（量子力学）
复向量空间

颜文斌

清华大学

内容提要

- **复数**
- 复线性空间、内积和复矩阵
- 厄米矩阵和幺正矩阵

复数

- 虚数单位：i，$i^2 = -1$
  - 也有书用记号j、$\sqrt{-1}$
- 复数：$\mathrm{z} = a + bi,\ a, b \in \mathbb{R}$
  - 实部：$\operatorname{Re} z = a \in \mathbb{R}$
  - 虚部：$\operatorname{Im} z = b \in \mathbb{R}$
- 复平面：所有复数的集合记为$\mathbb{C}$
  - x轴坐标是复数的实部
  - y轴坐标是复数的虚部

复数的运算

- 复数$z_1 = a_1 + b_1 i$，$z_2 = a_2 + b_2 i$
- 加法：$z_1 + z_2 = (a_1 + a_2) + (b_1 + b_2)i$
- 乘法：$z_1 z_2 = (a_1 a_2 - b_1 b_2) + (a_1 b_2 + b_1 a_2)i$
- 复共轭：$\bar{z}_1 = z_1^* = a_1 - b_1 i$
- 模：$|z_1| = \sqrt{\bar{z}_1 z_1} = \sqrt{a_1^2 + b_1^2}$
- 逆：$z_1^{-1} = \frac{\bar{z}_1}{|z_1|^2}$，$z_1^{-1} z_1 = z_1 z_1^{-1} = 1$

模和幅角

- $z = a + bi = re^{i\theta}$
  - $r = |z|$
  - $\theta = \tan^{-1}\frac{b}{a}$
- 欧拉公式：$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$
  - $a = r\cos\theta$，$b = r\sin\theta$
- $z_1 z_2 = r_1 r_2 e^{i(\theta_1+\theta_2)}$，模长相乘，幅角相加
  - $z^n = r^n e^{in\theta}$

内容提要

- 复数
- **复线性空间、内积和复矩阵**
- 厄米矩阵和幺正矩阵

$\mathbb{C}^n$和 $\mathbb{C}^n$上的运算

- 元素：$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix}$, $z_i \in \mathbb{C}$
- 线性组合：$c_1\boldsymbol{z}_1 + c_2\boldsymbol{z}_2$， $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$
- 复共轭： $\bar{\mathbf{z}} = \begin{bmatrix} \bar{z}_1 \\ \vdots \\ \bar{z}_n \end{bmatrix}$
- 共轭转置： $\bar{\mathbf{z}}^T = [\bar{z}_1 \quad \cdots \quad \bar{z}_n]$
  - 也记做$\boldsymbol{z}^H = \boldsymbol{z}^\dagger$
- 标准基： $\boldsymbol{e}_i = [0, \cdots, 0,1,0, \cdots, 0]^T$

例

- $4\begin{bmatrix}1\\i\end{bmatrix}+i\begin{bmatrix}1-i\\i\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5+4i\\-1+4i\end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix}1\\i\end{bmatrix}^*=\begin{bmatrix}1\\-i\end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix}1\\i\end{bmatrix}^\dagger=\begin{bmatrix}1 & -i\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\-i\end{bmatrix}^T$

一般复线性空间

- 定义：域$\mathbb{F}$上的向量空间是满足以下公理的集合V（131页）
  1. $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}+\boldsymbol{x}$
  2. $\boldsymbol{x}+(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})=(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})+\boldsymbol{z}$
  3. 存在唯一的零向量$\mathbf{0}$使得对于任意$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{x}+\mathbf{0}=\boldsymbol{x}$
  4. 对任意$\boldsymbol{x}$，存在唯一的向量$-\boldsymbol{x}$使得$\boldsymbol{x}+(-\boldsymbol{x})=\mathbf{0}$
  5. 1乘$\boldsymbol{x}$等于$\boldsymbol{x}$
  6. $(c_1c_2)\boldsymbol{x}=c_1(c_2\boldsymbol{x})$
  7. $c(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})=c\boldsymbol{x}+c\boldsymbol{y}$
  8. $(c_1+c_2)\boldsymbol{x}=c_1\boldsymbol{x}+c_2\boldsymbol{x}$
- 复线性空间：把数域换成复数

复线性空间的性质

- 所有实线性空间的知识都可以推广到复线性空间，只需要把原来是实数的地方换成复数
- **线性无关**：复向量组$\{\boldsymbol{z}_1, \cdots, \boldsymbol{z}_n\}$是线性无关的当且仅当方程$c_1\boldsymbol{z}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{z}_n = \boldsymbol{0}$只有零解$c_1 = \cdots = c_n = 0$
- 注意：$c_1, \cdots, c_n$都是复数
- 例：$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix} 0 \\ i \end{bmatrix}$是线性无关的

例：量子力学

- 量子态（quantum state）：量子系统在任意时刻的状态可以由一个有限或者无限维线性空间（态空间）的向量$|A\rangle$描述，并且满足态叠加原理。也就是说，如果$|A\rangle$和$|B\rangle$是量子态，那么$c_1|A\rangle + c_2|B\rangle$也是量子态，其中$c_1$和$c_2$是任意两个复数。
  - $|A\rangle$叫右矢（ket，ket vector）
  - 一般量子系统对应的线性空间是无限维的，但很多时候我们只讨论一个有限维的线性子空间
- P. A. M. Dirac, the principles of quantum mechanics, pp16

> We now assume that *each state of a dynamical system at a particular time corresponds to a ket vector, the correspondence being such that if a state results from the superposition of certain other states, its corresponding ket vector is expressible linearly in terms of the corresponding ket vectors of the other states, and conversely.* Thus the state R results from

内积和内积空间

- $\mathbb{C}^n$标准内积：向量$\boldsymbol{u}$和$\boldsymbol{v}$的内积为$\boldsymbol{u}^\dagger\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^n \bar{u}_1 v_1 + \cdots + \bar{u}_n v_n$
- 一般复线性空间V的内积$\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle$：$V\times V \to \mathbb{C}$
  - 共轭：$\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle = \overline{\langle\boldsymbol{v},\boldsymbol{u}\rangle}$
  - 对第二个变量线性：$\langle\boldsymbol{u},c\boldsymbol{v}\rangle = c\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle$，$\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w}\rangle = \langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle + \langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{w}\rangle$
  - 正定性：$\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}\rangle \geq 0$，等号成立当且仅当$\boldsymbol{u} = 0$
- **注意**：对第一个变量不是简单的线性，而是多一个复共轭
  - $\langle a\boldsymbol{u} + b\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}\rangle = \overline{\langle\boldsymbol{w},a\boldsymbol{u} + b\boldsymbol{v}\rangle} = \overline{a\langle\boldsymbol{w},\boldsymbol{u}\rangle + b\langle\boldsymbol{w},\boldsymbol{v}\rangle} = \bar{a}\overline{\langle\boldsymbol{w},\boldsymbol{u}\rangle} + \bar{b}\overline{\langle\boldsymbol{w},\boldsymbol{v}\rangle} = \bar{a}\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{w}\rangle + \bar{b}\langle\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}\rangle$
- 定义了内积的空间叫做**内积空间**

内积

- 复线性空间V的内积$\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle$：$V \times V \to \mathbb{C}$
- 实际上我们只需要知道基之间的内积就可以算出任意向量之间的内积
    - $\boldsymbol{v}_1, \cdots, \boldsymbol{v}_n$是复线性空间$V$上的一组基，假设$\langle \boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j \rangle = g_{ij}$。根据定义$g_{ij} = \bar{g}_{ji}$
    - $\forall\, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{w} \in V$，$u = x^1 v_1 + \cdots + x^n v_n$，$w = y^1 v_1 + \cdots + y^n v_n$
    - $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{w} \rangle = \langle x^1 v_1 + \cdots + x^n v_n, y^1 v_1 + \cdots + y^n v_n \rangle = \sum_{i,j=1}^{n} \bar{x}^i y^j g_{ij}$

内积空间和对偶空间

- 考虑V的对偶空间V^*， V^*中的元素是所有V到$\mathbb{C}$的线性函数
- 通过内积可以建立的$V \to V^*$的一一映射
  - $\forall\, \boldsymbol{v} \in V$，$g_{\boldsymbol{v}}: V \to \mathbb{C}$，$g_{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{w}) \equiv \langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \rangle$
  - $g_{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{w})$是$V^*$中的元素
- 我们之前对于V^*上基的选取相当于取标准的内积
  - $\langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \rangle = \boldsymbol{v}^\dagger \boldsymbol{w}$

例： $\mathbb{C}^n$的标准内积

- $\mathbb{C}^n$标准内积：向量$\boldsymbol{u}$和$\boldsymbol{v}$的内积为$\boldsymbol{u}^\dagger \boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^n \bar{u}_1 v_1 + \cdots + \bar{u}_n v_n$
- $\mathbb{C}^n$的对偶空间$(\mathbb{C}^n)^*$
  - $\mathbb{C}^n$上的标准基：$\boldsymbol{e}_i = [0, \cdots, 0,1,0, \cdots, 0]^T$
  - 利用内积得到的对应的$(\mathbb{C}^n)^*$中的元素：$g_{\boldsymbol{e}_i}(\boldsymbol{w}) \equiv w_i$
  - 也就是说：$g_{\boldsymbol{e}_i}(\boldsymbol{e}_j) = \delta_{ij}$。换句话说$g_{\boldsymbol{e}_i}$就是之前的$e^{*i}$

例：量子力学

- 量子态所在的态空间都是内积空间
- 右矢（bra， bra vector）：$\langle A|$
  - $\langle A|$和态空间中向量$|A\rangle$的关系由态空间上的内积决定
  - 根据定义：$\langle A|B\rangle$就是 $|A\rangle$和 $|B\rangle$的内积
- P. A. M. Dirac, the principles of quantum mechanics, pp18-19

> We shall call the new vectors *bra vectors*, or simply *bras*, and denote a general one of them by the symbol $\langle\,|$, the mirror image of the symbol for a ket vector. If we want to specify a particular one of them by a label, B say, we write it in the middle, thus $\langle B|$. The scalar product of a bra vector $\langle B|$ and a ket vector $|A\rangle$ will be written $\langle B|A\rangle$, i.e. as a juxtaposition of the symbols for the bra and ket vectors, that for the bra vector being on the left, and the two vertical lines being contracted to one for brevity.

复矩阵

- mxn的复矩阵A就是把m行n列复数写在一起
- 矩阵的加法和数乘和之前一样，只是推广到复数
- 矩阵A的共轭转置$A^\dagger = A^H = \bar{A}^T$
  - $\left(A^\dagger\right)_{ij} = \overline{A_{ji}}$
  - $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$
- 方阵A的逆矩阵
  - $A^{-1}A = AA^{-1} = I$
- 所有实矩阵相关的内容可以复制到复矩阵

例

- 泡利矩阵：$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = i\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = i\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = i\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$

内容提要

- 复数
- 复线性空间、内积和复矩阵
- **厄米矩阵和幺正矩阵**

厄米(Hermitian)矩阵

- 对称矩阵$S^T = S$的推广
- 厄米矩阵$S^H = S$
  - 厄米矩阵是方阵
- **定理**：厄米矩阵$S^H = S$，对于任意的$\boldsymbol{z} \in \mathbb{C}^n$，$\boldsymbol{z}^H S \boldsymbol{z}$是实数
- 证明：$(\boldsymbol{z}^H S \boldsymbol{z})^H = \boldsymbol{z}^H S^H \boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}^H S \boldsymbol{z}$

例

- 泡利矩阵：$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
- 泡利矩阵全是厄米的

厄米矩阵的特征值

- **定理**：厄米矩阵的特征值都是实数
- 证明：
  - $S\boldsymbol{z} = \lambda\boldsymbol{z}$，$\boldsymbol{z}^H S\boldsymbol{z} = \lambda\boldsymbol{z}^H\boldsymbol{z}$。$\boldsymbol{z}^H S\boldsymbol{z}$是实数，$\boldsymbol{z}^H\boldsymbol{z}$也是实数
  - 所以λ是实数
- **定理**：厄米矩阵的对应不同特质值的特征向量正交
- 证明：
  - $S\boldsymbol{z}_1 = \lambda_1\boldsymbol{z}_1$，$S\boldsymbol{z}_2 = \lambda_2\boldsymbol{z}_2$
  - $\lambda_1\boldsymbol{z}_2^\dagger\boldsymbol{z}_1 = \boldsymbol{z}_2^\dagger S\boldsymbol{z}_1 = \left(\boldsymbol{z}_2^\dagger S\boldsymbol{z}_1\right)^\dagger = \boldsymbol{z}_1^\dagger S^\dagger\boldsymbol{z}_2 = \boldsymbol{z}_1^\dagger S\boldsymbol{z}_2 = \lambda_2\boldsymbol{z}_1^\dagger\boldsymbol{z}_2$
  - $\boldsymbol{z}_1^\dagger\boldsymbol{z}_2 = 0$

例：

- $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$的特征值和特征向量
  - $\lambda = 1$，$v = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$。$\lambda = -1$，$v = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$。
- $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$的特征值和特征向量
  - $\lambda = 1$，$v = \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}$。$\lambda = -1$，$v = \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}$。
- $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$的特征值和特征向量
  - $\lambda = 1$，$v = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$。$\lambda = -1$，$v = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$。

厄米矩阵的对角化

- **谱定理**：任何nxn厄米矩阵S的特征向量构成$\mathbb{C}^n$的一组正交基
- 证明：