

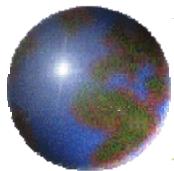
第六章 量子力学的矩阵形式及表示理论

§ 6.1 量子体系状态的表示

在几何学中，一个矢量可以用它在某个坐标架中的坐标来描述（现限于正交坐标）

$$\underline{A} = \underline{e}_1 a_1 + \underline{e}_2 a_2 + \underline{e}_3 a_3$$

显然，当坐标架给定后 $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$

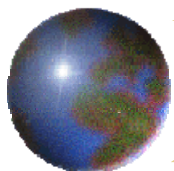


$$(a_i = \underline{e}_i \cdot \underline{A})$$

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

是与矢量 $\underline{A}$ 完全等价的.

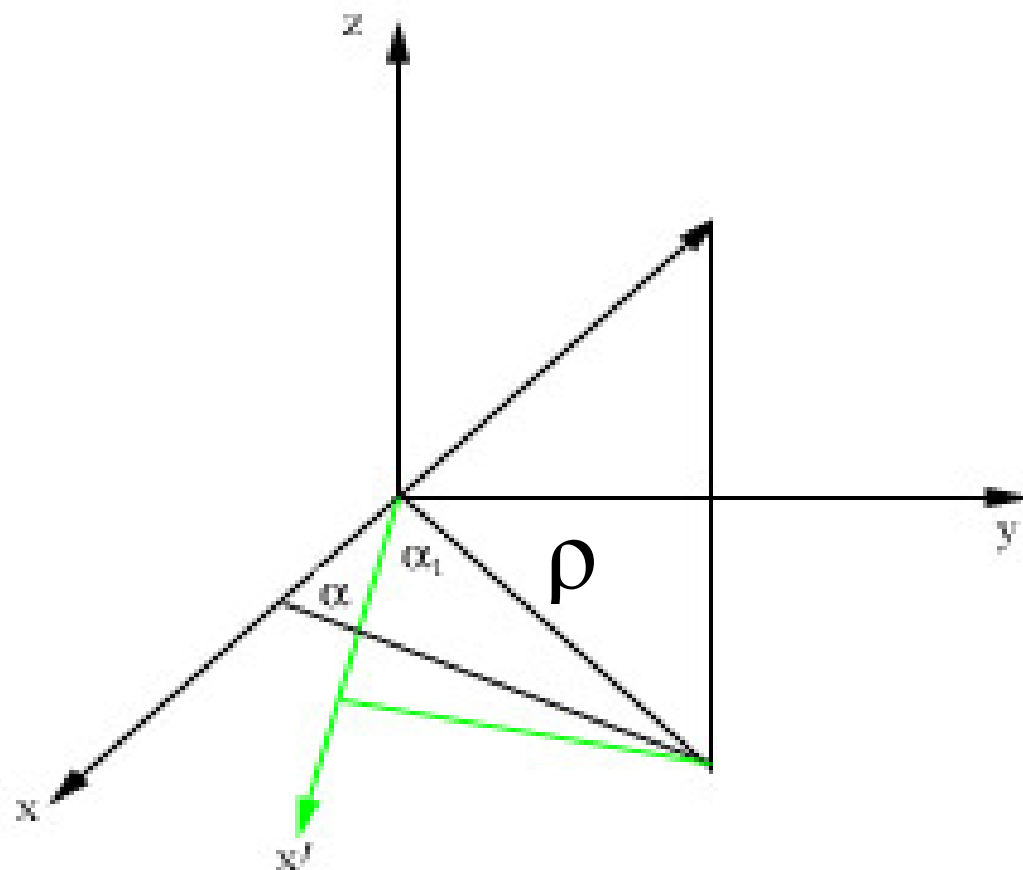
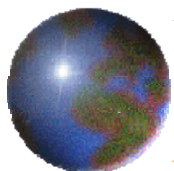
当然可另选一坐标系 $(\underline{e}'_i)$, 则矢量为

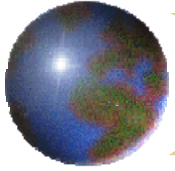


$$\underline{A} = \sum_i \underline{e}'_i a'_i$$

同样, $\{a'_i\}$ 与 $\underline{A}$ 等价。

所以, 我们可以用某一坐标系中的坐标来完全描述空间某一矢量。而同一矢量在二坐标系中的坐标之间有特定的关系。例如: 新坐标系是绕原坐标系 Z 轴转 α 而获得





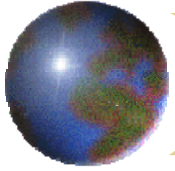
$$a'_1 = \rho \cos \alpha_1$$

$$= a_1 \cos \alpha + a_2 \sin \alpha$$

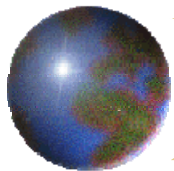
$$a'_2 = \rho \sin \alpha_1$$

$$= a_2 \cos \alpha - a_1 \sin \alpha$$

$$a'_3 = a_3$$



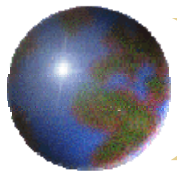
$$\begin{aligned} a'_3 &= a_3 \\ \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \\ &= R_Z(\alpha) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$



类似地，绕y轴转角 β 则有

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & -\sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

$$= R_y(\beta) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

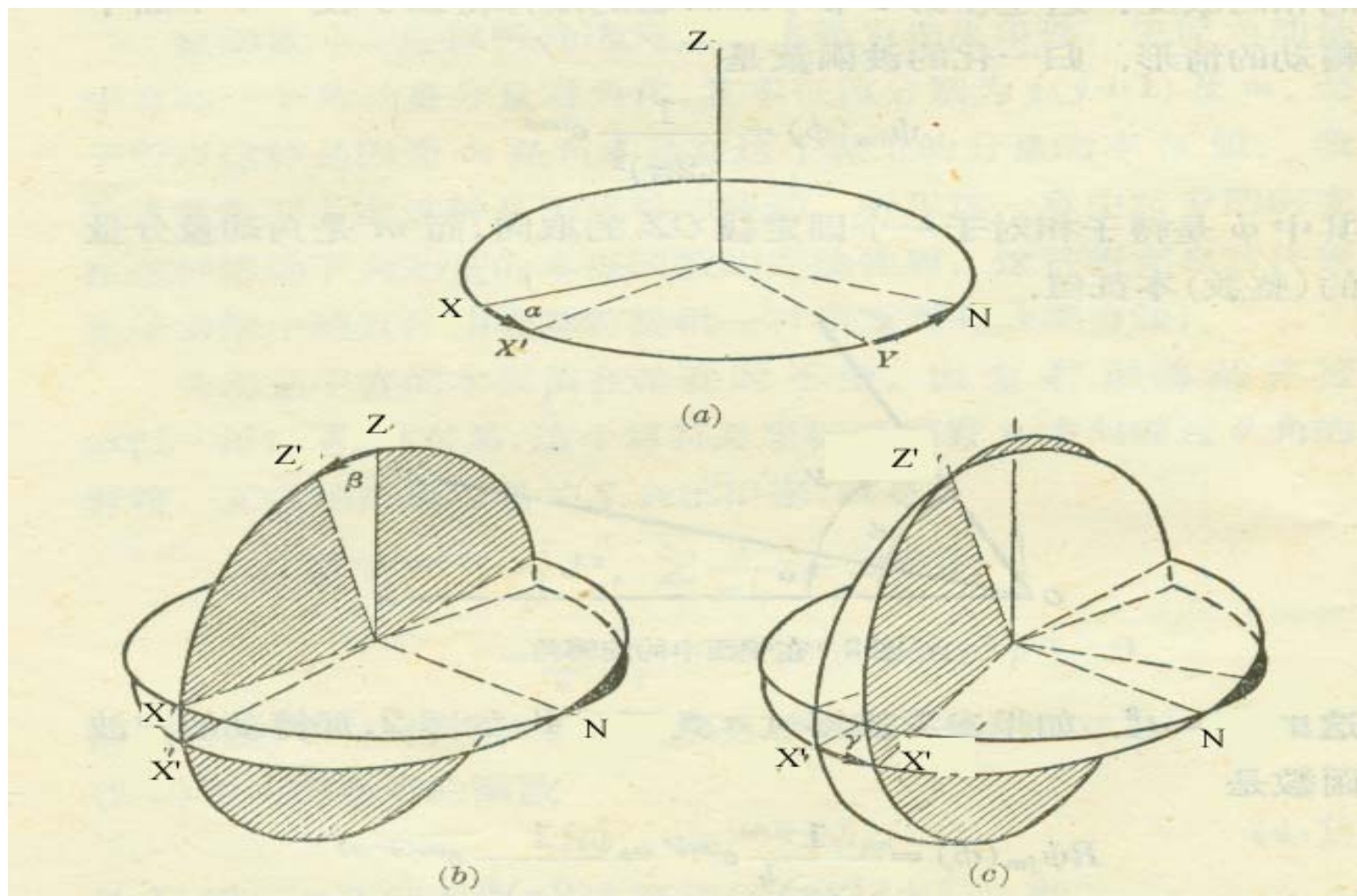
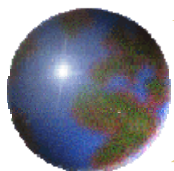


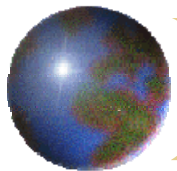
普遍而言，先绕 z 转 α ，再绕新 y 转 β
(即N轴)，再绕新 z 轴(即 z')转 γ ，
这时

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \end{pmatrix} = R_{z'}(\gamma) R_N(\beta) R_z(\alpha) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

事实上，

$$R_{z'}(\gamma) = R_N(\beta) R_z(\alpha) R_z(\gamma) R_z^{-1}(\alpha) R_N^{-1}(\beta)$$



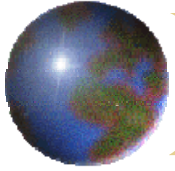


而

$$R_N(\beta) = R_Z(\alpha)R_Y(\beta)R_Z^{-1}(\alpha)$$

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \end{pmatrix} = [R_Z(\alpha)R_Y(\beta)R_Z^{-1}(\alpha)]R_Z(\alpha)R_Z(\gamma)R_Z^{-1}(\alpha)R_N^{-1}(\beta)R_N(\beta)R_Z(\alpha) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$
$$= \mathbf{R_Z(\alpha)R_Y(\beta)R_Z(\gamma)} \begin{pmatrix} \mathbf{a_1} \\ \mathbf{a_2} \\ \mathbf{a_3} \end{pmatrix}$$

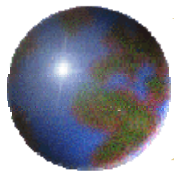
而且可以看到



$$\mathbf{R}_z(\alpha)\mathbf{R}_z^\dagger(\alpha)$$

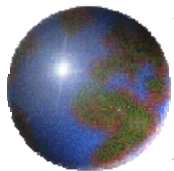
$$= \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & -\sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & \sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{I}$$



$$\mathbf{R}_z^\dagger(\alpha)\mathbf{R}_z(\alpha) = \mathbf{I}$$

这表明， $\mathbf{R}_z(\alpha)$ 是一个正矩阵

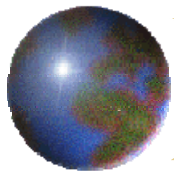


现来讨论一下体系状态的“坐标”—状态表示

如果有一组力学量 $\hat{\mathbf{M}}$ 构成一力学量完全集，
其共同本征态构成一正交，归一和完备组，
并有封闭性。

$$(\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{mn}$$

$$\sum_m \varphi_m(\underline{r}) \varphi_m^*(\underline{r}') = \delta(\underline{r} - \underline{r}')$$

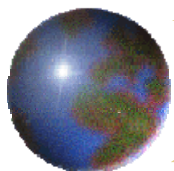


$$\Psi(\underline{r}) = \int \delta(\underline{r} - \underline{r}') \Psi(\underline{r}') d\underline{r}'$$

$$= \sum_m \varphi_m(\underline{r}) a_m$$

$$a_m = \int \varphi_m^*(\underline{r}') \Psi(\underline{r}') d\underline{r}' = (\varphi_m, \Psi)$$

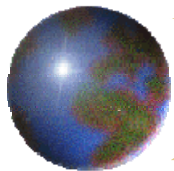
显然，当选定一组力学量完全集 $\hat{\mathbf{M}}$ 后，
则集合 $\{\mathbf{a}_m\}$ 是与 Ψ 完全等价的，它完全确定了体系的状态



我们将会看到， $\{a_m\}$ 与 Ψ 一样，提供我们同样多的信息。

状态表示的定义：若力学量的完全集 $\hat{M}$ 的共同本征函数组为 φ_m ，则 $a_m = (\varphi_m, \Psi)$ 的全体 $\{a_m\}$ ，被称为体系所处态 Ψ 在表象 M 中的表示。

也可以看作态矢量 Ψ 在 φ_m 作为基矢所张的“坐标系”中的“坐标”。

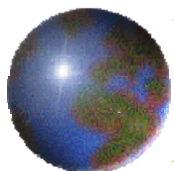


$\hat{\mathbf{r}}$ 的本征函数为 $\varphi_{\underline{\mathbf{r}}'}(\underline{\mathbf{r}}) = \delta(\underline{\mathbf{r}} - \underline{\mathbf{r}}')$ 它是力学量 (x, y, z) 的共同本征函数。

对于任何一个态，都能按它展开

$$\begin{aligned}(\varphi_{\underline{\mathbf{r}}'}, \Psi) &= \int \varphi_{\underline{\mathbf{r}}'}^*(\underline{\mathbf{r}}) \Psi(\underline{\mathbf{r}}) d\underline{\mathbf{r}} = \Psi(\underline{\mathbf{r}}') \\ &= a_{\underline{\mathbf{r}}'}\end{aligned}$$

所以， $\Psi(\underline{\mathbf{r}}')$ 是状态 Ψ 在表象 $\underline{\mathbf{r}}$ 中相应的本征值为 $\underline{\mathbf{r}}'$ 的表示。

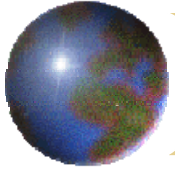


对于分立谱：则 ψ 在 $\mathbf{M}$ 表象中的表示 $\{a_m\}$ ，可以用一单列矩阵表示

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_M \end{pmatrix}$$

而归一化

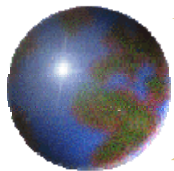
$$(\psi, \psi) = \int \sum_m a_m^* u_m^*(\underline{r}) \sum_n a_n u_n(\underline{r}) d\underline{r} = \sum_m |a_m|^2$$



$$= (\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^* \mathbf{L}) \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{M} \end{pmatrix} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} = 1$$

对于连续谱：则 Ψ 在表象 α 中的表示 $\{a_\alpha\}$ 它是 α 的函数

$$\begin{aligned} (\psi, \psi) &= \int \mathbf{a}_\alpha^* \varphi_\alpha^*(\underline{\mathbf{r}}) \mathbf{a}_{\alpha'} \varphi_{\alpha'}(\underline{\mathbf{r}}) d\alpha d\alpha' d\underline{\mathbf{r}} \\ &= \int |\mathbf{a}_\alpha|^2 d\alpha = 1 \end{aligned}$$

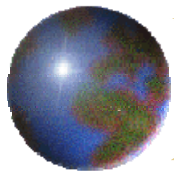


§ 6.2 Dirac 符号介绍

一个态矢量可由一组数 $\{\mathbf{a}_m\}$ 表示，但在表示 $\mathbf{a}_m$ （或计算）时，其实已用到态矢量在 $\underline{\mathbf{r}}$ 表象中的表示及 $\underline{\mathbf{r}}$ 表象的共同本征矢的表示。

$$\mathbf{a}_m = \int \Phi_m^*(\underline{\mathbf{r}}) \Psi(\underline{\mathbf{r}}) d\underline{\mathbf{r}}$$

$$(\varphi_r, \psi) = \int \delta(\underline{\mathbf{r}}' - \underline{\mathbf{r}}) \Psi(\underline{\mathbf{r}}') d\underline{\mathbf{r}}' = \Psi(\underline{\mathbf{r}})$$

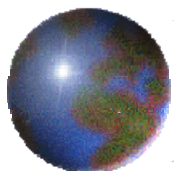


$$(\varphi_{\mathbf{r}}, \Phi_{\mathbf{m}}) = \int \delta(\underline{\mathbf{r}}' - \underline{\mathbf{r}}) \Phi_{\mathbf{m}}(\underline{\mathbf{r}}') d\underline{\mathbf{r}}' = \Phi_{\mathbf{m}}(\underline{\mathbf{r}})$$

事实上，描述体系所处的状态，并不需要依赖于某一表象。而仅在计算时，在一个具体表象中进行。

Dirac 建议用一抽象的符号来描述体系所处的状态。

(1) 量子态、ket矢，bra矢

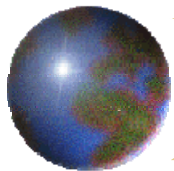


量子力学中的状态，可以看作某线性空间中的一个矢量，我们称为 **ket 矢** 以 $|\rangle$ 表示. 为使它可代表不同 **ket 矢**，则在这表示中给出特征标志符号。

如态矢量是 $\hat{N}$ 的本征矢，它的本征值为 N ，则本征矢可表为 $|N\rangle$

中心力场中能量的本征波函数

$$u_{nlm}(\underline{r}) \Rightarrow |nlm\rangle$$



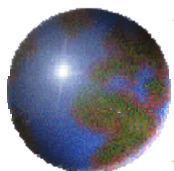
$$\hat{H}|nlm\rangle = E_{nl}|nlm\rangle$$

$$\hat{L}^2|nlm\rangle = l(l+1)\hbar^2|nlm\rangle$$

$$\hat{L}_z|nlm\rangle = m\hbar|nlm\rangle$$

共轭空间态矢量可以以符号 $\langle \quad |$ 来表示，
称为**bra**矢，如

$$\langle \mathbf{N} |$$
$$\langle \mathbf{nlm} |$$



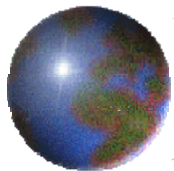
(2) 标积:

A. 标积定义: 矢量 $|m\rangle$ 和矢量 $|n\rangle$ 的标积为一数, 它表示为

$$\langle m|n\rangle = \langle m|\cdot|n\rangle = (\varphi_m, \psi_n)$$

$$\langle m|m\rangle = 1$$

$$\langle m|n\rangle^* = \langle n|m\rangle$$

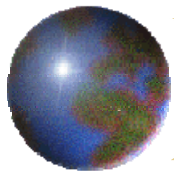


B. 基矢的正交、归一、完备和封闭性； 态矢量的表示

若力学量 $\hat{N}$ 形成一力学量完全集

共同本征态为 $|\mathbf{n}\rangle$ 被称为 $\mathbf{N}$ 表象的基矢
相应本征值为 N_n ，它是正交、归一

$$\langle \mathbf{n} | \mathbf{n}' \rangle = \delta_{nn'} \quad (\text{或} \langle c | c' \rangle = \delta(c - c'))$$



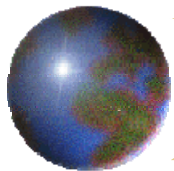
完备性:

对任一空间态矢量 $|\alpha\rangle$, 可表为

$$|\alpha\rangle = \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle a_{\mathbf{n}}^{(\alpha)}$$

$a_{\mathbf{n}}^{(\alpha)}$ 称为态矢量 $|\alpha\rangle$ 在 $\mathbf{N}$ 表象中的表示

$$a_{\mathbf{n}}^{(\alpha)} = \langle \mathbf{n} | \alpha \rangle$$



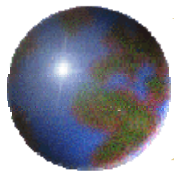
封闭性:

$$|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\alpha\rangle$$

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = I \quad \int |x\rangle dx \langle x| = I$$

在 x 表象中, $|\alpha\rangle$ 的表示即为

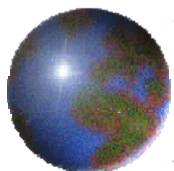
$$\langle x|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x)$$



若 $|\alpha\rangle$ 就是 N 表象的本征矢 $|\mathbf{n}\rangle$ ，那在自身表象中的表示

$$a_{n'}^{(n)} = \langle n' | n \rangle = \delta_{n'n}$$

$$a_{n'}^{(n)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \text{💣} \\ 1 \\ \text{💣} \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow \text{第 } n \text{ 行 } (n' = 1, 2, \text{😞😞})$$



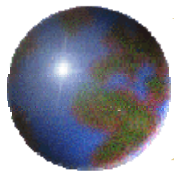
N表象中的基矢在 **x** 表象中的表示即为

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{n} \rangle = \varphi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$$

而 $\langle \mathbf{n} | \mathbf{x} \rangle$ 代表 **x** 表象中的基矢（本征值为 **x**）在 **N** 表象中的表示

$$\langle \mathbf{n} | \mathbf{x} \rangle = \eta_{\mathbf{x}}(\mathbf{n}) = \langle \mathbf{x} | \mathbf{n} \rangle^* = \varphi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x})$$

这样，在坐标表象中，本征函数组，即基矢的正交、归一，完备和封闭性就易于了解。



由本征矢 $|\mathbf{n}\rangle$ 的封闭性:

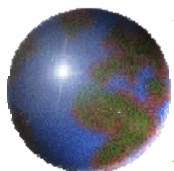
$$\sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| = \mathbf{I}$$

即

$$\sum_{\mathbf{n}} \langle \mathbf{x} | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | \mathbf{x}' \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle$$

$$\sum_{\mathbf{n}} \varphi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

$$\sum_{\mathbf{n}} \eta_{\mathbf{x}}^*(\mathbf{n}) \eta_{\mathbf{x}'}(\mathbf{n}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

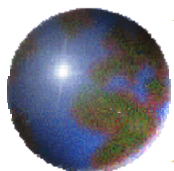


而二个矢量的标积

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

$$= \sum_n a_n^* b_n$$

$$= \left(\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*, \mathbf{L} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_3 \\ \mathbf{M} \end{pmatrix} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{b}$$



$$= \int \langle \varphi | \mathbf{x} \rangle d\mathbf{x} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \int \varphi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

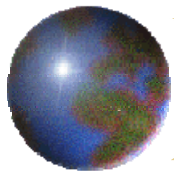
(3) 算符及其表示

A. 算符的自然展开：在量子力学中，可观测量是以厄密算符表示，其本征方程为

$$\hat{L} |L_n\rangle = L_n |L_n\rangle \quad \text{或} \quad \hat{L} |\mathbf{L}\rangle = \mathbf{L} |\mathbf{L}\rangle$$

对任意一个态矢量 $|\alpha\rangle$ 可按 $|L_n\rangle$ 展开

$$|\alpha\rangle = \sum |L_n\rangle a_n = \sum |L_n\rangle \langle L_n | \alpha \rangle$$

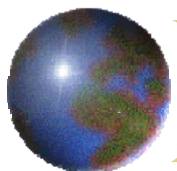


于是有

$$\begin{aligned}\hat{L}|\alpha\rangle &= \hat{L} \sum_n |L_n\rangle \langle L_n|\alpha\rangle \\ &= \sum_n L_n |L_n\rangle \langle L_n|\alpha\rangle\end{aligned}$$

由于 $|\alpha\rangle$ 是任意态，所以有

$$\hat{L} = \sum_n |L_n\rangle L_n \langle L_n| \quad \text{或} \quad \hat{L} = \int |L\rangle L \langle L| dL$$



事实上，这即定义了一个算符 $\hat{L}$ ，或称为 $\hat{L}$ 算符的自然展开。这将使厄米算符的函数的定义更广。

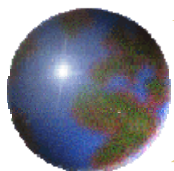
若

$$F(x) = \sum_n f_n x^n$$

则可定义厄米算符的函数

$$\hat{F}(\hat{A}) = \sum_n f_n \hat{A}^n$$

它的自然展开即为

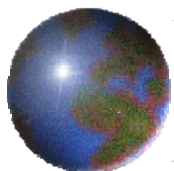


$$\mathbf{F}(\hat{\mathbf{A}}) = \sum_{\mathbf{m}} |\mathbf{A}_{\mathbf{m}}\rangle \sum_{\mathbf{n}} f_{\mathbf{n}}(\mathbf{A}_{\mathbf{m}})^{\mathbf{n}} \langle \mathbf{A}_{\mathbf{m}}| = \sum_{\mathbf{m}} |\mathbf{A}_{\mathbf{m}}\rangle \mathbf{F}(\mathbf{A}_{\mathbf{m}}) \langle \mathbf{A}_{\mathbf{m}}|$$

我们可用这表示式来定义厄米算符的函数。

例如：算符 $\hat{\mathbf{A}}$ 的逆算符 $\hat{\mathbf{A}}^{-1}$ 是算符 $\hat{\mathbf{A}}$ 的函数。但是，它不能用幂级数展开来定义。但我们可用算符的自然展开来定义它。逆算符 $\hat{\mathbf{A}}^{-1}$ 可定义为

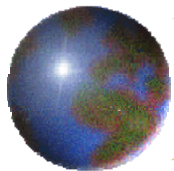
$$\hat{\mathbf{A}}^{-1} = \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{A}_{\mathbf{n}}\rangle \frac{1}{\mathbf{A}_{\mathbf{n}}} \langle \mathbf{A}_{\mathbf{n}}|$$



显然，这一定义是正确的。因

$$\begin{aligned}\hat{A}\hat{A}^{-1} &= \hat{A} \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{A}_{\mathbf{n}}\rangle \frac{1}{A_{\mathbf{n}}} \langle \mathbf{A}_{\mathbf{n}}| = \sum_{\mathbf{n}} A_{\mathbf{n}} |\mathbf{A}_{\mathbf{n}}\rangle \frac{1}{A_{\mathbf{n}}} \langle \mathbf{A}_{\mathbf{n}}| \\ &= \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{A}_{\mathbf{n}}\rangle \langle \mathbf{A}_{\mathbf{n}}| = \mathbf{I}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{A}^{-1}\hat{A} &= \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{A}_{\mathbf{n}}\rangle \frac{1}{A_{\mathbf{n}}} \langle \mathbf{A}_{\mathbf{n}}| \hat{A} \\ &= \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{A}_{\mathbf{n}}\rangle \frac{1}{A_{\mathbf{n}}} \langle \mathbf{A}_{\mathbf{n}}| A_{\mathbf{n}}^* = \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{A}_{\mathbf{n}}\rangle \frac{1}{A_{\mathbf{n}}} \langle \mathbf{A}_{\mathbf{n}}| A_{\mathbf{n}} \\ &= \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{A}_{\mathbf{n}}\rangle \langle \mathbf{A}_{\mathbf{n}}| = \mathbf{I}\end{aligned}$$



B. 算符的表示

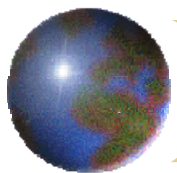
算符 $\hat{L}$ 是将一态矢量变为另一态矢量

$$|\mathbf{R}\rangle = \hat{L}|\mathbf{N}\rangle$$

设： $\hat{A}$ 是一力学量完全集，其正交，归一，完备组基矢为 $|\alpha_n\rangle$

则

$$\langle \alpha_n | \mathbf{R} \rangle = \sum_m \langle \alpha_n | \hat{L} | \alpha_m \rangle \langle \alpha_m | \mathbf{N} \rangle$$

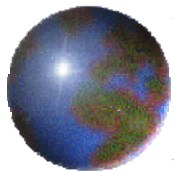


$\langle \alpha_n | R \rangle$ 和 $\langle \alpha_m | N \rangle$ 分别是态矢量 $|R\rangle$, $|N\rangle$ 在表象 **A** 中的表示。

而 $\langle \alpha_n | \hat{L} | \alpha_m \rangle$ 是将态矢量 $|R\rangle$ 表示变到态矢量 $|N\rangle$ 表示, 所以它起到算符 $\hat{L}$ 同样的作用。

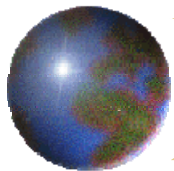
$\langle \alpha_n | \hat{L} | \alpha_m \rangle$ 的全体称为算符在表象 **A** 中的矩阵表示。

显然, 计算这一表示, 其结果与在那一个表象中计算是无关的



例 在 $\underline{\mathbf{r}}$ 表象中计算态矢量和算符在表象 $\mathbf{A}$ 中的表示和矩阵元

$$\begin{aligned}\langle \alpha_n | \mathbf{R} \rangle &= \int \langle \alpha_n | \underline{\mathbf{r}} \rangle d\underline{\mathbf{r}} \langle \underline{\mathbf{r}} | \mathbf{R} \rangle \\ &= \int V_{\alpha_n}^* (\underline{\mathbf{r}}) \varphi_{\mathbf{R}} (\underline{\mathbf{r}}) d\underline{\mathbf{r}} \\ &= (\mathbf{V}_{\alpha_n}, \varphi_{\mathbf{R}}) \\ &= \mathbf{a}_n^{\mathbf{R}}\end{aligned}$$

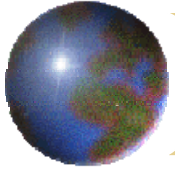


同理

$$\langle \alpha_m | N \rangle = \int V_{\alpha_m}^*(\underline{r}) \psi_N(\underline{r}) d\underline{r} = (\mathbf{V}_{\alpha_m}, \psi_N) = \mathbf{b}_m^N$$

$$\therefore \mathbf{a}_n^R = \sum_m (\hat{L})_{nm} \mathbf{b}_m^N$$

$$\begin{aligned} \langle \alpha_n | \hat{L} | \alpha_m \rangle &= \int \langle \alpha_n | \underline{r} \rangle d\underline{r} \langle \underline{r} | \hat{L} | \underline{r}' \rangle d\underline{r}' \langle \underline{r}' | \alpha_m \rangle \\ &= \int V_{\alpha_n}^*(\underline{r}) (\hat{L})_{\underline{r}\underline{r}'} V_{\alpha_m}(\underline{r}') d\underline{r} d\underline{r}' \end{aligned}$$



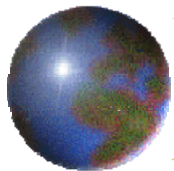
$$(\hat{L})_{\underline{r}\underline{r}'} = \langle \underline{r} | \hat{L} | \underline{r}' \rangle$$

$$= \sum_{\mathbf{n}} \langle \underline{r} | \mathbf{L}_{\mathbf{n}} \rangle \mathbf{L}_{\mathbf{n}} \langle \mathbf{L}_{\mathbf{n}} | \underline{r}' \rangle$$

$$= \sum_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{n}}(\underline{r}) \mathbf{L}_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{n}}^*(\underline{r}')$$

$$= \sum_{\mathbf{n}} \hat{L}(\underline{r}, -i\hbar \nabla) u_{\mathbf{n}}(\underline{r}) u_{\mathbf{n}}^*(\underline{r}')$$

$$= \hat{L}(\underline{r}, -i\hbar \nabla) \delta(\underline{r} - \underline{r}')$$

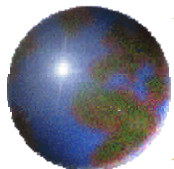


$\hat{\mathbf{L}}(\underline{\mathbf{r}}, -i\hbar\nabla)$ 为力学量 $\hat{\mathbf{L}}$ 在表象 $\underline{\mathbf{r}}$ 中的算符。

$$\langle \alpha_n | \hat{\mathbf{L}} | \alpha_m \rangle = \int \langle \alpha_n | \underline{\mathbf{r}} \rangle d\underline{\mathbf{r}} \langle \underline{\mathbf{r}} | \hat{\mathbf{L}} | \underline{\mathbf{r}}' \rangle d\underline{\mathbf{r}}' \langle \underline{\mathbf{r}}' | \alpha_m \rangle$$

$$= \int V_{\alpha_n}^*(\underline{\mathbf{r}}) d\underline{\mathbf{r}} (\hat{\mathbf{L}}(\underline{\mathbf{r}}, -i\hbar\nabla) \delta(\underline{\mathbf{r}} - \underline{\mathbf{r}}')) V_{\alpha_m}(\underline{\mathbf{r}}') d\underline{\mathbf{r}}'$$

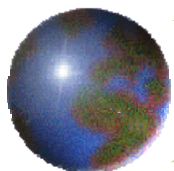
$$= \int V_{\alpha_n}^*(\underline{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{L}}(\underline{\mathbf{r}}, -i\hbar\nabla) V_{\alpha_m}(\underline{\mathbf{r}}) d\underline{\mathbf{r}}$$



事实上，矩阵

$$(L_{nm})$$

描述了表象 **A** 的本征态，即基矢 $|\alpha_m\rangle$ ，在算符 $\hat{L}$ 作用下，所得到的新的态矢量在 **A** 表象中的表示。

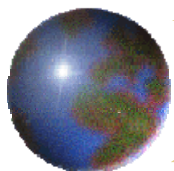


$$\hat{\mathbf{L}}|\alpha_m\rangle = \sum_n |\alpha_n\rangle \langle \alpha_n | \hat{\mathbf{L}} | \alpha_m \rangle = \sum_n |\alpha_n\rangle \mathbf{L}_{nm}$$

即

$$\hat{\mathbf{L}}|\alpha_m\rangle = |\alpha_1\rangle \mathbf{L}_{1m} + |\alpha_2\rangle \mathbf{L}_{2m} + |\alpha_3\rangle \mathbf{L}_{3m} + \dots$$

这表明，**A** 表象的基矢 $|\alpha_m\rangle$ 在 $\hat{\mathbf{L}}$ 作用下所产生的新的态矢量在表象 **A** 中的表示正是算符 $\hat{\mathbf{L}}$ 在表象 **A** 中矩阵表示的第 **m** 列元素集合



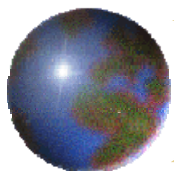
于是，我们求算符 $\hat{L}$ 在某表象中的矩阵表示。只要将它作用于该表象的基矢上，将所得态矢量在该表象中的展开系数所形成的矩阵转置，即得 $\hat{L}$ 在该表象中的表示。

$$\hat{L}|\alpha_1\rangle = |\alpha_1\rangle L_{11} + |\alpha_2\rangle L_{21} + |\alpha_3\rangle L_{31} + \odot$$

$$\hat{L}|\alpha_2\rangle = |\alpha_1\rangle L_{12} + |\alpha_2\rangle L_{22} + |\alpha_3\rangle L_{32} + \odot$$

$$\hat{L}|\alpha_3\rangle = |\alpha_1\rangle L_{13} + |\alpha_2\rangle L_{23} + |\alpha_3\rangle L_{33} + \odot$$





其系数矩阵为：

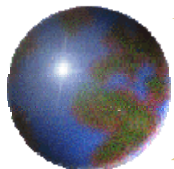
$$\begin{pmatrix} L_{11} & L_{21} & \text{☹} \\ L_{12} & L_{22} & \text{☹} \\ \text{☹} & \text{☹} & \text{☹} \end{pmatrix} \text{转置} \begin{pmatrix} \mathbf{L}_{11} & \mathbf{L}_{12} & \mathbf{L} \\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{L}_{22} & \mathbf{L} \\ \mathbf{L} & \mathbf{L} & \mathbf{L} \end{pmatrix}$$

这即为在表象 $\hat{\mathbf{A}}$ 中的矩阵表示

显然，算符在其自身表象中的表示为

$$\hat{\mathbf{A}}|\alpha_1\rangle = \alpha_1|\alpha_1\rangle$$

$$\hat{\mathbf{A}}|\alpha_2\rangle = \alpha_2|\alpha_2\rangle$$

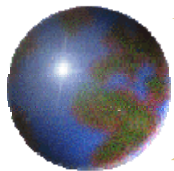


$$\hat{A}|\alpha_3\rangle = \alpha_3|\alpha_3\rangle$$



系数矩阵为，
$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & L \\ 0 & \alpha_2 & 0 & L \\ 0 & 0 & \alpha_3 & 0 \\ L & L & L & L \end{pmatrix}$$
转置同。

所以是对角矩阵，而矩阵元为其本征值。

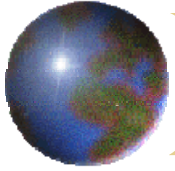


例： 给出方程 $\varphi(x) = x\psi(x)$ 在 $\hat{p}_x$ 表象中的表示式

$$\langle P_x | \varphi \rangle = \langle P_x | \hat{x} \psi \rangle$$

$$b_{P_x} = \int \langle P_x | \hat{x} | P'_x \rangle dP'_x \langle P'_x | \psi \rangle$$

$$= \int (\hat{x})_{P_x P'_x} a_{P'_x} dP'_x$$



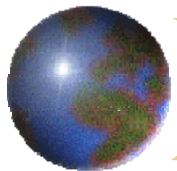
①

$$(\hat{X})_{P_X P'_X} = \langle P_X | \hat{X} | P'_X \rangle = \int \langle P_X | x \rangle x \langle x | P'_X \rangle dx$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-iP_X x/\hbar} x e^{iP'_X x/\hbar} dx$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial P_X} \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i(P'_X - P_X)x/\hbar} dx$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial P_X} \delta(P'_X - P_X) = i\hbar \frac{\partial}{\partial P_X} \delta(P_X - P'_X)$$



②

由

$$(\hat{x})_{P_x P'_x} = \langle P_x | \hat{x} | P'_x \rangle$$

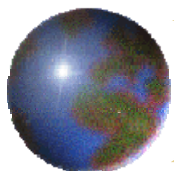
$$\langle P_x | [\hat{P}_x, \hat{x}] | P'_x \rangle = -i\hbar \langle P_x | P'_x \rangle = -i\hbar \delta(P_x - P'_x)$$

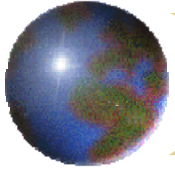
$$= \langle P_x | \hat{P}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{P}_x | P'_x \rangle$$

$$= (P_x - P'_x) \langle P_x | \hat{x} | P'_x \rangle$$

(由 δ 函数性质 $p\delta'(p) = -\delta(p)$)

$$\langle P_x | \hat{x} | P'_x \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial P_x} \delta(P_x - P'_x)$$





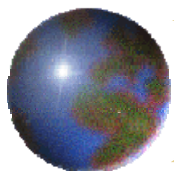
$$b_{p_x} = \int i \hbar \frac{\partial}{\partial p_x} \delta(p_x - p'_x) a_{p'_x} dP'_x$$

$$b_{p_x} = i \hbar \frac{\partial}{\partial p_x} a_{p_x}$$

并由此可推论，由于 $|\psi\rangle$ 是任意态，所以在 P_x 表象中， $\hat{X}$ 算符的形式为

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial P_x}$$

6.1 6.2 6.3



(3) 表象变换:

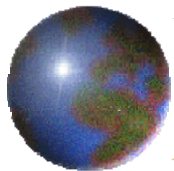
用 Dirac 符号给出表象变换特别方便。而且可以看出，在某表象中的表示是不因计算方式不同而不同。

A. 同一状态在不同表象中表示间的关系

对于态 $|\psi\rangle$ 在 **F** 表象中，其表示为

$$\langle f_n | \psi \rangle = a_{f_n} \quad \hat{F} | f_n \rangle = f_n | f_n \rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_n |f_n\rangle \langle f_n | \psi \rangle = \sum_n |f_n\rangle a_{f_n}$$



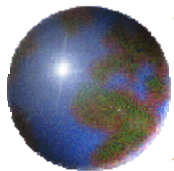
$\{a_{f_n}\}$ 就是态 $|\psi\rangle$ 在表象 F 中的表示
在 $\hat{G}$ 表象中其表示为

$$b_{g_\alpha} = \langle g_\alpha | \psi \rangle$$

于是,

$$a_{f_n} = \langle f_n | \psi \rangle$$

$$= \sum_{\alpha} \langle f_n | g_\alpha \rangle \langle g_\alpha | \psi \rangle$$

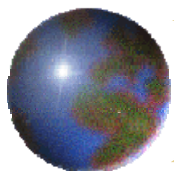


$$= \sum_{\alpha} S_{f_n g_{\alpha}} b_{g_{\alpha}}$$

$S_{f_n g_{\alpha}}$ 是将态矢量在 **F** 表象中的表示，以 **G** 表象中的表示来表达的变换。

$\hat{S}$ 构成一矩阵形式

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \text{💣} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \text{☹️} \\ S_{21} & S_{22} & \text{☹️} \\ \text{💣} & \text{💣} & \text{💣} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \text{💣} \end{pmatrix}$$



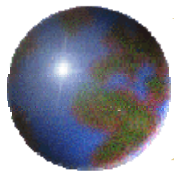
即

$$\mathbf{a}^{\mathbf{F}} = \mathbf{S} \mathbf{b}^{\mathbf{G}}$$

$\hat{\mathbf{S}}$ 矩阵的矩阵元正是 $\mathbf{F}$ 表象基矢与 $\mathbf{G}$ 表象基矢的标积，其第 **I** 列，是 $\mathbf{G}$ 表象中第 **I** 个基矢在 $\mathbf{F}$ 表象中的表示。

$$\begin{aligned} (\mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger)_{\mathbf{f}_n \mathbf{f}_{n'}} &= \sum_{\alpha} \mathbf{S}_{\mathbf{f}_n \mathbf{g}_{\alpha}} (\mathbf{S}^\dagger)_{\mathbf{g}_{\alpha} \mathbf{f}_{n'}} = \sum_{\alpha} \langle \mathbf{f}_n | \mathbf{g}_{\alpha} \rangle \langle \mathbf{g}_{\alpha} | \mathbf{f}_{n'} \rangle \\ &= \langle \mathbf{f}_n | \mathbf{f}_{n'} \rangle = \delta_{\mathbf{f}_n \mathbf{f}_{n'}} \end{aligned}$$

$$(\mathbf{S}^\dagger \mathbf{S})_{\mathbf{g}_{\alpha} \mathbf{g}_{\alpha'}} = \sum_{\mathbf{n}} \langle \mathbf{g}_{\alpha} | \mathbf{f}_{\mathbf{n}} \rangle \langle \mathbf{f}_{\mathbf{n}} | \mathbf{g}_{\alpha'} \rangle = \langle \mathbf{g}_{\alpha} | \mathbf{g}_{\alpha'} \rangle = \delta_{\mathbf{g}_{\alpha} \mathbf{g}_{\alpha'}}$$

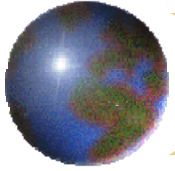


$$\hat{S}\hat{S}^\dagger = \hat{S}^\dagger\hat{S} = \mathbf{I}$$

因此， $\hat{S}$ 是一个幺正算符。同一态矢量在不同表象中的表示之间是通过一个幺正变换联系起来的。

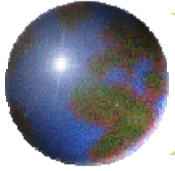
B. 两表象的基矢之间关系

$$|f_n\rangle = \sum_{\alpha} |g_{\alpha}\rangle \langle g_{\alpha} | f_n \rangle$$



$$= \left(|g_1\rangle, |g_2\rangle, \text{☹} \right) \begin{pmatrix} \langle g_1 | f_1 \rangle & \langle g_1 | f_2 \rangle & \text{☹} \\ \langle g_2 | f_1 \rangle & \langle g_2 | f_2 \rangle & \text{☹} \\ \text{☹} & \text{☹} & \text{☹} \end{pmatrix}$$

$$= \left(|g_1\rangle, |g_2\rangle, L \right) \begin{pmatrix} (S_{f_1 g_1})^* & (S_{f_2 g_1})^* & L \\ (S_{f_1 g_2})^* & (S_{f_2 g_2})^* & L \\ L & L & L \end{pmatrix}$$

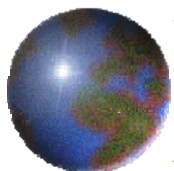


$$= (|g_1\rangle, |g_2\rangle, L) \begin{pmatrix} (S^\dagger)_{g_1 f_1} & (S^\dagger)_{g_1 f_2} & L \\ (S^\dagger)_{g_2 f_1} & (S^\dagger)_{g_2 f_2} & L \\ L & L & L \end{pmatrix}$$

$$= \sum_{\alpha} |g_{\alpha}\rangle (\hat{S}^\dagger)_{g_{\alpha} f_n}$$

$\therefore$ 基矢的变换是经 $S^\dagger$ 来实现

$$|f\rangle = |g\rangle \hat{S}^\dagger$$

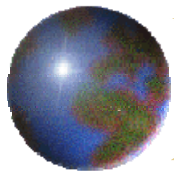


C. 力学量在不同表象中的矩阵表示之间的关系

与态矢量一样，在不同表象中，力学量的矩阵表示是不同的。它们之间的关系也是么正变换（即由么正算符进行相似变换）

对于算符在 $\mathbf{F}$ 表象中的矩阵表示为

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{f}_n | \hat{\mathbf{L}} | \mathbf{f}_{n'} \rangle &= \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \mathbf{f}_n | \mathbf{g}_\alpha \rangle \langle \mathbf{g}_\alpha | \hat{\mathbf{L}} | \mathbf{g}_{\alpha'} \rangle \langle \mathbf{g}_{\alpha'} | \mathbf{f}_{n'} \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \alpha'} \mathbf{S}_{\mathbf{f}_n \mathbf{g}_\alpha} (\hat{\mathbf{L}})_{\mathbf{g}_\alpha \mathbf{g}_{\alpha'}} (\mathbf{S}^\dagger)_{\mathbf{g}_{\alpha'} \mathbf{f}_{n'}}\end{aligned}$$



即

$$\mathbf{L}^F = \mathbf{S} \mathbf{L}^G \mathbf{S}^\dagger$$

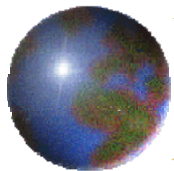
总结: $\mathbf{G}$ 表象 $\rightarrow \mathbf{F}$ 表象

1. 对同一波函数在不同表象中表示

$$a_{f_n} \quad b_{g_\alpha}$$

是通过一个幺正变换 $\hat{\mathbf{S}}$, 相应矩阵的矩阵元为

$$S_{f_n g_\alpha} = \langle \mathbf{f}_n | \mathbf{g}_\alpha \rangle = \int \mathbf{u}_{f_n}^*(\underline{\mathbf{r}}) \mathbf{v}_{g_\alpha}(\underline{\mathbf{r}}) d\underline{\mathbf{r}}$$



$$\mathbf{a}_{\mathbf{f}_n} = \sum_{\alpha} S_{\mathbf{f}_n \mathbf{g}_{\alpha}} \mathbf{b}_{\mathbf{g}_{\alpha}}$$

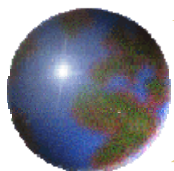
2. 基矢

$$|\mathbf{f}_n\rangle = \sum_{\alpha} |\mathbf{g}_{\alpha}\rangle (S^{\dagger})_{\mathbf{g}_{\alpha} \mathbf{f}_n}$$

$$\mathbf{u}_{\mathbf{f}_n}(\underline{\mathbf{r}}) = \sum_{\alpha} \mathbf{v}_{\mathbf{g}_{\alpha}}(\underline{\mathbf{r}}) (S^{\dagger})_{\mathbf{g}_{\alpha} \mathbf{f}_n}$$

3. 力学量

$$\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{f}_n \mathbf{f}_{n'}} = \langle \mathbf{f}_n | \hat{\mathbf{L}} | \mathbf{f}_{n'} \rangle = \sum_{\alpha, \alpha'} S_{\mathbf{f}_n \mathbf{g}_{\alpha}} \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{g}_{\alpha} \mathbf{g}_{\alpha'}} (S^{\dagger})_{\mathbf{g}_{\alpha'} \mathbf{f}_{n'}}$$



(4) 平均值, 本征方程和薛定谔方程的矩阵形式

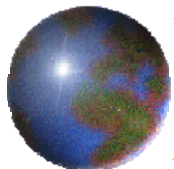
A. 平均值:

1. 力学量 $\hat{L}$ 在体系 (处于态 $|\psi\rangle$) 中的平均值

$$\overline{\hat{L}} = \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle = \int \psi^*(\underline{r}) \hat{L}(\underline{r}, -i\nabla) \psi(\underline{r}) d\underline{r}$$

设: $\hat{A}$ 构成力学量完全集, 共同本征矢为 $|\alpha_n\rangle$, 则

$$\overline{\hat{L}} = \sum_{n,m} \langle \psi | \alpha_n \rangle \langle \alpha_n | \hat{L} | \alpha_m \rangle \langle \alpha_m | \psi \rangle$$



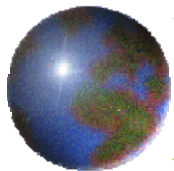
$$\overline{\hat{L}} = \sum_{n,m} \mathbf{a}_n^* \mathbf{L}_{nm} \mathbf{a}_m$$

$\{\mathbf{a}_m\}$ 是 $|\psi\rangle$ 在 $\hat{A}$ 中的表示。

若 $\hat{A}$ 包括力学量 $(\hat{L}, \hat{N}, \hat{M} \odot)$

$$\overline{\hat{L}} = \sum_{\substack{l,n,m \odot \\ l'n'm' \odot}} \mathbf{a}_{lnm \odot}^* (\hat{L})_{lnm \odot, l'n'm' \odot} \mathbf{a}_{l'n'm' \odot}$$

$$\overline{\hat{L}} = \sum_l L_l \left(\sum_{nm} |\mathbf{a}_{lnm \odot}|^2 \right) \quad \sum_{nm} |\mathbf{a}_{lnmL}|^2$$



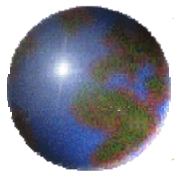
2. 对于两个算符乘积的平均值

$$(\overline{gf}) = \langle \psi | gf | \psi \rangle = \sum_{n,m,l} \langle \psi | \alpha_n \rangle \langle \alpha_n | g | \alpha_m \rangle \langle \alpha_m | f | \alpha_l \rangle \langle \alpha_l | \psi \rangle$$

$$(\overline{gf}) = \sum_{n,m,l} a_n^* g_{nm} f_{ml} a_l$$

B. 本征方程: 对于算符的本征方程为

$$\hat{L}|u\rangle = L'|u\rangle$$

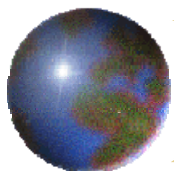


在 **A** 表象， 则

$$\sum_m \langle \alpha_k | \hat{L} | \alpha_m \rangle \langle \alpha_m | u \rangle = L' \langle \alpha_k | u \rangle$$

$\hat{L}$ 算符的本征方程在 **A** 表象中的矩阵形式
为

$$\sum_m L_{km} a_m = L' a_k \quad k = 1, 2 \odot$$

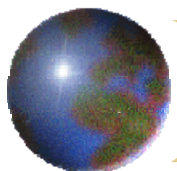


$$\sum_m (L_{km} - L'\delta_{km})a_m = 0 \quad k = 1, 2 \odot$$

这即为算符 $\hat{L}$ 在 $\mathbf{A}$ 表象中的本征方程

要方程组有非零解，即 a_m 不同时为 0 ，则
要求系数行列式为 0 ，即

$$|L_{km} - L'\delta_{km}| = 0 \quad k = 1, 2, 3 \odot \text{ 或 } 0, 1, 2 \odot$$



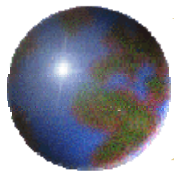
由这方程求出 L' . 然后代入方程组求出相应的 $\{\mathbf{a}_m^{L'}\}$

例1: 某力学量 $\hat{\sigma}_x$ 在 $\hat{\sigma}_z$ 表象中的矩阵为

$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, 求该力学量的本征值和本征函数

由系数行列式

$$\begin{vmatrix} -L' & 1 \\ 1 & -L' \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow L'^2 - 1 = 0 \quad L' = \pm 1$$



$L' = 1$ 代入方程得

$$-a_1 + a_2 = 0$$

$$a_1 - a_2 = 0$$

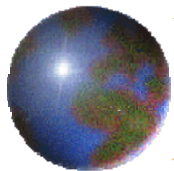
$$\Rightarrow a_1 = a_2$$

$L' = -1$ 代入方程得

$$a_1 + a_2 = 0$$

$$a_1 + a_2 = 0$$

$$\Rightarrow a_1 = -a_2$$

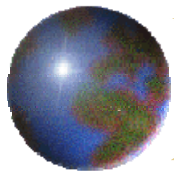


$\hat{\sigma}_x$ 的本征值 $L' = 1$ 所相应的本征矢在 σ_z 表象中的表示为

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$L' = -1$ 所相应的本征矢在 σ_z 表象中的表示为

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

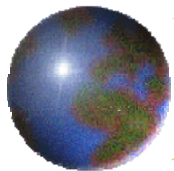


顺便我们可以看到，对于两个表象

$$\hat{G} \xrightarrow{S} \hat{F}$$

$$S_{\mathbf{f}_n \mathbf{g}_\alpha} = \langle \mathbf{f}_n | \mathbf{g}_\alpha \rangle = (\mathbf{u}_{\mathbf{f}_n}, \mathbf{v}_{\mathbf{g}_\alpha})$$

所以要求矩阵 S ，只要求 G 表象中的基矢在 F 表象中的表示即可，这相当于 $\hat{S}$ 矩阵中一个列。



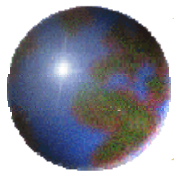
具体看

$\hat{\sigma}_x$ 的本征矢在 σ_z 表象中的表示为

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

由表象 σ_x 到 σ_z 表象的变换矩阵为

$$S_{\sigma_z \sigma_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

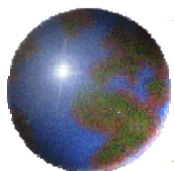


而我们知，算符在自身表象中的矩阵表示是对角的，对角元为其本征值

$$(\sigma_x)_{\text{自身表示}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$(\sigma_x)_{\text{在}\sigma_z\text{表示}} = S \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} S^+$$

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

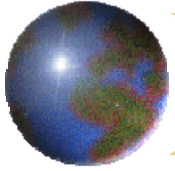


例2： 在 $\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_z$ 表象中，求 $\hat{\mathbf{L}}_x$ (在 $l=1$ 子空间)的本征值，本征矢（即在 $l=1$ 也就是 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 本征值为 $2\hbar^2$ 子空间）

解：首先求在 $\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_z$ 表象中 $\hat{\mathbf{L}}_x$ 的矩阵

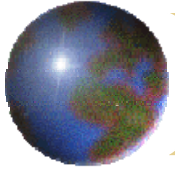
$$\hat{\mathbf{L}}_+ |1m\rangle = \hbar \sqrt{(1-m)(1+m+1)} |1, m+1\rangle$$

$$\hat{\mathbf{L}}_- |1m\rangle = \hbar \sqrt{(1+m)(1-m+1)} |1, m-1\rangle$$



$$\hat{\mathbf{L}}_x |1\mathbf{m}\rangle = \frac{\hbar}{2} (\sqrt{(1+\mathbf{m})(1-\mathbf{m}+1)} |1, \mathbf{m}-1\rangle + \sqrt{(1-\mathbf{m})(1+\mathbf{m}+1)} |1, \mathbf{m}+1\rangle)$$

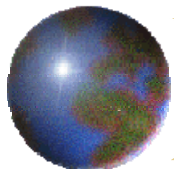
$$(\hat{\mathbf{L}}_x)_{\mathbf{m}'\mathbf{m}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{pmatrix}$$



由本征方程

$$\sum_n [(\hat{L}_x)_{mn} - 1_x \delta_{mn}] a_n = 0$$

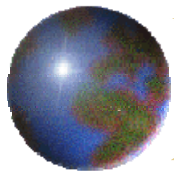
$$\begin{vmatrix} -1_x & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -1_x & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & -1_x \end{vmatrix} = 0$$



$$-l_x^3 + \frac{l_x}{2} + \frac{l_x}{2} = 0$$



$$l_x = 1, \quad 0, \quad -1$$



$$l_x = 1$$

$$0$$

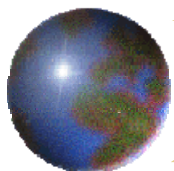
$$-1$$

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ -\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

如何求在 $\hat{L}_z$ 的本征值为 0 的本征态中测量 $\hat{L}_x$ 的可取值的概率？

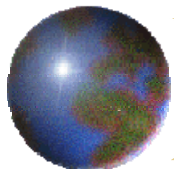


由于 $\hat{L}_z$ 在自身表象中的本征值为 0 的表示是

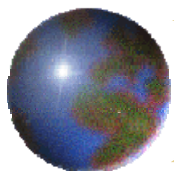
$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

于是测得 $l_x = \pm 1, \quad 0$ 的概率幅为

$$\begin{aligned} C_{l_x} &= \langle 1, l_x | 1, l_z = 0 \rangle \\ &= \sum_{l'_z} \langle 1, l_x | 1, l'_z \rangle \langle 1, l'_z | 1, l_z = 0 \rangle \end{aligned}$$



$$\begin{pmatrix} C_{\approx\approx\approx} \\ C_0 \\ C_{-\approx\approx\approx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1, \sqrt{2}, 1) \\ \frac{1}{2}(\sqrt{2}, 0, -\sqrt{2}) \\ \frac{1}{2}(1, -\sqrt{2}, 1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$$

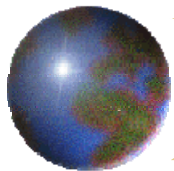


所以在 $\mathbf{Y}_{10}(\theta, \phi)$ (坐标表象中 $\hat{L}_z$ 的本征值为 0 的本征态) 中测量 $\hat{L}_x$ 的可取值的概率为

$$I_x \approx \begin{pmatrix} \approx & 0 & -\approx \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

这表明, 可在任何一个表象中来处理问题。

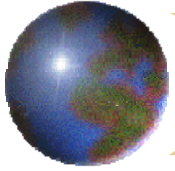
而 $(\hat{L}^2, \hat{L}_x) \rightarrow (\hat{L}^2, \hat{L}_z)$ (对 $l=1$ 的子空间) 的变换矩阵为



$$S_{1_z 1_x} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}$$

而从 $(L^2, L_z) \rightarrow (L^2, L_x)$ 则是

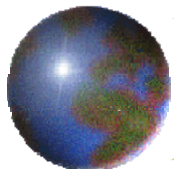
$$S'_{1_x 1_z} = (S^\dagger)_{1_x 1_z} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}$$



$$\mathbf{S}'(\hat{\mathbf{L}}_x)\mathbf{S}'^\dagger = \mathbf{S}^\dagger(\hat{\mathbf{L}}_x)\mathbf{S}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

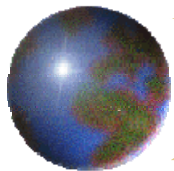


$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(3) 薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

在 **A** 表象中，基矢为 $|\alpha_n\rangle$ ，则



$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \alpha_n | \psi \rangle = \sum_m \langle \alpha_n | \hat{H} | \alpha_m \rangle \langle \alpha_m | \psi \rangle$$

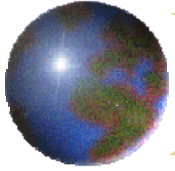
$$i\hbar \frac{d}{dt} a_n(t) = H_{nm} a_m(t)$$

这即为 **A** 表象中的薛定谔方程的矩阵形式。

若 $\hat{H}$ 不显含 t ，而 **A** 表象就是 **H** 表象，则

$$\hat{H}_{nm} = E_m \delta_{nm}$$

从而得



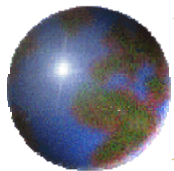
$$a_1(t) = a_1^0 e^{iE_1 t/\hbar}$$

$$a_2(t) = a_2^0 e^{iE_2 t/\hbar}$$



∴ 当 $\hat{H}$ 不显含 t , 在 $\mathbf{H}$ 表象中 $|\psi\rangle$ 的表示为

$$\begin{pmatrix} a_1^0 e^{-iE_1 t'/\hbar} \\ a_2^0 e^{-iE_2 t'/\hbar} \\ \text{💣} \end{pmatrix}$$

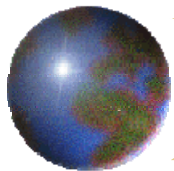


$a_1^0, a_2^0, \odot$, 由初态给出 (它是 $t = 0$ 时, $|\psi\rangle$ 在 $\mathbf{H}$ 表象中表示)

$E_1, E_2 \odot$, 由 $\hat{H}$ 在任一表象中

$$|H_{\alpha\beta} - E\delta_{\alpha\beta}| = 0$$

求出。



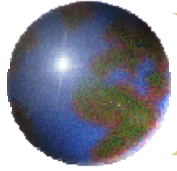
§ 6.5 量子态的不同描述

由 Schrödinger equation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\alpha}(\underline{r}, t) = \hat{H} \psi_{\alpha}(\underline{r}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle = \hat{H} |\alpha, t\rangle$$

它体现了量子力学的因果律，即当知 $\psi_{\alpha}(\underline{r}, t_0)$ ，在不受外界干扰下，体系的波函数随 t 的演化是完全确定的。

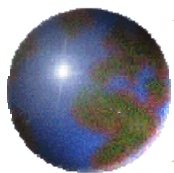


而

$$\begin{aligned}\overline{A} &= \langle \alpha, t | \hat{A} | \alpha, t \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle \alpha, t | u_n \rangle \langle u_n | \hat{A} | u_m \rangle \langle u_m | \alpha, t \rangle \\ &= \sum_{n,m} C_n^{\alpha*}(t) a_n \delta_{nm} C_m^{\alpha}(t) \\ &= \sum_n a_n \left| C_n^{\alpha}(t) \right|^2\end{aligned}$$

$$\hat{A} | u_n \rangle = a_n | u_n \rangle$$

$$C_n^{\alpha}(t) = \langle u_n | \alpha, t \rangle$$



波函数和算符不是直接观测量. 仅力学量取值, 及其概率幅 (或概率) 是直接观测量。

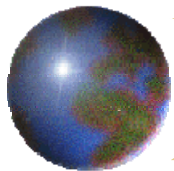
因此, 重要的是: ① $\hat{A}$ 可能取的值 a_n

② 测量 $\hat{A}$ 取 a_n 的概率

幅

$$\langle u_n | \alpha, t \rangle = C_n^\alpha(t)$$

如果用不同方式来描述, 但若上面两组量是完全相同的, 于是分不清这两种描述的差别, 而都是可以接受的。

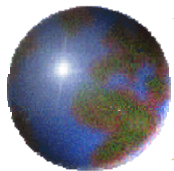


(1) 薛定谔绘景 (Schrödinger Picture)

设: $\Psi_\alpha(t)$ 以 $|\alpha, t\rangle_S$ 来表示, 遵守薛定谔方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\alpha, t\rangle_S = \hat{H} |\alpha, t\rangle_S$$

如果 $|\beta, t_0\rangle$ 和 $|\gamma, t_0\rangle$ 分别演化为 $|\beta, t\rangle$ 和 $|\gamma, t\rangle$, 根据态叠加原理可能态 $C_1|\beta, t_0\rangle + C_2|\gamma, t_0\rangle$ 将演化为 $C_1|\beta, t\rangle + C_2|\gamma, t\rangle$ 。这表明, $|\alpha, t\rangle$ 可由一线性算符从 $|\alpha, 0\rangle$ 获得。因此可假设



$$|\alpha, t\rangle_S = U(t, 0)|\alpha, 0\rangle_S$$

($U(t, 0)$ 与 $|\alpha, 0\rangle_S$ 无关)

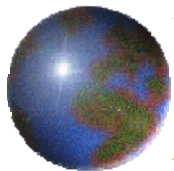
而

$$U(0, 0) = 1 \quad U(t, 0) = U(t, t')U(t', 0)$$

于是有

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, 0)|\alpha, 0\rangle_S = \hat{H}U(t, 0)|\alpha, 0\rangle_S$$

由于 $|\alpha, 0\rangle_S$ 是初态, 可任意设定



所以时间演化算符 $U(t,0)$ 满足

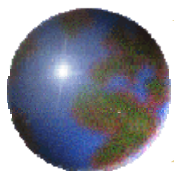
$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t,0) = \hat{H}U(t,0)$$

若 $\hat{H}$ 不显含 t , 则

$$U(t,0) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

由于 $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$, 所以

$$U^\dagger(t,0)U(t,0) = U(t,0)U^\dagger(t,0) = I$$



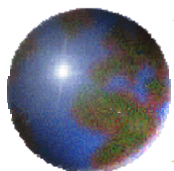
所以，这一变换是一么正变换
而本征方程

$$\hat{A}_S |a_n\rangle_S = a_n |a_n\rangle_S$$

若 $\hat{A}_S$ 不显含 t ，那 $a_n, |a_n\rangle_S$ 也与 t 无关

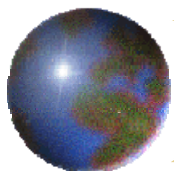
t 时刻，测量 $\hat{A}_S$ 取值 a_n 的概率幅为

$$\langle a_n | \alpha, t \rangle_S = b_n^\alpha(t)$$



在薛定谔绘景的描述中，态矢量随 t 的变化，反映在它的表示随 t 的变化。而力学量的本征值及本征矢不随 t 变化。

$$\begin{aligned}\overline{\hat{A}_S} &= {}_S \langle \alpha, t | \hat{A}_S | \alpha, t \rangle_S \\ &= \sum_S \langle \alpha, t | a_n \rangle_S {}_S \langle a_n | \hat{A}_S | a_m \rangle_S {}_S \langle a_m | \alpha, t \rangle_S \\ &= \sum_n a_n \left| b_n^\alpha(t) \right|^2\end{aligned}$$

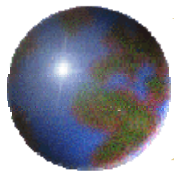


$\bar{A}_S$ 随 t 变化取决于 $b_n^\alpha(t)$ 。取 a_n 之值的
概率为

$$|b_n^\alpha(t)|^2$$

$$\langle \alpha, t | \hat{A}_S | \beta, t \rangle = \sum_{m,n} \langle \alpha, t | a_n \rangle \langle a_n | \hat{A}_S | a_m \rangle \langle a_m | \beta, t \rangle = \sum_n a_n b_n^{\alpha*}(t) b_n^\beta(t)$$

但所有这些测量可得值与实验可比较的量的描述并不唯一。上述描述只是一些等价描述方式之一。

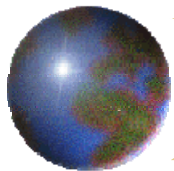


(2) 海森伯绘景 (Heisenberg Picture)

A. 矩阵元: 对于薛定谔绘景中的矩阵元, 我们看到 ${}_S\langle\alpha, t|\hat{A}_S|\beta, t\rangle_S$ 随 t 的变化 (如 $\hat{A}_S$ 不显含 t) 是由于态矢量随 t 变化所致。

$$|\alpha, t\rangle_S = U(t, 0)|\alpha, 0\rangle_S$$

$$|\beta, t\rangle_S = U(t, 0)|\beta, 0\rangle_S$$



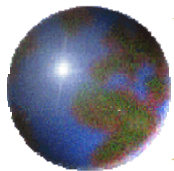
$\hat{A}_S$ 的矩阵元可表为

$${}_S \langle \alpha, t | \hat{A} | \beta, t \rangle_S = {}_S \langle \alpha, 0 | U^\dagger(t, 0) \hat{A} U(t, 0) | \beta, 0 \rangle_S$$

所以，态矢量可保持不随时间变，而算符用

$$\hat{A}_H(t) = U^\dagger(t, 0) \hat{A} U(t, 0)$$

来代之；



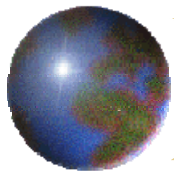
态矢量可以表为

$$|\alpha\rangle_{\text{H}} = |\alpha, 0\rangle_{\text{S}} = \mathbf{U}^{\dagger}(\mathbf{t}, 0)|\alpha, \mathbf{t}\rangle_{\text{S}}$$

$$|\beta\rangle_{\text{H}} = |\beta, 0\rangle_{\text{S}} = \mathbf{U}^{\dagger}(\mathbf{t}, 0)|\beta, \mathbf{t}\rangle_{\text{S}}$$

这样，矩阵元

$$_{\text{S}}\langle\alpha, \mathbf{t}|\hat{\mathbf{A}}_{\text{S}}|\beta, \mathbf{t}\rangle_{\text{S}} = \text{ }_{\text{H}}\langle\alpha|\hat{\mathbf{A}}_{\text{H}}(\mathbf{t})|\beta\rangle_{\text{H}}$$



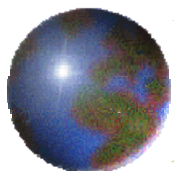
即这一描述与薛定谔绘景的描述一样。

B. 本征方程

$$\hat{A}_S |a_n\rangle_S = a_n |a_n\rangle_S$$

$$U^\dagger(t, 0) \hat{A}_S U(t, 0) U^\dagger(t, 0) |a_n\rangle_S = a_n U^\dagger(t, 0) |a_n\rangle_S$$

$$\hat{A}_H |a_n t\rangle_H = a_n |a_n t\rangle_H$$

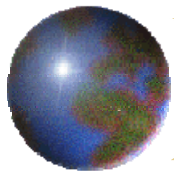


$$|a_n, t\rangle_H = U^\dagger(t, 0)|a_n\rangle_S$$

力学量 $\hat{A}_H$ 的本征值为 a_n ，即谱是相同的，但相应本征态为 $|a_n, t\rangle_H$ 是随 t 变的。

在 $|\alpha, t\rangle_S$ 中测得 α_n 的概率幅为

$${}_S\langle a_n | \alpha, t \rangle_S = {}_S\langle a_n | U(t, 0) | \alpha, 0 \rangle_S = {}_H\langle a_n, t | \alpha \rangle_H$$



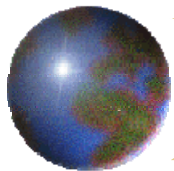
在态矢量 $|\alpha\rangle_H$ 中测得 a_n 的概率幅与在态 $|\alpha, t\rangle_S$ 中测得 a_n 的概率幅也是一样的。

所以，**这两种描述是完全等价的**。于是，我们引入新的绘景海森堡绘景（Heisenberg Picture）。

A. 态矢量

$$|\alpha\rangle_H = U^\dagger(t, 0)|\alpha, t\rangle_S = |\alpha, 0\rangle_S$$

B. 算符、本征矢和本征方程



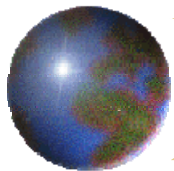
$$\hat{A}_H = U^\dagger(t, 0) \hat{A}_S U(t, 0)$$

$$|a_n, t\rangle_H = U^\dagger(t, 0) |a_n\rangle_S$$

$$\hat{A}_H |a_n, t\rangle_H = a_n |a_n, t\rangle_H$$

这时本征矢虽与 t 有关，但本征值相同，对易关系保持不变

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

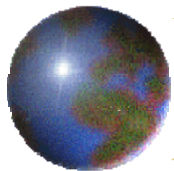


$$[\hat{A}_H, \hat{B}_H] = i\hat{C}_H$$

C. 算符随时间变化（运动方程）

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{A}_H}{dt} &= \frac{d}{dt}[U^\dagger(t, 0)\hat{A}_S U(t, 0)] \\ &= \frac{dU^\dagger(t, 0)}{dt}\hat{A}_S U(t, 0) + U^\dagger(t, 0)\hat{A}_S \frac{dU(t, 0)}{dt}\end{aligned}$$

($\hat{A}_S$ 不显含 t)

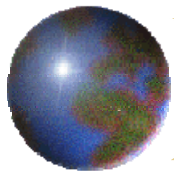


$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t,0) = \hat{H}_S U(t,0)$$

$$= \frac{U^\dagger(t,0) \hat{H}_S}{-i\hbar} \hat{A}_S U(t,0) + U^\dagger(t,0) \hat{A}_S \frac{\hat{H}_S U(t,0)}{i\hbar}$$

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{[\hat{A}_H, \hat{H}_H]}{i\hbar}$$

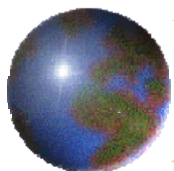
这时 $\hat{H}_H = \hat{H}_S$



D. 本征矢随 t 变化

$$\begin{aligned} |\mathbf{a}_n, \mathbf{t}\rangle_{\text{H}} &= \mathbf{U}^{\dagger}(\mathbf{t}, \mathbf{0}) |\mathbf{a}_n\rangle_{\text{S}} \\ &= \mathbf{U}^{\dagger}(\mathbf{t}, \mathbf{0}) |\mathbf{a}_n, \mathbf{0}\rangle_{\text{H}} \end{aligned}$$

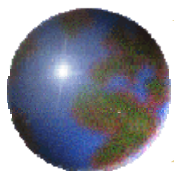
$$\frac{d|\mathbf{a}_n, \mathbf{t}\rangle_{\text{H}}}{dt} = \frac{d\mathbf{U}^{\dagger}(\mathbf{t}, \mathbf{0})}{dt} |\mathbf{a}_n\rangle_{\text{S}}$$



$$= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t, 0) \hat{H}_S |a_n\rangle_S = -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t, 0) \hat{H}_S U(t, 0) U^\dagger(t, 0) |a_n\rangle_S$$

$$i \frac{d|a_n, t\rangle}{dt} = -\hat{H}_H |a_n, t\rangle_H$$

这表明，在S. P.中态矢量在矢量空间随 t 绕一定方向“转动”。而算符和相应的本征矢不变。



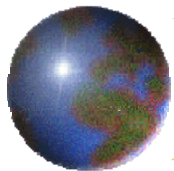
因此，在本征矢 $|\mathbf{a}_n\rangle_S$ 张开的坐标架下，态矢量随 t 的变化，反映在其“分量”，即表示

$$\mathbf{b}_n^\alpha(t) = {}_S \langle \mathbf{a}_n | \alpha, t \rangle_S \quad \text{随 } t \text{ 的“转动”}.$$

$$|\alpha, t\rangle_S = U(t, 0) |\alpha, 0\rangle_S$$

而在 H. P. 中，态矢量不变，但算符和其本征矢绕同一方向随 t “反转动”

$$\mathbf{b}_n^\alpha(t) = {}_S \langle \mathbf{a}_n | \alpha, t \rangle_S = {}_S \langle \mathbf{a}_n | U(t, 0) | \alpha, 0 \rangle_S = {}_H \langle \mathbf{a}_n, t | \alpha \rangle_H$$



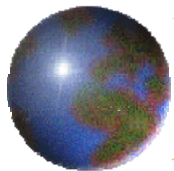
从而保持概率幅与S.P相同。

在实际使用中，S.P. 较方便（解方程，求本征值，本征函数）；但在理论讨论中，H.P. 有其优越性，其形式更类似经典描述（因经典是讨论物理量的变化，但无波函数）。

将算符方程

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{[\hat{A}_H, \hat{H}_H]}{i\hbar}$$

用于 $\hat{x}_H, \hat{p}_H$

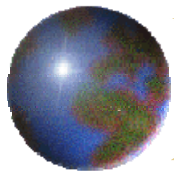


$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{[\hat{x}_H, \hat{H}_H]}{i\hbar} = \frac{\partial \hat{H}_H}{\partial (\hat{p}_x)_H}$$

$$\frac{d(\hat{p}_x)_H}{dt} = \frac{[(\hat{p}_x)_H, \hat{H}_H]}{i\hbar} = -\frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{x}_H}$$

例：求H.P.中一维谐振子的坐标算符和动量算符。

$$\frac{d(\hat{p}_x)_H}{dt} = -\frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{x}_H} = -m\omega^2 \hat{x}_H$$

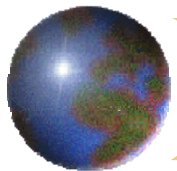


$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{p}_H} = \frac{(\hat{p}_x)_H}{m}$$

所以

$$\frac{d^2 \hat{x}_H}{dt^2} = -\omega^2 \hat{x}_H$$

$$\frac{d^2 (\hat{p}_x)_H}{dt^2} = -\omega^2 (\hat{p}_x)_H$$



有解

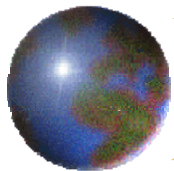
$$\hat{x}_H = a_1 \cos \omega t + a_2 \sin \omega t$$

$$(\hat{p}_x)_H = -a_1 m \omega \sin \omega t + a_2 m \omega \cos \omega t$$

由初条件

$$\hat{x}_H(0) = \hat{x}, \quad (\hat{p}_x)_H(0) = \hat{p}_x$$

$$\hat{x}_H(t) = \hat{x} \cos \omega t + \frac{\hat{p}_x}{m \omega} \sin \omega t$$



$$(\hat{p}_x)_H(t) = -\hat{x}m\omega \sin \omega t + \hat{p}_x \cos \omega t$$

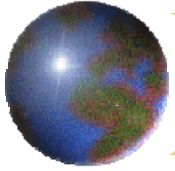
显然，

$$[\hat{x}_H(t), (\hat{p}_x)_H(t)] = i\hbar$$

$$[\hat{x}_H(t), \hat{x}_H(t)] = 0$$

但

$$[\hat{x}_H(t), \hat{x}_H(0)] = \hat{x}_H(t)\hat{x}_H(0) - \hat{x}_H(0)\hat{x}_H(t)$$



$$= (\hat{x} \cos \omega t + \frac{\hat{p}_x}{m\omega} \sin \omega t) \hat{x} - \hat{x} (\hat{x} \cos \omega t + \frac{\hat{p}_x}{m\omega} \sin \omega t)$$

$$= \frac{1}{m\omega} (\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x) \sin \omega t$$

$$= -i\hbar \frac{1}{m\omega} \sin \omega t$$

6.5 6.9 6.10