

§ 3 本征矢量和本征值

§ 3.1 定义

一、本征矢量和本征值

对于算符 A ，若有非零矢量 $|\psi\rangle$ 满足下式

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

式中 a 为常数。则 $|\psi\rangle$ 称为算符 A 的本征矢量，而 a 为相应的本征值。

上式称为本征值方程。

本征值一般是复数，但也可以为0.

算符 A 虽然可以不加限制，但是量子力学中用到的主要是厄米算符的本征值问题。

二、厄米算符本征值问题的两个重要性质

1. 在复空间中，厄米算符的本征值都是实数

[证]若 A 是厄米算符，用 $\langle \psi |$ 左乘式 $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$
两边，有

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = a \langle \psi | \psi \rangle$$

已经知道 $\langle \psi | A | \psi \rangle$ 是实数

所以 a 必为实数。

2. 厄米算符属于不同本征值的本征矢量相互正交

[证]设 $A|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle$, $A|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle$

但 $a_1 \neq a_2$

则 $\langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle = a_1 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle$

又
$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle &= \langle A \psi_2 | \psi_1 \rangle \\ &= \langle a_2 \psi_2 | \psi_1 \rangle \\ &= a_2^* \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \\ &= a_2 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \end{aligned}$$

由此得 $a_1 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = a_2 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle$

即 $(a_1 - a_2) \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 0$

但 $a_1 \neq a_2$

所以 $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 0$

即厄米算符属于不同本征值的本征矢量相互正交。

三、本征矢量问题—简并性

1. 问题的提出

厄米算符 A 属于本征值 a 的本征矢量有多少个？

这实际上是一个简并度的问题。

若 $|\psi\rangle$ 是 A 的一个本征矢量，则 $|\psi\rangle c$ 也是属于同一个本征值的本征矢量；

若 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ 都是 A 的本征矢量且本征值相同，则它们的线性叠加 $|\psi_1\rangle c_1 + |\psi_2\rangle c_2$ 也是 A 的属于同一本征值的本征矢量。

所以算符 A 的属于同一个本征值 a 的本征矢量全体构成Hilbert空间中的一个子空间。这个子空间称为算符 A 的属于本征值 a 的本征子空间。

2. 简并

本征子空间的维数 s 称为所属本征值的简并度。这个本征值或这组本征矢量称为是 s 重简并的。

当简并度为1时，通常称为无简并。

为了指出 s 维本征子空间，只需给出其中一组 s 个线性无关的本征矢量即可。

3. 相关的定理

定理：若 A, B 两算符相似，即对于有逆算符 R ，有

$$B = RAR^{-1}$$

则 A, B 有相同的本征值谱，且每一本征值都有相同的简并度。

[证] 设已知 A 的全部本征值和相应的本征矢量，

$$A|\psi_i\rangle = a_i|\psi_i\rangle \quad i=1,2,\dots$$

利用 $R^{-1}R = I$ ，用 R 从左作用上式两边，得

$$RAR^{-1}R|\psi_i\rangle = a_i R|\psi_i\rangle$$

即

$$BR|\psi_i\rangle = a_i R|\psi_i\rangle$$

$$BR|\psi_i\rangle = a_i R|\psi_i\rangle$$

因为 R 有逆，所以 $R|\psi_i\rangle$ 不为零

所以所有 a_i 也都是 B 的本征值。

下面设 A 的一个本征值是 s 重简并的，属于这个本征值的 s 个线性无关本征矢量记为 $|\psi_{i1}\rangle, |\psi_{i2}\rangle, \dots, |\psi_{is}\rangle$ 。

由于 R 有逆， $R|\psi_{i1}\rangle, R|\psi_{i2}\rangle, \dots, R|\psi_{is}\rangle$ 也必为线性无关。

所以算符 B 的属于本征值 a_i 的本征矢量至少为 s 个，即简并度不会比 A 小。另外利用 $A = R^{-1}BR$ 用同样的方法证明 B 的简并度也不会比 A 大。证毕。

用反证法：

如果 $R|\psi_{i1}\rangle, R|\psi_{i2}\rangle, R|\psi_{i3}\rangle$ 线性相关，则存在 c_j ，从而有

$$\sum_j c_j R|\psi_{ij}\rangle = 0$$

比如由此可以得到

$$R|\psi_{i1}\rangle = c_1 R|\psi_{i2}\rangle + c_2 R|\psi_{i3}\rangle$$

因为 R 有逆 R^{-1} ，上式两边用 R^{-1} 作用后有

$$|\psi_{i1}\rangle = c_1 |\psi_{i2}\rangle + c_2 |\psi_{i3}\rangle$$

这与 $|\psi_{i1}\rangle, |\psi_{i2}\rangle, |\psi_{i3}\rangle, \dots$ 线性无关相矛盾。
命题得证。

§ 3.2 本征矢量的完全性

一. 问题的提出

在一个确定的Hilbert空间中，一个厄米算符 A 的本征矢量的情况有两种：

- 1) 不简并的本征矢量是彼此正交的；
- 2) s 重简并的本征值所对应的本征矢量构成一个 s 维的本征子空间，并与那些本征值为其它值的本征矢量正交。

如在上述 s 维子空间中选出 s 个互相正交的本征矢作为代表，那么其线性叠加都是算符 A 的对应于同一本征值的本征矢量。

在进行归一化后,算符 A 的所有不简并和简并的本征矢量为代表就构成了一个正交归一矢量集。若取不简并的本征值的简并度为1,则这个正交归一矢量集里矢量总数是所有本征值简并度之和 $\sum_i s_i$ 。这个总数亦可能是无穷大。

问题：一个厄米算符 A 的本征矢量正交归一集在所在空间中是否完全？

二、完全性和封闭性

一个确定的空间中，一组正交归一矢量集的完全性的含义是：

空间内所有矢量都能表为这个矢量集的线性叠加。

一组正交归一矢量集的封闭性的含义是，这个空间中不存在其它与集内所有矢量都正交的矢量（否则此矢量集应再加一矢量）。

二者的等价性是明显的。对于一般的Hilbert空间，二者是等价的。

对有限维空间予以证明：

定理：在有限维空间中，厄米算符的全部本征矢量构成正交完全集。

[证]：设空间是 n 维的，厄米算符为 A 。我们只需证明在 A 的本征矢量中有 n 个线性无关的即可。

A的本征值方程为 $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$

为求 $|\psi\rangle$ ，在此空间中取一组已知的基矢

$$\{|v_i\rangle\} = \{|i\rangle\}, \quad (i=1,2,\cdots,n)$$

这组基矢共有n个。

将矢量 $|\psi\rangle$ 按照这组基矢展开

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n |i\rangle c_i$$

其中 $c_i = \langle i|\psi\rangle$ 。知道了一组 c_i 就知道了一个 $|\psi\rangle$ 。

将 $|\psi\rangle$ 的展开式代入本征值方程，并用 $\langle j|$ 与方程两边作内积，得

$$\sum_{i=1}^n \langle j|A|i\rangle c_i = a \sum_{i=1}^n \langle j|i\rangle c_i = ac_j$$

$$\sum_{i=1}^n \langle j | A | i \rangle c_i = a \sum_{i=1}^n \langle j | i \rangle c_i = a c_j$$

式中 $\langle j | A | i \rangle = A_{ji}$ 是复数，对于给定的A，它们是已知的，而 c_i 是待求的。

上式是关于未知数 $\{c_i\}$ 线性齐次方程组，可以写成

$$\text{会展开} \left\{ \begin{array}{ll} (A_{11} - a)c_1 + A_{12}c_2 + \cdots A_{1n}c_n = 0 & (j=1) \\ A_{21}c_1 + (A_{22} - a)c_2 + \cdots A_{2n}c_n = 0 & (j=2) \\ \cdots & \cdots \\ A_{n1}c_1 + A_{n2}c_2 + \cdots (A_{nn} - a)c_n = 0 & \end{array} \right.$$

式中 a 是待定的本征值。这一方程有非零解的条件是系数行列式为0：

$$\begin{vmatrix} A_{11} - a & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} - a & \vdots & A_{2n} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} - a \end{vmatrix} = 0$$

这是一关于 a 的 n 次方程，称为久期方程，有 n 个根

$$a^{(1)}, a^{(2)}, \cdots, a^{(n)}$$

当这些根互不相同，对于每一个根 $a^{(k)}$ ，上述方程有一组非零解 $\{c_i^{(k)}\}$ ；

所求得的那些根 $a^{(k)}$ ，就是厄米算符 \mathbf{A} 的本征值。

当每个 $a^{(k)}$ 都不同时，可得线性方程组的 n 组解

$$\{c_i^{(k)}\}, k = 1, 2, \cdots,$$

从而得到相应的 n 个本征矢量 $|\psi^{(k)}\rangle$ 。

前面已经证明过，当本征值不同时，厄米算符的本征矢量互相正交。因此证明了A的这组本征矢量肯定可构成此空间的一组正交完全集。

当系数行列式有等根时，如 $a^{(1)} = a^{(2)} = a^{(3)}$ 是一个三重根，那么对于这个 a 值，不仅系数行列式本身为0，它的 $n-1, n-2$ 阶的全部子行列式也都为0；

对于这样的 a ，齐次方程也有3个线性无关的 $\{c_i^{(1)}\}, \{c_i^{(2)}\}, \{c_i^{(3)}\}$ 。于是对于这个三重简并的本征值，空间中有3个线性无关的本征矢量存在，即有一个三维的本征子空间存在。

总之，在 n 维空间中，不论厄米算符A的本征值有无简并，总有 n 个线性无关的本征矢量存在，总可以构成空间的一组正交完全集。

三、基矢的选择

把一个厄米算符 \mathbf{A} 的全部（彼此正交的）本征矢量编上一定的次序（通常是按照本征值由小到大的次序），就可以构成这个空间的一组正交归一完全集 $\{|\psi^{(i)}\rangle\}$ ，它们满足完全性关系

$$\sum_{i=1}^n |\psi^{(i)}\rangle \langle \psi^{(i)}| = 1$$

可用它们作为这个空间的一组基矢。

当 \mathbf{A} 的本征值没有简并时, 这组 $\{|\psi^{(i)}\rangle\}$ 是完全确定的。而当有简并时，就有许多组这样的正交归一完全集存在，因为在本征子空间中，选取 n 个互相正交的矢量作为代表(不要求归一)，其选法是很多的。

对于无穷维Hilbert空间，厄米算符具有离散本征值的情况，虽然没有经过数学上的一一证明，在物理上总是认为，厄米算符的全部线性无关的本征矢量可以构成此空间的完全集。进行正交化以后，完全性关系成立。写成通常的下标形式，有

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij},$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = 1$$

在物理上，常常用厄米算符的本征矢量去确定一组基矢，甚至用厄米算符的本征矢量去“构造”一个 Hilbert 空间，原因在此。

#

§ 3.3 厄米算符完备组

一、基矢的选择问题

对于一个Hilbert空间，每一个厄米算符的全部线性无关的本征矢量都可以用来构成空间的基矢，即正交归一完全集（条件是厄米算符的定义域和值域都应是全空间）。

但是当此厄米算符的本征值有简并时，对应于这一本征值的线性无关的本征矢量的数目与简并度相同，这时由本征矢量所确定的基矢不是唯一的。

在简并的本征子空间中有多种选择。下面的任务就是设法消除这一不确定性。

二、本征矢量完全性定理

1. 定理:

当且仅当两个粒子的厄米算符互相对易时，它们有一组共同的本征矢量完全集。

[证] 设两个算符是A和B.

(1) 必要性：完全集 \rightarrow 对易

设A和B有一组共同的本征矢量完全集 $\{|i\rangle\}$ ，这时有

$$A|i\rangle = a_i|i\rangle \quad B|i\rangle = b_i|i\rangle$$

则 $AB|i\rangle = A(B|i\rangle) = b_i(A|i\rangle) = a_i b_i|i\rangle$

同样 $BA|i\rangle = a_i b_i|i\rangle$

所以 $(AB - BA)|i\rangle = 0$ 对所有 $|i\rangle$ 都成立。

因为 $|i\rangle$ 是完全的，所以有 $AB - BA = 0$

(2) 充分性：对易 \rightarrow 完全集

设 $\mathbf{AB}=\mathbf{BA}$ ，且 $\{|i\rangle\}$ 是 \mathbf{A} 的一套正交归一化的本征矢量完全集。我们将用后者构造同是 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} 的共同本征矢量完全集。

显然

$$\mathbf{A}(\mathbf{B}|i\rangle) = \mathbf{B}(\mathbf{A}|i\rangle) = a_i(\mathbf{B}|i\rangle)$$

即 $\mathbf{B}|i\rangle$ 也是 \mathbf{A} 的属于本征值 a_i 的本征矢量。

下面分两种情况讨论。

1° \mathbf{A} 的本征值无简并

这时 $\mathbf{B}|i\rangle$ 与 $|i\rangle$ 属于同一个一维本征子空间，它们只能差一个常数倍：

$$B|i\rangle = b_i|i\rangle$$

即 $|i\rangle$ 也同是 B 的本征矢量，常数 b_i 就是 B 的本征值。

如果所有 A 的本征值都没有简并，则 $\{|i\rangle\}$ 就是 A 和 B 的共同本征矢量完全集。

2° A 的本征值有简并

新的问题：在 A 的 $2D$ 以上的本征子空间中随便取一个矢量未必就是 B 的本征矢量。

设 A 的本征值 a_j 有 m 重简并（无简并的前面已经讨论），在 $\{|i\rangle\}$ 中属于这一本征值的本征矢量是 $|j1\rangle, |j2\rangle, \dots, |jm\rangle$ （不见的相互正交,但可以化成正交的），它们是在 m 维子空间中互相正交 m 个矢量的代表。

现在要在这个 m 维本征子空间中寻找一些也是 B 的本征矢量的矢量。设这种矢量是

$$|j'\rangle = \sum_{\alpha=1}^m |j\alpha\rangle C_{\alpha}$$

式中 $\{C_{\alpha}\}$ 是一组叠加系数。这种矢量应该具有 m 个（总维数要求）。

上述矢量成为 B 的本征矢量的条件是

$$\hat{B} \sum_{\alpha=1}^m |j\alpha\rangle C_{\alpha} = b \sum_{\alpha=1}^m |j\alpha\rangle C_{\alpha}$$

用 $\langle j\beta|$ 同上式作内积，利用 $\langle j\beta|j\alpha\rangle = \delta_{\beta\alpha}$ 得

$$\sum_{\alpha=1}^m \langle j\beta|\hat{B}|j\alpha\rangle C_{\alpha} = b C_{\beta} \quad (\beta = 1, 2, \dots, m)$$

这是一个 $\{C_{\alpha}\}$ 的线性齐次方程组，设其系数

$$\langle j\beta | \hat{B} | j\alpha \rangle = B_{\beta\alpha}$$

这一方程组有解的条件是系数行列式为0，即

$$\begin{vmatrix} B_{11} - b & B_{12} & \cdots & B_{1m} \\ B_{21} & B_{21} - b & \cdots & B_{2m} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ B_{m1} & B_{m2} & \cdots & B_{mm} - b \end{vmatrix} = 0$$

根据前面的讨论， b 有 m 个根（其中可能有相同的），对每一个 $b^{(i)}$ ，有一组解 $\{c_{\alpha}^{(i)}\}$ ，即一个矢量 $|j^{(i)}\rangle$ 。

于是我们求得了 m 个矢量 $|j^{(1)}\rangle, |j^{(2)}\rangle, \dots, |j^{(m)}\rangle$ ，它们是A的本征矢量（本征值为 a_j ），同时又是B的本征矢量（本征值为 $b^{(1)}, b^{(2)}, \dots$ ）。

如果对于每个A的简并本征值都经过这样重新选取，就可以得出一个 A和 B的共同本征矢量完全集。至此定理已经证毕。

当b没有等根时，所得的共同本征矢量完全集是完全确定的。

当b有等根时，还有一个一维以上的本征子空间中的所有矢量都同时是A和B的本征矢量，共同本征矢量完全集还有任意性。比如 $|j^{(l)}\rangle$ 和 $|j^{(m)}\rangle$ 都属于本征值 $b^{(k)}$ ，它们的线性组合也属于 $b^{(k)}$ ，这样如何选择完全集就成了问题。在这种情况下，可以再取第三个与 A，B都对易的厄米算符C，以同样的方法用C的本征值来区分，直到这一组本征矢量完全集完全确定为止。

三、厄米算符完备组

定义：对于一个Hilbert空间，一组相互对易的厄米算符 A, B, C, \dots ，它们只有一组完全确定的共同本征矢量完全集，而去掉其中的任意一个，都会使剩下的那些算符的共同本征矢量完全集具有任意性，称它们为一组厄米算符完备组。

这一组本征矢量完全集构成这个Hilbert空间的一组基矢。这组基矢可以分别用它所属算符 A, B, C, \dots 的本征值 a, b, c, \dots 的数值来编号，或者用各自本征值的序号来编号。

厄米算符完备组所包含算符的最少个数？

物理空间的维数。

其实，一个厄米算符的全部线性无关的本征矢量就已然构成空间的基矢。

为何还要增加算符？

增加更多算符的目的：

为减少其中的任意性，最后消除任意性，以便得到一组完全确定的基矢。

以后有时为了方便，我们用单一字母（如A）表示算符的完备组，用单一字母 a_i 表示它们的本征值的集合，用单一字母 I 表示各本征值序号的集合，而用 $\{|a_i\rangle\}$ 表示它们的共同本征矢量，简单地写成

$$A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$$

共同本征矢量的完全性关系简写成

$$\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = 1 \quad \#$$

§ 3.4 无穷维空间的情况

以上我们对有限维矢量空间的情况作了比较完整的讨论。但是在量子力学中更多的是无穷维的矢量空间。这种空间中厄米算符大体上有两种：

- (1) 具有离散的本征值谱，其本征值是可数的无穷多个；
- (2) 具有连续的本征值谱，具有不可数无穷多个本征值和相应的本征矢量。

一、基矢的选择问题

对于这种厄米算符，只需把前面讨论内容加以推广，把取和的上限推到无穷大，而不去仔细考虑由此带来的数学问题。

对于一个对易的厄米算符完备组A，本征矢量用 $|i\rangle$ 表示，满足

$$A|i\rangle = a_i|i\rangle \quad (i=1,2,\cdots)$$

正交归一关系为

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad (i,j=1,2,\cdots)$$

全部本征矢量 $\{|i\rangle\}$ 构成空间的一组基矢，我们直接认为这组基矢是完备的，即

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle \langle i|\psi\rangle$$

完全性关系为

$$\sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle \langle i| = 1$$

$\langle i|\psi\rangle$ 是展开系数。

在一般情况下，基矢这样安排：当 i 增大时， $\langle i | \psi \rangle$ 迅速减小。否则按照公式

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle \psi | i \rangle \langle i | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle i | \psi \rangle|^2$$

归一化条件就很难满足了。

这就是所谓的收敛问题。

二、连续本征值谱的情况

讨论一个无简并的厄米算符或一组对易厄米算符完备组 A 。由于其本征值是连续变化的，无法编号，只好用本征值本身来给本征值编号。本征值方程为

$$A | a \rangle = a | a \rangle$$

其中 a 取某一区间内的全部实数，是一个连续的实变量。

1. 连续本征函数的正交归一关系

设任何归一化的矢量 $|\psi\rangle$ 都可以展开为这组 $\{|a\rangle\}$ 的叠加（用积分表示）

$$|\psi\rangle = \int da |a\rangle \langle a|\psi\rangle$$

积分遍及本征值 a 的取值范围。

上式实际上利用了完全性关系

$$\int da |a\rangle \langle a| = 1$$

$\langle a|\psi\rangle$ 可以认为是展开系数，即矢量 $|\psi\rangle$ 在基矢 $|a\rangle$ 上的分量。这是一个 a 的连续函数，可以写出 $\psi(a)$ ，其函数形式取决于矢量 $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \int da |a\rangle \psi(a)$$

$$|\psi\rangle = \int da |a\rangle \psi(a)$$

现在用本征左矢 $\langle a'|$ 作用上式，有

$$\langle a' | \psi \rangle = \int da \langle a' | a \rangle \psi(a) \quad \text{or}$$

$$\psi(a') = \int da \langle a' | a \rangle \psi(a)$$

式中 $\psi(a')$ 是函数 $\psi(a)$ 在 $a = a'$ 那一点的函数值。

将其与 δ 函数定义式

$$f(x_0) = \int dx \delta(x - x_0) f(x)$$

比较，可见应有

$$\langle a' | a \rangle = \delta(a - a') \quad \text{Dirac } \delta\text{-函数}$$

这是一个很重要的关系，对应于连续本征值谱的情况。

而对于离散本征值谱的情况，其正交归一关系为

$$\langle j | i \rangle = \delta_{ji} \quad \text{Kronecker } \delta\text{-函数}$$

可见，在连续情况下，本征值不同的两本征矢量仍然是正交的。但所有本征矢量的模都是由 δ 函数所描写的无穷大。

尽管如此，我们仍称之为归一化条件，只不过归一化为 δ 函数。

由于 δ 函数的存在，这些连续本征矢量自身的内积将为 ∞ ，但这种本征矢量同Hilbert空间中所有其它归一化矢量 $|\psi\rangle$ 的内积都是有限的，因为

$$\begin{aligned}
 1 = \langle \psi | \psi \rangle &= \int \mathbf{d}a \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle \\
 &= \int \mathbf{d}a |\langle a | \psi \rangle|^2
 \end{aligned}$$

在物理上，具有连续本征值谱的算符是绝对需要的，因而归一化为 δ 函数的本征函数也是必不可少的。

为此我们把严格定义的Hilbert空间加以扩大，把上述那些虽然本身的模并不有限，但与别的矢量的内积为有限这一类矢量包括进来。这样的空间称之为物理的或扩大的Hilbert空间。

#

2. 离散和连续本征值谱同时存在的情况

在量子力学中，还有这样的算符，它的本征值谱在一个区间是连续的，在另一个区间是离散的（如能量本征值谱）。这种情况下完全性关系是

$$\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| + \int da |a\rangle\langle a| = 1$$

正交归一条件是

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \langle a' | a \rangle = \delta(a - a'), \quad \langle a_i | a \rangle = 0$$

在本课中，我们约定，作一般讨论时，使用取和形式或积分形式随意，正确理解即可。