

2：态矢量和算符

#Quantum_Mechanics

我们考虑一个复向量空间，它的维度是由我们所考虑的系统决定的。例如，在之前的 S-G 实验中，一个银原子通过实验装置后只有两条路径可选（这是因为它的自旋只能取两个值），此时这个空间的维度是 2；当我们后面讨论连续谱，例如坐标和动量时，这个空间的维度就是无限维的。我们将这样的向量空间称为希尔伯特空间。一个系统的状态由希尔伯特空间中的一个矢量表示，我们将这样的矢量称为右矢，记作 $|\alpha\rangle$ ，这个矢量应当含有系统的全部信息。在希尔伯特空间中，我们可以定义右矢的加法和数乘运算。注意：右矢 $|\alpha\rangle$ 和 $c|\alpha\rangle$ 含有完全相同的信息。一个可观测量，例如粒子的自旋或者动量，使用希尔伯特空间到自身的线性映射表示，这种线性映射称为算符。一个算符可以像线性代数中一样，作用在一个右矢的左侧： $A|\alpha\rangle$ 。一般来说， $A|\alpha\rangle$ 不会是 $|\alpha\rangle$ 的整数倍，但是，对于算符 A ，存在一些特殊的右矢，使得：

$$A|\alpha'\rangle = \alpha'|\alpha'\rangle \quad A|\alpha''\rangle = \alpha''|\alpha''\rangle \cdots$$

这里的 $|\alpha'\rangle, |\alpha''\rangle, \dots$ 被称为 A 的本征矢量，而 α', α'', \dots 则被称为 A 的本征值。在前面的 S-G 实验中，我们显然有：

$$S_z|S_z; +\rangle = \frac{\hbar}{2}|S_z; +\rangle \quad S_z|S_z; -\rangle = -\frac{\hbar}{2}|S_z; -\rangle$$

一个算符 A 的 N 个本征矢量可以作为 N 维希尔伯特空间的基向量，因此希尔伯特空间中的任意一个向量可以被写为：

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle$$

在上面我们处理的是右矢空间，现在我们介绍右矢空间的对偶空间——左矢空间。对偶空间是由对偶本征矢量 $\{\langle a'|\}$ 张成的，每一个右矢有一个与之——对应的左矢。注意与右矢 $c|\alpha\rangle$ 对应的左矢是 $c^*\langle\alpha|$ 。我们现在可以定义左矢和右矢的内积：

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\beta| \cdot |\alpha\rangle$$

这个内积有两条基本性质：

- $\langle\beta|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\beta\rangle$

- $\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$, 当且仅当 $|\alpha\rangle$ 为零时成立。这一点也被称为“正定的度规”
两个右矢 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 是正交的, 如果 $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$ 。另外, 我们一般都会使用规范化的矢量 (因为不同模长的矢量表示的信息是相同的) :

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} \right) |\alpha\rangle$$

接下来我们看算符。可观测量使用算符表示, 作用在右矢的左侧。我们称算符 $X = Y$, 如果对于任意 $|\alpha\rangle$ 有 $X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle$ 。算符可以相加, 且其加法满足结合律。一个算符可以从右侧作用到一个左矢上: $\langle \alpha | X$, 这将产生另一个左矢。注意: 与右矢 $X|\alpha\rangle$ 对偶的左矢是 $|\alpha\rangle X^\dagger$, 这里的 X^\dagger 称为 X 的厄尔米特伴随, 或者简称为伴随。如果算符 X 满足 $X = X^\dagger$, 那么我们称 X 是自伴的 (厄米的)。

算符可以相乘, 通常满足结合律但是不满足交换律。有性质: $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$ 。另外, 我们还可以考虑右矢和左矢的外积:

$$|\beta\rangle \cdot \langle \alpha| = |\beta\rangle \langle \alpha|$$

我们将外积视作一个算符处理。注意 $|\alpha\rangle X$, $X \langle \alpha|$, $|\alpha\rangle |\beta\rangle$ 和 $\langle \alpha | \langle \beta |$ 都是错误的写法。

刚才说过算符满足结合律, 实际上, 结合律在处理任何左矢、右矢和算符的合法相乘时都适用, 例如: $(|\beta\rangle \langle \alpha|) \cdot |\gamma\rangle = |\beta\rangle \cdot (\langle \alpha | \gamma \rangle)$, 以及 $\langle \beta | \cdot X |\alpha\rangle = \langle \beta | X \cdot |\alpha\rangle$ 。对于第二个式子, 我们会把它统一写成 $\langle \beta | X |\alpha\rangle$ 。注意:

$$\langle \beta | X |\alpha\rangle = \{ \langle \alpha | X^\dagger \cdot |\beta\rangle \}^* = \langle \alpha | X^\dagger |\beta\rangle^*$$