国家出版基金项目
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

中外物理学精品书系

经典系列·22

王竹溪遗著选集

第二分册

量子力学中一些重要理论

王竹溪 著

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

中外物理学精品书系·经典系列22

王竹溪遗著选集

第二分册 量子力学中一些重要理论

王竹溪（1911—1983），我国著名理论物理学家、教育家。1933年毕业于清华大学，1935年获该校硕士学位。1938年获英国剑桥大学哲学博士学位。曾先后任西南联合大学教授、清华大学教授兼物理学系主任、北京大学物理学系教授、北京大学副校长，中国科学院原子能研究所研究员、金属物理研究室主任等职。1955年当选为中国科学院学部委员（院士）。曾任中国物理学会副理事长、中国计量测试学会副理事长、教育部理科物理学教材编审委员会主任委员、《中国科学》副主编、《物理学报》主编、中国物理学会名词委员会主任等职。

王竹溪在理论物理的各个领域，特别是热力学、统计物理学、数学物理等方面具有很深的造诣。撰写了我国第一批理论物理优秀教材，为建立我国理论物理教学体系奠定了基础，主要著作有《热力学》《统计物理学导论》《简明十位对数表》《新部首大字典》等，以及与郭敦仁合著的《特殊函数概论》。

国家出版基金项目
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

中外物理学精品书系

经典系列·22

王竹溪遗著选集

第二分册

量子力学中一些重要理论

王竹溪 著

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

五、谐振子（狄书137页）

1. 产生标符和湮灭标符

谐振子只有一个自由度，哈氏量是 $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2q^2$.

引进标符 b, b^+：

$$b=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q+\frac{ip}{m\omega}\right),\quad b^+=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q-\frac{ip}{m\omega}\right).$$

反过来 $q=\sqrt{\hbar/2m\omega}\,(b+b^+)$

$p=i\sqrt{\hbar m\omega/2}\,(b^+-b)$

哈氏量是

$$H=-\frac{1}{2m}\cdot\frac{\hbar m\omega}{2}(b^+-b)^2+\frac{m\omega^2}{2}\cdot\frac{\hbar}{2m\omega}(b+b^+)^2$$

$$=\frac{\hbar\omega}{2}(bb^++b^+b).$$

~~关于~~ b, b^+ 的对易关系是

~~它们满足~~ $[b,b^+]=bb^+-b^+b$

$$=\frac{m\omega}{2\hbar}\left[q+\frac{ip}{m\omega},\ q-\frac{ip}{m\omega}\right]$$

$$=-\frac{m\omega}{2\hbar}\cdot\frac{2i}{m\omega}[q,p]=1.$$ 又有 $[b,b]=0$, $[b^+,b^+]=0$

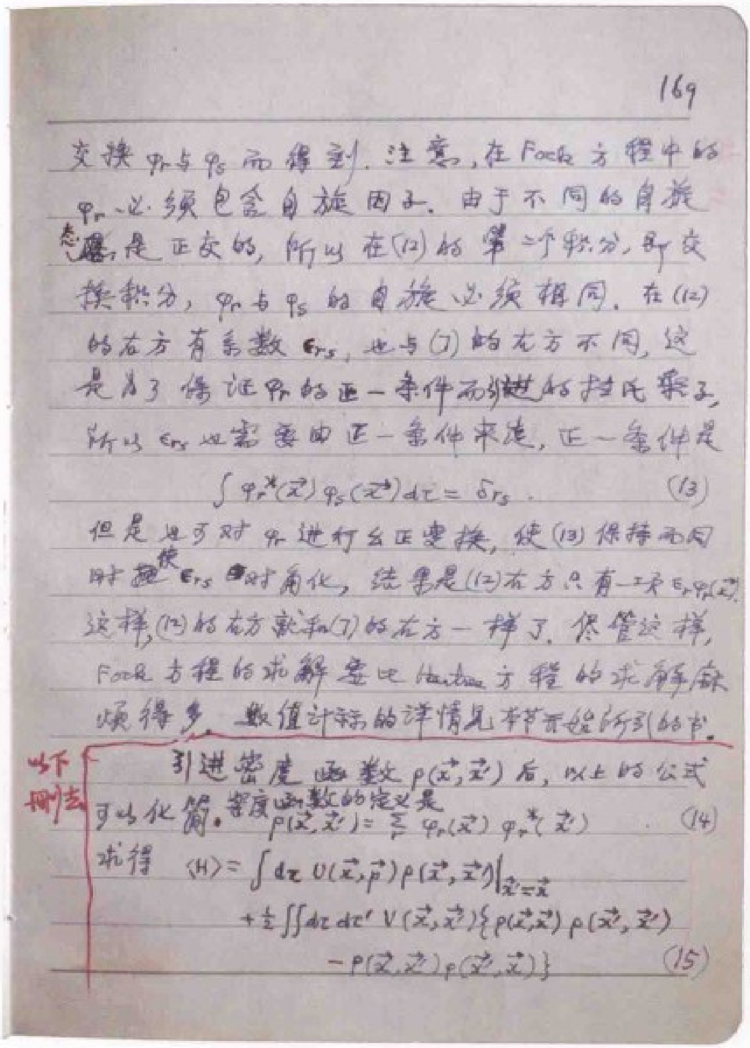
~~于是H化为~~
应用 b 与 b^+ 的对易关系，得

$$H=\hbar\omega\left(b^+b+\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

其中 $n=b^+b$. n 称为粒子数标符.

它是厄密标符.

《量子力学中一些重要理论》原稿38页



交换 φ_r 与 φ_s 而得到. 注意, 在 Fock 方程中的 φ_r 必须包含自旋因子. 由于不同的自旋态是正交的, 所以在(12)的第二个积分, 即交换积分, φ_r 与 φ_s 的自旋必须相同. 在(12)的右方有系数 ε_{rs}, 也与(7)的右方不同, 这是为了保证 φ_r 的正一条件而引进的拉氏乘子, 所以 ε_{rs} 也需要由正一条件来定, 正一条件是

$$\int \varphi_r^*(\vec{x})\varphi_s(\vec{x})\,d\tau=\delta_{rs}. \qquad (13)$$

但是也可对 φ_r 进行幺正变换, 使(13)保持而同时使 ε_{rs} 对角化, 结果是(12)右方只有一项 $\varepsilon_r\varphi_r(\vec{x})$. 这样, (12)的右方就和(7)的右方一样了. 尽管这样, Fock 方程的求解要比 Hartree 方程的求解麻烦得多. 数值计算的详情见本节开始所引的书.

以下删去

引进密度函数 $\rho(\vec{x},\vec{x}')$ 后, 以上的公式可以化简. 密度函数的定义是

$$\rho(\vec{x},\vec{x}')=\sum_r \varphi_r(\vec{x})\,\varphi_r^*(\vec{x}') \qquad (14)$$

求得

$$\langle H\rangle=\int d\tau\, U(\vec{x},\vec{p})\,\rho(\vec{x},\vec{x}')\Big|_{\vec{x}'=\vec{x}} +\frac{1}{2}\iint d\tau\, d\tau'\, V(\vec{x},\vec{x}')\{\rho(\vec{x},\vec{x})\,\rho(\vec{x}',\vec{x}') -\rho(\vec{x},\vec{x}')\,\rho(\vec{x}',\vec{x})\} \qquad (15)$$

《量子力学中一些重要理论》原稿169页

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

内　容　简　介

本书是我国著名理论物理学家王竹溪教授未完成的遗稿，包括量子力学的五个基本原理、表象的变换、运动方程的三种表象、统计算符、谐振子、二次量子化·玻色子、二次量子化·费密子、角动量、近似方法等九章，系统扼要地归纳阐述了量子力学的基本原理和重要理论．全书概念严格准确，理路清晰明白，方法巧妙简洁，推演细致缜密，讨论普遍深入，体现了王竹溪一贯严谨与简洁的风格和品味，以及他具体细致的作风．书中有许多精辟独到的见解，和他自己研究的结果．有一些专题，例如统计算符，三个和多个角动量的耦合，刚体的能级，密集能级的微扰等，都是在一般量子力学书籍中很少进行详细讨论的．特别是给出了角动量耦合 CG 系数和 Racah 系数等的详细推导．本书适合大学物理系高年级学生和研究生，以及对于量子力学有兴趣的广大读者．

目　　录①

① 本书正文取自王竹溪一本题为“量子力学中一些重要理论”的笔记，附录取自其他几本笔记，详见后记. 在原稿目录下一行为标题“量子力学中一些重要理论”，现按出版编辑的风格删去. —— 编者注

一、量子力学的五个基本原理[①]

1. 态叠加原理 (狄书第一章)

态用希耳伯空间矢量表达：符号 $|\,\rangle$, $|a\rangle$, 称刃.

态叠加原理

$$\begin{aligned}|\,\rangle &= c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle + \cdots\\ &= \sum_n c_n|a_n\rangle.\end{aligned}$$

另有一希耳伯伴空间 (或 **共轭** 空间，或对偶空间) 对偶矢量 (或伴矢量，或 **共轭** 矢量) $\langle\,|$, $\langle a|$, 称刁[②]. 相应的态叠加原理是

$$\langle\,| = \sum_n c_n^*\langle a_n|,$$

即所有出现的数值系数都变为共轭复数. 以后引进符号 †：

$$\langle a| = \{|a\rangle\}^\dagger = |a\rangle^\dagger.$$

引进一种内积 $\langle a|b\rangle$, 为一复数，满足条件 (这是共轭的必然结果)：

$$\langle b|a\rangle = \langle a|b\rangle^*,$$

并且

$$\langle a|a\rangle > 0 \quad (若|a\rangle \neq 0).$$

由此可以归一化为

$$\langle a|a\rangle = 1.$$

设有一正交归一基矢组

$$|a_n\rangle, \quad n = 1, 2, \cdots,$$

① 原稿在此章目之上写有书名“量子力学中一些重要理论”, 之下依次注明“1973.2.27. 讲, 1977.6.18. 修改” 和 “参考书：狄拉克：量子力学原理 (1965 年中译本) ”. 这是当时王竹溪的一份讲稿，详见本书后记. 参考书是 P.A.M.Dirac 原著 *The Principles of Quantum Mechanics* 牛津大学出版社 1958 年第 4 版的中译本，陈咸亨译，喀兴林校，科学出版社 1965 年出版，在这份讲稿中简称 “狄书”. 这个译本把 Dirac 译为 “狄拉克”, 而当时主流的译名为 “狄喇克”, 所以在这份讲稿中有时仍按习惯用后者，见本书 104 页. —— 编者注

② 为了表述他的形式理论，狄拉克把完整尖括号 $\langle\ \rangle$ 的英文 bracket 拆成左右两半，新造两个词 bra 和 ket, 用以命名他的符号 $\langle\,|$ 和 $|\,\rangle$. 这两个新词的中文译名，现在流行的是左矢和右矢，刁和刃是当时居主流的译名. —— 编者注

满足

$$\langle a_n|a_m\rangle = \delta_{nm}.$$

任意一个态 $|c\rangle$ 可表达为

$$|c\rangle = \sum_n c_n|a_n\rangle.$$

左乘 $\langle a_m|$, 得

$$\langle a_m|c\rangle = c_m.$$

c_m 称为 $|c\rangle$ 在基矢 $|a_m\rangle$ 中的表象, c_m 是一个复数. 很显然有 (用 $\langle a|b\rangle$ 的性质)

$$c_m^* = \langle c|a_m\rangle.$$

还可以考虑一种连续谱的基矢 $|x\rangle$, 其中 x 在 $(-\infty,\infty)$ 中连续变化. 正交归一的条件改为

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x').$$

δ 函数的性质 (狄书 58 页):

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\mathrm{d}x = 1, \quad \delta(x) = 0 \quad (x \neq 0).$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)\mathrm{d}x = f(a).$$

δ 函数可以认为是 $\delta(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\theta(x)$, 其中阶梯函数

$$\theta(x) = 0 \quad (x<0), \quad \theta(x) = 1 \quad (x>0).$$

δ 函数也可以认为是

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}x\zeta}\mathrm{d}\zeta.$$

δ 函数还有下面一些性质:

$$\delta(-x) = \delta(x), \qquad x\delta(x) = 0,$$

$$\delta(ax) = a^{-1}\delta(x) \quad (a>0),$$

$$\delta(x^2-a^2) = (2a)^{-1}\{\delta(x-a)+\delta(x+a)\} \quad (a>0).$$

用连续谱表达态 $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\psi(x)|x\rangle.$$

左乘 $\langle x|$:

$$\langle x|\psi\rangle = \langle x|\int \mathrm{d}x'\psi(x')|x'\rangle = \int \mathrm{d}x'\psi(x')\langle x|x'\rangle = \int \mathrm{d}x'\psi(x')\delta(x-x') = \psi(x).$$

ψ 在 x 的表象 $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ 称为波函数.

$|\psi\rangle$ 也可用 a_n 基展开为

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|a_n\rangle = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle.$$

左乘 $\langle x|$, 得

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \sum_n c_n\langle x|a_n\rangle = \sum_n\langle x|a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle.$$

若令 $\varphi_n(x) = \langle x|a_n\rangle$, 这是 $|a_n\rangle$ 的波函数，则得

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_n c_n\varphi_n(x)\\ &= \sum_n\langle a_n|\psi\rangle\varphi_n(x).\end{aligned}$$

公式 $\langle x|\psi\rangle = \sum_n\langle x|a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle$ 有一简单结果:

$$1 = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|.$$

这是基矢 $|a_n\rangle$ 的完备条件. 这时称 $|a_n\rangle$ 构成一个全集.

对于连续谱也有类似的条件:

$$1 = \int \mathrm{d}x|x\rangle\langle x|.$$

2. 物理量用算符表达 (狄书第二章)

前面所讲的态还是一种抽象的概念, 还没有与物理实际的观测量联系起来. 一个物理量必然有一种效果，能使某一个态 a 改变到另一个态 A. 设物理量为 F, 这种作用可以写为

$$F|a\rangle = |A\rangle.$$

这种作用在数学上叫做算符. 在数学理论的发展中我们发现，可以假设算符是线性的，即 F 满足下面的条件:

$$F\{|a\rangle + |b\rangle\} = F|a\rangle + F|b\rangle,$$

$$F\{c|a\rangle\} = cF|a\rangle \quad (c为复数).$$

从前节所讲的共轭态 $\langle a|$, 必然有共轭算符 $F^\dagger$: 由 F 和 $F^\dagger$ 的关系式得

$$\langle A| = \langle a|F^\dagger.$$

$$\langle b|F|a\rangle = \langle b|A\rangle, \qquad \langle a|F^\dagger|b\rangle = \langle A|b\rangle.$$

此为试读，需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com

由于 $\langle A|b\rangle = \langle b|A\rangle^*$ (见 1 页), 故有

$$\langle a|F^\dagger|b\rangle = \langle b|F|a\rangle^*.$$

这是算符 F 与它的共轭 $F^\dagger$ 之间的普遍关系，其中 a 和 b 是任意两个态.

可证

$$(F^\dagger)^\dagger = F. \quad (\text{狄书 25 页})$$

证：在前面的公式中用 $F^\dagger$ 代替 F, 得

$$\langle a|(F^\dagger)^\dagger|b\rangle = \langle b|F^\dagger|a\rangle^* = \langle a|F|b\rangle.$$

这对任意 a, b 态都成立，故得 $(F^\dagger)^\dagger = F$.

又可证：

$$(FG)^\dagger = G^\dagger F^\dagger. \quad (\text{狄书 25 页})$$

证：

$$\langle a|(FG)^\dagger = (FG|a\rangle)^\dagger = (F\{G|a\rangle\})^\dagger = \{G|a\rangle\}^\dagger F^\dagger = \{\langle a|G^\dagger\}F^\dagger = \langle a|G^\dagger F^\dagger.$$

由于 $\langle a|$ 是任意的，故得 $(FG)^\dagger = G^\dagger F^\dagger$.

本征值：若

$$F|a'\rangle = F'|a'\rangle,$$

F' 为一复数，则 F' 称为 F 的本征值， $|a'\rangle$ 为相应的本征态. 取复共轭，得

$$\langle a'|F^\dagger = \langle a'|F'^*.$$

一些特殊算符:

(1°) 厄密算符 (又叫自伴算符): $F^\dagger = F$.

厄密算符的本征值是实数. (狄书 29 页)

证：由 $F|a'\rangle = F'|a'\rangle$ 得

$$\langle a'|F|a'\rangle = F'\langle a'|a'\rangle.$$

又由 $\langle a'|F^\dagger = \langle a'|F'^*$ 得

$$\langle a'|F^\dagger|a'\rangle = F'^*\langle a'|a'\rangle.$$

对于厄密算符说，这两个方程左方相等，故右方也相等，即

$$F'\langle a'|a'\rangle = F'^*\langle a'|a'\rangle,$$

即

$$F' = F'^*,$$

即 F' 是实数.

厄密算符的两个不同本征值的本征态相互正交. (狄书 30 页)

证：有

$$F|a'\rangle = F'|a'\rangle, \qquad F|a''\rangle = F''|a''\rangle.$$

由于是厄密算符，可把第一个方程改为

$$\langle a'|F = F'\langle a'|.$$

右乘 $|a''\rangle$, 得

$$\langle a'|F|a''\rangle = F'\langle a'|a''\rangle.$$

用 $\langle a'|$ 左乘第二个方程，得

$$\langle a'|F|a''\rangle = F''\langle a'|a''\rangle.$$

两个方程的左方相等，右方也必等，故得

$$F'\langle a'|a''\rangle = F''\langle a'|a''\rangle,$$

即

$$(F' - F'')\langle a'|a''\rangle = 0.$$

今 $F' \neq F''$, 故必有

$$\langle a'|a''\rangle = 0,$$

即 a' 态与 a'' 态正交.

(2°) 倒数算符 (或逆算符) (狄书 43 页)

定义

$$F^{-1}F = FF^{-1} = 1. \quad (\text{设 } F \text{ 的本征值不为 } 0)$$

设 F 的本征值为 F', 相应的本征态为 $|F'\rangle$. 给予 F^{-1} 的定义为

$$F^{-1}|F'\rangle = F'^{-1}|F'\rangle.$$

左乘 F, 得

$$FF^{-1}|F'\rangle = F'^{-1}F|F'\rangle = F'^{-1}F'|F'\rangle = |F'\rangle.$$

这对一切本征态 F' 都成立，所以必有 $FF^{-1} = 1$. 同样可得 $F^{-1}F = 1$.

可证

$$(FG)^{-1} = G^{-1}F^{-1}.$$

证：由

$$(FG)^{-1}FG = 1,$$

右乘 G^{-1}, 得

$$(FG)^{-1}F = G^{-1}.$$

再右乘 F^{-1}, 得 $(FG)^{-1} = G^{-1}F^{-1}$.

又可证明

$$(F^\dagger)^{-1} = (F^{-1})^\dagger.$$

证：

$$(F^\dagger)^{-1} = (F^\dagger)^{-1}(F^{-1}F)^\dagger = (F^\dagger)^{-1}F^\dagger(F^{-1})^\dagger = (F^{-1})^\dagger.$$

(3°) 幺正算符： $F^\dagger = F^{-1}$.

所以幺正算符满足：

$$FF^\dagger = F^\dagger F = 1.$$

这是幺正算符的定义 (见后面 16 页).

(4°) 投影算符： $P_a = |a\rangle\langle a|$. (狄书 37 页)

有

$$P_a^\dagger = P_a.$$

这很容易看出，因为

$$P_a^\dagger = \{|a\rangle\langle a|\}^\dagger = (\langle a|)^\dagger(|a\rangle)^\dagger = |a\rangle\langle a| = P_a. \quad \text{(狄书 26 页)}$$

又有

$$P_a^2 = P_a.$$

证：

$$P_a^2 = |a\rangle\langle a|a\rangle\langle a| = |a\rangle\langle a| = P_a \quad (\text{假设 } |a\rangle \text{ 是归一化的，即 } \langle a|a\rangle = 1).$$

作用在任一态 ψ 有

$$P_a|\psi\rangle = |a\rangle\langle a|\psi\rangle,$$

这成为态 $|a\rangle$ 而乘以系数 $\langle a|\psi\rangle$, 这个系数相当于方向余弦，这个作用相当于把态 ψ 投影到态 a 上，所以 P_a 称为投影算符.

更普遍些有算符

$$Q = |a\rangle\langle b|.$$

这个算符从左作用到态 $|\psi\rangle$ 是投影到 $|a\rangle$ 上，但从右作用到态 $\langle\psi|$ 则投影到 $\langle b|$ 上，与 $\langle a|$ 不同. 这个 Q 不是一般的投影算符. (狄书 23 页) Q 不是厄密的，

$$Q^\dagger \doteq |b\rangle\langle a| \neq Q. \quad \text{(狄书 26 页)}$$

完备性条件是

$$\sum_n P_{a_n} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = 1.$$

算符的矩阵表达式：

取基矢 $|a_n\rangle$, 公式

$$F|a_n\rangle = \sum_m |a_m\rangle\langle a_m|F|a_n\rangle,$$

其中系数 $\langle a_m|F|a_n\rangle$ 称为 F 的矩阵表达式，常简写为 $\langle m|F|n\rangle$ 或 F_{mn}. 这是 F 的表象. 上面的等式可以认为是用 $1 = \sum_m |a_m\rangle\langle a_m|$ 左乘 $F|a_n\rangle$ 的结果. 在计算中常常可以插入 $\sum_m |a_m\rangle\langle a_m|$ 到任何两个相乘的量之间.

在连续谱的情形下则利用

$$1=\int \mathrm{d}x|x\rangle\langle x|.$$

于是有

$$F|x\rangle=\int \mathrm{d}x'|x'\rangle\langle x'|F|x\rangle,$$

这里矩阵元是 $\langle x'|F|x\rangle$.

共同本征态 (狄书 48 页)

设有两个厄密算符 F 和 G. 设 F 的本征值为 F' (一组数 $F', F'', F''', \cdots$ 的简写), 把相应的本征态写为 $|F'\rangle$ (F' 是实数). 设 G 的本征值为 G', 把相应的本征态写为 $|G'\rangle$.

现在假设 F 和 G 有一个共同的本征态 $|a\rangle$, 其本征值分别为 F' 和 G'. 则有

$$F|a\rangle=F'|a\rangle, \qquad G|a\rangle=G'|a\rangle.$$

由此可得

$$(FG-GF)|a\rangle=FG'|a\rangle-GF'|a\rangle=F'G'|a\rangle-F'G'|a\rangle=0.$$

假如 F 与 G 互相对易, 即 $FG-GF=0$, 则共同本征态总是可能的. 假如 F 和 G 不互相对易, 则共同本征态一般不存在 (也许有某种特殊的共同本征态可以存在).

在 F 和 G 互相对易的情形下, 可把共同本征态写成 $|F'G'\rangle$. 每一个 $|F'\rangle$ 构成全集:

$$1=\sum_{F'}|F'\rangle\langle F'|,$$

同样有

$$1=\sum_{G'}|G'\rangle\langle G'|.$$

两者相乘:

$$1=\sum_{F'G'}|F'G'\rangle\langle G'F'|,$$

所以共同本征态也构成全集. 注意这里 $|F'G'\rangle$ 是被理解为 $|F'\rangle|G'\rangle$ 的. 同时 $|F'G'\rangle$ 的共轭矢量是 $\langle G'F'|$. [这与狄书符号不同, 狄书写成 $\langle F'G'|$.] (狄书 83 页)

反过来, 若共同本征态 $|F'G'\rangle$ 构成全集时, F 与 G 一定互相对易, 构成全集的意思是任意态都可表达为 $|F'G'\rangle$ 的线性组合. 这可证明如下 (狄书 49 页):

$$(FG-GF)|F'G'\rangle=FG'|F'G'\rangle-GF'|F'G'\rangle$$

$$= G'F'|F'G'\rangle - F'G'|F'G'\rangle = 0.$$

由于 $|F'G'\rangle$ 构成全集，任意态 a 都可用它展开，于是得

$$(FG - GF)|a\rangle = 0,$$

$|a\rangle$ 是任意的．所以必有

$$FG - GF = 0,$$

故 F 与 G 互相对易.

从上面所讨论的物理量的性质，可以看出，它与经典物理量的最大的区别，在经典的物理量是通常的实数，是可以对易的，而量子力学中的物理量是希耳伯空间的线性算符，一般是不可对易的．一个经典的物理量是坐标 q 和动量 p 的函数，在量子力学中可考虑更普遍的量，它可以不一定是 p 和 q 的函数，例如以后我们将要遇到的自旋就是这样一种量.

3. 物 理 诠 释

前节所讲的还是物理量的一些抽象的数学性质，还没有到具体的实验结果．在量子力学中一个基本假设是：测量一实的力学变量的任何结果，都是本征值之一．(狄书 34 页)

测量总是使系统突变到所测量的力学量的本征态，这个本征态所属的本征值等于测量的结果．(这是因为测后接着再测，一定得同样的结果.) (狄书 34 页)

这个突变称为“投影假设”，即是原来的态突变到一个本征态，像是投影到这个本征态一样．这也有时称为波函数或波包的缩编 (或收缩) (英文为 reduction).

基本的物理诠释假设是：(狄书 45 页)

对于处于态 a 的系统，观测物理量 F 多次的平均值是

$$\langle a|F|a\rangle.$$

这适用于态 $|a\rangle$ 是归一化了的，即

$$\langle a|a\rangle = 1.$$

对连续谱说，$|a\rangle$ 一般不是归一化的．对于不是归一化的 $|a\rangle$ 说，观测物理量 F 多次的平均值与 $\langle a|F|a\rangle$ 成比例.

统计表达式：

设 F 的本征值为 F_n，其相应的本征态为 $|a_n\rangle$．设把 $|a\rangle$ 用 $|a_n\rangle$ 作为基矢展

开为

$$|a\rangle=\sum_n|a_n\rangle\langle a_n|a\rangle=\sum_n c_n|a_n\rangle,$$

其中

$$c_n=\langle a_n|a\rangle$$

为展开系数.

F 的平均值 (也叫期待值) 为

$$\begin{aligned}\langle a|F|a\rangle&=\sum_{nm}\langle a|a_n\rangle\langle a_n|F|a_m\rangle\langle a_m|a\rangle=\sum_{nm}\langle a|a_n\rangle F_m\langle a_n|a_m\rangle\langle a_m|a\rangle\\&=\sum_{nm}\langle a|a_n\rangle F_m\delta_{nm}\langle a_m|a\rangle=\sum_n\langle a|a_n\rangle F_n\langle a_n|a\rangle\\&=\sum_n c_n^*F_nc_n=\sum_n|c_n|^2F_n.\end{aligned}$$

这个结果说明 F_n 在 F 的平均值中出现的几率是

$$|c_n|^2=|\langle a_n|a\rangle|^2.$$

因此 $|c_n|^2=|\langle a_n|a\rangle|^2$ 是观测到 F_n 的几率.

假如 $|a_n\rangle$ 不限制是 F 的本征态，而是任意基态，则平均值公式可以化为

$$\begin{aligned}\langle a|F|a\rangle&=\sum_n\langle a|F|a_n\rangle\langle a_n|a\rangle=\sum_n\langle a_n|a\rangle\langle a|F|a_n\rangle\\&=\sum_n\langle a_n|WF|a_n\rangle=\mathrm{tr}(WF),\end{aligned}$$

其中

$$W=|a\rangle\langle a|$$

名为 **统计算符**. 这里 $W=P_a$ 是 a 态的投影算符，这是 W 的一种特殊情形，W 还有更广泛的意义. tr 是迹的符号，迹指矩阵元的对角和，即

$$\mathrm{tr}(A)=\sum_n\langle a_n|A|a_n\rangle.$$

统计算符 W 有下面几个特点：

(1°) tr(W)=1.

证：

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(W)&=\sum_n\langle a_n|W|a_n\rangle=\sum_n\langle a_n|a\rangle\langle a|a_n\rangle\\&=\sum_n\langle a|a_n\rangle\langle a_n|a\rangle=\langle a|a\rangle=1.\end{aligned}$$

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com