西安交通大学
泛函分析, 2022 年春

泛函分析大报告
——算子与量子力学

欧阳鑫健　4121156012
xinjian.ouyang@student-cs.fr

2022 年 6 月

摘　要

本文结合泛函分析课程中的线性算子理论，说明算子（算符）在物理学，特别是量子力学中的应用。本文还指出了数学上的算子和物理上的算符的不同之处。

关键词：算子, 量子力学，泛函

目录

1　前言

在数学领域里，算子是一种映射，一个向量空间的元素通过此映射（或模）在另一个向量空间（也有可能是相同的向量空间）中产生另一个元素。算子对于线性代数和泛函分析都至关重要，它在纯数学和应用数学的许多其他领域中都有应用。在泛函分析中，研究赋范线性空间上的算子和泛函的性质，特别是 Banach 空间上的 (线性) 算子和泛函的性质，是 (线性) 泛函分析的核心内容。线性泛函分析中的许多定理，在计算数学、微分方程、随机过程等应用学科中也有重要意义。

物理学上的算符有别于数学上的算子，但很大程度上借鉴了数学上的算子概念，两者的英文都是 operator。物理学上的算符和数学上的算子本质上都是一种映射。算符作用于物理系统的状态空间，使得物理系统从某种状态变换为另外一种状态。这变换可能相当复杂，需要用很多方程式来表明，假若能够使用算符来代表，可以更为简单扼要地表达论述。一般而言，在经典力学里的算符大多作用于函数，这些函数的参数为各种各样的物理量，算符将某函数映射为另一种函数。这种算符称为“函数算符”；在量子力学里的算符称为“量子算符”，作用的对象是量子态。量子算符将某量子态映射为另一种量子态 [1]。

本文作为泛函分析的大报告，结合泛函分析的课程知识和自己的科研学习体会，着眼于讲述泛函分析课程中的线性算子理论，以及算子理论在量子力学领域的应用。文章分为四个部分，第一部分是“前言”，第二部分给出了算子的数学定义和数学上的例子，第三部分讲述了算子在量子力学中的应用，最后第四部分给出了本文的总结。

2　数学上的算子

2.1　算子的数学定义

算子的数学定义如下：

定义 [2]：设 U、V 是两个向量空间。从 U 到 V 的任意映射被称为算子。令 V 是域 K 上的向量空间。我们可以定义包含所有从 U 到 V 算子的集合上的向量空间结构（A 和 B 是算子）：

$$(A+B)\mathbf{x} := A\mathbf{x} + B\mathbf{x}, (\alpha A)\mathbf{x} := \alpha A\mathbf{x} \tag{1}$$

对所有 $A, B : U \to V$，$\mathbf{x} \in U$ 和 $\alpha \in K$。

从一个向量空间到自身的算子构成一个辛结合代数:

$$(AB)\mathbf{x} := A(B\mathbf{x}) \tag{2}$$

单位元是恒等映射（通常记为 E, I 或 id）。

线性算子是最常见的算子，也是课堂上重点讲授的，因此本文不详述线性算子的定义和相关定理。线性算子的重要性在于它是向量空间之间的态射。在有限维情形下，线性算子可以由矩阵表示。线性算子在无限维情形也起着重要作用，在无限维情况下的对线性算子的研究被称为泛函分析 [2]。在物理中用的比较多的是线性算子。

从算子的定义出发，还可以延伸出有界算子、算子范数等概念，这里不一一赘述。值得指出的是，泛函也是一种算子，它是将向量空间映射到其底域的算子。广义函数理论和变分法是泛函的重要应用。两者对理论物理都非常重要。下节介绍算子的一些应用。

2.2 算子应用举例

算子作为一种数学映射，在几何、概率论、微积分和信号处理中应用广泛。

1. **微积分中的算子**: 从泛函分析的角度来说，微积分是研究两个线性算子：微分算子 $\frac{d}{dt}$ 和不定积分算子 $\int_0^t$。
2. **傅立叶变换和拉普拉斯变换**: 信号处理中的各种数学变换，也可以表示成算子的形式。傅立叶变换是一种积分算子，将一个时域上的函数转换为频域上的函数，拉普拉斯变换则是另一种积分算子，用于简化求解微分方程的过程。
3. **标量和向量场上的基本算子**: 梯度算子、散度算子和旋度算子是向量微积分的三个主要算子。分别表示为 $Grad : \nabla, Div : \nabla\cdot$ 和 $Curl : \nabla\times$。

3 算子和量子力学

3.1 算子与算符

数学上的算子和物理学中的算符本质上都是一种映射，两者并无本质区别，只是在应用上有不同。在算子的作用下，一个向量空间的元素在另一个向量空间（也有可能是相同的向量空间）中产生另一个元素；而算符作用于物理系统的状态空间，使得物理系统从某种状态变换为另外一种状态。

量子力学是 Hilbert 空间的物理。Hilbert 空间，即完备的内积空间，是有限维欧几里得空间的一个推广，使之不局限于实数的情形和有限的维数，但又不失完备性（而不像一般的非欧几里得空间那样破坏了完备性）。Hilbert 空间是泛函分析的核心概念之一，它为基于任意正交系上的多项式表示的傅立叶级数和傅立叶变换提供了一种有效的表述方式。

在量子力学中，系统的观测量用 Hilbert 空间的算符表达，算符的运算规则由物理条件确定。换句话说，量子力学在数学上是一种算符理论，观测量用厄米算符表示，观测量的关系是算符关系 [3]。算符理论简化了物理关系的表示，从而使得物理框架更加简洁、精致，物理意义更加直观。

线性算子可看作是“矩阵”概念的推广，实际上，在量子力学的实际计算中，算符就是以矩阵的形式出现的。量子系统的量子态可以用态向量设定，态向量是向量空间的单位范数向量。在向量空间内，量子算符作用于量子态，使它变换成另一个量子态。由于物体的态向量范数应该保持不变，量子算符必须是厄米算符。假若变换前的量子态与变换后的量子态，除了乘法数值以外，两个量子态相同，则称此量子态为本征态，称此乘法数值为本征值 [1]。本文不对量子理论作过多的说明，只展示一些量子力学中的算符，便于读者对于算子理论在物理上的应用有初步的认识。

3.2 量子力学中的算符

假设物理量 O 是某量子系统的可观察量，其对应的量子算符表示为在对应的物理量符号上加上尖角号，即 $\hat{O}$。在量子力学中，算符实际上定义了一类运算规则。量子力学中的常见算符以表格形式整理如图 1。

可以看出，将算符理论引入量子力学框架，极大地简化了公式的表达，使理论更加简洁、优美、直观，而不至于迷失于纷繁复杂的关系式中，阻碍了对物理内涵、物理图像的理解。

另外，量子力学中的大部分算符，如位置算符、动量算符、能量算符，都是无界算子。无界算子的概念提供了用于处理量子力学中无界可观测量的一个抽象框架。无界算符并不代表一定无界，可以被理解为“无需有界”，或者“不一定有界”，这在物理中是适用的。

算符名称	直角坐标系分量表示	向量表示
位置算符	$\hat{x} = x$ $\hat{y} = y$ $\hat{z} = z$	$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$
动量算符	一般状况 $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ $\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$ $\hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$	一般状况 $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$
	电磁场 $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - qA_x$ $\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} - qA_y$ $\hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} - qA_z$	电磁场（$\mathbf{A}$是磁矢势） $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla - q\mathbf{A}$
动能算符	平移运动 $\hat{T}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ $\hat{T}_y = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ $\hat{T}_z = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}$	平移运动 $\hat{T} = \hat{T}_x + \hat{T}_y + \hat{T}_z$ $= \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2$
	电磁场 $\hat{T}_x = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - qA_x\right)^2$ $\hat{T}_y = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y} - qA_y\right)^2$ $\hat{T}_z = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z} - qA_z\right)^2$	电磁场（$\mathbf{A}$是磁矢势） $\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}}}{2m}$ $= \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})\cdot(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})$ $= \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2$
	旋转运动（I是转动惯量） $\hat{T}_{xx} = \frac{\hat{J}_x^2}{2I_{xx}}$ $\hat{T}_{yy} = \frac{\hat{J}_y^2}{2I_{yy}}$ $\hat{T}_{zz} = \frac{\hat{J}_z^2}{2I_{zz}}$	旋转运动 $\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{J}}\cdot\hat{\mathbf{J}}}{2I}$
势能算符	N/A	$\hat{V} = V(\mathbf{r}, t)$
总能量算符	N/A	含时位势： $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ 不含时位势： $\hat{E} = E$

图 1: 量子力学中的常见算符, 节选自 [2]

4 总结

线性算子理论是泛函分析的重要部分，在物理中也有许多重要应用。只不过，数学上的算子在物理上是以“算符”的名义出现的。在量子力学里，算符的功能被发挥得淋漓尽致。量子力学的数学表述得益于于算符的概念，整个量子力学的框架也是建立在 Hilbert 空间上的。基于此，本文简要介绍了算子的定义，并重点说明了算子（算符）在在量子力学中的应用，试图使读者体会到泛函分析这一抽象的数学学科在物理中的具体应用。

参考文献

[1] 维基百科. 算符 — 维基百科, 自由的百科全书, 2022.

[2] 维基百科. 算子 — 维基百科, 自由的百科全书, 2022.

[3] 王正行. 简明量子场论. 北京大学出版社, 2020.