2.4 運算子之矩陣表示與特殊矩陣

(一) 向量的矩陣表示

定義：設 $e=\{|e_1\rangle,|e_2\rangle,\cdots,|e_n\rangle\}$ 為 n 維空間 V 中之一組基底，若一向量

$|a\rangle=\sum_{i=1}^{n}a_i\,|e_i\rangle$，則

$$|a\rangle_e=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{pmatrix}_e \tag{2.48}$$

代表向量 $|a\rangle$ 以 e 為基底之坐標**矩陣表示**（*coordinate matrix representation*），或簡稱為坐標矩陣。

若 e 為標準自然基底，則足標 e 可省略不寫。若基底 e 已給定，則向量 $|a\rangle$ 的矩陣表示，可讓我們不必反覆書寫此基底，而僅須用此基底展開後，其對應係數或分量之大小來代表即可。

例 2.10

在 $\mathbb{R}^2$ 空間中，向量 $|a\rangle=(1,2)$。求 $|a\rangle$ 在自然基底 $e=\{(1,0),(0,1)\}$ 及基底 $b=\{(1,1),(0,2)\}$ 之矩陣表示？

解 因 $|a\rangle=(1,2)=1\cdot(1,0)+2\cdot(0,1)$，故

$$|a\rangle_e=\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}_e=\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}\quad（足標\ e\ 可省略）$$

同理，$|a\rangle=(1,2)=1\cdot(1,1)+\dfrac{1}{2}\cdot(0,2)$，

其幾何意義如圖 2.2，故

$$|a\rangle_b=\begin{pmatrix}1\\1/2\end{pmatrix}_b$$

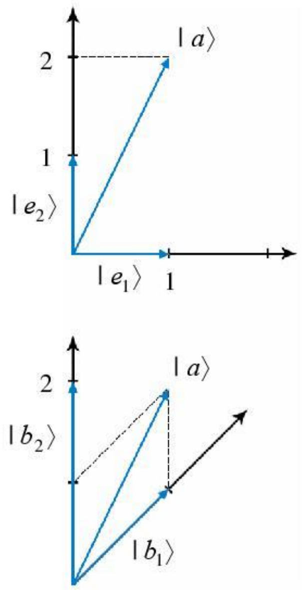

圖 2.2：向量 $|a\rangle$ 在基底 e 與基底 b 上之分量。

故向量的矩陣表示完全由選定之基底或參考坐標，來決定其數值和分量。

(二) 運算子的矩陣表示

由於空間中每一向量均可以基底元素將其展開，而一運算子 T 作用在向量的效果，利用線性關係，遂可先以 T 作用在各基底元素，然後再將其結果線性組合起來完成。故一運算子作用在向量之效果一定，但其表示卻會因所選定之基底不同而有所差異。

定義：設 $e=\{|e_1\rangle,|e_2\rangle,\cdots,|e_n\rangle\}$ 為 n 維空間 V 中之一組基底，T 為映射（*mapping*）至 V 之一運算子。若

$$\begin{aligned}\hat{T}|e_1\rangle &= t_{11}|e_1\rangle+t_{21}|e_2\rangle+\cdots+t_{n1}|e_n\rangle\\ \hat{T}|e_2\rangle &= t_{12}|e_1\rangle+t_{22}|e_2\rangle+\cdots+t_{n2}|e_n\rangle\\ &\vdots\\ \hat{T}|e_n\rangle &= t_{1n}|e_1\rangle+t_{2n}|e_2\rangle+\cdots+t_{nn}|e_n\rangle\end{aligned} \tag{2.49}$$

即 $\hat{T}$ 作用在基底元素後之向量，其矩陣表示為

$$\hat{T}|e_1\rangle_e=\begin{pmatrix}t_{11}\\t_{21}\\\vdots\\t_{n1}\end{pmatrix},\ \hat{T}|e_2\rangle_e=\begin{pmatrix}t_{12}\\t_{22}\\\vdots\\t_{n2}\end{pmatrix},\cdots,\ \hat{T}|e_n\rangle_e=\begin{pmatrix}t_{1n}\\t_{2n}\\\vdots\\t_{nn}\end{pmatrix} \tag{2.50}$$

則以 e 為基底，**運算子 $\hat{T}$ 的作用可以矩陣**

$$[\hat{T}]_e=\begin{pmatrix}t_{11} & t_{12} & & t_{1n}\\ t_{21} & t_{22} & & t_{2n}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ t_{n1} & t_{n2} & & t_{nn}\end{pmatrix} \tag{2.51}$$

來表示（若 e 為標準自然基底，則足標 e 可省略不寫）。

例 2.11

若運算子 $\hat{T}$：$\mathbb{R}^2\to\mathbb{R}^2$，其效果是將原向量放大為 4 倍。求在自然基底 $e=\{|e_1\rangle,|e_2\rangle\}=\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\}$ 之矩陣表示。

解 因運算子 $\hat{T}$ 之矩陣形式，均是由 $\hat{T}$ 作用在基底 e 上之效果代表。

因 $\hat{T}\,|e_1\rangle = \hat{T}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}4\\0\end{pmatrix} = 4\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + 0\cdot\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

故 $\hat{T}$ 之矩陣表示的第一行為 $\begin{pmatrix}4\\0\end{pmatrix}$。

同理，$\hat{T}\,|e_2\rangle = \hat{T}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\4\end{pmatrix} = 0\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + 4\cdot\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

故 $\hat{T}$ 之矩陣表示的第二行為 $\begin{pmatrix}0\\4\end{pmatrix}$。

所以，$\hat{T}$ 之矩陣表示為 $[\hat{T}]_e = \begin{pmatrix}4 & 0\\0 & 4\end{pmatrix}_e = \begin{pmatrix}4 & 0\\0 & 4\end{pmatrix}$。

若在空間 V 上有一基底為 $e=\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \cdots, |e_n\rangle\}$，$\hat{T}$ 為在 V 上的運算子，一向量 $|\alpha\rangle = a_1\,|e_1\rangle + a_2\,|e_2\rangle + \cdots + a_n\,|e_n\rangle$，則由運算子之線性關係，有

$$
\begin{aligned}
\hat{T}\,|\alpha\rangle &= \hat{T}\,(a_1\,|e_1\rangle + a_2\,|e_2\rangle + \cdots + a_n\,|e_n\rangle) \\
&= a_1\,\hat{T}\,|e_1\rangle + a_2\,\hat{T}\,|e_2\rangle + \cdots + a_n\,\hat{T}\,|e_n\rangle \\
&= a_1\,(t_{11}\,|e_1\rangle + t_{21}\,|e_2\rangle + \cdots + t_{n1}\,|e_n\rangle) + a_2\,(t_{12}\,|e_1\rangle + t_{22}\,|e_2\rangle + \cdots + t_{n2}\,|e_n\rangle) \\
&\qquad + \cdots + a_n\,(t_{1n}\,|e_1\rangle + t_{2n}\,|e_2\rangle + \cdots + t_{nn}\,|e_n\rangle) \\
&= (a_1\,t_{11} + a_2\,t_{12} + \cdots + a_n\,t_{1n})\,|e_1\rangle + (a_1\,t_{21} + a_2\,t_{22} + \cdots + a_n\,t_{2n})\,|e_2\rangle \\
&\qquad + \cdots + (a_1\,t_{n1} + a_2\,t_{n2} + \cdots + a_n\,t_{nn})\,|e_n\rangle
\end{aligned}
$$

即

$$
\boxed{[\hat{T}\,|\alpha\rangle]_e = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & & t_{1n} \\ t_{21} & t_{22} & \cdots & t_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_{n1} & t_{n2} & & t_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}_e = [\hat{T}]_e\,|\alpha\rangle_e} \tag{2.52}
$$

所以，**若有式(2.51)定義，且已知矩陣乘法規則，則式(2.52)成立。或者可說，若式(2.52)成立，則必須要有現存的矩陣乘法規則。**

在例題 **2.11** 中 $\hat{T}$ 作用在向量 $|a\rangle=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}$ 的結果，可從兩觀點來看：

• 線性變換

$$\hat{T}\,|a\rangle=\hat{T}\,(a_1|e_1\rangle+a_2|e_2\rangle)=a_1\hat{T}\,|e_1\rangle+a_2\hat{T}\,|e_2\rangle$$
$$=a_1\begin{pmatrix}4\\0\end{pmatrix}+a_2\begin{pmatrix}0\\4\end{pmatrix}=4\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}=4\,|a\rangle$$

• 矩陣乘法

$$\hat{T}\,|a\rangle=\begin{pmatrix}4&0\\0&4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}=4\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}=4\,|a\rangle$$

由此可看出，**一旦知道 $\hat{T}$ 作用在基底之結果，便可知道 $\hat{T}$ 作用在任何向量的結果**；而其效應完全等同於 $\hat{T}$ 矩陣，與 $|a\rangle$ 之坐標矩陣的矩陣乘積。茲以二維空間及自然基底為例，若知

$$\hat{T}\,|e_1\rangle=\begin{pmatrix}t_{11}\\t_{21}\end{pmatrix}\quad,\quad\hat{T}\,|e_2\rangle=\begin{pmatrix}t_{12}\\t_{22}\end{pmatrix}$$

則任意向量 $|a\rangle=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}$ 在 $\hat{T}$ 作用下之 $\hat{T}\,|a\rangle$，其矩陣表示可由以下兩方式來看：

• 線性變換

$$\hat{T}\,|a\rangle=\hat{T}\,(a_1|e_1\rangle+a_2|e_2\rangle)=a_1\hat{T}\,|e_1\rangle+a_2\hat{T}\,|e_2\rangle$$
$$=a_1\begin{pmatrix}t_{11}\\t_{21}\end{pmatrix}+a_2\begin{pmatrix}t_{12}\\t_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_1t_{11}+a_2t_{12}\\a_1t_{21}+a_2t_{22}\end{pmatrix}\tag{2.53}$$

• 矩陣乘法

$$\hat{T}\,|a\rangle=\begin{pmatrix}t_{11}&t_{12}\\t_{21}&t_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_1t_{11}+a_2t_{12}\\a_1t_{21}+a_2t_{22}\end{pmatrix}\tag{2.54}$$

結果完全一致，其中原因可由矩陣的乘法性質顯示出，因

$$\begin{pmatrix}t_{11}&t_{12}\\t_{21}&t_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}=a_1\begin{pmatrix}t_{11}&t_{12}\\t_{21}&t_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+a_2\begin{pmatrix}t_{11}&t_{12}\\t_{21}&t_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=a_1\begin{pmatrix}t_{11}\\t_{21}\end{pmatrix}+a_2\begin{pmatrix}t_{12}\\t_{22}\end{pmatrix}$$

故運算子 $\hat{T}$ 之矩陣表示的定義式(2.51)是合理有意義的。

註　　解

由此例得知，運算子對向量的作用，與矩陣的乘法作用完全相同。然而，後者在計算上相對地要簡單，且快速許多。

例 2.12

一自 $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ 之運算子 $\hat{A}$ 作用在任一向量 $|a\rangle$ 之效果，由

$$\hat{A}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x-y+2z \\ 3x-z \\ 2y+z \end{pmatrix}$$

所描述。求運算子 $\hat{A}$ 分別以 $e=\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}=\{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}\}$，及

$b=\{|b_1\rangle, |b_2\rangle, |b_3\rangle\}=\{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}\}$ 為基底之矩陣表示。

解 運算子 $\hat{A}$ 作用在基底 e 中每一元素之情形為

$$\hat{A}|e_1\rangle = \hat{A}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix},\ \hat{A}|e_2\rangle = \hat{A}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix},\ \hat{A}|e_1\rangle = \hat{A}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

故 $\hat{A}$ 以 e 為基底之矩陣表示為

$$[\hat{A}]_e = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ 3 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

而 $\hat{A}$ 作用在基底 b 中每一元素之情形為

$$\hat{A}|b_1\rangle = \hat{A}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{5}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$