量子力學的數學結構

Kow Lung Chang 張國龍 Physics Department, National Taiwan University

September 28, 2011



引言

研究不同的學門所使用的數學工具會有所差異;在古典力學的領域裡,我們需要具備變分學(variational calculus)的知識,才能處理一群(或一個)質點的動力方程式。在量子力學裡,也一樣需要一些不同的數學工具。我們需要線性代數(linear algebra),線性向量空間(linear vector space)的知識,更重要的是對 Hilbert 空間(Hilbert space)的了解和熟稔,才能完全領會量子力學最基本的四大公理(the four postuates of quantum mechanics)。

不同的探討領域,也還需要不同的數學工具。量子力學系統中,很重要的一個特徵是系統的對稱性(symmetry property)。當我們研究系統的對稱轉換(symmetry transformation)時,就需要用到連續群(continuous group)或李群(Lie group)的理論及其 group representations。

從我過去講授量子力學課程的經驗裡,時常遇到一個由學生提出的共同問題:到底我們要具備多少數學的背景知識,才能有信心、有效率地來研修這門課程。當然這個問題難給予統一的答案,因爲學生當中所具備的數學背景頗爲懸殊,一般大學部標準的應用數學課程,一定包括線性代數等範圍,有的學生也會到數學系選修群論(group theory)等課程。當我無法在講授量子力學的同時解決擁有不同數學背景學生們遇到的困難時,我只能數度修訂我的量力講義,當需使用到特殊的數學工具時,我將這些資料先行介紹給學生,節省他們重新摸索的時間。

這本書首先回顧線性向量空間,並以其數學術語來闡述量子力學的基本定律。第一章除了介紹量子力學前三大定律外,也討論在量子力學中不可或缺,線性算子(linear operators)和 dynamical observables 之間的關係。

量子力學當然不只是解某一特定的系統的 Schrödinger 方程式,但是傳統上它卻一再用來作爲系統量化的實例: 如氫原子光譜,或者它的角動量。本書第二章藉由將前一章抽象的量子理論數學架構轉化爲讀者熟悉的 q-representation 與 p-representation ,同時輔以經典的簡諧振子(harmonic oscillator)爲例,說明 N-representation 與 q-representation 之間的關係。

很多作者試圖以波包(wave packet)的方法來推導 Schrödinger 方程式。嚴格來說, Schrödinger 方程式絕對不是波包運動時省略某些項而獲得的近似結果。Schrödinger 方程式 是一個 exact equation,並且是量子力學中唯一的 dynammical postulate。正如同古典力學 中,牛頓第二運動定律: $\vec{f} = m\vec{a}$ 是 dynamical law of motion 而不是可從推導去獲得一般, Schrödinger 方程式這個動力學上的假設決定了一個量子態(quantum state)隨時間的演化(time evolution)。在第二章結束以前,我們將示範在古典理論的極限下,即 $\hbar \to 0$ 時, 古典力學的運動方程式確實可以從量子系統時域演化所定義的傳播子(propagator)之極大值再次獲得。

從第三章到最後一章,探討的重心完全集中於量子系統的對稱性。在第三章中,我們分別探討連續群(continuous group)與離散群(discrete group);介紹李群(Lie group)與李代數(Lie algebra),並且深入分析 半純李群(semisimple Lie group)及 半純李群代數(semisimple Lie algebra)之標準形(standard form)。至於離散群的對稱性則僅限於PCT 的分析。

第四章則由 O(3) 及 SU(2) 對稱群來探討角動量,並介紹 O(3) 的不可約表示(irreducible representation)與球諧函數(spherical harmonics)之間的關聯。最後也介紹 dynamical symmetry 在 Coulomb 力作用之系統中的應用來做總結。

最後一章從時空的對稱轉換來建構 Lorentz 群,並且從 Lorentz 群的有限維表示 (finite dimensional representation)來進行具有不同內稟自旋 (intrinsic spin)粒子的分類。我們特別以 Dirac 粒子爲例詳細地探討 Dirac 方程式及其相關的 PCT 轉換的特徵。

本書的專門術語將儘量依照國家教育研究院公告之學術名詞對照表給予中文譯名,並在該名詞首次出現時同時列出英文原名。少部份無適當譯名之術語則照列原文。另外也可以從附錄的中英名詞對照表來檢索。

Taipei, Taiwan September, 2011

Kow Lung Chang

Contents

1			1
	1.1	有限維與無限維的向量空間	1
	1.2	量子力學的 q 表示與 p 表示	9

X Contents

量子力學的各種表示理論

1.1 有限維與無限維的向量空間

在第一章討論向量空間時,我們一直採以抽象的符號來說明向量與向量空間的種種性質與相關 定理。從這一章開始,我們將以學習過的數學,或者新介紹的數學工具,重新驗證上一章以抽 象符號描述的理論。

首先我們以 C^n 空間爲例,過去我們學習過的矩陣理論,其實就是有限維向量空間中最具體的表示(representation)。在 C^n 空間中的一個向量,通常用 n 個複數由上而下排成一行來表示,譬如抽象的向量 \bar{x} 即可表示爲

$$\bar{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_i \\ x_{i+1} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \tag{1.1}$$

這個向量矩陣我們稱爲行矩陣(column matrix),其中 x_i 是該向量的第 i 個分量,當然是複數。因爲矩陣的運算操作法則與向量的兩個基本操作法則一致,並且也滿足向量的八個條件,這就是爲何數學家以矩陣來進行有限維向量空間的各種運算。

用行矩陣來表示 C^n 空間中的一個向量並不是唯一的選擇或方法。我們也曾在第一章時,

將一個向量 x 用橫寫得 n 個 x_i ,即 $(x_1, x_2, \ldots, x_i, \ldots, x_n)$ 來表示。也就是說 n 維向量也可以用列矩陣(row matrix)來描述。用列矩陣來表示向量的線性空間稱爲 \mathcal{C}^n 空間的對偶空間(dual space),使用符號 $\tilde{\mathcal{C}}^n$ 來表示。爲了有別於前述的行矩陣 x, $\tilde{\mathcal{C}}^n$ 中的向量符號爲:

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} x_1, & x_2, & \dots, & x_i, & x_{i+1}, & \dots, & x_n \end{pmatrix},$$
 (1.2)

矩陣的表示法有很多方便之處。 \mathcal{C}^n 空間的第i 個基底向量就很自然地表爲 \bar{e}_i ,它也是具有n 個分量的行矩陣,除了第i 個分量爲 1,其他分量皆爲零,即

$$\bar{e_i} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{1.3}$$

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i \bar{e}_i. \tag{1.4}$$

在 $\tilde{\mathcal{C}}^n$ 空間中, 第 i 個基底向量則寫爲

$$\tilde{e_i} = \begin{pmatrix} 0, & 0, & \dots, & 1, & \dots, & 0 \end{pmatrix}.$$
 (1.5)

所以任何 * C^n 空間中的向量 \tilde{x} 也可以表示成 \tilde{e}_i 的線性組合,即

$$\tilde{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i \tilde{e_i}. \tag{1.6}$$

以矩陣討論量子力學時, \tilde{x} 空間的觀念用處不多,反而另一個對偶空間 $*\mathcal{C}^n$ 的用處更大。 $*\mathcal{C}^n$ 空間中的向量也是一個列矩陣,在 \mathcal{C}^n 中的一個向量 \bar{x} 對應於 $*\mathcal{C}^n$ 中的向量寫爲 \tilde{x}^* ,這個向量是行矩陣 \bar{x} 的伴隨共軛形(adjoint conjugate),亦即將 \bar{x} 的各個分量 x_i 的共軛(complex conjugate)依序擺入列矩陣中:

$$\tilde{x}^* = \bar{x}^\dagger = \begin{pmatrix} x_1^*, & x_2^*, & \dots, & x_i^*, & x_{i+1}^*, & \dots, & x_n^* \end{pmatrix}$$
 (1.7)

* \mathcal{C}^n 空間的好處可以從向量空間的內積計算看出來。當我們求取 \bar{x} 與 \bar{y} 這組有序對的內積時我們就可以遵循矩陣的基本操作法則,計算 \bar{x} 向量的伴隨共軛 \bar{x}^\dagger 與 \bar{y} 向量的積。也就是內積 (x,y) 可寫爲列矩陣 \tilde{x}^* 與行矩陣 \bar{y} 的積。

$$(x,y) = \tilde{x}^* \bar{y} = \bar{x}^{\dagger} \bar{y} = \begin{pmatrix} x_1^* & x_2^* & \dots & x_i^* & \dots & x_n^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_i \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n x_i^* y_i.$$
 (1.8)

值得一提的是 $\tilde{\mathcal{C}}^n$ 空間及 $*\mathcal{C}^n$ 空間的基底構成相同,第 i 個基底向量都可寫爲

$$\tilde{e_i}^* = \tilde{e_i} = \begin{pmatrix} 0, & 0, & \dots, & 1, & \dots, & 0 \end{pmatrix}.$$
 (1.9)

由 eq. 1.9 與 eq. 1.3 可以得到

上式說明了(

 \mathcal{C}^n 空間中線性算子 (linear operator) 在矩陣的表示法就是大家所熟悉的 $n \times n$ 矩陣。如果我們用相同的符號 **A** 來表示 $n \times n$ 矩陣,則矩陣元素 (matrix elements) A_{ij} 可寫爲:

$$A_{ij} = \tilde{e}_i \mathbf{A} \bar{e}_j. \tag{1.10}$$

因爲 $\bar{e_j}$ 的伴隨共軛爲 $\bar{e_i}$, $\tilde{e_i}$ 的伴隨共軛爲 $\bar{e_i}$, 所以 \mathbf{A}^{\dagger} 的矩陣元素 $(A_{ij})^{\dagger}$ 爲

$$(A_{ij})^{\dagger} = \tilde{e}_i \mathbf{A}^{\dagger} \bar{e}_j = \bar{e}_i^{\dagger} A^{\dagger} \tilde{e}_j^{\dagger} = (\tilde{e}_j \mathbf{A} \bar{e}_i)^{\dagger}. \tag{1.11}$$

但 $\tilde{e_j}$ **A** $\bar{e_i}$ 唯一純數,所以它的伴隨形(adjoint)就是取複共軛(complex conjugate), 因此

$$(A^{\dagger})_{ij} = (\tilde{e_j} \mathbf{A} \bar{e_i})^{\dagger} = (\tilde{e_j} \mathbf{A} \bar{e_i})^* = A_{ii}^*. \tag{1.12}$$

驗證了 A 的伴隨共軛形式。

如果 **A** 代表量子系統中的可觀測量(observable),那麼 **A** = **A**[†],當該系統在量子態 \bar{x} 進行 **A** 的測量時,它的期望値可表以 \bar{x}^{\dagger} **A** \bar{x} 三個矩陣的乘積:

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \bar{x}^{\dagger} \mathbf{A} \bar{x} = \bar{x}^{\dagger} \mathbf{A}^{\dagger} \bar{x} = (\bar{x}^{\dagger} \mathbf{A} \bar{x})^{\dagger} = (\bar{x}^{\dagger} \mathbf{A} \bar{x})^{*} = \langle \mathbf{A} \rangle^{*}. \tag{1.13}$$

因此我們再次用矩陣來驗證量子力學中的可觀測量之期望值是實數。

有限維向量的矩陣表示法對於建構投影算子(projection operator)極爲方便。如果我們把基底向量(行矩陣) $\bar{e_i}$ 寫在左邊,並在右邊乘上共軛空間的基底向量(列矩陣) $\tilde{e_j}$,則該矩陣乘積就是一個i 維子空間(i subspace)的投影算子 \mathbf{P}_i ,即

$$\mathbf{P}_{i} = \bar{e}_{i}\tilde{e}_{i} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & & & \vdots \\ 0 & & & & 1 & & & 0 \\ 0 & & & & & 0 & & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

讀者可自行驗證

$$\mathbf{P}_{i}\mathbf{P}_{j} = \begin{cases} 0, $\mathbf{i} \neq j, \\ \mathbf{P}_{i}, \mathbf{i} \neq j, \text{ 亦即 } \mathbf{P}_{i}^{2} = \mathbf{P}_{i}. \end{cases}$$$

一個可以投影到子空間 \mathcal{M} 的投影算子 $\mathbf{P}_{\mathcal{M}}$ 則爲 \mathbf{P}_{i} 的部份和,亦即將 \mathcal{M} 中的所有 e_{i} 的投影算子相加:

$$\mathbf{P}_{\mathcal{M}} = \sum_{e_i \in \mathcal{M}} \mathbf{P}_i. \tag{1.15}$$

如果 \mathcal{M} 取爲 n 維的全部空間, 則

$$\sum_{i=1}^{n} \mathbf{P}_i = \sum_{i=1}^{n} \bar{e}_i \tilde{e}_j = \mathbf{I}. \tag{1.16}$$

上式就是封閉性質 (closure relation) 的矩陣表達。

對應於投射在子空間中向量 \bar{y} 的投影算子 $\mathbf{P}_{\bar{y}}$, 我們也可以利用行矩陣 \bar{y} 與其伴隨共軛的列矩陣 \bar{y} 有序操作來建構出投影算子:

$$\mathbf{P}_y = \bar{y}\bar{y}^{\dagger} = \bar{y}\tilde{y}^*. \tag{1.17}$$

矩陣表示法適用於有限維的向量空間,它無法應用在無限維空間的討論與分析。但是量子力學涉及的 Hilbert 空間往往都是無限維度,並且是不可分離的(nonseparable)。幸好在1930年代,Dirac 設計了一套符號適合用來討論及分析有限維或無限維、可分離或者不可分離的 Hilbert 空間,直至今日這套簡潔的符號系統仍廣爲物理學家使用。

在 Hilbert 空間 \mathcal{H} 中的一個向量, Dirac 用符號 $|\alpha\rangle$ 來表示,並稱之爲 ket 向量。對應於 Hilbert 空間 \mathcal{H} 的對偶空間 * \mathcal{H} 的伴隨共軛向量則使用 符號 $\langle \alpha|$ 來註記,並稱爲 bra 向量。當我們要計算一對有序向量 β 與 α 的內積時,可以用 Dirac 的符號系統(bra-ket)將 (β,α) 寫爲 $\langle \alpha|\cdot|\beta\rangle$, 或者簡寫爲 $\langle \beta|\alpha\rangle$,也就是從 * \mathcal{H} 取一個 bra 向量 $\langle \alpha|$ 和 \mathcal{H} 空間中的 ket 向量 α 依照有序對(order pair)的規則乘在一起:

$$\langle \alpha || \beta \rangle \equiv \langle \alpha | \beta \rangle. \tag{1.18}$$

當 β 取爲 α 時,相當於得到 \mathcal{H} 的範數平方,

$$\|\alpha\|^2 = \langle \alpha | \alpha \rangle. \tag{1.19}$$

如果 **A** 代表 \mathcal{H} 空間中的一個可觀測量,當 **A** 作用於 $|\alpha\rangle$ 而得到 $|\alpha'\rangle$,即 $\mathbf{A}|\alpha\rangle = |\alpha'\rangle$,我們計算 $|\beta\rangle$ 與 $|\alpha'\rangle$ 內積時可寫爲

$$(\beta, \alpha') = \langle \beta | \alpha' \rangle = \langle \beta | (\mathbf{A} | \alpha \rangle) \equiv \langle \beta | \mathbf{A} | \beta \rangle. \tag{1.20}$$

上式中間項的括號往往可以省略,並且意味著算子 **A** 是作用於右邊的 ket 向量。如果計算 $|beta'\rangle = \mathbf{A}|\beta\rangle$ 和 $|\alpha\rangle$ 的內積時,則因為 $\langle\beta'| = (|\beta'\rangle)^{\dagger} = \langle\beta|\mathbf{A}^{\dagger}$,所以

$$(\beta', \alpha) = (\mathbf{A}\beta, \alpha) = (\langle \alpha | \mathbf{A}^{\dagger}) | \beta \rangle = \langle \alpha | \mathbf{A}^{\dagger} | \beta \rangle. \tag{1.21}$$

上式第三項的括號也可省略。這表示該內積

$$\langle \beta | \mathbf{A}^{\dagger} | \alpha \rangle = \langle \beta | (\mathbf{A}^{\dagger} | \alpha \rangle) = (\beta, \mathbf{A}^{\dagger} \alpha), \tag{1.22}$$

可寫爲

$$(\beta', \alpha) = (\mathbf{A}\beta, \alpha) = (\beta, \mathbf{A}^{\dagger}\alpha). \tag{1.23}$$

該是即爲上一章介紹伴隨算子 (adjoint operator) \mathbf{A}^{\dagger} 的定義。

如果 **A** 代表的是一個量子系統的可觀測量時,則 **A** = **A**[†],當 β 取爲 α 時,($\langle \alpha | \mathbf{A}^{\dagger} | \alpha \rangle$) = ($\langle \alpha | \mathbf{A} | \alpha \rangle$)[†] = $\langle \alpha | \mathbf{A}^{\dagger} | \alpha \rangle$ *,所以量子可觀測量的期望値爲實數亦可由 Dirac 符號系統再次驗證。

第一章我們所討論的量子力學定律,如果以 Dirac 符號來描述,則顯得更爲簡潔。我們以量子系統的算子 $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\dagger}$ 來建構一個 \mathcal{H} 空間,那麼該空間的基底就可從 $\mathbf{A}|a\rangle = a|a\rangle$ 的固有向量(eigenvecotr,字根 eigen- 爲德語『具備某種特徵』、『特定於某物』之意)方程式

解出所有的 $|a\rangle$ 而獲得。當固有値(eigenvalue)a 是離散値,我們可用 $a_1, a_2, a_3, \ldots, a_i, \ldots$ 來表示,當足碼 i 由 1 至 n 就能描述所有可能的 a_n 時,那麼該 Hilbert 空間就是 n 維度空間。如果 a_i 可以取無限多値,那麼這個 \mathcal{H} 空間爲無限多維度可分離的 Hilbert 空間。任何該系統的量子狀態 $|\alpha\rangle$ 就可表以 $|\alpha_i\rangle$ 的線性組合,即

$$\alpha = \sum_{j} \alpha_{j} |a_{j}\rangle. \tag{1.24}$$

當 $|\alpha_i\rangle$ 已正則化時,

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}, \tag{1.25}$$

那麼 α_i 可從內積 $\langle a_i | \alpha \rangle$ 求出

$$\alpha_i = \langle a_i | \alpha \rangle = \langle a_i | \left(\sum_j \alpha_j | a_j \rangle \right) = \sum_j \alpha_j \delta_{ji}.$$
 (1.26)

我們可以獲得 Dirac 符號所表示的封閉性質

$$\sum |a_i\rangle\langle a_i| = \mathbf{I}.\tag{1.27}$$

其中 $\mathbf{P}_i = |a_i\rangle\langle a_i|$ 就是投射於第 i 個子空間的投影算子。如果是投射於子空間 \mathcal{M} ,則

$$\mathbf{P}_{\mathcal{M}} = \sum_{i} \mathbf{P}_{i} = \sum_{i} |a_{i}\rangle\langle a_{i}|, \quad |a_{i}\rangle \in \mathcal{M}. \tag{1.28}$$

當我們解固有向量方程式 $\mathbf{A}|a_i\rangle=a_i|a_i\rangle$,如果對應於 a_i 具有 m-folde 的簡併 (degeneracy) 時,則該固有向量必須多一個足碼來加以區別簡併態,我們通常將它表以 $|a_i,l\rangle$ 其中 a_i 爲固有值, $l=1,2,\ldots,m$ 代表該固有向量的 m 個簡併態。該系統的任何一個量子態 $|alpha\rangle$ 則表爲

$$|\alpha\rangle = \sum_{i} \sum_{l=1}^{m} \alpha_{i,l} |\alpha_{i,l}\rangle,$$
 (1.29)

其基底 $|\alpha_{i,l}\rangle$ 的正則化寫爲

$$\langle a_{i,l}|a_{i,k}\rangle = \delta_{ij}\delta_{jk}.\tag{1.30}$$

量子系統中,對應於某些可觀測量所求出的固有值往往是連續而非離散的。我們也可以用 它的固有值來標示其對應的固有向量,比如

$$\mathbf{A}|a\rangle = a|a\rangle. \tag{1.31}$$

a 是一個連續値的實數,因此不可分離的 \mathcal{H} 是無限維的。固有向量 $|a\rangle$ 的正則化當然有別於上述離散的情況,我們必須引入一個新的符號: δ 函數來進行描述,將 $|a\rangle$ 及 $|a'\rangle$ 的內積寫

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a-a'). \tag{1.32}$$

因爲 $a \neq a'$ 時, $|a\rangle$ 與 $|a'\rangle$ 正交,所以 $\delta(a-a')=0>$ 。但是 a' 可無限接近 a ,所以相似於可分離的固有向量的情況,即 $\langle a_i|a_j\rangle=\delta_{ij}$ 且 $\sum_i\langle a_i|a_j\rangle=_i\delta_{ij}=1$,我們可以定義

也就是說, $\delta(x-a)$ 函數具有以下性質:

$$\delta(x-a) \begin{cases} = 0, \ \text{\'a} \ x \neq a \ \text{時,} \\ \text{未定, \'a} \ x = a \ \text{fh.} \end{cases}$$

但 $\delta(x-a)$ 的總面積爲 1, 即 a 在積分範圍 Ω 之內時

$$\int \Omega \delta(x-a)dx = 1.$$

結束本節之前,我們還要在介紹一個經常使用,不可分離的 \mathbf{H} 的封閉性質。它也是從 $\sum_{i}|i\rangle\langle i|=\mathbf{I}$ 的離散和延伸到 aa 對 a 的積分,即

$$\int |a\rangle da\langle a| = \int \mathbf{P}_a da = \mathbf{I},$$

上式中的 \mathbf{P}_a 式投影到基底 $|a\rangle$ 的投影算子 $\mathbf{P}_a = |a\rangle\langle a|$ 。

1.2 量子力學的 q 表示與 p 表示

量子系統的實際演算,最常用的是 q 表示(q-representation)。因爲大多數的讀者最熟悉的數學也是微積分,所以操作微分算子以及波函數要比操作抽象的線性算子或者量子態來得自然。這一節我們要討論如何將抽象的 $\mathcal H$ 空間的量子系統以讀者熟悉的 q 表示來呈現計算的細節。

爲了簡要起見,我們只以一維的空間作爲示範。首先我們選取對應於位置的量子可觀測量 \mathbf{X} ,並由 \mathbf{X} 的固有向量 $|x\rangle$ 來展(span)成一個無限維的 \mathcal{H} 空間,即由

$$\mathbf{X}|x\rangle = x|x\rangle \tag{1.33}$$

所獲得的不可分離固有向量 $|x\rangle$ 作爲基底來建構一個 \mathcal{H} 空間。如果我們將該量子系統進行位移,例如由 x 的位置移到 $x+\xi$ 的位置,也就是說,我們試著建構一個平移算子(translational operator),以 $\mathbf{U}(\mathbf{P};\xi)=\exp(-\frac{i}{\hbar}\xi\mathbf{P})$ 的符號來表示,那麼將算子作用到固有向量上會得到

$$\mathbf{U}(\mathbf{P};\xi)|x\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\xi\mathbf{P}} = |x+\xi\rangle. \tag{1.34}$$

如何求得該平移算子 $\mathbf{U}(\mathbf{P};\xi)$ 爲 $\exp(-\frac{i}{\hbar}\xi\mathbf{P})$ 會留待下一章對稱轉換一節中加以討論,我們在此先討論該算子的特性:

 $\xi = g$ 参數,即空間中平移的距離 $\mathbf{P} = -$ 維的動量算子,

並且

$$\mathbf{U}^{\dagger}(\mathbf{P};\xi) = e^{\frac{i}{\hbar}\xi\mathbf{P}} = \mathbf{U}^{-1}(\mathbf{P};\xi).$$

所以 $\mathbf{U}(\mathbf{P};\xi)$ 是一個么正算子 (unitary operator)。我們先證明第一個引理:

引理一

 $\mathbf{U}(\mathbf{P};\xi)|x\rangle$ 爲位置算子 X 的固有向量,其固有值爲 $x+\xi$; 即 $\mathbf{U}(\mathbf{P};\xi)|x\rangle=|\alpha\rangle$,則 $\mathbf{X}|\alpha\rangle=(x+\xi)|\alpha\rangle$,所以 $|\alpha\rangle$ 可寫爲

$$|\alpha\rangle = \mathbf{U}(\mathbf{P};\xi)|x\rangle = |x + \xi\rangle.$$

證明

從基本對易關係 $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar \mathbf{I}$ 我們不難計算 $[\mathbf{X}, \mathbf{P}]^n$ 如下:

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}^n] = \mathbf{P}^{n-1}[\mathbf{X}, \mathbf{P}] + [\mathbf{X}, \mathbf{P}^{n-1}]\mathbf{P} = in\hbar \mathbf{P}^{n-1}, \tag{1.35}$$

故可進一步得到

$$[\mathbf{X}, \mathbf{U}(\mathbf{P}; \xi)] = i\hbar \left[\mathbf{X}, \sum_{m} \frac{1}{m!} \left(-\frac{i}{\hbar} \xi \right)^{m} \mathbf{P}^{m} \right]$$
$$= \xi \sum_{m} \frac{1}{(m-1)!} \left(-\frac{i}{\hbar} \xi \right)^{m-1} \mathbf{P}^{m-1} = \xi \mathbf{U}, \tag{1.36}$$

或寫爲

$$XU(P;\xi) = U(P;\xi)(X + \xi I). \tag{1.37}$$

當 $\mathbf{U}(\mathbf{P};\xi)|x\rangle = |\alpha\rangle$ 時,則

$$\mathbf{X}|\alpha\rangle = \mathbf{X}\mathbf{U}|x\rangle = \mathbf{U}(\mathbf{X} + \xi\mathbf{I})|x\rangle = \mathbf{U}(x+\xi)|x\rangle = (x+\xi)|\alpha\rangle,$$
 (1.38)

上式表示 $|\alpha\rangle$ 也是 **X** 的固有向量,其固有值爲 $x+\xi$,亦即 $|\alpha\rangle=c|x+\xi\rangle$ 。通常 c 爲相 位因子。爲了簡便,通常把 c 取爲 1,所以引理一證實了

$$\mathbf{U}(\mathbf{P};\xi)|x\rangle = |x+\xi\rangle. \tag{1.39}$$