四大力学笔记系列

早川汐音

量子力学

Quantum Mechanics

3.14 Edition

六番町学院出版社

写给过去的自己.

A book to my past self.

過去の自分へ.

前言

在真正开始学习量子力学之前，笔者总是听说线性代数是量子力学的数学语言，于是就想当然地认为量子力学只是有限维线性空间中的游戏．直到正式学习量子力学，特别是读到[1]之后，笔者才发现量子力学的数学语言实际上是泛函分析，粒子们是在无穷维线性空间这个无人能预测的命运舞台上作用着、演化着．

在惊异于 Hilbert 空间奇妙性质的同时，笔者也同样惊异于一些教材对这个问题的处理方式．如果说一本好的教材可以给出量子力学的“三视图”，能让读者从各个方向看到量子力学的样貌，那么阅读一本欠佳的教材就如同盲人摸象，只能让读者获得神秘和混沌之感，同时使读者颇有一种想要盘古开天辟地的冲动．

笔者时常在想，为什么广义相对论能大方地说自己选择了微分流形，而量子力学有时却如此扭捏，不愿显露自己的真身？笔者认为，一方面是笔者本人的阅读量太少，知识面太窄，没有认清事情的本质就下了结论；另一方面，可能是当时的教师不想引入过深的名词，不想过多引起同学们的厌恶情绪．但是在网络发达的今天，没有这些名词就失去了让有兴趣的同学自行查找资料学习的机会，这实在是有些可惜．

基于以上的思考，笔者试图从泛函分析出发较严格地叙述量子力学的基本原理，并按照有逻辑的顺序整理量子力学的有关主题，希望能对量子力学的学习者们有所帮助．

早川汐音

于六番町学院

目录

第一章　量子力学的基本概念

在本章中，我们将会介绍态空间、线性算符和时间演化等量子力学的基本概念，并给出简单量子系统的公理．在这里会涉及较多的数学概念和定理，主要涉及实变函数和泛函分析．为了让没有接触过这个领域的读者大致了解相关的数学基础但又不至于深陷于数学的细节，这里只会给出相关概念的介绍和定理的陈述，具体的证明则需要参考有关教材或专著．

§1.1　态空间及其结构

1.1.1　从波函数到函数空间

读者一定或多或少听说过，在量子力学中，粒子的状态可以由波函数描述，但是对于波函数的物理意义，历来有着不同的理解方式．这些关于量子力学数学形式的理解方式统称为量子力学的诠释．在这里，我们将采用最受欢迎的 *Copenhagen* 诠释，这个诠释认为波函数描述粒子的概率分布．例如，对于一个一维单粒子系统，如果设波函数的形式为 $\psi(x,t)$，那么

$$\rho(x,t)=|\psi(x,t)|^2 \tag{1.1}$$

表示粒子位置的概率密度，即 $\displaystyle\int_E|\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x$ 表示 t 时刻在 $E\subset\mathbb{R}$ 中能找到粒子的概率．

根据波函数的概率解释，波函数应满足归一化条件

$$\int_{\mathbb{R}}|\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x=1, \tag{1.2}$$

这就要求波函数是平方可积函数，也就是说波函数模的平方在 $\mathbb{R}$ 上的积分是一个有限值．

定义 1.1. 在可测集 E 上平方可积函数的全体构成的集合称为 L^2 空间，记作 $L^2(E)$．设平方可积函数 $f,g\in L^2(E)$，利用三角不等式和基本不等式放缩

$$|\lambda f+\mu g|^2\leqslant(|\lambda f|+|\mu g|)^2\leqslant 2(|\lambda|^2|f|^2+|\mu|^2|g|^2),$$

可以得到 $\lambda f+\mu g\in L^2(E)$，因此 L^2 空间是一个线性空间．

在 L^2 空间上可以定义内积[1]

$$(f,g)=\int_E f^*(x)g(x)\,\mathrm{d}x. \tag{1.3}$$

[1]满足以下条件的二元函数 $(\cdot,\cdot)$ 称为内积：

(1) $(f,g)=(g,f)^*$；(2) $(f,\lambda_1g_1+\lambda_2g_2)=\lambda_1(f,g_1)+\lambda_2(f,g_2)$；(3) $(f,f)\geqslant 0$ 当且仅当 $f(x)=0,\mathrm{a.e.}x\in E$ 时取等．

根据 Cauchy-Schwarz 不等式 $|(f,g)| \leqslant \sqrt{(f,f)(g,g)}$，可以在 L^2 空间上自然地定义范数[2]

$$\|f\| = (f,f)^{1/2} = \left(\int_E |f(x)|^2 \,\mathrm{d}x\right)^{1/2}. \tag{1.4}$$

根据范数的定义，考虑 f 和 g 的几个特殊线性组合的范数

$$\begin{aligned}
\|f+g\|^2 &= (f,f) + (f,g) + (g,f) + (g,g),\\
\|f-g\|^2 &= (f,f) - (f,g) - (g,f) + (g,g),\\
\|f+\mathrm{i}g\|^2 &= (f,f) + \mathrm{i}(f,g) - \mathrm{i}(g,f) + (g,g),\\
\|f-\mathrm{i}g\|^2 &= (f,f) - \mathrm{i}(f,g) + \mathrm{i}(g,f) + (g,g),
\end{aligned}$$

将这些等式进行线性组合，就可以得到极化恒等式

$$(f,g) = \frac{1}{4}(\|f+g\|^2 - \|f-g\|^2 - \mathrm{i}\|f+\mathrm{i}g\|^2 + \mathrm{i}\|f-\mathrm{i}g\|^2), \tag{1.5}$$

这个恒等式提供了从范数性质证明内积性质的重要工具.

定义 1.2. *设 $\{f_n\} \subset L^2(E)$，若存在 $f \in L^2(E)$ 使得 $\lim\limits_{n\to\infty} \|f_n - f\| = 0$，就称 $\{f_n\}$ 为 $L^2(E)$ 中的收敛列，$\{f_n\}$ 依 L^2 收敛于 f；若 $\lim\limits_{n,m\to\infty} \|f_n - f_m\| = 0$，就称 $\{f_n\}$ 为 $L^2(E)$ 中的 Cauchy 列. 若收敛列和 Cauchy 列等价，就称 L^2 空间具有完备性，完备的内积空间称为 Hilbert 空间.*

定义 1.3. *设 $\Gamma \subset L^2(E)$，若对任意的 $f \in L^2(E)$ 都存在 $\{g_n\} \subset \Gamma$ 使得 $\lim\limits_{n\to\infty} \|f - g_n\| = 0$，就称 Γ 在 $L^2(E)$ 中稠密，记作 $L^2(E) = \overline{\Gamma}$. 若存在可数的稠密子集，就称 L^2 空间具有可分性.*

可以证明[3]，L^2 空间是可分的 Hilbert 空间.

1.1.2 状态空间公理

现在我们已经知道，一维单粒子系统的波函数是 $L^2(\mathbb{R})$ 中的单位元，而 $L^2(\mathbb{R})$ 是可分的 Hilbert 空间. 基于合理的推广，对于简单的量子系统，我们可以提出下面的公理.

公理 1. *对于一个量子系统，存在一个合适的定义在复数域 $\mathbb{C}$ 上的可分的 Hilbert 空间，称为态空间 $\mathcal{H}$. 系统的状态由 $\mathcal{H}$ 中的一个单位向量 $|\psi(t)\rangle$ 表示，所有共线单位向量表示的态相同.*

在量子力学通用的 Dirac 符号中，态空间中的向量使用*右矢符号*，这样加法和数乘表示为

$$|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle, \tag{1.6}$$

向量的内积、范数和 Cauchy-Schwarz 不等式表示为

$$\langle\phi|\psi\rangle = (\phi,\psi), \quad \|\psi\| = \sqrt{(\psi,\psi)}, \quad |\langle\phi|\psi\rangle| \leqslant \|\phi\|\|\psi\|. \tag{1.7}$$

需要注意的是，上述关于系统状态的表示只对简单的量子系统成立，满足这个表示的系统状态称为*纯态*. 由于所有共线单位向量表示的纯态相同，在定义其他概念时需要注意验证结果与态的不同表示无关.

[2]满足以下条件的函数 $\|\cdot\|$ 称为范数：

(1) $\|f+g\| \leqslant \|f\| + \|g\|$； (2) $\|\lambda f\| = |\lambda| \cdot \|f\|$； (3) $\|f\| \geqslant 0$ 当且仅当 $f(x) = 0, \mathrm{a.e.}x \in E$ 时取等.

[3][3]定理6.5，定理6.7.

1.1.3 态空间的结构

态空间的完备性和可分性为它带来了清晰的结构，同时也为内积的计算提供了方便的工具．为了阐明这种结构，需要从标准正交基入手．

定义 1.4. 设 $S=\{|e_\alpha\rangle\}_{\alpha\in A}\subset\mathcal{H}$，记 S 中由有限个元素的线性组合构成的线性空间为 $\mathrm{span}\{|e_\alpha\rangle\}_{\alpha\in A}$．若有 $\langle e_\alpha|e_\beta\rangle=\delta_{\alpha\beta}$，就称 S 为 $\mathcal{H}$ 的标准正交系；若还有 $\mathcal{H}=\overline{\mathrm{span}\{|e_\alpha\rangle\}_{\alpha\in A}}$，就称 S 为 $\mathcal{H}$ 的标准正交基．

可以证明[4]，在 Hilbert 空间中，标准正交系 S 是标准正交基的充要条件是下列三者之一：

1. 在 $\mathcal{H}$ 中不存在非零向量与 S 中所有元素正交；
2. 任取 $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$ 都有 Fourier 级数收敛到自身
$$|\psi\rangle=\sum_{\alpha\in A}|e_\alpha\rangle\langle e_\alpha|\psi\rangle;\tag{1.8}$$
3. 任取 $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$ 都有 Parseval 等式
$$\|\psi\|^2=\langle\psi|\psi\rangle=\sum_{\alpha\in A}\langle\psi|e_\alpha\rangle\langle e_\alpha|\psi\rangle=\sum_{\alpha\in A}|\langle e_\alpha|\psi\rangle|^2.\tag{1.9}$$

现在设 S 是标准正交基，考虑 $|\phi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 的几个特殊线性组合的范数
$$\begin{aligned}
\|\phi+\psi\|^2&=\sum_{\alpha\in A}[|\langle e_\alpha|\phi\rangle|^2+\langle e_\alpha|\phi\rangle^*\langle e_\alpha|\psi\rangle+\langle e_\alpha|\phi\rangle\langle e_\alpha|\psi\rangle^*+|\langle e_\alpha|\psi\rangle|^2],\\
\|\phi-\psi\|^2&=\sum_{\alpha\in A}[|\langle e_\alpha|\phi\rangle|^2-\langle e_\alpha|\phi\rangle^*\langle e_\alpha|\psi\rangle-\langle e_\alpha|\phi\rangle\langle e_\alpha|\psi\rangle^*+|\langle e_\alpha|\psi\rangle|^2],\\
\|\phi+\mathrm{i}\psi\|^2&=\sum_{\alpha\in A}[|\langle e_\alpha|\phi\rangle|^2+\mathrm{i}\langle e_\alpha|\phi\rangle^*\langle e_\alpha|\psi\rangle-\mathrm{i}\langle e_\alpha|\phi\rangle\langle e_\alpha|\psi\rangle^*+|\langle e_\alpha|\psi\rangle|^2],\\
\|\phi-\mathrm{i}\psi\|^2&=\sum_{\alpha\in A}[|\langle e_\alpha|\phi\rangle|^2-\mathrm{i}\langle e_\alpha|\phi\rangle^*\langle e_\alpha|\psi\rangle+\mathrm{i}\langle e_\alpha|\phi\rangle\langle e_\alpha|\psi\rangle^*+|\langle e_\alpha|\psi\rangle|^2],
\end{aligned}$$
将这些等式进行线性组合并利用极化恒等式，就可以得到推广的 Parseval 等式
$$\langle\phi|\psi\rangle=\sum_{\alpha\in A}\langle e_\alpha|\phi\rangle^*\langle e_\alpha|\psi\rangle=\sum_{\alpha\in A}\langle\phi|e_\alpha\rangle\langle e_\alpha|\psi\rangle,\tag{1.10}$$
这个等式将两个向量的内积用 Fourier 系数的乘积表示出来了．

可以证明[5]，在可分的 Hilbert 空间中存在至多可数的标准正交基，于是可以定义系数映射
$$T:|\psi\rangle\mapsto\{\langle e_i|\psi\rangle\}_{i=1}^n,\quad n\in\mathbb{N}^*\cup\{+\infty\}.$$

1. 对于有限维的可分 Hilbert 空间，可以在 $\mathbb{C}^n$ 上定义内积
$$(x,y)=\sum_{i=1}^n x_i^*y_i.$$
于是可以验证 $T:\mathcal{H}\to\mathbb{C}^n$ 是线性同构且保持内积，这样 $\mathcal{H}$ 与 $\mathbb{C}^n$ 同构．

[4] [4]定理1.6.25．

[5] [4]定理1.6.30．

2. 对于无限维的可分 Hilbert 空间，由 Parseval 等式知系数模的平方和序列收敛.

定义 1.5. *平方收敛级数序列的全体构成的集合称为 l^2 空间，这也是一个线性空间.*

可以在 l^2 空间上定义内积

$$(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} x_i^* y_i.$$

于是可以验证 $T : \mathcal{H} \to l^2$ 是线性同构且保持内积，这样 $\mathcal{H}$ 与 l^2 空间同构.

这两个结论就从同构的角度给出了态空间的结构.

1.1.4 共轭空间

在线性代数中有对偶空间的概念，同样地，在泛函分析中也可以定义相应的共轭空间.

定义 1.6. *若映射 $f : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ 保持加法和数乘*

$$f(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1 f(\psi_1) + \lambda_2 f(\psi_2),$$

就称 f 为 $\mathcal{H}$ 上的线性泛函. 若还存在常数 C 使得

$$|f(\psi)| \leqslant C\|\psi\|, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H},$$

就称 f 为 $\mathcal{H}$ 上的有界线性泛函. 有界线性泛函的全体构成的集合称为 $\mathcal{H}$ 的共轭空间，记作 $\mathcal{H}^*$.

对于态空间中的向量，利用已有的内积运算，可以自然地诱导得到对应的有界线性泛函.

给定向量 $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$，可以定义映射 $f_\phi : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ 为

$$f_\phi(\psi) = \langle\phi|\psi\rangle,$$

由内积的性质知这是一个线性泛函，而且利用 Cauchy-Schwarz 不等式有

$$|f_\phi(\psi)| = |\langle\phi|\psi\rangle| \leqslant \|\phi\|\|\psi\|,$$

因此 f_ϕ 是一个有界线性泛函，这表明 $\mathcal{H}$ 中的任一向量对应一个 $\mathcal{H}^*$ 中的有界线性泛函.

对于这个命题的逆命题，我们有如下重要定理.

定理 1.1 (Hilbert 空间中的 Riesz 表示定理[6]). *在 Hilbert 空间中给定有界线性泛函 $f \in \mathcal{H}^*$，存在唯一的向量 $|\phi_f\rangle \in \mathcal{H}$ 满足*

$$f(\psi) = \langle\phi_f|\psi\rangle, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H},$$

这表明 $\mathcal{H}^*$ 中的任一有界线性泛函对应一个 $\mathcal{H}$ 中的向量.

根据这个定理可以定义映射 $T : \mathcal{H}^* \to \mathcal{H}, f \mapsto |\phi_f\rangle$，可以验证这是一个共轭线性映射

$$T(\lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2) = \lambda_1^* T(f_1) + \lambda_2^* T(f_2).$$

[6] [4]定理2.2.1.

在共轭空间 $\mathcal{H}^*$ 中定义内积，使其成为 Hilbert 空间

$$(f,g)=\langle\phi_f|\phi_g\rangle.$$

于是可以验证映射 T 是共轭线性同构且保持内积，这就是说 $\mathcal{H}^*$ 与 $\mathcal{H}$ 共轭同构.

在 Dirac 符号中，用左矢符号 $\langle\psi|$ 表示对应向量 $|\psi\rangle$ 的有界线性泛函，这样加法和数乘表示为

$$\langle\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2|=\lambda_1^*\langle\psi_1|+\lambda_2^*\langle\psi_2|. \tag{1.11}$$

这种符号使得内积和有界线性泛函的作用具有相同的表示方法.

§1.2　线性算符初探

1.2.1　有界线性算符

态空间为量子系统的演化提供了舞台，而真正决定命运的舞台装置则是态空间上的线性算符.

定义 1.7. 设 $\mathrm{Dom}(A)$ 是 $\mathcal{H}$ 的稠密线性子空间，若映射 $A:\mathrm{Dom}(A)\to\mathcal{H}$ 保持加法和数乘

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

就称 A 为 $\mathcal{H}$ 上的稠定线性算符，$\mathrm{Dom}(A)$ 称为 A 的定义域. 若还存在常数 C 使得

$$\|A\psi\|\leqslant C\|\psi\|,\quad\forall|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A),$$

就称 A 为 $\mathcal{H}$ 上的有界线性算符.

对于有界线性算符的定义域，我们有如下定理. 实际上，这对有界线性泛函也成立.

定理 1.2 (有界线性延拓，BLT 定理[7]). 有界线性算符 A 的定义域可以唯一地延拓到 $\overline{\mathrm{Dom}(A)}$ 上. 由于 $\mathcal{H}=\overline{\mathrm{Dom}(A)}$，因此在考虑有界线性算符时不妨认为 $\mathrm{Dom}(A)=\mathcal{H}$.

对于有界线性算符，利用已有的内积运算，可以自然地诱导得到另一个有界线性算符.

定义 1.8. 设 A 是有界线性算符，给定向量 $|\phi\rangle$，可以验证映射 $f:|\psi\rangle\mapsto\langle\phi|A\psi\rangle$ 是有界线性泛函，由 *Hilbert* 空间中的 *Riesz* 表示定理，存在唯一的向量 $|\chi\rangle$ 满足

$$\langle\chi|\psi\rangle=\langle\phi|A\psi\rangle,\quad\forall|\psi\rangle\in\mathcal{H}, \tag{1.12}$$

这给出了映射 $A^\dagger:|\phi\rangle\mapsto|\chi\rangle$，可以验证这是一个有界线性算符，称为 A 的伴随算符. 若 $A^\dagger=A$，就称 A 为自伴算符.

由于有界线性算符的定义域是 $\mathcal{H}$，我们可能会想到可以简化自伴算符的定义.

定义 1.9. 设线性算符 A，若任取$|\phi\rangle,|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A)$ 都有

$$\langle A\phi|\psi\rangle=\langle\phi|A\psi\rangle, \tag{1.13}$$

就称 A 为对称算符.

根据定义，对于有界线性算符的情形，自伴算符和对称算符是等价的.

[7][4]定理2.3.13.

1.2.2 初识位置算符

以上的定义看起来可能比较轻松愉快，但是量子力学中的线性算符一般不是有界的.

根据波函数的概率解释，粒子位置分布的期望为

$$\mathrm{E}[x] = \int_{\mathbb{R}} x|\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x,$$

由此可以在 $L^2(\mathbb{R})$ 上定义位置算符为

$$\hat{x}\psi(x,t) = x\psi(x,t), \tag{1.14}$$

可以验证这是一个线性算符，这样期望就可以表示为

$$\mathrm{E}[x] = \langle\psi|\hat{x}\psi\rangle.$$

根据定义可以看出位置算符是一个对称算符，事实上它也是自伴算符，这将在下一节简单介绍.

可以想到，对于函数 $\psi \in L^2(\mathbb{R})$，可能有 $\hat{x}\psi \notin L^2(\mathbb{R})$，这表明位置算符的定义域不是 $L^2(\mathbb{R})$. 并且对于指示函数

$$I_E(x) = \begin{cases} 1, & x \in E, \\ 0, & x \notin E, \end{cases}$$

有 $\|\hat{x}I_{[n,n+1]}(x)\| \geqslant n\|I_{[n,n+1]}(x)\|$，这都表明位置算符不是有界线性算符.

1.2.3 自伴算符公理

现在，对于一般的稠定线性算符，我们给出伴随算符的定义.

定义 1.10. 设 A 是稠定线性算符，给定向量 $|\phi\rangle$，若映射 $f: \mathrm{Dom}(A) \to \mathbb{C}, |\psi\rangle \mapsto \langle\phi|A\psi\rangle$ 有界，就称 $|\phi\rangle \in \mathrm{Dom}(A^\dagger)$. 对于这种情形，$f$ 的定义域可以延拓到 $\mathcal{H}$ 而成为有界线性泛函，于是由 *Hilbert* 空间中的 *Riesz* 表示定理，存在唯一的向量 $|A^\dagger\phi\rangle$ 满足

$$\langle A^\dagger\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A\psi\rangle, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A), \tag{1.15}$$

可以验证映射 $A^\dagger: \mathrm{Dom}(A^\dagger) \to \mathcal{H}$ 是一个线性算符，称为 A 的伴随算符. 若 $\mathrm{Dom}(A) = \mathrm{Dom}(A^\dagger)$ 且任取 $|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)$ 都有 $|A\psi\rangle = |A^\dagger\psi\rangle$ ，就称 A 为自伴算符.

根据定义可以看出，自伴算符一定是对称算符，而对称算符只要求 $\mathrm{Dom}(A) \subset \mathrm{Dom}(A^\dagger)$，因此不一定是自伴算符. 对于位置算符，虽然可以明显看出它是对称算符，但是由于我们还没有明确它的定义域，因此它的自伴性现在还不能证明.

现在我们已经知道，经典的位置函数在量子中表现为位置算符，而位置算符是自伴算符. 基于合理的推广，对于一般的经典函数，我们可以提出下面的公理.

公理 2. 经典相空间中的任一实值函数 f 都对应于量子态空间中的一个自伴算符 $\hat{f}$.

在 Dirac 符号中，线性算符的作用可以简单地表示为

$$A|\psi\rangle = |A\psi\rangle, \quad \langle\psi|A = \langle A^\dagger\psi|, \quad \langle\phi|A|\psi\rangle = \langle A^\dagger\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A\psi\rangle. \tag{1.16}$$

通常将这个实值函数称为经典可观测量，对应的自伴算符称为量子可观测量. 尽管对称算符的定义看起来更简单，但是进一步的分析将会表明，自伴算符才是正确的物理量算符.

1.2.4 初识动量算符

从波函数 $\psi(x,t)$ 的形式来看，由于不直接依赖于 p，如果想要找到经典的动量函数在 $L^2(\mathbb{R})$ 中对应的算符不是一件容易的事．根据 de Broglie 的观点，具有平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 形式波函数的粒子的动量应为 $\hbar k$．但是 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 不是 $L^2(\mathbb{R})$ 中的函数，在这里不妨先考虑 $L^2([0,2\pi])$ 中的函数．

可以证明[8]，$\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}/\sqrt{2\pi}\}_{k\in\mathbb{Z}}$ 是 $L^2([0,2\pi])$ 的标准正交基，于是可以设波函数的形式为

$$\psi(x,t)=\sum_{k=-\infty}^{+\infty}a_k(t)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}},\quad a_k(t)=\int_0^{2\pi}\psi(x,t)\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{d}x.$$

根据 Parseval 等式，Fourier 系数应满足

$$\sum_{k=-\infty}^{+\infty}|a_k|^2=\|\psi\|^2=1.$$

观察这两个等式，可以认为 $|a_k|^2$ 表示粒子动量为 $\hbar k$ 的概率，于是粒子动量分布的期望为

$$\mathrm{E}[p]=\sum_{k=-\infty}^{+\infty}\hbar k|a_k|^2.$$

如果选取的动量算符满足等式

$$\hat{p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}=\hbar k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},$$

那么利用推广的 Parseval 等式，动量分布的期望就可以表示为

$$\mathrm{E}[p]=\langle\psi|\hat{p}\psi\rangle.$$

一个合适的选择是在 $L^2([0,2\pi])$ 上定义动量算符为

$$\hat{p}\psi(x,t)=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t),\tag{1.17}$$

可以验证这是一个线性算符，在以后我们会证明它的自伴性．

现在让我们回到 $L^2(\mathbb{R})$，在这里级数化为 Fourier 变换，于是可以设波函数的形式为

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}}\hat{\psi}(k,t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k,\quad \hat{\psi}(k,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}}\psi(x,t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}x.$$

可以证明[9]，若 $\psi\in L^2(\mathbb{R})$，则 $\hat{\psi}\in L^2(\mathbb{R})$ 且

$$\|\hat{\psi}\|^2=\|\psi\|^2=1,\tag{1.18}$$

这称为 Plancherel 定理．利用极化恒等式，同样可以得到推广的 Plancherel 定理

$$\langle\hat{\phi}|\hat{\psi}\rangle=\langle\phi|\psi\rangle.\tag{1.19}$$

观察以上等式，可以认为 $|\hat{\psi}(k)|^2$ 表示粒子动量的概率密度，于是粒子动量分布的期望为

$$\mathrm{E}[p]=\int_{\mathbb{R}}\hbar k|\hat{\psi}(k)|^2\,\mathrm{d}k.$$

[8] [3]6.3节例6

[9] [4]推论4.4.11

可以认为动量算符仍然保持上面的定义，若函数 $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ 满足 $\hat{p}\psi \in L^2(\mathbb{R})$，则由微分关系有

$$\hbar k\hat{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} \hat{p}\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}x,$$

利用推广的 Plancherel 定理，动量分布的期望就可以表示为

$$\mathrm{E}[p] = \langle\hat{\psi}|\hbar k\hat{\psi}\rangle = \langle\psi|\hat{p}\psi\rangle.$$

同样可以看出，动量算符的定义域不是 $L^2(\mathbb{R})$，动量算符不是有界线性算符.

1.2.5　测量分布公理

现在我们已经知道，位置和动量分布的期望都可以用对应的算符表示为 $\langle\psi|A\psi\rangle$ 的形式. 进一步可以验证，分布的 m 阶矩可以表示为 $\langle\psi|A^m\psi\rangle$. 基于合理的推广，对于一般的可观测量，我们可以提出下面的公理.

公理 3. 设系统状态为 $|\psi\rangle$，则对可观测量 f 测量的概率分布满足

$$\mathrm{E}[f^m] = \langle\psi|\hat{f}^m|\psi\rangle, \quad \forall m \in \mathbb{N}^*, \tag{1.20}$$

这里要求 $\hat{f}^m|\psi\rangle$ 在 $\mathcal{H}$ 中有定义.

在 Dirac 符号中，线性算符的期望可以简单地表示为

$$\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A|\psi\rangle, \tag{1.21}$$

而相应的方差可以表示为

$$(\Delta_\psi A)^2 = \langle(A - \langle A\rangle_\psi I)^2\rangle = \langle A^2\rangle_\psi - \langle A\rangle_\psi^2. \tag{1.22}$$

在这个定义中，可以验证计算结果 $\langle\hat{f}^m\rangle_\psi$ 与态的不同表示无关. 并且由于 $\hat{f}$ 是自伴算符，有

$$\langle\psi|\hat{f}^m\psi\rangle = \langle\hat{f}^m\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{f}^m\psi\rangle^*,$$

于是 $\langle\hat{f}^m\rangle_\psi \in \mathbb{R}$，这也是实验上要求的. 需要注意的是，这里并没有给出关于测量的定义，而量子测量的问题也是量子力学争论最多的地方，许多不同的诠释都提出了有关的见解，但都没有被绝大多数人很好地接受. 我们将暂时忽略这些老大难问题，继续进行数学形式上的讨论.

1.2.6　特征值与特征向量

注意到在 $L^2([0,2\pi])$ 中，动量算符满足 $\hat{p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} = \hbar k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，这是一个特征方程.

定义 1.11. 设线性算符 A，若存在非零向量 $|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)\backslash\{0\}$ 满足特征方程

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle, \tag{1.23}$$

就称 $\lambda \in \mathbb{C}$ 为 A 的特征值，$|\psi\rangle$ 称为 A 对应于 λ 的特征向量.

自伴算符的特征值和特征向量有一些简单的性质．设 λ 是自伴算符 A 的特征值，有

$$\langle\psi|A\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle = \lambda,$$

于是 $\lambda \in \mathbb{R}$．设 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ 是自伴算符 A 对应不同特征值 λ_1, λ_2 的特征向量，有

$$\lambda_1^*\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle A\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|A\psi_2\rangle = \lambda_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle,$$

由于 $\lambda_1^* = \lambda_1 \neq \lambda_2$，于是 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$．

设可观测量 f，系统状态 $|\psi\rangle$ 为 $\hat{f}$ 对应于 λ 的特征向量，则测量的概率分布满足

$$\mathrm{E}[f^m] = \langle\psi|\hat{f}^m|\psi\rangle = \lambda^m, \quad \forall m \in \mathbb{N}^*,$$

根据测量结果的要求，设随机变量 f 的分布函数为 F，有

$$\int_{\mathbb{R}} x^m \,\mathrm{d}F(x) = \lambda^m, \quad \forall m \in \mathbb{N}^*,$$

由此可以计算分布函数的特征函数

$$\varphi(t) = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}tx} \,\mathrm{d}F(x) = \int_{\mathbb{R}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}t)^m}{m!} x^m \,\mathrm{d}F(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}t)^m}{m!}\lambda^m = \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\lambda},$$

利用 Fourier 变换可以看出这个分布函数实际上是阶跃函数

$$F(x) = \begin{cases} 1, & x \geqslant \lambda, \\ 0, & x < \lambda, \end{cases}$$

设分布函数 F 定义的 $\mathbb{R}$ 上的测度为 μ_F，由此得到这个测度是点测度

$$\mu_F = \delta_\lambda, \quad \delta_\lambda(E) = I_E(\lambda) = \begin{cases} 1, & \lambda \in E, \\ 0, & \lambda \notin E, \end{cases}$$

这表明对可观测量 f 测量的结果一定是 λ．

1.2.7 测量状态公理

设可观测量 f，若 $\hat{f}$ 对应不同特征值 λ_i 的特征向量构成 $\mathcal{H}$ 的标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$，可以设波函数的形式为

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i|e_i\rangle, \quad a_i = \langle e_i|\psi\rangle,$$

同样设随机变量 f 的分布函数为 F，由推广的 Parseval 等式有

$$\int_{\mathbb{R}} x^m \,\mathrm{d}F(x) = \langle\psi|\hat{f}^m|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2\lambda_i^m, \quad \forall m \in \mathbb{N}^*,$$

由此可以计算测量概率分布的特征函数

$$\varphi(t) = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}tx} \,\mathrm{d}F(x) = \int_{\mathbb{R}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}t)^m}{m!} x^m \,\mathrm{d}F(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}t)^m}{m!} \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2\lambda_i^m = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\lambda_i},$$

利用 Fourier 变换可以看出分布函数定义的测度是点测度的级数和

$$\mu_F = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 \delta_{\lambda_i},$$

这表明对可观测量 f 测量的结果一定是 λ_i 中的一个，且 $P\{f = \lambda_i\} = |a_i|^2$.

现在我们已经知道，特征值可以作为可观测量的一个测量结果，但是测量对系统状态的影响需要实验检验. 基于实验事实，我们可以提出下面的公理.

公理 4. *设系统的初始状态为 $|\psi\rangle$，对系统进行可观测量 f 的测量，若测量结果为 $\lambda \in \mathbb{R}$，则测量后系统的状态立即变为 $|\psi'\rangle$，满足*

$$\hat{f}|\psi'\rangle = \lambda|\psi'\rangle. \tag{1.24}$$

波函数的这个突变称为波函数的坍缩. 坍缩保证了在一次测量后立即进行的另一次测量会给出相同的结果，但这也引起了大量的争论，因为这涉及系统状态的不连续变化.

§1.3 系统的时间演化

1.3.1 时间演化公理

如果想要真正了解系统是如何演化的，就需要知道舞台装置对系统的影响在何处.

设经典的 Hamilton 函数在 $L^2(\mathbb{R})$ 中对应的算符为 $\hat{H}$. 根据 de Broglie 的观点，具有简谐波 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ 形式波函数的粒子的能量应为 $\hbar\omega$，于是可以认为波函数

$$\psi(x,t) = \psi_0(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$

是 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 对应于 $\hbar\omega$ 的特征向量

$$\hat{H}\psi(x,t) = \hbar\omega\psi(x,t).$$

一个合适的选择是要求 Hamilton 算符满足关系

$$\hat{H}\psi(x,t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t).$$

基于上面的分析，对于简单的量子系统，我们可以提出下面的公理.

公理 5. *系统状态随时间的演化由 Schrödinger 方程给出*

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle. \tag{1.25}$$

一般情况下方程的求解较为困难，但是对于一些特殊的系统，可以求得方程的精确解.

若 $\hat{H}$ 对应特征值 E_n 的特征向量构成 $\mathcal{H}$ 的标准正交基 $\{|\psi_n\rangle\}_{n=0}^{\infty}$，可以设波函数的形式为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(t)|\psi_n\rangle,$$

利用 Schrödinger 方程得到

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n(t)E_n|\psi_n\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_n(t)}{\mathrm{d}t}|\psi_n\rangle,$$

将方程用特征向量 $|\psi_n\rangle$ 作内积，得到系数满足的方程

$$a_n(t)E_n = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_n(t)}{\mathrm{d}t},$$

由此解得 $a_n(t) = c_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}$，因此方程的解为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}|\psi_n\rangle.$$

特别地，若系统初始状态为 $|\psi_n\rangle$，则系统的状态只是整体改变一个相位而保持不变

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}|\psi_n\rangle,$$

这种状态称为*定态*，因此 $\hat{H}$ 的特征方程也称为*定态 Schrödinger 方程*

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \tag{1.26}$$

在这种情况下，只需要找到系统所有的定态就可以得到系统的演化行为，因此在很多情况下求解系统只是表示求解定态.

1.3.2 概率守恒方程

可以想到，在 $L^2(\mathbb{R})$ 上 Hamilton 算符的一个合适的定义为

$$\hat{H}\psi(x,t) = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x},t)\right]\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x,t)\psi(x,t), \tag{1.27}$$

其中实函数 $V(x,t)$ 表示势能，因此 $L^2(\mathbb{R})$ 上的 Schrödinger 方程表示为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x,t)\psi(x,t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t). \tag{1.28}$$

根据波函数的概率解释，可以计算概率密度随时间的变化

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right),$$

观察发现，只要定义*概率流密度*为

$$j = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right), \tag{1.29}$$

上式就可以化为概率守恒方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0. \tag{1.30}$$

可以看出概率守恒是实势能函数的结果，这也是 Hamilton 算符自伴性的要求.

一般地，设 $|\phi(t)\rangle$ 和 $|\psi(t)\rangle$ 都满足 Schrödinger 方程，可以得到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\phi|\psi\rangle &= \left\langle\frac{\partial\phi}{\partial t}\middle|\psi\right\rangle + \left\langle\phi\middle|\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\rangle \\ &= \left\langle\frac{\hat{H}\phi}{\mathrm{i}\hbar}\middle|\psi\right\rangle + \left\langle\phi\middle|\frac{\hat{H}\psi}{\mathrm{i}\hbar}\right\rangle = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\hat{H}\phi|\psi\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\phi|\hat{H}\psi\rangle = 0,\end{aligned}$$

特别地，有向量的模不随时间变化，这在 $L^2(\mathbb{R})$ 上表现为概率守恒.

1.3.3 期望关系与对易式

设线性算符 $A(t)$，可以计算期望随时间的变化

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle_{\psi(t)}&=\left\langle\frac{\partial\psi}{\partial t}\middle|A\middle|\psi\right\rangle+\left\langle\psi\middle|A\middle|\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\rangle+\left\langle\psi\middle|\frac{\partial A}{\partial t}\middle|\psi\right\rangle\\&=\left\langle\frac{\hat{H}\psi}{\mathrm{i}\hbar}\middle|A\middle|\psi\right\rangle+\left\langle\psi\middle|A\middle|\frac{\hat{H}\psi}{\mathrm{i}\hbar}\right\rangle+\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_{\psi(t)}\\&=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|\hat{H}A|\psi\rangle+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|A\hat{H}|\psi\rangle+\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_{\psi(t)},\end{aligned}$$

观察发现，只要定义线性算符的*对易式*为

$$[A,B]=AB-BA,\tag{1.31}$$

上式就可以简化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle_{\psi(t)}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[A,\hat{H}]\rangle_{\psi(t)}+\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_{\psi(t)}.\tag{1.32}$$

这称为 *Ehrenfest 关系*. 可以看出，若 $\hat{f}$ 和 $\hat{H}$ 对易且不含时，则对可观测量 f 测量的概率分布不变，此时称 f 为*守恒量*. 特别地，只要 $\hat{H}$ 不含时，$\hat{H}$ 就是守恒量

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{H}\rangle_{\psi(t)}=\left\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}\right\rangle_{\psi(t)}.$$

这个关系式表明量子力学中的对易式和经典力学中的 Poisson 括号具有相似的作用，事实上，通过定义直接计算验证，它们也具有相似的性质：

1. $[c_1A_1+c_2A_2,B]=c_1[A,B]+c_2[A_2,B]$；
2. $[B,A]=-[A,B]$；
3. $[AB,C]=A[B,C]+[A,C]B$；
4. $[A,[B,C]]+[B,[C,A]]+[C,[A,B]]=0$.

作为计算对易式的例子，考虑 $L^2(\mathbb{R})$ 上位置算符和动量算符的对易式

$$\begin{aligned}[\hat{x},\hat{p}]\psi(x,t)&=\hat{x}\hat{p}\psi(x,t)-\hat{p}\hat{x}\psi(x,t)\\&=-\mathrm{i}\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}[x\psi(x,t)]=\mathrm{i}\hbar\psi(x,t),\end{aligned}$$

这个结果通常用单位算符表示为

$$[\hat{x},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar I,\tag{1.33}$$

这表明 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 不对易，这个对易关系称为*正则对易关系*.

1.3.4　三个有用的定理

利用关系式计算位置算符和动量算符的期望随时间的变化，由此可以得到第一个重要定理.

由对易式的性质，可以计算 $\hat{x},\hat{p}$ 和 $\hat{p}^2$ 的对易式

$$[\hat{x},\hat{p}^2]=\hat{p}[\hat{x},\hat{p}]+[\hat{x},\hat{p}]\hat{p}=2\mathrm{i}\hbar\hat{p},$$
$$[\hat{p},\hat{p}^2]=\hat{p}[\hat{p},\hat{p}]+[\hat{p},\hat{p}]\hat{p}=0.$$

对于具有较好性质的函数 $V(x,t)$ ，可以计算它和 $\hat{x},\hat{p}$ 的对易式

$$[\hat{x},V(\hat{x},t)]\psi(x,t)=xV(x,t)\psi(x,t)-V(x,t)x\psi(x,t)=0,$$
$$[V(\hat{x},t),\hat{p}]\psi(x,t)=-\mathrm{i}\hbar V(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}[V(x,t)\psi(x,t)]=\mathrm{i}\hbar V'(\hat{x},t)\psi(x,t).$$

由对易式的性质，可以得到 $\hat{x},\hat{p}$ 和 $\hat{H}$ 的对易关系

$$[\hat{x},\hat{H}]=\frac{1}{2m}[\hat{x},\hat{p}^2]+[\hat{x},V(\hat{x},t)]=\mathrm{i}\hbar\frac{1}{m}\hat{p},$$
$$[\hat{p},\hat{H}]=\frac{1}{2m}[\hat{p},\hat{p}^2]+[\hat{p},V(\hat{x},t)]=-\mathrm{i}\hbar V'(\hat{x},t).$$

由于位置算符和动量算符不含时，因此期望随时间的变化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle_{\psi(t)}=\frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle_{\psi(t)},\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle_{\psi(t)}=-\langle V'(\hat{x},t)\rangle_{\psi(t)},\tag{1.34}$$

这称为 *Ehrenfest* 定理．它与 Hamilton 正则方程具有相似的形式，但是一般情况下

$$\langle V'(\hat{x},t)\rangle_{\psi(t)}\neq V'(\langle\hat{x}\rangle_{\psi(t)},t),$$

因此 $(\langle\hat{x}\rangle_{\psi(t)},\langle\hat{p}\rangle_{\psi(t)})$ 一般不是 Hamilton 正则方程的解.

对于处在定态的系统，不含时算符的期望不随时间变化，由此可以得到第二个重要定理.

由对易式的性质，可以得到 $\hat{x}\hat{p}$ 和 $\hat{H}$ 的对易关系

$$[\hat{x}\hat{p},\hat{H}]=\hat{x}[\hat{p},\hat{H}]+[\hat{x},\hat{H}]\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\hat{x}V'(\hat{x})+\mathrm{i}\hbar\frac{1}{m}\hat{p}^2,$$

由于位置算符和动量算符不含时，因此期望随时间的变化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\hat{p}\rangle_{\psi(t)}=\frac{1}{m}\langle\hat{p}^2\rangle_{\psi(t)}-\langle\hat{x}V'(\hat{x})\rangle_{\psi(t)},$$

设 $|\psi(t)\rangle$ 为定态，则 $\hat{x}\hat{p}$ 的期望应不随时间变化，因此有

$$\frac{1}{m}\langle\hat{p}^2\rangle_{\psi(t)}=\langle\hat{x}V'(\hat{x})\rangle_{\psi(t)},\tag{1.35}$$

这称为*位力定理*．特别地，若 $V(x)$ 是 k 次齐次函数，由 Euler 齐次函数定理

$$xV'(x)=kV(x),$$

设动能算符 $\hat{T}=\hat{p}^2/2m$ ，则动能和势能的期望满足

$$2\langle\hat{T}\rangle_{\psi(t)}=k\langle V(\hat{x})\rangle_{\psi(t)},\tag{1.36}$$

这在形式上与经典的位力定理相同.

可以看出 $\hat{H}$ 的期望对时间 t 的导数具有简单的形式，如果推广到一般参量的导数，就需要考虑在特征向量中的期望，由此可以得到第三个重要定理.

设 λ 是 $\hat{H}$ 的参量，$|\psi\rangle$ 是 $\hat{H}$ 对应于 E 的单位特征向量，考虑特征值对参量的导数

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda}\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \\ &= \left\langle\frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\middle|\hat{H}\middle|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\middle|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\middle|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\middle|\hat{H}\middle|\frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\right\rangle \\ &= E\left\langle\frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\middle|\psi\right\rangle + E\left\langle\psi\middle|\frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\right\rangle + \left\langle\psi\middle|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\middle|\psi\right\rangle \\ &= E\frac{\partial}{\partial \lambda}\langle\psi|\psi\rangle + \left\langle\psi\middle|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\middle|\psi\right\rangle,\end{aligned}$$

由于 $|\psi\rangle$ 是单位向量，由此得到

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \left\langle\psi\middle|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\middle|\psi\right\rangle, \tag{1.37}$$

这称为 *Hellmann-Feynman* 定理. 利用这个关系可以方便地计算一些算符的期望.

1.3.5　初识时间演化算符

状态向量的时间演化自然定义了时间演化算符，这个算符应当包含了时间演化的全部信息.

设时间演化算符 $U(t) : |\psi(0)\rangle \mapsto |\psi(t)\rangle$，由向量的内积不随时间变化有

$$\langle\phi(t)|\psi(t)\rangle = \langle U(t)\phi(0)|U(t)\psi(0)\rangle = \langle\phi(0)|\psi(0)\rangle.$$

定义 1.12. 若有界线性算符 U 满足

$$\langle U\phi|U\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle, \quad \forall|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \tag{1.38}$$

就称 U 为酉算符.

这表明 $U(t)$ 是一个酉算符，利用伴随算符可以得到性质的等价表述

$$U^\dagger(t)U(t) = I.$$

利用 Schrödinger 方程

$$\hat{H}U(t)|\psi(0)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t}|\psi(0)\rangle,$$

可以得到算符满足的方程

$$\hat{H}U(t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t}. \tag{1.39}$$

求解时间演化算符等价于求解 Schrödinger 方程，因此若 $\hat{H}$ 对应特征值 E_n 的特征向量构成 $\mathcal{H}$ 的标准正交基 $\{|\psi_n\rangle\}_{n=0}^{\infty}$，则时间演化算符为

$$U(t) : \sum_{n=0}^{\infty} c_n|\psi_n\rangle \mapsto \sum_{n=0}^{\infty} c_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}|\psi_n\rangle.$$

可以看出 $|\psi_n\rangle$ 是 $U(t)$ 对应 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}$ 的特征向量，由此可以将时间演化算符在形式上表示为

$$U(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}.$$

对于一般的情况，如果想将时间演化算符写成相同的形式，就需要考虑算符指数函数的定义问题.

1.3.6 动力学绘景

在求解系统的演化时，通常会将时间演化算符作用在不同的对象上，通过求解对象的演化来表示系统的演化，这些对于系统演化形式的描述不同方式称为绘景.

在之前的讨论中，时间演化算符作用在状态向量上，这种描述方式称为 *Schrödinger* 绘景. 在这个绘景中，状态向量和可观测量可以分别表示为

$$|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle, \quad \hat{f}_{\mathrm{S}}(t) = \hat{f}(t). \tag{1.40}$$

为了构造更多的绘景，就需要知道不同绘景间状态向量和可观测量满足的关系.

由于系统的演化与绘景的选择无关，这要求可观测量 f 测量的概率分布也与绘景的选择无关

$$\langle\psi_{\mathrm{P}}(t)|\hat{f}_{\mathrm{P}}^m(t)|\psi_{\mathrm{P}}(t)\rangle = \langle\psi_{\mathrm{S}}(t)|\hat{f}_{\mathrm{S}}^m(t)|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle, \quad \forall m \in \mathbb{N}^*.$$

设线性算符 $A(t) : |\psi_{\mathrm{P}}(t)\rangle \mapsto |\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle$，这要求可观测量满足

$$\hat{f}_{\mathrm{P}}^m(t) = A^\dagger(t)\hat{f}_{\mathrm{S}}^m(t)A(t), \quad \forall m \in \mathbb{N}^*.$$

为了使这个等式成立，需要 $A(t)$ 满足

$$(A^\dagger(t)\hat{f}_{\mathrm{S}}(t)A(t))^m = \hat{f}_{\mathrm{P}}^m(t) = A^\dagger(t)\hat{f}_{\mathrm{S}}^m(t)A(t), \quad \forall m \in \mathbb{N}^*.$$

可以看出这要求 $A(t)$ 是一个酉算符

$$A^\dagger(t)A(t) = I.$$

现在取 $A(t) = U(t)$，这种描述方式称为 *Heisenberg* 绘景，在这个绘景中有

$$|\psi_{\mathrm{H}}(t)\rangle = U^\dagger(t)|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle = |\psi(0)\rangle, \quad \hat{f}_{\mathrm{H}}(t) = U^\dagger(t)\hat{f}_{\mathrm{S}}(t)U(t) = U^\dagger(t)\hat{f}(t)U(t). \tag{1.41}$$

为了得到系统演化的方程，根据时间演化算符满足的方程有

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\hat{f}_{\mathrm{H}}(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}U^\dagger(t)}{\mathrm{d}t}\hat{f}(t)U(t) + U^\dagger(t)\hat{f}(t)\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t} + U^\dagger(t)\frac{\partial\hat{f}(t)}{\partial t}U(t) \\
&= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}U^\dagger(t)\hat{H}\hat{f}(t)U(t) + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}U^\dagger(t)\hat{f}(t)\hat{H}U(t) + U^\dagger(t)\frac{\partial\hat{f}(t)}{\partial t}U(t) \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}U^\dagger(t)[\hat{f}(t), \hat{H}]U(t) + U^\dagger(t)\frac{\partial\hat{f}(t)}{\partial t}U(t),
\end{aligned}$$

进一步将算符变换到这个绘景中有

$$\frac{\mathrm{d}\hat{f}_{\mathrm{H}}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{f}_{\mathrm{H}}(t), \hat{H}_{\mathrm{H}}] + \left(\frac{\partial\hat{f}(t)}{\partial t}\right)_{\mathrm{H}}, \tag{1.42}$$

这称为 *Heisenberg 方程*. 从这个方程出发可以直接得到 Ehrenfest 关系.

根据 Heisenberg方程，在 $L^2(\mathbb{R})$ 上位置算符和动量算符满足

$$\frac{\mathrm{d}\hat{x}_{\mathrm{H}}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m}\hat{p}_{\mathrm{H}}(t), \quad \frac{\mathrm{d}\hat{p}_{\mathrm{H}}(t)}{\mathrm{d}t} = -V'(\hat{x}_{\mathrm{H}}(t), t),$$

这与 Hamilton 正则方程具有相同的形式.

现在设 Hamilton 算符可以分为两部分

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}',$$

设 $\hat{H}_0$ 对应的时间演化算符为 $U_0(t)$，取 $A(t)=U_0(t)$，这种描述方式称为相互作用绘景，有

$$|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = U_0^\dagger(t)|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle, \quad \hat{f}_{\mathrm{I}}(t) = U_0^\dagger(t)\hat{f}_{\mathrm{S}}(t)U_0(t). \tag{1.43}$$

这个绘景中状态向量满足的方程为

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle &= \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U_0^\dagger(t)}{\mathrm{d}t}|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle + \mathrm{i}\hbar U_0^\dagger(t)\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle \\ &= -U_0^\dagger(t)\hat{H}_0|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle + U_0^\dagger(t)\hat{H}|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle = U_0^\dagger(t)\hat{H}'|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle, \end{aligned}$$

这个绘景中可观测量满足的方程为

$$\frac{\mathrm{d}\hat{f}_{\mathrm{I}}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}U_0^\dagger(t)[\hat{f}(t),\hat{H}_0]U_0(t) + U_0^\dagger(t)\frac{\partial\hat{f}(t)}{\partial t}U_0(t),$$

进一步将向量和算符变换到这个绘景中有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \hat{H}'_{\mathrm{I}}|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle, \quad \frac{\mathrm{d}\hat{f}_{\mathrm{I}}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{f}_{\mathrm{I}}(t),\hat{H}_{0,\mathrm{I}}] + \left(\frac{\partial\hat{f}(t)}{\partial t}\right)_{\mathrm{I}}, \tag{1.44}$$

这是相互作用绘景中系统演化的方程.

在解决问题时选择不同的绘景可能会具有一定的便利性，在这里如果不加说明，都认为选取 Schrödinger 绘景.

§1.4 本章小结

1.4.1 简单量子系统的公理

1. 对于一个量子系统，存在一个合适的定义在复数域 $\mathbb{C}$ 上的可分的 Hilbert 空间，称为态空间 $\mathcal{H}$. 系统的状态由 $\mathcal{H}$ 中的一个单位向量 $|\psi(t)\rangle$ 表示，所有共线单位向量表示的态相同.
2. 经典相空间中的任一实值函数 f 都对应于量子态空间中的一个自伴算符 $\hat{f}$.
3. 设系统状态为 $|\psi\rangle$，则对可观测量 f 测量的概率分布满足

   $$\mathrm{E}[f^m] = \langle\psi|\hat{f}^m|\psi\rangle, \quad \forall m\in\mathbb{N}^*,$$

   这里要求 $\hat{f}^m|\psi\rangle$ 在 $\mathcal{H}$ 中有定义.
4. 设系统的初始状态为 $|\psi\rangle$，对系统进行可观测量 f 的测量，若测量结果为 $\lambda\in\mathbb{R}$，则测量后系统的状态立即变为 $|\psi'\rangle$，满足

   $$\hat{f}|\psi'\rangle = \lambda|\psi'\rangle.$$
5. 系统状态随时间的演化由 Schrödinger 方程给出

   $$\hat{H}|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle.$$

本章我们通过简单推广的方式提出了简单量子系统的公理，但这不能作为公理正确性的理由，这些公理的正确性需要由实验检验.

1.4.2 Dirac 符号

1. 态空间中的向量使用右矢符号，加法和数乘表示为

$$|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle.$$

2. 共轭空间中的有界线性泛函使用左矢符号，加法和数乘表示为

$$\langle\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2| = \lambda_1^*\langle\psi_1| + \lambda_2^*\langle\psi_2|.$$

3. 向量的内积、范数和 Cauchy-Schwarz 不等式表示为

$$\langle\phi|\psi\rangle = (\phi, \psi), \quad \|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)}, \quad |\langle\phi|\psi\rangle| \leqslant \|\phi\|\|\psi\|.$$

4. 线性算符的作用表示为

$$A|\psi\rangle = |A\psi\rangle, \quad \langle\psi|A = \langle A^\dagger\psi|, \quad \langle\phi|A|\psi\rangle = \langle A^\dagger\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A\psi\rangle.$$

5. 线性算符的期望和方差表示为

$$\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A|\psi\rangle, \quad (\Delta_\psi A)^2 = \langle(A - \langle A\rangle_\psi I)^2\rangle = \langle A^2\rangle_\psi - \langle A\rangle_\psi^2.$$

泛函分析中的许多定理为 Dirac 符号的使用和计算提供了基础，希望读者在享受符号便利性的同时不要认为这都是显然的.

第二章　一维问题的求解

在本章中，我们将会求解几个典型的一维问题，并从中体会到简单量子力学问题求解的基本方法．在这里我们不仅会涉及数学物理方程中几种典型的方法，包括 Green 函数，积分变换等，也会结合具体问题采用算符代数等方法．这不仅加深了我们对量子力学的基本概念的理解，还为之后的讨论提供了基本的方法．

§2.1　自由粒子

2.1.1　自由粒子的传播子

现在我们考虑自由粒子的运动，此时势能函数

$$V(x)=0, \tag{2.1}$$

于是自由粒子的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t),$$

我们考虑的问题是波函数随时间的演化，因此定解问题是一维无界初值问题

$$\begin{cases}\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}+\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x,t)=0, & x\in\mathbb{R},t>0,\\ \psi(x,t)|_{t=0}=\psi_0(x), & x\in\mathbb{R}.\end{cases} \tag{2.2}$$

下面我们先讨论这个问题的 Green 函数，根据定义，Green 函数满足定解问题

$$\begin{cases}\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}+\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\right)G(x,t;x',t')=\mathrm{i}\hbar\delta(x-x')\delta(t-t'), & x,x'\in\mathbb{R},t,t'>0,\\ G(x,t;x',t')|_{t=0}=0, & x,x'\in\mathbb{R},\end{cases} \tag{2.3}$$

由 Green 函数满足的方程

$$\begin{cases}\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}+\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\right)G(x,t;x',t')=\mathrm{i}\hbar\delta(x-x')\delta(t-t'),\\ \left(-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}+\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\right)G(x,-t;x'',-t'')=\mathrm{i}\hbar\delta(x-x'')\delta(t-t''),\end{cases}$$

交叉相乘相减积分，可以得到 Green 函数满足的对称性

$$G(x'',t'';x',t')=G(x',-t';x'',-t''), \tag{2.4}$$

可以看出这个方程的 Green 函数满足的对称性和热传导方程相同．

下面我们求解 Green 函数，根据无界问题的常用解法作 Fourier 变换

$$g(t;t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}} G(x,t;x',t')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\,\mathrm{d}x,$$

于是 Green 函数满足的方程化为

$$\begin{cases}\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} - \dfrac{p^2}{2m}\right)g(t;t') = \mathrm{i}\hbar\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px'/\hbar}\delta(t-t'),\\ g(t;t')|_{t<t'} = 0,\end{cases}$$

根据常微分方程初值问题 Green 函数的方法解得

$$g(t;t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px'/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{p^2}{2m\hbar}(t-t')}\eta(t-t'),$$

于是作 Fourier 逆变换得到

$$G(x,t;x',t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}} g(t;t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\,\mathrm{d}p = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t-t')}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{m(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}}\eta(t-t'). \tag{2.5}$$

自由粒子的 Green 函数称为自由粒子的传播子.

2.1.2 初值问题的求解

下面求解初值问题，由 Green 函数满足的方程

$$\begin{cases}\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t'} + \dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x'^2}\right)\psi(x',t') = 0,\\ \left(-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t'} + \dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x'^2}\right)G(x,t;x',t') = \mathrm{i}\hbar\delta(x-x')\delta(t-t'),\end{cases}$$

交叉相乘相减积分，可以得到

$$-\mathrm{i}\hbar\psi(x,t) = \mathrm{i}\hbar\int_{\mathbb{R}} -\psi(x',t')G(x,t;x';t')\Big|_{t'<t}\,\mathrm{d}x',$$

于是初值问题的解为

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\int_{\mathbb{R}}\psi_0(x')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{m(x-x')^2}{2\hbar t}}\,\mathrm{d}x'. \tag{2.6}$$

这个定解问题也可以利用 Fourier 变换直接求解，设

$$\varphi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}}\psi(x,t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\,\mathrm{d}x,$$

于是定解问题化为

$$\begin{cases}\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} - \dfrac{p^2}{2m}\right)\varphi(p,t) = 0, & p\in\mathbb{R}, t>0\\ \varphi(p,t)|_{t=0} = \varphi_0(p), & p\in\mathbb{R},\end{cases}$$

求解常微分方程，作 Fourier 逆变换，也可以得到初值问题的解

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}}\varphi_0(p)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{p^2}{2m\hbar}t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\,\mathrm{d}p, \tag{2.7}$$

利用卷积公式可以验证这两个解的表达式相同.

2.1.3 波包的传播和扩展

从表达式可以看出，初值问题的解在形式上可以表示为简谐平面波的叠加，有

$$k = \frac{p}{\hbar}, \quad \omega = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m},$$

因此每个简谐平面波成分的相速度为

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m}. \tag{2.8}$$

设 $\varphi_0(p)$ 在 $p_0 = \hbar k_0$ 处取峰值，作为一种近似，由角频率的 Taylor 公式

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \omega'(k_0)(k - k_0) + o(k - k_0)^2,$$

保留一阶项，代入解的表达式得到

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\omega'(k_0)k_0 - \omega(k_0)]t} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \varphi_0(p) \mathrm{e}^{\mathrm{i}p[x-\omega'(k_0)t]/\hbar} \mathrm{d}p \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\omega'(k_0)k_0 - \omega(k_0)]t} \psi_0(x - \omega'(k_0)t),\end{aligned}$$

于是波函数整体移动的速度可以近似为

$$v_g = \left.\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}, \tag{2.9}$$

因此波包的群速度表示了自由粒子的移动速度.

根据 Ehrenfest 定理，粒子位置和动量的平均值满足方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle_{\psi(t)} = \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle_{\psi(t)}, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle_{\psi(t)} = 0,$$

由此可以解得粒子位置和动量的平均值随时间的变化

$$\langle\hat{x}\rangle_{\psi(t)} = \langle\hat{x}\rangle_{\psi_0} + \frac{t}{m}\langle\hat{p}\rangle_{\psi_0}, \quad \langle\hat{p}\rangle_{\psi(t)} = \langle\hat{p}\rangle_{\psi_0}, \tag{2.10}$$

因此粒子在形式上作匀速直线运动.

下面计算粒子位置的不确定度随时间的变化，由 Ehrenfest 关系有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}^2\rangle_{\psi(t)} &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[\hat{x}^2, \hat{H}]\rangle_{\psi(t)} = \frac{1}{m}\langle\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\rangle_{\psi(t)}, \\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle\hat{x}^2\rangle_{\psi(t)} &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{m}\langle[\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}, \hat{H}]\rangle_{\psi(t)} = \frac{2}{m^2}\langle\hat{p}^2\rangle_{\psi(t)},\end{aligned}$$

由此可以解得粒子位置的平方随时间的变化为

$$\langle\hat{x}^2\rangle_{\psi(t)} = \langle\hat{x}^2\rangle_{\psi_0} + \frac{t}{m}\langle\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\rangle_{\psi_0} + \frac{t^2}{m^2}\langle\hat{p}^2\rangle_{\psi_0}, \tag{2.11}$$

于是粒子位置的不确定度随时间的变化为

$$\Delta_{\psi(t)}\hat{x})^2 = \langle\hat{x}^2\rangle_{\psi(t)} - \langle\hat{x}\rangle_{\psi(t)}^2 = \frac{t^2}{m^2}(\Delta_{\psi_0}\hat{p})^2 + \frac{t}{m}(\langle\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\rangle_{\psi_0} - 2\langle\hat{x}\rangle_{\psi_0}\langle\hat{p}\rangle_{\psi_0}) + (\Delta_{\psi_0}\hat{x})^2,$$

由于动量的不确定度不为零，因此位置的不确定度将会随时间逐渐变至无穷.

§2.2 方势阱与方势垒

2.2.1 方程的连接条件

现在我们考虑粒子在方势阱或方势垒中的运动，此时势能函数

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| \leqslant a/2, \\ 0, & |x| > a/2, \end{cases} \tag{2.12}$$

我们考虑求解粒子的定态，因此是特征值问题．根据粒子的定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

可以看出由于势能 $V(x)$ 分段光滑，于是方程的解 $\psi(x)$ 也在相应的区间内光滑．而在势能的间断点附近，方程的解应满足一定的连接条件，使得 $\psi''(x)$ 在一定意义上存在且是平方可积函数．

对于跳跃间断点 $x_0 = \pm a/2$，连接条件可以表示为

$$\psi(x)\Big|_{x=x_0^-}^{x=x_0^+} = 0, \quad \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=x_0^-}^{x=x_0^+} = 0, \tag{2.13}$$

这样的条件可以保证在间断点附近 $\psi''(x)$ 不会成为 δ 函数或 δ 函数的导数．

2.2.2 方势阱的束缚态

我们先考虑 $-V_0 < E < 0$ 的情况．在阱外，可以得到方程的通解为

$$\psi(x) = A_1\mathrm{e}^{\beta x} + A_2\mathrm{e}^{-\beta x}, \quad \beta = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad |x| > \frac{a}{2},$$

要使 $\psi(x)$ 平方可积，应当要求指数增长项的系数为零，于是

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1\mathrm{e}^{\beta x}, & x < -a/2, \\ A_2\mathrm{e}^{-\beta x}, & x > a/2, \end{cases}$$

在阱内，可以得到方程的通解为

$$\psi(x) = B_1\cos k'x + B_2\sin k'x, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar}, \quad |x| < \frac{a}{2}.$$

利用连接条件，我们可以得到系数满足的线性齐次方程组，从而得到特征方程的解．由于势能是偶函数，可以验证，特征方程解的奇函数部分和偶函数部分仍是特征方程的解，因此我们可以分别考虑奇函数解和偶函数解．

先考虑偶函数解，设

$$\psi(x) = \begin{cases} A\mathrm{e}^{\beta x}, & x < -a/2 \\ B\cos k'x, & |x| < a/2 \\ A\mathrm{e}^{-\beta x}, & x > a/2 \end{cases} \tag{2.14}$$

为了直接求得特征值，我们可以利用 $\psi'(x)/\psi(x)$ 的连续条件得到等式

$$k'\tan k'\frac{a}{2} = \beta, \tag{2.15}$$

可以看出这是一个超越方程，根据方程两端的单调性作图，可以得到若满足

$$(n-1)\pi < \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \leqslant n\pi, \quad n \in \mathbb{N}^*,$$

则这个超越方程有 n 个解，有范围估计

$$(m-1)\pi < \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar}\frac{a}{2} < \left(m-\frac{1}{2}\right)\pi, \quad m = 1, 2, \cdots, n.$$

再考虑奇函数解，设

$$\psi(x) = \begin{cases} -A\mathrm{e}^{\beta x}, & x < -a/2, \\ B\sin k'x, & |x| < a/2, \\ A\mathrm{e}^{-\beta x}, & x > a/2, \end{cases} \tag{2.16}$$

同样可以利用 $\psi'(x)/\psi(x)$ 的连续条件得到等式

$$-k'\cot k'\frac{a}{2} = \beta, \tag{2.17}$$

可以看出这是一个超越方程，根据方程两端的单调性作图，可以得到若满足

$$\left(n-\frac{1}{2}\right)\pi < \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \leqslant \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi, \quad n \in \mathbb{N}^*,$$

则这个超越方程有 n 个解，有范围估计

$$\left(m-\frac{1}{2}\right)\pi < \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar}\frac{a}{2} < m\pi, \quad m = 1, 2, \cdots, n.$$

根据以上结果，可以发现这种情况下特征值 E 的取值是离散的，且在这里是有限的

$$-V_0 < E_0 < E_1 < \cdots < E_m < 0,$$

于是特征值对应的特征向量也是有限的，因此它们无法构成 $L^2(\mathbb{R})$ 的标准正交基.

现在我们将能量离散取值的情况称为*离散谱*，这些能量取值称为*能级*．最低能级 E_0 对应的定态称为*基态*，相应的波函数记为 $\psi_0(x)$；能级 E_n 对应的定态称为第 n *激发态*，相应的波函数记为 $\psi_n(x)$．这些满足平方可积条件的定态统称为*束缚态*．需要注意的是，可以证明离散谱的能量取值一定对应束缚态，但反之则不一定．

对于 $E < -V_0 < 0$ 或 $E < 0 < -V_0$ 的情况，可以验证定态 Schrödinger 方程只有零解．

2.2.3 方势阱的散射态

下面我们考虑 $-V_0 < 0 < E$ 的情况，在阱外，可以得到方程的通解为

$$\psi(x) = A_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + A_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad |x| > \frac{a}{2},$$

要使 $\psi(x)$ 平方可积，应当只有零解．但是在这里，我们不妨先保留平面波的形式，设

$$\psi(x) = \begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & x < -a/2, \\ S\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, & x > a/2, \end{cases} \tag{2.18}$$

在阱内，可以得到方程的通解为

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x}, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar}, \quad |x| < \frac{a}{2}, \tag{2.19}$$

利用连接条件，我们可以得到系数满足的线性齐次方程组，解得

$$\begin{aligned} A &= \frac{2k(k+k')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k+k')a/2}}{(k+k')^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a} - (k-k')^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}}, \quad B = \frac{-2k(k-k')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k-k')a/2}}{(k+k')^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a} - (k-k')^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}}, \\ S &= \frac{4kk'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}}{(k+k')^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a} - (k-k')^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}}, \quad R = \frac{(k^2-k'^2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a})}{(k+k')^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a} - (k-k')^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}}, \end{aligned} \tag{2.20}$$

根据系数的表达式可以验证有如下关系

$$|R|^2 + |S|^2 = \frac{[2(k^2-k'^2)\sin k'a]^2 + [4kk']^2}{|4kk'\cos k'a - 2\mathrm{i}(k^2+k'^2)\sin k'a|^2} = 1,$$

这个结果可以解释为，当粒子作为平面波入射时，既存在透射波也存在反射波，用*透射系数* $|S|^2$ 表示粒子穿透的概率，用*反射系数* $|R|^2$ 表示粒子反射的概率，二者满足概率守恒. 从这里可以看出，即使平面波不平方可积，它也能给出具有物理意义的解，且这种解对能量的取值是连续的.

现在我们将能量连续取值的情况称为*连续谱*，这些不满足平方可积条件的态统称为*散射态*. 同样需要注意的是，可以证明散射态一定对应连续谱，但反之则不一定.

对于 $0 < E < -V_0$ 或 $0 < -V_0 < E$ 的情况，可以验证解的形式相同.

§2.3 谐振子

2.3.1 谐振子的升降算符

现在我们考虑粒子在谐振子势中的运动，此时势能函数

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \tag{2.21}$$

我们考虑求解粒子的定态，因此是特征值问题. 根据粒子 Hamilton 算符的表达式

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \frac{1}{2m}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2],$$

可以发现存在一定的对称性，这提示我们可以尝试先从算符的性质入手解决问题.

利用因式分解，可以定义*升算符* $a^\dagger$ 和*降算符* a 分别为

$$a^\dagger = \frac{m\omega\hat{x} - \mathrm{i}\hat{p}}{\sqrt{2\hbar m\omega}}, \quad a = \frac{m\omega\hat{x} + \mathrm{i}\hat{p}}{\sqrt{2\hbar m\omega}}, \tag{2.22}$$

根据正则对易关系，可以计算升降算符的乘积

$$a^\dagger a = \frac{1}{2\hbar m\omega}[(m\omega\hat{x})^2 + \hat{p}^2] + \frac{\mathrm{i}}{2\hbar}[\hat{x}, \hat{p}] = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}I,$$

于是 Hamilton 算符可以用升降算符表示为

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}I\right), \tag{2.23}$$

而任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ 都有 $\langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle = \langle a\psi|a\psi\rangle \geqslant 0$，于是 $a^\dagger a$ 是非负自伴算符.

利用正则对易关系，可以计算升降算符之间的对易式

$$[a, a^\dagger] = -\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}([\hat{x}, \hat{p}] - [\hat{p}, \hat{x}]) = I, \tag{2.24}$$

由此可以得到升降算符满足的重要对易关系

$$[a^\dagger, a^\dagger a] = a^\dagger[a^\dagger, a] = -a^\dagger, \quad [a, a^\dagger a] = [a, a^\dagger]a = a. \tag{2.25}$$

现在我们设存在 $|\psi\rangle$ 是 $a^\dagger a$ 对应 λ 的特征向量，根据对易关系可以得到

$$(a^\dagger a)a^\dagger|\psi\rangle = [a^\dagger(a^\dagger a) + a^\dagger]|\psi\rangle = (\lambda+1)a^\dagger|\psi\rangle,$$
$$(a^\dagger a)a|\psi\rangle = [a(a^\dagger a) - a]|\psi\rangle = (\lambda-1)a|\psi\rangle,$$

于是 $a^\dagger|\psi\rangle$ 是零向量或是对应 $\lambda+1$ 的特征向量，而 $a|\psi\rangle$ 是零向量或是对应 $\lambda-1$ 的特征向量．考虑到 $a^\dagger a$ 特征值的非负性，若不存在 $N \in \mathbb{N}^*$ 使得 $a^N|\psi\rangle$ 为零向量，则对于充分大的 N 有特征值 $\lambda - N < 0$，这就产生了矛盾，于是一定存在 N 使得

$$|\psi_0\rangle = a^{N-1}|\psi\rangle \neq 0, \quad a|\psi_0\rangle = a^N|\psi\rangle = 0,$$

由此可以得到 $a^\dagger a|\psi_0\rangle = 0$，这表明 $|\psi_0\rangle$ 是对应 0 的特征向量，这样通过 $a^\dagger$ 对 $|\psi_0\rangle$ 的反复作用可以得到一系列对应 $n \in \mathbb{N}^*$ 的特征向量 $|\psi_n\rangle$，因此相应的能级为

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{2.26}$$

设 $|\psi_n\rangle$ 是 $a^\dagger a$ 的对应 n 的单位特征向量，为了得到对应 $n+1$ 的单位特征向量，需要对递推关系的系数有一定要求．为此我们计算 $a^\dagger|\psi_n\rangle$ 的范数，根据对易关系可以得到

$$\langle a^\dagger\psi_n|a^\dagger\psi_n\rangle = \langle\psi_n|aa^\dagger|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|a^\dagger a + I|\psi_n\rangle = (n+1)\langle\psi_n|\psi_n\rangle,$$

可以发现只要定义 $a^\dagger$ 给出的递推关系为

$$a^\dagger|\psi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\psi_{n+1}\rangle, \tag{2.27}$$

就可以得到单位化的特征向量，由此也可以得到 a 给出的递推关系

$$a|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}aa^\dagger|\psi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}(a^\dagger a + I)|\psi_{n-1}\rangle = \sqrt{n}|\psi_{n-1}\rangle, \tag{2.28}$$

这样我们就可以通过求解一个特征向量得到全部的特征向量．

2.3.2 特征值问题的求解

现在我们准备求解 $|\psi_n\rangle$ 的具体表达式，为了简化升降算符的表达式，可以定义无量纲常数

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \tag{2.29}$$

于是升降算符对波函数的作用可以表示为

$$a^\dagger\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\psi(x), \quad a\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\psi(x). \tag{2.30}$$

利用基态满足的条件 $a|\psi_0\rangle=0$，可以得到方程

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\psi_0(x)=0,$$

于是解得归一化的基态波函数为

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\xi^2/2}=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\}. \tag{2.31}$$

设激发态波函数 $\psi_n(x)=A_n(\xi)\psi_0(x)$，根据递推关系可以计算得到

$$\begin{aligned}
a^\dagger\psi_n(x)&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)A_n(\xi)\psi_0(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}[2\xi A_n(\xi)-A_n'(\xi)]\psi_0(x),\\
a\psi_n(x)&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)A_n(\xi)\psi_0(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}A_n'(\xi)\psi_0(x),
\end{aligned}$$

于是可以验证 $A_n(\xi)$ 是多项式，且满足递推关系

$$\begin{aligned}
A_{n+1}(\xi)&=\frac{1}{\sqrt{2(n+1)}}[2\xi A_n(\xi)-A_n'(\xi)],\\
A_{n-1}(\xi)&=\frac{1}{\sqrt{2n}}A_n'(\xi),
\end{aligned}$$

将第一式两边求导，再将第二式下标 +1 后代入第一式可以得到 $A_n(\xi)$ 满足的方程

$$A_n''(\xi)-2\xi A_n'(\xi)+2nA_n(\xi)=0, \tag{2.32}$$

可以看出这是 Hermite 方程，满足 ψ_n 平方可积的解是 Hermite 多项式

$$H_n(\xi)=(-1)^n\mathrm{e}^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2},$$

根据 Hermite 多项式满足的递推关系

$$\begin{aligned}
H_{n+1}(\xi)&=2\xi H_n(\xi)-H_n'(\xi),\\
H_{n-1}(\xi)&=\frac{1}{2n}H_n'(\xi),
\end{aligned}$$

可以递推得到系数 $A_n(\xi)=H_n(\xi)/\sqrt{2^nn!}$，于是归一化的激发态波函数为

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{2^nn!}}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\}. \tag{2.33}$$

现在一个自然的问题是 $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ 是否构成 $L^2(\mathbb{R})$ 的标准正交基．由于 ψ_n 是 $a^\dagger a$ 对应不同特征值的特征向量，于是 $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ 是标准正交系．设 $V=\mathrm{span}\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$，则 V 中的元素可以表示为多项式 p 与 ψ_0 的乘积，根据范数的连续性可以得到

$$\lim_{N\to\infty}\left\|\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\psi_0(x)-\sum_{n=0}^N\frac{(\mathrm{i}kx)^n}{n!}\psi_0(x)\right\|=\left\|\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\psi_0(x)-\lim_{N\to\infty}\sum_{n=0}^N\frac{(\mathrm{i}kx)^n}{n!}\psi_0(x)\right\|=0,\quad\forall k\in\mathbb{R},$$

于是 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\psi_0(x)\in\overline{V}$，任取 $\psi\in V^\perp$，有 $\psi\in\overline{V}^\perp$，可以得到

$$\langle\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\psi_0|\psi\rangle=\int_{\mathbb{R}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\psi_0(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x=0,$$

由于 $\psi_0\cdot\psi$ 的 Fourier 变换为零，由 Plancherel 定理有 $\psi_0(x)\psi(x)=0,\mathrm{a.e.}x\in\mathbb{R}$，因此 $V^\perp=\{0\}$，即 $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ 构成 $L^2(\mathbb{R})$ 的标准正交基．

2.3.3 谐振子的相干态

我们已经发现，量子谐振子的行为与经典谐振子具有很大的不同，现在我们想知道能否找到一种量子态，使其具有近似经典的行为.

根据 Ehrenfest 关系，升降算符的期望随时间的演化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle a^\dagger\rangle_{\psi(t)} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[a^\dagger,\hat{H}]\rangle_{\psi(t)} = \mathrm{i}\omega\langle a^\dagger\rangle_{\psi(t)},$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle a\rangle_{\psi(t)} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[a,\hat{H}]\rangle_{\psi(t)} = -\mathrm{i}\omega\langle a\rangle_{\psi(t)},$$

求解这个方程，利用升降算符的定义可以得到粒子的位置和动量随时间的演化

$$\langle\hat{x}\rangle_{\psi(t)} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\langle a\rangle_{\psi(0)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \langle a^\dagger\rangle_{\psi(0)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}],$$
$$\langle\hat{p}\rangle_{\psi(t)} = -\mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}[\langle a\rangle_{\psi(0)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - \langle a^\dagger\rangle_{\psi(0)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}],$$

设 $\langle a\rangle_{\psi(0)} = \alpha_0$，于是 $\langle a^\dagger\rangle_{\psi(0)} = \alpha_0^*$，这样上式可以表示为

$$\langle\hat{x}\rangle_{\psi(t)} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\mathrm{Re}(\alpha_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}),\quad \langle\hat{p}\rangle_{\psi(t)} = \sqrt{2\hbar m\omega}\,\mathrm{Im}(\alpha_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}). \tag{2.34}$$

根据经典力学，这种情况下的 Hamilton 函数应为

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \hbar\omega[\mathrm{Im}(\alpha_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})]^2 + \hbar\omega[\mathrm{Re}(\alpha_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})]^2 = \hbar\omega|\alpha_0|^2,$$

为了使量子谐振子也具有相似的性质，可以要求 $|\psi(0)\rangle$ 满足

$$\langle a^\dagger a\rangle_{\psi(0)} = |\alpha_0|^2, \tag{2.35}$$

根据这个要求可以计算得到

$$\|(a-\alpha_0)\psi(0)\|^2 = \langle(a^\dagger-\alpha_0^*)(a-\alpha_0)\rangle_{\psi(0)} = \langle a^\dagger a - \alpha_0 a^\dagger - \alpha_0^* a + |\alpha_0|^2\rangle_{\psi(0)} = 0,$$

于是 $|\psi(0)\rangle$ 是 a 对应 α_0 的特征向量.

下面我们计算 $|\psi(t)\rangle$ 的表达式，由于 $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ 是 $L^2(\mathbb{R})$ 的标准正交基，有

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^\infty|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi(0)\rangle,\quad a|\psi(0)\rangle = \sum_{n=1}^\infty\sqrt{n}|\psi_{n-1}\rangle\langle\psi_n|\psi(0)\rangle,$$

由特征方程 $a|\psi(0)\rangle = \alpha_0|\psi(0)\rangle$ 可以得到系数满足的递推关系

$$\sqrt{n}\langle\psi_n|\psi(0)\rangle = \alpha_0\langle\psi_{n-1}|\psi(0)\rangle,$$

于是解得归一化的初始态为

$$|\psi(0)\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha_0|^2/2}\sum_{n=0}^\infty\frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}|\psi_n\rangle, \tag{2.36}$$

由此可以得到态随时间的演化

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha_0|^2/2}\sum_{n=0}^\infty\frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}|\psi_n\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha_0|^2/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\sum_{n=0}^\infty\frac{(\alpha_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})^n}{\sqrt{n!}}|\psi_n\rangle. \tag{2.37}$$

现在我们将 $|\psi(0)\rangle$ 表示的态称为相干态，根据表达式可以看出相干态随时间的演化仍是相干态.

最后我们来求解 $|\psi(t)\rangle$ 的具体表达式，根据特征方程 $a|\psi(t)\rangle=\alpha_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}|\psi(t)\rangle$ 可以得到

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(m\omega x+\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)=\alpha_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\psi(x,t),$$

求解这个方程，利用 $\langle\hat{x}\rangle_{\psi(t)},\langle\hat{p}\rangle_{\psi(t)}$ 的表达式，可以得到归一化的相干态波函数为

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\langle\hat{p}\rangle_{\psi(t)}x/\hbar}\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}[x-\langle\hat{x}\rangle_{\psi(t)}]^2\right\}, \tag{2.38}$$

可以看出相干态粒子的波包始终保持高斯型，且随时间作周期振荡.

§2.4 周期势

2.4.1 周期势中解的形式

现在我们考虑粒子在周期势中的运动，此时势能函数满足

$$V(x+d)=V(x),\quad d\in\mathbb{R}, \tag{2.39}$$

我们考虑求解粒子的定态，因此是特征值问题. 根据粒子的定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x),$$

可以将方程改写成线性方程组的形式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\begin{bmatrix}\psi(x)\\ \psi'(x)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 2m[V(x)-E]/\hbar^2 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\psi(x)\\ \psi'(x)\end{bmatrix}, \tag{2.40}$$

我们记待求向量为 $\boldsymbol{y}(x)$，系数矩阵为 $\boldsymbol{A}(x)$.

设 $\boldsymbol{Y}_0(x)=[\boldsymbol{y}_{10}(x),\boldsymbol{y}_{20}(x)]$ 是方程的一个基本解矩阵，由于 $\boldsymbol{A}(x)$ 是周期矩阵，有

$$\boldsymbol{Y}_0'(x+d)=\boldsymbol{A}(x+d)\boldsymbol{Y}_0(x+d)=\boldsymbol{A}(x)\boldsymbol{Y}_0(x+d),$$

于是 $\boldsymbol{Y}_0(x+d)$ 也是方程的基本解矩阵，存在非奇异常矩阵 $\boldsymbol{C}$ 使得

$$\boldsymbol{Y}_0(x+d)=\boldsymbol{Y}_0(x)\boldsymbol{C},$$

此时可以对角化得到 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{P}\operatorname{diag}(\lambda_1,\lambda_2)\boldsymbol{P}^{-1}$，取基本解矩阵 $\boldsymbol{Y}(x)=\boldsymbol{Y}_0(x)\boldsymbol{P}$，可以得到

$$\boldsymbol{Y}(x+d)=\boldsymbol{Y}(x)\operatorname{diag}(\lambda_1,\lambda_2), \tag{2.41}$$

于是存在基本解满足 $\boldsymbol{y}_i(x+d)=\lambda_i\boldsymbol{y}_i(x)$，称 λ_i 为 $\boldsymbol{A}(x)$ 对应的特征乘数.

现在计算 Wronsky 行列式的导数

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\det\boldsymbol{Y}(x)=\begin{vmatrix}y_{11}'(x) & y_{12}'(x)\\ y_{21}(x) & y_{22}(x)\end{vmatrix}+\begin{vmatrix}y_{11}(x) & y_{12}(x)\\ y_{21}'(x) & y_{22}'(x)\end{vmatrix},$$

由于 $\boldsymbol{y}(x)$ 是方程的解，有

$$y_{1i}'=a_{11}y_{1i}+a_{12}y_{2i},\quad y_{2i}'=a_{21}y_{1i}+a_{22}y_{2i},$$

利用行列式的性质可以得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\det \boldsymbol{Y}(x)=\begin{vmatrix} a_{11}y_{11} & a_{11}y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \end{vmatrix}+\begin{vmatrix} y_{11} & y_{12} \\ a_{22}y_{21} & a_{22}y_{22} \end{vmatrix}=\operatorname{tr}\boldsymbol{A}(x)\det \boldsymbol{Y}(x), \tag{2.42}$$

注意到 $\boldsymbol{A}(x)$ 零迹，于是 $\det \boldsymbol{Y}(x)\neq 0$ 是常数，而

$$\det \boldsymbol{Y}(x+d)=\det \boldsymbol{Y}(x)\det \operatorname{diag}(\lambda_1,\lambda_2),$$

有 $\lambda_1\lambda_2=1$．若进一步要求 $\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2$ 有界，需要 $|\lambda_1|=|\lambda_2|=1$．

2.4.2 周期方势

现在我们考虑粒子在周期方势中的运动，此时势能函数满足

$$V(x)=\begin{cases} 0, & 0\leqslant x<a, \\ -V_0, & -b\leqslant x<0, \end{cases}\qquad V(x+a+b)=V(x), \tag{2.43}$$

根据方程的通解，可以设

$$\psi(x)=\begin{cases} A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & 0<x<a, \\ C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}+D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x}, & -b<x<0, \end{cases}\qquad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},k'=\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}, \tag{2.44}$$

对于有界的波函数，还需要满足

$$\psi(x+a+b)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}K(a+b)}\psi(x), \tag{2.45}$$

利用连接条件可以得到系数满足的线性齐次方程组，要使系数存在非零解，需要行列式为零．

由方程组消去 A,B，计算 C,D 方程组的行列式，将指数 ka 和 $k'b$ 合并书写，可以整理得到

$$(k+k')^2\cos(ka+k'b)-(k-k')^2\cos(ka-k'b)=4kk'\cos K(a+b),$$

展开完全平方并利用和差化积得到

$$\cos ka\cos k'b-\frac{k^2+k'^2}{2kk'}\sin ka\sin k'b=\cos K(a+b), \tag{2.46}$$

由于 $|\cos K(a+b)|\leqslant 1$，这对粒子能量的连续取值有了一个限制．

现在我们称允许的能量区间为导带，不允许的能量区间为禁带．

2.4.3 周期冲激势

现在我们考虑粒子在周期冲激势中的运动，这种势也称为 Dirac 梳，此时势能函数满足

$$V(x)=\gamma\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x+na), \tag{2.47}$$

对于 δ 势，连接条件可以表示为

$$\psi(x)\Big|_{x=x_0^-}^{x=x_0^+}=0,\qquad \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\Bigg|_{x=x_0^-}^{x=x_0^+}=\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(x_0). \tag{2.48}$$

根据方程的通解，可以设

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\quad 0<x<a,\quad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},\tag{2.49}$$

对于有界的波函数，还需要满足

$$\psi(x+a)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}\psi(x),\tag{2.50}$$

利用连接条件可以得到系数满足的线性方程组

$$\begin{cases}A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}(A+B),\\ \mathrm{i}kA\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-\mathrm{i}kB\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}+\dfrac{2m\gamma}{\hbar^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}(A+B)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}(\mathrm{i}kA-\mathrm{i}kB),\end{cases}$$

将第二式除以 $\mathrm{i}k$ 并与第一式相加相减，计算行列式并整理得到

$$\cos ka+\frac{m\gamma}{\hbar^2 k}\sin ka=\cos Ka,\tag{2.51}$$

根据辅助角公式作图可以得到导带的取值范围.

§2.5 本章小结

2.5.1 一维问题的典型方法

根据本章的内容，可以总结方法如下：

1. 对于定解问题，可以先讨论相应的 Green 函数，从而得到方程的解.
2. 对于无界问题，可以作积分变换求解，再逆变换得到方程的解.
3. 对于可以写出通解的方程，可以先写出通解，再根据连接条件得到特解.
4. 对于具有对称性的问题，可以尝试先从算符的性质入手.
5. 对于具有周期性的问题，可以利用方程组的形式讨论相应的性质.

在求解更多量子力学问题时，不仅需要从这些要点出发思考方法，还需要想到数学物理方法中介绍过的其他方法，这是我们需要掌握的基本功.

第三章　自伴算符的谱定理

在本章中，我们将会给出自伴算符谱定理的陈述和证明，这些定理将会为我们提供有关算符函数和测量的概率测度等有关定义和性质．对于有限维态空间，证明主要涉及线性代数；对于无限维态空间，证明主要涉及实变函数和泛函分析．由于这部分的内容完全是数学，对这部分内容不感兴趣的读者可以选读．

§3.1　有限维态空间

3.1.1　算符的基本性质

根据态空间的结构，有限维态空间同构于 $\mathbb{C}^n$，于是只要线性代数的知识就能处理算符的谱．由于有限维态空间的稠密子空间只有自身，因此只需要考虑有界线性算符，这就使得有限维空间的情形相对简单．利用这种简单的情形，我们将进一步介绍有界线性算符的有关概念．

定义 3.1. 态空间上有界线性算符的全体构成的集合记作 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$．设有界线性算符 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，可以定义算符的范数为

$$\|A\| = \sup_{|\psi\rangle \in \mathcal{H}\setminus\{0\}} \frac{\|A\psi\|}{\|\psi\|} = \sup_{\|\psi\|=1} \|A\psi\|. \tag{3.1}$$

完备的赋范线性空间称为 *Banach* 空间．可以证明[1]，$\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是 *Banach* 空间．

对于有限维态空间，设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，任取 $\lambda \in \mathbb{C}$，只有下面两个可能：

1. $(A-\lambda I)^{-1}$ 存在，且 $(A-\lambda I)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$；
2. λ 是 A 的特征值．

根据这个结论，我们可以定义态空间上有界线性算符的谱．

定义 3.2. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，使得 $(A-\lambda I)^{-1}$ 是有界线性算符的 λ 全体构成的集合

$$\rho(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} | (A-\lambda I)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})\} \tag{3.2}$$

称为 A 的预解集，预解集中的元素称为 A 的正则值．在预解集上，有界线性算符

$$R(\lambda; A) = (A-\lambda I)^{-1}, \quad \forall \lambda \in \rho(A) \tag{3.3}$$

称为 A 的预解式，这可以看作取算符值的复变函数．预解集的补集

$$\sigma(A) = \mathbb{C}\setminus\rho(A) \tag{3.4}$$

称为 A 的谱．对于有限维态空间的情形，A 的谱就是 A 的特征值集合．

[1] [4]定理2.1.13.

3.1.2 正规算符的谱

为了得到更一般的结果，我们在这里将讨论正规算符的谱.

定义 3.3. *若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 满足 $A^\dagger A = AA^\dagger$，就称 A 为正规算符.*

由于有限维空间中谱的结构较为简单，我们可以直接从特征值入手解决.

引理 3.1. *若 $|\psi\rangle$ 是正规算符 A 对应 λ 的特征向量，则 $|\psi\rangle$ 也是 $A^\dagger$ 对应 λ^* 的特征向量.*

证明. 考虑对应向量范数，利用算符 $A-\lambda I$ 的伴随算符是 $A^\dagger - \lambda^* I$ 有

$$\|(A^\dagger - \lambda^* I)\psi\|^2 = \langle\psi|(A-\lambda I)(A^\dagger - \lambda^* I)\psi\rangle,$$

利用 A 的正规性，可以交换两个算符乘积的位置

$$\|(A^\dagger - \lambda^* I)\psi\|^2 = \langle\psi|(A^\dagger - \lambda^* I)(A-\lambda I)\psi\rangle = \|(A-\lambda I)\psi\|^2,$$

由此得到 $(A^\dagger - \lambda^* I)|\psi\rangle = 0$，因此命题成立. □

引理 3.2. *正规算符 A 对应不同特征值 λ_1, λ_2 的特征向量 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ 正交.*

证明. 考虑内积，利用上面的引理有

$$\lambda_1\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle A^\dagger\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|A\psi_2\rangle = \lambda_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle,$$

由于 $\lambda_1 \neq \lambda_2$，于是 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$. □

引理 3.3. *若 $\mathcal{M}$ 是正规算符 A 的不变子空间，则 $\mathcal{M}^\perp$ 也是 A 的不变子空间.*

证明. 设 A 在 $\mathcal{M}$ 的标准正交基下的矩阵为 A_1，将标准正交基扩充到 $\mathcal{H}$，则 A 在扩充后的基下的矩阵可以分块表示为

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 \\ 0 & A_3 \end{bmatrix},$$

根据 A 的正规性 $A^\dagger A = AA^\dagger$ 计算分块矩阵的左上角元得到

$$A_1^\dagger A_1 = A_1 A_1^\dagger + A_2 A_2^\dagger,$$

将等式两边取迹有 $\mathrm{tr}(A_2 A_2^\dagger) = 0$，而矩阵元的直接计算表明这等价于 $A_2 = 0$，因此命题成立. □

定理 3.4. *存在 $\mathcal{H}$ 的标准正交基使得正规算符 A 在基下的矩阵是对角矩阵.*

证明. 利用数学归纳法：

1. 当态空间维数 $\dim\mathcal{H} = 1$ 时显然成立.

2. 设命题对 $\dim\mathcal{H} < n$ 的情形成立，考虑 $\dim\mathcal{H} = n$ 的情形. 根据代数基本定理，A 一定存在特征值. 设 $|\psi_1\rangle$ 为 A 对应 λ_1 的特征向量，取 $\mathcal{M} = \mathrm{span}\{|\psi_1\rangle\}$，则 $\mathcal{M}$ 是 A 的不变子空间，因此 $\mathcal{M}^\perp$ 也是 A 的不变子空间. 由归纳假设，存在 $\mathcal{M}^\perp$ 的标准正交基 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=2}^n$ 使得 A 在基下的矩阵是对角矩阵，因此 A 在标准正交基 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^n$ 下的矩阵是对角矩阵. □

3.1.3 谱定理的形式

现在我们已经得到了正规算符的谱定理在线性代数中的常见表述，但是这种表述依赖于基和矩阵表示，从而难以推广到无限维空间的情形．为了实现这种推广，我们需要得到只利用空间和算符表述的谱定理形式．由于正规算符在特征子空间中的行为相当于数乘算符，我们就从这一点出发改造形式．

第一种想法是将 A 分解为特征子空间中的算符之和，这就需要将向量投影到特征子空间中．

定义 3.4. 若 $P \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 满足 $P^2 = P$，就称 P 为投影算符．若还满足

$$\langle (I-P)\phi | P\psi \rangle = 0, \quad \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \tag{3.5}$$

就称 P 为正交投影算符．通过交换 $|\phi\rangle, |\psi\rangle$ 的位置可以验证投影算符的自伴性和正交性等价．

我们知道对于有限维态空间，设 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{H}$ 的子空间，任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$，存在唯一的正交分解

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + |\psi'\rangle, \quad |\psi_0\rangle \in \mathcal{M}, |\psi'\rangle \in \mathcal{M}^{\perp},$$

对于无限维态空间，我们有如下重要定理．

定理 3.5 (正交分解定理[2])**.** 设 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{H}$ 的闭线性子空间，任取态空间中的向量 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$，存在唯一的正交分解

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + |\psi'\rangle, \quad |\psi_0\rangle \in \mathcal{M}, |\psi'\rangle \in \mathcal{M}^{\perp}. \tag{3.6}$$

基于以上想法，我们给出有限维态空间中正规算符谱定理的第一形式．

定理 3.6 (谱定理，有限维第一形式)**.** 若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是正规算符，则存在唯一的正交投影算符集合 $\{P_\lambda\}_{\lambda\in\sigma(A)}$ 使得

$$A = \sum_{\lambda\in\sigma(A)} \lambda P_\lambda. \tag{3.7}$$

证明. 任取态空间的向量 $|\psi\rangle$，存在到特征子空间的唯一分解

$$|\psi\rangle = \sum_{\lambda\in\sigma(A)} |\psi_\lambda\rangle, \quad |\psi_\lambda\rangle \in \mathcal{H}_\lambda,$$

定义算符 $P_\lambda : |\psi\rangle \mapsto |\psi_\lambda\rangle$，可以验证这是正交投影算符．考虑 A 的作用有

$$A|\psi\rangle = \sum_{\lambda\in\sigma(A)} \lambda|\psi_\lambda\rangle = \sum_{\lambda\in\sigma(A)} \lambda P_\lambda|\psi\rangle,$$

由 $|\psi\rangle$ 的任意性知命题成立． □

利用这种形式的谱定理就可以定义算符函数．

定义 3.5 (泛函微积分，有限维)**.** 若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是正规算符，$f : \sigma(A) \to \mathbb{C}$ 是有界可测函数，定义 A 的泛函微积分为映射 $f \mapsto f(A)$，在这里

$$f(A) = \sum_{\lambda\in\sigma(A)} f(\lambda) P_\lambda. \tag{3.8}$$

[2] [4]推论1.6.37.

第二种想法是将 $\mathcal{H}$ 与特征子空间联系起来，这就需要考虑态空间的直和．

定义 3.6. 设 X 是有限集，给定一组态空间 $\{\mathcal{H}_\lambda\}_{\lambda\in X}$．若映射 s 满足任取 $\lambda\in X$ 都有 $s(\lambda)\in\mathcal{H}_\lambda$，就称 s 为切片．切片的全体构成的集合称为态空间的直和，记作

$$\bigoplus_{\lambda\in X}\mathcal{H}_\lambda. \tag{3.9}$$

在直和空间上可以定义内积，使其成为 *Hilbert* 空间

$$\langle s_1|s_2\rangle=\sum_{\lambda\in X}\langle s_1(\lambda)|s_2(\lambda)\rangle. \tag{3.10}$$

我们知道，具有相同维数的态空间可以通过酉映射联系起来

$$U:\mathcal{H}\to\tilde{\mathcal{H}},\quad |\tilde{\psi}\rangle=U|\psi\rangle,\quad \tilde{A}=UAU^\dagger,$$

基于以上想法，我们给出有限维态空间中正规算符谱定理的第二形式．

定理 3.7 (谱定理，有限维第二形式). 若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是正规算符，则存在直和空间 $\bigoplus\limits_{\lambda\in\sigma(A)}\mathcal{H}_\lambda$ 和相应的酉映射 $U:\mathcal{H}\to\bigoplus\limits_{\lambda\in\sigma(A)}\mathcal{H}_\lambda$ 满足

$$[UAU^\dagger(s)](\lambda)=\lambda s(\lambda),\quad \forall s\in\bigoplus_{\lambda\in\sigma(A)}\mathcal{H}_\lambda. \tag{3.11}$$

证明. 不妨设 $\mathcal{H}_\lambda$ 为 A 对应 λ 的特征子空间．任取态空间的向量 $|\psi\rangle$，存在唯一分解

$$|\psi\rangle=\sum_{\lambda\in\sigma(A)}|\psi_\lambda\rangle,\quad |\psi_\lambda\rangle\in\mathcal{H}_\lambda,$$

可以看出只要取 $s(\lambda)=|\psi_\lambda\rangle$，映射 $U:|\psi\rangle\mapsto s$ 就是酉映射

$$\langle U\phi|U\psi\rangle=\sum_{\lambda\in\sigma(A)}\langle(U\phi)(\lambda)|(U\psi)(\lambda)\rangle=\sum_{\lambda\in\sigma(A)}\langle\phi_\lambda|\psi_\lambda\rangle=\langle\phi|\psi\rangle,$$

根据酉映射的形式考虑 A 的作用有

$$UAU^\dagger(s)=UAU^\dagger U|\psi\rangle=UA|\psi\rangle=\sum_{\lambda\in\sigma(A)}\lambda|U\psi_\lambda\rangle,$$

由于 $|U\psi_\lambda\rangle$ 只在 λ 上的取值不为零，因此

$$[UAU^\dagger(s)](\lambda)=\lambda|(U\psi_\lambda)(\lambda)\rangle=\lambda|\psi_\lambda\rangle=\lambda s(\lambda),$$

由 s 的任意性知命题成立． □

由于 $\mathcal{H}_\lambda$ 的选取存在同构上的任意性，因此只能要求维度上的唯一性．

命题 3.8. 设 $\mathcal{H}_\lambda^{(1)}$ 和 $\mathcal{H}_\lambda^{(2)}$ 都满足谱定理，若对任意的 λ 都有 $\dim\mathcal{H}_\lambda^{(i)}>0$，则

$$\dim\mathcal{H}_\lambda^{(1)}=\dim\mathcal{H}_\lambda^{(2)},\quad \forall\lambda\in\sigma(A). \tag{3.12}$$

这个命题将在之后通过有界算符的谱定理证明，也可以在这里自行验证．

§3.2 有界自伴算符

3.2.1 算符的基本性质

根据有界线性延拓，有界线性算符的定义域是整个态空间，这确保了我们进行的运算都是有定义的．更为重要的是，算符的范数为有界线性算符带来了深刻的代数结构．

命题 3.9. 设 $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有如下性质：

1. $\|AB\| \leqslant \|A\|\|B\|$；
2. $\|A^\dagger A\| = \|A\|^2$.

根据这两条性质有推论：

1. $\|A^\dagger\| = \|A\|$；
2. 若 A 自伴，则 $\|A^2\| = \|A\|^2$.

证明. 任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}\backslash\{0\}$．不妨设 $B|\psi\rangle \neq 0$，根据算符范数的定义有

$$\frac{\|AB\psi\|}{\|\psi\|} = \frac{\|AB\psi\|}{\|B\psi\|}\frac{\|B\psi\|}{\|\psi\|} \leqslant \|A\|\|B\|,$$

取上确界即可得到 $\|AB\| \leqslant \|A\|\|B\|$．利用 Cauchy-Schwarz 不等式有

$$\|A\psi\|^2 = |\langle A^\dagger A\psi|\psi\rangle| \leqslant \|A^\dagger A\psi\|\|\psi\|,$$

取上确界得到 $\|A\|^2 \leqslant \|A^\dagger A\|$．根据已经证明的性质有

$$\|A\|^2 \leqslant \|A^\dagger A\| \leqslant \|A^\dagger\|\|A\|,$$

这表明 $\|A\| \leqslant \|A^\dagger\|$，相对地有 $\|A^\dagger\| \leqslant \|(A^\dagger)^\dagger\| = \|A\|$，这就同时证明了

$$\|A^\dagger A\| = \|A\|^2, \quad \|A^\dagger\| = \|A\|.$$

若 $A^\dagger = A$，则 $\|A^2\| = \|A^\dagger A\| = \|A\|^2$. □

根据这两条性质，有界线性算符和相关的运算一起构成了一种名为 C*-代数的结构，这也是有界线性算符有关性质的代数本质．由于 C*-代数的定义过于冗长，有兴趣的读者可以自行查找有关资料．利用这些性质，我们可以讨论有界线性算符的谱．

定义 3.7. 设线性算符 A，定义域中元素的像全体构成的集合

$$\mathrm{Ran}(A) = \{|A\psi\rangle : |\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)\}, \tag{3.13}$$

称为 A 的值域．定义域中像为零向量的元素全体构成的集合

$$\ker(A) = \{|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A) : A|\psi\rangle = 0\}, \tag{3.14}$$

称为 A 的核．除了定义域的限制，这里的定义与线性代数完全相同．

对于线性算符 A，可以看出 A 是满射等价于 $\mathrm{Ran}(A)=\mathcal{H}$，而 A 是单射等价于 $\ker(A)=\{0\}$，也等价于 A^{-1} 存在．对于有界线性算符 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$，可以证明[3]，$A$ 是双射等价于 $A^{-1}\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$．

因此对于无限维态空间，设 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$，任取 $\lambda\in\mathbb{C}$，只有下面四个可能：

1. $(A-\lambda I)^{-1}$ 存在，且 $(A-\lambda I)^{-1}\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$，这等价于 $\mathrm{Ran}(A-\lambda I)=\mathcal{H}$；
2. λ 是 A 的特征值，这等价于 $(A-\lambda I)^{-1}$ 不存在；
3. $(A-\lambda I)^{-1}$ 存在，且 $\mathrm{Ran}(A-\lambda I)\neq\mathcal{H}$，但 $\overline{\mathrm{Ran}(A-\lambda I)}=\mathcal{H}$；
4. $(A-\lambda I)^{-1}$ 存在，且 $\overline{\mathrm{Ran}(A-\lambda I)}\neq\mathcal{H}$．

现在将后三种情况的 λ 集合分别称为点谱、连续谱和剩余谱，记作 $\sigma_p(A)$、$\sigma_c(A)$ 和 $\sigma_r(A)$，有

$$\sigma(A)=\sigma_p(A)\cup\sigma_c(A)\cup\sigma_r(A). \tag{3.15}$$

可以看出，此时 A 的谱不一定是 A 特征值集合，但可以猜想谱仍具有类似的性质．

3.2.2 有界算符的谱

由于无限维空间中谱的结构较为复杂，我们需要从预解集入手解决．

引理 3.10. 设 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$，若 $\|A\|<1$，则 $(I-A)^{-1}$ 存在且 $(I-A)^{-1}\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$．

证明. 考虑级数 $I+A+A^2+\cdots$，根据性质 $\|A^n\|\leqslant\|A\|^n$ 有不等式估计

$$\|I+A+A^2+\cdots\|\leqslant 1+\|A\|+\|A\|^2+\cdots=\frac{1}{1-\|A\|},$$

因此级数在 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 中绝对收敛．分别左乘和右乘 $(I-A)$ 可以验证这就是 $(I-A)^{-1}$． □

推论 3.11. 若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是双射，则满足 $\|B-A\|<1/\|A^{-1}\|$ 的任意 $B\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 都是双射．

证明. 注意到有恒等式

$$B=A+(B-A)=A[I+A^{-1}(B-A)]$$

由于 $\|A^{-1}(B-A)\|\leqslant\|A^{-1}\|\|B-A\|<1$，因此

$$\|B^{-1}\|\leqslant\|[I+A^{-1}(B-A)]^{-1}\|\|A^{-1}\|\leqslant\frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}(B-A)\|}.$$

利用这个不等式可以估计预解式的值． □

引理 3.12. 设 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$，在预解集上有第一预解公式

$$R(\lambda;A)-R(\mu;A)=(\lambda-\mu)R(\lambda;A)R(\mu;A),\quad\forall\lambda,\mu\in\rho(A). \tag{3.16}$$

证明. 直接计算得到

$$\begin{aligned}(A-\lambda I)^{-1}-(A-\mu I)^{-1}&=(A-\lambda I)^{-1}[(A-\mu I)-(A-\lambda I)](A-\mu I)^{-1}\\&=(\lambda-\mu)(A-\lambda I)^{-1}(A-\mu I)^{-1}.\end{aligned}$$

根据预解式的定义知命题成立． □

[3] [4]定理2.3.8.

引理 3.13. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 $R(\lambda; A)$ 在 $\rho(A)$ 上解析.

证明. 先证 $R(\lambda; A)$ 连续. 设 $\lambda_0, \lambda \in \rho(A)$，由第一预解公式

$$\|R(\lambda; A) - R(\lambda_0; A)\| = |\lambda - \lambda_0| \|R(\lambda; A)\| \|R(\lambda_0; A)\|,$$

当 $|\lambda - \lambda_0| < 1/\|R(\lambda_0; A)\|$ 时，可以利用不等式估计 $\|R(\lambda; A)\|$ 的值

$$\|R(\lambda; A)\| \leqslant \|[I + R(\lambda_0; A)(\lambda_0 - \lambda)]^{-1}\| \|R(\lambda_0; A)\| \leqslant \frac{\|R(\lambda_0; A)\|}{1 - |\lambda - \lambda_0| \|R(\lambda_0; A)\|},$$

可以看出只要取 $|\lambda - \lambda_0| < 1/(2\|R(\lambda_0; A)\|)$，就有

$$\|R(\lambda; A) - R(\lambda_0; A)\| \leqslant 2|\lambda - \lambda_0| \|R(\lambda_0; A)\|^2 \to 0, \quad (\lambda \to \lambda_0).$$

再证 $R(\lambda; A)$ 可导. 由第一预解公式并利用连续性得到

$$\lim_{\lambda \to \lambda_0} \frac{R(\lambda; A) - R(\lambda_0; A)}{\lambda - \lambda_0} = \lim_{\lambda \to \lambda_0} R(\lambda; A) R(\lambda_0; A) = [R(\lambda_0; A)]^2,$$

这就是说对任意的 $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$，复变函数 $f(\lambda) = \langle \phi | R(\lambda; A) | \psi \rangle$ 在 $\rho(A)$ 上解析. □

定理 3.14. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 $\sigma(A)$ 是非空有界闭集.

证明. 设 $\lambda_0 \in \rho(A)$，任取 $|\lambda - \lambda_0| < 1/\|R(\lambda_0; A)\|$，同样由不等式

$$\|R(\lambda; A)\| \leqslant \|[I + R(\lambda_0; A)(\lambda_0 - \lambda)]^{-1}\| \|R(\lambda_0; A)\| \leqslant \frac{\|R(\lambda_0; A)\|}{1 - |\lambda - \lambda_0| \|R(\lambda_0; A)\|}$$

有 $R(\lambda; A) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，即 $\lambda \in \rho(A)$，因此 $\rho(A)$ 是开集，即 $\sigma(A)$ 是闭集.

任取 $|\lambda| > \|A\|$，由不等式

$$\|R(\lambda; A)\| \leqslant \|(I - \lambda^{-1} A)^{-1}\| |\lambda^{-1}| \leqslant \frac{|\lambda^{-1}|}{1 - |\lambda^{-1}| \|A\|}$$

有 $R(\lambda; A) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，即 $\lambda \in \rho(A)$，因此 $\sigma(A)$ 有界.

若 $\sigma(A) = \varnothing$，任取 $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$，有 $\langle \phi | R(\lambda; A) | \psi \rangle$ 在 $\rho(A) = \mathbb{C}$ 上解析. 当 $|\lambda| > \|A\|$ 时，由 Cauchy-Schwarz 不等式和算符范数的定义有

$$|\langle \phi | R(\lambda; A) | \psi \rangle| \leqslant \|\phi\| \|R(\lambda; A)\| \|\psi\| \leqslant \frac{\|\phi\| \|\psi\|}{|\lambda| - \|A\|} \to 0, \quad (\lambda \to \infty),$$

于是由 Liouville 定理有 $\langle \phi | R(\lambda; A) | \psi \rangle \equiv 0$，但这与 $R(\lambda; A)$ 是双射矛盾，因此 $\sigma(A)$ 非空. □

3.2.3 自伴算符的谱

在得到有界线性算符谱的一般性质之后，我们可以给出有界自伴算符谱的性质.

引理 3.15. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 $[\mathrm{Ran}(A)]^{\perp} = \ker(A^{\dagger})$.

证明. 任取 $|\psi\rangle \in \ker(A^{\dagger})$，由伴随算符的定义有

$$\langle A^{\dagger} \psi | \phi \rangle = \langle \psi | A \phi \rangle = 0, \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H},$$

因此 $|\psi\rangle \in [\mathrm{Ran}(A)]^{\perp}$. 反过来，任取 $|\psi\rangle \in [\mathrm{Ran}(A)]^{\perp}$ 同样有这个等式，因此 $|\psi\rangle \in \ker(A^{\dagger})$. □

引理 3.16. 设 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{H}$ 的线性子空间，有 $\mathcal{M}^{\perp}=\overline{\mathcal{M}}^{\perp}$ 且 $(\mathcal{M}^{\perp})^{\perp}=\overline{\mathcal{M}}$.

证明. 设 $\{|\psi_n\rangle\}\subset\mathcal{M}$ 收敛到 $|\psi\rangle\in\overline{\mathcal{M}}$，任取 $|\phi\rangle\in\mathcal{H}$，由 Cauchy-Schwarz 不等式

$$|\langle\psi|\phi\rangle-\langle\psi_n|\phi\rangle|=\|\psi-\psi_n\|\|\phi\|\to 0,\quad(n\to\infty),$$

因此由正交补的定义有

$$\langle\psi|\phi\rangle=\lim_{n\to\infty}\langle\psi_n|\phi\rangle=0,\quad\forall|\phi\rangle\in\mathcal{M}^{\perp},$$

于是 $|\psi\rangle\in(\mathcal{M}^{\perp})^{\perp}$．反过来，任取 $|\psi\rangle\in(\mathcal{M}^{\perp})^{\perp}$，存在唯一的正交分解

$$|\psi\rangle=|\psi_0\rangle+|\psi'\rangle,\quad|\psi_0\rangle\in\overline{\mathcal{M}},|\psi'\rangle\in\overline{\mathcal{M}}^{\perp},$$

利用相同的取极限方式可以证明 $\overline{\mathcal{M}}^{\perp}=\mathcal{M}^{\perp}$，于是有

$$\langle\psi_0|\psi'\rangle=\langle\psi|\psi'\rangle=0,$$

将等式用向量 $|\psi'\rangle$ 做内积，由正交性得到 $\|\psi'\|^2=0$，因此 $|\psi\rangle=|\psi_0\rangle\in\overline{\mathcal{M}}$. □

定理 3.17. 若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，则 $\sigma(A)\subset\mathbb{R}$ 且 $\sigma_r(A)=\varnothing$.

证明. 设 $\lambda=a+\mathrm{i}b,(b\neq 0)$，只要证 $\lambda\in\rho(A)$．任取 $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$，考虑对应向量的范数

$$\|(A-\lambda I)\psi\|^2=\langle(A-aI)\psi|(A-aI)\psi\rangle-\langle(A-aI)\psi|\mathrm{i}b\psi\rangle-\langle\mathrm{i}b\psi|(A-aI)\psi\rangle+\langle\mathrm{i}b\psi|\mathrm{i}b\psi\rangle,$$

由于 $a\in\mathbb{R}$，利用 $A-aI$ 的自伴性得到

$$\|(A-\lambda I)\psi\|^2=\|(A-aI)\psi\|^2+b^2\|\psi\|^2\geqslant b^2\|\psi\|^2,$$

于是 $\ker(A-\lambda I)=\{0\}$，即 $(A-\lambda I)$ 是单射．由于 $\lambda^*=a-\mathrm{i}b,(b\neq 0)$，相对地有

$$[\mathrm{Ran}(A-\lambda I)]^{\perp}=\ker[(A-\lambda I)^{\dagger}]=\ker(A-\lambda^* I)=\{0\}.$$

下证 $\mathrm{Ran}(A-\lambda I)$ 是闭线性子空间．设 $\{|\phi_n\rangle\}=\{(A-\lambda I)|\psi_n\rangle\}$ 在 $\mathcal{H}$ 中收敛到 $|\phi\rangle$，利用不等式

$$\|\phi_n-\phi_m\|^2=\|(A-\lambda I)(\psi_n-\psi_m)\|^2\geqslant b^2\|\psi_n-\psi_m\|^2,$$

由 $\{|\phi_n\rangle\}$ 是 Cauchy 列可以得到 $\{|\psi_n\rangle\}$ 也是 Cauchy 列，设 $\{|\psi_n\rangle\}$ 收敛到 $|\psi\rangle$，取极限得到

$$(A-\lambda I)|\psi\rangle=\lim_{n\to\infty}(A-\lambda I)|\psi_n\rangle=\lim_{n\to\infty}|\phi_n\rangle=|\phi\rangle,$$

于是 $|\phi\rangle\in\mathrm{Ran}(A)$，因此 $\mathrm{Ran}(A-\lambda I)$ 是闭线性子空间，从而

$$\mathrm{Ran}(A-\lambda I)=\overline{\mathrm{Ran}(A-\lambda I)}=[[\mathrm{Ran}(A-\lambda I)]^{\perp}]^{\perp}=\{0\}^{\perp}=\mathcal{H},$$

即 $(A-\lambda I)$ 是满射，于是 $(A-\lambda I)$ 是双射，因此 $\lambda\in\rho(A)$.

若 $\sigma_r(A)\neq\varnothing$，取 $\lambda\in\sigma_r(A)\subset\mathbb{R}$，由定义有 $\ker(A-\lambda I)=\{0\}$，于是

$$\overline{\mathrm{Ran}(A-\lambda I)}=[[\mathrm{Ran}(A-\lambda I)]^{\perp}]^{\perp}=[\ker[(A-\lambda I)^{\dagger}]]^{\perp}=[\ker(A-\lambda I)]^{\perp}=\mathcal{H},$$

但这与定义矛盾，因此 $\sigma_r(A)=\varnothing$. □

定理 3.18. 若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，则 $\lambda \in \sigma(A)$ 的充要条件是存在 $\{|\psi_n\rangle\} \subset \mathcal{H}$ 使得

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\|A\psi_n - \lambda\psi_n\|}{\|\psi_n\|} = 0. \tag{3.17}$$

证明. 设存在 $\{|\psi_n\rangle\} \subset \mathcal{H}$ 满足条件，若 $\lambda \in \rho(A)$，设 $|\phi_n\rangle = (A-\lambda I)|\psi_n\rangle$，有

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\|\phi_n\|}{\|(A-\lambda I)^{-1}\phi_n\|} = 0,$$

但这与 $(A-\lambda I)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 矛盾，因此 $\lambda \in \sigma(A)$.

设 $\lambda \in \sigma(A)$，若不存在 $\{|\psi_n\rangle\} \subset \mathcal{H}$ 满足条件，则存在 $\varepsilon_0 > 0$ 使得

$$\|A\psi - \lambda\psi\| > \varepsilon_0\|\psi\|, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H},$$

这个不等式导致 $\ker(A-\lambda I) = \{0\}$ 且 $\mathrm{Ran}(A-\lambda I)$ 是闭线性子空间，从而

$$\mathrm{Ran}(A-\lambda I) = \overline{\mathrm{Ran}(A-\lambda I)} = [\ker[(A-\lambda I)^\dagger]]^\perp = [\ker(A-\lambda I)]^\perp = \mathcal{H}$$

于是 $(A-\lambda I)$ 是双射，但这与 $\lambda \in \sigma(A)$ 矛盾，因此存在 $\{|\psi_n\rangle\} \subset \mathcal{H}$ 满足条件. □

3.2.4 泛函微积分

在有限维态空间中，我们利用谱定理的第一形式定义了泛函微积分，这提示我们可以通过讨论泛函微积分得到谱定理的第一形式. 在这里我们先从简单的多项式函数开始，再进一步推广到连续函数和有界可测函数.

定义 3.8. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，定义 A 的谱半径为 $r_\sigma(A) = \sup\limits_{\lambda\in\sigma(A)} |\lambda|$.

根据 $\sigma(A)$ 有界性的证明可以得到 $r_\sigma(A) \leqslant \|A\|$，而对于有界自伴算符，我们有如下关系.

引理 3.19. 若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，则 $r_\sigma(A) = \|A\|$.

证明. 当 $|\lambda| > \|A\|$ 时，$R(\lambda; A)$ 有 Laurent 级数展开

$$R(\lambda; A) = -\lambda^{-1}(I - \lambda^{-1}A)^{-1} = -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{\lambda^{n+1}},$$

而当 $|\lambda| \leqslant \|A\|$ 时，由自伴算符的性质 $\|A^2\| = \|A\|^2$ 有级数发散

$$\lim_{n\to\infty} \left\|\frac{A^{2^n}}{\lambda^{2^n+1}}\right\| = \lim_{n\to\infty} \frac{\|A\|^{2^n}}{|\lambda|^{2^n+1}} \neq 0,$$

由于 $R(\lambda; A)$ 在 $\rho(A)$ 上解析，这要求级数在 $|\lambda| > r_\sigma(A)$ 上收敛，因此 $r_\sigma(A) \geqslant \|A\|$. □

引理 3.20. 若 $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 对易且 A 不是双射，则 AB 也不是双射.

证明. 若 AB 是双射，则存在 $C \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 使得

$$(AB)C = C(AB) = I,$$

由对易性得到 $A(BC) = (CB)A = I$，而直接计算有

$$BC = I(BC) = (CB)A(BC) = (CB)I = CB,$$

于是 $A^{-1} = BC \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，但这与 A 不是双射矛盾，因此 AB 不是双射. □

引理 3.21. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，对任意的多项式 p 有 $\sigma(p(A)) = p(\sigma(A))$.

证明. 设 $\lambda \in \sigma(A)$，有 $\gamma = p(\lambda) \in p(\sigma(A))$，设多项式的形式为

$$p(z) = a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \cdots + a_0,$$

考虑相应的算符

$$p(A) - \gamma I = a_n(A^n - \lambda^n I) + a_{n-1}(A^{n-1} - \lambda^{n-1} I) + \cdots + a_0(I - I),$$

注意到有因式分解

$$A^k - \lambda^k I = (A - \lambda I)(A^{k-1} + \lambda A^{k-2} + \cdots + \lambda^{k-1} I),$$

于是提取公因式并将剩余的多项式设为 q，得到

$$p(A) - \gamma I = (A - \lambda I) q(A),$$

由于 $(A-\lambda I)$ 与 $q(A)$ 对易且 $(A-\lambda I)$ 不是双射，于是 $p(A)-\gamma I$ 也不是双射，因此 $\gamma \in \sigma(p(A))$.

设 $\gamma \in \sigma(p(A))$，由代数基本定理设多项式的形式为

$$p(z) - \gamma = c(z - b_1)(z - b_2) \cdots (z - b_n),$$

考虑相应的算符

$$p(A) - \gamma I = c(A - b_1 I)(A - b_2 I) \cdots (A - b_n I),$$

由于 $p(A) - \gamma I$ 不是双射，于是一定存在一个 b_i 使得 $(A - b_i I)$ 不是双射，这就是说 $b_i \in \sigma(A)$，因此 $\gamma = p(b_i) \in p(\sigma(A))$. □

定理 3.22 (连续泛函微积分). 若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，$f : \sigma(A) \to \mathbb{R}$ 是连续函数，则存在唯一的 A 的连续泛函微积分 $C(\sigma(A); \mathbb{R}) \to \mathcal{B}(\mathcal{H}), f \mapsto f(A)$ 满足当 $f(\lambda) = \lambda^m$ 时有 $f(A) = A^m$.

证明. 设 p 是 $\sigma(A)$ 上的实多项式，有 $p(A)$ 是自伴算符，可以得到

$$\|p(A)\| = r_\sigma(p(A)) = \sup_{\gamma \in \sigma(p(A))} |\gamma| = \sup_{\gamma \in p(\sigma(A))} |\gamma| = \sup_{\lambda \in \sigma(A)} |p(\lambda)|,$$

于是 $p \mapsto p(A)$ 是线性映射且保持范数. 由 Stone–Weierstrass 定理，有界闭集上的连续函数可以由多项式一致逼近，这就是说多项式在连续函数空间中稠密，因此这个映射可以唯一地延拓到连续函数空间 $C(\sigma(A); \mathbb{R})$ 中. □

根据多项式满足的性质可以得到连续泛函微积分的性质.

命题 3.23. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，$f, g \in C(\sigma(A); \mathbb{R})$，有如下性质：

1. $(f \cdot g)(A) = f(A) g(A)$；
2. $f(A)$ 是自伴算符；
3. 若 f 非负，则 $f(A)$ 非负；
4. $\|f(A)\| = \sup\limits_{\lambda \in \sigma(A)} |f(\lambda)|$ 且 $\sigma(f(A)) = f(\sigma(A))$.

证明. 由于前两条性质对多项式成立，因此只要取极限即可得到对连续函数成立．对于第三条性质，设 $f=g^2$，则 $f(A)=(g\cdot g)(A)=[g(A)]^2$ 且 $g(A)$ 是自伴算符，任取 $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$ 有

$$\langle\psi|f(A)\psi\rangle=\langle\psi|[g(A)]^2\psi\rangle=\langle g(A)\psi|g(A)\psi\rangle\geqslant 0,$$

因此 $f(A)$ 非负．对于第四条性质，第一个等式同样可以通过取极限得到，下证第二个等式．

设 $\mu\in\sigma(A)$，若 $f(\mu)\notin\sigma(f(A))$，取多项式 $\{p_n\}$ 一致收敛到 f，由于 $f(A)-f(\mu)I$ 是双射，则对充分大的 n 有 $p_n(A)-p_n(\mu)I$ 也是双射，但这与 $p_n(\mu)\in\sigma(p_n(A))$ 矛盾，因此 $f(\mu)\in\sigma(f(A))$.

设 $\lambda_0\in\sigma(f(A))$，若 $\lambda_0\notin f(\sigma(A))$，则函数 $g(\lambda)=1/[f(\lambda)-\lambda_0]$ 在 $\sigma(A)$ 上连续，于是 $g(A)\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是 $f(A)-\lambda_0 I$ 的逆，但这与 $\lambda_0\in\sigma(f(A))$ 矛盾，因此 $\lambda_0\in f(\sigma(A))$. □

为了将泛函微积分推广到有界可测函数，我们有如下重要定理.

定理 3.24 (测度论的 Riesz 表示定理[4]). *设 X 是紧度量空间，若映射 $\Lambda: C(X;\mathbb{R})\to\mathbb{R}$ 满足若 f 非负则 $\Lambda(f)$ 非负，则在 X 的 Borel σ-代数上存在唯一的测度 μ 满足*

$$\Lambda(f)=\int_X f\,\mathrm{d}\mu,\quad \forall f\in C(X;\mathbb{R}). \tag{3.18}$$

注意到 $\sigma(A)$ 是 $\mathbb{R}$ 上的有界闭集，从而是紧度量空间，由此可以用测度表示连续泛函微积分.

引理 3.25. *若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，任取 $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$，则在 $\sigma(A)$ 的 Borel σ-代数上存在唯一的测度 μ_ψ^A 满足*

$$\langle\psi|f(A)|\psi\rangle=\int_{\sigma(A)} f\,\mathrm{d}\mu_\psi^A,\quad \forall f\in C(\sigma(A);\mathbb{R}). \tag{3.19}$$

证明. 定义 $\Lambda_\psi(f)=\langle\psi|f(A)|\psi\rangle$. 由于若 f 非负则 $f(A)$ 非负，从而 $\Lambda_\psi(f)$ 非负，于是存在唯一的测度 μ_ψ^A 满足等式．取 $f(\lambda)=1$ 可以得到这是个有限测度 $\mu_\psi^A(\sigma(A))=\|\psi\|^2$. □

在测度论中，通常用 $\sigma(\mathcal{A})$ 表示集合类 $\mathcal{A}$ 生成的 σ-代数，我们有如下重要定理.

引理 3.26 (单调类定理[5]). *设 $\mathcal{A}$ 是代数，$\mathcal{M}$ 是单调类，若 $\mathcal{A}\subset\mathcal{M}$，则 $\sigma(\mathcal{A})\subset\mathcal{M}$.*

定理 3.27. *若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符且 $f:\sigma(A)\to\mathbb{C}$ 是有界可测函数，则映射*

$$Q_f(\psi)=\int_{\sigma(A)} f\,\mathrm{d}\mu_\psi^A,\quad \forall|\psi\rangle\in\mathcal{H}, \tag{3.20}$$

是 $\mathcal{H}$ 上的有界二次型.

证明. 设使得 Q_f 是二次型的有界可测函数 f 全体构成的集合为 $\mathcal{F}$，可以验证 $\mathcal{F}$ 是线性空间且 $C(\sigma(A);\mathbb{R})$ 是 $\mathcal{F}$ 的子空间，并且若 $\{f_n\}\subset\mathcal{F}$ 一致有界且 $\lim\limits_{n\to\infty}f_n=f$，则根据控制收敛定理有 $f\in\mathcal{F}$，即 $Q_f(\psi)$ 关于 f 连续．下面用测度论的典型方法证明 $\mathcal{F}$ 包含全体有界可测函数.

设使得 I_E 是一致有界的连续函数序列的极限的可测集 E 全体构成的集合为 $\mathcal{A}$，下证 $\mathcal{A}$ 是代数且包含全体开集．设 E 是开集，有 $\mathbb{C}$ 的任一开集在映射 I_E 下的原像都是开集，于是 I_E 连续，由于 $\{I_E\}$ 收敛到 I_E，因此 $E\in\mathcal{A}$．特别地有 $\sigma(A)\in\mathcal{A}$．设 $E_1,E_2\in\mathcal{A}$，$\{f_n\},\{g_n\}$ 分别收敛到 I_{E_1},I_{E_2}，则 $\{f_n\cdot g_n\},\{1-f_n\}$ 分别收敛到 $I_{E_1\cap E_2},I_{E_1^c}$，于是 $E_1\cap E_2,E_1^c\in\mathcal{A}$，因此 $\mathcal{A}$ 是代数.

[4][2]定理5.2.8.

[5][2]定理1.2.2.

设使得 $I_E \in \mathcal{F}$ 的可测集 E 全体构成的集合为 $\mathcal{M}$，可以看出 $\mathcal{A} \subset \mathcal{M}$，下证 $\mathcal{M}$ 是单调类且包含全体 Borel 集．设单调集合序列 $\{E_n\} \subset \mathcal{M}$ 的极限为 E，由于 $\{I_{E_n}\}$ 一致有界且收敛到 I_E，于是 $E \in \mathcal{M}$，因此 $\mathcal{M}$ 是单调类．根据单调类定理，有 $\sigma(\mathcal{A}) \subset \mathcal{M}$，因此 $\mathcal{M}$ 包含全体 Borel 集．

由于这里的可测集是 Borel 集，因此任取可测集 E 有指示函数 $I_E \in \mathcal{F}$．由于简单函数是指示函数的有限线性组合，因此任取简单函数 h 有 $h \in \mathcal{F}$．由于任取有界可测函数 f 都存在一致有界的简单函数列 $\{h_n\}$ 收敛到 f，因此 $f \in \mathcal{F}$，这就证明了 $\mathcal{F}$ 包含全体有界可测函数．

根据积分的性质和测度的有限性可以得到二次型有界

$$|Q_f(\psi)| \leqslant \sup_{\lambda\in\sigma(A)} |f(\lambda)|\mu_\psi^A(\sigma(A)) = \sup_{\lambda\in\sigma(A)} |f(\lambda)|\|\psi\|^2, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$ □

利用极化恒等式，可以由二次型诱导出相应的半双线性形式

$$L_f(\phi,\psi) = \frac{1}{4}[Q_f(\phi+\psi) - Q_f(\phi-\psi) - \mathrm{i}Q_f(\phi+\mathrm{i}\psi) + \mathrm{i}Q_f(\phi-\mathrm{i}\psi)], \tag{3.21}$$

若二次型 $Q_f(\psi)$ 有界，可以得到半双线性形式 $L_f(\phi,\psi)$ 也有界

$$|L_f(\phi,\psi)| \leqslant C\|\phi\|\|\psi\|,$$

由此可以验证映射 $|\phi\rangle \mapsto L_f(\phi,\psi)$ 是有界共轭线性泛函，由 Hilbert 空间中的 Riesz 表示定理的共轭版本，存在唯一的向量 $|A_f\psi\rangle$ 满足

$$\langle\phi|A_f\psi\rangle = L_f(\phi,\psi), \quad \forall|\phi\rangle,|\psi\rangle \in \mathcal{H},$$

可以验证 $A_f \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，利用这种方式，我们可以正式定义泛函微积分．

定义 3.9 (泛函微积分)**.** *设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，$f : \sigma(A) \to \mathbb{C}$ 是有界可测函数，定义 A 的泛函微积分 $f \mapsto f(A)$ 为满足如下条件的唯一算符*

$$\langle\psi|f(A)|\psi\rangle = \int_{\sigma(A)} f\,\mathrm{d}\mu_\psi^A, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}. \tag{3.22}$$

直接计算可以得到这个半双线性形式的表达式为

$$L_f(\phi,\psi) = \langle\phi|f(A)|\psi\rangle, \quad \forall|\phi\rangle,|\psi\rangle \in \mathcal{H}, \tag{3.23}$$

由于 $Q_f(\psi)$ 关于 f 连续，因此 $L_f(\phi,\psi)$ 也关于 f 连续．

命题 3.28. *若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符且 f,g 是有界可测函数，则 $(f\cdot g)(A) = f(A)g(A)$.*

证明. 根据上面的定义，这个等式可以表示为

$$L_{fg}(\phi,\psi) = L_f(\phi, g(A)\psi), \quad \forall|\phi\rangle,|\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

设使得对任意 $g \in C(\sigma(A);\mathbb{R})$ 满足等式的有界可测函数 f 全体构成的集合为 $\mathcal{F}_1$，可以验证 $\mathcal{F}_1$ 是线性空间且 $C(\sigma(A);\mathbb{R})$ 是 $\mathcal{F}_1$ 的子空间，并且若 $\{f_n\} \subset \mathcal{F}_1$ 一致有界且 $\lim\limits_{n\to\infty} f_n = f$，则由连续性有 $f \in \mathcal{F}_1$，因此根据测度论的典型方法有 $\mathcal{F}_1$ 包含全体有界可测函数．

设使得对任意有界可测函数 g 满足等式的有界可测函数 f 全体构成的集合为 $\mathcal{F}_2$，根据 $\mathcal{F}_1$ 的结果有 $\mathcal{F}_2$ 是线性空间且 $C(\sigma(A);\mathbb{R})$ 是 $\mathcal{F}_2$ 的子空间，并且若 $\{f_n\} \subset \mathcal{F}_2$ 一致有界且 $\lim\limits_{n\to\infty} f_n = f$，则由连续性有 $f \in \mathcal{F}_2$，因此根据测度论的典型方法有 $\mathcal{F}_2$ 包含全体有界可测函数． □

3.2.5 谱定理的第一形式

现在我们准备证明谱定理的第一形式．在有限维态空间中，算符被表示为正交投影算符的加权和．可以想到在无限维态空间中，求和将变为积分，由此需要定义投影值测度．

定义 3.10. 设 (X,Ω) 是可测空间，定义满足如下性质的映射 $\mu:\Omega\to\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 为投影值测度：

1. 对任意的 $E\in\Omega$，算符 $\mu(E)$ 是正交投影算符；
2. $\mu(\varnothing)=0,\mu(X)=I$；
3. 对任意可列个两两不交的集合 $E_1,E_2,\cdots\in\Omega$ 有 $\mu\left(\bigcup\limits_{n=1}^{\infty}E_n\right)=\sum\limits_{n=1}^{\infty}\mu(E_n)$；
4. 对任意的 $E_1,E_2\in\Omega$，有 $\mu(E_1\cap E_2)=\mu(E_1)\mu(E_2)$.

命题 3.29. 设 (X,Ω) 是可测空间，μ 是 Ω 上的投影值测度，任取 $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$，可以定义测度

$$\mu_\psi(E)=\langle\psi|\mu(E)|\psi\rangle, \tag{3.24}$$

设 $f:X\to\mathbb{C}$ 是有界可测函数，存在唯一的有界线性算符 $A_f=\displaystyle\int_X f\,\mathrm{d}\mu$ 满足

$$\left\langle\psi\middle|\int_X f\,\mathrm{d}\mu\middle|\psi\right\rangle=\int_X f\,\mathrm{d}\mu_\psi. \tag{3.25}$$

有界可测函数关于投影值测度的积分映射有如下性质：

1. 任取 $E\in\Omega$，有 $\displaystyle\int_X I_E\,\mathrm{d}\mu=\mu(E)$；
2. $\displaystyle\left\|\int_X f\,\mathrm{d}\mu\right\|\leqslant\sup_{\lambda\in X}|f(\lambda)|$；
3. $\displaystyle\int_X f\cdot g\,\mathrm{d}\mu=\int_X f\,\mathrm{d}\mu\cdot\int_X g\,\mathrm{d}\mu$；
4. $\displaystyle\int_X f^*\,\mathrm{d}\mu=\left(\int_X f\,\mathrm{d}\mu\right)^\dagger$，特别地，若 f 是实函数，则 $\displaystyle\int_X f\,\mathrm{d}\mu$ 是自伴算符.

证明. 根据正交投影算符的定义或利用自伴性有

$$\mu_\psi(E)=\langle\psi|\mu(E)|\psi\rangle=\langle\psi|\mu(E)^2|\psi\rangle=\|\mu(E)\psi\|^2,$$

于是 μ_ψ 非负，可以验证 $\mu_\psi(\varnothing)=0,\mu_\psi(X)=\|\psi\|^2$ 和 μ_ψ 的可列可加性，因此 μ_ψ 是有限测度．

下证对于任意有界可测函数 f，映射

$$Q_f(\psi)=\int_X f\,\mathrm{d}\mu_\psi,\quad\forall|\psi\rangle\in\mathcal{H}$$

是 $\mathcal{H}$ 上的有界二次型．若 f 是指示函数 I_E，有 $Q_f(\psi)=\mu_\psi(E)=\langle\psi|\mu(E)|\psi\rangle$ 是二次型．若 f 是简单函数，由于简单函数是简单函数的有限线性组合，有 $Q_f(\psi)$ 是二次型．若 f 是有界可测函数，取一致有界的简单函数列收敛到 f，由于 $Q_f(\psi)$ 关于 f 连续，有 $Q_f(\psi)$ 是二次型．同样根据积分的性质和测度的有限性可以得到二次型有界

$$|Q_f(\psi)|\leqslant\sup_{\lambda\in X}|f(\lambda)|\mu_\psi(X)=\sup_{\lambda\in X}|f(\lambda)|\|\psi\|^2,\quad\forall|\psi\rangle\in\mathcal{H}.$$

由此可以定义 A_f 是满足定义式的唯一算符.

根据前面的证明就可以得到前两条性质. 对于第三条性质, 设 $E_1, E_2 \in \Omega$, 则有

$$\int_X I_{E_1} \cdot I_{E_2} \,\mathrm{d}\mu = \int_X I_{E_1 \cap E_2} \,\mathrm{d}\mu = \mu(E_1 \cap E_2) = \mu(E_1)\mu(E_2) = \int_X I_{E_1} \,\mathrm{d}\mu \cdot \int_X I_{E_2} \,\mathrm{d}\mu,$$

利用简单函数列取极限即可证明对有界可测函数成立. 对定义式取复共轭就得到第四条性质. □

定理 3.30 (谱定理, 第一形式). *若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符, 则在 $\sigma(A)$ 的 Borel σ-代数上存在唯一的投影值测度 μ^A 满足*

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda \,\mathrm{d}\mu^A(\lambda). \tag{3.26}$$

证明. 任取可测集 $E \subset \sigma(A)$, 利用泛函微积分定义 $\mu^A(E) = I_E(A)$, 下证 μ^A 是投影值测度. 根据泛函微积分的性质有

$$\mu^A(E) = I_E(A) = (I_E \cdot I_E)(A) = [I_E(A)]^2 = [\mu^A(E)]^2,$$

由于 I_E 是实函数, 于是 $\mu^A(E) = I_E(A)$ 是自伴算符, 因此 $\mu^A(E)$ 是正交投影算符.
当 $E = \varnothing$ 时 $I_E = 0$, 因此 $\mu^A(\varnothing) = 0$; 当 $E = \sigma(A)$ 时 $I_E = 1$, 因此 $\mu^A(\sigma(A)) = I$.
任取可列个两两不交的可测集 $E_1, E_2, \cdots$, 有

$$\mu^A\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} E_n\right) = I_{\bigcup_{n=1}^{\infty} E_n}(A) = \left(\sum_{n=1}^{\infty} I_{E_n}\right)(A) = \sum_{n=1}^{\infty} I_{E_n}(A) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu^A(E_n).$$

任取可测集 E_1, E_2, 有

$$\mu^A(E_1 \cap E_2) = I_{E_1 \cap E_2}(A) = (I_{E_1} \cdot I_{E_2})(A) = I_{E_1}(A) \cdot I_{E_2}(A) = \mu^A(E_1)\mu^A(E_2).$$

因此根据投影值测度的定义有 μ^A 是投影值测度.

下证对于任意有界可测函数 f 都有

$$f(A) = \int_{\sigma(A)} f(\lambda) \,\mathrm{d}\mu^A(\lambda).$$

若 f 是指示函数 I_E, 有

$$I_E(A) = \mu^A(E), \quad \int_{\sigma(A)} I_E(\lambda) \,\mathrm{d}\mu^A(\lambda) = \mu^A(E)$$

因此等式成立, 利用简单函数列取极限即可证明对有界可测函数也成立.

下证唯一性. 设投影值测度 μ^A 和 ν^A 都满足

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda \,\mathrm{d}\mu^A(\lambda) = \int_{\sigma(A)} \lambda \,\mathrm{d}\nu^A(\lambda),$$

要证 $\mu^A = \nu^A$, 只要证明对于任意有界可测函数 f 都有

$$\int_{\sigma(A)} f(\lambda) \,\mathrm{d}\mu^A(\lambda) = \int_{\sigma(A)} f(\lambda) \,\mathrm{d}\nu^A(\lambda).$$

若 f 是多项式, 根据投影值测度的性质有等式成立. 若 f 是连续函数, 取极限即可得到等式成立. 若 f 是有界可测函数, 根据测度论的典型方法可以得到等式成立. □

通过定义 $\mu^A(\mathbb{R}\backslash\sigma(A))=0$ 将 μ^A 延拓到 $\mathbb{R}$ 上，我们可以得到如下性质.

命题 3.31 (概率测度). 若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符且 $|\psi\rangle$ 是单位向量，则存在唯一的概率测度 μ_ψ^A 满足

$$\int_{\mathbb{R}}\lambda^m\,\mathrm{d}\mu_\psi^A(\lambda)=\langle\psi|A^m|\psi\rangle,\quad \forall m\in\mathbb{N}^*. \tag{3.27}$$

可以看出谱定理为可观测量的测量提供了概率测度的存在唯一性.

3.2.6 谱子空间

在有限维态空间中，特征值对应的特征子空间是相应正交投影算符的值域. 在无限维态空间中，我们也想将谱和空间联系起来，这就可以定义谱子空间.

定义 3.11. 设 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，定义 Borel 集 $E\subset\mathbb{R}$ 的谱子空间 $V_E=\mathrm{Ran}(\mu^A(E))$.

命题 3.32. 设 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，$E\subset\mathbb{R}$ 是 Borel 集，有如下性质：

1. $V_\varnothing=\{0\},V_{\sigma(A)}=\mathcal{H}$;
2. 对任意可列个两两不交的 Borel 集 $E_1,E_2,\cdots$ 有 $V_{\bigcup_{n=1}^\infty E_n}=\bigoplus\limits_{n=1}^\infty V_{E_n}$;
3. 对任意的 Borel 集 E_1,E_2 有 $V_{E_1\cap E_2}=V_{E_1}\cap V_{E_2}$，若 E_1,E_2 不交，则 $V_{E_1}\perp V_{E_2}$.

这些性质可以通过投影值测度的定义直接验证，我们将证明如下性质：

1. V_E 是 A 的不变子空间;
2. 若 $E\subset[\lambda_0-\varepsilon,\lambda_0+\varepsilon]$，则对任意 $|\psi\rangle\in V_E$，有 $\|(A-\lambda_0I)\psi\|\leqslant\varepsilon\|\psi\|$;
3. $\sigma(A|_{V_E})\subset\overline{E}$;
4. 若 $\lambda_0\in\sigma(A)$，则对 λ_0 的任意邻域 U 有 $V_U\neq\{0\}$.

证明. 对于第一条性质，设 f,g 是有界可测函数，有

$$f(A)g(A)=(f\cdot g)(A)=(g\cdot f)(A)=g(A)f(A),$$

取 $f(\lambda)=\lambda,g(\lambda)=I_E(\lambda)$，任取 $|\psi\rangle\in V_E$，可以得到

$$A|\psi\rangle=A\mu^A(E)|\psi\rangle=AI_E(A)|\psi\rangle=I_E(A)A|\psi\rangle=\mu^A(E)A|\psi\rangle,$$

于是 $A|\psi\rangle\in V_E$，因此 V_E 是 A 的不变子空间.

对于第二条性质，取 $f(\lambda)=\lambda-\lambda_0,g(\lambda)=I_E(\lambda)$，由 $|\psi\rangle\in V_E$ 有

$$(A-\lambda_0I)|\psi\rangle=(A-\lambda_0I)\mu^A(E)|\psi\rangle=(f\cdot g)(A)|\psi\rangle,$$

根据投影值测度的性质有 $\|f(A)\|\leqslant\sup\limits_{\lambda\in\sigma(A)}|f(\lambda)|$，于是 $\|(f\cdot g)(A)\|\leqslant\varepsilon$，因此

$$\|(A-\lambda_0I)\psi\|\leqslant\|(f\cdot g)(A)\|\|\psi\|\leqslant\varepsilon\|\psi\|.$$

对于第三条性质，若 $\lambda_0 \in \sigma(A|_{V_E})$ 但 $\lambda_0 \notin \overline{E}$，则有界可测函数 $g(\lambda) = I_E(\lambda)/(\lambda - \lambda_0)$ 满足

$$(A - \lambda_0 I)g(A) = g(A)(A - \lambda_0 I) = I_E(A),$$

这表明 $(A - \lambda_0 I)|_{V_E}$ 是双射，而这与 $\lambda_0 \in \sigma(A|_{V_E})$ 矛盾，因此 $\lambda_0 \in \overline{E}$.

对于第四条性质，若存在 $\varepsilon_0 > 0$ 使得 $\mu^A((\lambda_0 - \varepsilon_0, \lambda_0 + \varepsilon_0)) = 0$，设有界可测函数

$$f(\lambda) = \begin{cases} \dfrac{1}{\lambda - \lambda_0}, & |\lambda - \lambda_0| \geqslant \varepsilon_0, \\ 0, & |\lambda - \lambda_0| < \varepsilon_0, \end{cases}$$

由于除这个零测集外有 $(\lambda - \lambda_0)f(\lambda) = 1$，于是积分得到

$$(A - \lambda_0 I)f(A) = f(A)(A - \lambda_0 I) = I,$$

这表明 $(A - \lambda_0 I)$ 是双射，而这与 $\lambda_0 \in \sigma(A)$ 矛盾，因此命题成立. □

命题 3.33. *设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，$B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 与 A 对易，有如下性质：*

1. *对任意的有界可测函数 f，算符 $f(A)$ 与 B 对易；*
2. *A 的谱子空间是 B 的不变子空间.*

证明. 对于第一条性质，根据定义，$f(A)$ 与 B 对易等价于

$$L_f(\phi, B\psi) = L_f(B^\dagger\phi, \psi), \quad \forall|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

若 f 是多项式，直接计算可以验证 $f(A)$ 与 B 对易. 若 $f(A)$ 是连续函数，取极限即可得到 $f(A)$ 与 B 对易. 若 f 是有界可测函数，根据测度论的典型方法可以得到 $f(A)$ 与 B 对易.

对于第二条性质，设 Borel 集 $E \subset \mathbb{R}$，任取 $|\psi\rangle \in V_E$，可以得到

$$B|\psi\rangle = B\mu^A(E)|\psi\rangle = BI_E(A)|\psi\rangle = I_E(A)B|\psi\rangle = \mu^A(E)B|\psi\rangle,$$

于是 $B|\psi\rangle \in V_E$，因此 V_E 是 B 的不变子空间. □

3.2.7 循环向量

在讨论泛函微积分时，我们从简单的多项式函数出发逐步推广到有界可测函数，这提示我们可以通过讨论简单的情形得到谱定理的第二形式. 为了利用多项式，在这里有循环向量的定义.

定义 3.12. *若 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ 满足 $\mathcal{H} = \overline{\operatorname{span}\{|A^n\psi\rangle\}_{n=0}^{\infty}}$，就称 $|\psi\rangle$ 为 A 的循环向量.*

定理 3.34. *若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符且 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ 是 A 的循环向量，则存在酉映射 $U : \mathcal{H} \to L^2(\sigma(A), \mu_\psi^A)$ 满足*

$$[UAU^\dagger(s)](\lambda) = \lambda s(\lambda), \quad \forall s \in L^2(\sigma(A), \mu_\psi^A). \tag{3.28}$$

证明. 设 p 是多项式，定义 $U : p(A)|\psi\rangle \mapsto p$，可以验证这是酉映射

$$\langle p(A)\psi|q(A)\psi\rangle = \langle\psi|p^*(A)q(A)|\psi\rangle = \int_{\sigma(A)} p^*(\lambda)q(\lambda)\,\mathrm{d}\mu_\psi^A(\lambda) = \langle p|q\rangle.$$

由于 $|\psi\rangle$ 是 A 的循环向量，有 $\{p(A)|\psi\rangle\}$ 在 $\mathcal{H}$ 中稠密，而多项式在 $L^2(\sigma(A),\mu_\psi^A)$ 中稠密，因此这个映射可以唯一地延拓到 $\mathcal{H}$ 和 $L^2(\sigma(A),\mu_\psi^A)$ 上．注意到

$$[UAU^\dagger(p)](\lambda)=[UAp(A)|\psi\rangle](\lambda)=\lambda p(\lambda),$$

取极限即可得到等式对任意 $s\in L^2(\sigma(A),\mu_\psi^A)$成立． □

为了利用上面的结果证明谱定理的第二形式，我们需要下面的这些引理．

引理 3.35. *若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，则 $\mathcal{H}$ 可以表示为至多可数个非零闭线性子空间 W_j 的直和，满足 W_j 是 A 的不变子空间且 $A|_{W_j}$ 存在循环向量．*

证明. 取 $\mathcal{H}$ 的至多可数的稠密子集 $\{|\phi_i\rangle\}_{i=0}^\infty$，设 $|\psi_1\rangle=|\phi_1\rangle$，定义

$$W_1=\overline{\operatorname{span}\{|A^n\psi_1\rangle\}_{n=0}^\infty},$$

有 W_1 是 A 的不变子空间且 $|\psi_1\rangle$ 是 $A|_{W_1}$ 的循环向量．若 $W_1=\mathcal{H}$，有命题成立．

否则，不妨设 $|\phi_2\rangle\notin W_1$，根据正交分解定理，设 $|\psi_2\rangle$ 为 $|\phi_2\rangle$ 在 $W_1^\perp$ 上的分量，定义

$$W_2=\overline{\operatorname{span}\{|A^n\psi_2\rangle\}_{n=0}^\infty},$$

有 W_2 是 A 的不变子空间且 $|\psi_2\rangle$ 是 $A|_{W_2}$ 的循环向量．由于 W_1 是 A 的不变子空间，于是 $W_1^\perp$ 也是 A 的不变子空间，根据 W_2 的定义有 $W_2\perp W_1$．若 $W_1\oplus W_2=\mathcal{H}$，有命题成立．

否则，重复这一过程，不妨设最后得到无限个 W_j，有 $|\phi_i\rangle$ 都可以用 W_j 中的向量唯一表示，注意到 W_j 都是闭线性子空间，取极限即可得到任意 $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$ 都可以用 W_j 中的向量唯一表示，因此 $\mathcal{H}$ 就是 W_j 的直和． □

引理 3.36. *若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符且 V 是 A 的闭不变子空间，则对任意有界可测函数 f 有 $f(A)|_V=f(A|_V)$．*

证明. 由 $\lambda\in\sigma(A)$ 的充要条件可以验证 $\sigma(A|_V)\subset\sigma(A)$．下证对于任意有界可测函数 f 都有

$$\int_{\sigma(A|_V)}f\,\mathrm{d}\mu^{A|_V}=\int_{\sigma(A|_V)}f\,\mathrm{d}\mu^A.$$

若 f 是多项式，根据 $f(A)$ 的表达式有等式成立．若 f 是连续函数，取极限即可得到等式成立．若 f 是有界可测函数，根据测度论的典型方法可以得到等式成立． □

引理 3.37. *若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，则在 $\sigma(A)$ 的 Borel σ-代数上存在测度 μ，满足任取 Borel 集 $E\subset\sigma(A)$ 有 $\mu^A(E)=0$ 等价于 $\mu(E)=0$．*

证明. 取 $\mathcal{H}$ 的标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^\infty$，有 $\mu_{e_i}^A(\sigma(A))=\|e_i\|^2=1$，定义有限测度

$$\mu=\sum_{i=1}^\infty\frac{1}{2^i}\mu_{e_i}^A.$$

若 $\mu^A(E)=0$，则有 $\mu_{e_i}^A(E)=0$，因此 $\mu(E)=0$．若 $\mu(E)=0$，则有 $\mu_{e_i}^A(E)=0$，而

$$\mu_{e_i}^A(E)=\langle e_i|\mu^A(E)|e_i\rangle=\|\mu^A(E)e_i\|^2,$$

于是 $\mu^A(E)|e_i\rangle=0$，因此 $\mu^A(E)=0$． □

在测度论中，关于相同可测空间上的不同测度，我们有如下重要定理.

定理 3.38 (Radon-Nikodym 定理[6]). 设 μ,ν 都是可测空间 (X,Ω) 上的 σ-有限测度，若 ν 关于 μ 绝对连续，即任取 $E\in\Omega$ 都有若 $\mu(E)=0$ 则 $\nu(E)=0$，则存在关于 μ 的可测函数 ρ 满足 $\rho\geqslant 0, \text{a.e.}\mu$ 且

$$\nu(E)=\int_E \rho\,\mathrm{d}\mu,\quad \forall E\in\Omega. \tag{3.29}$$

3.2.8 谱定理的第二形式

现在我们准备证明谱定理的第二形式. 在有限维态空间中，算符通过酉映射在直和空间中被表示为乘法算符. 可以想到在无限维态空间中，直和将变为直积分，谱值对应的态空间可以视为广义的特征空间，而为了使得切片的内积仍然有定义，需要定义相应的可测结构.

定义 3.13. 设 (X,Ω,μ) 是 σ-有限测度空间，给定一组态空间 $\{\mathcal{H}_\lambda\}_{\lambda\in X}$. 若任取 $\lambda\in X$ 都有 $\{e_i(\lambda)\}_{i=0}^{\infty}$ 是 $\mathcal{H}_\lambda$ 的标准正交基，就称 $\{e_i\}_{i=0}^{\infty}$ 为同时标准正交基. 在这里，为了解决态空间维度不同的问题，允许在 $e_i(\lambda)$ 中存在零向量. 若选取的同时标准正交基满足任意 $\langle e_i(\lambda)|e_j(\lambda)\rangle$ 可测，就称这个选择为 $\{\mathcal{H}_\lambda\}_{\lambda\in X}$ 的可测结构. 可以验证，若重数函数 $X\to[0,+\infty],\lambda\mapsto\dim\mathcal{H}_\lambda$ 可测，则可测结构存在.

有了可测结构之后，我们就可以正式定义直积分.

定义 3.14. 设 (X,Ω,μ) 是 σ-有限测度空间，给定一组态空间 $\{\mathcal{H}_\lambda\}_{\lambda\in X}$ 和可测结构. 若切片 s 满足任意 $\langle e_i(\lambda)|s(\lambda)\rangle$ 都可测，就称 s 可测. 将几乎处处相等的切片作为一个等价类，可测切片等价类的全体构成的集合称为态空间的直积分，记作

$$\int_X^{\oplus}\mathcal{H}_\lambda\,\mathrm{d}\mu(\lambda). \tag{3.30}$$

利用可测结构，设 s_1,s_2 是可测切片，有

$$\langle s_1(\lambda)|s_2(\lambda)\rangle=\sum_{i=1}^{\infty}\langle s_1(\lambda)|e_i(\lambda)\rangle\langle e_i(\lambda)|s_2(\lambda)\rangle$$

可测，于是在直积分空间上可以定义内积，使其成为 *Hilbert* 空间

$$\langle s_1|s_2\rangle=\int_X\langle s_1(\lambda)|s_2(\lambda)\rangle\,\mathrm{d}\mu(\lambda). \tag{3.31}$$

可以看出，在 X 是至多可数集的情况下，直积分空间就是直和空间.

定理 3.39 (谱定理，第二形式). 若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，则在 $\sigma(A)$ 的 *Borel* σ-代数上存在 σ-有限测度 μ，直积分空间 $\int_{\sigma(A)}^{\oplus}\mathcal{H}_\lambda\,\mathrm{d}\mu(\lambda)$ 和相应的酉映射 $U:\mathcal{H}\to\int_{\sigma(A)}^{\oplus}\mathcal{H}_\lambda\,\mathrm{d}\mu(\lambda)$ 满足

$$[UAU^\dagger(s)](\lambda)=\lambda s(\lambda),\quad \forall s\in\int_{\sigma(A)}^{\oplus}\mathcal{H}_\lambda\,\mathrm{d}\mu(\lambda). \tag{3.32}$$

[6][4]定理2.2.5.

证明. 设 $\mathcal{H}$ 为非零闭线性子空间 W_j 的直和，有 W_j 是 A 的不变子空间且 $|\psi_j\rangle$ 为 $A_j = A|_{W_j}$ 的循环向量，则存在酉映射 $U_j : W_j \to L^2(\sigma(A_j), \mu_{\psi_j}^{A_j})$ 满足

$$[U_j A_j U_j^\dagger(s_j)](\lambda) = \lambda s_j(\lambda), \quad \forall s_j \in L^2(\sigma(A_j), \mu_{\psi_j}^{A_j}).$$

任取可测集 $E \subset \sigma(A_j) \subset \sigma(A)$，有 $I_E(A_j) = I_E(A)|_{W_j}$，将 μ^{A_j} 零延拓到 $\sigma(A)$ 上，可以得到若 $\mu^A(E) = 0$ 则 $\mu^{A_j}(E) = 0$．取测度 μ 满足 $\mu^A(E) = 0$ 等价于 $\mu(E) = 0$，可以得到若 $\mu(E) = 0$ 则 $\mu_{\psi_j}^{A_j}(E) = 0$，即 $\mu_{\psi_j}^{A_j}$ 关于 μ 绝对连续．由 Radon-Nikodym 定理，存在 ρ_j 满足

$$\mu_{\psi_j}^{A_j}(E) = \int_E \rho_j \, \mathrm{d}\mu,$$

这样任取 $f, g \in L^2(\sigma(A_j), \mu_{\psi_j}^{A_j})$，有等式

$$\int_{\sigma(A)} f^* g \, \mathrm{d}\mu_{\psi_j}^{A_j} = \int_{\sigma(A)} f^* g \rho_j \, \mathrm{d}\mu$$

于是映射 $L^2(\sigma(A_j), \mu_{\psi_j}^{A_j}) \to L^2(\sigma(A_j), \mu), f \mapsto \rho_j^{1/2} f$ 是酉映射，由此定义 $\tilde{U}_j : W_j \to L^2(\sigma(A_j), \mu)$ 为两个酉映射的复合，满足

$$[\tilde{U}_j A_j \tilde{U}_j^\dagger(\tilde{s}_j)](\lambda) = [\rho_j^{1/2} U_j A_j U_j^\dagger \rho_j^{-1/2}(\tilde{s}_j)](\lambda) = \lambda \tilde{s}_j(\lambda), \quad \forall \tilde{s}_j \in L^2(\sigma(A_j), \mu).$$

根据 L^2 空间的定义和直积分的定义，可以验证

$$L^2(\sigma(A_j), \mu) = \int_{\sigma(A)}^{\oplus} \mathcal{H}_\lambda^j \, \mathrm{d}\mu, \quad \mathcal{H}_\lambda^j = \begin{cases} \mathbb{C}, & \lambda \in \sigma(A_j), \\ \{0\}, & \lambda \notin \sigma(A_j), \end{cases}$$

定义 $\mathcal{H}_\lambda = \bigoplus_j \mathcal{H}_\lambda^j$，有

$$\int_{\sigma(A)}^{\oplus} \mathcal{H}_\lambda \, \mathrm{d}\mu = \bigoplus_j L^2(\sigma(A_j), \mu),$$

另一方面，由于 $\mathcal{H} = \bigoplus_j W_j$，取 U 为 $\tilde{U}_j$ 的直和即可． □

根据谱定理，可以立即得到泛函微积分满足的相应性质．

命题 3.40. *若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，则对任意有界可测函数 f 有*

$$[U f(A) U^\dagger(s)](\lambda) = f(\lambda) s(\lambda). \tag{3.33}$$

证明. 若 f 是多项式，直接计算表达式有等式成立．若 f 是连续函数，取极限即可得到等式成立．若 f 是有界可测函数，根据测度论的典型方法可以得到等式成立． □

事实上，如果将证明稍加修改，就可以得到一个更容易理解的谱定理形式．

定理 3.41 (谱定理，乘法算符形式). *若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，则存在 σ-有限测度空间 (X, Ω, μ)，集合 X 上的有界可测实函数 h 和相应的酉映射 $U : \mathcal{H} \to L^2(X, \mu)$ 满足*

$$[U A U^\dagger(s)](\lambda) = h(\lambda) s(\lambda), \quad \forall s \in L^2(X, \mu). \tag{3.34}$$

证明. 取 X 为 $\sigma(A_j)$ 的不交并，μ 为所有 $\mu_{\psi_j}^{A_j}$ 的和，h 在 $\sigma(A_j)$ 上的限制为 $\lambda \mapsto \lambda$，则 $L^2(X, \mu)$ 是 $L^2(\sigma(A_j), \mu_{\psi_j}^{A_j})$ 的直和，由于 $\mathcal{H}$ 是 W_j 的直和，取 U 为 U_j 的直和即可． □

需要注意的是，虽然这个形式看起来更容易理解，但是谱定理的直积分形式实际上更为规范．

3.2.9 算符的酉等价

我们说谱定理有两种不同的形式，这两种形式也应当满足一定的关系.

命题 3.42. 若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，$\mu, \mathcal{H}_\lambda$ 满足谱定理且 $\dim \mathcal{H}_\lambda > 0, \text{a.e.}\mu$，则对任意 *Borel* 集 $E \subset \sigma(A)$ 有 $\mu^A(E) = 0$ 等价于 $\mu(E) = 0$.

证明. 任取 Borel 集 $E \subset \sigma(A)$，设在 E^c 中满足 $s(\lambda) = 0, \text{a.e.}\mu$ 的全体切片 s 构成的集合为 $\tilde{V}_E$，可以验证 $\tilde{V}_E$ 是直积分空间的闭线性子空间. 设 $\tilde{P}_E$ 是 $\tilde{V}_E$ 的正交投影算符，定义

$$\tilde{\mu}^A(E) = U^\dagger \tilde{P}_E U,$$

可以验证 $\tilde{\mu}^A(E)$ 是投影值测度，不妨设 $U : |\psi\rangle \to s$，有

$$\tilde{\mu}^A_\psi(E) = \langle \psi | \tilde{\mu}^A(E) | \psi \rangle = \langle s | \tilde{P}_E s \rangle = \int_E \langle s(\lambda) | s(\lambda) \rangle \, \mathrm{d}\lambda,$$

于是可以计算得到

$$\int_{\sigma(A)} \lambda \, \mathrm{d}\tilde{\mu}^A_\psi = \int_{\sigma(A)} \lambda \langle s(\lambda) | s(\lambda) \rangle \, \mathrm{d}\lambda,$$

另一方面，根据谱定理的第二形式有

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle s | UAU^\dagger(s) \rangle = \int_{\sigma(A)} \langle s(\lambda) | \lambda s(\lambda) \rangle \, \mathrm{d}\lambda,$$

因此 $\tilde{\mu}^A$ 满足谱定理的第一形式，由唯一性有 $\tilde{\mu}^A = \mu^A$.

设 $\mu(E) = 0$，此时有 $\tilde{V}_E = \{0\}$，因此 $\mu^A(E) = 0$.

设 $\mu^A(E) = 0$，若 $\mu(E) \neq 0$，不妨设 $\mu(E) < \infty$，定义切片

$$s(\lambda) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{2^i} e_i(\lambda) I_E(\lambda),$$

可以验证 s 可测. 计算切片 s 的范数，根据 $\dim \mathcal{H}_\lambda > 0, \text{a.e.}\mu$ 有 $\|s\| > 0$，而根据 $\mu(E) < \infty$ 有 $\|s\| < \infty$，于是 $s \in \tilde{V}_E$，即 $\tilde{V}_E \neq \{0\}$，但这与 $\mu^A(E) = 0$ 矛盾，因此 $\mu(E) = 0$. □

关于谱定理中空间的唯一性，我们可以提出下面的命题.

命题 3.43. 若 $\mu^{(1)}, \mathcal{H}^{(1)}_\lambda$ 和 $\mu^{(2)}, \mathcal{H}^{(2)}_\lambda$ 都满足谱定理且 $\dim \mathcal{H}^{(i)}_\lambda > 0, \text{a.e.}\mu^{(i)}$，则 $\mu^{(1)}$ 和 $\mu^{(2)}$ 相互绝对连续且

$$\dim \mathcal{H}^{(1)}_\lambda = \dim \mathcal{H}^{(2)}_\lambda, \quad \text{a.e.}\mu^{(i)}. \tag{3.35}$$

证明. 任取 Borel 集 $E \subset \sigma(A)$，有 $\mu^A(E) = 0$ 等价于 $\mu^{(1)}(E) = 0$，也有 $\mu^A(E) = 0$ 等价于 $\mu^{(2)}(E) = 0$，于是 $\mu^{(1)}(E) = 0$ 等价于 $\mu^{(2)}(E) = 0$，因此 $\mu^{(1)}$ 和 $\mu^{(2)}$ 相互绝对连续.

设两个直积分空间之间的酉映射为 V，定义映射 $V_\lambda : \mathcal{H}^{(1)}_\lambda \to \mathcal{H}^{(2)}_\lambda, s^{(1)}(\lambda) \mapsto (Vs^{(1)})(\lambda)$. 由于 V 是酉映射，这要求对任意可测切片 $s^{(1)}_1, s^{(1)}_2$ 都满足

$$\int_{\sigma(A)} \langle V_\lambda s^{(1)}_1(\lambda) | V_\lambda s^{(1)}_2(\lambda) \rangle \, \mathrm{d}\mu^{(2)} = \int_{\sigma(A)} \langle s^{(1)}_1(\lambda) | s^{(1)}_2(\lambda) \rangle \, \mathrm{d}\mu^{(1)},$$

设 ρ 是 $\mu^{(2)}$ 关于 $\mu^{(1)}$ 的密度函数，由切片的任意性有

$$\langle \rho^{1/2} V_\lambda s^{(1)}_1(\lambda) | \rho^{1/2} V_\lambda s^{(1)}_2(\lambda) \rangle = \langle s^{(1)}_1(\lambda) | s^{(1)}_2(\lambda) \rangle, \quad \text{a.e.}\mu^{(i)},$$

这表明 $\rho^{1/2} V_\lambda$ 几乎处处是酉映射，因此维数几乎处处相等. □

命题 3.44. 若 $A_1 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$ 和 $A_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$ 都是自伴算符，$\mu_1, \mathcal{H}_{\lambda,1}$ 和 $\mu_2, \mathcal{H}_{\lambda,2}$ 分别满足 A_1 和 A_2 的谱定理且 $\dim \mathcal{H}_{\lambda,i} > 0, \text{a.e.}\mu_i$，则 A_1 和 A_2 酉等价的充要条件是满足下列所有条件:

1. $\sigma(A_1) = \sigma(A_2)$;
2. μ_1 和 μ_2 相互绝对连续;
3. $\dim \mathcal{H}_{\lambda,1} = \dim \mathcal{H}_{\lambda,2}, \text{a.e.}\mu_i$.

证明. 只证充分性．要证 A_1 和 A_2 酉等价，只需证明两个直积分空间酉等价．由于维数几乎处处相等，可以定义 $\tilde{V}_\lambda : \mathcal{H}_{\lambda,1} \to \mathcal{H}_{\lambda,2}$ 几乎处处是酉映射，于是对任意可测切片 $s_{1,1}, s_{2,1}$ 都有

$$\int_{\sigma(A_1)} \langle \tilde{V}_\lambda s_{1,1}(\lambda) | \tilde{V}_\lambda s_{2,1}(\lambda) \rangle \, \mathrm{d}\mu_1 = \int_{\sigma(A_1)} \langle s_{1,1}(\lambda) | s_{2,1}(\lambda) \rangle \, \mathrm{d}\mu_1$$

设 ρ 是 μ_2 关于 μ_1 的密度函数，定义两个直积分空间之间的映射 V 满足

$$(Vs_1)(\lambda) = \rho^{-1/2} \tilde{V}_\lambda s_1(\lambda),$$

因此 V 是酉映射. □

§3.3 无界自伴算符

3.3.1 正规算符的谱定理

在开始无界算符的讨论之前，我们可以将有界自伴算符的谱定理推广到正规算符．由于除了谱不再是实数之外，谱定理的表述实际上是完全相同的，这里我们只会补充部分不同的证明．

仿照有界自伴算符的步骤，我们先证明谱的性质，为此可以进一步定义有关概念．

定义 3.15. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，若存在 $\varepsilon > 0$ 和非零向量 $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \backslash \{0\}$ 满足

$$\|(A - \lambda I)\psi\| < \varepsilon \|\psi\|, \tag{3.36}$$

就称 $|\psi\rangle$ 为 A 对应于 λ 的 ε-近乎特征向量.

引理 3.45. 若 $|\psi\rangle$ 是正规算符 A 对应 λ 的 ε-近乎特征向量，则 $|\psi\rangle$ 也是 $A^\dagger$ 对应 λ^* 的 ε-近乎特征向量.

证明. 在有限维态空间中已经证明 $\|(A^\dagger - \lambda^* I)\psi\| = \|(A - \lambda I)\psi\|$，因此命题成立. □

定理 3.46. 若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是正规算符，则 $\lambda \in \sigma(A)$ 的充要条件是任取 $\varepsilon > 0$ 都存在对应 λ 的 ε-近乎特征向量，即存在 $\{|\psi_n\rangle\} \subset \mathcal{H}$ 使得

$$\lim_{n \to \infty} \frac{\|A\psi_n - \lambda \psi_n\|}{\|\psi_n\|} = 0. \tag{3.37}$$

证明. 同样只需补充等式 $\|(A^\dagger - \lambda^* I)\psi\| = \|(A - \lambda I)\psi\|$，这样有 $\ker(A - \lambda I) = \{0\}$ 等价于 $\ker(A^\dagger - \lambda^* I) = \{0\}$，从而

$$\overline{\operatorname{Ran}(A - \lambda I)} = [\ker[(A - \lambda I)^\dagger]]^\perp = [\ker(A^\dagger - \lambda^* I)]^\perp = \mathcal{H},$$

利用有界自伴算符的相应定理中的证明即可得到命题成立. □

接下来是构造连续泛函微积分，这里需要有关于谱半径和多项式的两个引理.

引理 3.47. 若 $A,B\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 对易，则 $r_\sigma(AB)\leqslant r_\sigma(A)r_\sigma(B)$.

证明. 由预解式的解析性，要求 Laurent 级数

$$R(\lambda_1;A)=-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{A^n}{\lambda_1^{n+1}},(|\lambda_1|>\|A\|),\quad R(\lambda_2;B)=-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{B^n}{\lambda_2^{n+1}},(|\lambda_2|>\|B\|)$$

分别在 $|\lambda_1|>r_\sigma(A),|\lambda_2|>r_\sigma(B)$ 上收敛. 考虑 $R(\lambda;AB)$ 的 Laurent 级数展开

$$R(\lambda;AB)=-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(AB)^n}{\lambda^{n+1}}=-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{A^nB^n}{\lambda^{n+1}},\quad (|\lambda|>\|AB\|),$$

任取 $|\lambda|>r_\sigma(A)r_\sigma(B)$，存在 $|\lambda_1|>r_\sigma(A),|\lambda_2|>r_\sigma(B)$ 满足 $|\lambda|>|\lambda_1\lambda_2|$，由不等式

$$\left\|\frac{A^nB^n}{\lambda^{n+1}}\right\|\leqslant\left\|\frac{A^n}{\lambda_1^{n+1}}\right\|\left\|\frac{B^n}{\lambda_2^{n+1}}\right\|$$

有级数收敛，因此 $|\lambda|>r_\sigma(AB)$，即 $r_\sigma(AB)\leqslant r_\sigma(A)r_\sigma(B)$. □

引理 3.48. 若 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是正规算符，则 $r_\sigma(A)=\|A\|$.

证明. 由于正规性要求 $A^\dagger$ 和 A 对易，注意到 $A^\dagger A$ 是自伴算符，利用已有的引理计算得到

$$\|A\|^2=\|A^\dagger A\|=r_\sigma(A^\dagger A)\leqslant r_\sigma(A^\dagger)r_\sigma(A)\leqslant\|A^\dagger\|r_\sigma(A)=\|A\|r_\sigma(A).$$ □

引理 3.49. 设 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是正规算符，对于给定的二元多项式 p 和 $\lambda\in\mathbb{C}$，存在常数 C 满足若 $|\psi\rangle$ 是 A 对应 λ 的 ε-近乎特征向量，则 $|\psi\rangle$ 也是 $p(A,A^\dagger)$ 对应 $p(\lambda,\lambda^*)$ 的 $C\varepsilon$-近乎特征向量.

证明. 只需对形如 $\lambda^k(\lambda^*)^l$ 的每一项证明，利用数学归纳法：

1. 当 $(k,l)=(1,0)$ 时显然成立，当 $(k,l)=(0,1)$ 时已经证明.
2. 设命题对 $k+l<n$ 的情形成立，考虑 $k+l=n$ 的情形. 不妨设 $k>0$，利用恒等式

$$[A^k(A^\dagger)^l-\lambda^k(\lambda^*)^l]|\psi\rangle=A^{k-1}(A^\dagger)^l(A-\lambda I)|\psi\rangle+\lambda[A^{k-1}(A^\dagger)^l-\lambda^{k-1}(\lambda^*)^l]|\psi\rangle,$$

第一项由 A 的有界性有相应不等式，第二项由归纳假设有相应不等式. 因此命题成立. □

引理 3.50. 设 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是正规算符且 p 是二元多项式，若 $\gamma\in\sigma(p(A,A^\dagger))$，则任取 $\varepsilon>0$ 都存在 $\mathcal{H}$ 的非零闭线性子空间 W^ε，满足 W^ε 是 $A,A^\dagger$ 的不变子空间且 W^ε 中的非零元是 $p(A,A^\dagger)$ 对应 γ 的 ε-近乎特征向量.

证明. 设 $B=p(A,A^\dagger)-\gamma I$，有 $0\in\sigma(B)$ 且 B 是正规算符. 由谱的充要条件和上面的引理有 $0\in\sigma(B^\dagger B)$ 且 $B^\dagger B$ 是自伴算符. 利用有界自伴算符的谱定理，设 W^ε 是 $B^\dagger B$ 对应 $(-\varepsilon^2,\varepsilon^2)$ 的谱子空间，由谱子空间的性质有 $W^\varepsilon\neq\{0\}$ 且对任意 $|\psi\rangle\in W^\varepsilon$ 有 $\|B^\dagger B\psi\|\leqslant\varepsilon^2\|\psi\|$，于是

$$\|[p(A,A^\dagger)-\gamma I]\psi\|^2=|\langle\psi|B^\dagger B\psi\rangle|\leqslant\|\psi\|\|B^\dagger B\psi\|\leqslant\varepsilon^2\|\psi\|^2.$$

由于 $A,A^\dagger$ 和 $B^\dagger B$ 对易，因此 W^ε 是 $A,A^\dagger$ 的不变子空间. □

引理 3.51. 若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是正规算符，则对任意的二元多项式 p 都有

$$\sigma(p(A, A^\dagger)) = \{p(\lambda, \lambda^*) | \lambda \in \sigma(A)\}. \tag{3.38}$$

证明. 设 $\lambda \in \sigma(A)$，任取 $\varepsilon > 0$ 存在 $|\psi\rangle$ 是 A 对应 λ 的 ε-近乎特征向量，而 $|\psi\rangle$ 也是 $p(A, A^\dagger)$ 对应 $p(\lambda, \lambda^*)$ 的 $C\varepsilon$-近乎特征向量．因此 $p(\lambda, \lambda^*) \in \sigma(p(A, A^\dagger))$．

设 $\gamma \in \sigma(p(A, A^\dagger))$，任取 $\varepsilon > 0$，由于 W^ε 是 $A, A^\dagger$ 的闭不变子空间，有 $A|_{W^\varepsilon}$ 是正规算符．设 $\lambda \in \sigma(A|_{W^\varepsilon})$，存在 $|\psi\rangle$ 是 A 对应 λ 的 ε-近乎特征向量，也是 $p(A, A^\dagger)$ 对应 $p(\lambda, \lambda^*)$ 的 $C\varepsilon$-近乎特征向量，同时也是 $p(A, A^\dagger)$ 对应 γ 的 ε-近乎特征向量，利用不等式

$$|\gamma - p(\lambda, \lambda^*)| \|\psi\| \leqslant \|[p(A, A^\dagger) - \gamma I]\psi\| + \|[p(A, A^\dagger) - p(\lambda, \lambda^*) I]\psi\| < (C+1)\varepsilon\|\psi\|,$$

由 ε 的任意性，存在序列 $\{\lambda_n\} \subset \sigma(A)$ 满足 $\lim\limits_{n\to\infty} p(\lambda_n, \lambda_n^*) = \gamma$．由于 $\sigma(A)$ 是有界闭集，序列 $\{\lambda_n\}$ 存在收敛子列，设子列收敛到 $\lambda \in \sigma(A)$，因此 $p(\lambda, \lambda^*) = \gamma$． □

定理 3.52 (连续泛函微积分). 若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是正规算符，$f : \sigma(A) \to \mathbb{C}$ 是连续函数，则存在唯一的 A 的连续泛函微积分 $f \mapsto f(A)$ 满足当 $f(\lambda) = \lambda^k (\lambda^*)^l$ 时有 $f(A) = A^k (A^\dagger)^l$．

证明. 设 p 是 $\sigma(A)$ 上的二元多项式，有 $p(A, A^\dagger)$ 是正规算符，可以得到

$$\|p(A, A^\dagger)\| = r_\sigma(p(A, A^\dagger)) = \sup_{\lambda \in \sigma(A)} |p(\lambda, \lambda^*)|,$$

于是 $p \mapsto p(A, A^\dagger)$ 是线性映射且保持范数．由 Stone–Weierstrass 定理，有界闭集上的连续函数可以由多项式一致逼近，这就是说多项式在连续函数空间中稠密，因此这个映射可以唯一地延拓到连续函数空间 $C(\sigma(A); \mathbb{C})$ 中． □

现在我们已经得到了正规算符的连续泛函微积分，之后的证明就与有界自伴算符完全相同．

3.3.2 算符的基本性质

对于无界线性算符，算符范数的方法不再适用，这就要求我们使用新的工具．为了更好地考虑算符的定义域和值域，我们可以利用算符的图将二者结合起来讨论，这就需要定义乘积空间．

定义 3.16. 两个态空间的 *Descartes* 积 $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ 称为乘积空间．在乘积空间上可以定义内积，使其成为 *Hilbert* 空间

$$\langle \phi_1, \phi_2 | \psi_1, \psi_2 \rangle = \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle + \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle. \tag{3.39}$$

设线性算符 A，乘积空间 $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ 的线性子空间

$$\mathrm{Gra}(A) = \{|\psi, A\psi\rangle : |\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)\} \tag{3.40}$$

称为 A 的图．若 $\mathrm{Gra}(A)$ 是 $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ 的闭线性子空间，就称 A 为闭算符．若线性算符 A, B 满足 $\mathrm{Gra}(A) \subset \mathrm{Gra}(B)$，就称 B 为 A 的扩张，记作 $A \subset B$．对于算符 A，若存在扩张算符 B 满足 $\mathrm{Gra}(B) = \overline{\mathrm{Gra}(A)}$，就称 A 可闭，B 为 A 的闭包，记作 $B = \overline{A}$．

可以看出，算符 A 是闭算符的充要条件是若序列 $\{|\psi_n\rangle\} \subset \mathrm{Dom}(A)$ 满足 $\lim\limits_{n\to\infty} |\psi_n\rangle = |\psi\rangle$ 且 $\lim\limits_{n\to\infty} A|\psi_n\rangle = |\phi\rangle$，则 $|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)$ 且 $|\phi\rangle = A|\psi\rangle$．关于闭算符，我们有如下重要定理．

定理 3.53 (闭图像定理[7]). 设 A 是闭算符，若 $\mathrm{Dom}(A) = \mathcal{H}$，则 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$.

根据这个定理，我们要讨论的算符的定义域将不会是整个态空间．在这种情况下，为了使得伴随算符有定义，我们通常要求无界算符是稠定算符．对于伴随算符的稠定性，我们有下面的命题．

命题 3.54. 设 A 是稠定算符，有 $A^\dagger$ 是闭算符，且 $A^\dagger$ 是稠定算符的充要条件为 A 可闭，在这种情况下有 $\overline{A} = (A^\dagger)^\dagger$ 且 $\overline{A}^\dagger = A^\dagger$.

证明. 任取 $|\psi, \phi\rangle \in \mathrm{Gra}(A^\dagger)$，根据伴随算符的定义，这等价于

$$\langle \phi|\chi\rangle = \langle \psi|A\chi\rangle, \quad \forall|\chi\rangle \in \mathrm{Dom}(A),$$

利用乘积空间上内积的定义，这个等式也可以表示为

$$\langle \phi, -\psi|\chi, A\chi\rangle = \langle \psi, \phi| - A\chi, \chi\rangle = 0, \quad \forall|\chi\rangle \in \mathrm{Dom}(A),$$

定义映射 $V : |\psi, \phi\rangle \mapsto | - \phi, \psi\rangle$，由于 $V^2 = -I$ 且 $|\chi, A\chi\rangle \in \mathrm{Gra}(A)$，于是

$$\mathrm{Gra}(A^\dagger) = V[\mathrm{Gra}(A)]^\perp = [V\,\mathrm{Gra}(A)]^\perp,$$

而正交补空间一定是闭线性子空间，因此 $A^\dagger$ 是闭算符．

设 A 可闭，若 $A^\dagger$ 不稠定，可以取 $|\phi\rangle \notin \overline{\mathrm{Dom}(A^\dagger)}$，有 $|\phi\rangle \in [\mathrm{Dom}(A^\dagger)]^\perp$，利用内积得到

$$\langle \phi, 0|\chi, A^\dagger\chi\rangle = \langle 0, \phi| - A^\dagger\chi, \chi\rangle = \langle \phi|\chi\rangle = 0, \quad \forall|\chi\rangle \in \mathrm{Dom}(A^\dagger),$$

于是 $|0, \phi\rangle \in V[\mathrm{Gra}(A^\dagger)]^\perp = [V\,\mathrm{Gra}(A^\dagger)]^\perp$，计算得到

$$[V\,\mathrm{Gra}(A^\dagger)]^\perp = [V[V\,\mathrm{Gra}(A)]^\perp]^\perp = [[V^2\,\mathrm{Gra}(A)]^\perp]^\perp = [[\mathrm{Gra}(A)]^\perp]^\perp = \overline{\mathrm{Gra}(A)},$$

由于 $|0, \phi\rangle$ 不应是算符的图中的元素，而这与 A 可闭矛盾，因此 $A^\dagger$ 稠定．

设 $A^\dagger$ 稠定，有 $(A^\dagger)^\dagger$ 是闭算符，并且

$$\mathrm{Gra}((A^\dagger)^\dagger) = [V\,\mathrm{Gra}(A^\dagger)]^\perp = \overline{\mathrm{Gra}(A)},$$

因此 A 可闭且 $\overline{A} = (A^\dagger)^\dagger$，由于 $A^\dagger$ 是闭算符，计算得到 $\overline{A}^\dagger = ((A^\dagger)^\dagger)^\dagger = \overline{A^\dagger} = A^\dagger$. □

现在我们可以用图的语言重新表述自伴算符的定义．

定义 3.17. 设 A 是稠定算符．若 $A \subset A^\dagger$，就称 A 为对称算符．若 $A = A^\dagger$，就称 A 为自伴算符．若 A 可闭且 $\overline{A}$ 是自伴算符，即 $\overline{A} = A^\dagger$，就称 A 为本质自伴算符．

命题 3.55. 对称算符可闭．自伴算符是闭算符．本质自伴算符的自伴扩张唯一．

证明. 设 A 是对称算符 $A \subset A^\dagger$，由于 $A^\dagger$ 是闭算符，因此 A 可闭．

设 A 是自伴算符 $A = A^\dagger$，由于 $A^\dagger$ 是闭算符，因此 A 是闭算符．

设 A 是本质自伴算符 $\overline{A} = A^\dagger$，B 是 A 的自伴扩张，由于自伴算符 B 是闭算符，有 $\overline{A} \subset B$. 根据 $\mathrm{Gra}(A^\dagger) = [V\,\mathrm{Gra}(A)]^\perp$ 可以得到 $B^\dagger \subset \overline{A}^\dagger$ 即 $B \subset \overline{A}$，因此 $B = \overline{A}$. □

[7][4]定理2.3.15.

由于自伴算符是闭算符，利用这些性质，我们可以讨论闭算符的谱.

对于无界线性算符 A，在 $\ker(A) = \{0\}$ 即 A^{-1} 存在的情况下，由 $\mathrm{Dom}(A^{-1}) = \mathrm{Ran}(A)$ 可以看出 $\overline{\mathrm{Ran}(A)} = \mathcal{H}$ 等价于 A^{-1} 稠定，由此可以进一步讨论 A^{-1} 是否有界. 对于闭算符 A，根据闭图像定理有 $\mathrm{Ran}(A) = \mathcal{H}$ 等价于 $A^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$.

因此设 A 是闭算符，任取 $\lambda \in \mathbb{C}$，只有下面四个可能：

1. $\ker(A - \lambda I) = \{0\}$ 且 $(A - \lambda I)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，这等价于 $\mathrm{Ran}(A - \lambda I) = \mathcal{H}$；
2. λ 是 A 的特征值，这等价于 $\ker(A - \lambda I) \neq \{0\}$；
3. $\ker(A - \lambda I) = \{0\}$ 且 $(A - \lambda I)^{-1} \notin \mathcal{B}(\mathcal{H})$，但 $\overline{\mathrm{Ran}(A - \lambda I)} = \mathcal{H}$；
4. $\ker(A - \lambda I) = \{0\}$ 且 $\overline{\mathrm{Ran}(A - \lambda I)} \neq \mathcal{H}$.

可以看出这四种情况与有界线性算符的情形分别对应，相应谱的名称也保持不变.

3.3.3 自伴算符的谱

仿照有界自伴算符中的讨论，我们同样可以给出自伴算符谱的性质.

引理 3.56. *设 A 是稠定算符，有 $[\mathrm{Ran}(A)]^{\perp} = \ker(A^{\dagger})$.*

证明. 任取 $|\psi\rangle \in \ker(A^{\dagger})$，由伴随算符的定义有

$$\langle A^{\dagger}\psi|\phi\rangle = \langle\psi|A\phi\rangle = 0, \quad \forall|\phi\rangle \in \mathrm{Dom}(A),$$

因此 $|\psi\rangle \in [\mathrm{Ran}(A)]^{\perp}$. 反过来，任取 $|\psi\rangle \in [\mathrm{Ran}(A)]^{\perp}$ 同样有这个等式，因此 $|\psi\rangle \in \ker(A^{\dagger})$. □

引理 3.57. *设 A 是闭算符，对于给定的 $\lambda \in \mathbb{C}$，若存在 $\varepsilon_0 > 0$ 满足*

$$\|(A - \lambda I)\psi\| \geqslant \varepsilon_0\|\psi\|, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A),$$

则 $\mathrm{Ran}(A - \lambda I)$ 是 $\mathcal{H}$ 的闭线性子空间.

证明. 设 $\{|\phi_n\rangle\} = \{(A - \lambda I)|\psi_n\rangle\}$ 在 $\mathcal{H}$ 中收敛到 $|\phi\rangle$，利用不等式

$$\|\phi_n - \phi_m\|^2 = \|(A - \lambda I)(\psi_n - \psi_m)\|^2 \geqslant \varepsilon_0\|\psi_n - \psi_m\|^2,$$

由 $\{|\phi_n\rangle\}$ 是 Cauchy 列可以得到 $\{|\psi_n\rangle\}$ 也是 Cauchy 列，设 $\{|\psi_n\rangle\}$ 收敛到 $|\psi\rangle$，由 A 是闭算符有 $|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)$ 且 $|\phi\rangle \in \mathrm{Ran}(A - \lambda I)$，因此 $\mathrm{Ran}(A - \lambda I)$ 是闭线性子空间. □

定理 3.58. *若 A 是自伴算符，则 $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ 且 $\sigma_r(A) = \varnothing$.*

证明. 设 $\lambda = a + \mathrm{i}b, (b \neq 0)$，只要证 $\lambda \in \rho(A)$. 同样可以计算得到

$$\|(A - \lambda I)\psi\|^2 = \|(A - aI)\psi\|^2 + b^2\|\psi\|^2 \geqslant b^2\|\psi\|^2, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A),$$

于是 $\ker(A - \lambda I) = \{0\}$，由于 $\lambda^* = a - \mathrm{i}b, (b \neq 0)$，相对地有

$$[\mathrm{Ran}(A - \lambda I)]^{\perp} = \ker[(A - \lambda I)^{\dagger}] = \ker(A - \lambda^* I) = \{0\}.$$

由于 $\mathrm{Ran}(A-\lambda I)$ 是闭线性子空间，从而

$$\mathrm{Ran}(A-\lambda I)=\overline{\mathrm{Ran}(A-\lambda I)}=[[\mathrm{Ran}(A-\lambda I)]^{\perp}]^{\perp}=\{0\}^{\perp}=\mathcal{H},$$

注意到 $\mathrm{Dom}[(A-\lambda I)^{-1}]=\mathrm{Ran}(A-\lambda I)$，由闭图像定理有 $(A-\lambda I)^{-1}\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$，因此 $\lambda\in\rho(A)$.

若 $\sigma_r(A)\neq\varnothing$，取 $\lambda\in\sigma_r(A)\subset\mathbb{R}$，由定义有 $\ker(A-\lambda I)=\{0\}$，于是

$$\overline{\mathrm{Ran}(A-\lambda I)}=[[\mathrm{Ran}(A-\lambda I)]^{\perp}]^{\perp}=[\ker[(A-\lambda I)^{\dagger}]]^{\perp}=[\ker(A-\lambda I)]^{\perp}=\mathcal{H}$$

但这与定义矛盾，因此 $\sigma_r(A)=\varnothing$. □

定理 3.59. 若 A 是自伴算符，则 $\lambda\in\sigma(A)$ 的充要条件是存在 $\{|\psi_n\rangle\}\subset\mathrm{Dom}(A)$ 使得

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\|A\psi_n-\lambda\psi_n\|}{\|\psi_n\|}=0. \tag{3.41}$$

证明. 设存在 $\{|\psi_n\rangle\}\subset\mathrm{Dom}(A)$ 满足条件，若 $\lambda\in\rho(A)$，设 $|\phi_n\rangle=(A-\lambda I)|\psi_n\rangle$，有

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\|\phi_n\|}{\|(A-\lambda I)^{-1}\phi_n\|}=0,$$

但这与 $(A-\lambda I)^{-1}\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 矛盾，因此 $\lambda\in\sigma(A)$.

设 $\lambda\in\sigma(A)$，若不存在 $\{|\psi_n\rangle\}\subset\mathrm{Dom}(A)$ 满足条件，则存在 $\varepsilon_0>0$ 使得

$$\|A\psi-\lambda\psi\|>\varepsilon_0\|\psi\|,\quad\forall|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A),$$

这个不等式导致 $\ker(A-\lambda I)=\{0\}$ 且 $\mathrm{Ran}(A-\lambda I)$ 是闭线性子空间，从而

$$\mathrm{Ran}(A-\lambda I)=\overline{\mathrm{Ran}(A-\lambda I)}=[\ker[(A-\lambda I)^{\dagger}]]^{\perp}=[\ker(A-\lambda I)]^{\perp}=\mathcal{H},$$

但这与 $\lambda\in\sigma(A)$ 矛盾，因此存在 $\{|\psi_n\rangle\}\subset\mathrm{Dom}(A)$ 满足条件. □

定理 3.60. 若 A 是自伴算符，则 $\sigma(A)$ 是闭集.

证明. 设 $\{\lambda_m\}\subset\sigma(A)$ 收敛到 λ，对每个 λ_m 存在 $\{|\psi_{m,n}\rangle\}\subset\mathrm{Dom}(A)$ 满足

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\|A\psi_{m,n}-\lambda_m\psi_{m,n}\|}{\|\psi_{m,n}\|}=0,$$

任取 $\varepsilon>0$，存在 λ_m 满足 $|\lambda-\lambda_m|<\varepsilon/2$，$|\psi_{m,n}\rangle$ 满足 $\|A\psi_{m,n}-\lambda_m\psi_{m,n}\|<\varepsilon/2\|\psi_{m,n}\|$，于是

$$\|A\psi_{m,n}-\lambda\psi_{m,n}\|\leqslant\|A\psi_{m,n}-\lambda_m\psi_{m,n}\|+|\lambda-\lambda_m|\|\psi_{m,n}\|<\varepsilon\|\psi_{m,n}\|,$$

因此对于 λ 存在 $\{|\psi_{m_k,n_k}\rangle\}\subset\mathrm{Dom}(A)$ 满足条件，即 $\lambda\in\sigma(A)$. □

3.3.4 算符自伴的条件

为了更好地理解对称算符和自伴算符的关系，我们可以考虑对称算符自伴的条件.

引理 3.61. 若 A 是对称算符，则 $\ker(A\pm\mathrm{i}I)=\{0\}$.

证明. 利用 A 的对称性同样可以计算得到

$$\|(A\pm\mathrm{i}I)\psi\|^2=\|A\psi\|^2+\|\psi\|^2\geqslant\|\psi\|^2,\quad\forall|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A),$$

于是 $\ker(A\pm\mathrm{i}I)=\{0\}$. □

定理 3.62. 若 A 是对称算符，则 A 是自伴算符的充要条件是下列二者之一：

1. A 是闭算符且 $\ker(A^\dagger \pm \mathrm{i}I) = \{0\}$；

2. $\mathrm{Ran}(A \pm \mathrm{i}I) = \mathcal{H}$.

证明. 利用轮转证法．设 A 是自伴算符，则 A 是闭算符且 $\ker(A^\dagger \pm \mathrm{i}I) = \ker(A \pm \mathrm{i}I) = \{0\}$.
设 A 是闭算符且 $\ker(A^\dagger \pm \mathrm{i}I) = \{0\}$，由上面的不等式有 $\mathrm{Ran}(A \pm \mathrm{i}I)$ 是闭线性子空间，因此

$$\mathrm{Ran}(A \pm \mathrm{i}I) = \overline{\mathrm{Ran}(A \pm \mathrm{i}I)} = [\ker[(A \pm \mathrm{i}I)^\dagger]]^\perp = [\ker(A^\dagger \mp \mathrm{i}I)]^\perp = \mathcal{H}.$$

设 $\mathrm{Ran}(A \pm \mathrm{i}I) = \mathcal{H}$，任取 $|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A^\dagger)$，存在 $|\phi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)$ 满足

$$(A^\dagger \pm \mathrm{i}I)|\psi\rangle = (A \pm \mathrm{i}I)|\phi\rangle,$$

根据 A 的对称性 $A \subset A^\dagger$ 可以得到 $|\phi\rangle \in \mathrm{Dom}(A^\dagger)$，于是

$$(A^\dagger \pm \mathrm{i}I)|\psi - \phi\rangle = 0,$$

由于 $\ker(A^\dagger \pm \mathrm{i}I) = [\mathrm{Ran}(A \mp \mathrm{i}I)]^\perp = \{0\}$，有 $|\psi\rangle = |\phi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)$，因此 $A^\dagger \subset A$. □

定理 3.63. 若 A 是对称算符，则 A 是本质自伴算符的充要条件是下列二者之一：

1. $\ker(A^\dagger \pm \mathrm{i}I) = \{0\}$；

2. $\overline{\mathrm{Ran}(A \pm \mathrm{i}I)} = \mathcal{H}$.

证明. 由于 A 是对称算符 $A \subset A^\dagger$，有 $\overline{A}$ 也是对称算符 $\overline{A} \subset A^\dagger = \overline{A}^\dagger$.
利用轮转证法．设 A 是本质自伴算符，则 $\ker(A^\dagger \pm \mathrm{i}I) = \ker(\overline{A} \pm \mathrm{i}I) = \{0\}$.
设 $\ker(A^\dagger \pm \mathrm{i}I) = \{0\}$，则 $\overline{\mathrm{Ran}(A \pm \mathrm{i}I)} = [\ker(A^\dagger \mp \mathrm{i}I)]^\perp = \mathcal{H}$.
设 $\overline{\mathrm{Ran}(A \pm \mathrm{i}I)} = \mathcal{H}$，由于 $\mathrm{Ran}(A \pm \mathrm{i}I) \subset \mathrm{Ran}(\overline{A} \pm \mathrm{i}I)$，而由上面的不等式有 $\mathrm{Ran}(\overline{A} \pm \mathrm{i}I)$ 是闭线性子空间，于是 $\mathrm{Ran}(\overline{A} \pm \mathrm{i}I) = \mathcal{H}$，因此 $\overline{A}$ 是自伴算符. □

3.3.5 投影值测度

利用投影值测度，我们可以得到有界可测函数与有界线性算符的对应，现在我们将这种对应扩展到可测函数与稠定算符之间，由此可以将正规算符的泛函微积分推广到可测函数.

命题 3.64. 设 (X, Ω) 是可测空间，μ 是 Ω 上的投影值测度，$f : X \to \mathbb{C}$ 是可测函数，在

$$W_f = \left\{ |\psi\rangle : \int_X |f|^2 \,\mathrm{d}\mu_\psi < \infty \right\} \tag{3.42}$$

上存在唯一的稠定算符 $A_f = \int_X f \,\mathrm{d}\mu$ 满足

$$\left\langle \psi \middle| \int_X f \,\mathrm{d}\mu \middle| \psi \right\rangle = \int_X f \,\mathrm{d}\mu_\psi. \tag{3.43}$$

证明. 第一步，证明 W_f 是线性空间. 设 $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in W_f$，利用测度 μ_ψ 的定义和基本不等式

$$\begin{aligned}\mu_{\alpha\phi+\beta\psi}(E) &= \|\mu(E)(\alpha\phi+\beta\psi)\|^2 \\ &\leqslant [\|\alpha\mu(E)\phi\| + \|\beta\mu(E)\psi\|]^2 \\ &\leqslant 2[|\alpha|^2\|\mu(E)\phi\|^2 + |\beta|^2\|\mu(E)\psi\|^2] = 2[|\alpha|^2\mu_\phi(E) + |\beta|^2\mu_\psi(E)],\end{aligned}$$

可以得到 $\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle \in W_f$，因此 W_f 是线性空间.

第二步，证明 W_f 稠密. 设 $E_n = \{x \in X \,|\, |f(x)| < n\}$，任取 $|\psi_n\rangle \in \mathrm{Ran}(\mu(E_n))$，有

$$\mu_{\psi_n}(E_n^c) = \langle\psi_n|\mu(E_n^c)|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\mu(E_n^c)|\mu(E_n)\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\mu(\varnothing)|\psi_n\rangle = 0,$$

由此利用积分的性质可以得到

$$\int_X |f|^2\,\mathrm{d}\mu_{\psi_n} = \int_{E_n} |f|^2\,\mathrm{d}\mu_{\psi_n} \leqslant n^2\mu_{\psi_n}(E_n) < \infty,$$

于是 $|\psi_n\rangle \in W_f$. 设 $F_n = E_n \backslash E_{n-1}$，有 $F_1, F_2, \cdots$ 两两不交且 $\bigcup\limits_{n=1}^{\infty} F_n = X, \bigcup\limits_{k=1}^{n} F_k = E_n$，得到

$$\bigoplus_{n=1}^{\infty}\mathrm{Ran}(\mu(F_n)) = \mathrm{Ran}(\mu(X)) = \mathcal{H}, \quad \bigoplus_{k=1}^{n}\mathrm{Ran}(\mu(F_k)) = \mathrm{Ran}(\mu(E_n)) \subset W_f,$$

于是在 W_f 中可以根据分量构造序列逼近 $\mathcal{H}$ 中的向量，因此 W_f 是 $\mathcal{H}$ 的稠密子空间.

第三步，证明对于任意可测函数 f，映射

$$Q_f(\psi) = \int_X f\,\mathrm{d}\mu_\psi$$

是 W_f 上的二次型. 设有界可测函数 $f_n = f \cdot I_{E_n}$，根据控制收敛定理有 $Q_f(\psi) = \lim\limits_{n\to\infty} Q_{f_n}(\psi)$，由于 $Q_{f_n}(\psi)$ 是二次型，因此 $Q_f(\psi)$ 也是二次型.

第四步，根据二次型定义算符. 设 L_f 是 Q_f 诱导的半双线性形式，对于有界可测函数 f_n 有

$$|L_{f_n}(\phi,\psi)| = |\langle\phi|A_{f_n}|\psi\rangle| \leqslant \|\phi\|\|A_{f_n}\psi\|, \quad \forall|\phi\rangle, |\psi\rangle \in W_f,$$

根据有界可测函数关于投影值测度的积分的性质可以得到

$$\|A_{f_n}\psi\|^2 = \left\langle \psi \middle| \left(\int_X f_n\,\mathrm{d}\mu\right)^\dagger \left(\int_X f_n\,\mathrm{d}\mu\right) \middle| \psi \right\rangle = \int_X |f_n|^2\,\mathrm{d}\mu_\psi = \|f_n\|^2_{L^2(X,\mu_\psi)},$$

利用 L_f 关于 f 的连续性可以得到对任意可测函数 f 都有

$$|L_f(\phi,\psi)| \leqslant \|\phi\|\|f\|_{L^2(X,\mu_\psi)}, \quad \forall|\phi\rangle, |\psi\rangle \in W_f,$$

于是映射 $|\phi\rangle \mapsto L_f(\phi,\psi)$ 的定义域可以延拓到 $\mathcal{H}$ 而成为有界共轭线性泛函，由 Hilbert 空间中的 Riesz 表示定理的共轭版本，存在唯一的向量 $|A_f\psi\rangle$ 满足

$$\langle\phi|A_f\psi\rangle = L_f(\phi,\psi), \quad \forall|\phi\rangle, |\psi\rangle \in W_f,$$

可以验证 A_f 是线性算符. 这样 A_f 也关于 f 连续，因此有

$$\|A_f\psi\| = \|f\|_{L^2(X,\mu_\psi)}, \quad \forall|\psi\rangle \in W_f.$$

□

命题 3.65. 若 f 是可测实函数，则 $\int_X f\,\mathrm{d}\mu$ 是自伴算符.

证明. 第一步，证明 $W^n=\mathrm{Ran}(\mu(F_n))$ 是 A_f 的闭不变子空间. 设 $|\psi\rangle\in W^n$，根据

$$\langle\phi|\mu(E)|\psi\rangle=\langle\phi|\mu(E)|\mu(F_n)\psi\rangle=\langle\phi|\mu(F_n)\mu(E)|\psi\rangle=0,\quad\forall|\phi\rangle\in(W^n)^{\perp},$$

可以得到 $\mu_{\phi+\psi}=\mu_\phi+\mu_\psi$，于是有 $Q_f(\phi+\psi)=Q_f(\phi)+Q_f(\psi)$. 利用极化恒等式计算得到

$$\langle\phi|A_f\psi\rangle=L_f(\phi,\psi)=0,\quad\forall|\phi\rangle\in(W^n)^{\perp},$$

由于 W^n 是闭线性子空间，因此 $A_f|\psi\rangle\in((W^n)^{\perp})^{\perp}=\overline{W^n}=W^n$.

第二步，证明 $A_n=A_f|_{W^n}$ 是有界自伴算符. 任取 $|\psi_n\rangle\in W^n$，由 $\mu_{\psi_n}(F_n^c)=0$ 可以得到

$$Q_f(\psi_n)|_{W^n}=\langle\psi_n|A_n|\psi_n\rangle=\int_{F_n}f\,\mathrm{d}\mu_{\psi_n}=\int_X f\cdot I_{F_n}\,\mathrm{d}\mu_\psi,$$

而 $f\cdot I_{F_n}$ 是有界可测实函数，因此 A_n 是有界自伴算符.

第三步，构造直和空间. 由于 $\mathcal{H}$ 可以表示为 W^n 的直和，任取 $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$，存在唯一分解 $|\psi_n\rangle=\mu(F_n)|\psi\rangle\in W^n$，记作 $|\psi\rangle=(\psi_1,\psi_2,\cdots)$. 由控制收敛定理，积分可以分解为

$$\langle\psi|A_f|\psi\rangle=\int_X f\,\mathrm{d}\mu_\psi=\sum_{n=1}^{\infty}\int_{F_n}f\,\mathrm{d}\mu_\psi=\sum_{n=1}^{\infty}\langle\psi_n|A_n|\psi_n\rangle,$$

利用极化恒等式可以得到 A_f 的作用为

$$\langle\phi|A_f|\psi\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}\langle\phi_n|A_n|\psi_n\rangle,$$

记作 $A_f|\psi\rangle=(A_1\psi_1,A_2\psi_2,\cdots)$，于是有界性要求

$$\|\psi\|^2=\sum_{n=1}^{\infty}\|\psi_n\|^2<\infty,\quad\int_X|f|^2\,\mathrm{d}\mu_\psi=\|A_f\psi\|^2=\sum_{n=1}^{\infty}\|A_n\psi_n\|^2<\infty,$$

由此可以得到定义域 W_f 的等价表示

$$W_f=\left\{|\psi\rangle=(\psi_1,\psi_2,\cdots):\sum_{n=1}^{\infty}(\|\psi_n\|^2+\|A_n\psi_n\|^2)<\infty\right\}.$$

第四步，证明 A 是自伴算符. 由 $\mathrm{Ran}(A_n\pm\mathrm{i}I)=W^n$ 有 $\bigoplus_{k=1}^{n}W^k\subset\mathrm{Ran}(A\pm\mathrm{i}I)$，从而 $\overline{\mathrm{Ran}(A\pm\mathrm{i}I)}=\mathcal{H}$，因此 A 是本质自伴算符，接下来只要证明 $\mathrm{Dom}(A_f^\dagger)=W_f$ 即可.

任取 $|\phi\rangle\in W_f$，利用 A_n 的有界自伴性和 Cauchy 不等式得到

$$|\langle\phi|A_f|\psi\rangle|\leqslant\sum_{n=1}^{\infty}|\langle\phi_n|A_n|\psi_n\rangle|\leqslant\sum_{n=1}^{\infty}\|A_n\phi_n\|\|\psi_n\|\leqslant\left(\sum_{n=1}^{\infty}\|A_n\phi_n\|^2\right)^{1/2}\left(\sum_{n=1}^{\infty}\|\psi_n\|^2\right)^{1/2},$$

于是 $|\psi\rangle\mapsto\langle\phi|A_f|\psi\rangle$ 是有界线性泛函，因此 $|\phi\rangle\in\mathrm{Dom}(A_f^\dagger)$. 反过来，任取 $|\phi\rangle\in\mathrm{Dom}(A_f^\dagger)$，取 $|\psi\rangle=(\phi_1,\phi_2,\cdots,\phi_N,0,0,\cdots)$，由于要求 $|\psi\rangle\mapsto\langle\phi|A_f|\psi\rangle$ 有界，同样由上面的不等式得到

$$\left(\sum_{n=1}^{N}\|A_n\phi_n\|^2\right)^{1/2}<C,\quad\forall N\in\mathbb{N}^*,$$

因此 $|\phi\rangle\in W_f$，这就证明了 A_f 是自伴算符. □

3.3.6 谱定理的第一形式

现在我们准备证明谱定理的第一形式，为了利用正规算符的谱定理和泛函微积分，我们需要将无界自伴算符变换为正规算符.

定义 3.18. *设 A 是自伴算符，定义 A 的 Cayley 变换为算符 $U=(A+\mathrm{i}I)(A-\mathrm{i}I)^{-1}$.*

引理 3.66. *设 A 是自伴算符，U 是 A 的 Cayley 变换，有如下性质：*

1. *U 是酉算符，从而是正规算符；*
2. *$\ker(U-I)=\{0\}$ 且 $\mathrm{Ran}(U-I)=\mathrm{Dom}(A)$；*
3. *$A=\mathrm{i}(U+I)(U-I)^{-1}$.*

证明. 对于第一条性质，由 $\mathrm{i}\in\rho(A)$ 有 $(A-\mathrm{i}I)^{-1}\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$，于是 $U:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$. 已经得到

$$\|(A+\mathrm{i}I)\phi\|^2=\|A\phi\|^2+\|\phi\|^2=\|(A-\mathrm{i}I)\phi\|^2,\quad \forall|\phi\rangle\in\mathrm{Dom}(A),$$

任取 $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$，有 $(A-\mathrm{i}I)^{-1}|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A)$，从而

$$\|(A+\mathrm{i}I)(A-\mathrm{i}I)^{-1}\psi\|^2=\|(A-\mathrm{i}I)(A-\mathrm{i}I)^{-1}\psi\|^2=\|\psi\|^2,$$

于是 $U\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$，利用极化恒等式可以得到 U 保持内积，因此 U 是酉算符.

对于第二条性质，注意到有恒等式

$$(A+\mathrm{i}I)(A-\mathrm{i}I)^{-1}-I=[(A+\mathrm{i}I)-(A-\mathrm{i}I)](A-\mathrm{i}I)^{-1}=2\mathrm{i}(A-\mathrm{i}I)^{-1},$$

因此 $\ker(U-I)=\ker[(A-\mathrm{i}I)^{-1}]=\{0\}$ 且 $\mathrm{Ran}(U-I)=\mathrm{Ran}[(A-\mathrm{i}I)^{-1}]=\mathrm{Dom}(A)$.

对于第三条性质，由于定义域相同，直接计算得到

$$\mathrm{i}(U+I)(U-I)^{-1}=\frac{\mathrm{i}}{2\mathrm{i}}(U+I)(A-\mathrm{i}I)=\frac{1}{2}[(A+\mathrm{i}I)+(A-\mathrm{i}I)]=A.$$ □

引理 3.67. *设 A 是自伴算符，U 是 A 的 Cayley 变换，定义可测函数*

$$D(u)=\mathrm{i}\frac{u+1}{u-1},\quad u\in S^1\backslash\{1\},\tag{3.44}$$

利用正规算符的泛函微积分有 $A=D(U)$.

证明. 由于 $D(u)$ 是可测实函数，有 $D(U)$ 是自伴算符. 设 Borel 集 $E\subset S^1\backslash\{1\}$ 满足 $1\notin\overline{E}$，由于闭集 $\sigma(U|_{V_E})\subset\overline{E}$，可以得到 $D(u)$ 在 $\sigma(U|_{V_E})$ 上有界，于是 $D(U)|_{V_E}=D(U|_{V_E})$ 是有界自伴算符. 利用有界可测函数关于投影值测度的积分的乘法性质可以得到

$$D(U)|_{V_E}=D(U|_{V_E})=\mathrm{i}(U|_{V_E}+I)(U|_{V_E}-I)^{-1}=A|_{V_E}.$$

现在将 $S^1\backslash\{1\}$ 分解为满足条件的两两不交集合序列 E_n，于是 $\mathcal{H}$ 可以表示为 V_{E_n} 的直和. 由于 A 和 $D(U)$ 在每个 V_{E_n} 上相等，同样利用直和空间中的证明可以得到 A 和 $D(U)$ 在 $\mathcal{H}$ 上有相同的作用且有相同的定义域. □

定理 3.68 (谱定理，第一形式). *若 A 是自伴算符，则在 $\sigma(A)$ 的 Borel σ-代数上存在唯一的投影值测度 μ^A 满足*

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda \,\mathrm{d}\mu^A(\lambda). \tag{3.45}$$

证明. 设 U 是 A 的 Cayley 变换，μ^U 是 U 对应的投影值测度，定义可测函数

$$C(x) = \frac{x+\mathrm{i}}{x-\mathrm{i}}, \quad x \in \mathbb{R},$$

任取可测集 $E \subset \sigma(A)$，定义 $\mu^A(E) = \mu^U(C(E))$，可以验证 μ^A 是投影值测度.

由于 $D(C(x)) = x$，利用可测函数关于投影值测度的积分和正规算符的泛函微积分有

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda \,\mathrm{d}\mu^A(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} \lambda \,\mathrm{d}\mu^U(C(\lambda)) = \int_{S^1\setminus\{1\}} D(u) \,\mathrm{d}\mu^U(u) = D(U) = A,$$

下证唯一性. 设投影值测度 ν^A 也满足

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda \,\mathrm{d}\nu^A(\lambda),$$

利用可测函数关于投影值测度的积分定义算符

$$C(A) = \int_{\sigma(A)} C(\lambda) \,\mathrm{d}\nu^A(\lambda),$$

设 Borel 集 $E \subset \mathbb{R}$ 满足 $\overline{E}$ 有界，同样可以得到

$$C(A)|_{V_E} = C(A|_{V_E}) = (A|_{V_E} + \mathrm{i}I)(A|_{V_E} - \mathrm{i}I)^{-1} = U|_{V_E},$$

于是利用相同的方法可以得到 $U = C(A)$. 任取可测集 $E \subset \sigma(U)$，定义 $\nu^U(E) = \nu^A(D(E))$，有

$$\int_{S^1\setminus\{1\}} u \,\mathrm{d}\nu^U(u) = \int_{S^1\setminus\{1\}} u \,\mathrm{d}\nu^A(D(u)) = \int_{\mathbb{R}} C(\lambda) \,\mathrm{d}\nu^A(\lambda) = C(A) = U,$$

根据正规算符谱定理中的唯一性有 $\mu^U = \nu^U$，因此 $\mu^A = \nu^A$. □

在证明谱定理之后，我们就可以定义相应的泛函微积分.

定义 3.19 (泛函微积分). *设 A 是自伴算符，$f : \sigma(A) \to \mathbb{C}$ 是可测函数，定义 A 的泛函微积分 $f \mapsto f(A)$ 为*

$$f(A) = \int_{\sigma(A)} f \,\mathrm{d}\mu^A.$$

命题 3.69. *设 A 是自伴算符，$E \subset \mathbb{R}$ 是 Borel 集，有如下性质：*

1. *若 E 有界，则 $V_E \subset \mathrm{Dom}(A)$，$V_E$ 是 A 的不变子空间且 $A|_{V_E}$ 是有界算符；*

2. *若 $E \subset [\lambda_0 - \varepsilon, \lambda_0 + \varepsilon]$，则对任意 $|\psi\rangle \in V_E$，有 $\|(A - \lambda_0 I)\psi\| \leqslant \varepsilon \|\psi\|$.*

证明. 设有界可测函数 $f(\lambda) = \lambda I_E(\lambda)$，有 $A|_{V_E} = f(A)$，利用有界情形的证明即可. □

命题 3.70 (概率测度). *若 A 是自伴算符且 $|\psi\rangle$ 是单位向量，则存在唯一的概率测度 μ^A_ψ 满足*

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda^m \,\mathrm{d}\mu^A_\psi(\lambda) = \langle\psi|A^m|\psi\rangle, \quad \forall m \in \mathbb{N}^*. \tag{3.46}$$

可以看出这些命题的形式和有界的情形相似.

3.3.7 谱定理的第二形式

现在我们准备证明谱定理的第二形式，由于无界自伴算符的定义域不是整个态空间，因此我们需要考虑态空间和直积分空间之间的酉映射的值域.

定理 3.71 (谱定理，第二形式). *若 A 是自伴算符，则在 $\sigma(A)$ 的 Borel σ-代数上存在 σ-有限测度 μ，直积分空间 $\int_{\sigma(A)}^{\oplus} \mathcal{H}_\lambda \,\mathrm{d}\mu(\lambda)$ 和相应的酉映射 $U : \mathcal{H} \to \int_{\sigma(A)}^{\oplus} \mathcal{H}_\lambda \,\mathrm{d}\mu(\lambda)$ 满足*

$$[UAU^\dagger(s)](\lambda) = \lambda s(\lambda), \quad \forall s \in U(\mathrm{Dom}(A)), \tag{3.47}$$

其中 U 的值域为

$$U(\mathrm{Dom}(A)) = \left\{ s \in \int_{\sigma(A)}^{\oplus} \mathcal{H}_\lambda \,\mathrm{d}\mu(\lambda) : \int_{\sigma(A)} \|\lambda s(\lambda)\|^2 \,\mathrm{d}\mu(\lambda) < \infty \right\}. \tag{3.48}$$

证明. 设 $C(A)$ 是 A 的 Cayley 变换，根据 $C(A)$ 的谱定理，有

$$[\tilde{U}C(A)\tilde{U}^\dagger(\tilde{s})](\lambda) = \lambda \tilde{s}(\lambda), \quad \forall \tilde{s} \in \int_{\sigma(C(A))}^{\oplus} \tilde{\mathcal{H}}_\lambda \,\mathrm{d}\tilde{\mu}(\lambda),$$

由于 $\ker[C(A) - I] = \{0\}$，不妨设 $\mu(\{1\}) \neq 0$，若存在 $\tilde{s}(1) \neq 0$，有

$$[\tilde{U}C(A)\tilde{U}^\dagger(\tilde{s})](1) = \tilde{s}(1),$$

而这与 1 不是 $C(A)$ 的特征向量矛盾，于是 $\tilde{\mathcal{H}}_1 = \{0\}$，因此 $\tilde{\mathcal{H}}_1$ 在直积分中可以忽略.

任取 $\lambda \in \sigma(A)$ 和可测集 $E \subset \sigma(A)$，定义 $\mathcal{H}_\lambda = \tilde{\mathcal{H}}_{C(\lambda)}$ 和 $\mu(E) = \tilde{\mu}(C(E))$，有对应

$$s(\lambda) = \tilde{s}(C(\lambda)) \in \tilde{\mathcal{H}}_{C(\lambda)} = \mathcal{H}_\lambda,$$

于是两个直积分空间之间的映射是酉映射

$$\int_{\sigma(A)}^{\oplus} \langle s_1(\lambda)|s_2(\lambda)\rangle \,\mathrm{d}\mu(\lambda) = \int_{\sigma(A)}^{\oplus} \langle \tilde{s}_1(C(\lambda))|\tilde{s}_2(C(\lambda))\rangle \,\mathrm{d}\tilde{\mu}(C(\lambda)) = \int_{\sigma(C(A))}^{\oplus} \langle \tilde{s}_1(\lambda)|\tilde{s}_2(\lambda)\rangle \,\mathrm{d}\tilde{\mu}(\lambda),$$

这样 $C(A)$ 的谱定理就可以表示为

$$[UC(A)U^\dagger(s)](\lambda) = [\tilde{U}C(A)\tilde{U}^\dagger(\tilde{s})](C(\lambda)) = C(\lambda)\tilde{s}(C(\lambda)) = C(\lambda)s(\lambda), \quad \forall s \in \int_{\sigma(A)}^{\oplus} \mathcal{H}_\lambda \,\mathrm{d}\mu(\lambda),$$

设 Borel 集 $E \subset \mathbb{R}$ 满足 $\overline{E}$ 有界，同样可以得到

$$[UA|_{V_E}U^\dagger(s)](\lambda) = [UD(C(A))|_{V_E}U^\dagger(s)](\lambda) = D(C(\lambda))s(\lambda) = \lambda s(\lambda),$$

于是利用相同的方法可以得到谱定理，酉算符 U 的值域可以通过切片 $\lambda s(\lambda)$ 的模有界得到. □

定理 3.72 (谱定理，乘法算符形式). *若 A 是自伴算符，则存在 σ-有限测度空间 (X, Ω, μ)，集合 X 上的可测实函数 h 和相应的酉映射 $U : \mathcal{H} \to L^2(X, \mu)$ 满足*

$$[UAU^\dagger(s)](\lambda) = h(\lambda)s(\lambda), \quad \forall s \in U(\mathrm{Dom}(A)), \tag{3.49}$$

其中 U 的值域为

$$U(\mathrm{Dom}(A)) = \{s \in L^2(X, \mu) | h \cdot s \in L^2(X, \mu)\}. \tag{3.50}$$

这个定理的证明与谱定理的第二形式的证明相似.

3.3.8 单参数酉群

我们知道时间演化算符 $U(t)$ 是酉算符，在特殊情况下 $U(t)$ 可以表示为 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 的指数函数，而 $\hat{H}$ 应当是自伴算符．这提示我们，酉算符和自伴算符之间可能存在一定的联系．

定义 3.20. 若一族酉算符 $U(t), t\in\mathbb{R}$ 满足 $U(0)=I$ 且 $U(s+t)=U(s)U(t), \forall s,t\in\mathbb{R}$，就称 U 为 $\mathcal{H}$ 上的单参数酉群．若还满足

$$\lim_{s\to t}\|[U(s)-U(t)]\psi\|=0,\quad \forall t\in\mathbb{R}, |\psi\rangle\in\mathcal{H}, \tag{3.51}$$

就称 U 为 $\mathcal{H}$ 上的强连续单参数酉群，定义 U 的无穷小生成元为

$$A|\psi\rangle=\lim_{t\to 0}\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{[U(t)-I]|\psi\rangle}{t}, \tag{3.52}$$

其中 A 的定义域为使得极限存在的 $|\psi\rangle$ 全体．

命题 3.73. 设 A 是自伴算符，利用泛函微积分定义 $U(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}, t\in\mathbb{R}$，有如下性质：

1. U 是强连续单参数酉群；
2. A 是 U 的无穷小生成元．

证明. 对于第一条性质，由于 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\lambda}$ 是有界可测函数，满足

$$f^*(\lambda)f(\lambda)=1,\quad f(\lambda)|_{t=0}=1,\quad f(\lambda)|_{t=t_1+t_2}=f(\lambda)|_{t=t_1}f(\lambda)|_{t=t_2},$$

根据有界可测函数关于投影值测度的积分的性质可以得到

$$f(A)^\dagger f(A)=I,\quad f(A)|_{t=0}=I,\quad f(A)|_{t=t_1+t_2}=f(A)|_{t=t_1}f(A)|_{t=t_2},$$

于是 U 是单参数酉群．根据 $U(t)$ 的定义直接计算得到

$$\|[U(s)-U(t)]\psi\|^2=\langle\psi|[U(s)-U(t)]^\dagger[U(s)-U(t)]\psi\rangle=\int_{\mathbb{R}}|\mathrm{e}^{\mathrm{i}s\lambda}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\lambda}|^2\,\mathrm{d}\mu_\psi^A(\lambda),$$

由控制收敛定理可以得到 U 强连续．

对于第二条性质，设 B 是 U 的无穷小生成元，由 $U^\dagger(t)=U^{-1}(t)=U(-t)$ 有

$$\langle\phi|B\psi\rangle=\lim_{t\to 0}\left\langle\phi\middle|\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{[U(t)-I]\psi}{t}\right\rangle=\lim_{t\to 0}\left\langle\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{[U(-t)-I]\phi}{-t}\middle|\psi\right\rangle=\langle B\phi|\psi\rangle,\quad \forall|\phi\rangle,|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(B),$$

于是 B 是对称算符．任取 $|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A)$，由可测函数关于投影值测度的积分的性质可以得到

$$\left\|\left[\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{U(t)-I}{t}-A\right]\psi\right\|^2=\int_{\mathbb{R}}\left|\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\lambda}-1}{t}-\lambda\right|^2\mathrm{d}\mu_\psi^A(\lambda)$$

由于 $|\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\lambda}-1|<t\lambda$，而根据 $\|A\psi\|^2<\infty$ 有 λ^2 可积，由控制收敛定理可以得到极限为零，于是

$$A|\psi\rangle=\lim_{t\to 0}\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{[U(t)-I]|\psi\rangle}{t},\quad \forall|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A),$$

这表明 $A\subset B$，根据 A 的自伴性和 B 的对称性有 $B\subset B^\dagger\subset A^\dagger=A$，因此 $A=B$． □

事实上，这个命题的逆命题也成立，为此需要证明两个引理．

引理 3.74. *设 U 是强连续单参数酉群，A 是 U 的无穷小生成元，若 $|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A)$，则 $U(t)|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A),\forall t\in\mathbb{R}$ 且*

$$\lim_{h\to 0}\frac{[U(t+h)-U(t)]|\psi\rangle}{h}=\mathrm{i}U(t)A|\psi\rangle=\mathrm{i}AU(t)|\psi\rangle.$$

证明. 设 $|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A)$，根据单参数酉群的定义有如下等式

$$\frac{[U(t+h)-U(t)]|\psi\rangle}{h}=\frac{U(t)[U(h)-I]|\psi\rangle}{h}=\frac{[U(h)-I]U(t)|\psi\rangle}{h},$$

这样有中间式的极限存在，而右式的极限存在表明 $U(t)|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A)$，取极限即可得到等式. □

引理 3.75. *若 U 是强连续单参数酉群，则 U 的无穷小生成元 A 是稠定算符.*

证明. 设 $f\in C_c^\infty(\mathbb{R})$ 是紧支集的光滑函数，$B_f=\displaystyle\int_{\mathbb{R}}f(\tau)U(\tau)\,\mathrm{d}\tau$ 是满足条件的唯一算符

$$\left\langle\phi\middle|\int_{\mathbb{R}}f(\tau)U(\tau)\,\mathrm{d}\tau\middle|\psi\right\rangle=\int_{\mathbb{R}}f(\tau)\langle\phi|U(\tau)|\psi\rangle\,\mathrm{d}\tau,\quad\forall|\phi\rangle,|\psi\rangle\in\mathcal{H},$$

任取 $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$，根据单参数酉群的定义有如下等式

$$[U(t)-I]B_f|\psi\rangle=\int_{\mathbb{R}}f(\tau)[U(\tau+t)-U(\tau)]|\psi\rangle\,\mathrm{d}\tau=\int_{\mathbb{R}}[f(\tau-t)-f(\tau)]U(\tau)|\psi\rangle\,\mathrm{d}\tau,$$

由控制收敛定理就可以得到

$$\lim_{t\to 0}\frac{[U(t)-I]B_f|\psi\rangle}{t}=-\int_{\mathbb{R}}f'(\tau)U(\tau)|\psi\rangle\,\mathrm{d}\tau,$$

于是 $B_f|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A)$. 任取 $\delta>0$，存在 $f_\delta\in C_c^\infty(\mathbb{R})$ 满足条件

$$f_\delta\geqslant 0,\quad\operatorname{supp}f_\delta\subset[-\delta,\delta],\quad\int_{\mathbb{R}}f_\delta(\tau)\,\mathrm{d}\tau=1,$$

由积分的性质可以得到

$$\|B_{f_\delta}\psi-\psi\|\leqslant\int_{\mathbb{R}}f_\delta(\tau)\|[U(\tau)-I]\psi\|\,\mathrm{d}\tau\leqslant\sup_{-\delta\leqslant\tau\leqslant\delta}\|[U(\tau)-I]\psi\|,$$

而由于 U 强连续，有 $|\psi\rangle$ 可以被 $B_{f_\delta}|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(A)$ 逼近，因此 A 稠定. □

定理 3.76 (Stone 定理). *若 U 是强连续单参数酉群，则 U 的无穷小生成元 A 是自伴算符，且满足*

$$U(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA},\quad\forall t\in\mathbb{R}.\tag{3.53}$$

证明. 利用与上面的命题相同的方法可以证明 A 是对称算符，下证 A 是本质自伴算符. 设 $|\psi\rangle\in\ker(A^\dagger-\mathrm{i}I),|\phi\rangle\in\mathrm{Dom}(A)$，定义 $y(t)=\langle U(t)\phi|\psi\rangle$，有 $|y(t)|\leqslant\|\phi\|\|\psi\|$，而根据上面的引理

$$\frac{\mathrm{d}y(t)}{\mathrm{d}t}=\langle\mathrm{i}AU(t)\phi|\psi\rangle=\langle\mathrm{i}U(t)\phi|A^\dagger\psi\rangle=\langle\mathrm{i}U(t)\phi|\mathrm{i}\psi\rangle=\langle U(t)\phi|\psi\rangle=y(t),$$

这个常微分方程初值问题的唯一解是 $y(t)=y(0)\mathrm{e}^t=\langle\phi|\psi\rangle\mathrm{e}^t$，要使 $y(t)$ 有界，只有

$$\langle\phi|\psi\rangle=0,\quad\forall|\phi\rangle\in\mathrm{Dom}(A)$$

而 A 稠定，因此 $|\psi\rangle=0$. 同样可以证明 $\ker(A^\dagger+\mathrm{i}I)=\{0\}$，因此 A 是本质自伴算符.

定义 $V(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\overline{A}}$，下证 $U(t) = V(t)$．设 $|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)$，定义 $w(t) = [U(t) - V(t)]|\psi\rangle$，有

$$\frac{\mathrm{d}w(t)}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}AU(t)|\psi\rangle - \mathrm{i}\overline{A}V(t)|\psi\rangle = \mathrm{i}\overline{A}w(t),$$

由此对向量的模方求导得到

$$\frac{\mathrm{d}\|w(t)\|^2}{\mathrm{d}t} = \langle \mathrm{i}\overline{A}w(t)|w(t)\rangle + \langle w(t)|\mathrm{i}\overline{A}w(t)\rangle = 0,$$

由于 $w(0) = 0$，于是 $w(t) = 0$，因此 $U(t) = V(t)$．

由于 $\overline{A}$ 是 V 的无穷小生成元，因此 $A = \overline{A}$，即 A 是自伴算符，且 $U(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}$．　□

§3.4　量子力学中的算符

3.4.1　再识位置算符

根据算符自伴的条件，现在我们可以证明位置算符的自伴性，为了不失一般性，我们将考虑 n 维的情形，并将位置算符作为乘法算符的特殊情况证明．

命题 3.77. 设 $V:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是可测函数，如下定义的 $V(\hat{\boldsymbol{x}})$ 是自伴算符．

$$V(\hat{\boldsymbol{x}})\psi(\boldsymbol{x}) = V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}), \quad \forall \psi \in \mathrm{Dom}(V(\hat{\boldsymbol{x}})) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)|V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}. \tag{3.54}$$

证明. 下证 $V(\hat{\boldsymbol{x}})$ 稠定．任取 $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$，设 $E_m = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n||V(\boldsymbol{x})| < m\}$，可以验证 $\psi \cdot I_{E_m} \in \mathrm{Dom}(V(\hat{\boldsymbol{x}}))$，根据控制收敛定理有 $\psi \cdot I_{E_m}$ 依 L^2 收敛到 ψ，因此 $\mathrm{Dom}(V(\hat{\boldsymbol{x}}))$ 在 $L^2(\mathbb{R}^n)$ 中稠密．

下证 $V(\hat{\boldsymbol{x}})$ 对称．任取 $\phi, \psi \in \mathrm{Dom}(V(\hat{\boldsymbol{x}}))$，根据 L^2 空间内积的定义得到

$$\langle \phi|V(\hat{\boldsymbol{x}})\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \phi^*(\boldsymbol{x})V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_{\mathbb{R}^n} V^*(\boldsymbol{x})\phi^*(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \langle V(\hat{\boldsymbol{x}})\phi|\psi\rangle.$$

下证 $V(\hat{\boldsymbol{x}})$ 自伴．任取 $\phi \in \mathrm{Dom}(V(\hat{\boldsymbol{x}})^\dagger)$，根据伴随算符的定义有

$$\int_{\mathbb{R}^n} [V(\hat{\boldsymbol{x}})^\dagger\phi(\boldsymbol{x})]^*\psi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_{\mathbb{R}^n} \phi^*(\boldsymbol{x})V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \quad \forall \psi \in \mathrm{Dom}(V(\hat{\boldsymbol{x}})),$$

设 $\psi(\boldsymbol{x}) = [V(\hat{\boldsymbol{x}})^\dagger\phi(\boldsymbol{x}) - V(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})] \cdot I_{E_m}(\boldsymbol{x})$，于是

$$V(\hat{\boldsymbol{x}})^\dagger\phi(\boldsymbol{x}) - V(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x}) = 0, \quad \text{a.e.}\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n,$$

这样 $V(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x}) = V(\hat{\boldsymbol{x}})^\dagger\phi(\boldsymbol{x}) \in L^2(\mathbb{R}^n)$，因此 $\phi \in \mathrm{Dom}(V(\hat{\boldsymbol{x}}))$．　□

推论 3.78. 如下定义的位置算符的第 i 个分量 $\hat{x}_i$ 是自伴算符．

$$\hat{x}_i\psi(\boldsymbol{x}) = x_i\psi(\boldsymbol{x}), \quad \forall \psi \in \mathrm{Dom}(\hat{x}_i) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)|x_i\psi(\boldsymbol{x}) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}. \tag{3.55}$$

这是乘法算符自伴性的特殊情形．

3.4.2 再识动量算符

我们知道，如果对波函数作 Fourier 变换

$$\psi(\boldsymbol{x})=\mathcal{F}^{-1}\{\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\}=\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\psi(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,\mathrm{d}\boldsymbol{k},\quad \hat{\psi}(\boldsymbol{k})=\mathcal{F}\{\psi(\boldsymbol{x})\}=\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x},$$

那么动量算符相当于乘法算符，而我们已经证明了乘法算符的自伴性，于是我们有下面的命题.

命题 3.79. *如下定义的动量算符的第 i 个分量 $\hat{p}_i$ 是自伴算符.*

$$\hat{p}_i\psi(\boldsymbol{x})=\mathcal{F}^{-1}\{\hbar k_i\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\},\quad \forall\psi\in\mathrm{Dom}(\hat{p}_i)=\{\psi\in L^2(\mathbb{R}^n)|k_i\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\in L^2(\mathbb{R}^n)\}.\tag{3.56}$$

证明. 由于 Fourier 变换 $\mathcal{F}:L^2(\mathbb{R}^n)\to L^2(\mathbb{R}^n)$ 是酉变换，因此命题成立. □

为了将动量算符的作用表示为我们熟悉的形式，我们需要定义更广泛意义上的导数.

定义 3.21. *设 $\phi,\psi\in L^2(\mathbb{R}^n)$，若任取紧支集的光滑函数 $\chi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ 都有*

$$-\int_{\mathbb{R}^n}\frac{\partial\chi^*(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}\psi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}=\int_{\mathbb{R}}\chi^*(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x},$$

就称 ϕ 是 ψ 在广义函数意义上的导数，仍记作 $\phi=\partial\psi/\partial x_i$.

引理 3.80. *设 $\psi\in L^2(\mathbb{R}^n)$，有 $\phi=\partial\psi/\partial x_i\in L^2(\mathbb{R}^n)$ 的充要条件是 $k_i\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\in L^2(\mathbb{R}^n)$，在这种情况下有 $\hat{\phi}(\boldsymbol{k})=\mathrm{i}k_i\hat{\psi}(\boldsymbol{k})$.*

证明. 设 $\phi\in L^2(\mathbb{R}^n)$，根据 Fourier 变换的微分关系有

$$\langle\hat{\chi}|\hat{\phi}\rangle=\langle\chi|\phi\rangle=-\left\langle\frac{\partial\chi}{\partial x_i}\middle|\psi\right\rangle=-\langle\mathrm{i}k_i\hat{\chi}|\hat{\psi}\rangle=\langle\hat{\chi}|\mathrm{i}k_i\hat{\psi}\rangle,\quad\forall\chi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^n),$$

由于 $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ 在 $L^2(\mathbb{R}^n)$ 中稠密，于是对任意 $\chi\in L^2(\mathbb{R}^n)$ 都成立，因此 $\hat{\phi}(\boldsymbol{k})=\mathrm{i}k_i\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\in L^2(\mathbb{R}^n)$.

设 $k_i\hat{\psi}\in L^2(\mathbb{R}^n)$，取 $\phi(\boldsymbol{x})=\mathcal{F}^{-1}\{\mathrm{i}k_i\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\}\in L^2(\mathbb{R}^n)$，根据 Fourier 变换的微分关系有

$$\langle\chi|\phi\rangle=\langle\hat{\chi}|\hat{\phi}\rangle=\langle\hat{\chi}|\mathrm{i}k_i\hat{\psi}\rangle=-\langle\mathrm{i}k_i\hat{\chi}|\hat{\psi}\rangle=-\left\langle\frac{\partial\chi}{\partial x_i}\middle|\psi\right\rangle,\quad\forall\chi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^n),$$

因此根据定义有 $\phi=\partial\psi/\partial x_i\in L^2(\mathbb{R}^n)$. □

根据这个引理，我们也可以按照下面的方式定义动量算符.

命题 3.81. *如下定义的动量算符的第 i 个分量 $\hat{p}_i$ 是自伴算符.*

$$\hat{p}_i\psi(\boldsymbol{x})=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\psi(\boldsymbol{x}),\quad\forall\psi\in\mathrm{Dom}(\hat{p}_i)=\{\psi\in L^2(\mathbb{R}^n)|\ \partial\psi/\partial x_i\in L^2(\mathbb{R}^n)\}.\tag{3.57}$$

推论 3.82. *如下定义的 Laplace 算符 ∇^2 是自伴算符.*

$$\nabla^2\psi(\boldsymbol{x})=-\mathcal{F}^{-1}\{|\boldsymbol{k}|^2\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\},\quad\forall\psi\in\mathrm{Dom}(\nabla^2)=\{\psi\in L^2(\mathbb{R}^n)||\boldsymbol{k}|^2\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\in L^2(\mathbb{R}^n)\}.\tag{3.58}$$

这个命题的证明与动量算符相似.

3.4.3 位置表象与动量表象

在通常的量子力学教材中，我们会通过选取不同的方式将我们熟悉的空间作为态空间的表示，这种选取态空间表示的方式称为选取*表象*.

由于 $\mathcal{H}$ 同构于 $\mathbb{C}^n$ 或 l^2 空间，任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$，对于标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$，有

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle,$$

这样向量 $|\psi\rangle$ 就可以用系数 $\{\langle e_i|\psi\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ 表示，这在有限维态空间中是一种常见的表象.

设 $\mathcal{H}$ 同构于 $L^2(\mathbb{R}^n)$，任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$，存在对应的 $\psi, \hat{\psi} \in L^2(\mathbb{R}^n)$，定义线性泛函

$$\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle = \psi(\boldsymbol{x}), \quad \langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle = \hat{\psi}(\boldsymbol{k}), \tag{3.59}$$

可以看出 $\langle \boldsymbol{x}|$ 和 $\langle \boldsymbol{p}|$ 并不是有界线性泛函，但是可以在形式上定义

$$\langle \psi|\boldsymbol{x}\rangle = \psi^*(\boldsymbol{x}), \quad \langle \psi|\boldsymbol{p}\rangle = \hat{\psi}^*(\boldsymbol{k}). \tag{3.60}$$

这样向量 $|\psi\rangle$ 就可以用函数 ψ 或 $\hat{\psi}$ 表示，这称为位置表象和动量表象.

现在我们用这种记号表示位置算符和动量算符的作用，根据定义有

$$\langle \boldsymbol{x}|\hat{x}_i|\psi\rangle = x_i\psi(\boldsymbol{x}), \quad \langle \boldsymbol{p}|\hat{p}_i|\psi\rangle = \hbar k_i\hat{\psi}(\boldsymbol{k}),$$

于是可以规定位置算符和动量算符在相应的线性泛函上的作用为

$$\langle \boldsymbol{x}|\hat{x}_i = x_i\langle \boldsymbol{x}|, \quad \langle \boldsymbol{p}|\hat{p}_i = \hbar k_i\langle \boldsymbol{p}|, \tag{3.61}$$

相应地，我们也可以规定

$$\hat{x}_i|\boldsymbol{x}\rangle = x_i|\boldsymbol{x}\rangle, \quad \hat{p}_i|\boldsymbol{p}\rangle = \hbar k_i|\boldsymbol{p}\rangle, \tag{3.62}$$

可以看出 $|\boldsymbol{x}\rangle$ 和 $|\boldsymbol{p}\rangle$ 是位置算符和动量算符的特征向量，但是它们并不在 $\mathcal{H}$ 内.

现在我们用这种记号计算位置算符和动量算符的期望，根据定义有

$$\langle \psi|\hat{x}_i|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} x_i\langle \psi|\boldsymbol{x}\rangle\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \quad \langle \psi|\hat{p}_i|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \hbar k_i\langle \psi|\boldsymbol{p}\rangle\langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{k},$$

根据谱定理的第一形式，位置算符和动量算符可以用这种记号表示为

$$\hat{x}_i = \int_{\mathbb{R}} x_i|\boldsymbol{x}\rangle\langle \boldsymbol{x}|\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \quad \hat{p}_i = \int_{\mathbb{R}} \hbar k_i|\boldsymbol{p}\rangle\langle \boldsymbol{p}|\,\mathrm{d}\boldsymbol{k}, \tag{3.63}$$

特别地，利用泛函微积分，单位算符可以表示为

$$I = \int_{\mathbb{R}} |\boldsymbol{x}\rangle\langle \boldsymbol{x}|\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \quad I = \int_{\mathbb{R}} \hbar|\boldsymbol{p}\rangle\langle \boldsymbol{p}|\,\mathrm{d}\boldsymbol{k}, \tag{3.64}$$

利用这个表示可以在形式上定义 $\langle \boldsymbol{x}|$ 和 $\langle \boldsymbol{p}|$ 的作用.

根据 $\langle \boldsymbol{x}|$ 和 $\langle \boldsymbol{p}|$ 的定义，我们可以作形式上的运算

$$\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle\langle \boldsymbol{x}'|\psi\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}' = \psi(\boldsymbol{x}), \quad \langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}'\rangle\langle \boldsymbol{p}'|\psi\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{k}' = \hat{\psi}(\boldsymbol{k}),$$

于是可以规定 $\langle \boldsymbol{x}|$ 和 $\langle \boldsymbol{p}|$ 对自身的作用为

$$\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'), \quad \langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}'\rangle = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'), \tag{3.65}$$

相应地，形式上的运算也可以表示为

$$\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}\rangle\langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{k} = \psi(\boldsymbol{x}), \quad \langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{x}\rangle\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \hat{\psi}(\boldsymbol{k}),$$

根据 ψ 和 $\hat{\psi}$ 的关系可以规定 $\langle \boldsymbol{x}|$ 和 $\langle \boldsymbol{p}|$ 的相互作用为

$$\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \quad \langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{x}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{3.66}$$

可以看出 $|\boldsymbol{x}\rangle$ 和 $|\boldsymbol{p}\rangle$ 对应的是广义函数.

3.4.4 自伴算符的加法

现在我们准备证明 Hamilton 算符的自伴性，由于 Hamilton 算符是两个自伴算符之和，为了正确地处理这个问题，我们需要定义和算符的定义域.

定义 3.22. 设 A, B 是稠定算符，定义和算符 $A+B$ 的定义域为

$$\mathrm{Dom}(A+B) = \mathrm{Dom}(A) \cap \mathrm{Dom}(B), \tag{3.67}$$

可以看出 $\mathrm{Dom}(A+B)$ 不一定在 $\mathcal{H}$ 中稠密.

关于两个自伴算符的关系，我们有如下重要定理.

定理 3.83 (Kato-Rellich 定理). 设 A, B 是自伴算符，若 $\mathrm{Dom}(A) \subset \mathrm{Dom}(B)$ 且存在常数 $0 < a < 1, b > 0$ 满足

$$\|B\psi\| \leqslant a\|A\psi\| + b\|\psi\|, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A),$$

则 $A+B$ 是自伴算符. 若 A 还非负，则 $\sigma(A+B)$ 的一个下界是 $-b/(1-a)$.

证明. 可以验证 $A+B$ 是对称算符. 取 $\mu > 0$ 使得 $a + b/\mu < 1$，注意到恒等式

$$A + B + \mathrm{i}\mu I = [I + B(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}](A+\mathrm{i}\mu I),$$

根据算符自伴的条件有 $\mathrm{Ran}(A+\mathrm{i}\mu I) = \mathcal{H}$. 任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$，有等式

$$\|\psi\|^2 = \|A(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}\psi\|^2 + \mu^2\|(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}\psi\|^2,$$

由此可以得到

$$\|A(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}\| \leqslant 1, \quad \|(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}\| \leqslant \frac{1}{\mu},$$

于是有估计

$$\|B(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}\psi\| \leqslant a\|A(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}\psi\| + b\|(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}\psi\| \leqslant \left(a + \frac{b}{\mu}\right)\|\psi\| < \|\psi\|,$$

即 $\|B(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}\| < 1$，这样 $I + B(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}$ 是双射，因此 $\mathrm{Ran}(A+B+\mathrm{i}\mu I) = \mathcal{H}$. 同理可以得到 $\mathrm{Ran}(A+B-\mathrm{i}\mu I) = \mathcal{H}$，根据算符自伴的条件有 $A+B$ 是自伴算符.

若 A 非负，取 $\lambda > b/(1-a)$，有 $a + b/\lambda < 1$，任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$，有不等式

$$\|\psi\|^2 \geqslant \|A(A+\lambda I)^{-1}\psi\|^2 + \lambda^2\|(A+\lambda I)^{-1}\psi\|^2,$$

由此可以得到

$$\|A(A+\lambda I)^{-1}\| \leqslant 1, \quad \|(A+\lambda I)^{-1}\| \leqslant \frac{1}{\lambda},$$

于是有估计

$$\|B(A+\lambda I)^{-1}\psi\| \leqslant a\|A(A+\lambda I)^{-1}\psi\| + b\|(A+\lambda I)^{-1}\psi\| \leqslant \left(a+\frac{b}{\lambda}\right)\|\psi\| < \|\psi\|,$$

即 $\|B(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}\| < 1$，这样 $I + B(A+\mathrm{i}\mu I)^{-1}$ 是双射．而 $-\lambda \in \rho(A)$，有 $\operatorname{Ran}(A+\lambda I) = \mathcal{H}$，于是 $\operatorname{Ran}(A+B+\lambda I) = \mathcal{H}$，由自伴性可以得到 $\ker(A+B+\lambda I) = [\operatorname{Ran}(A+B+\lambda I)]^{\perp} = \{0\}$，因此 $-\lambda \in \rho(A+B)$．即 $\sigma(A+B) \subset [-b/(1-a), +\infty)$． □

下面我们证明在一定条件下，Hamilton 算符是自伴的．

命题 3.84. 设 $n \leqslant 3$，若 $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 可以分解为两个实可测函数 V_1, V_2 之和，满足 V_1 有界且 $V_2 \in L^2(\mathbb{R})$，则有 $\operatorname{Dom}(\hat{H}) = \operatorname{Dom}(\nabla^2)$，$\hat{H} = \hat{\boldsymbol{p}}^2/(2m) + V(\hat{\boldsymbol{x}})$ 是自伴算符且有下界．

证明. 只要证 $A = \hat{\boldsymbol{p}}^2/(2m) = -\hbar^2/(2m)\nabla^2$ 和 $B = V(\hat{\boldsymbol{x}})$ 满足 Kato-Rellich 定理的条件．

任取 $\psi \in \operatorname{Dom}(\nabla^2)$，由于 $\hat{\psi}(\boldsymbol{k}), |\boldsymbol{k}|^2\hat{\psi}(\boldsymbol{k}) \in L^2(\mathbb{R}^n)$，而 $1/(1+|\boldsymbol{k}|^2) \in L^2(\mathbb{R}^n)$，于是

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{1+|\boldsymbol{k}|^2}[\hat{\psi}(\boldsymbol{k}) + |\boldsymbol{k}|^2\hat{\psi}(\boldsymbol{k})] \in L^1(\mathbb{R}^n),$$

根据 $L^1(\mathbb{R}^n)$ 上 Fourier 变换的性质，有 ψ 在 $\mathbb{R}^n$ 上一致连续．利用等式

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{1+|\boldsymbol{k}|^{5/3}}[\hat{\psi}(\boldsymbol{k}) + |\boldsymbol{k}|^{5/3}\hat{\psi}(\boldsymbol{k})],$$

任取 $\varepsilon > 0$，存在常数 $c_0(\varepsilon)$ 使得 $|\boldsymbol{k}|^{5/3} < \varepsilon|\boldsymbol{k}|^2 + c_0 - 1$，于是

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{k}) < \frac{1}{1+|\boldsymbol{k}|^{5/3}}[c_0\hat{\psi}(\boldsymbol{k}) + \varepsilon|\boldsymbol{k}|^2\hat{\psi}(\boldsymbol{k})],$$

利用 Cauchy-Schwarz 不等式可以得到

$$\begin{aligned}|\psi(\boldsymbol{x})| &\leqslant \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}|\hat{\psi}(\boldsymbol{k})|\,\mathrm{d}\boldsymbol{k} \leqslant \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\frac{c_0|\hat{\psi}(\boldsymbol{k})|}{1+|\boldsymbol{k}|^{5/3}}\,\mathrm{d}\boldsymbol{k} + \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\frac{\varepsilon|\boldsymbol{k}|^2|\hat{\psi}(\boldsymbol{k})|}{1+|\boldsymbol{k}|^{5/3}}\,\mathrm{d}\boldsymbol{k}\\ &\leqslant \left\|\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\frac{c_0}{1+|\boldsymbol{k}|^{5/3}}\right\|\|\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\| + \varepsilon\left\|\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\frac{1}{1+|\boldsymbol{k}|^{5/3}}\right\|\||\boldsymbol{k}|^2\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\|,\end{aligned}$$

由于系数的 L^2 范数是有限的常数，于是利用 Fourier 变换的性质可以得到不等式

$$|\psi(\boldsymbol{x})| \leqslant c_\varepsilon\|\psi\| + \varepsilon\|\nabla^2\psi\|,$$

这里 c_ε 是依赖于 ε 的常数，由此可以估计得到

$$\|V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})\| \leqslant \sup|V_1|\|\psi\| + \|V_2\|\sup|\psi| \leqslant \varepsilon\|V_2\|\|\nabla^2\psi\| + (\sup|V_1| + c_\varepsilon\|V_2\|)\|\psi\|,$$

因此 $\operatorname{Dom}(\nabla^2) \subset \operatorname{Dom}(V(\hat{\boldsymbol{x}}))$ 且满足 Kato-Rellich 定理的条件．

根据 Fourier 变换的性质可以验证 A 非负． □

3.4.5 再识时间演化算符

现在我们已经知道，在一定条件下 Hamilton 算符是自伴的，由此可以定义时间演化算符.

定义 3.23. 若 $\hat{H}$ 是自伴算符，定义时间演化算符 $U(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}$.

这就得到 U 是强连续单参数酉群，$-\hat{H}/\hbar$ 是 U 的无穷小生成元. 任取 $|\psi(0)\rangle\in\mathrm{Dom}(\hat{H})$，有 $|\psi(t)\rangle=U(t)|\psi(0)\rangle\in\mathrm{Dom}(\hat{H})$ 且

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\mathrm{i}\hbar(-\mathrm{i}\hat{H}/\hbar)|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle,$$

因此 $|\psi(t)\rangle$ 是 Schrödinger 方程的解.

根据时间演化算符的想法，我们可以想到定义空间平移算符.

命题 3.85. 设 $\boldsymbol{e}_i$ 是第 i 个方向的单位向量，定义如下算符

$$U_i(t)\psi(\boldsymbol{x})=\psi(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{e}_i),$$

有 U_i 是强连续单参数酉群，U_i 的无穷小生成元 A_i 满足

$$A_i\psi(\boldsymbol{x})=-\mathrm{i}\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x})}{\partial x_i},\quad\forall\psi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^n).$$

证明. 可以验证 U_i 是单参数酉群. 任取 $\psi\in L^2(\mathbb{R}^n)$，由于 $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ 在 $L^2(\mathbb{R}^n)$ 中稠密，于是任取 $\varepsilon>0$，存在 $\phi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ 满足 $\|\psi-\phi\|<\varepsilon/3$. 由于 $\phi(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{e}_i)$ 在 $t\to0$ 时一致收敛到 $\phi(\boldsymbol{x})$，而 $\phi(\boldsymbol{x})$ 是紧支集的，于是支集的测度有限，从而

$$\lim_{s\to t}\|[U_i(s)-U_i(t)]\phi(\boldsymbol{x})\|=\lim_{s\to t}\|\phi(\boldsymbol{x}+s\boldsymbol{e}_i)-\phi(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{e}_i)\|=0,$$

存在 $\delta>0$ 使得 $|s-t|<\delta$ 时 $\|[U_i(s)-U_i(t)]\phi(\boldsymbol{x})\|<\varepsilon/3$，于是

$$\|[U_i(s)-U_i(t)]\psi(\boldsymbol{x})\|\leqslant\|U_i(s)[\psi(\boldsymbol{x})-\phi(\boldsymbol{x})]\|+\|[U_i(s)-U_i(t)]\phi(\boldsymbol{x})\|+\|U_i(t)[\phi(\boldsymbol{x})-\psi(\boldsymbol{x})]\|<\varepsilon,$$

因此 U_i 强连续. 根据无穷小生成元的定义，对 $\psi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ 有

$$A_i\psi(\boldsymbol{x})=\lim_{t\to0}\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{[U_i(t)-I]\psi(\boldsymbol{x})}{t}=\lim_{t\to0}\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\psi(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{e}_i)-\psi(\boldsymbol{x})}{t}=-\mathrm{i}\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}.$$ □

由于 A_i 是自伴算符，于是 A_i 在 $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ 上的限制是本质自伴算符，可以看出

$$A_i\psi(\boldsymbol{x})=\hbar\hat{p}_i\psi(\boldsymbol{x}),\quad\forall\psi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^n),$$

根据本质自伴算符的自伴延拓唯一，可以得到 $A_i=\hbar\hat{p}_i$，由此可以定义空间平移算符.

定义 3.24. 设 $\hat{p}_i$ 是动量算符的第 i 个分量，定义空间平移算符 $U_i(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{p}_it/\hbar}$.

可以验证这样定义的空间平移算符和上面的定义一致.

3.4.6 不确定性原理的一般形式

我们知道，算符的对易式为系统性质的分析提供了有力的工具，不仅如此，利用对易关系我们还能得到关于算符不确定度的估计．为了正确地处理对易式，我们需要定义乘积算符的定义域.

定义 3.25. 设 A, B 是稠定算符，定义乘积算符 AB 的定义域为

$$\mathrm{Dom}(AB) = \{|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(B) : B|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)\}, \tag{3.68}$$

可以看出 $\mathrm{Dom}(AB)$ 不一定在 $\mathcal{H}$ 中稠密.

在之前，我们已经定义过算符的不确定度

$$(\Delta_\psi A)^2 = \langle (A - \langle A\rangle_\psi I)^2\rangle_\psi = \langle A^2\rangle_\psi - \langle A\rangle_\psi^2,$$

要使等式有定义，这要求 $|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A^2)$，可以看出这有些过分强了.

定义 3.26. 设 A 是自伴算符，定义 A 的不确定度 $\Delta_\psi A$ 为

$$(\Delta_\psi A)^2 = \|(A - \langle A\rangle_\psi I)\psi\|^2 = \|A\psi\|^2 - \langle A\rangle_\psi^2, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A), \tag{3.69}$$

可以验证 $\Delta_\psi A = 0$ 的充要条件是 $|\psi\rangle$ 是 A 的特征向量.

现在我们可以证明不确定性原理的一般形式.

定理 3.86 (不确定性原理，一般形式). 设 A, B 是自伴算符，有

$$\Delta_\psi A \cdot \Delta_\psi B \geqslant \frac{1}{2}|\langle [A, B]\rangle_\psi|, \quad \forall|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(AB) \cap \mathrm{Dom}(BA). \tag{3.70}$$

证明. 设 $A' = A - \langle A\rangle_\psi I$ 和 $B' = B - \langle B\rangle_\psi I$，可以得到 $|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A'B') \cap \mathrm{Dom}(B'A')$．由 Cauchy-Schwarz 不等式并利用 A' 和 B' 的对称性可以得到

$$\begin{aligned}\|A'\psi\|^2\|B'\psi\|^2 \geqslant |\langle A'\psi|B'\psi\rangle|^2 &\geqslant |\operatorname{Im}\langle A'\psi|B'\psi\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4}|\langle A'\psi|B'\psi\rangle - \langle B'\psi|A'\psi\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4}|\langle\psi|A'B'\psi\rangle - \langle\psi|B'A'\psi\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle [A', B']\rangle_\psi|^2,\end{aligned}$$

可以验证 $[A', B'] = [A, B]$，因此定理成立. □

命题 3.87. 不等式取等的充要条件是下面三个条件的其中之一成立：

1. $|\psi\rangle$ 是 A 的特征向量；
2. $|\psi\rangle$ 是 B 的特征向量；
3. 存在 $\gamma \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$ 使得 $|\psi\rangle$ 是 $A - \mathrm{i}\gamma B$ 的特征向量.

证明. 根据 Cauchy-Schwarz 不等式的取等条件，第一个不等式取等的充要条件是 $A'|\psi\rangle$ 和 $B'|\psi\rangle$ 线性相关．若 $A'|\psi\rangle$ 是零向量，则 $|\psi\rangle$ 是 A 的特征向量．若 $B'|\psi\rangle$ 是零向量，则 $|\psi\rangle$ 是 B 的特征向量．若二者都是非零向量，不妨设 $A'|\psi\rangle = \mathrm{i}\gamma B'|\psi\rangle$，第二个不等式取等的充要条件是 $\mathrm{Re}\langle A'\psi|B'\psi\rangle = 0$，因此 $\gamma \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$，此时 $|\psi\rangle$ 是 $A - \mathrm{i}\gamma B$ 的特征向量. □

3.4.7 不确定性原理的特殊形式

可以看出，不确定性原理的一般形式对定义域的限制较强．现在我们想知道，是否存在一对特定的算符，可以使不确定性原理的定义域扩大到 $\mathrm{Dom}(A)\cap\mathrm{Dom}(B)$．

定理 3.88 (不确定性原理，特殊形式)．设 $\hat{x},\hat{p}$ 是位置算符和动量算符，有

$$\Delta_\psi\hat{x}\cdot\Delta_\psi\hat{p}\geqslant\frac{\hbar}{2}\|\psi\|^2,\quad\forall|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(\hat{x})\cap\mathrm{Dom}(\hat{p}).\tag{3.71}$$

证明. 根据单参数酉群的性质，动量算符的作用可以表示为 L^2 意义上的极限

$$\hat{p}\psi(x)=-\mathrm{i}\hbar\lim_{a\to0}\frac{\psi(x+a)-\psi(x)}{a},$$

将 $\hat{x}\psi(x)$ 和 $\hat{p}\psi(x)$ 作内积，利用换元 $y=x+a$ 可以得到

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}\psi|\hat{p}\psi\rangle&=\lim_{a\to0}\left\langle x\psi(x)\middle|-\mathrm{i}\hbar\frac{\psi(x+a)-\psi(x)}{a}\right\rangle\\&=-\mathrm{i}\hbar\lim_{a\to0}\frac{\langle(y-a)\psi(y-a)|\psi(y)\rangle-\langle x\psi(x)|\psi(x)\rangle}{a},\end{aligned}$$

将 y 仍用 x 表示，化简并利用 $\hat{x}$ 的对称性可以得到

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}\psi|\hat{p}\psi\rangle&=-\mathrm{i}\hbar\lim_{a\to0}\frac{\langle x[\psi(x-a)-\psi(x)]|\psi(x)\rangle-\langle a\psi(x-a)|\psi(x)\rangle}{a}\\&=\lim_{a\to0}\left[\left\langle-\mathrm{i}\hbar\frac{\psi(x-a)-\psi(x)}{-a}\middle|x\psi(x)\right\rangle+\mathrm{i}\hbar\langle\psi(x-a)|\psi(x)\rangle\right],\end{aligned}$$

由此得到位置算符和动量算符满足的性质

$$\langle\hat{x}\psi|\hat{p}\psi\rangle=\langle\hat{p}\psi|\hat{x}\psi\rangle+\mathrm{i}\hbar\langle\psi|\psi\rangle.$$

设 $\hat{x}'=\hat{x}-\langle\hat{x}\rangle_\psi I$ 和 $\hat{p}'=\hat{p}-\langle\hat{p}\rangle_\psi I$，可以得到 $|\psi\rangle\in\mathrm{Dom}(\hat{x}')\cap\mathrm{Dom}(\hat{p}')$，于是

$$\|\hat{x}'\psi\|\|\hat{p}'\psi\|\geqslant\mathrm{Im}\langle\hat{x}'\psi|\hat{p}'\psi\rangle=\frac{1}{2\mathrm{i}}[\langle\hat{x}'\psi|\hat{p}'\psi\rangle-\langle\hat{p}'\psi|\hat{x}'\psi\rangle],$$

可以验证 $\langle\hat{x}'\psi|\hat{p}'\psi\rangle-\langle\hat{p}'\psi|\hat{x}'\psi\rangle=\langle\hat{x}\psi|\hat{p}\psi\rangle-\langle\hat{p}\psi|\hat{x}\psi\rangle$，因此定理成立． □

命题 3.89. 不等式取等的充要条件是存在 $\delta\in\mathbb{R}\backslash\{0\}$ 使得 $|\psi\rangle$ 是 $\hat{x}+\mathrm{i}\delta\hat{p}$ 的特征向量．

证明. 这是因为 $\hat{x}$和 $\hat{p}$ 不存在特征向量． □

现在设 $(\hat{x}+\mathrm{i}\delta\hat{p})|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle$，可以得到 $\langle\hat{x}\rangle_\psi+\mathrm{i}\delta\langle\hat{p}\rangle_\psi=\lambda$，于是位置和动量的期望满足

$$\langle\hat{x}\rangle_\psi=\mathrm{Re}\,\lambda,\quad\langle\hat{p}\rangle_\psi=\frac{1}{\delta}\,\mathrm{Im}\,\lambda,$$

而 $(\hat{x}'+\mathrm{i}\delta\hat{p}')|\psi\rangle=0$，可以得到 $\|\hat{x}'\psi\|=\delta\|\hat{p}'\psi\|$，于是位置和动量的不确定度满足

$$\frac{\Delta_\psi\hat{x}}{\Delta_\psi\hat{p}}=\delta.$$

利用特征方程，我们可以求解波函数具体表达式

$$x\psi(x)+\delta\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}=\lambda\psi(x),$$

对于给定的 δ 和 λ，除相位的不确定性外，方程有唯一解

$$\psi(x)=c_1\exp\left\{-\frac{(x-\lambda)^2}{2\delta\hbar}\right\}=c_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\langle\hat{p}\rangle_\psi x/\hbar}\exp\left\{-\frac{(x-\langle\hat{x}\rangle_\psi)^2}{2\delta\hbar}\right\},$$

根据表达式，为了使 $\psi\in L^2(\mathbb{R})$ 需要 $\delta>0$．这种具有最小位置和动量不确定度的态称为相干态．

§3.5 本章小结

3.5.1 自伴算符的谱和谱定理

设 A 是自伴算符，有如下性质：

1. $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ 是闭集且 $\sigma_r(A) = \varnothing$，$\sigma(A)$ 有界的充要条件是 A 有界.
2. $\lambda \in \sigma(A)$ 的充要条件是存在 $\{|\psi_n\rangle\} \subset \mathrm{Dom}(A)$ 使得
$$\lim_{n\to\infty} \frac{\|A\psi_n - \lambda\psi_n\|}{\|\psi_n\|} = 0.$$
3. 在 $\sigma(A)$ 的 Borel σ-代数上存在唯一的投影值测度 μ^A 满足
$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda \, \mathrm{d}\mu^A(\lambda).$$
4. 设 f 是 $\sigma(A)$ 上的可测函数，A 的泛函微积分有如下性质：
$$f(A) = \int_{\sigma(A)} f(\lambda) \, \mathrm{d}\mu^A(\lambda),$$
   (a) 若 f 是实函数，则 $f(A)$ 是自伴算符.
   (b) 若 f 有界，则 $f(A)$ 有界，有 $(f\cdot g)(A) = f(A)g(A)$ 且 $f^*(A) = f(A)^\dagger$.
5. 设 $|\psi\rangle$ 是单位向量，在 $\sigma(A)$ 的 Borel σ-代数上存在唯一的概率测度 $\mu^A_\psi = \langle\psi|\mu^A|\psi\rangle$ 满足
$$\int_{\mathbb{R}} \lambda^m \, \mathrm{d}\mu^A_\psi(\lambda) = \langle\psi|A^m|\psi\rangle, \quad \forall m \in \mathbb{N}^*.$$
6. 在 $\sigma(A)$ 的 Borel σ-代数上存在 σ-有限测度 μ，直积分空间 $\int^\oplus_{\sigma(A)} \mathcal{H}_\lambda \, \mathrm{d}\mu(\lambda)$ 和相应的酉映射 $U : \mathcal{H} \to \int^\oplus_{\sigma(A)} \mathcal{H}_\lambda \, \mathrm{d}\mu(\lambda)$ 满足
$$[UAU^\dagger(s)](\lambda) = \lambda s(\lambda), \quad \forall s \in U(\mathrm{Dom}(A)),$$
   其中 U 的值域为
$$U(\mathrm{Dom}(A)) = \left\{ s \in \int^\oplus_{\sigma(A)} \mathcal{H}_\lambda \, \mathrm{d}\mu(\lambda) : \int_{\sigma(A)} \|\lambda s(\lambda)\|^2 \, \mathrm{d}\mu(\lambda) < \infty \right\}.$$

本章我们详细地证明了自伴算符的有关性质，这里仅选取了部分具有代表性的结论，更多的讨论可以参见正文和参考文献.

3.5.2 量子力学基本算符的定义

如下定义的算符是自伴算符：

1. 乘法算符 $V(\hat{\boldsymbol{x}})\psi(\boldsymbol{x}) = V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}), \quad \mathrm{Dom}(V(\hat{\boldsymbol{x}})) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) | V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}.$

2. 位置算符 $\hat{x}_i\psi(\boldsymbol{x}) = x_i\psi(\boldsymbol{x})$, $\mathrm{Dom}(\hat{x}_i) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) | x_i\psi(\boldsymbol{x}) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$.

3. 动量算符 $\hat{p}_i\psi(\boldsymbol{x}) = \mathcal{F}^{-1}\{\hbar k_i\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\}$, $\mathrm{Dom}(\hat{p}_i) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) | k_i\hat{\psi}(\boldsymbol{k}) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$.

4. 动量算符 $\hat{p}_i\psi(\boldsymbol{x}) = -\mathrm{i}\hbar\, \partial\psi(\boldsymbol{x})/\partial x_i$, $\mathrm{Dom}(\hat{p}_i) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) |\, \partial\psi/\partial x_i \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$.

5. Laplace 算符 $\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}) = -\mathcal{F}^{-1}\{|\boldsymbol{k}|^2\hat{\psi}(\boldsymbol{k})\}$, $\mathrm{Dom}(\nabla^2) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) || \boldsymbol{k}|^2\hat{\psi}(\boldsymbol{k}) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$.

6. Hamilton 算符 $\hat{H} = \hat{\boldsymbol{p}}^2/(2m) + V(\hat{\boldsymbol{x}})$, $\mathrm{Dom}(\hat{H}) = \mathrm{Dom}(\nabla^2)$，若 $n \leqslant 3$，$V: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 可以分解为两个实可测函数 V_1, V_2 之和，满足 V_1 有界且 $V_2 \in L^2(\mathbb{R})$.

7. 时间演化算符 $U(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}$，若 Hamilton 算符是自伴算符.

8. 空间平移算符 $U_i(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{p}_i t/\hbar}$.

本章我们回顾了量子力学中基本的算符，并给出了这些算符自伴性的证明，希望读者可以对这些算符和简单量子系统的公理产生更深刻的认识.

第四章　角动量与自旋初探

在本章中，我们将会给出角动量的基本性质，并介绍自旋的基本概念．在这里，为了正确表述粒子自旋的概念，我们需要定义张量积的概念，并给出相应的性质，这也是我们之后讨论复合系统和全同粒子的基础．角动量和自旋在量子力学中非常重要，因为它们还和转动的对称性有关，我们以后将会进一步介绍有关概念．

§4.1　初识角动量算符

4.1.1　角动量算符的表达式

4.1.2　角动量算符的对易式

4.1.3　角动量算符的升降算符

§4.2　张量积

4.2.1　向量的张量积

在线性代数中，关于线性空间的张量积，我们有如下定义．

定义 4.1. 设 V_1, V_2, W 是域 F 上的线性空间，映射 $T: V_1 \times V_2 \to W$ 是双线性映射．若任取域 F 上的线性空间 U 和双线性映射 $\Phi: V_1 \times V_2 \to U$ 都存在唯一的线性映射 $\tilde{\Phi}: W \to U$，使得 $\Phi = \tilde{\Phi} \circ T$ 成立，就称 W 为 V_1 与 V_2 的一个张量积．

可以看出这个定义非常的抽象，但是明确了张量积满足的泛性质，下面我们从向量的张量积出发，逐步给出 Hilbert 空间张量积的具体构造．

定义 4.2. 设 $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$，定义 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 的张量积为映射

$$|\psi_1 \otimes \psi_2\rangle : \mathcal{H}_1^* \times \mathcal{H}_2^* \to \mathbb{C}, \quad \langle \phi_1, \phi_2| \mapsto \langle \phi_1|\psi_1\rangle\langle \phi_2|\psi_2\rangle. \tag{4.1}$$

任取 $\langle \phi_{11}|, \langle \phi_{12}| \in \mathcal{H}_1^*$，根据定义可以计算得到

$$\begin{aligned}\langle \lambda_1^*\phi_{11} + \lambda_2^*\phi_{12}, \phi_2|\psi_1 \otimes \psi_2\rangle &= \langle \lambda_1^*\phi_{11} + \lambda_2^*\phi_{12}|\psi_1\rangle\langle \phi_2|\psi_2\rangle \\ &= \lambda_1\langle \phi_{11}|\psi_1\rangle\langle \phi_2|\psi_2\rangle + \lambda_2\langle \phi_{12}|\psi_1\rangle\langle \phi_2|\psi_2\rangle \\ &= \lambda_1\langle \phi_{11}, \phi_2|\psi_1 \otimes \psi_2\rangle + \lambda_2\langle \phi_{12}, \phi_2|\psi_1 \otimes \psi_2\rangle,\end{aligned}$$

由此可以验证映射 $|\psi_1 \otimes \psi_2\rangle$ 是 $\mathcal{H}_1^* \times \mathcal{H}_2^*$ 上的双线性函数．

4.2.2 线性空间的张量积

现在我们利用向量的张量积构造一个线性空间，并证明这是在同构意义上唯一的张量积.

定义 4.3. 定义在全体 $\{|\psi_1\otimes\psi_2\rangle\}$ 中由有限个元素的线性组合构成的线性空间为

$$\mathcal{H}_1\odot\mathcal{H}_2=\operatorname{span}\{|\psi_1\otimes\psi_2\rangle:|\psi_1\rangle\in\mathcal{H}_1,|\psi_2\rangle\in\mathcal{H}_2\}. \tag{4.2}$$

对于两个张量积向量，可以定义内积

$$\langle\phi_1\otimes\phi_2|\psi_1\otimes\psi_2\rangle=\langle\phi_1|\psi_1\rangle\langle\phi_2|\psi_2\rangle, \tag{4.3}$$

这个定义可以线性延拓到 $\mathcal{H}_1\odot\mathcal{H}_2$ 上，从而使 $\mathcal{H}_1\odot\mathcal{H}_2$ 成为内积空间.

任取 $|\psi_{11}\rangle,|\psi_{12}\rangle\in\mathcal{H}_1$，根据定义可以计算得到

$$\begin{aligned}\langle\phi_1,\phi_2|(\lambda_1\psi_{11}+\lambda_2\psi_{12})\otimes\psi_2\rangle&=\langle\phi_1|\lambda_1\psi_{11}+\lambda_2\psi_{12}\rangle\langle\phi_2|\psi_2\rangle\\&=\lambda_1\langle\phi_1|\psi_{11}\rangle\langle\phi_2|\psi_2\rangle+\lambda_2\langle\phi_1|\psi_{12}\rangle\langle\phi_2|\psi_2\rangle\\&=\lambda_1\langle\phi_1,\phi_2|\psi_{11}\otimes\psi_2\rangle+\lambda_2\langle\phi_2,\phi_2|\psi_{12}\otimes\psi_2\rangle,\end{aligned}$$

由此以验证映射 $T:\mathcal{H}_1\times\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_1\odot\mathcal{H}_2,|\psi_1,\psi_2\rangle\mapsto|\psi_1\otimes\psi_2\rangle$ 是双线性映射.

关于 $\mathcal{H}_1\odot\mathcal{H}_2$ 中的零元素，我们有如下关系.

引理 4.1. 设 $\Phi:\mathcal{H}_1\times\mathcal{H}_2\to U$ 是双线性映射，有

$$\sum_{i=1}^{n}|\psi_{1i}\otimes\psi_{2i}\rangle=0\Rightarrow\sum_{i=1}^{n}\Phi|\psi_{1i},\psi_{2i}\rangle=0.$$

证明. 设 $\{|e_j\rangle\}_{j=1}^{m}$ 是 $\operatorname{span}\{|\psi_{1i}\rangle\}_{i=1}^{n}$ 的标准正交基，有

$$\sum_{i=1}^{n}|\psi_{1i}\otimes\psi_{2i}\rangle=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}|e_j\otimes\psi_{2i}\rangle\langle e_j|\psi_{1i}\rangle=\sum_{j=1}^{m}|e_j\otimes\psi'_{2j}\rangle=0,$$

这里 $|\psi'_{2j}\rangle$ 是对 i 求和的结果. 将向量取范数得到

$$\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{m}\langle e_j\otimes\psi'_{2j}|e_k\otimes\psi'_{2k}\rangle=\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{m}\langle e_j|e_k\rangle\langle\psi'_{2j}|\psi'_{2k}\rangle=\sum_{j=1}^{m}\|\psi'_{2j}\|^2=0,$$

于是 $|\psi'_{2j}\rangle=0$，根据双线性映射的性质有 $\Phi|e_j,\psi'_{2j}\rangle=0$，因此

$$\sum_{i=1}^{n}\Phi|\psi_{1i},\psi_{2i}\rangle=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\Phi|e_j,\psi_{2i}\rangle\langle e_j|\psi_{1i}\rangle=\sum_{j=1}^{m}\Phi|e_j,\psi'_{2j}\rangle=0.$$

□

命题 4.2. $\mathcal{H}_1\odot\mathcal{H}_2$ 是 $\mathcal{H}_1$ 与 $\mathcal{H}_2$ 在线性空间意义上的张量积.

证明. 任取复数域 $\mathbb{C}$ 上的线性空间 U 和双线性映射 $\Phi:\mathcal{H}_1\times\mathcal{H}_2\to U$，定义线性映射

$$\tilde{\Phi}:\mathcal{H}_1\odot\mathcal{H}_2\to U,\quad|\psi\rangle=\sum_{i=1}^{n}|\psi_{1i}\otimes\psi_{2i}\rangle\mapsto\sum_{i=1}^{n}\Phi|\psi_{1i},\psi_{2i}\rangle.$$

根据引理有 $\tilde{\Phi}$ 良定义.

下证 $\tilde{\Phi}$ 唯一. 设线性映射 $\tilde{\Phi}':\mathcal{H}_1\odot\mathcal{H}_2\to U$ 也满足 $\Phi=\tilde{\Phi}\circ T$，有

$$\tilde{\Phi}'|\psi\rangle=\sum_{i=1}^{n}\tilde{\Phi}'|\psi_{1i}\otimes\psi_{2i}\rangle=\sum_{i=1}^{n}\Phi|\psi_{1i},\psi_{2i}\rangle=\tilde{\Phi}|\psi\rangle,$$

于是 $\tilde{\Phi}'=\tilde{\Phi}$，因此 $\tilde{\Phi}$ 唯一. 根据线性空间张量积的定义有命题成立. □

命题 4.3. *$\mathcal{H}_1$ 与 $\mathcal{H}_2$ 在线性空间意义上的张量积唯一.*

证明. 设 W_1, W_2 是 $\mathcal{H}_1$ 与 $\mathcal{H}_2$ 在线性空间意义上的两个张量积. 分别将 W_2, W_1 作为U，存在唯一的线性映射 $\tilde{\Phi}_1, \tilde{\Phi}_2$ 满足 $T_2 = \tilde{\Phi}_1 \circ T_1$ 和 $T_1 = \tilde{\Phi}_2 \circ T_2$，于是

$$T_2 = \tilde{\Phi}_1 \circ \tilde{\Phi}_2 \circ T_2, \quad T_1 = \tilde{\Phi}_2 \circ \tilde{\Phi}_1 \circ T_1,$$

再分别将 W_1, W_2 本身作为 U，由于恒同映射是到自身的线性映射，由映射的唯一性有

$$\tilde{\Phi}_1 \circ \tilde{\Phi}_2 = \mathrm{id}_2, \quad \tilde{\Phi}_2 \circ \tilde{\Phi}_1 = \mathrm{id}_1,$$

于是 $\tilde{\Phi}_1, \tilde{\Phi}_2$ 是同构映射，因此张量积在同构的意义上唯一. □

4.2.3 态空间的张量积

由于 $\mathcal{H}_1 \odot \mathcal{H}_2$ 只考虑了有限的线性组合，因此 $\mathcal{H}_1 \odot \mathcal{H}_2$ 不是完备的，因而不是 Hilbert 空间. 为了使得两个 Hilbert 空间的张量积仍是 Hilbert 空间，下面我们正式给出态空间张量积的定义.

定义 4.4. *设 $\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$ 是两个态空间，$\mathcal{H}_1 \odot \mathcal{H}_2$ 是 $\mathcal{H}_1$ 与 $\mathcal{H}_2$ 在线性空间意义上的张量积，定义 $\mathcal{H}_1$ 与 $\mathcal{H}_2$ 的张量积为 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \overline{\mathcal{H}_1 \odot \mathcal{H}_2}$.*

命题 4.4. *设 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ 和 $\{|f_j\rangle\}_{j=1}^{\infty}$ 分别是 $\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$ 的标准正交基，有 $\{|e_i \otimes f_j\rangle\}_{i,j=1}^{\infty}$ 是 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 的标准正交基.*

证明. 根据 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 上内积的定义可以验证 $\{|e_i \otimes f_j\rangle\}_{i,j=1}^{\infty}$ 是标准正交集.

下证任取 $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$ 都有 $|\psi\rangle = |\psi_1 \otimes \psi_2\rangle \in \overline{\mathrm{span}\{|e_i \otimes f_j\rangle\}_{i,j=1}^{\infty}}$. 设

$$|\psi_{1n}\rangle = \sum_{i=n}^{\infty} |e_i\rangle\langle e_i|\psi_1\rangle, \quad |\psi_{2m}\rangle = \sum_{j=m}^{\infty} |f_j\rangle\langle f_j|\psi_2\rangle,$$

由于 $|\psi_{n,m}\rangle = |(\psi_1 - \psi_{1n}) \otimes (\psi_2 - \psi_{2m})\rangle \in \mathrm{span}\{|e_i \otimes f_j\rangle\}_{i,j=1}^{\infty}$，取极限有

$$\begin{aligned}
\lim_{n,m\to\infty} \|\psi_{n,m} - \psi\| &= \lim_{n,m\to\infty} \|\psi_{1n} \otimes \psi_{2m} - \psi_{1n} \otimes \psi_2 - \psi_1 \otimes \psi_{2m}\| \\
&\leqslant \lim_{n,m\to\infty} (\|\psi_{1n} \otimes \psi_{2m}\| + \|\psi_{1n} \otimes \psi_2\| + \|\psi_1 \otimes \psi_{2m}\|) \\
&= \lim_{n,m\to\infty} (\|\psi_{1n}\|\|\psi_{2m}\| + \|\psi_{1n}\|\|\psi_2\| + \|\psi_1\|\|\psi_{2m}\|) = 0,
\end{aligned}$$

于是 $|\psi\rangle$ 可以被 $|\psi_{n,m}\rangle$ 逼近，因此 $|\psi\rangle \in \overline{\mathrm{span}\{|e_i \otimes f_j\rangle\}_{i,j=1}^{\infty}}$.

现在得到 $\mathcal{H}_1 \odot \mathcal{H}_2 \subset \overline{\mathrm{span}\{|e_i \otimes f_j\rangle\}_{i,j=1}^{\infty}}$，而 $\mathrm{span}\{|e_i \otimes f_j\rangle\}_{i,j=1}^{\infty} \subset \mathcal{H}_1 \odot \mathcal{H}_2$，取闭包就有 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \overline{\mathrm{span}\{|e_i \otimes f_j\rangle\}_{i,j=1}^{\infty}}$，因此 $\{|e_i \otimes f_j\rangle\}_{i,j=1}^{\infty}$ 是 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 的标准正交基. □

4.2.4 线性算符的张量积

根据向量和态空间的张量积，我们可以定义线性算符的张量积.

定义 4.5. *设 $A_1 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1), A_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$，将 $\mathcal{H}_1 \odot \mathcal{H}_2$ 自身作为 U，有双线性映射*

$$\Phi : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1 \odot \mathcal{H}_2, \quad |\psi_1, \psi_2\rangle \mapsto |A_1\psi_1 \otimes A_2\psi_2\rangle,$$

根据线性空间张量积的定义，存在唯一的线性算符 $A:\mathcal{H}_1\odot\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_1\odot\mathcal{H}_2$ 满足

$$A|\psi_1\otimes\psi_2\rangle=\Phi|\psi_1,\psi_2\rangle=|A_1\psi_1\otimes A_2\psi_2\rangle, \tag{4.4}$$

定义 A_1 与 A_2 的张量积为 A，记作 $A=A_1\otimes A_2$.

关于张量积算符的乘法，我们有如下关系.

引理 4.5. 设 $A_1,B_1\in\mathcal{B}(\mathcal{H}_1),A_2,B_2\in\mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$，有 $(A_1\otimes A_2)(B_1\otimes B_2)=A_1B_1\otimes A_2B_2$.

证明. 任取 $|\psi_1\rangle\in\mathcal{H}_1,|\psi_2\rangle\in\mathcal{H}_2$，根据定义计算得到

$$(A_1\otimes A_2)(B_1\otimes B_2)|\psi_1\otimes\psi_2\rangle=(A_1\otimes A_2)|B_1\psi_1\otimes B_2\psi_2\rangle=|A_1B_1\psi_1\otimes A_2B_2\psi_2\rangle,$$

而 $A_1B_1\otimes A_2B_2$ 是唯一满足这个关系的算符，因此 $(A_1\otimes A_2)(B_1\otimes B_2)=A_1B_1\otimes A_2B_2$. □

命题 4.6. 设 $A_1\in\mathcal{B}(\mathcal{H}_1),A_2\in\mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$，有 $\|A_1\otimes A_2\|=\|A_1\|\|A_2\|$，于是可以将 $A_1\otimes A_2$ 的定义域延拓到 $\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ 上.

证明. 利用 $A_1\otimes A_2=(A_1\otimes I)(I\otimes A_2)$，下证 $\|I\otimes A_2\|\leqslant\|A_2\|$. 任取

$$|\psi\rangle=\sum_{i=1}^{n}|\psi_{1i}\otimes\psi_{2i}\rangle,$$

设 $\{|e_j\rangle\}_{j=1}^m$ 是 $\mathrm{span}\{|\psi_{1i}\rangle\}_{i=1}^n$ 的标准正交基，有

$$|\psi\rangle=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}|e_j\otimes\psi_{2i}\rangle\langle e_j|\psi_{1i}\rangle=\sum_{j=1}^{m}|e_j\otimes\psi'_{2j}\rangle,\quad (I\otimes A_2)|\psi\rangle=\sum_{j=1}^{m}|e_j\otimes A_2\psi'_{2j}\rangle,$$

这里 $|\psi'_{2j}\rangle$ 是对 i 求和的结果. 将向量取范数得到

$$\|(I\otimes A_2)\psi\|^2=\sum_{j=1}^{m}\|A_2\psi'_{2j}\|^2\leqslant\sum_{j=1}^{m}\|A_2\|^2\|\psi'_{2j}\|^2=\|A_2\|^2\|\psi\|^2,$$

于是 $\|I\otimes A_2\|\leqslant\|A_2\|$，同理 $\|A_1\otimes I\|\leqslant\|A_1\|$，这就有

$$\|A_1\otimes A_2\|\leqslant\|A_1\otimes I\|\|I\otimes A_2\|\leqslant\|A_1\|\|A_2\|.$$

任取 $|\psi_1\rangle\in\mathcal{H}_1,|\psi_2\rangle\in\mathcal{H}_2$，可以得到

$$\frac{\|A_1\psi_1\|}{\|\psi_1\|}\frac{\|A_2\psi_2\|}{\|\psi_2\|}=\frac{\|A_1\psi_1\otimes A_2\psi_2\|}{\|\psi_1\otimes\psi_2\|}=\frac{\|(A_1\otimes A_2)(\psi_1\otimes\psi_2)\|}{\|\psi_1\otimes\psi_2\|}\leqslant\|A_1\otimes A_2\|,$$

取上确界即可得到 $\|A_1\|\|A_2\|\leqslant\|A_1\otimes A_2\|$，因此 $\|A_1\otimes A_2\|=\|A_1\|\|A_2\|$. □

§4.3 电子的自旋

§4.4 角动量的耦合

§4.5 本章小结

第五章　三维问题的求解

第六章　一般量子系统

在本章中，我们将会介绍多粒子系统和全同粒子系统中的基本概念，并给出一般量子系统的公理．在这里，为了利用算符表示更一般的量子系统的状态，我们将会引入更多类型的线性算符，并给出相应的性质，对证明不感兴趣的读者可以只关注相应命题的表述．

§6.1　更多线性算符

6.1.1　有限秩算符

在简单量子系统中，我们用态空间 $\mathcal{H}$ 中的单位向量 $|\psi\rangle$ 表示系统的状态，而所有共线单位向量表示的态相同，这就给向量的相位提供了一个自由度．现在我们想用算符 ρ 表示系统的状态，并消除相位的不确定性，可以想到一个合适的选择是

$$\rho|\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle, \quad \forall|\phi\rangle \in \mathcal{H},$$

可以验证这个定义与相位无关

$$|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\psi\rangle\langle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\psi|\phi\rangle = |\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}|^2|\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle, \quad \forall|\phi\rangle \in \mathcal{H},$$

记 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$，可以看出这是到一维线性子空间 $\operatorname{span}\{|\psi\rangle\}$ 的正交投影算符．

定义 6.1. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，若 $\dim \operatorname{Ran}(A) < \infty$，就称 A 为有限秩算符．

关于有界线性算符是有限秩算符的条件，我们有如下定理．

定理 6.1. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 A 是有限秩算符的充要条件是存在 $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^n, \{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^n \subset \mathcal{H}$ 满足

$$A = \sum_{i=1}^n |\phi_i\rangle\langle\psi_i|. \tag{6.1}$$

证明. 设存在序列满足条件，则 $\operatorname{Ran}(A) = \operatorname{span}\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^n$，因此 $\dim \operatorname{Ran}(A) < \infty$．

设 A 有限秩，取 $\operatorname{Ran}(A)$ 的标准正交基 $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^n$，任取 $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$，存在线性泛函 $\{f_i\}_{i=1}^n$ 使得

$$A|\chi\rangle = \sum_{i=1}^n f_i(\chi)|\phi_i\rangle,$$

根据 $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^n$ 的标准正交性可以得到

$$|f_i(\chi)|^2 \leqslant \sum_{i=1}^n |f_i(\chi)|^2 = \|A\chi\|^2 \leqslant \|A\|^2\|\chi\|^2,$$

因此 f_i 是有界线性泛函，存在对应的 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^n \subset \mathcal{H}$ 满足条件．　□

根据这个定理，我们可以得到有限秩算符的性质.

命题 6.2. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是有限秩算符，有如下性质：

1. 有限秩算符全体构成线性空间；
2. $A^\dagger$ 是有限秩算符；
3. 任取 $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 AB 和 BA 是有限秩算符.

证明. 利用有限秩算符的表示即可. □

6.1.2 紧算符

由于有限秩算符只考虑了有限的求和，因此有限秩算符空间不是 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 的闭线性子空间. 为了得到相应的推广，下面我们我们考虑有限秩算符空间在算符范数下的完备化空间.

定义 6.2. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，若对任意有界集 $E \subset \mathcal{H}$ 都有 $\overline{A(E)}$ 是紧集，就称 A 为紧算符.

关于有限秩算符和紧算符之间的关系，我们有如下命题.

命题 6.3. 有限秩算符空间在紧算符空间中稠密.

证明. 设 A 是有限秩算符，E 是有界集，有 $\overline{A(E)}$ 是有限维空间中的有界闭集，因此是紧集.

设 A 是紧算符，E 是有界集，任取 $\varepsilon > 0$，由有限覆盖定理，存在 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^n \subset \mathcal{H}$ 满足

$$\overline{A(E)} \subset \bigcup_{i=1}^n B_{\varepsilon/2}(\psi_i),$$

其中 $B_{\varepsilon/2}(\psi_i)$ 是以 $|\psi_i\rangle$ 为球心，半径为 $\varepsilon/2$ 的开球，于是对任意 $|\psi\rangle \in E$ 都存在 $|\psi_i\rangle$ 满足

$$\|A\psi - \psi_i\| < \frac{\varepsilon}{2}.$$

设 P_ε 为到 $\mathrm{span}\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^n$ 的正交投影算符，有 P_ε 是有限秩算符，且满足

$$\|P_\varepsilon A\psi - \psi_i\| = \|P_\varepsilon(A\psi - \psi_i)\| < \|A\psi - \psi_i\| < \frac{\varepsilon}{2},$$

根据不等式 $\|(P_\varepsilon A - A)\psi\| \leqslant \|P_\varepsilon A\psi - \psi_i\| + \|A\psi - \psi_i\|$，不妨设 $\|\psi\| = 1$，可以得到

$$\|P_\varepsilon A - A\| = \sup_{\|\psi\|=1} \|(P_\varepsilon A - A)\psi\| \leqslant \varepsilon,$$

由于 $P_\varepsilon A$ 也是有限秩算符，于是 A 可以被 $P_\varepsilon A$ 逼近，因此此命题成立. □

根据这个命题，我们可以得到紧算符的性质.

命题 6.4. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是紧算符，有如下性质：

1. 紧算符全体构成线性空间；
2. $A^\dagger$ 是紧算符；
3. 任取 $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 AB 和 BA 是紧算符.

证明. 设有限秩算符序列 $\{A_n\}$ 收敛到 A.

对于第一条性质，设有限秩算符序列 $\{B_n\}$ 收敛到 B，利用 $\|A+B\| \leqslant \|A\|+\|B\|$ 有

$$\lim_{n\to\infty} \|(\alpha A_n+\beta B_n)-(\alpha A+\beta B)\| = 0.$$

对于第二条性质，由于 $A_n^\dagger$ 也是有限秩算符，利用 $\|A^\dagger\| = \|A\|$有

$$\lim_{n\to\infty} \|A_n^\dagger - A^\dagger\| = \lim_{n\to\infty} \|A_n - A\| = 0.$$

对于第三条性质，由于 A_nB 和 BA_n 也是有限秩算符，利用 $\|AB\| \leqslant \|A\|\|B\|$有

$$\lim_{n\to\infty} \|A_nB - AB\| = \lim_{n\to\infty} \|BA_n - BA\| = 0.$$ □

对于自伴的紧算符，我们有如下重要定理.

定理 6.5 (Hilbert-Schmidt 定理[1]). *若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是紧自伴算符，则存在至多可数的只可能以零为聚点的特征值序列 $\{\lambda_i\}$，满足对应的特征向量 $\{|e_i\rangle\}$ 构成标准正交基. 如果将 A 的特征值按绝对值从大到小排序，则 A 可以表示为*

$$A = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i|, \tag{6.2}$$

这可以看作自伴算符谱定理第一形式的离散版本.

6.1.3 Hilbert-Schmidt 算符

设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是紧算符，有 $A^\dagger A$ 是非负紧自伴算符，下面我们讨论这个算符.

引理 6.6. *设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，对任意两组标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}, \{|f_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ 都有*

$$\sum_{i=1}^{\infty} \|Ae_i\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \|A^\dagger e_i\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \|Af_i\|^2.$$

证明. 利用 Parseval 等式得到

$$\sum_{i=1}^{\infty} \|Ae_i\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} |\langle f_j|Ae_i\rangle|^2 = \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} |\langle A^\dagger f_j|e_i\rangle|^2 = \sum_{j=1}^{\infty} \|A^\dagger f_j\|^2,$$

取 $|f_i\rangle = |e_i\rangle$ 即可得到第一个等式，交换 $|f_i\rangle$ 和 $|e_i\rangle$ 的位置即可得到第二个等式. □

定义 6.3. *设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，若存在标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ 使得*

$$\sum_{i=1}^{\infty} \|Ae_i\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i|A^\dagger A|e_i\rangle < \infty,$$

就称 A 为 Hilbert-Schmidt 算符，对两个 Hilbert-Schmidt 算符可以定义内积

$$\langle A|B\rangle_{HS} = \sum_{i=1}^{\infty} \langle Ae_i|Be_i\rangle, \tag{6.3}$$

根据极化恒等式可以得到内积与标准正交基的选择无关.

[1] [4]定理3.4.8.

关于有限秩算符和 Hilbert-Schmidt 算符之间的关系，我们有如下命题.

命题 6.7. *有限秩算符空间关于范数 $\|\cdot\|_{HS}$ 在 Hilbert-Schmidt 算符空间中稠密.*

证明. 设 A 是有限秩算符，有 $A^\dagger A$ 也是有限秩算符，因此 $\|A\|_{HS}$ 只包含有限项求和.

设 A 是 Hilbert-Schmidt 算符，取标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$，设

$$A_n = \sum_{i=1}^{n} A|e_i\rangle\langle e_i|,$$

有 A_n 是有限秩算符，可以得到

$$\lim_{n\to\infty} \|A_n - A\|_{HS}^2 = \lim_{n\to\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \|(A_n - A)e_j\|^2 = \lim_{n\to\infty} \sum_{j=n+1}^{\infty} \|Ae_j\|^2 = 0,$$

于是 A 可以被 A_n 逼近，因此命题成立. □

根据这个命题，我们可以得到 Hilbert-Schmidt 算符的性质.

命题 6.8. *设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是 Hilbert-Schmidt 算符，有如下性质：*

1. *Hilbert-Schmidt 算符全体构成线性空间；*
2. *$A^\dagger$ 是 Hilbert-Schmidt 算符；*
3. *任取 $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 AB 和 BA 是 Hilbert-Schmidt 算符.*

证明. 对于第一条性质，利用范数的定义 $\|A+B\|_{HS} \leqslant \|A\|_{HS} + \|B\|_{HS}$ 即可.

对于第二条性质，利用上面的引理 $\|A^\dagger\|_{HS} = \|A\|_{HS}$ 即可.

对于第三条性质，利用下面的不等式即可

$$\|BA\|_{HS}^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \|BAe_i\|^2 \leqslant \sum_{i=1}^{\infty} \|B\|^2 \|Ae_i\|^2 = \|B\|^2 \|A\|_{HS}^2,$$

相对地有 $\|AB\|_{HS} = \|B^\dagger A^\dagger\|_{HS} \leqslant \|B^\dagger\| \|A^\dagger\|_{HS} = \|A\|_{HS} \|B\|$. □

事实上，Hilbert-Schmidt 算符空间是完备空间.

命题 6.9. *Hilbert-Schmidt 算符空间关于内积 $\langle\cdot|\cdot\rangle_{HS}$ 构成 Hilbert 空间.*

证明. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是 Hilbert-Schmidt 算符，任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$，利用 Parseval 等式有

$$\|A\psi\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle e_i|A\psi\rangle|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle A^\dagger e_i|\psi\rangle|^2 \leqslant \sum_{i=1}^{\infty} \|A^\dagger e_i\|^2 \|\psi\|^2 = \|A\|_{HS}^2 \|\psi\|^2,$$

由此可以得到两个算符范数之间的关系 $\|A\| \leqslant \|A\|_{HS}$.

设 Hilbert-Schmidt 算符序列 $\{A_n\}$ 是 Cauchy 列，有 $\{A_n\}$ 关于 $\|\cdot\|$ 也是 Cauchy 列. 设 $\{A_n\}$ 依 $\|\cdot\|$ 收敛到 A，任取 $\varepsilon > 0$，存在 $N \in \mathbb{N}^*$ 使得对任意 $n, m > N$ 都有

$$\sum_{i=1}^{k} \|(A_n - A_m)e_i\|^2 < \|A_n - A_m\|_{HS}^2 < \varepsilon^2,$$

先取 $m \to \infty$，再取 $k \to \infty$，可以得到

$$\sum_{i=1}^{\infty} \|(A_n - A)e_i\|^2 \leqslant \varepsilon^2,$$

因此 A 是 Hilbert-Schmidt 算符且 $\{A_n\}$ 依 $\|\cdot\|_{HS}$ 收敛到 A. □

关于有界线性算符是 Hilbert-Schmidt 算符的条件，我们有如下定理.

定理 6.10. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 A 是 *Hilbert-Schmidt* 算符的充要条件是 A 是紧算符，且 $\sqrt{A^\dagger A}$ 的全体特征值 $\{\lambda_i\}_{i=1}^\infty$ 满足

$$\sum_{i=1}^\infty \lambda_i^2 < \infty.$$

证明. 设 A 是紧算符，有 $A^\dagger A$ 是非负紧自伴算符，由泛函微积分可以定义 $\sqrt{A^\dagger A}$. 设特征值满足条件，取特征向量作为标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^\infty$，可以得到

$$\|A\|_{HS}^2 = \sum_{i=1}^\infty \langle e_i|A^\dagger A|e_i\rangle = \sum_{i=1}^\infty \lambda_i^2 < \infty.$$

设 A 是 Hilbert-Schmidt 算符，取有限秩算符序列 $\{A_n\}$ 依 $\|\cdot\|_{HS}$ 收敛到 A，有

$$\lim_{n\to\infty} \|A_n - A\| \leqslant \lim_{n\to\infty} \|A_n - A\|_{HS} = 0,$$

于是 A 是紧算符，同样由上面的等式得到特征值满足条件. □

6.1.4 迹类算符

设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是紧算符，由泛函微积分有 $\sqrt{A^\dagger A}$ 也是紧自伴算符，下面我们讨论这个算符.

引理 6.11. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是非负自伴算符，对任意两组标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^\infty, \{|f_i\rangle\}_{i=1}^\infty$ 都有

$$\sum_{i=1}^\infty \langle e_i|A|e_i\rangle = \sum_{i=1}^\infty \langle f_i|A|f_i\rangle.$$

证明. 利用推广的 Parseval 等式得到

$$\sum_{i=1}^\infty \langle e_i|A|e_i\rangle = \sum_{i=1}^\infty \sum_{j=1}^\infty \langle e_i|A|f_j\rangle\langle f_j|e_i\rangle = \sum_{i=1}^\infty \sum_{j=1}^\infty \langle f_j|e_i\rangle\langle e_i|A|f_j\rangle = \sum_{j=1}^\infty \langle f_j|A|f_j\rangle.$$ □

定义 6.4. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，若存在标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^\infty$ 使得

$$\sum_{i=1}^\infty \langle e_i|\sqrt{A^\dagger A}|e_i\rangle < \infty,$$

就称 A 为迹类算符，对迹类算符可以定义范数

$$\operatorname{tr}(|A|) = \sum_{i=1}^\infty \langle e_i|\sqrt{A^\dagger A}|e_i\rangle. \tag{6.4}$$

可以得到范数与标准正交基的选择无关，之后我们会验证这满足范数的定义.

为了简化记号，下面记 $|A| = \sqrt{A^\dagger A}$，我们有如下重要定理.

定理 6.12 (极分解定理). 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，则存在唯一的 $U \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 使得 $A = U|A|$，满足

$$\|U\psi\| = \|\psi\|, \quad \forall|\psi\rangle \in [\ker(U)]^\perp,$$

且 $\ker(U) = \ker(A), \operatorname{Ran}(U) = \overline{\operatorname{Ran}(A)}$，在这种情况下有 $|A| = U^\dagger A$.

证明. 任取 $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$，利用泛函微积分的性质有

$$\||A|\phi\|^2 = \langle \phi||A|^2\phi\rangle = \langle \phi|A^\dagger A\phi\rangle = \|A\phi\|^2,$$

于是 $\ker(|A|) = \ker(A)$，映射 $\mathrm{Ran}(|A|) \to \mathrm{Ran}(A), |A||\phi\rangle \mapsto A|\phi\rangle$ 有良好定义，可以得到

$$[\mathrm{Ran}(|A|)]^\perp = \ker(|A|^\dagger) = \ker(|A|) = \ker(A).$$

将这个映射延拓到 $\overline{\mathrm{Ran}(|A|)} \to \overline{\mathrm{Ran}(A)}$ 上，任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$，由正交分解定理有

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + |\psi'\rangle, \quad |\psi_0\rangle \in \overline{\mathrm{Ran}(|A|)}, |\psi'\rangle \in \ker(A),$$

定义 U 在 $|\psi_0\rangle$ 上的作用为上面的映射，在 $|\psi'\rangle$ 上的作用为零，可以验证命题成立. □

关于 Hilbert-Schmidt 算符和迹类算符之间的关系，我们有如下定理.

定理 6.13. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 A 是迹类算符的充要条件是存在 *Hilbert-Schmidt* 算符 B, C 使得 $A = BC$. 特别地，迹类算符是 *Hilbert-Schmidt* 算符.

证明. 设 B, C 是 Hilbert-Schmidt 算符，有极分解 $BC = U|BC|$，可以得到

$$\|B^\dagger U\|_{HS} \leqslant \|B^\dagger\|_{HS}\|U\| = \|B\|_{HS},$$

利用 Cauchy-Schwarz 不等式可以得到

$$\mathrm{tr}(|BC|) = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle e_i|U^\dagger BCe_i\rangle| = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle B^\dagger Ue_i|Ce_i\rangle| \leqslant \sum_{i=1}^{\infty} \|B^\dagger Ue_i\|\|Ce_i\|,$$

利用 Cauchy 不等式可以得到

$$[\mathrm{tr}(|BC|)]^2 \leqslant \sum_{i=1}^{\infty} \|B^\dagger Ue_i\|^2 \sum_{i=1}^{\infty} \|Ce_i\|^2 = \|B^\dagger U\|_{HS}\|C\|_{HS} \leqslant \|B\|_{HS}^2\|C\|_{HS}^2,$$

因此 $A = BC$ 是迹类算符.

设 A 是迹类算符，有极分解 $A = U|A|$，根据 $\|\cdot\|_{HS}$ 和 $\mathrm{tr}(|\cdot|)$ 的定义有

$$\|U\sqrt{|A|}\|_{HS} \leqslant \|\sqrt{|A|}\|_{HS}, \quad \|\sqrt{|A|}\|_{HS}^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \|\sqrt{|A|}e_i\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i|\sqrt{A^\dagger A}|e_i\rangle = \mathrm{tr}(|A|),$$

于是 $U\sqrt{|A|}$ 和 $\sqrt{|A|}$ 是 Hilbert-Schmidt 算符. □

关于有界线性算符是迹类算符的条件，我们有如下定理.

命题 6.14. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 A 是迹类算符的充要条件是 A 是紧算符，且 $\sqrt{A^\dagger A}$ 的全体特征值 $\{\lambda_i\}_{i=1}^\infty$ 满足

$$\sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i < \infty.$$

证明. 设 A 是紧算符且特征值满足条件，取特征向量作为标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^\infty$，可以得到

$$\mathrm{tr}(|A|) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i|\sqrt{A^\dagger A}|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i < \infty.$$

设 A 是迹类算符，有 A 是 Hilbert-Schmidt 算符，同样可以得到特征值满足条件. □

关于有限秩算符和迹类算符之间的关系，我们有如下命题.

命题 6.15. 有限秩算符空间关于范数 $\mathrm{tr}(|\cdot|)$ 在迹类算符空间中稠密.

证明. 设 A 是有限秩算符，有 $|A|$ 也是有限秩算符，因此 $\mathrm{tr}(|A|)$ 只包含有限项求和.
设 A 是迹类算符，有极分解 $A = U|A|$，取特征向量作为标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$，设

$$A_n = \sum_{i=1}^{n} A|e_i\rangle\langle e_i| = \sum_{i=1}^{n} U|A||e_i\rangle\langle e_i| = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i U|e_i\rangle\langle e_i|,$$

有 A_n 是有限秩算符，设极分解 $A_n - A = U_n|A_n - A|$ 可以得到

$$\mathrm{tr}(|A_n - A|) = \sum_{j=1}^{\infty} |\langle e_j|U_n^\dagger(A_n - A)e_j\rangle| = \sum_{j=n+1}^{\infty} \lambda_j |\langle U_n e_j|U e_j\rangle| \leqslant \sum_{j=n+1}^{\infty} \lambda_j$$

于是 A 可以被 A_n 逼近，因此命题成立. □

根据这个命题，我们可以得到迹类算符的性质.

命题 6.16. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是迹类算符，有如下性质：

1. 迹类算符全体构成线性空间；
2. $A^\dagger$ 是迹类算符；
3. 任取 $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有 AB 和 BA 是迹类算符.

证明. 对于第一条性质，由极分解 $A = U|A|$，$B = V|B|$ 和 $A + B = W|A + B|$ 可以得到

$$\mathrm{tr}(|A + B|) = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle e_i|W^\dagger(A + B)e_i\rangle| \leqslant \sum_{i=1}^{\infty} |\langle e_i|W^\dagger A e_i\rangle| + \sum_{i=1}^{\infty} |\langle e_i|W^\dagger B e_i\rangle|,$$

利用 Cauchy-Schwarz 不等式和 Cauchy 不等式可以得到

$$\sum_{i=1}^{\infty} |\langle e_i|W^\dagger A e_i\rangle| = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle \sqrt{|A|}U^\dagger W e_i|\sqrt{|A|}e_i\rangle| \leqslant \|\sqrt{|A|}U^\dagger W\|_{HS}\|\sqrt{|A|}\|_{HS},$$

根据 $\|\cdot\|_{HS}$ 的性质可以得到

$$\|\sqrt{|A|}U^\dagger W\|_{HS}\|\sqrt{|A|}\|_{HS} \leqslant \|\sqrt{|A|}\|_{HS}\|U^\dagger\|\|W\|\|\sqrt{|A|}\|_{HS} = \|\sqrt{|A|}\|_{HS}^2 = \mathrm{tr}(|A|),$$

因此范数满足定义 $\mathrm{tr}(|A + B|) \leqslant \mathrm{tr}(|A|) + \mathrm{tr}(|B|)$.

对于第二条性质，由极分解 $A = U|A|$，于是 $A^\dagger = |A|U^\dagger = \sqrt{|A|}(U\sqrt{|A|})^\dagger$，可以得到

$$\mathrm{tr}(|A^\dagger|) \leqslant \|\sqrt{|A|}\|_{HS}\|U\sqrt{|A|}\|_{HS} \leqslant \|\sqrt{|A|}\|_{HS}\|U\|\|\sqrt{|A|}\|_{HS} = \|\sqrt{|A|}\|_{HS}^2 = \mathrm{tr}(|A|)$$

相对地有 $\mathrm{tr}(|A|) = \mathrm{tr}(|(A^\dagger)^\dagger|) \leqslant \mathrm{tr}(|A^\dagger|)$，因此 $\mathrm{tr}(|A^\dagger|) = \mathrm{tr}(|A|)$.

对于第三条性质，由极分解 $A = U|A|$，于是 $BA = BU\sqrt{|A|}\sqrt{|A|}$，可以得到

$$\mathrm{tr}(|BA|) \leqslant \|BU\sqrt{|A|}\|_{HS}\|\sqrt{|A|}\|_{HS} \leqslant \|B\|\|U\|\|\sqrt{|A|}\|_{HS}\|\sqrt{|A|}\|_{HS} \leqslant \|B\|\,\mathrm{tr}(|A|),$$

相对地有 $\mathrm{tr}(|AB|) = \mathrm{tr}(|B^\dagger A^\dagger|) \leqslant \|B^\dagger\|\,\mathrm{tr}(|A^\dagger|) = \mathrm{tr}(|A|)\|B\|$. □

事实上，迹类算符空间是完备空间.

命题 6.17. 迹类算符空间关于范数 $\operatorname{tr}(|\cdot|)$ 构成 *Banach* 空间.

证明. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是迹类算符，取特征向量作为标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$，利用基本不等式有

$$\|A\|_{HS}^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^2 \leqslant \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i = [\operatorname{tr}(|A|)]^2,$$

由此可以得到三个算符范数之间的关系 $\|A\| \leqslant \|A\|_{HS} \leqslant \operatorname{tr}(|A|)$.

注意到等式 $\|\sqrt{|A|}\|_{HS}^2 = \operatorname{tr}(|A|)$，利用相同的方法即可. □

对于迹类算符，我们可以定义算符的迹.

引理 6.18. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是迹类算符，对任意两组标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}, \{|f_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ 都有

$$\sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i|A|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle f_i|A|f_i\rangle.$$

证明. 为了使用级数重排，需要证明级数绝对收敛. 由极分解 $A = U|A|$ 和不等式可以得到

$$\sum_{i=1}^{\infty} |\langle e_i|A|e_i\rangle| = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle \sqrt{|A|}U^\dagger e_i|\sqrt{|A|}e_i\rangle| \leqslant \|\sqrt{|A|}U^\dagger\|_{HS}\|\sqrt{|A|}\|_{HS} \leqslant \operatorname{tr}(|A|).$$ □

定义 6.5. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是迹类算符，定义 A 的迹为

$$\operatorname{tr}(A) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i|A|e_i\rangle, \tag{6.5}$$

可以验证 tr 是线性映射，有 $\operatorname{tr}(A^\dagger) = \operatorname{tr}(A)^*$ 且 $|\operatorname{tr}(A)| \leqslant \operatorname{tr}(|A|)$.

我们知道，矩阵的迹满足 $\operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA)$，现在我们对迹类算符证明这个性质.

引理 6.19. 有界线性算符可以分解为两个有界自伴算符的线性组合，有界自伴算符可以分解为两个酉算符的线性组合.

证明. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，有

$$A = \frac{1}{2}(A + A^\dagger) - \frac{\mathrm{i}}{2}(\mathrm{i}A - \mathrm{i}A^\dagger).$$

设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，不妨设 $\|A\| \leqslant 1$，利用泛函微积分有

$$A = \frac{1}{2}(A + \mathrm{i}\sqrt{1 - A^2}) + \frac{1}{2}(A - \mathrm{i}\sqrt{1 - A^2}).$$ □

命题 6.20. 设 $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，若 A 或 B 是迹类算符，或 A 和 B 都是 *Hilbert-Schmidt* 算符，则 $\operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA)$.

证明. 不妨设 B 是酉算符. 取标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$，有 $\{B|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ 也是标准正交基，于是

$$\operatorname{tr}(BA) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle Be_i|BA|Be_i\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i|AB|e_i\rangle = \operatorname{tr}(AB).$$ □

这个命题是计算两个算符乘积的迹的基础.

§6.2 密度矩阵

6.2.1 期望族与密度矩阵

设系统的状态可以用单位向量 $|\psi\rangle$ 表示，此时有界线性算符 A 的期望可以表示为 $\langle\psi|A|\psi\rangle$. 现在我们想利用算符 ρ 表示 A 的期望，在 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ 的情况下，取标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$，利用推广的 Parseval 等式可以得到

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty}\langle\psi|A|e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty}\langle e_i|\psi\rangle\langle\psi|A|e_i\rangle = \mathrm{tr}(\rho A),$$

可以看出算符 ρ 联系着一个期望映射 $\Phi_\rho : A \mapsto \mathrm{tr}(\rho A)$，根据 $\langle\psi|A|\psi\rangle$ 的性质，我们有如下定义.

定义 6.6. *定义满足如下性质的线性映射 $\Phi : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \to \mathbb{C}$ 为期望族:*

1. $\Phi(I) = 1$;
2. *若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，则 $\Phi(A)$ 是实数;*
3. *若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是非负自伴算符，则 $\Phi(A)$ 非负;*
4. *若 $\{A_n\} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 满足任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ 都有 $\lim\limits_{n\to\infty} \|A_n\psi - A\psi\| = 0$，则 $\lim\limits_{n\to\infty} \Phi(A_n) = \Phi(A)$.*

第四条性质要求任取 $|\psi\rangle$ 有 $\|A_n\psi\|$ 一致有界，关于一致有界性，我们有如下重要定理.

定理 6.21 (一致有界定理[2]). *若 $\{A_\alpha\}_{\alpha\in W} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 满足任取 $|\psi\rangle$ 都有 $\sup\limits_{\alpha\in W} \|A_\alpha\psi\| < \infty$，则存在常数 C 使得对任意 $\alpha \in W$ 都有 $\|A_\alpha\| \leqslant C$.*

现在我们给出密度矩阵的定义，并证明密度矩阵可以给出期望族.

定义 6.7. *设 $\rho \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是非负自伴算符，若 $\mathrm{tr}(\rho) = 1$，就称 ρ 为密度矩阵.*

由定义可以看出密度矩阵满足 $\rho = |\rho|$，因此 ρ 是迹类算符.

命题 6.22. *设 $\rho \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是密度矩阵，有 $\Phi_\rho(A) = \mathrm{tr}(\rho A) = \mathrm{tr}(A\rho)$ 是期望族.*

证明. 对于第一条性质，有 $\Phi_\rho(I) = \mathrm{tr}(\rho) = 1$.

对于第二条性质，由迹的性质有

$$\Phi_\rho(A^\dagger) = \mathrm{tr}(\rho A^\dagger) = \mathrm{tr}[(A\rho)^\dagger] = \mathrm{tr}(A\rho)^* = \Phi_\rho(A)^*,$$

若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，有 $\Phi_\rho(A) = \Phi_\rho(A)^*$，因此 $\Phi_\rho(A)$ 是实数.

对于第三条性质，由于 $\sqrt{\rho}$ 和 $A\sqrt{\rho}$ 都是 Hilbert-Schmidt 算符，由迹的性质有

$$\Phi_\rho(A) = \mathrm{tr}(A\rho) = \mathrm{tr}[(A\sqrt{\rho})\sqrt{\rho}] = \mathrm{tr}[\sqrt{\rho}(A\sqrt{\rho})] = \mathrm{tr}(\sqrt{\rho}A\sqrt{\rho}),$$

若 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是非负自伴算符，有 $\sqrt{\rho}A\sqrt{\rho}$ 也是非负自伴算符，因此 $\Phi_\rho(A)$ 非负.

对于第四条性质，设 $\{A_n\} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 满足条件，由一致有界定理有 $\|A_n\| \leqslant C$，于是

$$\sum_{i=1}^{\infty} |\langle e_i|\rho A_n|e_i\rangle| = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle\sqrt{\rho}e_i|\sqrt{\rho}A_n e_i\rangle| \leqslant \|\sqrt{\rho}\|_{HS}\|\sqrt{\rho}A_n\|_{HS} \leqslant \|A_n\|\|\sqrt{\rho}\|_{HS}^2 \leqslant C\,\mathrm{tr}(\rho),$$

[2] [4]定理2.3.16.

有 $\Phi_\rho(A_n)$ 级数绝对一致收敛，而 $A_n|e_i\rangle$ 收敛到 $A|e_i\rangle$，因此

$$\lim_{n\to\infty}\Phi_\rho(A_n)=\lim_{n\to\infty}\sum_{i=1}^{\infty}\langle e_i|\rho A_n|e_i\rangle=\sum_{i=1}^{\infty}\lim_{n\to\infty}\langle e_i|\rho A_n|e_i\rangle=\Phi_\rho(A). \qquad \square$$

事实上，这个命题的逆命题也成立，为此需要证明两个引理.

引理 6.23. *设 Φ 是期望族，有 Φ 是 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 上的有界线性泛函.*

证明. 设 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是自伴算符，有 $\|A\|I\pm A$ 是非负自伴算符，于是

$$\Phi(\|A\|I\pm A)=\|A\|\Phi(I)\pm\Phi(A)=\|A\|\pm\Phi(A)\geqslant 0,$$

因此 $|\Phi(A)|\leqslant\|A\|$. 现在设 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$，由于 $\Phi(A+A^\dagger)$ 和 $\Phi(\mathrm{i}A-\mathrm{i}A^\dagger)$ 是实数，有

$$|\Phi(A)|^2=\frac{1}{4}|\Phi(A+A^\dagger)|^2+\frac{1}{4}|\Phi(\mathrm{i}A-\mathrm{i}A^\dagger)|^2\leqslant\frac{1}{4}(\|A+A^\dagger\|^2+\|\mathrm{i}A-\mathrm{i}A^\dagger\|^2),$$

由于 $\|A\pm A^\dagger\|\leqslant\|A\|+\|A^\dagger\|=2\|A\|$，因此 $|\Phi(A)|\leqslant\sqrt{2}\|A\|$. $\square$

引理 6.24. *设 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$，存在有限秩算符序列 $\{A_n\}$ 满足任取 $|\psi\rangle$ 都有*

$$\lim_{n\to\infty}\|A_n\psi-A\psi\|=0.$$

证明. 取标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$，设

$$A_n=\sum_{i=1}^{n}|e_i\rangle\langle e_i|A,$$

有 A_n 是有限秩算符，由标准正交基的充要条件

$$A|\psi\rangle=\sum_{i=1}^{\infty}|e_i\rangle\langle e_i|A|\psi\rangle=\lim_{n\to\infty}A_n|\psi\rangle,$$

于是 $A|\psi\rangle$ 可以被 $A_n|\psi\rangle$ 逼近，因此命题成立. $\square$

命题 6.25. *设 Φ 是期望族，存在唯一的密度矩阵 $\rho\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 满足 $\Phi(A)=\mathrm{tr}(\rho A)$.*

证明. 设 $L_\Phi(\phi,\psi)=\Phi(|\psi\rangle\langle\phi|)$，由于 Φ 是 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 上的有界线性泛函，而

$$\||\psi\rangle\langle\phi|\chi\rangle\|\leqslant\|\psi\|\|\phi\|\|\chi\|,\quad\forall|\chi\rangle\in\mathcal{H},$$

可以得到半双线性形式 $L_\Phi(\phi,\psi)$ 有界，由此可以验证映射 $|\phi\rangle\mapsto L_\Phi(\phi,\psi)$ 是有界共轭线性泛函，由 Hilbert 空间中的 Riesz 表示定理的共轭版本，存在唯一的向量 $\rho|\psi\rangle$ 满足

$$\langle\phi|\rho|\psi\rangle=\Phi(|\psi\rangle\langle\phi|),\quad\forall|\phi\rangle,|\psi\rangle\in\mathcal{H},$$

可以验证 $\rho\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$. 由于 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 是非负自伴算符，有

$$\langle\psi|\rho|\psi\rangle=\Phi(|\psi\rangle\langle\psi|)\geqslant 0,\quad\forall|\psi\rangle\in\mathcal{H},$$

而 $\langle\psi|\rho^\dagger\psi\rangle=\langle\psi|\rho\psi\rangle^*=\Phi(|\psi\rangle\langle\psi|)$，由 ρ 定义的唯一性有 ρ 是非负自伴算符. 根据第四条性质

$$\mathrm{tr}(\rho)=\sum_{i=1}^{\infty}\langle e_i|\rho|e_i\rangle=\lim_{n\to\infty}\Phi(\sum_{i=1}^{n}|e_i\rangle\langle e_i|)=\Phi(I)=1,$$

因此 ρ 是密度矩阵. 由有限秩算符 A 满足 $\Phi(A)=\mathrm{tr}(\rho A)$，取极限就得到对 $A\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 满足. $\square$

6.2.2 状态空间公理

现在我们已经知道，简单量子系统的态 $|\psi\rangle$ 可以用算符 $\rho=|\psi\rangle\langle\psi|$ 表示，而 ρ 是密度矩阵．基于合理的推广，对于一般的量子系统，我们可以提出下面的公理．

公理 6. *对于一个量子系统，存在一个合适的定义在复数域 $\mathbb{C}$ 上的可分的 Hilbert 空间，称为态空间 $\mathcal{H}$．系统的状态由 $\mathcal{H}$ 中的一个密度矩阵 $\rho(t)$ 表示．*

现在我们将具有 $\rho=|\psi\rangle\langle\psi|$ 形式的密度矩阵表示的状态称为纯态，其余形式的密度矩阵表示的状态称为混态．下面我们讨论系统状态是纯态的条件．

命题 6.26. *设 $\rho\in\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是密度矩阵，有 ρ 表示纯态的充要条件是下列三者之一：*

1. $\operatorname{tr}(\rho^2)=1$；
2. 定义 von Neumann 熵 $S(\rho)=\operatorname{tr}(-\rho\ln\rho)$，有 $S(\rho)=0$；
3. 不存在不同的密度矩阵 ρ_1,ρ_2 和 $\lambda\in(0,1)$ 使得 $\rho=\lambda\rho_1+(1-\lambda)\rho_2$.

证明. 由于 ρ 是非负紧自伴算符，取特征向量作为标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$，可以得到

$$\rho=\sum_{i=1}^{\infty}\lambda_i|e_i\rangle\langle e_i|,\quad \operatorname{tr}(\rho)=\sum_{i=1}^{\infty}\lambda_i=1,\quad \lambda_i\geqslant 0.$$

利用轮转证法．设 ρ 表示纯态，于是存在 $\lambda_i=1$．根据 ρ 的表示可以得到

$$\operatorname{tr}(\rho^2)=\sum_{i=1}^{\infty}\lambda_i^2,$$

由于 $\lambda_j=0,(j\neq i)$，因此直接计算得到 $\operatorname{tr}(\rho^2)=1$.

设 $\operatorname{tr}(\rho^2)=1$，若不存在 $\lambda_i=1$，则对所有非零 λ_i 有 $\lambda_i^2<\lambda_i$，这与 $\operatorname{tr}(\rho^2)=1$ 矛盾，于是存在 $\lambda_i=1$．根据 ρ 的表示可以得到

$$S(\rho)=\operatorname{tr}(-\rho\ln\rho)=\sum_{i=1}^{\infty}-\lambda_i\ln\lambda_i,$$

由于 $\lambda_j=0,(j\neq i)$，因此直接计算得到 $S(\rho)=0$.

设 $S(\rho)=0$，若不存在 $\lambda_i=1$，则对所有非零 λ_i 有 $-\lambda_i\ln\lambda_i<0$，这与 $S(\rho)=0$ 矛盾，于是存在 $\lambda_i=1$．若 ρ 能被满足条件的 ρ_1,ρ_2 表示，利用 $\operatorname{tr}(\rho^2)=1$，由于 $\|\rho\|_{HS}^2=\operatorname{tr}(\rho^2)$，有

$$\|\lambda\rho_1+(1-\lambda)\rho_2\|_{HS}\leqslant\lambda\|\rho_1\|_{HS}+(1-\lambda)\|\rho_2\|_{HS}\leqslant\lambda\operatorname{tr}(\rho_1)+(1-\lambda)\operatorname{tr}(\rho_2)=1,$$

不等号成立要求 $\operatorname{tr}(\rho_1^2)=\operatorname{tr}(\rho_2^2)=1$ 且 ρ_1 和 ρ_2 关于内积 $\langle\cdot|\cdot\rangle_{HS}$ 共线，这与 $\rho_1\neq\rho_2$ 矛盾．

设 ρ 不能被满足条件的 ρ_1,ρ_2 表示，若不存在 $\lambda_i=1$，不妨设 $\lambda_1\neq 0$，取 $\lambda=\lambda_1$，则 ρ 可以用下面的密度矩阵表示

$$\rho_1=|e_1\rangle\langle e_1|,\quad \rho_2=\sum_{i=2}^{\infty}\frac{\lambda_i}{1-\lambda_1}|e_i\rangle\langle e_i|.$$

这与条件矛盾，于是存在 $\lambda_i=1$，因此 ρ 表示纯态． □

6.2.3　测量分布公理

现在我们已经知道，简单量子系统中算符 A 的期望可以表示为 $\operatorname{tr}(\rho A)$ 的形式，而对密度矩阵 ρ，有 $\operatorname{tr}(\rho A)$ 是期望族．基于合理的推广，对于一般的可观测量，我们可以提出下面的公理．

公理 7. 设系统状态为 ρ，则对可观测量 f 测量的期望为

$$\mathrm{E}[f] = \operatorname{tr}(\rho \hat{f}). \tag{6.6}$$

可以看出，若 A 是有界自伴算符，则 ρA 是迹类算符，从而可以计算迹．而若 A 是无界自伴算符，则 $\operatorname{tr}(\rho A)$ 可能没有定义，在这种情况下，我们需要考虑测量的概率测度．

设 ρ 表示纯态 $|\psi\rangle$，根据谱定理的第一形式，自伴算符 A 对应的概率测度为

$$\mu_\psi^A(E) = \langle\psi|\mu^A(E)|\psi\rangle = \operatorname{tr}[\rho\mu^A(E)] = \operatorname{tr}[\rho I_E(A)],$$

于是对于任意的系统状态 ρ，根据 ρ 的表示，如果定义概率测度为

$$\mu_\rho^A(E) = \operatorname{tr}[\rho I_E(A)] = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \langle e_i|\mu^A(E)|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \mu_{e_i}^A(E),$$

利用控制收敛定理，此时自伴算符 A 的期望可以表示为

$$\langle A\rangle_\rho = \int_{\mathbb{R}} \lambda \,\mathrm{d}\mu_\rho^A(\lambda) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \int_{\mathbb{R}} \lambda \,\mathrm{d}\mu_{e_i}^A(\lambda) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \langle A\rangle_{e_i},$$

而这在 A 有界的情况下与直接计算 $\operatorname{tr}(\rho A)$ 的结果相同，因此这个公理也可以表述为下面的形式．

公理 7. 设系统状态为 ρ，则对可观测量 f 测量的概率测度为

$$\mu_\rho^{\hat{f}}(E) = \operatorname{tr}[\rho I_E(\hat{f})]. \tag{6.7}$$

现在为了理解和计算上的方便，我们将采用公理的第一种表述．

6.2.4　测量状态公理

现在我们已经知道，简单量子系统中系统的状态 $|\psi\rangle$ 经过可观测量 f 测量后会立即变为

$$|\psi'\rangle \propto P_\lambda|\psi\rangle,$$

这里 P_λ 是到 $\hat{f}$ 对应 λ 的特征子空间的正交投影算符，而这可以用密度矩阵表示为

$$\rho' = |\psi'\rangle\langle\psi'| \propto P_\lambda|\psi\rangle\langle\psi|P_\lambda = P_\lambda\rho P_\lambda.$$

基于合理的推广，我们可以提出下面的公理．

公理 8. 设系统的初始状态为 ρ，对系统进行可观测量 f 的测量，若测量结果为 $\lambda \in \mathbb{R}$，则测量后系统的状态立即变为 ρ'，满足

$$\rho' = \frac{1}{Z} P_\lambda \rho P_\lambda, \quad Z = \operatorname{tr}(P_\lambda \rho P_\lambda), \tag{6.8}$$

这里 P_λ 是到 $\hat{f}$ 对应 λ 的特征子空间的正交投影算符．

可以验证 $P_\lambda\rho P_\lambda$ 是非负自伴算符，且是迹类算符，因此 ρ' 是密度矩阵．

6.2.5 时间演化公理

现在我们已经知道，简单量子系统中系统的状态 $|\psi\rangle$ 随时间的演化为

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle,$$

而这可以用密度矩阵表示为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t}\langle\psi| + \mathrm{i}\hbar|\psi\rangle\frac{\partial\langle\psi|}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi|\hat{H} = [\hat{H},\rho].$$

基于合理的推广，对于一般的量子系统，我们可以提出下面的公理.

公理 9. *系统状态随时间的演化由 von Neumann 方程给出*

$$[\hat{H},\rho(t)] = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(t). \tag{6.9}$$

在这个公理中，由于定态的密度矩阵不随时间演化，因此相应的定态方程为

$$[\hat{H},\rho] = 0. \tag{6.10}$$

设 $\rho(t)$ 满足 von Neumann 方程，可以得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\operatorname{tr}(\rho) = \operatorname{tr}\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}\right) = \operatorname{tr}\left(\frac{[\hat{H},\rho]}{\mathrm{i}\hbar}\right) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\operatorname{tr}(\hat{H}\rho) - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\operatorname{tr}(\rho\hat{H}) = 0,$$

特别地，这在 $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ 的情形表现为 $\operatorname{tr}(\rho) = \|\psi\|^2$ 不随时间变化.

设线性算符 $A(t)$，可以计算期望随时间的变化

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle_{\rho(t)} &= \operatorname{tr}\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}A\right) + \operatorname{tr}\left(\rho\frac{\partial A}{\partial t}\right)\\ &= \operatorname{tr}\left(\frac{[\hat{H},\rho]}{\mathrm{i}\hbar}A\right) + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_{\rho(t)}\\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\operatorname{tr}(\hat{H}\rho A) - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\operatorname{tr}(\rho\hat{H}A) + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_{\rho(t)},\end{aligned}$$

观察发现，只要利用 $\operatorname{tr}(\hat{H}\rho A) = \operatorname{tr}(\rho A\hat{H})$ 就可以得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle_{\rho(t)} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[A,\hat{H}]\rangle_{\rho(t)} + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_{\rho(t)}, \tag{6.11}$$

这可以看作 Ehrenfest 关系的推广.

利用时间演化算符，可以验证方程的解为 $\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t)$.

§6.3 复合系统

6.3.1 单粒子系统的复合

我们知道，对于一个三维无自旋单粒子系统，一个合适的 Hilbert 空间是 $L^2(\mathbb{R}^3)$. 如果设波函数的形式为 $\psi(\boldsymbol{x},t)$，根据波函数的概率解释，有 $\rho(\boldsymbol{x},t) = |\psi(\boldsymbol{x},t)|^2$ 表示粒子位置的概率密度.

现在我们考虑一个三维无自旋 N 粒子系统，可以想到，一个合适的 Hilbert 空间是 $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. 如果设波函数的形式为 $\psi(\boldsymbol{x}^1,\boldsymbol{x}^2,\cdots,\boldsymbol{x}^N,t)$，有

$$\rho(\boldsymbol{x}^1,\boldsymbol{x}^2,\cdots,\boldsymbol{x}^N,t)=|\psi(\boldsymbol{x}^1,\boldsymbol{x}^2,\cdots,\boldsymbol{x}^N,t)|^2$$

表示粒子位置的联合概率密度，这里 $\boldsymbol{x}^i$ 表示第 i 个粒子的位置.

由于 N 粒子系统可以看作 N 个单粒子系统的复合，于是可以推测 $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ 也可以看作 N 个 $L^2(\mathbb{R}^3)$ 的复合. 下面的命题表明，这种复合方式是张量积.

命题 6.27. 设 $(X_1,\Omega_1,\mu_1),(X_2,\Omega_2,\mu_2)$ 是两个 σ-有限测度空间，存在唯一的酉映射

$$p:L^2(X_1,\mu_1)\otimes L^2(X_2,\mu_2)\to L^2(X_1\times X_2,\mu_1\times\mu_2),$$

满足任取 $\psi_1\in L^2(X_1,\mu_1),\psi_2\in L^2(X_2,\mu_2)$ 都有

$$p(\psi_1\otimes\psi_2)(x_1,x_2)=\psi_1(x_1)\psi_2(x_2),\quad\forall x_1\in X_1,x_2\in X_2.$$

证明. 将 $L^2(X_1\times X_2,\mu_1\times\mu_2)$ 作为 U，有双线性映射

$$\Phi:L^2(X_1,\mu_1)\times L^2(X_2,\mu_2)\to L^2(X_1\times X_2,\mu_1\times\mu_2),\quad(\psi_1,\psi_2)\mapsto\psi_1\cdot\psi_2,$$

于是存在唯一的线性映射 $p:L^2(X_1,\mu_1)\odot L^2(X_2,\mu_2)\to L^2(X_1\times X_2,\mu_1\times\mu_2)$ 满足

$$p(\psi_1\otimes\psi_2)(x_1,x_2)=\Phi(\psi_1,\psi_2)(x_1,x_2)=\psi_1(x_1)\psi_2(x_2),\quad\forall x_1\in X_1,x_2\in X_2.$$

任取 $\psi\in L^2(X_1,\mu_1)\odot L^2(X_2,\mu_2)$，可以设

$$\psi=\sum_{i=1}^n\psi_{1i}\otimes\psi_{2i},\quad p\psi=\sum_{i=1}^n\psi_{1i}\cdot\psi_{2i}$$

根据 L^2 空间和张量积空间范数的定义，有

$$\|p\psi\|^2=\sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n\langle\psi_{1i}\cdot\psi_{2i}|\psi_{1j}\cdot\psi_{2j}\rangle=\sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n\langle\psi_{1i}|\psi_{1j}\rangle\langle\psi_{2i}|\psi_{2j}\rangle=\|\psi\|^2,$$

于是 p 保持范数不变，从而可以将 p 的定义域延拓到 $L^2(X_1,\mu_1)\otimes L^2(X_2,\mu_2)$ 上.

设 $\{e_i\}_{i=1}^\infty$ 和 $\{f_j\}_{j=1}^\infty$ 分别是 $L^2(X_1,\mu_1)$ 和 $L^2(X_2,\mu_2)$ 的标准正交基，下证 $\{e_i\cdot f_j\}_{i,j=1}^\infty$ 是 $L^2(X_1\times X_2,\mu_1\times\mu_2)$ 的标准正交基. 根据内积的定义可以验证 $\{e_i\cdot f_j\}_{i,j=1}^\infty$ 是标准正交集，若存在非零向量 $\psi\in L^2(X_1\times X_2,\mu_1\times\mu_2)$ 满足 $\langle\psi|e_i\cdot f_j\rangle=0$，设

$$\psi_2^*(x_2)=\int_{X_1}\psi^*(x_1,x_2)e_i(x_1)\,\mathrm{d}x_1,$$

有 $\psi_2\in L^2(X_2,\mu_2)$，由 Fubini 定理得到

$$\int_{X_2}\psi_2^*(x_2)f_j(x_2)\,\mathrm{d}x_2=\int_{X_1\times X_2}\psi^*(x_1,x_2)e_i(x_1)f_j(x_2)\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2=0,$$

于是 $\psi_2(x_2)=0,\text{a.e.}x_2\in X_2$，根据 $\{e_i\}_{i=1}^\infty$ 的标准正交性有

$$\mu_1(\{x_1\in X_1|\psi(x_1,x_2)\neq 0\})=0,\quad\text{a.e.}x_2\in X_2,$$

由 Fubini 定理得到 $\psi(x_1,x_2)=0,\text{a.e.}(x_1,x_2)\in(X_1,X_2)$，这与 ψ 非零矛盾，因此命题成立. □

6.3.2 复合空间公理

现在我们已经知道，三维无自旋二粒子系统的 Hilbert 空间是 $L^2(\mathbb{R}^{3\times 2})$，而这可以表示成两个 $L^2(\mathbb{R}^3)$ 的张量积．基于合理的推广，对于一般量子系统的复合，我们可以提出下面的公理．

公理 10. 设两个系统的 *Hilbert* 空间分别为 $\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$，则由这两个系统组成的复合系统的 *Hilbert* 空间为 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$．

根据线性算符的张量积，设 $\rho_1 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1), \rho_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$ 分别是 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ 上的密度矩阵，可以验证 $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$ 是 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 上的密度矩阵．事实上，我们也可以从 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 上的密度矩阵构造 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ 上的密度矩阵，为此需要证明一个引理．

引理 6.28. 设 $\{A_{2n}\} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$，若存在 $A_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$ 满足任取 $|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$ 都有

$$\lim_{n\to\infty} \|A_{2n}\psi_2 - A_2\psi_2\| = 0,$$

则任取 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 都有 $\lim\limits_{n\to\infty} \|(I \otimes A_{2n})\psi - (I \otimes A_2)\psi\| = 0$.

证明. 设 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}, \{|f_j\rangle\}_{j=1}^{\infty}$ 分别是 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ 的标准正交基，有

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} |e_i \otimes f_j\rangle\langle e_i \otimes f_j|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |e_i \otimes \psi_{2i}\rangle, \quad (I \otimes A_2)|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |e_i \otimes A_2\psi_{2i}\rangle,$$

这里 $|\psi_{2i}\rangle$ 是对 j 求和的结果．由一致有界定理有 $\|A_{2n}\| + \|A_2\| \leqslant C$，于是

$$\|(I \otimes A_{2n})\psi - (I \otimes A_2)\psi\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \|(A_{2n} - A_2)\psi_{2i}\|^2 \leqslant \sum_{i=1}^{\infty} \|A_{2n} - A_2\|^2 \|\psi_{2i}\|^2 \leqslant C^2\|\psi\|^2,$$

有级数绝对一致收敛，因此

$$\lim_{n\to\infty} \|(I \otimes A_{2n})\psi - (I \otimes A_2)\psi\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \lim_{n\to\infty} \|(A_{2n} - A_2)\psi_{2i}\|^2 = 0.$$

□

定义 6.8. 设 $\rho \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)$ 是 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 上的密度矩阵，可以验证 $\Phi_2(A_2) = \mathrm{tr}[\rho(I \otimes A_2)]$ 是 $\mathcal{H}_2$ 上的期望族，于是存在唯一的密度矩阵 $\rho_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$ 满足

$$\mathrm{tr}(\rho_2 A_2) = \mathrm{tr}(\rho(I \otimes A_2)), \quad \forall A_2 \in \mathcal{H}_2, \tag{6.12}$$

称 ρ_2 为 ρ 相对于 $\mathcal{H}_2$ 的部分迹．

命题 6.29. 设 ρ_2 是 ρ 相对于 $\mathcal{H}_2$ 的部分迹，取 $\mathcal{H}_1$ 的标准正交基 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$，有

$$\langle\phi_2|\rho_2|\psi_2\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i \otimes \phi_2|\rho|e_i \otimes \psi_2\rangle, \quad \forall |\phi_2\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2.$$

证明. 取 $\mathcal{H}_2$ 的标准正交基 $\{|f_j\rangle\}_{j=1}^{\infty}$，有

$$\begin{aligned}
\langle\phi_2|\rho_2|\psi_2\rangle &= \mathrm{tr}(\rho_2|\psi_2\rangle\langle\phi_2|) = \mathrm{tr}[\rho(I \otimes |\psi_2\rangle\langle\phi_2|)] \\
&= \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} \langle e_i \otimes f_j|\rho(I \otimes |\psi_2\rangle\langle\phi_2|)|e_i \otimes f_j\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} \langle e_i \otimes f_j|\rho|e_i \otimes \psi_2\rangle\langle\phi_2|f_j\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i \otimes \phi_2|\rho|e_i \otimes \psi_2\rangle,
\end{aligned}$$

因此命题成立，这也是部分迹的名称来源． □

6.3.3 自伴算符的张量积

设 A_1, A_2 分别是 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ 上的无界自伴算符，我们想定义算符

$$A = A_1 \otimes I + I \otimes A_2,$$

使得 A 在 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 上仍是自伴算符，这就要求我们正确选择定义域.

命题 6.30. 设 A_1, A_2 分别是 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ 上的自伴算符，有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA_1} \otimes \mathrm{e}^{\mathrm{i}tA_2}$ 是强连续单参数酉群.

证明. 设 $U_1(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}tA_1}, U_2(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}tA_2}$ 和 $U(t) = U_1(t) \otimes U_2(t)$，由于 U_1, U_2 都是强连续单参数酉群，可以验证 U 也是单参数酉群，下证强连续.

由于 $\{U_2(t)\}_{t\in\mathbb{R}} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$ 满足任取 $|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$ 都有 $\lim\limits_{s\to t} \|[U_2(s) - U_2(t)]\psi_2\| = 0$，于是

$$\lim_{s\to t} \|[I \otimes U_2(s) - I \otimes U_2(t)]\psi\| = 0, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2,$$

同理可以得到

$$\lim_{s\to t} \|[U_1(s) \otimes I - U_1(t) \otimes I]\psi\| = 0, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2,$$

利用 $U_1 \otimes U_2 = (U_1 \otimes I)(I \otimes U_2)$ 可以得到

$$\begin{aligned}
&\|[U_1(s) \otimes U_2(s) - U_1(t) \otimes U_2(t)]\psi\| \\
&\leqslant \|[U_1(s) \otimes [U_2(s) - U_2(t)]]\psi\| + \|[[U_1(s) - U_1(t)] \otimes U_2(t)]\psi\| \\
&\leqslant \|U_1(s)\|\|[I \otimes [U_2(s) - U_2(t)]]\psi\| + \|U_2(t)\|\|[[U_1(s) - U_1(t)] \otimes I]\psi\|,
\end{aligned}$$

因此 U 是强连续单参数酉群. □

定义 6.9. 设 A_1, A_2 分别是 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ 上的自伴算符，定义 $A_1 \otimes I + I \otimes A_2$ 为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA_1} \otimes \mathrm{e}^{\mathrm{i}tA_2}$ 的无穷小生成元. 特别地，当 $A_2 = 0$ 时，定义 $A_1 \otimes I$ 为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA_1} \otimes I$ 的无穷小生成元.

这样根据 Stone 定理，$A_1 \otimes I + I \otimes A_2$ 就是 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 上的自伴算符.

6.3.4 复合演化公理

现在设两个系统的 Hilbert 空间分别为 $\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$，在 Hamilton 算符 $\hat{H}_1$ 和 $\hat{H}_2$ 的作用下，系统状态随时间的演化分别为 $\rho_1(t)$ 和 $\rho_2(t)$. 若这两个系统之间没有相互作用，我们希望这个复合系统的状态为 $\rho_1(t) \otimes \rho_2(t)$，于是根据 von Neumann 方程有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial \rho_1}{\partial t} \otimes \rho_2 + \mathrm{i}\hbar\rho_1 \otimes \frac{\partial \rho_2}{\partial t} = [\hat{H}_1, \rho_1] \otimes \rho_2 + \rho_1 \otimes [\hat{H}_2, \rho_2] = [\hat{H}_1 \otimes I + I \otimes \hat{H}_2, \rho].$$

基于上面的分析，对于一般量子系统的复合，我们可以提出下面的公理.

公理 11. 设两个系统的 *Hamilton* 算符分别为 $\hat{H}_1$ 和 $\hat{H}_2$，若这两个系统之间没有相互作用，则由这两个系统组成的复合系统的 *Hamilton* 算符为 $\hat{H}_1 \otimes I + I \otimes \hat{H}_2$.

在通常的量子力学教材中，一般会将 $\hat{H}_1 \otimes I + I \otimes \hat{H}_2$ 简写成 $\hat{H}_1 + \hat{H}_2$.

§6.4　全同粒子

6.4.1　全同粒子系统的复合

对于全同粒子组成的复合系统，情况还会略有不同.

考虑两个具有自旋 s 的全同粒子组成的复合系统，根据上面的公理，复合系统的 Hilbert 空间应为 $L^2(\mathbb{R}^{3\times 2}; V_s\otimes V_s)$. 但是由于全同粒子是不可分辨的，这就是说，若交换两个粒子的标记，则系统的状态不发生改变. 这要求复合系统的波函数 $\psi(\boldsymbol{x}^1,\boldsymbol{x}^2)$ 满足性质

$$\psi(\boldsymbol{x}^2,\boldsymbol{x}^1)=c\psi(\boldsymbol{x}^1,\boldsymbol{x}^2),$$

由于交换两次后波函数复原，于是有 $c^2=1$，因此 $c=\pm1$.

根据实验事实，具有整数自旋 s 的粒子满足 $c=1$，这种粒子称为*玻色子*；具有半整数自旋 s 的粒子满足 $c=-1$，这种粒子称为*费米子*.

6.4.2　全同粒子公理

现在我们已经知道，全同粒子系统的态需要满足一定的限制，而这个限制对玻色子和费米子不同. 基于上面的分析，对于全同粒子系统的复合，我们可以提出下面的公理.

公理 12. *设系统由 N 个具有整数自旋 s 的全同粒子组成，Hilbert 空间是 $L^2(\mathbb{R}^{3N}; V_s^{\otimes N})$ 的一个闭线性子空间，由满足交换对称性的平方可积函数组成*

$$\psi(\boldsymbol{x}^{\sigma(1)},\boldsymbol{x}^{\sigma(2)},\cdots,\boldsymbol{x}^{\sigma(N)})=\psi(\boldsymbol{x}^1,\boldsymbol{x}^2,\cdots,\boldsymbol{x}^N). \tag{6.13}$$

设系统由 N 个具有半整数自旋 s 的全同粒子组成，Hilbert 空间是 $L^2(\mathbb{R}^{3N}; V_s^{\otimes N})$ 的一个闭线性子空间，由满足交换反对称性的平方可积函数组成

$$\psi(\boldsymbol{x}^{\sigma(1)},\boldsymbol{x}^{\sigma(2)},\cdots,\boldsymbol{x}^{\sigma(N)})=\operatorname{sgn}(\sigma)\psi(\boldsymbol{x}^1,\boldsymbol{x}^2,\cdots,\boldsymbol{x}^N). \tag{6.14}$$

这里 σ 表示任意 N 元置换.

需要注意的是，在量子场论中，这一假设可以得到说明，这称为*自旋-统计定理*.

我们知道电子具有自旋 $\dfrac{1}{2}$，因此电子是费米子. 设 $\psi\in L^2(\mathbb{R}^3; V_{\frac{1}{2}})$，对于任意两个电子，根据上面的假设，$\psi(\boldsymbol{x}^1)\otimes\psi(\boldsymbol{x}^2)$ 不是这两个电子组成的复合系统的一个可能的态，于是任意两个电子不能同时处于相同的态，这称为 *Pauli 不相容原理*.

§6.5　本章小结

6.5.1　一般量子系统的公理

1. 对于一个量子系统，存在一个合适的定义在复数域 $\mathbb{C}$ 上的可分的 Hilbert 空间，称为态空间 $\mathcal{H}$. 系统的状态由 $\mathcal{H}$ 中的一个密度矩阵 $\rho(t)$ 表示.

2. 经典相空间中的任一实值函数 f 都对应于量子态空间中的一个自伴算符 $\hat{f}$.

3. 设系统状态为 ρ，则对可观测量 f 测量的期望为

$$\mathrm{E}[f]=\operatorname{tr}(\rho\hat{f}).$$

4. 设系统的初始状态为 ρ，对系统进行可观测量 f 的测量，若测量结果为 $\lambda\in\mathbb{R}$，则测量后系统的状态立即变为 ρ'，满足

$$\rho'=\frac{1}{Z}P_\lambda\rho P_\lambda,\quad Z=\operatorname{tr}(P_\lambda\rho P_\lambda),$$

这里 P_λ 是到 $\hat{f}$ 对应 λ 的特征子空间的正交投影算符.

5. 系统状态随时间的演化由 von Neumann 方程给出

$$[\hat{H},\rho(t)]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(t).$$

6. 设两个系统的 Hilbert 空间分别为 $\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$，则由这两个系统组成的复合系统的 Hilbert 空间为 $\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$.

7. 设两个系统的 Hamilton 算符分别为 $\hat{H}_1$ 和 $\hat{H}_2$，若这两个系统之间没有相互作用，则由这两个系统组成的复合系统的 Hamilton 算符为 $\hat{H}_1\otimes I+I\otimes\hat{H}_2$.

8. 设系统由 N 个具有整数自旋 s 的全同粒子组成，Hilbert 空间是 $L^2(\mathbb{R}^{3N};V_s^{\otimes N})$ 的一个闭线性子空间，由满足交换对称性的平方可积函数组成

$$\psi(\boldsymbol{x}^{\sigma(1)},\boldsymbol{x}^{\sigma(2)},\cdots,\boldsymbol{x}^{\sigma(N)})=\psi(\boldsymbol{x}^1,\boldsymbol{x}^2,\cdots,\boldsymbol{x}^N).$$

设系统由 N 个具有半整数自旋 s 的全同粒子组成，Hilbert 空间是 $L^2(\mathbb{R}^{3N};V_s^{\otimes N})$ 的一个闭线性子空间，由满足交换反对称性的平方可积函数组成

$$\psi(\boldsymbol{x}^{\sigma(1)},\boldsymbol{x}^{\sigma(2)},\cdots,\boldsymbol{x}^{\sigma(N)})=\operatorname{sgn}(\sigma)\psi(\boldsymbol{x}^1,\boldsymbol{x}^2,\cdots,\boldsymbol{x}^N).$$

这里 σ 表示任意 N 元置换.

第七章　定态微扰与跃迁

第八章　散射理论

第九章　WKB 近似

第十章　量子化方案

第十一章　二次量子化

第十二章　相对论量子力学

后记

参考文献

[1] Brian C Hall. *Quantum theory for mathematicians.* Springer, 2013.

[2] 严加安. 测度论讲义（第二版）. 科学出版社, 2004.

[3] 周民强. 实变函数论（第三版）. 北京大学出版社, 2016.

[4] 张恭庆，林源渠. 泛函分析讲义（上）（第二版）. 北京大学出版社, 2021.