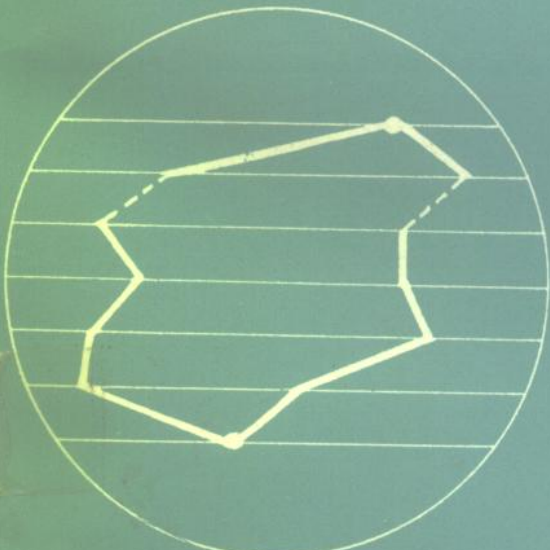
·近代物理学丛书·

群论与高等量子力学导论

熊钰庆　何宝鹏编著



广东科技出版社

·近代物理学丛书·

群论与高等量子力学导论

熊钰庆　何宝鹏　编著

广东科技出版社

粤新登字 04 号

内 容 提 要

本书分两篇. 第一篇（第一至四章）是希尔伯特空间与群论基础，阐述抽象群、希尔伯特空间、有限群的表示理论、连续群及其表示等内容. 第二篇（第五至十一章）是高等量子力学，阐述量子力学的基本原理、对称性、角动量、散射理论、相对论量子力学、二次量子化、路径积分量子化等内容. 第一篇的内容为学习第二篇提供必备的数学基础知识和工具.

本书可作高等院校物理系为本科学生、研究生开设的高等量子力学课程的教学参考书，也可供有关专业的科研教学人员阅读参考.

近代物理学丛书

Qunlun yu Gaodeng Liangzilixue Daolun

群论与高等量子力学导论

编 著 者：熊钰庆　何宝鹏

出版发行：广东科技出版社（广州市环市东路水荫路 11 号）

经　　销：广东省新华书店

电脑排版：全通电脑公司

印　　刷：广州番禺印刷厂

规　　格：850×1168　1/32　印张 14.5　字数 380 000

版　　次：1991 年 8 月第 1 版　1991 年 8 月 第 1 次印刷

印　　数：1— 1 000 册

ISBN 7—5359—0863—2/O・56

定　　价：8.00 元

前　言

量子力学 (quantum mechanics) 是研究微观物质世界运动规律的理论，是现代物理学的理论基础和支柱. 自从 1900 年普朗克 (Planck) 提出能量子假说，开创了量子论的新纪元以后，1925 年海森堡 (Heisenberg) 创立了矩阵力学，1926 年薛定谔 (Schrödinger) 创立了波动力学，从而宣告了量子力学的诞生. 此后，人们开始冲破经典物理学的框框，对微观世界奥秘的探索向前跨进了一大步. 半个多世纪以来，量子力学理论已深入到物理学各个领域和化学、生物学的某些领域，得到极其广泛的应用，经历了无数实践的考验.

随着量子力学应用范围的扩大和认识的深化，量子力学的基本概念和基本理论也得到相应的发展，出现了不少新的理论和方法. 例如，量子力学的普遍表述——狄喇克 (Dirac) 的态矢量空间理论体系，对称性理论，形式散射理论，二次量子化理论，相对论量子力学以及路径积分量子化方法等. 以上几个方面大致上构成高等量子力学 (advanced quantum machanics) 的内容. 本书第二篇基本上阐述这些内容.

量子力学理论应用于原子、分子、原子核和“基本”粒子，以及电磁场与物质的相互作用等方面，形成了量子力学理论发展的另一个重要方向，并创立了量子电动力学 (QED) 和量子场论 (quantum field theory). 最先将电磁场量子化并提出电磁场能量的不连续性理论的是狄喇克 (1927 年). 接着，人们将非相对论薛定谔方程进行量子化，即所谓二次量子化，并将二次量子化描述方法推广到相对论领域，将玻色子场和费米子场进行量子化，从而构成了量子场论.

由于量子力学理论进一步应用于凝聚态和光的受激发射等物理现

象，以及化学、生物学等方面，极大地推动了这些学科的发展，形成了量子统计和凝聚态理论，激光物理学，以及量子化学和量子生物学等新兴学科.

总之，越来越多的实践证明，量子力学理论是人们认识和改造微观物质世界的不可缺少的工具. 随着它在各个领域的应用范围的扩大和深化，量子力学理论本身也得到了进一步的发展.

高等量子力学不仅在量子力学的基本概念和基本理论上有所深化，同时也进一步发展了数学方法，其中最重要的是希尔伯特空间理论和群论. 因此，本书第一篇将简要地介绍这些数学方法，作为学习高等量子力学的基础. 这样，可以尽量地使数学方法与理论体系组成一体，前后连贯，便于学习和查阅.

本书是在近年来为研究生开设的高等量子力学课程编写的《高等量子力学》和《矢量空间与群论基础》两本讲义的基础上修改而成的. 这两本讲义的初稿完成于 1983 年夏，经 1984 年春和 1986 年秋两次修订，试用多年，颇有称誉. 现将两讲义合并，全面修订后交付出版，敬希同仁、读者批评指正.

在本书出版之际，谨向北京师范大学喀兴林教授和北京大学曾谨言教授表示衷心的感谢. 编者曾多次聆听两位教授的讲学，获益不浅，喀先生的《高等量子力学》讲义和曾先生的《量子力学》专著也是编者经常拜读和参考的读物. 这些，都给我们的编写工作以很多启发和帮助. 此外，华南师范大学物理系试用过原讲义的教师们为本书的编写提了许多宝贵意见，在此一并感谢.

在普朗克划时代的量子论诞生九十周年之际，编者谨以拙作奉献给读者，并且满怀信心地期望，量子力学将在科学之林中显示出自己更强的生命力.

编　　者

1990 年 4 月，广州

目　录

第一篇　希尔伯特空间与群论基础

希尔伯特空间(Hilbert space)是建立量子力学的数学框架,物理可观察量用希尔伯特空间中的算符表示,而物理态用此空间中的矢量表示. 群论则是处理对称性物理体系的一种有力的数学工具. 群论与希尔伯特空间又密切相关,群表示就是群元素在希尔伯特空间中对应算符的映象,它们之间存在一一对应关系.

本篇内容是第二篇高等量子力学的数学基础,为第二篇涉及的内容提供简明的必备知识.

第一章　抽象群的基本概念

群(group)的概念开始于 150 多年前，即 19 世纪初叶. 群论(group theory)的早期发展归功于著名的数学家高斯(Gauss)、柯西(Cauchy)、阿贝尔(Abel)、哈密顿(Hamilton)、伽罗瓦(Calois)等. 但是直到 1925 年出现了量子力学之后，才发现它在物理学中有许多应用. 贝特(Bethe)和维格纳(Wigner)等人很快就认识到群论在物理学中的应用，把这一新的工具用于计算原子结构和光谱. 利用群论方法，可以直接对体系的许多性质作出定性的了解，可以简化复杂的计算，也可以预言物理过程的发展趋向. 目前在物理学和物理化学的许多分支中，群论已经成为不可缺少的工具.

§1　群的定义和例子

1. 群的定义

考察所有整数的集合(set)I，$I=\{\cdots,-3,-2,-1,0,1,2,\cdots\}$，并注意此集合满足下列四个性质：(a)集合 I 的任意两元素(element)之和仍是一整数，也属此集合；(b)此集合包含一个叫做零的元素 0，它具有这样的性质，对于任意元素 $m\in I$，有 $m+0=0+m=m$；(c)对于任意元素 $m\in I$，存在一个也属于 I 的唯一元素 n，使得 $m+n=n+m=0$，显然，$n=-m$；(d)对任意 m、n、$p\in I$，有 $m+(n+p)=(m+n)+p$，这表示加法满足结合律. 上述集合就是群的例子.

抽象地说，一些不同元素的集合，记为 $G\equiv\{E,A,B,C,D,\cdots\}$，这些元素被赋予一组合法则(例如加法，乘法，矩阵乘法等)，并满足下列四个性质，则这些元素的集合就称为群.

(a)G 中任意两个元素 A 和 B 在给定法则下组合得到的元素

仍属于 G，即如果 $A,B\in G$，则

$$A\cdot B\in G,\qquad B\cdot A\in G \tag{1}$$

其中符号"·"表示 G 中两元素的组合．这一性质称为群的封闭性(closure)，又称集合在给定组合法则下是封闭的．

(b)存在单位元素 $E\in G$，使得对任何 $A\in G$，有

$$E\cdot A=A\cdot E=A \tag{2}$$

E 叫做单位元(unit element)或恒等元(identity element)．

(c)对任意元素 $A\in G$，存在一个唯一元素 $B\in G$，使得

$$A\cdot B=B\cdot A=E \tag{3}$$

B 叫做 A 的逆(inverse element)，记为 $B\equiv A^{-1}$；反之，A 也叫 B 的逆元或逆．(3)式亦可表示为

$$A\cdot A^{-1}=A^{-1}\cdot A=E \tag{3'}$$

(d)群元素的组合法则满足结合律(associative law)，即对任意 A、B、$C\in G$，有

$$A\cdot(B\cdot C)=(A\cdot B)\cdot C \tag{4}$$

2. 群的阶

群中元素的个数称为群的阶(order)．包含有限个元素的群叫做有限群(finite group)，包含无限多个元素的群叫做无限群(infinite group)．无限群又可分为分立群(discrete group)和连续群(continuous group)．如果群中元素的个数是可数无穷的(例如全体整数的个数)，则群是分立的；如果群中元素的个数是不可数无穷的(例如全部实数的个数)，则群是连续的．

3. 阿贝尔群

群元素的组合不一定是可交换的(可对易的 commutative)，即一般说来，$A\cdot B\neq B\cdot A$．若群的所有元素都相互对易，即 $A\cdot B=B\cdot A$，则此群称为阿贝尔群(Abelian group)或交换群．上面例子中的整数加群就是阿贝尔群．

4. 两元素乘积的逆

今后我们常常用群元素的乘积或积代替"组合"这个词，并将组合的符号"·"省去，例如 $A\cdot B$ 写作 AB．

容易证明，群元素的乘积 AB 的逆 $(AB)^{-1}$ 由下式给出：

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \tag{5}$$

事实上，根据逆元的定义(3′)式有

$$(AB)^{-1}(AB) = E$$

首先用 B^{-1}，然后用 A^{-1} 右乘上式两边，并利用(2)式，便得到(5)式.

5. 群的例子

下面我们列举几个群的例子.

(1)只包含单位元的单一点集是在乘法下的一阶群.

(2)由实数 1，−1 组成的以普通乘法作为组合法则的二阶群.

(3)由复数 $1, i, -1, -i$(其中 $i^2=-1$)组成的在乘法下的四阶群，其单位元是 1.

(4)本节开头提到的由所有实整数组成的分立无限群.此群的组合法则是加法，其单位元是 0，逆元 $n^{-1}=-n$. 这个群是阿贝尔群.

全体偶整数(包括 0)在加法下也作成群.同样，全体有理数、全体实数、全体复数对数的加法也各自作成群.

但是，全体非负实数在加法下不作成群.奇整数的集合在加法下也不作成群.

(5)在乘法运算下所有正实数(0 除外)的集合是一个阿贝尔群，其单位元是 1，元素 x 的逆是它的倒数 $\frac{1}{x}$.

全体非零有理数、全体非零实数、全体非零复数对数的乘法也各自作成群.

但是，全体整数的集合在乘法下不作成群.全体实数在乘法下也不作成群.

(6)在矩阵乘法下所有满秩的(非奇异的) n 维(n 是正整数)[方]矩阵的集合是一个矩阵群.

如两个二维方阵 $\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$ 和 $\begin{bmatrix}-1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}$ 的集合是一个二阶矩阵群.

又如六个二维方阵

$$T(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad T(A)=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},$$

$$T(B)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad T(C)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix},$$

$$T(D)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad T(F)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

的集合是一个六阶矩阵群.

再如八个二维方阵

$$T(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad T(A)=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix},\quad T(B)=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix},$$

$$T(C)=\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix},\quad T(D)=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\quad T(F)=\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix},$$

$$T(G)=\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix},\quad T(H)=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

的集合是一个八阶矩阵群.

(7)在矩阵加法下所有 $m\times n$ 阶矩阵的集合是一个群，其单位元是 $m\times n$ 阶零矩阵，而元素 A 的逆元是它的负矩阵 $-A$.

上面我们讨论的是关于标量(scalars)和矩阵(matrices)的两个基本组合法则：加法和乘法. 在数群的情形下，0 是加法单位元，而 1 是乘法单位元；在矩阵群的情形下，适当阶的零矩阵(null matrix)是加法单位元，而适当阶的单位矩阵(unit matrix)是乘法单位元. 当群组合法则是加法时，元素的逆叫加法逆元；当它是乘法时，元素的逆叫乘法逆元. 例如，若 x 是一个数，则 $-x$ 是加法逆元，而 $\frac{1}{x}$ 是乘法逆元(设 $x\neq 0$)；若 A 是一个矩阵，则 $-A$ 是加法逆元，A^{-1} 是乘法逆元(设 A 是非奇异的).

§2 对称性变换群

物理学家特别感兴趣的是物理系统的变换群，例如平移(translation)、转动(rotation)、反射(reflection)、置换(permutation)等.使物理系统保持不变的变换称为系统的对称性变换(symmetry transformation).例如，对于一个圆平面，围绕通过其中心并垂直于平面的轴的转动是它的对称变换.在一个水分子中，两个相同原子的置换对分子来说也是对称变换.

一个系统的所有对称变换组成的群称为这个系统的对称性群(group of symmetry).

下面我们讨论几个对称性群的例子.

(1)群 S_2

设 I 代表反演(inversion)变换，它使空间任何矢量改变方向，即

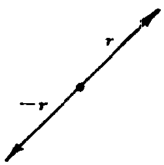


图 1-1

$$\boldsymbol{r} \xrightarrow{I} -\boldsymbol{r} \tag{1}$$

明显地，连续施行两次反演，系统将保持不变，故

$$I^2 = E \tag{2}$$

由此可得到

$$I^{-1} = I^{+} = I \tag{3}$$

可见，I 既是幺正算符(unitary operator)，又是厄密算符(Hermitian operator).(2)式表明满足封闭性条件.单位元也存在，它就是恒等变换 E.(3)式表明逆元 I^{-1}就是反演自身 I.于是，E 和 I 的集合$\{E,I\}$，即反演和恒等变换构成二阶阿贝尔群.

(2)群 C_2

设 R 代表绕 z 轴转过 π 角的转动(例如长方形绕垂直于其平面且通过中心的轴转动 π 角，如图 1—2)，而 E 代表恒等变换(即转动角为 0).显然有 $R^2=E$.与上例相同，E 和 R 的集合$\{E,R\}$构成二阶阿贝尔群.

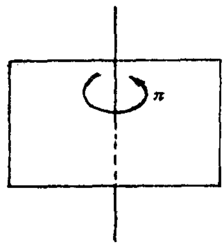


图 1-2

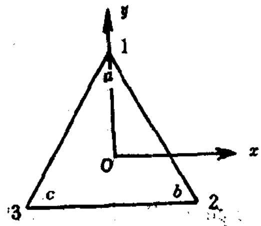


图 1-3

(3)群 C_3

设 R_1 和 R_2 分别代表绕 z 轴转过 $\frac{2}{3}\pi$ 和 $\frac{4}{3}\pi$ 的转动(例如正三角形绕垂直于其平面且通过中心的轴转动 $\frac{2}{3}\pi$ 角和 $\frac{4}{3}\pi$ 角),而 E 代表恒等变换.

为了直观起见,我们想象从一块硬纸板上切下一个正三角形,如图 1—3 所示. 按图示对正三角形上各点加以标记:三个角标为 a、b、c,其中心标为 o,它与坐标原点重合. 为了比较,硬纸板上与三个顶角接触的点分别标为 1,2,3. 于是,我们可以形象地将以上三个对称性操作(变换)表示为:

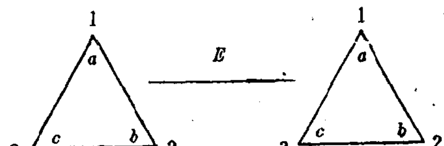


图 1-4

即恒等变换 E 使三角形的每一点都不变.

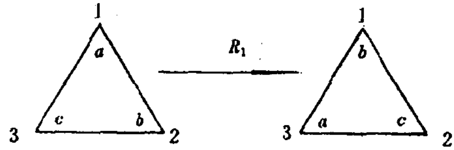


图 1-5

即变换 R_1 代表三角形绕 z 轴逆时针方向作 $\frac{2}{3}\pi$ 角旋转.

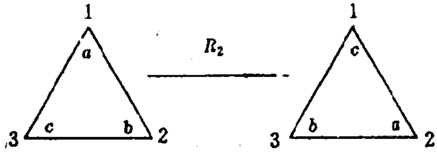


图 1-6

即变换 R_2 代表三角形绕 z 轴逆时针方向作 $\frac{4}{3}\pi$ 角旋转.

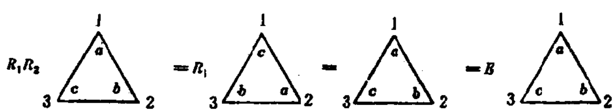
显然，这三个对称性变换的结果，除了标记 a、b、c 有所变动外，看不出正三角形有任何变化.

如果绕某轴线旋转 $\frac{2\pi}{n}$ 角（n 是正整数）使系统保持不变，则此轴线称为系统的 n 重对称轴（n—fold symmetry axis），相应的操作记为 C_n. C_n 的整数幂也是系统的对称变换，记作 C_n^k，它表示对系统施以 k 个 C_n 操作，即绕轴转动 $k\frac{2\pi}{n}$ 角. 因此，在本例中，oz 轴是正三角形的三重对称轴，操作 R_1 和 R_2 可分别记为 C_3 和 C_3^2.

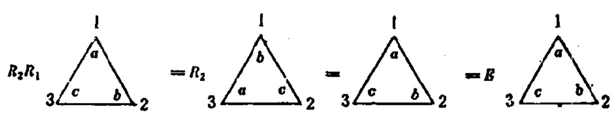
容易验证，E,R_1,R_2 的集合 $\{E,R_1,R_2\}$ 构成群. 首先，我们有

$$\left.\begin{aligned} ER_i = R_iE = R_i, \quad i = 1,2 \\ R_1R_2 = R_2R_1 = E \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

即封闭性条件被满足. 例如



故
$$R_1R_2 = E$$
同样



亦有
$$R_2R_1 = E$$