**算符的矩阵表示**

2014/12/16

(未完成)

(一定要强调一下计算矩阵元的方法)

考虑一个比较基本的问题, 算符的"功能"是什么呢? 算符就是对函数的一种操作方法. 给出一个波函数, 经过算符作用, 可以得到一个新的波函数.

以下给出量子力学中算符的两个重要性质

1.算符都是线性的, 即对任意*n*个波函数, 算符满足



2.算符的本征方程的本征值都是实数. 因为根据测量理论, 本征值就是可能出现的测量结果, 所以本征值一定是实数.

我们已经知道, 波函数可以用列向量表示(链接未完成, 词条在哪里?). 既然算符都是线性的, 而矩阵可以表示列向量的线性变换, 是否可以用矩阵代替算符, 从而作用于列向量呢?

根据性质1, 若是算符的本征函数, 是对应的本征值(实数), 则



若把上面的波函数表示成列矢量, 就相当于在算符的作用下, 任意一个列矢量总是会变成. 这个变换可以用矩阵来表示, 即



所以矩阵就是算符的矩阵形式, 把算符作用在波函数上得到新的波函数, 等效于把算符对应的矩阵作用在波函数对应的列矢量上, 得到新的波函数对应的列矢量.

用矩阵和列向量表示的本征方程如下



解得时,  ... 时, 

而正是波函数对应的列向量.

算符的矩阵表示(2)

上面的讨论中用矩阵表示算符, 其局限性在于, 只能使用的本征函数作为基底. 现在若用其他基底(正交归一的), 能否求出算符对应的矩阵呢?

下面讨论中, 为了避免混淆, 用表示波函数以为基底的列矢量, 表示波函数以为基底的列矢量.

现取任意一波函数, , . 虽然他们表示同一个波函数, 但是由于选取的基底不同, 列向量也不同. 下面讨论他们之间的变换关系.

若把按展开, 有



若把按展开, 有



上式用矩阵和列矢量表示, 即 , 即.

其中矩阵的矩阵元. 叫做基底变换矩阵(或表象变换矩阵).

若令 , 根据前面的内容,  其中.

下面应用基底变换矩阵, 有; . 代入上式得



两边左乘得



令, 得



所以就是要求的矩阵.

下面证明是厄米矩阵

我们先学习所谓幺正矩阵. 这里给出幺正矩阵的一种定义:

若把矩阵的每一列划分成一个列向量, 从左到右分别为, 若满足, 则矩阵叫做幺正矩阵.

容易证明式\*中的就是幺正矩阵(证明略).

性质1: 幺正矩阵一个很重要的性质就是其厄米共轭等于其逆矩阵, 

证明:

要证明, , 只需证明是单位矩阵即可.

根据矩阵乘法的定义, 

根据厄米共轭的定义, 

所以是n阶的单位矩阵. 证毕.

在上文中,是所谓的实数元的对角矩阵, 所以; 另外容易证明, 

所以 . 所以是厄米矩阵.

**算符的矩阵表示**

2014/11/21

三. 算符的矩阵表示(1)

考虑一个比较基本的问题, 算符的"功能"是什么呢? 算符就是对函数的一种操作方法. 给出一个波函数, 经过算符作用, 可以得到一个新的波函数.

以下给出量子力学中算符的两个重要性质

1.算符都是线性的, 即对任意波函数, 算符都满足



2.算符的本征方程的本征值都是实数. 因为根据测量理论, 本征值就是可能出现的测量结果, 所以本征值一定是实数.

我们已经知道, 波函数可以用列向量表示. 既然算符都是线性的, 而矩阵可以表示列向量的线性变换, 是否可以用矩阵代替算符, 从而作用于列向量呢?

根据性质1, 若是算符的本征函数, 是对应的本征值(实数), 则



若把上面的波函数表示成列矢量, 就相当于在算符的作用下, 任意一个列矢量总是会变成. 这个变换可以用矩阵来表示, 即



所以矩阵就是算符的矩阵形式, 把算符作用在波函数上得到新的波函数, 等效于把算符对应的矩阵作用在波函数对应的列矢量上, 得到新的波函数对应的列矢量.

用矩阵和列向量表示的本征方程如下



解得时,  ... 时, 

而正是波函数对应的列向量.

算符的矩阵表示(2)

上面的讨论中用矩阵表示算符, 其局限性在于, 只能使用的本征函数作为基底. 现在若用其他基底(正交归一的), 能否求出算符对应的矩阵呢?

下面讨论中, 为了避免混淆, 用表示波函数以为基底的列矢量, 表示波函数以为基底的列矢量.

现取任意一波函数, , . 虽然他们表示同一个波函数, 但是由于选取的基底不同, 列向量也不同. 下面讨论他们之间的变换关系.

若把按展开, 有



若把按展开, 有



上式用矩阵和列矢量表示, 即 , 即.

其中矩阵的矩阵元. 叫做基底变换矩阵(或表象变换矩阵).

若令 , 根据前面的内容,  其中.

下面应用基底变换矩阵, 有; . 代入上式得



两边左乘得



令, 得



所以就是要求的矩阵.

下面证明是厄米矩阵

我们先学习所谓幺正矩阵. 这里给出幺正矩阵的一种定义:

若把矩阵的每一列划分成一个列向量, 从左到右分别为, 若满足, 则矩阵叫做幺正矩阵.

容易证明式\*中的就是幺正矩阵(证明略).

性质1: 幺正矩阵一个很重要的性质就是其厄米共轭等于其逆矩阵, 

证明:

要证明, , 只需证明是单位矩阵即可.

根据矩阵乘法的定义, 

根据厄米共轭的定义, 

所以是n阶的单位矩阵. 证毕.

在上文中,是所谓的实数元的对角矩阵, 所以; 另外容易证明, 

所以 . 所以是厄米矩阵.