

第八章 量子力学的矩阵形式

§8.1 态和力学量的表象和表象变换 栋梁表象

8.1.1 量子态的表象 态矢量 连续谱和离散谱

在量子力学中，描写量子态和力学量的方式不是唯一的。一种具体的方式称为一种**表象**。我们在前面已经介绍过坐标表象和动量表象。在一维情况下，用 $\Psi(x, t)$ 描写量子态是**坐标表象**，用 $\Phi(p, t)$ 描写量子态是**动量表象**，它们之间是 Fourier 变换的关系。这两种表象都是连续表象。

现在介绍一般的离散表象。取一个力学量 \hat{Q} (Hermitian 算符)，假设它的本征值集是离散的，记为 $\{q_1, q_2, \dots\}$ ，本征函数系记为 $\{u_1(x), u_2(x), \dots\}$ 。为简单起见，假设所有的本征值都是非简并的。这个本征函数系的正交归一性是

$$(u_m(x), u_n(x)) = \delta_{mn},$$

再假设它是完备的，也就是这些本征函数满足等式

$$\sum_n u_n(x) u_n^*(x') = \delta(x - x'),$$

因此，任意一个波函数 $\Psi(x, t)$ 都可以对 $\{u_n(x)\}$ 展开，得到

$$\Psi(x, t) = \sum_n a_n(t) u_n(x),$$

其中各项的系数可以通过正交归一关系 $(u_m(x), u_n(x)) = \delta_{mn}$ 求出，为

$$a_n(t) = (u_n(x), \Psi(x, t)).$$

我们称这样做是变换到了 \hat{Q} 表象，函数 $\{a_n(t), n=1, 2, \dots\}$ 也可以称为 \hat{Q} 表象中的“波函数”。

更方便的记法是把 $\{a_n(t)\}$ 排成矩阵

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix},$$

它称为 \hat{Q} 表象中的**态矢量**，而

$$\Psi^\dagger(t) = (a_1^*(t), a_2^*(t), \dots, a_n^*(t), \dots)$$

称为 **Hermitian 共轭的态矢量**。显然我们有

$$\Psi^\dagger(t) \Psi(t) = \sum_n |a_n(t)|^2 = (\Psi(x, t), \Psi(x, t)),$$

这里第一个式子中的运算是矩阵乘法，即行乘以列，最后一个式子表示 $\Psi(x, t)$ 的内积。

在这里， $\{u_n(x)\}$ 又称为 \hat{Q} 表象的**基矢量或基底**， $\{a_n(t)\}$ 又称为态矢量的**分量或投影**。之所以采用这些术语，在本质上是由于量子态满足叠加原理，所以在数学上它们构成一个线性空间，或者称为矢量空间，这个空间称为给定算符的（或给定系统的）**希尔伯特(Hilbert)空间**。

如果算符 \hat{Q} 的本征值是连续谱，以上各式就要做相应的改变。设 \hat{Q} 的本征值记为 $q \in (-\infty, +\infty)$ ，本征函数系记为 $\{u_q(x)\}$ ，那么它的正交归一性是

$$(u_q(x), u_{q'}(x)) = \int u_q^*(x) u_{q'}(x) dx = \delta(q - q'),$$

完备性是

$$\int u_q(x) u_q^*(x') dq = \delta(x - x').$$

任意波函数 $\Psi(x, t)$ 对 $\{u_q(x)\}$ 的展开式是

$$\Psi(x, t) = \int \Xi(q, t) u_q(x) dq,$$

其中

$$\Xi(q, t) = \int u_q^*(x) \Psi(x, t) dx.$$

以坐标表象为例。记算符 \hat{x} 的本征值为 $x_0 \in (-\infty, +\infty)$ 的本征函数是 $u_{x_0}(x)$ ，那么我们有本征方程

$$\hat{x} u_{x_0}(x) = x_0 u_{x_0}(x),$$

它的解显然是

$$u_{x_0}(x) = \delta(x - x_0),$$

函数系 $\{u_{x_0}(x) | x_0 \in (-\infty, +\infty)\}$ 的正交归一条件是

$$\int u_{x_1}^*(x) u_{x_2}(x) dx = \int \delta(x - x_1) \delta(x - x_2) dx = \delta(x_1 - x_2),$$

完备性是

$$\int u_{x_0}(x) u_{x_0}^*(x') dx_0 = \int \delta(x - x_0) \delta(x' - x_0) dx_0 = \delta(x - x'),$$

所以任意波函数 $\Psi(x, t)$ 对 $\{u_q(x)\}$ 的展开式是

$$\Psi(x, t) = \int \Psi(x_0, t) u_{x_0}(x) dx_0 = \int \Psi(x_0, t) \delta(x - x_0) dx_0.$$

这样看来，我们也不妨把 $\Psi(x, t) \equiv \Psi_x(t)$ 称为“矩阵元”，只不过它的矩阵的指标 x 是连续变量。但是毕竟这种语言不如函数的语言更直接，所以此后我们在量子力学的矩阵形式中主要用离散表象。

这些方法和概念不难推广到多自由度情形。对于多自由度系统，我们需要取它的完备力学量集的同时本征函数系作为 Hilbert 空间的基底，以构成一个表象。所以，一个“完备力学量集”和一个“表象”实际上是相同的含义。同时，也不难推广到多自由度连续本征值谱的情形。

8.1.2 算符的矩阵表示

一个算符表为 $\hat{F}(x, -i\hbar\partial_x)$ 是它的坐标表象，这意味着它作用于任意波函数 $\psi(x)$ 都能够生成完全确定的新波函数 $\phi(x)$ ，即

$$\phi(x) = \hat{F}(x, -i\hbar\partial_x) \psi(x).$$

现在把 $\psi(x)$ 和 $\phi(x)$ 都变换到 \hat{Q} 表象中，

$$\psi(x) = \sum_n a_n u_n(x), \quad \phi(x) = \sum_n b_n u_n(x),$$

代入上面的方程得

$$\sum_n b_n u_n(x) = \sum_n a_n \hat{F} u_n(x),$$

左乘以 $u_m^*(x)$ 并积分，得

$$\sum_n b_n \int u_m^*(x) u_n(x) dx = \sum_n a_n \int u_m^*(x) \hat{F} u_n(x) dx,$$

也就是

$$\sum_n b_n (u_m, u_n) = \sum_n a_n (u_m, \hat{F} u_n),$$

利用 $\{u_n(x)\}$ 的正交归一性 $(u_m(x), u_n(x)) = \delta_{mn}$ 就得到：

$$b_m = \sum_n (u_m, \hat{F} u_n) a_n.$$

现在记

$$F_{mn} = (u_m, \hat{F} u_n),$$

那么就有

$$b_m = \sum_n F_{mn} a_n.$$

它也可以写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

所以，若记

$$F = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

则方程就成为

$$\phi = F\psi,$$

其中等式的右方再次理解为矩阵乘法。这告诉我们，在离散表象中，算符用（方）**矩阵**代表。

算符的 Hermitian 性在矩阵形式中的表现是

$$F_{mn}^* = (u_m, \hat{F}u_n)^* = (\hat{F}u_n, u_m) = (u_n, \hat{F}u_m) = F_{nm},$$

即是

$$F^\dagger = F, \quad (F^\dagger)_{mn} = (F_{nm})^*,$$

矩阵 F^\dagger 称为矩阵 F 的 Hermitian 共轭矩阵。

不难发现：一个算符在其自身的表象中是对角矩阵，各对角元素就是各本征值。

恒等算符（即单位算符） \hat{I} 定义为

$$\hat{I}\psi = \psi, \quad \forall \psi.$$

所以它在任何离散表象中的矩阵都是单位矩阵。

8.1.3 表象变换 量子力学的么正不变性 线性代数，基底变换

仍以一维情形为例。设我们再取另一个与算符 \hat{Q} 函数独立的算符 \hat{R} ，求出它的本征值集 $\{r_n\}$ 和本征函数系 $\{v_n(x)\}$ ，我们就构造了 \hat{R} 表象。原来的基底 $\{u_n(x)\}$ 也可以用新的基底 $\{v_n(x)\}$ 来展开，得到

$$u_n(x) = \sum_m v_m(x) S_{mn},$$

其中

$$S_{mn} = (v_m, u_n).$$

如果一个态 ψ 在 \hat{Q} 表象中的矩阵元是 $\{a_n\}$ ，在 \hat{R} 表象中的矩阵元是 $\{a'_n\}$ ，那么

$$\psi = \sum_n a_n u_n = \sum_{m,n} S_{mn} a_n v_m = \sum_m a'_m v_m,$$

所以

$$a'_m = \sum_n S_{mn} a_n,$$

把 $\{a_n\}$ 和 $\{a'_n\}$ 都排成矩阵，就有

$$\psi' = S\psi,$$

其中

$$S = (S_{mn}).$$

注意，基底的变换 $u_n = \sum_m v_m S_{mn}$ 和矩阵元的变换 $a'_m = \sum_n S_{mn} a_n$ 用的是互相转置的矩阵。这些关系就称为（从 \hat{Q} 表象到 \hat{R} 表象的）表象变换。类似地不难证明：在表象变换下，一个算符所对应的矩阵的变换是

$$F' = SFS^\dagger.$$

那么矩阵 $S = (S_{mn})$ 应该满足什么条件？考虑到量子力学里的基本可观察量是态矢量的内积，我们应该要求在表象变换下内积保持不变。设态 ψ 和态 ϕ 在 \hat{Q} 表象中的矩阵元分别是 $\{a_n\}$ 和 $\{b_n\}$ ，在 \hat{R} 表象中的矩阵元分别是 $\{a'_n\}$ 和 $\{b'_n\}$ ，那么

$$(\phi, \psi) = \sum_n b_n^* a_n = \sum_l b_l'^* a_l' = \sum_{l,m,n} S_{lm}^* b_m^* S_{ln} a_n,$$

所以

$$\sum_l S_{lm}^* S_{ln} = \delta_{mn}.$$

记得矩阵 S 的 Hermitian 共轭矩阵 S^\dagger 是

$$(S^\dagger)_{ml} = S_{lm}^*,$$

所以上式就是

$$S^\dagger S = S S^\dagger = I,$$

或者说

$$S^\dagger = S^{-1}.$$

满足这个条件的矩阵称为**么正矩阵**。所以表象变换是**么正变换**。事实上，我们在前面已经谈到过：坐标表象和动量表象（这是两个连续表象）之间的变换，以及系统的对称性变换，都是么正变换。

现在我们总结一下表象变换即么正变换的特点。么正变换不改变任何量子力学方程，即，如果

$$\phi = F\psi,$$

那么也有

$$\phi' = F'\psi',$$

这是因为

$$\phi' = S\phi = SF\psi = SFS^{-1}S\psi = F'\psi'.$$

前面还说过，么正变换不改变态矢量的内积，因而算符的本征值、力学量的几率分布和平均值等等都保持不变。总而言之，么正变换完全不改变量子力学理论的结构和理论对实验观察的预言。这称为量子力学理论的**么正不变性**，也就是量子力学理论的**表象无关性**。事实上我们应该说，么正不变性（有时候也简称为么正性）是量子力学的最**根本**的不变性。

§8.2 量子力学的矩阵形式

8.2.1 离散表象中的量子力学诸方程

坐标表象与离散表象的关系和对比如下表。

	坐标表象	离散表象
态	波函数 $\Psi(x, t)$, 复共轭波函数 $\Psi^*(x, t)$	列矢量 $\Psi(t)$, 行矢量 $\Psi^\dagger(t)$
算符	$\hat{F}(x, -i\hbar\partial_x)$	矩阵 $F = (F_{mn})$
算符作用于态	$\Phi(x, t) = \hat{F}(x, -i\hbar\partial_x)\Psi(x, t)$	$\Phi(t) = F\Psi(t)$ (矩阵乘法)
态的内积	$\int \Phi^*(x)\Psi(x)dx$	$\Phi^\dagger\Psi$ (矩阵乘法)

因此，在离散表象中量子力学的诸方程的形式如下：

(1) 态的归一： $\Psi^\dagger\Psi=1$ ，两态正交： $\Phi^\dagger\Psi=0$ ，

(2) 力学量的平均值（若 Ψ 已归一）： $\bar{F} = \Psi^\dagger F \Psi$ ，

(3) 本征方程：

$$F\psi = \lambda\psi,$$

(4) 含时间的 Schrödinger 方程：

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi(t),$$

以上各式中的乘法均理解为矩阵（包括列矢量和行矢量）的乘法。

8.2.2 离散表象中本征方程的解法

设

$$\psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

那么本征方程 $F\psi = \lambda\psi$ 就是

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

或写为

$$\begin{pmatrix} F_{11}-\lambda & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22}-\lambda & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0,$$

也经常简写为

$$(F - \lambda I)\psi = 0,$$

I 代表单位矩阵。这是一个齐次线性方程组，它的解 ψ 当然不能是 0 矢量。线性代数的基本理论告诉我们：这个方程组有非零解的充分必要条件是

$$\begin{vmatrix} F_{11}-\lambda & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22}-\lambda & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0,$$

或简记为

$$|F - \lambda I| = 0.$$

这个方程称为长期(久期)方程。如果 \hat{F} 是 $n \times n$ 矩阵，那么它是关于 λ 的 n 次代数方程。根据“代数基本定理”，在复数域内， n 次代数方程一定有 n 个根（ k 重根算 k 个根），这些根就是本征值。矩阵 \hat{F} 的

Hermitian 性保证了长期方程的根都是**实数**。把这些本征值记为 $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ （先假设没有重根），再代回方程

$$\begin{pmatrix} F_{11} - \lambda_i & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} - \lambda_i & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0, \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

就可以对各个本征值求出 $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ ，但有一个整体的常数因子未定（因为 $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ 同时乘以相同的常数仍然满足方程），再利用归一化条件把它定出，就完全得到了归一化的**本征矢量**。有重根出现的情况稍微复杂一些，因为这时 $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ 当中可以自由选择的分量数目更多一些，这里不再细说。

8.2.3 算符矩阵的对角化

矩阵的本征矢量还有更多的用场。设已经求出了属于本征值 $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ （没有重根）的归一化本征矢量分别为 $\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\}$ （每个 ψ 都是一个 n 分量的列矢量），现在把它们排成一个矩阵

$$S = ((\psi_1), (\psi_2), \dots, (\psi_n)),$$

它的 **Hermitian** 共轭矩阵是（注意每一个 ψ^\dagger 都是 n 分量的行矢量）

$$S^\dagger = \begin{pmatrix} (\psi_1^\dagger) \\ (\psi_2^\dagger) \\ \vdots \\ (\psi_n^\dagger) \end{pmatrix}.$$

首先我们发现

$$S^\dagger S = \begin{pmatrix} (\psi_1^\dagger) \\ (\psi_2^\dagger) \\ \vdots \\ (\psi_n^\dagger) \end{pmatrix} ((\psi_1), (\psi_2), \dots, (\psi_n)) = \begin{pmatrix} \psi_1^\dagger \psi_1 & \psi_1^\dagger \psi_2 & \cdots & \psi_1^\dagger \psi_n \\ \psi_2^\dagger \psi_1 & \psi_2^\dagger \psi_2 & \cdots & \psi_2^\dagger \psi_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_n^\dagger \psi_1 & \psi_n^\dagger \psi_2 & \cdots & \psi_n^\dagger \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

也就是说 S 是一个幺正矩阵，而这个性质完全等价于 $\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\}$ 的正交归一性。进一步，利用它对矩阵 F 做一个幺正变换，又发现

$$\begin{aligned} S^\dagger F S &= \begin{pmatrix} (\psi_1^\dagger) \\ (\psi_2^\dagger) \\ \vdots \\ (\psi_n^\dagger) \end{pmatrix} (F) ((\psi_1), (\psi_2), \dots, (\psi_n)) = \begin{pmatrix} (\psi_1^\dagger) \\ (\psi_2^\dagger) \\ \vdots \\ (\psi_n^\dagger) \end{pmatrix} (\lambda_1(\psi_1), \lambda_2(\psi_2), \dots, \lambda_n(\psi_n)) \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1 \psi_1^\dagger \psi_1 & \lambda_2 \psi_1^\dagger \psi_2 & \cdots & \lambda_n \psi_1^\dagger \psi_n \\ \lambda_1 \psi_2^\dagger \psi_1 & \lambda_2 \psi_2^\dagger \psi_2 & \cdots & \lambda_n \psi_2^\dagger \psi_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1 \psi_n^\dagger \psi_1 & \lambda_2 \psi_n^\dagger \psi_2 & \cdots & \lambda_n \psi_n^\dagger \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

所以这个幺正变换正好把矩阵 F **对角化**了，对角元素就是它的本征值。这给出了算符（矩阵）的本征函数（矢量）的更多意义。所以，求解本征方程的问题又被称为算符（矩阵）的**对角化问题**，因为这个步骤使我们找到了从矩阵的一般表象（不是对角矩阵）到它自身的表象（是对角矩阵）的那个幺正变换。

例子：把下列矩阵对角化：

$$F = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

首先不难验证这个 F 是 **Hermitian** 矩阵：

$$F^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = F.$$

为了求本征值，可以直接写下它的长期方程：

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0,$$

所以本征值是：

$$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = -1.$$

对于 $\lambda_1 = 1$ ，本征方程成为

$$\begin{pmatrix} -1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0,$$

所以

$$-a_1 - i a_2 = 0, \quad i a_1 - a_2 = 0,$$

但实际上这两个式子是完全等价的，都意味着

$$a_2 = i a_1,$$

所以它的本征矢量是

$$\psi_1 = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix},$$

归一化条件是

$$\psi_1^\dagger \psi_1 = |a_1|^2 + |i a_1|^2 = 2 |a_1|^2 = 1,$$

所以

$$|a_1|^2 = \frac{1}{2},$$

可以取

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

所以归一化的本征矢量是：

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}.$$

类似地，对于 $\lambda_2 = -1$ ，归一化的本征矢量是：

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

现在矩阵 S 和 S^\dagger 是

$$S = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad S^\dagger = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

不难发现

$$\begin{aligned} S^\dagger S &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ S^\dagger F S &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

§8.3 Dirac 符号

不同的量子力学表象所表达的**物理内容**是完全相同的，但是在表面上看来，不同表象中的量子力学方程的形式却可能很不一样。为了避免不同表象带来的形式上的差异，Dirac 引进了一种**与表象无关的符号体系**，以后就被称为 Dirac 符号。它的主要内容如下。

8.3.1 两种态矢量

量子体系的状态用**态矢量**代表。态矢量有**右矢** $|\psi\rangle$ 和**左矢** $\langle\psi|$ 两种，二者的关系是

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger, \quad |\psi\rangle = \langle\psi|^\dagger,$$

这里可以把 Hermitian 共轭运算 † 看成一种满足某些公理要求的“形式运算”。

对于两个态 $|\psi\rangle$ 和 $|\phi\rangle$ ，定义 $\langle\phi|\psi\rangle$ 代表一个**复数**，称为二者的**内积**，它还满足关系

$$(\langle\phi|\psi\rangle)^* = \langle\psi|\phi\rangle.$$

又，假定（注意 $\langle\psi|\psi\rangle$ 一定是实数）

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \quad \text{其中 } = \text{号只对 } |\psi\rangle = 0 \text{ 成立,}$$

态的归一是

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1,$$

两态正交是

$$\langle\phi|\psi\rangle = 0.$$

8.3.2 算符及其本征方程

算符的头顶上不再打“ \wedge ”号。算符（例如 F ）对右矢的作用直接写为 $F|\psi\rangle$ ，结果仍然是一个右矢。算符 F 也可以作用于左矢，写为 $\langle\psi|F$ ，结果还是一个左矢。不妨注意，按照这个定义，像

$$|\phi\rangle\langle\psi|$$

这样的式子是一个**算符**。**任何算符 F 都有它的 Hermitian 共轭算符，记为 F^\dagger** ，定义为

$$(\langle\phi|F|\psi\rangle)^* = \langle\psi|F^\dagger|\phi\rangle, \quad \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle.$$

所以，如果

$$F|\psi\rangle = |\phi\rangle,$$

那么

$$\langle\psi|F^\dagger = \langle\phi|.$$

算符乘积的 Hermitian 共轭满足等式

$$(FG)^\dagger = G^\dagger F^\dagger.$$

如果算符 F 满足

$$F = F^\dagger,$$

它就称为自 **Hermitian 共轭算符**，简称为 **Hermitian 算符**。显然对于 Hermitian 算符有关系

$$(\langle\phi|F|\psi\rangle)^* = \langle\psi|F|\phi\rangle,$$

所以

$$(\langle\psi|F|\psi\rangle)^* = \langle\psi|F|\psi\rangle,$$

也就是说， $\langle\psi|F|\psi\rangle$ 是实数。

算符的**本征方程**是

$$F|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle,$$

其中 λ 是本征值， $|\psi_\lambda\rangle$ 是算符 F 的**属于本征值 λ 的本征矢量**。对于 Hermitian 算符，本征方程也可以写成左矢的形式：

$$\langle\psi_\lambda|F = \langle\psi_\lambda|\lambda,$$

它和右矢形式的方程是等价的。力学量（算符）的**平均值**公式是

$$\bar{F} = \langle \psi | F | \psi \rangle, \quad (\text{如果 } |\psi\rangle \text{ 已经归一})$$

或者

$$\bar{F} = \frac{\langle \psi | F | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (\text{如果 } |\psi\rangle \text{ 没有归一})$$

当 F 是 Hermitian 算符时， \bar{F} 显然恒为实数。

8.3.3 完备态矢量集和表象

态矢量集 $\{|n\rangle \ (n=1, 2, \dots)\}$ 如果是**正交归一**的：

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn}, \quad (m, n = 1, 2, \dots)$$

和**完备**的：

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = I. \quad (I \text{ 是单位算符})$$

那么它就构成了一个**表象的基底**。上面的求和式中的某一项

$$P_n = |n\rangle \langle n|$$

称为属于态 $|n\rangle$ 的**投影算符**，它的主要性质是

$$P_n^2 = P_n, \quad \sum_n P_n = \sum_n |n\rangle \langle n| = I.$$

态矢量 $|\psi\rangle$ 在表象 $\{|n\rangle\}$ 中的分解是

$$|\psi\rangle = \sum_n P_n |\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad \text{其中 } c_n = \langle n | \psi \rangle.$$

算符 F 在表象 $\{|n\rangle\}$ 中的**矩阵元**是

$$F_{mn} = \langle m | F | n \rangle,$$

而算符 F 本身可以写为

$$F = \sum_{m,n} F_{mn} |m\rangle \langle n|.$$

所以，如果取 F 自己的表象，则有

$$F = \sum_n f_n |n\rangle \langle n|,$$

其中 $\{f_n \ (n=1, 2, \dots)\}$ 是 F 的本征值， $\{|n\rangle \ (n=1, 2, \dots)\}$ 是对应的本征态。

在 Dirac 符号的体系下，通常的波函数 $\psi(x)$ （实变量的复函数）实际上是坐标表象中的内积。坐标表象的基矢量集是 $\{|x\rangle \ (x \in \square)\}$ ，满足

$$\langle x | x_0 \rangle = \delta(x - x_0), \quad (x_0 \in \square)$$

注意这里等式左方的 x 是坐标算符，等式右方的 x_0 是坐标本征值，它的正交归一性是

$$\langle x_1 | x_2 \rangle = \delta(x_1 - x_2), \quad (x_1, x_2 \in \square)$$

而完备性是

$$\int |x\rangle \langle x| dx = I, \quad (I \text{ 是单位算符})$$

所以对任何量子态 $|\psi\rangle$ 可写

$$|\psi\rangle = I |\psi\rangle = \int |x\rangle \langle x | \psi \rangle dx \equiv \int |x\rangle \psi(x) dx,$$

其中

$$\psi(x) \equiv \langle x | \psi \rangle$$

就是通常称之为的波函数。