狄拉克符号

阿笠博士

May 16, 2024

1 介绍

狄拉克符号，不仅仅是对波函数的一种符号上的替代，它更反映了一种思维方式上的变化，源于狄拉克对有限维矢量空间数学性质之精髓的深刻洞察与把握。它是真正数学精神的体现。

具体一些而言，提出这一符号体系，需要把握两点：一是量子态的物理本质，二是符号规则的数学本质。狄拉克符号的使用，带来了两大变化。

其一，是关于量子态的图像的变化。传统的波函数所描述的是量子态在有限维矢量空间特定标准正交基中的表现：例如，位置表象的波函数$\psi(x)$与动量表象的波函数$\phi(p)$是不同的，它们之间的关系为$\phi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ipx/\hbar}dx$。狄拉克认为，量子态的性质与有限维矢量空间标准正交基的选取完全无关，他使用$|\psi\rangle$表示一个量子态，可以看到，该记号并没有任何有关标准正交基的信息。正如线性代数，我们可以使用v表示矢量空间中的一个矢量，而该矢量的取值与矢量空间标准正交基的选取完全无关。

其二，利用更为细致与方便的规则，可以使线性算子的运算变得更为直观；这些规则使用了量子态空间的内积结构(在没有矢量结构的的线性空间中不能使用)。

符号系统本身是数学的。理论物理学与数学的最大区别在于，后者仅需要研究符号系统的逻辑运作，而前者在此之外还必须充分考虑符号背后所反映的物理实在。

2 量子态的狄拉克符号表示

2.1 量子态的右矢表示

注意：在本文中，矢量空间V的维数均是有限的，即$\dim V<\infty$。记$\dim V=n$。

首先引入量子力学的一个公理(语言表达不严谨，主要是为了方便理解)：

Axiom 2.1. 任意一个量子态都与有限维矢量空间的一个矢量相对应。如果使用$|\psi\rangle\in V$表示一个量子态，那么$\lambda|\psi\rangle$表示的是同一个量子态，其中$\lambda\in\mathbb{C}$是<u>非零</u>常数。换而言之，决定量子态的是$|\psi\rangle$的方向，而不是$|\psi\rangle$的大小。

我们称对应的矢量为**态矢量(State)**。根据这一公理，我们完全可以将线性代数的知识套用到量子力学上。

2.2 对偶空间

对于有限维矢量空间V，定义**对偶空间(Dual Space)**V^*，它是所有线性映射(在复数域$\mathbb{C}$上线性)$\omega : V \to \mathbb{C}$的集合。因此，对于任意$v, w \in V, \alpha, \beta \in \mathbb{C}$，

$$\omega(\alpha v + \beta w) = \alpha\omega(v) + \beta\omega(w). \tag{2.1}$$

并且，对于任意$\omega, \nu \in V^*, \alpha, \beta \in \mathbb{C}$，$\alpha\omega + \beta\nu \in V^*$，定义

$$(\alpha\omega + \beta\nu)(v) = \alpha\omega(v) + \beta\nu(v). \tag{2.2}$$

Theorem 2.1. V^*是复数域$\mathbb{C}$上的矢量空间。记有限维矢量空间V的一组基为$E_1, ..., E_n$，那么$\epsilon^1, ..., \epsilon^n \in V^*$是矢量空间$V^*$上的一组基，其中

$$\epsilon^i(E_j) = \delta^i_j = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \tag{2.3}$$

因此，V^*是有限维矢量空间，并且$\dim V^* = \dim V$。

Proof. 很显然V^*是矢量空间。对于任意$\omega \in V^*$，记

$$\beta = \omega(E_1)\epsilon^1 + \cdots + \omega(E_n)\epsilon^n, \tag{2.4}$$

可以得出，$\beta(E_i) = \omega(E_i)$对于任意i都成立。因此，$\beta = \omega$，这证明了$\epsilon^1, ..., \epsilon^n$生成矢量空间$V^*$。

如果存在不完全为零的常数$c_1, ..., c_n$，使得

$$\gamma = c_1\epsilon^1 + \cdots + c_n\epsilon^n = 0, \tag{2.5}$$

那么$\gamma(E_i) = 0$对于任意i都成立，而$\gamma(E_i) = c_i$，这表明$c_i = 0$对于任意i都成立，得到矛盾。因此，$\epsilon^1, ..., \epsilon^n$是线性无关的。 $\square$

对于有限维矢量空间V(定义了内积运算，后面的情况均是如此)的一个态矢量$|\psi\rangle$，记**左矢(Bra)**为$\langle\psi|$(有时候会称为$|\psi\rangle$的**对偶矢量(Dual Vector)**)，它是对偶空间V^*上的一个矢量，其运算规则满足

$$\langle\psi| \left(|\phi\rangle\right) = \langle\psi, \phi\rangle, \tag{2.6}$$

其中，$\langle\psi, \phi\rangle$是$|\psi\rangle, |\phi\rangle$的内积。我们将$\langle\psi| \left(|\phi\rangle\right)$简记为$\langle\psi|\phi\rangle$。

因此，如果选取V上的一组标准正交基$|1\rangle, ..., |n\rangle$(在之后的篇幅中，如果右矢为$|i\rangle, i \in \{1, ..., n\}$的形式，那么就默认它是$V$上的一组标准正交基)，那么

$$\langle i|j\rangle = \delta^i_j. \tag{2.7}$$

根据Theorem 2.1可得，$\langle 1|, ..., \langle n|$也是对偶空间$V^*$上的一组基。

根据线性代数的知识，我们可以将V上任意态矢量$|\psi\rangle$展开为

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \psi^i |i\rangle, \tag{2.8}$$

我们可以将它视为列矢量

$$\begin{pmatrix} \psi^1 \\ \vdots \\ \psi^n \end{pmatrix}, \tag{2.9}$$

其中$\psi^i \in \mathbb{C}$。因为$\langle\psi|$是对偶空间V^*上的矢量，因此它也可以被展开为

$$\langle\psi| = \sum_{i=1}^{n} \psi_i \langle i|. \tag{2.10}$$

我们可以将它视为行矢量

$$\begin{pmatrix} \psi_1 & \cdots & \psi_n \end{pmatrix}, \tag{2.11}$$

其中$\psi_i \in \mathbb{C}$。因此

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_{i,j} \psi_i \phi^j \langle i|j\rangle = \sum_{i,j} \psi_i \phi^j \delta^i_j = \sum_{i=1}^{n} \psi_i \phi^i, \tag{2.12}$$

而$\langle\psi|\phi\rangle$又是$|\psi\rangle, |\phi\rangle$的内积，因此

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \left(\psi^i\right)^* \phi^i. \tag{2.13}$$

注意，复数域上的矢量空间内积定义是$\langle v, w\rangle = v^\dagger w$，而不是$v^T w$，其中$v^\dagger = \left(v^T\right)^*$。

根据ϕ^i的任意性可得

$$\psi_i = \left(\psi^i\right)^*. \tag{2.14}$$

我们举一个例子。假设$\psi = i|1\rangle + (1+i)|2\rangle + |3\rangle$，那么根据(2.10)与(2.14)可得

$$\langle\psi| = \sum_{i=1}^{3} \psi_i \langle i| = i^* \langle 1| + (1+i)^* \langle 2| + 1^* \langle 3| = -i\langle 1| + (1-i)\langle 2| + \langle 3|. \tag{2.15}$$

Theorem 2.2. 对于任意态矢量

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{i=1}^{n} \psi^i |i\rangle, \\ |\phi\rangle &= \sum_{i=1}^{n} \phi^i |i\rangle, \end{aligned} \tag{2.16}$$

都具有

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*. \tag{2.17}$$

Proof. 根据(2.13)可得，这是显然的。 □

因此，根据(2.1), (2.2)与Theorem 2.2可得

$$\begin{aligned}
\langle\phi|\left(\alpha\,|\psi\rangle+\beta\,|\theta\rangle\right)&=\alpha\,\langle\phi|\psi\rangle+\beta\,\langle\phi|\theta\rangle\,,\\
\left(\alpha\,\langle\phi|+\beta\,\langle\theta|\right)|\psi\rangle&=\alpha\,\langle\phi|\psi\rangle+\beta\,\langle\theta|\psi\rangle\,,\\
\langle\phi|\psi\rangle&=\langle\psi|\phi\rangle^{*}\,,\\
\langle\psi|\psi\rangle&\geq 0,\langle\psi|\psi\rangle=0\text{ if and only if }\;|\psi\rangle=0.
\end{aligned}\tag{2.18}$$

其中$\alpha,\beta\in\mathbb{C}$。

然而，有一点需要注意的是，有限维矢量空间V的标准正交基并不是唯一的，正如$\{(1,0),(0,1)\}$与$\left\{(1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2}),(1/\sqrt{2},1/\sqrt{2})\right\}$都是$\mathbb{R}^2$上的标准正交基。因此，如果选取$V$上的标准正交基$|1\rangle\,,...,|n\rangle$与$|\tilde{1}\rangle\,,...,|\tilde{n}\rangle$，我们可以分别将态矢量表示为

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle&=\sum_{i=1}^{n}\psi^{i}\,|i\rangle\,,\\
|\psi\rangle&=\sum_{i=1}^{n}\tilde{\psi}^{i}\,|\tilde{i}\rangle\,,
\end{aligned}\tag{2.19}$$

并且对偶矢量也可以表示为

$$\begin{aligned}
\langle\psi|&=\sum_{i=1}^{n}\psi_{i}\,\langle i|\,,\\
\langle\psi|&=\sum_{i=1}^{n}\tilde{\psi}_{i}\,\langle\tilde{i}|\,,
\end{aligned}\tag{2.20}$$

至于ψ^i与$\tilde{\psi}^i$，ψ_i与$\tilde{\psi}_i$之间的关系，以下的定理会详细说明：

Theorem 2.3. 注意：为了避免理解上的困难，在该定理中，我们只讨论实数域上的矢量空间。

如果$|1\rangle\,,...,|n\rangle$与$|\tilde{1}\rangle\,,...,|\tilde{n}\rangle$之间满足以下关系：

$$|\tilde{i}\rangle=\sum_{j=1}^{n}A_{i}^{j}\,|j\rangle\,,\tag{2.21}$$

其中A_i^j是矩阵A的第j行，第i列元素。因为$|1\rangle\,,...,|n\rangle$与$|\tilde{1}\rangle\,,...,|\tilde{n}\rangle$是$V$上的标准正交基，所以$A$是正交矩阵，$A\in\mathrm{O}(n)$，根据线性代数的知识可得$A^TA=AA^T=I$。此时

$$\begin{aligned}
\psi^{i}&=\sum_{j=1}^{n}A_{j}^{i}\tilde{\psi}^{j},\\
\tilde{\psi}_{i}&=\sum_{j=1}^{n}A_{i}^{j}\psi_{j}.
\end{aligned}\tag{2.22}$$

因此，V上的矢量分量变换规律与基矢量变换规律是相反的，V^*上的矢量分量变换规律与基矢量变换规律是相同的。我们将V上的矢量称为**逆变矢量(Contravariant Vector)**，将V^*上的矢量称为**协变矢量(Covariant Vector)**。

Proof. 根据(2.19)与(3.47)可得

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \tilde{\psi}^i \left|\tilde{i}\right\rangle = \sum_{i,j} A_i^j \tilde{\psi}^i \left|j\right\rangle = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{n} A_j^i \tilde{\psi}^j \right) \left|i\right\rangle, \tag{2.23}$$

再根据(2.19)可得

$$\psi^i = \sum_{j=1}^{n} A_j^i \tilde{\psi}^j. \tag{2.24}$$

令$B = A^T$，因此$AB = BA = I$，$B_j^i = A_i^j$。根据(2.14)可得

$$\left\langle\tilde{i}\right| = \sum_{j=1}^{n} B_j^i \left\langle j\right|, \tag{2.25}$$

根据(2.20)与(3.47)可得

$$\langle\psi| = \sum_{i=1}^{n} \tilde{\psi}_i \left\langle\tilde{i}\right| = \sum_{i,j} B_j^i \tilde{\psi}_i \left\langle j\right| = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{n} B_i^j \tilde{\psi}_j \right) \left\langle i\right|, \tag{2.26}$$

再根据(2.20)可得

$$\psi_i = \sum_{j=1}^{n} B_i^j \tilde{\psi}_j, \tag{2.27}$$

而$AB = BA = I$，因此

$$\sum_{i=1}^{n} A_k^i B_i^j = \delta_k^j, \tag{2.28}$$

因此

$$\sum_{i=1}^{n} A_k^i \psi_i = \sum_{i,j} A_k^i B_i^j \tilde{\psi}_j = \sum_{j=1}^{n} \delta_k^j \tilde{\psi}_j = \tilde{\psi}_k. \tag{2.29}$$

□

3 线性算子

3.1 定义

线性算子(Linear Operator)是有限维矢量空间上的线性映射$A : V \to V$，它将一个态矢量$|\psi\rangle$映射到另一个态矢量，记为$A\,|\psi\rangle$。我们将$\langle\phi|\,(A\,|\psi\rangle)$简记为$\langle\phi|A|\psi\rangle$。

如果没有特殊说明，线性算子都是向右作用的。定义线性算子的乘积AB为

$$AB\,|\psi\rangle = A\,(B\,|\psi\rangle)\,. \tag{3.1}$$

3.2 右矢-左矢表示

如果将右矢$|\psi\rangle$与左矢$\langle\phi|$并列，那会得到什么结果呢？尝试着把它写出来，我们可以得到$|\psi\rangle\,\langle\phi|$。它的作用是，将一个态矢量变成另一个态矢量：

$$|\psi\rangle\,\langle\phi|\,(|\theta\rangle) = |\psi\rangle\,\langle\phi|\theta\rangle = \langle\phi|\theta\rangle\,|\psi\rangle\,. \tag{3.2}$$

($\langle\phi|\theta\rangle$是一个标量，因此可以被提取出来)很显然，该映射是线性映射。因此，$|\psi\rangle\,\langle\phi|$起到了线性算子的作用。

Theorem 3.1. 任意线性算子A都可以表示为以下形式：

$$A = \sum_{i,j} A^i_j\,|i\rangle\,\langle j|\,, \tag{3.3}$$

其中

$$A^i_j = \langle i|A|j\rangle\,. \tag{3.4}$$

因此，任意线性算子都可以视为一个n阶矩阵，其第i行，第j列的元素为A^i_j，但是它的取值并不是固定的，取决于标准正交基的选取。我们将这个行为称为**矩阵表示(Matrix Representation)**。可以将它视为矩阵

$$\begin{pmatrix} A^1_1 & \cdots & A^1_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A^n_1 & \cdots & A^n_n \end{pmatrix}. \tag{3.5}$$

Proof. 因为$A\,|j\rangle$是一个态矢量，所以可以展开为以下形式：

$$A\,|j\rangle = \sum_{k=1}^{n} A^k_j\,|k\rangle\,, \tag{3.6}$$

将左矢$\langle i|$作用于等式的两边，可得

$$\langle i|A|j\rangle = \sum_{k=1}^{n} A^k_j\,\langle i|k\rangle = \sum_{k=1}^{n} A^k_j \delta^i_k = A^i_j. \tag{3.7}$$

根据(2.8)，记$|\psi\rangle = \Sigma_j \psi^j |j\rangle$，因此，根据(3.6)可得

$$A|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{n} \psi^j A|j\rangle = \sum_{j,k} A_j^k \psi^j |k\rangle . \tag{3.8}$$

而

$$\left(\sum_{i,j} A_j^i |i\rangle \langle j|\right) |\psi\rangle = \sum_{i,j,k} A_j^i \psi^k |i\rangle \langle j|k\rangle = \sum_{i,j,k} A_j^i \psi^k \delta_k^j |i\rangle = \sum_{i,k} A_k^i \psi^k |i\rangle , \tag{3.9}$$

所以$A|\psi\rangle = \left(\sum_{i,j} A_j^i |i\rangle \langle j|\right) |\psi\rangle$。根据态矢量的任意性可得

$$A = \sum_{i,j} A_j^i |i\rangle \langle j| . \tag{3.10}$$

□

Theorem 3.2. 形式为$A = \sum_{i,j} A_j^i |i\rangle \langle j|$的算子作用于形式为$|\psi\rangle = \sum_k \psi^k |k\rangle$的态矢量上，得到的结果为

$$A|\psi\rangle = \sum_{i,j} A_j^i \psi^j |i\rangle . \tag{3.11}$$

因此，线性算子作用于态矢量可以视为对应的矩阵与对应的矢量相乘！

Proof. 详见Theorem 3.1的证明。 □

Theorem 3.3. 对于形式为$A = \sum_{i,j} A_j^i |i\rangle \langle j| , B = \sum_{k,m} B_m^k |k\rangle \langle m|$的算子，$AB$则可以表示为

$$AB = \sum_{i,j,m} A_j^i B_m^j |i\rangle \langle m| . \tag{3.12}$$

因此，AB对应的矩阵可以视为A对应的矩阵与B对应的矩阵相乘！

Proof. 记$|\psi\rangle = \sum_i \psi^i |i\rangle$，因为$AB|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$，所以

$$\begin{aligned} AB|\psi\rangle &= \sum_{k,m} A\left(B_m^k \psi^m |k\rangle\right) \\ &= \sum_{k,m} B_m^k \psi^m A|k\rangle \\ &= \sum_{i,k,m} A_k^i B_m^k \psi^m |i\rangle , \end{aligned} \tag{3.13}$$

而

$$\left(\sum_{i,j,m} A^i_j B^j_m |i\rangle \langle m|\right) |\psi\rangle = \sum_{i,j,m} A^i_j B^j_m \psi^m |i\rangle , \tag{3.14}$$

根据$|\psi\rangle$的任意性，完成证明。 □

类比线性代数，我们就可以很容易地得出：

$$(AB)C = A(BC). \tag{3.15}$$

虽然该定理的证明在数学上是没有问题的，但是它略显复杂，因为我们借助了态矢量$|\psi\rangle$，并且这个证明过程仿佛已经知道了$AB = \sum_{i,j,m} A^i_j B^j_m |i\rangle \langle m|$这个事实，如同"自圆其说"一般。那么，有什么办法，可以更加方便地去计算AB呢？

可以看到，如果我们尝试将AB直接拼在一起，那么就会得到：

$$AB = \sum_{i,j,k,m} A^i_j B^k_m (|i\rangle \langle j|)(|k\rangle \langle m|) , \tag{3.16}$$

是不是很熟悉呢？可能你已经想到了，将中间的$\langle j|$与$|k\rangle$拼在一起，得到$\langle j|k\rangle = \delta^j_k$，那我们就试试看这样做是否可行：

$$AB = \sum_{i,j,k,m} A^i_j B^k_m \delta^j_k |i\rangle \langle m| = \sum_{i,j,m} A^i_j B^j_m |i\rangle \langle m| , \tag{3.17}$$

这与Theorem 3.3的结果刚好相等！这样，你就完全没有必要特意去区分态矢量与线性算子的计算规则，直接将左右矢"拼在一起"即可，如果产生了$\langle \psi|\phi\rangle$这样的标量，你再把它提取出来，这样就能缩短表达式的长度了！但是要当心，你不能随意交换左右矢的排列次序，正如矩阵相乘，你不能随意交换矩阵的排列次序一样。例如，

$$\begin{aligned}(|\alpha\rangle \langle\beta|)(|\gamma\rangle \langle\delta|)(|\theta\rangle \langle\psi|) &= |\alpha\rangle \langle\beta|\gamma\rangle \langle\delta|\theta\rangle \langle\psi| \\ &= \langle\beta|\gamma\rangle \langle\delta|\theta\rangle |\alpha\rangle \langle\psi| .\end{aligned} \tag{3.18}$$

第一个等号就是"拼在一起"，第二个等号就是把标量$\langle\beta|\gamma\rangle , \langle\delta|\theta\rangle$提取出来。所以，狄拉克符号强大之处就体现在这里，它非常的直观！

3.3 恒等算子

恒等算子(Identity Operator)记为I，它将任意态矢量映射到它本身，具体来说，对于任意态矢量$|\psi\rangle$，都具有$I|\psi\rangle = \psi$。

而$\langle i|I|j\rangle = \langle i|j\rangle = \delta^i_j$，根据Theorem 3.1可得

$$I = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle \langle i| . \tag{3.19}$$

因此，它对应单位矩阵！

3.4 算子的作用方向

前面提到，算子都是向右作用的。不过有些时候，我们希望算子向左作用，因为在某些情况下向左作用的比向右作用更加容易计算。此时需要引入**共轭(Conjugate)**的概念。线性算子的共轭同样也是线性算子，记为$A^\dagger$(读作A dagger)。它满足以下关系：对于任意态矢量$|\psi\rangle, |\phi\rangle$，都具有

$$\langle\psi|A|\phi\rangle = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle^*. \tag{3.20}$$

因此

$$\langle\psi|A|\phi\rangle = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle^* = \left(\langle\psi|\left(A^\dagger\right)^\dagger|\phi\rangle^*\right)^* = \langle\psi|\left(A^\dagger\right)^\dagger|\phi\rangle, \tag{3.21}$$

根据$|\psi\rangle, |\phi\rangle$的任意性可得

$$A = \left(A^\dagger\right)^\dagger. \tag{3.22}$$

当$A = A^\dagger$时，A被称为**厄米算子(Hermitian Operator)**。从上面可以看出，如果能求出算子的共轭，那么就可以实现"向左作用"，如果该算子是厄米算子，那情况就更为简单了！

以下定理虽然没有直接求出算子的共轭，但是它可以提供一种较为简单的计算思路，并且具有一定的直观性。

Theorem 3.4. 形式为$A = \sum_{i,j} A^i_j |i\rangle\langle j|$的算子，当处于左矢的右方时，可以利用其右矢部分直接向左作用于左矢。

换而言之，如果向右作用，那么

$$\langle\psi|\left(\sum_{i,j} A^i_j |i\rangle\langle j|\right)|\phi\rangle = \langle\psi|\left(\sum_{i,j} A^i_j |i\rangle\langle j|\phi\rangle\right) = \sum_{i,j} A^i_j \langle\psi|i\rangle\langle j|\phi\rangle, \tag{3.23}$$

如果向左作用，那么

$$\langle\psi|\left(\sum_{i,j} A^i_j |i\rangle\langle j|\right)|\phi\rangle = \left(\sum_{i,j} A^i_j \langle\psi|i\rangle\langle j|\right)|\phi\rangle = \sum_{i,j} A^i_j \langle\psi|i\rangle\langle j|\phi\rangle, \tag{3.24}$$

因此，我们可以直接把右矢-左矢表示的算子"插入"到左右矢中！

Proof. 根据(2.8)，记$|\psi\rangle = \Sigma_i \psi^i |i\rangle, |\phi\rangle = \Sigma_j \phi^j |j\rangle$，因此

$$\langle\psi|\left(\sum_{i,j} A^i_j |i\rangle\langle j|\phi\rangle\right) = \langle\psi|\left(\sum_{i,j} A^i_j \phi^j |i\rangle\right) = \sum_{i,j} A^i_j \psi_i \phi^j, \tag{3.25}$$

$$\left(\sum_{i,j} A^i_j \langle\psi|i\rangle\langle j|\right)|\phi\rangle = \left(\sum_{i,j} A^i_j \psi_i \langle j|\right)|\phi\rangle = \sum_{i,j} A^i_j \psi_i \phi^j, \tag{3.26}$$

所以这两者相等。 □

根据这一定理，我们可以很方便地写出形式为$A=\sum_{i,j}A^i_j\left|i\right\rangle\left\langle j\right|$的算子的共轭。

Theorem 3.5.

$$A^\dagger=\sum_{i,j}(A^j_i)^*\left|i\right\rangle\left\langle j\right|. \tag{3.27}$$

因此，算子的共轭可以视为其对应矩阵的共轭转置(先对任意元素取共轭复数，再对矩阵进行转置)！

Proof. 记$\left|\psi\right\rangle=\Sigma_i\psi^i\left|i\right\rangle,\left|\phi\right\rangle=\Sigma_j\phi^j\left|j\right\rangle$，根据Theorem 3.4, (3.20)与(3.25)可得

$$\langle\psi|A|\phi\rangle=\sum_{i,j}A^i_j\psi_i\phi^j, \tag{3.28}$$

因此

$$\langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle=\langle\psi|A|\phi\rangle^*=\sum_{i,j}(A^i_j)^*(\psi_i)^*(\phi^j)^*. \tag{3.29}$$

令$B=\sum_{i,j}(A^j_i)^*\left|i\right\rangle\left\langle j\right|$，因此

$$\langle\phi|B|\psi\rangle=\sum_{i,j}(A^j_i)^*\phi_i\psi^j=\sum_{i,j}(A^i_j)^*\psi^i\phi_j, \tag{3.30}$$

根据(2.14)可得

$$\langle\phi|B|\psi\rangle=\sum_{i,j}(A^i_j)^*(\psi_i)^*(\phi^j)^*, \tag{3.31}$$

根据$\left|\psi\right\rangle,\left|\phi\right\rangle$的任意性可得

$$B=A^\dagger. \tag{3.32}$$

□

我们将$(A^j_i)^*$记为$(A^\dagger)^i_j$，因此

$$A^\dagger=\sum_{i,j}(A^\dagger)^i_j\left|i\right\rangle\left\langle j\right|. \tag{3.33}$$

对于态矢量$\left|\psi\right\rangle$的对偶矢量$\left\langle\psi\right|$与线性算子A，定义$\left\langle\psi\right|A$，它是对偶空间上的一个矢量，其运算满足

$$(\left\langle\psi\right|A)\left|\phi\right\rangle=\langle\psi|A|\phi\rangle. \tag{3.34}$$

Theorem 3.6. 态矢量$A\left|\psi\right\rangle$的对偶矢量为$\left\langle\psi\right|A^\dagger$。

Proof. 记$A=\sum_{i,j}A^i_j\left|i\right\rangle\left\langle j\right|, \left|\psi\right\rangle=\sum_k\psi^k\left|k\right\rangle$，根据Theorem 3.2可得

$$A\left|\psi\right\rangle=\sum_{i,j}A^i_j\psi^j\left|i\right\rangle, \tag{3.35}$$

记$A\left|\psi\right\rangle$的对偶矢量为$\left\langle\theta\right|$，根据(2.10)与(2.14)可得

$$\left\langle\theta\right|=\sum_{i,j}(A^\dagger)^j_i\psi_j\left\langle i\right|, \tag{3.36}$$

记任意态矢量$\left|\phi\right\rangle=\sum_i\phi^i\left|i\right\rangle$，因此

$$\left\langle\theta|\phi\right\rangle=\sum_{i,j}(A^\dagger)^j_i\psi_j\phi^i, \tag{3.37}$$

而根据Theorem 3.4, Theorem 3.5与(3.34)可得

$$\left(\left\langle\psi\right|A^\dagger\right)\left|\phi\right\rangle=\left\langle\psi|A^\dagger|\phi\right\rangle=\sum_{i,j}(A^\dagger)^i_j\psi_i\phi^j, \tag{3.38}$$

根据$\left|\phi\right\rangle$的任意性可得

$$\left\langle\theta\right|=\left\langle\psi\right|A^\dagger. \tag{3.39}$$

□

Theorem 3.7. 对于任意$\alpha\in\mathbb{C}$，

$$\begin{aligned}(A+B)^\dagger&=A^\dagger+B^\dagger,\\ (\alpha A)^\dagger&=\alpha^*A^\dagger.\end{aligned} \tag{3.40}$$

因此，共轭运算只在实数域$\mathbb{R}$上是线性的，在复数域$\mathbb{C}$上不是线性的。

Proof. 根据Theorem 3.5，这是显然的。 □

Theorem 3.8.

$$(AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger. \tag{3.41}$$

这与线性代数公式$(AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger$相对应，当然你也可以类比为转置矩阵之间的关系$(AB)^T=B^TA^T$。

Proof. 将A,B表示为$A=\sum_{i,j}A^i_j\left|i\right\rangle\left\langle j\right|, B=\sum_{k,m}B^k_m\left|k\right\rangle\left\langle m\right|$，可得

$$A^\dagger=\sum_{i,j}(A^\dagger)^i_j\left|i\right\rangle\left\langle j\right|, \tag{3.42}$$

$$B^\dagger = \sum_{k,m} (B^\dagger)^k_m |k\rangle \langle m| , \tag{3.43}$$

因此

$$B^\dagger A^\dagger = \sum_{j,k,m} (B^\dagger)^k_m (A^\dagger)^m_j |k\rangle \langle j| = \sum_{j,k,m} \left(A^j_m B^m_k\right)^* |k\rangle \langle j| , \tag{3.44}$$

而

$$AB = \sum_{i,j,m} A^i_j B^j_m |i\rangle \langle m| , \tag{3.45}$$

因此

$$(AB)^\dagger = \sum_{i,j,m} \left(A^m_j B^j_i\right)^* |i\rangle \langle m| , \tag{3.46}$$

重组上下标即可完成证明。 □

3.5 算子表示形式与标准正交基的关系

Theorem 2.3表明，当V标准正交基的选取发生改变时，V上的矢量与V^*上的矢量分量均发生改变，并且改变规律是恰好相反的。同样道理，线性算子A的矩阵表示也会发生改变，其规律满足：

Theorem 3.9. 注意：为了避免理解上的困难，在该定理中，我们只讨论实数域上的矢量空间。

如果$|1\rangle , ..., |n\rangle$与$|\tilde{1}\rangle , ..., |\tilde{n}\rangle$之间满足以下关系：

$$|\tilde{i}\rangle = \sum_{j=1}^{n} S^j_i |j\rangle , \tag{3.47}$$

其中S^j_i是矩阵S的第j行，第i列元素。因为$|1\rangle , ..., |n\rangle$与$|\tilde{1}\rangle , ..., |\tilde{n}\rangle$是$V$上的标准正交基，所以$S$是正交矩阵，$S \in \mathrm{O}(n)$，根据线性代数的知识可得$S^T S = S S^T = I$。如果将线性算子$A$表示为

$$\begin{aligned} A &= \sum_{i,j} A^i_j |i\rangle \langle j| , \\ A &= \sum_{i,j} \tilde{A}^i_j |\tilde{i}\rangle \langle \tilde{j}| , \end{aligned} \tag{3.48}$$

那么

$$\tilde{A}^i_j = \sum_{k,l} (S^T)^i_k A^k_l S^l_j , \tag{3.49}$$

简记为

$$\tilde{A} = S^T A S. \tag{3.50}$$

Proof. 根据(2.25)可得

$$\langle\tilde{j}| = \sum_{l=1}^{n}(S^T)^j_l \langle l|, \tag{3.51}$$

因此

$$\begin{aligned} A &= \sum_{i,j} \tilde{A}^i_j |\tilde{i}\rangle\langle\tilde{j}| \\ &= \sum_{i,j,k,l} \tilde{A}^i_j S^k_i |k\rangle (S^T)^l_j \langle l| \\ &= \sum_{i,j,k,l} \tilde{A}^i_j S^k_i (S^T)^j_l |k\rangle\langle l|. \end{aligned} \tag{3.52}$$

因此

$$A^k_l = \sum_{i,j} \tilde{A}^i_j S^k_i (S^T)^j_l. \tag{3.53}$$

而$S^TS = SS^T = I$，因此

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n} S^k_i (S^T)^m_k &= \delta^m_i, \\ \sum_{l=1}^{n} (S^T)^j_l S^l_n &= \delta^j_n. \end{aligned} \tag{3.54}$$

因此

$$\begin{aligned} \sum_{k,l} A^k_l (S^T)^m_k S^l_n &= \sum_{i,j,k,l} \tilde{A}^i_j S^k_i (S^T)^m_k (S^T)^j_l S^l_n \\ &= \sum_{i,j} \tilde{A}^i_j \delta^m_i \delta^j_n \\ &= \tilde{A}^m_n. \end{aligned} \tag{3.55}$$

重组上下标即可完成证明。 □

我们举一个例子。令$|\tilde{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle), |\tilde{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$，那么

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \tag{3.56}$$

如果线性算子A的矩阵表示为

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 5 & 3 \end{pmatrix}, \tag{3.57}$$

即$A = |1\rangle\langle 1| + 2|1\rangle\langle 2| + 5|2\rangle\langle 1| + 3|2\rangle\langle 2|$。那么$\tilde{A}$的矩阵表示为

$$\tilde{A} = S^T A S = \begin{pmatrix} 11/2 & -1/2 \\ 5/2 & -3/2 \end{pmatrix}, \tag{3.58}$$

因此，A又可以表示为$A = 11/2\,|\tilde{1}\rangle\langle\tilde{1}| - 1/2\,|\tilde{1}\rangle\langle\tilde{2}| + 5/2\,|\tilde{2}\rangle\langle\tilde{1}| - 3/2\,|\tilde{2}\rangle\langle\tilde{2}|$。

4 量子力学的其他公理

之前我们只讨论了一个公理。实际上，量子力学有五个公理。但是在引入公理之前，我们需要一些数学概念。

对于线性算子A，如果存在一组标量a_k与一组态矢量$|a_k\rangle$满足$A|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle$，满足

$$A|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle, \tag{4.1}$$

那么称$|a_k\rangle$为A的**本征矢量(Eigenvector)**，a_k为本征矢量$|a_k\rangle$对应的**本征值(Eigenvalue)**。

Theorem 4.1. 记A是厄米算子。因此，A的本征值都是实数；如果$a_k \neq a_m$，那么对应的本征矢量$|a_k\rangle, |a_m\rangle$满足$\langle a_k|a_m\rangle = 0$。

Proof. 记$A|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle$，对等式两边取对偶矢量可得

$$\langle a_k|A^\dagger = \langle a_k|A = a_k^*\langle a_k|, \tag{4.2}$$

对等式两边右乘$|a_k\rangle$可得

$$\langle a_k|A|a_k\rangle = a_k^*\langle a_k|a_k\rangle, \tag{4.3}$$

而$A|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle$，因此

$$a_k\langle a_k|a_k\rangle = a_k^*\langle a_k|a_k\rangle, \tag{4.4}$$

根据(2.18)可得，$\langle a_k|a_k\rangle > 0$，因此

$$a_k = a_k^*, \tag{4.5}$$

所以A的本征值都是实数。

对等式(4.2)两边右乘$|a_m\rangle$，并且利用$a_k = a_k^*$可得

$$\langle a_k|A|a_m\rangle = a_m\langle a_k|a_m\rangle = a_k\langle a_k|a_m\rangle, \tag{4.6}$$

因为$a_k \neq a_m$，所以

$$\langle a_k|a_m\rangle = 0. \tag{4.7}$$

□

根据这个定理，我们就可以引入如下公理:

Axiom 4.1. 对于任意一个物理性质(例如：能量、位置、动量、角动量......)，它都与有限维矢量空间的一个厄米算子相对应，该算子被称为**可观测量(Observable)**。可观测量的本征值都是实数。

Axiom 4.2. 如果A是一个可观测量，并且具有对应的本征值a_k与本征矢量$|a_k\rangle$，那么态矢量$|\psi\rangle$下测量其可观测量A，得到本征值a_k的概率为$\Pr\{\lambda = a_k\} = \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle}|\langle a_k|\psi\rangle|^2$。

Axiom 4.3. 对处于态矢量$|\psi\rangle$的系统，测量其可观测量A，如果得到本征值a_k，则在测量之后的瞬间，系统处于由下述态矢量所描述的状态:

$$|\psi_k\rangle = \langle a_k|\psi\rangle\, |a_k\rangle\,. \tag{4.8}$$

接下来引入一个数学概念。在线性代数中，我们接触过“逆矩阵”这个概念，其定义为：对于一个n阶矩阵A，如果存在一个n阶矩阵B使得$AB = BA = I$，那么称B为A的逆矩阵，记为$B = A^{-1}$。但是，并不是所有的n阶矩阵都存在逆矩阵，它需要满足一个条件：$\det A \neq 0$。只要满足了这个条件，那么A一定存在逆矩阵。

根据这个思路，如果我们把线性算子A表示为$A = \sum_{i,j} A^i_j\, |i\rangle\, \langle j|$，并且要求$\det\left(A^i_j\right) \neq 0$，其中$\det\left(A^i_j\right)$是第$i$行，第$j$列元素为$A^i_j$的矩阵的行列式。那么此时，$A$就存在**逆算子(Inverse Operator)**，还是记为A^{-1}，并且满足$AA^{-1} = A^{-1}A = I$。此外，也可以证明

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}, \tag{4.9}$$

在这里不做展开。

另外，在线性代数中，如果n阶矩阵A是正交矩阵，那么$A^TA = I$，对等式两边取行列式可得$\det\left(A^T\right)\det A = 1$，即$(\det A)^2 = 1, \det A = \pm 1$，因此$A$存在逆矩阵。

根据这个思路，如果线性算子A存在逆算子，并且$A^\dagger A = I$，即$A^\dagger = A^{-1}$，此时我们称A为**酉算子(Unitary Operator)**。

根据这些概念，我们就可以引入如下公理:

Axiom 4.4. (A) 一个孤立系统的态矢量的演化，满足薛定谔方程$i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = H\,|\psi\rangle$，其中$H$是一个厄米算子，并且$\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \sum_i \dot{\psi}^i\,|i\rangle$。

(B) 将满足上述方程的态矢量记为$|\psi(t)\rangle$，那么对于任意固定的时间t_0，总是存在一个酉算子$U(t,t_0)$，称为**演化算子(Evolution Operator)**，使得$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$。