高等学校教学参考书

量子力学

下册

（高等量子力学部分）

柯善哲　蔡建华　编

高等教育出版社

内 容 简 介

本书是蔡建华教授所编《量子力学》一书的下册．该书上册偏重于物理概念，可作为综合大学物理专业大学生量子力学课的课本(已于1980年出版)．下册偏重于数学理论，即通常所说的高等量子力学，内容包括：表象理论、近似方法、散射理论、二次量子化方法、对称性理论、角动量理论、相对论性波动方程等．

为了便于自学，下册还介绍了一些群论的基础知识，并对某些数学推导作了较详细的叙述．本册可供综合大学理论物理专业高年级学生及研究生使用，亦可供有关专业的教师及研究人员参考

高等学校教学参考书
量 子 力 学
下 册
(高等量子力学部分)
柯善哲 蔡建华 编
*
高等教育出版社出版
新华书店北京发行所发行
高等教育出版社印刷厂印装
*
开本 787×1092 1/16 印张 28.25 字数 647.000
1992年12月第1版 1992年12月第1次印刷
印数 00 001—1 123
ISBN7—04—001077—1/O·664
定价：12.90元

序

蔡建华教授编的《量子力学》上册已经出版，这本下册是它的续篇．上册偏重于物理概念，可作为物理专业量子力学课的课本；下册偏重于数学理论，是为南京大学物理系研究生的高等量子力学课编写的讲义．

我们认为研究生应以自学为主，讲授时不宜作冗繁的数学推导．因此，我们在编写这本讲义时希望它能便于自学；为此，把讲课时要省略的内容在讲义中作了较详细的叙述．选修本课的大学生大多没有学过群论，为了便于他们自学，我们在讲义中写了一些群论的基础知识(§5.2，§5.3，§5.7)，但不作为讲课内容．鉴于专业的差异而对本课内容的要求不尽相同，打星号(*)的章节，是供选学的．

这本下册是以蔡建华教授所编《量子力学补充讲义》为基础而改写的．改写工作是在蔡老师悉心指导和具体帮助下由我负责进行的，但是行文中的错误只能由我个人负责．由于水平所限，难免错误和欠妥之处，欢迎批评指正．

本书§3.12是根据卢德馨同志提供的讲稿改写的．曾谨言先生对初稿提出过许多宝贵的意见．在此一并致谢．

柯善哲　谨识

1985年9月

目　录

第一章 表象理论

本章讨论量子力学的表示问题. 量子态的叠加原理使得允许对态的表示采用不同的表象, 这意味着量子态是一种矢量, 于是可用比上册更为普遍的数学形式来表述量子力学的基本原理. 对于具体的量子力学问题, 可酌情采用适宜的表象, 使问题得到简化.

§1.1 量子态及算符的矩阵表示 完全集合

量子力学研究微客体的运动规律. 微粒子具有波粒二象性因而和经典力学研究的没有波动性的粒子有本质上的不同. 用经典力学量描写经典粒子的状态是决定性的描述: t 时刻测量粒子的位置 $\vec{x}$ 和动量 $\vec{p}$ 都有唯一确定的数值, 因而作为 $\vec{x}$ 和 $\vec{p}$ 的函数的其他力学量也有确定的数值. 沿用经典力学量来描写微粒子的状态, 波动性使得状态的描述具有统计性的特点, 我们要用测量力学量所得统计分布的几率幅来描写量子态①. 由于对同一个力学量的测量需要进行很多次, 才能确定几率分布, 所以实际上我们是和量子系综打交道. 大数、相互独立且处于相同宏观条件下的量子系统(可以由 N 个相互作用的粒子组成)的集合构成一个量子系综. 上面所说微粒子的状态, 其实是指单粒子系统构成的系综的状态②. 量子态依赖于系统所处的宏观条件, 例如电子衍射实验中的多晶体更换后, 位置 $\vec{x}$ 的几率分布(衍射图)也随之改变.

对于同一个量子态, 进行位置的测量, 得到几率幅 $\Psi(\vec{x}, t)$; 进行动量的测量, 得到几率幅 $\Phi(\vec{p}, t)$; 也可测量力学量 A, 得到相应于本征值 $A_n(n=1, 2, 3, \cdots)$的几率幅 $c_n(t)$. 但由于测不准关系的限制, 不能对 $\vec{x}$ 和 $\vec{p}$ 进行同时测量. 要描写一个年级的学生的健康状况, 需要同时列出身高、体重、肝功能、肺活量等参量的统计分布. 是否需要同时列出 $\Psi(\vec{x}, t)$, $\Phi(\vec{p}, t)$, $c_n(t)$, …才能表示一个量子态呢? 由于微粒子有波动性, 量子态满足叠加原理, 因此描写同一量子态的各种几率幅以线性变换相联系, 例如 $\Psi(\vec{x}, t)$ 和 $\Phi(\vec{p}, t)$ 以傅里叶积分变换相联系. 因此, 知道一种几率幅, 例如 $\Psi(\vec{x}, t)$, 就可算出其他力学量的统计分布的几率幅, 所以 $\Psi(\vec{x}, t)$或 $\Phi(\vec{p}, t)$或 $c_n(t)(n=1, 2, \cdots)$已经包含了所需要的其他物理信息, 足以描写量子态③. 换句话说, 由于态的叠加原理, 可以对量子态的表示采用不同的表象. 在上册中, 我们主要以波函数 $\Psi(\vec{x}, t)$来描述无自旋单粒子的量子态. $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ 代表在位置 $\vec{x}$ 附近测量粒子的几率(密度). 这种表示方法使得量子态比较接近我们的直接认识, 所以经常被采用. 但当问题涉及其它力学量 A 的测量几率时, 用 $\Psi(\vec{x}, t)$表示量子态并不

① 参阅本书上册, §11.

② 参考书[5], §14.

③ 参考书[2], 2.3 节.

方便，我们不妨选用力学量 A 的测量几率幅来表示量子态.

设 $\psi_1(\vec{x}), \psi_2(\vec{x}), \cdots, \psi_n(\vec{x}), \cdots$ 为一组完备的正交归一函数. 任意态的波函数 $\Psi(\vec{x}, t)$ 可以展开成

$$\Psi(\vec{x}, t)=\sum_n c_n(t)\psi_n(\vec{x}), \tag{1.1.1}$$

其中展开系数

$$c_n(t)=\int \psi_n^*(\vec{x})\Psi(\vec{x}, t)d^3x. \tag{1.1.2}$$

我们可以把函数组 ψ_n，$n=1, 2, \cdots$ 当作一种"参照系统". 如果约定了相对于这一组特殊的函数来讨论问题，我们就可以用展开式(1.1.1)中的一系列系数 c_n 来代替波函数 Ψ:

$$\Psi \longleftrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{1.1.3}$$

即用一列数字 (c_n) 代替 Ψ 来描述系综的态①.

一列数字 (c_n) 和 Ψ 的等价性，不仅表现在当约定"参照系统"后彼此在数学上可以相互推求，而且 (c_n) 的确也是广义的波函数，因为它们的绝对值的平方也具有几率意义. 设函数组 ψ_n 是某个力学量算符 $\widehat{A}$ 的本征函数，它们分别对应于 $\widehat{A}$ 的本征值 A_n，则在 Ψ 态中测量力学量 A，测得 A_n 的几率是 $|c_n|^2$. 通常的波函数 Ψ 也不过有这样的意义: 可以将 Ψ 写成"展开式"

$$\Psi(\vec{x}, t)=\sum_n \Psi(\vec{x}_n, t)\delta(\vec{x}-\vec{x}_n)=\sum_n \Psi(\vec{x}_n, t)\psi_{\vec{x}_n}(\vec{x}),$$

其中 $\psi_{\vec{x}_n}=\delta(\vec{x}-\vec{x}_n)$ 是属于本征值 $\vec{x}_n$ 的算符 $\hat{\vec{x}}$ 的本征函数(为了看得清楚起见，已假定粒子的坐标只取分立值 $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_n, \cdots$). $\psi_{\vec{x}_n}$ 相当于(1.1.1)式的 ψ_n，$\Psi(\vec{x}_n, t)$ 相当于 $c_n(t)$，而 $|\Psi(\vec{x}_n, t)|^2$ 等于测量位置得到 $\vec{x}_n$ 的几率. 由表(1.1.1)中的比较，更可相信 (c_n) 确实是广义的波函数. 我们称 $\Psi(x, t)$ 为 $\vec{x}$ 表象中的波函数，而 (c_n) 为 A 表象中的波函数. 它们的差别仅仅在于应用了不同的参照系统.

表(1.1.1)

	$\vec{x}$ 表象(分立)	$\vec{x}$ 表象(连续)	A 表象(分立)	A 表象(连续)
本征值与本征函数(参照系)	$\vec{x}_n, \psi_{\vec{x}_n}=\delta(\vec{x}-\vec{x}_n)$	$\vec{x}', \psi_{\vec{x}'}=\delta(\vec{x}-\vec{x}')$	$A_n, \psi_n(\vec{x})$	$A', \psi_{A'}(\vec{x})$
$\Psi(\vec{x}, t)=$	$\sum_n \Psi(\vec{x}_n, t)\psi_{\vec{x}_n}$	$\int \Psi(\vec{x}',t)\psi_{\vec{x}'}d^3x'$	$\sum_n c_n(t)\psi_n$	$\int c(A', t)\psi_{A'}dA'$
平均值	$\langle\vec{x}\rangle=\sum_n \vec{x}_n \lvert\Psi(\vec{x}_n, t)\rvert^2$	$=\int \vec{x}'\lvert\Psi(\vec{x}', t)\rvert^2 d^3x'$	$\langle A\rangle=\sum_n A_n\lvert c_n(t)\rvert^2$	$=\int A'\lvert c(A', t)\rvert^2 dA'$
归一化，1=	$\sum_n \lvert\Psi(\vec{x}_n, t)\rvert^2$	$\int \lvert\Psi(\vec{x}', t)\rvert^2 d^3x'$	$\sum_n \lvert c_n(t)\rvert^2$	$\int \lvert c(A', t)\rvert^2 dA'$
测量结果的几率	$\lvert\Psi(\vec{x}_n, t)\rvert^2$	$\lvert\Psi(\vec{x}', t)\rvert^2$	$\lvert c_n(t)\rvert^2$	$\lvert c(A', t)\rvert^2$
波函数	$(\Psi(\vec{x}_n, t))$	$\Psi(\vec{x}', t)$	$(c_n(t))$	$c(A', t)$

① 参考书[1]，§24.

$\vec{x}$ 表象和 A 表象还有一个非原则性的区别：$\vec{x}$ 的本征值实际上形成连续谱，所以 $\Psi(\vec{x}, t)$是连续变化的本征值$\vec{x}$ 的函数；另一方面，为了简单起见，我们假定 $\hat{A}$ 的本征值形成分立谱，所以 c 只有一连串分立值 c_1，c_2，…，c_n，…．如果 $\hat{A}$ 的本征值 A 也形成连续谱，则如表(1.1.1)所示，$c=c(A, t)$，那么这种形式上的差别就完全不存在了．

根据上述观点可知，下列傅里叶变换

$$\Psi(\vec{x}, t)=(2\pi\hbar)^{-3/2}\int\Phi(\vec{p}, t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}\right]d^3p$$

中的 $\Phi(\vec{p}, t)$就是 $\vec{p}$ 表象中的波函数．由此可见，相应于不同"参照系统"的各种广义波函数，分别对应于不同类型的力学量的测量几率幅．

随之而来的问题自然是：任意一个力学量算符 $\hat{B}$ 在一般的A 表象中将取何种形式？我们首先在熟悉的$\vec{x}$ 表象中讨论 $\hat{B}$ 的意义，然后通过量子态的 $\vec{x}$ 表象和 A 表象的对应关系［公式(1.1.1)，(1.1.3)］过渡到 A 表象去．一个算符 $\hat{B}$ 的意义在于它作用到波函数 $\Psi(\vec{x})$上结果成为波函数 $\Phi(\vec{x})=\hat{B}\Psi(\vec{x})$ 由于任意波函数 $\Psi(\vec{x})$可以用 A 表象的"参照系统"(或称为 A 表象的基矢组)$\psi_n(\vec{x})$展开，而且 $\hat{B}$ 是线性算符，所以讨论 $\hat{B}$ 对 Ψ 的作用，只需考虑它对诸 ψ_n 的作用．我们已有关系式：

$$\Psi=\sum_m c_m\psi_m;\qquad \Phi=\hat{B}\Psi=\sum_m c_m\hat{B}\psi_m.$$

设 $\hat{B}$ 作用于 ψ_m 后将它变成 $\varphi_m=\hat{B}\psi_m$，则 φ_m 也可用 ψ_n 来展开：

$$\varphi_m=\hat{B}\psi_m=\sum_n b_{nm}\psi_n, \tag{1.1.4}$$

其中展开系数为

$$b_{nm}=\int\psi_n^*\hat{B}\psi_m d^3x. \tag{1.1.5}$$

如果已知全部系数 $b_{nm}(n, m=1, 2, \cdots)$，则 $\hat{B}$ 对任意波函数 Ψ 的作用结果也就可知道了：

$$\Phi=\hat{B}\Psi=\sum_m c_m\hat{B}\psi_m=\sum_n\left(\sum_m b_{nm}c_m\right)\psi_n=\sum_n d_n\psi_n. \tag{1.1.6}$$

以上仍是在$\vec{x}$表象中的讨论．转变到 A 表象，如上所述，Ψ 将由一组系数(c_m)来代替；同样，Φ 也将由一组系数(d_n)来代替．(1.1.6)式表明：

$$d_n=\sum_m b_{nm}c_m, \tag{1.1.7}$$

上式右边在形式上恰可看作一行矩阵$(b_{n1}, b_{n2}, \cdots b_{nm}\cdots)$和一列矩阵$(c_m)$相乘的结果．如果我们把$(d_n)$和$(c_m)$都当作一列矩阵，那么 $\hat{B}$ 算符在 A 表象中就相当于一个方矩阵：

$$\hat{B}\leftrightarrow(b_{nm})=\left(\begin{array}{cccc|c} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} & \cdots \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{array}\right), \tag{1.1.8}$$

其中矩阵元 b_{nm} 由(1.1.5)式给出，第一个脚标 $n=1, 2, \cdots$代表行，第二个脚标 $m=1, 2, \cdots$代表列．结果，在 $\vec{x}$ 表象中的 $\Phi=\hat{B}\Psi$，过渡到 A 表象，表示成矩阵关系$(d_n)=(b_{nm})(c_m)$．

上面我们已经论证了算符对波函数的作用，在一般表象中相当于矩阵的乘法运算．现在

我们要进一步考察原在 $\vec{x}$ 表象中定义的算符之间的代数关系，例如乘积 $\hat{B}=\hat{F}\hat{G}$ 及和 $\hat{B}=\hat{F}+\hat{G}$，当算符分别作矩阵表示后是否也由矩阵的代数关系(乘积及和)所代替? 只有当问题得到肯定回答时，(b_{nm})才能真正作为矩阵对待，并以矩阵运算代替算符运算.

根据(1.1.5)式，代替乘积 $\hat{B}=\hat{F}\hat{G}$ 的系数 b_{nm} 为

$$b_{nm}=\int \psi_n^* \hat{B}\psi_m d^3x=\int \psi_n^*\hat{F}\hat{G}\psi_m d^3x.$$

按照算符乘积的定义，$\hat{F}\hat{G}\psi_m$ 表示先由 $\hat{G}$ 对 ψ_m 作用而产生新函数 $\hat{G}\psi_m$，再由 $\hat{F}$ 对 $\hat{G}\psi_m$ 作用，但 $\hat{G}\psi_m=\sum\limits_l g_{lm}\psi_l$，而 $f_{nl}=\int \psi_n^*\hat{F}\psi_l d^3x$，因此

$$b_{nm}=\sum_l g_{lm}\int \psi_n^*\hat{F}\psi_l d^3x=\sum_l f_{nl}g_{lm}. \tag{1.1.9}$$

这正好符合矩阵的乘法定义. 再考虑 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 之和，$\hat{B}=\hat{F}+\hat{G}$，按照算符和的定义，我们有

$$\begin{aligned} b_{nm}&=\int \psi_n^*\hat{B}\psi_m d^3x=\int \psi_n^*\hat{F}\psi_m d^3x+\int \psi_n^*\hat{G}\psi_m d^3x\\ &=f_{nm}+g_{nm}. \end{aligned} \tag{1.1.10}$$

这也符合矩阵和的定义. 因此系数组(b_{nm})，(f_{nm})，(g_{nm})等都确实是矩阵.

至此，我们可以断言：在一般表象中，广义波函数可表示为一列的矩阵，而且算符也具有矩阵的形式；算符对波函数的作用以及算符之间的代数运算都可归结为矩阵的代数运算.

现在进一步讨论，在$\vec{x}$ 表象中已熟悉的诸如厄密算符、求平均值、算符的本征方程、薛定谔方程等等，在一般表象中该如何表示.

由厄密共轭算符的定义：

$$\int \psi_n^*\hat{B}^\dagger\,\psi_m d^3x=\int \psi_m(\hat{B}\psi_m)^* d^3x,$$

我们得到 $\hat{B}^\dagger$ 的矩阵元为

$$b_{nm}=\int \psi_n^*\hat{B}\;\;\psi_m d^3x=\left(\int \psi_m^*\hat{B}\psi_n d^3x\right)^*=b_{mn}^*. \tag{1.1.11}$$

因此，如果 $\hat{B}\longleftrightarrow(b_{nm})$，则 $\hat{B}\;\longleftrightarrow(b_{mn}^*)$. 换言之，$\hat{B}^\dagger$ 矩阵等于转置的 $\hat{B}$ 矩阵的复数共轭，通常称为厄密共轭矩阵. 由此可见，如果 $\hat{B}$ 为厄密算符：$\hat{B}\;=\hat{B}$，则它的矩阵是厄密矩阵：

$$b_{nm}=b_{nm}^\dagger=b_{mn}^*,\quad b_{nn}=\text{实数}. \tag{1.1.12}$$

我们已知力学量 B 的平均值 $\langle\hat{B}\rangle=\int \Psi^*\hat{B}\Psi d^3x$，如果代入 $\Psi^*=\sum\limits_n c_n^*\psi_n^*$，$\Psi=\sum\limits_m c_m\psi_m$，则得

$$\langle\hat{B}\rangle=\sum_{nm}c_n^*b_{nm}c_m.$$

所以，如将

$$\Psi^*\longleftrightarrow(c_1^*,\ c_2^*,\ \cdots,\ c_n^*,\ \cdots)=(c_n) \tag{1.1.13}$$

看作一个一行的矩阵，它是 Ψ 所对应的一列矩阵(c_n)的厄密共轭矩阵，那么$\langle\hat{B}\rangle$由三个矩阵的乘积来表示：

$$\langle\hat{B}\rangle=(c_n)\ \ (b_{nm})(c_m)=\sum_{nm}c_n^*b_{nm}c_m. \tag{1.1.14}$$

借助于(1.1.13)式，我们同样可把正交性及归一化表示为矩阵运算：如 $\Psi=\sum_n c_n\psi_n$，$\Phi=\sum_m d_m\psi_m$，则容易验证

$$\text{正交性:}\quad 0=\int\Psi^*\Phi d^3x=\sum_{nm}c_n^* d_m\delta_{nm}$$

$$=\sum_n c_n^* d_n=(c_n)^\dagger(d_n)$$

$$\text{归一化:}\quad 1=\int\Psi^*\Psi d^3x=(c_n)^\dagger(c_n)$$

现在来讨论本征值问题. 在 $\vec{x}$ 表象中，我们需要求解厄密算符 $\hat{B}$ 的本征方程 $\hat{B}\psi=b\psi$. 过渡到一般的 A 表象：$\psi=\sum_m c_m\psi_m\longleftrightarrow(c_m)$，而 $\hat{B}\longleftrightarrow(b_{nm})$；算符 $\hat{B}$对 ψ 的作用 $\hat{B}\psi$ 过渡为矩阵的相乘. 结果本征方程成为：

$$\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} & \cdots \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \\ \vdots \end{pmatrix}=b\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{1.1.15}$$

以上方程组也可如下推出：将 $\psi=\sum_m c_m\psi_m$ 代入 $\hat{B}\psi=b\psi$，再分别以 $\psi_n^*(n=1,\ 2\cdots)$乘等式两边，然后对 $\vec{x}$ 积分得到

$$\sum_m c_m b_{nm}=\sum_m bc_m\delta_{nm}=bc_n,\quad n=1,\ 2,\cdots$$

将此关于 c_n 的方程组写成矩阵形式，就是(1.1.15)式. 这是求厄密矩阵(b_{nm})的本征值及相应的本征矢量(c_m)的本征方程. 如果求得了解答 b_i 及相应的(c_m^i)，$i=1,2,\cdots$，则

$$\psi_i=\sum_m c_m^i\psi_m,\quad \int\psi_i^*\psi_j d^3x=(c_m^i)^\dagger(c_m^j)=\delta_{ij},$$

再以 ψ_i，$i=1,\ 2,\ \cdots$为"参照系统"，即取 B 表象来表示 $\hat{B}$ 算符，其矩阵元为

$$b_{ij}=\int\psi_i^*\hat{B}\psi_j d^3x=b_j\delta_{ij},$$

所以，在它自己的表象中，算符有最简单的对角形式，对角元素就是它的本征值：

$$(b_{ij})=\begin{pmatrix} b_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & b_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & b_3 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \tag{1.1.16}$$

综上所述，本征值问题也是一个矩阵代数问题. 要求算符 $\hat{B}$ 的本征值，可将 $\hat{B}$ 矩阵化为对角形式而完成任务. 至于 $\hat{B}$ 的本征函数 $\psi_i(i=1,\ 2,\ \cdots)$，即 B 表象的基矢组，如果也用 B 表象来表示，根据(1.1.1)，(1.1.2)，(1.1.3)式，考虑到基矢之间的正交归一性，则它们可写成：

$$\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix},\cdots \tag{1.1.17}$$

不难用矩阵运算来验证它们确实是正交归一的，而且确实是对角矩阵(1.1.16)的本征矢量。借助(1.1.17)式，任意态 Ψ 按 ψ_i 的展开式 $\Psi=\sum_i c_i\psi_i$ 可写成

$$\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\c_3\\c_4\\\vdots\end{pmatrix}=c_1\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}+c_2\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}+c_3\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}+\cdots \tag{1.1.18}$$

同样，也可将薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\hat{H}\Psi$$

在 A 表象中表示：如果 $\Psi=\sum_m c_m\psi_m$，则

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}c_1\\\vdots\\c_m\\\vdots\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} & \cdots\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ H_{m1} & H_{m2} & \cdots & H_{mn} & \cdots\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\\vdots\\c_n\\\vdots\end{pmatrix}, \tag{1.1.19}$$

其中 H_{mn} 是 $\hat{H}$ 的矩阵元。以上方程组也可由将 Ψ 的展式代入薛定谔方程，利用表象基矢组的正交归一性而导出．(1.1.19)式的厄密共轭是

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(c_m)^{\dagger}=(c_n)^{\dagger}(H_{nm}). \tag{1.1.20}$$

例1 求一维谐振子的 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 算符在能量表象中的矩阵表示。

设一维谐振子能量算符的本征函数 ψ_n 对应于本征值 $E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$，在上册 § 13 中已解出：

$$\psi_n=\sqrt[4]{\frac{m\omega_0}{\hbar}}\,e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi),\quad \xi=x\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}},\quad n=0,1,2,\cdots$$

其中 $H_n(\xi)$ 为第 n 阶厄密多项式。按照(1.1.5)式，$\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 算符在能量表象中的矩阵元是

$$x_{nk}=\int\psi_n^* x\,\psi_k dx$$

$$p_{nk}=\int\psi_n^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_k\right)dx$$

为了计算的方便，我们先求两个互为厄密共轭的算符$\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\hat{x}\pm\frac{i}{\hbar}\hat{p}\right)$的矩阵元，再通过它们求出$(x_{nk})$和$(p_{nk})$。利用公式［见上册附录 III 中的公式(III. 14)］

$$\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right)\psi_k(\xi)=\sqrt{2k}\ \psi_{k-1}(\xi),$$

我们有
$$\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\hat{x}+\frac{i}{\hbar}\hat{p}\right)_{nk}=\int\psi_n^*\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}x+\frac{d}{dx}\right)\psi_k dx$$
$$=\int\psi_n^*(\xi)\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right)\psi_k(\xi)d\xi=\sqrt{2k}\int\psi_n^*(\xi)\psi_{k-1}(\xi)d\xi$$
$$=\sqrt{k\frac{2m\omega_0}{\hbar}}\int\psi_n^*(x)\psi_{k-1}(x)dx=\sqrt{k\frac{2m\omega_0}{\hbar}}\ \delta_{n,k-1},$$

所以矩阵
$$\left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\hat{x}+\frac{i}{\hbar}\hat{p}\right)_{nk}\right]=\sqrt{\frac{2m\omega_0}{\hbar}}\begin{pmatrix}0&\sqrt{1}&0&0&\cdots\\0&0&\sqrt{2}&0&\cdots\\0&0&0&\sqrt{3}&\cdots\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\end{pmatrix}.$$

由此得矩阵
$$\left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\hat{x}-\frac{i}{\hbar}\hat{p}\right)_{nk}\right]=\left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\hat{x}+\frac{i}{\hbar}\hat{p}\right)_{nk}\right]^{\dagger}$$
$$=\sqrt{\frac{2m\omega_0}{\hbar}}\begin{pmatrix}0&0&0&0&\cdots\\\sqrt{1}&0&0&0&\cdots\\0&\sqrt{2}&0&0&\cdots\\0&0&\sqrt{3}&0&\cdots\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\end{pmatrix}$$

因为
$$\hat{x}=\frac{\hbar}{2m\omega_0}\left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\hat{x}+\frac{i}{\hbar}\hat{p}\right)+\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\hat{x}-\frac{i}{\hbar}\hat{p}\right)\right],$$
$$\hat{p}=\frac{\hbar}{2i}\left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\hat{x}+\frac{i}{\hbar}\hat{p}\right)-\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\hat{x}-\frac{i}{\hbar}\hat{p}\right)\right],$$

所以，通过矩阵的代数运算得到①：

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\begin{pmatrix}0&\sqrt{1}&0&0&0&0&\cdots\\\sqrt{1}&0&\sqrt{2}&0&0&0&\cdots\\0&\sqrt{2}&0&\sqrt{3}&0&0&\cdots\\0&0&\sqrt{3}&0&\sqrt{4}&0&\cdots\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\end{pmatrix}\tag{1.1.21}$$

$$\hat{p}=i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}}\begin{pmatrix}0&-\sqrt{1}&0&0&0&0&\cdots\\\sqrt{1}&0&-\sqrt{2}&0&0&0&\cdots\\0&\sqrt{2}&0&-\sqrt{3}&0&0&\cdots\\0&0&\sqrt{3}&0&-\sqrt{4}&0&\cdots\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\end{pmatrix}\tag{1.1.22}$$

容易验证，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2=\frac{\hbar\omega_0}{2}\begin{pmatrix}1&0&0&0&\cdots\\0&3&0&0&\cdots\\0&0&5&0&\cdots\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\end{pmatrix}.\tag{1.1.23}$$

① 在记号上不再区分算符和矩阵.

可见 $\hat{H}$ 在它自己的表象中是对角矩阵，主对角线上的元素是它的本征值.

我们已经完成了在一般表象中描述量子力学问题的任务.但是,我们是由 $\bar{x}$ 表象出发而过渡到 A 表象的.于是,我们要提出一个极重要的问题:当粒子具有不属于三维位形空间运动的其它自由度时(例如自旋运动),由于和该种自由度相关的力学量的本征态显然不能以 $\bar{x}$ 的函数来表示,所以就不能再从 $\bar{x}$ 表象出发过渡到这个力学量的表象中去.对于这种情况,该怎么办?

如果我们抓住建立一般表象的实质，根据叠加原理着重于态按基矢展开的一组系数，而不拘泥于原来的态和基矢是以何种表象表示的形式，那么我们的问题就迎刃而解了．这就是我们不一定要从 $\bar{x}$ 表象出发．既然在某些情况(例如对于自旋态)我们不能作 $\bar{x}$ 表象的描述，那么不妨直接采用有关力学量的表象．采用 A 表象来表示 $\hat{A}$ 的本征态(基矢)，它们成为(1.1.17)式所示的样子．而 $\hat{A}$ 在自己的表象中具有对角矩阵形式．所以，如果我们由实验资料或理论推断知道力学量 A 有哪些本征值，那么 $\hat{A}$ 在自己的表象中的表示就可直接建立起来．而任意态在 A 表象中的表示可写成(1.1.18)式的样子.

现在，我们进一步提出问题：如果 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 都是属于位形空间运动以外的自由度的算符，那么 $\hat{A}$ 采用 A 表象表示后，$\hat{B}$ 在 A 表象中如何表示呢?（例如电子自旋的 x 分量 $\hat{S}_x$ 在 S_z 表象中如何表示)这时可以通过 $\hat{B}$ 与 $\hat{A}$ 的算符代数关系(这种关系常常能够由实验或理论假定而得到)依靠矩阵运算来得到 $\hat{B}$ 的矩阵表示.

例 2 设电子自旋算符 $\hat{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$ 如同轨道角动量算符那样满足关系：$\hat{\vec{S}}\times\hat{\vec{S}}=i\hbar\hat{\vec{S}}$. 即 $\hat{\sigma}_i$ 满足：

$$[\hat{\sigma}_1,\ \hat{\sigma}_2]=2i\hat{\sigma}_3,\ [\hat{\sigma}_2,\ \hat{\sigma}_3]=2i\hat{\sigma}_1,\ [\hat{\sigma}_3,\ \hat{\sigma}_1]=2i\hat{\sigma}_2 \tag{1.1.24}$$

由实验已知 $\hat{\sigma}_3$ 只有两个本征值 $+1$ 和 -1，求 $\hat{\sigma}_1$，$\hat{\sigma}_2$，$\hat{\sigma}_3$ 在 σ_3 表象中的矩阵表示.

$\hat{\sigma}_3$ 的两个本征态可以表达成 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，分别对应于本征值$+1$ 和 -1。在 σ_3 表象中，$\hat{\sigma}_3$ 本身为对角形式

$$\hat{\sigma}_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}, \tag{1.1.25}$$

并且容易验证 $\hat{\sigma}_3^2=1$.

下一步，求 $\hat{\sigma}_1$ 在 σ_3 表象中的矩阵表示．设

$$\hat{\sigma}_1=\begin{pmatrix}(\sigma_1)_{11} & (\sigma_1)_{12}\\(\sigma_1)_{21} & (\sigma_1)_{22}\end{pmatrix}.$$

由于 $\hat{\sigma}_1$ 应是厄密矩阵，所以其对角元素是实数，且$(\sigma_1)_{12}=(\sigma_1)_{21}^*$．从(1.1.24)的三个等式中消去 $\hat{\sigma}_2$，并注意 $\hat{\sigma}_3^2=1$，得到 $\hat{\sigma}_1$ 和 $\hat{\sigma}_3$ 之间的算符关系：

$$\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1+\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_3=0 \tag{1.1.26}$$

$$2i\hat{\sigma}_3=\frac{1}{2i}(2\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1-\hat{\sigma}_1^2\hat{\sigma}_3-\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1^2). \tag{1.1.27}$$

由(1.1.26)式

$$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}(\sigma_1)_{11} & (\sigma_1)_{21}^*\\ (\sigma_1)_{21} & (\sigma_1)_{22}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}(\sigma_1)_{11} & (\sigma_1)_{21}^*\\ (\sigma_1)_{21} & (\sigma_1)_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=0,$$

得到$(\sigma_1)_{11}=(\sigma_1)_{22}=0$，于是

$$\hat{\sigma}_1=\begin{pmatrix}0 & (\sigma_1)_{21}^*\\ (\sigma_1)_{21} & 0\end{pmatrix},\quad \hat{\sigma}_1^2=|(\sigma_1)_{21}|^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{1.1.28}$$

将(1.1.28)式及 $\hat{\sigma}_3$ 矩阵代入(1.1.27)式，得到$|(\sigma)_{21}|^2=1$，准确到相位可调，令$(\sigma_1)_{21}=1$，于是我们求得了

$$\hat{\sigma}_1=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}. \tag{1.1.29}$$

将 $\hat{\sigma}_3$ 及 $\hat{\sigma}_1$ 的矩阵表示代入 $\hat{\sigma}_2=\frac{1}{2i}(\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1-\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_3)$，得到

$$\hat{\sigma}_2=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}. \tag{1.1.30}$$

我们将已经求得的 $\hat{\sigma}$ 矩阵叫做泡利(W. Pauli)矩阵.

我们已经建立了在一般的 A 表象中表示量子态及算符的方案．经常使用的坐标表象，$\hat{x}$ 实际上同时包含了三个力学量 $\hat{x}_1$、$\hat{x}_2$、$\hat{x}_3$．单独测量 $\hat{x}_1$ 的值是不足以完全描述量子态的．同样道理，$\hat{A}$ 应该是一套完全集合力学量算符的综合代表(例如，在辏力场中运动的情形，$\hat{A}$ 可以综合代表 $\hat{H}$、$\hat{L}^2$、$\hat{L}_3$)．换言之，我们要取一套完全集合的共同的本征态作为表象的基矢．所谓完全集合是指一套相互独立、而彼此可以交换的力学量，只有通过完全集合的同时测量，才能确定态．下面，我们从数学上补充证明两个可交换算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 有共同的本征函数系[1].

设通过解方程 $\hat{A}\psi=A\psi$，我们已找出了 $\hat{A}$ 的一系列本征值 A_1，A_2，…，A_n，…和相应的本征函数 ψ_1，ψ_2，…，ψ_n，…．由于 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是可对易的线性算符，故有

$$\hat{A}(\hat{B}\psi_n)=\hat{B}(\hat{A}\psi_n)=\hat{B}(A_n\psi_n)=A_n(\hat{B}\psi_n).$$

因此，$\hat{B}\psi_n$ 也是属于本征值 A_n 的 $\hat{A}$ 的一个本征函数.

如果本征值 A_n 是非简并的，则属于 A_n 的本征函数只有一个 ψ_n，因而 $\hat{B}\psi_n$ 必等于常数乘上 ψ_n，即

$$\hat{B}\psi_n=B_n\psi_n \tag{1.1.31}$$

这就是说，ψ_n 同时也是 $\hat{B}$的本征函数(属于本征值 B_n).

如果本征值 A_n 是 f 度简并的，即存在 f 个函数 ψ_{nk}，$k=1, 2, \cdots, f$，它们都是属于本征值 A_n 的 $\hat{A}$ 的本征函数：$\hat{A}\psi_{nk}=A_n\psi_{nk}$．我们假定诸 ψ_{nk} 已正交归一化．由于 $\hat{B}\psi_n$ 也是属于 A_n 的 $\hat{A}$ 的一个本征函数，所以它必定是 $\psi_{nk}(k=1, 2, \cdots, f)$的线性组合，即

$$\hat{B}\psi_{nk}=\sum_{l=1}^{f}b_{lk}\psi_{nl},\quad k=1, 2, \cdots, f. \tag{1.1.32}$$

以 ψ_{nj}^* 左乘上式，再积分，考虑正交归一性，求得系数

[1] 参考书[1]，§21；[7]第16章，§17.

$$b_{jk}=\int\psi_{nj}^{*}\hat{B}\psi_{nk}d^{3}x,\quad j,\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ f. \tag{1.1.33}$$

(1.1.32)式表明 ψ_{nk} 不是 $\hat{B}$ 的本征函数，但我们能够用 $\psi_{nk}(k=1,\ 2,\ \cdots,\ f)$ 重新线性组合成 f 个新的函数 $\varphi_{ni}(i=1,\ 2,\ \cdots,\ f)$：

$$\varphi_{ni}=\sum_{k=1}^{f}c_{k}^{ni}\psi_{nk}, \tag{1.1.34}$$

使它们成为 $\hat{B}$ 的本征函数：

$$\hat{B}\varphi_{ni}=B_{i}\varphi_{ni},\quad i=1,\ 2,\ \cdots,\ f. \tag{1.1.35}$$

显然 φ_{ni} 仍是属于本征值 A_n 的 $\hat{A}$ 的本征函数．这由 $\hat{A}$ 是线性算符所保证：

$$\hat{A}\varphi_{ni}=\sum_{k=1}^{f}c_{k}^{ni}\hat{A}\psi_{nk}=A_{n}\varphi_{ni}.$$

下面，我们讨论如何由满足(1.1.35)式的要求来决定(1.1.34)式中的线性叠加系数 c_k^{ni}．将(1.1.34)式代入(1.1.35)式，并应用(1.1.32)式，得到：

$$\begin{aligned}\hat{B}\varphi_{ni}&=\sum_{k=1}^{f}c_{k}^{ni}\hat{B}\psi_{nk}=\sum_{k=1}^{f}\sum_{l=1}^{f}c_{k}^{ni}b_{lk}\psi_{nl}=B_{i}\varphi_{ni}\\&=\sum_{k=1}^{f}B_{i}c_{k}^{ni}\psi_{nk}=\sum_{k=1}^{f}\sum_{l=1}^{f}c_{k}^{ni}B_{i}\delta_{lk}\psi_{nl},\quad i=1,2,\cdots,f\end{aligned}$$

因此，只要选系数 c_k^{ni} 使之满足

$$\sum_{k=1}^{f}(b_{lk}-B_{i}\delta_{lk})c_{k}^{ni}=0,\quad i,\ l=1,\ 2,\ \cdots,\ f \tag{1.1.36}$$

便能使 $\varphi_{ni}(i=1,2,\cdots,f)$ 满足(1.1.35)式．或者说由(1.1.36)式解出 $c_k^{ni}(i,k=1,2,\cdots,f)$，用这些 c_k^{ni} 按(1.1.34)式来组成的 φ_{ni}，便是算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征函数，它们属于 $\hat{A}$ 的本征值 A_n 和 $\hat{B}$ 的本征值 B_i．B_i 是由下述手续决定的．线性齐次方程组(1.1.36)要有不全等于零的解 c_k^{ni}，必须有行列式

$$\det[b_{lk}-B_{i}\delta_{lk}]=0. \tag{1.1.37}$$

由上式可解出 $\hat{B}$ 的本征值 $B_i(i=1,\ 2,\ \cdots,\ f)$［由于(1.1.37)式是一个 f 次的代数方程，它有 f 个根］．将各个 B_i 的数值代入(1.1.36)式，可解出 f 组系数 $c_k^{ni}(i,\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ f)$，从而决定相应的 f 个本征函数 φ_{ni}．由于 $\hat{B}$ 是厄密算符，矩阵 (b_{lk}) 是厄密矩阵，所以 B_i 一定都是实数，并且 φ_{ni} 都是互相正交的．

由以上讨论可见：如果算符 $\hat{A}$ 的本征值是简并的，那么仅仅确定力学量 A 的数值不足以完全确定粒子的态．这时必须再确定和 A 可对易的另一个力学量 B 的数值．也可能确定了 A 和 B 之后仍不足以完全确定粒子的态，例如，当(1.1.37)式有重根时便会发生这种情况．这时还能有数个（重根数）线性独立的函数都是属于 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的同一对本征值的本征函数．在这种情况，我们还需要再确定和 $\hat{A}$，$\hat{B}$ 都可交换的第三个力学量 $\hat{C}$ 的本征值．依次类推，我们称完全确定粒子的态所需要的一组最少数目的力学量为完全集合．为了方便，我们应选择一套完全集合共同的本征函数作为表象的基矢①（即参照系统）．在具体问题中，选择适当的

① 由于厄密算符 $\hat{A}$ 的本征函数系是完备的，如果 $\hat{A}$ 不是完全集合，其本征值有简并性，只要对简并的本征函数进行了正交归一化手续，$\hat{A}$ 的本征函数系仍可作为表象的基矢组．

表象，对于解决问题的繁简将有很大关系，因此这成为理论工作需要认真考虑的问题.

回顾本节的数学内容，我们并不感到生疏，它们都是在线性代数中学习过的. 特别是态可以在不同的表象中表示，非常类似于一个矢量可以用不同的坐标系来描述. 而且，算符把一个态变为另一个态，并可写成矩阵形式，不正如一个线性变换把一个矢量变为另一个矢量吗？因此，我们不禁要问，是否有一个可以反映量子态性质的矢量空间呢？这样的空间就是希耳伯特(Hilbert)空间.

§1.2　希耳伯特空间　态矢量

希耳伯特空间是存在完备基的无穷维的线性空间，而且是定义了内积(标量积)的幺正空间①.

(1) 线性空间

线性空间是元素(矢量)的集合，它对于线性运算(相加和数乘)是封闭的.

(1.a) 空间的矢量可以相加②，任意两个矢量之和，仍为空间中的一个矢量.

我们采用狄拉克建议的符号. 用"$|\rangle$"表示空间的矢量，在"$|$"和"$\rangle$"间可插入字母以区别不同矢量. 于是，上述性质可表示为

$$|a\rangle+|b\rangle=|c\rangle \tag{1.2.1}$$

$|c\rangle$仍为空间中的一个矢量. 加法满足下列性质：

$$\left.\begin{array}{ll}
1)\ |a\rangle+|b\rangle=|b\rangle+|a\rangle & (\text{交换律}) \\
2)\ |a\rangle+(|b\rangle+|c\rangle)=(|a\rangle+|b\rangle)+|c\rangle & (\text{结合律}) \\
3)\ \text{对于空间中的零矢量 } |0\rangle \text{ 有} & \\
\quad |a\rangle+|0\rangle=|a\rangle &
\end{array}\right\} \tag{1.2.2}$$

(1.b) 用任何复数③乘任何矢量仍得空间中的一个矢量：

$$\alpha|a\rangle=|b\rangle \tag{1.2.3}$$

α 为任意复数. 并且数乘满足下列性质：

$$\left.\begin{array}{l}
1)\ \alpha(|a\rangle+|b\rangle)=\alpha|a\rangle+\alpha|b\rangle \\
2)\ (\alpha+\beta)|\rangle=\alpha|\rangle+\beta|\rangle \\
3)\ (\alpha\beta)|\rangle=\alpha(\beta|\rangle) \\
4)\ 0|a\rangle=|0\rangle \\
5)\ 1|a\rangle=|a\rangle
\end{array}\right\} \tag{1.2.4}$$

性质(1.a)和(1.b)表明空间是线性的.

(2) 空间的维数与完备基

进一步，我们要求空间中的任意矢量 $|a\rangle$ 都能表示为基矢的线性组合.

1) 参考书[1]，§82；[3]，§5，§6；[18]，第一卷，3，4，5章；[31]，附录1；[39]，§3.9，§3.12.

2) 对于抽象的矢量空间，加法是需要具体定义的. 例如三维位形空间的位矢，按平行四边形法则相加. 对于波函数或矩阵作为矢量，加法是通常熟知的定义.

3) 矢量空间的定义中，关于数乘涉及一个数域 P，我们关心的是复矢量空间，所以 P 是整个复数域.

(2.a) 设空间是有限维的，维数（空间的特征）为 n. n 为有限的，意思是在空间中至多只能找到 n 个不为零的线性无关矢量，即在式

$$\alpha_1|1\rangle+\alpha_2|2\rangle+\cdots+\alpha_n|n\rangle+\alpha_{n+1}|n+1\rangle=0$$

中至少能有一组不全等于零的系数$[\alpha_i]$使上式成立．式中$|i\rangle(i=1, 2, \cdots, n, n+1)$是空间中 $n+1$ 个任意的非零矢量．

于是在空间中可以建立一组基矢，即选择 n 个线性无关的非零矢量 $|i\rangle$，$i=1, 2, \cdots, n$；它们被称为"完备集"，满足

$$\sum_{i=1}^{n}\alpha_i|i\rangle\neq 0,$$

除非所有的 α_i 全等于零．当然，一般地存在许多套"完备集"，均可作为一组基矢．当选定一组基矢后，n 维空间中的任意矢量均可用基矢的线性组合表示：

$$|a\rangle=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i|i\rangle \tag{1.2.5}$$

系数 α_i 称为 $|a\rangle$ 对于所取基矢的分量．α_i 一般为复数．

(2.b) 如果空间是无限维的（希耳伯特空间），则要求（1.2.5）式推广到 $n=\infty$ 时仍成立．即要求仍能找到完备集 $|i\rangle(i=1, 2, \cdots, \infty)$作为基矢组（在下节中，将给出一组矢量为完备的条件）．这基矢组中的任何有限个矢量都是线性无关的，

$$\sum_{j=1}^{m}\alpha_j|j\rangle\neq 0, \quad m=\text{任意正整数},$$

除非诸 α_j 均为零．希耳伯特空间中的任意矢量 $|a\rangle$ 可用基矢的线性组合表出：

$$|a\rangle=\sum_{i=1}^{\infty}\alpha_i|i\rangle \tag{1.2.6}$$

上式右边的无穷级数收敛于 $|a\rangle$.

(3) 幺正空间

我们还需要规定诸如矢量的模、矢量的正交性等涉及矢量标量积的运算．

(3.a) 存在一个对应的共轭空间，其中矢量与原空间的矢量有一一对应关系，并且相应的分量互为共轭复数．用 $\langle\,|$ 表示共轭空间的矢量．设对应于基矢 $|i\rangle(i=1, 2, \cdots)$的共轭空间基矢为 $\langle i|(i=1, 2, \cdots)$，对应于 $|a\rangle$ 的共轭空间矢量为 $\langle a|$，则对应于（1.2.5）或（1.2.6）式有

$$\langle a|=\sum_i\alpha_i^*\langle i|, \tag{1.2.7}$$

通常 $|\,\rangle$ 称为**右矢**(ket)，而 $\langle\,|$ 称为**左矢**(bra).

(3.b) 一个左矢和一个右矢可以相乘，乘积$\langle a|b\rangle$①（称为内积或标量积）是一个复数，且满足下列性质：

1) $\langle a|b\rangle=\langle b|a\rangle^*$, $\quad\langle a|a\rangle\geqslant 0$

2) $\langle a|\{|b\rangle+|b'\rangle\}=\langle a|b\rangle+\langle a|b'\rangle$

$\{\langle a|+\langle a'|\}|b\rangle=\langle a|b\rangle+\langle a'|b\rangle$

① 在一般矢量空间中，矢量 a, b 的标量积常记作(a, b).