi_n \to c_n\phi_n \quad c_n \to g_n)$。

2) ϕ_n简并，L重简并

$$\hat{F}\phi_{nj} = f_n\phi_{nj} \quad j = 1, 2, 3, ..., \ L$$

假定ϕ_{nj}已经正交归一(必可以做到，见前面的论述)。一般情况下，ϕ_{nj}并不一定就是$\hat{G}$的本征态，但因为

$$\hat{F}(\hat{G}\phi_{nj}) = \hat{G}\hat{F}\phi_{nj} = f_n\hat{G}\phi_{nj}$$

即$\hat{G}\phi_{nj}$仍然是$\hat{F}$属于本征值f_n的本征函数，因此

$$\hat{G}\phi_{nj} = \sum_i g_{ij}\phi_{ni}$$

其中$g_{ij} = (\phi_{ni}, \hat{G}\phi_{nj})$。按照前面的说法，我们可以构建

$$\varphi = \sum_j c_j\phi_{nj}$$

显然，φ是$\hat{F}$属于本征值f_n的本征态，问题是这个新构建的波函数φ是否也是$\hat{G}$的本征态？即

$$\hat{G}\varphi = g\prime\varphi$$

下面证明：因

$$\begin{aligned}\hat{G}\varphi &= \sum_j c_j \hat{G}\phi_{nj} = \sum_{ij} c_j g_{ij}\phi_{ni} \\ g\prime\varphi &= g'\sum_i c_i\phi_{ni}\end{aligned}$$

即如果

$$g'c_i = \sum_j g_{ij}c_j$$

那么就可以证明了，即要求

$$\sum_{j=1}^{L}(g_{ij} - g'\delta_{ij})c_j = 0$$

L个未知数，L个方程，c_j是未知数，线性齐次方程，方程有解的条件是系数行列式

$$\det|g_{ij} - g'\delta_{ij}| = 0$$

因为$\hat{G}^+ = \hat{G}$，即$g_{ij} = g_{ji}^*$，所以上述方程有L个实根，假定无重根，假定为g_λ，代回线性方程组，得到对应的一组解$c_{\lambda j}$，就得到相应的波函数为$\phi_{n\lambda}$

$$\phi_{n\lambda} = \sum_{j=1}^{L} c_{\lambda j}\phi_{nj}$$

这里的$\phi_{n\beta}$就是力学量$\hat{F}$和$\hat{G}$的共同本征函数。

$$\begin{aligned}\hat{F}\phi_{n\lambda} &= f_n\phi_{n\lambda} \\ \hat{G}\phi_{n\lambda} &= g_\lambda\phi_{n\lambda}\end{aligned}$$

也就是说，如果$[\hat{F},\hat{G}] = 0$，则可以找到他们的共同本征函数。

Example: 一个二维的平面波，$\varphi(\vec{p}) = A\exp(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}) = A\exp(\frac{i}{\hbar}p_x x)\exp(\frac{i}{\hbar}p_y y)$，显然有$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$，$\varphi(\vec{p})$就是它们的共同本征函数(动量表象)。从另外一个角度讲，我们必须要用$\hat{p}_x$和$\hat{p}_y$共同的本征函数$\varphi(p_x, p_y)$才能要完整地描述二维的平面波。因为二维平面波有两个自由度，所以必须用两个彼此独立的力学量算符才能完整的描述它的状态。

3.7 力学量完全集

所谓力学量完全集是指：设有一组彼此独立又相互对易的厄米算符$\hat{A}(\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3, ...)$，它们的共同本征函数记为$\psi_\alpha$，$\alpha$是一组量子数的笼统记号。如果给定$\alpha$之后就能够确定体系的一个可能状态，则称$(\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3, ...)$构成体系的一组力学量完全集。这里有弄明白几点：

1. 为什么需要一组力学量完全集合？

从前面的例子可以看出，一个系统可能有多个自由度，要完整地描述的状态，我们需要多个力学量，每个自由度需要一个对应的力学量描述。

2. 一组力学量完全集怎样描述系统的状态？

我们以二维无限深方势阱来作为例子：其波函数为$\psi_{n_x n_y}(x,y) = \frac{2}{\sqrt{ab}}\sin\frac{n_x\pi x}{a}\sin\frac{n_y\pi y}{b}$，对应的能量为$E_{n_x n_y} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2})$。对于二维运动，粒子有两个自由度，所以需要两个力学量。我们选择了两个力学量$\hat{x}$和$\hat{y}$来描述此系统，每个力学量分别对应了一个量子数n_x和n_y。

可见每一个力学量$\hat{A}_i$对应一个量子数n_i，或者说每个量子数n_i对应了一个自由度，一组力学量完全集$(\hat{A}_1,\hat{A}_2,\hat{A}_3,...)$对应的量子数组$(n_1,n_2,n_3,...)$描述了每一个自由度，即确定了系统的一个可能状态。

从这个角度讲，要描述一个量子体系，首先我们应该确定该系统有多少个自由度，每一个自由度选择一个相应的力学量来描述，每一个力学量对应了一个量子数，一组量子数确定了系统的状态。例如同样对于一个二维体系，如果粒子还具有自旋(如电子)，假定只考虑自旋朝上或者自旋朝下的，那么就需要三个自由度，就需要新增一个力学量$\hat{S}_z$，对应的量子数就是S_z，波函数就变成$\psi_{n_x n_y +}(x,y)$和$\psi_{n_x n_y -}(x,y)$。

3. 力学量完全集的特点：

1) 力学量完全集的共同本征函数系构成一个$Hilbert$空间；

2) 力学量完全集所包含的力学量数目等于量子数组所包含的量子数的数目，即体系的自由度；

3) 力学量完全集中所有的力学量可以同时测量。

3.8 几个基本的力学量算符

1. 坐标算符$\hat{\vec{x}}$，在坐标表象里就是$\vec{x}$

$$(\vec{x}-\vec{x}_0)\delta(\vec{x}-\vec{x}_0) = 0$$
$$\hat{\vec{x}}\delta(\vec{x}-\vec{x}_0) = \vec{x}\delta(\vec{x}-\vec{x}_0)$$

正交归一性

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(\vec{x}-\vec{x}_0)\delta(\vec{x}-\vec{x}_0')d\vec{x} &= \delta(\vec{x}_0-\vec{x}_0')\\ \int_{-\infty}^{\infty}\delta(\vec{x}-\vec{x}_0)d\vec{x} &= 1\end{aligned}$$

2. 动量算符$\hat{\vec{p}}$，在坐标表象中$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}_x$

$$\hat{p}_x\psi(x) = p_x\psi(x) \implies \psi_{p_x}(x) = c\exp(ip_x x/\hbar)$$

发现

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_{p_x}(x)|^2 dx = \infty$$

由于我们知道

$$\delta(x-x_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ik_x(x-x_0)}dk_x$$

因此

$$\delta(p_x'-p_x) = 2\pi\hbar\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i(p_x'-p_x)x/\hbar}dx$$

所以

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{p'_x}^*(x)\psi_{p_x}(x)dx=|c|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i(p'_x-p_x)x/\hbar}dx=2\pi\hbar|c|^2\delta(p'_x-p_x)$$

可见$c=1/\sqrt{2\pi\hbar}$，

$$\psi_{p_x}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(ip_xx/\hbar)$$

这两个算符当然也可以放到动量表象中来讨论。

3. 角动量算符

1) 角动量算符的球坐标表示

经典的角动量定义为$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$，量子化(一次量子化)变成角动量算符

$$\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}=\begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix}$$

可见

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

变换到球坐标系，

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

因为

$$\cos\theta=z/r\quad\Longrightarrow\quad -\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial x}=\frac{\partial(\frac{z}{r})}{\partial x}\quad\Longrightarrow\quad\frac{\partial\theta}{\partial x}=-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial x}(\frac{z}{r})$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\theta}{\partial x}&=\frac{xz}{r^3\sin\theta}=\frac{r^2\sin\theta\cos\varphi\cos\theta}{r^3\sin\theta}=\frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\\ \frac{\partial\theta}{\partial y}&=\frac{yz}{r^3\sin\theta}=\frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi\\ \frac{\partial\theta}{\partial z}&=-\frac{\sin\theta}{r}\end{aligned}$$

又因为

$$\tan\varphi=\frac{y}{x}\;\Longrightarrow\frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}(\frac{y}{x})$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\varphi}{\partial x}&=-\cos^2\varphi\frac{y}{x^2}=-\cos^2\varphi\frac{\sin\theta\sin\varphi}{r\sin^2\theta\cos^2\varphi}=-\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\\ \frac{\partial\varphi}{\partial y}&=\cos^2\varphi\frac{1}{x}=\cos^2\varphi\frac{1}{r\sin\theta\cos\varphi}=\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\\ \frac{\partial\varphi}{\partial z}&=0\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}\hat{L}_x&=-i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})=-i\hbar[y(\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial z})-z(\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial y})]\\ &=-i\hbar[\frac{\partial}{\partial\theta}(y\frac{\partial\theta}{\partial z}-z\frac{\partial\theta}{\partial y})+\frac{\partial}{\partial\varphi}(y\frac{\partial\varphi}{\partial z}-z\frac{\partial\varphi}{\partial y})]\\ &=-i\hbar[\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}]\end{aligned}$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) = -i\hbar[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}]$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \\
&= -\hbar^2[(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})^2 + (\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})^2 + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}] \\
&= -\hbar^2\left[\begin{array}{c}
\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \cot^2\theta(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} + \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}) + \\
(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}) - \\
(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta})
\end{array}\right] \\
&= -\hbar^2\left[\begin{array}{c}
\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \cot^2\theta(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} + \sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}) + \\
(\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}\cot\theta + \cot\theta\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}) - \\
(\cos\varphi\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}\cot\theta - \cot\theta\sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial\theta})
\end{array}\right] \\
&= -\hbar^2[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}] \\
&= -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]
\end{aligned}$$

2) $(\hat{L}^2, \hat{L}_z)$的共同本征函数–球谐函数

对于这样一个系统，显然有两个自由度θ和φ，所以构建力学量完全集需要两个力学量，两个量子数。显然我们可以证明

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] = ([y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z]) \\
&= -\hbar^2(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) = i\hbar\hat{L}_z
\end{aligned}$$

同理得到

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

一般可以写成

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i\hbar\hat{L}_\gamma\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$$

可见$\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$之间彼此之间不对易，没有共同的本征函数，不能构建力学量完全集。但是容易证明

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_{x,y,z}] = 0$$

$$\begin{aligned}
[\hat{L}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] \\
&= \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z \\
&= i\hbar(-\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_z) \equiv 0
\end{aligned}$$

同理有

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

也就是说$\hat{L}^2$和$\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$是对易的，可以有共同的本征函数，由此建立力学量完全集。不失一般性，我们取$(\hat{L}^2, \hat{L}_z)$的共同本征函数–球谐函数作为它们的共同本征函数。(当然也可以取$(\hat{L}^2, \hat{L}_x)$或者$(\hat{L}^2, \hat{L}_y)$)，即由$(\hat{L}^2, \hat{L}_z)$构成力学量完全集，两个量子数分别写为l，m，以此描述两个自由度θ和φ。

单独考虑角动量分量$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$的本征函数和本征值，显然本征方程表示为

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(\varphi) = l_z\psi(\varphi)$$

因此得到

$$\psi(\varphi) = C\exp(il_z\varphi/\hbar)$$

当体系旋转一周，即$\varphi \to \varphi + 2\pi$，体系回到空间原位置。同时作为力学量算符，$\hat{L}_z$必须是厄米的，为此取周期边界条件，即$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$，因此给出

$$l_z = m\hbar \quad\quad m = 0, \pm1, \pm2, ...$$

此即算符$\hat{L}_z$的本征值，相应的量子数为m，对应的归一化本征函数取为

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

现在假定$(\hat{L}^2, \hat{L}_z)$的共同本征函数为$Y(\theta, \varphi)$，因为$\hat{L}_z$的本征函数不包含θ，所以$Y(\theta, \varphi)$可以作变量分量，令

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\psi_m(\varphi)$$

代入$\hat{L}^2$的本征方程有

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = \lambda\hbar^2 Y(\theta, \varphi)$$

$$-\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]\Theta(\theta)\psi_m(\varphi) = \lambda\hbar^2\Theta(\theta)\psi_m(\varphi)$$

即

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\Theta(\theta)) + (\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta})\Theta(\theta) = 0$$

其中$\lambda\hbar^2$是$\hat{L}^2$的本征值，λ正是我们要确定的，$\theta \in [0, \pi]$。书上有如何得到本征值和本征函数，我们先给结果

$$\lambda = l(l+1) \quad\quad l = 0, 1, 2, ...$$

并且要求

$$|m| \le l$$

这里l正是$\hat{L}^2$的量子数。相应的本征函数为

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m\sqrt{\frac{(2l+1)}{2}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)$$

其中$P_l^m(\cos\theta)$是连带*Legendre*多项式。因此的共同本征函数为

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

Y_{lm}称为球谐函数，满足

$$
\begin{aligned}
\hat{L}^2 Y_{lm} &= l(l+1)\hbar^2 Y_{lm} \qquad l=0,1,2,...\\
\hat{L}_z Y_{lm} &= m\hbar Y_{lm} \qquad\qquad m=-l,-l+1,...,l-1,l
\end{aligned}
$$
$$
\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y^*_{lm}(\theta,\varphi) Y_{l'm'}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}
$$

所以$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的本征值都是量子化的，l称为轨道角动量量子数，m为磁量子数。从上面的结果可以看出，对于给定的l，共有$(2l+1)$个简并态。

3) 升降算符

类似于前面讲一维谐振子的办法，我们引进角动量的升降算符$\hat{L}^+$和$\hat{L}^-$，分别定义为

$$
\hat{L}^+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \qquad \hat{L}^- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y
$$

所以

$$
\hat{L}_x = \frac{\hat{L}^+ + \hat{L}^-}{2} \qquad \hat{L}_y = \frac{\hat{L}^+ - \hat{L}^-}{2i}
$$

则可以有下列关系

$$
[\hat{L}^+, \hat{L}^-] = 2\hbar\hat{L}_z \qquad [\hat{L}^\pm, \hat{L}_z] = \mp\hbar\hat{L}_z \qquad [\hat{L}^\pm, \hat{L}^2] = 0
$$
$$
\left[\hat{L}^\pm, \hat{L}_x\right] = \left[\pm i\hat{L}_y, \hat{L}_x\right] = \pm\hbar\hat{L}_z \qquad \left[\hat{L}^\pm, \hat{L}_y\right] = \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z
$$

可以证明Y_{lm}也是$\hat{L}^+\hat{L}^-(\hat{L}^-\hat{L}^+)$的本征函数

$$
\begin{aligned}
\hat{L}^2 &= [\hat{L}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{L}^+\hat{L}^- + \hat{L}^-\hat{L}^+)]\\
&= \hat{L}^+\hat{L}^- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{L}^+\hat{L}^- Y_{lm} &= (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z) Y_{lm} = [l(l+1) - m(m-1)]\hbar^2 Y_{lm}\\
\hat{L}^-\hat{L}^+ Y_{lm} &= (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z) Y_{lm} = [l(l+1) - m(m+1)]\hbar^2 Y_{lm}
\end{aligned}
$$

可以推断出$\hat{L}^+$和$\hat{L}^-$的作用应该是只改变量子数m，与前面讲一维谐振子时升降算符的作用对比，可以得到

$$
\hat{L}^\pm Y_{lm} = \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\hbar Y_{l\ m\pm 1}
$$

3.9 量子力学的矩阵表示和表象变换

我们知道量子力学中的算符都是在某个基矢空间的表示，选择一组力学量完全集$\hat{F}$，对应的共同本征态为ψ_n，其中n代表一组完备的量子数，$\{\psi_n\}$构成完备的$Hilbert$空间基矢，即$\hat{F} \to \{\psi_n\}$，任意的波函数都是基矢的线性组合。

1. 量子态和算符的矩阵表示

1). 量子态的矩阵表示

以一维量子力学的坐标表象和动量表象为例。假定选择力学量$\hat{x}$作为力学量完全集(注意：因为只有一个自由度，所以选择一个力学量就可以构成力学量完全集了)，对应的基矢为$\{\psi(x,t)\}$，也就是说选择了坐标表象。任意的态(态矢)或者波函数$\psi(x,t)$可以表示为

$$\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}dx'\psi(x',t)\delta(x-x')=\int_{-\infty}^{\infty}dx'\psi(x',t)c(x')$$

上述结果表示任意态$\psi(x,t)$可以展开成完备基矢$\{\psi(x,t)\}$的线性组合(连续谱变为积分)，在自己的表象中，显然展开系数为$c(x')=\delta(x-x')$。即

$$c(x')=\delta(x-x')=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x',t)\psi(x,t)dx=(\psi(x',t),\psi(x,t))$$

选择力学量$\hat{p}$作为力学量完全集，设基矢为$\{\phi(p,t)\}$，即选择了动量表象。按照前面讲过的$Fourier$变换知道

$$\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}dp\phi(p,t)\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{-ipx/\hbar}=\int_{-\infty}^{\infty}dp\phi(p,t)c(p)$$

也就是说，任意态$\psi(x,t)$可以展开成完备基矢$\{\phi(p,t)\}$的线性组合(连续谱变为积分)，展开系数

$$c(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{-ipx/\hbar}=\int_{-\infty}^{\infty}dx\phi^*(p,t)\psi(x,t)=(\phi(p,t),\psi(x,t))$$

可见，在给定完备基矢ϕ的情况下，只要知道展开系数，我们就完全确定态了。

更一般，选择某个力学量$\hat{F}$作为力学量完全集，对应的完备基$\{\psi_n\}$(假定是分裂的情况，$n=1,2,...,N$)，即选择了F表象，我们可以把态$\psi(x,t)$表示成

$$\psi(x,t)=\sum_n c_n\psi_n$$

其中展开系数为

$$c_n=(\psi_n,\psi)$$

只要知道系数$\{c_n\}$就确定了态。

如果引入矩阵描述，则

$$\psi(x,t)=(c_1,c_2,c_3,...)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ ...\end{pmatrix}$$

也就是说一组$\{c_n\}$ $(n=1,2,...)$就描述了一个任意的量子态，当然前提是已经选择了F表象，确定了完备基$\{\psi_n\}$。我们一般习惯表示为

$$\vec{c}=\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\\ ...\\ c_n\end{bmatrix}=c_1\begin{bmatrix}1\\ 0\\ ...\\ 0\end{bmatrix}+c_2\begin{bmatrix}0\\ 1\\ ...\\ 0\end{bmatrix}+...+c_n\begin{bmatrix}0\\ 0\\ ...\\ 1\end{bmatrix}$$

其中$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ ... \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ ... \\ 0 \end{bmatrix}, ... \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ ... \\ 1 \end{bmatrix}$是基矢。$\vec{c}$相当于在$Hilbert$空间，一个任意态投影到基矢上面的系数表示，也就是态在F表象中的表示。这就是**量子态的矩阵表示形式**。

更多时候我们直接采用下面的表示，但是强调的是这样写的真实含义是上面的表示。

$$\psi = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ ... \\ c_n \end{bmatrix}$$

2) 力学量(算符)的矩阵表示

首先我们要强调的一点是谈到力学量算符、态等的表示时，必须先确定一个表象(基矢空间)。假定在F表象，基矢$\{\psi_n\}$，对于一个力学量算符$\hat{\vec{L}}$，作用在某个态上ψ(这样写意味着$\psi = \sum_k a_k\psi_k$)，有

$$\hat{\vec{L}}\psi = \varphi$$

即算符的作用是使态ψ变为一个新态φ。但是要注意，这时候表象并没有变化，所以$\varphi = \sum_k b_k\psi_k$，则

$$\hat{\vec{L}}\psi = \varphi \implies \sum_k b_k\psi_k = \hat{\vec{L}}\sum_l a_l\psi_l = \sum_l \hat{\vec{L}}\psi_l a_l$$

左乘ψ_j^*并积分，得到

$$\sum_k b_k \int \psi_j^*\psi_k d^3x = b_j = \sum_l a_l \int \psi_j^* \hat{\vec{L}}\psi_l d^3x = \sum_l a_l(\psi_j, \hat{\vec{L}}\psi_l)$$

因此可以写成

$$b_j = \sum_l L_{jl}a_l$$

用矩阵表示则是

$$(b_1, b_2, ...)^T = (L_{jl})_{N\times N}(a_1, a_2, ...)^T$$

其中L_{jl}就是算符$\hat{\vec{L}}$在F表象中的表示的矩阵元

$$L_{jl} = (\psi_j, \hat{\vec{L}}\psi_l)$$

2. 表象变换

任何表象原则上都是互相等价的，但对于一个具体的系统，具体的问题，有些表象可能很麻烦，而另一些表象可能很方便。就如直角坐标系和球坐标系都可以描述三维运动，但是选择合理的坐标系可以使计算简化计算。两个坐标系之间可以通过一个变换来完成。这个问题在量子力学中同样存在，以前我们讲过比如选择动量表象有时比坐标表象容易处理问题。两个表象之间可以通过$Fourier$变换完成。量子力学的两个基本描述$Schrödinger$的波动力学和$Heisenberg$的矩阵力学描述实际上就是分别选择坐标和能量表象。

1) 基矢变换和幺正变换矩阵

考虑两个力学量$\hat{F}$和$\hat{G}$对应的两个表象F和G表象，相应的基矢分别是$\{\psi_k\}$和$\{\varphi_k\}$，假定两组基矢组都是正交归一的，则有

$$(\psi_k, \psi_{k'}) = \delta_{kk'} \qquad (\varphi_k, \varphi_{k'}) = \delta_{kk'}$$

在各自的表象中，算符$\hat{F}$和$\hat{G}$的本征方程为

$$\hat{F}\psi_k = f_k\psi_k \qquad \hat{G}\varphi_k = g_k\varphi_k$$

对于一个任意的态Φ既可以用$\{\psi_k\}$，也可以用$\{\varphi_k\}$来展开

$$\Phi = \sum_i a_i\psi_i = \sum_j b_j\varphi_j$$

其中展开系数分别为

$$a_i = (\psi_i, \Phi) \qquad b_j = (\varphi_j, \Phi)$$

现在用$\{\varphi_k\}$展开ψ_i，即

$$\psi_i = \sum_j b'_j\varphi_j = \sum_j (\varphi_j, \psi_i)\varphi_j = \sum_j S^*_{ij}\varphi_j$$

其中

$$S_{ij} = (\psi_i, \varphi_j)$$

实质上，相当于$|\psi_i\rangle = \sum_j S^*_{ij}|\varphi_j\rangle = \sum_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\psi_i\rangle$，由于完备性知道，$\sum_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| = 1$

因此我们通过一个变换，把基矢从G表象变换到了F表象。记以S_{ij}为矩阵元的矩阵为S，称为G表象到F表象的变换矩阵。因为

$$\begin{aligned}\varphi_j &= \sum_i a_i\psi_i = \sum_i (\psi_i, \varphi_j)\psi_i = \sum_i \psi_i S_{ij} \\ \psi_i &= \sum_j S^*_{ij}\varphi_j = \sum_j S^*_{ij}\sum_l \psi_l S_{lj} = \sum_l \psi_l = \sum_l (\sum_j S^*_{ij}S_{lj})\psi_l\end{aligned}$$

由于基矢之间的正交性，知道$l = i$，因此

$$\sum_j S^*_{ij}S_{ij} = 1$$

所以变换矩阵S是幺正矩阵，该变换是个幺正变换。

($X = SS^+ = S(S^*)^T$, 所以$X_{ij} = \sum_k S_{ik}(S^*_{jk})$, 前面我们已经证明了只有$i = j$才不为0，即$X_{ii} = 1$，因此$SS^+ = 1$，即$S$是个幺正矩阵)

2) 态和表象变换

假定在F表象中，基矢为$\{\psi_k\}$，某个态Φ表示为$\vec{a}$，在另一个G表象中，基矢为$\{\varphi_k\}$，此态Φ表示为$\vec{b}$，即

$$\Phi = \sum_{k=1}^{N} a_k\psi_k = \sum_{m=1}^{N} b_m\varphi_m$$

因此系数a_k可以表示为

$$a_k = (\psi_k, \Phi) = \sum_m (\psi_k, b_m\varphi_m) = \sum_m (\psi_k, \varphi_m)b_m = \sum_m S_{km}b_m$$

也就是说，可以通过一个幺正变换把态从G表象变换到F表象，这个幺正变换的矩阵元就是S_{km}，即

$$\vec{a} = S\vec{b}$$

或者

$$b_m = \sum_{k=1}^{N} S_{mk} a_k \qquad S_{mk} = (\varphi_m, \psi_k) = S_{km}^*$$

即

$$\vec{b} = S^+ \vec{a}$$

这里需要注意的是变换矩阵的顺序。上述过程就是**量子态的表象变换**。

习惯上我们我们一般这样写，假定量子态在F和G表象中的表示分布为ψ和φ，这里的ψ和φ实际上表示了如下的一组系数

$$\begin{aligned} \psi &= (a_1, a_2, ...)^T \\ \varphi &= (b_1, b_2, ...)^T \end{aligned}$$

则表象变换为

$$\begin{aligned} \psi &= S\varphi \\ \varphi &= S^+ \psi \end{aligned}$$

3) 算符的表象变换

如果算符$\hat{A}$在F表象和G表象的矩阵分别为A和A'，其矩阵元为分别为

$$A_{nm} = (\psi_n, \hat{A}\psi_m) \qquad A'_{ij} = (\varphi_i, \hat{A}\varphi_j)$$

可以得到

$$\begin{aligned} A_{nm} &= (\sum_i S_{ni}^* \varphi_i, \sum_j S_{mj}^* \hat{A}\varphi_j) = \sum_{i,j} S_{ni} S_{mj}^* (\varphi_i, \hat{A}\varphi_j) \\ &= \sum_{i,j} S_{ni} A'_{ij} S_{mj}^* = \sum_{i,j} S_{ni} A'_{ij} S_{jm}^+ \end{aligned}$$

因此矩阵形式为

$$\begin{aligned} A &= SA'S^+ \\ A' &= S^+ AS \end{aligned}$$

这就是算符的表象变换公式。

Example: 设$\hat{J}^2$和$\hat{J}_Z$的共同本征函数$\{Y_{jm}\}$(球谐函数)，则

$$\hat{J}^2 Y_{jm} = j(j+1)\hbar^2 Y_{jm} \qquad \hat{J}_Z Y_{jm} = m\hbar Y_{jm}$$

取$j = 1$，写出$\hat{J}^2$、$\hat{J}_Z$、$\hat{J}_x$和$\hat{J}_y$在此表象中的矩阵表示。

$j=1$，所以$m=-1,0,1$，因此基矢共计有Y_{1-1}，Y_{10}和Y_{11}三个，并且我们可以证明这三个基矢构成完备的基矢组。因此我们有

$$\begin{aligned}(Y_{jm},\hat{J}^2Y_{jm'}) &= j(j+1)\hbar^2\delta_{mm'}\\(Y_{jm},\hat{J}_ZY_{jm'}) &= m\hbar\delta_{mm'}\end{aligned}$$

取基矢$\psi_1=Y_{11}$，$\psi_2=Y_{10}$，$\psi_3=Y_{1-1}$，则

$$J^2=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\qquad J_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}\hat{J}^{\pm}Y_{jm} &= \sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\hbar Y_{jm\pm1}\\(Y_{jm},\hat{J}^{\pm}Y_{jm'}) &= \sqrt{j(j+1)-m'(m'\pm1)}\hbar\delta_{m,m'\pm1}\end{aligned}$$

所以

$$J^+=\hbar\begin{pmatrix}0&\sqrt{2}&0\\0&0&\sqrt{2}\\0&0&0\end{pmatrix}\qquad J^-=\hbar\begin{pmatrix}0&0&0\\\sqrt{2}&0&0\\0&\sqrt{2}&0\end{pmatrix}$$

所以

$$\begin{aligned}J_x &= \frac{1}{2}(J^++J^-)=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&\sqrt{2}&0\\\sqrt{2}&0&\sqrt{2}\\0&\sqrt{2}&0\end{pmatrix}\\J_y &= \frac{1}{2i}(J^+-J^-)=\frac{i\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-\sqrt{2}&0\\\sqrt{2}&0&-\sqrt{2}\\0&\sqrt{2}&0\end{pmatrix}\end{aligned}$$

Problem: 一组正交归一基矢φ_1，φ_2，φ_3组成的完备基，*Hamiltonian*算符$\hat{H}=\hbar\omega_0\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&2\end{pmatrix}$，已知体系$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_1+\frac{1}{2}\varphi_2+\frac{1}{2}\varphi_3$，求(1) $\langle E\rangle$；(2) 又有算符$\hat{A}=a\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$，求$\psi$在$A$表象中的表示；(3) 求$\hat{H}$在$A$表象中的表示。

解：(1) 能量本征值方程为

$$H\varphi_i=E_i\varphi_i$$

因为H是对角的，所以$E_1=\hbar\omega_0$，$E_2=2\hbar\omega_0$，$E_3=2\hbar\omega_0$，$E_2=E_3$表明这个能级是二重简并的。这也意味着所采用的表象就是能量表象，φ_i是能量表象中的基矢。

具体推导时候应该如下：基矢$\varphi_1=\begin{pmatrix}1&0&0\end{pmatrix}^T$

$$H\varphi_1=\hbar\omega_0\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=\hbar\omega_0\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=\hbar\omega_0\varphi_1$$

又

$$H\psi = H\sum_{n=1}^{3} c_n\varphi_n = \sum_{n=1}^{3} c_n E_n\varphi_n$$

可见测得$E=\hbar\omega_0$的几率为$(\frac{1}{\sqrt{2}})^2$，测得$E=2\hbar\omega_0$的几率为$(\frac{1}{2})^2+(\frac{1}{2})^2$，或者

$$\langle E\rangle = (\psi, H\psi) = \sum_{n=1}^{3}|c_n|^2 E_n = \frac{\hbar\omega_0}{2} + 2\frac{2\hbar\omega_0}{4} = \frac{3\hbar\omega_0}{2}$$

或者用矩阵表示则为$\psi = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$，所以

$$\langle E\rangle = (\psi, H\psi) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} \hbar\omega_0 = \frac{3\hbar\omega_0}{2}$$

(2) 首先应该找到$\hat{A}$的在此表象中的本征态

假定$\hat{A}$的本征态Φ为

$$\Phi = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix}^T$$

本征方程为$\hat{A}\Phi = a\lambda\Phi$，即

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \begin{pmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 0$$

有解的条件是系数行列式为0

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \Longrightarrow \quad (1-\lambda)(\lambda^2-1) = 0$$

即$\lambda = 1, 1, -1$ ($\lambda = 1$是二重简并的)，代回计算可以得到x_1, x_2, x_3。

$\lambda = -1$: 得到$x_1 = 0$，$x_2 = -x_3$(取为ψ_3)；

$\lambda = 1$: 得到$x_2 = x_3$，x_1为任意数；不妨取$x_1 = 1$, $x_2 = x_3 = 0$和$x_1 = 0$, $x_2 = x_3 = 1/\sqrt{2}$，两者都已经考虑归一化，即取

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

要将ψ按照ψ_1，ψ_2，ψ_3展开，设展开系数为c_1，c_2，c_3，则

$$\psi = \sum_{n=1}^{3} c_n\psi_n \qquad c_n = (\psi_n, \psi)$$

即

$$
\begin{aligned}
c_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\
c_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\
c_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} = 0
\end{aligned}
$$

当然也可以直接通过表象变换得到，相当于要把态从H表象变换到A表象

$$S_{ij} = (\psi_i, \varphi_j)$$

由此得到

$$
\begin{aligned}
S_{11} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \qquad S_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \qquad S_{13} = 0 \\
S_{21} &= 0 \qquad S_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad S_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\
S_{31} &= 0 \qquad S_{32} = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad S_{33} = -\frac{1}{\sqrt{2}}
\end{aligned}
$$

即

$$
\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}
$$

(3) 按照算符的表象变换公式知道

$$
H' = S^{+}HS = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}
$$

3.10 *Dirac*符号

引入*Dirac*符号的目的是为了能够更清楚的表示量子力学，*Dirac*符号本身并不增加新的物理。其优点是：1) 不需具体的表象；2) 运算方便。类似于坐标系中的矢量，通常三维空间任一矢量的表示方法依赖于坐标系(也即基矢)的选取。但是，也可以不选取任何基矢，而只直接就将这些矢量写作为$\vec{A}$，$\vec{B}$，......，并利用标积$\vec{A}\cdot\vec{B}$，矢积$\vec{A}\times\vec{B}$等等，形式地表示对它们的代数运算或微积分运算。由于这种描述不依赖于基矢即坐标系的选取，所以它是一种抽象的、普适的表示方法

1) 左矢(bra)和右矢(ket)

在*Hilbert*空间中，所有态矢都称为右矢，比如右矢$|A\rangle$，等等。这里记号A是对此态矢的某种标识。标记的办法以确切、简便为准。比如用系统的好量子数组来标记(例如$|lm\rangle$)；也可以用态矢的波函数(它和态矢的关系下面即将谈及)来标记，例如态矢$|lm\rangle$可记为$|\psi_{lm}\rangle$；如果要强调态矢随时间的变化，也可以记为$|\psi_{lm}(t)\rangle$；另外还有$|\vec{r}\prime\rangle$，$|\vec{p}'\rangle$等等。这里，$|\vec{r}\prime\rangle(|\vec{p}'\rangle)$是坐标（动量）算符的对应于本征值为$\vec{r}\prime(\vec{p}')$的本征态，即有$\hat{\vec{r}}|\vec{r}\prime\rangle = \vec{r}\prime|\vec{r}\prime\rangle(\hat{\vec{p}}|\vec{p}'\rangle = \vec{p}'|\vec{p}'\rangle)$。

对于每一个右矢$|A\rangle$，对应地还有一个左矢$\langle A|$，它与该右矢互为厄米共轭，即

$$\langle A| = (|A\rangle)^+ \qquad |A\rangle = (\langle A|)^+$$

于是，用于展开态矢的基矢也就有左基矢和右基矢之分了。

2) 内积

有了左矢和右矢的概念，便可以引入内积—投影的定义。右矢$|A\rangle$向右矢$|B\rangle$的投影是右矢$|A\rangle$与对应左矢$\langle B|$的内积，即

$$\langle B|A\rangle = \text{在态矢}|A\rangle\text{中发现态矢}|B\rangle\text{的几率幅}$$

按量子力学的基本假设，此式的含意若用波函数来表示便应当是

$$\langle B|A\rangle = \int \varphi_B^*(\vec{r})\psi_A(\vec{r})d\vec{r}$$

这个内积关于$|A\rangle$是线性的，关于$\langle B|$则是反线性的。这可以设想从它们中各自抽出一个复数常系数，看是否经受复数共轭操作，便可以知道。由内积定义可知

$$\langle B|A\rangle = \langle A|B\rangle^*$$

显然$|A\rangle$(或$\langle A|$)和和自己的内积$\langle A|A\rangle$是个正数。对于标记(编号)为分立的一组左（右）态矢，如果彼此间的内积为零，自己的内积为1，称它们为正交归一的；对于标记(编号)为连续的一组左（右）态矢，若它们之间的内积是δ 函数，就称它们为正交归一的。

和三维空间矢量解析的情况相似。在量子体系的态矢空间中，对态矢的描述可以不必事先选取基矢，而是采用抽象的态矢符号，以普适的方式表示它们在状态空间中的变化。但是，为了能在态矢空间中进行具体的计算，需要选定一组特定的态矢作为基矢，用它们去展开任意态矢。这里，第一，为了运算方便，所选基矢最好是正交、归一的。就是说，规定基矢组$\{|\xi\rangle\}$和$\{\langle\xi|\}$有如下正交归一的性质

$$\begin{aligned} \text{对分立编号：正交归一条件为}\ \langle\xi_i|\xi_j\rangle &= \delta_{ij} \\ \text{对连续编号：正交归一条件为}\ \langle\xi'|\xi''\rangle &= \delta(\xi'-\xi'') \end{aligned}$$

分立编号情况的正交归一条件比如$\langle lm|l'm'\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$；连续编号情况的正交归一条件比如，$\langle\vec{r}'|\vec{r}''\rangle = \delta(\vec{r}' - \vec{r}'')$，$\langle\vec{p}'|\vec{p}''\rangle = \delta(\vec{p}' - \vec{p}'')$等。第二，若要能够展开任意的态矢，选做基矢的一组态矢必须是完备的。可以证明，这要求基矢组必须满足以下条件

$$\text{对只有分立编号：完备条件为}\quad \sum_i |\xi_i\rangle\langle\xi_i| \quad = \quad I$$
$$\text{对只有连续编号：完备条件为}\quad \int |\xi\rangle d\xi\langle\xi| \quad = \quad I$$

上面的$|\xi_i\rangle\langle\xi_i|$也称外积。一般情况下，一个完备的基矢组常常既包含分立的基矢集合，又包含着参数连续变化的基矢集合（两集合之间也正交）。如一维有限深方势阱，既有负能区分立的束缚态部分，也有正能区连续的散射态部分。因此，完备性条件的普遍形式应为

$$\sum_i |\xi_i\rangle\langle\xi_i| + \int |\xi'\rangle d\xi\langle\xi'| = I$$

现来证明上式：假定所选基矢是完备的，它应当能够展开任一态矢$|A\rangle$，于是有

$$|A\rangle = \sum_i a_i|\xi_i\rangle + \int a(\xi)|\xi\rangle d\xi$$

用分立编号的左基矢$\langle\xi_j|$乘此式，注意基矢的正交归一性，展开式右边就简化为

$$\langle\xi_j|A\rangle = \sum_i a_i\langle\xi_j|\xi_i\rangle = a_j$$

若用连续编号的左基矢$\langle\xi'|$乘，类似可得

$$\langle\xi'|A\rangle = a(\xi')$$

因此

$$|A\rangle = \sum_i\langle\xi_i|A\rangle|\xi_i\rangle + \int\langle\xi|A\rangle|\xi\rangle d\xi = \sum_i |\xi_i\rangle\langle\xi_i|A\rangle + \int |\xi\rangle\langle\xi|A\rangle d\xi$$

由于A 的任意性，就得到普遍的完备性条件。

以后，常常将这些完备性条件作为单位算符，插入运算式中适当的地方，转入相应的基矢展式中，以便进行具体的运算。从下面和以后的计算中会经常看到这种做法。。

3) 一些讨论

根据内积定义的物理解释：$\langle B|A\rangle$为在$|A\rangle$中发现$|B\rangle$的几率幅，应当有

$$\langle\vec{r}|A\rangle = \psi_A(\vec{r})$$

这是因为，等式左边的含义是在A态中找到粒子位于$\vec{r}$处的几率幅，而这正是等式右边$\psi_A(\vec{r})$的含义。同样，从内积的解释还可以得到

$$\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \qquad \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle = \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle^* = \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

这里，指数前面的分数是为了保证此类连续态能够归一化到δ函数。例如

$$\langle\vec{r}|\vec{r}'\rangle = \int\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle d\vec{p}\langle\vec{p}|\vec{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d\vec{p}e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

以上是关于量子力学中波函数的另一种表述——将系统状态空间中的状态用$Hilbert$空间中$Dirac$符号的态矢表示。这种将量子状态表示作态矢的方法是一种抽象的普适的描述方法。

$Dirac$符号表示的重点在于量子状态。至于算符的表述形式, 可以保留前面讲得那样，也可以只抽象地设定各个算符的符号，而不进一步设定算符的表示形式(例如，动量算符就只写成为$\hat{\vec{p}}$、坐标算符就为$\hat{\vec{r}}$等等)。

关于量子力学的测量，对状态$|A\rangle$进行力学量Ω的多次测量后所得平均值，现在用$Dirac$符号表示即为

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \frac{\langle A|\hat{\Omega}|A\rangle}{\langle A|A\rangle} \quad \text{或者} \quad \langle\hat{\Omega}\rangle = \langle A|\hat{\Omega}|A\rangle \quad (|A\rangle\text{已归一化})$$

注意，上式只说明它是算符$\hat{\Omega}$在态矢$|A\rangle$中的平均值，并未规定采用什麽样的基矢来展开，并未说明怎样去作相应的具体计算。

关于*Schrödinger*方程，用*Dirac*符号表示就是

$$i\hbar\frac{\partial|\psi(\vec{r},t)\rangle}{\partial t}=\{\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{\vec{r}})\}|\psi(\vec{r},t)\rangle$$

Example: 证明两个广泛使用的态矢等式

$$\begin{aligned}\langle\vec{r}'|\hat{\vec{p}} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}\langle\vec{r}'| \\ \hat{\vec{p}}|\vec{r}'\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}|\vec{r}'\rangle\end{aligned}$$

证：用任一态矢$|A\rangle$右乘第一个等式的左边，得$\langle\vec{r}'|\hat{\vec{p}}|A\rangle$。接着，在态矢$|A\rangle$的前面插入动量表象基矢的完备性条件，

$$\begin{aligned}\langle\vec{r}'|\hat{\vec{p}}|A\rangle &= \int\langle\vec{r}'|\hat{\vec{p}}|\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|A\rangle d\vec{p}'=\int\vec{p}'\langle\vec{r}'|\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|A\rangle d\vec{p}' \\ &= \int\vec{p}'\frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}'/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\varphi_A(\vec{p}')d\vec{p}' \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}\int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}'/\hbar}\varphi_A(\vec{p}')\frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}\varphi_A(\vec{r}')=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}\langle\vec{r}'|A\rangle\end{aligned}$$

由于$|A\rangle$是任意的并且不依赖于变数$\vec{r}'$，可从等式两边除去它。这表明存在如下左矢等式

$$\langle\vec{r}'|\hat{\vec{p}}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}\langle\vec{r}'|$$

第二个等式其实是第一个等式的厄米共轭，也可作类似的证明，请大家课后完成。值得注意的是，这里等式左边的$\hat{\vec{p}}$是量子力学的动量算符，而等式右边的$\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}$只是对右矢$|\vec{r}'\rangle$ 中本征值$\vec{r}'$的微商运算，不对其它态矢作用。这从上面运算过程可以清楚地看出。类似地，还有另外两个态矢等式

$$\begin{aligned}\hat{\vec{r}}|\vec{p}'\rangle &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}'}|\vec{p}'\rangle \\ \langle\vec{p}'|\hat{\vec{r}} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}'}\langle\vec{p}'|\end{aligned}$$

可以插入坐标表象的完备条件进行类似证明。