（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

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

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，且V对加法和数乘封闭
  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$\boldsymbol{0}$使得对于任意$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{x}+\boldsymbol{0}=\boldsymbol{x}$
  4. 对任意$\boldsymbol{x}$，存在唯一的向量$-\boldsymbol{x}$使得$\boldsymbol{x}+(-\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$
  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**

内积和内积空间

- $\mathbb{R}^n$标准内积：向量$\boldsymbol{u}$和$\boldsymbol{v}$的内积为$\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{n} u_1 v_1 + \cdots + u_n v_n$
- 一般实线性空间V的内积$\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle$：$V \times V \to \mathbb{R}$
  - **对称**：$\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle = \langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u} \rangle$
  - 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**：对第二个变量的线性加对称性可以推出对第一个变量线性

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
  - $\forall\, \boldsymbol{v} \in V$，$g_{\boldsymbol{v}}: V \to \mathbb{C}$，$g_{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{w}) \equiv \langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \rangle$
  - 线性函数$g_{\boldsymbol{v}}(\cdot)$是$V^*$中的元素（$g_{\boldsymbol{v}}(\cdot)$代表一个自变量的函数，$\cdot$代表自变量）
- 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
- 左矢（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$H^\dagger = H$
  - 厄米矩阵是方阵
- **定理**：厄米矩阵$H^\dagger = H$，对于任意的$\boldsymbol{z} \in \mathbb{C}^n$，$\boldsymbol{z}^\dagger H \boldsymbol{z}$是实数
- 证明：$\left(\boldsymbol{z}^\dagger H \boldsymbol{z}\right)^\dagger = \boldsymbol{z}^\dagger H^\dagger \boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}^\dagger H \boldsymbol{z}$

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

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
  - $\lambda = 1$，$v = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$。$\lambda = -1$，$v = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$。

例：量子力学

- 可观测量：每个可观测量对应一个厄米算符（矩阵）。厄米矩阵的特征值就代表了这个可观测量的所有可能的测量结果
- 注：实验结果都是实数，所以需要特征值都为实数的厄米矩阵
- P. A. M. Dirac, pp36

We can infer that, with the dynamical system in any state, *any result of a measurement of a real dynamical variable is one of its eigenvalues.* Conversely, *every eigenvalue is a possible result of a measurement of the dynamical variable for some state of the system*, since it is certainly the result if the state is an eigenstate belonging to this eigenvalue. This gives us the physical significance of eigenvalues. The set of eigenvalues of a real dynamical variable are just the possible results of measurements of that dynamical variable and the calculation of eigenvalues is for this reason an important problem.

厄米矩阵的对角化

- **谱定理**：任何nxn厄米矩阵H的特征向量构成$\mathbb{C}^n$的一组幺正基
- $H = Q\Lambda Q^\dagger$
- $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

例：量子力学

- 态空间上的基：每个可观测量对应一个厄米算符（矩阵）。厄米矩阵的特征向量构成态空间中的一组正交完备基。
- 注：
  - 我们课程讨论的都是有限维的，量子力学里的态空间一般是无限维的，但是实际上我们一般讨论一个有限维的子空间，我们之前提到的所有定理怎么在无限维是其它数学课的内容。
  - 任何一个量子态都能写成厄米矩阵特征向量的线性组合
  - 并不是所有矩阵都可以同时对角化的。对易的厄米矩阵可以同时对角化

例：量子力学

- 物理量对应的厄米矩阵H的特征向量$\{|1\rangle,\cdots,|n\rangle\}$构成态空间中的一组正交完备基，为了方便我们假设这些向量的模为1
- 任意一个物理态可以写成这些正交归一基的线性组合
$$|\boldsymbol{v}\rangle = c_1|1\rangle + \cdots + c_n|n\rangle$$
- 假设$|\boldsymbol{v}\rangle$也是归一化的，$\langle\boldsymbol{v}|\boldsymbol{v}\rangle = 1$
- **测量假设**：对物理态$|\boldsymbol{v}\rangle$测量物理量H，我们得到特征值λ_i，并且物理态塌缩到对应的特征向量$|i\rangle$。并且得到的λ_i概率是$|c_1|^2$，或者说概率是$|\langle\boldsymbol{v}|i\rangle|^2$（假设 $|\boldsymbol{v}\rangle$、$|i\rangle$模都为1）
- 推论：$\langle\boldsymbol{v}|H|\boldsymbol{v}\rangle$是对量子态$\boldsymbol{v}$测量物理量$H$的期望值

例：量子力学

- 泡利矩阵：$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
- 自旋算符：$s_x = \frac{1}{2}\sigma_1$， $s_y = \frac{1}{2}\sigma_2$， $s_z = \frac{1}{2}\sigma_3$，描述了电子自旋的三个分量
  - $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$是电子x方向自旋为1/2的本征态
  - $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$，写成了z方向自旋两个本征态的线性组合
  - 所以对于电子x方向自旋为1/2的本征态测z方向自旋，50%的可能得到1/2，50%的可能得到-1/2

幺正矩阵（unitary matrix）

- 正交矩阵：$Q^TQ = QQ^T = I$
- **幺正矩阵**：$U^\dagger U = I$
  - U是mxn的， $U^\dagger U = I$ <=> U的列向量是正交归一的
  - U是方阵， $U^\dagger U = UU^\dagger = I$
- 幺正矩阵和向量的模
  - $\mathbb{C}^n$：向量$\boldsymbol{u}$和$\boldsymbol{v}$的内积为$\boldsymbol{u}^\dagger \boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^n \bar{u}_1 v_1 + \cdots + \bar{u}_n v_n$
  - $|Q\boldsymbol{z}|^2 = \boldsymbol{z}^\dagger Q^\dagger Q\boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}^\dagger I\boldsymbol{z} = |\boldsymbol{z}|^2$
  - 幺正变换保持复向量的内积不变

幺正矩阵的性质

- 考虑U是方阵，$U^\dagger U = I$
- U的行列式$\det U$
  - $\det U^\dagger = \det \overline{U}^T = \det \overline{U}$
  - 根据行列式的公式，或者是展开式，$\det U$可以写成U中的元素的乘积和求和，而$\overline{U}$ 的元素是U中元素取复共轭，所以$\det \overline{U} = \overline{\det U}$
  - $\det U^\dagger U = \det U^\dagger \det U = \det I = 1$，所以$|\det U|^2 = 1$

例

- 例1：$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}$，$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ i & -i\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$
- 例2: $H = H^\dagger$是厄米矩阵，那么$U = e^{iH}$是个幺正矩阵
  - 如果x是个实数，e^{ix}的模为1
  - $H = Q\Lambda Q^\dagger$
  - $U = e^{iH} = Q\begin{bmatrix}e^{i\lambda_1} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{i\lambda_n}\end{bmatrix}Q^\dagger$，所以$U^\dagger U = I$

例：量子力学

- **量子态随时间演化**：量子态随时间的演化满足薛定谔方程
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |A(t)\rangle = H|A(t)\rangle$$
- H是系统哈密顿量（能量）对应的厄米算符（矩阵）
- 如果H不是时间的函数，那么$|A(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}|A(t_0)\rangle$，也就是说物理态随时间的演化用一个幺正矩阵描述