2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

   ① 欧式空间是人类居住的空间，也是最熟悉的空间，它是位置矢量**r**的集合。现在假设我们来到了一个新的世界，从零开始去建立一个空间。那么我们首先需要一个集合，这个集合里面的元素我们称为矢量，用记号$|u\rangle$表示

   ② 欧式空间有一个很好的性质，就是我们可以对矢量进行任意的叠加（高中课程：力的合成），那么在我们建立的新空间中，首先要求这些矢量也要可以合成

   ③ 我们就得到了线性空间

      a. 加法和数乘运算封闭: $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}$，$a\boldsymbol{u}$
      b. 矢量加法满足交换律和结合律
      c. 对于加法运算，有零矢量和逆矢量
      d. 数乘满足结合律：$(ab)\boldsymbol{u}=a(b\boldsymbol{u})$
      e. 数乘和加法满足分配律：$(a+b)\boldsymbol{u}=a\boldsymbol{u}+b\boldsymbol{u}$，$a(\mathbf{u}+\mathbf{v})=a\boldsymbol{u}+a\boldsymbol{v}$
      f. $1\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}$

   ④ 满足这些性质的空间有很多个，例如函数组成的空间，或者数列（元素个数固定）组成的空间。

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习
   ⑤ 基矢与维度：这是线性叠加性质的自然推论
      a. 一组矢量，互相线性独立，并且所有矢量都可以表达为它们的叠加，这组矢量就叫做基矢
      b. 对于确定的矢量空间，基矢的个数总是确定的，叫做这个空间的维度维度：例如欧式空间是三维
      c. 函数空间的基矢可以选为δ函数，或者幂函数（对应泰勒展开）等等
   ⑥ 欧式空间还有一个很好的性质，就是矢量有长度、夹角等概念，这样就可以和各种几何性质联系起来
      a. 这些概念的关键是内积的定义：这个内积要是可交换的，线性的，并且正定的，即非零矢量自己和自己的内积要是正实数（模长）
      b. 内积可以记作 $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{u})$
      c. 欧式空间中的矢量点乘
      d. 欧式空间中夹角和垂直的概念
   ⑦ 有了内积，我们就可以把基矢正交归一化，使得 $(\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{m}}, \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{n}}) = \delta_{mn}$

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

⑧ 基矢展开：任意矢量都可以用基矢展开

a. $\boldsymbol{u} = \sum_n u_n \boldsymbol{e_n}$ ，展开系数$u_n = (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{e_n})$

b. 把展开系数写成列矢量（右矢）形式 $|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}$，基矢也可写成这种形式

c. 左矢定义成右矢的转置：$\langle u| = (u_1, u_2, \dots, u_N)$

d. 也可以写成紧凑的形式$1 = \sum |e_n\rangle\langle e_n|$

e. 欧式空间下的基矢展开：坐标分解内积：$\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle = \sum_n u_n v_n$

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

⑨ 线性映射：矢量到矢量的映射，且满足线性要求

a. $\hat{f}(a|u\rangle + b|v\rangle) = a\hat{f}|u\rangle + b\hat{f}|v\rangle$

b. 由于线性性质，只要找到每个基矢的映射方式就可以知道全部空间的映射方式

c. $\hat{f}|e_n\rangle = \sum_m f_{mn}|e_m\rangle$，$f_{mn} = \langle e_m|\hat{f}|e_n\rangle$，

--> $\hat{f}|u\rangle = \sum_n \hat{f}|e_n\rangle\langle e_n|u\rangle = \sum_{mn} f_{mn}|e_m\rangle\langle e_n|u\rangle = \sum_m\{\sum_n f_{mn}\langle e_n|u\rangle\}|e_m\rangle$

d. 写成矩阵形式

$$\hat{f} = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & \cdots & f_{1N} \\ f_{21} & f_{22} & \cdots & f_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_{N1} & f_{N2} & \cdots & f_{NN} \end{bmatrix}, \quad |u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, \quad \hat{f}|u\rangle = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & \cdots & f_{1N} \\ f_{21} & f_{22} & \cdots & f_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_{N1} & f_{N2} & \cdots & f_{NN} \end{bmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}$$

e. 线性代数就是矩阵代数

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

⑩ 矩阵的运算：转置、加法、乘法

a. 举例$\hat{f}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$，$\hat{g}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$，计算$\hat{f}\hat{g}$和$\hat{g}\hat{f}$

b. 对易关系

c. 单位矩阵 $\hat{I}$，矩阵元δ_{mn}

d. 逆矩阵

⑪ 基矢变换与正交矩阵

a. 把一组正交归一基映射成另外一组：$(|e_1\rangle,|e_2\rangle,\dots,|e_N\rangle)\hat{O}=(|g_1\rangle,|g_2\rangle,\dots,|g_N\rangle)$

b. 坐标变换：$(|e_1\rangle,|e_2\rangle,\dots,|e_N\rangle)\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\\ \vdots\\ u_N\end{pmatrix}=(|g_1\rangle,|g_2\rangle,\dots,|g_N\rangle)\begin{pmatrix}u_1'\\ u_2'\\ \vdots\\ u_N'\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\\ \vdots\\ u_N\end{pmatrix}=\hat{O}\begin{pmatrix}u_1'\\ u_2'\\ \vdots\\ u_N'\end{pmatrix}$

c. $\hat{O}$对应的矩阵是正交矩阵：$\hat{O}^{\tau}\hat{O}=\hat{I}$，即逆矩阵等于转置矩阵

d. 证明：$O_{mn}=\langle e_m|g_n\rangle$，$(\hat{O}^{\tau})_{mn}=O_{nm}=\langle e_n|g_m\rangle=\langle g_m|e_n\rangle$,
$(\hat{O}^{\tau}\hat{O})_{ml}=\sum_n(\hat{O}^{\tau})_{mn}O_{nl}=\sum_n\langle e_n|g_m\rangle\langle g_l|e_n\rangle=\sum_n\langle g_l|e_n\rangle\langle e_n|g_m\rangle=\langle g_l|g_m\rangle=\delta_{ml}$

e. 正交变换对矩阵的作用：原先$\hat{f}|u\rangle=|v\rangle$，现在要满足$\hat{g}\hat{O}^{\tau}|u\rangle=\hat{O}^{\tau}|v\rangle=\hat{O}^{\tau}\hat{f}|u\rangle=$，故$\hat{g}=\hat{O}^{\tau}\hat{f}\hat{O}$

2.3 基矢与表象

1. 线性代数复习

⑫ 实对称矩阵的本征值与本征矢量

a. 矩阵的本征值与本征矢量：$\hat{f}|u\rangle = \lambda|u\rangle \quad |u\rangle \neq 0$

b. 本征方程的求解：$(\hat{f} - \lambda\hat{I})|u\rangle = 0 \quad \det\left(\hat{f} - \lambda\hat{I}\right) = 0$

c. 实对称矩阵不同本征值对应的本征矢量正交：$\langle u|\hat{f}|v\rangle = \lambda_u\langle u|v\rangle = \lambda_v\langle u|v\rangle$

d. 实对称矩阵的本征态可以组成正交归一基：$\{|f_i\rangle\}$

e. 在基$\{|f_n\rangle\}$下，$\hat{f}$是对角矩阵：$f_{mn} = \langle f_m|\hat{f}|f_n\rangle = \lambda_n\langle f_m|f_n\rangle = \lambda_n\delta_{mn}$

2.3 基矢与表象

2. 酉空间

① 欧氏空间对应的数乘是用实数，如果我们要用复数去数乘，这时矩阵表示中矢量对应的分量可以是复数

② 为了满足内积的正定性要求，$\langle u|v\rangle$中的左矢不能再只等于右矢的转置，而应该是它的共轭转置：

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, \quad \langle u| = (u_1^*, u_2^*, \dots, u_N^*) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}^+$$

从而保证内积的正定性：$\langle u|v\rangle = \sum_n u_n^* v_n$，$\langle v|u\rangle = \sum_n v_n^* u_n = \langle u|v\rangle^*$，
$\langle u|v\rangle = \sum_n |u_n|^2 \geq 0$

③ 这是欧氏空间的扩展，当矢量的分量都是实数时，回到欧氏空间

④ 矩阵的共轭转置(厄米共轭)：$\{\hat{f}|u\rangle\}^+ = \langle u|\hat{f}^+$，从而$\hat{f}^+ = (\hat{f}^\tau)^*$

2.3 基矢与表象

2. 酉空间

⑤ 基矢变换不再对应于正交矩阵，而是幺正矩阵：$\hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{I}$

证明：$U_{mn} = \langle e_m|g_n\rangle$，$(\hat{U}^{+})_{mn} = U_{nm}^{*} = \langle e_n|g_m\rangle^{*} = \langle g_m|e_n\rangle$

$$(\hat{U}^{+}\hat{U})_{ml} = \sum_n (\hat{U}^{+})_{mn}U_{nl} = \sum_n \langle e_n|g_m\rangle\langle g_l|e_n\rangle = \sum_n \langle g_l|e_n\rangle\langle e_n|g_m\rangle$$
$$= \langle g_l|g_m\rangle = \delta_{ml}$$

当矩阵元都是实数时，幺正矩阵就是正交矩阵

⑥ 基矢变换下，矩阵的变换：$\hat{f}$ ---》$\hat{g} = \hat{U}^{+}\hat{f}\hat{U}$

⑦ 厄米矩阵的定义：$\hat{f}^{+} = \hat{f}$

⑧ 厄米矩阵的本征值都是实数，本征态可以构成正交归一基

证明：$\langle u|\hat{f}|u\rangle = \lambda\langle u|u\rangle = \lambda^{*}\langle u|u\rangle$，$\langle u|\hat{f}|v\rangle = \lambda_u\langle u|v\rangle = \lambda_v\langle u|v\rangle$

⑨ 以$\hat{f}$的这组正交归一基作为基矢，矩阵$\hat{f}$本身变换为实对角矩阵

⑩ 当矩阵元都是实数时，厄米矩阵就是实对称矩阵

2.3 基矢与表象

2. 酉空间

⑪ 线性代数中基矢变换的实质：
矢量具有绝对的意义，而矢量的展开系数是随着基矢选取的不同而不同，是相对的。
同样的，（线性）算符具有绝对意义，算符的矩阵元也是随着基矢选取的不同而不同，是相对的。
基矢变换就类似于解析几何中的坐标变换。