

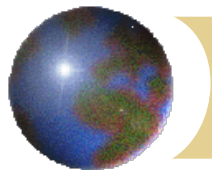


## 第四章 量子力学中的力学量

1. 在以坐标表示的波函数中，要计算  $\mathbf{p}_x$  的平均值时，我们必须引进算符

$$\hat{\mathbf{p}}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\bar{P}_x = \int \psi^*(\underline{r}, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(\underline{r}, t) d\underline{r}$$

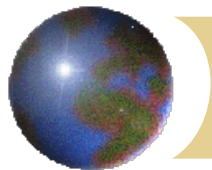


于是问，力学量用算符来表示，那它的性质是什么？从物理上讲，

## 对算符有那些制约

2. 在一些定态中，求一个体系的能量可取值，是通过在一定条件下，求解不含时间的薛定谔方程（或能量本征方程）

$$\hat{H}u_n = E_n u_n$$



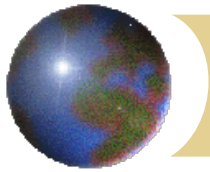
于是问，

其他力学量的可测得值是如何确定的？

3. 在某一时刻， $\hat{x}$  和  $\hat{p}_x$  不能同时取确定值。

是否所有力学量都不能同时取确定值，  
那些可以，那些不可以？

4. 在量子力学中，体系的波函数对体系

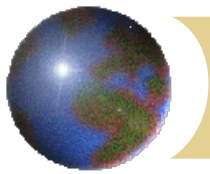


作了充分的描述，即可以给出体系所有可能的信息。那

如何从  $\psi(\mathbf{r}, t)$  得到这些信息？

5. 当  $V(\mathbf{x}, t) = V(\mathbf{x})$  时，体系能量平均值不随  $t$  变，体系处于某能量状态的概率，也不随时间改变。

力学量的平均值如何随  $t$  变？



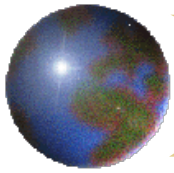
## I. 表示力学量算符的性质

A. 一般运算规则：一个力学量如以算符  $\hat{O}$  表示。它是一运算

$$\hat{O}\psi(x, y, z) = \varphi(x, y, z)$$

代表一个变换，是将空间分布的**概率密度**  
**幅**从

$$\psi(x, y, z) \xrightarrow{\hat{O}} \varphi(x, y, z)$$



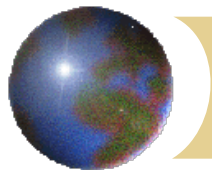
例：  $\hat{O} = e^{-ia\hat{p}_x / \hbar}$  ， 于是

$$\hat{O}\psi(\mathbf{x}) = e^{-a\frac{d}{dx}}\psi(\mathbf{x})$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \psi(\mathbf{x})$$

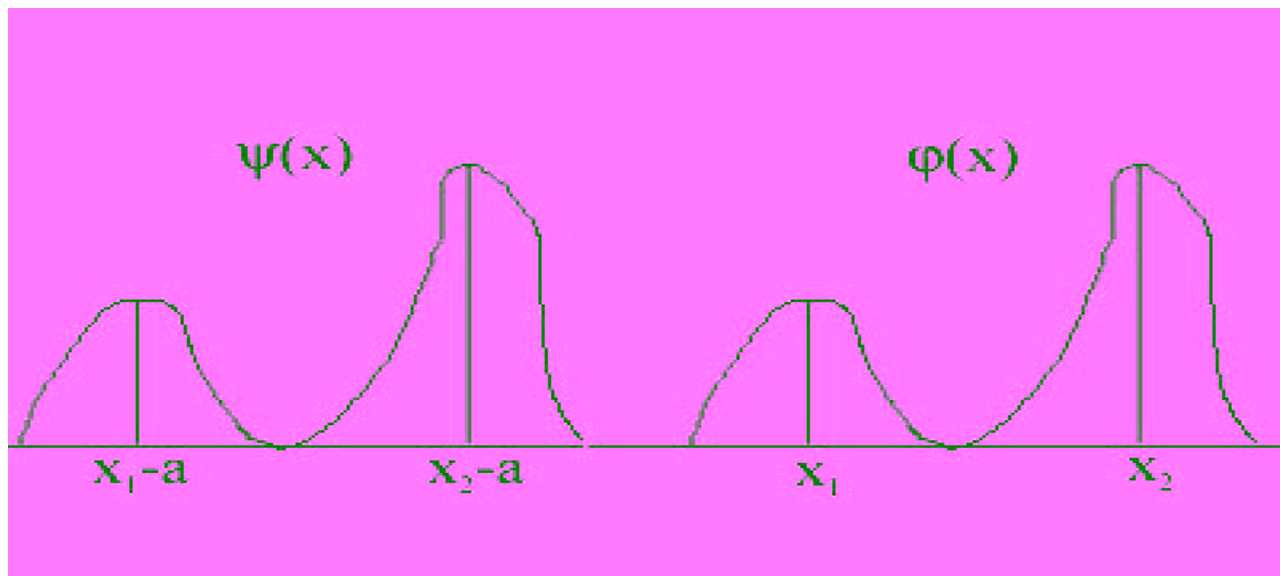
$$= \psi(\mathbf{x} - a)$$

$$= \varphi(\mathbf{x})$$



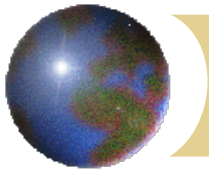
即将体系的**概率密度幅**沿  $x$  方向移动距离

$a$



1. 力学量算符至少是线性算符；量子力学方程是线性齐次方程。

由于**态叠加原理**，所以在量子力学中的



算符应是线性算符。所谓线性算符，即

$$\hat{O}(c\psi) = c\hat{O}\psi$$

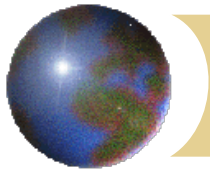
$$\hat{O}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{O}\psi_1 + c_2\hat{O}\psi_2$$

例如 1.  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$

$$\psi_1 \quad \psi_2$$

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$





$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) &= c_1 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1 + c_2 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2 \\ &= c_1 \hat{H} \psi_1 + c_2 \hat{H} \psi_2\end{aligned}$$

仅当  $\hat{H}$  是线性算符

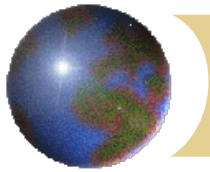
$$= \hat{H}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2)$$

例如 2. 对不显含时间的薛定谔方程

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

若  $\hat{H}\psi_1 = E\psi_1$  ,  $\hat{H}\psi_2 = E\psi_2$  , 则

$$c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$$

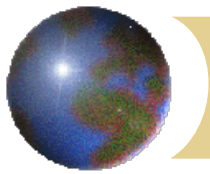


$$\begin{aligned} & E(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \\ &= c_1E\psi_1 + c_2E\psi_2 \\ &= c_1\hat{H}\psi_1 + c_2\hat{H}\psi_2 \end{aligned}$$

仅当  $\hat{H}$  是线性算符

$$\hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = E(c_1\psi_1 + c_2\psi_2)$$

量子力学不仅要求力学量算符是线性算符，而且方程是线性齐次，



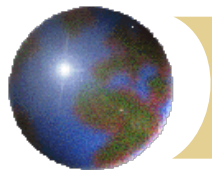
方程  $\hat{O}\psi = A$  就不行。因

$$\hat{O}\psi_1 = A \quad \hat{O}\psi_2 = A$$

$$\hat{O}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{O}\psi_1 + c_2\hat{O}\psi_2 = A(c_1 + c_2) \\ \neq A$$

2. 算符之和:  $\hat{O} = \hat{A} + \hat{B}$  表示, 对任意波函数进行变换所得的新波函数完全相等

$$\hat{O}\psi = \varphi \quad (\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi = \varphi_A + \varphi_B = \varphi$$



3. 算符之积:  $\hat{O} = \hat{A}\hat{B}$  表示, 对任意波函数, 有  $\hat{O}\psi = \varphi$ , 则

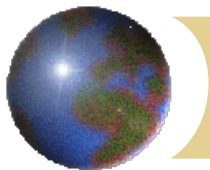
$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}\varphi_B = \varphi$$

4. 逆算符: 算符  $\hat{O}$  将任一波函数

$$\hat{O}\psi = \varphi$$

若有另一算符  $\hat{R}$  使

$$\hat{R}\varphi = \psi$$



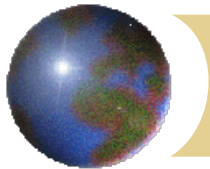
则称  $\hat{R}$  为  $\hat{O}$  逆算符，并表为  $\hat{R} = \hat{O}^{-1}$ ，

例如： $\hat{O} = e^{-ia\hat{p}_x/\hbar}$

$$\hat{O}\psi(\mathbf{x}) = e^{-a\frac{d}{d\mathbf{x}}}\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} - \mathbf{a}) = \varphi(\mathbf{x})$$

$$e^{ia\hat{p}_x/\hbar}\varphi(\mathbf{x}) = e^{a\frac{d}{d\mathbf{x}}}\varphi(\mathbf{x})$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \frac{d^n}{d\mathbf{x}^n} \varphi(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = \psi(\mathbf{x})$$



所以

$$\hat{O}^{-1} = e^{ia\hat{p}_x / \hbar}$$

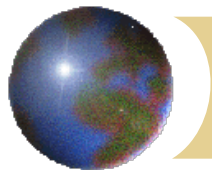
显然， $\hat{A}\hat{B}$  的逆算符

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$$

## 5. 算符的函数:

设:  $F(x)$  在  $x=0$  处, 有各级导数

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



## 则定义算符的函数

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

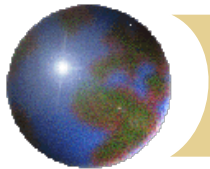
例如:  $e^x$  它有各级导数,  $(e^x)_0^{(n)} = 1$

于是

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n$$

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n$$

如果函数不能以幂级数表示, 则还可以由算符的自然展开来定义算符的函数。



## B. 算符的对易性

一般而言，两算符的乘积和次序有关，不能彼此对换。

若  $\hat{A} = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{L}_y/\hbar}$  ,  $\hat{B} = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{L}_z/\hbar}$  , 则

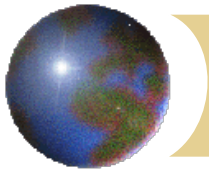
$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

又如

$$x\hat{p}_x\psi = -i\hbar x\psi'$$

$$\hat{p}_x x\psi = -i\hbar \frac{d}{dx} x\psi = -i\hbar\psi - i\hbar x\psi'$$





所以

$$x\hat{p}_x\psi - \hat{p}_xx\psi = i\hbar\psi$$

算符

$$x\hat{p}_x - \hat{p}_xx = i\hbar$$

引入**对易子**：算符  $\hat{A}$  和  $\hat{B}$  的对易子

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

对易子有如下性质

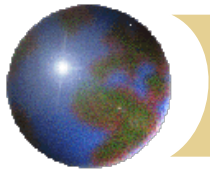


$$[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = -[\hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{A}}]$$

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

$$\begin{aligned} & \hat{\mathbf{B}}[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{C}}] + [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}]\hat{\mathbf{C}} \\ &= \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{C}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{C}}\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{C}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{C}} \\ &= \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{C}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{C}}\hat{\mathbf{A}} = [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{C}}] \end{aligned}$$

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



并有

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = \sum_{S=0}^{n-1} \hat{B}^S [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{n-S-1}$$

证： $n=1$ ，成立

设： $n-1$  成立，即

$$[\hat{A}, \hat{B}^{n-1}] = \sum_{S'=0}^{n-2} \hat{B}^{S'} [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{n-1-S'-1}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = \hat{B} [\hat{A}, \hat{B}^{n-1}] + [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{n-1}$$

$$= \sum_{S'=0}^{n-2} \hat{B}^{S'+1} [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{n-1-S'-1} + [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{n-1}$$



$$\begin{aligned} &= \sum_{S=1}^{n-1} \hat{\mathbf{B}}^S [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] \hat{\mathbf{B}}^{n-S-1} + [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] \hat{\mathbf{B}}^{n-1} \\ &= \sum_{S=0}^{n-1} \hat{\mathbf{B}}^S [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] \hat{\mathbf{B}}^{n-S-1} \end{aligned}$$

**例：** 求  $[\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}}_x^n]$

$$\begin{aligned} [\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}}_x^n] &= \sum_{S=0}^{n-1} \hat{\mathbf{p}}_x^S [\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}}_x] \hat{\mathbf{p}}_x^{n-S-1} \\ &= i\hbar \sum_{S=0}^{n-1} \hat{\mathbf{p}}_x^{n-1} = i\hbar n \hat{\mathbf{p}}_x^{n-1} \end{aligned}$$



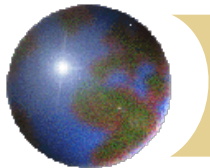
在算符的运算时，要特别小心。

**例：**如  $\hat{A}, \hat{B}$  和  $[\hat{A}, \hat{B}]$  对易，可证明

$$e^{\hat{A}} \cdot e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$$

所以

$$e^x \cdot e^{\hat{p}_x} = e^{x + \hat{p}_x + \frac{1}{2}i\hbar}$$



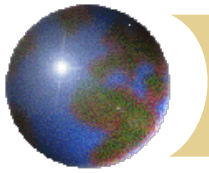
下面是一些有用的对易关系

$$[\hat{L}_i, x_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k$$

$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k$$

$\varepsilon_{ijk}$  称为Levi-Civita符号。取值  $(-1)^{\delta_{ijk}}$ ，  
 $\delta_{ijk}$  为从123→ijk的对换数。如123→312  
的对换数2

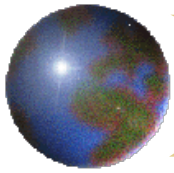


例:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, z]u &= \left( -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)z + i\hbar z\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \right)u \\ &= \left( -i\hbar y - i\hbar yz\frac{\partial}{\partial z} + i\hbar zz\frac{\partial}{\partial y} + i\hbar zy\frac{\partial}{\partial z} - i\hbar zz\frac{\partial}{\partial y} \right)u \\ &= -i\hbar yu \end{aligned}$$

即

$$[\hat{L}_x, z]u = -i\hbar yu$$



用上述关系可证：

$$\underline{\hat{L}} \times \underline{r} + \underline{r} \times \underline{\hat{L}} = 2i\hbar \underline{r}$$

$$\underline{\hat{L}} \times \underline{\hat{p}} + \underline{\hat{p}} \times \underline{\hat{L}} = 2i\hbar \underline{\hat{p}}$$

**例：**

$$L_x y - L_y x + x L_y - y L_x$$





$$\begin{aligned} &= L_x y - y L_x - (L_y x - x L_y) \\ &= i\hbar z - (-i\hbar z) \\ &= 2i\hbar z \end{aligned}$$

则证得

$$\left( \underline{\hat{L}} \times \underline{r} + \underline{r} \times \underline{\hat{L}} \right) \Big|_z = 2i\hbar z$$

**对易关系是与坐标选择无关**



例： $[\hat{L}_z, \mathbf{r}]$

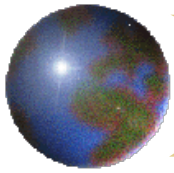
$$= \left[ -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \mathbf{r} \right]$$

$$= -i\hbar \left( \frac{2xy}{2r} - \frac{2yx}{2r} \right) = \mathbf{0}$$

实际上

$[\hat{L}_z, \mathbf{r}]$

$$= \left[ -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}, \mathbf{r} \right] = \mathbf{0}$$



另外，对易关系与表象选择无关  
如

$$[\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}}_x^n]$$

$$= \sum_{s=0}^{n-1} \hat{\mathbf{p}}_x^s [\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}}_x] \hat{\mathbf{p}}_x^{n-s-1} = i\hbar n \hat{\mathbf{p}}_x^{n-1}$$

$$= [i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_x}, \mathbf{p}_x^n] = i\hbar n \hat{\mathbf{p}}_x^{n-1}$$



↑

## C. 算符的厄米性 (Hermiticity)

1. 算符复共轭: 若对任一波函数有

$$\varphi = \hat{A}\psi$$

$$\varphi^* = \hat{B}\psi^*$$

则称  $\hat{B}$  为  $\hat{A}$  的复共轭算符, 以  $\hat{A}^*$  表示

例

$$\varphi(x) = \hat{p}_x \psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x)$$



$$\varphi^*(\mathbf{x}) = \left( -i\hbar \frac{d}{d\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) \right)^* = i\hbar \frac{d}{d\mathbf{x}} \psi^* = -\hat{p}_x \psi(\mathbf{x})^*$$

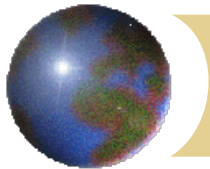
所以

$$\hat{p}_x^* = -\hat{p}_x$$

算符的复共轭就是将算符所有复数量取复共轭。显然，

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

$$(\hat{A}^*)^* = \hat{A}$$



## 2. 算符的转置

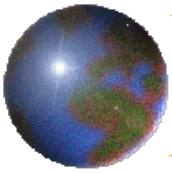
**a. 标积定义：**若体系有两个波函数，其标积为

$$(\psi, \varphi) = \int \psi^* \varphi d\underline{r}$$

显然，

$$(\psi, \psi) = \int |\psi|^2 d\underline{r} \geq 0$$

对于标积，有性质

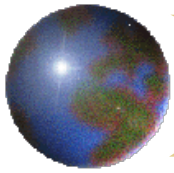


$$\int \psi^* \varphi d\underline{r} = \left( \int \varphi^* \psi d\underline{r} \right)^* = \left( \int (\varphi^*)^* \psi^* d\underline{r} \right)$$

$$(\psi, \varphi) = (\varphi, \psi)^* = (\varphi^*, \psi^*)$$



$$(\psi, \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2) = \lambda_1 (\psi, \varphi_1) + \lambda_2 (\psi, \varphi_2)$$



$$\int \psi^* (\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2) d\underline{r} = \lambda_1 \int \psi^* \varphi_1 d\underline{r} + \lambda_2 \int \psi^* \varphi_2 d\underline{r}$$
$$= (\psi, \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2) = \lambda_1 (\psi, \varphi_1) + \lambda_2 (\psi, \varphi_2)$$



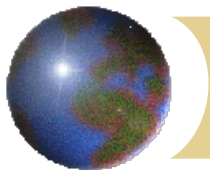
$$(\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2, \varphi) = \lambda_1^* (\psi_1, \varphi) + \lambda_2^* (\psi_2, \varphi)$$



$$(\psi, \varphi) = \int \psi^* \varphi d\underline{r} = 0$$

则称这两波函数是正交的。





**b. 转置定义：**算符  $\hat{B}$  称为算符  $\hat{A}$  的转置算符，若

$$\int \psi^* \hat{A} \varphi d\underline{r} = \int \varphi \hat{B} \psi^* d\underline{r}$$

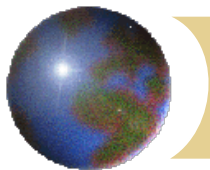
即

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

通常以算符  $\tilde{\hat{A}}$  表示算符  $\hat{A}$  的转置算符。即

$$\int \psi^* \hat{A} \varphi d\underline{r} = \int \varphi \tilde{\hat{A}} \psi^* d\underline{r}$$

即



$$(\psi, \hat{A}\varphi) = (\varphi^*, \tilde{\hat{A}}\psi^*) \quad \text{并有} \quad (\tilde{\hat{A}}\tilde{\hat{B}}) = \tilde{\hat{B}}\tilde{\hat{A}}$$

例：
$$\int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \varphi d\underline{r} = \psi^* \varphi \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \varphi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* d\underline{r} = \int \varphi \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right) \psi^* d\underline{r}$$

$$\frac{\tilde{\partial}}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}$$

### 3. 算符的厄米共轭

**定义：**算符的厄米共轭是该算符取复共轭，再转置，（以  $\hat{A}^\dagger$  表示），



$$\hat{A}^\dagger = \tilde{A}^*$$

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



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

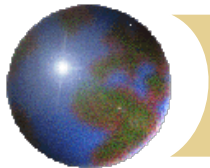
例

$$\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right)^\dagger = -\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right)^* = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$$

可证

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \quad (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$$

$$\hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{x}}^\dagger = \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{x}} \quad \hat{\mathbf{x}}^\dagger = \hat{\mathbf{x}} \quad \hat{L}_i^\dagger = \hat{L}_i$$



$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2}} \left[ i(m\hbar\omega)^{-1/2} \hat{p}_x + \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \hat{x} \right]$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2}} \left[ -i(m\hbar\omega)^{-1/2} \hat{p}_x + \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \hat{x} \right]$$

假设： $u_s$  是归一化的，相应本征值为  $(s + \frac{1}{2})\hbar\omega$  ， 那

$$\hat{a}^\dagger u_s \quad (s + 1 + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\int (\hat{a}^\dagger u_s)^* (\hat{a}^\dagger u_s) dx$$

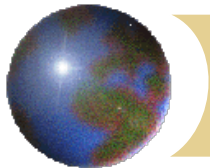


$$= \int \left( \hat{\mathbf{a}} \hat{\mathbf{a}}^\dagger \mathbf{u}_s \right)^* \left( \mathbf{u}_s \right) d\mathbf{x}$$

$$= \int \left( (s+1) \mathbf{u}_s \right)^* \left( \mathbf{u}_s \right) d\mathbf{x}$$

$$= s+1$$

$$\mathbf{u}_{s+1} = \frac{\hat{\mathbf{a}}^\dagger \mathbf{u}_s}{\sqrt{(s+1)}}$$



↑ D. 厄米算符: 若算符的厄米共轭就是它自身, 则称该算符为厄米算符。

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

↑ E. 厄米算符的性质

1. 厄米算符相加、减仍是厄米算符;  
但厄米算符之积并不一定为厄米算符

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

# 量子力学形式理论





# 1926 - 1927



薛定谔  
40岁



希尔伯特  
65岁



狄拉克  
23岁

# 为什么要研究抽象理论？

- ❌ 波动力学仅限于描述空间中运动的粒子  
(坐标或动量)
- ❌ 量子描述并不是独一无二的  
(坐标表象和动量表象给出一致结果)
- ❌ 但有许多物理量无法用坐标( $x$ )和动量( $p$ )来描述  
例如：费米子自旋，强子同位旋，  
弱同位旋，夸克的色空间  
抽象理论可以帮助我们更好地理解量子力学

# Plancherel定理

两个波函数的如下积分和它们傅里叶变换后波函数的积分相等

$$\int \psi_1^*(\vec{r}, t) \psi_2(\vec{r}, t) d^3 r = \int \varphi_1^*(\vec{p}, t) \varphi_2(\vec{p}, t) d^3 p$$
$$(\psi_1(\vec{r}, t), \psi_2(\vec{r}, t)) = (\varphi_1(\vec{p}, t), \varphi_2(\vec{p}, t))$$

数学家理解上面等式背后的结构：

这些积分是两个复函数的标量内积

# 例：有限维复向量空间—厄米空间

简单起见，考虑二维空间，

$$\text{矢量 } u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad \text{共轭矢量 } \bar{u} = (u_1^* \quad u_2^*)$$

$$\text{厄米标量积 } \langle v|u \rangle = v_1^* u_1 + v_2^* u_2$$

$$\text{矢量模 } \|u\| = \langle u|u \rangle \geq 0$$

$$\text{矩阵的厄米共轭 } M_{ij}^\dagger = (M_{ji})^*$$

$$\text{厄米矩阵： } M^\dagger = M$$

厄米矩阵的本征值是实数，其归一化的本征向量构成了厄米空间的正交归一的基矢

# 例：平方可积复函数的向量空间

与量子力学紧密相关的是平方可积函数：满足如下条件的实变量的复函数

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx < \infty$$

数学上将平方可积函数的集合即作为  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ ，所以  $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

线性代数：平方可积函数的集合构成一个复向量空间  $V$

这个集合中元素之间可以定义加法“+”，同时也可以定义它的一个元素和一个复数的数乘，这些操作之间满足分配律

可证：任何平方可积函数的线性组合仍然是平方可积的，即  $V$  对于上述加法和数乘运算是封闭的。

# 例：平方可积复函数的向量空间

任取  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$  上的函数  $f(x)$  和  $g(x)$ ，则它们任何一个线性组合

$G(x) = af(x) + bg(x)$  也是平方可积的。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |G(x)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} |af(x) + bg(x)|^2 dx \\ &= |a|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx + |b|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |g(x)|^2 dx + a^*b \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)g(x) dx + ab^* \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g^*(x) dx \\ &\leq |a|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx + |b|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |g(x)|^2 dx + 2|ab| \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx} \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |g(x)|^2 dx} \\ &< \infty \end{aligned}$$

其中用到Cauchy-Schwartz不等式：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)g(x) dx \leq \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx} \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |g(x)|^2 dx}$$

# Schwarz不等式

如果  $\psi_1, \psi_2$  是任意两个平方可积函数，则有

$$(\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2) \geq |(\psi_1, \psi_2)|^2$$

证：令  $\Psi_3 = \Psi_2 - \Psi_1 \frac{(\Psi_1, \Psi_2)}{(\Psi_1, \Psi_1)}$

$$(\Psi_3, \Psi_3) = \left( \Psi_2 - \Psi_1 \frac{(\Psi_1, \Psi_2)}{(\Psi_1, \Psi_1)}, \Psi_2 - \Psi_1 \frac{(\Psi_1, \Psi_2)}{(\Psi_1, \Psi_1)} \right) \geq 0$$

得

$$\begin{aligned} & (\Psi_2, \Psi_2) - (\Psi_2, \Psi_1) \frac{(\Psi_1, \Psi_2)}{(\Psi_1, \Psi_1)} - \frac{(\Psi_1, \Psi_2)^*}{(\Psi_1, \Psi_1)} (\Psi_1, \Psi_2) \\ & + \left( \frac{(\Psi_1, \Psi_2)^*}{(\Psi_1, \Psi_1)} \frac{(\Psi_1, \Psi_2)}{(\Psi_1, \Psi_1)} (\Psi_1, \Psi_1) \right) \geq 0 \end{aligned}$$

从而证得：

$$(\Psi_1, \Psi_1) \cdot (\Psi_2, \Psi_2) \geq |(\Psi_2, \Psi_1)|^2$$

类似于

$$|\vec{A} \cdot \vec{B}|^2 \leq |\vec{A}|^2 |\vec{B}|^2$$

# 平方可积函数的向量空间 和量子力学的联系



# Charles Hermite



1860年厄米研究复变函数性质时

定义了两个函数的厄米标量内积

$$(g, f) = \int g^*(x) f(x) dx$$

厄米标积满足厄米对称性

$$(g, f) = (f, g)^*$$

我们可以定义函数的模

$$\|f\|^2 = \int |f(x)|^2 dx$$

这和有限维向量空间的数学形式没有区别，虽然收敛性不同。

# 简谐振子本征值



厄米研究了简谐振子本征值问题

$$\hat{h}\varphi_n(x) \equiv \left( x^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \varphi_n(x) = \varepsilon_n \varphi_n(x)$$

得到了离散的本征值和相应的平方可积的本征解

$$\varepsilon_n = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\varphi_n(x) = \gamma_n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} \left( e^{-x^2} \right)$$

归一化因子  $\gamma_n = \pi^{-1/4} 2^{-n/2} (n!)^{-1/2}$

厄米函数  $\varphi_n(x)$  是正交归一的，构成一组正交基

# 厄米的重要发现



所有平方可积函数都可以写作厄米函数的集合

$$\forall f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{R}), \quad f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \varphi_n(x)$$

$$\text{其中 } C_n = \langle \varphi_n | f \rangle$$

换言之，厄米函数构成一个完备集合，  
被称作  $\mathcal{L}^2(\mathcal{R})$  的 Hilbert 基。

取厄米函数为基时，函数  $f(x)$  完全由它展开系数确定

$$f(x) \Leftrightarrow \{C_n\}$$

# 希尔伯特空间 $\mathcal{H}$

平方可积复函数

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx < \infty$$

构成的向量空间  $L^2(\mathbb{R})$   $x \in \mathbb{R}$

独立性和完备性

向量空间维数  $d_V =$  最大独立矢量的个数

厄米函数构成 Hilbert 基是 **无穷维** 的

取厄米函数为基时，函数 $f(x)$ 完全由它展开系数确定

$$f(x) \Leftrightarrow \{C_n\}$$

我们可以“忘掉”厄米函数基，直接和展开系数打交道。例如，

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \varphi_n(x) \quad g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \varphi_n(x)$$

$f(x)$ 和 $g(x)$ 的内积

$$(g, f) = \sum B_n^* C_n$$

$$\|f\|^2 = \sum |C_n|^2$$

**Bessel-Parseval定理**

能量平均值

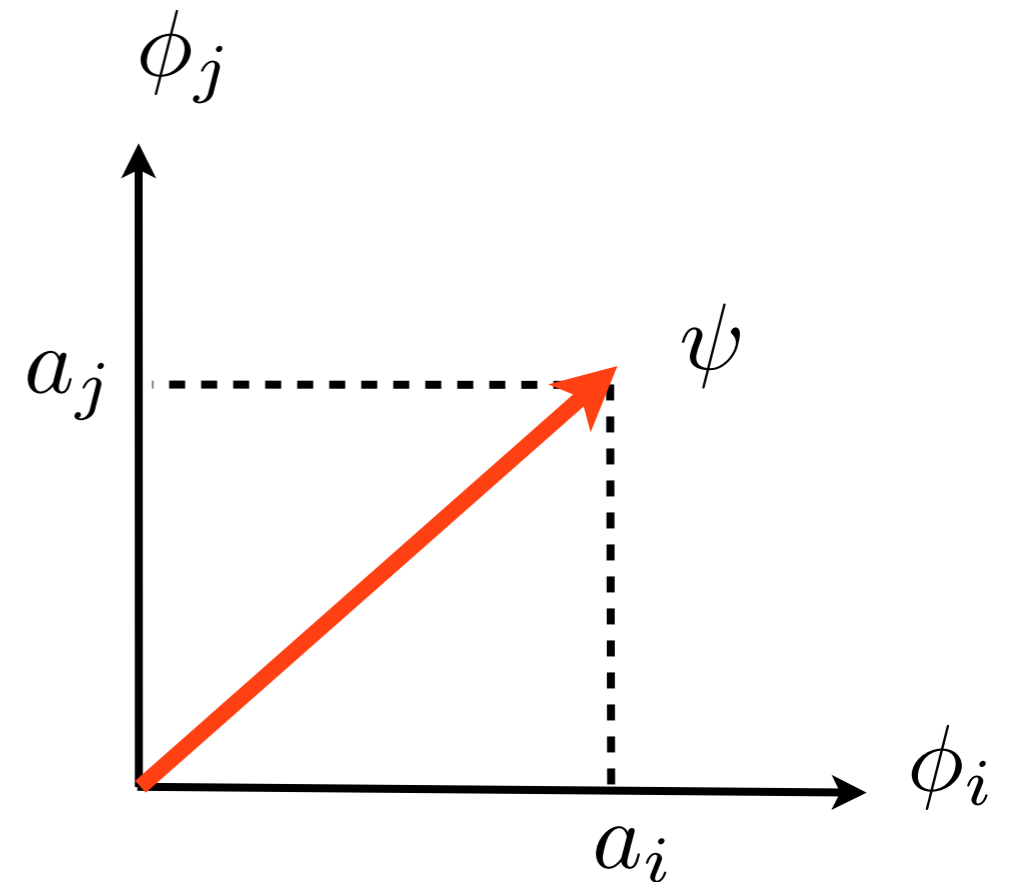
$$\hat{h}f(x) = \sum C_n \hat{h}\varphi_n(x) = \sum C_n \varepsilon_n \varphi_n(x)$$

$$(f, \hat{h}f(x)) = \sum \varepsilon_n |C_n|^2$$

# Hilbert空间的几何性质

矢量表示

$$\psi = \sum_{i=1}^N a_i \phi_i$$
$$a_j = \frac{(\phi_j, \psi)}{(\phi_j, \phi_j)}$$
$$\psi = \sum_j \frac{(\phi_j, \psi)}{(\phi_j, \phi_j)} \phi_j$$



矢量内积

$$(\psi, \psi') = \sum_{ij} \frac{(\phi_j, \psi)^* (\phi_i, \psi')}{(\phi_j, \phi_j)(\phi_i, \phi_i)} (\phi_j, \phi_i) = \sum_i \frac{(\phi_i, \psi)^* (\phi_i, \psi')}{(\phi_i, \phi_i)}$$

# Hilbert空间的维数

(有限维 或 无限维)

无限维独立矢量集合的完备性

给定任一态矢量  $\psi$ ，总可以找到一组数  $a_i$  使得

$$\sum_{i=1}^{\infty} a_i \phi_i \rightarrow \psi$$

数学上，定义  $\Omega_N \equiv \psi - \sum_{i=1}^N a_i \phi_i$ ，当  $N \rightarrow \infty$  时，

$$\langle \Omega_N | \Omega_N \rangle \rightarrow 0$$

这使得我们可以将无限维的希尔伯特空间视作为有限维来做同样的数学处理

# 波函数——态矢量

薛定谔波动力学中波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  属于希尔伯特空间。

例如，3维空间中的运动粒子的Hilbert空间是  $\mathcal{L}^2(R^3)$ 。

$$R^3 = (x, y, z)$$

$\psi(\vec{r}, t)$  和  $\varphi(\vec{p}, t)$  是3维粒子运动的两种等价描述

===》 存在无穷多的等价描述。

采用抽象的Hilbert空间中的矢量  $\psi(t)$  来描述物理体系的量子状态，不在拘泥于具体的表示空间。

$|\psi(t)\rangle \longrightarrow$  Hilbert空间的元素



# 量子力学第1条假设

描述物理体系的波函数对应于希尔伯特空间中的矢量或一点，简称为态矢量。

对理论物理学家或数学家来说，

量子物理发生在希尔伯特空间。

然而我们需要牢记，

物理现象（经典或量子）是发生在实验室内。

# 狄拉克符号

为了将态矢量从具体坐标表示中释放出来，狄拉克引入符号

**Ket矢**  
(右矢)  $\psi \rightarrow |\psi\rangle$

Hilbert空间  $\mathcal{H}$

**Bra矢**  
(左矢)  $\psi^* \rightarrow \langle\psi|$

Hilbert空间的共轭空间  $\mathcal{H}_d = \mathcal{H}^*$

每一个右矢都存在一个单独的左矢，反之亦然。

内积:  $(\phi, \psi) \rightarrow \langle\phi|\psi\rangle$

如果要研究粒子出现在空间某处（或某个动量）的概率，我们需要写出粒子在坐标空间（或动量空间）中的波函数，

$$\psi(\vec{r}, t) = \langle\vec{r}, t|\psi\rangle \quad \varphi(\vec{p}, t) = \langle\vec{p}, t|\psi\rangle$$

内积为  $\langle\phi|\psi\rangle = \int \phi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)d^3r$

# 左矢和右矢的属性

每一个ket矢都有一个相应的bra矢

$$\begin{aligned} |\psi\rangle^* &= \langle\psi| & (\alpha|\psi\rangle)^* &= \alpha^* \langle\psi| \\ |\alpha\psi\rangle &= \alpha|\psi\rangle & \langle\alpha\psi| &= \alpha^* \langle\psi| \end{aligned}$$

## 标积性质

$$\langle\phi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\phi\rangle \quad \text{QM中标积为复数，顺序非常重要}$$

$$\langle\psi|a_1\psi_1 + a_2\psi_2\rangle = a_1 \langle\psi|\psi_1\rangle + a_2 \langle\psi|\psi_2\rangle \quad \text{线性}$$

$$\langle a_1\psi_1 + a_2\psi_2|\psi\rangle = a_1^* \langle\psi_1|\psi\rangle + a_2^* \langle\psi_2|\psi\rangle \quad \text{反线性}$$

$$\begin{aligned} \langle a_1\phi_1 + a_2\phi_2|b_1\psi_1 + b_2\psi_2\rangle &= a_1^*b_1 \langle\phi_1|\psi_1\rangle + a_1^*b_2 \langle\phi_1|\psi_2\rangle \\ &\quad + a_2^*b_1 \langle\phi_2|\psi_1\rangle + a_2^*b_2 \langle\phi_2|\psi_2\rangle \end{aligned}$$

# 左矢和右矢的属性

标积满足Schwarz不等式

$$|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle$$

标积满足三角不等式

$$\sqrt{\langle \psi + \phi | \psi + \phi \rangle} \leq \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} + \sqrt{\langle \phi | \phi \rangle} \quad |\vec{A} + \vec{B}| \leq |\vec{A}| + |\vec{B}|$$

正交归一态

$$\langle \psi | \phi \rangle = 0 \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad \langle \phi | \phi \rangle = 1$$

禁止的物理量

如果  $|\psi\rangle$  和  $|\phi\rangle$  属于同一希尔伯特空间,

$|\psi\rangle |\phi\rangle$  和  $\langle \psi | \langle \phi |$  是禁止的。属于不同空间可以直乘。

# 狄拉克符号总结

Dirac formalism

Wave functions

$$|\varphi\rangle$$

$$\varphi(\mathbf{r})$$

$$|\psi(t)\rangle$$

$$\psi(\mathbf{r}, t)$$

$$\langle\psi_2|\psi_1\rangle$$

$$\int \psi_2^*(\mathbf{r})\psi_1(\mathbf{r}) d^3r$$

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle$$

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r$$

$$\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle$$

$$\int \psi_2^*(\mathbf{r})\hat{A}\psi_1(\mathbf{r}) d^3r$$

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

$$\int \psi^*(\mathbf{r})\hat{A}\psi(\mathbf{r}) d^3r$$

选定正交归一  
完备的Hilbert基

$$\{|n\rangle\}$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$$

任意矢量都可以  
展开为

$$|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$$

$$C_n = \langle n|\psi\rangle$$

# 算符

作用在波函数上将之变换为另外一个波函数

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\hat{O}} |\phi\rangle$$

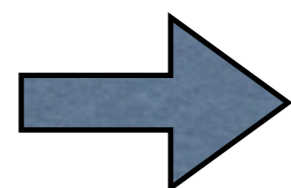
物理量：线性+厄米算符

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

算符的厄米共轭是该算符  
取复共轭，再转置

$$\langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle^*$$

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


$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^*$$

厄米算符的平均值是实数

# 厄米算符性质

在任意状态下，平均值为实数的线性算符必为厄米算符。

$$(\psi, \hat{A}\psi) = (\psi, \hat{A}\psi)^* = (\hat{A}\psi, \psi) \longrightarrow \hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

令  $\psi = \psi_1 + \lambda\psi_2$ ，( $\lambda, \psi_1, \psi_2$ 都是任意的

线性

$$(\psi_1 + \lambda\psi_2, \hat{A}(\psi_1 + \lambda\psi_2))$$

$$= (\psi_1, \hat{A}\psi_1) + \lambda (\psi_1, \hat{A}\psi_2) + \lambda^* (\psi_2, \hat{A}\psi_1) + |\lambda|^2 (\psi_2, \hat{A}\psi_2) \quad \text{—— (1)}$$

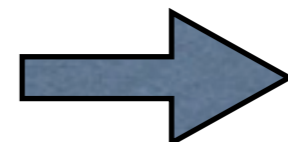
实数

$$(\hat{A}(\psi_1 + \lambda\psi_2), \psi_1 + \lambda\psi_2)$$

$$= (\hat{A}\psi_1, \psi_1) + \lambda (\hat{A}\psi_1, \psi_2) + \lambda^* (\hat{A}\psi_2, \psi_1) + |\lambda|^2 (\hat{A}\psi_2, \psi_2)$$

$$= (\psi_1, \hat{A}\psi_1) + \lambda (\psi_2, \hat{A}\psi_1)^* + \lambda^* (\psi_1, \hat{A}\psi_2)^* + |\lambda|^2 (\psi_2, \hat{A}\psi_2) \quad \text{—— (2)}$$

$$(1) - (2)$$



(1) - (2)

$$\lambda [(\psi_1, \hat{A}\psi_2) - (\psi_2, \hat{A}\psi_1)^*]$$

$$= \lambda^* [(\psi_1, \hat{A}\psi_2)^* - (\psi_2, \hat{A}\psi_1)]$$

$$= \lambda^* [(\psi_1, \hat{A}\psi_2) - (\psi_2, \hat{A}\psi_1)^*]^*$$

由于  $\lambda$  取任意值，该式都成立，因此仅当

$$[(\psi_1, \hat{A}\psi_2)^* - (\psi_2, \hat{A}\psi_1)] = 0 \text{ 该式成立。}$$

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

由于  $\psi_1, \psi_2$  是任意的，所以  $\hat{A}$  是厄米算符

易证：若  $\hat{A}$  是厄米算符，则  $\overline{\hat{A}^2} \geq 0$



# 厄米算符性质

厄米算符相加、减仍是厄米算符；

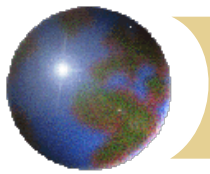
$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A}$$

但厄米算符之积不一定是厄米算符

如果两个厄米算符乘积仍是厄米算符，那么它们必然对易。

两个厄米算符对易子是反厄米的。

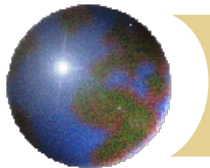
$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}]$$



## II. 厄米算符的本征值和本征函数

### A. 算符的本征方程

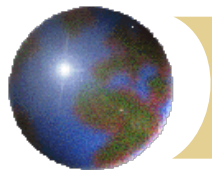
如对大量完全相同的体系作完全相同的测量，可以发现，测得  $A_1, A_2, A_3 \cdots$  等各有一定的概率。而对有**一定概率分布**（围绕最大概率测量值）**的状态**，进行一次测量，其偏差大小可由一“涨落”来定义，即由**方均根**来定义



$$\sqrt{(\psi, (\hat{A} - \bar{\hat{A}})^2 \psi)} = \sqrt{(\psi, (\hat{A}^2 - \bar{\hat{A}}^2) \psi)}$$

要使“涨落”为零，即测量值只取确定值，则要求

$$\begin{aligned} \Delta A &= \sqrt{(\psi, (\hat{A} - \bar{\hat{A}})^2 \psi)} = \sqrt{(\psi, \Delta \hat{A}^2 \psi)} \\ &= \sqrt{((\hat{A} - \bar{\hat{A}})\psi, (\hat{A} - \bar{\hat{A}})\psi)} \\ &= \sqrt{\int |\hat{A} - \bar{\hat{A}}\psi|^2 d\underline{r}} = 0 \end{aligned}$$



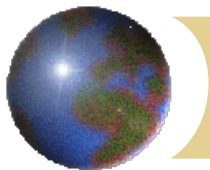
$$(\hat{A} - \overline{\hat{A}})\psi = 0$$

令这一特殊状态为  $u_n$

$$\hat{A}u_n = A_n u_n$$

我们称上述方程为**算符的本征方程**。

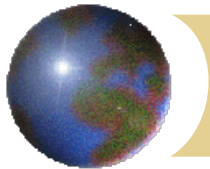
显然，仅当体系处于本征态所描述的状态时，测量值才是唯一的，即为相应的本征值（这时“涨落”为零）。



$$\hat{H}(\underline{r}, \underline{\hat{p}})u_n = E_n u_n$$

就是体系的能量本征方程。

**量子力学第三个基本假设：**在量子力学中，一个直接可观测的力学量，对应于一个线性厄米算符；当对体系进行该力学量的测量时，所有测量可能得到的值，只能是算符  $\hat{A}$  的本征方程的本征值。



**例1** 求轨道角动量在  $z$  方向分量的本征值和本征函数。

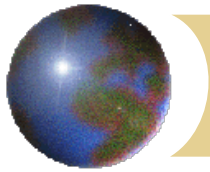
$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\hat{L}_z \psi(\phi) = l_z \psi(\phi)$$

有解

$$\psi(\phi) = A e^{i l_z \phi / \hbar}$$

由于  $\psi(\phi + 2\pi) = \psi(\phi)$

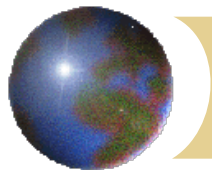


得 
$$\frac{2\pi l_z}{\hbar} = 2\pi m \Rightarrow l_z = m\hbar$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

$$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad l_z = m\hbar$$

事实上，上述条件并不需要。我们只要利用轨道角动量算符的对易关系，直接



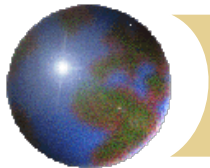
可导出  $\hat{L}_z$  算符本征值的可取值（参见习题 4.14）

⊙ 要求  $\hat{L}_z$  是厄米算符（保证本征值为实数）只能推得



$$l_z = \hbar \begin{cases} \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots \\ 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \end{cases}$$



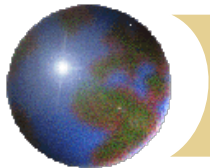


要求是厄密算符（保证本征值为实数）。

所以，对任意二个波函数有

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \psi_1^* \left( -i\hbar \frac{d}{d\phi} \right) \psi_2 d\phi &= -i\hbar \psi_1^*(\phi) \psi_2(\phi) \Big|_0^{2\pi} + i\hbar \int_0^{2\pi} \psi_2(\phi) \frac{d}{d\phi} \psi_1^*(\phi) d\phi \\ &= -i\hbar (\psi_1^*(2\pi) \psi_2(2\pi) - \psi_1^*(0) \psi_2(0)) \\ &\quad + \int_0^{2\pi} \left( -i\hbar \frac{d}{d\phi} \psi_1(\phi) \right)^* \psi_2(\phi) d\phi \end{aligned}$$

$$(\psi_1^*(2\pi) \psi_2(2\pi) - \psi_1^*(0) \psi_2(0)) = 0$$



如  $\Psi_1, \Psi_2$  是本征解, 则有

$$(l_2^z - l_1^z) \frac{2\pi}{\hbar} = \pm 2\pi m$$

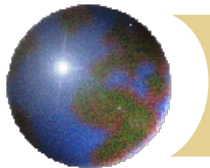
即

$$(l_2^z - l_1^z) = \pm m\hbar$$

这表明, 两本征值之差最小绝对值为。

所以,

$$\frac{l_z}{\hbar} = \begin{cases} \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots \\ 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \end{cases}$$

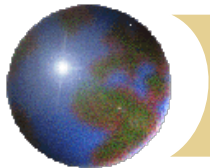


**例2** 求绕固定轴转子的能量本征值和本征函数。

绕固定轴转子的能量本征方程

$$\hat{H}u = Eu \Rightarrow \frac{L_z^2}{2\mathfrak{I}} u = -\frac{\hbar^2}{2\mathfrak{I}} \frac{d^2}{d\phi^2} u = Eu$$

$$\frac{d^2}{d\phi^2} u = -\frac{2\mathfrak{I}E}{\hbar^2} u$$



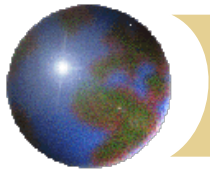
令  $\mathbf{u} = A e^{i\lambda\phi}$

得  $\lambda = \pm (2\mathfrak{J}E / \hbar^2)^{1/2}$

$$\mathbf{u} = A e^{\pm i(2\mathfrak{J}E / \hbar^2)^{1/2} \phi}$$

要求  $\mathbf{u}(\phi + 2\pi) = \mathbf{u}(\phi)$

$$2\pi \sqrt{\frac{2\mathfrak{J}E}{\hbar^2}} = 2\pi m \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$



事实上，这一条件并不需要。因

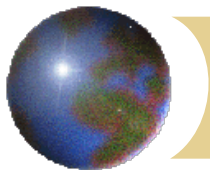
$$\mathbf{u} = A e^{\pm i(2\mathfrak{I}E/\hbar^2)^{1/2} \phi}$$

也是  $\hat{L}_z$  的本征函数，直接可得

$$(2\mathfrak{I}E/\hbar^2)^{1/2} = m \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

固定转子的能量本征值和本征函数为

$$E_{|m|} = \frac{\hbar^2}{2\mathfrak{I}} m^2 \quad \mathbf{u}_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

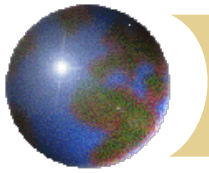


- ↑ B. 力学量算符的本征值和本征函数性质
1. 力学量的每一可取值都是实数（即本征值）；
  2. 相应不同本征值的本征函数是正交的

$$(u_n, u_m) = 0$$

证：

$$\hat{A}u_n = A_n u_n$$



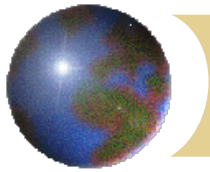
$$\hat{\mathbf{A}}\mathbf{u}_m = \mathbf{A}_m\mathbf{u}_m$$

$$(\mathbf{u}_m, \hat{\mathbf{A}}\mathbf{u}_n) = \mathbf{A}_n(\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_n)$$

$\hat{\mathbf{A}}$  是厄米算符

$$= (\hat{\mathbf{A}}\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_n) = (\mathbf{A}_m\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_n)$$

$$= \mathbf{A}_m^*(\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_n) = \mathbf{A}_m(\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_n)$$



$$\text{于是, } (\mathbf{A}_n - \mathbf{A}_m)(\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_n) = 0$$

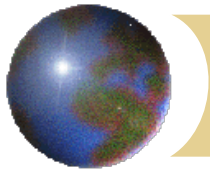
当  $\mathbf{A}_m \neq \mathbf{A}_n$  , 则

$$(\mathbf{u}_n, \mathbf{u}_m) = 0$$

即  $\mathbf{u}_n, \mathbf{u}_m$  正交的。

这就自然保证波函数对某力学量的本征函数展开时, 是唯一的。



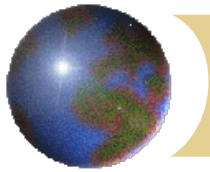


### 3. Schmit 正交化方法

如果一个本征值  $A_n$  对应  $S$  个线性无关的本征函数  $\psi_n^{(i)}$ ，这组本征函数并不一定正交，我们可以通过 **Schmit 正交化方法** 来实现正交归一化。

取  $\varphi_n^{(1)} = c_1 \psi_n^{(1)}$  使  $(\varphi_n^{(1)}, \varphi_n^{(1)}) = 1$

取  $\varphi_n^{(2)} = c_2 [\psi_n^{(2)} - \varphi_n^{(1)} (\varphi_n^{(1)}, \psi_n^{(2)})]$



保证  $(\varphi_n^{(1)}, \varphi_n^{(2)}) = 0$  , 且  $(\varphi_n^{(2)}, \varphi_n^{(2)}) = 1$

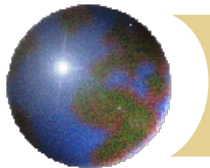
类似地设

$$\varphi_n^{(3)} = c_3 \left[ \psi_n^{(3)} - \varphi_n^{(1)} (\varphi_n^{(1)}, \psi_n^{(3)}) - \varphi_n^{(2)} (\varphi_n^{(2)}, \psi_n^{(3)}) \right]$$

这必然有

$$(\varphi_n^{(1)}, \varphi_n^{(3)}) = (\varphi_n^{(2)}, \varphi_n^{(3)}) = 0$$

且  $(\varphi_n^{(3)}, \varphi_n^{(3)}) = 1$



⋮

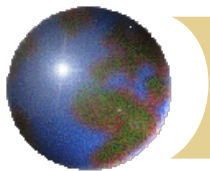
$$\varphi_n^{(s)} = c_s \left[ \psi_n^{(s)} - \sum_{m=1}^{s-1} \varphi_n^{(m)} (\varphi_n^{(m)}, \psi_n^{(s)}) \right]$$

4. 任何一个算符总可表示为两个厄米算符之和

$$\hat{A} = \hat{A}_+ + i\hat{A}_-$$

其中

$$\hat{A}_+ = \frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{A}^\dagger) \quad \hat{A}_- = \frac{-i}{2}(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$$



## C. 测量结果的概率

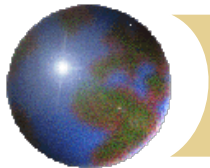
↑  
现来计算测量力学量  $\hat{A}$  取值  $A_n$  的概率。根据态叠加原理，如能测得

$$A_1, A_2, A_3 \cdots$$

则体系所处的态  $\Psi$  必可表为

$$\Psi = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2 + c_3 \varphi_3 + \cdots$$

而  $\hat{A} \varphi_n = A_n \varphi_n$



所以

$$\begin{aligned}\overline{\hat{A}} &= \int \psi^* \hat{A} \psi d\mathbf{r} \\ &= \sum_n |c_n|^2 A_n\end{aligned}$$

表达式表明，在  $\Psi$  中测量力学量  $\hat{A}$  取值  $A_n$  的概率为  $|c_n|^2$ 。

所以，要在一体系中（以  $\Psi$  描述），测量力学量  $\hat{A}$ ，取值  $A_n$  的概率幅为

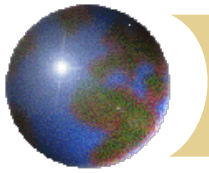


$$c_n = (\varphi_n, \psi)$$

$$c_n = \frac{(\varphi_n, \psi)}{(\varphi_n, \varphi_n)^{1/2} (\psi, \psi)^{1/2}}$$

↑ D. 直接可观测的力学量的本征函数构成一完备组。

如  $\{\varphi_n\}$  是力学量  $\hat{A}$  的本征函数组，  
则任一波函数可以以  $\{\varphi_n\}$  表示



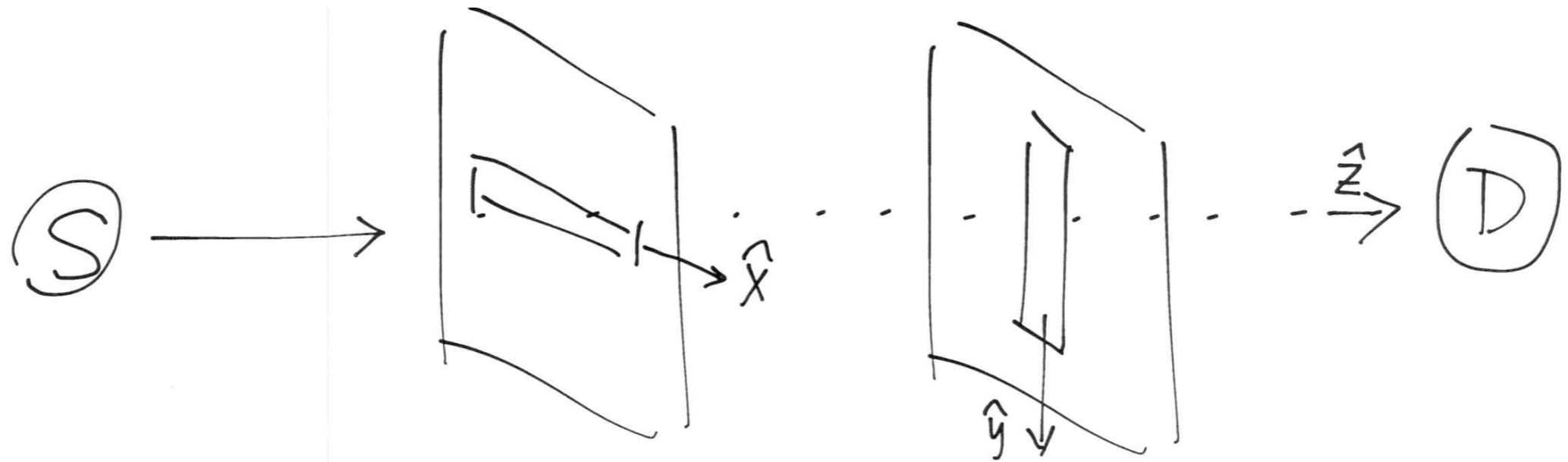
$$\Psi = \sum_n c_n \Phi_n$$

根据态叠加原理，体系处于态  $\Psi$  中，那进行力学量  $\hat{A}$  的测量。如测量值为  $A_1, A_2, A_3 \dots$ ，则  $\Psi$  是这些本征值所相应的本征态的线性叠加态。即

$$\Psi = c_1 \Phi_1 + c_2 \Phi_2 + c_3 \Phi_3 + \dots$$

4.4    4.5    4.9

# 干涉仪实验



现在考虑在以上两个  $x$  和  $y$  偏振片之间插入第三个偏振片, 其偏振方向同  $x$  成  $45^\circ$  角

$\Rightarrow$  有光透射出



光的极化态可以用2维希尔伯特空间的矢量表示：

$$|\rightarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

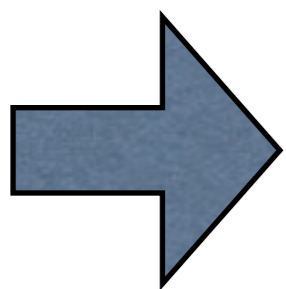
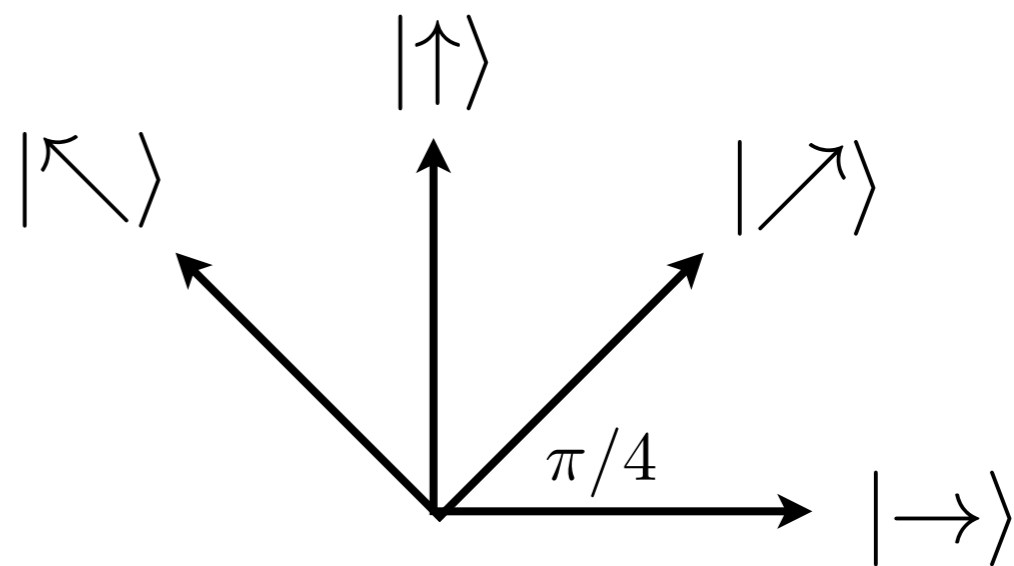
处于此态的光子  
完全穿透x偏振片

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

处于此态的光子  
完全穿透y偏振片

$$|\nearrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\rightarrow\rangle + |\uparrow\rangle)$$

$$|\nwarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-|\rightarrow\rangle + |\uparrow\rangle)$$



$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\nearrow\rangle + |\nwarrow\rangle)$$

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-|\nearrow\rangle + |\nwarrow\rangle)$$

# 量子“逻辑”

经典“和”与量子“或”

量子世界：

我们将偏振片想象成一道门。

$|\rightarrow\rangle$  允许女人通过     $|\uparrow\rangle$  允许男人通过

$|\nearrow\rangle$  吃(鸡腿+啤酒)     $|\nwarrow\rangle$  不吃(鸡腿+啤酒)

量子儿童：

观测通过 $\rightarrow\rangle$  和 $\nearrow\rangle$  两道门的人

经典逻辑：喜欢吃(鸡腿+啤酒)的女性

量子逻辑：喜欢吃(鸡腿+啤酒)的女性中一半是男性