测量假设：

$$\psi(x,t) = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} C_n^i \phi_n^i(x,t)$$ g_n是a_n的简并度

$$\psi(x,t) \xrightarrow{a_n} \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |C_n^i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} C_n^i \phi_n^i(x,t) \quad (\text{归一化})$$

测$\hat{A}$得到a_n本征值的几率是

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |C_n^i|^2$$

但明显，我们没有完全确定测量后体系的全部信息，因为测量后体系的波函数存在简并。

简并意味着量子体系一定具有某种对称性，在该对称性操作下，$\{\phi_n^i\}$中的波函数 无法分辨(区分)

(对称性：看起来很多，但实际信息要少)

测量的目的是完全地确定体系的状态

$\Rightarrow$ 引入其他的测量来区分$\{\phi_n^i\}$ —— $\hat{B}$ (设为$\hat{B}$)

同时还要求$\hat{A}$和$\hat{B}$都可以在对量子体系影响小的情形下同时测量得极其精确

$$\Rightarrow \left.\begin{array}{l}\hat{A}\phi_i = a_i\phi_i \\ \hat{B}\phi_j = b_j\phi_j\end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l}\hat{A}\phi_{ij} = a_i\phi_{ij} \\ \hat{B}\phi_{ij} = b_j\phi_{ij}\end{array}$$

$\Rightarrow$ 具有共同本征函数.

1) 算符的共同本征函数 —— 算符间关系

① 涨落：在有一定概率分布的状态中，对物理量 $\hat{A}$ 进行一次测量，测量值与平均值之间的偏差大小可由如下定义的涨落描述

$$\Delta A = \sqrt{(\psi, (\hat{A}-\bar{A})^2\psi)} \geq 0 , \quad \bar{A} = (\psi, \hat{A}\psi)$$

$\int \psi^* \hat{A}\psi\, dx = \bar{A}$

$\Delta A^2 = \int \psi^* (\hat{A}-\bar{A})^2 \psi\, dx$

$\hat{A}-\bar{A}$ 是厄米算符 $\Rightarrow (\psi, (\hat{A}-\bar{A})^2\psi)$
$= ((\hat{A}-\bar{A})\psi, (\hat{A}-\bar{A})\psi) \geq 0$

涨落为0，($\Delta A = 0$)：测量值只取确定值，且得到该值几率为1.

$$\Rightarrow (\hat{A}-\bar{A})\psi = 0$$

$$\Rightarrow \hat{A}\psi = \bar{A}\psi \quad \text{本征方程}$$

(涨落为0的态)

标积定义：

若体系有两个波函数 $\psi(x)$ 和 $\phi(x)$，其标积为

$$(\psi,\phi)\equiv\int\psi^*(x)\phi(x)\,dx$$

$$\Rightarrow (\psi,\psi)=\int|\psi|^2dx\geq 0$$

性质：

$$(\psi,\phi)=(\phi,\psi)^*=(\phi^*,\psi^*)$$

$$(\psi,\lambda_1\phi_1+\lambda_2\phi_2)=\lambda_1(\psi,\phi_1)+\lambda_2(\psi,\phi_2)$$

$$(\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2,\phi)=\lambda_1(\psi_1,\phi)+\lambda_2(\psi_2,\phi)$$

厄米算符 $\hat{A}^{+} = \hat{A}$

$$(\psi, \hat{A}\phi) = (\psi, \hat{A}^{+}\phi) = (\hat{A}\psi, \phi)$$

和算符有关定义：

1) 转置 $\widetilde{\hat{A}}$ （简记为 $\tilde{A}$）暂时忽略 $\hat{A}$

$$(\psi, \hat{A}\phi) \equiv (\phi^*, \widetilde{\hat{A}}\psi^*)$$

$$\int \psi^* \hat{A}\phi \, dx = \int \phi \widetilde{\hat{A}} \psi^* \, dx$$

$$\widetilde{\hat{A}\hat{B}} = \widetilde{\hat{B}}\widetilde{\hat{A}}$$

2) 厄米共轭：

$$\hat{A}^+ = \widetilde{\hat{A}^*} \quad \text{取复共轭} + \text{转置}$$

$$(\psi, \hat{A}^+\phi) = (\psi, \widetilde{\hat{A}^*}\phi)$$

$$\overset{\text{转置}}{=} (\phi^*, A^*\psi^*)$$

$$\overset{\text{标积}}{=} (\hat{A}\psi, \phi)$$

$$\Rightarrow (\psi, \hat{A}^+\phi) = (\hat{A}\psi, \phi)$$

证明：对任意波函数 ψ，有 $(\psi,\psi)\geq 0$ （等号在 $\psi=0$ 时成立）

令 ψ_1 和 ψ_2 也是平方可积的波函数

$$\psi=\psi_1+\underbrace{\lambda}_{\text{任意参量}}\psi_2$$

$$(\psi,\psi)=(\psi_1,\psi_1)+|\lambda|^2(\psi_2,\psi_2)$$
$$+\lambda(\psi_1,\psi_2)+\lambda^*(\psi_2,\psi_1)\geq 0$$

取 $\lambda=-\dfrac{(\psi_2,\psi_1)}{(\psi_2,\psi_2)}$，则有

$$(\psi,\psi)=(\psi_1,\psi_1)-\frac{(\psi_2,\psi_1)(\psi_1,\psi_2)}{(\psi_2,\psi_2)}-\frac{(\psi_2,\psi_1)^*(\psi_2,\psi_1)}{(\psi_2,\psi_2)}$$
$$+\frac{|(\psi_2,\psi_1)|^2}{(\psi_2,\psi_2)^2}(\psi_2,\psi_2)$$

$$=(\psi_1,\psi_1)-\frac{|(\psi_2,\psi_1)|^2}{(\psi_2,\psi_2)}\geq 0$$

$$\Rightarrow (\psi_1,\psi_1)\geq\frac{|(\psi_2,\psi_1)|^2}{(\psi_2,\psi_2)}$$

$$\Rightarrow (\psi_1,\psi_1)(\psi_2,\psi_2)\geq|(\psi_2,\psi_1)|^2$$

等号仅在 $\psi_2=a\psi_1$ 时成立.

要找到 $\hat{A}\phi_{ij}=a_i\phi_{ij}$，$\hat{B}\phi_{ij}=b_j\phi_{ij}$，即要求 $\begin{cases}(\Delta A)=0\\(\Delta B)=0\end{cases}$

$\Rightarrow$ 两个标符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 在一个态中的一次测量，一般都有涨落 ΔA 和 ΔB

能否找到一组态，使得 $\Delta A=\Delta B=0$？

$\Rightarrow$ $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 要满足什么条件？

② 标符"涨落"之间的关系式

Ⓐ Schwartz 不等式

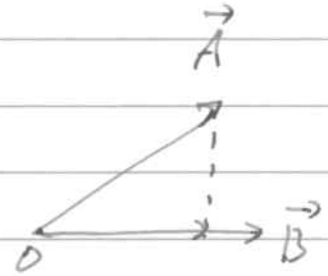
如果 ψ_1 和 ψ_2 是两个平方可积的波函数，则有

$$(\psi_1,\psi_1)(\psi_2,\psi_2)\geq|(\psi_1,\psi_2)|^2$$

类似于矢量性质

$$\vec{A}^2\cdot\vec{B}^2\geq(\vec{A}\cdot\vec{B})^2$$

$$\vec{A}^2\geq\left(\vec{A}\cdot\frac{\vec{B}}{|B|}\right)^2$$



即 $\vec{A}$ 的长度大于或等于它在任意方向 $\frac{\vec{B}}{|B|}$ 上投影

$$(\psi_a, \psi_b) = (\hat{a}\psi, \hat{b}\psi) = (\psi, \hat{a}\hat{b}\psi)$$

因为任意一个算符 $\hat{O}$ 都可表示为两个厄米算符之和

$$\hat{O} = \hat{O}_+ + i\hat{O}_- \qquad \begin{cases} \hat{O}_+ = \frac{1}{2}(\hat{O} + \hat{O}^+) \\ \hat{O}_- = -\frac{i}{2}(\hat{O} - \hat{O}^+) \end{cases}$$

所以，

$$(\psi, \hat{a}\hat{b}\psi) = (\psi, \tfrac{1}{2}(\hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a})\psi) + (\psi, \tfrac{1}{2}(\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a})\psi)$$

定义算符对易子

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

则

$$(\psi, \hat{a}\hat{b}\psi) = \underbrace{(\psi, \tfrac{1}{2}(\hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a})\psi)}_{\text{实数}} + i(\psi, \underbrace{\tfrac{-i}{2}[\hat{a}, \hat{b}]}_{\text{厄米算符，平均值为实}}\psi)$$

实部　　　　虚部

所以

$$|(\psi, \hat{a}\hat{b}\psi)|^2 \geq |(\psi, \tfrac{i}{2}[\hat{a}, \hat{b}]\psi)|^2$$

$$\Longrightarrow (\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 \geq |(\psi, \hat{a}\hat{b}\psi)|^2 \geq |(\psi, \tfrac{i}{2}[\hat{a}, \hat{b}]\psi)|^2$$

即 $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\overline{i[\hat{a}, \hat{b}]}\right| = \frac{1}{2}\left|\overline{i[\hat{A}, \hat{B}]}\right|^2$

Ⓑ 不确定关系

$$(\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 \geq \frac{1}{4}\left(\overline{i[\hat{A},\hat{B}]}\right)^2$$

或 $$\Delta A\cdot\Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\overline{i[\hat{A},\hat{B}]}\right|$$

⇒ 如果 $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$，那么通常 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 不能同时测定

（同时测定 = 对体系影响为0或极小的情况下读出 a_i 和 b_j 的数值

严格理论要求影响为0
但现实中无法做到

证明：

令 $\hat{a}=\hat{A}-\bar{A}$，$\hat{b}=\hat{B}-\bar{B}$，且

$$\psi_a=\hat{a}\psi,\quad \psi_b=\hat{b}\psi.$$

则 $$(\Delta\hat{A})^2=(\psi,(\hat{A}-\bar{A})^2\psi)=(\psi,\hat{a}^2\psi)$$

$$(\Delta\hat{B})^2=(\psi,(\hat{B}-\bar{B})^2\psi)=(\psi,\hat{b}^2\psi)$$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2\cdot(\Delta B)^2=(\psi,\hat{a}^2\psi)(\psi,\hat{b}^2\psi)$$

$$=(\hat{a}\psi,\hat{a}\psi)(\hat{b}\psi,\hat{b}\psi)$$

$$=(\psi_a,\psi_a)(\psi_b,\psi_b)\geq\left|(\psi_a,\psi_b)\right|^2$$

结论.

1) 若 对于 $|\overline{[\hat{A},\hat{B}]}| \neq 0$ 的态 ψ，则在该态中

$\hat{A}, \hat{B}$ 的涨落不可能同时为 0.

当 $\Delta A \to 0$ 时 $\Delta B \to \infty$

无法用 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 同时标记(描述物理体系)

例. $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}_x$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{x}, \hat{p}_x] = \underbrace{i\hbar}_{\text{常数}}$$

$|\overline{[\hat{x}, \hat{p}_x]}| \neq 0$ 永远无法同时测定

且 $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ (海森堡的不确定关系)

2) 注意: 不确定关系右方 是

$|\overline{[\hat{A}, \hat{B}]}|$

当在某个特定态中 $|\overline{[\hat{A}, \hat{B}]}| = 0$ 时.

即使 $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$，那么在该态中 $\underline{\underline{\Delta A \cdot \Delta B = 0}}$

(可同时测准)

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

在 $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ 中 $(Y_{00}, \hat{L}_z Y_{00}) = 0$，此时 $(\Delta L_x)^2 (\Delta L_y)^2$

↳ 偏微分特征 $L_x = L_y = L_z = 0$

3) 更严格的不确定关系

$$(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}\left((\psi, (\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})\psi) - 2\bar{A}\bar{B} \right)^2$$

$$+ \frac{1}{4}\left((\psi, i[\hat{A},\hat{B}]\psi) \right)^2$$

E. Schrödinger, "the uncertainty principle"
Abh. Press. Akad. Wiss. 19, 296 (1930)

4) 例. 具有最小不确定关系 $\Delta x\cdot\Delta p=\frac{\hbar}{2}$ 的波函数?

解: 不确定关系推导如下

$$(\psi_a,\psi_a)(\psi_b,\psi_b)\geq|(\psi_a,\psi_b)|^2\geq|(\psi,\frac{i}{2}[\hat{A},\hat{B}]\psi)$$

故,最小不确定关系的波函数应满足

$$(\psi_a,\psi_a)(\psi_b,\psi_b)=|(\psi_a,\psi_b)|^2$$

$$\Longrightarrow\ \psi_b=\lambda\psi_a$$

此即 $\left.\begin{array}{l}\psi_b=(\hat{B}-\bar{B})\psi\\ \psi_a=(\hat{A}-\bar{A})\psi\end{array}\right\}\Rightarrow$

$$\Longrightarrow\ \left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\bar{p}\right)\psi(x)=\lambda(\hat{x}-\bar{x})\psi(x)$$

注意: 上述不等式的第二步还要求

$(\psi,\frac{1}{2}(\hat{a}\hat{b}+\hat{b}\hat{a})\psi)=0$ 即 (ψ_a,ψ_b) 实部为0

将 $\psi_b=\lambda\psi_a$,

$$(\psi,\frac{1}{2}(\hat{a}\hat{b}+\hat{b}\hat{a})\psi)=\frac{1}{2}\left[(\hat{a}\psi,\hat{b}\psi)+(\hat{b}\psi,\hat{a}\psi)\right]$$

$$=\frac{1}{2}\left[(\hat{a}\psi,\lambda\psi_a)+(\lambda\psi_a,\psi_a)\right]$$

$$=\frac{1}{2}(\lambda+\lambda^*)(\psi_a,\psi_a)=0\Rightarrow\lambda\text{是纯虚数}$$

不妨先设 $\bar{p}=\bar{x}=0$，则有

$$-i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)=\lambda x\psi(x)$$

$$\Rightarrow\quad \psi(x)=C\,e^{i\lambda x^2/2\hbar}$$

令 $\lambda=i\lambda'$，则有

$$\psi(x)=C\,e^{-\lambda' x^2/2\hbar}\qquad\text{(高斯波包)}$$

当 $\bar{p}\neq0,\ \bar{x}\neq0$ 时，

$$\psi(x)=C\,e^{\frac{i\bar{p}x}{\hbar}}\,e^{-\frac{\lambda'(x-\bar{x})^2}{2\hbar}}$$

C → 归一化常数.

注意：

$$\psi_b=\lambda\psi_a\Rightarrow\hat{b}\psi=\lambda\hat{a}\psi$$

$$\Rightarrow(\hat{b}-\lambda\hat{a})\psi=0$$

$\psi(x)$ 是 $(\hat{b}-\lambda\hat{a})$ 的本征值为 0 的本征函数

但 $\hat{b}-i\lambda'\hat{a}$ 不是厄米算符.

不确定关系第2种推导方法

令 $|\phi\rangle = (\hat{A}-\bar{A})|\psi\rangle + i\lambda(\hat{B}-\bar{B})|\psi\rangle$ ，λ是实数

$\langle\phi| = \langle(\hat{A}-\bar{A})\psi| - i\lambda\langle(\hat{B}-\bar{B})\psi|$

则有 $0 \le \langle\phi|\phi\rangle = \langle(\hat{A}-\bar{A})\psi|(\hat{A}-\bar{A})\psi\rangle$

$+\lambda^2\langle(\hat{B}-\bar{B})\psi|(\hat{B}-\bar{B})\psi\rangle$

$+i\lambda\left[\langle(\hat{A}-\bar{A})\psi|(\hat{B}-\bar{B})\psi\rangle - \langle(\hat{B}-\bar{B})\psi|(\hat{A}-\bar{A})\psi\rangle\right]$

定义 $I(\lambda) = \langle\phi|\phi\rangle$

$= \langle\psi|(\hat{A}-\bar{A})^2|\psi\rangle + \lambda^2\langle\psi|(\hat{B}-\bar{B})^2|\psi\rangle$

$+i\lambda\langle\psi|(\hat{A}-\bar{A})(\hat{B}-\bar{B}) - (\hat{B}-\bar{B})(\hat{A}-\bar{A})|\psi\rangle$

$= (\Delta A)^2 + \lambda^2(\Delta B)^2 + \underbrace{i\lambda\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle}_{\equiv\lambda\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle}$

$I(\lambda) = \langle\phi|\phi\rangle \geq 0$

求极值： $0 = \left.\dfrac{dI(\lambda)}{dx}\right|_{\lambda_{min}} = 2\lambda_{min}(\Delta B)^2 + \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle$

$$\Rightarrow \lambda_{min} = -\frac{\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle}{2(\Delta B)^2}$$

将 λ_{min} 代入到 $I(\lambda)$ 中可得.

$$I(\lambda_{min}) = (\Delta A)^2 + \left(-\frac{\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle}{2(\Delta B)^2}\right)^2(\Delta B)^2 - \frac{\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle}{2(\Delta B)^2}\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle$$

$$= (\Delta A)^2 + \frac{1}{4}\frac{(\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle)^2}{(\Delta B)^2} - \frac{1}{2}\frac{(\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle)^2}{(\Delta B)^2}$$

$$= (\Delta A)^2 - \frac{(\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle)^2}{4(\Delta B)^2} \geq 0$$

$$\Rightarrow \quad (\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}(\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle)^2$$

最小不确定关系 $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ 需要上面等式成立

也即 $\langle\phi|\phi\rangle = 0$，此仅当 $\phi = 0$ 时成立

$$|0\rangle = |\phi\rangle = \left(-i\hbar\frac{d}{dx} - \bar{p}\right)\psi(x) + i\lambda(x-\bar{x})\psi(x)$$

$$\lambda_{min} = -\frac{\hbar}{2(\Delta x)^2}$$

$$\frac{d}{dx}\psi(x) = \frac{i\bar{p}}{\hbar}\psi(x) - \frac{(x-\bar{x})}{2(\Delta x)^2}\psi(x)$$

$$\Rightarrow \psi(x) \propto e^{\frac{i\bar{p}x}{\hbar}} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{4(\Delta x)^2}}$$

又因为 x 和 p 地位相当，故 $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} = (\Delta x)^2 = (\Delta$

$$\Rightarrow \psi(x) \propto e^{\frac{i\bar{p}x}{\hbar}} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\hbar}}$$ 高斯波包

$[\hat{A},\hat{B}]=0 \Rightarrow \Delta A\cdot\Delta B \geq 0 \Rightarrow$ $\hat{A}\cdot\hat{B}$ 可同时测定

B) 算符的共同本征函数组.

定理1) 如果两个力学量相应的算符有一组正交归一完备的共同本征函数组.

$\Rightarrow [\hat{A}\cdot\hat{B}]=0$

证: 设 $\{V_{nm}^{(t)}(x)\}$ 为 $\hat{A}\cdot\hat{B}$ 的共同本征函数组

$$\hat{A}V_{nm}^{(t)} = A_n V_{nm}^{(t)}$$

$$\hat{B}V_{nm}^{(t)} = B_m V_{nm}^{(t)}$$

对 $\forall\psi$, $\psi(x) = \sum\limits_{n,m,t} C_{nm}^{(t)} V_{nm}^{(t)}$

$$[\hat{A},\hat{B}]\psi(x) = \sum_{nm t} C_{nm}^{t}[\hat{A},\hat{B}]V_{nm}^{(t)}$$

$$= \sum_{nmt} C_{nm}^{t}[A_n,B_m]V_{nm}^{t} = 0$$

因 $\psi(x)$ 是任意的 $\Rightarrow [\hat{A}\cdot\hat{B}]=0.$

定理2：如果两个力学量所相应的算符对易，

$$[\hat{A}, \hat{B}],$$

则它们有共同的正交归一完备的本征函数组.

证明：设 $\phi_n^{(s)}$ 是A的本征函数组，$\{\phi_n^{(s)}\}$

$$\hat{A}\phi_n^{(s)} = A_n\phi_n^{(s)} \longrightarrow \text{标记简并度}$$

(1) $s=1$，无简并

$$\hat{A}\hat{B}\phi_n = \hat{B}\hat{A}\phi_n = A_n\hat{B}\phi_n$$

$\hat{B}\phi_n$ 也是 $\hat{A}$ 的本征值为 A_n 的本征函数，与 ϕ_n 仅差常数

$$\hat{B}\phi_n = B_n\phi_n$$

$\Longrightarrow$ $\{\phi_n\}$ 是 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 共同完备的本征函数组

(2) 当 $s>1$，有简并。

设 $\hat{B}$ 的本征函数组为 $\{u_m^{(r)}\}$

$$\hat{B}u_m^{(r)} = b_m u_m^{(r)} \longrightarrow \text{简并度}$$

对任意波函数有

$$\Psi = \sum_{n,s} d_s^n \phi_n^{(s)}$$

$$= \sum_{n,s} d_s^n \sum_{m,r} C_{nr}^{(s)m} U_m^{(r)}$$

$$= \sum_{nsm} d_s^n \underline{\underline{\left(\sum_r C_{nr}^{(s)m} U_m^{(r)} \right)}}$$

是"完备的"

对所有的 n, m, s 的集合

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow \hat{A}, \hat{B}$ 有共同的正交归一完备的本征函数组

将 $\phi_n^{(s)}$ ~~[illegible]~~ 按照 $\{u_m^{(r)}\}$ 展开

$$\phi_n^{(s)} = \sum_{r,m} C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}$$

$$\hat{A}\phi_n^{(s)} = A_n \phi_n^{(s)}$$

$$\Rightarrow \hat{A}\sum_{r,m} C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)} = A_n \sum_{rm} C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}$$

~~线性算符~~ $\cancel{\Rightarrow \sum_m \hat{A}\left(C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right) = \sum_m A_n \left(C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right)}$

$$\Rightarrow \sum_m \hat{A}\underline{\left(\sum_r C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right)} = \sum_m A_n \left(\underline{\sum_r C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}}\right)$$

左侧：$\hat{B}\left(\hat{A}\sum_r C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right) \overset{(对易)}{=} \hat{A}\hat{B}\sum_r C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}$

$$= \hat{A}\, b_m \sum_r C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}$$

$$= b_m \left(\hat{A}\sum_r C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right)$$

右侧：$\hat{B} A_n \left(\sum_r C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right)$

$$= b_m A_n \sum_r C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}$$

$$\hat{A}\left(\sum_r C_{nr}^{(s)m} u_m^{(r)}\right) = A_n \sum(\ )$$

是 $\hat{A}$ 的本征函数

③ 可对易算符的集合 —— 对易算符的性质

定理1：如果 $[\hat A,\hat B]=0$，且 $\hat A\psi=a\psi$，

则 $\hat B\psi$ 也是 $\hat A$ 的本征函数，并且属于同一本征值.

证明：$\hat A\psi=a\psi$

$$\underbrace{\hat B(\hat A\psi)=a\hat B\psi=\hat A\hat B\psi}_{[\hat A\hat B]=0} \therefore \hat A(\underline{\underline{\hat B\psi}})=a(\underline{\underline{\hat B\psi}})$$

1) a 非简并，即 $\hat B\psi\sim\psi$（两者等价，仅有不可测的相位因

2) a 简并，$\hat B\psi$ 仍属于 $\hat A$ 的本征值 a 所对应的子空间 ε_a 中

$\Rightarrow$ 本征空间 ε_a 在 $\hat B$ 作用下整体不变

定理1的等价描述：

$[\hat A,\hat B]=0 \Rightarrow \hat A$ 所有本征子空间在 $\hat B$ 作用下是整体不变的.

定理2：如果 $[\hat A,\hat B]=0$，设 ψ_1 和 ψ_2 是 $\hat A$ 的两个不同本征值对应的本征函数，那么 $(\psi_1,\hat B\psi_2)=0$

证明：$\hat A\psi_1=a_1\psi_1$，$\hat A\psi_2=a_2\psi_2$

$$\left.\begin{array}{l} a_1\neq a_2 \Rightarrow (\psi_1,\psi_2)=0 \\ \hat B\psi_2\in \underbrace{\varepsilon_2}_{a_2\text{本征子空间}} \end{array}\right\} \Rightarrow (\psi_1,\hat B\psi_2)=0$$

第二种证明:

$$(\psi_1, (\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\psi_2) = 0$$
$$= (\psi_1, \hat{A}\hat{B}\psi_2) - (\psi_1, \hat{B}\hat{A}\psi_2)$$
$$= (\hat{A}\psi_1, \hat{B}\psi_2) - a_2(\psi_1, \hat{B}\psi_2)$$
$$= (a_1 - a_2)(\psi_1, \hat{B}\psi_2)$$

当 $a_1 \neq a_2$ 时 $(\psi_1, \hat{B}\psi_2) = 0$

定理3: (基本定理)

如果 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, 则 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征函数组构成态空间的正交归一基 (完备)

证明: 参见程老师教科书

为简化符号, 假设两个算符的谱是完全离散的.

- $\hat{A}$ 的本征函数 $\{u_n^i\}$ 形成态空间的基矢

$$\hat{A} u_n^i = a_n u_n^i \quad , \quad n = 1, 2, \cdots \quad i = 1, 2, \cdots, g_n$$

g_n 是本征值 a_n 的简并度
也是子空间 $\mathcal{E}_n$ 的维数

并且 $(u_n^i, u_{n'}^{i'}) = \delta_{nn'}\delta_{ii'}$

问题: 在基 $\{u_n^i\}$ 中 $\hat{B}$ 算符的矩阵形式如何?

由定理2可知：

当 $n \neq n'$ 时，$(u_n^i, \hat{B} u_{n'}^{i'}) = 0$

如果 $n = n'$ 但 $i \neq i'$，我们一无所知!!!

将 $\{u_n^i\}$ 基矢按照本征值 a_n 排列

$$u_1^1, u_1^2, \cdots u_1^{g_1};\ u_2^1, u_2^2, \cdots, u_2^{g_2};\ u_3^1, \cdots$$

从而可知 $\hat{B}$ 的矩阵表示如下的对角分块形状

$$\begin{array}{c|cccc} & \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \cdots \\ \hline \varepsilon_1 & \underline{\times}_{\,g_1} & 0 & 0 & 0 \\ \varepsilon_2 & 0 & \boxed{\times}_{\,g_2} & 0 & 0 \\ \varepsilon_3 & 0 & 0 & \boxed{\times}_{\,g_3} & 0 \\ \vdots & 0 & 0 & 0 & \times \end{array}$$

× 不为0

定理1说明：各个子空间 $\varepsilon_1, \varepsilon_2 \cdots$ 在 $\hat{B}$ 作用下整体不变。

$\Longrightarrow$ 分块对角形式

有如下两种情况：

(1) a_n 非简并 ($g_n = 1$)，每个分块 $\longrightarrow$ 一个数

则 u_n 是 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征函数

(2) a_n 有简并 ($g_n > 1$)，一般而言 $g_n \times g_n$ 维分块不一定是对角的。

因为 u_n^i 不一定是 $\hat{B}$ 的本征函数

注意: $\hat{A} u_n^i = a_n u_n^i \quad (i=1,\cdots,g_n)$

$\Rightarrow$ $\hat{A}$ 的矩阵形式为

$$
\begin{array}{c|cccc}
\hat{A} & \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \cdots \\
\hline
\varepsilon_1 & I_{g_1} & 0 & 0 & 0 \\
\varepsilon_2 & 0 & I_{g_2} & 0 & 0 \\
\varepsilon_3 & 0 & 0 & I_{g_3} & 0 \\
 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{array}
$$

$\Rightarrow$ ε_n 空间中任意一个矢量都是 $\hat{A}$ 的本征值 a_n 对应的本征矢

在 ε_n 空间中基矢选择是任意的,

$\{u_n^i\}, \; i=1,2,\ldots g_n$

且在此空间中 $\hat{A} = a_n \hat{I}$

在 ε_n 中 $\hat{B}$ 算符矩阵~~形式~~的矩阵元是

$$B_{ij}^{(n)} = (u_n^i, \hat{B} u_n^j)$$

因为 $\hat{B}$ 是厄米算符, $\Rightarrow$ $\underline{\underline{B_{ij}^{(n)*} = B_{ji}^{(n)}}}$ $\Rightarrow$ 可对角化

故而, 我们可以找到一组 ε_n 空间的基矢 $\{v_n^i\}, \; i=1,\ldots,g_n$

在这组基中 $\hat{B}$ 矩阵是对角化的

$$(v_n^i, \hat{B} v_n^j) = B_i^{(n)} \delta_{ij}$$

强调：$\hat{A}$的属于简并本征值的本征矢不一定是$\hat{B}$的本征矢．

但我们可以选取一组基矢，由$\hat{A}$和$\hat{B}$的共同本征函数组

又因为每个$\mathcal{E}_n$空间都可做同样处理

$\Longrightarrow$ 得到 $\mathcal{E}$空间的由$\hat{A}$和$\hat{B}$共同本征函数组构成的基．

Q.E.D

逆定理：

如果存在由$\hat{A}$和$\hat{B}$的共同本征函数构成的基，

则 $[\hat{A},\hat{B}]=0$．

$$\left.\begin{array}{l}\hat{A}\,U_{n,p}^{i}=a_n U_{n,p}^{i}\\ \hat{B}\,U_{n,p}^{i}=b_p U_{n,p}^{i}\end{array}\right. \Rightarrow \left\{\begin{array}{l}\hat{A}\hat{B}\,U_{n,p}^{i}=b_p\hat{A}\,U_{n,p}^{i}=b_p a_n U_{n,p}^{i}\\ \hat{B}\hat{A}\,U_{n,p}^{i}=a_n\hat{B}\,U_{n,p}^{i}=a_n b_p U_{n,p}^{i}\end{array}\right.$$

上下相减得

$$[\hat{A},\hat{B}]\,U_{n,p}^{i}=0$$

假设$\{U_{n,p}^{i}\}$是　正交归一完备的基矢，

则 $[\hat{A},\hat{B}]=0$

注意：完全 complete

可观测量算符的完全集合

1) $\hat{A}$：ε空间 无简并，每个本征子空间都是1维的

$\{u_n\}$ （$g_{u_n}=1$）

→ $\hat{A}$本身构成一个力学量完全集

2) $\hat{A}$有简并（即使仅有1个简并本征值）

a_n：$\{u_n^i\}$ 无法确定基矢

→ 有多个独立矢量对应同一个简并本征值

→ 并非是唯一的，ε_n本征子空间基矢可任意选择

取另一个算符$\hat{B}$，$[\hat{A},\hat{B}]=0$

如果$\hat{A}$和$\hat{B}$的共同本征函数组构成一个正交归一基，并且这个基是唯一的（每个基矢可以相差一个相位因子）

⇒ $\hat{A}$和$\hat{B}$构成一个完全集

注意：如果$\hat{B}$的本征函数无简并

⇒ $\hat{B}$自己本身就构成一个力学量完全集

→ 或者，如果对于每一对本征值(a_n, b_p)只有一个基矢

则$\hat{A}$和$\hat{B}$构成完全集

3) 如果 (a_n, b_p) 中的某一组或多组，存在着若干个独立矢量

则 集合 $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ 是不完全的

$\Longrightarrow$ 引入第3个算符 $\hat{C}$. $[\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0$

寻找 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ 的共同本征函数

如果 (a_n, b_p, c_r) 对应的基矢仅有1个，

$\Longrightarrow$ $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}\}$ 构成完全集。

定义②

力学量算符 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \cdots$ 的一个集合成为

可观测量完全集的条件是：

存在着由共同本征函数构成一个正交归一基，

并且这个基是唯一的（除~~相位~~倍乘因子以外）

或定义① $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}\cdots$ 的一个集合是力学量完全集的条件是

(1) 所有算符两两对易

(2) 给出全体算符的本征值的一个数组，便足以决定唯一的一个共同本征函数（除倍乘因子以外）

注意:

1) 如果 $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ 是 CSCO，添加任意一个和 $\hat{A}$ $\hat{B}$ 对易的 $\hat{C}$ 便可得到另一个 CSCO

我们常约定只考虑"最小"的集合

最小：去掉任意一个就不是 CSCO 了.

2) 对于一个给定的物理体系，CSCO 可以是不止一个。

例如. 3d 自由粒子

$\{\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z\}$, $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$

本征函数对易子的物理意义 —— 可观测量的相容性

相容性和对易性

1) $[\hat{A},\hat{B}]=0$ ⟹ 存在共同本征函数组构成基矢，记作 $U^{i}_{a_n,b_p}$

$$\hat{A}\,U^{i}_{a_n,b_p}=a_n\,U^{i}_{a_n,b_p}$$ i 标记简并

$$\hat{B}\,U^{i}_{a_n,b_p}=b_p\,U^{i}_{a_n,b_p}$$

在 $U^{i}_{a_n,b_p}$ 波函数中测 A 得 a_n，测 B 得 b_p

⟹ 可以同时确定的可观测量叫做相容力学量

2) 反之，$[\hat{A},\hat{B}]\neq0$，

一般来说，一个波函数不可能同时是 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征函数，

也许有些波函数可以同时是 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的本征函数，

但这些波函数的个数不足以构成一组正交归一基

⟹ $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 两个力学量不相容。

例如：在任意归一化的初态 ψ 中测 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$。设 $[\hat{A},\hat{B}]=0$
相容

$$\psi(x,t)=\sum_{n,p,i} C_{n,p}^{i}\, u_{a_n,b_p}^{i}$$

① 刚测 $\hat{A}$ 之后在体系来不及演化前测 $\hat{B}$.

$\Rightarrow$ 第1次测得 a_n 和第2次得 b_p 的几率 $P(\underset{1}{a_n},\underset{2}{b_p})$

$$\psi \xrightarrow{a_n} \psi_n' \qquad P(a_n)=\sum_{p,i}|C_{n,p}^{i}|^2$$

$$\psi_n'=\frac{1}{\sqrt{\sum_{p,i}|C_{n,p}^{i}|^2}}\sum_{p,i} C_{n,p}^{i}\, u_{a_n,b_p}^{i}$$

$$\psi_n' \xrightarrow{b_p} u_{a_n,b_p}^{i}$$

$$P_{a_n}(b_p)=\frac{1}{\sum_{p,i}|C_{n,p}^{i}|^2}\sum_{i}|C_{n,p}^{i}|^2$$

故而"复合"几率

$$P(a_n,b_p)=P(a_n)\times P_{a_n}(b_p)=\sum_{i}|C_{n,p}^{i}|^2$$

此后波函数

$$\psi_{n,p}''=\frac{1}{\sqrt{\sum_{i}|C_{n,p,i}|^2}}\sum_{i} C_{n,p}^{i}\, u_{a_n,b_p}^{i}$$

② 在初态 Ψ 中刚测 $\hat{B}$ 后在体系未演化前测 $\hat{A}$

$\Longrightarrow$ 第1次得 b_p 和第2次得 a_n 的几率 $P(\underset{1}{b_p}, \underset{2}{a_n}) = ?$

同理：
$$P(b_p, a_n) = P(b_p) \times P_{b_p}(a_n)$$

$$\Psi \xrightarrow{b_p} \Psi_p' : \quad P(b_p) = \sum_{n,i} |C_{n,p}^i|^2$$

$$\Psi_p' = \frac{1}{\sqrt{\sum_{n,i} |C_{n,p}^i|^2}} \sum_{n,i} C_{n,p}^i U_{a_n, b_p}^i$$

$$\Psi_p' \xrightarrow{a_n} \quad U_{b_p, a_n}^i$$

$$P_{b_p}(a_n) = \frac{1}{\sum_{n,i} |C_{n,p}^i|^2} \sum_i |C_{n,p}^i|^2$$

故而
$$P(b_p, a_n) = \sum_i |C_{n,p}^i|^2$$

此后波函数

$$U_{b_p, a_n}^i = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |C_{n,p}^i|^2}} \sum_i C_{n,p}^i U_{a_n, b_p}^i$$

由上可见，

如果两个观测量相容，那么无论测量顺序如何，物理上预言是一样的（假设两次测量之间的时间间隔很小，体系没有时间演化

先测得 a_n，后测得 b_p，或
…… b_p，…… a_n
的几率相同

$$P(a_n, b_p) = P(b_p, a_n) = \sum_i |C_{n,p}^i|^2$$

$$= \sum_i |(u_{a_n, b_p}^i, \psi)|^2$$

此外，在此二种测量之后体系状态是完全相同。

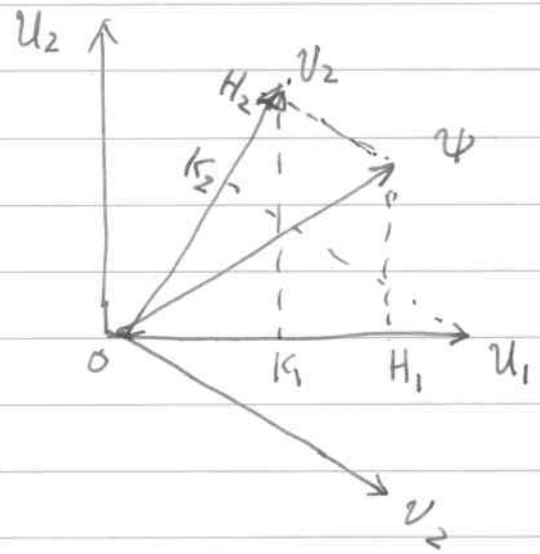
$$u_{n,p}'' = u_{p,n}'' = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |C_{n,p}^i|^2}} \sum_i C_{n,p}^i u_{a_n, b_p}^i$$

⇒ 结论：

① 如果两个可观测量 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是相容的，那么测量 $\hat{A}$ 所得信息并不会因测 $\hat{B}$ 而损失，而且会因而得到补充

② 测量顺序无关。

如果 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 不相容，则结论完全不同



$\hat{A}\,u_1(x) = a_1\,u_1(x)$

$\hat{A}\,u_2(x) = a_2\,u_2(x)$

$\hat{B}\,v_1(x) = b_1\,v_1(x)$

$\hat{B}\,v_2(x) = b_2\,v_2(x)$

$$\psi(x) \xrightarrow[\hat{A}]{a_1} u_1(x) \xrightarrow[\hat{B}]{b_2} v_2(x)$$

$$P(a_1, b_2) = |OH_1|^2 \otimes |OK_2|^2$$

$$\psi(x) \xrightarrow[\hat{B}]{b_2} v_2(x) \xrightarrow[A]{a_1} u_1(x)$$

$$P(b_2, a_1) = |OH_2|^2 \times |OK_1|^2$$

显然 $|OK_1| = |OK_2|$，但 $|OH_1|^2 \neq |OH_2|^2$

$$\Rightarrow P(a_1, b_2) \neq P(b_2, a_1)$$

附注：第2次测量将使第1次测量所得信息丢失