3.4.1 矢量的矩阵形式

我们可以把$|\alpha\rangle = c_1|+\rangle + c_2|-\rangle$记为列矢

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \tag{3.70}$$

对应的左矢可以写成

$$\langle\alpha| = c_1^*\langle +| + c_2^*\langle -|. \tag{3.71}$$

$\langle\alpha|$记为行矢:

$$\begin{pmatrix} c_1^*, & c_2^* \end{pmatrix}. \tag{3.72}$$

我们可以要求态$|\alpha\rangle$归一:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1. \tag{3.73}$$

插入完备性关系:

$$\langle\alpha|(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|)|\alpha\rangle = |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \tag{3.74}$$

可见c_1, c_2的模方是处于两个基矢的几率，并且看到**内积是行矢与列矢的矩阵乘积**.

更一般地, 任意两个矢量的内积都可以写成列矢表示与行矢表示的矩阵乘积:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\alpha|(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|)|\beta\rangle = c_1^* b_1 + c_2^* b_2. \tag{3.75}$$

可以写成

$$(c_1^*, c_2^*)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{3.76}$$

其中b_1, b_2是$|\beta\rangle$的展开系数.

回到最一般的A表象. $|a_i\rangle, i = 1, \cdots, N$ 是力学量A的的本征矢，构成正交归一完备的一组基矢. 任意矢量

$$|\alpha\rangle = \sum_i^N a_i|a_i\rangle \tag{3.77}$$

可以表示成

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ . \\ . \\ . \\ a_N \end{pmatrix}. \tag{3.78}$$

考虑另一态矢$|\beta\rangle = \sum_i^N b_i|a_i\rangle$与$|\alpha\rangle$作内积

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\alpha|(\sum_i^N |a_i\rangle\langle a_i|)|\beta\rangle = \sum_i^N \langle\alpha|a_i\rangle\langle a_i|\beta\rangle = (a_1^*, a_2^*, \cdots, a_N^*)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ . \\ . \\ . \\ b_N \end{pmatrix}. \tag{3.79}$$

3.4.2 算符的矩阵形式

算符原则上由其本征值和本征态确定。我们可以据此写出它的矩阵。

在欧几里德空间里, 对矢量的旋转操作(算符)可以写成一个矩阵. 比如将二维矢量$\vec{A}$旋转θ角得到矢量$\vec{B}$:

$$\hat{R}(\theta)\vec{A} = \vec{B}. \tag{3.80}$$

选定两个正交归一矢量$\vec{e_1}, \vec{e_2}$后(满足$\vec{e_i} \cdot \vec{e_j} = \delta_{ij}, i, j = 1, 2$), $\vec{A} = a_1\vec{e}_1 + a_2\vec{e}_2$和$\vec{B} = b_1\vec{e}_1 + b_2\vec{e}_2$可以写成列矢形式

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}; \qquad \vec{B} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{3.81}$$

计算$\vec{e_1} \cdot \vec{B}$和$\vec{e_2} \cdot \vec{B}$, Eq.(3.80)可以写成矩阵关系:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{3.82}$$

其中$\hat{R}(\theta)$矩阵的i行j列就由

$$\vec{e}_i \cdot \hat{R}\vec{e}_j \tag{3.83}$$

算出.

与此类似, 一个力学量算符在给定基矢的情况下亦可以写成矩阵. 比如我们来写S_z表象下S_z的矩阵. 考虑

$$\hat{S}_z|\alpha\rangle = |\beta\rangle. \tag{3.84}$$

将$|\alpha\rangle, |\beta\rangle$展开成基矢的叠加

$$\hat{S}_z(a_1|+\rangle + a_2|-\rangle) = b_1|+\rangle + b_2|-\rangle. \tag{3.85}$$

分别用$\langle+|, \langle-|$与之作内积,

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle+|\hat{S}_z|+\rangle, & \langle+|\hat{S}_z|-\rangle \\ \langle-|\hat{S}_z|+\rangle, & \langle-|\hat{S}_z|-\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{3.86}$$

即

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} \hbar/2, & 0 \\ 0, & -\hbar/2 \end{pmatrix} \tag{3.87}$$

容易发现, 任意算符$\hat{Q}$都可以写成A表象(以A的本征矢$|a_i\rangle$为基, $|a_i\rangle$简写为$|i\rangle$)下的矩阵. 其元素

$$Q_{i,j} = \langle i|\hat{Q}|j\rangle. \tag{3.88}$$

由于

$$Q_{i,j} = \langle i|\hat{Q}|j\rangle = ((\hat{Q}|j\rangle)^\dagger|i\rangle)^* = (\langle j|\hat{Q}^\dagger|i\rangle)^* = (Q^\dagger_{j,i})^*, \tag{3.89}$$

即$\hat{Q}$和$\hat{Q}^\dagger$的矩阵互为转置共轭.

而力学量算符是厄密的($Q = Q^\dagger$), 所以其矩阵是厄密矩阵:

$$Q_{i,j} = (Q_{j,i})^*. \tag{3.90}$$

现在来计算S_x的矩阵:

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} \langle+|\hat{S}_x|+\rangle, & \langle+|\hat{S}_x|-\rangle \\ \langle-|\hat{S}_x|+\rangle, & \langle-|\hat{S}_x|-\rangle \end{pmatrix}. \tag{3.91}$$

对于轨道角动量$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, 容易算出$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$. (利用动量的求导特性).

与轨道角动量不同, 这里我们不知道自旋角动量S_x算符与位置和动量的关系, 但是我们有一条基本假设: 自旋角动量的分量满足角动量对易关系:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z. \tag{3.92}$$

及其轮转关系.

容易证明

$$i\hbar\langle+|\hat{S}_x|+\rangle = \langle+|\hat{S}_y\hat{S}_z|+\rangle - \langle+|\hat{S}_z\hat{S}_y|+\rangle = 0 \tag{3.93}$$

类似地

$$\langle-|\hat{S}_x|-\rangle = 0. \tag{3.94}$$

再看到测每个分量平方都是$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \hbar^2/4$, 即$S_i^2, i = x, y, z$是常数算符$\hbar^2/4$. (所以$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$的测量值永远为$3\hbar^2/4$.)

证明: 对任意态矢$|\alpha\rangle$, 将其展开成S_x的本征态的叠加

$$|\alpha\rangle = c_1|S_x, +\rangle + c_2|S_x, -\rangle \tag{3.95}$$

那么

$$S_x^2|\alpha\rangle = c_1S_x^2|S_x, +\rangle + c_2S_x^2|S_x, -\rangle = c_1S_x(\hbar/2)|S_x, +\rangle + c_2S_x(-\hbar/2)|S_x, -\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\alpha\rangle \tag{3.96}$$

利用这一结果，通过计算$\langle+|S_x^2|+\rangle$, 容易证明

$$|\langle+|S_x|-\rangle|^2 = \hbar^2/4 = |\langle+|S_y|-\rangle|^2. \tag{3.97}$$

通常我们取$\langle+|S_x|-\rangle = \hbar/2$, 那么利用对易关系，自然$\langle+|S_y|-\rangle = -i\hbar/2$.

最终S_x的矩阵(3.91)就是

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} 0, & \hbar/2 \\ \hbar/2, & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0, & 1 \\ 1, & 0 \end{pmatrix} \tag{3.98}$$

类似地，S_y的矩阵就是

$$\hat{S}_y = \begin{pmatrix} 0, & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2, & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0, & -i \\ i, & 0 \end{pmatrix} \tag{3.99}$$