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) $(f,\lambda_1 g_1 + \lambda_2 g_2) = \lambda_1(f,g_1) + \lambda_2(f,g_2)$； (3) $(f,f) \geqslant 0$ 当且仅当 $f(x) = 0, \text{a.e.} x \in E$ 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 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，对于一般的量子系统，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 $f(x) = 0, \text{a.e.} x \in E$ 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 $\operatorname{span}\{|e_\alpha\rangle\}_{\alpha\in A}$．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 $\mathcal{H}=\overline{\operatorname{span}\{|e_\alpha\rangle\}_{\alpha\in A}}$，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 $\mathcal{H}$，读者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，对于一般的量子系统，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 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

§2.1　自由粒子

§2.2　方势阱与方势垒

§2.3　谐振子

§2.4　周期势场

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. 设 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$，若 $A^\dagger A = AA^\dagger$，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 $\bigoplus_{\lambda\in\sigma(A)} \mathcal{H}_\lambda$ 和相应的酉映射 $U : \mathcal{H} \to \bigoplus_{\lambda\in\sigma(A)} \mathcal{H}_\lambda$ 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，读者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. $\|f(A)\| = \sup_{\lambda \in \sigma(A)} |f(\lambda)|$ 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

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

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． $\square$

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 $\mu\left(\bigcup_{n=1}^{\infty}E_n\right)=\sum_{n=1}^{\infty}\mu(E_n)$；*
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 $A_f=\int_X f\,\mathrm{d}\mu$ 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 $\int_X I_E\,\mathrm{d}\mu=\mu(E)$；*
2. *$\left\|\int_X f\,\mathrm{d}\mu\right\|\leqslant\sup_{\lambda\in X}|f(\lambda)|$；*
3. *$\int_X f\cdot g\,\mathrm{d}\mu=\int_X f\,\mathrm{d}\mu\cdot\int_X g\,\mathrm{d}\mu$；*
4. *$\int_X f^*\,\mathrm{d}\mu=\left(\int_X f\,\mathrm{d}\mu\right)^\dagger$，特别地，若 f 是实函数，则 $\int_X f\,\mathrm{d}\mu$ 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 $\mathcal{H} = \overline{\operatorname{span}\{|A^n\psi\rangle\}_{n=0}^{\infty}}$，则称 $|\psi\rangle$ 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 $\rho\geqslant 0,\mathrm{a.e.}\mu$ 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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\langle\phi,0|\chi,A^\dagger\chi\rangle=\langle0,\phi|-A^\dagger\chi,\chi\rangle=\langle\phi|\chi\rangle=0,\quad \forall|\chi\rangle\in\mathrm{Dom}(A^\dagger),$$

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 $A\subset A^\dagger$，则称 A 为对称算符．若 $A=A^\dagger$，则称 A 为自伴算符．若 A 可闭且 $\overline{A}$ 是自伴算符，即 $\overline{A}=A^\dagger$，则称 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. $\operatorname{Ran}(A \pm \mathrm{i}I) = \mathcal{H}$.

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 $\operatorname{Ran}(A \pm \mathrm{i}I)$ 是闭线性子空间，因此

$$\operatorname{Ran}(A \pm \mathrm{i}I) = \overline{\operatorname{Ran}(A \pm \mathrm{i}I)} = [\ker[(A \pm \mathrm{i}I)^\dagger]]^\perp = [\ker(A^\dagger \mp \mathrm{i}I)]^\perp = \mathcal{H}.$$

设 $\operatorname{Ran}(A \pm \mathrm{i}I) = \mathcal{H}$，任取 $|\psi\rangle \in \operatorname{Dom}(A^\dagger)$，存在 $|\phi\rangle \in \operatorname{Dom}(A)$ 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 $|\phi\rangle \in \operatorname{Dom}(A^\dagger)$，于是

$$(A^\dagger \pm \mathrm{i}I)|\psi - \phi\rangle = 0,$$

由于 $\ker(A^\dagger \pm \mathrm{i}I) = [\operatorname{Ran}(A \mp \mathrm{i}I)]^\perp = \{0\}$，有 $|\psi\rangle = |\phi\rangle \in \operatorname{Dom}(A)$，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. $\overline{\operatorname{Ran}(A \pm \mathrm{i}I)} = \mathcal{H}$.

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 $\overline{\operatorname{Ran}(A \pm \mathrm{i}I)} = [\ker(A^\dagger \mp \mathrm{i}I)]^\perp = \mathcal{H}$.

设 $\overline{\operatorname{Ran}(A \pm \mathrm{i}I)} = \mathcal{H}$，由于 $\operatorname{Ran}(A \pm \mathrm{i}I) \subset \operatorname{Ran}(\overline{A} \pm \mathrm{i}I)$，而由上面的不等式有 $\operatorname{Ran}(\overline{A} \pm \mathrm{i}I)$ 是闭线性子空间，于是 $\operatorname{Ran}(\overline{A} \pm \mathrm{i}I) = \mathcal{H}$，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

$$\|A_f\psi\| = \|f\|_{L^2(X,\mu_\psi)}, \quad \forall|\psi\rangle \in W_f. \qquad \square$$

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_ψ^A 满足

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda^m \, \mathrm{d}\mu_\psi^A(\lambda) = \langle \psi | A^m | \psi \rangle, \quad \forall m \in \mathbb{N}^*. \tag{3.46}$$

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 $B_f|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)$. 取磨光函数序列 $\{f_n\} \subset C_c^\infty(\mathbb{R})$ 满足条件

$$f_n \geqslant 0, \quad \operatorname{supp} f_n \subset \left[-\frac{1}{n}, \frac{1}{n}\right], \quad \int_{\mathbb{R}} f_n(\tau)\,\mathrm{d}\tau = 1,$$

由积分的性质可以得到

$$\|B_{f_n}\psi - \psi\| \leqslant \int_{\mathbb{R}} f_n(\tau)\|[U(\tau)-I]\psi\|\,\mathrm{d}\tau \leqslant \sup_{-1/n\leqslant\tau\leqslant 1/n} \|[U(\tau)-I]\psi\|,$$

而由于 U 强连续，有 $|\psi\rangle$ 可以被 $B_{f_n}|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(A)$ 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　位置算符

3.4.2　动量算符

3.4.3　不确定性原理

3.4.4　自伴算符的加法

§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 $\mu_\psi^A=\langle\psi|\mu^A|\psi\rangle$ 满足

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

6. 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

$$[UAU^\dagger(s)](\lambda)=\lambda s(\lambda),\quad \forall s\in U(\mathrm{Dom}(A)),$$

其中 U 的值域为

$$U(\mathrm{Dom}(A))=\left\{s\in\int_{\sigma(A)}^{\oplus} \mathcal{H}_\lambda \,\mathrm{d}\mu(\lambda):\int_{\sigma(A)}\|\lambda s(\lambda)\|^2 \,\mathrm{d}\mu(\lambda)<\infty\right\}.$$

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.

第四章　角动量与自旋

第五章　三维问题的求解

第六章　多粒子系统

§6.1　迹类算符

§6.2　密度矩阵

§6.3　复合系统

§6.4　全同粒子

§6.5　本章小结

6.5.1　量子系统的附加公理

第七章　定态微扰与跃迁

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.