第 1 章 线性代数回顾、狄拉克符号

物理学研究的是物体的状态的状态随时间的变化，回忆在牛顿力学中，我们用哪些量标记物体运动的状态。这一章我们学习如何在量子力学中标记物体的状态。

这一章的主要内容有：

1. 复习线性代数的相关知识，熟悉狄拉克符号的使用；
2. 熟悉线性空间中向量与算符的抽象定义和矩阵表示 (representation)；
3. 掌握算符函数的计算方法；
4. 掌握无穷维空间中矢量和算符的计算。

1.1 线性空间、基矢量

定义 1.1 (线性空间)

线性空间 V 是矢量 $|1\rangle$、$|2\rangle$、$\ldots|w\rangle$ 组成的集合，并在该集合上定义了加法和数乘运算，满足

(1) 完备性：$\forall|u\rangle,|v\rangle\in V$，有 $|u\rangle+|v\rangle\in V$；

(2) 加法交换律和结合律：$\forall|u\rangle,|v\rangle,|w\rangle\in V$，有

$$|u\rangle+|v\rangle=|v\rangle+|u\rangle,\qquad (|u\rangle+|v\rangle)+|w\rangle=|u\rangle+(|v\rangle+|w\rangle);$$

(3) 数乘的分配率和结合律：$\forall|u\rangle,|v\rangle\in V,a,b\in\mathbb{C}$，有

$$(a+b)|u\rangle=a|u\rangle+b|u\rangle,\qquad a(|u\rangle+|v\rangle)=a|u\rangle+a|v\rangle,\qquad a(b|u\rangle)=(ab)|u\rangle;$$

(4) 零矢量：存在零矢量 $|0\rangle\in V$, 满足 $\forall|u\rangle\in V$, 有 $|u\rangle+|0\rangle=|u\rangle$;

(5) 逆矢量：$\forall|u\rangle\in V$，都存在唯一的逆矢量 $|-u\rangle\in V$, 满足 $|v\rangle+|-v\rangle=|0\rangle$. ♣

$|u\rangle$ 读作 u-ket 或者 ket-u，是量子力学中矢量的标准写法, 类似大学物理中用 $\vec{r}$ 和相对论中用 x^μ 表示矢量.

思考：中学几何中学到的“有长度的箭头”及其运算是否构成线性空间？

练习 1.1

证明如下结论：

(1) V 中只有一个零矢量；

(2) $0|u\rangle=|0\rangle$;

(3) $|-u\rangle=(-1)|u\rangle$;

(4) 每个元素 $|u\rangle$ 都有唯一的逆。

练习 1.2

用中学几何中的方法定义三维线性坐标空间，证明：

(1) $x-y$ 平面中的矢量构成线性空间；

(2) $z=1$ 的平面不构成线性空间。

练习 1.3

在三维坐标空间 V 中，所有起点在原点，重点在二维单位球面上的矢量集合为 U，证明在通常定义的加法和数乘下，U 不是线性空间。能否重新定义 U 上的加法和数乘，使其成为线性空间？

思考：能否脱离加法和数乘的定义讨论一个空间是否是线性空间？

练习 1.4
判断所有 $n \times m$ 矩阵的集合在通常定义的矩阵加法和数乘运算下是否构成线性空间。

练习 1.5
判断所有单参量光滑函数的集合在通常定义的矩阵加法和数乘运算下是否构成线性空间。

定义 1.2 (线性相关和线性无关)

$\forall |1\rangle, |2\rangle, \ldots |n\rangle \in V$，若

$$\sum_{i=1}^{n} a_i |i\rangle = |0\rangle \Leftrightarrow a_i = 0 \forall i,$$

则成这些矢量线性无关，反之则称为线性相关。 ♣

若一组矢量线性相关，可以将其中一个矢量写成其他矢量的线性组合。

练习 1.6
Pauli 矩阵 $\sigma^i (i = 1, 2, 3)$ 在量子力学中有重要意义，Pauli 矩阵的定义为

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

判断这三个矩阵连同 2×2 单位矩阵是否线性无关。

定义 1.3 (基矢量、坐标分量)

n 维线性空间 V 中的任意矢量 $|u\rangle$ 都可以写成 n 哥线性无关矢量 $|1\rangle, |2\rangle, \ldots |n\rangle$ 的线性组合，

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^{n} u_i |i\rangle$$

，这 n 个线性无关矢量称为该线性空间中的一组基矢量，系数 u_i 成为 $|u\rangle$ 在这一组基矢量下的坐标分量。 ♣

练习 1.7
单变量光滑函数 $f(x)$ 的傅里叶变换，

$$f(x) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{f}(k) e^{ikx}$$

是否可以看成一种线性叠加？如果可以，那什么是基矢量，什么是 $f(x)$ 在该基矢量下的坐标分量？

矢量 $|u\rangle$ 本身只是线性空间中的一个元素，是抽象的，不需要有“带长度的箭头”这类的图像。只有当取定 V 中的一组基矢量 $\{|i\rangle | i = 1 \ldots n\}$ 后，$|u\rangle$ 才和一个 n 维有序的数有了一一对应（映射！）

练习 1.8
$\forall |u\rangle, |v\rangle \in V, \{|i\rangle | i = 1 \ldots n\}$ 是 V 的一组基，有

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^{n} u_i |i\rangle, |v\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i |i\rangle.$$

$\forall a \in \mathbb{C}$，用前面线性空间的性质，证明

$$|u\rangle + |v\rangle = \sum_{i=1}^{n} (u_i + v_i) |i\rangle, \qquad a|u\rangle = \sum_{i=1}^{n} (a u_i) |i\rangle.$$

练习 1.9 回忆练习 1.4 和 1.6。
所有 2×2 复矩阵构成的线性空间，其中的加法和数乘按通常定义。证明 2×2 单位矩阵和 Pauli 矩阵构成 V 的一组基。

1.2 内积空间

回忆：相对论中用 x^μ 表示一个 4 维逆变矢量，其集合构成一个线性空间。同时协变矢量 y_μ 全体也构成一个线性空间 V^*，有 $x^\mu y_\mu$ 为一个数字，V 和 V^* 互为对偶空间。

定义 1.4 (对偶空间)
若 V 为线性空间，线性映射 $\omega: V\to\mathbb{C}$ 称为 V 上的对偶矢量。V 上所有对偶矢量的集合称为 V 的对偶空间，记为 V^*
♣

类似相对论中的情况，可以定义 V 和 V^* 中矢量的一一映射，即 $x^\mu\to x_\mu=g_{\mu\nu}x^\nu$。

定义 1.5 (对偶映射)
$\forall|u\rangle\in V$，可以将其映射到 V^* 中的某一矢量，记为 $\langle u|$. V 中定义的加法和数乘同样被映射到 V^* 中，满足：$\forall|u\rangle,|v\rangle\in V,a,b\in\mathbb{C}$，有

$$a|u\rangle+b|v\rangle\to a^*\langle u|+b^*\langle v|.$$
♣

定义 1.6 (内积)
$\forall|u\rangle\in V,\langle v|\in V^*$，内积定义为 $V\times V^*\to\mathbb{C}$ 的映射，且满足以下条件：
(1) $\langle v|u\rangle=(\langle u|v\rangle)^*$，
(2) $\langle v|v\rangle\geq 0$，等号当且仅当 $|v\rangle=|0\rangle$ 时成立，
(3) $\forall|w\rangle\in V,a,b\in\mathbb{C}$, 有 $\langle v|(a|u\rangle+b|w\rangle)=a\langle v|u\rangle+b\langle v|w\rangle$.
♣

练习 1.10 内积的性质（2）要求 $\langle v|v\rangle\in\mathbb{R}$，为什么成立？

练习 1.11 $\forall|u\rangle,|v\rangle,|w\rangle\in V,\forall a,b\in\mathbb{C},|t\rangle=a|v\rangle+b|w\rangle$，求 $\langle t|u\rangle$。

练习 1.12 在三维欧式空间中，矢量 $|u\rangle$ 可以表示为 3 分量的列矩阵，

$$|u\rangle=\begin{pmatrix}u_x\\u_y\\y_z\end{pmatrix},$$

其中 $u_x,u_y,u_z\in\mathbb{R}$。对偶矢量 $\langle u|$ 可定义为行矢量

$$\langle u|=(u_x,u_y,u_z).$$

证明：$\langle u|u\rangle\in\mathbb{R}$，等号当且仅当 $|u\rangle=|0\rangle$ 时成立。

思考：若将上例中的 u_x,u_y,u_z 推广到复数域，该如何定义对偶映射使得 $\langle u|u\rangle\geq 0$。检验该定义是否符合内积定义中的另外两个性质

定义 1.7 (正交)

$|u\rangle, |v\rangle \in V$，若 $\langle u|v\rangle = 0$，则称 $|u\rangle$,$|v\rangle$ 正交。

定义 1.8 (矢量的模)

$|u| \equiv \sqrt{\langle u|u\rangle}$ 称为 u 的模（norm）。

定义 1.9 (正交归一基)

$\{|i\rangle | i = 1, \dots n\}$ 为 V 的一组基，若 $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$, 则称其为 V 的一组正交归一基。

练习 1.13 $\{|i\rangle | i = 1, \dots n\}$ 为 V 的一组基（不一定正交归一），$|u\rangle, |v\rangle \in V$ 可以在这组基下展开，求 $\langle v|u\rangle$ 和 $\langle u|u\rangle$. 若这组基是正交归一的，重复上面的计算。

练习 1.14 回忆练习 1.9

V 是所有 2×2 复矩阵组成的线性空间，加法和数乘按通常定义。下面定义如下对偶关系：$\forall A \in V, A \to A^\dagger$.

(1) 推导单位矩阵 $I_{2\times 2}$ 和 Pauli 矩阵 σ_i 的对偶矢量；

(2) 若 $A = a_0 I_{2\times 2} + \sum_i a_i \sigma^i$，其中 $a_0, a_i \in \mathbb{C}$，求 A 的对偶矢量。

进一步定义内积：$\forall A \in V, B \in V^*$, A 与 B 的内积定义为:

$$\frac{1}{2} Tr[AB^\dagger] = \frac{1}{2} Tr[B^\dagger A].$$

(3) 证明该定义满足内积的要求；

(4) 证明 $\{I_{2\times 2}, \sigma^i\}$ 构成 V 的一组正交归一基；

(5) 用该内积的定义求

$$A = \begin{pmatrix} 1+i & 1-i \\ 2+3i & 4-5i \end{pmatrix}$$

在基底 $\{I_{2\times 2}, \sigma_i\}$ 下的分量。

练习 1.15 回忆练习 1.7

设 V 是所有单变量光滑复函数 $f(x), (x \in \mathbb{R})$ 组成的线性空间，其中加法和数乘按通常定义。

定义 $f(x)$ 的对偶矢量为 $f^*(x)$，则可以进一步定义内积，$\forall f(x), g(x) \in V$，则 f 和 g 的内积为 $\langle f|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x) g(x)$.

(1) 证明该定义满足内积定义的要求；

数理方法课上你们将会学习球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$，其中 $\theta \in [0, \pi], \varphi \in [0, 2\pi)$, 现在你可以先在网上自学一下球谐函数的性质。$Y_{lm}$ 构成了二维单位球面上光滑复函数的一组基，即 $\forall f(\theta, \varphi) \in V$, 有

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{lm} a_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

其中 $a_{lm} \in \mathbb{C}$。定义对偶关系 $f(\theta, \varphi) \to f^*(\theta, \varphi) \in V^*$ 和内积 $\langle f|g\rangle = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi f^*(\theta, \varphi) g(\theta, \varphi) \sin\theta$.

(2) 用 f 和 g 在球谐函数基底下的坐标表示 $\langle f|g\rangle$。

练习 1.16 Schimidt 正交化

给定 V 的一组基 $\{|v_i\rangle | i = 1 \dots n\}$，构造 V 的一组正交归一基 $\{|i\rangle | i = 1 \dots n\}$。

给定 V 的一组正交归一基 $\{|i\rangle | i = 1 \dots n\}$，$\forall |v\rangle \in V$, 有

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i |i\rangle,$$

系数 $v_i = \langle i|v\rangle$。代入可得，

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle i|v\rangle |i\rangle = \left(\sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|\right) |v\rangle$$

比较上式的左右两边，我们即得到了一个重要的恒等式

$$\left(\sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|\right) = \hat{I}, \tag{1.1}$$

其中 $\hat{I}$ 表示单位算符。

练习 1.17 利用等式(1.1)证明 $\langle v| = \sum_{i=1}^{n} v_i^* \langle i|$, 其中 $v_i = \langle i|v\rangle$.

练习 1.18 证明 Schwarz 不等式：$|\langle v|w\rangle| \leq |v||w|$, 其中 $|v|, |w|$ 分别为 $|v\rangle$,$|w\rangle$ 的模长。

练习 1.19 证明三角不等式：$|v + w| \leq |v| + |w|$。其中 $|v|, |w|$ 分别为 $|v\rangle$,$|w\rangle$ 的模长。

1.3 线性子空间

定义 1.10 (线性子空间)

若线性空间 V 的一个子集对于定义在 V 上的加法和数乘运算封闭，则该子集构成 V 的一个线性子空间，

$$\forall |u\rangle, |v\rangle \in V_1, a \in \mathbb{C} \Rightarrow |u\rangle + |v\rangle \in V_1, a|u\rangle \in V_1,$$

记作 $V_1 \subseteq V$。若 V_1 的维数为 n_1，则称 V_1 为 V 的 n_1 维线性子空间。♣

思考：

(1) 是否存在线性空间 V, 其没有任何线性子空间？

(2) 若上面的答案为否，写出任何线性空间都有的线性子空间？

(3) 所有线性子空间都有的元素是什么？

练习 1.20 设 V 为三维欧氏空间，加法和数乘按通常定义。

(1) x 轴上的所有矢量是否构成 V 的线性子空间；

(2) $x - y$ 平面上的所有矢量是否构成 V 的线性子空间；

(3) $z = 1$ 平面上的所有矢量是否构成 V 的线性子空间.

练习 1.21 回忆练习 1.7

设 V 是全体一维单变量光滑函数的集合，加法和数乘按通常定义。所有周期为 $T > 0$ 的单变量光滑函数组成的集合是否构成 V 的线性子空间？

练习 1.22 回忆练习 1.9

设 V 为所有 2×2 复矩阵组成的线性空间，$\{|u\rangle = \sum_{i=1}^{3} a_i \sigma^i | \forall a_i \in \mathbb{C}\}$ 是否构成线性子空间？证明你的结论。

1.4 直和空间和直积空间

定义 1.11 (直和空间)

（这里我们不严格地定义直和空间）若两个线性空间 V_1 和 V_2 中矢量的性质相同，加法和数乘的性质也相同，则可以定义 V_1 和 V_2 的直和空间，

$$V_1 \oplus V_2 = \{a|u\rangle + b|v\rangle | \forall |u\rangle \in V_1, |v\rangle \in V_2 \forall a, b \in \mathbb{C}\},$$

其中加法和数乘的定义与 V_1,V_2 中的定义相同。♣

练习 1.23 定义 V 为三维欧氏空间，其中加法和数乘由通常定义。定义 V 的几个线性子空间，
$V_z =$ 沿 z 轴的所有向量的集合；
$V_x =$ 沿 x 轴的所有向量的集合；
$V_{xy} = xy$ 平面上的所有向量的集合；
$V_{xz} = xz$ 平面上的所有向量的集合。
取直和空间的定义中的 $a, b \in \mathbb{R}$。解释 $V_z \oplus V_x, V_z \oplus V_{xy}, V_z \oplus V_{xz}$ 的几何意义。

练习 1.24 若线性空间 V_1,V_2 可以定义直和空间，其中 V_1 的维数为 n_1, V_2 的维数为 V_2。若定义内积使 $\langle u|v\rangle = 0, \forall |u\rangle \in V_1, |v\rangle \in V_2$。证明 $V_1 \oplus V_2$ 的维数是 $n_1 + n_2$.

定义 1.12 (直积空间)

若 V_1 和 V_2 是两个线性空间，V_1 中的一组基为 $\{|u_i\rangle | i = 1 \dots n_1\}$, V_2 中的一组基为 $\{|v_j\rangle | j = 1 \dots n_2\}$，那么 V_1 和 V_2 的直积空间 $V_1 \otimes V_2$ 定义为，

$$\left\{ \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} a_{ij} |u_i\rangle \otimes |v_j\rangle | \forall a_{ij} \in \mathbb{C} \right\}.$$

♣

可以将对偶向量的定义推广到 $V_1 \otimes V_2$:

$$|u\rangle \otimes |v\rangle \to \langle u| \otimes \langle v|, \forall |u\rangle \in V_1, |v\rangle \in V_2.$$

对应的对偶空间记为 $(V_1 \otimes V_2)^*$. 内积的定义为

$$(\langle u| \otimes \langle v|)(|w\rangle \otimes |x\rangle) = \langle u|w\rangle \langle v|x\rangle.$$

如果 V_1 和 V_2 中定义的加法和数乘相同，则可以将 $V_1 \otimes V_2$ 对应到一个更大的空间，后面学习角动量加法时会详细解释。

练习 1.25 若 V_1 的维数为 n_1，V_2 的维数为 n_2，证明 $V_1 \otimes V_2$ 的维数是 $n_1 \times n_2$。

练习 1.26 回忆练习 1.15
假设 V_1 是定义在 $[-\pi, \pi]$ 上的单变量光滑奇函数的集合，V_2 是定义在 $[-\pi, \pi]$ 上的单变量光滑偶函数的集合。
（1）分别找到 V_1 和 V_2 上的一组基，若内积均定义为 $\langle f|g\rangle = \int dx f^*(x) g(x)$, 判断这组基是否正交归一？
（2）写出 $V_1 \otimes V_2$ 中的元素的一般形式，注意 $\otimes$ 只是用来标记相对顺序，在不会引起误解的情况下，$\otimes$ 可以省略。试将 V_1 和 V_2 元素中的变量用不同的字母（比如 x 和 y），判断直积空间中的元素是否为双变量函数？

1.5 线性算符

定义 1.13 (线性算符)

给定线性空间 V，$\forall|u\rangle \in V$，算符 (operator)$\widehat{\Omega}$ 为将矢量 $|u\rangle$ 映射到另一个矢量 $|v\rangle \in V$ 的映射，

$$\widehat{\Omega}|u\rangle = |v\rangle.$$

若该映射为线性映射，即满足

$$\widehat{\Omega}\left(a|u\rangle + b|v\rangle\right) = a\left(\widehat{\Omega}|u\rangle\right) + b\left(\widehat{\Omega}|v\rangle\right),$$

则称 Ω 为线性算符。♣

根据内积定义，$\forall\langle w| \in V^*$, 有 $\langle w|\widehat{\Omega}|u\rangle = \langle w|v\rangle \in \mathbb{C}$。我们也可以把 $\langle w|\widehat{\Omega}$ 看成一个整体，由内积定义可知 $\langle w|\widehat{\Omega} \in V^*$，因此算符将对偶空间的一个矢量映射成另一个矢量。

一些特殊的算符有特定的记号，比如恒等算符 $\widehat{I}$ 和零算符 $\widehat{\varnothing}$：

$$\widehat{I}|u\rangle = |u\rangle, \qquad \widehat{\varnothing}|u\rangle = |0\rangle, \qquad \forall|u\rangle \in V.$$

✍ **练习 1.27** $\forall a, b \in \mathbb{C}, \forall\langle w|\langle z| \in V^*$，证明 $\widehat{\Omega}$ 对于对偶矢量也有线性性，即

$$\left(a\langle w| + b\langle z|\right)\widehat{\Omega} = a\left(\langle w|\widehat{\Omega}\right) + b\left(\langle z|\widehat{\Omega}\right).$$

回忆前面说的线性空间中的矢量是抽象的物体，只有在选定线性空间中的一组基，才能将抽象的矢量变成一个列矢量进行运算。同理，算符也是抽象的操作，只有在选定的基下变成一个矩阵后才能进行计算，这即是算符的矩阵表示。

✍ **练习 1.28**

（1）取 V 为三维欧氏空间，$\widehat{\Omega}$ 为绕 z 轴旋转 $60°$ 的操作，写出 $\widehat{\Omega}$ 的矩阵表示；

（2）取 V 的线性子空间 V_{xy}：$x-y$ 平面上的全部矢量，写出 $\widehat{\Omega}$ 在 V_{xy} 上的矩阵表示；

（3）若将 V_{xy} 中的向量映射到复平面，即 $a|x\rangle + b|y\rangle \to a + bi$，写出 $\widehat{\Omega}$ 在复平面上的表示。

对于线性算符，只需知道其对基矢量的作用，即可知其对 V 内所有矢量的作用。若 $\{|i\rangle | i = 1\ldots n\}$ 为 n 维线性空间 V 的一组基，算符 $\widehat{\Omega}$ 满足

$$\widehat{\Omega}|i\rangle = |i'\rangle.$$

$\forall|u\rangle \in V$，设其在这组基下展开式为 $|u\rangle = \sum_i a_i|i\rangle$，则，

$$\widehat{\Omega}|u\rangle = \sum_i a_i\widehat{\Omega}|i\rangle = \sum_i a_i|i'\rangle.$$

算符乘积定义为算符对矢量的连续作用，按照离得近的算符优先作用的原则。设 $\widehat{\Omega}$ 和 $\widehat{\Lambda}$ 为两个线性算符，$\forall|u\rangle \in V$,

$$\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda}|u\rangle = \widehat{\Omega}\left(\widehat{\Lambda}|u\rangle\right) = \widehat{\Omega}|u'\rangle = |u''\rangle \in V,$$

其中 $|u'\rangle = \widehat{\Lambda}|u\rangle, |u''\rangle = \widehat{\Omega}|u'\rangle$.

一般来说，算符乘法没有交换律，即，

$$\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda}|u\rangle \neq \widehat{\Lambda}\widehat{\Omega}|u\rangle,$$

两者的差为

$$\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda}|u\rangle - \widehat{\Lambda}\widehat{\Omega}|u\rangle = (\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda} - \widehat{\Lambda}\widehat{\Omega})|u\rangle.$$

定义 1.14 (算符对易)

定义算符 $\widehat{\Omega}$ 和 $\wp\Lambda$ 的对易（commutator）为，

$$[\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}] \equiv \widehat{\Omega}\widehat{\Lambda} - \widehat{\Lambda}\widehat{\Omega},$$

由算符的定义和线性空间的完备性，有 $[\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}]|u\rangle \in V$，所以 $[\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}]$ 也是作用在 V 上的一个算符。 ♣

可以继续用对易关系构造新算符：$[\widehat{\Omega}, [\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}]], [\widehat{\Lambda}, [\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}]] \ldots$

思考： 是否可以用对易关系从两个算符出发构造出无穷多个算符?

✍ **练习 1.29** 回忆练习 1.28
取 V 为三维欧氏空间，
$\widehat{\Omega} =$ 绕 z 轴旋转 $60°$;
$\widehat{\Omega}' =$ 绕 z 轴旋转 $30°$;
$\widehat{\Omega}'' =$ 绕 x 轴旋转 $60°$。
写出 $\widehat{\Omega}', \widehat{\Omega}''$ 在 V 上的矩阵表示，并计算这三个算符两两之间的对易。

✍ **练习 1.30** 若 $\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}, \widehat{\Phi}$ 为线性空间 V 上的三个算符，利用对易关系证明：
(1) $[\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}\widehat{\Phi}] = \widehat{\Lambda}[\widehat{\Omega}, \widehat{\Phi}] + [\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}]\widehat{\Phi}$,
(2) $[\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda}, \widehat{\Phi}] = \widehat{\Omega}[\widehat{\Lambda}, \widehat{\Phi}] + [\widehat{\Omega}, \widehat{\Phi}]\widehat{\Lambda}$.

定义 1.15 (逆算符)

算符 $\widehat{\Omega}$ 的逆定义为 $\widehat{\Omega}^{-1}$，满足 $\widehat{\Omega}\widehat{\Omega}^{-1} = \widehat{\Omega}^{-1}\widehat{\Omega} = \widehat{I}$. ♣

$\widehat{\Omega}^{-1}$ 也是一个算符，其意义是取消 $\widehat{\Omega}$ 对任意矢量的操作。

✍ **练习 1.31** 若 $\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}$ 为 V 上的两个算符，证明乘积 $\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda}$ 的逆满足，

$$\left(\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda}\right)^{-1} = \widehat{\Lambda}^{-1}\widehat{\Omega}^{-1}.$$

(hint: 需证明左乘和右乘。)

1.6 线性算符的矩阵表示

在练习 2.28 和 2.29 中，我们计算了旋转矩阵在三维欧氏空间的矩阵表示。在这一节中，我们将其推广到抽象空间中算符的矩阵表示。

设 $\{|i\rangle | i = 1 \ldots n\}$ 是 n 维线性空间 V 的一组正交归一基，有，

$$|u\rangle = \sum_i a_i|i\rangle, \forall |u\rangle \in V.$$

算符 $\widehat{\Omega}$ 将 $|u\rangle$ 映射到 $|u'\rangle=\sum_j b_j|j\rangle$, 即,

$$\sum_j b_j|j\rangle=\widehat{\Omega}|u\rangle=\sum_i a_i\widehat{\Omega}|i\rangle.$$

两边分别左乘 $\langle k|$,

$$\begin{aligned}\text{lhs=}&\langle k|\sum_j b_j|j\rangle=\sum_j b_j\langle k|j\rangle=\sum_j b_j\delta_{kj}=b_k,\\ \text{rhs=}&\langle k|\sum_i a_i\widehat{\Omega}|i\rangle=\sum_i a_i\langle k|\widehat{\Omega}|i\rangle,\end{aligned}$$

因此有

$$b_k=\sum_i a_i\langle k|\widehat{\Omega}|i\rangle.$$

写成矩阵形式,

$$\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\langle 1|\widehat{\Omega}|1\rangle & \langle 1|\widehat{\Omega}|2\rangle & \dots & \langle 1|\widehat{\Omega}|n\rangle\\ \langle 2|\widehat{\Omega}|1\rangle & \langle 2|\widehat{\Omega}|2\rangle & \dots & \langle 2|\widehat{\Omega}|n\rangle\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ \langle n|\widehat{\Omega}|1\rangle & \langle n|\widehat{\Omega}|2\rangle & \dots & \langle n|\widehat{\Omega}|n\rangle\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{pmatrix},\tag{1.2}$$

其中的 $n\times n$ 矩阵即为算符 $\widehat{\Omega}$ 的矩阵表示,bra 中的数字是行标号,ket 中的数字是列标号。

练习 1.32 用表达式(1.2)重新计算练习 1.28(1)(2) 中算符的矩阵表示。

练习 1.33 用表达式(1.2)写出单位算符 $\widehat{I}$ 和零算符 $\widehat{\varnothing}$ 的矩阵表示。

注意到 $b_j=\langle j|u'\rangle, a_i=\langle i|u\rangle$,表达式(1.2)可以写成,

$$\langle j|u'\rangle=\sum_i\langle j|\widehat{\Omega}|i\rangle\langle i|u\rangle=\langle k|\widehat{\Omega}\left(\sum_{i=1}^n|i\rangle\langle i|\right)|u\rangle.$$

括号中正是单位算符在正交归一基下的表达式(1.1)。实际上,我们可以反过来做上述计算,通过在 $\langle j|\widehat{\Omega}|u\rangle$ 中插入单位算符得到 $\widehat{\Omega}$ 的矩阵表示。后面为了记号方便,常将 $\langle j|\widehat{\Omega}|i\rangle$ 简写为 Ω_{ji}.

练习 1.34 通过插入单位矩阵的方法,计算乘积 $\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda}$ 的矩阵表示和 $\widehat{\Omega}$、$\widehat{\Lambda}$ 的矩阵表示的关系,证明算符乘积的矩阵表示等于算符矩阵表示的乘积。

1.7 算符作用在对偶空间

给定线性空间 V 和其上的任意算符 Ω,$\forall|u\rangle\in V,\langle v|\in V^*$, 可知 $\langle v|\widehat{\Omega}|u\rangle\in\mathbb{C}$。$\langle v|\widehat{\Omega}|u\rangle$ 有两种理解方法:
(1) $\widehat{\Omega}$ 作用在 V 上,将 $|u\rangle$ 映射到 $\widehat{\Omega}|u\rangle$;
(2)$\widehat{\Omega}$ 作用在 V^* 上,将 $\langle v|$ 映射到 $\langle v|\widehat{\Omega}$.

练习 1.35 若 $\widehat{\Omega}$ 将 $|u\rangle$ 映射到 $|u'\rangle$, $\widehat{\Lambda}$ 将 $\langle u|$ 映射到 $\langle u'|$,求 $\widehat{\Lambda}$ 和 $\widehat{\Omega}$ 的矩阵表示的关系。

若算符 $\widehat{\Omega}$ 将 $|u\rangle$ 映射到 $|u'\rangle$: $|u'\rangle=\widehat{\Omega}|u\rangle$, 则 $\widehat{\Omega}^\dagger$ 将 $\langle u|$ 映射到 $\langle u'|$, 在正交归一基下,$\widehat{\Omega}^\dagger$ 矩阵表示是 $\widehat{\Omega}$ 矩阵表示的转置共轭。

练习 1.36 证明:(1)$\left(\widehat{\Omega}^\dagger\right)^\dagger=\widehat{\Omega}$; (2) $\forall|u\rangle,|v\rangle\in V$, 有 $\left(\langle u|\widehat{\Omega}|v\rangle\right)^*=\langle v|\widehat{\Omega}^\dagger|u\rangle$.

定义 1.16 (厄米算符与反厄米算符)

若 $\widehat{\Omega}^\dagger = \widehat{\Omega}$, 则称 $\widehat{\Omega}$ 为厄米 (hermitian) 算符。若 $\widehat{\Omega}^\dagger = -\widehat{\Omega}$, 则称 $\widehat{\Omega}$ 为反厄米 (anti-hermitian) 算符 ♣

✍ **练习 1.37** 算符 $\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda}$ 将 $|u\rangle$ 映射到 $|u'\rangle$: $|u'\rangle = \widehat{\Omega}\widehat{\Lambda}|u\rangle$，则 $(\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda})^\dagger$ 将 $\langle u|$ 映射到 $\langle u'|$. 求 $(\widehat{\Omega}\widehat{\Lambda})^\dagger$ 和 $\widehat{\Omega}$、$\widehat{\Lambda}$ 的关系。

定义 1.17 (酉算符)

若 $\widehat{\Omega}^\dagger\widehat{\Omega} = \widehat{\Omega}\widehat{\Omega}^\dagger = \widehat{I}$, 则称 $\widehat{\Omega}$ 为酉 (unitary) 算符。 ♣

✍ **练习 1.38** 证明

(1) 两个酉算符的乘积还是酉算符；

(2) 酉变换不改变内积；

(3) 检验练习 1.29 中得到的算符是否为酉算符，物理上应该如何理解。

1.8 本征值和本征态

定义 1.18 (本征值和本征态)

给定算符 $\widehat{\Omega}$，若 $|u\rangle \in V$ 满足 $\widehat{\Omega}|u\rangle = \omega|u\rangle$, 其中 $\omega \in \mathbb{C}$, 则称 $|u\rangle$ 为 $\widehat{\Omega}$ 的本征态（本征矢量），对应的本征值为 ω。 ♣

✍ **练习 1.39** 若 $|u\rangle$ 为 $\widehat{\Omega}$ 的本征矢量且本征值为 ω, 证明 $\forall a \in \mathbb{C}$ 且 $a \neq 0$, $a|u\rangle$ 也是 $\widehat{\Omega}$ 的本征矢量，并求相应的本征值。

✍ **练习 1.40** 求矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

的本征值和本征矢量。

定义 1.19 (简并)

若算符 $\widehat{\Omega}$ 有多于一个本征矢量具有相同的本征值，则称这些本征矢量简并（degenerate）。 ♣

✍ **练习 1.41** 证明厄米算符（1）本征值都是实数；（2）不同本征值的本征矢量正交。

✍ **练习 1.42** 证明互相对易的算符有相同的本征态。

因此我们可以用互相对易的算符标记本征态，若第一个算符 $\widehat{\Omega}$ 的本征态存在简并，可以用第二个算符 $\widehat{\Lambda}$ 进一步对简并态进行区分。若仍有简并，可以引入第三个算符 $\widehat{\Gamma}\ldots$。由此得到的本征态可以用这些算符的本征值

标记 $|\omega, \lambda, \gamma \ldots\rangle$

1.9 算符函数

给定算符 $\widehat{\Omega}$，算符函数（例如 $e^{ia\widehat{\Omega}}$, $\frac{1}{1-a\widehat{\Omega}}$ 等，其中 $a \in \mathbb{C}$）用 Taylor 展开理解，例如

$$e^{ia\widehat{\Omega}} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!}(ia\widehat{\Omega})^n.$$

计算上通常有两种方法

(1) 若 $\widehat{\Omega}$ 有循环性，比如对某正整数 m，有 $\widehat{\Omega}^m = 1$，这时可以用 Taylor 展开写出算符函数的矩阵表示；

(2) 先计算 $\widehat{\Omega}$ 的全部正交归一本征态 $|\omega_i\rangle$，然后在算符函数左侧或右侧插入

$$\widehat{I} = \sum_i |\omega_i\rangle\langle\omega_i|.$$

练习 1.43 在三维欧氏空间 V 上定义算符 $\widehat{\Omega}$，其在笛卡尔坐标系上的矩阵表示为，

$$\widehat{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

求 $e^{i\theta\widehat{\Omega}}$ 的矩阵表示，并解释其物理意义。

当只考虑一个算符 $\widehat{\Omega}$ 时，微分和积分也可以推广到算符函数中。

练习 1.44 求 $\frac{d}{ds}e^{is\widehat{\Omega}}$

练习 1.45 求解算符函数微分方程

$$\frac{d}{ds}f(s) = f^2(s)\widehat{\Omega}.$$

练习 1.46 有算符函数 $\widehat{H}$ 及其函数 $\mathcal{U}, \mathcal{U}$ 满足算符方程，

$$i\hbar\frac{d}{dt}\mathcal{U} = \widehat{H}\mathcal{U}, \qquad \mathcal{U}(t_0) = 1,$$

其中 $\hbar \in \mathbb{R}$.

(1) 若 $\widehat{H}$ 不依赖于 t，猜出 $\mathcal{U}$ 的表达式，检验得到的结果；

(2) 若 $\widehat{H}$ 是 t 的函数，猜出 $\mathcal{U}$ 的表达式，检验得到的结果；

(3) 检验在（2）中的计算过程是否交换了算符的顺序，讨论这些操作是否总成立。

(4) 当不同 t 对应的 $\widehat{H}(t)$ 不对易，即 $[\widehat{H}(t_1), \widehat{H}(t_2)] \neq 0$ 时，上述方程的解最先由 Dyson 给出，

$$\mathcal{U}(t) = \widehat{I} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \widehat{H}(t_1)\widehat{H}(t_2)\ldots\widehat{H}(t_n).$$

检验该展开式是否满足上述微分方程。

当算符的个数多于一个，且彼此之间不对易时，算符函数的顺序不能轻易改变。

练习 1.47 有两个算符 $\widehat{\Omega}$ 和 $\widehat{\Lambda}$ 且 $[\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}] = 0$, 证明 $e^{\widehat{\Omega}}e^{\widehat{\Lambda}} = e^{\widehat{\Lambda}}e^{\widehat{\Omega}}$.

练习 1.48 有两个算符 $\widehat{\Omega}$ 和 $\widehat{\Lambda}$ 且 $\widehat{\Gamma} \equiv [\widehat{\Omega}, \widehat{\Lambda}] \neq \widehat{\varnothing}$ 但 $[\widehat{\Omega}, \widehat{\Gamma}] = [\widehat{\Omega}, \widehat{\Gamma}] = 0$, 证明 $e^{\widehat{\Omega}+\widehat{\Lambda}} = e^{\widehat{\Omega}}e^{\widehat{\Lambda}}e^{-\widehat{\Gamma}/2}$.

1.10 无穷维线性空间,Hilbert 空间

回忆： 对于有限维线性空间 V，定义了对偶空间和内积后可以找到一组正交归一基 $\{|i\rangle|i=1\ldots n\}$. 对 V 内任一矢量，可以在这组基下做展开，

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^{n}\langle i|u\rangle|i\rangle,$$

其中 $\langle i|u\rangle$ 是 $|u\rangle$ 在 $|i\rangle$ 方向上的投影/坐标分量。若有另一组基 $\{|j'\rangle|j'=1\ldots n\}$，则 $|u\rangle$ 在其上的坐标分量为，

$$\langle j'|u\rangle = \sum_{i=1}^{n}\langle j'|i\rangle\langle i|u\rangle, \tag{1.3}$$

即可以用 $|u\rangle$ 在老坐标系中的分量 $\langle i|u\rangle$ 和两坐标系基矢的关系 $\langle j'|i\rangle$ 计算 $|u\rangle$ 在新坐标系中的分量。$\langle i|u\rangle$ 和 $\langle j'|u\rangle$ 虽然数值上不同，但含有的信息量相同，都可以完全描述 $|u\rangle$。

物理学的一个原则是：自然规律不依赖于参考系，所以我们希望能直接对 $|u\rangle$ 进行操作/计算，只有在需要的时候，再将其在特定的坐标系中进行分解。

回忆： 在练习 1.7 中，我们知道全体光滑函数也构成线性空间。在

$$f(x)=\int\frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\tilde{f}(k)e^{ikx}$$

中，$f(x)$ 和 $\tilde{f}(k)$ 虽然形式不同，但所含信息是相同的。与 Eq. (1.3)相比，$f(x)$ 和 $\tilde{f}(k)$ 类似某一抽象矢量在两组不同基上的投影。数学上我们用 $|f\rangle$ 表示这个抽象的矢量，用 $\{|x\rangle|x\in\mathbb{R}\}$ 和 $\{|k\rangle|k\in\mathbb{R}\}$ 表示这两组基。在这种理解下，上式可写成，

$$\langle x|f\rangle=\int\frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\langle k|f\rangle e^{ikx}.$$

和 Eq. (1.3) 对比，可得

$$\langle x|k\rangle=\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}},\qquad \int dk|k\rangle\langle k|=\widehat{I}.$$

在这种理解下，$f(x=x_0)=\langle x=x_0|f\rangle$ 即为抽象物体 $|f\rangle$ 在基矢 $|x=x_0\rangle$ 上的投影，即为 f 在 x_0 点的函数值。

注意： Fourier 变换中的 2π 放在哪里有一定的随意性，这里我们在 x 和 k 的积分中各放一个 $\sqrt{2\pi}$.

练习 1.49 下面我们检验一下这个新的理解，并得到几个有用的关系式。
（1）从 Fourier 逆变换推出 $\int|x\rangle\langle x|=\widehat{I}$;
（2）由 $f(x_0)=\langle x=x_0|f\rangle$ 和（1）中结论证明 $\langle x=x_0|x\rangle=\delta(x-x_0)$. 往后我们将 $|x=x_0\rangle$ 简记为 $|x_0\rangle$，上述关系即变成 $\langle x|x'\rangle=\delta(x-x')$;
（3）证明 $|f\rangle=\int dx f(x)|x\rangle$;
（4）证明 $\langle f|g\rangle=\int dx f^*(x)g(x)$;
（5）证明 $\langle f|f\rangle\geq 0$;
（6）用 $\langle x|f\rangle$ 的表达式证明 $\int\frac{dk}{2\pi}e^{ik(x'-x)}=\delta(x-x')$;
（7）用 $\langle x|f\rangle$ 的表达式证明 $\langle k|k'\rangle=\delta(k-k')$.

练习 1.50 Hilbert 空间的计算经常会用到 δ 函数，下面复习一下 δ 函数的性质
（1）计算 $\int dx\delta'(x-x')f(x)$，其中 $\delta'(x-x')=\frac{d}{dx}\delta(x-x')$;
（2）证明 $\delta(ax)=\frac{\delta(x)}{|a|}$;

（3）证明

$$\delta\left(f(x)\right)=\sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|df/dx|\big|_{x=x_i}},$$

其中 x_i 是 $f(x)$ 的第 i 个零点;

（4）证明 $\delta(x-x')=\frac{d}{dx}\theta(x-x')$，其中

$$\theta(x-x')=\begin{cases}0 & x<x'\\ 1 & x\geq x'\end{cases}$$

1.11 Hilbert 空间中的算符

回忆：算符将线性空间中的一个矢量映射到另一个矢量 $\widehat{\Omega}|f\rangle=|g\rangle$.

Hilbert 空间中最常见的映射即为求导算符 $\widehat{D}: f(x)\to\frac{d}{dx}f(x)$，下面研究这个算符的性质。定义 $\frac{d}{dx}f(x)$ 对应的抽象矢量为 $|f'\rangle:\langle x|f'\rangle=\frac{d}{dx}f(x)$，可得

$$\begin{aligned}
&\widehat{D}|f\rangle=|f'\rangle\\
\Rightarrow&\langle x|\widehat{D}\left(\int dx'|x'\rangle\langle x'|\right)|f\rangle=\langle x|f'\rangle\\
\Rightarrow&\int dx'\langle x|\widehat{D}|x'\rangle\langle x'|f\rangle=\langle x|f'\rangle\\
\Rightarrow&\int dx'\langle x|\widehat{D}|x'\rangle f(x')=\frac{d}{dx}f(x)\\
\Rightarrow&\langle x|\widehat{D}|x'\rangle=\frac{d}{dx}\delta(x-x')=\delta(x-x')\frac{d}{dx'}.
\end{aligned}\tag{1.4}$$

✍ **练习 1.51** 证明 $\widehat{D}$ 不是厄米算符，即 $\widehat{D}^\dagger\neq\widehat{D}$.

因为 $\widehat{D}$ 是反厄米算符，我们定义 $\widehat{K}=-i\widehat{D}$, 则 $\widehat{K}$ 为厄米算符。

✍ **练习 1.52** 求解 $\widehat{K}$ 的本征值和本征态。

量子力学的另一个重要算符是 “位置算符 “$\widehat{X}$, 满足 $\widehat{X}|x\rangle=x|x\rangle$。可见 $|x\rangle$ 是 $\widehat{X}$ 的本征态，对应的本征值即为 x.

✍ **练习 1.53** 求 $\widehat{X}$ 在 $|x\rangle$ 基底下的矩阵表示。

✍ **练习 1.54** 求 $\widehat{X}$ 在 $|k\rangle$ 基底下的矩阵表示。

✍ **练习 1.55** 证明 $\widehat{X}$ 为厄米算符。

✍ **练习 1.56** 若 $|g\rangle=\widehat{X}|f\rangle$，计算 $|g\rangle$ 在坐标基底下的坐标分量。

✍ **练习 1.57** 在 $|x\rangle$ 基底下计算 $[\widehat{X},\widehat{K}]$.

✍ **练习 1.58** 在 $|k\rangle$ 基底下计算 $[\widehat{X},\widehat{K}]$.