

测量与算符

测量和算符是量子力学中不可分割的两个核心概念，我决定把这两个概念联系在一起讲述。

测量

量子力学中，测量是指用服从经典规律的**仪器**对服从量子规律的**量子客体**的某个力学量进行一次观测。

算符

算符(operator) 是量子力学中的一种操作，从物理意义上讲，算符和测量相对应；从数学上讲，它的性质与矩阵比较相似（但是不一定是矩阵）。通俗理解，算符是可以对所作用的部分进行某种操作的东西。算符有线性可加性，可逆性。（书上有，不抄了）

最重要的是，某些情况下，算符有不可对易性 $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ （这是量子力学的核心概念，因为从物理上看，两个算符不可对易，意味着这两个力学量不可以同时测准，如果两个算符可对易，那么这两个力学量可以同时测准）。

厄米算符。厄米算符是满足特殊性质的一系列算符。厄米算符的数学定义是，对于任意波函数 $\Psi(r), \Phi(r)$ ，算符 $\hat{A}$ 是厄米的，等价于：

$$\int \Psi^*(\mathbf{r})[\hat{A}\Phi(\mathbf{r})]d\tau = \int [\hat{A}\Psi(\mathbf{r})]^*\Phi(\mathbf{r})d\tau$$

或者用狄拉克符号（可以看后面的内容了解）可以写成：

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Phi \rangle = \langle \hat{A} \Psi | \Phi \rangle$$

物理实验中能观测的力学量，所对应的算符都是厄米算符。由于每一种经过测量而得到的物理量都是实值的，所以，可观察量 $\hat{O}$ 的期望值 $\langle \hat{O} \rangle$ 必须是实值：

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \hat{O} \rangle^*$$

对于任意量子态 $|\psi\rangle$ ，上述关系都成立，期望值用狄拉克符号表示为：

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

根据伴随算符（厄米共轭）的定义，假设 $\hat{O}^\dagger$ 是 $\hat{O}$ 的伴随算符，则内积的复共轭定义为：

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

将伴随算符的定义代入期望值实值条件中：

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O}^\dagger | \psi \rangle$$

重排上式得：

$$\langle \psi | (\hat{O} - \hat{O}^\dagger) | \psi \rangle = 0$$

由于该关系对于任意量子态 $|\psi\rangle$ 都必须成立，我们得出算符本身的等式：

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

因此，厄米算符对应的矩阵是厄米矩阵。即矩阵 **A** 必须等于其**共轭转置**（Conjugate Transpose，记为 $\mathbf{A}^\dagger$ ）的矩阵：

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

测量的定性分析

量子力学的一个基本假定是，测量某一力学量 $\hat{O}$ 时，所有可能用经典仪器读出的值，都是相应的厄米算符 $\hat{O}$ 的本征值。在进行一个确定的测量之前，该体系的波函数 Ψ 是算符 $\hat{O}$ 的所有本征函数 $\{\psi_n\}$ 的一个线性组合，即

$$\Psi = \sum_n C_n \psi_n$$

并且有 $\hat{O}\psi_n = \lambda_n\psi_n$. 在做测量时，人们总是读出力学量 $\hat{O}$ 的一个确定的本征值 λ_m . 在此测量之后，其它测量之前，体系的波函数变到并且保持为 ψ_m . 形象地讲，测量力学量 $\hat{O}$ 使得体系的波函数 Ψ **塌缩**到某一个确定的本征函数 ψ_m 去了。而相应的展开系数 C_m 的绝对值的平方 $|C_m|^2$ 被解释作 ψ_m 出现在 Ψ 的几率。值得强调的是，根据上述理论，在波函数塌缩发生以后，再次对于体系重复力学量 $\hat{O}$ 的测量，将只会得到读数 λ_m 了。

测量的定量计算

使用某个经典仪器，对量子客体的某个力学量进行一次测量，数学上就是将这个力学量的算符作用于量子客体的波函数上。常见算符如下：

算符名称	坐标表象下的算符	动量表象下的算符
坐标算符 $\hat{X}$	x	$i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$
动量算符（ i 方向分量） $\hat{p}_i$	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$	p_x
动量算符（矢量） $\hat{\mathbf{p}}$	$-i\hbar \nabla$	$\mathbf{p}$
动能算符 $\hat{T}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$	$\frac{p^2}{2m}$
哈密顿量算符 $\hat{H}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$	$\frac{p^2}{2m} + V\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right)$

定量计算之前，我们必须得到本征函数。本征函数系可以通过解薛定谔方程得到（这部分内容在“量子力学的波动理论”中讲述），每个本征值对应着一个或几个本征函数（若不是只有一个本征函数，则称这种本征态是简并的）。本征函数满足正交性和简并性。

下面这部分内容涉及狄拉克记号且不好避免，可以先看后面关于狄拉克记号的讲解。

正交性：

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{mn}$$

上式中的 δ_{mn} 是克罗内克(Kronecker)记号，当且仅当 $m = n$ 时 $\delta_{mn} = 1$ ，其他情况下均为0。

完备性（这个式子书上写错了，请注意右边应该是一个单位算符）：

$$\sum_{n=1}^N |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \hat{I}$$

这个性质没有那么显然，但是也是很好证明的。读者可以自行证明。

下面我们假设已知波函数、本征函数和力学算符，要对该力学量进行测量。

首先，已知波函数和本征函数，将波函数在本征函数上展开，可以得到展开系数：

$$C_n(t) = (\psi_n(x), \Psi(x, t)) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x, t) dx$$

根据展开系数，测量得到本征值 λ_n 的概率 P_n 为：

$$P_n = |C_n(t)|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x, t) dx \right|^2$$

本征值 λ_n 就是本征波函数的测量值：

$$\lambda_n = (\psi_n(x, t), \hat{A} \psi_n(x, t)) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x, t) (\hat{A} \psi_n(x, t)) dx$$

测量某力学量的期望是：

$$\langle \hat{A} \rangle = (\Psi(x, t), \hat{A} \Psi(x, t)) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) (\hat{A} \Psi(x, t)) dx$$

从离散谱到连续谱

上面讨论的内容都是离散谱（即本征态是离散的，由量子数控制；典型的例子是Bohr氢原子能谱，一维谐振子，无穷深势阱中的束缚粒子等等），而在一些情况下，测量的结果是连续的（比如自由粒子），对于连续谱的情形，我们只需要把求和改为积分即可。

量子态仍然是不同本征态的线性组合：

$$\varphi = \int c_\lambda \varphi_\lambda d\lambda$$

本征函数之间满足：

$$\int \varphi_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda'}(\mathbf{r}) d\tau = \delta(\lambda - \lambda')$$

概率幅的计算公式：

$$c_{\lambda} = (\varphi_{\lambda}, \varphi) = \int \varphi_{\lambda}^* \varphi d\tau$$

概率密度必须满足归一化条件：

$$\int |c_{\lambda}|^2 d\lambda = 1$$

这些内容和离散的情况都可以一一对应，不言而喻。

表象

量子力学中，一个量子态 ψ 处于一个抽象的希尔伯特空间中，我们需要找到一组基底来描述这个量子态，正如我们在线性代数中找到一组基底来描述一个矢量一样。**表象** (Representation) 即是描述量子态和力学量（算符）所选取的“特定坐标系”。不同的表象对应于选择不同的可观测量的本征态作为基底。

狄拉克记号

用狄拉克记号表示量子态。一个量子态在不同表象下的波函数是不一样的，为了得到一个统一的表示，我们引入狄拉克记号。某量子态可以记作 $|\psi\rangle$ ，这个表达式是不区分表象的。在选定一组基矢 $\{|u_n\rangle\}$ 后，抽象的量子态 $|\Psi\rangle$ 可以表示为：

$$|\Psi\rangle = \sum_n C_n |u_n\rangle$$

其中，展开系数 C_n 就是态矢 $|\Psi\rangle$ 在该表象下的分量（或**概率幅**）。在有限维空间中，这可以看作一个列向量。

$$|\Psi\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

狄拉克记号和波函数的关系。 狄拉克记号 $|\psi\rangle$ 不区分表象，而波函数是和表象相关的。这两者的关系如下，如果 $\psi(x, t)$ 是坐标表象下的波函数，那么 $\psi(x, t) = \langle x | \psi \rangle$ ，如果 $\phi(p, t)$ 是动量表象下的波函数，那么 $\phi(p, t) = \langle p | \psi \rangle$ 。

用狄拉克记号表示内积。 $\langle \Phi | \Psi \rangle$ 代表量子态 $|\Phi\rangle$ 和 $|\Psi\rangle$ 之间的**重叠程度**。在坐标表象中，它对应于一个积分：

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \int \Phi^*(x) \Psi(x) dx$$

表象变换

我们以坐标表象向动量表象变换为例。根据完备性关系： $\hat{I} = \int |x\rangle \langle x| dx$ ，我们把它插入进去，如下：

$$\Phi(p) = \langle p | \Psi \rangle = \langle p | \left(\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| dx \right) | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\langle p | x \rangle \langle x | \Psi \rangle}_{\text{变换核 } \Psi(x)} dx$$

变换核 $\langle p | x \rangle$ 是动量本征态 $|p\rangle$ 在位置表象下的波函数 $\Psi_p(x)$ 的复共轭（或反过来是位置本征态 $|x\rangle$ 在动量表象下的波函数 $\Phi_x(p)$ ）。

由于 $\langle x | p \rangle$ 是满足动量本征方程 $\hat{P} \langle x | p \rangle = p \langle x | p \rangle$ 的解，即平面波：

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

因此，变换核 $\langle p | x \rangle$ 为其复共轭：

$$\langle p | x \rangle = \langle x | p \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}$$

将变换核代入上式，我们得到波函数从 x 表象到 p 表象的变换公式：

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x) dx$$

由此可见，动量表象的波函数 $\Phi(p)$ 是坐标表象的波函数 $\Psi(x)$ 的傅里叶变换。

不确定性关系

量子力学可以严格证明（这个证明不难，读者可以自证），对于两个厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ ，其对易关系满足 $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ ，令 $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \bar{A}$ ， $\Delta\hat{B} = \hat{B} - \bar{B}$ ，则有

$$\sqrt{(\Delta\hat{A})^2 \cdot (\Delta\hat{B})^2} \geq \frac{|\bar{\hat{C}}|}{2}$$

通常简记为

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|\bar{\hat{C}}|}{2}$$

由于 $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ ，代入上式，可以得到准确的位置和动量的不确定关系

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2.$$

练习题

1. 考虑一维无穷深势阱（势阱位于 $[0, a]$ ），计算粒子的波函数、位置的期望值、动量的期望值、能量的期望值。
2. 考虑一维势能函数如下：

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & (x < -a/2) \\ 0 & (-a/2 \leq x \leq a/2) \\ V_2 & (x > a/2) \end{cases}$$

计算粒子的波函数、位置的期望值、动量的期望值、能量的期望值。

3. 证明以下对易关系（作业）：

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar$$

4. 定义角动量算符如下：

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

定义在角动量平方算符如下：

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

证明角动量算符的对易关系：

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

并证明 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_x^2, \hat{L}_y^2, \hat{L}_z^2$ 都是对易的。（提示：根据定义展开，利用算符的性质证明。）

5. 证明厄米算符的本征值必为实数。
6. 证明厄米算符属于不同本征值的本征函数必然是正交的。