《高等量子力学》第 2 讲

3. 算符（矩阵）的本征值和本征矢

1）一般线性算符的本征值和本征态

算符的本征方程：

$$\hat{T}|a\rangle = \lambda|a\rangle\,,$$

λ 称为 $\hat{T}$ 的本征值，$|a\rangle$ 称为 $\hat{T}$ 的本征矢。

矩阵形式（自己用完备性条件 $\sum_n |n\rangle\langle n| = I$ 证明）：

$$Ta = \lambda a$$
$$(T - \lambda I)a = 0$$

本征矢 $a \neq 0$ 的条件：

$$\det(T - \lambda I) = 0\,,$$

即久期方程（N 维空间）：

$$\begin{vmatrix} T_{11}-\lambda & T_{12} & \cdots & \mathrm{T}_{1\mathrm{N}} \\ T_{21} & T_{22}-\lambda & \cdots & \mathrm{T}_{2\mathrm{N}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ T_{N1} & T_{N2} & \cdots & \mathrm{T}_{\mathrm{NN}}-\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad ,$$

从而求得 N 个本征值 λ_i $(i = 1, 2, \ldots N)$，将任意一个代入本征方程

$$(T - \lambda_i I)\,a = 0$$

得到对应的本征矢 a 。

例：求算符矩阵 $T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ 的本征值和本征矢。

久期方程为 $\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 \\ 0 & -1-\lambda \end{vmatrix} = 0$，即 $\lambda^2 - 1 = 0$，本征值为 $\lambda = \pm 1$。

设本征矢为 $a=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}$， 取 λ=1，$\begin{pmatrix}0&0\\0&-2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}=0$，求得归一化后本征矢为 $a=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$；

类似，取 λ=−1，求得对应的本征矢为 $a=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$。

2）厄米算符

若 $\hat{T}^{+}=\hat{T}$, 或 $T^{+}=T$, 则称 $\hat{T}$ 为厄米算符，T 为厄米矩阵。

以下讨论厄米算符的性质：

a) $\langle a|\hat{T}|b\rangle=\langle b|\hat{T}^{+}|a\rangle^{*}=\langle b|\hat{T}|a\rangle^{*}$

特别是，$\langle a|\hat{T}|a\rangle=\langle a|\hat{T}|a\rangle^{*}$，说明厄米算符的平均值 $\langle a|\hat{T}|a\rangle$ 是实数。

注意，对于反厄米算符，$\hat{T}^{+}$=-$\hat{T}$，$\langle a|\hat{T}|a\rangle=-\langle a|\hat{T}|a\rangle^{*}$，反厄米算符的平均值 $\langle a|\hat{T}|a\rangle$ 是虚数。

b) 设本征方程 $\hat{T}|i\rangle=\lambda_i|i\rangle$， $\hat{T}|j\rangle=\lambda_j|j\rangle$

由 $\langle j|\hat{T}|i\rangle=\lambda_i\langle j|i\rangle$

和 $\langle j|\hat{T}=\langle j|\lambda_j^{*}$， $\langle j|\hat{T}|i\rangle=\langle j|\lambda_j^{*}|i\rangle=\lambda_j^{*}\langle j|i\rangle$

有 $(\lambda_i-\lambda_j^{*})\langle j|i\rangle=0$

当 $j=i$, $\langle i|i\rangle\neq 0$, $\lambda_i=\lambda_i^{*}$，说明厄米算符的本征值为实数。

当 $j\neq i$, 如果 $\lambda_i-\lambda_j\neq 0$, $\langle j|i\rangle=0$, 说明厄米算符属于不同本征值的本征态正交。考虑到总可以归一化，有正交归一条件：

$$\langle i|j\rangle=\delta_{ij}$$。

问题：同一本征值的不同本征态是否正交？

c) 线性叠加正交法（施米特正交法，自己推导）

若同一本征值对应多个本征态，即有简并，例如有 g 重简并（$g \geq 2$）：

$$\hat{T}\left|i, j\right\rangle=\lambda_i \left|i, j\right\rangle, \quad j=1,\ldots g$$ ，　这 g 个本征矢量是否正交？

重新定义 g 个新态：

$$\left|i,n\right\rangle=\sum_{j=1}^{g} C_{nj}\left|i, j\right\rangle, \quad n=1,2,\ldots g$$

因为 $$\hat{T}\left|i,n\right\rangle=\sum_{j=1}^{g} C_{nj}\hat{T}\left|i, j\right\rangle=\lambda_i\sum_{j=1}^{g} C_{nj}\left|i, j\right\rangle=\lambda_i\left|i,n\right\rangle,$$

所以$\left|i,n\right\rangle$ 仍然是$\hat{T}$ 的属于本征值λ_i的本征态，故只需证明$\left|i,n\right\rangle$是正交归一的就可以了。

能否通过合适的选取系数C_{nj}，使得这g个新态正交归一？

$$\left\langle i,m\middle|i,n\right\rangle=\delta_{mn} \quad ?$$

共有 g 个归一化方程$+\dfrac{\mathrm{g}^2-\mathrm{g}}{2}$个正交方程$=\dfrac{\mathrm{g}(\mathrm{g}+1)}{2}$个独立方程$<\mathrm{g}^2$个待定系数$C_{nj}$，有多种选择来决定满足正交归一化的系数$C_{nj}$，使得新态$\left|i,n\right\rangle$正交归一：

$$\left\langle i,m\middle| j,n\right\rangle=\delta_{ij}\delta_{mn},$$

δ_{ij}来自于不同本征值的本征态的正交归一，δ_{mn}来自于线性叠加正交法。

结论：无论简并还是非简并，厄米算符的本征态正交归一。

d）可以证明：厄米算符的本征矢满足完备性条件，

$$\sum_i \left|i\right\rangle\left\langle i\right| = \mathrm{I} 。$$

故厄米算符的本征矢可以构成 Hilbert 空间的一组正交归一的基矢，即构成一个线性矢量空间的一个表象。

4. 测量

讨论量子力学与 Hilbert 空间的联系。

1）单个力学量的测量

在 Stern－Gerlach 实验中 S_z 在磁场前没有确定值（如果有确定值，则经过磁场后会只有一束银原子），只在磁场后有确定值，一束为 S_z^+，另一束为 S_z^-。因此，量子力学量的取值与系统所处的状态紧密相关。力学量在一般状态没有确定值，只有在某些特点的状态有确定值。

量子力学假设：量子力学系统的力学量用线性矢量空间中的厄米算符表示，状态用矢量表示。由于厄米算符本征态的完备性(物理上说，一个力学量的所有本征值集合给出了这个力学量在任意态的性质)，任意力学量的本征态都可构成一个线性矢量空间的表象。

$\hat{F}$ 的本征方程 $\hat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle$，在 F 表象：基矢 $|n\rangle$

任意态 $|a\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|a\rangle$，$\langle n|a\rangle$ 是态 $|a\rangle$ 在 F 表象的具体形式。

量子力学假设：力学量 $\hat{F}$ 只有在它的本征态 $|n\rangle$ 才有确定值，就是本征值 f_n，处于任意态 $|a\rangle$ 时，$\hat{F}$ 没有确定值，只有确定的平均值 $\langle F\rangle \equiv \langle a|\hat{F}|a\rangle$。(厄米算符的本征值和平均值都是实数，这是将力学量用厄米算符表示的原因）

$$\begin{aligned}
\langle F\rangle &\equiv \langle a|\hat{F}|a\rangle \\
&= \sum_{n,m}\langle a|n\rangle\langle n|\hat{F}|m\rangle\langle m|a\rangle \\
&= \sum_{n,m}\langle a|n\rangle f_m\delta_{nm}\langle m|a\rangle \\
&= \sum_{n}\langle a|n\rangle\langle n|a\rangle f_n \\
&= \sum_{n}\left|\langle n|a\rangle\right|^2 f_n
\end{aligned}$$

表明 $\hat{F}$ 取值为 f_n 的几率是 $\left|\langle n|a\rangle\right|^2$，$\langle n|a\rangle$ 是几率幅，$\left|\langle n|a\rangle\right|^2$ 是在态 $|a\rangle$ 中包含态 $|n\rangle$ 的几率。在一般态，力学量取值不确定，但取值几率确定，平均值确定。

在 $\hat{F}$ 的自身表象，F 的矩阵元

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

故力学量在自身表象是一个对角矩阵，对角元就是力学量的本征值。故求力学量的取值就是通过表象变换将对应矩阵对角化，其对角元就是力学量的取值。

现在讨论测量与态的塌缩。

Stern－Gerlach 实验中的 Ag 原子在磁场前 s_z 无确定值，过磁场后有了确定值。设置磁场可以看成是对自旋的一次测量，一测量就有了确定值。

在任意态 $|a\rangle$ 测量 $\hat{F}$，体系便塌缩到 $\hat{F}$ 的本征态，故 $\hat{F}$ 有确定的值。塌缩到 $\hat{F}$ 的哪一个本征态呢？因为在态 $|a\rangle$ 中包含态 $|n\rangle$ 的几率是 $\left|\langle n|a\rangle\right|^2$，故塌缩到 $|n\rangle$ 的几率是 $\left|\langle n|a\rangle\right|^2$，即测量取值为 f_n 的几率是 $\left|\langle n|a\rangle\right|^2$。

测量使得体系的态塌缩到被测力学量的本征态，该力学量有确定值，粒子性质得以体现，或者可以说，测量产生了粒子。

问题：在态 $|a\rangle$ 测量 $\hat{F}$，得值 f_n，紧接又测量 $\hat{F}$，取值为多少？

第一次测量，　$|a\rangle \to |n\rangle$

第二次测量，体系已经处于 $\hat{F}$ 的本征态 $|n\rangle$，测量结果仍然为 f_n。这是为什么在经过两个 Z 方向磁场后，Stern－Gerlach 实验中 Ag 原子的自旋仍然为 s_z^+ 的原因。

2）自旋矩阵（自己推导）

由 Stern－Gerlach 实验，电子自旋为 $\frac{1}{2}$，在任意方向 $\vec{e}_n$ 的自旋算符

$\hat{\vec{s}}\cdot\vec{e}_n=\hat{s}_n$ 的取值是 $\pm\frac{\hbar}{2}$，本征方程

$$\hat{s}_n\left|s_n^{\pm}\right\rangle=\pm\frac{\hbar}{2}\left|s_n^{\pm}\right\rangle。$$

在 $\hat{s}_z$ 的本征态构成的表象（S_z 表象），S_z 是一个对角矩阵，对角元是 $\pm\frac{\hbar}{2}$，

$$s_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}。$$

解本征方程

$$s_z\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\pm\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix},$$

得归一化的本征态为

$$\left|s_z^{+}\right\rangle=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix},\qquad \left|s_z^{-}\right\rangle=\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}。$$

现在 s_z 表象求解 $\hat{s}_x,\hat{s}_y$ 的矩阵形式。由 $\hat{s}_z$ 的本征态的完备性条件，有

$$\left|s_x^{+}\right\rangle=\sum_{i=\pm}\left|s_z^{i}\right\rangle\left\langle s_z^{i}\middle|s_x^{+}\right\rangle=\left(\left\langle s_z^{+}\middle|s_x^{+}\right\rangle\right)\left|s_z^{+}\right\rangle+\left(\left\langle s_z^{-}\middle|s_x^{+}\right\rangle\right)\left|s_z^{-}\right\rangle,$$

由级联 **Stern－Gerlach** 实验，具有确定 s_x 值的态在通过 **Z** 方向磁场（测量 s_z 的装置）后分裂为强度相等的两束，具有 S_z^{+} 和 S_z^{-} 的几率相等

$$\left|\left\langle s_z^{+}\middle|s_x^{+}\right\rangle\right|=\left|\left\langle s_z^{-}\middle|s_x^{+}\right\rangle\right|=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\left|s_x^{+}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left|s_z^{+}\right\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}\left|s_z^{-}\right\rangle,$$

已经通过归一化把相因子归结到 δ_1 中。

由 $\left|S_x^{\pm}\right\rangle$ 的正交归一化，$\left\langle s_x^{i}\middle|s_x^{j}\right\rangle=\delta_{ij}$，有

$$\left|s_x^-\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left|s_z^+\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}\left|s_z^-\right\rangle$$

或者

$$\begin{cases}\left|s_z^+\right\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|s_x^+\right\rangle+\left|s_x^-\right\rangle\right)\\ \left|s_z^-\right\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\delta_1}\left(\left|s_x^+\right\rangle-\left|s_x^-\right\rangle\right)\end{cases}$$

代入 $\hat{s}_x$ 的矩阵元

$$\left\langle s_z^+\left|\hat{s}_x\right|s_z^+\right\rangle=0,\qquad \left\langle s_z^+\left|\hat{s}_x\right|s_z^-\right\rangle=\frac{\hbar}{2}e^{-i\delta_1},$$

$$\left\langle s_z^-\left|\hat{s}_x\right|s_z^+\right\rangle=\frac{\hbar}{2}e^{i\delta_1},\qquad \left\langle s_z^-\left|\hat{s}_x\right|s_z^-\right\rangle=0$$

$$s_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & e^{-i\delta_1}\\ e^{i\delta_1} & 0\end{pmatrix}$$

类似，有

$$\left|s_y^\pm\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left|s_z^+\right\rangle\pm\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_2}\left|s_z^-\right\rangle,$$

$$s_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & e^{-i\delta_2}\\ e^{i\delta_2} & 0\end{pmatrix}$$

现在考虑相位 δ_1,δ_2 的取值。具有确定 s_x 值的态在通过 **Y** 方向磁场（测量 s_y 的装置）后分裂为强度相等的两束，分别具有 s_y^+ 和 s_y^-，即

$$\left|\left\langle s_y^\pm\middle|s_x^+\right\rangle\right|=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

即 $$\frac{1}{2}\left|1\pm e^{i(\delta_1-\delta_2)}\right|=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

故 $\delta_1-\delta_2=\pm\frac{\pi}{2}$。

如果取 $\delta_1=0,\quad \delta_2=\frac{\pi}{2}$，

有矩阵 $s_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\qquad s_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$。

可以证明，对于矩阵 S_x,S_y,S_z，有

$$\left[s_i,s_j\right]=i\varepsilon_{ijk}\hbar s_k,\qquad \left\{s_i,s_j\right\}=\frac{\hbar^2}{2}\delta_{ij},$$

其中

$$\left[A,B\right]=AB-BA,\qquad \left\{A,B\right\}=AB+BA。$$

定义

$$s^2=\sum_i s_i^2=\frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},$$

因为 s^2 是一个单位矩阵，任意态都是它的本征态，对应同一个本征值 $\frac{3}{4}\hbar^2$。在任意态它都有确定的值 $\frac{3}{4}\hbar^2$。显然，$\hat{s}^2$ 与任意力学量 $\hat{F}$ 对易，可看成为一个经典量。

3）同时测量多个力学量的条件

可否同时测量两个力学量 $\hat{A}$，$\hat{B}$ 呢？

定理：若 $\hat{A}$，$\hat{B}$ 有完备的共同本征态，则 $\hat{A}$，$\hat{B}$ 一定对易。

证明：设完备的共同本征态为 $|n\rangle$

由 $\hat{A}|n\rangle=a_n|n\rangle,\qquad \hat{B}|n\rangle=b_n|n\rangle,$

在由$|n\rangle$构成的表象，任意态

$$|\psi\rangle=\sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle,$$

$$\begin{aligned}\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)|\psi\rangle&=\sum_n\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)|n\rangle\langle n|\psi\rangle\\&=\sum_n\left(\hat{A}b_n-\hat{B}a_n\right)|n\rangle\langle n|\psi\rangle\\&=\sum_n\left(a_nb_n-b_na_n\right)|n\rangle\langle n|\psi\rangle\\&=0\end{aligned}$$

因为$|\psi\rangle$是任意态，故$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$。

逆定理：若$\hat{A}$，$\hat{B}$对易，则$\hat{A}$，$\hat{B}$一定有完备的共同本征态。

证明：　设$|n\rangle$是$\hat{A}$的本征态，

$$\hat{A}|n\rangle=a_n|n\rangle,$$

由　$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0,$$

有　$$\hat{A}\hat{B}|n\rangle=\hat{B}\hat{A}|n\rangle=a_n\hat{B}|n\rangle。$$

说明$\hat{B}|n\rangle$也是$\hat{A}$的属于本征值a_n的本征态。若$\hat{A}$无简并，则$\hat{B}|n\rangle$与$|n\rangle$是同一个态，只能相差一个常数：

$$\hat{B}|n\rangle=b_n|n\rangle$$

故$|n\rangle$也是$\hat{B}$的本征态，即$\hat{A}$，$\hat{B}$有共同的完备本征态。

若$\hat{A}$有简并，则可以用施密特方法来证明有同样的结果（作为习题）。

结论：多个力学量相互对易时，它们可以有共同的本征态。当体系处于这些共同本征态时，它们同时有确定的值。

注意，$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$，$\left[\hat{B},\hat{C}\right]=0$，只说明 A，B 可以同时有确定值，B，C 可以同时有确定值。但 A，C 不一定同时有确定值。例如：对于角动量$\hat{\vec{J}}$，$\left[\hat{\vec{J}}^2,\ \hat{J}_x\right]$=0，$\left[\hat{\vec{J}}^2,\hat{J}_y\right]$=0，$\left[\hat{J}_x,\ \hat{J}_y\right]\neq 0$。说明$\hat{\vec{J}}^2$，$\hat{J}_x$可以同时有确定值，$\hat{\vec{J}}^2$，$\hat{J}_y$可以同时有确定值，$\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$一般不能同时有确定值。原因是$\hat{\vec{J}}^2$和$\hat{J}_x$的共同本状态和$\hat{\vec{J}}^2$和$\hat{J}_y$的共同本状态一般不相同。

4）力学量完备组

当力学量的本征值与本征态有简并时，$\hat{F}\left|i,j\right\rangle$=$f_i\left|i,j\right\rangle$ ， $j=1,\ldots g$，从数学上可用施密特方法来实现本征态的正交归一，但一般是从物理上引入力学量完备组来实现正交归一。

一个本征值对应多个本征态说明该力学量不足以完全描述这些本征态，必须引入新的力学量来刻划这些本征态之间的差别。引入另一个力学量$\hat{T}$，要求$\hat{T}$的本征态可以描述$\hat{F}$的本征态之间的差别，

$$\hat{F}\left|i,j\right\rangle=f_i\left|i,j\right\rangle$$
$$\hat{T}\left|i,j\right\rangle=t_j\left|i,j\right\rangle,$$

则对于力学量组$\left\{\hat{F},\hat{T}\right\}$，本征值$\left\{f_i,t_j\right\}$与本征态$\left|i,j\right\rangle$一一对应，无简并，故满足正交归一条件：

$$\left\langle i,j\middle|i',j'\right\rangle=\delta_{ii'}\delta_{jj'},$$

5）级联测量

对三个力学量$\hat{A},\hat{B},\hat{C}$分别进行如下两种测量。

第一种方法：

$\longrightarrow$ 测 A $\longrightarrow$ 测 B $\longrightarrow$ 测 C $\longrightarrow$

态：

$|\Psi\rangle$　　　　$|a\rangle$　　　　$|b\rangle$　　　　$|c\rangle$

力学量值：

无确定值　　　　a　　　　b　　　　c

经过 **3** 次测量后，测得 $\hat{C}$ 取值为 c 的几率是

$$P(c)=\sum_{a,b}\left|\langle a|\Psi\rangle\right|^2\cdot\left|\langle b|a\rangle\right|^2\cdot\left|\langle c|b\rangle\right|^2$$

其中 $\left|\langle a|\Psi\rangle\right|^2$ 是从 $|\Psi\rangle$ 塌缩到 $|a\rangle$ 的几率，$\left|\langle b|a\rangle\right|^2$ 是从 $|a\rangle$ 塌缩到 $|b\rangle$ 的几率，$\left|\langle c|b\rangle\right|^2$ 是从 $|b\rangle$ 塌缩到 $|c\rangle$ 的几率。

第二种方法：

$\longrightarrow$ 测 A $\longrightarrow$ 测 C $\longrightarrow$

态：　$|\Psi\rangle$　　　　$|a\rangle$　　　　$|c\rangle$

力学量值：无确定值　　　　a　　　　c

经过 **2** 次测量后，测得 $\hat{C}$ 取值为 c 的几率是

$$P'(c)=\sum_{a}\left|\langle a|\Psi\rangle\right|^2\cdot\left|\langle c|a\rangle\right|^2$$

显然，一般有

$$P(c)\neq P'(c),$$

结论：测量的顺序会改变最终测量结果。

但如果 $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$，$\hat{A},\hat{B}$ 有共同本征态，即 $|b\rangle=|a\rangle\delta_{ab}$，故

$$P(c)=\sum_a \left|\langle a|\Psi\rangle\right|^2 \cdot \left|\langle c|a\rangle\right|^2 = P'(c),$$

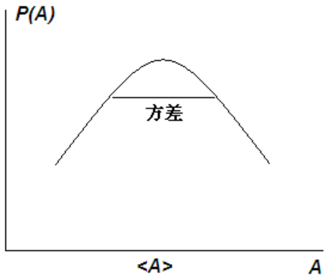
或$\left[\hat{B},\hat{C}\right]=0$，$\hat{B},\hat{C}$有共同本征态，即$|c\rangle=|b\rangle\delta_{bc}$，也有

$$P(c)=\sum_a \left|\langle a|\Psi\rangle\right|^2 \cdot \left|\langle c|a\rangle\right|^2 = P'(c)。$$

6）不确定关系

当$\left[\hat{A},\hat{B}\right]\neq 0$，$\hat{A},\hat{B}$不能同时有确定的值，那么它们的不确定度如何？

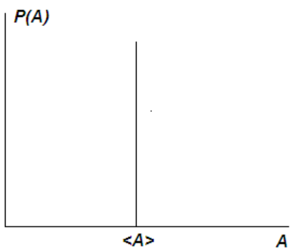
在任意态$|\psi\rangle$，力学量$\hat{A}$只有确定的平均值$\langle\hat{A}\rangle\equiv\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$，取值几率分布



不确定度用方差表示：

$$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\equiv\langle\psi|\left(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle\right)^2|\psi\rangle\neq 0。$$

如果态$|\psi\rangle$为$\hat{A}$的本征态，则平均值就是本征值，方差＝0，取值分布为δ函数，



定义：用方差的乘积$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle$描述$\hat{A},\hat{B}$之间测量的不确定关系。

如何估计这个不确定度？

显然，对任意的态$|\alpha\rangle,|\beta\rangle$和任意的复数$\lambda$，线性组合态$|\alpha\rangle+\lambda|\beta\rangle$的内

积

$$\left(\langle\alpha|+\langle\beta|\lambda^*\right)\left(|\alpha\rangle+\lambda|\beta\rangle\right)\geq 0$$

取 $$\lambda=-\frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle},$$

有 $$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle\geq\left|\langle\alpha|\beta\rangle\right|^2$$ **（Schwarz 不等式）**

令 $$|\alpha\rangle=\Delta\hat{A}|\Psi\rangle,\quad |\beta\rangle=\Delta\hat{B}|\Psi\rangle$$

有 $$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle\geq\left|\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle\right|^2。$$

因为

$$\begin{aligned}\left|\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle\right|^2&=\left(\mathrm{Re}\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle\right)^2+\left(\mathrm{Im}\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle\right)^2\\&\geq\left(\mathrm{Im}\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle\right)^2\\&=\left(\frac{1}{2i}\left(\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle-\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle^*\right)\right)^2\end{aligned}$$

故 $$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle\geq\left(\frac{1}{2i}\left(\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle-\left\langle\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}\right\rangle\right)\right)^2,$$

等号对应 Schwarz 不等式取等号和 $\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle$ 的实部为零。

由 $$\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle=\langle\psi|\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)\left(\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\right)|\psi\rangle=\left\langle\hat{A}\hat{B}\right\rangle-\left\langle\hat{A}\right\rangle\left\langle\hat{B}\right\rangle$$

$$\left\langle\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}\right\rangle=\langle\psi|\left(\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\right)\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)|\psi\rangle=\left\langle\hat{B}\hat{A}\right\rangle-\left\langle\hat{B}\right\rangle\left\langle\hat{A}\right\rangle$$

故 $$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle\geq\left(\frac{1}{2i}\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right)^2,$$

说明：两个力学量的不确定度由它们的对易关系和态 $|\psi\rangle$ 控制。