课堂练习

练习1：证明$(\hat{A}^\dagger)^\dagger=\hat{A}$

证明：首先要证明如下引理：对于任意矢量$|u\rangle,|v\rangle$均有$\langle u|\hat{A}|v\rangle=\langle u|\hat{B}|v\rangle$，则$\hat{A}=\hat{B}$。以下是可能的证明思路：

证明1：移项可得$\langle u|(\hat{A}-\hat{B})|v\rangle=0$，将$\langle u|$按共轭空间的基矢$\{\langle a_i|\}$展开，得$\langle u|=\sum\limits_i\langle u|a_i\rangle\langle a_i|$，从而有$\sum\limits_i\langle u|a_i\rangle\langle a_i|(\hat{A}-\hat{B})|v\rangle=0$，该式对任意$|u\rangle,|v\rangle$均成立（因此可以取一个向量$|u\rangle$，使得对任意的$i$都有$\langle u|a_i\rangle\neq 0$），这意味着$(\hat{A}-\hat{B})|v\rangle$与共轭空间的所有基矢均正交，从而$(\hat{A}-\hat{B})|v\rangle$只能为零向量（否则$\langle u|(\hat{A}-\hat{B})|v\rangle=0$不成立），即$|(\hat{A}-\hat{B})|v\rangle=\mathbf{0}$，移项得$\hat{A}|v\rangle=\hat{B}|v\rangle$，因此$\hat{A}=\hat{B}$，证毕

证明2：原式两边左乘任意不为零的矢量$|w\rangle$，得$|w\rangle\langle u|\hat{A}|v\rangle=|w\rangle\langle u|\hat{B}|v\rangle$，即$(|w\rangle\langle u|\hat{A})\cdot|v\rangle=(|w\rangle\langle u|\hat{B})\cdot|v\rangle$。根据算符相等的定义，有$|w\rangle\langle u|\hat{A}=|w\rangle\langle u|\hat{B}$，然后再左乘相应的共轭矢量$\langle w|$，得$\langle w|w\rangle\langle u|\hat{A}=\langle w|w\rangle\langle u|\hat{B}$，消去$\langle w|w\rangle$得$\langle u|\hat{A}=\langle u|\hat{B}$，再根据算符相等的定义，得$\hat{A}=\hat{B}$

现在回到本题。对于矢量$|u\rangle,|v\rangle$，由算符的厄米共轭性质，得$\langle u|\hat{A}|v\rangle=\langle v|\hat{A}^\dagger|u\rangle^*$，两边取复共轭，得$\langle u|\hat{A}|v\rangle^*=\langle v|\hat{A}^\dagger|u\rangle$，另一方面，按照厄米共轭算符的定义，$\langle v|\hat{A}^\dagger|u\rangle=\langle u|(\hat{A}^\dagger)^\dagger|v\rangle^*$，因此$\langle u|\hat{A}|v\rangle^*=\langle u|(\hat{A}^\dagger)^\dagger|v\rangle^*$，两边再取复共轭，得$\langle u|\hat{A}|v\rangle=\langle u|(\hat{A}^\dagger)^\dagger|v\rangle$，结合前面的引理，可得$(\hat{A}^\dagger)^\dagger=\hat{A}$

练习2：试证明，如果对任意矢量$|u\rangle$，$\langle u|\hat{A}|u\rangle$都为实数，则算符$\hat{A}$为厄米算符

证明：因$\langle u|\hat{A}|u\rangle$为实数，故有$\langle u|\hat{A}|u\rangle=\langle u|\hat{A}|u\rangle^*$。又根据厄米共轭算符的定义，得$\langle u|\hat{A}|u\rangle^*=\langle u|\hat{A}^\dagger|u\rangle$，故有$\langle u|\hat{A}|u\rangle=\langle u|\hat{A}^\dagger|u\rangle$，根据练习1的引理，可得$\hat{A}=\hat{A}^\dagger$，即算符$\hat{A}$为厄米算符

练习3：试证明，如果对任意矢量$|u\rangle$，$\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|u\rangle=\langle u|u\rangle$，则算符$\hat{A}$为幺正算符

证明：设有任意矢量$|u\rangle,|v\rangle$，它们的其中一种线性组合为$|w\rangle=|u\rangle+\lambda|v\rangle$，其中$\lambda$为非零复数，对应共轭矢量为$\langle w|=\langle u|+\lambda^*\langle v|$，则：

$$\langle w|w\rangle=(\langle u|+\lambda^*\langle v|)(|u\rangle+\lambda|v\rangle)=\langle u|u\rangle+\lambda\langle u|v\rangle+\lambda^*\langle v|u\rangle+\lambda\lambda^*\langle v|v\rangle$$

另一方面，用算符$\hat{A}$对前述线性组合进行变换，得$\hat{A}|w\rangle=\hat{A}|u\rangle+\lambda\hat{A}|v\rangle$（根据分配律和数乘交换律），其对应的共轭矢量为$\langle w|\hat{A}^\dagger=\langle u|\hat{A}^\dagger+\lambda^*\langle v|\hat{A}^\dagger$，因此：

$$\langle w|\hat{A}^\dagger\hat{A}|w\rangle=(\langle u|\hat{A}^\dagger+\lambda^*\langle v|\hat{A}^\dagger)(\hat{A}|u\rangle+\lambda\hat{A}|v\rangle)=\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|u\rangle+\lambda\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle+\lambda^*\langle v|\hat{A}^\dagger\hat{A}|u\rangle+\lambda\lambda^*\langle v|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle$$

结合题意，有$\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|u\rangle=\langle u|u\rangle$，$\langle v|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle=\langle v|v\rangle$，$\langle w|\hat{A}^\dagger\hat{A}|w\rangle=\langle w|w\rangle$，故联立并化简得：

$$\lambda\langle u|v\rangle+\lambda^*\langle v|u\rangle=\lambda\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle+\lambda^*\langle v|\hat{A}^\dagger\hat{A}|u\rangle$$

又根据内积的性质，得$\langle u|v\rangle^*=\langle v|u\rangle$，再根据厄米共轭算符的定义，得$\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle^*=\langle v|\hat{A}^\dagger\hat{A}|u\rangle$，因此有：

$$\begin{aligned}
&\lambda\langle u|v\rangle+\lambda^*\langle u|v\rangle^*=\lambda\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle+\lambda^*\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle^*\\
\Rightarrow&\lambda\langle u|v\rangle+(\lambda\langle u|v\rangle)^*=\lambda\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle+(\lambda\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle)^*\\
\Rightarrow&2\Re(\lambda\langle u|v\rangle)=2\Re(\lambda\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle)\\
\Rightarrow&\Re(\lambda\langle u|v\rangle)=\Re(\lambda\langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|v\rangle)
\end{aligned}$$

取$\lambda=1$，则有$\Re(\langle u|v\rangle)=\Re(\langle u|\hat{A}^{\dagger}\hat{A}|v\rangle)$；取$\lambda=\mathrm{i}$，则有$\Re(\mathrm{i}\langle u|v\rangle)=\Re(\mathrm{i}\langle u|\hat{A}^{\dagger}\hat{A}|v\rangle)$，即$\Im(\langle u|v\rangle)=\Im(\langle u|\hat{A}^{\dagger}\hat{A}|v\rangle)$。从而得 $\langle u|\hat{A}^{\dagger}\hat{A}|v\rangle=\langle u|v\rangle=\langle u|\hat{I}|v\rangle$，根据练习1的引理，得$\hat{A}^{\dagger}\hat{A}=\hat{I}$，即算符$\hat{A}$为幺正算符

练习4：如果$\hat{A}|u\rangle=|v\rangle$，则显然有$\hat{A}|u\rangle=|v\rangle\langle u|u\rangle=(|v\rangle\langle u|)\cdot|u\rangle$（假定$|u\rangle$是个归一化矢量），是否由此可以得出$\hat{A}=|v\rangle\langle u|$?

解：算符相等的定义为：对于任意向量$|u\rangle$，均有$\hat{A}|u\rangle=\hat{B}|u\rangle$，则$\hat{A}=\hat{B}$。显然对于题述情形，由于仅仅存在$|u\rangle$，使得$\hat{A}|u\rangle=(|v\rangle\langle u|)\cdot|u\rangle$，因此并不能说明$\hat{A}=|v\rangle\langle u|$。事实上，取$\hat{A}=|v\rangle(\langle u|+\lambda\langle w|)=|v\rangle\langle u|+\lambda|v\rangle\langle w|$，其中λ为任意复数，$\langle w|$为满足$\langle w|u\rangle=0$的任意向量，则：

$$\hat{A}|u\rangle=|v\rangle\langle u|u\rangle+\lambda|v\rangle\langle w|u\rangle=|v\rangle\langle u|u\rangle=(|v\rangle\langle u|)\cdot|u\rangle$$

显然满足题意，但当$\lambda\neq 0$时，$\hat{A}\neq|v\rangle\langle u|$

练习5：在函数空间中，$\hat{d}_x$作用在右矢的定义是非常明确的，$\hat{d}_x|u\rangle=\frac{d}{dx}u(x)$。但根据前面的讨论，算符$\hat{d}_x$也应该能作用于左矢，那么如何定义$\langle u|\hat{d}_x$?

解：我们知道，$\frac{d}{dx}$是一个右结合的运算符，即波函数在坐标表象下表示时，形式上$\frac{d}{dx}$只能作用在其右侧的波函数$v(x)$，而不能作用在左侧的波函数$u(x)$，因此考虑函数空间的如下内积$\langle u|\hat{d}_x|v\rangle$，有：

$$\begin{aligned}\langle u|\hat{d}_x|v\rangle&=\int_0^a u^*(x)\hat{d}_x v(x)dx=\int_0^a u^*(x)\frac{dv(x)}{dx}dx=\int_0^a u^*(x)dv(x)\\&=[u^*(x)v(x)]_0^a-\int_0^a du^*(x)v(x)\quad\text{（利用分部积分法）}\\&=-\int_0^a du^*(x)v(x)\quad\text{（利用波函数的边界条件，即波函数在边界的函数值为0）}\end{aligned}$$

比较$\int_0^a u^*(x)\hat{d}_x v(x)dx$和$-\int_0^a du^*(x)v(x)$得$\langle u|\hat{d}_x=-\frac{d}{dx}u^*(x)$

练习6：在$L_2[0,a]$空间中证明：$\hat{p}_x$是个厄米算符

证明：易知：

$$\begin{aligned}\langle u|\hat{p}_x|v\rangle&=\int_0^a u^*(x)\hat{p}_x v(x)dx=\int_0^a u^*(x)[-\mathrm{i}\hbar\frac{dv(x)}{dx}]dx=-\mathrm{i}\hbar\int_0^a u^*(x)dv(x)\\&=-\mathrm{i}\hbar\{[u^*(x)v(x)]_0^a-\int_0^a du^*(x)v(x)\}=-\mathrm{i}\hbar\{-\int_0^a du^*(x)v(x)\}\\&=\int_0^a[\mathrm{i}\hbar\frac{du^*(x)}{dx}]v(x)dx=\int_0^a[\hat{p}_x u(x)]^*v(x)dx\\&=[\int_0^a v^*(x)\hat{p}_x u(x)dx]^*=\langle v|\hat{p}_x|u\rangle^*\end{aligned}$$

因此根据定义，得$\hat{p}_x$是个厄米算符

练习7：证明贝克-豪斯多夫公式

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}}=\hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+\frac{1}{3!}[\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]]+\dots$$

证明：根据$\mathrm{e}^{\hat{A}}$和$\mathrm{e}^{-\hat{A}}$的展开式（此处定义$\hat{A}^0=\hat{I}$）

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}=\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{i!}\hat{A}^n\quad\mathrm{e}^{-\hat{A}}=\sum_{i=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{i!}\hat{A}^n$$

以上公式可改写为：

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}} = (\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{i!}\hat{A}^{n})\hat{B}\Big[\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-1)^{n}}{j!}\hat{A}^{n}\Big]$$