第1章

预备知识

量子力学是描述微观世界运动规律的理论，诞生于1925年，最初的形式为矩阵力学，由海森堡(Werner Heisenberg)、玻恩(Max Born)和约当(Pascual Jordan)三位德国科学家创建。1926年，奥地利物理学家薛定谔(Erwin Schrödinger)提出了量子力学的另一种形式——波动力学，并证明了波动力学与矩阵力学的等价性。波动力学虽然出现稍晚，但应用更为方便，很快成为了主流形式。在本书中，量子力学默认指波动力学，它与我们熟知的牛顿力学有很大的差异。在牛顿力学中，运动物体被抽象为质点，其空间位置随时间演化。以一维运动为例，质点的位置 x 随时间 t 而变化，当质点不受束缚时，x 的全部取值范围构成实数集$\mathbb{R}$。实数集$\mathbb{R}$具有很好的性质，例如可以定义微分和积分运算。质点的运动速度就是 x 关于 t 的导数。然而，之后将要介绍，量子力学使用波函数来描述微观粒子的状态。在一维情况下，粒子在任意时刻的波函数(一般用 Ψ 标记)都是关于空间坐标 $x \in \mathbb{R}$ 的函数，全部波函数的集合则构成一个抽象的函数空间。在量子力学中，这个抽象空间称为希尔伯特空间。

微积分的建立依赖于实数集的完备性等性质；而在有理数集中，显然极限的定义存在问题，例如

$$\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{1}{n}\right)^{n}=\mathrm{e} \tag{1-1}$$

是无理数，所以无法在有理数集中引入微积分运算。类似地，考察波函数的集合所具有的特性，对量子力学的学习是非常有必要的。本章将介绍希尔伯特空间、算符、线性泛函的基础知识。另外，在微积分及变分法的基础上，法国科学家拉格朗日(Joseph-Louis Lagrange)于18世纪引入的分析力学比牛顿力学更适合用于多粒子体系及复杂系统，是经典力学的重要组成部分。随后于19世纪出现的哈密顿力学重新表述了拉格朗日力学的数学形式。在量子力学的建立过程中，物理学家们在很大程度上延续了经典力学的数学形式。了解经典力学，尤其是哈密顿力学，对理解初等量子力学大有裨益。

1.1 希尔伯特空间与线性泛函

集合是数学中最基础的概念。一元函数微积分依赖于实数集$\mathbb{R}$的一系列优良特性。三维欧几里得空间中全部的矢量也构成一个集合，它是一个线性空间。然而，当函数的整体成为集合中的一个元素时，有必要对微积分和线性代数学科中涉及的集合或空间进行某种抽象与推广。特别是集合的元素可以不限于实数、复数或矢量，它可以包括任何实体。在这种

推广和抽象化的集合概念下，可以定义一系列的运算规则。

1.1.1 度量空间

法国数学家弗雷歇(M.-R. Fréchet)于1906年定义了度量空间(metric space)的概念，它十分基础和广泛，仅建立在集合的基础上。

定义 1-1 度量空间

设 X 为非空集合，对其中每两个元素 x、y 都定义其距离 $d(x,y)\in\mathbb{R}$，满足以下四个条件(x、y、z 为集合中的元素)：

$$d(x,y)\geqslant 0 \tag{1-2}$$

$$d(x,y)=0\Leftrightarrow x=y \tag{1-3}$$

$$d(x,y)=d(y,x) \tag{1-4}$$

$$d(x,y)\leqslant d(x,z)+d(z,y) \tag{1-5}$$

则称 d 是 X 上的一个度量(即距离函数)，(X,d) 称为度量空间。

度量空间的定义中，不等式(1-5)特别重要，称为三角不等式。显然，三维位形空间中所有的点可以构成一个集合，其元素有无穷多个。如果定义任意两点之间的距离等于其连线的长度，则三角不等式成立。其意义是：

(1) 如果 x、y、z 是三个不同的点，且不在同一条直线上，则三角不等式的小于号成立，原因是三角形的任一边长小于另外两条边的长度之和。

(2) 如果 x、y、z 是三个不同的点，且在同一条直线上，那么如果 z 位于 x 与 y 之间，则三角不等式的等号成立；否则，其小于号成立。

(3) 如果 $x=y$，则三角不等式的左侧等于零，右侧非负，不等式(1-5)成立。

(4) 如果 $x=z$(或 $y=z$，情况相似)，则由式(1-3)可判断不等式(1-5)的等号成立。

三角不等式并不是平庸的、对任何情况都成立的。例如，一个广场上所有的人组成一个集合(见图1-1)，每两个人所在位置之间的直线距离取为度量，则三角不等式显然成立。但如果将两个人之间的距离用亲疏远近来量化，越熟悉距离越短，则三角不等式不一定成立。例如 C 与 A、C 与 B 都熟识，但 A 与 B 完全不认识，那么 $d(A,B)>d(A,C)+d(C,B)$，违反三角不等式，这种度量的定义就不成立。

例 1-1 度量空间 $C[a,b]$：定义在实轴某闭区间 $t\in[a,b]$ 上的全部连续实值函数($x=x(t)$，$y=y(t)$ 等)组成一个集合，引入度量

$$d(x,y)=\max_{t\in[a,b]}|x(t)-y(t)|$$

容易看出绝对值运算保证了式(1-2)和式(1-4)成立。

条件(1-3)证明如下：如果 $d(x,y)=0$，则在区间 $[a,b]$ 上 x 与 y 处处差值的绝对值不大于零，即 $x=y$；反之，若 $x=y$，则 $|x(t)-y(t)|$ 恒等于零，因此 $d(x,y)=0$。

三角不等式(1-5)的证明如下：设 $t_0\in[a,b]$，且

$$d(x,y)=\max_{t\in[a,b]}|x(t)-y(t)|=|x(t_0)-y(t_0)|$$

这样的 t_0 不一定唯一(如果不唯一，则任选其中一个)，但至少存在一个。由绝对值的运算规则得

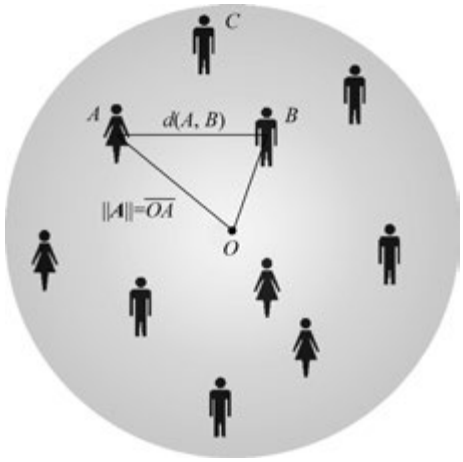


图 1-1　广场上的人组成的度量空间

$$|x(t_0)-z(t_0)|+|z(t_0)-y(t_0)|\geqslant|x(t_0)-y(t_0)|=d(x,y)$$

但另一方面，

$$|x(t_0)-z(t_0)|\leqslant d(x,z)$$

$$|z(t_0)-y(t_0)|\leqslant d(z,y)$$

因此

$$d(x,y)\leqslant|x(t_0)-z(t_0)|+|z(t_0)-y(t_0)|\leqslant d(x,z)+d(z,y)$$

即条件(1-5)成立，$C[a,b]$构成度量空间。

引入度量的好处是可以定义序列的收敛性。

定义 1-2　依度量收敛

设(X,d)为度量空间，对其中的无穷序列 x_n 和元素 x，若任取实数 $\varepsilon>0$，都存在 $N\in\mathbb{N}$，使得当 $n>N$ 时恒有

$$d(x_n,x)<\varepsilon$$

则称序列 x_n 依度量 d 收敛于 x，x 为序列 x_n 的极限：

$$\lim_{n\to\infty}x_n=x$$

1.1.2　线性空间

线性空间也就是线性代数中定义了加法和数乘的矢量空间，但本章所指的线性空间概念比较广泛，仅建立在集合的基础上，对空间中元素的实体属于什么类别并无要求。

定义 1-3　线性空间

数域 K（例如实数域$\mathbb{R}$、复数域$\mathbb{C}$）上的线性空间（也称为矢量空间）是一个非空集合 X，其元素 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\cdots$ 称为矢量（vector），并对 X 和 K 定义了两种代数运算：矢量加法、矢量与标量（即数域 K 中的元素）的乘法。其中，矢量加法定义如下。

对 X 中的每一对矢量 $\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{y}$，都有与之关联的一个矢量 $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}$ 称为 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 之和，并满足：

(1) $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}+\boldsymbol{x}$（交换律）

(2) $\boldsymbol{x}+(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})=(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})+\boldsymbol{z}$（结合律）

此外，X 中必须存在零矢量，记为 $\mathbf{0}$，满足：

(3) $\boldsymbol{x}+\mathbf{0}=\boldsymbol{x}$(零矢量)

并且对 X 中任意矢量 $\boldsymbol{x}$，都存在其加法逆元，记为 $-\boldsymbol{x}$，满足：

(4) $\boldsymbol{x}+(-\boldsymbol{x})=\mathbf{0}$(加法逆元)

并定义矢量减法：对 X 中的任意一对矢量 $\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{y}$，其差 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}$ 即 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 的加法逆元之和

(5) $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}+(-\boldsymbol{y})$(减法)

矢量与标量的乘法定义如下。对任意矢量 $\boldsymbol{x}$ 与标量 α，与其关联的一个矢量 $\alpha\boldsymbol{x}$(或记为 $\boldsymbol{x}\alpha$)称为 α 与 $\boldsymbol{x}$ 之积，且对任意 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in X$ 及 $\alpha,\beta\in K$ 满足：

(6) $\alpha(\beta\boldsymbol{x})=(\alpha\beta)\boldsymbol{x}$

(7) $1\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}$

(8) $\alpha(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})=\alpha\boldsymbol{x}+\alpha\boldsymbol{y}$

(9) $(\alpha+\beta)\boldsymbol{x}=\alpha\boldsymbol{x}+\beta\boldsymbol{x}$

当数域 K 取为实数域$\mathbb{R}$时，X 称为实线性空间；当数域 K 取为复数域$\mathbb{C}$时，X 称为复线性空间。因此，取决于 K 的性质，线性空间中的数乘既可能是实数数乘，也可能是复数数乘。一个集合如果是线性空间，其元素通常不再笼统地称为“元素”，而称为“矢量”。

线性空间中的矢量不一定是几何意义上的矢量，也可以是函数或者其他实体。

例 1-2 n 维实欧几里得空间$\mathbb{R}^n$：它的元素是形如

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\\ \vdots\\ \xi_n\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}\eta_1\\ \eta_2\\ \vdots\\ \eta_n\end{bmatrix}$$

的 n 元实数序列组成的矢量。依照通常线性代数的规则定义矢量加法和数乘：

$$\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}\xi_1+\eta_1\\ \xi_2+\eta_2\\ \vdots\\ \xi_n+\eta_n\end{bmatrix},\quad \alpha\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}\alpha\xi_1\\ \alpha\xi_2\\ \vdots\\ \alpha\xi_n\end{bmatrix}$$

要求标量 $\alpha\in\mathbb{R}$。其中$\mathbb{R}^3$是我们最为熟悉的，用于描述物理上的三维位形空间。当选定直角坐标系原点后，任何一个位置都可以用该空间中的三维矢量来描述。当然，也可以根据需要选择柱坐标系或者球坐标系，则矢量的各分量之间将具有不同的物理量纲。

例 1-3 线性空间 $C[a,b]$：定义在实轴某闭区间 $t\in[a,b]$上的全部连续实值函数组成一个线性空间，其矢量记为函数 $x(t)$，$y(t)$等。它们实质上是标量函数，只是其整体可视为抽象空间中的“矢量”。矢量加法定义为

$$(x+y)(t)=x(t)+y(t)$$

实数数乘定义为

$$(\alpha x)(t)=\alpha x(t)\quad(\alpha\in\mathbb{R})$$

线性相关与无关、线性空间的维度、子空间等概念与线性代数的知识一致，这里不再赘述。

1.1.3 赋范空间

上一小节引入的线性空间中虽然定义了线性运算，但仍然缺乏距离、收敛等概念。本小节中，通过对矢量定义范数，可以将线性空间与度量空间结合起来。

定义 1-4 赋范线性空间

赋范线性空间（简称赋范空间）X，是指在其上定义了范数（norm）的线性空间。所谓（实或复）线性空间 X 上的范数是指定义在 X 上的实值函数，它在 $\boldsymbol{x}\in X$ 的值记为 $\boldsymbol{x}$ 的范数 $\|\boldsymbol{x}\|$。范数应具有如下性质：

$$\|\boldsymbol{x}\| \geqslant 0 \tag{1-6}$$

$$\|\boldsymbol{x}\| = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \tag{1-7}$$

$$\|\alpha\boldsymbol{x}\| = |\alpha| \, \|\boldsymbol{x}\| \tag{1-8}$$

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\| \tag{1-9}$$

式中，$\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{y}$ 是 X 中的任意矢量；α 是 X 相应数域中的任意标量。赋范线性空间 X 可记为 $(X, \|\cdot\|)$。

矢量的范数与复数的模是不同的概念。设 $\Psi(x)$ 为任意定义在实数集上的复值函数。所谓复值函数指定义域是实数集 $\mathbb{R}$，但值域是复数集 $\mathbb{C}$ 的一类特殊函数，它与复变函数有本质区别（复变函数定义在复数域上）。若 $\Psi(x)$ 的模方（即先取复数的模，再对其平方）可积，定义范数

$$\|\Psi\| \xlongequal{\text{def}} \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 \mathrm{d}x} \tag{1-10}$$

如果范数为 1，表示函数整体作为线性空间中的一个矢量，具有某种好的特征，即“归一化条件”。函数在局域某点处值的模等于 1，不说明其范数为 1；反之，函数的范数为 1，不等于其特定点处值的模为 1，甚至可能在任何点处的值，其模都不等于 1。这个例子反映出函数整体特性与函数局域特性的区别。

赋范空间不仅是一种特殊的线性空间，同时也是度量空间。

定理 1-1 范数可以给出度量

证明 设 $(X, \|\cdot\|)$ 为赋范线性空间，对其中任意两个矢量 $\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{y}$，定义其距离

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\| \tag{1-11}$$

其中 $-\boldsymbol{y}$ 是 $\boldsymbol{y}$ 的加法逆元。下面验证该距离定义满足度量空间的要求。

（1）由于 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}$ 也是 X 中的矢量，由式（1-6）可知，条件（1-2）成立。

（2）当 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ 时，$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \|\boldsymbol{0}\| = 0$。反之，若 $d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\| = 0$，则由式（1-7）知，$\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$ 或者 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$。综上，条件（1-3）成立。

（3）根据式（1-8）得 $d(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\| = \|(-1)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\| = |-1| \, \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\| = d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$，条件（1-4）成立。

（4）设 $\boldsymbol{z}$ 也是 X 中的矢量，则 $d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})+d(\boldsymbol{z},\boldsymbol{y}) = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z}\| + \|\boldsymbol{z}-\boldsymbol{y}\| \geqslant \|(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z})+(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{y})\| = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\| = d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$，其中用到了不等式（1-9）。因此，条件（1-5）也成立。

综上，(X,d) 是度量空间。范数可以自然地给出一种度量，赋范空间是一类特殊的度量空间。

例 1-4 之前已经证明欧几里得空间$\mathbb{R}^n$是线性空间。对其中任意矢量$\boldsymbol{x}$引入范数：

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\\ \vdots\\ \xi_n\end{bmatrix}\Rightarrow \|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{\sum_{j=1}^{n}|\xi_j|^2}$$

因此，其中任意两个矢量$\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{y}$之间的距离取为

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|=\sqrt{\sum_{j=1}^{n}|\xi_j-\eta_j|^2},\quad \text{其中 } \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}\eta_1\\ \eta_2\\ \vdots\\ \eta_n\end{bmatrix}$$

读者可自行验证以上范数和距离的定义是否符合要求。

例 1-5 酉空间$\mathbb{C}^n$与$\mathbb{R}^n$的区别在于，每个矢量的各分量由实数推广为复数，线性空间的数域也取为复数域$\mathbb{C}$。任意矢量$\boldsymbol{x}$的范数仍然定义为

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\\ \vdots\\ \xi_n\end{bmatrix}(\xi_j\in\mathbb{C},j=1,2,\cdots,n)\Rightarrow\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{\sum_{j=1}^{n}|\xi_j|^2}$$

只不过$|\cdot|$不再理解为绝对值，而变为复数取模的运算。酉空间是英文 unitary space 的中文翻译，其中“酉”(unitary)的另外一种译法是“幺正”。所以“酉算符”与“幺正算符”、“酉变换”与“幺正变换”都是完全相同的概念。

例 1-6 序列空间$l^p(p\in\mathbb{N})$中每个元素都是一个无穷维矢量，记为

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\\ \vdots\\ \xi_j\\ \vdots\end{bmatrix}$$

其中$\xi_j\in\mathbb{C}(j\in\mathbb{N})$，并要求级数$\sum_{j=1}^{\infty}|\xi_j|^p$收敛。矢量$\boldsymbol{x}$的范数定义为

$$\|\boldsymbol{x}\|=\left(\sum_{j=1}^{\infty}|\xi_j|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

读者可自行验证l^p是赋范空间。

1.1.4 赋范空间的完备性

人们往往关注某些具有较“好”性质的赋范空间，而完备性(completeness)是其中最重要的性质之一。不失一般性，完备性的概念应该在度量的意义上进行讨论。

定义 1-5 柯西列

度量空间(X,d)中的序列x_n，如果对于任意给定的实数$\varepsilon>0$，都存在$N\in\mathbb{N}$，使得当

$j>N,k>N$ 时，恒有

$$d(x_j,x_k)<\varepsilon \tag{1-12}$$

则称序列 x_n 是柯西列。

收敛的序列一定是柯西列，证明如下。

定理 1-2 在度量空间(X,d)中，收敛的序列一定是柯西列。

证明 设在度量空间(X,d)中，存在任意收敛的序列 x_n，满足

$$\lim_{n\to\infty}x_n=x$$

则对于任意给定的实数 $\varepsilon/2>0$，都存在 $N\in\mathbb{N}$，使得当 $j>N,k>N$ 时，恒有

$$d(x_j,x)<\varepsilon/2$$

$$d(x_k,x)<\varepsilon/2$$

由条件(1-5)可知

$$d(x_j,x_k)\leqslant d(x_j,x)+d(x_k,x)<\frac{\varepsilon}{2}+\frac{\varepsilon}{2}=\varepsilon$$

所以，对于任意给定的实数 $\varepsilon>0$，都存在 $N\in\mathbb{N}$，使得当 $j>N,k>N$ 时，恒有

$$d(x_j,x_k)<\varepsilon \tag{1-13}$$

即 x_n 是柯西列。

反之，柯西列是否一定收敛呢？在实数集中，有著名的柯西收敛原则，即柯西列一定收敛。然而，若实数集中去掉了某些元素，例如无理数，则可以构造一个本应收敛于 e 的柯西列$\{x_n\}$，$x_n=(1+1/n)^n$，但由于其极限在集合以外，该序列不再收敛，该空间也就不再完备了。可见，从更广泛的意义上讲，柯西列不一定收敛。

定义 1-6 赋范空间的完备性

在一个赋范空间中，若所有的柯西列都收敛，则称空间是完备的(complete)。

例 1-7 不完备的赋范空间例子。设 X 是定义在区间$[-1,1]$上全部实值连续函数的集合。对任意两个元素 $x(t),y(t)$，定义加法

$$(x+y)(t)=x(t)+y(t),\quad t\in[-1,1]$$

对任意元素 $x(t)$与任意实数 α，定义数乘

$$(\alpha x)(t)=\alpha x(t),\quad t\in[-1,1]$$

容易验证 X 构成线性空间。进一步，对任意元素 $x(t)$，定义范数

$$\|x\|=\int_{-1}^{1}|x(t)|\,\mathrm{d}t$$

它满足范数所需的各种限制条件。X 构成赋范空间，但它是否完备呢？要证明其不完备只需要举出一个柯西列不收敛即可。下面构造一个柯西列$\{x_n\}$，其中每个元素 $x_j(t)$都是定义在区间$[-1,1]$上的实值连续函数：

$$x_j(t)=\begin{cases}-\pi, & -1\leqslant t<-\dfrac{1}{j+1}\\ 4\arctan[(j+1)t], & -\dfrac{1}{j+1}\leqslant t\leqslant\dfrac{1}{j+1},\quad j\in\mathbb{N}\\ \pi, & \dfrac{1}{j+1}<t\leqslant 1\end{cases}$$

然而，在 X 中序列$\{x_n\}$并没有极限。因为极限如果存在(记为 $z(t)$)，势必满足

$$z(t)=\begin{cases}-\pi, & -1\leqslant t<0\\ \pi, & 0<t\leqslant 1\end{cases}$$

即在 $t=0$ 处函数 $z(t)$的值必须发生不连续的跃变，所以 $z(t)$不可能是连续函数，也就不在 X 中。

由此例可以看出，一个赋范空间是否完备，往往并不是显而易见的。然而，对有限维赋范空间，情况则简单得多，有如下定理。

定理 1-3 有限维的赋范空间都是完备的。

本定理的证明从略，有兴趣的读者可参阅泛函分析的教材。

完备的赋范空间也称为巴拿赫空间，这是为了纪念波兰数学家巴拿赫(Stefan Banach)对泛函分析做出的巨大贡献。

1.1.5 内积空间与希尔伯特空间

赋范空间已经将微积分和线性代数两门学科中的一些核心概念融合在了一起，例如距离与收敛、加法和数乘。然而，如何给出范数的最佳定义？一个比较好的方案是通过定义内积运算来导出范数。

定义 1-7 内积空间

内积空间是在其上定义了内积运算的线性空间 X。所谓内积是指对 X 中的任意一对矢量 $\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{y}$，都有一个标量与之相对应，记为$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$，称作 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 的内积。内积需要满足以下性质。对任意矢量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\in X$ 以及标量β(一般为复数)，均有

$$(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y},\boldsymbol{z})=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})+(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}) \tag{1-14}$$

$$(\boldsymbol{x},\beta\boldsymbol{y})=\beta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \tag{1-15}$$

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})^* \tag{1-16}$$

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})\geqslant 0,\quad \text{并且 } (\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})=0\Leftrightarrow\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0} \tag{1-17}$$

其中上标 $*$ 代表取复共轭的运算。在量子力学中遇到的内积空间一般是定义在复数域上的，内积值一般也是一个复数，但由式(1-16)可知

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})^*\Rightarrow(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})\in\mathbb{R}$$

由此可见，式(1-17)直接将$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})$与 0 比较大小是合理的。任意矢量与自身的内积值都是非负的实数。另外，由式(1-15)和式(1-16)可知，对于任意复数 α，有

$$(\alpha\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=(\boldsymbol{y},\alpha\boldsymbol{x})^*=[\alpha(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})]^*=\alpha^*(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$$

所以，内积对于前一个矢量的数乘是共轭线性的，对后一个矢量的数乘才是线性的。注意，在数学上，许多泛函分析教材中关于内积的线性性质具有相反的定义(前一个矢量的数乘是线性的，后一个矢量的数乘是共轭线性的)。量子力学中的习惯则有所不同，本书一律沿用量子力学的定义式(1-15)。

可以立即证明内积具有如下重要性质——施瓦茨不等式。

定理 1-4 内积运算满足如下的施瓦茨不等式(Schwarz's inequality)：

$$|(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})|^2\leqslant(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}) \tag{1-18}$$

证明 讨论 $\boldsymbol{y}$ 是否为零矢量。

(1) 如果 $\boldsymbol{y}$ 是零矢量,则由条件(1-17)可知$(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})=0$。而$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{0})=(\boldsymbol{x},-\boldsymbol{0})=-(\boldsymbol{x},\boldsymbol{0})$,说明$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=0$。等号成立。

(2) 如果 $\boldsymbol{y}$ 不是零矢量,则对于任意标量 α,均有

$$0\leqslant(\boldsymbol{x}-\alpha\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}-\alpha\boldsymbol{y})=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})-\alpha(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})-\alpha^{*}[(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})-\alpha(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})]$$

今取

$$\alpha=\frac{(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})}{(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})}$$

代入上式得

$$0\leqslant(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})-\frac{(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}{(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})}=\frac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})-|(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})|^{2}}{(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})}$$

不等式两边同时乘以非负实数$(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})$,并移项整理得

$$|(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})|^{2}\leqslant(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})$$

证毕。

内积具有很好的性质,例如可以由内积定义范数。所以内积空间是一类特殊的赋范空间。

定理 1-5 通过内积可以定义矢量的范数。

证明 设 X 为内积空间,定义其中任意矢量 $\boldsymbol{x}$ 的范数为

$$\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}$$

下面检验该定义是否符合范数的性质。

(1) $\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}\geqslant0$,自然满足条件(1-6)。

(2) 若 $\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}=0$,说明$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})=0$。根据性质(1-17),有 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$;反之,若 $\boldsymbol{x}$ 是零矢量,则性质(1-17)保证其与自身的内积为零,故 $\|\boldsymbol{x}\|=0$。综上,性质(1-7)成立。

(3) $\|\alpha\boldsymbol{x}\|=\sqrt{(\alpha\boldsymbol{x},\alpha\boldsymbol{x})}=\sqrt{\alpha(\alpha\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}=\sqrt{\alpha(\boldsymbol{x},\alpha\boldsymbol{x})^{*}}=\sqrt{\alpha\alpha^{*}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})^{*}}=\sqrt{|\alpha|^{2}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}=|\alpha|\sqrt{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}=|\alpha|\,\|\boldsymbol{x}\|$,性质(1-8)成立。证明过程利用了式(1-15)、式(1-16),并注意到任意复数与其复共轭的乘积等于其模方($\alpha\alpha^{*}=|\alpha|^{2}$)。

(4) 在施瓦茨不等式的基础上,两边开平方,得

$$|(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})|\leqslant\sqrt{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}\ \sqrt{(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})}=\|\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{y}\|$$

$$|(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})|\leqslant\|\boldsymbol{y}\|\,\|\boldsymbol{x}\|=\|\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{y}\|$$

因此

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^{2}&=(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})=\|\boldsymbol{x}\|^{2}+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})+(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})+\|\boldsymbol{y}\|^{2}\\&\leqslant\|\boldsymbol{x}\|^{2}+|(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})|+|(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})|+\|\boldsymbol{y}\|^{2}\\&\leqslant\|\boldsymbol{x}\|^{2}+2\|\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{y}\|+\|\boldsymbol{y}\|^{2}=(\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|)^{2}\end{aligned}$$

两边开平方,最终得到范数应满足的三角不等式(1-9):

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|\leqslant\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|$$

综上,由内积给出的范数定义符合要求。

由此可见,内积空间都是赋范空间。拥有内积运算的好处是可引出矢量之间正交(orthogonal)的概念。

定义 1-8 内积为零的两个矢量称为互相正交。

例 1-8 酉空间$\mathbb{C}^n$是一个内积空间。其中任意两个元素

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\\ \vdots\\ \xi_n\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}\eta_1\\ \eta_2\\ \vdots\\ \eta_n\end{bmatrix}$$

的内积定义为

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\xi_1^*\eta_1+\xi_2^*\eta_2+\cdots+\xi_n^*\eta_n=\sum_{j=1}^{n}\xi_j^*\eta_j$$

可以进一步检验内积给出的范数：

$$\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{\sum_{j=1}^{n}|\xi_j|^2}$$

确实与预期完全一致。

由于酉空间$\mathbb{C}^n$的维度为n，是有限维的，所以它是完备的。完备的内积空间在量子力学中具有特殊重要的地位。

定义 1-9 希尔伯特空间

完备的内积空间称为希尔伯特空间。

度量空间、线性空间、赋范空间、内积空间与希尔伯特空间之间的从属关系可由图 1-2 表示。

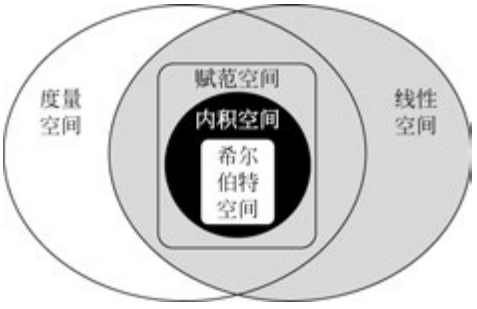


图 1-2 希尔伯特空间与相关概念之间的从属关系

例 1-9 实轴上全部的点组成一个一维希尔伯特空间，任意两个元素x、y的内积定义为$(x,y)=xy$，即简单的实数相乘。零矢量即实数零：$\mathbf{0}=0$。元素x的范数定义为$\|x\|\overset{\text{def}}{=}\sqrt{(x,x)}=\sqrt{x^2}=|x|$，即坐标$x$的绝对值。任意两个元素$x$、$y$的距离为$d(x,y)=|x-y|$。虽然该空间中含有无穷多个元素，却是一维的。因为其中任何一个元素x_0都与基矢$\boldsymbol{I}=1$线性相关。

$$x_0+(-x_0)\boldsymbol{I}=0$$

例 1-10 在实轴上定义如下狄拉克δ函数。对于实常数x_0，

$$\delta(x-x_0)=\begin{cases}\infty, & x=x_0\\ 0, & x\neq x_0\end{cases}\tag{1-19}$$