量子力学第七讲：矩阵力学与表象变换

刘宁

2026 年 11 月 15 日

前两讲我们建立了量子力学的一般语言：力学量对应厄米算符，测量可能值由本征值给出，态由希尔伯特空间中的矢量描述；随后又把这套语言用于动量、角动量、中心力场和氢原子。在这些讨论中，我们主要使用坐标表象，把态写成波函数 $\psi(x)$，把算符写成微分算符。但量子力学的结构并不依赖于某一种具体表示。正如三维几何中的矢量既可以用直角坐标描述，也可以用球坐标描述，同一个量子态和同一个算符也可以在不同的“基底”下表示。这种表示方式的选择就是**表象**。

本讲要什么是表象，为什么同一个量子态可以写成不同的列向量或波函数？第二，如果把态写成列向量、把算符写成矩阵，量子力学的全部运算会呈现什么形式？这就是海森堡、玻恩、约当等人发展的**矩阵力学**。第三，不同表象之间如何转换？转换为什么必须保持物理预言不变？这就是**幺正变换**。最后，作为矩阵力学和代数方法的一个重要应用，我们介绍谐振子的**占有数表象**，展示如何用产生、湮灭算符把微分方程问题转化为简洁的代数问题。

1 表象

1.1 从矢量类比引入表象

在三维欧氏空间中，一个速度矢量 $\boldsymbol{v}$ 本身是客观存在的，不依赖于我们选择什么坐标系。但一旦选定一组基矢 $\{\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z\}$，就可以把 $\boldsymbol{v}$ 写成

$$\boldsymbol{v} = v_x \boldsymbol{e}_x + v_y \boldsymbol{e}_y + v_z \boldsymbol{e}_z, \qquad v_i = \boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{v}. \tag{1}$$

如果换一组基矢，矢量 $\boldsymbol{v}$ 本身没有变，但它的分量 (v_x, v_y, v_z) 会变。分量依赖于基矢的选择，而矢量本身不依赖。

量子力学中的情形完全类似。一个量子态是希尔伯特空间中的抽象矢量，称为**状态矢量**，简称**态矢**，用狄拉克符号 $|\psi\rangle$ 表示。$|\psi\rangle$ 本身与具体表示无关，但实际计算中我们总要把它在某组完备基上展开，得到具体分量。这组完备基的选择就称为**表象**。正如速度矢量在不同坐标系中有不同分量，同一个态矢在不同表象中写成不同的波函数或列向量，但它们描述的是同一个物理态。

表象是基矢的选择，分量是态矢在基矢上的投影。坐标表象、动量表象、能量表象，不过是三组不同的“坐标轴”而已。选择哪个表象，取决于问题方便：处理位置相关势能时用坐标表象方便，处理自由粒子或周期性系统时用动量表象方便，处理定态问题时用能量表象方便。

1.2 表象的定义

定义 1.1 (表象). 一个**表象**由一组正交归一完备基矢定义。若基矢是离散的 $\{|\phi_n\rangle\}$，则要求

$$\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn}, \qquad \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{I}. \tag{2}$$

若基矢是连续的 $\{|\phi_\lambda\rangle\}$，则要求

$$\langle\phi_\lambda|\phi_{\lambda'}\rangle = \delta(\lambda-\lambda'), \qquad \int \mathrm{d}\lambda\, |\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda| = \hat{I}. \tag{3}$$

其中 $\hat{I}$ 是单位算符。

正交归一性保证不同基矢可以区分，完备性保证任意态都可以展开。对于离散基，任意态 $|\psi\rangle$ 可写成

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|\phi_n\rangle. \tag{4}$$

两边左乘 $\langle\phi_m|$，利用正交归一性，得到

$$\langle\phi_m|\psi\rangle = \sum_n c_n\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \sum_n c_n\delta_{mn} = c_m. \tag{5}$$

因此

$$c_n = \langle\phi_n|\psi\rangle. \tag{6}$$

代回式 (4)，得到

$$|\psi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi\rangle = \left(\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\right)|\psi\rangle. \tag{7}$$

由于这对任意 $|\psi\rangle$ 成立，括号中的算符必须是单位算符，这就是完备性关系。它与态叠加原理是同一件事的两种说法。

连续谱情形完全类似：任意态写成

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}\lambda\, c(\lambda)|\phi_\lambda\rangle, \tag{8}$$

则

$$c(\lambda) = \langle\phi_\lambda|\psi\rangle, \tag{9}$$

完备性关系为

$$\int \mathrm{d}\lambda\, |\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda| = \hat{I}. \tag{10}$$

1.3 态矢在坐标表象和动量表象中的展开

位置算符 $\hat{x}$ 的本征态 $\{|x\rangle\}$ 构成一组连续完备基，满足

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \qquad \langle x'|x\rangle = \delta(x'-x), \qquad \int \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x| = \hat{I}. \tag{11}$$

任意态矢 $|\psi\rangle$ 可以在这组基上展开。在展开式中插入完备性关系：

$$|\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\, \langle x|\psi\rangle\, |x\rangle. \tag{12}$$

这里 $\langle x|\psi\rangle$ 就是态矢 $|\psi\rangle$ 在基矢 $|x\rangle$ 上的投影，即分量。记

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \tag{13}$$

这就是坐标表象中的波函数。类似地，在动量表象中，以动量本征态 $\{|p\rangle\}$ 为基，

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}p\, |p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int \mathrm{d}p\, \tilde{\psi}(p)\, |p\rangle, \qquad \tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle. \tag{14}$$

$\tilde{\psi}(p)$ 就是动量表象中的波函数。

同一个态 $|\psi\rangle$ 在坐标表象中写成 $\psi(x)$，在动量表象中写成 $\tilde{\psi}(p)$。这两个函数看起来不同，但描述的是同一个物理态。它们之间的关系由基矢之间的重叠 $\langle x|p\rangle$ 决定，这正是后面要讲的表象变换。

1.4 常见的几种表象

表 1 列出量子力学中常用的几种表象。

表象	基矢	波函数	本征方程
坐标表象	位置本征态 $\|x\rangle$	$\psi(x) = \langle x\|\psi\rangle$	$\hat{x}\|x\rangle = x\|x\rangle$
动量表象	动量本征态 $\|p\rangle$	$\tilde{\psi}(p) = \langle p\|\psi\rangle$	$\hat{p}\|p\rangle = p\|p\rangle$
能量表象	能量本征态 $\|E_n\rangle$	$c_n = \langle E_n\|\psi\rangle$	$\hat{H}\|E_n\rangle = E_n\|E_n\rangle$

表 1: 量子力学中的常见表象

波函数 $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ 是态 $|\psi\rangle$ 在位置本征态上的投影振幅，$|\psi(x)|^2$ 给出在 x 处找到粒子的概率密度。这与三维矢量在坐标轴上的投影完全类似：矢量本身是抽象的，分量依赖于坐标轴；态本身是抽象的，波函数依赖于基矢。

2 矩阵力学

2.1 态矢的矩阵表示

一旦选定一组离散正交归一完备基 $\{|\phi_n\rangle\}$，任意态 $|\psi\rangle$ 的展开系数

$$c_n = \langle \phi_n|\psi\rangle \tag{15}$$

就完全确定了这个态。因此我们可以把态表示为一个列向量

$$|\psi\rangle \longleftrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{16}$$

对应的左矢 $\langle\psi|$ 表示为行向量

$$\langle\psi| \longleftrightarrow \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & \cdots & c_n^* & \cdots \end{pmatrix}. \tag{17}$$

内积则写成矩阵乘法：

$$\langle\psi|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_n |c_n|^2. \tag{18}$$

归一化条件 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ 即

$$\sum_n |c_n|^2 = 1. \tag{19}$$

这与第五讲中概率归一化条件完全一致。

2.2 算符的矩阵表示

设算符 $\hat{A}$ 把态 $|\phi\rangle$ 变为 $|\psi\rangle$：

$$|\psi\rangle = \hat{A}|\phi\rangle. \tag{20}$$

在基 $\{|\phi_n\rangle\}$ 下展开：

$$|\psi\rangle = \sum_m c_m|\phi_m\rangle, \qquad |\phi\rangle = \sum_n d_n|\phi_n\rangle. \tag{21}$$

代入式 (20)，并在 $\hat{A}$ 与 $|\phi_n\rangle$ 之间插入完备性关系 $\sum_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m| = \hat{I}$：

$$\begin{aligned} \sum_m c_m|\phi_m\rangle &= \hat{A}\sum_n d_n|\phi_n\rangle \\ &= \sum_n d_n\hat{A}|\phi_n\rangle \\ &= \sum_n d_n \left(\sum_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m|\right)\hat{A}|\phi_n\rangle \\ &= \sum_{m,n} d_n|\phi_m\rangle\langle\phi_m|\hat{A}|\phi_n\rangle. \end{aligned} \tag{22}$$

比较两边 $|\phi_m\rangle$ 的系数，得到

$$c_m = \sum_n A_{mn} d_n, \tag{23}$$

其中

$$A_{mn} = \langle \phi_m | \hat{A} | \phi_n \rangle. \tag{24}$$

这就是算符 $\hat{A}$ 在基 $\{|\phi_n\rangle\}$ 下的矩阵元。式 (23) 用矩阵写出来就是

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{25}$$

因此，算符在选定表象中就是一个矩阵，态就是列向量，算符作用就是矩阵乘法。

定义 2.1 (算符的矩阵表示). *在正交归一基 $\{|\phi_n\rangle\}$ 下，算符 $\hat{A}$ 的矩阵元定义为*

$$A_{mn} = \langle \phi_m | \hat{A} | \phi_n \rangle. \tag{26}$$

由这些矩阵元构成的矩阵就是 $\hat{A}$ 在该表象中的矩阵表示。

特别地，若基矢是 $\hat{A}$ 的本征态，即 $\hat{A}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$，则

$$A_{mn} = \langle \phi_m | \hat{A} | \phi_n \rangle = a_n \langle \phi_m | \phi_n \rangle = a_n \delta_{mn}. \tag{27}$$

此时矩阵是对角矩阵，对角元就是本征值。

2.3 本征方程的矩阵形式

考虑算符 $\hat{F}$ 的本征方程

$$\hat{F}|\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle. \tag{28}$$

在基 $\{|\phi_n\rangle\}$ 下，设

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle. \tag{29}$$

代入式 (28)，并利用式 (23)，得到

$$\sum_n F_{mn} c_n = \lambda c_m, \tag{30}$$

其中 $F_{mn} = \langle \phi_m | \hat{F} | \phi_n \rangle$。用矩阵写出来：

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{31}$$

把右边移到左边，得到

$$\sum_n (F_{mn} - \lambda\delta_{mn})c_n = 0. \tag{32}$$

这是一个齐次线性方程组。它有非零解的条件是系数行列式为零：

$$\det(F_{mn} - \lambda\delta_{mn}) = 0. \tag{33}$$

这就是久期方程。解出 λ 就得到本征值，再代回式 (32) 求本征向量。于是，算符的本征值问题完全转化为矩阵的本征值问题。

2.4 薛定谔方程的矩阵形式

薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle. \tag{34}$$

在基 $\{|\phi_n\rangle\}$ 下展开：

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle. \tag{35}$$

代入式 (34)，左乘 $\langle\phi_m|$，并插入完备性关系，得到

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial c_m}{\partial t} &= \langle\phi_m|\hat{H}|\psi\rangle \\ &= \sum_n \langle\phi_m|\hat{H}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi\rangle \\ &= \sum_n H_{mn}c_n. \end{aligned} \tag{36}$$

用矩阵写出来：

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{37}$$

这就是矩阵力学中的薛定谔方程。若选择能量表象，$H_{mn} = E_n\delta_{mn}$，方程变为

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}c_n}{\mathrm{d}t} = E_n c_n, \tag{38}$$

其解为

$$c_n(t) = c_n(0)e^{-iE_nt/\hbar}. \tag{39}$$

这正是定态的时间演化因子。

例 2.1 (自旋 1/2 系统的泡利矩阵). *考虑电子自旋 1/2 系统, 其自旋算符在 z 方向分量为：*

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{40}$$

这是一个 2×2 矩阵, 我们要求解其本征值和本征矢量.

本征值求解：

$$\det(\hat{S}_z-\lambda I)=\det\begin{pmatrix}\frac{\hbar}{2}-\lambda & 0\\ 0 & -\frac{\hbar}{2}-\lambda\end{pmatrix}=\left(\frac{\hbar}{2}-\lambda\right)\left(-\frac{\hbar}{2}-\lambda\right)=0 \tag{41}$$

解得本征值：

$$\lambda_1=\frac{\hbar}{2},\quad \lambda_2=-\frac{\hbar}{2} \tag{42}$$

本征矢量求解：

对于 $\lambda_1=\frac{\hbar}{2}$：

$$\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & -\hbar\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}=0\Rightarrow -\hbar c_2=0\Rightarrow c_2=0 \tag{43}$$

归一化条件：$|c_1|^2+|c_2|^2=|c_1|^2=1$, 取 $c_1=1$, 得到本征态：

$$|\uparrow\rangle=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} \tag{44}$$

对于 $\lambda_2=-\frac{\hbar}{2}$：

$$\begin{pmatrix}\hbar & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}=0\Rightarrow \hbar c_1=0\Rightarrow c_1=0 \tag{45}$$

归一化条件：$|c_1|^2+|c_2|^2=|c_2|^2=1$, 取 $c_2=1$, 得到本征态：

$$|\downarrow\rangle=\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} \tag{46}$$

这对应于电子自旋在 z 方向的两种可能取向：自旋向上 $(+\hbar/2)$ 和自旋向下 $(-\hbar/2)$.

3 表象变换与幺正变换

虽然我们可以选择不同的表象来表示态矢和算符，但是在不同的表象中所描述的物理实质应该是相同的。比如在不同的表象下的本征方程，其本征值应该是不变的，这对应于可观测量。

定义 3.1 (表象变换). 假设我们有两个不同的正交归一完备基 $\{|\phi_n\rangle\}$ 和 $\{|\psi_k\rangle\}$，则任意态 $|\chi\rangle$ 在这两个表象中的展开系数 $|\chi\rangle=\sum_n a_n|\phi_n\rangle$，$|\chi\rangle=\sum_k b_k|\psi_k\rangle$，通过变换矩阵 $U_{kn}=\langle\psi_k|\phi_n\rangle$ 联系：

$$b_k=\langle\psi_k|\chi\rangle=\sum_n\langle\psi_k|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\chi\rangle=\sum_n U_{kn}a_n \tag{47}$$

其中 $a_n=\langle\phi_n|\chi\rangle$。

定理 3.1 (表象变换是幺正变换)**.** 变换矩阵 U 满足

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I, \tag{48}$$

即 U 是幺正矩阵。

证明. 计算 $U^\dagger U$ 的第 (m,n) 个矩阵元：

$$\begin{aligned}
(U^\dagger U)_{mn} &= \sum_k (U^\dagger)_{mk} U_{kn} \\
&= \sum_k U^*_{km} U_{kn} \\
&= \sum_k \langle \psi_k | \phi_m \rangle^* \langle \psi_k | \phi_n \rangle \\
&= \sum_k \langle \phi_m | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \phi_n \rangle \\
&= \langle \phi_m | \left(\sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \right) |\phi_n\rangle \\
&= \langle \phi_m | \hat{I} | \phi_n \rangle = \langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn}.
\end{aligned} \tag{49}$$

这里用了新基的完备性关系 $\sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \hat{I}$。因此 $U^\dagger U = I$。同理可证 $UU^\dagger = I$。 □

3.1 算符的幺正变换

幺正变换 U 可以看作是在希尔伯特空间中基矢的" 旋转"。态矢量 $|\psi\rangle$ 在新表象中的表示为 $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$。我们希望算符在新旧表象中对物理观测的预测保持一致。具体来说，对于任意态 $|\psi\rangle$ 和 $|\phi\rangle$，内积 $\langle\phi|\hat{F}|\psi\rangle$ 应该在表象变换下不变。这类似于三维空间中矢量和张量在坐标旋转下的变换规律。幺正变换保持了量子系统的内禀结构不变。

设算符 $\hat{F}$ 在旧基下的矩阵元为

$$F_{mn} = \langle \phi_m | \hat{F} | \phi_n \rangle, \tag{50}$$

在新基下的矩阵元为

$$F'_{kl} = \langle \psi_k | \hat{F} | \psi_l \rangle. \tag{51}$$

在 $\hat{F}$ 两侧插入旧基的完备性关系：

$$\begin{aligned}
F'_{kl} &= \langle \psi_k | \hat{F} | \psi_l \rangle \\
&= \sum_{m,n} \langle \psi_k | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \hat{F} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \psi_l \rangle \\
&= \sum_{m,n} U_{km} F_{mn} U^*_{ln} \\
&= \sum_{m,n} U_{km} F_{mn} (U^\dagger)_{nl}.
\end{aligned} \tag{52}$$

用矩阵写出来就是

$$\boxed{F' = UFU^{\dagger}.} \tag{53}$$

这就是算符在表象变换下的变换公式。

3.2 表象变换的性质

表象变换只是改变描述方式，不改变物理。具体体现在以下几个方面。

（1）内积不变。设 $|\chi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 在旧基下的系数分别为 a_n 和 d_n，在新基下为 b_k 和 e_k。则

$$\begin{aligned}
\langle\chi|\varphi\rangle &= \sum_n a_n^* d_n \\
&= \sum_k b_k^* e_k \\
&= \sum_k \left(\sum_m U_{km} a_m\right)^* \left(\sum_n U_{kn} d_n\right) \\
&= \sum_{m,n} a_m^* d_n \sum_k U_{km}^* U_{kn} \\
&= \sum_{m,n} a_m^* d_n \delta_{mn} = \sum_n a_n^* d_n.
\end{aligned} \tag{54}$$

因此内积在幺正变换下不变。

（2）期望值不变。算符 $\hat{F}$ 在态 $|\chi\rangle$ 中的期望值为

$$\langle\hat{F}\rangle = \langle\chi|\hat{F}|\chi\rangle. \tag{55}$$

在旧基下，

$$\langle\hat{F}\rangle = \sum_{m,n} a_m^* F_{mn} a_n. \tag{56}$$

在新基下，

$$\begin{aligned}
\langle\hat{F}\rangle &= \sum_{k,l} b_k^* F'_{kl} b_l \\
&= \sum_{k,l} \left(\sum_m U_{km} a_m\right)^* \left(\sum_{p,q} U_{kp} F_{pq} U_{lq}^*\right) \left(\sum_n U_{ln} a_n\right) \\
&= \sum_{m,n} a_m^* a_n \sum_{p,q} \left(\sum_k U_{km}^* U_{kp}\right) F_{pq} \left(\sum_l U_{lq}^* U_{ln}\right) \\
&= \sum_{m,n} a_m^* a_n \sum_{p,q} \delta_{mp} F_{pq} \delta_{qn} \\
&= \sum_{m,n} a_m^* F_{mn} a_n.
\end{aligned} \tag{57}$$

因此期望值不变。

（3）本征值不变。设 $\hat{F}$ 在旧表象中的本征方程为

$$Fa = \lambda a. \tag{58}$$

在新表象中，$F' = UFU^\dagger$，$b = Ua$。则

$$F'b = (UFU^\dagger)(Ua) = UFa = U(\lambda a) = \lambda b. \tag{59}$$

因此本征值 λ 不变，本征向量按 $b = Ua$ 变换。

（4）对易关系不变。若

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}, \tag{60}$$

则在新表象中

$$\begin{aligned}
[A', B'] &= A'B' - B'A' \\
&= (UAU^\dagger)(UBU^\dagger) - (UBU^\dagger)(UAU^\dagger) \\
&= U(AB - BA)U^\dagger \\
&= UCU^\dagger = C'.
\end{aligned} \tag{61}$$

因此对易关系形式不变。

3.3 矩阵对角化与谱定理

表象变换的一个重要用途是把厄米算符的矩阵对角化。若选择厄米算符 $\hat{A}$ 的本征态作为基矢，则 $\hat{A}$ 的矩阵是对角的，对角元就是本征值。反过来，给定 $\hat{A}$ 在某个表象中的矩阵 A，求一个幺正矩阵 U，使得

$$U^\dagger AU = D \tag{62}$$

是对角矩阵，这就是矩阵对角化。D 的对角元是本征值，U 的列向量是对应的本征向量。

定理 3.2 (厄米算符的可对角化性). *厄米算符 $\hat{A}$ 存在一组正交归一本征矢完备系。在这些本征矢构成的表象中，$\hat{A}$ 的矩阵是对角矩阵，且对角元全为实数。*

证明. 设 $\hat{A}$ 的本征值为 λ_i，本征矢为 $|\psi_i\rangle$，满足

$$\hat{A}|\psi_i\rangle = \lambda_i|\psi_i\rangle, \qquad \langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}. \tag{63}$$

以 $\{|\psi_i\rangle\}$ 为基，则

$$A_{ij} = \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_j\rangle = \lambda_j\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \lambda_j\delta_{ij}. \tag{64}$$

因此矩阵是对角的。由第五讲，厄米算符的本征值为实数。 □

定理 3.3 (谱定理). 厄米算符 $\hat{A}$ 可以写成

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \tag{65}$$

其中 λ_i 是本征值，$|\psi_i\rangle$ 是相应的正交归一本征矢。

式 (65) 称为谱分解。它把算符写成投影算符的加权和，权重就是本征值。若本征值有简并，则对简并子空间求和即可。

例 3.1 (角动量 L_x 在 $l=1$ 子空间中的对角化). 在 L_z 表象中，$l=1$ 子空间的基矢为 $|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle$。角动量 x 分量的矩阵为

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{66}$$

求本征值：

$$\det(L_x - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & \hbar/\sqrt{2} & 0 \\ \hbar/\sqrt{2} & -\lambda & \hbar/\sqrt{2} \\ 0 & \hbar/\sqrt{2} & -\lambda \end{pmatrix} = -\lambda^3 + \lambda\hbar^2 = 0. \tag{67}$$

因此

$$\lambda = 0, \pm\hbar. \tag{68}$$

对应的归一化本征向量为

$$|\lambda = \hbar\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{69}$$

$$|\lambda = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \tag{70}$$

$$|\lambda = -\hbar\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{71}$$

以这三个本征向量为列构造幺正矩阵 U，则

$$U^\dagger L_x U = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{72}$$

这就是 L_x 在自身表象中的对角形式。

3.4 坐标表象与动量表象的变换

坐标表象与动量表象之间的变换是傅里叶变换。由完备性关系

$$\int \mathrm{d}p\, |p\rangle\langle p| = \hat{I}, \tag{73}$$

在坐标表象中插入：

$$\langle x|\psi\rangle = \int \mathrm{d}p\, \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle. \tag{74}$$

第六讲已经得到

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}. \tag{75}$$

因此

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \mathrm{d}p\, e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p), \tag{76}$$

其中 $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$。这就是动量表象到坐标表象的傅里叶变换。反变换为

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \mathrm{d}x\, e^{-ipx/\hbar} \psi(x). \tag{77}$$

这正是表象变换在连续谱情形下的具体形式。变换核 $\langle x|p\rangle$ 就是幺正变换矩阵的连续版本。

类似地，位置算符在动量表象中为

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, \tag{78}$$

而动量算符在坐标表象中为

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \tag{79}$$

这两个表达式互为“对偶”：在一个表象中对角的算符，在另一个表象中变成微分算符。这正是表象变换保持对易关系 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ 的体现。

4 占有数表象

4.1 占有数表象的引入

一维谐振子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2. \tag{80}$$

在坐标表象中，这是一个二阶微分算符；定态薛定谔方程是一个二阶微分方程。传统解法是渐近分析加幂级数，得到厄米多项式。计算虽然可行，但过程较长，物理图像也不够直观。

另一方面，谐振子的能级是等间距的：

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{81}$$

这种等间距结构强烈暗示存在一种“升降”机制：每次增加或减少一个能量量子 $\hbar\omega$。如果我们能找到这样的算符，就可以用纯代数方法得到全部能级和矩阵元，而不必解微分方程。这就是**占有数表象**（也称粒子数表象）的思想。

4.2 产生算符与湮灭算符

定义

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}, \tag{82}$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}. \tag{83}$$

由 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$，可以算出

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \qquad [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0. \tag{84}$$

具体验证如下：

$$\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}\right] \\
&= -\frac{i}{2\hbar}[\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{2\hbar}[\hat{p}, \hat{x}] \\
&= -\frac{i}{2\hbar}(i\hbar) + \frac{i}{2\hbar}(-i\hbar) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1.
\end{aligned} \tag{85}$$

同样可证另外两个对易子为零。

由式 (82) 和式 (83) 反解出 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$：

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \tag{86}$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \tag{87}$$

代入哈密顿量 (80)：

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2m}\left[-i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)\right]^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\right]^2 \\
&= -\frac{\omega\hbar}{4}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + \frac{\omega\hbar}{4}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \\
&= \frac{\omega\hbar}{4}\left[(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 - (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2\right] \\
&= \frac{\omega\hbar}{4}\left(2\hat{a}\hat{a}^\dagger + 2\hat{a}^\dagger\hat{a}\right) \\
&= \frac{\omega\hbar}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}).
\end{aligned} \tag{88}$$

利用 $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$，得到

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right).} \tag{89}$$

这个形式极其简洁：哈密顿量只依赖于组合 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$。

4.3 粒子数算符与本征值

定义粒子数算符

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}. \tag{90}$$

则

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right). \tag{91}$$

因此求谐振子能级等价于求 $\hat{N}$ 的本征值。设

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle. \tag{92}$$

由于 $\hat{N}$ 是厄米算符，n 为实数。又因为

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \|\hat{a}|n\rangle\|^2 \geq 0, \tag{93}$$

所以 $n \geq 0$。

利用对易关系

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger, \tag{94}$$

以及

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}. \tag{95}$$

可以证明 $\hat{a}^\dagger$ 使 n 增加 1，$\hat{a}$ 使 n 减少 1。以 $\hat{a}^\dagger$ 为例：

$$\begin{aligned}\hat{N}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) &= (\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger)|n\rangle \\ &= (n+1)(\hat{a}^\dagger|n\rangle).\end{aligned} \tag{96}$$

因此 $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ 是 $\hat{N}$ 的本征值为 $n+1$ 的本征态：

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = c_n|n+1\rangle. \tag{97}$$

由归一化条件确定 c_n：

$$\|\hat{a}^\dagger|n\rangle\|^2 = \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|(\hat{N}+1)|n\rangle = n+1. \tag{98}$$

因此 $|c_n|^2 = n+1$。取相位为 1，得到

$$\boxed{\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.} \tag{99}$$

同理，

$$\boxed{\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (n>0), \qquad \hat{a}|0\rangle = 0.} \tag{100}$$

由于 $n \geq 0$，且 $\hat{a}$ 每次减少 1，必然存在一个最低态 $|0\rangle$ 使得

$$\hat{a}|0\rangle = 0. \tag{101}$$

否则 n 可以无限减小并变为负数，与 $n \geq 0$ 矛盾。由 $\hat{N}|0\rangle = 0$，n 从 0 开始，每次增加 1，因此

$$n = 0, 1, 2, \ldots \tag{102}$$

即 n 必须是非负整数。于是谐振子能级为

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots} \tag{103}$$

基态 $|0\rangle$ 称为真空态。

由式 (99)，任意激发态可由真空态递推得到：

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle. \tag{104}$$

4.4 基态波函数

在坐标表象中，条件 $\hat{a}|0\rangle = 0$ 给出

$$\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\right]\psi_0(x) = 0. \tag{105}$$

化简为

$$\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]\psi_0(x) = 0. \tag{106}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}x} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0. \tag{107}$$

解为

$$\psi_0(x) = C\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right). \tag{108}$$

由归一化

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0(x)|^2\mathrm{d}x = 1 \tag{109}$$

确定

$$C = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}. \tag{110}$$

因此

$$\boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right).} \tag{111}$$

这与传统微分方程方法得到的基态完全一致。激发态波函数可通过式 (99) 在坐标表象中递推得到，对应于厄米多项式乘以高斯函数。

4.5 位置与动量的平均值和不确定度

利用式 (86) 和式 (87)，可以方便地计算各矩阵元。在能量本征态 $|n\rangle$ 中，

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|n\rangle = 0, \tag{112}$$

$$\langle n|\hat{p}|n\rangle = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\langle n|(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)|n\rangle = 0. \tag{113}$$

这是因为 $\hat{a}|n\rangle \propto |n-1\rangle$，$\hat{a}^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle$，均与 $|n\rangle$ 正交。

计算 $\hat{x}^2$：

$$\begin{aligned}\hat{x}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)^2 \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}).\end{aligned} \tag{114}$$

在 $|n\rangle$ 中，$\hat{a}^2$ 和 $\hat{a}^{\dagger 2}$ 的期望值为零，且

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a}+1 = \hat{N}+1. \tag{115}$$

因此

$$\langle n|\hat{x}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1) = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right). \tag{116}$$

同理，

$$\langle n|\hat{p}^2|n\rangle = m\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right). \tag{117}$$

因此不确定度为

$$(\Delta x)_n^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right), \tag{118}$$

$$(\Delta p)_n^2 = m\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right). \tag{119}$$

乘积为

$$(\Delta x)_n(\Delta p)_n = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right) \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{120}$$

基态 $n=0$ 达到最小值 $\hbar/2$，是最小不确定态；激发态的不确定度随 n 增大而增大。这与第五讲的一般不确定性关系一致。

4.6 矩阵元与选择定则

由式 (99) 和式 (100)，位置算符的矩阵元为

$$\begin{aligned}\langle m|\hat{x}|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle m|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|n\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1}+\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right).\end{aligned} \tag{121}$$

动量算符的矩阵元为

$$\langle m|\hat{p}|n\rangle = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} - \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right). \tag{122}$$

这两个式子清楚显示：$\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 只在相邻能级之间有非零矩阵元，即选择定则为

$$\Delta n = \pm 1. \tag{123}$$

这是谐振子跃迁的基本选择定则。在传统微分方程方法中，这一结论需要计算积分才能得到；在占有数表象中，它直接从算符代数中读出。

占有数表象的优点如下：

1. 能级量子化直接来自 $\hat{N}$ 的本征值为非负整数，不必解微分方程；

2. 波函数可从真空态通过 $\hat{a}^\dagger$ 递推生成；

3. 矩阵元计算变成代数运算，选择定则一目了然；

4. 物理图像清晰：$\hat{a}^\dagger$ 产生一个能量量子，$\hat{a}$ 湮灭一个能量量子；

5. 易于推广到多模系统和量子场论。

习题

待补