量子力学

孙天阳

2022 年 9 月 16 日

目录

1 绪论

参考书推荐

- 钱伯初，量子力学
- 张永德，量子力学
- Sakurai，Modern quantum mechanics
- Cohen，Quantum mechanics
- Griffiths，Introduction to quantum mechanics
- Kok，A first introduction to quantum physics
- Paul，Introduction to quantum theory
- Kaye，An introduction to quantum computing
- Auletta，Quantum mechanics for thinkers

作业与考试的计划

- 每周三道左右. 尽可能不采用 Sakurai 原著上的题目.
- 作业将作为平时成绩的一部分评分，平时成绩也包括对课堂提问的参与，平时成绩比重为百分之二十.
- 期中考试（闭卷）和期末考试（开卷）比重分别为百分之二十与百分之六十.
- 考题的难易程度与作业持平、但不会考平时作业中布置过的习题原题.

  只要考生平时学习中认真听讲、积极复习、独立完成作业，就可以取得 75 分以上的好成绩.

教学改革

传统量子力学课程一般是从介绍实物粒子的波动性

- 电子衍射实验
- 德布罗意物质波假设
- 波函数 $\psi(r,t)$
- 薛定谔方程

  $$\mathrm{i}\hbar h\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta^2+V(r)\right]\psi(r,t)$$

  出发组织课堂教学的. 这一方面在组织结构上与原子物理等入门课程有些雷同和重复，容易引起审美疲劳，另一方面也不完全符合量子力学发展的历史真实.

2 伴随算子

PartI

学过泛函分析的都知道，设 $A\colon X\to Y$ 是 Banach 空间之间的有界线性映射，则 A 的伴随映射定义为

$$A^*\colon Y^*\longrightarrow X^*, f\longmapsto A^*f,$$

其中 $A^*f(x):=f(Ax)$. 特别地，当 $Y=X$ 是 Hilbert 空间时，我们有一种方式可以将 A^* 看作 $B(X,X)$ 中的元素. 这种方式是通过 Riesz 表示定理实现的.

为了与杨焕雄老师的课件保持一致，我们约定 X 上的内积关于第二个分量是线性的. 这样，对于固定的 $x\in X$，$y\mapsto(x,y)$ 是 X 上的有界线性泛函，也就是决定了 X^* 中的一个元素 f. Riesz 表示定理是说，对于任意的 $f\in X^*$，存在唯一的 $x\in X$ 使得 $f(y)=(x,y)$. 这样我们就建立了 X 与 X^* 之间的一个双射，但由于内积关于第一个分量的共轭线性性，这个双射并不是线性的，而是共轭线性的. 记该映射为 $\varphi\colon X\to X^*, x\mapsto f=(x,\cdot)$.

设 $A\colon X\to X$，$A^*\colon X^*\to X^*$，我们利用下面的交换图表将 A^* 搬运成为 X 上的线性变换 $\widetilde{A}^*$

$$\begin{tikzcd} X \arrow[r, "\widetilde{A}^*"] \arrow[d, "\varphi"] & X \\ X^* \arrow[r, "A^*"] & X^* \arrow[u, "\varphi^{-1}"'] \end{tikzcd}, \qquad \begin{tikzcd} y \arrow[r, mapsto, "\widetilde{A}^*"] \arrow[d, mapsto, "\varphi"] & \widetilde{A}^*y \\ g \arrow[r, mapsto, "A^*"] & A^*g \arrow[u, mapsto, "\varphi^{-1}"'] \end{tikzcd}$$

按定义有如下等式

$$(\widetilde{A}^*y,x)=A^*g(x)=g(Ax)=(y,Ax),\quad \forall\ x\in X.$$

即

$$(Ax,y)=(x,\widetilde{A}^*y),\quad \forall\ x,y\in X.$$

现在假设 X 是有限维 $\mathbb{C}$-线性空间，取定一组标准正交基 $\{e_1,\cdots,e_n\}$，设 A 在该组基下的矩阵表示为 A，易知 $\widetilde{A}^*$ 在同一组基下的矩阵表示为 A^H，其中 H 表示矩阵的共轭转置.

以上只是回顾一下泛函分析与线性代数中的标准内容.

PartII

下面我们来看量子力学中定义的伴随映射.

首先交代一点，量子力学中，Hilbert 空间 X 中的元素称作态矢量，用来描述量子力学体系的状态，一般记作 $|\alpha\rangle,|\beta\rangle$. 记 $\varphi(|\alpha\rangle)=:\langle\alpha|$，其中 φ 是上文提到的由 Riesz 表示定理建立的双射.

设 $A\colon X\to X, |\alpha\rangle\mapsto|\beta\rangle$. 定义 A 的伴随映射为 $\mathscr{A}^*\colon X^*\to X^*, \langle\alpha|\mapsto\langle\beta|$.

首先你应意识到，量子力学中定义的伴随映射 $\mathscr{A}^*$ 绝不是泛函分析中定义的伴随映射 A^*. 事实上，很像上面提到的将 A^* 利用 Riesz 表示定理视作 X 上的线性变换 $\widetilde{A}^*$ 的过程，$\mathscr{A}^*$ 实际上是将 A 从 X 上搬到 X^* 上得到的，具体来说，我们有下面的交换图表

$$\begin{tikzcd} X \arrow[r, "A"] \arrow[d, "\varphi"] & X \arrow[d, "\varphi"] \\ X^* \arrow[u, "\varphi^{-1}"] \arrow[r, "\mathscr{A}^*"] & X^* \end{tikzcd}.$$

下面我们需要考虑将 $\mathscr{A}^*$ 理解为 X 上的线性变换的方式. 之前的路子肯定不奏效了，因为你搬回去得到的就是 A. 那该怎么办呢？

PartIII

默认大家熟悉线性空间的张量积.

设 $x, y, z \in X, f, g, h \in X^*$，并且 $\varphi(x) = f, \varphi(y) = g, \varphi(z) = h$.

考虑 $x \otimes g$. 这玩意非常有意思，因为它既可以看作 X 上的线性变换，又可以看作 X^* 上的线性变换.

命题 2.1. *设 $A = x \otimes g$，则 $\mathscr{A}^* = y \otimes f$.*

证明. 直接验证.

- $Az = (x \otimes g)(z) = g(z)x$.
- $(y \otimes f)(h) = h(y)f$.
- $g(z) = (y, z), h(y) = (z, y)$，刚好共轭.

□

命题 2.2. *设 $x \otimes g$ 作为 X 上的线性变换的矩阵表示为 A，则 $y \otimes f$ 作为 X 上的线性变换的矩阵表示为 A^H.*

证明. 只需要比较 $x \otimes g(e_i)$ 放在内积的第二个分量与 e_j 的内积和 $y \otimes f(e_j)$ 放在内积的第二个分量与 e_i 的内积，看是否是共轭的关系.

- $(e_j, g(e_i)x) = g(e_i)(e_j, x) = g(e_i)\overline{(x, e_j)} = g(e_i)\overline{f(e_j)}$
- 由对称性另一边自然是 $f(e_j)\overline{g(e_i)}$，刚好共轭.

□

这样我们就清楚了，虽然 A^* 与 $\mathscr{A}^*$ 作为 X^* 上的线性变换是不同的，但按照各自的方式视作 X 上的线性变换后，二者是相同的. 我们将与其伴随算子（视作 X 上的线性变换）相等的算子称作自伴算子，因此两种定义给出的自伴算子的概念是一致的，至少我们在有限维时验证了这一点.

为了理论的完整性，我们还需要如下命题

命题 2.3. *设 $A\colon X \to X$ 是有界线性变换，存在 $x_i \in X$ 和 $g_i \in X^*$ 使得 $A = \sum_{i=1}^{m} x_i \otimes g_i$.*

这个命题，在有限维时是显然的，在无限维时是不对的.

在上面，我们是将 A 写成了 $x \otimes g$，然后利用了 $x \otimes g$ 的特殊性，将算子在 X 上的线性变换与 X^* 上的线性变换这两种观点间切换.

既然不是所有的算子都能写成 $x \otimes g$ 的有限和的形式，我们需要一种内蕴的等价刻画.

PartIV

既然是内蕴的刻画，我们得想想自己手上有什么？我们只有 X 上的内积和 X^* 中元素与 X 中元素的配对.

设 $A\colon X \to X$，心里想着 $A = x \otimes g$.

怎么定义一个 $\widetilde{A}\colon X^* \to X^*$，只用到内积和配对，使得 $\widetilde{A}$ 也是 $x \otimes g$?

要定义 $\widetilde{A}$，就是任给 $h \in X^*$，我们需要知道 $\widetilde{A}h$ 是谁. 但 $\widetilde{A}h$ 是 X^* 中的元素，因此只需要对任意的 $w \in X$，我们说明 $(\widetilde{A}h)(w)$ 是谁，下面就是根据心目中 $\widetilde{A}$ 也是 $x \otimes g$ 来猜出 $(\widetilde{A}h)(w)$ 该如何用 A 表达

$$(\widetilde{A}h)(w) = h(x)g(w) = h(Aw).$$

但仔细看这个表达式，我们惊喜的发现这样定义出来的 $\widetilde{A}$ 正是泛函分析中的伴随算子！

所以事情已经很清楚了，在泛函分析中，我们从 $A\colon X \to X$ 出发，按照泛函分析的定义得到伴随算子 $A^*\colon X^* \to X^*$，再利用 Riesz 表示定理将 A^* 搬到 X 上得到 $\widetilde{A}^*\colon X \to X$. 在量子力学中，我们从 $A\colon X \to X$ 出发，利用 Riesz 表示定理将 A 搬到 X^* 上得到 $\mathscr{A}^*\colon X^* \to X^*$，然后按照泛函分析的定义得到 $\mathscr{A}^*$ 的伴随算子（已经将 X 与 X^{**} 自然等同）$\widetilde{\mathscr{A}^*}$.

我们前面已经在有限维的时候验证过，$\widetilde{A}^*$ 与 $\widetilde{\mathscr{A}^*}$ 的矩阵表示都是 A^H，从而二者相等，下面我们一般地做这件事情.

命题 2.4. $\widetilde{A}^* = \widetilde{\mathscr{A}^*}$.

证明.

$$A\colon X \to X \overset{\text{伴随}}{\Longrightarrow} A^*\colon X^* \to X^* \overset{\text{Riesz}}{\Longrightarrow} \widetilde{A}^*\colon X \to X$$

$$A\colon X \to X \overset{\text{Riesz}}{\Longrightarrow} \mathscr{A}^*\colon X^* \to X^* \overset{\text{伴随}}{\Longrightarrow} \widetilde{\mathscr{A}^*}\colon X \to X$$

任取 $x \in X$，要证 $\widetilde{A}^*x = \widetilde{\mathscr{A}^*}x$. 任取 $y \in X$.

- $(\widetilde{A}^*x, y) = (\varphi^{-1}(A^*f), y) = A^*fy = f(Ay) = (x, Ay)$.
- $(y, \widetilde{\mathscr{A}^*}x) = g(\widetilde{\mathscr{A}^*}x) = (\mathscr{A}^*g)x = \varphi(Ay)(x) = (Ay, x)$.

□

3 可交换与可同时对角化

4 测不准关系与 Cauchy-Schwartz 不等式

5 简并的算子的分析