**量子力学数学基础简介**

摘 要

本文目的在于简要介绍量子力学的数学基础，即从泛函分析的角度介绍希尔伯特空间的定义，介绍算符的定义，以及其一系列有趣的性质，并做适量分析。意义在于使读者更深入的了解20世纪建立起来的量子力学所使用的区别于经典物理的数学语言。

关键词：量子力学 泛函分析 算子 希尔伯特空间

**ABSTRACT**

The purpose of this paper is to briefly introduce the mathematical foundations of quantum mechanics to introduce the definition of the Hilbert Space, that is, from the perspective of functional analysis, introduced the definition of the operator, and a series of interesting properties, and do some analysis. The meaning is to make the reader a better understanding of the mathematical language of quantum mechanics established in the 20th century, which is different from classical physics.

**Key words:** Quantum Mechanics Functional Analysis Operator Hilbert Space

**目 录**

[第1章 量子力学简史 1](#_Toc353395942)

[第2章 量子力学重要内容简介 2](#_Toc353395943)

[2.1基本假设 2](#_Toc353395944)

[2.2对易力学量完全集 3](#_Toc353395945)

[2.3态矢量、算符 3](#_Toc353395946)

[2.3.1态矢量 3](#_Toc353395947)

[2.3.2算符 4](#_Toc353395948)

[第3章 泛函分析简介 4](#_Toc353395949)

[3.1集合与空间 4](#_Toc353395950)

[3.1.1集合 4](#_Toc353395951)

[3.1.2拓扑空间 5](#_Toc353395952)

[3.1.3度量空间 5](#_Toc353395953)

[3.1.4赋范线性空间 5](#_Toc353395954)

[3.1.5内积空间 6](#_Toc353395955)

[3.1.6希尔伯特空间 6](#_Toc353395956)

[3.1.7希尔伯特空间的重要性质 6](#_Toc353395957)

[3.1.8综述 7](#_Toc353395958)

[3.2线性算子 8](#_Toc353395959)

[3.2.1线性算子 8](#_Toc353395960)

[3.2.2线性运算与乘法 9](#_Toc353395961)

[3.2.3伴算子 9](#_Toc353395962)

[3.2.4自伴算子 10](#_Toc353395963)

[第4章 量子力学中泛函分析的应用 11](#_Toc353395964)

[4.1量子态的矩阵表示 11](#_Toc353395965)

[4.2算符 12](#_Toc353395966)

[4.3本征方程 12](#_Toc353395967)

[4.4平均值 13](#_Toc353395968)

[第5章 后序 13](#_Toc353395969)

[参考文献 15](#_Toc353395970)

# 量子力学简史

1900年，普朗克提出辐射量子假说，假定电磁场和物质交换能量是以间断的形式(能量子)实现的，能量子的大小同辐射频率成正比，比例常数称为普朗克常数，从而得出黑体辐射能量分布公式，成功地解释了黑体辐射现象。1905年，爱因斯坦引进光量子(光子)的概念，并给出了光子的能量、动量与辐射的频率和波长的关系，成功地解释了光电效应。其后，他又提出固体的振动能量也是量子化的，从而解释了低温下固体比热问题。1913年，玻尔在卢瑟福原有核原子模型的基础上建立起原子的量子理论。按照这个理论，原子中的电子只能在分立的轨道上运动，在轨道上运动时候电子既不吸收能量，也不放出能量。原子具有确定的能量，它所处的这种状态叫“定态”，而且原子只有从一个定态到另一个定态，才能吸收或辐射能量。这个理论虽然有许多成功之处，但对于进一步解释实验现象还有许多困难。在人们认识到光具有波动和微粒的二象性之后，为了解释一些经典理论无法解释的现象，法国物理学家德布罗意于1923年提出了物质波这一概念。认为一切微观粒子均伴随着一个波，这就是所谓的德布罗意波。由于微观粒子具有波粒二象性，微观粒子所遵循的运动规律就不同于宏观物体的运动规律，描述微观粒子运动规律的量子力学也就不同于描述宏观物体运动规律的经典力学。当粒子的大小由微观过渡到宏观时，它所遵循的规律也由量子力学过渡到经典力学。量子力学与经典力学的差别首先表现在对粒子的状态和力学量的描述及其变化规律上。在量子力学中，粒子的状态用波函数描述，它是坐标和时间的复函数。为了描写微观粒子状态随时间变化的规律，就需要找出波函数所满足的运动方程。这个方程是薛定谔在1926年首先找到的，被称为薛定谔方程。当微观粒子处于某一状态时，它的力学量(如坐标、动量、角动量、能量等)一般不具有确定的数值，而具有一系列可能值，每个可能值以一定的几率出现。当粒子所处的状态确定时，力学量具有某一可能值的几率也就完全确定。这就是1927年，海森伯得出的测不准关系，同时玻尔提出了并协原理，对量子力学给出了进一步的阐释。量子力学和狭义相对论的结合产生了相对论量子力学。经狄拉克、海森伯（又称海森堡，下同）和泡利（pauli）等人的工作发展了量子电动力学。20世纪30年代以后形成了描述各种粒子场的量子化理论——量子场论，它构成了描述基本粒子现象的理论基础。

# 第2章 量子力学重要内容简介

## 2.1基本假设

量子力学的基本假设是整个量子力学体系的基础，有如下四个。这四个假设可推导出整个量子力学（非相对论）。

1. 一个物理系统于时间点的状态可以由希尔伯特空间中的一个归一化矢量来定义。这里的希尔伯特空间指的是定义了内积的平方可积的线性矢量空间。



1. 每个可观测量可以通过状态空间中的一个线性厄米算符来表示，可观测量在状态的期望值（即测量结果的平均值）为  。进一步的，对应于可观测量的厄米算符的所有本征态构成希尔伯特空间中的正交归一的完备函数系。任意一个态矢量都可以由该算符的本征态展开。如果系统处于算符的本征态上，对应的可观测量具有唯一确定的测量值，即该本征态对应的本征值。对于任意的态，观测量的测量值是各本征值的带权平均。量子力学中的测量是不可逆的，测量后系统处于该测量值的一个特征矢量上。
2. 位置算符和动量算符之间满足正则对易关系



由此对易关系可以确定动量算符的表达式，而所有的其他算符都可以由位置算符和动量算符表出。

1. 状态矢量的动力学演化由薛定谔方程表示：



在这里哈密顿算符通常对应于系统的总能量。

## 2.2对易力学量完全集

设有一组彼此独立而且相互对易的厄米算符，它们的共同本征态记为，表示一组完备的量子数。设给定一组量子数之后，就能够确定体系的唯一一个可能状态，则我们称构成体系的一组对易可观测量完全集（complete set of commuting obserbables，简称CSCO），习惯称为对易力学量完全集，或简称力学量完全集[1]。

CSCO在量子力学中是个很重要的概念，是完全描述系统的最小集合，即从中抽出任何一个可观测量后，就不再构成CSCO。其中可观测量的数目一般等于体系的自由度。一个给定的体系往往可以找到多个CSCO，且涉及体系的对称性。

一组力学量完全集可以找到对应的共同本征态，其性质用共同本征函数描述。所有本征态的本征函数构成本征函数系，本征函数系是完备的，所有物理系统的量子状态可以在该本征函数系中进行展开。至于本征函数系的完备性是个很复杂的问题，本文对此不做详细讨论（可参见参考文献[2]）。

## 2.3态矢量、算符

### 2.3.1态矢量

量子力学的基本假设中已经提到，物理系统的某个状态用希尔伯特空间中归一化矢量来描述，这个矢量叫做态矢量（state vector），简称态矢。态矢量是一个关于时间和空间的函数，它描述物理系统的所有物理性质。由于物理意义上的需要，态矢量函数还需要满足以下三个条件：

①单值的，即在空间每一点只能有一个值；

②连续的，即的值不能出现突跃； 对的一级微商也应是连续的；

③平方可积的（有限），即在整个空间的积分应为一有限值，通常要求波函数归一化，即。

在薛定谔图像中，态矢量随时间的演化、随空间的变化要满足薛定谔方程（非相对论理论），在海森堡图像中则要满足海森堡方程。这两个方程是等价的，描述同样的物理规律。

### 2.3.2算符

定义算符满足的数学符号称为算符。

其中，为算符的本征函数系，为算符作用到本征态而得到的本征值，为所有本征值的加权平均。

量子力学中的算符源自数学中的算子理论，关于算子理论的内容将在下一小节中做简要介绍。量子力学中的可观测量(observable)，或称力学量，由一个线性厄米算符表示。算符的线性要求也正是态叠加原理的反映。

假设物理系统处于力学量的本征态，则算符、本征函数与本征值之间的关系在本征方程中得到鲜明体现：



对于哈密顿算符则有：



其中即为系统总能量。

# 第3章 泛函分析简介

上面对量子力学中与数学相关的基本概念做了简单介绍，下面将介绍这些概念背后严密的数学基础。

## 3.1集合与空间

### 3.1.1集合

集合这一数学概念的使用非常广泛，它是如此之一般，以致很难给它下一个不归结为其同义词的定义。这些同义词无非是元素的总体，元素的全体等。集合简称集。

### 3.1.2拓扑空间

定义 设（某一个集）是“空间承载子”，是的子集所成的任一集族。如果满足下列两条公理：

1. 集本身与空集皆属于，
2. 中任意多个（有限个或无限个）集的和及任意有限个集的交都属于，

则称为中的拓扑。

集与在其中给定的拓扑，即偶称为拓扑空间（topological space）。

简单的说，如果对一个非空集合给予适当的结构，使之能引入微积分中的极限和连续的概念，这样的结构就称为拓扑，具有拓扑结构的空间称为拓扑空间。

引入拓扑结构的方法有多种，如邻域系、开集系、闭集系、闭包系、内部系等不同方法。

### 3.1.3度量空间

定义 由元素（点）的某集（空间）及距离组成的偶叫做度量空间（metric space），其中距离是由中任何与确定的单值实函数，它满足以下三条公理：

1），当且仅当时，

2） （对称公理），

3） （三角形公理），

称为空间的一个度量（距离）。

度量空间也叫距离空间。度量空间中最符合我们对于现实直观理解的是三维欧氏空间。这个空间中的欧几里德度量定义两点之间距离为连接这两点的直线的长度。

### 3.1.4赋范线性空间

以往的函数我们一般用来表示，此时的函数我们用表示，对应， 对应。设代表实数域或复数域。

设是实数域（或复数域）上的线性空间，函数满足条件：

①对任意，；且，当且仅当；（注意：为上的零元）

②对任意及，‖（齐次性）；

③对任意，（三角不等式）。

称是上的一个范数，上定义的范数称为赋范线性空间，记为[3]。

范数概念是欧几里德空间模长脱离了精确定义之后的推广。完备化的赋范空间就是Banach 空间。

### 3.1.5内积空间

定义了内积的矢量空间称为内积空间（Inner product space）。

内积公理

（定义在实数或复数域上的）矢量空间中矢量的内积是它们的标量值函数，满足：

1）与互为复共轭，即；

2），其中和是数域上的标量；

3）对于任何，；当且仅当时，。

### 3.1.6希尔伯特空间

在一个复向量空间上的给定的内积可以按照如下的方式导出一个范数（norm）：



如果此规定构成的空间对于这个范数来说是完备的，那么这个空间称为是一个希尔伯特空间（Hilbert space）。

### 3.1.7希尔伯特空间的重要性质

**定义：**（1）设。若，则说与正交或直交，记为。

（2）设。若当时，则称为正交系。若是正交系且（这等价于，是Konecker记号），则称为标准正交系。

（3）设。约定，有；，有；，称为的正交补。当时，称与相互正交。

**性质：**若是一有限正交系，则有。一般地，若，类似地有。

**性质：**不含零元的正交系必线性无关。

**性质：**设是中的标准正交系。若可表为，则有，即表达式中的系数惟一确定。

**定义：**若每个均可表为，则称为的标准正交基。

**定理**  设是Hilbert空间中的标准正交系，则以下条件相互等价：

（1）是的标准正交基；

（2）是的基本集；

（3）是极大正交系，即若，则；

（4）对任给的，成立如下的Parseval等式：

；

（5）对任给的，成立如下内积公式：

。

**推论（标准正交基的存在问题）：**设是一个可分的无限维Hilbert空间，则其一定存在标准正交基。

### 3.1.8综述

一个集合，加上一套公理就称为一个空间。对一个集合赋予一定的拓扑机构就构成一个拓扑空间。度量空间就是一种拓扑空间。同样，赋范空间属于度量空间，因为如果在任一赋范空间中引入度量[4]：



则可推知其满足度量空间的公理，故赋范空间是一种度量空间。内积可以诱导出范数，故内积空间又属于赋范空间。完备化的内积空间就是希尔伯特空间[5]。如下图所示：



量子力学所使用的希尔伯特空间是函数空间，即空间的元素是函数，更确切的说是定义在一定区间上（有界或无界）上的复值平方可积函数（即对于，确保有限）[6]。可以证明，这样的平方可积函数的集合对于加法和数乘是封闭的，因此构成一个线性空间（矢量空间）。

量子力学中内积的定义如下：

对于任意两个函数定义



为对应量子体系的内积，也叫标积（scalar product）[1]。

## 3.2线性算子

### 3.2.1线性算子

假设等是（实数或复数）上的向量空间。

**定义：** 若一个映射满足

，

则称为从到的**线性算子**。

容易看出，上述等式可推广到更一般的情形：。

若，则称为零算子，就记为0；若为常数，则称为纯量算子（或相似变换，若），记作，当与1时，分别是零算子和单位算子。

### 3.2.2线性运算与乘法

对线性算子可定义两种自然的运算：线性运算与乘法。若是线性算子，，则是一个线性算子，它定义为



若是另一个算子，则由



定义出一个线性算子，称它为与的乘积。实际上，线性算子的乘积就是它们的复合。容易验证，如上定义的运算有以下性质：







只要以上等式的一端有意义。

### 3.2.3伴算子

定义 设和为定义在一定函数空间内的线性（微分）算子，若对于该函数空间内的任意函数和，恒有

 即 

则称是的伴算子[6]。

若为微分算子，于是



所以，当和都满足边界条件时，的伴算子是。

如果是的伴算子，则对于任意函数和也有



所以，也是的伴算子。

### 3.2.4自伴算子

定义 若算子的伴算子就是它本身，则称是自伴算子。

若是自伴算子，则对于该函数空间内的任意函数和，恒有

 即 

定义 设为自伴算子，则方程



称为自伴算子的本征值问题。

自伴算子的本征值问题具有一下几个重要的基本性质：

1. 自伴算子的本征值必然存在。本征值有无数多个，构成可数集。
2. 自伴算子的本征值必为实数，且构成可数集。
3. 自伴算子的本征函数具有正交性，即对应不同本征值的本征函数一定正交。
4. 自伴算子的本征函数（的全体）构成一个完备函数组，即任意一个在区间中有连续二阶导数、且满足和自伴算子相同的边界条件的函数，均可按本征函数展开为绝对而且一致收敛的级数



其中

。

特别是，如果本征函数是归一化的，则上式分母为1，展开形式更加简单。

算子的自伴性总是和一定的函数空间联系在一起的。通常，我们总是要求函数定义在给定的区间上，要求函数具有足够的连续性，（例如，对于二阶微分算子，就要求函数的二阶导数连续，至少分段连续；如果是无界区间，则要求函数平方可积），我们实际上总是限于希尔伯特空间。并且，还要求函数满足一定的（齐次）边界条件，即总是局限在希尔伯特空间中的特定子空间内。绝不能脱离边界条件的约束来讨论算子的自伴性。一个算子，相对于某一个函数是自伴的，但相对于另一个函数，就可能不是自伴的[6]。

伴算子也叫共轭算子，自伴算子也叫自共轭算子。算子也叫算符。量子力学的基本假设中已经提到，要求可观测量用一个线性厄米算符表示。一般认为厄米算符就是自伴算子（自共轭算子），按着自伴算子的数学性质进行数学运算（实际上两者有微小区别，数学上已证明，自共轭算符一定是厄密算符，反之不然。自共轭算符不一定具有完备的本征函数组[7]）。所以量子力学中关于算符的各种运算，比如加法、乘法、乘幂以及算符的函数，还有算符的复共轭、转置、厄米共轭等都是根据泛函分析里有关算子的数学性质得出的。

# 第4章 量子力学中泛函分析的应用

由上面介绍的数学知识可知，自伴算子的本征函数组构成完备函数系，即满足上述条件的函数均可在该函数系中展开。这也正如量子力学的假设中提到的，对应于可观测量的厄米算符的所有本征态构成希尔伯特空间中的正交归一的完备函数系。任意一个态矢量都可以由该算符的本征态展开。

## 4.1量子态的矩阵表示

假设某一力学量的厄米算符为，本征值为,本征方程为

 （）

为力学量的本征函数系，也就是在表象下的基矢，不妨用狄拉克符号表示为。那么对于任意一个量子态可以展开为：



由基矢的正交归一性，可知



它表示在基矢上的“投影”。当所有都给定，就给定了一个态，所以这组数就是态在表象中的表示。排成列矢为：



此即量子态的矩阵表示形式[1]。

## 4.2算符

已知



设算符作用到态矢量（已归一化）上，使之变为态（已归一化），，则





两边乘左，取内积可得



假设为力学量的本征函数系，则即为算符在表象下的矩阵元。

故关系式



可以写成矩阵的形式如下：

。

薛定谔方程的矩阵表示



为哈密顿算符在表象中的矩阵元[1]。

## 4.3本征方程



可变为



两边左乘取标积，并假设波函数已归一化，得



所以可得



这既是的本征方程在表象中的形式，它是线性齐次代数方程组，有非平庸解的充要条件为



即



## 4.4平均值

矩阵形式的平均值为





# 第5章 后序

在1926年左右，出现了两种量子物理的理论，即海森堡、波恩和约当的矩阵力学和薛定谔的波动力学。1926年，薛定谔第一个证明两者的等价性，虽然薛定谔的证明在数学上不够严谨。稍后狄拉克和约当给出了更为严谨的证明。但是他们的证明都使用了当时在数学上存在疑问的狄拉克delta函数。1927年冯·诺依曼严格地证明了波动力学和矩阵力学的等价性。在这些证明过程中，尤其是冯·诺依曼的证明，量子力学被构建在无穷维可分离的[希尔伯特空间](http://zh.wikipedia.org/wiki/å¸å°ä¼¯ç¹ç©ºé´" \o "希尔伯特空间)之中。冯·诺依曼在其中引入[勒贝格](http://zh.wikipedia.org/wiki/åè²æ ¼" \o "勒贝格)测度下的平方可积函数作为一组基。波动力学被视为量子力学在这一组基下的实现。1930年[保罗·狄拉克](http://zh.wikipedia.org/wiki/ä¿ç½Â·çæå" \o "保罗·狄拉克)出版了他的著作《量子力学原理》（Principles of Quantum Mechanics），这是整个[科学史](http://zh.wikipedia.org/wiki/ç§å­¦å²" \o "科学史)上的一个里程碑之作。狄拉克在书中引入了此后被广泛应用的左右矢记号和狄拉克delta函数。从而量子力学可以表示为不依赖特定基的形式。量子力学的数学基础是由[埃尔温·薛定谔](http://zh.wikipedia.org/wiki/åå°æ¸©Â·èå®è°" \o "埃尔温·薛定谔)，[保罗·狄拉克](http://zh.wikipedia.org/wiki/ä¿ç½Â·çæå" \o "保罗·狄拉克)，[帕斯库尔·约当](http://zh.wikipedia.org/wiki/å¸æ¯åºå°Â·çº¦å½" \o "帕斯库尔·约当)和[约翰·冯·诺伊曼](http://zh.wikipedia.org/wiki/çº¦ç¿°Â·å¯Â·è¯ºä¼æ¼" \o "约翰·冯·诺伊曼)相继建立和严格化的。

## 参考文献

[1] 曾谨言.量子力学卷一[M].北京：科学出版社，2007:121-272

[2] A.Messiah,Quantum Mechanics[M],vol.1,p,188

[3] 孙永生,王昆扬.泛函分析讲义[M].北京：北京师范大学出版社，2007,59-60

[4] A.H.柯尔莫戈洛夫，C.B.佛明.段虞荣，郑洪深，郭思旭.函数论与泛函分析初步[M].北京：高等教育出版社，2006，1-200

[5] 李梧龄.组合希尔伯特空间和\*代数[J].自然杂志，1987，10，6：407-412

[6] 吴崇试.数学物理方法[M].北京：北京大学出版社，2003:276-284

[7] 陶宗英,谈量子力学的数学基础[J]. 数理统计与应用概率,1998,9,13:247-250