高等量子力学

（理论原理）

Advanced Quantum Mechanics

(Theoretical Foundation)

吴兆颜

吉林大学出版社
JILIN UNIVERSITY PRESS

高等量子力学

（理论原理）

Advanced Quantum Mechanics

（Theoretical Foundation）

吴兆颜

吉林大学出版社

图书在版编目（CIP）数据

高等量子力学 / 吴兆颜著. —长春：吉林大学出版社，2008
ISBN 978-7-5601-3820-6

Ⅰ. 高… Ⅱ. 关… Ⅲ. 量子力学-研究生-教材
Ⅳ.0413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2008）第 041446 号

书　名：高等量子力学
作　者：吴兆颜　著
责任编辑、责任校对：安　斌
封面设计：孙　群
吉林大学出版社出版、发行
吉林科华印刷厂　印刷
开本：787×960 毫米　1/16
印张：20.625　字数：330 千字
2008 年 4 月第 1 版
2008 年 4 月第 1 次印刷
ISBN 978-7-5601-3820-6
定价：42.00 元

社址：长春市明德路 421 号　邮编：130021
发行部电话：0431-88499826
网址：http://www.jlup.com.cn
E-mail：jlup@mail.jlu.edu.cn

前　　言

整个现代物理学是建立在量子力学和相对论这两大理论支柱之上的。特别是量子力学，它是从基本粒子物理、核物理、原子分子物理、纳米物理、光学、等离子体物理、凝聚态物理，一直到天体物理、宇宙学，物理科学各个分支的理论基础。此外，量子力学在自然科学的其他分支，如材料科学、化学、生命科学等，和工程技术，如计算机技术、电子工程、通讯工程等，也有重要的应用。在当今世界上各个高等学校中，量子力学已是物理系大学本科生必修的基础理论课之一。而高等量子力学则是物理学科各专业研究生必修的基础理论课之一。八十年代末以来，作者曾在吉林大学多次讲授高等量子力学课，形成了一份讲义。本书是在此讲义的基础之上，考虑教学和科研实践的经验，并参考其他高等量子力学教材，经过多次修改写就的。

上面所说的物理学理论支柱之一的（广义的）量子力学，既包括讨论微观物理体系运动规律的非相对论性理论（狭义的量子力学），又包括讨论微观物理体系运动规律的相对论性理论（量子场论）。作为物理学科各专业研究生高等量子力学课的教材，本书只讨论非相对论性的量子力学。

微观物理体系的行为和宏观物理体系的行为是如此地不同，这告诉我们不得把我们熟悉的经典物理图象强加到微观物理体系上。因而建立正确的量子概念，不能过多地依赖直观。作者认为，对 Hilbert 空间及其上线性算符的理论有一个很好的了解，是建立正确的量子概念，学好量子力学理论并掌握应用量子力学处理物理问题的方法的前提条件之一。在本书的第 0 章，作者将和读者一起回顾有关的数学预备知识。这些数学知识，原则上包含在各种数学教科书中。但是数学书很少是专为学习量子力学而写的。学生要花很多时间去翻阅许多书，还不一定能找到所需要的知识。作者希望第 0 章能帮助读者，花最少时间而能较系统地掌握学习量子力学所

需要的数学知识。

读者在大学本科的量子力学课程中，已学习过量子概念和量子力学发生和发展的历史，并对量子力学的基本理论和应用有了一个初步的认识。本书的讨论将从重述量子力学的基本原理开始。作者将不涉及自量子力学建立以来就有的，关于量子力学基础的那些争论。这不是因为作者认为它们不重要，而是因为它们还没有达成公认的结论。在以后的各章，作者向读者介绍了对称性分析，角动量理论，二次量子化形式和相对论单粒子波动方程。这些内容，在我们看来，是在篇幅有限的情况下，最值得首先介绍给读者的。

尽管本书主要是为物理学各专业研究生写的教材，作者希望物理学工作者和大学物理教师也能从中找到有用的东西。

目　　录

第0章　一些数学预备知识

数学一向是理论物理学的语言。为学好一门物理理论,你必须对相关的数学有一个很好的了解。与经典物理学相比,量子理论要抽象得多。这就要求学习量子理论的人在相关的数学知识方面有一个更坚实的基础。因此本书第0章将介绍学习高等量子力学所需要的一些数学预备知识。

读者在大学本科量子力学课程的学习中已经知道,一个微观物理体系的状态是由波函数来描述的。表象理论告诉我们,这些波函数是某个希尔伯特空间中的向量。体系的力学量是由定义在此希尔伯特空间上的厄米算符所表示的。在这个意义上我们说,量子力学的数学框架是希尔伯特空间及其上线性算符的理论。而希尔伯特空间的概念是由线性空间和内积空间的概念发展而来的,熟悉线性空间和内积空间上线性算符的理论,是学好希尔伯特空间上线性算符理论的前提条件。现代数学,包括代数学在内,是建立在集合论基础之上的。因此,本章将首先介绍集合论的一些概念和记法,接着讨论线性空间、内积空间及其上线性算符的理论,最后介绍希尔伯特空间及其上线性算符的理论。我们的讲述将以物理需要为取舍准则,并尽量照顾数学理论本身的系统性。然而本章毕竟带有复习性质,希望要求自己严格的读者,能参考相应的数学书,系统地掌握本章所介绍的数学预备知识。群论已经是物理专业研究生的必修课,掌握本章内容也是学习群表示论的前提条件。

§0.0　集合论中的一些概念和记法

现代数学的特征之一是使用集合论的语言。它是最精确的语言。花一定时间去掌握它,并养成使用这种语言思考的习惯,对一个物理学工作者是必要的,也是明智

的。建议读者一定要非常认真地学习这些基本概念。你在这上面所花的每一分努力，都将会得到数倍的回报。

Ⅰ. 集合论的一些记法

我们假定读者知道集合论的最基本的知识，在这里只列出常用的一些集合论的记法。

$x \in S$ 读作 x 是集合 S 的元素，或者 x 属于集合 S。

$A \subset S$ 读作集合 A 是集合 S 的子集，或者集合 A 包含在集合 S 内。意思是凡属于 A 的事物一定属于 S。若 $A \subset S \& A \neq S$，则称 A 是 S 的真子集。

$\emptyset$ 代表空集，即一个元素也没有的集。

显然对任一集 S 有 $\emptyset \subset S$ 和 $S \subset S$。称 $\emptyset$ 和 S 为 S 的平庸子集。

$A \cup B$ 读作集 A 与集 B 的并集。它是由所有至少属于 A、B 之一的事物构成的。

$A \cap B$ 读作集 A 与集 B 的交集。它是由所有同时属于 A 和 B 的事物构成的。

$A \setminus B$ 读作集 A 与集 B 的差集。它是由所有属于 A 而不属于 B 的事物构成的。

2^S 读作集 S 的幂集。它是由集 S 的所有子集构成的集合。

$A \times B$ 读作集 A 与集 B 的笛卡儿积集。它是由全体这样的元素对 (a, b)，其中 $a \in A$ 而 $b \in B$，构成的集合。用符号可以记作 $A \times B \equiv \{(a, b) \mid a \in A, b \in B\}$。

$|A|$ 读作集合 A 的基数(cardinal)，表示 A 中元素的个数。基数可以是 0,1,2,…和各种超穷数，例如，可数集的基数 $\aleph_0$(分离无穷)，连续统的基数 $\aleph$(连续无穷)，等等。

设 S 是非空集，$\mathscr{M}$ 是 S 的一些非空子集的集合。若 $\mathscr{M}$ 的不同元交空，且 $\mathscr{M}$ 的所有元的并等于 S，则称 $\mathscr{M}$ 为 S 的一个分拆。又设 $\mathscr{N}$ 也是 S 的一个分拆。若 $\mathscr{M}$ 的每一个元都包含在 $\mathscr{N}$ 的一个元中，则称分拆 $\mathscr{M}$ 细于分拆 $\mathscr{N}$。

练习 0-0-1 试证：对任意集合 A、B、C 都有(并对于交，交对于并的分配律)

$A \cup (B \cap C) = (A \cup B) \cap (A \cup C)$，$A \cap (B \cup C) = (A \cap B) \cup (A \cap C)$。

练习 0-0-2 试证：对任意集合 A、B、C 都有(de-Morgan 公式)

$A \setminus (B \cup C) = (A \setminus B) \cap (A \setminus C)$，$A \setminus (B \cap C) = (A \setminus B) \cup (A \setminus C)$。

练习 0-0-3 设 A 是有限集,以 $|A|$ 记 A 的元素的个数。试证:$|2^A| = 2^{|A|}$。

练习 0-0-4 试证:对任意集合 A_1, A_2, B_1, B_2,都有

$(A_1 \times A_2) \cap (B_1 \times B_2) = (A_1 \cap B_1) \times (A_2 \cap B_2)$,$(A_1 \times A_2) \cup (B_1 \times B_2) \subset (A_1 \cup B_1) \times (A_2 \cup B_2)$。

Ⅱ. 映射

映射是最基本的数学概念之一。它是读者在数学分析中所学到的函数概念的推广。通常这一概念是这样定义的:设 A 和 X 是非空集,若按某一规则 f,对集 A 的每一元素 a,都有集 X 的一个确定的元素 x 与之对应,则称 f 是集 A 到集 X 的一个映射,记作 $f: A \to X$。称与 $a \in A$ 对应的集 X 的元 x 为 a 在映射 f 下的象,记作 $x = f(a)$。

映射的这一定义可以用集合论的语言表达得更确切。

定义 设 A 和 X 是非空集,$f \subset A \times X$。若

(1) 对每一 $a \in A$,都有 $x \in X$,使 $(a, x) \in f$,

(2) 由 $(a, x) \in f$ 和 $(a, y) \in f$,可推出 $x = y$,

则称 f 是集 A 到集 X 的一个映射,记作 $f: A \to X$。若 $(a, x) \in f$,则称 x 为 a 在映射 f 下的象,记作 $x = f(a)$,或者 $f: a \mapsto x$。集 A 称为映射 f 的定义域,集 X 称为映射 f 的值域。

在映射的这个定义中,定义域集 A 与值域集 X 的地位是不平等的:对集 A 的每一元素,与之对应的集 X 的元素的个数必为 1;而对集 X 的元素,与之对应的集 A 的元素的个数可以是任一基数(cardinal),即可以是 0、1、2 …和各种超穷数。

设 f 是集 A 到集 X 的一个映射,$B \subset A$,$Y \subset X$。称 X 的子集 $\{x \in X \mid \exists\, b \in B$,使 $x = f(b)\}$ 为 B 在 f 下的象,记作 $f(B)$。特别是,称 $f(A)$ 为映射 f 的象,记作 $\mathrm{Im} f$。称 A 的子集 $\{a \in A \mid f(a) \in Y\}$ 为 Y 在 f 下的完全逆象,记作 $f^{-1}(Y)$。特别是,当 Y 是独点集 $\{y\}$ 时,$f^{-1}(Y)$ 也称为 y 的完全逆象,记作 $f^{-1}(Y)$。考虑下面的定义域 A 的子集的集合 $\{f^{-1}(x) \in 2^A \mid x \in \mathrm{Im} f\}$。显然它是 A 的一个分拆,我们称之为映射 f 确定的分拆。

设有两个映射 $f: A \to X$,$g: B \to Y$。若对每一 $(a, b) \in A \times B$,令 $(f(a), g(b)) \in X \times Y$ 与之对应,则我们得到一个 $A \times B$ 到 $X \times Y$ 的映射,称之为映射 f 与 g 的笛卡

尔积，记作 $f\times g:A\times B\to X\times Y$。

设 $f:A\to X$ 是映射，$S\subset A$。若对每一 $s\in S$，令 $f(s)\in X$ 与之对应，则我们得到一个 S 到 X 的映射，称之为 f 到 S 上的限制，记作 $f|_S:S\to X$。

设 $f:A\to X$ 是映射。当 $f(A)=X$ 时，称 f 为满射(surjection)。当 A 中的不同元素在 f 下的象一定不同时，即当 $f(a)=f(b)\Rightarrow a=b$ 成立时，称 f 为单射(injection)。一个既是单射又是满射的映射称为双射(bijection)，也就是平常所说的双方一一对应。

设 $f:A\to X$ 是双射，则 $X\times A$ 的子集 $\{(f(a),a)\mid a\in A\}$ 是集 X 到集 A 的一个映射，称之为 f 的逆映射，记作 $f^{-1}:X\to A$。显然 f^{-1} 也是双射，而且 $(f^{-1})^{-1}=f$。

设 A,B 是非空集，以 B^A 记全体 A 到 B 的映射的集合，这是因为 $|B^A|=|B|^{|A|}$。

设有两个映射 $f:A\to M$ 和 $g:M\to X$。不难看出 $A\times X$ 的子集 $\{(a,g(f(a)))\mid a\in A\}$ 是集 A 到集 X 的一个映射，称之为 g 与 f 的乘积或复合，记作 $g\circ f:A\to X$。又设 $h:X\to Z$，则不难验证 $h\circ(g\circ f)=(h\circ g)\circ f$。这就是说映射的乘法满足结合律。由于结合律，我们可以写 $h\circ g\circ f$，而不引起歧义。

设 A 是非空集。$A\times A$ 的子集 $\{(a,a)\mid a\in A\}$ 是 A 到自身的一个映射，它把 A 的每一个元素映到自身，称作集 A 的恒等映射，记作 $1_A:A\to A$。若 $f:A\to X$ 是双射，则显然有 $f\circ f^{-1}=1_X$，$f^{-1}\circ f=1_A$。

设有映射 $f:A\to B$，$g:B\to C$，$h:C\to D$，$j:A\to M$ 和 $k:M\to D$。若有 $h\circ g\circ f=k\circ j$ 则称下图交换：

$$\begin{array}{ccccc} A & \xrightarrow{f} & B & \xrightarrow{g} & C \\ \downarrow j & & & & h\downarrow \\ M & & \xrightarrow{\quad k \quad} & & D \end{array}$$

练习 0-0-5　设有映射 $f:A\to X$，以及 $B_i\subset A$，$Y_i\subset X(i=1,2)$。试证：

$f(B_1\cup B_2)=f(B_1)\cup f(B_2)$，$f(B_1\cap B_2)\subset f(B_1)\cap f(B_2)$；

$f^{-1}(Y_1\cup Y_2)=f^{-1}(Y_1)\cup f^{-1}(Y_2)$，$f^{-1}(Y_1\cap Y_2)=f^{-1}(Y_1)\cap f^{-1}(Y_2)$。

练习 0-0-6　设有映射 $f:A\to X$ 和 $g:A\to M$。试证存在映射 $h:M\to X$ 使 $f=h\circ g$ 的充分必要条件是 g 确定的分拆细于 f 确定的分拆。

练习 0-0-7 设 A,B 是非空有限集。试证:集 A 到集 B 的映射共有 $|B|^{|A|}$ 个,即 $|B^A|=|B|^{|A|}$。

§0.1 线性空间

线性空间或许是读者在高等代数课程中所遇到的第一个用公理定义的代数系。我们希望读者通过本章的复习,能系统地掌握线性空间的理论,而不是仅仅知道有关它的一些零散的知识。由于是复习,我们只简要地介绍基本定义和定理,很多定理我们以练习的形式留给读者自己证明。如果读者能够顺利地做出这些练习,则可以越过相应的正文。否则,你应该参考线性代数书,仔细地阅读本节内容。掌握高等代数中的线性代数方程组的理论是学好本节内容的前提条件之一。

Ⅰ. 基本概念

定义 设 V 是非空集,称它的元为向量,而 F 是数域(复数域、实数域或有理数域)。若定义了两个映射 $a: V\times V\to V$ 和 $m: F\times V\to V$,对所有 $x,y,z\in V$ 和 $\lambda,\mu\in F$,称 $a(x,y)$ 为向量 x 和向量 y 的和,记作 $x+y$ 称 $m(\lambda,x)$ 为数 λ 与向量 x 的积,记作 λx(或 $x\lambda$),满足下面条件:

(1) $(x+y)+z=x+(y+z)$,(结合律)

(2) 存在 $0\in V$,使 $0+x=x$,称 0 为零向量,

(3) 存在 $-x\in V$,使 $(-x)+x=0$,称 $-x$ 为 x 的负向量,

(4) $x+y=y+x$,(交换律)

(5) $\lambda(\mu x)=(\lambda\mu)x$,

(6) $1x=x$,

(7) $(\lambda+\mu)x=\lambda x+\mu x$,(向量的数乘关于数的加法的分配律)

(8) $\lambda(x+y)=\lambda x+\lambda y$,(向量的数乘关于向量的加法的分配律)(0.1.1)

则称 V 为复数域(实数域或有理数域)F 上的线性空间,或复(实或有理)线性空间。

例 1 所有 $m\times n$ 复矩阵的集合,在矩阵加法和复数与复矩阵的乘法下是一个