2.3 線性運算子與厄米特運算子

了解了向量空間之意義後，我們可進一步地在其上定義一些運算，而其中最具普遍應用性的是以下所要探討的運算線性。平常所言之線性或一次，以及高次或分式函數，它們實質上均是一種變換，是將變數 x，送至其一次、高次或倒數值，如：

$$f(x) = x \quad , \quad g(x) = 3x^2 \quad , \quad h(x) = \frac{1}{x}$$

然其中只有一次或線性函數 f 存在有以下二特性：

(一) 任兩變數相加之函數值，會等於各別變數之函數值再相加，即

$$f(x+y) = f(x) + f(y) \tag{2.37}$$

(二) 一常數與變數相乘後之函數值，會等於此變數之函數值再乘上常數，即

$$f(cx) = cf(x) \tag{2.38}$$

此二特性均不存在於高次與分式函數之中。以上二式亦可簡化合併成

$$f(ax+by) = af(x) + bf(y) \tag{2.39}$$

故此關係式或特性可用來做為一次函數或線性變換之定義。

在向量空間中之**變換**（*transformation*），是將一空間中之元素送至或對應到同一或另一空間元素。在所有變換中，滿足線性變換關係者，尤其值得探討與重視。

定義：介於兩向量空間 V 和 W 中之變換 $\hat{T}$，若滿足

$$\boxed{\hat{T}(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha\hat{T}(|a\rangle) + \beta\hat{T}(|b\rangle)} \tag{2.40}$$

則稱 $\hat{T}$ 為**線性變換**（*linear transformation*），亦稱做**運算子**或**算符**（*operator*）。運算子對向量的作用，常可將小括號略去，而寫為 $\hat{T}(|a\rangle) = \hat{T}|a\rangle$。

例 2.4

若 $\hat{T}: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$，$\hat{T}(x, y) = (-cy, cx)$，$c$ 為實數，則 $\hat{T}$ 是否為一運算子？

解 設 $|a\rangle = (x_1, y_1)$，$|b\rangle = (x_2, y_2)$ 因

$$\begin{aligned}
&\hat{T}(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle)\\
&= \hat{T}(\alpha(x_1, y_1) + \beta(x_2, y_2)) = \hat{T}(\alpha x_1 + \beta x_2, \alpha y_1 + \beta y_2)\\
&= (-c(\alpha y_1 + \beta y_2), c(\alpha x_1 + \beta x_2)) = \alpha(-cy_1, cx_1) + \beta(-cy_2, cx_2)\\
&= \alpha\hat{T}|a\rangle + \beta\hat{T}|b\rangle
\end{aligned}$$

滿足線性條件，故 $\hat{T}$ 為一運算子。

例 2.5

在無限可微函數 $\mathbb{C}^{\infty}$ 空間中，$f \in \mathbb{C}^{\infty}$，$\hat{D}$ 與 $\hat{S}$ 定義為

$$\hat{D}: f(x) \to \frac{d}{dx} f(x) \quad , \quad \hat{S}: f(x) \to \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx$$

則 $\hat{D}$ 與 $\hat{S}$ 是否為運算子？

解 因 $\hat{D}(af(x) + bg(x)) = \dfrac{d}{dx}(af(x) + bg(x))$

$$= a\frac{d}{dx} f(x) + b\frac{d}{dx} g(x) = a\hat{D} f(x) + b\hat{D} g(x)$$

故 $\hat{D}$ 為一運算子，稱做**微分運算子**。又

$$\hat{S}(af(x) + bg(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} (af(x) + bg(x))\,dx$$

$$= a\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx + b\int_{-\infty}^{\infty} g(x)dx = a\hat{S} f(x) + b\hat{S} g(x)$$

故 $\hat{S}$ 為一運算子，稱做積分運算子。

設一運算子 $\hat{T}$ 作用在空間 V 中之一向量 $|b\rangle$ 後得到 $|c\rangle$，即 $\hat{T}|b\rangle=|c\rangle$。今若存在有另一運算子作用在左向量 $\langle b|$ 後得到左向量 $\langle c|$，則稱此運算子為 $\hat{T}$ 之**伴隨**或**共軛運算子**（*adjoin or conjugate operator*），記作 $\hat{T}^{\dagger}$，且有 $\hat{T}^{\dagger}\langle b|=\langle c|$ 或記成 $\langle b|\hat{T}^{\dagger}=\langle c|$。

例 2.6

若 $\hat{T}$ 與 $\hat{A}$ 為作用在二維行矩陣空間上之兩運算子，其中

$$\hat{T}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x+y\\x-y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}\ ,\ \hat{A}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2x-y\\x-2y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&-1\\1&-2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$$

其中 x,y 均為實數，求其共軛運算子 $\hat{T}^{\dagger}$ 與 $\hat{A}^{\dagger}$？

解 (a) 由定義，共軛運算子 $\hat{T}^{\dagger}$ 將左向量 (x,y) 送至左向量 $(x+y,x-y)$，即 $\hat{T}^{\dagger}(x,y)=(x+y,x-y)$。亦可將其表為

$$(x,y)\hat{T}^{\dagger}=(x+y,x-y)=(x,y)\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}，故\ \hat{T}^{\dagger}=\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}。$$

(b) 同理，$\hat{A}^{\dagger}$ 將左向量 (x,y) 送至左向量 $(2x-y,x-y)$，亦可表為

$$(x,y)\hat{A}^{\dagger}=(2x-y,x-y)=(x,y)\begin{pmatrix}2&1\\-1&-2\end{pmatrix}，故\ \hat{A}^{\dagger}=\begin{pmatrix}2&1\\-1&-2\end{pmatrix}。$$

若 $\hat{T}|b\rangle=|c\rangle$，則 $|c\rangle$ 與任意向量 $|a\rangle$ 之內積：

$$\langle a|c\rangle=\langle a|\hat{T}|b\rangle \tag{2.41}$$

兩邊取共軛複數，由內積定義及共軛運算子 $\hat{T}^{\dagger}$ 之意義，有

$$\langle a|\hat{T}|b\rangle^{*}=\langle a|c\rangle^{*}=\langle c|a\rangle=\langle b|\hat{T}^{\dagger}|a\rangle \tag{2.42}$$

有時亦可將上式兩端，或

$$\boxed{\langle a|\hat{T}|b\rangle=\langle b|\hat{T}^{\dagger}|a\rangle^{*}} \tag{2.43}$$

視為**共軛運算子 $\hat{T}^{\dagger}$ 之定義**。