§2 算符

§2.1 定义

1. 算符:

要求一种详细的相应关系，用 A表达，使右矢空间中的某些右矢与其中另某些右矢相相应。如

$$|\varphi>=A|\psi>$$

这么的对易关系A称为算符。

2. 定义域和值域

在算符的定义域中，被算符 A 作用的右矢全体称为A 的定义域，得出的右矢全体称为值域。

两者能够不同、部分或完全重叠。一般定义域和值域都是整个空间。

3. 线性算符和反线性算符

（1） 一种算符A，其定义域是一种矢量空间，如果满足下列条件

$$A(|\psi>+|\varphi>)=A|\psi>+A|\varphi>$$

$$A(|\psi>a)=(A|\psi>)a$$

则算符A称为线性算符。

（2）假如算符A满足下列条件

$$A(|\psi>+|\varphi>)=A|\psi>+A|\varphi>$$

$$A(|\psi>a)=(A|\psi>)a^{*}$$ 其中a是任意复数。

则算符A称为反线性算符。

量子力学中的算符绝大多数是线性算符。

（3） 线性算符的定义域

算符对其定义域中的每一种右矢作用，都应有拟定的成果。

拟定一种详细的线性算符，只需要求它对其定义域中的一组线性无关的右矢中每一种右矢的作用成果即可。

线性算符的定义域，能够是整个右矢空间本身，也能够是其一子空间。

（4） 线性算符的性质

1）线性算符的值域也是一种右矢空间；

2）若定义域是有限维的空间，则值域空间的维数等于或不大于定义域空间的维数；

3）在定义域中，那些受**A**的作用得到零矢量的右矢全体，也构成一种右矢空间, 这是定义域的子空间。

4. 几种特殊算符

（1） 复数算符

复数对右矢的数乘，能够看作算符对右矢的作用。每一种复数都能够看成一种算符；其定义域和值域均为全空间：

$$a|\psi>=|\psi>a$$

（2） 零算符和单位算符

若 $O|\psi>=|0>$， $1|\psi>=|\psi>$

对一切$|\psi>$都成立，则 O 称为零算符，1称为单位算符。

5. 算符的运算

（1）算符之和　　A+B

$$(A+B)|\psi> = A|\psi> + B|\psi>$$

A+B定义域是A与B两算符定义域共同部分（交集）

（2）算符之乘积　　BA

$$BA|\psi> = B(A|\psi>)$$

BA的定义域：

1)A的值域$\subset$ B的定义域：BA的定义域＝A的定义域;

2)A的值域$\not\subset$ B的定义域：BA的定义域$\subset$ A的定义域。即某些$|\psi>$能够被A作用，但不能被BA作用。

(3)两个算符相等

A与B有相同定义域而且对域内任意矢量$|\psi>$,有

$$A|\psi> = B|\psi>$$

则

$$A = B$$

(4)两个算符对易

若两算符满足 AB=BA，则此二算符对易。

各个算符之间不都是可对易的，要求对易式

[A,B]=AB-BA

表达两算符A,B的对易关系。

(5)代数运算法则

除互换律不一定成立（不对易）外，算符之间服从一般的加、减、乘和幂次的代数运算法则：

$$A(B+C)=AB+AC$$

$$(AB)C=A(BC)$$

$$A^3=AAA$$

$$\cdots$$

(6)算符的函数

可用算符和复数构成一种多项式作为算符的函数

$$F(A)=a_0+a_1A+a_2A^2+\cdots+a_nA^n$$

甚至能够构成无穷级数，例如

$$\mathbf{1}+aA+\frac{1}{2!}a^2A^2+\frac{1}{3!}a^3A^3+\cdots=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}a^nA^n=e^{aA}$$

注意上式是算符的指数函数的定义式。

在此定义下，关系式$e^Ae^B=e^{A+B}$的成立是有条件的

即

$$[A,B]=0$$

若 $[A,B]\neq 0$ 则 $e^Ae^B\neq e^{A+B}$

6. 逆算符

①定义: 设在一种右矢空间中，算符A把定义域中的一种右矢$|\psi>$ 变为值域中一种右矢$|\varphi>$

$$\mathrm{A}\,|\psi>=|\varphi>$$

$$A|\psi>=|\varphi>$$

若算符A所建立的这个相应关系是一一相应的，则由$|\varphi>$到$|\psi>$的逆相应关系存在。这种关系称为A的逆算符，用A^{-1}表达，即

$$A^{-1}|\varphi>=|\psi>$$

显然

$$A^{-1}A=AA^{-1}$$

逆算符A^{-1}的定义域和值域分别是A的值域和定义域

逆算符相当于算符的除法，有时也可写为

$$A^{-1}=\frac{1}{A}$$

②算符有逆的条件

1)在$A|\psi>=|\varphi>$中，对于每一种$|\varphi>$，总有$|\psi>$存在

2)若 $A|\psi_1>=A|\psi_2>$ ，则必有$|\psi_1>=|\psi_2>$

这两个条件需同步满足。

以上条件是对 A 的定义域及值域均为无穷维空间来说的。

若 A 的定义域为有限维（值域也是有限维），能够证明条件 1) 肯定满足。有逆的条件只用条件 2)就能够。

③有关算符有逆的定理

定理：设A是一种定义域和值域都在全空间的线性算符，若另外两个线性算符B, C存在，满足

$$AB = 1, \quad CA = 1$$

则算符A有逆，且

$$A^{-1} = B = C$$

[证]只需证明A满足上述两个条件就能够。

条件1）：在值域中取任意波函数$|\varphi>$

证明在定义域中有$|\psi>$存在即可。

$$|\varphi>=1|\varphi> = AB|\varphi> = A(B|\varphi>)$$

可见对任意$|\varphi>$，必有$|\psi>$存在，

此$|\psi>$即$B|\varphi>$

条件2）：若 $A|\psi_1>=A|\psi_2>$ ，

用C作用此式两边，有

$$CA|\psi_1>=CA|\psi_2>$$

但 $CA=1$

所以 $|\psi_1>=|\psi_2>$

故A^{-1} 存在。

既然A^{-1}存在，将$AB=1$用A^{-1}左乘，

得 $A^{-1}=B$

将$CA=1$用A^{-1} 右乘得$A^{-1}=C$

所以 $A^{-1}=B=C$

#

§2.2 算符的代数运算

在量子力学中，经常出现不可对易线性算符的代数运算。在这一节里举几种比较复杂的算例，并用代数措施证明两个常用的算符等式。

多重对易式

设A,B为两个线性算符,互不对易. 定义多重对易式

$$[A^{(0)}, B] = B \qquad [B, A^{(0)}] = B$$

$$[A^{(1)}, B] = [A, B] \qquad [B, A^{(1)}] = [B, A]$$

$$[A^{(2)}, B] = [A, [A, B]] \qquad [B, A^{(2)}] = [[B, A], A]$$

L L

显然，对于$[A^{(i)},B]$型的多重对易式，有

$$[A,[A^{(i)},B]]=[A^{(i+1)},B]$$

利用上式及其对易关系，轻易得出

$$A[A^{(i)},B]=[A^{(i)},B]A+[A^{(i+1)},B]$$

对于$[B,A^{(i)}]$型的多重对易式亦有类似的公式。

例1 证明： $$A^n B=\sum_{i=0}^{n}\frac{n!}{(n-i)!i!}[A^{(i)},B]A^{n-i}$$

[证]利用数学归纳法

1) 当n=1时，上式变为 $AB=BA+[A,B]$

这是显然的。

2) 若原式成立，即

$$A^n B=\sum_{i=0}^{n}\frac{n!}{(n-i)!i!}[A^{(i)},B]A^{n-i}$$

左边用A作用，利用式

$$A[A^{(i)},B]=[A^{(i)},B]A+[A^{(i+1)},B]$$

有 $$A^{n+1}B=\sum_{i=0}^{n}\frac{n!}{(n-i)!i!}A[A^{(i)},B]A^{n-i}$$

$$=\sum_{i=0}^{n}\frac{n!}{(n-i)!i!}[A^{(i)},B]A^{n+1-i}$$

$$+\sum_{i=0}^{n}\frac{n!}{(n-i)!i!}[A^{(i+1)},B]A^{n-i}$$

看上式右端第二项，我们希望这两项能合并

为此，令$j=i+1$，则

$$\sum_{i=0}^{n}\frac{n!}{(n-i)!i!}[A^{(i+1)},B]A^{n-i}=\sum_{j=1}^{n+1}\frac{n!}{(n-j+1)!(j-1)!}[A^{(j)},B]A^{n-j+1}$$

与第一项进行比较 $\sum_{i=0}^{n}\frac{n!}{(n-i)!i!}[A^{(i)},B]A^{n+1-i}$

进行傀标代换$j\to i$，第二项变为

$$\sum_{i=1}^{n+1}\frac{n!}{(n-i+1)!(i-1)!}[A^{(i)},B]A^{n+1-i}$$

$$=\sum_{i=1}^{n+1}\frac{i}{n+1}\frac{(n+1)!}{(n-i+1)!i!}[A^{(i)},B]A^{n+1-i}$$

一样第一项也相应变为

$$\sum_{i=0}^{n}\frac{n-i+1}{n+1}\frac{(n+1)!}{(n-i+1)!i!}[A^{(i)},B]A^{n+1-i}$$

这么原式就变为

$$A^{n+1}B=\sum_{i=0}^{n}\frac{n-i+1}{n+1}\frac{(n+1)!}{(n-i+1)!i!}[A^{(i)},B]A^{n+1-i}$$

$$+\sum_{i=1}^{n+1}\frac{i}{n+1}\frac{(n+1)!}{(n-i+1)!i!}[A^{(i)},B]A^{n+1-i}$$

考虑两项求和符号后第一种分式的特点，能够将两个求和上下线写成一致，即

$$A^{n+1}B=\sum_{i=0}^{n+1}\frac{n-i+1}{n+1}\frac{(n+1)!}{(n-i+1)!i!}[A^{(i)},B]A^{n+1-i}$$

$$+\sum_{i=0}^{n+1}\frac{i}{n+1}\frac{(n+1)!}{(n-i+1)!i!}[A^{(i)},B]A^{n+1-i}$$

从而有 $$A^{n+1}B=\sum_{i=0}^{n+1}\frac{(n+1)!}{(n-i+1)!i!}[A^{(i)},B]A^{n+1-i}$$

所以，若原式对n时成立，则n+1时也成立。

3) 已知n=1时成立，所以原式对任意整数n都成立。

下面利用这个结论来证明一种常用的公式：

$$e^{A}Be^{-A}=\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{i!}[A^{(i)},B]$$

[证] 利用算符指数函数的定义，有

$$e^{aA}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}a^{n}A^{n}$$

所以 $$e^{A}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}A^{n}$$

利用上例结论，当 $n \to \infty$ 时

$$A^n B = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{n!}{(n-i)!i!}[A^{(i)}, B]A^{n-i}$$

则 $$e^A B e^{-A} = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n B\right] e^{-A}$$

$$= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{n!}{(n-i)!i!}[A^{(i)}, B]A^{n-i}\right] e^{-A}$$

$$= \left[\sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!}[A^{(i)}, B]\left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n-i)!} A^{n-i}\right)\right] e^{-A}$$

$$= \left[\sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!}[A^{(i)}, B] e^{A}\right] e^{-A} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!}[A^{(i)}, B]$$

Q $\quad n: 0 \sim \infty$

$\therefore \quad n-i: -i \sim \infty$

but $\quad (-n)! = \infty$

$$\therefore \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^{n-i}}{(n-i)!} = \sum_{n-i=0}^{\infty} \frac{A^{n-i}}{(n-i)!}$$

$$= e^A$$

#

下面我们把条件放宽某些：

虽然$[A,B]\neq 0$，但 $[A,B]=C,[C,A]=[C,B]=0$

由此证明几种关系.

$$\text{Q}\quad [A,B]\neq 0$$

$$\therefore\quad (A+B)^2=A^2+AB+BA+B^2$$

$$(A+B)^3=A^3+A^2B+ABA+$$
$$+BA^2+AB^2+BAB+B^2A+B^3$$

下面要求一种符号$[A+B]^n$，其意义是，不论**A, B**是否对易，$(A+B)^n$中**A**一律写在**B**前面所得的式子，如

$$[A+B]^2=A^2+2AB+B^2$$

$$[A+B]^3=A^3+3A^2B+3AB^2+B^3$$

$$[A+B]^2 = A^2 + 2AB + B^2$$

$$[A+B]^3 = A^3 + 3A^2B + 3AB^2 + B^3$$

显然它符合一般代数中的二项式定理

$$[A+B]^n = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{n!}{(n-i)!i!} A^{n-i} B^i$$

我们懂得，根据定义

$$e^{A+B} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} (A+B)^i$$

当 $[A,B] \neq 0$ 时，$e^{A+B} \neq e^A e^B$（利用定义式能够证明）

目前要求

$$e^A e^B = e^{[A+B]} = \sum_i \frac{1}{i!} [A+B]^i$$

能够证明（不再证）

（1）令 $C=[A,B]$ ，则有

$$(A+B)[A+B]^n=[A+B]^{n+1}-nC[A+B]^{n-1}$$

（2）另外，$(A+B)^n$ 与 $[A+B]^n$ 有如下关系

$$(A+B)^n=\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{i!}\frac{n!}{(n-2i)!}[A+B]^{n-2i}\left(-\frac{C}{2}\right)^i$$

例5 证明Glauber公式 $e^{A+B}=e^Ae^Be^{-C/2}$

[证] $$e^{A+B}=\sum_n\frac{1}{n!}(A+B)^n$$

$$=\sum_n\frac{1}{n!}\sum_{i=0}\frac{1}{i!}\frac{n!}{(n-2i)!}[A+B]^{n-2i}\left(-\frac{C}{2}\right)^i$$