附录B Hilbert空间初步

本附录与相对论并无直接关系，但是直接利用了前两章关于几何、映射、拓扑、矢量空间及其对偶空间、张量、度规等微分几何概念，将量子力学中的内积、左右矢、线性算符以及用正交归一基底展开波函数等一系列重要问题与上述概念作了联系对比。

所谓量子力学的数学基础，指的是von Neumann等人基于泛函分析为量子力学建立起的一套完整的、严密的数学表述体系，对于量子力学中的许多“物理的”但是缺少严格数学基础的或是数学基础并不那么明显的概念和方法进行了严格的数学化表述，主要讨论了Hilbert空间以及其中的矢量和线性算符的性质。

§B.1 Hilbert空间及其对偶空间

2018年4月20日 12:55

复矢量空间是复数域$\mathbb{C}$上的矢量空间，是一个集合V配以两个映射：加法：$V\times V\to V$和数乘：$\mathbb{C}\times V\to V$并满足相关条件。

复矢量空间V称为复内积空间（inner product space），若存在双线性函数$(\cdot,\cdot)$：$V\times V\to\mathbb{C}$，对$\forall f,g,h\in V$和$\forall c,d\in\mathbb{C}$满足：

1. （对第一元的线性性）$\left(cf+dg,h\right)=c\left(f,g\right)+d\left(g,h\right)$;
2. （共轭对称性）$\left(f,g\right)=\overline{\left(g,f\right)}$;
3. （正定性）$\left(f,f\right)\geq 0$，且$\left(f,f\right)=0\Leftrightarrow f=0$。

称双线性函数为一个内积。
可知，内积对第二元是共轭线性的：$\left(f,cg+dh\right)=\overline{c}\left(f,g\right)+\overline{d}\left(f,h\right)$。
例：$C[a,b]\coloneqq\left\{f(x)\,\middle|\,f(x)\text{是}[a,b]\subset\mathbb{R}\text{上的连续复值函数}\right\}$是无限维内积空间，若定义内积：$\left(f,g\right)\coloneqq\int_a^b f(x)\,\overline{g(x)}\,\mathrm{d}x$

内积空间V中任意两元素之间的距离定义为：$d\left(f,g\right)\coloneqq\sqrt{\left(f-g,f-g\right)}$
易见$d\left(f,g\right)=d\left(g,f\right)$
定义开球：$B_r\left(f\right)\coloneqq\left\{g\in V\middle|\,d\left(f,g\right)\leq r\right\}$
定义自然拓扑：$\mathcal{T}\coloneqq\{\text{空集，或}V\text{中能表示为开球之并的子集}\}$

内积空间V的对偶空间（共轭空间）定义为：
$V^*\coloneqq\left\{\eta\text{：}V\to\mathbb{C}\middle|\eta\text{是连续的线性映射}\right\}$
在泛函分析中，η是V上的连续线性泛函（continuous linear functional）。

1. 加法：$\left(\eta_1+\eta_2\right)\left(f\right)=\eta_1\left(f\right)+\eta_2\left(f\right)$；$\forall\eta_1,\eta_2\in V^*$，$f\in V$；
2. 数乘：$\left(c\eta\right)\left(f\right)=c\,\eta\left(f\right)$，$\forall\eta\in V^*$，$f\in V$，$c\in\mathbb{C}$。

其中零元$\eta_0\left(f\right)=0$，$\forall f\in V$。
（对于有限维内积空间V，则V上的线性泛函η：$V\to\mathbb{C}$必定连续。若V为无限维，则还需要考虑η：$V\to\mathbb{C}$的连续性，这时与$\mathbb{C}$的拓扑有关。
设$z_1=a_1+\mathrm{i}b_1,z_2=a_2+\mathrm{i}b_2\in\mathbb{C}$，其中$a_1,b_1,a_2,b_2\in\mathbb{R}$，则$d\left(z_1,z_2\right)\coloneqq\sqrt{\left(a_1-a_2,f-g\right)}$，借此自然可以定义开球和自然拓扑。）

设V是内积空间，$f\in V$。序列$\{f_n\}$收敛于f，若$\lim\limits_{n\to\infty}d\left(f,f_n\right)=0$。$f$称为$\{f_n\}$的极限，记作$f=\lim\limits_{n\to\infty}f_n$。
V中的$\{f_n\}$序列称为柯西序列（Cauchy sequence），若$\forall\varepsilon>0,\exists N\in\mathbb{N}^*,s.t.\forall m,n>N,d\left(f_m,f_n\right)<\varepsilon$。
内积空间是完备的（complete），若其中任意柯西序列都是收敛的。即完备的内积空间包含

了所有柯西序列的极限。
对任何不完备的内积空间V，总可以找到完备的内积空间$\tilde{V}$，使得$V \subset \tilde{V}$，且$\tilde{V} = \overline{V}$，其中$\overline{V}$是把$\tilde{V}$看作拓扑空间时子集V的闭包。

完备的内积空间叫做Hilbert空间，记作$\mathcal{H}$。
有限维内积空间一定是完备的，即一定是Hilbert空间。

例：$C[a,b] = \{f(x) \mid f(x)\text{是}[a,b] \subset \mathbb{R}\text{上的连续复值函数}\}$不是完备的，因为∃柯西序列$\{f_n\}$的极限不在$C[a,b]$中（极限函数不连续）。为使之完备化，可把$[a,b]$上虽不连续却平方可积的复值函数包括进去：
$\mathrm{L}^2[a,b] \coloneqq \left\{f\text{：}[a,b] \to \mathbb{C} \middle| f\text{满足}\int_a^b |f(x)|^2\,\mathrm{d}x < \infty\right\}$。内积仍定义为：
$(f,g) \coloneqq \int_a^b f(x)\,\overline{g(x)}\,\mathrm{d}x$
则$\mathrm{L}^2[a,b]$是完备的Hilbert空间。
类似的，n维平方可积函数空间$\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$也是Hilbert空间。其中$\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$是量子力学常用的波函数空间（空间波函数的平方可积性）。

内积自然诱导出一个一一的、共轭线性的映射ν：$V \to V^*$，其中$\nu(f) = \eta_f \coloneqq (\cdot, f) \in V^*$，$\forall f \in V$，
其共轭线性性是自然的：$\nu(cf + dg) \coloneqq (\cdot, cf + dg) = \bar{c}\,\nu(f) + \bar{d}\,\nu(g) = \bar{c}(\cdot, f) + \bar{d}(\cdot, g)$，$\forall f, g \in V$，$\forall c, d \in \mathbb{C}$。
然而对于一般的内积空间，若V是无限维的，则V^*也是无限维的，映射不一定是到上的。
但对于Hilbert空间$\mathcal{H}$及其对偶空间$\mathcal{H}^*$，能够证明对$\forall \eta \in \mathcal{H}^*$，有唯一的$f_\eta \in \mathcal{H}$，使得$\eta(g) = (g, f_\eta)$，$\forall g \in \mathcal{H}$。这表明，对Hilbert空间$\mathcal{H}$，通过内积自然诱导出的映射$\nu$：$\mathcal{H} \to \mathcal{H}^*$是一一到上且共轭线性的，其中
$\nu(f) \coloneqq (\cdot, f) \in \mathcal{H}^*$，$\forall f \in \mathcal{H}$。
$\nu[\mathcal{H}] = \mathcal{H}^*$，两个空间同样大。

另外，还可以利用这个映射将$\mathcal{H}^*$也定义为Hilbert空间：$\forall \eta, \xi \in \mathcal{H}^*$，有唯一的$f_\eta, f_\xi \in \mathcal{H}$，使得$\eta = \nu(f_\eta)$，$\xi = \nu(f_\xi)$。定义内积为：
$(\eta, \xi) \coloneqq (f_\eta, f_\xi)$
不难证明这样的定义满足内积条件，$\mathcal{H}^*$是内积空间。还可证明其完备性，故$\mathcal{H}^*$是Hilbert空间。

（无论V是否完备，其对偶空间V^*一定完备：
设$\mathcal{H} = \overline{V}$是将$V$完备化后的Hilbert空间，则$\forall \eta \in \mathcal{H}^*$是$\mathcal{H}$上的连续线性泛函。将其作用范围限制在$V$上，得到$V$上的连续线性泛函$\tilde{\eta} \in V^*$。可见存在映射$\beta$：$\mathcal{H}^* \to V^*$。由$\mathcal{H} = \overline{V}$并借助柯西序列可证$\mathcal{H} = \overline{V}$是一一到上的线性映射，从而$V^*$也获得了$\mathcal{H}^*$的Hilbert空间的结构。
若V不完备，则$\overline{\nu[V]} = V^*$；若V完备，则$\nu[V] = V^*$）

§B.2 Hilbert空间的正交归一基

2018年5月23日　4:50

任意维数$\mathcal{H}$的有限子集$\{f_1, f_2, \cdots, f_N\}$是线性无关的，若

$$\sum_{n=1}^{N} c_n f_n = 0 \Rightarrow c_n = 0,\ n = 1,2,\cdots,N$$

$\mathcal{H}$的任一子集$\{f_\alpha\}$是线性无关的，若$\{f_\alpha\}$的任一非空有限子集线性无关。

若无限维$\mathcal{H}$中的无限序列$\{e_n\}$满足：

1. $\{e_n\}$线性无关；
2. $\mathcal{H}$中任一元素f可由$\{e_n\}$线性表出：

   $$f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e_n\ ,\ c_n \in \mathbb{C}$$

则$\{e_n\}$构成$\mathcal{H}$的一个基底。

$\mathcal{H}$中的序列$\{f_n\}$是一个正交归一序列，若$(f_m, f_n) = \delta_{mn}$。
$\mathcal{H}$中任一正交归一序列都线性无关。所以，对于有限维Hilbert空间来说，元素个数等于空间维数的正交归一序列就算空间的一个基，且是正交归一基。

而对于无限维的$\mathcal{H}$，只有其中满足如下完备性条件的无限正交归一序列才能成为$\mathcal{H}$的一个正交归一基底。
$\mathcal{H}$中的正交归一序列$\{f_n\}$是完备的（complete），若$\mathcal{H}$中除零元外不存在与序列$\{f_n\}$中每一个元素都正交的元素。
$\{f_n\}$的完备性保证$\mathcal{H}$中任一元素f都可由$\{f_n\}$线性表出，因此$\mathcal{H}$任一完备的正交归一序列$\{f_n\}$都是$\mathcal{H}$的正交归一基。
以$\{e_n\}$表示完备的正交归一基，则$\forall f \in \mathcal{H}$：

$$c_n = (f, e_n)$$

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e_n = \sum_{n=1}^{\infty} (f, e_n) e_n$$

以上用自然数n标记表示$\{e_n\}$是可数的（countable）。然而并非任一$\mathcal{H}$都有可数的正交归一基。
一般地，$\mathcal{H}$的（有限或无限，可数或不可数）子集$\{e_\alpha\}$是$\mathcal{H}$的一个基底，若$\{e_\alpha\}$是线性无关的，且$\overline{\mathcal{T}} = \mathcal{H}$，其中
$\mathcal{T} := \{f \in \mathcal{H} | f$可由$\{e_\alpha\}$中有限个元素线性表出$\}$。
事实上任何Hilbert空间都有正交归一基，但并非都可数。只有当它具有可分性（separability）时，才有可数的正交归一基，如平方可积函数空间$\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$。

§B.3 Hilbert空间上的线性算符

2018年5月23日 5:23

映射A：$\mathcal{H}\to\mathcal{H}$称为$\mathcal{H}$上的算符/算子（operator）。作用结果记为$Af$，$\forall f\in\mathcal{H}$。
算符A是线性算符（linear operator），若：
$A(cf+dg)=c\,A\,f+d\,A\,g$，$\forall f,g\in\mathcal{H}$，$c,d\in\mathbb{C}$。
$\mathcal{H}$上全体线性算符构成的集合$\mathcal{L}(\mathcal{H})$成为一个复线性空间。
对$\forall f\in\mathcal{H}$，定义$\mathcal{H}$上算符的：
和：$(A+B)\,f\coloneqq A\,f+B\,f$;
积：$(AB)\,f\coloneqq A(B\,f)$;
相等：$A=B$当且仅当$A\,f=B\,f$。

线性算符A：$D_A(\subset\mathcal{H})\to\mathcal{H}$是有界算符（bounded operator），若$\exists M>0$，使得
$\sqrt{(A\,f\,,A\,f)}\le M\sqrt{(f,f)}$，$\forall f\in\mathcal{H}$。
否则称为无界算符（unbounded operator）。本节只讨论有界算符。

任一算符A的本征方程为$A\,f=cf$，$c\in\mathbb{C}$，$f\in\mathcal{H}$。
给定Hilbert空间上任一线性算符，若$\exists\lambda\in\mathbb{C}$，$\exists f\in\mathcal{H}$满足本征方程，即使得$A\,f=\lambda f$，则称$\lambda$是$A$的一个本征值，$f$是$A$的相应于$\lambda$的一个本征矢。

$\mathcal{H}$上的任一线性算符A自然诱导出$\mathcal{H}^*$上的一个线性算符A^*：$\mathcal{H}^*\to\mathcal{H}^*$:
$(A^*\,\eta)(f)\coloneqq\eta(A\,f)$，$\forall\eta\in\mathcal{H}^*$，$f\in\mathcal{H}$。
易证$A^*\,\eta$是线性连续的。这样的A^*称为A的对偶算符（dual operator）。
A^*与A的对应关系是线性的：$(cA+dB)^*=cA^*+dB^*$。

$\mathcal{H}$上的任一线性算符A的对偶算符A^*又可自然诱导出$\mathcal{H}$上的一个线性算符$A^\dagger$：$\mathcal{H}\to\mathcal{H}$:
设ν：$\mathcal{H}\to\mathcal{H}^*$是一一到上且共轭线性的，其中$\nu(f)\coloneqq(\cdot,f)\in\mathcal{H}^*$，$\forall f\in\mathcal{H}$。
则对于$\forall f\in\mathcal{H}$，$\exists\eta_f=\nu(f)\in\mathcal{H}^*$，则$\exists\eta_h=A^*\,\eta_f\in\mathcal{H}^*$，则$\exists h\in\mathcal{H}$使得$\eta_h(g)=(g,h)$，$\forall g\in\mathcal{H}$，则定义此时
$A^\dagger\,f\coloneqq h$，即$A^\dagger\coloneqq\nu^{-1}\circ A^*\circ\nu$。
（也即：$\forall f,h\in\mathcal{H}$，$\nu(f),\nu(h)\in\mathcal{H}^*$，且则$A^\dagger\,f=h$)
ν的共轭线性性导致ν^{-1}的共轭线性性，加上ν^{-1}的线性性，可知$A^\dagger$为线性的。
称$A^\dagger$为的A伴随算符（adjoint operator）。则：$(A\,f\,,g)=\eta_g(A\,f)=\left(A^*\,\eta_g\right)(f)=\eta_h(f)=(f,h)=(f,A^\dagger\,g)$,
即$(A\,f\,,g)=(f,A^\dagger\,g)$，$\forall f,g\in\mathcal{H}$。
反之，若B：$\mathcal{H}\to\mathcal{H}$且$(A\,f\,,g)=(f,B\,g)$，则$B=A^\dagger$，$\forall f,g\in\mathcal{H}$。
$A^\dagger$与A的对应关系是共轭线性的：$(cA+dB)^\dagger=\overline{c}A^\dagger+\overline{d}B^\dagger$。

设A为$\mathcal{H}$上的有界算符，则$A^{\dagger\dagger} = A$。
利用该关系，结合$(A f, g) = (f, A^\dagger g)$，也可表示为：
$(A^\dagger f, g) = (f, A g)$，$\forall f, g \in \mathcal{H}$。

有界算符A称为自伴（self-adjoint）的或Hermitian的，若$A^\dagger = A$，即$(A f, g) =$
$(f, A g)$，$\forall f, g \in \mathcal{H}$。
（对于有界算符，自伴性等于Hermitian性。对于无界算符，自伴性强于Hermitian性。）

§B.4 Dirac记号

2018年5月23日 11:38

记$|f\rangle = f$，$\forall f \in \mathcal{H}$，称为右矢（ket）；
记$\langle\eta| = \eta$，$\forall \eta \in \mathcal{H}^*$，称为左矢（bra）；
记复数$\langle\eta|f\rangle = \eta(f)$，称为左矢和右矢的内积，实际上是$g_\eta = \nu^{-1}(\eta) \in \mathcal{H}$与$f$的内积。
任一算符A的本征方程写为：$A|\psi\rangle = c|\psi\rangle$。

$|f\rangle \in \mathcal{H}$在映射$\nu$：$\mathcal{H} \to \mathcal{H}^*$下的像$\eta_f \in \mathcal{H}^*$本应记作$\left\langle\eta_f\right|$，但通常简记为$\langle f|$。
这种ν：$\mathcal{H} \to \mathcal{H}^*$下对应关系记作$\langle f| \leftrightarrow |f\rangle$。同理$\langle\eta| \in \mathcal{H}^*$的原像记作$|\eta\rangle$，即$\langle\eta| \leftrightarrow |\eta\rangle$。
则可以表示：$(g,f) = \eta_f(g) = \langle f|g\rangle$
可见，$\langle\psi|\phi\rangle$对第一元是共轭线性的，对第二元是线性的：

1. $\langle\psi|\phi\rangle = \overline{\langle\phi|\psi\rangle}$;
2. $\langle c\psi|d\phi\rangle = \overline{c}d\langle\psi|\phi\rangle$。

记$|c\psi\rangle = c|\psi\rangle$，$\langle c\psi| \leftrightarrow |c\psi\rangle$，则$\langle c\psi| = \overline{c}\langle\psi|$。

算符A作用于右矢$|f\rangle$记作$|Af\rangle = A|f\rangle$，算符A^*作用于左矢$\langle\eta|$记作$A^*\langle\eta|$。则：
$(A^*\langle\eta|)(f) = \langle\eta|(A|f\rangle)$。
考虑A^*的定义式$(A^*\eta)(f) \coloneqq \eta(Af)$，由于$A$：$\mathcal{H} \to \mathcal{H}$，$\eta$：$\mathcal{H} \to \mathbb{C}$，则$\eta \circ A$：$\mathcal{H} \to \mathbb{C}$，$\eta$的连续性保证了$\eta \circ A$的连续性，故$\eta \circ A \in \mathcal{H}^*$，记作$\eta A$，则：
$(A^*\eta)(f) = \eta(Af) = (\eta \circ A)(f) = (\eta A)(f)$，$\forall \eta \in \mathcal{H}^*$，$f \in \mathcal{H}$。
故$A^*\eta = \eta A$，即$A^*\langle\eta| = \langle\eta|A$，于是：$A^*\langle\eta|$
$(A^*\langle\eta|)(f) = \langle\eta|(A|f\rangle) = (\langle\eta|A)|f\rangle$。表明圆括号并无意义。
记$\langle\eta|A|f\rangle = \langle\eta|(A|f\rangle) = (\langle\eta|A)|f\rangle$。

考虑$A|\psi\rangle = |A\psi\rangle \leftrightarrow \langle A\psi|$
而$(\langle\psi|A^\dagger)|\phi\rangle = \langle\psi|(A^\dagger|\phi\rangle) = \langle\psi|A^\dagger\phi\rangle$，又由$(A^\dagger f, g) = (f, Ag)$得：
$(\langle\psi|A^\dagger)|\phi\rangle = \langle\psi|(A^\dagger|\phi\rangle) = \langle\psi|A^\dagger\phi\rangle = \langle A\psi|\phi\rangle$，对$\forall|\phi\rangle \in \mathcal{H}$。故$\langle\psi|A^\dagger = \langle\psi A|$，结合$A|\psi\rangle = |A\psi\rangle \leftrightarrow \langle A\psi|$得$A|\psi\rangle \leftrightarrow \langle\psi|A^\dagger$。
故任一算符A的本征方程$A|\psi\rangle = c|\psi\rangle$的左矢形式为：$\langle\psi|A^\dagger = \langle\psi|\overline{c}$。

设$\{|e_n\rangle\}$是$\mathcal{H}$的正交归一基，则可定义$\mathcal{H}$上的线性算符$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n|$为：

$$\left(\sum_n |e_n\rangle\langle e_n|\right)|\psi\rangle \coloneqq \sum_n |e_n\rangle\langle e_n|\psi\rangle \in \mathcal{H}^*, \ \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

与$f = \sum_{n=1}^{\infty}(f, e_n)e_n$结合得

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n| = I$$

该式称为完备性关系。其中I是$\mathcal{H}$上的恒等算符：$I|\psi\rangle \coloneqq |\psi\rangle$，$\forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}$。

§B.5 态矢与射线

2018年5月23日 15:28

量子系统每一时刻的态由$\mathcal{H}$中的一个右矢$|\psi\rangle$表示，称为态矢（state vector）。

然而态矢与态的关系并非是一一的。
态矢$|\psi\rangle$与自己作线性组合（叠加）：$c|\psi\rangle + d|\psi\rangle = (c+d)|\psi\rangle$，$\forall c, d \in \mathbb{C}$，得到仍属于$\mathcal{H}$的态$(c+d)|\psi\rangle$。应当假定，若$c+d \neq 0$，则认为$(c+d)|\psi\rangle$与原始态$|\psi\rangle$相同。
即认为$|\psi\rangle$与$c|\psi\rangle$，$\forall c \in \mathbb{C}$且$c \neq 0$代表同一个态。

对任一非零元素$|\psi\rangle$，定义$\mathcal{H}$的子集$r_\psi \coloneqq \{c|\psi\rangle | c \in \mathbb{C}且c \neq 0\}$，称为过$|\psi\rangle$的一条射线（ray）。
一条射线对应于量子系统的一个态。
以$\mathcal{H}$中所有射线为元素形成的集合$\mathcal{R}$称为射线空间（ray space）。

§B.6 无界算符及其自伴性

2018年5月23日 20:08

约定：
“$\mathcal{H}$上的算符（operator on $\mathcal{H}$）” 指从$\mathcal{H}$到$\mathcal{H}$的算符，定义域为$\mathcal{H}$。
“$\mathcal{H}$中的算符（operator in $\mathcal{H}$）” 指从$D_A \subset \mathcal{H}$到$\mathcal{H}$的算符，定义域为$\mathcal{H}$的真子集。

以一维空间的波函数空间$\mathrm{L}^2(\mathbb{R})$（无限维空间）为例：
定义位置算符（position operator）X：$D_X \to \mathrm{L}^2(\mathbb{R})$为：$\big(X\psi\big)(x) \coloneqq x\,\psi(x)$，$\forall\psi \in D_X$，$x \in \mathbb{R}$。
X的定义域不是$\mathrm{L}^2(\mathbb{R})$，因为$\exists\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R})$使得$X\,\psi = x\psi \notin \mathrm{L}^2(\mathbb{R})$。如：

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{x}, & x > 1 \\ 0, & x \le 1 \end{cases}$$

是平方可积的，然而

$$X\,\psi(x) = x\,\psi(x) = \begin{cases} 1, & x > 1 \\ 0, & x \le 1 \end{cases}$$

却非平方可积。因而X只是“$\mathrm{L}^2(\mathbb{R})$中的算符”。
定义动量算符（momentum operator）P：$D_P \to \mathrm{L}^2(\mathbb{R})$为：$\big(P\,\psi\big)(x) \coloneqq -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\,\psi(x)}{\mathrm{d}x}$，$\forall\psi \in D_P$，$x \in \mathbb{R}$。
P的定义域不是$\mathrm{L}^2(\mathbb{R})$，因为$\exists\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R})$使得$P\,\psi \notin \mathrm{L}^2(\mathbb{R})$。具体来说，它的定义域$D_P$满足：对$\forall\psi \in D_P$，$\psi(x)$在每一有界区间$[a,b] \in \mathbb{R}$上绝对连续且导数$\frac{\mathrm{d}\,\psi(x)}{\mathrm{d}x} \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R})$。

线性算符A：$D_A(\subset \mathcal{H}) \to \mathcal{H}$是有界算符（bounded operator），若$\exists M > 0$，使得$\sqrt{\big(A\,f, A\,f\big)} \le M\sqrt{\big(f, f\big)}$，$\forall f \in \mathcal{H}$。
否则称为无界算符（unbounded operator）。

若A是$\mathcal{H}$上的有界线性算符，则$A^\dagger \coloneqq \nu^{-1} \circ A^* \circ \nu$也是$\mathcal{H}$上的有界线性算符。

对于有限维Hilbert空间，其上的线性算符都是有界算符。
反之，量子力学用到的无限维Hilbert空间中的许多线性算符都是无界算符。例如，位置算符、动量算符、Hamiltonian算符等。
有界算符的定义域总可以延拓到整个$\mathcal{H}$，然而无界算符不能如此。

设A：$D_A \to \mathcal{H}$是$\mathcal{H}$中的无界算符，定义域$D_A \subset \mathcal{H}$。由于$\exists f \in \mathcal{H}$但$f \notin D_A$，对这些$f$，$Af$无意义。这样$\big(A^*\,\eta\big)\big(f\big) \coloneqq \eta\big(A\,f\big)$就无法定义$A^*$，因为要定义$A^*\,\eta \in \mathcal{H}^*$，就要定义它对每一$f \in \mathcal{H}$的作用。从而也无法进一步定义$A^\dagger$。

可以按照如下方式定义$A^\dagger$：
给定$f \in \mathcal{H}$，若∃唯一的$h \in \mathcal{H}$，使得$(f, A\,g) = (h, g)$，则定义$A^\dagger f \coloneqq h$。
$A^\dagger$的定义域自然为：$D_{A^\dagger} = \{f \in \mathcal{H} | \exists$唯一的$h \in \mathcal{H}$，使得$(f, A\,g) = (h, g)$，$\forall g \in D_A\}$。

拓扑空间X的子集$U \subset X$称为稠密子集（dense subset），若$\overline{U} = X$（$\overline{U}$是U的闭包）。
Hilbert空间中的算符A是稠定的（densely defined，稠密定义的），若$\overline{D_A} = X$。
则有命题：设A是$\mathcal{H}$中的线性算符，$f \in \mathcal{H}$，则满足$(f, A\,g) = (h, g)$，$\forall g \in D_A$的$h \in \mathcal{H}$是唯一的当且仅当A是稠定的。
即当且仅当A为稠定的时，其伴随算符$A^\dagger$可以由上述过程定义，且满足$(A^\dagger f, g) = (f, A\,g)$，$\forall g \in D_A$，$f \in D_{A^\dagger}$。
这样定义的$A^\dagger$是线性的。
可以证明，位置算符、动量算符都是稠定的。
注意：D_A的稠密性不能保证$D_{A^\dagger}$的稠密性。

$\mathcal{H}$中任意（有界或无界）的稠定线性算符A：$D_A \to \mathcal{H}$是Hermitian的，若$(A\,f, g) = (f, A\,g)$，$\forall f, g \in D_A$。
由定理：$\mathcal{H}$中Hermitian算符必定有界。因此导致结论：无界的Hermitian算符定义域不可能是全$\mathcal{H}$。

对$\mathcal{H}$中的线性算符，其和的定义域是原始算符定义域之交；其积有意义要求内算符的值域包含于外算符的定义域之中。而：

1. $A = B$若$D_A = D_B$且$A\,f = B\,f$对$\forall f \in D_A = D_B$；
2. $A \subset B$若$D_A \subset D_B$且$A\,f = B\,f$对$\forall f \in D_A$。称B为A的延拓或扩张。

$\mathcal{H}$中的任意稠定线性算符A是Hermitian的，当且仅当$A \subset A^\dagger$。
A是厄米的不保证$A^\dagger$是Hermitian的。事实上对厄米算符A有$A \subset A^{\dagger\dagger} \subset A^\dagger$。

若厄米算符A有界，则可以把A唯一地延拓为$\mathcal{H}$上的有界算符，仍记为A。同理，$A^\dagger$也可唯一地延拓为$\mathcal{H}$上的有界算符$A^\dagger$，且：$(A\,f, g) = (f, A\,g) = (A^\dagger f, g)$，$\forall f, g \in \mathcal{H}$。

可见对有界算符来说，Hermitian性可以导出$A^\dagger = A$。
但是对无界算符来说，确实存在$D_A \subset D_{A^\dagger}$的无界Hermitian算符，对这种算符只有$A \subset A^\dagger$。因此无界算符的Hermitian性不能确保$A^\dagger = A$。$A^\dagger = A$是比$A \subset A^\dagger$更高的要求：
$\mathcal{H}$中的任意（有界或无界）的稠定算符A是自伴（self-adjoint）的，若$A^\dagger = A$。

无界算符Hermitian性与自伴性的区分，关键在于定义域。
可以证明，$\mathrm{L}^2(\mathbb{R})$中的位置算符X：$D_X \to \mathrm{L}^2(\mathbb{R})$、动量算符$P$：$D_P \to \mathrm{L}^2(\mathbb{R})$、Hamiltonian算符是自伴的。
（$f \in D_P$，当且仅当$f \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R})$且在每一有界闭区间上绝对连续，且导数属于$\mathrm{L}^2(\mathbb{R})$。）

§B.7 自伴算符的谱分解定理

2018年5月24日 1:25

Hilbert空间$\mathcal{H}$的子集$M \subset \mathcal{H}$称为子空间（subspace），若它对$\mathcal{H}$的加法和数乘封闭，并且用$\mathcal{H}$的拓扑衡量是闭集。
设M是$\mathcal{H}$的任意子集，则子集$M^{\perp} \coloneqq \{f \in \mathcal{H} | (f, g) = 0，\forall g \in M\}$称为$M$的正交补（orthogonal complement）。
若M是$\mathcal{H}$的子空间，则可以证明：

1. $M^{\perp}$也是子空间；
2. $M \cap M^{\perp} = \{0\}$；
3. 只要$M \neq \mathcal{H}$，则$M^{\perp}$必含有非零元。
4. 投影定理：$\forall f \in \mathcal{H}$，则必$\exists f_1 \in M$，$f_2 \in M^{\perp}$，使得$f = f_1 + f_2$。$f_1$称为$f$在$M$上的投影。

定义到上映射P：$\mathcal{H} \to M$为$Pf \coloneqq f_1$，$\forall f \in \mathcal{H}$，则易见$P$是线性算符，定义域$\mathcal{H}$，值域$M$，称为（到）$M$上的投影算符（projection operator onto M）。
给定Hilbert空间上任一线性算符，若$\exists \lambda \in \mathbb{C}$，$f \in \mathcal{H}$，使得$Af = \lambda f$，则称$\lambda$是$A$的一个本征值（eigenvalue），$f$是$A$的相应于$\lambda$的本征矢（eigenvector）。
$\forall \lambda \in \mathbb{C}$，$A$的相应于$\lambda$的所有本征矢（包括零元）构成集合$M_\lambda$，则$M_\lambda$的闭包$\overline{M_\lambda}$是$\mathcal{H}$的子空间，称为$A$的相应于$\lambda$的本征空间（eigenspace）。对有限维Hilbert空间，$\overline{M_\lambda} = M_\lambda$。
若$\overline{M_\lambda}$维数$m > 1$，则称λ是m重简并的（m-fold degenerate）。
自伴算符相应于不同本征值的本征空间互为正交补。
所有本征空间的维数和等于Hilbert空间总维数。

有限n维Hilbert空间上的Hermitian算符可以用自己的相互线性无关的（包括属于不同本征空间的，和属于同一个维数$m > 1$的本征空间中相互线性无关的）n个本征矢构成的基底来将自己表示为一个n阶对角矩阵，且对角元就是各个本征矢对应的本征值（实数，因而矩阵是实矩阵）。λ_k是n维Hilbert空间上Hermitian算符的K个本征值（$K \leq n$）之一，P_k是$\mathcal{H}$到M_{λ_k}（对于有限维Hilbert空间即$\overline{M_{\lambda_k}}$）上的投影算符。则有：

$$A = \sum_{k=1}^{K} \lambda_k P_k$$

且P_k满足（I是恒等算符，O是零算符）：

1. $I = \sum_{k=1}^{K} P_k$
2. $P_k P_j = O$，若$k \neq j$。

以上用投影算符表示算符A的过程，称为算符A的对角化。
由于投影算符性质简单得多，因此算符对角化对研究算符的性质有着重要作用。

然而当$\mathcal{H}$为无穷维的时候，Hermitian甚至自伴算符都不一定有本征值。即使有也未必完备（即可以构成基底）。

因此推广本征值集的概念为谱（spectrum）：算符A的谱是的一个复数域的闭子集$\sigma(A)$。若A有本征值λ，则$\lambda \in \sigma(A)$，然而$\sigma(A)$中的点（谱点）却并不一定都是A的本征值。
自伴算符的谱点都是实数（Hermitian却非自伴算符的谱点可以包含非实数）。
对于有限维情况，算符只有点谱（离散谱），谱点对应于本征值。
（动量算符P和位置算符X这两个特殊的无界自伴算符，他们的谱$\sigma(P)$和$\sigma(X)$是$\mathbb{C}$中的整个实数轴，且只有连续谱，任一谱点都不是本征值。）

对于有限维情况，我们可以定义投影算符族$\{Q_i | i = 0,1,2,\cdots,K，K \le n\}$，其中

$$Q_0 \coloneqq O，\ Q_i \coloneqq \sum_{k=1}^{i} P_k，\ i = 1,2,\cdots,K$$

易见$P_k = Q_k - Q_{k-1}$，$1 \le k \le K$，且$Q_K = I$。则：

$$A = \sum_{k=1}^{K} \lambda_k (Q_k - Q_{k-1})$$

对于一般的无穷维情况，类比于以上的有限维，可以得到自伴算符的谱分解定理：
任意维Hilbert空间中任一（有界或无界，有或无本征值）稠定自伴算符A，必存在唯一的不可数的单参投影算符族$\{E_\lambda | \lambda \in \mathbb{R}\}$，使得$A$可以被表示为：

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda\, \mathrm{d}E_\lambda$$

称为A的广义对角化形式，且

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}E_\lambda$$

以上表示式的含义是：

$$(f, A\, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda\, \mathrm{d}(f, E_\lambda\, g)，\ \forall f, g \in \mathcal{H}$$

该定理对应相当于量子力学中的完备性条件。
其中$\{E_\lambda | \lambda \in \mathbb{R}\}$称为$A$的谱族（spectral family），利用投影算符族$\{Q_i\}$可以定义如下：

$$E_\lambda \coloneqq \begin{cases} O & \lambda < \lambda_1 \\ Q_k & \lambda_k \le \lambda < \lambda_{k+1}，\ k = 1,2,\cdots,K-1 \\ I & \lambda \ge \lambda_k \end{cases}$$

其中$\lambda_k \in \sigma(A) \subset \mathbb{R}$,

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \mathrm{d}E_\lambda\ ,$$

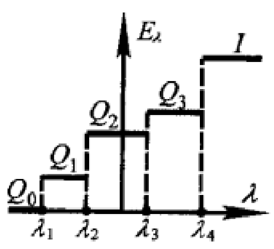

图 B-4　E_λ 定义示意

注：以上谱定理，即广义对角化过程对无限维Hilbert空间中非自伴的Hermitian算符不成立，尽管对于有限维情况来说Hermitian（因而自伴）算符就可以做到对角化。因此，分清算符的自伴性与Hermitian性至关重要。这也是严格规定物理上的可观测量（observable）必须是自

伴算符（而不仅仅是Hermitian算符）的原因之一。

自伴算符的谱分解定理（谱定理）可以将自伴算符约化为无数简单地多的投影算符。

§B.8 δ函数的数学基础

2018年6月29日 21:22

前面的讨论是基于von Neumann等人为量子力学建立起的一套完整的、严密的数学基础，事实上其中并不涉及δ函数。但是在一般的物理领域，Dirac提出δ函数的概念并将之广泛用于量子力学理论之中，获得了极大成功。
Dirac定义的δ函数是一族满足如下条件的“一元函数”：

1. $\delta_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) = \begin{cases} 0 & x \neq x_0 \\ \infty & x = x_0 \end{cases}$；
2. 对$\mathbb{R}$上任意函数$\varphi(x)$有
   $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0)\, \varphi(x)\, \mathrm{d}x = \varphi(x_0)$

然而这样的函数无论如何不是普通意义下的一元函数。

之后数学家经过研究，提出了广义函数理论，终于将δ函数置于严格的数学基础之上。
广义函数是定义在某特定带拓扑结构的函数空间K上的连续线性泛函。
K是全体“足够好”函数的集合，定义为：
$K \coloneqq \{\varphi: \mathbb{R} \to \mathbb{C} \mid \varphi\text{是}\mathbf{C}^\infty\text{的，}\varphi\text{的支集有界}\}$，其中函数$\varphi(x)$的支集定义为定义域子集$\{x \in \mathbb{R} \mid \varphi(x) \neq 0\}$的闭包。
然后再在K上定义适当的拓扑，定义了这一拓扑的K称为基本空间。则可对K上线性泛函定义连续性。
K上的每一个连续线性泛函称为一个广义函数（generalized function），亦称为一个分布（distribution）。
广义函数都无穷阶可微，且导函数也是广义函数。

可以证明：

1. $\mathbb{R}$上的任意一个局部可积函数（即在$\mathbb{R}$的每一个有界区域内都可积）$f(x)$都可以看作一个广义函数η_f；更确切地说，$f(x)$按照下式定义的泛函η_f：
   $\eta_f(\varphi) \coloneqq \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \varphi(x)\, \mathrm{d}x$，$\forall \varphi \in K$
   是一个广义函数，称为函数型的广义函数。
2. $\forall x_0 \in \mathbb{R}$，按照下式定义的连续线性泛函：
   $\delta_{x_0}(f) \coloneqq f(x_0)$，$\forall f \in K$
   也是一个广义函数，但是不存在任何局部可积函数$f(x)$满足$\eta_f = \delta_{x_0}$，因此δ_{x_0}属于非函数型的广义函数。

Dirac事实上是将第二种情况形式化地写成：
$\delta_{x_0}(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0)\, f(x)\, \mathrm{d}x = f(x_0)$，$\forall f \in K$
其中$\delta(x - x_0)$只是一个象征性的符号，并非函数。真正满足Dirac定义性质的，其实是泛函：
$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0)\,(\cdot)\, \mathrm{d}x: K \to \mathbb{C},\ f(x) \mapsto f(x_0)$
但是Dirac从来只将$\delta(x - x_0)$放在积分号内使用，因此不会出现问题。