3：希尔伯特空间的基和具象化的矩阵表示

#Quantum_Mechanics

让我们考虑一个厄米算符的本征值和本征矢量。

> Note
>
> 厄米算符有实的本征值和互相正交的本征矢量。

证明：设 a', a'' 是 A 的两个互不相同的本征值，那么我们有：$A|a'\rangle = a'|a'\rangle, A|a''\rangle = a''|a''\rangle$。将第二个式子放在左矢空间中（直观上，这相当于将式子两边取共轭转置）：$\langle a''|A^\dagger = \langle a''|A = a''^\star\langle a''|$。将第一式的左右两侧同时乘以 $\langle a''|$，将第二式的左右两侧同时乘以 $|a'\rangle$ 并相减，我们就得到：

$$(a' - a''^\star)\langle a''|a'\rangle = 0$$

如果 a' 和 a'' 是一致的，那么我们就得到 a' 的共轭是其自身，因此 A 的本征值都是实数；如果它们不相等，那么我们得到 $\langle a''|a'\rangle = 0$，因此 A 有互相正交的本征矢量。

另一个自然的问题是：A 的本征向量构成的单位正交组 $\{|a\rangle\}$ 是完备的吗？考虑一个矢量 $|\alpha\rangle$ 向这个正交组上的投影：

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

显然，我们必须有

$$\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = I$$

（有的时候右侧也使用 1 表示，只不过这里的 1 是单位算符）这个方程被称为完备性关系。这个式子可以为我们的计算提供便利，这是因为我们可以在任何位置插入这组完备性关系，例如考虑：

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha| \cdot \left(\sum |a'\rangle\langle a'|\right) \cdot |\alpha\rangle = \sum |\langle a'|\alpha\rangle|^2 = 1$$

另外，这里的 $\Lambda_{a'}=|a'\rangle\langle a'|$ 被称为对于 $|a'\rangle$ 的投影算符。那么完备性关系被写成 $\sum_{a'}\Lambda_{a'}=I$。

接下来我们展示一下如何使用方阵表示一个算符。插入两次完备性关系：

$$X=\sum_{a''}\sum_{a'}|a''\rangle\langle a''|X|a'\rangle\langle a'|$$

这样的话，$\langle a''|X|a'\rangle$ 就有 n^2 个，我们将算符 X 用矩阵表示为：（注意！这里不是相等，只是表示为）

$$X=\left[\langle a^{(i)}|X|a^{(j)}\rangle\right]$$

其中 i 代表行，j 代表列。如果 X 是厄米算符，那么上面这个矩阵的共轭转置等于其自身。为了验证这一表示的正确性，我们考虑 $Z=XY$，那么：

$$\langle a''|Z|a'\rangle=\langle a''|XY|a'\rangle=\sum_{a'''}\langle a''|X|a'''\rangle\langle a'''|Y|a'\rangle$$

类似地，考虑关系 $|\gamma\rangle=X|\alpha\rangle$，我们插入一次完备性关系：

$$\langle a'|\gamma\rangle=\sum_{a''}\langle a'|X|a''\rangle\langle a''|\alpha\rangle$$

那么，我们可以将 γ 和 α 投影在基底上的分量写成列向量的形式，也就是 $|\gamma\rangle=\begin{bmatrix}\langle a^{(1)}|\gamma\rangle\\ \langle a^{(2)}|\gamma\rangle\\ \cdots\end{bmatrix}$，对于左矢空间中的 $\langle\gamma|=\langle\alpha|X$，我们只需要共轭转置一下就行了。

对于内积 $\langle\beta|\alpha\rangle$，可以将其写成表示 $\langle\beta|$ 的行向量和表示 $|\alpha\rangle$ 的列向量的内积，而外积 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ 也是类似的。如果 A 的本征矢量被用作基底，那么算符的矩阵表示就非常简单，因为 $\langle a''|A|a'\rangle=a'\delta_{a'a''}$，此时有：

$$A=\sum_{a'}a'|a'\rangle\langle a'|=\sum_{a'}a'\Lambda_{a'}$$

我们考虑一下上面这些东西在 $\dfrac{1}{2}$ 自选系统上的应用。根据完备性关系，单位算符被写为：

$$1=|+\rangle\langle+|\ +\ |-\rangle\langle-|$$

由于这里我们的基底就是 S_z 的本征矢，于是根据我们刚才的讨论，它应该被写为：

$$S_z=\left(\frac{\hbar}{2}\right)[|+\rangle\langle+|\ -\ |-\rangle\langle-|]$$

另外有两个特殊的算符（它们都不是厄尔米特算符）：$S_+ = \hbar|+\rangle\langle-|, S_- = \hbar|-\rangle\langle+|$。注意 S_+ 的作用是将 $|-\rangle$ 变成 $|+\rangle$，也就是将自旋 $+1$，将 $|+\rangle$ 变成 0。之后我们会再讨论这两个算符。