5：基底的变换

#Quantum_Mechanics

假设我们有两个不对易的算符 A, B，那么，态矢就可以由两组基底表示。我们希望考虑这两组基底之间的关系，以及一个态矢在这两组基底下的表示的变换。我们先从考虑基底之间的变换开始：

> Note
>
> 存在一个幺正算符 U 使得 $|b^{(i)}\rangle = U|a^{(i)}\rangle$

证明是显然的，因为这个幺正算符就是 $U = \sum_k |b^{(k)}\rangle\langle a^{(k)}|$。我们有：

$$\langle a^{(k)}|U|a^{(l)}\rangle = \langle a^{(k)}|a^{(l)}\rangle$$

因此，U 在原基底下的矩阵表示是原基底和新基底的内积。在变换一个矢量时，只需要将其乘以 $U^\dagger$：

$$\langle b^{(k)}|\alpha\rangle = \sum_l \langle b^{(k)}|a^{(l)}\rangle\langle a^{(l)}|\alpha\rangle = \sum_l \langle a^{(k)}|U^\dagger|a^{(l)}\rangle\langle a^{(l)}|\alpha\rangle$$

一个算符 X 在新、旧基底下的矩阵表示 X, X' 也满足关系：

$$X' = U^\dagger X U$$

很容易证明，变换前后矩阵的迹是不变的：

$$\sum_{a'} \langle a'|X|a'\rangle = \sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{b''} \langle a'|b'\rangle\langle b'|X|b''\rangle\langle b''|a'\rangle = \sum_{b'}\langle b'|X|b'\rangle$$

一个问题是如何在基底 $\{a'\}$ 下找出算符 B 的本征矢量和本征值，也就是要将 B 在 $\{a'\}$ 下对角化：

$$B|b'\rangle = b'|b'\rangle \Rightarrow \sum_{a'}\langle a''|B|a'\rangle\langle a'|b'\rangle = b'\langle a''|b'\rangle$$

右侧的式子可以使用 B 和 $|b'\rangle$ 在 $\{a'\}$ 下的表示写成 $Bc = \lambda c$ 的形式，从而我们只需计算

$$\det(B - \lambda I) = 0$$

就得到本征值，这与线性代数中学到的完全相同。

> **Note**
>
> 如果两组基 $\{|a'\rangle\}, \{|b'\rangle\}$ 之间可以通过一个幺正算符互相变换，那么我们称 A 和 $UAU^\dagger$ 是幺正等价的，$\{|b'\rangle\}$ 是 $UAU^\dagger$ 的本征矢量，$UAU^\dagger$ 与 A 有相同的本征值。