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 $\{q_1, q_2, \cdots\}$，本征函数系记为 $\{u_1(x), u_2(x), \cdots\}$。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

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

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

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

我们称这样做是变换到了 **$\hat{Q}$ 表象**，函数 $\{a_n(t), n = 1, 2, \cdots\}$ 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

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

称为 **Hermitian 共轭的态矢量**。显然我们有

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

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。

本征函数集

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

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

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

$$\hat{x}u_{x_0}(x)=x_0u_{x_0}(x),$$

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 $\hat{F}(x,-\mathrm{i}\hbar\partial_x)$ 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

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

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

$$\psi(x)=\sum_n a_nu_n(x),\qquad \phi(x)=\sum_n b_nu_n(x),$$

代入上面的方程得

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

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 $\big(u_m(x),u_n(x)\big)=\delta_{mn}$ 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 量子力学的幺正不变性 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

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

或者说

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

满足这个条件的矩阵称为**幺正矩阵**。所以表象变换是**幺正变换**。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，都是幺正变换。

现在我们总结一下表象变换即幺正变换的特点。幺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，幺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。总而言之一句话，幺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**幺正不变性**，也就是量子力学理论的**表象无关性**。事实上我们应该说，幺正不变性（有时候也简称为幺正性）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	$\hat{F}(x,-\mathrm{i}\hbar\partial_x)$	矩阵 $F=(F_{mn})$
算符作用于态	$\Phi(x,t)=\hat{F}(x,-\mathrm{i}\hbar\partial_x)\Psi(x,t)$	$\Phi(t)=F\,\Psi(t)$（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：

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

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$\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}$（先假设没有重根），再代回方程

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

就可以对各个本征值求出$\{a_1,a_2,\cdots,a_n\}$，但有一个整体的常数因子未定（因为$\{a_1,a_2,\cdots,a_n\}$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$\{a_1,a_2,\cdots,a_n\}$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$\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}$（没有重根）的归一化本征矢量分别为$\{\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_n\}$（每个$\psi$都是一个$n$分量的列矢量），现在把它们排成一个矩阵

$$S=\big((\psi_1),(\psi_2),\cdots,(\psi_n)\big),$$

它的 Hermitian 共轭矩阵是（注意每一个$\psi^\dagger$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

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

也就是说S是一个幺正矩阵，而这个性质完全等价于$\{\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_n\}$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

$$S^\dagger FS=\begin{pmatrix} (\psi_1^\dagger) \\ (\psi_2^\dagger) \\ \vdots \\ (\psi_n^\dagger) \end{pmatrix}(F)\big((\psi_1),(\psi_2),\cdots,(\psi_n)\big)=\begin{pmatrix} (\psi_1^\dagger) \\ (\psi_2^\dagger) \\ \vdots \\ (\psi_n^\dagger) \end{pmatrix}\big(\lambda_1(\psi_1),\lambda_2(\psi_2),\cdots,\lambda_n(\psi_n)\big)$$

$$=\begin{pmatrix} \lambda_1\psi_1^\dagger\psi_1 & \lambda_2\psi_1^\dagger\psi_2 & \cdots & \lambda_n\psi_1^\dagger\psi_n \\ \lambda_1\psi_2^\dagger\psi_1 & \lambda_2\psi_2^\dagger\psi_2 & \cdots & \lambda_n\psi_2^\dagger\psi_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1\psi_n^\dagger\psi_1 & \lambda_2\psi_n^\dagger\psi_2 & \cdots & \lambda_n\psi_n^\dagger\psi_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix},$$

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：

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

首先不难验证这个F是 Hermitian 矩阵：

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

为了求本征值，可以直接写下它的长期方程：

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

所以本征值是：

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

对于 $\lambda_1=1$，本征方程成为

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

所以

$$-a_1-\mathrm{i}\,a_2=0,\qquad \mathrm{i}\,a_1-a_2=0,$$

但实际上这两个式子是完全等价的，都意味着

$$a_2=\mathrm{i}\,a_1,$$

所以它的本征矢量是

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

归一化条件是

$$\psi_1^{+}\psi_1=|a_1|^2+|\mathrm{i}a_1|^2=2|a_1|^2=1,$$

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：

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

类似地，对于 $\lambda_2=-1$，归一化的本征矢量是：

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

现在矩阵 S 和 $S^{\dagger}$ 是

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

不难发现

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

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

§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**$|\ \rangle$和**左矢**$\langle\ |$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

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

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

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

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“∧”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

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

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

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

所以

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

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

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

或者

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

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

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

和**完备**的：

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

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

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

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 $\{f_n\,(n=1,2,\cdots)\}$ 是 F 的本征值，$\{|n\rangle\ (n=1,2,\cdots)\}$ 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 $\{|x\rangle(x\in\mathbb{R})\}$，满足

$$x|x_0\rangle=x_0|x_0\rangle,\quad (x_0\in\mathbb{R})$$

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

$$\langle x_1|x_2\rangle=\delta(x_1-x_2),\quad (x_1,x_2\in\mathbb{R})$$

而完备性是

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

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。