

高等量子力学

华东

出版社

04121
X92

380039

高等量子力学

徐在新



华东师范大学出版社



高等量子力学

徐在新

华东师范大学出版社出版发行

(上海中山北路 3663 号)

邮政编码: 200062

新华书店上海发行所经销 商务印书馆上海印刷厂印刷

开本: 850×1168 1/32 印张: 12.25 字数: 315 千字

1994 年 12 月第一版

1994 年 12 月第一次印刷

印数: 001—1,000 本

ISBN 7-5617-1195-6/N·087

定 价: 19.80 元

导 言

一、本书以作者所编写的高等量子力学讲义为基础。该讲义自1985年以来为我系历届研究生及助教进修班作教材使用。与此同时,该讲义也多次被中国科学院上海技术物理研究所、上海冶金研究所及上海硅酸盐研究所等单位的研究生部以及在国家教委主持下,由我系开设的华东地区高等院校教师暑期理论物理硕士学位课程班采用作为教材。

本书内容可分为三部分:量子力学的一般描述(第一、二章),二次量子化理论及其应用(第三、四章)以及相对论性量子力学(第五章)。

二、牛顿力学(Newton, 1687)反映了实物粒子的“粒子性”,即其能量、动量、角动量等在一定状态下具有确定的值;但却忽略了它的“(概率)波性”,即每个物理量通常按一定的概率分布取一系列可能值。经典力学所能反映的仅仅是在某种条件($\hbar \rightarrow 0$)下的一种近似情况:物理量取某个值的概率最大,而取其他可能值的概率可被忽略。实物粒子的波粒二象性(de Broglie, 1924),或更一般地说,微观现象的概率性迄今已成为公认的实验事实而被确立。

经典物理学与量子力学的根本区别在于是否注意到波粒二象性或概率性。在“正则量子化”方案下,反映波粒二象性的办法是:令描述客体的广义坐标与相应的正则动量满足某种不对易性关系。例如对于一维粒子系统,有

$$[x, p] = i\hbar, \quad (1)$$

其中 \hbar 为普朗克常数, x 和 p 分别为粒子的坐标和动量。正则量子化方案能够反映粒子波粒二象性的理由可简述如下:由数学中的施瓦兹(Schwarz)不等式可以证明,任意两个力学量 A 和 B 的

测量偏差之积与这两个量的对易子存在如下关系:

$$|\Delta A|^2 |\Delta B|^2 \geq \frac{1}{4} |[A, B]|^2. \quad (2)$$

因此, 令 $A=x$, $B=p$, 则如果 x 和 p 满足不对易性关系(1), 我们便可得到 $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ 。这就是海森伯不确定性关系(Heisenberg, 1927)。在初等量子力学(波动力学)教材中已通过许多例子说明, 这种不确定关系是微观粒子波粒二象性的必然结果。

描写微观系统的力学量为了反映波粒二象性而应满足某种不对易性关系, 所以在量子理论中人们不再可用带有量纲的经典的数(O 数)来“表示”力学量, 而要用矩阵或作用于 O 数函数上的微分算符来“表示”量子理论中的力学量(Q 数), 因为矩阵和微分算符的代数满足一定的不对易性关系。力学量表示为带有量纲的算符, 它就不能直接与物理学测量结果相比较。算符是一种“运算约定”, 它只有作用在某个量上才有意义。因此量子理论中还需引进态矢量或波函数。由于这个缘故, 量子力学与经典力学在描述客体的方式上存在根本差别。在量子力学中必须同时引进态矢量和力学量算符来描写一个粒子的特征。只有通过态矢量和力学量算符按一定方式的运算组合, 才能算出对某力学量测量所得到的平均值、本征值, 以及测得的可能值及其概率。而微观现象中的可测量(如能级、跃迁概率、散射截面、寿命等)都与这些量相联系。量子力学对单粒子系统的这种描述方式与经典统计物理学相似。经典统计学对系综的描述不仅要有力学量, 而且还要有“统计分布”。从这个意义来说, 微观单粒子系统就是一个统计系综。不过应当注意, 在经典统计学中力学量是 O 数, 不是 Q 数。

三、正则量子化方法可推广到经典场系统。以电磁场为例, 若令电磁场的广义坐标(如矢势 $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$)及其相应的正则动量

$$\left(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi c^2} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)$$

$$[A_i(\mathbf{x}, t), \pi_j(\mathbf{x}', t)] = i\hbar \delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (3)$$

则此时 A 以及由它所构造的电场 E 、磁场 B 、电磁场能量密度 H 、动量密度 p 、角动量密度 J 等都变成了算符。这些算符是坐标 x 的函数，坐标 x 现在被看成与时间 t 一样都是参数。若将这些“坐标表象”中的力学量算符转化到“粒子数表象”，人们发现此时该场系统的能量、动量和角动量等算符的本征值均分别等于某个基本量的整数倍。因此说，该电磁场被“量子化”了。这种量子化电磁场理论能统一反映电磁场的波粒二象性 (Einstein, 1905)。

在非相对论性量子力学中，坐标表象中的薛定谔方程可视为波场函数 $\psi(x, t)$ 所满足的经典场方程，因为 ψ 现在并非算符而是经典量。于是上述使电磁场量子化的场的正则量子化方法也可应用于薛定谔波场，从而得到量子化薛定谔波场理论。量子化薛定谔波场的基本量子就是原来薛定谔方程所描写的粒子 (如电子)。如果把通过不对易性关系使经典粒子的力学量转化为算符的量子力学理论称为“一次量子化理论”，则在此基础上通过令波场函数转化为算符从而建立起来的量子场理论便可称为“二次量子化理论”。从量子化水平上说，量子化薛定谔波场的理论与量子化电磁场理论相当，它们实质上都是全同多粒子理论。于是人们可从描写单粒子的一次量子化理论出发，通过再次量子化手续，得到一个描写全同多粒子系统的量子理论。大家知道，在一次量子化方案中，对 n 个全同多粒子系统的研究需求解一个 $3n+1$ 个变量的二阶微分方程，而其中 n 的数量级是阿伏伽德罗常数。因此求解这类方程根本不可能。但是若采用二次量子化方案，对全同粒子系统的描述便变得相当简单。由于二次量子化理论的建立，促进了自本世纪 40 年代末以来的固体理论、凝聚态理论以及量子光学的飞速发展。

四、薛定谔方程是非相对论性量子力学方程。以该理论为基础的二次量子化理论也只能描述低能情况下的全同粒子系统及其相互作用现象，如固体性质、超导、超流等。为了探索物质结构的奥秘及固体凝聚态现象中的精细部分，需要研究更深的微观领域

($\leq 10^{-13}$ cm)。在原子核及基本粒子尺度上，物质粒子的结合能将变得愈来愈大，从而大大超过粒子本身的静质量。所以必须建立相对论性一次量子化理论，并在此基础上建立相对论性量子场理论。相对论性量子力学通常包括克莱因-戈登方程(Klein-Gordon)，狄拉克方程(Dirac, 1928)以及麦克斯韦电磁场理论(Maxwell, 1864)等。其中描写自旋为0的粒子的克莱因-戈登方程与描写自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子的狄拉克方程的非相对论极限都是薛定谔方程。本书并未介绍相对论性二次量子化理论，读者可进一步参阅其他关于量子场论方面的著作。在薛定谔方程基础上的二次量子化方法，与在相对论性量子力学方程基础上的二次量子化方法完全类似。不过由于相对论性效应，在薛定谔理论与相对论性量子力学之间，以及在非相对论性二次量子化理论与相对论性二次量子化理论之间，存在某些显著的、甚至是基本观念上的区别。

五、在编写本书的过程中，特别注意对基本观念、基本概念及基本方法的叙述。在介绍各部分内容时，力求通过对比，如矩阵力学及波动力学的对比；一次量子化理论与经典力学的对比；二次量子化理论与一次量子化理论的对比，以及相对论性量子力学与非相对论性量子力学的对比等，使读者对各类方法引进的目的，引进的方式及其基本特点有较深刻的了解。其次，作为本书的一个重点，在引进二次量子化方案时，作者并未按照历史的轨迹，而是从迄今已获公认的、看来反而非常直观的量子场的观点出发，较直接地引进二次量子化方法。然后安排较多篇幅介绍这种方法在固体理论、超导、超流、磁学及量子光学等诸多方面的应用。作者认为，这样的安排或许更有利于读者掌握二次量子化理论的基本方法及其特点；有利于扩大知识面；有利于读者更好更快地与进一步的研究工作和阅读专业论文及著作接轨。最后，本书在叙述过程中常常穿插一些例题，以利于读者对某些基本概念和基本方法的掌握。

本书各章还附有定量的习题。

本书在编写及出版过程中可能存在某些疏漏或差错，欢迎读者批评指教。

徐 在 新

1994. 1 于华东师范大学物理系

目 录

| | |
|----------------------------------|-----|
| 导 言 | 1 |
| 第一章 量子力学的一般描述 | 1 |
| § 1.1 态矢量和力学量的表示 | 2 |
| § 1.2 本征值问题的矩阵力学方法 | 13 |
| § 1.3 么正变换的一般理论 | 27 |
| § 1.4 状态随时间改变的描述——三种绘景 | 36 |
| § 1.5 对称性和守恒定律 | 53 |
| § 1.6 密度算符 | 80 |
| § 1.7 量子力学的路径积分形式 | 95 |
| 习 题 | 108 |
| 第二章 散射的量子理论 | 114 |
| § 2.1 定态格林函数 | 115 |
| § 2.2 弹性散射的玻恩近似 | 121 |
| § 2.3 非弹性散射 | 129 |
| *§ 2.4 重组散射, 反应截面 | 134 |
| § 2.5 与时间有关的格林函数 | 139 |
| § 2.6 散射矩阵 | 144 |
| § 2.7 有心力场中的散射, 分波法 | 151 |
| *§ 2.8 存在两类相互作用时的散射, 奇变波近似 | 155 |
| *§ 2.9 程函近似 | 157 |
| 习 题 | 164 |
| 第三章 二次量子化理论 | 165 |
| § 3.1 粒子数表象, 声子 | 166 |
| § 3.2 相干态 | 179 |
| § 3.3 场的量子化方法 | 195 |
| § 3.4 全同粒子系统的二次量子化理论 | 205 |
| § 3.5 电磁场的量子化 | 217 |
| § 3.6 存在相互作用的量子场理论 | 228 |
| 习 题 | 238 |

| | |
|--------------------------------|------------|
| 第四章 二次量子化理论的某些应用 | 241 |
| § 4.1 相互作用玻色子系统 | 241 |
| § 4.2 电子和晶格振动的相互作用 | 250 |
| § 4.3 超导的微观理论基础 | 266 |
| § 4.4 自旋系统的二次量子化理论 | 280 |
| § 4.5 辐射的量子理论 | 293 |
| 习 题 | 309 |
| 第五章 相对论性粒子的量子力学方程 | 312 |
| § 5.1 引言 | 312 |
| § 5.2 克莱因-戈登方程 | 317 |
| § 5.3 电磁场存在时的 KG 方程 | 328 |
| § 5.4 狄拉克方程 | 334 |
| § 5.5 狄拉克方程的协变形式 | 346 |
| § 5.6 电磁场中的电子 | 360 |
| § 5.7 克莱因-戈登场和狄拉克场的量子化 | 372 |
| 习 题 | 378 |

第一章 量子力学的一般描述

为了研究和把握微观现象，首先需要对微观系统的状态及其随时间的演化进行描述。但是由于波粒二象性，对微观系统的这种描述就不同于经典情况。例如对于经典粒子，人们可以通过坐标和速度或动量等“力学量”来描写它们的状态，因为对于确定的状态它们都具有确定的值；当状态随时间演化时，这些量都按确定的方式随时间变化。这些力学量在经典物理学中都是可以通过实验测量的量。在量子力学中，由于概率性，微观粒子的坐标和动量等力学量一般并不具有确定的值，这些力学量的值之间存在各种“不确定关系”；这些力学量之间存在各种“不对易性关系”。于是人们不再能够用满足乘法交换律的代数量来表示力学量，而需要用“算符”（矩阵或微分算符）来表示它们，以便能够满足不对易性关系，反映微观粒子系统的概率性或波粒二象性的实验事实。于是在量子力学中，这些力学量不再是直接可测量的量，而是作用于“态矢量”或“波函数”的算符。只有通过态矢量或波函数以及力学量两者的结合，人们才能借助于统计物理学方法算出在某个状态中测量某个物理量时所得到的各种可能值，以及出现某种可能值的概率，并算出平均值。在量子力学中，这种可能值及其出现的概率以及平均值，才是人们感兴趣的，因为这些量直接与实验上的可测量相联系。例如原子或固体的能谱与能量的“本征值”有关，而本征值是平均值的一种重要的特例。再如，实验中可以直接测量的散射截面、谱线强度等都是与“跃迁概率”有关的，而跃迁概率又涉及到在末态中测量某个或某几个力学量（如动量、角动量、能量等）所得到的各种可能值的概率。

量子理论最重要的是要讨论微观状态的描述及其随时间的演

化。从上述讨论可知,对于微观状态的描述应包括两个方面,即对态矢量的描述和对力学量的描述。对于微观状态及其随时间演化的描述又可采用不同的表述方式,或者不同的“表象”。在量子力学中,时间是一个参数,而不是力学量。所以为区别起见,对状态的表述方式称为表象;而对它随时间演化的表述方式称为“绘景”。

本章首先讨论微观粒子状态的描述(§ 1.1, § 1.2),以及状态的不同描述之间的变换关系(§ 1.3)。对状态随时间演化的描述将在§ 1.4中讨论。量子力学中对称性和守恒定律的关系则在§ 1.5中讨论。§ 1.6中讨论了状态的“密度矩阵”描述方式,用密度矩阵代替态矢量对微观系统进行描述,在某些情况下是方便的,或许也是必要的。最后,在§ 1.7中简要介绍了量子力学的路径积分形式,这是一种区别于“正则量子化”的量子力学描述方式,这种描述方式在统计物理以及现代量子场理论中已有广泛的应用。

§ 1.1 态矢量和力学量的表示

量子力学中描写微观粒子状态的量可以用“希尔伯空间”中的矢量来表示,故常称为态矢量;力学量则可用该空间中的“张量”来表示。在一般最简单的情况下,表示力学量算符的张量常常是二阶张量,这一类算符因此可表示为方矩阵的形式。

1.1.1 态矢量

从初等量子力学的学习中已经知道,描写微观粒子状态的态矢量 ψ_α 是一个复矢量。任一复矢量有两个独立部分,即它的实部和虚部,或 ψ_α 和 ψ_α^* ,其中 ψ_α^* 是 ψ_α 的厄米共轭矢量或称为“对偶矢量”。现在采用 Dirac 的记号方法,将 ψ_α 记为 $|\alpha\rangle$,并称它为“右括号矢量”或“右矢”; ψ_α^* 记为 $\langle\alpha|$,并称它为“左括号矢量”或“左矢”。显然对于微观粒子状态的描述,右矢和左矢都是重要的。 α 在这里可称为“态指标”,它特征了微观粒子的状态。右矢左矢是互相独立的,但是存在如下简单关系

$$\langle \alpha | = (|\alpha\rangle)^+ \quad (1.1.1)$$

态矢量的长度或它的模的平方并非右矢或左矢的平方，而是左矢和右矢的“标积”或“内积”： $\langle \alpha | \cdot |\alpha\rangle \equiv \langle \alpha | \alpha \rangle$ ，它是一个非负实数，即

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle^* \geq 0, \quad (1.1.2)$$

上式中的等号仅仅对于“零矢量”才成立。式(1.1.2)常常称为“正定性条件”。从物理上来说，正定性条件为概率性解释提供了保证，因为概率必须用非负的实数表示。由于 $\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}$ 是态矢量的模，所以对于任意非零态矢量 $|\alpha\rangle$ 来说，总可以构造一个“归一化态矢量 $|\tilde{\alpha}\rangle$ ”：

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} |\alpha\rangle, \quad (1.1.3)$$

因此有

$$\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle = 1, \quad (1.1.4)$$

此结果称为归一化条件。在量子力学中，通常采用这种归一化的态矢量来描述微观粒子的状态。这表明对于态矢量，重要的是它们的方向。

对于任意两个态矢量 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 的内积，应区分两种情况： $\langle \beta | \alpha \rangle$ 和 $\langle \alpha | \beta \rangle$ 。它们通常都是复数，且存在如下互为复共轭的关系：

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^*. \quad (1.1.5)$$

显然，式(1.1.2)是上式的特例。如果两个矢量的内积为零，即

$$\langle \beta | \alpha \rangle = 0, \quad (1.1.6)$$

我们就说，这两个态矢量是“正交的”。

1.1.2 力学量算符

量子力学中的物理量，如坐标、动量、角动量、能量、自旋等，都采用作用于态矢量的算符表示。应当指出，在非相对论量子力学中，时间 t 是参数，不是算符；在相对论量子力学中，时间 t 和坐标 α 则都是参数。

算符就是一种运算,或一种操作。算符 A 作用于右矢 $|\alpha\rangle$, 即 $A|\alpha\rangle$ 也是一右矢:

$$|\beta\rangle = A|\alpha\rangle, \quad (1.1.7)$$

通常 $|\beta\rangle$ 与 $|\alpha\rangle$ 不相等。如果对于任意右矢 $|\alpha\rangle$, 上式中的 $|\beta\rangle = |\alpha\rangle$, 则算符 A 便称为“单位算符”; 若 $A|\alpha\rangle = B|\alpha\rangle$, 则算符 A 和 B 相等, 记为 $A=B$; 若 $A|\alpha\rangle = 0$, 则算符 A 称为“零算符”。如果对于算符 A 来说, 下式成立:

$$A(c_1|\alpha_1\rangle + c_2|\alpha_2\rangle) = c_1A|\alpha_1\rangle + c_2A|\alpha_2\rangle, \quad (1.1.8)$$

其中 c_1 和 c_2 是任意复数, 则称 A 为“线性算符”。

一个算符 A 从左边作用于右矢 $|\alpha\rangle$ 通常将得到一个右矢, 而这个新的右矢 ($A|\alpha\rangle$) 的对偶态矢量, 即左矢显然可表示为

$$(A|\alpha\rangle)^+ = (|\alpha\rangle)^+ A^+ = \langle\alpha| A^+, \quad (1.1.9)$$

其中 A^+ 是算符 A 的厄米共轭算符。上述结果表明, 右矢 $A|\alpha\rangle$ 与左矢 $\langle\alpha| A^+$ 是对偶的。若 $A^+ = A$, 则称 A 为厄米算符。对于厄米算符, 显然有

$$(A|\alpha\rangle)^+ = \langle\alpha| A, \quad (A^+ = A). \quad (1.1.10)$$

算符的运算与通常代数量的运算有一个重要区别, 即算符的乘法不满足交换律。即对于任意态矢量 $|\alpha\rangle$,

$$AB|\alpha\rangle \neq BA|\alpha\rangle. \quad (1.1.11)$$

这种算符的不可对易性可用算符方程表示为

$$AB \neq BA, \quad (1.1.12)$$

或

$$[A, B] \equiv AB - BA \neq 0, \quad (1.1.13)$$

其中 $[A, B]$ 称为算符 A 和 B 的“对易子”。应当指出, 算符的乘法虽然一般不满足交换律, 但仍满足结合律, 即

$$A(BC) = (AB)C = ABC. \quad (1.1.14)$$

在上面的讨论中我们已从右矢、左矢和算符通过乘法构造了如下形式的量: $\langle\beta|\alpha\rangle$, $A|\alpha\rangle$, $\langle\alpha|A$, AB 等, 它们分别为数、右矢、左矢和算符。实际上, 还可构造出其它乘积形式的量。例如

$$|\beta\rangle\langle\alpha|, \quad (1.1.15)$$

我们称这是 $|\beta\rangle$ 和 $\langle\alpha|$ 的“外积”。注意到这个外积作用于任一右矢 $|\gamma\rangle$, 有 $|\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle$, 由于 $\langle\alpha|\gamma\rangle$ 是一个(复)数, 所以 $\langle\alpha|\gamma\rangle|\beta\rangle$ 是一个右矢。可见, 式(1.1.15)表示的外积是一个算符, 可表示为

$$A = |\beta\rangle\langle\alpha|. \quad (1.1.16)$$

显然由式(1.1.16), 可得

$$A^+ = |\alpha\rangle\langle\beta|. \quad (1.1.17)$$

外积 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ 和 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ 一般并不相等, 即它们不是同一算符。

最后, 通过乘法还可构造出如下形式的量:

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle. \quad (1.1.18)$$

这个量可以看作左矢 $\langle\beta|$ 与右矢 $A|\alpha\rangle$ 的内积, 或左矢 $\langle\beta|A$ 与右矢 $|\alpha\rangle$ 的内积, 即 $\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\beta|(A|\alpha\rangle) = (\langle\beta|A)|\alpha\rangle$, 因此这个量是一个数。式(1.1.18)所表示的数的复共轭是

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|A^+|\beta\rangle. \quad (1.1.19)$$

如果 A 是厄米算符, 则有 $\langle\beta|A|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|A|\beta\rangle$ 。因此对于厄米算符来说, 有

$$\langle\alpha|A|\alpha\rangle = \langle\alpha|A|\alpha\rangle^*, \quad (1.1.20)$$

即 $\langle\alpha|A|\alpha\rangle$ 为实数, 并称它为算符 A 在状态 $|\alpha\rangle$ 中的平均值。

1.1.3 态矢量的矩阵表示

设厄米算符 A 共有 N 个本征值。这里 N 的值可能是有限的, 也可能是无限的; 可能是分立值, 也可能是连续值。现在将算符 A 的属于本征值 α_i 的本征矢记为 $|\alpha_i\rangle$ 。量子力学可以证明^①, 一个厄米算符的本征矢的全体(记为 $\{|\alpha_i\rangle\}$)构成一个正交归一化的完全集。于是可将 $|\alpha_i\rangle$ 作为“基矢”, 构造一个“(复)正交坐标系”, 它所张成的空间称为希尔伯空间。相应的描写微观粒子状态的态矢量 $|\alpha\rangle$ 可看作该空间中的一个矢量。按照解析几何的方法, 可利用该矢量在这些基矢上的投影(即分量)的全体来特征这个矢量, 即特征该微观粒子系统的状态。

^① 例如可参阅: 曾谨言, 《量子力学》, 科学出版社(1981)。

厄米算符 A 的本征矢集 $\{|a_i\rangle\}$ 作为基矢所张成的空间称为“ A 表象空间”，或简称“ A 表象”。于是，任一态矢量 $|\alpha\rangle$ 在该表象中可表示为

$$|\alpha\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle, \quad (1.1.21)$$

其中 c_i 就是态矢量 $|\alpha\rangle$ 在基矢 $|a_i\rangle$ 上的分量，它的全体构成了态矢量 $|\alpha\rangle$ 在 A 表象中的一个表示。或者说，在 A 表象中一个态矢量在各基矢上的分量的全体完全特征了该态矢量。

A 表象基矢的正交归一性可表示为

$$\langle a_j | a_i \rangle = \delta_{ij}. \quad (1.1.22)$$

若将左矢 $\langle a_j |$ 左乘式(1.1.21)，利用上述正交归一化条件可得

$$c_i = \langle a_i | \alpha \rangle, \quad (1.1.23)$$

这表明，内积 $\langle a_i | \alpha \rangle$ 就是态矢量 $|\alpha\rangle$ 在基矢 $|a_i\rangle$ 方向上的分量。这也正是解析几何学的结果。我们可以将态矢量在 A 表象中的所有分量排成一个列矩阵：

$$\alpha^{(A)} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle a_1 | \alpha \rangle \\ \langle a_2 | \alpha \rangle \\ \vdots \\ \langle a_i | \alpha \rangle \\ \vdots \end{bmatrix}. \quad (1.1.24)$$

所以，态矢量在任一表象中可表示为一个列矩阵，其矩阵元就是态矢量在该表象各基矢上的分量。从物理意义上说，态矢量 $|\alpha\rangle$ 在 A 表象中的分量 $\langle a_i | \alpha \rangle$ 也就是在该态矢量所描述的状态中测量力学量 A 时得到的值为 a_i 的概率幅。

将式(1.1.23)代入式(1.1.21)，有

$$|\alpha\rangle = \sum_i^N |a_i\rangle \langle a_i | \alpha \rangle. \quad (1.1.25)$$

由于上式对任意态矢量成立，所以有

$$\sum_i^N |a_i\rangle \langle a_i| = 1, \quad (1.1.26)$$

这个结论称为 A 表象基矢集 $\{|a_i\rangle\}$ 的“完全性条件”。应该注意，上式求和记号中的因子是算符，等式右边的 1 应理解为单位矩阵。令

$$P_i = |a_i\rangle\langle a_i|. \quad (1.1.27)$$

由于

$$P_i|\alpha\rangle = |a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle = a_i|a_i\rangle,$$

所以，算符 P_i 对右矢 $|\alpha\rangle$ 作用的结果得到该态矢量沿基矢 $|a_i\rangle$ 的分矢量，即投影，所以可称它为“投影算符”。完全性条件式 (1.1.26) 于是也可表示为

$$\sum_i^N P_i = 1. \quad (1.1.28)$$

1.1.4 算符的矩阵表示

所谓算符，就是指某种特定的运算或操作，使一个态变为另一个态。设任一力学量 L 的作用使 $|\alpha\rangle$ 变为 $|\beta\rangle$ ，即

$$|\beta\rangle = L|\alpha\rangle. \quad (1.1.29)$$

上式仅代表抽象的运算，并未涉及到具体表象。现在我们来考察上式在 A 表象中的形式。将左矢 $\langle a_i|$ 左乘上式，并利用完全性条件 (1.1.26)，可得

$$\langle a_i|\beta\rangle = \langle a_i|L|\alpha\rangle = \sum_j^N \langle a_i|L|a_j\rangle\langle a_j|\alpha\rangle, \quad (1.1.30)$$

上式等号左侧的 $\langle a_i|\beta\rangle$ 是态矢量 $|\beta\rangle$ 在 A 表象中的表示，记为 $\beta_i^{(A)}$ ；等号右侧中的 $\langle a_j|\alpha\rangle$ 是态矢量 $|\alpha\rangle$ 在 A 表象中的表示，记为 $\alpha_j^{(A)}$ ； $\langle a_i|L|a_j\rangle$ 显然可理解为算符 L 在 A 表象中的表示，记为 $L_{ij}^{(A)}$ ，于是 (1.1.30) 式可记为

$$\beta_i^{(A)} = \sum_j^N L_{ij}^{(A)}\alpha_j^{(A)}. \quad (1.1.31)$$

上式可记为矩阵形式

$$\beta^{(A)} = L^{(A)}\alpha^{(A)}, \quad (1.1.32)$$

其中

• • •