《高等量子力学》第 3 讲

5. 表象变换

选取合适的表象可简化计算。不同表象的基矢之间的变换称为表象变换。

设有两个表象：

I 表象：　基矢 $|i\rangle$，　$\hat{I}|i\rangle = |i\rangle$，　$\sum_i |i\rangle\langle i| =$

M 表象：　基矢 $|m\rangle$，$\hat{M}|m\rangle = m|m\rangle$，$\sum_i |m\rangle\langle m| = I$

想进入哪个表象，就用那个表象的完备性条件，

$$|m\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|m\rangle = \sum_i S_{im}|i\rangle$$

表象变换矩阵 S，

$$S_{im} = \langle i|m\rangle$$

是 M 表象的基矢在 I 表象的表示。

1）矢量的变换

I 表象：　$|a\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|a\rangle$，

$\langle i|a\rangle$ 是矢量 $|a\rangle$ 在 $|i\rangle$ 方向的分量，或称 $|a\rangle$ 在 I 表象的表示。

M 表象：　$|a\rangle = \sum_m |m\rangle\langle m|a\rangle$

$\langle m|a\rangle$ 是矢量 $|a\rangle$ 在 $|m\rangle$ 方向的分量，或称 $|a\rangle$ 在 M 表象的表示。

$$\langle m|a\rangle = \sum_i \langle m|i\rangle\langle i|a\rangle = \sum_i \langle i|m\rangle^* \langle i|a\rangle = \sum_i S^*_{im}\langle i|a\rangle = \sum_i S^+_{mi}\langle i|a\rangle,$$

或者写成矩阵形式　　$a_M = S^+ a_I$

2）算符的变换

I 表象：　$T_{ij} = \langle i|\hat{T}|j\rangle$，

M 表象：　$T_{mn} = \langle m|\hat{T}|n\rangle$

$$T_{mn}=\sum_{i,j}\langle m|i\rangle\langle i|\hat{T}|j\rangle\langle j|n\rangle=\sum_{i,j}\langle i|m\rangle^{*}\langle i|\hat{T}|j\rangle\langle j|n\rangle=\sum_{i,j}S_{mi}^{+}T_{ij}S_{jn}$$

或者写成矩阵形式：

$$T_M=S^{+}T_IS\text{。}$$

3）表象变换矩阵是幺正矩阵

$$\left(SS^{+}\right)_{ij}=\sum_m S_{im}S_{mj}^{+}=\sum_m S_{im}S_{jm}^{*}=\sum_m\langle i|m\rangle\langle j|m\rangle^{*}=\sum_m\langle i|m\rangle\langle m|j\rangle=\langle i|j\rangle=\delta_{ij}$$

$$SS^{+}=1,$$

同理可证：$S^{+}S=1$，

故 $S^{+}=S^{-1}$

表象变换矩阵为幺正矩阵。

注意S不是厄米矩阵，$S^{+}\neq S$。

4）表象变换不改变算符的本征值

设 $T_I|a\rangle_I=\lambda_I|a\rangle_I$，

则 $T_M|a\rangle_M=S^{+}T_ISS^{+}|a\rangle_I=S^{+}T_I|a\rangle_I=S^{+}\lambda_I|a\rangle_I=\lambda_IS^{+}|a\rangle_I=\lambda_I|a\rangle_M$

说明： 在 M 表象，本征值仍为 λ_I。可见，**表象变换不改变力学量的取值，这正是我们可以取任意表象而不改变物理可观测量的基础**。

例 1：**表象变换不改变对易关系**。

设在 I 表象，有

$$[A_I,B_I]=C_I,$$

则在 M 表象，

$$\begin{aligned}[A_M,B_M]&=A_MB_M-B_MA_M\\&=S^{+}A_ISS^{+}B_IS-S^{+}B_ISS^{+}A_IS\\&=S^{+}\left(A_IB_I-B_IA_I\right)S\\&=S^{+}C_IS=C_M\end{aligned}$$

说明：对易关系是量子力学基本关系，不随表象的变化而变化。

例 2：表象变换不改变矩阵的求迹。

$$tr\left(T_M\right)=tr\left(S^{+}T_I S\right)=tr\left(SS^{+}T_I\right)=tr\left(T_I\right)$$

6. 坐标表象与动量表象

1）连续谱

与自旋角动量 $\hat{S}_z$ 取分离值不同，坐标 $\hat{x}$ 与动量 $\hat{p}$ 取值连续。

用坐标或动量的本征态构成连续的坐标或动量表象。

本征方程	$\hat{x}\lvert x\rangle = x\lvert x\rangle$，	$\hat{p}\lvert p\rangle = p\lvert p\rangle$
基矢	$\lvert x\rangle$，	$\lvert p\rangle$
正交归一化	$\langle x\lvert x'\rangle = \delta(x-x')$，	$\langle p\lvert p'\rangle = \delta(p-p')$
完备性条件	$\int dx\lvert x\rangle\langle x\rvert = \mathrm{I}$，	$\int dp\lvert p\rangle\langle p\rvert = \mathrm{I}$

对于任意态 $\lvert\psi\rangle$　　$\lvert\psi\rangle = \int dx\lvert x\rangle\langle x\lvert\psi\rangle = \int dp\lvert p\rangle\langle p\lvert\psi\rangle$

$\langle x\lvert\psi\rangle \equiv \psi(x)$, $\langle p\lvert\psi\rangle \equiv \psi(p)$ 是态 $\lvert\psi\rangle$ 在坐标和动量表象的具体形式。

矢量算符　　$\hat{\vec{x}}\lvert\vec{x}\rangle = \vec{x}\lvert\vec{x}\rangle$，　$\hat{\vec{p}}\lvert\vec{p}\rangle = \vec{p}\lvert\vec{p}\rangle$

量子力学假设：　基本对易关系（笛卡尔坐标系）

$$\left[\hat{x}_i,\hat{x}_j\right]=0,\quad \left[\hat{p}_i,\hat{p}_j\right]=0,\quad \left[\hat{x}_i,\hat{p}_j\right]=i\hbar\delta_{ij},$$
$$i,j=1,2,3$$

坐标动量不确定关系：

$$\left\langle(\Delta\hat{x})^2\right\rangle\left\langle(\Delta\hat{p}_x)^2\right\rangle \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{x},\hat{p}_x]\rangle\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$ （不依赖于态）

2）空间平移变换

定义 $\hat{T}(d\vec{x})|\vec{x}\rangle=|\vec{x}+d\vec{x}\rangle$

对任意态的作用

$$\begin{aligned}\hat{T}(d\vec{x})|\psi\rangle&=\hat{T}(d\vec{x})\int d^3x|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle &&\text{(进入坐标表象)}\\&=\int d^3x|\vec{x}+d\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle &&\text{(算符只对矢量起作用)}\\&=\int d^3x|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}-d\vec{x}|\psi\rangle &&\text{(积分变量替换)}\end{aligned}$$

无限小平移算符 $\hat{T}(d\vec{x})=\mathrm{I}-i\hat{\vec{K}}\cdot d\vec{x}$，

$\hat{\vec{K}}$ 是 $\hat{T}$ 的生成元。如果 $\hat{\vec{K}}$ 为厄米算符，则平移变换是一么正算符

$$\hat{T}(d\vec{x})\hat{T}^{+}(d\vec{x})=\left(\mathrm{I}-i\hat{\vec{K}}\cdot d\vec{x}\right)\left(\mathrm{I}+i\hat{\vec{K}}\cdot d\vec{x}\right)=\mathrm{I}\quad\text{（忽略二级无穷小）}$$

平移变换的结合律

$$\begin{aligned}\hat{T}(d\vec{x}_1)\hat{T}(d\vec{x}_2)&=\left(1-i\hat{\vec{K}}\cdot d\vec{x}_1\right)\left(1-i\hat{\vec{K}}\cdot d\vec{x}_2\right)\\&=1-i\hat{\vec{K}}\cdot\left(d\vec{x}_1+d\vec{x}_2\right)=\hat{T}(d\vec{x}_1+d\vec{x}_2)\end{aligned}$$

故有限平移变换可以看成是无限小平移变换的多次操作。

对于任意态 $|\psi\rangle$，

$$\begin{aligned}\hat{\vec{x}}\hat{T}(d\vec{x})|\psi\rangle&=\int d^3x\,\hat{\vec{x}}\hat{T}(d\vec{x})|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle\\&=\int d^3x\,\hat{\vec{x}}|\vec{x}+d\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle\\&=\int d^3x\left(\vec{x}+d\vec{x}\right)|\vec{x}+d\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle,\\\hat{T}(d\vec{x})\hat{\vec{x}}|\psi\rangle&=\int d^3x\,\hat{T}(d\vec{x})\hat{\vec{x}}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle\\&=\int d^3x\,\hat{T}(d\vec{x})\vec{x}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle\\&=\int d^3x\,\vec{x}\hat{T}(d\vec{x})|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle\\&=\int d^3x\,\vec{x}|\vec{x}+d\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle,\end{aligned}$$

$$\left[\hat{\vec{x}},\quad\hat{T}(d\vec{x})\right]|\psi\rangle=\int d^3x\,d\vec{x}|\vec{x}+d\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle$$

利用 $\left|\vec{x}+d\vec{x}\right\rangle=\left|\vec{x}\right\rangle+\left(d\vec{x}\cdot\vec{\nabla}\right)\left|\vec{x}\right\rangle+\ldots\ldots$

有 $\left[\hat{\vec{x}},\quad \hat{T}(d\vec{x})\right]\left|\psi\right\rangle=\int d^3x\ d\vec{x}\left|\vec{x}\right\rangle\left\langle\vec{x}\middle|\psi\right\rangle=d\vec{x}\left|\psi\right\rangle$

故有对易关系 $\left[\hat{\vec{x}},\ \hat{T}(d\vec{x})\right]=d\vec{x}$

即 $\left[\hat{\vec{x}},\ \hat{\vec{K}}\cdot d\vec{x}\right]=id\vec{x}$

如果取平移在 x_j 的方向， $d\vec{x}=\varepsilon\vec{e}_j$

有 $\left[\hat{x}_i,\quad \hat{K}_j\right]=\delta$

与量子力学基本对易关系 $\left[\hat{x}_i,\ \hat{p}_j\right]=i\hbar\delta_{ij}$

比较，可取 $\hat{\vec{K}}=\dfrac{\hat{\vec{p}}}{\hbar}$，

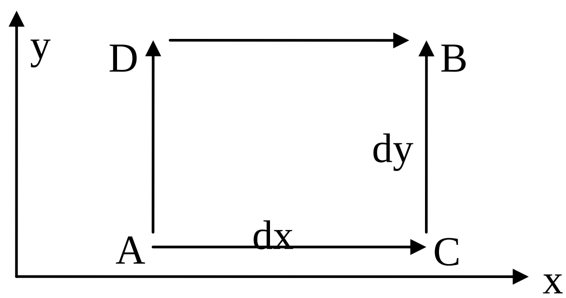
表明**动量是平移变换的生成元**，

$$\hat{T}(d\vec{x})=1-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot d\vec{x}\text{。}$$

由于任意两个动量算符对易 $\left[\hat{p}_i,\quad \hat{p}_j\right]=0$,

有 $\left[\hat{T}(dx_i),\hat{T}(dx_j)\right]=0$，

说明平移与次序无关。例如平移步骤 $A\xrightarrow{dx}C\xrightarrow{dy}B$ 与 $A\xrightarrow{dy}D\xrightarrow{dx}B$ 效果一样。



3）坐标表象

$\hat{\vec{x}}$ 的矩阵元 $\langle \vec{x}_1 | \hat{\vec{x}} | \vec{x}_2 \rangle = \vec{x}_2 \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \vec{x}_1 \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$ 为对角矩阵

由 $\hat{T}(d\vec{x})|\beta\rangle = \int d^3x |\vec{x}\rangle\langle \vec{x} - d\vec{x}|\beta\rangle$

利用 $\langle \vec{x} - d\vec{x}| = \langle \vec{x}| - d\vec{x}\cdot\vec{\nabla}\langle \vec{x}| + \ldots\ldots$

有 $\hat{T}(d\vec{x})|\beta\rangle = |\beta\rangle - d\vec{x}\cdot\int d^3x |\vec{x}\rangle\vec{\nabla}\langle \vec{x}|\beta\rangle$

与 $\hat{T}(d\vec{x})|\beta\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot d\vec{x}\right)|\beta\rangle$

比较，有 $\hat{\vec{p}}|\beta\rangle = \int d^3x |\vec{x}\rangle\left(-i\hbar\nabla\right)\langle \vec{x}|\beta\rangle,$

$$\langle \alpha | \hat{\vec{p}} | \beta\rangle = \int d^3x \langle \alpha | \vec{x}\rangle\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\langle \vec{x}|\beta\rangle$$

若取 $\langle \alpha| = \langle \vec{x}_1|,\ \ |\beta\rangle = |\vec{x}_2\rangle$,

有动量算符 $\hat{\vec{p}}$ 在坐标表象的矩阵元：

$$\langle \vec{x}_1 | \hat{\vec{p}} | \vec{x}_2\rangle = \int d^3x \langle \vec{x}_1 | \vec{x}\rangle\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\langle \vec{x}|\vec{x}_2\rangle = \left(-i\hbar\nabla_1\right)\delta\left(\vec{x}_1 - \vec{x}_2\right)$$

再取 $\langle \alpha| = \langle \vec{x}_1|,\ \ |\beta\rangle = |\vec{p}\rangle$,

有 $\langle \vec{x}_1 | \hat{\vec{p}} | \vec{p}\rangle = \int d^3x \langle \vec{x}_1 | \vec{x}\rangle\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle = \left(-i\hbar\nabla_1\right)\langle \vec{x}_1|\vec{p}\rangle$

即 $\vec{p}\langle \vec{x}_1 | \vec{p}\rangle = \left(-i\hbar\nabla_1\right)\langle \vec{x}_1|\vec{p}\rangle$

此为动量算符在坐标表象的本征方程，本征态是

$$\langle \vec{x} | \vec{p}\rangle = Ne^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$$

说明动量本征态在坐标表象的表示是平面波。由归一化条件，

$$\langle \vec{x} | \vec{p}\rangle = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}\ 。$$

4）动量表象

$\hat{\vec{p}}$ 的矩阵元 $\langle \vec{p}_1 | \hat{\vec{p}} | \vec{p}_2\rangle = \vec{p}_1\delta(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)$ 为对角矩阵。

$\hat{x}$的矩阵元

$$\langle \vec{p}_1|\hat{\vec{x}}|\vec{p}_2\rangle = \int d^3x_1 d^3x_2 \langle \vec{p}_1|\vec{x}_1\rangle\langle \vec{x}_1|\hat{\vec{x}}|\vec{x}_2\rangle\langle \vec{x}_2|\vec{p}_2\rangle$$

$$= \int d^3x_1 d^3x_2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_1\cdot\vec{x}_1} \vec{x}_2 \delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_2\cdot\vec{x}_2}$$

$$= \int d^3x_1 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \vec{x}_1 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_2-\vec{p}_1)\cdot\vec{x}_1}$$

$$= \int d^3x_1 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left(i\hbar\vec{\nabla}_{p_1}\right) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_2-\vec{p}_1)\cdot\vec{x}_1}$$

$$= i\hbar\vec{\nabla}_{p_1}\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2)$$

注意这里是对动量的微分。

坐标算符本征态在动量表象的形式

$$\langle \vec{p}|\vec{x}\rangle = \langle \vec{x}|\vec{p}\rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} 。$$

例 1：在坐标表象证明$\hat{x}$，$\hat{p}$ 为厄米算符。

$$x_{x_1x_2} = \delta(x_1-x_2)x_1 ,$$

$$x^+_{x_1x_2} = \left(x_{x_2x_1}\right)^* = \left(\delta(x_2-x_1)x_2\right)^* = \delta(x_2-x_1)x_2 = \delta(x_1-x_2)x_1 = x_{x_1x_2}$$

$$p_{x_1x_2} = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\right)\delta(x_1-x_2) = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial(x_1-x_2)}\right)\delta(x_1-x_2) ,$$

$$p^+_{x_1x_2} = \left(p_{x_2x_1}\right)^* = \left(\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial(x_2-x_1)}\right)\delta(x_2-x_1)\right)^*$$

$$= \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial(x_2-x_1)}\right)\delta(x_2-x_1) = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial(x_1-x_2)}\right)\delta(x_1-x_2) = p_{x_1x_2}$$

故 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 均为厄米算符。

例 2：在坐标表象计算$\left[\hat{x},\hat{p}\right]$

$$\hat{x}\hat{p} = \int dx_1 dx_2 \hat{x}|x_1\rangle\langle x_1|\hat{p}|x_2\rangle\langle x_2|$$

$$= \int dx_1 dx_2 x_1 |x_1\rangle\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\right)\delta(x_1 - x_2)\langle x_2|$$

$$= -\int dx_1 dx_2 \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\right)\left(x_1|x_1\rangle\right)\delta(x_1 - x_2)\langle x_2| \qquad \text{（分步积分）}$$

$$= -\int dx_1 \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\right)\left(x_1|x_1\rangle\right)\langle x_1|$$

$$= \int dx_1\ x_1|x_1\rangle\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\right)\langle x_1| \qquad \text{（分步积分）}$$

同理可证，

$$\hat{p}\hat{x} = -i\hbar + \int dx_1 x_1 |x_1\rangle\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\right)\langle x_1|,$$

故 $\left[\hat{x}, \hat{p}\right] = i\hbar$ 。

由不确定关系，坐标与动量不可能同时有确定值。例如，在动量本征态，动量有确定值，$\left\langle p\left|\left(\Delta\hat{p}\right)^2\right|p\right\rangle = 0$，但坐标无确定值，取值为 x 的几率是

$$\left|\langle x|p\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}\right|^2 = const,$$

说明粒子在 $-\infty < x < \infty$ 出现的几率处处相等，即坐标的取值完全不确定，方差 $\left\langle p\left|\left(\Delta\hat{x}\right)^2\right|p\right\rangle = \infty$ 。坐标算符与动量算符仍然满足不确定关系

$$\left\langle\left(\Delta\hat{x}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{p}_x\right)^2\right\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} 。$$

例 3：最小不确定态。

要在不确定关系 $\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle \geq \left(\frac{1}{2i}\left\langle\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right\rangle\right)^2$ 取等号，得到最小不确定度，态必须满足：

1）在 Schwarz 不等式中取等号$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle=\left|\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle\right|^2$；

2）$\mathrm{Re}\left\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right\rangle=0$ 。

1）的解是 $\Delta\hat{B}\left|\psi\right\rangle=c\Delta\hat{A}\left|\psi\right\rangle$， c 为常数；

2）即$\mathrm{Re}\left(c\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\right)=0$，由于$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle$是实数，故$c=ia$， a 为实数。

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

这就是最小不确定性对态$\left|\psi\right\rangle$的限制。取

$$\hat{A}=\hat{x}，\ \hat{B}=\hat{p}，$$

$$\left(\hat{p}-\left\langle p\right\rangle\right)\left|\psi\right\rangle=ia\left(\hat{x}-\left\langle x\right\rangle\right)\left|\psi\right\rangle$$

进入坐标表象，有

$$\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\left\langle p\right\rangle\right)\psi\left(x\right)=ia\left(x-\left\langle x\right\rangle\right)\psi\left(x\right)$$

解为 $$\psi\left(x\right)=Ae^{-a\frac{\left(x-\left\langle x\right\rangle\right)^2}{2\hbar}}e^{i\frac{\left\langle p\right\rangle x}{\hbar}}$$，是坐标空间的 Gaussian 波包。

例 4：已知在坐标表象的态$\left\langle\vec{r}\,\middle|\,\psi\right\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}$（氢原子基态），求动量的平均值。

由于$\left\langle\vec{x}\,\middle|\,\psi\right\rangle$不是平面波，动量无确定值，取动量为 $\vec{p}$ 的几率幅是

$$\left\langle\vec{p}\,\middle|\,\psi\right\rangle=\int d^3\vec{r}\left\langle\vec{p}\,\middle|\,\vec{r}\right\rangle\left\langle\vec{r}\,\middle|\,\psi\right\rangle=\int d^3\vec{r}\,\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}$$

$$=\frac{\left(2a_0\hbar\right)^{3/2}\hbar}{\pi(a_0^2p^2+\hbar^2)^2}$$ (与动量的方向无关）

动量大小的平均值

$$\langle p\rangle = \frac{\int dp\ p^3 \left|\langle \vec{p}|\psi\rangle\right|^2}{\int dp\ p^2 \left|\langle \vec{p}|\psi\rangle\right|^2}。$$

5）经典力学系统的正则量子化 (Dirac，1925)

分析力学的 Poisson 括号：

$$[A,\ B]_P = \sum_s \left(\frac{\partial A}{\partial q_s}\frac{\partial B}{\partial p_s} - \frac{\partial A}{\partial p_s}\frac{\partial B}{\partial q_s} \right)$$

例如，

$$\left[x_i,\ p_j\right]_P = \delta_{ij}$$

如果重新定义两个力学量的 Poisson 括号为对应算符的对易关系，

$$\left[x_i,\ p_j\right]_P \ \rightarrow\ \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}_i,\ \hat{p}_j\right]$$

则有

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

这就是从经典力学到量子力学的正则量子化。