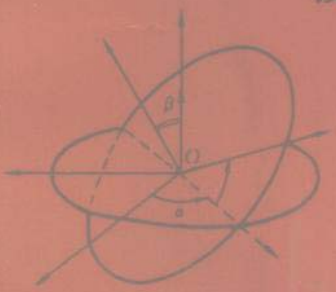
高等量子力学

钱诚德　编著



Gao Deng Liang Zi Li Xue

上海交通大学出版社

上海交通大学“九五”重点教材

高等量子力学

钱诚德　编著

上海交通大学出版社

内 容 提 要

本书作者以上海交通大学应用物理系开设的高等量子力学课程编写的讲义为基础,经过多次修改、补充而成,可以作为量子力学的后续课程教材。全书共分九章,基本内容包括:希尔伯特空间,量子力学的基本原理,时空对称性,一些近似方法,二次量子化方法,散射理论,角动量理论,路径积分方法及相对论量子力学等。

此外,书末还附有一定数量的例题和习题,以帮助读者加深对基本概念的理解及培养对基本方法的运用能力,其中有些例题具有新颖性。

本书可作为物理各专业研究生的高等量子力学课程教材或参考书,也可供高年级本科生、教师和科研工作者参考。

高等量子力学

钱诚德　编著

上海交通大学出版社出版发行

上海市番禺路 877 号　邮政编码 200030

电话　64281208　传真　64683798

全国新华书店经销

常熟市印刷二厂・印刷

开本:889×1194(mm) 1/32　印张:11.75　字数:305 千字

版次:1998 年 12 月　　第 1 版

印次:1998 年 12 月　　第 1 次

ISBN 7-313-01559-3/O·140

定价:19.00 元

前　言

量子力学是研究微观物质世界运动规律的理论，是现代物理学的理论基础和支柱。1900 年普朗克(Planck) 提出了能量子假说，开创了量子论的新纪元。1925 年海森堡(Heisenberg) 提出了矩阵力学，随后 1926 年薛定谔(Schrödinger) 提出了波动力学，从而宣告量子力学诞生。此后，人们开始冲破经典物理学框架，对微观世界的奥秘进行探索。现在，量子力学理论已深入到物理学各个领域，并且在化学和生物学的某些领域中也得到极其广泛的应用。

随着量子力学应用范围的扩大和认识的深化，量子力学的基本概念和基本理论也得到相应的发展，出现了不少新的理论和方法。例如：狄拉克(Dirac) 的态矢量空间理论体系，对称性理论，形式散射理论，二次量子化理论，相对论量子力学，路径积分量子力学等。以上的内容通常属于高等量子力学。

高等量子力学和量子力学本来没有明显的界限。许多量子力学巨著，无论在深度上和广度上都几乎包含了量子力学的全部内容或大部分内容，没有高等量子力学和量子力学之分，因为两者基本原理和出发点一致。但是由于高等学校物理专业教学计划的要求，形成了与大学本科水平相适应的量子力学课程的特定内容和深度，更高要求的内容则留在研究生阶段进行学习，即所谓高等量子力学。1982 年教育部颁布《高等量子力学教学大纲》规定其内涵为：线性空间理论，有限群及其表示，量子力学的基本原理，表象理论和三种绘景，对称性和守恒定律，角动量理论，近似方法和若干应用，散射的形式理论，二次量子化方法，单电子的相对论量子力学等。

本课程的内容，除大纲内的有限群表示由群论讲述以外，还将介绍路径积分量子力学，这是与波动力学、矩阵力学等价的第三种描述方法。至于辐射的量子理论、量子电动力学和量子场论，也是量子力学的发展和应用，但是其物理思想、概念和方法都有新的突破，已经形成另一门独立学科，这将在另一门课程中讨论。

近年来，上海交通大学理学院理论物理、凝聚态物理、光学及天体物理等各物理学科专业研究生均开设了一门《高等量子力学》学位课程。由于这门课程教学工作的需要，我们编写了这本适应面广、学时数少，而且可以作为本科量子力学后续课程的研究生教材。在本书的编写过程中得到了许多同行的关心和支持，在此谨向邱锡钧教授、黄惠慈研究员、崔世民博士、张海燕博士和怀平博士等所给予的大力支持与帮助表示衷心感谢，并且对上海交通大学出版社的许多同志所付出的辛勤劳动表示感谢。

钱诚德

1998年8月于上海交通大学应用物理系

目　　录

第一章　希尔伯特空间

希尔伯特空间为量子力学的数学表述提供了方法。一般地，力学量用希尔伯特空间中的算符表示，称为力学量算符；物理态可以用希尔伯特空间中的矢量函数表示，称为态矢量。描述物理系统中可能状态的矢量函数全体构成一个函数集合，其最重要的性质为：这种集合是完备的。整个量子力学就是建立在这一数学理论基础上的。

1.1　希尔伯特空间

从量子力学的数学表述看，希尔伯特空间具有一些重要性质，例如：① 它是 ∞ 维的复矢量空间，② 存在完备的基矢组，③ 可以定义标量积(内积) 的空间。下面就以上的性质分别进行讨论。

1.1.1　复矢量空间

当下述两个条件成立时，称元素 $x,y,z,\cdots$ 的集合 L 为域 C(所有复数集合) 上的矢量空间，即复矢量空间。一般地，矢量空间也称为线性矢量空间或线性空间。

(1) 在 L 中定义了一个加法运算，记为“+”。任意两个元素可以相加，任意两元素之和仍为空间中的元素。设 $\emptyset$ 为单位元素，则

$$\emptyset, x + y = z \in L$$

并满足

① $x + y = y + x \in L$，交换律。

② $(x + y) + z = x + (y + z) \in L$，结合律。

③ $x + \emptyset = x \in L$。

(2) 域 C 上的任一数乘以 L 中的任一元素仍为 L 中的元素。设 $0,1,\alpha,\beta \in C;\emptyset,x,y \in L$,则还满足

④ $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y \in L$。

⑤ $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x \in L$。

⑥ $(\alpha\beta)x = \alpha(\beta x) \in L$。

⑦ $1 \cdot x = x$。

⑧ $0 \cdot x = \emptyset$(以后将不区分 0 与 $\emptyset$)。

矢量空间的元素称为矢量。矢量空间的维数是空间中线性无关矢量的最大个数,如普通的三维空间,最多可以找到三个线性无关矢量。

1.1.2 完备基矢组

1. 线性无关

考虑两个矢量 r_i,r_j,如果 r_i,r_j 不是倍数关系,即不可能找到一个数 C,使得 $r_i = Cr_j$,则称 r_i,r_j 彼此线性无关。一般地,$\sum_{i=1}^{n} a_i r_i = 0$ 仅对所有 $a_i = 0(1 \leqslant i \leqslant n)$ 才成立,则称 $r_i(i = 1,\cdots,n)$ 线性无关,从而构成一个矢量集。换言之,n 个线性无关的矢量集中没有一个矢量可以表示成其余 $n - 1$ 个矢量的线性组合。

2. 完备集

在 n 维矢量空间 L 中,n 个线性无关的矢量集合称为 L 中的完备集。空间中的任一矢量都能表为这个完备集的线性组合:

$$r = \sum_{i=1}^{n} a_i r_i, a_i \in C。$$

若在 L 中选取 k 个相互独立的矢量($k < n$),则称其为 L 中的不完备集。另一方面,若在 L 中选出多于 n 个的矢量,则它们组成一个超完备集或过剩集,这些矢量不可能全部线性无关。

3. 基矢

一个 n 维矢量空间可以有许多完备集。任一完备集,或任一组 n 个线性无关的矢量称为此空间的基,这些矢量称为基矢。显然,基的选择不是唯一的,有无穷多种选择方法。L 中任一矢量 r 可按基矢展开:

$$r = \sum_{i=1}^{n} a_i r_i,$$

对于$\mathscr{H}$空间(即希尔伯特空间),$n = \infty$,对于任一矢量(采用Dirac记号)

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i |i\rangle。$$

1.1.3 内积空间

以上所说的空间,称为右矢空间,矢量称为右矢或 ket 刃,用 $|u\rangle$, $|v\rangle$ 表示。$\mathscr{H}$空间中要求存在一个对应的共轭空间,其中每个矢量与右矢空间中的矢量有一一对应关系。这个新的空间称为左矢空间,矢量称为左矢或 bra 刃,用$\langle u|$表示与右矢 $|u\rangle$ 相应的左矢。对于它们的性质作如下规定:

(1) 左矢和右矢之间,没有相加运算。

(2) 左矢和右矢之间定义一个内积运算,满足

① $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$("$*$"表示取复数共轭),$\langle a|a\rangle \geqslant 0$;

② $\langle a|(|b\rangle + |b'\rangle) = \langle a|b\rangle + \langle a|b'\rangle$,

$(\langle a| + \langle a'|)|b\rangle = \langle a|b\rangle + \langle a'|b\rangle$;

③ $\langle a|(\alpha|b\rangle) = \alpha\langle a|b\rangle$,

$(\alpha\langle a|)|b\rangle = \alpha\langle a|b\rangle, \alpha \in C$。

定义了内积的矢量空间称为内积空间。

设对应于基矢 $|i\rangle$ 的左矢空间基矢为$\langle i|$,则对应于$|a\rangle$的左矢空间矢量可展开为

$$\langle a| = \sum_{i=1}^{\infty} a_i^* \langle i|。$$

另外，还需要规定矢量模、正交性等概念。

如果两个矢量 $|a\rangle$，$|b\rangle$ 的内积为零，$\langle a|b\rangle = 0$，则称两矢量正交。如果所有矢量 $|a_1\rangle$，$|a_2\rangle$，$\cdots$ 彼此正交，且每一个矢量 $\langle a_i|a_i\rangle = 1$，$i = 1,2,\cdots$，则这些矢量的集合称为正交归一集，即如果 $\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$，则 $\{|a_1\rangle,\cdots,|a_j\rangle\}$ 是正交归一集。

由于矢量同它自身共轭对应矢量的内积 $\langle a|a\rangle \geqslant 0$，因而可以规定 $\mathscr{H}$ 空间意义下的模 $\|a\| = \sqrt{\langle a|a\rangle}$，而模为1的矢量称为归一化矢量。

如果不考虑数学上的严密性，则可以粗略地认为满足1.1.1、1.1.2和1.1.3的空间称为 $\mathscr{H}$ 空间。

1.2 算符

上节介绍了 $\mathscr{H}$ 空间的概念，现在进一步讨论在此空间上运算的算符。考虑 $\mathscr{H}$ 空间中的一个变换，经过变换后，任意矢量 $|a\rangle$ 成为一个矢量 $|b\rangle$，$|b\rangle$ 仍属于 $\mathscr{H}$ 空间，即变换使空间映射为它自身。

$$\mathscr{H} \to \mathscr{H},\ |a\rangle \to |b\rangle。$$

设变换由 $\hat{U}$ 描述(算符上方的算符记号“$\wedge$”，在不致误解时，为了简化，常常省去“$\wedge$”，将算符 $\hat{U}$ 直接记为 U)，

$$|b\rangle = U|a\rangle,\ |a\rangle,\ |b\rangle \in \mathscr{H},$$

则称算符 U 定义在 $\mathscr{H}$ 空间上。

量子力学中的算符可以代表对态矢量的运算或是对其进行的某种操作等。

1.2.1 定义

1. 线性算符

若 $\hat{U}(|a\rangle + |b\rangle) = \hat{U}|a\rangle + \hat{U}|b\rangle$，$|a\rangle$，$|b\rangle \in \mathscr{H}$；

$\hat{U}(\alpha|a\rangle) = \alpha\hat{U}|a\rangle$，$\alpha \in C$；

则称 $\hat{U}$ 为线性算符。

2. 反线性算符

若$\hat{T}(|a\rangle+|b\rangle)=\hat{T}|a\rangle+\hat{T}|b\rangle,|a\rangle,|b\rangle\in\mathscr{H}$;

$\hat{T}(\alpha|a\rangle)=\alpha^*\hat{T}|a\rangle,\alpha\in C$,

则称 $\hat{T}$ 为反线性算符。其中"$*$"表示对 α 取复数共轭。

在量子力学中绝大多数算符是线性算符,这是由于力学量算符对态矢量作用时必须保证态叠加原理成立,而也有少数算符,如时间反演变换算符,就是一种反线性算符,因为在这种算符中包含有对态矢量取复数共轭的操作。所以,一般地如果没有特别的指明,都是指线性算符,而且往往省略"线性"两字。

1.2.2 算符的运算

1. 算符相等

若任意 $|a\rangle\in\mathscr{H}$,算符 $\hat{P}$ 与 $\hat{Q}$ 对 $|a\rangle$ 的作用,总有

$$\hat{P}|a\rangle=\hat{Q}|a\rangle$$

成立,则称两算符相等,记为 $\hat{P}=\hat{Q}$。

2. 算符相加

若 $\hat{U}|a\rangle=\hat{P}|a\rangle+\hat{Q}|a\rangle$,则记为 $\hat{U}=\hat{P}+\hat{Q}$。其中 $|a\rangle\in\mathscr{H}$ 为任意态矢量。上式反过来可以说,$\hat{U}$ 满足分配律:$(\hat{P}+\hat{Q})|a\rangle=\hat{P}|a\rangle+\hat{Q}|a\rangle$。

3. 算符相乘

若 $\hat{U}|a\rangle=\hat{P}(\hat{Q}|a\rangle)=\hat{P}\hat{Q}|a\rangle$,则称 $\hat{P}$、$\hat{Q}$ 相乘的结果为 $\hat{U}$,记为 $\hat{U}=\hat{P}\hat{Q}$。

算符相乘的运算代表两个变换,首先是 $\hat{Q}$ 变换,然后是 $\hat{P}$ 变换。这两个变换的先后次序不一定可交换,一般说来,$\hat{P}\hat{Q}\neq\hat{Q}\hat{P}$,即一般地说,交换律不成立。若 $\hat{P}\hat{Q}=\hat{Q}\hat{P}$,则称 $\hat{P}$、$\hat{Q}$ 可对易。一般地

$$[\hat{P},\hat{Q}]\equiv\hat{P}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{P}$$

称为两算符的对易子。

4. 逆算符

在 $\mathscr{H}$ 空间中,给定算符 $\hat{U}$,设 $\hat{U}|a\rangle=|b\rangle$。若存在一个算符

$\hat{U}^{-1}$ 满足

$$|a\rangle = \hat{U}^{-1}|b\rangle(|a\rangle \text{是唯一确定的}),$$

则称 $\hat{U}^{-1}$ 是算符 $\hat{U}$ 的逆算符。

显然逆算符满足 $\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}\hat{U} = E$,其中 E 是恒等算符或单位算符。这里要注意,不是所有的算符都有逆算符的,只有非奇异算符才有逆算符存在,即仅当由算符 $\hat{U}$ 的矩阵元组成的行列式不为零时,逆算符才存在,记为 $\det U \neq 0$。另外,容易证明 $(\hat{P}\hat{Q})^{-1} = \hat{Q}^{-1}\hat{P}^{-1}$。

5. 相似变换

若算符 $\hat{P}$ 变换 $|a\rangle$ 为 $|b\rangle$,记为 $\hat{P}|a\rangle = |b\rangle$,而另一算符 $\hat{Q}$ 变换 $|a\rangle$ 为 $|a'\rangle$,记为 $\hat{Q}|a\rangle = |a'\rangle$,而且 $\hat{Q}$ 变换 $|b\rangle$ 为 $|b'\rangle$,记为 $\hat{Q}|b\rangle = |b'\rangle$,那么变换 $|a'\rangle$ 为 $|b'\rangle$ 的算符 $\hat{P}'$ 是什么形式呢?不难证明:

$$\hat{P}' = \hat{Q}\hat{P}\hat{Q}^{-1}$$

这一种算符的变换称为相似变换。

1.2.3 厄密算符和幺正算符

1. 厄密共轭算符

右矢 $\hat{U}|a\rangle$ 的共轭左矢量,可以看作是另一个算符 $\hat{U}^{+}$ 从右方对 $|a\rangle$ 作用的结果,则 $\hat{U}^{+}$ 称为 $\hat{U}$ 的厄密共轭算符。厄密共轭具有以下性质:

(1) $\langle b|\hat{U}|a\rangle = \langle b|(\hat{U}|a\rangle) = [(\langle a|\hat{U}^{+})|b\rangle]^{*} = \langle a|\hat{U}^{+}|b\rangle^{*}$;

(2) $(\hat{U}^{+})^{+} = \hat{U}$;

(3) $(\hat{P}\hat{Q})^{+} = \hat{Q}^{+}\hat{P}^{+}$。

这是因为

$$\begin{aligned}\langle a|(\hat{P}\hat{Q})^{+}|b\rangle &= \langle b|\hat{P}\hat{Q}|a\rangle^{*} \\ &= [(\langle b|\hat{P})(\hat{Q}|a\rangle)]^{*} \\ &= (\langle a|\hat{Q}^{+})\cdot(\hat{P}^{+}|b\rangle) \\ &= \langle a|\hat{Q}^{+}\hat{P}^{+}|b\rangle,\end{aligned}$$

其中“ * ”表示取复数共轭。

2. 厄密算符

若 $\hat{U}$ 的厄密共轭算符与其本身相等，即 $\hat{U}^{+}=\hat{U}$，则称 $\hat{U}$ 为厄密算符。厄密算符具有两个基本性质：

(1) 本征值是实数；

(2) 对应于不同本征值的本征矢量相互正交。

对于以上两个性质，可作以下讨论：

设 $\hat{U}\mid a_i\rangle=\lambda_i\mid a_i\rangle$ 为 $\hat{U}$ 的本征方程，其中 λ_i 为与本征矢量 $\mid a_i\rangle$ 所对应的本征值，则

$$\langle a_i\mid\hat{U}\mid a_i\rangle=\lambda_i,$$

而另一方面

$$\langle a_i\mid\hat{U}\mid a_i\rangle=\langle a_i\mid\hat{U}^{+}\mid a_i\rangle^{*}=\lambda_i^{*},$$

这样，比较两式可得 $\lambda_i=\lambda_i^{*}$，即性质(1)成立。

再由于

$$\langle a_i\mid\hat{U}\mid a_j\rangle=\lambda_j\langle a_i\mid a_j\rangle,$$

另一方面又有

$$\begin{aligned}\langle a_i\mid\hat{U}\mid a_j\rangle&=\langle a_j\mid\hat{U}^{+}\mid a_i\rangle^{*}\\&=\lambda_i\langle a_j\mid a_i\rangle^{*}=\lambda_i\langle a_i\mid a_j\rangle,\end{aligned}$$

所以

$$\lambda_j\langle a_i\mid a_j\rangle=\lambda_i\langle a_i\mid a_j\rangle。$$

由于 $\lambda_i\neq\lambda_j$，所以 $\langle a_i\mid a_j\rangle=0$，即性质(2)成立。

3. 幺正算符

若 $\hat{U}^{+}\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^{+}=E$ 或 $\hat{U}^{+}=\hat{U}^{-1}$ 成立，则称 $\hat{U}$ 为幺正算符。幺正算符在表象变换中起重要作用。

1.2.4 投影算符

(1) 引入矢量的外积 $\mid a\rangle\otimes\langle b\mid$，简记为 $\mid a\rangle\langle b\mid=\hat{P}$。

① $\hat{P}$ 是一个投影算符，考察 $\hat{P}$ 对态矢量 $\mid c\rangle$ 的作用，

$$\hat{P}\mid c\rangle=\mid a\rangle\langle b\mid\cdot\mid c\rangle=\mid a\rangle\langle b\mid c\rangle,$$

其中$\langle b\mid\cdot\mid c\rangle$可以看成内积$\langle b\mid c\rangle$,而$\langle b\mid c\rangle$是一个复数,结果将$\mid c\rangle$变成$\mid a\rangle$的$\langle b\mid c\rangle$倍,即在$\mid a\rangle$方向上的投影。

② $\hat{P}$ 是一个线性算符。

③ $\hat{P}$ 的厄密共轭算符为$(\mid a\rangle\langle b\mid)^{+}=\mid b\rangle\langle a\mid$。

(2) 设右矢空间正交归一完备基矢为$\mid i\rangle$,则$\langle i\mid j\rangle=\delta_{ij}$,定义投影算符 $\hat{P}_i=\mid i\rangle\langle i\mid$,那么 $\hat{P}_i$ 具有以下性质:

① $\hat{P}_i\mid\psi\rangle=\mid i\rangle\langle i\mid\cdot\mid\psi\rangle=\langle i\mid\psi\rangle\mid i\rangle$,即$\mid\psi\rangle$在基矢$\mid i\rangle$上的投影,所以,$\hat{P}_i$ 就是把$\mid\psi\rangle$投向基矢$\mid i\rangle$的投影算符。

② $\hat{P}_i$ 是线性算符和厄密算符,但不是幺正算符,而且从逆算符的要求看(经过逆算符所求得的原态矢量必须是唯一确定的),投影算符没有逆算符。

③ 由于$\hat{P}_i^2=\mid i\rangle\langle i\mid i\rangle\langle i\mid=\mid i\rangle\langle i\mid=\hat{P}_i$,所以,$\hat{P}_i^2=\hat{P}_i$这种性质,称为等幂性。

④ $\sum\limits_i\hat{P}_i=E$,即$\sum\limits_i\mid i\rangle\langle i\mid=E$,此式称为完备性关系。设$\{\mid i\rangle\}$组成正交归一完备基矢组,这样任意的$\mid\psi\rangle$可以展开成为

$$\mid\psi\rangle=\sum_{i=1}^{\infty}\mid i\rangle\psi_i。$$

为了求得系数 ψ_i,作内积

$$\langle i\mid\psi\rangle=\sum_{j=1}^{\infty}\psi_j\langle i\mid j\rangle=\sum_j\psi_j\delta_{ij}=\psi_i,$$

代回原式得

$$\mid\psi\rangle=\sum_{i=1}^{\infty}\mid i\rangle\langle i\mid\psi\rangle=\sum_{i=1}^{\infty}\mid i\rangle\langle i\mid\cdot\mid\psi\rangle,$$

进一步地,再把$\sum\limits_{i=1}^{\infty}\mid i\rangle\langle i\mid$看作算符,上式右端即为

$$\Big(\sum_{i=1}^{\infty}\mid i\rangle\langle i\mid\Big)\mid\psi\rangle,$$

所以

$$|\psi\rangle = \left(\sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i|\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle,$$

这样就可得到

$$\sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i| = E。$$

上式可以理解为向整个矢量空间投影的投影算符 $\sum_{i=1}^{\infty}\hat{P}_i$,所以,任何态矢量在它的作用下都不会发生变化。由于此式是以 $|i\rangle$ 完备性为前提的,所以此式也称为完备性关系或完备性条件,在计算中非常有用。如求内积,$\langle\psi|\psi\rangle$ 可写成

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|E|\psi\rangle = \sum_i \langle\psi|i\rangle\langle i|\psi\rangle,$$

这就是巴赛伐(Parseval)恒等式。

1.2.5 算符本征矢

(1) 设算符 $\hat{U}$ 的作用是把矢量 $|a\rangle \to |b\rangle$,记作 $\hat{U}|a\rangle = |b\rangle$。而 $\hat{U}$ 对基矢 $|i\rangle$ 的作用相应为 $|i\rangle \to |u\rangle = \sum_j \langle j|u\rangle|j\rangle$,其中 $\langle j|u\rangle$ 可以写成 $u_{j,i}$,代回原式可得

$$U|i\rangle = \sum_j u_{j,i}|j\rangle。$$

基矢的选择并非唯一,可以选择一组正交归一基矢,尽量使上式简化。最简单的情形是 $u_{j,i} = u_i\delta_{i,j}$,这样将得到

$$U|i\rangle = u_i|i\rangle (u_i = u_{i,i})$$

满足上式的非零矢量 $|i\rangle$ 称作算符 $\hat{U}$ 对应于本征值 u_i 的本征矢,而上式常称为本征值方程。一个算符的本征值的集合称为算符的本征值谱或谱。关于本征值有以下值得注意的性质:

① 厄密算符的本征值为实数(已证);

② 幺正算符本征值的绝对值为 1。

设 $\hat{U}$ 为幺正算符,本征矢为 $|i\rangle$,则有本征值方程:

$$\hat{U}|i\rangle = u_i|i\rangle。$$

对此方程两边同时作厄密共轭得

$$\langle i | \hat{U}^{+} = \langle i | u_i^*。$$

又由算符 $\hat{U}$ 的幺正性可知 $\hat{U}^{+}\hat{U} = E$ 成立,求此式在 $\langle i|$ 态与 $|i\rangle$ 态之间的矩阵元可得

$$\langle i | i\rangle = \langle i | \hat{U}^{+}\hat{U} | i\rangle = u_i u_i^* \langle i | i\rangle,$$

其中利用了本征值方程及其厄密共轭式。又由于 $\langle i | i\rangle \neq 0$,则 $u_i^* u_i = |u_i|^2 = 1$,所以 $|u_i| = 1$。

③ 幺正的相似变换不改变算符的本征值。

设 $\hat{P}|i\rangle = P_i|i\rangle$,在幺正相似变换下

$$|i\rangle \to |i'\rangle = \hat{U}|i\rangle,$$

$$\hat{P} \to \hat{P}' = \hat{U}\hat{P}\hat{U}^{-1},$$

则

$$\hat{P}'|i'\rangle = \hat{U}\hat{P}\hat{U}^{-1}\cdot\hat{U}|i\rangle = \hat{U}\hat{P}|i\rangle = P_i U|i\rangle = P_i|i'\rangle,$$

即 $\hat{P}$ 和 $\hat{U}\hat{P}\hat{U}^{-1}$ 具有相同的本征值谱,但本征矢不同,分别为 $|i\rangle$ 和 $\hat{U}|i\rangle$。换句话说,算符的本征值谱是算符的内禀性质。

(2) 简并和完备算符集。算符的本征值不必各不相同,也就是说,两个或更多的本征矢可对应于同一个本征值,此时称这些本征矢是简并的。本征值的简并度就是属于该本征值的独立的本征矢的个数。简并的本征矢所张子空间中的每一矢量均可以表示为简并本征矢的线性组合。

假设 $|\psi\rangle = \sum_\alpha \psi_\alpha |\alpha\rangle$,则

$$\hat{U}|\psi\rangle = \hat{U}\left(\sum_\alpha \psi_\alpha |\alpha\rangle\right)$$

$$= \sum_\alpha \psi_\alpha \hat{U}|\alpha\rangle = \sum_\alpha \psi_\alpha u|\alpha\rangle = u\sum_\alpha \psi_\alpha|\alpha\rangle = u|\psi\rangle,$$

这样,属于同一本征值的全部独立的本征矢集构成本征子空间。

如果算符 $\hat{U}$ 的本征值 α 存在简并,那么对于 α 就不能完全确定唯一的本征矢。这时必须再确定一个和 $\hat{U}$ 算符对易的算符 $\hat{P}$ 的本征值,其对应的本征值方程为 $\hat{P}|\psi\rangle = P_\psi|\psi\rangle$,才能解除简并,