量子力学与统计物理

Quantum mechanics and statistical physics

光电信息学院　王智勇

第四章：表象与矩阵力学

第三讲：幺正变换

问题：

$$\psi(x,t)=\sum_m a_m\phi_m=\sum_n b_n\varphi_n$$

任意态矢量 $\psi(x,t)$

在A表象： $\{\ \phi_\alpha\ \}$

在B表象： $\{\ \varphi_n\ \}$

$$a=\begin{pmatrix}a_1(t)\\ \vdots\\ a_\alpha(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$$

?

如何变换

$$b=\begin{pmatrix}b_1(t)\\ \vdots\\ b_n(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$$

答： **幺正变换**

1、定义：

什么是幺正变换？

答：通过幺正矩阵联系起来的变换！

什么是幺正矩阵？

答：对于一个矩阵，如果它的厄米共轭矩阵等于它的逆矩阵，则称为幺正矩阵

$$S^{\dagger} = (S^{T})^{*} = (S^{*})^{T} = S^{-1}$$

$$\Updownarrow$$

注：厄米共轭=复共轭+转置

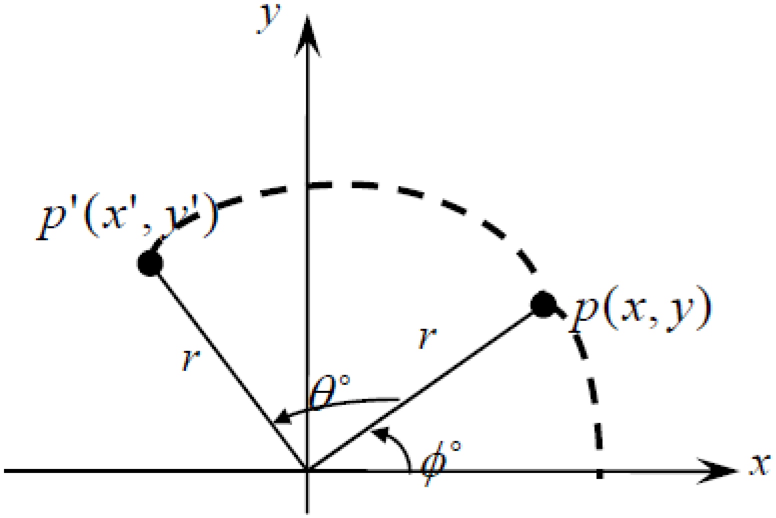
也可定义为：

$$S^{\dagger}S = SS^{\dagger} = I$$

例如：二维平面矢量绕原点的旋转变换矩阵是幺正矩阵

$$\begin{cases} x' = x\cos\theta - y\sin\theta \\ y' = x\sin\theta + y\cos\theta \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$



$$R_\theta = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \qquad R_\theta^+ = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

$$R_\theta^+ R_\theta = R_\theta R_\theta^+ = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I$$

即正交变换矩阵，是一种特殊的幺正矩阵（实幺正矩阵）

同理：在同一个矢量空间中，从一种坐标基到另一种坐标基之间的变换矩阵，是幺正矩阵

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_x \\ \boldsymbol{e}_y \\ \boldsymbol{e}_z \end{pmatrix} \Longleftrightarrow \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_r \\ \boldsymbol{e}_\theta \\ \boldsymbol{e}_\varphi \end{pmatrix}$$

$$S_{n\beta} = (\boldsymbol{e}_n, \boldsymbol{e}_\beta) = \boldsymbol{e}_n \cdot \boldsymbol{e}_\beta$$

$$\beta = x, y, z$$

$$n = r, \theta, \varphi$$

2. 量子力学中，不同表象基组之间的变换矩阵是幺正矩阵

Proof:

将 $\hat{A}$ 的本征函数系 $\{\psi_\alpha(x)\}$ 按 $\hat{B}$ 的本征函数集 $\{\varphi_n(x)\}$ 展开：

$$\psi_\beta(x)=\sum_n S_{n\beta}\varphi_n(x)=\sum_n \varphi_n(x)S_{n\beta}\Rightarrow \psi=\varphi S, \qquad (1)$$

$$\psi_\alpha^*(x)=\sum_m S_{m\alpha}^*\varphi_m^*(x)=\sum_m \varphi_m^*(x)S_{m\alpha}^*\Rightarrow \psi^*=\varphi^* S^*, \qquad (2)$$

$$\begin{pmatrix}\psi_1 & \psi_2 & \dots & \psi_\beta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi_1 & \varphi_2 & \dots & \varphi_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \dots & S_{1\beta}\\ S_{21} & S_{22} & \dots & S_{2\beta}\\ \dots & \dots & \dots & \dots\\ S_{n1} & S_{n2} & \dots & S_{n\beta}\end{pmatrix}, \quad (1)$$

用基$\{\varphi_n(x)\}$ 展开基$\{\psi_\alpha(x)\}$

展开系数为：

$$\psi_\beta(x) = \sum_n S_{n\beta}\varphi_n(x), \qquad (1)$$

$$\psi_\alpha^*(x) = \sum_m S_{m\alpha}^*\varphi_m^*(x), \qquad (2)$$

$$S_{n\beta} = \int \varphi_n^*(x)\psi_\beta(x)\mathrm{d}x, \qquad (3)$$

$$S_{m\alpha}^* = \int \varphi_m(x)\psi_\alpha^*(x)\mathrm{d}x, \qquad (4)$$

注意展开系数的下标顺序，左右不能随意颠倒，分别对应矩阵元的行与列

归一化

$$\delta_{\alpha\beta} = \int \psi_\alpha^*(x)\psi_\beta(x)\mathrm{d}x = \sum_{mn}\int S_{\alpha m}^*\varphi_m^*(x)S_{\beta n}\varphi_n(x)\mathrm{d}x$$

$$= \sum_{mn} S_{m\alpha}^* S_{n\beta}\int \varphi_m^*(x)\varphi_n(x)\mathrm{d}x = \sum_{mn} S_{m\alpha}^* S_{n\beta}\delta_{nm} = \sum_m S_{m\alpha}^* S_{m\beta}$$

$$= \sum_m (S^\dagger)_{m\alpha}^T S_{m\beta} = \sum_m S_{\alpha m}^\dagger S_{m\beta} = (S^\dagger S)_{\alpha\beta} \Rightarrow S^\dagger S = I$$

利用完备性关系 $$\sum_{\alpha}\psi_{\alpha}^{*}(x)\psi_{\alpha}(x')=\delta(x-x')$$

以及 $$S_{n\alpha}^{*}=\int\varphi_{n}(x)\psi_{\alpha}^{*}(x)\mathrm{d}x,\ S_{m\alpha}=\int\varphi_{m}^{*}(x)\psi_{\alpha}(x)\mathrm{d}x$$

同理有

$$(SS^{\dagger})_{mn}=\sum_{\alpha}S_{m\alpha}S_{\alpha n}^{\dagger}=\sum_{\alpha}S_{m\alpha}S_{n\alpha}^{*}$$

$$=\sum_{\alpha}\int\varphi_{m}^{*}(x')\psi_{\alpha}(x')\mathrm{d}x'\int\varphi_{n}(x)\psi_{\alpha}^{*}(x)\mathrm{d}x$$

$$=\int\int\varphi_{m}^{*}(x')\varphi_{n}(x)\sum_{\alpha}\psi_{\alpha}^{*}(x)\psi_{\alpha}(x')\mathrm{d}x'\mathrm{d}x$$

$$=\int\int\varphi_{n}^{*}(x')\varphi_{m}(x)\delta(x-x')\mathrm{d}x'\mathrm{d}x$$

$$=\int\varphi_{n}^{*}(x)\varphi_{m}(x)\mathrm{d}x=\delta_{nm}\Rightarrow SS^{\dagger}=I$$

即S是幺正矩阵

$$S^{\dagger}S = SS^{\dagger} = I$$

$$\boxed{S_{n\beta} = \int \varphi_n^*(x)\psi_\beta(x)\mathrm{d}x}$$

由基变换的矩阵形式（其中基构成行矩阵），有

$$\psi = \varphi S \Rightarrow \varphi = \psi S^{-1} = \psi S^{\dagger}$$

上面的推导过程，用矩阵元表达，则为

$$\psi_\beta = \sum_n \varphi_n S_{n\beta},\ \text{同时右乘}S^{\dagger}_{\beta m},\ \text{并对}\beta\text{求和，得：}$$

$$\sum_\beta \psi_\beta S^{\dagger}_{\beta m} = \sum_n \sum_\beta \varphi_n S_{n\beta} S^{\dagger}_{\beta m} = \sum_n (SS^{\dagger})_{nm}\varphi_n$$

$$= \sum_n \delta_{nm}\varphi_n = \varphi_m \Rightarrow \varphi_m = \sum_\beta \psi_\beta S^{\dagger}_{\beta m}$$

3. 同一力学量在不同表象之间的变换是幺正变换

Proof ：

算符 $\hat{F}$ 在 A 表象 $\{\psi_\beta\}$ 中的矩阵表示为 $F_{\alpha\beta}$ ，在 B 表象 $\{\varphi_m\}$ 中的矩阵表示为 F'_{mn}

$$F_{\alpha\beta} = \int \psi_\alpha^*(x)\hat{F}\psi_\beta(x)\mathrm{d}x \Leftrightarrow F'_{mn} = \int \varphi_m^*(x)\hat{F}\varphi_n(x)\mathrm{d}x$$

其中

$$\psi_\beta(x) = \sum_n \varphi_n(x) S_{n\beta}$$

$$\varphi_m(x) = \sum_\beta \psi_\beta(x) S_{\beta m}^\dagger$$

$$S_{n\beta} = \int \varphi_n^*(x)\psi_\beta(x)\mathrm{d}x$$

1) $\because\ \varphi_m^*(x)=[\sum_\alpha \psi_\alpha(x)S_{\alpha m}^\dagger]^*=\sum_\alpha \psi_\alpha^*(x)S_{m\alpha},\ \varphi_n(x)=\sum_\beta \psi_\beta(x)S_{\beta n}^\dagger$

$$\therefore\ F'_{mn}=\int \varphi_m^*(x)\hat{F}\varphi_n(x)\mathrm{d}x=\int \sum_\alpha \psi_\alpha^*(x)S_{m\alpha}\hat{F}\sum_\beta \psi_\beta(x)S_{\beta n}^\dagger \mathrm{d}x$$

$$=\sum_{\alpha\beta} S_{m\alpha}\int \psi_\alpha^*(x)\hat{F}\psi_\beta(x)\mathrm{d}x S_{\beta n}^\dagger=\sum_{\alpha\beta} S_{m\alpha}F_{\alpha\beta}S_{\beta n}^\dagger=(SFS^\dagger)_{mn}$$

$$\Rightarrow F'=SFS^\dagger$$

2) 同理 $\because\ \psi_\alpha^*(x)=\sum_m S_{\alpha m}^\dagger \varphi_m^*(x),\ \psi_\beta(x)=\sum_n S_{n\beta}\varphi_n(x)$

$$\therefore\ F_{\alpha\beta}=\int \psi_\alpha^*(x)\hat{F}\psi_\beta(x)\mathrm{d}x=\sum_{m,n} S_{\alpha m}^\dagger\int \varphi_m^*(x)\hat{F}\varphi_n(x)\mathrm{d}x S_{n\beta}$$

$$=\sum_{m,n} S_{\alpha m}^\dagger F'_{mn}S_{n\beta}=(S^\dagger F'S)_{\alpha\beta}\Rightarrow F=S^\dagger F'S$$

事实上，由于S是幺正矩阵，以上两个结果可以互推

$$F'=SFS^\dagger \Leftrightarrow F=S^\dagger F'S$$

4. 态矢量在不同表象中的变换是幺正变换

任意态矢量 $\psi(x,t)$

在A表象： $\{\phi_\beta\}$

在B表象： $\{\ \varphi_n\ \}$

$$\psi_{(A)} = a = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ \vdots \\ a_\beta(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

?

如何变换

$$\psi_{(B)} = b = \begin{pmatrix} b_1(t) \\ \vdots \\ b_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\psi(x,t) = \sum_\beta a_\beta(t)\phi_\beta(x) \qquad \psi(x,t) = \sum_n b_n(t)\varphi_n(x)$$

注意从这里开始，A表象基矢符号跟前面不同

$$\sum_{\alpha} a_{\alpha}(t)\phi_{\alpha}(x) = \sum_{n} b_n(t)\varphi_n(x)$$

$$S_{n\beta} = \int \varphi_n^*(x)\phi_\beta(x)\mathrm{d}x$$

$$S_{n\beta}^* = \int \varphi_n(x)\phi_\beta^*(x)\mathrm{d}x$$

$$= S_{\beta n}^\dagger = \int \phi_\beta^*(x)\varphi_n(x)\mathrm{d}x$$

两边左乘 $\phi_\beta^*(x)$ **，并对** x **积分**

$$\sum_{\alpha} a_{\alpha}(t)\int \phi_\beta^*(x)\phi_\alpha(x)\mathrm{d}x = \sum_{n} b_n(t)\int \phi_\beta^*(x)\varphi_n(x)\mathrm{d}x$$

$$\delta_{\beta\alpha} \qquad\qquad S_{\beta n}^\dagger$$

$$a_\beta = \sum_n S_{\beta n}^\dagger b_n \Leftrightarrow a = S^\dagger b$$

同理可证

$$b_m = \sum_\alpha S_{m\alpha} a_\alpha \Leftrightarrow b = Sa$$

矢量变换与基矢变换进行对比

1）B表象 $\rightarrow$ A表象

态矢：$a_\beta = \sum_n S^\dagger_{\beta n} b_n$，或 $a = S^\dagger b$

基矢：$\phi_\beta = \sum_n \varphi_n S_{n\beta}$，或 $\phi = \varphi S$

2）A表象 $\rightarrow$ B表象

态矢：$b_m = \sum_\alpha S_{m\alpha} a_\alpha$，或 $b = Sa$

基矢：$\varphi_n = \sum_\beta \phi_\beta S^\dagger_{\beta n}$，或 $\varphi = \phi S^\dagger$

课外阅读： 下式可以看做是基矢行矩阵与系数列矩阵的乘积

$$\psi(x,t)=\sum_\alpha a_\alpha(t)\phi_\alpha(x)=\phi a=\sum_n b_n(t)\varphi_n(x)=\varphi b, \quad (1)$$

利用 $\varphi=\phi S^\dagger,\ b=Sa,\ SS^\dagger=S^\dagger S=I$

有 $\psi=\phi a=\phi S^\dagger S a=(\phi S^\dagger)(Sa)=\varphi b$

这正符合(1)式

$$\phi a=\sum_\alpha a_\alpha\phi_\alpha=\sum_n b_n\varphi_n=\varphi b$$

$$\begin{pmatrix}\phi_1 & \phi_2 & \ldots & \phi_\alpha & \ldots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ \ldots\\ a_\alpha\\ \ldots\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi_1 & \varphi_2 & \ldots & \varphi_n & \ldots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_1\\ b_2\\ \ldots\\ b_n\\ \ldots\end{pmatrix}$$

$$b_m = \sum_{\alpha} S_{m\alpha} a_\alpha \Leftrightarrow \psi_{(\mathrm{B})} = S\psi_{(\mathrm{A})},\ a_\beta = \sum_n S^\dagger_{\beta n} b_n \Leftrightarrow \psi_{(\mathrm{A})} = S^\dagger \psi_{(\mathrm{B})}$$

$$\begin{pmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \\ \cdots\cdots \\ b_m(t) \\ \cdots\cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots\cdots & S_{1\alpha} & \cdots\cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots\cdots & S_{2\alpha} & \cdots\cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots\cdots & \cdots & \cdots\cdots \\ S_{m1} & S_{m2} & \cdots\cdots & S_{m\alpha} & \cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots & \cdots\cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \cdots\cdots \\ a_\alpha(t) \\ \cdots\cdots \end{pmatrix}$$

简写为 $b = Sa$ （即简写成：$a = \psi_{(\mathrm{A})}$，$b = \psi_{(\mathrm{B})}$）

反之， $\boxed{a = S^\dagger b = S^{-1} b}$

5. 幺正变换的两个重要性质

性质1：幺正变换不改变算符的本征值

算符 $\hat{F}$ 在 A 表象中的矩阵为 F，本征矢为 a

本征方程 $$Fa = \lambda a \qquad (1)$$

$\hat{F}$ 在 B 表象中的矩阵为 F'，本征矢为 b

本征方程 $$F'b = \lambda' b$$

$$b = Sa$$

$$F' = SFS^{\dagger}$$

$$\left(SFS^{\dagger}\right)Sa = \lambda' Sa$$

$$SFa = \lambda' Sa \longrightarrow Fa = \lambda' a \qquad (2)$$

比较(1)、(2)式，可知 $\lambda' = \lambda$ 证毕

例：设在某表象h_0中，系统的哈密顿量为

$$H=\begin{pmatrix}2\varepsilon & 0 & \varepsilon\\ 0 & 2\varepsilon & 0\\ \varepsilon & 0 & 2\varepsilon\end{pmatrix}$$

求由H到对角化矩阵h_0的变换矩阵S

$$h_0=S^\dagger HS$$

$$=\begin{pmatrix}\varepsilon & 0 & 0\\ 0 & 2\varepsilon & 0\\ 0 & 0 & 3\varepsilon\end{pmatrix}$$

解：

$$\begin{pmatrix}2\varepsilon & 0 & \varepsilon\\ 0 & 2\varepsilon & 0\\ \varepsilon & 0 & 2\varepsilon\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ a_3\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ a_3\end{pmatrix}$$

得：$E_1=\varepsilon$ $\quad E_2=2\varepsilon$ $\quad E_3=3\varepsilon$

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix}\qquad \psi_2=\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix}\qquad \psi_3=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 1\end{pmatrix}\Rightarrow S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & \sqrt{2} & 0\\ -1 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

性质2： 幺正变换不改变矩阵的迹

矩阵A的对角元素之和称为矩阵A的迹，用 $\mathrm{tr}(A)$ **表示，则**

$$\mathrm{tr}(A)=\sum_{n} A_{nn}$$

有性质： $\mathrm{tr}(AB)=\mathrm{tr}(BA)$

$$\mathrm{tr}(\mathrm{AB})=\sum_{i=1}^{n}(\mathrm{AB})_{ii}=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\mathrm{A}_{ij}\mathrm{B}_{ji}=\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{n}\mathrm{B}_{ji}\mathrm{A}_{ij}=\sum_{j=1}^{m}(\mathrm{BA})_{jj}=\mathrm{tr}(\mathrm{BA})$$

Proof:

$$F'=SFS^{\dagger}$$

$$\mathrm{tr}(F')=\mathrm{tr}\left(SFS^{\dagger}\right)=\mathrm{tr}\left(S^{\dagger}SF\right)=\mathrm{tr}(F)$$

例1：设算符$\hat{F}$在表象A中的矩阵为

$$F=\begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix}$$ 其中θ为常数，求：

（1）$\hat{F}$的本征值和在A表象中的正交归一本征函数；

（2）求使矩阵F对角化的幺正矩阵S。

解：(1) $\hat{F}$在 A 表象中的本征方程为

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

即
$$\begin{pmatrix} -\lambda & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & -\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0$$

可改写为
$$\begin{cases} -\lambda a_1 + e^{i\theta} a_2 = 0 \\ e^{-i\theta} a_1 - \lambda a_2 = 0 \end{cases} \qquad (1)$$

上式有非平庸解的条件是
$$\begin{vmatrix} -\lambda & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0$$

解得 $\lambda = +1, \qquad -1$

将$\lambda = +1$代入方程（1）可得：$a_1 = e^{i\theta} a_2$

则本征函数为 $\psi_1 = a_2 \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}$

利用归一化条件 $\psi^+\psi = 1$ 得： $a_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$

则

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}$$

同理，当$\lambda = -1$时，代入方程，得：

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ -1 \end{pmatrix}$$

（2） 为找出能使矩阵 F 对角化的幺正矩阵 S ，我们将本征函数 ψ_1 、ψ_2 按列排列，得：

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{i\theta}\\1\end{pmatrix}\quad \psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{i\theta}\\-1\end{pmatrix}$$

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{i\theta}&e^{i\theta}\\1&-1\end{pmatrix}\qquad S^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{-i\theta}&1\\e^{-i\theta}&-1\end{pmatrix}$$

验证：

$$F'=S^{\dagger}FS=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\exp(-\mathrm{i}\theta)&1\\\exp(-\mathrm{i}\theta)&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&\exp(\mathrm{i}\theta)\\\exp(-\mathrm{i}\theta)&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\exp(\mathrm{i}\theta)&\exp(\mathrm{i}\theta)\\1&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

$$F'=\begin{pmatrix}\lambda_1&0\\0&\lambda_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

例2：已知在x表象中有对易关系 $x\hat{p}_x - \hat{p}_x x = i\hbar$

先求它在p表象中的形式，然后证明：在任一表象Q中，这种对易关系也保持不变

解： 在p表象中： $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}$ $\hat{p}_x = p_x$

$$\hat{x}\hat{p}_x \psi(p_x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}(p_x \psi(p_x))$$

$$= i\hbar \psi(p_x) + p_x i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}(\psi(p_x))$$

$$\hat{p}_x \hat{x} \psi(p_x) = p_x i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}(\psi(p_x))$$

$$\hat{x}\hat{p}_x \psi(p_x) - \hat{p}_x \hat{x} \psi(p_x) = i\hbar \psi(p_x)$$

$$\hat{x} p_x - p_x \hat{x} = i\hbar$$

Proof: 设，x和p算符经幺正变换后，在Q 表象中表示为：

$$x' = S^{-1} x S$$

$$\hat{p}'_x = S^{-1} \hat{p}_x S$$

$$x'\hat{p}'_x - \hat{p}'_x x' = S^{-1} x S S^{-1} \hat{p}_x S - S^{-1} \hat{p}_x S S^{-1} x S$$

$$= S^{-1} x \hat{p}_x S - S^{-1} \hat{p}_x x S$$

$$= S^{-1} (x \hat{p}_x - \hat{p}_x x) S$$

$$= i\hbar S^{-1} S$$

$$= i\hbar$$

推广：

1、量子体系进行任一幺正变换不改变它的全部物理内容。

2、两个量子体系，如能用某个幺正变换联系起来，则它们在物理上就是等价的。

作业1：已知力学量算符 $\hat{S}_x$ 在某表象中的矩阵为

$$S_x = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

求能使它对角化的幺正矩阵 S

作业2：求由坐标表象向动量表象变换的幺正矩阵 S

作业3：证明宇称算符的矩阵即是厄密矩阵又是幺正矩阵