七、量子力学的矩阵形式与表象变换

7.1 量子态的不同表象，幺正变换

在量子力学中，**同一个量子态可以用不同的“表象”（basis）描述**——就像同一张照片可以用黑白或彩色呈现，本质相同但表现形式不同。这种灵活性源于量子力学中“可观测量完全集”的概念：若一组可观测量的本征值能唯一确定体系的状态，则它们构成一个**完备表象**。例如，位置算符$\hat{x}$的本征态$\{|x\rangle\}$构成位置表象，动量算符$\hat{p}$的本征态$\{|p\rangle\}$构成动量表象。

7.1.1 基矢与矢量展开

假设我们有一个平面直角坐标系x_1x_2，其基矢为$\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2$，满足**正交归一条件**：

$$(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2) \tag{1}$$

其中δ_{ij}是克罗内克δ函数（当$i = j$时为1，否则为0）。这组基矢是**完备的**——平面上任意矢量$\boldsymbol{A}$都可以用它们线性展开：

$$\boldsymbol{A} = A_1\boldsymbol{e}_1 + A_2\boldsymbol{e}_2 \tag{2}$$

这里$A_1 = (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{A})$、$A_2 = (\boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{A})$是$\boldsymbol{A}$在两个基矢上的**投影（分量）**，称为$\boldsymbol{A}$在该坐标系下的**表示。**

7.1.2 新坐标系下的表示

现在引入另一个直角坐标系$x_1'x_2'$，它由原坐标系顺时针旋转θ角得到，基矢为$\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2'$，同样满足正交归一：

$$(\boldsymbol{e}_i', \boldsymbol{e}_j') = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2) \tag{1'}$$

矢量$\boldsymbol{A}$在新坐标系下的展开为：

$$\boldsymbol{A} = A_1'\boldsymbol{e}_1' + A_2'\boldsymbol{e}_2' \tag{2'}$$

其中$A_1' = (\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{A})$、$A_2' = (\boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{A})$是新表示。

7.1.3 变换矩阵与幺正性

为了找到新旧表示的关系，我们将式(2)和式(2')联立。利用基矢间的标积关系（如$(\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_1) = \cos\theta$，$(\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2) = -\sin\theta$等），可以得到：

$$\begin{cases} A_1' = A_1\cos\theta + A_2(-\sin\theta) \\ A_2' = A_1\sin\theta + A_2\cos\theta \end{cases}$$

写成**矩阵形式**：

$$\begin{pmatrix} A_1' \\ A_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} \tag{5}$$

记变换矩阵为$\boldsymbol{R}(\theta)$，即：

$$\boldsymbol{R}(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix} \tag{6}$$

关键性质：

- $\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^\dagger=\boldsymbol{R}^\dagger\boldsymbol{R}=\boldsymbol{I}$（$\boldsymbol{I}$为单位矩阵），说明$\boldsymbol{R}$是**幺正矩阵**；
- $\det\boldsymbol{R}=1$，说明$\boldsymbol{R}$是**真正交矩阵**（保持空间定向）。

> 幺正矩阵在量子力学中至关重要！因为它保证**内积不变**（即概率守恒）：若两个态ψ和ϕ在旧表象下的内积为(ψ,ϕ)，经幺正变换后，新表象下的内积仍为$(\psi',\phi')=(\psi,\phi)$。这是量子力学“概率诠释”的核心要求——变换不应改变物理结果的概率。

7.1.4 量子态的表象

类比经典矢量，量子态ψ也可以用**完备基矢**展开。设有一组对易力学量完全集F，其共同本征态为$\{\psi_k\}$（离散谱），满足正交归一：

$$(\psi_k,\psi_l)=\delta_{kl} \tag{10}$$

则ψ可展开为：

$$\psi=\sum_k a_k\psi_k \tag{11}$$

其中系数$a_k=(\psi_k,\psi)$是ψ在F表象下的**表示**（类似经典矢量的分量）。

若另一组对易力学量完全集F'的本征态为$\{\psi'_k\}$，同样正交归一：

$$(\psi'_k,\psi'_l)=\delta_{kl} \tag{12}$$

则ψ也可展开为：

$$\psi=\sum_k a'_k\psi'_k \tag{13}$$

其中$a'_k=(\psi'_k,\psi)$是ψ在F'表象下的表示。

7.1.5 表象变换矩阵

现在问：a'_k与a_k有何联系？将式(11)代入式(13)的左边，得：

$$\sum_k a'_k\psi'_k=\sum_m a_m\psi_m \tag{14}$$

两边左乘ψ'_l并取内积（利用正交归一性），得：

$$a'_l=\sum_m(\psi'_l,\psi_m)a_m \tag{15}$$

定义**表象变换矩阵元**：

$$S_{lm} = (\psi'_l, \psi_m) \tag{16}$$

则式(15)可写成矩阵形式：

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{17}$$

简记为$\boldsymbol{a}' = \boldsymbol{S}\boldsymbol{a}$。

7.1.6 幺正性的证明

变换矩阵$\boldsymbol{S}$必须是**幺正矩阵**，即$\boldsymbol{S}^\dagger\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^\dagger = \boldsymbol{I}$。证明如下：
计算$\boldsymbol{S}^\dagger\boldsymbol{S}$的第$lm$个元素：

$$(\boldsymbol{S}^\dagger\boldsymbol{S})_{lm} = \sum_n S^*_{nl} S_{nm} = \sum_n (\psi_n, \psi'_l)^* (\psi'_n, \psi_m)$$

利用内积的共轭对称性$(\psi_n, \psi'_l)^* = (\psi'_l, \psi_n)$，上式变为：

$$\sum_n (\psi'_l, \psi_n)(\psi'_n, \psi_m) = (\psi'_l, \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi_m)$$

由于$\{\psi_n\}$是完备基，封闭性关系$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \boldsymbol{I}$成立，因此：

$$(\boldsymbol{S}^\dagger\boldsymbol{S})_{lm} = (\psi'_l, \psi_m) = \delta_{lm}$$

即$\boldsymbol{S}^\dagger\boldsymbol{S} = \boldsymbol{I}$，同理可证$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^\dagger = \boldsymbol{I}$。因此，$\boldsymbol{S}$是幺正矩阵，对应的变换称为**幺正变换**。

总结

本章核心是**表象理论**：量子态的本质不依赖于具体表象，但不同表象适用于不同问题（如位置表象便于描述空间分布，动量表象便于描述波动性）。幺正变换则是连接不同表象的桥梁，它保证了量子力学的概率诠释不变——这是量子力学数学框架的自洽性基础。后续章节将进一步讨论Dirac符号和连续谱表象，深入理解量子力学的矩阵形式。