Chapter 3

量子力学原理

3.1 左矢，右矢与算符

波函数实际描述的是粒子的微观状态.

粒子的每一个微观状态都可以用抽象的复数矢量空间中的矢量来表示, 该矢量称为**态矢(state vector)**, 它包含了一个物理状态(state)的全部信息. 也就是说, 我们能问的所有事情都被态矢包含了. 这一矢量称为右矢(ket). 比如, 一个处于无限深势阱基态的粒子的状态, 我们可以记为$|\alpha\rangle$. 而复数矢量空间称为Hilbert空间, 其维度由我们关心的物理系统的特性决定.

两个右矢可以相加:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle. \tag{3.1}$$

$|\gamma\rangle$是另一个矢量. 加法满足交换律,

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle \tag{3.2}$$

结合律:

$$|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle. \tag{3.3}$$

也可以用一个复数去乘一个右矢, 得到另一个矢量$c|\alpha\rangle$, 并且

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c. \tag{3.4}$$

数乘满足

$$c(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = c|\alpha\rangle + c|\beta\rangle \tag{3.5}$$

以及

$$(a+b)|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle + b|\alpha\rangle \tag{3.6}$$

$$a(b|\alpha\rangle) = (ab)|\alpha\rangle \tag{3.7}$$

如果$c = 0$, 得到的矢量称为**空矢(null ket)**. 在物理上, 我们**约定**$|\alpha\rangle$**与**$c|\alpha\rangle (c \neq 0)$**表示同一个物理态.** 换句话说, 矢量空间里**"方向"才是重要的**.

一个力学量, 或称**观测量**(**observable**, 注意这是个名词), 比如动量、坐标或以后遇到的自旋角动量等, 可以表示为矢量空间里的一个**算符**. 比如说$\hat{A}$, 它可以从左边作用在一个右矢上

$$\hat{A} \cdot |\alpha\rangle, \tag{3.8}$$

通常简写为$A|\alpha\rangle$, 得到另一个矢量. 一般来说, 这个矢量不是一个常数乘以$|\alpha\rangle$. 但是存在一些特殊的矢量, 满足

$$A|a\rangle = a|a\rangle, \tag{3.9}$$

称为算符$\hat{A}$的本征矢量(eigenvector, eigenket). a是纯数, 称作A的本征值(eigenvalue). 一般来说, 本征值和本征矢不止一个.

在物理上, 与本征矢对应的状态称为本征态(eigenstate). 按Dirac符号, 前面的能量本征方程Eq. (1.104)就是

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \tag{3.10}$$

以后我们会讨论波函数ψ_n与右矢$|n\rangle$的关系.

在线性代数里我们学过矢量$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$的线性组合可以写为$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle$. 如果另一个矢量$|\gamma\rangle$不能写为$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$的线性组合，则称$|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle$ 线性无关. 如果任意一个矢量都可以表示成这组彼此线性无关的矢量的线形组合，那么我们称这组矢量张开了一个空间，这些矢量称为该空间的一组'基' (basis). 这些矢量的个数称为空间的维数.

后面我们会论证，假设力学量$\hat{A}$有N个本征矢, 那么它们会彼此线性无关，因此可以张开一个N维空间. 一个任意的右矢$|\alpha\rangle$可以表示为

$$|\alpha\rangle = \sum_a c_a|a\rangle, \tag{3.11}$$

其中a表示N个右矢, c_a是复数. 也就是说这N个本征矢构成一组'基'。这一表示是否唯一以后再讨论.

3.1.1 左矢(bra)与内积(Inner products)

前面谈论的是右矢空间(ket space), 现在引入**左矢空间(bra space)**. 我们假设每一个右矢$|\alpha\rangle$ 都能在这个空间里找到一个**左矢(bra)** 和它对应, 记为$\langle\alpha|$.

$$|\alpha\rangle \leftrightarrow \langle\alpha| \tag{3.12}$$

也可以写作

$$(|\alpha\rangle)^\dagger = \langle\alpha|, \qquad (\langle\alpha|)^\dagger = |\alpha\rangle. \tag{3.13}$$

可以把左矢空间理解成右矢空间的镜像.

非常重要的一个约定:

$$\begin{aligned}(c|\alpha\rangle)^\dagger &\equiv c^*\langle\alpha|,\\ (c|\alpha\rangle + b|\beta\rangle)^\dagger &= c^*\langle\alpha| + b^*\langle\beta|.\end{aligned} \tag{3.14}$$

现在我们来定义左矢和右矢的**内积(inner product)**,

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\beta|\cdot|\alpha\rangle. \tag{3.15}$$

这一乘积一般是个**复数**.

我们假设内积的根本性质有两个,

- 第一

  $$\langle\beta|\alpha\rangle = (\langle\alpha|\beta\rangle)^*. \tag{3.16}$$

  注意：这一点与我们熟悉的实矢量空间两个矢量的点乘$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$是不同的. 在那种情况下,$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = \mathbf{b}\cdot\mathbf{a}$. 根据上面的性质可以立即得到结论: $\langle\alpha|\alpha\rangle$为实数.

  如果

  $$\langle\alpha|\beta\rangle = 0, \tag{3.17}$$

  我们称$|\alpha\rangle$和$\beta\rangle$**正交(orthogonal)**.

- 第二

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0. \tag{3.18}$$

等号只在$|\alpha\rangle$为空矢时成立. 这一点在物理上很重要, 保证了量子力学的几率解释的成立. 我们可以进而定义$|\alpha\rangle$的模

$$||\alpha|| = \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle} \tag{3.19}$$

对于一个非空的右矢, 我们可以构造一个归一化的右矢$|\tilde{\alpha}\rangle$,

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}\right)|\alpha\rangle, \tag{3.20}$$

满足

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1. \tag{3.21}$$

注：连续谱本征值对应的本征矢的归一化与此不同，后面讨论。

3.1.2 算符(Operators)的性质与运算

一个算符可以从左边作用到一个右矢上$X \cdot |\alpha\rangle$, 其实也可以从右边作用到一个左矢上：

$$(\langle\alpha|) \cdot X = \langle\alpha|X, \tag{3.22}$$

得到另外一个左矢. (这与我们前面学习过的动量算符不同. 动量算符只能向右作用到波函数上，是我们这里所谓算符在坐标表象下的特殊形式, 我们后面会讨论).

如果两个算符X和Y对任意一个右矢满足:

$$X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle, \tag{3.23}$$

那么$X = Y$.

算符可以相加, 并且满足交换律和结合律

$$X + Y = Y + X, \qquad X + (Y + Z) = (X + Y) + Z. \tag{3.24}$$

力学量的算符还都是**线性的**, 满足下面关系

$$X(c|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = cX|\alpha\rangle + bX|\beta\rangle. \tag{3.25}$$

算符可以相乘. 一般情况下乘法不能交换顺序

$$XY \neq YX. \tag{3.26}$$

因此有必要定义它们的对易式:

$$[X, Y] \equiv XY - YX. \tag{3.27}$$

但是结合律仍然成立

$$X(YZ) = (XY)Z = XYZ. \tag{3.28}$$

一般来讲$X|\alpha\rangle$和$\langle\alpha|X$不是对偶的（或称共轭）. 我们有必要定义$X^\dagger$使得

$$X|\alpha\rangle \leftrightarrow \langle\alpha|X^\dagger. \tag{3.29}$$

$X^\dagger$称作X的**厄密共轭(Hermitian adjoint)算符**. 一类非常重要的算符满足

$$X = X^\dagger, \tag{3.30}$$

被称作**厄密算符(Hermitian)**. 另外由于

$$XY|\alpha\rangle = X(Y|\alpha\rangle) \leftrightarrow (\langle\alpha|Y^\dagger)X^\dagger = \langle\alpha|Y^\dagger X^\dagger \tag{3.31}$$

所以,

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger. \tag{3.32}$$

3.1.3 外积(Outer Product)

一个左矢还可以与一个右矢进行外积. 写为$|\beta\rangle\langle\alpha|$. 它实际上是一个算符. 与内积完全不同.

结合公理（The Associative Axiom): 左矢, 右矢, 算符的**合法乘法**可以随意结合.

这里合法乘法是针对有些'非法'乘法而言的，比如: $|\alpha\rangle\hat{A}, \hat{X}\langle\beta|$. 当$\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$是同一个矢量空间的矢量时, $|\alpha\rangle|\beta\rangle$也是非法的.

应用举例：

1. 外积作用在一个右矢上
$$(|\beta\rangle\langle\alpha|)\cdot|\gamma\rangle = (|\beta\rangle)\cdot(\langle\alpha|\gamma\rangle). \tag{3.33}$$
得到一个新的右矢. 所以外积确实是一个算符. 如果内积$\langle\alpha|\gamma\rangle \neq 0$, 该右矢对应$|\beta\rangle$对应的物理态.

2. 外积算符的厄密共轭算符
$$(|\beta\rangle\langle\alpha|\cdot|\gamma\rangle)^\dagger = (|\beta\rangle(\langle\alpha|\gamma\rangle))^\dagger = \langle\beta|(\langle\alpha|\gamma\rangle)^* = \langle\gamma|\alpha\rangle\cdot\langle\beta| = \langle\gamma|\cdot|\alpha\rangle\langle\beta| \tag{3.34}$$
这表明$|\alpha\rangle\langle\beta|$是$|\beta\rangle\langle\alpha|$的厄密共轭算符.

3. 考虑
$$\langle\beta|\cdot(X|\alpha\rangle) = (\langle\beta|X)\cdot|\alpha\rangle = \langle\beta|X|\alpha\rangle \tag{3.35}$$
这说明在上式中没有必要区分算符向左还是向右作用. 由于
$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\beta|\cdot(X|\alpha\rangle) = ((\langle\alpha|X^\dagger)\cdot|\beta\rangle)^* = \langle\alpha|X^\dagger|\beta\rangle^*, \tag{3.36}$$
因此，对厄密算符$X = X^\dagger$, 有
$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\alpha|X|\beta\rangle^*. \tag{3.37}$$
在Griffiths书里定义了记号$|X\alpha\rangle \equiv X|\alpha\rangle$, 即用$X\alpha$来标识右矢$X|\alpha\rangle$, 以及$\langle X^\dagger\beta| \equiv (X^\dagger|\beta\rangle)^\dagger = \langle\beta|X$, 即用$X^\dagger\beta$来标识$X^\dagger|\beta\rangle$对应的左矢, 也就是$\langle\beta|X$, 这里我们利用了$(X^\dagger)^\dagger = X$.

因此Eq.(3.35)或(3.36) 可以改写成
$$\langle\beta|X\alpha\rangle = (X^\dagger|\beta\rangle)^\dagger\cdot|\alpha\rangle = \langle X^\dagger\beta|\alpha\rangle \tag{3.38}$$
可以理解为：左矢$\langle\beta|$与右矢$|X\alpha\rangle$的内积等于左矢$\langle X^\dagger\beta|$与右矢$|\alpha\rangle$的内积.

如果X是厄密算符，那么
$$\langle\beta|X\alpha\rangle = \langle X\beta|\alpha\rangle. \tag{3.39}$$
上式也被用来定义厄密算符:满足Eq.(3.39)的算符X是厄密的.

注意到$\langle X\beta| = (X|\beta\rangle)^\dagger = \langle\beta|X^\dagger$, 上式也就是
$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\beta|X^\dagger|\alpha\rangle \tag{3.40}$$