

谱理论与量子力学

GasinAn

2023 年 9 月 3 日

Copyright © 2023 by GasinAn

All rights reserved. No part of this book may be reproduced, in any form or by any means, without permission in writing from the publisher, except by a BNUser.

The author and publisher of this book have used their best efforts in preparing this book. These efforts include the development, research, and testing of the theories, technologies and programs to determine their effectiveness. The author and publisher make no warranty of any kind, express or implied, with regard to these techniques or programs contained in this book. The author and publisher shall not be liable in any event of incidental or consequential damages in connection with, or arising out of, the furnishing, performance, or use of these techniques or programs.

Printed in China

目录

第一章 Hilbert 空间

1.1 定义和基本性质

定义 1.1. 完备的内积空间称为 Hilbert 空间.

定理 1.1. Hilbert 空间是可分的, 当且仅当其有可数正交归一基.

任意可分 Hilbert 空间同构于 ℓ^2 和 L^2 . 以下只讨论可分 Hilbert 空间.

定义 1.2. 序列 $\{|f_n\rangle\}$ 称为强收敛于 $|f\rangle$, 若 $\{\| |f_n\rangle - |f\rangle \| \}$ 在 $n \rightarrow \infty$ 时收敛于 0.

定义 1.3. 序列 $\{|f_n\rangle\}$ 称为弱收敛于 $|f\rangle$, 若 $\forall |g\rangle, \{\langle g | f_n \rangle\}$ 在 $n \rightarrow \infty$ 时收敛于 $\langle g | f \rangle$.

可称强收敛为依范数收敛, 弱收敛为依分量收敛.

1.2 矢量值函数

用强收敛可定义任意矢量值函数 $|f(\cdot)\rangle : I \in \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H}$ 的强连续性, 强可微性和强 Riemann 可积性等.

1.3 Hilbert 空间的子集

定义 1.4. 若 U 是 Hilbert 空间 \mathcal{H} 的子集, U 的闭包 $\bar{U} = \mathcal{H}$, 则 U 称为稠密的.

定义 1.5. 若 M 是 Hilbert 空间 \mathcal{H} 的子集, M 对 \mathcal{H} 的线性运算封闭, 则 M 称为线性流形.

定义 1.6. 若 N 是 Hilbert 空间 \mathcal{H} 的子集, 则 \mathcal{H} 中所有能表示为 N 中有限个元素的线性叠加的矢量组成的集合是一个线性流形, 称为由 N 生成的线性流形.

定义 1.7. 若 N 是 Hilbert 空间 \mathcal{H} 的子集, 由 N 生成的线性流形是稠密的, 则 N 称为完全的.

定义 1.8. 若 M 是 Hilbert 空间 \mathcal{H} 的子集, M 是完备线性流形, 则 M 称为子空间.

定义 1.9. 若 N 是 Hilbert 空间 \mathcal{H} 的子集, 则由 N 生成的线性流形的闭包 M_N 是一个子空间, 称为由 N 生成的子空间.

定义 1.10. 若 U 是 Hilbert 空间 \mathcal{H} 的子集, 则 $U^\perp := \{|f\rangle \in \mathcal{H} | |f\rangle \perp |g\rangle, \forall |g\rangle \in U\}$ 称为 U 的正交补.

定理 1.2. 若 U 是 Hilbert 空间 \mathcal{H} 的子集, 则 U^\perp 为子空间, $U^{\perp\perp}$ 为由 N 生成的子空间.

定理 1.3. 若 M 是子空间, 则 $\forall |f\rangle \in \mathcal{H}$, $\exists |f\rangle$ 的唯一分解 $|f\rangle = |f_T\rangle + |f_N\rangle$, $|f_T\rangle \in M$, $|f_N\rangle \in M^\perp$.

定义 1.11. 若 $\{\mathcal{H}_1, \dots, \mathcal{H}_n\}$ 中的元素都是 Hilbert 空间, 则 $\{\mathcal{H}_1, \dots, \mathcal{H}_n\}$ 中的元素的正交和 $\bigoplus_{i=1}^n \mathcal{H}_i$ 为一个 Hilbert 空间, 其元素形如 $|f_1\rangle \dots |f_n\rangle$, $f_i \in \mathcal{H}_i$, $\forall i \in \{1, \dots, n\}$, 满足

$$(\langle f_n | \dots \langle f_1 |)(|g_1\rangle \dots |g_n\rangle) = \sum_{i=1}^n \mathcal{H}_i \langle f_i | g_i \rangle, \forall |f_1\rangle \dots |f_n\rangle, |g_1\rangle \dots |g_n\rangle \in \bigoplus_{i=1}^n \mathcal{H}_i.$$

定义 1.12. 若 $\{\mathcal{H}_i | i \in \mathbb{N}\}$ 中的元素都是 Hilbert 空间, 则 $\{\mathcal{H}_i | i \in \mathbb{N}\}$ 中的元素的正交和 $\bigoplus_{i=1}^\infty \mathcal{H}_i$ 为一个 Hilbert 空间, 其元素形如 $|f_1\rangle \dots |f_i\rangle \dots$, $f_i \in \mathcal{H}_i$, $\forall i \in \mathbb{N}$, 满足

$$(\dots \langle f_i | \dots \langle f_1 |)(|g_1\rangle \dots |g_i\rangle \dots) = \sum_{i=1}^\infty \mathcal{H}_i \langle f_i | g_i \rangle, \forall |f_1\rangle \dots |f_i\rangle \dots, |g_1\rangle \dots |g_i\rangle \dots \in \bigoplus_{i=1}^\infty \mathcal{H}_i.$$

1.4 测度和积分

测度和 Lebesgue 积分的内容参见<https://github.com/GasinAn/PRNotes>.

第二章 线性算符

2.1 代数 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$

定义 2.1. \mathcal{H} 上所有有界线性算符组成的集合称为 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.

定义 2.2. $\forall \hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, \hat{A} 的范数

$$\|\hat{A}\| := \inf \left\{ M \in \mathbb{R} \mid \|\hat{A}|f\rangle\| \leq M\|f\rangle, \forall |f\rangle \in \mathcal{H} \right\} = \sup_{|g\rangle \in \mathcal{H}, \|g\rangle=1} \|\hat{A}|g\rangle\|.$$

定理 2.1. $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是完备的.

定义 2.3. $\forall \hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, \hat{A}^\dagger 称为 \hat{A} 的伴随, 若 $(\langle f|\hat{A}^\dagger)|g\rangle = \langle f|(\hat{A}|g\rangle)$, $\forall |f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{H}$.

定义 2.4. $\forall \hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, \hat{A} 称为自伴的, 若 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.

定义 2.5. 序列 $\{\hat{A}_n\}$ 称为强收敛于 \hat{A} , 若 $\forall |f\rangle \in \mathcal{H}$, $\{\hat{A}_n|f\rangle\}$ 强收敛于 $\hat{A}|f\rangle$.

定义 2.6. 序列 $\{\hat{A}_n\}$ 称为弱收敛于 \hat{A} , 若 $\forall |f\rangle \in \mathcal{H}$, $\{\hat{A}_n|f\rangle\}$ 弱收敛于 $\hat{A}|f\rangle$.

定义 2.7. 序列 $\{\hat{A}_n\}$ 称为一致收敛于 \hat{A} , 若 $\{\|\hat{A}_n - \hat{A}\|\}$ 在 $n \rightarrow \infty$ 时收敛于 0.

可称强收敛为依矢量范数收敛, 弱收敛为依矢量分量收敛, 一致收敛为依范数收敛.

2.2 投影算符和等距算符

定义 2.8. $\hat{P} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 称为投影算符, 若 \hat{P} 自伴, 且 $\hat{P}^2 = \hat{P}$.

定理 2.2. 若 $\hat{P} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 是投影算符, 则 \exists 子空间 $M = \{|f\rangle \in \mathcal{H} \mid \hat{P}|f\rangle = |f\rangle\}$, 使得 $\hat{P} = \hat{P}_M$.

定理 2.3. 若投影算符序列 $\{\hat{P}_n\}$ 强收敛于 \hat{P} , 则 \hat{P} 是投影算符.

定义 2.9. $\hat{\Omega} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 称为半等距算符, 若 $\hat{\Omega}^\dagger \hat{\Omega} = \hat{P}$ 为投影.

定义 2.10. $\hat{\Omega} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 称为等距算符, 若 $\hat{\Omega}^\dagger \hat{\Omega} = \hat{I}$.

定义 2.11. $\hat{U} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 称为幺正算符, 若 $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I} = \hat{U} \hat{U}^\dagger$.

2.3 紧算符

定义 2.12. 算符 \hat{A} 称为有限秩算符, 若 \hat{A} 能表示成 $\hat{A} = \sum_{i=1}^n |h_i\rangle\langle g|$.

定理 2.4. 若 \hat{A} 为有限秩算符, 则 $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$

定理 2.5. 若 $\dim R_{\hat{A}} < \infty$, 则 \hat{A} 为有限秩算符.

定义 2.13. 算符 $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 称为紧算符, 若 \exists 有限秩算符序列 $\{\hat{A}_n\}$, $\{\hat{A}_n\}$ 一致收敛于 \hat{A} .

定义 2.14. \mathcal{H} 上所有紧算符组成的集合称为 $\mathcal{K}(\mathcal{H})$.

定理 2.6. $\hat{P}_M \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$, 当且仅当 $\dim M < \infty$.

定义 2.15. $\forall \hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, \hat{A} 的 Hilbert-Schmidt 范数

$$\|\hat{A}\|_{\text{HS}} := \left[\sum_i \|\hat{A}|e_i\rangle\|^2 \right]^{1/2},$$

其中 $|e_i\rangle$ 是 \mathcal{H} 的一组正交归一基.

定义 2.16. 算符 $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 称为 Hilbert-Schmidt 算符, 若 $\|\hat{A}\|_{\text{HS}} < \infty$.

定义 2.17. \mathcal{H} 上所有 Hilbert-Schmidt 算符组成的集合称为 $\mathcal{B}_2(\mathcal{H})$.

定理 2.7. 若 \hat{A} 为 Hilbert-Schmidt 算符, 则 \hat{A} 为紧算符.

2.4 无界算符

定义 2.18. 算符 \hat{A} 称为线性算符, 若 $D_{\hat{A}}$ 是线性流形且 \hat{A} 线性.

定义 2.19. 若 \hat{A} 是线性算符, 则 $N_{\hat{A}} := \{|f\rangle \in D_{\hat{A}} \mid \hat{A}|f\rangle = |0\rangle\}$ 称为 \hat{A} 的零空间.

定义 2.20. 对算符 \hat{A}, \hat{B} ,

1. 若 $D_{\hat{A}} = D_{\hat{B}}$, 且 $\forall |f\rangle \in D_{\hat{A}}, \hat{A}|f\rangle = \hat{B}|f\rangle$, 则称 \hat{A} 与 \hat{B} 相等, 并记作 $\hat{A} = \hat{B}$;
2. 若 $D_{\hat{A}} \subset D_{\hat{B}}$, 且 $\forall |f\rangle \in D_{\hat{A}}, \hat{A}|f\rangle = \hat{B}|f\rangle$, 则称 \hat{A} 是 \hat{B} 的限制, \hat{B} 是 \hat{A} 的延拓, 并记作 $\hat{A} \subset \hat{B}$.

定义 2.21. 算符 \hat{A} 称为可闭算符, 若 $D_{\hat{A}}$ 中序列 $\{|f_n\rangle\}$ 强收敛于 $|0\rangle$ 且序列 $\{\hat{A}f_n\rangle\}$ 是强 Cauchy 序列时, $\{\hat{A}f_n\rangle\}$ 强收敛于 $|0\rangle$.

定义 2.22. 算符 \hat{A} 称为闭算符, 若 $D_{\hat{A}}$ 中序列 $\{|f_n\rangle\}$ 强收敛于 $|f\rangle$ 且序列 $\{\hat{A}f_n\rangle\}$ 是强 Cauchy 序列时, $|f\rangle \in D_{\hat{A}}$ 且 $\{\hat{A}f_n\rangle\}$ 强收敛于 $|f\rangle$.

定理 2.8. 若 \hat{A} 为闭算符, 则 $N_{\hat{A}}$ 为子空间.

定理 2.9. \hat{A} 可逆, 当且仅当 $N_{\hat{A}} = \{|0\rangle\}$.

定义 2.23. 算符 \hat{A} 称为稠定算符, 若 $D_{\hat{A}}$ 是稠密的.

定义 2.24. 若 \hat{A} 是有界算符, 则存在 \hat{A} 的由 $D_{\hat{A}}$ 到 $\overline{D_{\hat{A}}}$ 的自然延拓, 称为 \hat{A} 的闭包, 记作 $\overline{\hat{A}}$.

定义 2.25. 算符 \hat{A}^\dagger 称为稠定算符 \hat{A} 的伴随, 若 $D_{\hat{A}^\dagger} = \{|f\rangle \in \mathcal{H} \mid \exists |f^\dagger\rangle \in \mathcal{H}, \langle f^\dagger|g\rangle = \langle f|(\hat{A}|g\rangle), \forall |g\rangle \in D_{\hat{A}}\}$, 且 $\hat{A}^\dagger|f\rangle = |f^\dagger\rangle$.

定义 2.26. 若 \hat{A} 是稠定算符, 则 \hat{A}^\dagger 是闭算符.

定义 2.27. 若 \hat{A} 是稠定可闭算符, 则 $\overline{\hat{A}}^\dagger = \hat{A}^\dagger$.

定义 2.28. 若 \hat{A} 和 \hat{A}^\dagger 都是稠定算符, 则 $\hat{A} \subset \hat{A}^{\dagger\dagger}$.

定义 2.29. 若 \hat{A} 和 \hat{A}^\dagger 都是稠定算符, 且 \hat{A} 是闭算符, 则 $\hat{A} = \hat{A}^{\dagger\dagger}$.

定义 2.30. 稠定算符 \hat{A} 称为自伴算符, 若 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

定义 2.31. 稠定算符 \hat{A} 称为 Hermitean 算符, 若 $(\langle f|\hat{A}|g\rangle = \langle f|(\hat{A}|g\rangle), \forall |f\rangle, |g\rangle \in D_{\hat{A}}$.

定理 2.10. 稠定算符 \hat{A} 是 Hermitean 算符, 当且仅当 $\hat{A} \subset \hat{A}^\dagger$.

定义 2.32. Hermitean 算符 \hat{A} 称为本质自伴算符, 若 $\overline{\hat{A}}$ 是自伴算符.

定理 2.11. Hermitean 算符 \hat{A} 是本质自伴算符, 当且仅当 \hat{A}^\dagger 是 Hermitean 算符.

2.5 算符的预解和谱

定义 2.33. 若 \hat{A} 是闭算符, 则 \hat{A} 的预解 $r(\hat{A})$ 定义为 $\{z \in \mathbb{C} \mid \hat{A} - z\hat{I} \text{ 可逆}, (\hat{A} - z\hat{I})^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})\}$, \hat{A} 的谱 $s(\hat{A})$ 定义为 $\mathcal{H} - r(\hat{A})$.

定理 2.12. 若 \hat{A} 是闭算符, 则 $r(\hat{A})$ 是开集, $s(\hat{A})$ 是闭集.

定义 2.34. $z \in \mathbb{C}$ 称为算符 \hat{A} 的本征值, 若 $\hat{A} - z\hat{I}$ 可逆.

定理 2.13. 若 \hat{A} 是 Hermitean 算符, 则 \hat{A} 的所有本征值为实数.

定理 2.14. 若 \hat{A} 是自伴算符, 则 $s(\hat{A}) \subset \mathbb{R}$.

定理 2.15. 若 $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, 则 $s(\hat{A}) \subset \{z \in \mathbb{C} \mid |z| \leq \|\hat{A}\|\}$.

2.6 自伴算符的微扰

定理 2.16. 若 \hat{A} 和 \hat{A}' 是 Hermitean 算符, $D_{\hat{A}} \cap D_{\hat{A}'}$ 是稠密的, 则 $\hat{A} + \hat{A}'$ 是 Hermitean 算符.

定理 2.17. 若 \hat{A} 是自伴算符, \hat{A}' 是 Hermitean 算符, 且 $\hat{A}' \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, 则 $\hat{A} + \hat{A}'$ 是自伴算符.

定义 2.35. 算符 \hat{A}' 称为 \hat{A} 有界算符, 若 $D_{\hat{A}} \subset D_{\hat{A}'}$ 且 $\exists \alpha \geq 0, \beta_\alpha \geq 0$, $\|\hat{A}'|f\rangle\| \leq \alpha\|\hat{A}|f\rangle\| + \beta_\alpha\|f\|$, $\forall |f\rangle \in D_{\hat{A}}$, 并且 α 的下确界 a 称为 \hat{A}' 的 \hat{A} 界.

定义 2.36. 1. 自伴算符 \hat{A} 称为下半有界算符, 若 $\exists \lambda \in \mathbb{R}, (-\infty, \lambda) \subset r(\hat{A})$.

2. 自伴算符 \hat{A} 称为上半有界算符, 若 $\exists \lambda \in \mathbb{R}, (\lambda, \infty) \subset \mathbf{r}(\hat{A})$.

定理 2.18. 若 \hat{A} 是自伴算符, \hat{A}' 是 \hat{A} 有界 Hermitean 算符, 且 \hat{A}' 的 \hat{A} 界 $a < 1$, 则:

1. $\hat{A} + \hat{A}'$ 是自伴算符.
2. \hat{A}' 也是 $\hat{A} + \hat{A}'$ 有界 Hermitean 算符.
3. 若 \hat{A} 是半有界算符, 则 $\hat{A} + \hat{A}'$ 也是半有界算符.
4. 若条件放宽, \hat{A} 是本质自伴算符, 或 $a \leq 1$, 则 $\hat{A} + \hat{A}'$ 是本质自伴算符.

定义 2.37. 当 \hat{A} 为闭算符时, 算符 \hat{B} 称为 \hat{A} 紧算符, 若 $D_{\hat{A}} \subset D_{\hat{B}}$ 且 $\exists z \in \mathbf{r}(\hat{A}), \hat{B}(\hat{A} - z\hat{I})^{-1}$ 是紧算符.

定理 2.19. 若 \hat{A} 是自伴算符, \hat{B} 是 \hat{A} 紧 Hermitean 算符, 则:

1. $\hat{B}(\hat{A} - z\hat{I})^{-1} \in \mathcal{K}(\mathcal{H}), \forall z \in \mathbf{r}(\hat{A})$.
2. \hat{B} 是 \hat{A} 有界算符, \hat{A} 界为 0.
3. 若 \hat{A}' 是 \hat{A} 有界 Hermitean 算符, 且 \hat{A}' 的 \hat{A} 界 $a < 1$, 则 \hat{B} 也是 $\hat{A} + \hat{A}'$ 紧 Hermitean 算符.