2.6 基底的改變對運算子矩陣表示的影響

上節描述了基底的改變對向量坐標表示之影響，以及此向量在前後二種基底的表示如何相關。對於運算子我們也將做類似的探討，即討論基底改變後，對運算子矩陣表示的影響，以及此二運算子，在前後二基底上的表示有何關係。

【定理 2.3】

在空間 V 上有二組基底

$$e=\{|e_1\rangle,|e_2\rangle,\cdots,|e_n\rangle\}\ ,\ b=\{|b_1\rangle,|b_2\rangle,\cdots,|b_n\rangle\}$$

若 $\hat{T}$ 為 V 上之一運算子，則 $\hat{T}$ 在二基底 e 與 b 之矩陣表示有

$$[\hat{T}]_b=P^{-1}[\hat{T}]_eP \tag{2.69}$$

此處 P 為 e 至 b 之轉換矩陣。

證 若 $|\alpha\rangle$ 為 V 中之一向量，則 $\hat{T}|\alpha\rangle$ 亦為 V 中之一向量。由前定理知

$$P|\alpha\rangle_b=|\alpha\rangle_e \tag{2.70}$$

$$P[\hat{T}|\alpha\rangle]_b=[\hat{T}|\alpha\rangle]_e \tag{2.71}$$

由式(2.51) (2.52)及(2.70)，得

$$[\hat{T}|\alpha\rangle]_e=[\hat{T}]_e|\alpha\rangle_e=[\hat{T}]_eP|\alpha\rangle_b \tag{2.72}$$

合併式(2.71)及(2.72)，則有

$$[\hat{T}]_eP|\alpha\rangle_b=P[\hat{T}|\alpha\rangle]_b \tag{2.73}$$

將上式左右兩邊同乘 P 之反矩陣 P^{-1}，則

$$(P^{-1}[\hat{T}]_eP)|\alpha\rangle_b=[\hat{T}|\alpha\rangle]_b=[\hat{T}]_b|\alpha\rangle_b \tag{2.74}$$

故 $[\hat{T}]_b=P^{-1}[\hat{T}]_eP$。所以，若二基底給定後，一旦知道運算子 $\hat{T}$ 在其中一基底之矩陣表示，則可得到它在另一基底之表示。

2.7 運算子之固有值與固有向量

一運算子作用在向量上，最特殊的便是存在某些向量在此運算子作用下，仍然維持著原先的向量，僅是放大或縮小一些倍數而已。此向量便可說，是能呈現出此運算子之特徵或本質。

定義：設 $|a\rangle$ 與 $\hat{A}$ 為向量空間 V 中之一向量與運算子，若 $\hat{A}$ 滿足

$$\hat{A}|a\rangle = \lambda|a\rangle \tag{2.75}$$

λ 為純量，則 λ 和 $|a\rangle$ 分別稱為運算子 $\hat{A}$ 的**固有值**和**固有向量**（*eigenvalue and eigenvector*）。

在有限維空間中，運算子 $\hat{A}$ 可以空間之基底表示成矩陣形式 A。在此情形下，如何求得運算子 $\hat{A}$ 或其對應矩陣 A 的固有值和固有向量呢？由固有方程式

$$\hat{A}|a\rangle = \lambda|a\rangle = \lambda\hat{1}|a\rangle \tag{2.76}$$

移項後得固有方程式之另一形式

$$(\hat{A}-\lambda\hat{1})|a\rangle = |0\rangle \tag{2.77}$$

在自然基底 e 之矩陣表示，則可得

$$[(\hat{A}-\lambda\hat{1})]_e \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = (A-\lambda\mathrm{I}) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2.78}$$

由於 n 元一次聯立方程組之解，可由

Cramer **法則**：設 A 為 $n\times n$ 之矩陣，X 和 b 為 $n\times 1$ 之行矩陣。若矩陣 A 之行列式值 $\det A \neq 0$，則在 $AX=b$ 之線性方程組中，恰有唯一的解

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

其中 $x_i = \det \Delta_i / \det A$，$\Delta_i$ 為 A 之第 i 行以行矩陣 b 來替換後之矩陣，即

$$\Delta_i = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & b_1 & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & & b_2 & & a_{2n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & b_n & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \\ \uparrow \text{第 } i \text{ 行} \end{array} \tag{2.79}$$

求得。故對式(2.77)而言，若 $\det(A-\lambda \mathrm{I}) \neq 0$，則對 $|a\rangle$ 中所有分量 a_i 而言，其解

$$a_i = \frac{\det \Delta_i}{\det(A-\lambda \mathrm{I})} = 0 \tag{2.80}$$

而無法得到有意義的向量解。相反地，若要求式(2.77)有不為零之向量解 $|a\rangle$，則

$$\det(A-\lambda \mathrm{I}) = 0 \tag{2.81}$$

由此可得到以 λ 為變數的多項式，稱為矩陣 A 的**特徵多項方程式**（*characteristic polynomial*）。而**此方程式的根，即為固有值 λ** 。

固有值 $\lambda \equiv$ 特徵方程式 $\det(A-\lambda \mathrm{I}) = 0$ 之根

再將 λ 代回式(2.78)，即 $(A-\lambda \mathrm{I})\, a = 0$，求解 a，即可得到相對應的固有向量

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

例 2.19

若一運算子之矩陣表示為 $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$，求 σ_y 之固有值與固有向量。

解 σ_y 之特徵方程式為

$$\det(\sigma_y - \lambda \mathrm{I}) = \begin{vmatrix} 0-\lambda & -i \\ i & 0-\lambda \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{vmatrix}$$