§4　表象理论

§4.1 矢量和算符的矩阵表示

引言

在前面我们一直用符号$|\psi>$和$|\varphi>$表示矢量，**A, B** 表示算符，用$|\varphi>=A|\psi>$一类公式表示算符与矢量之间的关系。这种表示方法虽然简洁、明确，适于理论推导，但是不够具体。

在这一节我们讨论如何用一组数字来具体表示矢量和算符。这种方法与在三维物理中取一组直角坐标系，把各点的位置矢量用三个数字（**x,y,z**）表示出来类似。

一、表象的概念

首先在矢量空间中选定一组基矢$\{|\varepsilon_i>\}$或者简写为$\{|i>\}, i=1,2,\cdots,n$ ，**n**是空间的维数，可以是无穷大。在物理上总是取**n**个有物理意义的厄米算符构成对易完备组**K**，用它们的共同本征矢量作为基矢：

$$K|i>=k_i|i>$$

在量子力学中，取定这样一组基矢称为取一个表象。这个表象就用算符完备组**K**命名，称为**K**表象。

空间中任意矢量$|\psi>,|\varphi>$（通常是归一化的）都可以用这组基矢来展开，如

$$|\psi> = \sum_i |i><i|\psi> = \sum_i |i>\psi_i, \quad \psi_i = <i|\psi>$$

$$|\varphi> = \sum_j |j><j|\varphi> = \sum_j |j>\varphi_j, \quad \varphi_j = <j|\varphi>$$

式中ψ_i,φ_j分别称为矢量$|\psi>,|\varphi>$在基$|i>,|j>$上的分量（标量，复数）

而$|i>\psi_i,|j>\varphi_j$分别称为矢量$|\psi>,|\varphi>$在基矢$|i>,|j>$上的投影。

为了具体表示一个矢量$|\psi>$，指出它在选定的这组基上的全部分量ψ_i就可以了。

两个矢量的内积也可以用分量来表示：

$$<\varphi|\psi> = \sum_i <\varphi|i><i|\psi> = \sum_i \varphi_i^* \psi_i$$

二、矢量和算符的矩阵表示

设**A**是一个确定的算符，且

$$|\varphi>=A|\psi>$$

用基矢$<j|$做内积，并利用完全性关系，有

$$<j|\varphi>=\sum_i <j|A|i><i|\psi> = \sum_i A_{ji}\psi_i$$

其中$A_{ji}=<j|A|i>$。已知算符**A**和矢量$|\psi>$，就可以算出$|\varphi>$。

实际上，A_{ji}是算符**A**在**K**表象中的矩阵元。如果左右矢及算符都写成矩阵的形式，即

$$|\psi> \to \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \qquad |\varphi> \to \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

$$<\psi| \to (\psi_1^* \ \psi_2^* \cdots \psi_n^*), \ <\varphi| \to (\varphi_1^* \ \varphi_2^* \cdots \varphi_n^*) \tag{4.2}$$

$$A \to \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \tag{4.3}$$

则矢量的相加、数乘和内积，算符的相加和相乘以及算符对矢量的作用等所有的公式，都可以用具体的矩阵表示出来，如

$$<\varphi|\psi> \to (\varphi_1^* \ \varphi_2^* \cdots \varphi_n^*)(\psi_1 \ \psi_2 \cdots \psi_n)^T$$

$$|\varphi> = A|\psi> \to \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \qquad (4.4)$$

$$<\varphi| = <\psi|A \to (\varphi_1^* \ \varphi_2^* \cdots \varphi_n^*) = (\psi_1^* \ \psi_2^* \cdots \psi_n^*) \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \qquad (4.5)$$

对于两个算符的乘积**C=AB,** 有

$$<j|C|i>=<j|AB|i>$$

利用完备性关系，有 $$=\sum_k <j|A|k><k|B|i>$$

于是有

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2n} \\ \cdots & & & \\ C_{n1} & C_{n2} & \cdots & C_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \cdots & & & \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1n} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2n} \\ \cdots & & & \\ B_{n1} & B_{n2} & \cdots & B_{nn} \end{pmatrix}$$

此外，我们知道$|\psi><\varphi|$是一个算符，这个关系也能写成矩阵的形式

$$|\psi><\varphi| \to \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1^* & \varphi_2^* & \cdots \varphi_n^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1\varphi_1^* & \psi_1\varphi_2^* & \cdots & \psi_1\varphi_n^* \\ \psi_2\varphi_1^* & \psi_2\varphi_2^* & \cdots & \psi_2\varphi_n^* \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_n\varphi_1^* & \psi_n\varphi_2^* & \cdots & \psi_n\varphi_n^* \end{pmatrix}$$

这样，通过矢量空间中建立基矢，找到了一种用矩阵具体表示矢量、算符和它们之间关系的一个方法。有了这种方法，便于进行具体的运算和求出具体的结果。

§ 4.2 表象变换

一个空间中有许多不同的基，因此矢量和算符有不同的表象。如果已知一个表象中矢量和算符的矩阵表示，如何求它们在另一个表象中的表示？

一、矢量的表象变换

设有两个表象

K表象: $\{|\varepsilon_i>\}$

L表象: $\{|\nu_\alpha>\}$

$$i,\alpha = 1,2,\cdots,n$$

完全性关系为

$$\sum_i |\varepsilon_i><\varepsilon_i| = 1, \quad \sum_\alpha |\nu_\alpha><\nu_\alpha| = 1$$

两组基元之间的关系为

$$|\nu_\alpha> = \sum_i |\varepsilon_i><\varepsilon_i|\nu_\alpha> = \sum_i |\varepsilon_i> U_{i\alpha}$$

$$|\varepsilon_i> = \sum_\alpha |\nu_\alpha><\nu_\alpha|\varepsilon_i> = \sum_\alpha |\nu_\alpha> U^{-1}_{\alpha i}$$

式中
$$\begin{cases} U_{i\alpha} = <\varepsilon_i|\nu_\alpha> \\ U^{-1}_{\alpha i} = <\nu_\alpha|\varepsilon_i> \end{cases}$$

U: 表示L→K的表象变换

$U_{i\alpha}$是一个幺正矩阵的矩阵元，此矩阵的行按照$|\varepsilon_i>$的序号编号，列则按照$|\nu_\alpha>$的序号编号；$U^{-1}_{\alpha i}$是这个幺正矩阵的逆矩阵元，其行列编号与 **U**相反，它们满足

$$\sum_\alpha U_{i\alpha}U^{-1}_{\alpha j}=\delta_{ij}, \quad \sum_i U^{-1}_{\alpha i}U_{i\beta}=\delta_{\alpha\beta}$$

注意：矩阵**U,U**$^{-1}$的行和列是按照不同的基编号的，因此它与一个幺正算符在某表象中的表示矩阵有所不同。

现在设$|\psi>$在**K**表象和**L**表象中的矩阵表示分别为

$$\psi_i=<\varepsilon_i|\psi> \qquad \psi_\alpha=<\nu_\alpha|\psi>$$

即

$$|\psi>=\sum_i|\varepsilon_i><\varepsilon_i|\psi>=\sum_i|\varepsilon_i>\psi_i$$

$$|\psi>=\sum_\alpha|\nu_\alpha><\nu_\alpha|\psi>=\sum_\alpha|\nu_\alpha>\psi_\alpha$$

表象变换就是由一组ψ_i求ψ_α或相反的过程。

设已知一组 ψ_i，则

$$<\nu_\alpha|\psi>=\sum_i<\nu_\alpha|\varepsilon_i><\varepsilon_i|\psi>$$

即

$$\psi_\alpha=\sum_i U_{\alpha i}^{-1}\psi_i$$

或写成矩阵的形式

$$(\psi_\alpha)=(U_{\alpha i}^{-1})(\psi_i)$$

同样有相反的关系

$$\psi_i=\sum_\alpha U_{i\alpha}\psi_\alpha$$

以上两式就是矢量的表象变换。

#

二、算符的表象变换

设算符A在K与L表象中的矩阵分别为 $(A_{ij}),(A_{\alpha\beta})$

$$A_{ij}=<\varepsilon_i|A|\varepsilon_j>, A_{\alpha\beta}=<\nu_\alpha|A|\nu_\beta>$$

于是

$$<\nu_\alpha|A|\nu_\beta>=\sum_i\sum_j<\nu_\alpha|\varepsilon_i><\varepsilon_i|A|\varepsilon_j><\varepsilon_j|\nu_\beta>$$

即

$$A_{\alpha\beta}=\sum_i\sum_j U_{\alpha i}^{-1}A_{ij}U_{j\beta}$$

右边是三个矩阵相乘。相反的关系是

$$A_{ij}=\sum_\alpha\sum_\beta U_{i\alpha}A_{\alpha\beta}U_{\beta j}^{-1}$$

容易看出，表象变换虽改变矢量与算符矩阵表示，但不改变二矢量内积 $<\psi|\varphi>$ 以及 $<\psi|A|\varphi>$ 的数值。

§ 4.3 若干矩阵运算

一、矩阵的迹和行列式

1.矩阵的迹（**trace**）

①定义：设**A**是一个方阵，则**A**的迹定义为其对角元之和，用**trA**表示

$$\operatorname{tr} A = \sum_i A_{ii}$$

②迹的主要性质：

$$\operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA)$$

2.行列式

①定义：**A** 的行列式是将矩阵**A** 的各元看成是一个行列式的相应各元时这个行列式的值，用**detA**表示。

$$\det A = \sum_{abc\cdots n} \varepsilon_{abc\cdots n} A_{a1} A_{b2} A_{c3} \cdots A_{nN}$$

$$= \sum_{abc\cdots n} \varepsilon_{abc\cdots n} A_{1a} A_{2b} A_{3c} \cdots A_{Nn}$$

N是矩阵的阶。式中 $\varepsilon_{abc\cdots n}$ 的定义为

$$\varepsilon_{abc\cdots n} = \begin{cases} 1 & \text{若abc…n是123…N的偶置换} \\ -1 & \text{若abc…n是123…N的奇置换} \\ 0 & \text{其它情况} \end{cases}$$

原序 **1 2 3**

则 **2 3 1** → **1 2 3** 置换**2**次 → 偶置换

而 **3 2 1** → **1 2 3** 置换**3**次 → 奇置换

1

根据这个定义可知，取 N个属于不同行和列元素乘在一起并冠以适当的正负号，将所有可能的这种乘积加起来就是行列式的值。

②行列式最重要的性质：

$$\det(AB)=\det(A)\cdot\det(B)$$

$$
\begin{aligned}
[\text{证}]\det(AB) &= \sum_{abc\cdots n}\varepsilon_{abc\cdots n}(AB)_{a1}(AB)_{b2}\cdots(AB)_{nN} \\
&= \sum_{abc\cdots n}\varepsilon_{abc\cdots n}\sum_{a'}A_{aa'}B_{a'1}\sum_{b'}A_{bb'}B_{b'2}\cdots\sum_{n'}A_{nn'}B_{n'N} \\
&= \sum_{a'b'c'\cdots n'}\left(\sum_{abc\cdots n}\varepsilon_{abc\cdots n}A_{aa'}A_{bb'}\cdots A_{nn'}\right)B_{a'1}B_{b'2}\cdots B_{n'N}
\end{aligned}
$$

将 $a',b',c',\cdots$ 按照从小到大的次序置换排列，有

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{a'b'c'\cdots n'}\left(\varepsilon_{a'b'c'\cdots n'}\det A\right)B_{a'1}B_{b'2}\cdots B_{n'N} \\
&= \det A\sum_{a'b'c'\cdots n'}\varepsilon_{a'b'c'\cdots n'}B_{a'1}B_{b'2}\cdots B_{n'N} \\
&= \det A\cdot\det B
\end{aligned}
$$

#

二、矩阵的相似变换

1. 定义：

方阵**A**用幺正矩阵**U**所作的如下变换

$$A \rightarrow U^{-1}AU$$

称为相似变换。

有两矩阵**A,B**，若有**U**存在，使得 $B = U^{-1}AU$ 则称**A,B**相似。算符的表象变换就是相似变换。

2. 相似变换的性质：

若**A,B**二矩阵相似，则

$$\mathrm{tr}\,A = \mathrm{tr}\,B$$

$$\det(A) = \det(B)$$

由于算符的表象变换是相似变换，我们定义：

一个算符A的迹和行列式为A在任何表象中的矩阵的迹和行列式。

3. 关于相似变换的一个定理

定理：任何厄米矩阵都可以通过相似变换（实际上是幺正变换）成为对角矩阵。

[证]设在 **n**维空间中取定一个确定的表象后，厄米矩阵**A**便成为某一厄米算符**A** 的表示矩阵，而算符**A**肯定有 **n** 个互相正交的归一化本征矢量 $|\psi^{(i)}>(i=1,2,\cdots,n)$　即

$$\psi^{(1)}=\begin{pmatrix}\psi_1^{(1)}\\ \psi_2^{(1)}\\ \vdots\\ \psi_n^{(1)}\end{pmatrix},\psi^{(2)}=\begin{pmatrix}\psi_1^{(2)}\\ \psi_2^{(2)}\\ \vdots\\ \psi_n^{(2)}\end{pmatrix},\cdots,\psi^{(n)}=\begin{pmatrix}\psi_1^{(n)}\\ \psi_2^{(n)}\\ \vdots\\ \psi_n^{(n)}\end{pmatrix},$$

现在用这些来构造一个幺正矩阵**U**。

取 $U_{ji}=\psi_j^{(i)}$ ，即

$$U=\begin{pmatrix}\psi_1^{(1)} & \psi_1^{(2)} & \cdots & \psi_1^{(n)}\\ \psi_2^{(1)} & \psi_2^{(2)} & \cdots & \psi_2^{(n)}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \psi_n^{(1)} & \psi_n^{(2)} & \cdots & \psi_n^{(n)}\end{pmatrix}$$

这个幺正矩阵**U**就可以把厄米算符**A**对角化。

首先证明**U**是幺正矩阵。

由于$\psi^{(i)}$彼此正交，即

$$<\psi^{(i)}|\psi^{(j)}>=\sum_k \psi_k^{(i)*}\psi_k^{(j)}=\delta_{ij}$$

所以有

$$(U^+U)_{ij}=\sum_k (U^+)_{ik}U_{kj}=\sum_k U_{ki}^*U_{kj} =\sum_k \psi_k^{(i)*}\psi_k^{(j)}=\delta_{ij}$$

从而证明了 $U^+U=I$

同理可证明 $UU^+=I$

所以**U**是幺正的，即

$$U^{-1}=U^+.$$

其次证明厄米矩阵**A**经过**U**的变换后确是对角矩阵

$$A'_{ij}=\left(U^{-1}AU\right)_{ij}=\sum_k\sum_l U^*_{ki}A_{kl}U_{lj}=\sum_k\sum_l \psi_k^{(i)*}A_{kl}\psi_l^{(j)}$$

但 $A|\psi^{(j)}>=a_j|\psi^{(j)}>$ 或 $\sum_l A_{kl}\psi_l^{(j)}=a_j\psi_k^{(j)}$

所以 $A'_{ij}=\sum_k \psi_k^{(i)*}a_j\psi_k^{(j)}=a_j\delta_{ij}$

证明变换后的矩阵A'是一对角矩阵，其对角元即是**A**的本征值。若本征值a_j是**m**重简并的，则a_j在对角元中出现**m**次。

实际上，在证明中所给的幺正矩阵**U**，正是由原来的表象变换到**A**表象的表象变换矩阵，而厄米算符在自身表象中的表示就是对角矩阵。

§4.4 连续本征值的情况

以上对有限维空间的情况作了分析。

对于无穷维空间，若表象基矢是离散的，只要把上面讨论的公式中的取和上限推到无穷大就可以了。而对于表象基矢为连续分布的情况，只能作一些形式上的推广。

一、完备性关系和矢量的表示

设在无穷维空间中取**K**表象，而厄米算符（或完备组）**K**具有在某一区间内的连续本征值谱，即

$$K|k>=k|k>$$

在这种情况下，仍取全部本征矢量的完全性关系

$$\int |k>dk<k|=I$$

此时，对空间任意矢量$|\psi>$和$|\varphi>$，有

$$|\psi>=\int|k>dk<k|\psi>=\int|k>\psi(k)dk$$

$$|\varphi>=\int|k>dk<k|\varphi>=\int|k>\varphi(k)dk$$

式中$\psi(k),\varphi(k)$仍称为矢量$|\psi>,|\varphi>$在基矢$|k>$上的分量。这时它们是**k**的连续复函数，称为$|\psi>,|\varphi>$在**k** 表象中的函数形式。函数形式与矢量本身是等价的。例如，此二矢量的内积可以用函数形式表示出：

$$<\varphi|\psi>=\int<\varphi|k>dk<k|\psi>$$

$$=\int\varphi^{*}(k)\psi(k)dk$$

二、算符的表示

算符A作用于$|\psi>$上得出$|\varphi>$: $|\varphi>=A|\psi>$

在K表象中，我们希望找到与算符A对应的，把$\psi(k)$直接变为$\varphi(k)$的办法。

用左矢$<k|$与上述两边作内积，并利用完备性关系，有

$$<k|\varphi>=\int<k|A|k'>\mathrm{d}k'<k'|\psi>$$

即
$$\varphi(k)=\int A(k,k')\psi(k')\,\mathrm{d}k'$$

可见，算符A在K表象中是变量k和k'的双变量函数，同离散的表象比较很类似。

三、连续表象下矢量和算符的记法

连续表象下函数$\psi(k)$可理解为下标连续改变的列矩阵, 而$A(k,k')$可看成下标连续改变的方阵, 即

$$\psi(k) \to \psi_k \to \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_k \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\varphi^*(k) \to \varphi_k^* \to \begin{pmatrix} \cdots & \varphi_k^* & \cdots \end{pmatrix}$$

$$A(k,k') \to A_{kk'} \to \begin{pmatrix} \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & A_{kk'} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

而所有的运算都是矩阵的乘法。对于连续表象，原来对i的取和改为对k的积分。

这样就把离散表象和连续表象的记法做到了完全的一一对应。

今后为书写方便，约定ψ_i和$\psi(k)$两种写法是完全无区别而任意使用。这样当讨论表象变换，且**K**和**L**中的一方或双方是连续表象时，讨论同样适用。

#