得 $\lambda^2-1=0$ 或 $(\lambda+1)(\lambda-1)=0$，故固有值 $\lambda=1$ 或 -1。

(a) 對 $\lambda=1$，式 (2.78) 為

$$\begin{pmatrix}-\lambda & -i\\ i & -\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-a_1-i\,a_2\\ i\,a_1-a_2\end{pmatrix}$$

故 $a_2=i\,a_1$，取 $a_1=1$，則 $a_2=i$。得固有向量

$$|+\rangle_y=\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}\rightarrow \text{歸一後為}\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}。$$

(b) 對 $\lambda=-1$，式 (2.78) 為

$$\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_1-i\,a_2\\ i\,a_1+a_2\end{pmatrix}$$

故 $a_2=-i\,a_1$，取 $a_1=1$，則 $a_2=-i$。得固有向量

$$|-\rangle_y=\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}\rightarrow \text{歸一後為}\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}。$$

例 2.20

在無限維複數函數空間 C^∞，求運算子 $\hat{D}=-i\dfrac{d}{dx}$ 之固有值與固有向量(或謂固有函數 *eigenfuction*)？

解 因 $\hat{D}$ 為一微分運算子，故得尋找一個函數，對 x 微分後仍與自身成正比者，此函數唯一的可能為指數函數 e^x 或 $e^{\alpha x}$。茲由

$$\hat{D}\,e^{\alpha x}=-i\frac{d}{dx}e^{\alpha x}=-i\alpha e^{\alpha x}$$

但若 α 為實數，則 $e^{\alpha x}\rightarrow\infty$ $\begin{cases}\text{當 } \alpha>0 \text{ 且 } x\rightarrow\infty \text{ 時}\\ \text{當 } \alpha<0 \text{ 且 } x\rightarrow-\infty \text{ 時}\end{cases}$

所以 $e^{\alpha x}$ 並非為一正規（*regular*）的函數，亦不能為固有函數，故須取 α 為虛數，即 $e^{i\beta x}$，此處 β 為實數（可正、可負），此時

$$\hat{D}\,e^{i\beta x}=-i\frac{d}{dx}e^{i\beta x}=\beta\,e^{i\beta x}$$

故 $\hat{D}=-i\dfrac{d}{dx}$ 之固有值為 β，固有函數為 $e^{i\beta x}$。（若 β 為任意正實數，則 $\hat{D}$ 之固有值可為 β 或 $-\beta$，固有函數為 $e^{i\beta x},e^{-i\beta x}$）

【定理 2.4】

若 $\hat{H}$ 是一厄米特運算子，則 $\hat{H}$ 的固有值必為實數。

證 設 $\hat{H}$ 所滿足之固有值方程式為 $\hat{H}\,|a\rangle=\lambda|a\rangle$，則與向量 $\langle a|$ 內積後得

$$\langle a|\hat{H}|a\rangle=\lambda\langle a|a\rangle \tag{2.82}$$

等號兩邊同取複數共軛，得

$$\lambda^*\langle a|a\rangle=\langle a|\hat{H}|a\rangle^*=\langle a|\hat{H}^\dagger|a\rangle=\langle a|\hat{H}|a\rangle=\lambda\langle a|a\rangle \tag{2.83}$$

故 $\lambda^*=\lambda$，即固有值 λ 恆為實數。

此為厄米特運算子一個非常重要的性質，與以後量子力學中之物理量有很緊密的關係。

【定理 2.5】

若 $\hat{H}$ 是一厄米特運算子，則 $\hat{H}$ 不同固有值所對應的固有向量，必互相正交。

證 設 $\hat{H}$ 有二固有向量 $|a_1\rangle, |a_2\rangle$，分別對應不同之固有值 λ_1,λ_2，即

$$\hat{H}\,|a_1\rangle=\lambda_1|a_1\rangle\ ,\ \hat{H}\,|a_2\rangle=\lambda_2|a_2\rangle \tag{2.84}$$

將上式左式與向量 $|a_2\rangle$ 內積，並利用厄米特運算子特性式(2.44)及定理 2.4，得

$$\begin{aligned}\lambda_1\langle a_2|a_1\rangle&=\langle a_2|\hat{H}|a_1\rangle\\&=\langle a_1|\hat{H}|a_2\rangle^*=(\lambda_2\langle a_1|a_2\rangle)^*=\lambda_2\langle a_2|a_1\rangle\end{aligned} \tag{2.85}$$

或

$$(\lambda_1-\lambda_2)\langle a_2|a_1\rangle=0 \tag{2.86}$$

若二固有值相異，$\lambda_1\neq\lambda_2$，則 $\langle a_2|a_1\rangle=0$，即 $|a_1\rangle$ 與 $|a_2\rangle$ 正交。

2.8 矩陣的對角化——如何使運算子的表示最簡單

前節述及在不同的基底，運算子的矩陣表示亦將不同。而如何選取一種基底使運算子的矩陣形式最簡單——即僅對角線上有值，甚為重要，此種程序稱為**矩陣的對角化**（*diagonalization of matrix*）。下面將指出以原矩陣的固有向量為新基底，則運算子的矩陣表示將具最簡單的對角線形式。

【定理 2.6】

在 n 維之向量空間 V，若運算子 $\hat{T}$ 具有 **n 個線性獨立之固有向量** $|b_1\rangle, |b_2\rangle, \cdots, |b_n\rangle$，即有

$$\hat{T}\,|b_i\rangle = \lambda_i\,|b_i\rangle \tag{2.87}$$

λ_i 為其對應之固有值，且 $b=\{|b_1\rangle, |b_2\rangle, \cdots, |b_n\rangle\}$ 可為一基底，則運算子 $\hat{T}$ 對基底 b 之矩陣形式必為**對角線形式**，或稱 $\hat{T}$ 之矩陣被對角化，即

$$[\hat{T}]_b = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & & \lambda_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}_b \tag{2.88}$$

證 由原基底 e 至新基底 b 之轉換矩陣為

$$P = (|b_1\rangle \vdots |b_2\rangle \vdots \cdots \vdots |b_n\rangle) \tag{2.89}$$

則運算子 $\hat{T}$ 在基底 e 之矩陣表示 $[\hat{T}]$ 與 P 之乘積為

$$[\hat{T}]P = ([\hat{T}]|b_1\rangle \vdots [\hat{T}]|b_2\rangle \vdots \cdots \vdots [\hat{T}]|b_n\rangle) = (\lambda_1|b_1\rangle \vdots \lambda_2|b_2\rangle \vdots \cdots \vdots \lambda_n|b_n\rangle)$$

$$= (|b_1\rangle\ \ |b_2\rangle\ \cdots\ |b_n\rangle)\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & & \lambda_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} = P\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & & \lambda_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$$

上式兩端的左邊同乘 P^{-1} 得

$$P^{-1}[\hat{T}]P=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & & 0 & 0\\ 0 & \lambda_2 & & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & & \lambda_{n-1} & 0\\ 0 & 0 & & 0 & \lambda_n\end{pmatrix} \tag{2.90}$$

由定理 2.3 知，$P^{-1}[\hat{T}]P=[\hat{T}]_b$ 即為運算子 $\hat{T}$ 在新基底 b 之矩陣表示，且對角線上之元素恰為 $\hat{T}$ 之固有值，即

$$[\hat{T}]_b=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & & 0 & 0\\ 0 & \lambda_2 & & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & & \lambda_{n-1} & 0\\ 0 & 0 & & 0 & \lambda_n\end{pmatrix} \tag{2.91}$$

若矩陣 $[\hat{T}]_b$ 在基底 b 下具對角線形式，則運算子 $\hat{T}$ 作用在基底上之每一元素很快地便可看出，必滿足固有方程式，即

$$[\hat{T}]_b\,|b_i\rangle=\begin{pmatrix}\lambda_1 & & 0 & & 0\\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots\\ 0 & & \lambda_i & & 0\\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & & 0 & & \lambda_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ \vdots\\ 1\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}=\lambda_i\begin{pmatrix}0\\ \vdots\\ 1\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}=\lambda_i\,|b_i\rangle \tag{2.92}$$

若一運算子之固有值有特殊的物理意義時，如何以固有值來直接呈現或描述運算子的矩陣，以迅速顯示出其內涵，也成為運算子矩陣對角化的主要目的。

例 2.21

在 $\mathbb{R}^2$ 空間中，一運算子之矩陣表示為 $A=\begin{pmatrix}1 & -1\\ 2 & -1\end{pmatrix}$。求在哪個基底下，此運算子的矩陣表示可形成為對角線形式。