第二章 数学基础1

- 单粒子波函数空间

波函数空间，离散正交基，连续谱正交归一基

- 态空间，狄拉克符号

左矢和右矢及其性质，线性算符，厄米共轭

§ 3.1 单粒子波函数空间

一、波函数空间

量子力学中，单个粒子用波函数 $\Psi(\vec{r},t)$ 来描述

$\Psi(\vec{r},t)$ 的物理意义：

波函数的模的平方（波的强度）代表时刻 t、在空间 $\vec{r}$ 点处，单位体积元中微观粒子出现的概率。

数学上 在区间$[a,b]$上的函数$f(x)$，如果

$$\int_a^b |f(x)|^2 \, dx$$

有定义的（即收敛），则称函数$f(x)$为平方可积的。

所有在$[a,b]$区间平方可积的函数集合构成一矢量空间，记为$L_2[a,b]$（该函数空间是被希尔伯特空间的一个特例）.

物理上 $\boldsymbol{L_2[a,b]}$空间太广泛，我们只考虑一类函数 $\Psi(\vec{r},t)$，它们处处确定，处处连续，而且任意多次可微分（函数在空间某点确实不连续，但这种说法没有任何物理意义，因为任何实验都不可能使我们知道在很小尺度上的实际情况如何）

因此，将$\boldsymbol{L_2(-\infty,+\infty)}$空间中的充分正规函数称为波函数空间，记为**F**，**F**为$\boldsymbol{L_2[a,b]}$的子空间。

波函数空间**F**上的内积定义为 $(\varphi,\psi)=\int d^3r\varphi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$

性质：（**1**） $(\varphi,\psi)=(\psi,\varphi)^*$

（**2**） $(\varphi,\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2)=\lambda_1(\varphi,\psi_1)+\lambda_2(\varphi,\psi_2)$

（**3**） $(\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2,\psi)=\lambda_1^*(\varphi_1,\psi)+\lambda_2^*(\varphi_2,\psi)$

内积对第二个是线性的，对第一个因子是反线性的

φ与ψ正交： $(\varphi,\psi)=0$

ψ的模： $\|\psi\|=\sqrt{(\psi,\psi)}$

波函数空间**F**上还存在线性算符，即从**F**到**F**的线性映射。常见的线性算符有：

(1) 宇称算符Π $$\Pi\psi(x,y,z)=\psi(-x,-y,-z)$$

(2) 倍乘算符$\boldsymbol{X}$ $$X\psi(x,y,z)=x\psi(x,y,z)$$

(3) 求导算符$\boldsymbol{D_x}$ $$D_x\psi(x,y,z)=\frac{\partial\psi(x,y,z)}{\partial x}$$

求导算符$\boldsymbol{D_x}$有可能改变函数的平方可积性

算符$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$的乘积定义为 $(AB)\psi=A(B\psi)$

一般来说，$AB\neq BA$

算符$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$的对易子定义为 $[A,B]\equiv AB-BA$

例： $[X,D_x]=-1$

二、离散正交基

设有这么一组可列的函数集合 $\{u_i(\vec{r})\}$，其中每个$u_i(\vec{r})$都属于**F**，且

(1) $(u_i, u_j) = \int d^3 r u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) = \delta_{ij}$

(2) **F**中任意的波函数 $\psi(\vec{r})$ 都可以唯一地按$u_i(\vec{r})$展开：

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$$

则这个函数集合 $\{u_i(\vec{r})\}$ 构成**F**上的一组正交归一基

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \Rightarrow (u_i, \psi) = (u_i, \sum_j c_j u_j(\mathbf{r})) = \sum_j c_j (u_i, u_j) = \sum_j c_j \delta_{ij} = c_i$$

$$\Rightarrow c_i = (u_i, \psi)$$

c_i称为 $\psi(\vec{r})$在 $u_i(\vec{r})$上的分量。

知道$\{c_i\}$与知道$\psi(\vec{r})$完全等价，因此，可以用数组$\{c_i\}$来指代$\psi(\vec{r})$

分量表示标量积： $\varphi(\vec{r}) = \sum_j b_j u_j(\vec{r}) \qquad \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$

由基矢的正交归一性 $\Rightarrow$ $(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$

特别地 $(\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2$

基矢完备性条件： $\sum_i u_i^*(\vec{r}\,')u_i(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$

证明：
$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$$
$$= \sum_i \int d^3r' u_i^*(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')u_i(\vec{r})$$
$$= \int d^3r' \psi(\vec{r}\,') \sum_i u_i^*(\vec{r}\,')u_i(\vec{r})$$

比较δ函数的定义：
$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r' \psi(\vec{r}\,')\delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$$

即证。

三、连续谱“正交归一”基

有这么一种函数集合，元素不属于L_2空间，但

F中的波函数 $\psi(\vec{r})$仍可以按这组基展开

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$$

$$c_i = (u_i, \psi)$$

例：质量为m的一维粒子，波函数表示为

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int C(p,t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp$$

$$C(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x,t) \exp\left(-i\frac{px}{\hbar}\right) dx$$

相当于“基”函数

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right)$$

对于“基”函数 $$\boxed{u_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)}$$

$$\int dx u_{p'}^{*}(x)u_p(x)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(p-p')x/\hbar}dx=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(p-p')\frac{x}{\hbar}}d\frac{x}{\hbar}=\delta(p-p')$$

正交归一性

$$\int dp u_p^{*}(x')u_p(x)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(x-x')p/\hbar}dp=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(x-x')\frac{p}{\hbar}}d\frac{p}{\hbar}=\delta(x-x')$$

完备性

$$(u_i,u_j)=\int d^3r u_i(\vec{r})u_j(\vec{r})=\delta_{ij}$$

正交归一性

$$\sum_i u_i^{*}(\vec{r}\,')u_i(\vec{r})=\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

完备性

例：同样描述质量为m的一维粒子，波函数表示为 $\Psi(x,t)$

选取“基”函数集合$\{\xi_{x_0}(x)\}$ $\quad$ $\xi_{x_0}(x)=\delta\left(x-x_0\right)$

指标x_0连续取值

波函数可以用这些函数展开：$\Psi(x,t)=\int\Psi(x_0,t)\xi_{x_0}(x)dx_0$

展开系数：$\Psi(x_0,t)=\int\Psi(x,t)\xi_{x_0}(x)dx$

$$\int dx\xi_{x_0'}^*(x)\xi_{x_0}(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta\left(x-x_0'\right)\delta\left(x-x_0\right)dx=\delta(x_0'-x_0)$$ 正交归一性

$$\int dx_0\xi_{x_0}^*(x')\xi_{x_0}(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta\left(x'-x_0\right)\delta\left(x-x_0\right)dx_0=\delta(x-x')$$ 完备性

一般情况：

有这么一种函数集合$\{w_\alpha(\vec{r})\}$，它的指标α连续变化，且 $w_\alpha(\vec{r})$ 不属于$\boldsymbol{L_2}$空间

F中的波函数 $\psi(\vec{r})$仍可以按这组基展开，只要$w_\alpha(\vec{r})$满足

(1) $$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \int d^3 r w_\alpha^*(\vec{r}) w_{\alpha'}(\vec{r}) = \delta(\alpha-\alpha')$$ 正交归一性

(2) $$\int d\alpha w_\alpha^*(\vec{r}\,') w_\alpha(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$$ 完备性

因为
$$\psi(\vec{r}) = \int d^3 r' \psi(\vec{r}\,')\delta(\vec{r}\,'-\vec{r})$$
$$= \int d^3 r' \psi(\vec{r}\,')\int d\alpha w_\alpha^*(\vec{r}\,') w_\alpha(\vec{r})$$
$$= \int d\alpha c(\alpha) w_\alpha(\vec{r})$$

其中 $$c(\alpha) = \int d^3 r' w_\alpha^*(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,') = (w_\alpha, \psi)$$

	离散基 $\{u_i(\boldsymbol{r})\}$	连续基 $\{w_\alpha(\boldsymbol{r})\}$
正交归一关系式	$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$
封闭性关系式	$\sum_i u_i(\boldsymbol{r}) u_i^*(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$	$\int \mathrm{d}\alpha w_\alpha(\boldsymbol{r}) w_\alpha^*(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$
波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 的展开式	$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_i c_i u_i(\boldsymbol{r})$	$\psi(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}\alpha c(\alpha) w_\alpha(\boldsymbol{r})$
$\psi(\boldsymbol{r})$ 的分量	$c_i = (u_i, \psi) = \int \mathrm{d}^3 r u_i^*(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int \mathrm{d}^3 r w_\alpha^*(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r})$
标量积	$(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha b^*(\alpha) c(\alpha)$
模方	$(\psi, \psi) = \sum_i \|c_i\|^2$	$(\psi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha \|c(\alpha)\|^2$

§ 3.2 态空间，狄拉克符号

同样的状态，选择的基不同，描述状态的函数具体形式也会不同

力学中，质点在普通三维空间中的位置用坐标来描述，但用抽象出来的几何矢量描述，不涉及坐标系，可以大大简化很多公式和论证。

量子力学中能否抽象出不依赖于具体基的量子态描述吗？

量子力学中量子态用一个态矢量来描述，而矢量属于一个抽象的态空间$\mathcal{E}$

它是希尔伯特空间的一个子空间

态空间的概念不仅可以使理论体系简化，而且利于推广，比如：自旋，不可能用波函数来描述

一、左矢和右矢

右矢：态空间$\mathcal{E}$ 中的元素，用| >来表示，中间填入标志性符号，如$|\psi>$

例：波函数空间中的每个波函数，可与态空间$\mathcal{E}$ 中的元素一一对应

$$\psi\left(\vec{r}\right)\in\mathbf{F}\Leftrightarrow\left|\psi\right\rangle\in\mathrm{E}$$

$\left|\psi\right\rangle$中没有 $\vec{r}$, $\vec{r}$ 起到具体“基”中分量指标的作用

态空间$\mathcal{E}$为内积空间：$\left(\left|\psi\right\rangle,\left|\varphi\right\rangle\right)$为一复数，定义左矢后可重新表示

左矢：态空间$\mathcal{E}$的对偶空间$\mathcal{E}^*$中的元素

对偶空间？

将态空间中的每个元素$|\psi\rangle$与一个复数连续起来的线性运算χ，称为线性泛函

记为：$\chi(|\psi\rangle)$ 要求满足线性条件

$$\chi(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle)=\lambda_1\chi(|\psi_1\rangle)+\lambda_2\chi(|\psi_2\rangle)$$

可与通常三维空间上的线性函数类比

定义在态空间右矢$|\psi\rangle$上的所有线性泛函的集合构成一个矢量空间，叫做$\mathcal{E}$的对偶空间，记为$\mathcal{E}*$

可与函数空间类别

ε^*中的每个元素，叫做左矢，用< |表示

例：左矢<χ |表示线性泛函χ，且将 $\langle\chi|\in E^*$作用于右矢 $|\psi\rangle\in E$得到

的数记为 $\langle\chi|\psi\rangle$ 即 $\chi(|\psi\rangle)=\langle\chi|\psi\rangle$

性质1：每一个右矢都对应于一个左矢

给定一右矢 $|\varphi\rangle\in E$，可以决定一个线性泛函，作用于任意态空间的右矢 $|\psi\rangle\in E$，得到它们的内积，设<φ |就是这个线性泛函，则

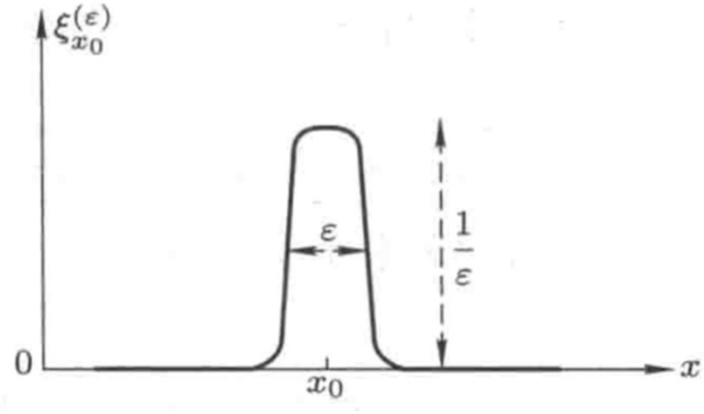
$$\langle\varphi|\psi\rangle=(|\varphi\rangle,|\psi\rangle)$$

例：一维波函数空间，给定函数$\varphi(x)$，定义 泛函

$$\chi(\psi(x))=\int\varphi^*(x)\psi(x)dx=(\varphi(x),\psi(x))$$ 对于任意的$\psi(x)$

该泛函表示为 $\langle\varphi|\in E^*$

每一个左矢都对应于一个右矢吗？　否！



反例：波函数空间F的函数 $\xi_{x_0}^{\varepsilon}(x)=\begin{cases}1/\varepsilon & |x-x_0|<\frac{\varepsilon}{2}\\ 0 & |x-x_0|>\frac{\varepsilon}{2}\end{cases}$

$\xi_{x_0}^{\varepsilon}(x)\in \mathrm{F}$　　$\xi_{x_0}^{\varepsilon}(x)\Leftrightarrow\left|\xi_{x_0}^{\varepsilon}\right\rangle$

存在对应的左矢 $\left\langle\xi_{x_0}^{\varepsilon}\right|$

作用于任意态空间的右矢 $|\psi\rangle\in \mathrm{E}$　$\left\langle\xi_{x_0}^{\varepsilon}\middle|\psi\right\rangle=\left(\xi_{x_0}^{\varepsilon},\psi\right)=\int\xi_{x_0}^{\varepsilon}(x)\psi(x)dx$

当 $\varepsilon\to 0$ 时，$\lim\limits_{\varepsilon\to 0}\xi_{x_0}^{\varepsilon}(x)=\delta(x-x_0)\notin \mathrm{F}$

但当 $\varepsilon\to 0$ 时，$\lim\limits_{\varepsilon\to 0}\left\langle\xi_{x_0}^{\varepsilon}\middle|\psi\right\rangle=\int\delta(x-x_0)\psi(x)dx=\psi(x_0)$

即左矢仍然存在 $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}\left\langle\xi_{x_0}^{\varepsilon}\right|=\left\langle\xi_{x_0}\right|\in \mathrm{E}^*$

解决办法：物理上引入“广义右矢”（即使用连续基），内积仍存在，但 $\xi_{x_0}(x)$ 和 $u_p(x)$ 不能表示物理状态。

性质2： 右矢和左矢对应关系是反线性的

$$\left(\lambda_1|\varphi_1\rangle+\lambda_2|\varphi_2\rangle,|\psi\rangle\right)=\lambda_1^*\left(|\varphi_1\rangle,|\psi\rangle\right)+\lambda_2^*\left(|\varphi_2\rangle,|\psi\rangle\right)$$

$$=\lambda_1^*\langle\varphi_1|\ \psi\rangle+\lambda_2^*\langle\varphi_2|\ \psi\rangle$$

$$=\left(\lambda_1^*\langle\varphi_1|+\lambda_2^*\langle\varphi_2|\right)\psi\rangle$$

和右矢$\lambda_1|\varphi_1\rangle+\lambda_2|\varphi_2\rangle$对应的左矢为 $\lambda_1^*\langle\varphi_1|+\lambda_2^*\langle\varphi_2|$

$$\lambda_1|\varphi_1\rangle+\lambda_2|\varphi_2\rangle\Rightarrow\lambda_1^*\langle\varphi_1|+\lambda_2^*\langle\varphi_2|$$

注1： 有时候，右矢$\lambda|\psi\rangle$ 记为$|\lambda\psi\rangle$ ，即$|\lambda\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle$

对应的左矢： $|\lambda\psi\rangle\Rightarrow\langle\lambda\psi|=\lambda^*\langle\psi|$

注2： $\langle\psi|\lambda=\lambda\langle\psi|$

性质3： 右矢的内积可表示为狄拉克符号

右矢$|\varphi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 的内积：$(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) \equiv \langle\varphi|\psi\rangle$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$$

$$\langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle$$

$$\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle$$

$\langle\psi|\psi\rangle$ 为正实数，当且仅当 $|\psi\rangle = 0$ 时，其值为零。

二、线性算符

1、定义

线性算符： 线性算符***A***使每一个右矢 $|\psi\rangle \in \mathrm{E}$ 都有一个对应的右矢$|\psi'\rangle \in \mathrm{E}$，且这种对应关系是线性的：

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

$$A\left(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle\right) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$$

线性算符的乘积： 两个线性算符***A***和***B***的乘积，记做***AB***，按以下方式定义：

$$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$$

先将***B***作用于$|\psi\rangle$得到右矢$B|\psi\rangle$，再将***A***作用到右矢 $B|\psi\rangle$

对易子算符[*A*,*B*]： $$\left[A,B\right] = AB - BA$$

矩阵元： $\langle\varphi|\left(A|\psi\rangle\right)$ 它是一个数，线性依赖于 $|\psi\rangle$ ，反线性依赖于 $|\varphi\rangle$

2、投影算符

$|\psi\rangle\langle\varphi|$ 是一个算符，因为取任意$|\chi\rangle$：

$$|\psi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle$$

是一右矢

设$|\psi\rangle$是归一化右矢： $\langle\psi|\psi\rangle=1$ 定义算符： $P_\psi=|\psi\rangle\langle\psi|$

将算符作用于任一右矢$|\varphi\rangle$ $P_\psi|\varphi\rangle=|\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle$

得到与$|\psi\rangle$成正比的右矢，比例为内积$\langle\psi|\varphi\rangle$

即该算符在右矢$|\psi\rangle$上进行“垂直投影” 即称为投影算符

投影算符具有性质： $P_\psi^2=P_\psi$

$$P_\psi^2=|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|=|\psi\rangle\langle\psi|=P_\psi$$

子空间上的投影算符：

假设有q个归一化、彼此正交的矢量： $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \cdots, |\varphi_q\rangle$

$$\langle\varphi_i|\ \varphi_j\rangle = \delta_{ij}; \qquad i, j = 1, 2, \cdots, q$$

q个矢量所张成态空间ε的子空间ε_q

定义子空间上的投影算符： $P_q = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$

该算符是投影算符： $P_q^2 = \sum_{i=1}^{q}\sum_{j=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| = \sum_{i=1}^{q}\sum_{j=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|\delta_{ij} = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| = P_q$

取任意右矢 $|\psi\rangle \in \mathrm{E}$ $\qquad P_q|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle$

得到的矢量为ε_q空间的矢量，即$|\psi\rangle$在子空间ε_q的投影。

三、厄米共轭

1、线性算符对左矢的作用

定义： 考察线性算符$\boldsymbol{A}$，取任一右矢$|\psi\rangle \in \mathrm{E}$，算符都有一个对应的右矢 $A|\psi\rangle \in \mathrm{E}$

对于确定的左矢$\langle\varphi| \in \mathrm{E}^*$，对任意一右矢，复数$\langle\varphi|\left(A|\psi\rangle\right)$皆有意义。

$\boldsymbol{A}$和$\langle\varphi|$是确定的

$\Downarrow$

将每一个右矢 $|\psi\rangle$ 联系上线性依赖于$|\psi\rangle$的数：$\langle\varphi|\left(A|\psi\rangle\right)$

确定的$\boldsymbol{A}$和$\langle\varphi|$可定义一个新的左矢，记为$\langle\varphi|A$ ，满足关系

$$(\langle\varphi|A)|\psi\rangle=\langle\varphi|(A|\psi\rangle)$$

算符$\boldsymbol{A}$和$\langle\varphi|$对应的新左矢$\langle\varphi|A$ 之间的对应关系是线性的

证明： 考察$\langle\varphi_1|$和$\langle\varphi_2|$的线性组合：$\langle\chi| = \lambda_1\langle\varphi_1| + \lambda_2\langle\varphi_2|$

$$= \lambda_1\langle\varphi_1|\left(A|\psi\rangle\right) + \lambda_2\langle\varphi_2|\left(A|\psi\rangle\right)$$

$$= \lambda_1\left(\langle\varphi_1|A\right)|\psi\rangle + \lambda_2\left(\langle\varphi_2|A\right)|\psi\rangle$$

由于$|\psi\rangle$ 的任意性， $\langle\chi|A = \left(\lambda_1\langle\varphi_1| + \lambda_2\langle\varphi_2|\right)A$

$$= \lambda_1\langle\varphi_1|A + \lambda_2\langle\varphi_2|A$$

注：矩阵元间的括号无关紧要，可以省略

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = (\langle\varphi|A)|\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle)$$

2、线性算符A的伴随算符$A^\dagger$

任意一右矢$|\psi\rangle$ $\Longleftrightarrow$ 对应一左矢$\langle\psi|$

右矢 $A|\psi\rangle=|\psi'\rangle$ $\Longleftrightarrow$ 对应一左矢$\langle\psi'|$

$\langle\psi|$与 $\langle\psi'|$ 之间定义伴随算符：$\langle\psi'|=\langle\psi|A^\dagger$

即 $$\boxed{|\psi'\rangle=A|\psi\rangle\Leftrightarrow\langle\psi'|=\langle\psi|A^\dagger}$$

伴随算符为线性算符：

右矢 $\lambda_1^*|\psi_1\rangle+\lambda_2^*|\psi_2\rangle$ $\Longleftrightarrow$ 左矢 $\lambda_1\langle\psi_1|+\lambda_2\langle\psi_2|$

作用算符A $\Downarrow$

右矢 $$\lambda_1^*A|\psi_1\rangle+\lambda_2^*A|\psi_2\rangle$$
$$=A\left(\lambda_1^*|\psi_1\rangle+\lambda_2^*|\psi_2\rangle\right)$$

$\xRightarrow{\text{自伴算符的定义}}$

$$\left(\lambda_1\langle\psi_1|+\lambda_2\langle\psi_2|\right)A^\dagger$$
$$=\lambda_1\langle\psi_1|A^\dagger+\lambda_2\langle\psi_2|A^\dagger$$

伴随算符的性质1：

由定义：$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \Leftrightarrow \langle\psi'| = \langle\psi|A^{\dagger}$

$$\langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^{*}$$

$$\langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\psi|A^{\dagger}|\varphi\rangle \qquad \langle\varphi|\psi'\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\langle\psi|A^{\dagger}|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^{*}}$$

注：符号表示$|A\psi\rangle \equiv A|\psi\rangle \qquad \langle A\psi| \equiv \langle\psi|A^{\dagger}$

伴随算符的性质2：

$$\left(A^{\dagger}\right)^{\dagger}=A$$

$$(\lambda A)^{\dagger}=\lambda^{*}A^{\dagger}$$

$$(A+B)^{\dagger}=A^{\dagger}+B^{\dagger}$$

$$\boxed{(AB)^{\dagger}=B^{\dagger}A^{\dagger}}$$

证明最后一式：

右矢 $|\varphi\rangle=AB|\psi\rangle \Longleftrightarrow$ 左矢 $\langle\varphi|=\langle\varphi|(AB)^{\dagger}$

定义 $|\chi\rangle=B|\psi\rangle$，则 $|\varphi\rangle=A|\chi\rangle \Longleftrightarrow$ 左矢 $\langle\varphi|=\langle\chi|A^{+}$

$$\left.\begin{aligned}\langle\varphi|&=\langle\chi|A^{+}\\ \langle\chi|&=\langle\psi|B^{\dagger}\end{aligned}\right\}\ \langle\varphi|=\langle\psi|B^{+}A^{+}$$

右矢 $|\varphi\rangle=AB|\psi\rangle \Longleftrightarrow \langle\varphi|=\langle\psi|B^{+}A^{+}$

狄拉克符号的厄米共轭

左矢和右矢之间的对应关系，称为彼此厄米共轭

通过右矢确定左矢，或通过左矢确定右矢，称为厄米共轭运算

算符$A^\dagger$又称为算符A的厄米共轭算符

重要的关系：$\boxed{(|u\rangle\langle v|)^\dagger = |v\rangle\langle u|}$

证明： 由性质1得 $\langle\psi|\left(|u\rangle\langle v|\right)^+|\varphi\rangle = \left[\langle\varphi|\left(|u\rangle\langle v|\right)|\psi\rangle\right]^*$

$$\left[\langle\varphi|\left(|u\rangle\langle v|\right)|\psi\rangle\right]^* = \langle\varphi|u\rangle^*\langle v|\psi\rangle^* = \langle\psi|v\rangle\langle u|\varphi\rangle = \langle\psi|\left(|v\rangle\langle u|\right)|\varphi\rangle$$

即得 $\langle\psi|\left(|u\rangle\langle v|\right)^+|\varphi\rangle = \langle\psi|\left(|v\rangle\langle u|\right)|\varphi\rangle$

厄米共轭运算规则

当一个式子中含有常数、右矢、左矢及算符时，要得到这个式子的厄米共轭式（或伴随式），必须：

- 代换：

  将常数换成其共轭复数
  将右矢换成其对应的左矢
  将左矢换成其对应的右矢
  将算符换成其伴随算符

- 反序：即颠倒各因子的顺序（但常数的位置无关紧要）

例1：

算符 $\lambda\langle u|A|v\rangle|w\rangle\langle\psi|$

共轭算符 $\lambda^*\langle v|A^\dagger|u\rangle|\psi\rangle\langle w|$

例2： 右矢 $\lambda|u\rangle\langle v|w\rangle$

共轭左矢 $\lambda^*\langle w|v\rangle\langle u|$

厄米算符

如果算符***A***等于它得自伴算符***A***†

$$A = A^{\dagger}$$

则称算符***A***为厄米算符

对于厄米算符 $\boxed{\langle\psi|A|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^{*}}$

投影算符是厄米算符 $P_{\psi}^{\dagger} = |\psi\rangle\langle\psi| = P_{\psi}$

设***A***和***B***是两个厄米算符，当且仅当$[A,B]=0$ 时，***AB***才是厄米算符。

证明： $A = A^{\dagger}$ $B = B^{\dagger}$ $(AB)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger} = BA$

欲使 $(AB)^{\dagger} = AB$ 要求： $BA = AB$ 即 $[A,B]=0$