

第一章补充内容

1.1

下面我们举两个复数线性空间的实例。

$S_{1/2}$ -空间: 考虑由所有矩阵元为复数的二维列矩阵所构成的空间, $|a\rangle \equiv \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$,

其中 a_1 和 a_2 为任意复数, 很容易证明, 这个空间构成了一个复数线性空间, 其中两个矢量相加定义为

$$|a\rangle + |b\rangle \equiv \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \end{bmatrix} \quad 1.1.11$$

一个复数和矢量的乘积定义为

$$\alpha |a\rangle \equiv \alpha \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha a_1 \\ \alpha a_2 \end{bmatrix} \quad 1.1.12$$

零矢量即为

$$|0\rangle \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad 1.1.13$$

为了后面讨论方便, 我们将这个线性空间记为 $S_{1/2}$ -空间。

$L_2[0, a]$: 作为另外一个实例, 我们考虑由定义在区间 $[0, a]$ 上, 并满足如下条件的所有函数 $f(x)$ 的集合: 1) 在区间内 $(0, a)$ 一阶导数连续; 2) $f(0)=0$, $f(a)=0$ 。容易证明这个集合构成了一个复数线性空间, 为了后面讨论方便, 将这个线性空间记为 $L_2[0, a]$ 。

1.2

【实例】下面以前面所举的两个线性空间为例, 讨论本节中的概念。

$S_{1/2}$ -空间: 容易证明 $S_{1/2}$ -空间是一个二维线性空间, 其基组选取的一种方式
是

$$|\mathbf{e}_1\rangle \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\mathbf{e}_2\rangle \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad 1.2.10$$

因此任意矢量 $|a\rangle$ 可以用这两个基矢作线性展开，

$$|a\rangle \equiv \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = a_1 |\mathbf{e}_1\rangle + a_2 |\mathbf{e}_2\rangle \quad 1.2.11$$

两个矢量的内积定义为

$$\langle a|b\rangle \equiv \begin{bmatrix} a_1^* & a_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 \quad 1.2.12$$

按照该内积定义，容易证明前面所给的两个基矢构成了一组正交归一基矢。

$L_2[0, a]$ 空间：可以证明这是个无限可数空间，另外，两个矢量的内积定义为

$$\langle f_1|f_2\rangle \equiv \int_0^a f_1^*(x) f_2(x) dx \quad 1.2.13$$

该空间中基矢的一种选取方式是

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right), \quad n=1, 2, 3, \dots \quad 1.2.14$$

后面会看到， $L_2[0, a]$ 是和最简单的量子力学体系——无限深势阱——所对应的线性空间。量子力学中所涉及的很多线性空间，其中的矢量都是满足一定边界条件的空间坐标的函数，其内积的定义也都类似于 1.2.13 式。

【练习】证明 1.2.14 给出的基矢是互相正交归一的。

1.4

矢量的外积与投影算符

对于右矢 $|w\rangle$ 和左矢 $\langle u|$ ，定义它们的外积为 $|w\rangle\langle u|$ 。 $|w\rangle\langle u|$ 事实上是一个算符。

一个外积 $|w\rangle\langle u|$ 作用到一个矢量 $|v\rangle$ 上，结果为

$$|w\rangle\langle u|v\rangle = (|w\rangle\langle u|)|v\rangle = |w\rangle(\langle u|v\rangle) \quad 1.4.19$$

上式的表述再次使用了乘法的结合律公设【注 1】。作为外积的特例，一个矢量 $|w\rangle$

与其自己的共轭矢量的外积 $|w\rangle\langle w|$ 一般称为**投影算符**，其物理意义可以通过类比

三维几何空间中的投影操作而得到理解。

【实例】对于由空间坐标的函数所构成的线性空间，比如前面所举的 $L_2[0,a]$ 空间，相应的算符一般也表示为坐标的函数 $V(x)$ ，或者包含对坐标的微分。对于一维空间函数构成的线性空间， $\hat{d}_x \equiv \frac{d}{dx}$ 构成了一个线性算符。但是容易证明，对于 $L_2[0,a]$ 空间而言， $\hat{d}_x$ 不是一个厄米算符，但是 $\hat{p}_x \equiv -i \frac{d}{dx}$ 是一个厄米算符。

【练习】在 $L_2[0,a]$ 空间中证明 $\hat{p}_x$ 是个厄米算符。

【注 1】乘法结合律公设

前面的讨论中定义了几种不同的乘法操作，包括复数（即标量）与矢量的乘积、左矢与右矢的乘积（即矢量之间的内积）、算符之间的乘积、算符与左矢或右矢的乘积（即算符作用在左矢或右矢上），以及最后引入的右矢和左矢之间的外积。在数学上，当某种操作关系被称为“乘法”操作时，即意味着这种操作应该满足结合律；同样的，任何被称为“加法”的操作都应该满足交换律。因此，当公式中出现以上各种不同类型乘积的组合时，仍应满足结合律，但前提是，结合律的使用不会导致不合理或未定义的结果。这可以看作是对定义“乘法”操作时保持内在一致性的一种限制，因此有时被称为**乘法结合律公设 (associative axiom of multiplication)**。

下面结合具体的例子来讨论什么情况下结合律公设的应用是允许，什么时候是不允许的。考虑一个外积 $|w\rangle\langle u|$ 作用在一个右矢 $|v\rangle$ 上，应用结合律公设，

$$(|w\rangle\langle u|) \cdot |v\rangle = |w\rangle(\langle u| \cdot |v\rangle) \equiv |w\rangle\langle u|v\rangle$$

这结果是合理的。另一方面，上式等号右侧是一个右矢和一个内积的相乘，由于内积是一个数。根据定义，数与矢量的相乘是可交换的，因此等号右侧可以写成 $(\langle u|v\rangle) \cdot |w\rangle$ ，这时如果使用结合律，就会得到 $\langle u| \cdot (|v\rangle|w\rangle)$ ，但是两个右矢的乘积 $|v\rangle|w\rangle$ 的意义没有定义的，因此，这时乘法结合律的应用导致了不合理的结果。在后面课程中，我们的确会引入两个右矢（或左矢）的直积，一般用符号 $\otimes$ 表示，但直积并不对应于如 $|v\rangle|w\rangle$ 这样的同一线性空间中两个右矢的乘积。如果两个右矢 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 分别属于两个彼此独立（有时也用“正交”来表示，但这里“正交”

的含义不同于同一个线性空间中两个矢量之间的“正交”) 的线性空间 A 和 B 中的矢量, 那么, $|a\rangle \otimes |b\rangle$ 构成一个复合线性空间 (记作 $A \otimes B$) 中的矢量。

附录 A：矩阵和行列式

矩阵与行列式是线性代数中的重要组成部分，虽然本课程只会用到非常基本的线性代数运算，但对于基本的矩阵运算技巧还是应该掌握的。

1. 矩阵的定义及其运算规则

矩阵是按矩形排列的一组数，一个 m 行 n 列（记为 $m \times n$ ）的矩阵表示为

$$\mathbf{A} \equiv [A_{ij}]_{m \times n} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \cdots & A_{mn} \end{bmatrix} \quad \text{A. 1}$$

其中 $m=1$ 的矩阵称为**行矩阵**，也称**行矢**； $n=1$ 的矩阵称为**列矩阵**，也称**列矢**（简称**矢量**）。 $m=n$ 的矩阵称为**方阵**。对于矩阵可以定义如下运算规则。

1) 两个矩阵相等：两个相同形状的矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ ，如对任意 i 和 j ， $A_{ij} = B_{ij}$ 则

称这两个矩阵相等。

2) 矩阵与数的乘积：

$$\alpha \mathbf{A} \equiv \mathbf{A} \alpha \equiv [\alpha A_{ij}]_{m \times n} = \begin{bmatrix} \alpha A_{11} & \alpha A_{12} & \cdots & \alpha A_{1n} \\ \alpha A_{21} & \alpha A_{22} & \cdots & \alpha A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha A_{m1} & \alpha A_{m2} & \cdots & \alpha A_{mn} \end{bmatrix} \quad \text{A. 2}$$

如上式所示，矩阵和数的乘积具有可交换性。

3) 矩阵的加和：两个相同形状的矩阵可以定义加和，

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} \equiv \mathbf{B} + \mathbf{A} \equiv [A_{ij} + B_{ij}]_{m \times n} \quad \text{A. 3}$$

如上式所示，矩阵相加是可交换的。

4) 矩阵的乘积： $m \times p$ 的矩阵 $\mathbf{A}$ 与 $p \times n$ 的矩阵 $\mathbf{B}$ 之间的乘积得到新的 $m \times n$ 矩阵 $\mathbf{C}$

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^p A_{ik} B_{kj} \quad \text{A. 4}$$

容易看出，矩阵乘积操作一般而言是不可交换的，对于 m ， n 和 p 不相等的情形， $\mathbf{A}$ 与 $\mathbf{B}$ 乘积可以定义，而 $\mathbf{B}$ 和 $\mathbf{A}$ 乘积就没有定义。当 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 是相同形状的方阵时，

$\mathbf{AB}$ 与 $\mathbf{BA}$ 都可以定义，但两者一般不相等，如果 $\mathbf{AB}=\mathbf{BA}$ ，则称这两个矩阵**对易**（commute）。两个矩阵的对易子（commutator）定义为

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \equiv \mathbf{AB} - \mathbf{BA}。 \quad \text{A. 5}$$

当一个 n 维的行矩阵或行矢 ($\mathbf{a}$) 和一个 n 维的列矩阵或列矢 ($\mathbf{b}$) 按照矩阵乘积的方式相乘，便得到一个 1×1 的矩阵，也即是一个数（也称标量）。这和矢量内积的定义是一致的。反之，一个 n 维列矩阵（列矢）和一个 n 维的行矩阵（行矢）按矩阵乘积的规则相乘，得到一个 $n \times n$ 的矩阵。这样的操作对应于矢量的外积。

在实际应用中最重要矩阵形式是方阵，因此在很多语境下，“矩阵”即是指“方阵”，本书也将采用这个约定。对于方阵，我们可以进一步定义如下特殊矩阵：

对角矩阵（diagonal matrix）：即非对角矩阵元 (A_{ij} , $i \neq j$) 均为零的方阵。

单位矩阵（unit matrix）：对角矩阵元均为 1 的对角矩阵，单位矩阵一般记为 $\mathbf{I}$ 。容易证明，对于任意与单位矩阵 $\mathbf{I}$ 有相同维度的方阵 $\mathbf{A}$ ，都有 $\mathbf{AI}=\mathbf{IA}=\mathbf{A}$ 。

块对角矩阵（block-diagonal matrix）：具有如下形式的方阵被称为块对角矩阵，

$$\begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1m} & & & & \\ \vdots & \ddots & \vdots & & & & \\ A_{m1} & \cdots & A_{mm} & & & & \\ & & & B_{11} & \cdots & B_{1n} & \\ & & & \vdots & \ddots & \vdots & \\ & & & B_{n1} & \cdots & B_{nn} & \\ & & & & & & C_{11} & \cdots & C_{1p} \\ & & & & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & & & & C_{p1} & \cdots & C_{pp} \\ & & & & & & & & & \ddots \end{pmatrix} \equiv \mathbf{A} \oplus \mathbf{B} \oplus \mathbf{C} \oplus \cdots \quad \text{A. 6}$$

上式也给出了**矩阵直和**的定义。

对于方阵，我们还可进一步定义矩阵之间的一些关系。

矩阵的逆：对于矩阵 $\mathbf{A}$ ，如果存在另外一个矩阵 $\mathbf{B}$ ，使得 $\mathbf{AB}=\mathbf{BA}=\mathbf{I}$ ，就称矩阵 $\mathbf{B}$ 是 $\mathbf{A}$ 的逆，一般标记为 $\mathbf{A}^{-1}$ 。需要指出的是，不是所有矩阵都存在相应的逆

矩阵。如果一个矩阵的逆矩阵不存在，称其为奇异（singular）矩阵，反之就是规则（regular）矩阵。容易证明，如果 **A** 和 **B** 都是规则矩阵，则有

$$(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1} \quad \text{A. 7}$$

矩阵的转置（transpose）：将矩阵 **A** 的行列互换得到的新矩阵称为 **A** 的转置矩阵，一般标记为 $\mathbf{A}^T$ ；

$$\mathbf{A}^T \equiv \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1m} & A_{2m} & \cdots & A_{nm} \end{bmatrix} \quad \text{A. 8}$$

矩阵的厄米共轭：将矩阵 **A** 的行列互换，并对每个矩阵元取复共轭，所得的新矩阵称为 **A** 的厄米共轭矩阵或伴随（adjoint）矩阵，一般记作 $\mathbf{A}^\dagger$ （英文读作 A dagger）。

$$\mathbf{A}^\dagger \equiv \begin{bmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & \cdots & A_{n1}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* & \cdots & A_{n2}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1m}^* & A_{2m}^* & \cdots & A_{nm}^* \end{bmatrix} \quad \text{A. 9}$$

容易证明，

$$(\mathbf{AB})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger \quad \text{A. 10}$$

基于以上矩阵之间的关系，可以定义**么正矩阵**（unitary matrix）和**厄米矩阵**（Hermitian matrix）：

么正矩阵：如果矩阵 **A** 的厄米共轭矩阵等于 **A** 的逆矩阵，即 $\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathbf{A}^\dagger = \mathbf{I}$ ，就称该矩阵为么正矩阵。

厄米矩阵：如果矩阵 **A** 的厄米共轭矩阵等于自己本身， $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$ ，就称该矩阵为厄米矩阵，也称**自伴矩阵**。

矩阵的迹：关于方阵的一个非常重要的概念是迹（trace），定义为矩阵对角元的加和，记作

$$\text{Tr } \mathbf{A} \equiv \sum_{i=1}^n A_{ii} \quad \text{A. 11}$$

容易证明矩阵的迹满足如下性质，

$$\text{Tr}(\mathbf{AB}) = \text{Tr}(\mathbf{BA}) \quad \text{A. 12}$$

【练习】

- 1) 证明式 A. 12;
- 2) 证明：如果对于矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$, 存在一个规则矩阵 $\mathbf{T}$, 使得 $\mathbf{T}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{T} = \mathbf{A}$ (称为 $\mathbf{A}$ 是 $\mathbf{B}$ 关于矩阵 $\mathbf{T}$ 的相似变换), 则有 $\text{Tr}(\mathbf{B}) = \text{Tr}(\mathbf{A})$ 。
- 3) 证明：如果两个厄米矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 的乘积 $\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{B}$ 也是厄米矩阵, 那么 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 一定对易。

2. 行列式 (determinant)

行列式可以看作是方阵的一个性质, 记作 $\det(\mathbf{A}) = |\mathbf{A}|$ 。对于简单的 2×2 矩阵, 其行列式定义为

$$\det \mathbf{A} \equiv |\mathbf{A}| \equiv \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} \equiv A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21} \quad \text{A. 13}$$

而 3×3 矩阵的行列式定义为

$$\begin{aligned} \det \mathbf{A} \equiv |\mathbf{A}| &\equiv \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{vmatrix} \\ &\equiv A_{11}A_{22}A_{33} + A_{21}A_{32}A_{13} + A_{31}A_{12}A_{23} - A_{31}A_{22}A_{13} - A_{21}A_{12}A_{33} - A_{11}A_{32}A_{23} \end{aligned} \quad \text{A. 14}$$

为了将以上定义推广到任意的 $n \times n$ 维方阵, 有必要引入排列(permutation)的概念。自然数 $1, 2, 3, \dots, n$ 的一个排列是指这组数的一种重新排序。将这组数从自然顺序 $1, 2, 3, \dots, n$ 到给定某种排列 (记为 I) 的变换操作, 用排列算符 $\hat{P}_I$ 来表示

$$\hat{P}_I(1, 2, \dots, n) = (I_1, I_2, \dots, I_n) \quad \text{A. 15}$$

另外, 对这组数中的任意两个数交换位置的操作, 用互换(transposition)算符表示,

$$\hat{P}_{ij}(\dots, i, \dots, j, \dots) = (\dots, j, \dots, i, \dots) \quad \text{A. 16}$$

很容易看出, 任意一个排列算符 $\hat{P}_I$ 都可以分解为一系列互换算符的乘积, 互换操

作的次数记作 P_I 。比如 (1, 2, 3) 的一个排列 (3, 1, 2)，可表示为 $\hat{P}_{(3,1,2)} = \hat{P}_{12}\hat{P}_{13}$ ，相应的 $P_{(3,1,2)} = 2$ ，对于排列 (1, 3, 2)，则有 $\hat{P}_{(1,3,2)} = \hat{P}_{23}$ ， $P_{(1,3,2)} = 1$ 。

基于排列算符，任意 $n \times n$ 维方阵的行列式定义为

$$\det(\mathbf{A}) = |\mathbf{A}| = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{vmatrix} \equiv \sum_I (-1)^{P_I} \hat{P}_I A_{11} A_{22} \cdots A_{nn} \quad \text{A. 17}$$

这里的加和下标 I 表示对 1, 2, 3, ..., n 所有可能的排列，排列算符 $\hat{P}_I$ 作用于行（或列）下标。容易验证，前面的 2×2 和 3×3 矩阵的行列式是上式的特例。

$n \times n$ 维矩阵 $\mathbf{A}$ 的行列式也可以根据如下递推方式进行计算，

$$|\mathbf{A}| = \sum_i (-1)^{i+j} A_{ij} \tilde{A}_{ij}, \quad \forall j = 1, 2, \dots, n \quad \text{A. 18a}$$

或者

$$|\mathbf{A}| = \sum_j (-1)^{i+j} A_{ij} \tilde{A}_{ij}, \quad \forall i = 1, 2, \dots, n \quad \text{A. 18b}$$

其中 $\tilde{A}_{ij}$ 为对应于矩阵元 A_{ij} 的余子式 (minor)，定义为将矩阵 $\mathbf{A}$ 中所有与 A_{ij} 同一行和同一列的元素都去掉之后得到的 $(n-1) \times (n-1)$ 维矩阵的行列式。

基于以上定义，可以证明行列式具有如下性质：

- (1) 如果一个矩阵的某一行或某一列矩阵元都为零，则其行列式为零。
- (2) 对角矩阵、上三角矩阵或下三角矩阵的行列式为对角元的乘积。
- (3) 交换任何两行或两列所得的新矩阵的行列式与原矩阵的行列式相差一个负号。
- (4) 如果一个矩阵存在两行或两列的矩阵元一一对应相等，则其对应的行列式为零。
- (5) 一个矩阵的转置矩阵的行列式与原矩阵的行列式相等： $|\mathbf{A}^T| = |\mathbf{A}|$ 。
- (6) 一个矩阵的厄米共轭矩阵的行列式等于原矩阵行列式的复共轭：

$$|\mathbf{A}^\dagger| = |\mathbf{A}|^*。$$

- (7) $|\mathbf{AB}| = |\mathbf{A}| \cdot |\mathbf{B}|$ 。

(8) 对于任意一组数 c_k , $k=1, 2, \dots, m$, 矩阵具有如下线性性质,

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & \sum_{k=1}^m c_k B_{1k} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & \sum_{k=1}^m c_k B_{2k} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & \sum_{k=1}^m c_k B_{nk} & \cdots & A_{nn} \end{vmatrix} \equiv \sum_{k=1}^m c_k \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & B_{1k} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & B_{2k} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & B_{nk} & \cdots & A_{nn} \end{vmatrix}$$

A. 19

行列式的性质 (3) 和 (4) 对于多电子体系的量子力学描述有着至关重要的作用。

【练习】

- 1) 从行列式定义出发证明上面行列式的性质。
- 2) 证明将矩阵的任一行 (列) 加上另外一行 (列) 乘以一个常数所得新的矩阵的行列式与原矩阵行列式相等, 以 3×3 矩阵为例,

$$\begin{vmatrix} A_{11} + aA_{12} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} + aA_{22} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} + aA_{32} & A_{32} & A_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{vmatrix}$$

补充习题

1. 说明在什么情况下 1.10.4 式中的等号成立。
2. 设矩阵 $\mathbf{A}$ 为

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$$

证明对应于函数 $f(x)$ 有 (假定 $f(x)$ 在 $x=0$ 处的 Taylor 展开收敛)

$$f(\mathbf{A}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}[f(a+b) + f(a-b)] & \frac{1}{2}[f(a+b) - f(a-b)] \\ \frac{1}{2}[f(a+b) - f(a-b)] & \frac{1}{2}[f(a+b) + f(a-b)] \end{pmatrix}$$

3. 证明如下两种关于么正算符的定义是等价的：a) 对于任意矢量 $|u\rangle$ ，满足 $\langle u|\hat{U}^\dagger\hat{U}|u\rangle = \langle u|u\rangle$ 的算符 $\hat{U}$ 为么正算符；b) 对于任意矢量 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$ 满足 $\langle u|\hat{U}^\dagger\hat{U}|v\rangle = \langle u|v\rangle$ 的算符 $\hat{U}$ 为么正算符。