第六章　无限维 Hilbert 空间

彼此互补的基向量

在 $\mathbb{C}^n$ 空间中, 两个观测量对应的厄密矩阵分别是 A 和 B, 本征向量分别是 $|\alpha_i\rangle$ 和 $|\beta_j\rangle$, 如果对于任意的 i 和 j, 总有 $\left|\langle\alpha_i|\beta_j\rangle\right| = \frac{1}{\sqrt{n}}$, 那么这两个观测量是互补观测量, 两组基向量 $\{|\alpha_i\rangle\}$ 和 $\{|\beta_j\rangle\}$ 是互补的基向量. 例如 $\mathbb{C}^2$ 空间中的 σ_x, σ_y 和 σ_z 是两两彼此互补的观测量.

一个关于互补基向量的基本定理

$\mathcal{B}_1 = \left\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \cdots, |\varphi_n\rangle\right\}$ 是 $\mathbb{C}^n$ 的基. 酉变换 U 作用于基向量 $|\varphi_j\rangle$, 使其以如下方式循环平移,

$$U|\varphi_j\rangle = \beta_j|\varphi_{j+1}\rangle, \quad |\beta_j| = 1, \quad |\varphi_{n+1}\rangle = |\varphi_1\rangle$$

酉变换 U 的正交归一的本征向量的集合记作

$$\mathcal{B}_2 = \left\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots, |\psi_n\rangle\right\}$$

那么, $\mathcal{B}_1$ 和 $\mathcal{B}_2$ 是互补基向量.

设 U 的本征值为 u_k, 即 $U|\psi_k\rangle = u_k|\psi_k\rangle$, 当然, $|u_k| = 1$. 对于每一个 $k = 1, 2, \cdots, n$, 有

$$\begin{aligned}
|\langle\psi_k|\varphi_1\rangle| &= \left|u_k^*\langle\psi_k|U|\varphi_1\rangle\right| \\
&= |\beta_1\langle\psi_k|\varphi_2\rangle| \\
&= |\langle\psi_k|\varphi_2\rangle|
\end{aligned}$$

于是有

$$|\langle\psi_k|\varphi_1\rangle| = |\langle\psi_k|\varphi_2\rangle| = \cdots = |\langle\psi_k|\varphi_n\rangle|$$

再考虑 $\sum_j \left|\langle\psi_k|\varphi_j\rangle\right|^2$, 一方面,

$$\sum_j \left|\langle\psi_k|\varphi_j\rangle\right|^2 = \sum_j \langle\psi_k|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\psi_k\rangle = 1$$

另一方面,

$$\sum_j \left|\langle\psi_k|\varphi_j\rangle\right|^2 = n|\langle\psi_k|\varphi_m\rangle|^2, \quad m = 1, 2, \cdots, n$$

所以, $|\langle\psi_k|\varphi_m\rangle| = \frac{1}{\sqrt{n}}$, 说明 $\mathcal{B}_1$ 和 $\mathcal{B}_2$ 是互补基向量.

$\mathbb{C}^n$ 上的循环平移变换

构造一个酉变换 U 以及一组 n 个单位向量 $|\alpha_k\rangle$, $k=1,\cdots,n$, 它们满足如下条件, 构造一个酉变换 U 以及一组 n 个单位向量 $|\alpha_k\rangle$, $k=1,\cdots,n$, 它们满足如下条件,

- $U^n = \mathbb{1}$,
- $U|\alpha_k\rangle = |\alpha_{k+1}\rangle$, $k=1,\cdots,n-1$,
  $U|\alpha_n\rangle = |\alpha_1\rangle$.
  即, U 的作用效果是传递的, 循环的.

实际上, 我们将看到, 这样一组 $|\alpha_k\rangle$ 是正交归一的, 可以用作 $\mathbb{C}^n$ 的基.

首先看看酉矩阵 U 的一些性质. U 的本征值记作 u_k, 相应的本征向量记作 $|\psi_k\rangle$, 即 $U|\psi_k\rangle = u_k|\psi_k\rangle$. 酉矩阵的本征值为单位复数, 又根据 $U^n = \mathbb{1}$ 可知,

$$u_k = e^{i2\pi\frac{k}{n}}, \quad k=1,\cdots,n$$

显然, $u_k^n = 1$.

证明一个要用到的等式:

$$|\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell} \tag{1}$$

将 $\mathbb{C}^n$ 的基向量选择为 U 的本征向量, 则 U 具有对角形式, 即

$$U = \sum_{j=1}^{n} u_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

U^ℓ 仍然是对角的

$$U^\ell = \sum_{j=1}^{n} u_j^\ell |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

可以把 $\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}$ 表示为

$$\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell} = \sum_{j=1}^{n} c_j |u_j\rangle\langle u_j|$$

当然可以把 c_j 写得更具体一些, 但这并不必要. 还需要一个能够体现 $\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}$ 的方程, 注意到 $U^n = \mathbb{1}$, 有下面的过程,

$$\left(\frac{U}{u_k}\right)^n - \mathbb{1} = 0$$

$$\left(\frac{U}{u_k} - \mathbb{1}\right)\sum_{\ell=0}^{n-1}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell} = 0$$

$$(U - u_k\mathbb{1})\sum_{\ell=0}^{n-1}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell} = 0$$

可以改作从 $\ell=1$ 到 $\ell=n$ 求和,

$$(U - u_k)\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell} = 0$$

这里省去了与 u_k 相乘的单位矩阵.

将 $(U-u_k)\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}=0$ 改写为

$$\left(\sum_{m=1}^{n}u_m\left|\psi_m\right\rangle\left\langle\psi_m\right|-u_k\right)\sum_{j=1}^{n}c_j\left|u_j\right\rangle\left\langle u_j\right|=0$$

由正交归一性得到

$$\sum_{j=1}^{n}u_jc_j\left|\psi_j\right\rangle\left\langle\psi_j\right|-u_k\sum_{j=1}^{n}c_j\left|\psi_j\right\rangle\left\langle\psi_j\right|=0$$

这也就是

$$\sum_{j=1}^{n}(u_jc_j-u_kc_j)\left|\psi_j\right\rangle\left\langle\psi_j\right|=0$$

这要求每一项的系数 $(u_jc_j-u_kc_j)$ 均为零, 所以有

$$(u_j-u_k)c_j=0 \implies \begin{cases} \text{当 } j\neq k \text{ 时}, c_j=0 \\ \text{当 } j=k \text{ 时}, c_j\neq 0 \end{cases}$$

如果当 $j=k$ 时, $c_j=0$, 那么 $\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}=0$, 而且对于所有的 $k=1,\cdots,n$ 都成立, 这将导致 $U=0$. 于是我们得到

$$\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}=c_k\left|\psi_k\right\rangle\left\langle\psi_k\right|$$

由 $\big(\left|\psi_k\right\rangle\left\langle\psi_k\right|\big)\left|\psi_k\right\rangle=\left|\psi_k\right\rangle$ 可以确定 $c_k=n$. 综上所述, 有 (1) 式.

下一步, 构造 $\left|\alpha_m\right\rangle$, $m=1,\cdots,n$. 用 $\left|\psi_k\right\rangle$ 展开 $\left|\alpha_m\right\rangle$,

$$\left|\alpha_m\right\rangle=\sum_{k=1}^{n}\left\langle\psi_k|\alpha_m\right\rangle\left|\psi_k\right\rangle$$

对于展开系数, 作如下设定.

- 对于 $\left|\alpha_n\right\rangle$, 令

$$\left\langle\psi_k|\alpha_n\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}},\quad k=1,\cdots,n \tag{2}$$

- 对于 $\left|\alpha_m\right\rangle$, $m=1,\cdots,n-1$, 令

$$\left\langle\psi_k|\alpha_m\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}}e^{i2\pi\frac{km}{n}},\quad k=1,\cdots,n \tag{3}$$

如果在 (3) 中令 $m=n$, 则是 (2) 式的结果.

重写各个 $\left|\alpha_k\right\rangle$:

$$\left|\alpha_n\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n}\left|\psi_k\right\rangle \tag{4}$$

$$\left|\alpha_m\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n}e^{i2\pi\frac{km}{n}}\left|\psi_k\right\rangle,\quad m=1,\cdots,n-1 \tag{5}$$

实际上, 这已经表明 $\left|\alpha_k\right\rangle$ 是归一的并且彼此正交的. 而且, 容易验证 $U\left|\alpha_k\right\rangle=\left|\alpha_{k+1}\right\rangle$.

离散 Fourier 变换

下面, 我们要将 $|\alpha_k\rangle$ 用作另一个酉变换 V 的本征向量.

设酉变换 V 有如下性质,

$$V^n = \mathbb{1}$$

$$\langle\psi_k| V = \langle\psi_{k+1}|$$

$$\langle\psi_k| V^n = \langle\psi_{k+n}| = \langle\psi_k|$$

将 V 的本征值记作 $v_\ell = e^{i2\pi\frac{\ell}{n}}$, 相应的本征向量记作 $|\varphi_\ell\rangle$, 将看到 $|\varphi_\ell\rangle = |\alpha_\ell\rangle$.

与 (1) 类似, 有

$$|\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell| = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{V}{v_\ell}\right)^k$$

考虑 $\langle\varphi_k|$ 和 $\langle\psi_k|$ 之间的关系,

$$\langle\psi_k| = \sum_{\ell=1}^{n}\langle\psi_k|\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell|$$

计算其中的一项 $\langle\psi_n|\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell|$,

$$\begin{aligned}
\langle\psi_n|\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell| =& \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\langle\psi_n|\left(\frac{V}{v_\ell}\right)^k \\
=& \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\langle\psi_{n+k}|\, v_\ell^{-k} \\
=& \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}}\langle\psi_k|
\end{aligned} \tag{6}$$

用 $|\psi_n\rangle$ 右乘上式, 给出

$$|\langle\psi_n|\varphi_\ell\rangle|^2 = \frac{1}{n}$$

对所有的 ℓ, 选择内积 $\langle\psi_n|\varphi_\ell\rangle$ 为正实数, 有

$$\langle\psi_n|\varphi_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}, \quad \ell = 1, \cdots, n \tag{7}$$

将 (7) 代入 (6), 有

$$\frac{1}{\sqrt{n}}\langle\varphi_\ell| = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}}\langle\psi_k|$$

也就是

$$\boxed{|\varphi_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n} e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}}|\psi_k\rangle} \tag{8}$$

与前面的 $|\alpha_k\rangle$ 的形式 (4) 和 (5) 比较,

$$|\varphi_\ell\rangle = |\alpha_\ell\rangle, \quad \ell = 1, \cdots, n$$

而且 $|\psi_k\rangle$ 和 $|\varphi_\ell\rangle$ 之间的内积也就是由 (3) 式给出的结果,

$$\boxed{\langle\psi_k|\varphi_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}}} \tag{9}$$

稍作小结

- 在 $\mathscr{H} = \mathbb{C}^n$ 空间中构造了两组基向量, $\{|\psi_k\rangle\}$ 和 $\{|\varphi_\ell\rangle\}$, 满足
$$|\langle\psi_k|\varphi_\ell\rangle| = \frac{1}{\sqrt{n}}$$
$\{|\psi_k\rangle\}$ 和 $\{|\varphi_\ell\rangle\}$ 被称为两组彼此互补的基向量.
- 酉矩阵 U 和 V 的本征向量分别是 $|\psi_k\rangle$ 和 $|\varphi_\ell\rangle$, 相应的本征值分别是 $e^{i2\pi\frac{k}{n}}$ 和 $e^{i2\pi\frac{\ell}{n}}$.
- 酉矩阵 U 使 $|\varphi_\ell\rangle$ 循环平移; 酉矩阵 V 使 $\langle\psi_k|$ 循环平移.

对于 $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$, 现在有两种展开方式,

$$|\psi\rangle = \sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|\psi\rangle = \sum_\ell |\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell|\psi\rangle$$

实际上就是表象的变换.

$$\boxed{\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_k\Big[\sum_\ell \langle\psi_k|\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell|\psi\rangle\Big]|\psi_k\rangle \\ \langle\psi_k|\psi\rangle &= \sum_\ell\langle\psi_k|\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell|\psi\rangle = \sum_{\ell=1}^{n}\frac{1}{\sqrt{n}}e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}}\langle\varphi_\ell|\psi\rangle\end{aligned}}$$

量子态在这两个表象之间的联系是**离散 Fourier 变换**.

与连续 Fourier 变换的比较 (令 $\hbar = 1$):

Fourier 变换

连续情形	离散情形
$\langle x\|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ixp}$	$\langle\psi_k\|\varphi_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}}$

可以有这样的类比

$$\sqrt{\frac{2\pi}{n}}k \sim x, \quad \sqrt{\frac{2\pi}{n}}\ell \sim p \tag{10}$$

酉矩阵 U 和 V 之间的联系

接着考虑酉变换 U 和 V 的一些性质.

$$U = \sum_k u_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k|, \quad u_k = e^{i2\pi\frac{k}{n}}$$

$$U^\dagger = \sum_k u_k^* \left|\psi_k\right\rangle \left\langle\psi_k\right|$$

$$U^\dagger \left|\psi_k\right\rangle = u_k^* \left|\psi_k\right\rangle, \quad \left\langle\psi_k\right| U = \left\langle\psi_k\right| u_k$$

$$\left\langle\psi_k\right| VU = \left\langle\psi_{k+1}\right| U = e^{i2\pi\frac{k+1}{n}} \left\langle\psi_{k+1}\right|$$

类似地, 有

$$\left\langle\psi_k\right| UV = e^{i2\pi\frac{k}{n}} \left\langle\psi_{k+1}\right|$$

所以

$$VU = e^{i2\pi\frac{1}{n}} UV$$

继续推广, 可得

$$V^\ell U^k = e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}} U^k V^\ell \tag{11}$$

由 U 和 V 构成的 $U^k V^\ell$ 可以作为 $\mathbb{C}^n$ 上的矩阵的基

选择 $\mathbb{C}^n$ 的基向量为 $\left|\psi_k\right\rangle$, $k = 1, \cdots, n$. 任意的 $\mathbb{C}^n$ 上的 $n \times n$ 的矩阵 X 可以写为

$$X = \sum_{jk} x_{jk} \left|\psi_j\right\rangle \left\langle\psi_k\right|$$

先考虑对角项. 已有结论 (1),

$$\left|\psi_k\right\rangle \left\langle\psi_k\right| = \frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^\ell = \frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n} e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}} U^\ell$$

对于非对角项, 有

$$\left|\psi_k\right\rangle \left\langle\psi_m\right| = \left|\psi_k\right\rangle \left\langle\psi_k\right| V^{m-k} = \frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n} e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}} U^\ell V^{m-k}$$

于是上述结论成立.

考虑 $n \to \infty$

设 n 是一个很大的素数. 令

$$\epsilon^2 = \frac{2\pi}{n}$$

当 n 很大的时候, ϵ 很小.

U 的本征值 u_k

$$u_k = e^{i2\pi\frac{k}{n}} = e^{i\epsilon^2 k}, \quad k = 1, 2, \cdots, n$$

本征值 u_k 是单位复数, 均匀分布在单位圆上. 当 n 很大时, u_k 分布得非常密集.

设 U 的生成元是 Q, 它是厄密的, $Q = Q^\dagger$.

$$U = e^{i\epsilon Q}$$

考虑 U 的本征方程 $U\left|\psi_k\right\rangle = e^{i\epsilon^2 k}\left|\psi_k\right\rangle$, 并注意到 ϵ 很小,

$$(\mathbb{1} + i\epsilon Q)\left|\psi_k\right\rangle = (1 + i\epsilon^2 k)\left|\psi_k\right\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$Q\,|\psi_k\rangle = k\epsilon\,|\psi_k\rangle$$

表明 $|\psi_k\rangle$ 是 Q 的本征向量, 本征值是 $k\epsilon = k\sqrt{\frac{2\pi}{n}}$.

再设 v 的生成元是 P,

$$V = e^{i\epsilon P}, \quad P = P^\dagger$$

类似地有

$$V\,|\varphi_\ell\rangle = e^{i2\pi\frac{\ell}{n}}\,|\varphi_k\rangle = e^{i\epsilon^2\ell}\,|\varphi_\ell\rangle$$

$$P\,|\varphi_\ell\rangle = \ell\epsilon\,|\varphi_\ell\rangle$$

即 $|\varphi_\ell\rangle$ 是 P 的本征向量, 本征值是 $\ell\epsilon = \sqrt{\frac{2\pi}{n}}\ell$.

将 Q 和 P 的本征值与类比关系 (10) 式对照, 可以看出, Q 和 P 将被分别解释为位置算子和动量算子.

可以将 Q 和 P 的本征值画在半径为 $\frac{1}{\epsilon}$ 的圆周上. 以 Q 的本征值为例说明这件事. 首先考虑 Q 的本征值的分布范围. 当 k 的值从 1 取到 n 时, Q 的本征值从 $\epsilon = \sqrt{\frac{2\pi}{n}}$ 增大到 $n\epsilon = \sqrt{2n\pi}$. 显然, 当 n 增大时, Q 的本征值分布的范围也变得越来越大. 不过, 还应该注意到酉变换 U 的特征. 局部看来, 它是平移变换, U 将 $|\varphi_\ell\rangle$ "向前平移" 到 $|\varphi_{\ell+1}\rangle$, 平移量是 ϵ; U^2 将 $|\varphi_\ell\rangle$ "向前平移" 到 $|\varphi_{\ell+2}\rangle$, 平移量是 2ϵ; $\cdots\ \cdots$. 但是, 整体看来是一个循环置换, 所谓的 "向前平移" 不可能无止境地走下去, 当平移量达到 $n\epsilon$ 的时候, 酉变换是

$$e^{in\epsilon Q} = \sum_{k=1}^{n} e^{in\epsilon k\epsilon}\,|\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \sum_{k=1}^{n} e^{ink\epsilon^2}\,|\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \sum_{k=1}^{n} e^{i2k\pi}\,|\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \mathbb{1}$$

其中的第一个等式用到了 Q 的本征分解形式 $Q = \sum_{k=1}^{n} k\epsilon\,|\psi_k\rangle\langle\psi_k|$. 上式也就是引入生成元之后重新描述 $U^n = \mathbb{1}$ 这一性质. 实际上, 有限维空间中的酉变换不可能将该空间中的向量 "变出" 这个空间. 我们在这里讨论的 U 或者 U^k 也不可能实现任意大的平移, 当平移量超过 $n\epsilon$ 之后, 就开始了新一轮的循环, 所以, 应该将所有可能的平移量 $k\epsilon$ 描绘在一个周长为 $n\epsilon$ 的圆周上, 这个圆的半径是

$$\frac{n\epsilon}{2\pi} = \frac{2\pi}{\epsilon^2}\,\frac{\epsilon}{2\pi} = \frac{1}{\epsilon}$$

如图 1 所示.

酉变换 U 和 V 对 Q 和 P 的变换

将酉变换 V 作用于算子 Q, 将得到

$$e^{-iq_\ell P}Qe^{iq_\ell P} = Q - q_\ell\mathbb{1} \tag{12}$$

将酉变换 U 作用于算子 P, 将得到

$$e^{ip_k Q}Pe^{-ip_k Q} = P - p_k\mathbb{1} \tag{13}$$

为了得到上面两个结果, 回顾已知的性质 (11),

$$V^\ell U^k = e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}}U^kV^\ell$$

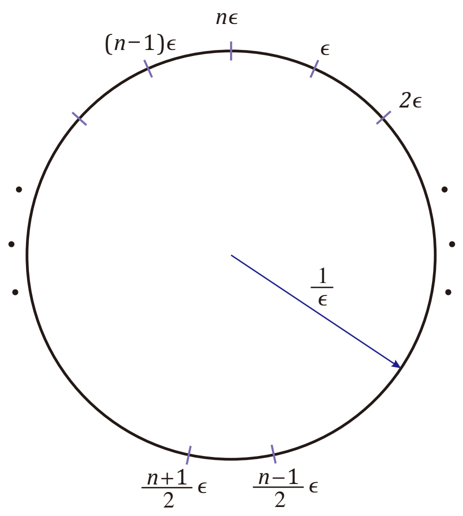

图 1

由此可以推出

$$V^{-\ell}U^kV^\ell = e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}}U^k$$

$$U^kV^\ell U^{-k} = e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}}V^\ell$$

注意到 $\epsilon^2 = 2\pi/n$, 将以上两式改写为

$$e^{-i\ell\epsilon P}e^{ik\epsilon Q}e^{i\ell\epsilon P} = e^{-ik\epsilon\ell\epsilon}e^{ik\epsilon Q} = \exp\left\{ik\epsilon(Q-\ell\epsilon\mathbb{1})\right\} \tag{14}$$

$$e^{ik\epsilon Q}e^{i\ell\epsilon P}e^{-ik\epsilon Q} = e^{-ik\epsilon\ell\epsilon}e^{i\ell\epsilon P} = \exp\left\{i\ell\epsilon(P-k\epsilon\mathbb{1})\right\} \tag{15}$$

在 (14) 和 (15) 两式中令 $\ell\epsilon = q_\ell$, $k\epsilon = p_k$, 有

$$e^{-iq_\ell P}e^{ip_kQ}e^{iq_\ell P} = \exp\left\{ip_k(Q-q_\ell\mathbb{1})\right\} \tag{16}$$

$$e^{ip_kQ}e^{iq_\ell P}e^{-ip_kQ} = \exp\left\{iq_\ell(P-p_k\mathbb{1})\right\} \tag{17}$$

我们将由此得到关于 Q 和 P 的变换规则. 注意到

$$U^{-1}A^kU = (U^{-1}AU)^k$$

$$U^{-1}f(A)U = f(U^{-1}AU)$$

因此, (16) 式的左侧可以写为

$$\exp\left\{ip_k\left(e^{-iq_\ell P}Qe^{iq_\ell P}\right)\right\}$$

与其右侧比较后有

$$e^{-iq_\ell P}Qe^{iq_\ell P} = Q - q_\ell\mathbb{1}$$

类似地, 考虑 (17) 式, 可以得到

$$e^{ip_kQ}Pe^{-ip_kQ} = P - p_k\mathbb{1}$$

这就像是对位置和动量的平移变换. 但是, 需要注意, 本质上还是循环变换.

前面我们令 $U = e^{i\epsilon Q}$, $V = e^{i\epsilon P}$, 当 ϵ 很小的时候, 这实际上是无穷小变换. 为了实现有限大小的变换, 我们可以让 U 或 V 作用多次, 也就是 $U^k = e^{ip_k Q}$ 或 $V^\ell = e^{iq_\ell P}$. 当空间维数越来越大, ϵ 越来越小, p_k 和 q_ℓ 越来越接近连续分布. 与此同时, 图 1 中的圆也变得越来越大.

为了体现真正的平移而不是循环平移, 我们修改 k 的取值范围. 原先 k 的取值范围是从 1 到 n, 现在将其修改为

$$k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm\frac{n-1}{2}$$

这一修改并不影响已有的计算结果, 但是可以更好地体现平移变换的效果. 当 $k = 0, +1, +2, \cdots, +\frac{n-1}{2}$ 时, 向右平移; 当 $k = 0, -1, -2, \cdots, -\frac{n-1}{2}$ 时, 向左平移.

$k\epsilon$ 或 $\ell\epsilon$ 的取值是

$$0, \pm\epsilon, \pm 2\epsilon, \cdots, \pm\frac{n-1}{2}\epsilon$$

$$\frac{n-1}{2}\epsilon = \frac{\epsilon}{2}\left(\frac{2\pi}{\epsilon^2} - 1\right) = \frac{\pi}{\epsilon} - \frac{\epsilon}{2}$$

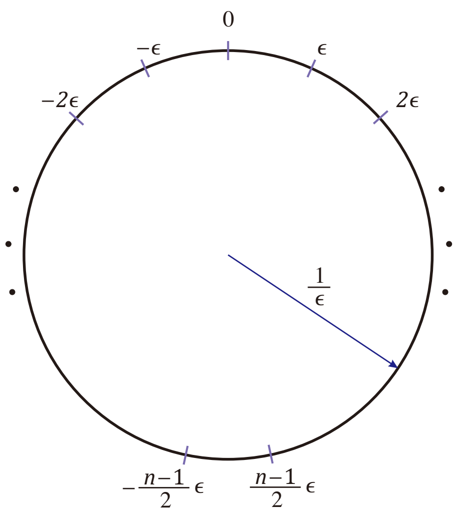

图 2

随着 $\epsilon \to 0$, 图 2 中的圆的半径趋于无穷大. 无穷大的圆上的一段有限长度的圆弧可以近似地当作直线看待. 而且, 就物理问题而言, 平移量不至于无限大. 我们所考虑的波函数也不至于扩展到无限远处. 所以, 我们面临的只是从图 2 中的位置 0 出发向右或向左平移一段有限大小的距离, 这只是无限大的圆周上的有限长度的圆弧, 在这圆弧上的有限大小的平移不会出现循环平移的效果, 因而也就基本上接近真正的平移过程了.

于是将 p_k 记作 p', 将 q_ℓ 记作 q', 并把它们视为连续变量. 将 (12) 和 (13) 表示为真正意义上的平移关系,

$$\boxed{\begin{aligned} e^{-iq'P} Q e^{iq'P} &= Q - q'\mathbb{1} \\ e^{ip'Q} P e^{-ip'Q} &= P - p'\mathbb{1} \end{aligned}}$$

展开, 保留到一级项, 有对易子

$$\boxed{[Q, P] = i\mathbb{1}}$$

再考虑对基向量的改变. 已知

$$\langle\psi_k|\, V^\ell = \langle\psi_{k+\ell}| \tag{18}$$

$$U^k\,|\varphi_\ell\rangle = |\varphi_{\ell+k}\rangle \tag{19}$$

先考虑 (18) 式,

$$u_k = e^{i\epsilon k\epsilon} = e^{i\epsilon q'}, \quad q' = k\epsilon$$

$$u_{k+\ell} = e^{i\epsilon(k+\ell)\epsilon} = e^{i\epsilon(q'+q'')}, \quad q'' = \ell\epsilon$$

$$V^\ell = e^{i\ell\epsilon P} = e^{iq''P}$$

注意到 $\langle\psi_k|$ 对应的本征值是 u_k, 而 u_k 主要依赖于 $q' = k\epsilon$, 所以把 $\langle\psi_k|$ 记作 $\langle q'|$, 类似地, 把 $\langle\psi_{k+\ell}|$ 记作 $\langle q'+q''|$. 改写 $\langle\psi_k|\,V^\ell = \langle\psi_{k+\ell}|$,

$$\left\langle q'\right|e^{iq''P} = \left\langle q'+q''\right| \tag{20}$$

也就是

$$e^{-iq''P}\left|q'\right\rangle = \left|q'+q''\right\rangle$$

类似地从 (19) 式可以得到

$$e^{ip''Q}\left|p'\right\rangle = \left|p'+p''\right\rangle$$

讨论在 Q 表象中 P 的表示. 在 Q 表象中, 基向量是 $|q'\rangle$, 某个 $|\psi\rangle$ 在 $|q'\rangle$ 上的分量是 $\langle q'|\psi\rangle = \psi(q')$. 考虑对 $|\psi\rangle$ 作平移变换, 变换后的态是 $e^{iq''P}\,|\psi\rangle$, 它在 $|q'\rangle$ 上的分量是

$$\left\langle q'\middle|e^{iq''P}\middle|\psi\right\rangle \xlongequal{\text{cf. (20)}} \left\langle q'+q''\middle|\psi\right\rangle = \psi(q'+q'')$$

当 q'' 很小时, 展开至一阶项,

$$\left\langle q'\middle|\mathbb{1}+iq''P\middle|\psi\right\rangle = \psi(q') + q''\frac{\mathrm{d}\psi(q')}{\mathrm{d}q'}$$

$$\Downarrow$$

$$\left\langle q'\middle|P\middle|\psi\right\rangle = -i\frac{\mathrm{d}\psi(q')}{\mathrm{d}q'}$$

对这个结果的理解是: 算子 P 作用于向量 $|\psi\rangle$, 将它变为 $P\,|\psi\rangle$, 在 Q 表象中, 该结果在基向量 $|q'\rangle$ 上的分量是 $-i\frac{\mathrm{d}\psi(q')}{\mathrm{d}q'}$; 另一方面, 向量 $|\psi\rangle$ 在基向量 $|q'\rangle$ 上的分量是 $\psi(q')$, 这表明 P 在 Q 表象中的表示是

$$P \longrightarrow -i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}$$

类似地可以有

$$\left\langle p'\middle|Q\middle|\psi\right\rangle = i\frac{\mathrm{d}\psi(p')}{\mathrm{d}p'}, \quad \text{其中 } \psi(p') = \left\langle p'\middle|\psi\right\rangle$$

表明在 P 表象中 Q 被表示为 $i\frac{d}{dp}$.

讨论完备性和正交归一性. 在有限维空间中, 完备性体现为

$$\sum_{k=1}^{n}|\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \mathbb{1}$$

我们曾用 $|q'\rangle$ 表示 $|\psi_k\rangle$, 其中 $q' = q_k = k\epsilon$. 现在想把求和指标换成 q'.

在求和式 $\sum_{k=1}^{n} |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$ 中, k 的取值的间隔是 $\Delta k = 1$. 现在改作对 q' 求和, q' 的间隔是

$$\Delta q' = \Delta q_k = \epsilon$$

所以

$$\sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \mathbb{1} \;\longrightarrow\; \sum_{q'} \epsilon\, |q'\rangle\langle q'| = \mathbb{1} \tag{21}$$

这就相当于变换

$$|\psi_k\rangle \longrightarrow \sqrt{\epsilon}\,\left|q'\right\rangle \tag{22}$$

当空间维数增大, $\epsilon \to 0$, 而且 q' 呈连续分布, (21) 式过渡到积分形式,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |q'\rangle\langle q'|\, dq' = \mathbb{1}$$

这就是完备性在 Q 表象中的表示. 在 P 表象中的完备性有类似的形式.

至于连续情形下 $|q'\rangle$ 与 $|q''\rangle$ 的正交, 来自如下分析,

$$\langle\psi_{k'}|\psi_{k''}\rangle = \delta_{k'k''}$$

$$q' = k'\epsilon, \quad q'' = k''\epsilon$$

$$|\psi_{k'}\rangle \longrightarrow \sqrt{\epsilon}\,\left|q'\right\rangle, \quad |\psi_{k''}\rangle \longrightarrow \sqrt{\epsilon}\,\left|q''\right\rangle \qquad \text{cf. Eq. (22)}$$

$$\left\langle q' \middle| q'' \right\rangle = \frac{\langle\psi_{k'}|\psi_{k''}\rangle}{\epsilon} = \frac{\delta_{k'k''}}{\epsilon} \xrightarrow{\epsilon\to 0} \delta(q'-q'')$$

最后, 讨论 Q 表象和 P 表象的基向量之间的内积. 这个内积决定了这两个表象之间的变换关系.

$$\langle\psi_k|\varphi_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}}$$

$$\text{Let } q' = k\epsilon,\ p' = \ell\epsilon$$

$$\epsilon\left\langle q' \middle| p' \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi/\epsilon^2}} e^{iq'p'}, \quad \left\langle q' \middle| p' \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iq'p'}$$

至此, 完成了从有限维情形到连续情形的过渡.

Hilbert 空间

在以前的章节中, 讨论了量子力学的基本假设在有限维空间中的表示. 有限维的空间用来描述有限个观测结果的量子系统. 但是, 我们一直说的观测结果或者实验现象最终是要体现在我们身处其中的这个三维的欧氏空间 $\mathbb{E}^3$ 中 —— 而不是描述量子态的 Hilbert 空间, 而且, 需要用 “在 $\mathbb{E}^3$ 中某个区域看到某种现象的几率是多少” 这样一类叙述来描述观测结果. 为了实现这样的描述, 必须在与此相关的表象中表示量子态. 这就是位置表象, 将位置 x 看作力学量 X, 它的本征值和对应的本征向量分别是 x 和 $|x\rangle$, 即 $X|x\rangle = x|x\rangle$. 然后, 就像在有限维空间中的

做法一样, 将 $|x\rangle$ 当作空间的基向量, 用来展开任意某个量子态 $|\psi\rangle$. 接着就可以利用 Born 规则分析在 $\mathbb{E}^3$ 空间中的某个区域内得到观测结果的几率.

然而, 现在面临的问题是, x 的值是连续的而不是离散的, 是无限的而不是有限的. 对于基向量 $|x\rangle$ 也是如此. 对于有限维情形, 我们可以去除 "量子系统的状态表示为 Hilbert 空间中的向量" 这条基本假设中对于态空间的要求 —— Hilbert 空间. 但是, 在无限维情形中, 我们不能省去这个对态空间的基本要求.

Hilbert 空间它的数学的定义很简单: 具有内积的完备空间.

我们已经讨论过内积的定义和内积的各种形式, 这里不再重复. 如果 H 是一个复的 (或实的) 的线性空间, $(\cdot,\cdot)$ 是 H 上的内积, 那么, $\mathscr{H}=\big(H,(\cdot,\cdot)\big)$ 就是一个 pre-Hilbert 空间. 在 pre-Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 中, 可以根据内积定义范数, 设 $f\in\mathscr{H}$, 范数定义为

$$\|f\|=\sqrt{(f,f)}$$

接着定义空间中两个点之间的距离. 对于 $f,g\in\mathscr{H}$, 二者间的距离是

$$\|f-g\|=\sqrt{(f-g,f-g)}$$

为了从 pre-Hilbert 空间过渡到 Hilbert 空间, 需要考虑 $\mathscr{H}$ 中的序列 (sequence). 序列中的成员是抽象的 "点", 它们可以是向量, 可以是算子, 可以是函数.

关注序列的收敛性. 将某个序列记作 (f_n), 其中 $f_n\in\mathscr{H}$. 如果存在某个 $f\in\mathscr{H}$, 使得当 $n\to\infty$ 时, 有 $\|f_n-f\|\to 0$, 那么序列 (f_n) 是收敛的, 记作 $f_n\to f$.

- 如果 $f_n\to f$, 那么序列 $(\|f_n\|)$ 也是收敛, 且 $\|f_n\|\to\|f\|$.
- 如果两个序列 (f_n) 和 (g_n) 都收敛, $f_n\to f$, $g_n\to g$, 那么 $(f_n,g_n)\to(f,g)$.

存在一些看似收敛序列. 对于 $\mathscr{H}$ 中的一个序列 (f_n), 如果对于任意一个 $\epsilon>0$, 总存在某个自然数 $n_0\in\mathbb{N}$, 使得对于任何的 $n,m\geqslant n_0$, $\|f_n-f_m\|\leqslant\epsilon$ 总能成立, 这样的序列就是 Cauchy 序列.

- 如果 (f_n) 是 Cauchy 序列, 那么 $(\|f_n\|)$ 是收敛序列.
- 如果 (f_n) 和 (g_n) 是两个 Cauchy 序列, 那么 $\big((f_n,g_n)\big)$ 是收敛序列.

显然, 收敛的序列一定是 Cauchy 序列, 但反过来不一定成立. 如果 pre-Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 中所有的 Cauchy 序列都收敛, 那么 $\mathscr{H}$ 是 Hilbert 空间.

Hilbert 空间的两个例子:

ℓ_2 空间 这个空间中的元素是一个个序列, $f\in\ell_2$, $f=(f_n)$, $\sum_{n=1}^{\infty}|f_n|^2<\infty$. 直观的看法是, ℓ_2 中的每一个元素 f 是 $\mathbb{C}^\infty$ (无限维复空间) 中的一个长度 (即范数) 有限的向量, 而每一个 f_n 视作向量 f 的一个分量. 定义了加法和数乘以后构成一个线性空间, 而且是 Hilbert 空间. 这个空间上的内积是

$$(f,g)=\sum_{n=1}^{\infty}f_n^*g_n$$

ℓ_2 上的内积可以类比于有限维空间上的内积, 差别在于求和的上限.

L_2 空间 (模) 平方可积的函数空间. 对于 $f,g\in L_2$, 有

$$(f,g)=\int_{-\infty}^{+\infty}f^*(x)g(x)dx$$

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

这样一类函数构成了 L_2 空间, 它是 Hilbert 空间 [1]. 我们将要讨论的波函数属于 L_2 空间.

对于 Hilbert 空间, 存在一组 (可以是无限多个) 可列的 (countable) 基向量. 以下事实有助于理解这一结论:

- 有理数序列未必收敛于有理数, 可能收敛于某个无理数. 有理数集不能构成 Hilbert 空间, 但是实数集构成 Hilbert 空间. 任何一个无理数可以用有理数的无穷序列表示, 这是实数空间完备性的体现.
- 可以用周期函数 (正弦函数或余弦函数) 展开任意某个函数, 即 Fourier 展开. 这些正弦或余弦函数具有不同的周期, 它们构成一组无穷多个离散的可列的基函数.
- 还可以用其它类型的更复杂的函数来展开任意给定的函数, 例如, 我们将要遇到的谐振子的哈密顿量的本征函数构成一组无穷多个可列的正交归一的函数集, 可以用作 Hilbert 的空间的基.

将以上的数学内容用于量子系统的描述. 现在, 我们讨论的量子系统不再是像以前那样只有有限个观测结果, 而是有无穷多个观测结果, 需要在无限维 Hilbert 空间中描述. 暂且假设量子系统的某个观测量 H (例如系统的哈密顿量) 的本征值有这无限多个, 而且它们是观分立的、离散的、可列的 [2].

$$H|u_k\rangle = h_k|u_k\rangle, \quad k = 1, 2, \cdots$$

这无穷多个 $|u_k\rangle$ 是正交归一的,

$$\langle u_j|u_k\rangle = \delta_{jk}$$

空间的完备性体现在

$$\sum_{k=1}^{\infty} |u_k\rangle\langle u_k| = \mathbb{1} \tag{23}$$

其中 $\mathbb{1}$ 表示单位算子, identity, 可以将它想象为一个无穷维的单位阵.

系统的量子态 $|\psi\rangle$ 可以表示为

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} |u_k\rangle\langle u_k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} c_k|k\rangle, \quad c_k = \langle u_k|\psi\rangle \tag{24}$$

位置表象

至此, 虽然有了无限维 Hilbert 空间的定义, 但是仍然没有回答物理上的问题: 在具体的实验中, 微观粒子在我们周围的空间中的某个地方表现出特定的现象, 这些现象出现的几率是多少? 这也就是本章开始的时候提出的问题. 我们需要在位置表象中回答这个问题, 而前面关于 Hilbert 空间的定义和讨论并没有考虑位置表象.

在位置表象中, Hilbert 空间的基向量是位置算子 X 的本征向量 $|x\rangle$. 这里暂且只考虑一维情形, 就是说, 只关心在 x 轴上的某个区间内观测到量子现象的几率. 如果用 $|x\rangle$ 来展开量子态 $|\psi\rangle$, 那么仿照 (24) 式, 有 $|\psi\rangle = \sum_x \langle x|\psi\rangle|x\rangle$. 但是, 需注意到这里的 x 是连续分布的, 于是应该写为

$$\sum_x \longrightarrow \int \mathrm{d}x$$

[1] 这里的叙述较为简单, 更详细而严格的讨论见 J. Weidmann, Linear Operators in Hilbert Space. (Springer-Verlag, 1980).

[2] 典型的例子是谐振子的能级.

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \ \langle x|\psi\rangle\, |x\rangle$$

其中 $\langle x|\psi\rangle$ 是关于 x 的复函数, 令 $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, 这就是通常说的**波函数** (wave function).

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \psi(x)\, |x\rangle \tag{25}$$

关于波函数的解释:

- $\langle x|\psi\rangle$ 可类比于以前谈到的 $\langle\alpha_i|\psi\rangle$, 它们是量子态 $|\psi\rangle$ 在特定的某个表象中的表示, 或者更严格地说, 它们是在特定的表象中基向量上的坐标或分量. 不同之处在于, 对于离散的基向量 $|\alpha_i\rangle$, 分量 $\langle\alpha_i|\psi\rangle$ 易于理解. 而对于连续的基向量 $|x\rangle$, 所谓的分量 $\langle x|\psi\rangle$ 暂时缺乏数学上的支持. 这也正是 "不好" 的 δ 函数的由来.

- 现在设想把测量结果标记在横轴上. 对于有限个测量结果 a_i, 它们分布在横轴上的不同位置. 对应于每一个 a_i, 有一个复数 $\langle\alpha_i|\psi\rangle$. 把这个复数画在纵轴上. 当然, 我们不能在一维数轴上表示复数, 但是可以作这样的想象. 于是, 就可以看到一些列离散分布的点, 每一个点的 "坐标" 是 $(a_i, \langle\alpha_i|\psi\rangle)$. 转而在位置表象中做这件事. 横轴上的点表示位置 x, 它是位置算子 X 的本征值, 同时也是测量微观粒子的位置所能得到的结果 [3]. 纵轴上是想象中的复数 $\langle x|\psi\rangle$. 由于 x 是连续地从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 变化, 我们将 "看到" 一条关于 x 的连续函数曲线 $\psi(x)$, 也就是波函数的图像. 当然, 如果波函数是实函数 (例如谐振子和氢原子的能量本征函数), 那么确实可以画出它的函数图像.

- 在有限维情形中, $|\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$ 是得到观测结果 a_i 的几率. 在位置表象中, $|\langle x|\psi\rangle|^2$ 是几率幅, $|\langle x|\psi\rangle|^2$ 是几率密度, $|\langle x|\psi\rangle|^2 dx$ 是在 x 的领域 $(x, x+dx)$ 内观测到微观粒子的几率. 在区间 $[a, b]$ 内观测到粒子的几率是
$$\int_a^b |\psi(x)|^2 dx$$
在整个空间 (目前我们讨论的只是一维空间) 内观测到粒子的几率应该为 1,
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$
即量子态应该是归一化的. 这便是将 Born 规则应用于位置表象所得到的结论, 即波函数在统计意义上的几率诠释. 很多时候, 人们把波函数称为几率波, 从约定俗成的意义上说并无不可, 但是, 如同我们再三强调的那样, 量子系统不能等同于量子现象, 量子态不能等同于几率, 波函数也不是关于几率的函数. 只有针对表现在经典层面上的观测结果才能说它们的几率分布. 我们说, 波函数无非是量子态在位置表象中的表示, 表示形式是位置坐标的函数, 之所以被冠以 "波" 这个称谓, 仅仅是出于历史原因.

- 波函数 $\psi(x)$ 是平方可积函数, 属于 L_2 空间. 但是, 平方可积这个条件对于波函数而言还显得不够, 我们还希望波函数是连续的, 可导的, 甚至无穷可导的, 而且波函数的支撑 (support) 是有限的. 所以, 我们讨论的波函数实际上属于 L_2 空间的一个子空间 [4].

既然 $|x\rangle$ 构成了位置表象中的基, 一个自然的问题是, 它的表示形式是什么?

在有限维空间中, 我们也问过这个问题. 例如, 对于 $\mathbb{C}^2$ 空间, 有两个归一的彼此正交的基向量, 记作 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$. 虽然我们说过, 追问基向量的表示形式有些不妥 —— 基向量就是用来表示向量的, 但是, 这并不妨碍我们在运算

[3] 这是粗糙的说法. 观测连续分布的变量, 我们不可能得到某个值, 不可能得到 "点" 事件, 只能观测到某个值的邻域. 不过, 我们不准备再引入有关测度论的讨论, 于是采用了不严格的描述.

[4] 参看 Cohen-Tannoudji 书 Quantum Mechanics 卷 1, 第二章.

和推导过程中用具体的形式表示它们. 实际上, 我们把 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^2$ 写为 $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$, 并进而表示为列向量 $|\psi\rangle = \left(\begin{smallmatrix} c_0 \\ c_1 \end{smallmatrix}\right)$,

这也就意谓着可以把基向量 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 分别表示为 $\left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 0 \end{smallmatrix}\right)$ 和 $\left(\begin{smallmatrix} 0 \\ 1 \end{smallmatrix}\right)$.

现在, 考虑位置表象的基向量 $|x\rangle$. 假设我们已经知道了 $|\psi\rangle$ 在位置表象中的表示形式, 即波函数 $\psi(x)$. 对于给定的某个 x', 波函数的函数值是 $\psi(x')$. $\psi(x')$ 来自于 $\langle x'|\psi\rangle$. 这是量子态 $|\psi\rangle$ 在基向量 $|x'\rangle$ 上的分量. 不过, 为了看出 $|x'\rangle$ 的具体形式, 我们从内积的角度来分析: $\langle x'|\psi\rangle$ 是 $|x'\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 的内积, 在位置表象中, $|\psi\rangle$ 的表示形式是波函数 $\psi(x)$, 而 $|x'\rangle$ 的表示形式就是我们希望知道的, 设为 $f_{x'}(x)$. 于是有

$$\left\langle x' \middle| \psi \right\rangle = \psi(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{x'}(x)\psi(x)dx \tag{26}$$

上式的特点是, 从连续函数 $\psi(x)$ 中挑选出对应于 x' 的函数值 $\psi(x')$. 因此, $f_{x'}(x)$ 的作用就相对于一个筛子, 非常理想的但是实际上不存在的筛子, 竟然能滤出某个点上的函数值. 这样的筛子不可能对应于真实的实验仪器, 而且也不能表示为 Hilbert 空间中的函数, 这就是 δ 函数.

$$f_{x'}(x) = \delta(x - x') \tag{27}$$

(26) 重写为

$$\psi(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\delta(x - x')dx \tag{28}$$

注 关于 δ 函数. 首先, 它不是传统意义上的函数, Dirac 引入 δ 函数是为了在统一框架中 (有限维的或连续的 Hilbert 空间) 表示量子态. 现代数学逐步承认了这样一类 "不好" 的函数, 并把它们成为 distribution. δ 函数的定义也确实体现了 "分布" 的意义, 这就是

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0)$$

δ 函数的性质也是需要借助积分过程才能体现.

$$\delta(-x) = \delta(x)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x), \quad a \in \mathbb{R}$$

$$x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - y)\delta(x - z)\mathrm{d}x = \delta(y - z)$$

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x - x_0)}dk$$

δ 函数可以表示为一些正规函数的渐近形式, 例如, 当 $\epsilon \to 0$ 时, 以下函数渐近地趋于 δ 函数.

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}\epsilon}e^{-x^2/\epsilon^2}, \quad \frac{1}{2\epsilon}e^{-|x|/\epsilon}, \quad \frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2}$$

$$\frac{1}{\pi}\frac{\sin\frac{x}{\epsilon}}{x}, \quad \frac{\epsilon}{\pi}\frac{\sin^2\frac{x}{\epsilon}}{x^2}$$

以上讨论说明, 位置表象的基向量 $|x\rangle$ 可以表示为 δ 函数. 基向量的正交归一性可以写为

$$\left|x'\right\rangle \longleftrightarrow \delta(x - x'), \quad \left|x''\right\rangle \longleftrightarrow \delta(x - x'')$$

$$\langle x'|x''\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x')\delta(x-x'')dx = \delta(x'-x'')$$

δ 函数不是平方可积的函数, 不属于 L^2 空间.

Hilbert 空间完备性的表示

有两种表示形式.

用可列的基向量表示

$$\sum_k |u_k\rangle\langle u_k| = \mathbb{1} \tag{29}$$

用连续的基向量表示 (位置表象)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\, dx = \mathbb{1} \tag{30}$$

考虑在位置表象中表示 $|u_k\rangle$ 的正交归一性.

$$u_k(x) = \langle x|u_k\rangle$$

$|u_k\rangle$ 的正交归一性写为

$$\langle u_j|u_k\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u_j^*(x)u_k(x)dx = \delta_{jk} \tag{31}$$

再来在位置表象中表示 (29), 先用 $|u_k\rangle$ 展开 $|\psi\rangle$,

$$|\psi\rangle = \sum_j c_j\,|u_j\rangle, \quad c_j = \langle u_j|\psi\rangle$$

在位置表象中, 上式写为

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \sum_j c_j u_j(x) \\
&= \sum_j \Big[\int_{-\infty}^{+\infty} u_j^*(x')\psi(x')dx'\Big]u_j(x) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \Big[\sum_j u_j^*(x')u_j(x)\Big]\psi(x')dx'
\end{aligned}$$

而我们又知道

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x')\delta(x-x')dx'$$

所以有

$$\sum_j u_j^*(x')u_j(x) = \delta(x-x')$$

这就是在位置表象中 $|u_k\rangle$ 的完备性.

也可以换一种看法. 考虑 $\sum_j |u_k\rangle\langle u_k|$ 的 “第 x' 行第 x'' 列的矩阵元”, 这就是

$$\langle x'|\Big(\sum_k |u_k\rangle\langle u_k|\Big)|x''\rangle = \sum_k u_k^*(x'')u_k(x')$$

而另一方面, 将 $\sum_j |u_k\rangle\langle u_k| = \mathbb{1}$ 在位置表象中表示, 即

$$\langle x'|\Big(\sum_k |u_k\rangle\langle u_k|\Big)|x''\rangle = \langle x'|\mathbb{1}|x''\rangle = \langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'')$$

于是得到

$$\sum_k u_k^*(x'')u_k(x') = \delta(x'-x'')$$

我们还可以把 (30) 式在离散基向量 $|u_k\rangle$ 上表示, 这就相当于写出 $\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\,dx$ 的第 j 行第 k 列的矩阵元,

$$\langle u_j|\Big(\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\,dx\Big)|u_k\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u_j^*(x)u_k(x)dx = \delta_{jk}$$

这就是 (31) 式.

动量表象

动量是平移变换的生成元. 考虑简单的一维情形, 我们要说明, 动量可以表示为微分算子 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

将某个函数 $f(x)$ 沿 x 方向向右平移一端距离 a. 设平移后的函数是 $g(x)$.

如同在讨论旋转变换的时候说的那样, 首先需要明确变换的对象是什么. 针对不同的对象, 变换有不同的表示. 目前我们希望知道的是空间平移变换如何改变函数的形式, 而容易知道的是平移变换如何改变了一维空间中各个点的坐标, 这就是

$$x \longrightarrow x+a$$

其中 a 是平移量. 把这个变换记作 T, 上面的变换就是

$$x \longrightarrow x' = \mathrm{T}x = x+a$$

一个显然的事实是 $f(x) = g(x')$, 这也就是

$$f(x) = g(\mathrm{T}x)$$

可以将上式中的 x 替换为 $\mathrm{T}^{-1}x$, 这里 T^{-1} 是变换平移变换 T 的逆变换, $T^{-1}x = x-a$.

$$f(\mathrm{T}^{-1}x) = f(x-a) = g(x)$$

简单地说, 将函数 $f(x)$ 中的自变量 x 代之以 $x-a$, 就得到了平移后的函数表达式 $g(x)$.

现在考虑无穷小变换, 令 $a\to 0$, 在某个点 x_0 附近展开 $g(x_0)$,

$$g(x_0) = f(x_0) - a\frac{df}{dx}\Big|_{x_0} + \cdots$$

这表明, 对于函数而言, 平移变换的生成元是 $-\frac{d}{dx}$. 有限大小的针对函数的平移变换可以表示为

$$\mathcal{T}(a) = e^{-a\frac{d}{dx}}$$

$$f(x) \longrightarrow g(x) = \mathcal{T}(a)f(x)$$

稍后会看到, 微分算子 $-\frac{d}{dx}$ 不是厄密算子, 乘以 i 以后成为一个厄密算子, 令

$$P_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$$

对函数的平移变换表示为

$$\mathcal{T}(a) = e^{-a\frac{d}{dx}} = e^{-iaP_x/\hbar}$$

$$\left.\begin{array}{l}\text{动量是平移变换的生成元}\\[2ex]\text{动量作为力学量, 表示为厄密算子}\end{array}\right\} \Longrightarrow P_x \longleftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{32}$$

这时动量算子在位置表象中的表示.

动量的本征方程 (以下暂时省略下标 x)

$$P\,|p\rangle = p\,|p\rangle$$

在动量表象中, 动量的本征态满足正交归一性和完备性,

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'')$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\,|p\rangle\,\langle p| = \mathbb{1}$$

与位置表象类似, 对于任意的量子态 $|\psi\rangle$, 可以表示为

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\langle p|\psi\rangle\,|p\rangle$$

令 $\varphi(p) = \langle p|\psi\rangle$, 这是量子态在动量表象中的表示, 或者说, 这是动量空间波函数.

对量子态的空间平移变换

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = \mathcal{T}(a)\,|\psi\rangle = e^{-iaP/\hbar}\,|\psi\rangle$$

在位置表象中的表示

$$\langle x|\psi\rangle \longrightarrow \langle x|\psi'\rangle = \langle x|e^{-iaP/\hbar}|\psi\rangle \tag{33}$$

平移后的波函数的具体形式一定是 [5]

$$\psi'(x) = \psi(x-a) \tag{34}$$

为了说明这一点, 先考虑 $\langle x|P|\psi\rangle$. 最直接的做法是, 在位置表象中, 量子态表示为波函数 $\psi(x)$, 动量算子表示为 $-i\hbar\frac{d}{dx}$, 所以有

$$\langle x|P|\psi\rangle = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}$$

进而有

$$\langle x|P^n|\psi\rangle = (-i\hbar)^n\frac{d^n\psi(x)}{dx^n}$$

于是

$$\begin{aligned}\langle x|e^{-iaP/\hbar}|\psi\rangle &= \langle x|\left[\mathbb{1} + \frac{-ia}{\hbar}P + \frac{1}{2!}\left(\frac{-ia}{\hbar}\right)^2P^2 + \cdots\right]|\psi\rangle \\ &= \psi(x) + (-a)\frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{(-a)^2}{2!}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \cdots\end{aligned}$$

[5] 如果考虑以前得到的 $\langle q'|\,e^{iq''P} = \langle q'+q''|$, 那么有 $\langle x|\,e^{-iaP/\hbar} = \langle x-a|$, 立即可以得到 $\langle x|e^{-iaP/\hbar}|\psi\rangle = \psi(x-a)$.

$$= \psi(x-a) \tag{35}$$

在得到 (32) 式的推导过程中, 是从有限大小的酉变换出发, 通过考虑无穷小变换提炼出生成元. 而 (35) 式的过程则是相反的, 从生成元出发实现有限大小的酉变换.

还可以这样考虑 $\langle x|P|\psi\rangle$,

$$\langle x|P|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \langle x|P|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p\, \langle x|p\rangle\, \varphi(p) dp \tag{36}$$

这涉及位置表象和动量表象之间的变换.

又可以这样,

$$\langle x|P|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|P|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle\, dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|P|x'\rangle\, \psi(x') dx'$$

这相当于考虑在位置表象中 P 的 "第 x 行第 x' 列的矩阵元".

$$P = \int p\, |p\rangle \langle p|\, dp$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|P|x'\rangle\, \psi(x') dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} p\, \langle x|p\rangle \langle p|x'\rangle\, dp \right) \psi(x') dx' \tag{37}$$

还是涉及表象的变换.

位置表象和动量表象之间的变换

考虑动量的本征态在位置表象中的函数形式, 也就是要计算 $\langle x|p\rangle$, 记作 $v_p(x)$.

$$P\, |p'\rangle = p'\, |p'\rangle$$

$$\langle x|P|p'\rangle = p' \langle x|p'\rangle$$

$$\because \quad \langle x|P|\psi\rangle = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$$

$$\therefore \quad \langle x|P|p'\rangle = -i\hbar \frac{dv_{p'}(x)}{dx} = p' v_{p'}(x)$$

$$v_{p'}(x) = C e^{ip'x/\hbar}$$

其中 C 是归一化尝试, 稍后确定. 对 $v_{p'}(x)$ 的解释:

- 它是 $|p'\rangle$ 在位置表象中的表示.
- 此时 p' 是固定的, $v_{p'}(x)$ 是 x 的函数.
- $v_{p'}(x)$ 的形式是平面波, 波矢 $k' = \frac{p'}{\hbar}$, 是固定的. 平面波不是平方可积的, 与 δ 函数一样, 不属于通常的可分的 Hilbert 空间. 它们的价值体现在分析和计算过程中, 分析和计算的结果应该有明确物理意义.

将 $v_{p'}(x)$ 归一, 计算常数 C. 如果直接写 $|v_{p'}(x)|^2 = |C|^2$ 并做积分, 那么得到分散的结果.

利用 $|x\rangle$ 的正交归一性和 $|p\rangle$ 的完备性,

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

$$
\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \left\langle x' \middle| p' \right\rangle \left\langle p' \middle| x'' \right\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dp' |C|^2 \exp\left[\frac{ip'(x'-x'')}{\hbar}\right] \\
&= 2\pi\hbar |C|^2 \delta(x - x'')
\end{aligned}
$$

选择 C 为正实数, $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, 有

$$
v_{p'}(x) = \left\langle x \middle| p' \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x/\hbar}
$$

复共轭给出 $\langle p'|x\rangle$,

$$
\left\langle p' \middle| x \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip'x/\hbar}
$$

现在可以看到, 量子态 $|\psi\rangle$ 在位置表象和动量表象中的两种表示形式 $\psi(x)$ 和 $\varphi(p)$ 之间的联系是 Fourier 变换,

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle = \int dx \, \langle x|\psi\rangle \, |x\rangle &= \int dx \;\, \psi(x) \, |x\rangle \\
&= \int dx \int dp \;\, \psi(x) \, |p\rangle \, \langle p|x\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \;\, \left[\int dx \;\, \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \right] |p\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \;\, \varphi(p) \, |p\rangle
\end{aligned}
$$

即

$$
\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \;\, \psi(x) e^{-ipx/\hbar}
$$

反过来, 有

$$
\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \;\, \varphi(p) e^{ipx/\hbar}
$$

再回头看 (36) 和 (37) 式. 在 (36) 中,

$$
\begin{aligned}
\langle x|P|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} p \, \langle x|p\rangle \, \varphi(p) dp \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} p e^{ipx/\hbar} \varphi(p) dp \\
&= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) \; e^{ipx/\hbar} dp \\
&= -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}
\end{aligned}
$$

在 (37) 中, 所谓的 P 的 “矩阵元”,

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty} p \, \langle x|p\rangle \left\langle p \middle| x' \right\rangle dp \\
=&\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} p e^{ip(x-x')/\hbar} \; dp
\end{aligned}
$$

$$=\frac{-i\hbar}{2\pi\hbar}\ \frac{d}{dx}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip(x-x')/\hbar}\ dp$$

$$=-\,i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x')$$

这涉及到对 δ 函数的求导, 不易处理.

对易子

$$[X,P_x]=i\hbar$$

期望值

$$\langle\psi|X|\psi\rangle=\int x\psi^*(x)\psi(x)dx$$

$$\langle\psi|P_x|\psi\rangle=-i\hbar\int\psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}$$

$$\langle\psi|P_x^2|\psi\rangle=-\hbar^2\int\psi^*(x)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

厄密性. 证明 $-i\frac{d}{dx}$ 是厄密算子 (令 $\hbar=1$).

$$\text{证明}\ \langle\varphi|P_x|\psi\rangle=\langle\psi|P_x|\varphi\rangle^*$$

$$\langle\varphi|P_x|\psi\rangle=-i\int\varphi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}dx=i\int\psi(x)\frac{d\varphi^*(x)}{dx}$$

$$\langle\psi|P_x|\varphi\rangle=-i\int\psi^*(x)\frac{d\varphi(x)}{dx}$$

Gauss 波包

$$\psi_G(x)=\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\exp\left\{-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right\}$$

在 Gauss 波包中的期望值

$$\langle\psi_G|X|\psi_G\rangle=\langle\psi_G|P_x|\psi_G\rangle=0$$

$$\langle\psi_G|X^2|\psi_G\rangle=\sigma^2$$

$$\langle\psi_G|P_x^2|\psi_G\rangle=\frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$$

不确定关系, 谐振子的基态满足最小不确定关系.

平移变换作用于位置算子

$$e^{-iaP_x/\hbar}Xe^{iaP_x/\hbar}$$

$$=X+\left(\frac{-ia}{\hbar}\right)[P_x,X]$$

$$=X-a\mathbb{1}$$

如果我们不用 Baker-Hausdorff 公式, 那么我们需要用到如下两个事实或条件,

- X 的本征向量 $|x\rangle$ 在空间平移变换下以如下方式变换,

$$|x\rangle \longrightarrow e^{-iaP_x/\hbar}\,|x\rangle = |x+a\rangle$$

这是因为 (回顾 (33) 和 (34) 两式),

$$\langle x|e^{iaP_x/\hbar}|\psi\rangle = \psi(x+a) = \langle x+a|\psi\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\langle x|\,e^{iaP_x/\hbar} = \langle x+a|\,, \quad \text{or} \quad e^{-iaP_x/\hbar}\,|x\rangle = |x+a\rangle$$

- X 的本征值在空间平移变换下是不变的, 即

$$X'\,|x'\rangle = x\,|x'\rangle.$$

这里, X' 的形式是未知的, 但是 x' 却是知道的, 即 $|x'\rangle = |x+a\rangle$.

$$X'\,|x+a\rangle = x\,|x+a\rangle\,.$$

于是问题变为, 怎样形式的向量算子 X' 能够满足上式? 可以直接看出

$$(X-a)\,|x+a\rangle = (x+a)\,|x+a\rangle - a\,|x+a\rangle = x\,|x+a\rangle\,.$$

也就是说

$$X' = X - a\mathbb{1}$$

推广到三维运动

位置表象中的基

$$|x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$$

选择不同的坐标系: 直角坐标系, 柱坐标系, 球坐标系等等.