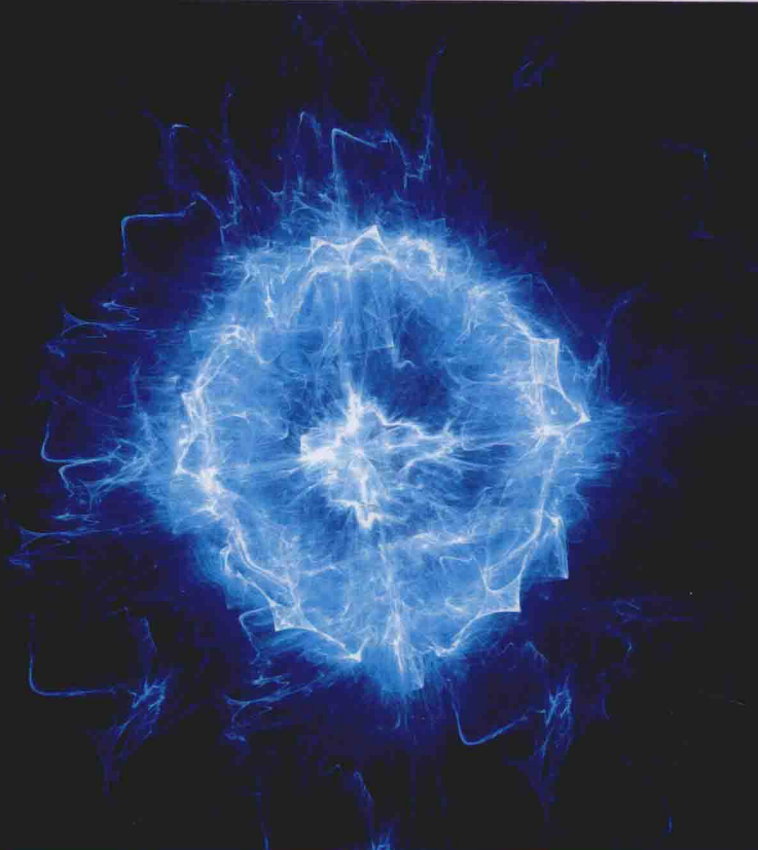




量子力学精髓简学

Brief Approaches to
The Essence of Quantum Mechanics

范洪义 著



上海交通大学出版社
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY PRESS

量子力学律髓简学

范洪义 著



上海交通大学出版社
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY PRESS

内容提要

本书向初学者提供一个能快速习惯量子力学律髓的读本,它从坐标-动量的基本对易关系出发,以波-粒二象为准绳、以粒子产生和湮灭的机制为例,至理简明地引入 Dirac 符号和量子力学表象,使读者能较容易地了解量子力学的最顺畅有效的“语言”——Dirac 符号法和作者创造的有序算符内的积分理论(Dirac 符号的“语法结构”),并能看到其在量子光学、量子信息和经济物理学等方面的新应用,从而较深入地熟悉和掌握量子力学的程式和习惯,在思维模式和欣赏品味等方面融入“量子社会”。本书的阐述风格别致,物理玄机尽量一语道破,含蓄撩人有待探索的则一笔带过,留给读者进一步思考的空间。就数理推导而言,所用方法新颖明晰、简约严密、体现 Dirac 符号法深层次的美而引人入胜。

本书既可作为初学者的教材,也向研究者提供了学研结合的范例,不啻为 Dirac《量子力学原理》的补充读物。本书既适合大学生、研究生学习,也可供中学教师和资深研究人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学律髓简学/范洪义著. —上海:上海交通大学出版社,2015

ISBN 978-7-313-13736-4

I. ①量… II. ①范… III. ①量子力学 IV. ①0413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 215908 号

量子力学律髓简学

著 者: 范洪义

出版发行: 上海交通大学出版社

邮政编码: 200030

出 版 人: 韩建民

印 制: 昆山市亭林印刷有限责任公司

开 本: 787mm×960mm 1/16

字 数: 240 千字

版 次: 2015 年 12 月第 1 版

书 号: ISBN 978-7-313-13736-4/O

定 价: 39.00 元

地 址: 上海市番禺路 951 号

电 话: 021-64071208

经 销: 全国新华书店

印 张: 13.75

印 次: 2015 年 12 月第 1 次印刷

版权所有 侵权必究

告读者: 如发现本书有印装质量问题请与印刷厂质量科联系

联系电话: 0512-57751097

前言

量子现象(如太阳辐射、光电效应和亮线光谱等)与人们的普通常识相悖,是不能用经典力学解释的,这就给人以高深莫测之感,加之量子理论本身又较抽象,使得不少学人视为畏途。诚如天才物理学家费曼曾无可奈何地说过的那样,“没有一个人懂量子力学,我认为这样说并不冒风险,要是你有可能避开的话,就不要老是问自己‘怎么会是那个样子的呢?’……”。尽管量子理论抽象难学,但由于随着时代的进步,宏观量子现象不断呈现,量子论的应用硕果在现实生活中已经无处不在,想了解它的人日趋增多,量子论的基本概念迟早要“飞入寻常百姓家”。

想让别人了解一个难懂的学问时,通常是列举他已经有的知识做比喻,因为拿已知的事情做类比,即便是较深奥的问题也容易使人理解。但在量子力学框架内想找到与经典力学那样相似而易懂的例子实在不容易,即便是想从日常生活司空见惯的现象中,找出涉及量子力学现象的“引子”也难,也许以下四个例子可以作为开场白,一是北极熊的皮毛为什么是白色的?二是夜夜在篝火边与朋友谈话,脸不会变黑,而在海滨日光浴却能晒黑皮肤,这又是为什么呢?三是为什么海水是蓝色的?四是我国古代神话“后羿射日”与物理史上的“紫外光灾难”有什么相似之处?

然而即使能以科普的方式来解释这两个问题,大多数人对博大精深的量子论还是望而生畏。如何让更多有兴趣的人在短时间内了解量子力学,习惯量子的基本语言(如波函数、能级、跃迁、量子化和量子纠缠等)后融入“量子社会”中,笔者经过半个世纪的自学与探索,认为作为量子力学的启蒙读本,理解事情是次要的。如当我向别人解释什么是“量子化”时,即便是我这样解释,“量子化是指辐射和物质之间的能量交换正比于辐射的频率,其比例因子是一个自然界的常数——普朗克常数”,听者也会觉得抽象。所以说,在“量子社会”中习惯事情是第一位的。在“经典力学社会”里耳濡目染多年的人们学习量子力学需经历一个习惯的过程,因此有必要向初学者提供一本能快速习惯量子力学律髓(章律之精髓)的读物。

就像从事文学的人如果缺乏语感就写不好文章一样,初学者应该先了解量子

力学的用语,即 Dirac 符号。胡适先生说:“凡成一种科学的学问,必有一个系统,绝不是一些零碎堆砌的知识。”如果学生们一开始就能径以 Dirac 符号为其思想之表象,不必要处处“译”成函数,那么就有望学到一个系统。但是,Dirac 符号本身又是抽象的,人们很难知道它是怎么想出来的,即便是读他的书《量子力学的原理》,也会有一头雾水的感觉。直到 Dirac 70 岁时,人们才从他的一次演讲中:“……尝试建立一个有数学美的原理,我们可能还不知道这方程的物理,可是具有极致的美”而初见端倪。从这个意义上说,“量子论本质上是数学的……”(普朗克语)。

本书根据作者自学量子力学的体会和长期科研中积累的经验所著,向读者介绍有序算符内的积分理论(IWOP 技术),该理论凸显了 Dirac 符号内在的美,可以帮助读者迅速熟悉量子论的用语和表象变换(“常识”),从而较自然地接受量子论,减少神秘感。在习惯了量子力学语言后,习惯成自然,就有望达到驾轻就熟的水平。有序算符内的积分理论的“魅力”还在于:它自身有逐步展开的能耐,起初只是为求解特定问题而想出来的方法会有不少意想不到的新用途和新结果。

爱因斯坦说:“物理所追求的是——以一个尽可能简单的思想系统,统合所有观察到的事实”,可谓“千秋几人圣,万象壹式描”,本书作者遵循这个教导着手写作。具体说,我们以量子力学坐标-动量的基本对易关系 $[Q, P] = i\hbar$ 为起点,以波粒两象为准绳、以粒子产生和湮灭的机制为例引入量子力学的“语言”——Dirac 符号,建立粒子数态表象的概念。这样做,可以使得读者容易理解和接受 Dirac 符号。再用有序算符内的积分理论(IWOP 技术)导出相干态表象,继之用算符厄米多项式方法,自然地过渡到坐标表象和动量表象,从而避免了它们出现的突兀性。有序算符内的积分理论把态矢量、表象与算符以积分相联系,又把表象积分完备性与算符排序融合,不但可以导出大量有物理意义的新表象和新么正算符,而且提供了从经典变换过渡到量子力学么正变换的自然途径,使得原本因抽象而“干涩”的量子力学表象与变换论有了生气与灵动,成为一个严密的、自洽的、内部“经脉疏通、气息调匀”的数理系统,就像是从一幅山水画中既听到了潺潺水流,又感到了风云叱咤。作者相信,在懂得了对量子力学的 ket-bra 算符积分的 IWOP 技术以后,就可进一步体会到 Dirac 符号法“随物赋形”的韵律和美感,对于量子论的结构就会有较深刻的理解,原本底气不足的读者对于现行量子力学数理基础正确性的信心就会大大增强,对于探索量子世界奥秘就会兴趣盎然。

“*A physical theory must possess mathematical beauty.*”这是 Dirac 探索物理本质的信条,也是作者在写作风格方面所追求的。本书中关于各种表象的陈述别有新意,关于海森堡方程转换为薛定谔方程的阐述另辟蹊径,所介绍的相干态、压

缩态、纠缠态和角动量理论的新进展,解决了不少多年来悬而未决的课题(例如,如何导出基本量子力学算符排序的简洁公式,如何求出扩散通道的量子主方程和原子体系的量子主方程的算符和形式解),有助于读者提高发现问题和分析问题的思维能力,尽快进入科研前沿。

由于此书介绍量子力学的方式与以往的教科书多有不同,“步远量思绪,暮迟失景深”,可能会有不当和疏漏之处(尤其是作者没有独到体会的内容都没有写入本书),但愿读者能“失之东隅,收之桑榆”吧。

本书在写作过程中自始至终得到吴泽同学的帮助,深表感谢。而本书的定稿正值 2015 年清明节,望着窗外淅淅沥沥的雨从阴沉沉的天上落下,值伤辰而孤念,要是父母九泉下感知他们的儿子能写出一些不朽之书来,会收到多少宽慰呢。

目 录

1 Dirac 符号 粒子数表象、海森堡方程和薛定谔方程	1
1.1 以粒子的产生和湮灭机制为例引入 Dirac 符号 / 1	
1.2 谐振子本征态的集合——“量子库” / 2	
1.3 左矢和右矢的“相引”与“相揖” 表象及其变换 / 4	
1.4 用 Dirac 符号表述不确定关系 / 6	
1.5 用 Dirac 符号表述量子跃迁 / 8	
1.6 海森堡方程的引入 / 9	
1.7 相算符作为谐振子海森堡方程的解 / 10	
1.8 由法拉第定理决定的介观电路的数-相量子化方案 / 12	
1.9 导出与海森堡方程等价的薛定谔方程 / 13	
2 结合薛定谔算符与海森堡方程求能级	16
2.1 不变本征算符方法 / 16	
2.2 不变本征算符方法解格点链哈密顿的能级 / 17	
2.3 不变本征算符方法解双原子线性链的振动模式 / 20	
3 相干态表象和有序算符内的积分理论	23
3.1 量子谐振子的极小不确定态——湮灭算符的本征态 / 23	
3.2 有序算符内的积分理论 $ 0\rangle\langle 0 $ 的正规乘积形式 / 26	
3.3 Fock 空间的划分 / 27	
3.4 相干态的完备性导出新法 / 28	
3.5 混沌光场及其熵 / 29	
3.6 相干态在研究量子扩散方程的应用 / 30	
3.7 用相干态表象导出对应菲涅耳变换的算符 / 32	

3.8 一类阻尼振子的求解 / 34

4 坐标表象和动量表象的导出与应用 36

4.1 算符厄米多项式方法 / 36

4.2 从粒子数表象过渡到坐标表象 量子力学概率假设 / 38

4.3 坐标-动量中介表象 / 41

4.4 求粒子态坐标表象波函数的简洁方法 / 42

4.5 从粒子数表象过渡到动量表象 / 43

4.6 动量算符 P 在 $\langle q |$ 表象的表示 / 44

4.7 求粒子态的动量表象波函数的简洁方法 / 46

4.8 用 IWOP 技术给出分数傅里叶变换的量子力学对应 / 47

4.9 用 Dirac 符号描述小波变换 / 48

5 相空间准概率分布函数和 Weyl-Wigner 量子化 50

5.1 完备性 $\iint_{-\infty}^{\infty} \frac{dpdq}{\pi} : e^{-(q-Q)^2 - (p-P)^2} : = 1$ 的应用 / 50

5.2 Weyl-Wigner 量子化与 Weyl 排序 / 51

5.3 Wigner 算符的 Radon 变换 / 53

5.4 量子 Tomography 与非涅耳变换 / 54

5.5 Wigner 函数的非正定性及如何变正定 / 55

5.6 $Q-P$ 排序 ($P-Q$ 排序) 与 Weyl 排序之间的关系 / 57

6 正规乘积算符内积分法求新压缩态和新压缩变换 59

6.1 从 $|p\rangle$ 到 $|\mu p\rangle$ 的压缩变换 / 59

6.2 压缩混沌光场密度算符作为正规排序的正态分布 / 62

6.3 双模压缩情形 / 64

6.4 单-双模组合压缩算符和压缩态 / 67

6.5 从单-双模组合压缩光场导出新光场密度算符 / 68

6.6 分数压缩变换 / 70

6.7 分数压缩变换的可加性 / 72

6.8 用有序算符内的积分法求与混合态相应的纯态 / 74

6.9 一类兼含压缩和混沌的双模光场的部分约化: 温度效应 / 76

7 坐标-动量算符之幂次的排序互换	80
7.1 双变量厄米多项式的引入 /	80
7.2 化 $P^n Q^m$ 为 Q 在左、 P 在右 /	82
7.3 化 $Q^m P^n$ 为 P 在左、 Q 在右 /	82
7.4 化 $P^n Q^m$ 为 Weyl 排序 /	83
7.5 化 $P^n Q^m$ 为 $\mathfrak{P}$ -排序 /	84
7.6 化 $Q^m P^n$ 为 Weyl 排序 /	84
7.7 化 $P^n Q^m$ 为 Ω -排序 /	85
8 用 Ω -排序、 $\mathfrak{P}$ -排序算符内的积分技术对 ket-bra 算符积分	86
8.1 Ω -排序或 $\mathfrak{P}$ -排序算符内的积分技术 /	86
8.2 多模指数算符 $e^{-iP_L \Delta_{lk} Q_k}$ 的 Ω -排序和 $\mathfrak{P}$ -排序展开公式 /	90
8.3 单-双模组合压缩算符的简洁形式 /	93
8.4 $\left \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{bmatrix} \right\rangle \rightarrow \left \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{bmatrix} \right\rangle$ 所映射的广义压缩算符 /	94
8.5 从双模压缩算符剥离出单模压缩算符 /	95
8.6 用 Ω -排序算符内的积分技术求菲涅耳算符 /	97
8.7 玻色产生-湮灭算符函数化为 $\mathfrak{P}$ -排序、 Ω -排序或 Weyl 排序的一般公式 /	99
9 纠缠态表象的发现与应用	102
9.1 从相干态表象的正态分布形式到纠缠态表象的发现 /	102
9.2 纠缠态表象中的关联振幅-相纠缠关系 /	104
9.3 纠缠态表象作为双模压缩算符的自然表象 /	106
9.4 质量相关的纠缠态表象 /	108
9.5 纠缠态表象的 Ω -排序、 $\mathfrak{P}$ -排序 /	109
9.6 双模压缩算符的 $\mathfrak{P}$ -排序展开 /	111
9.7 相干-纠缠态及两体置换-宇称算符 /	113
9.8 纠缠态表象和复分数 Fourier 变换 /	117
9.9 纠缠态表象和分数压缩变换 /	118
9.10 用纠缠态表象解量子扩散方程 /	121

- 9.11 粒子数态在扩散通道的演化——拉盖尔多项式-混沌光场 / 124
- 9.12 纯粒子数态在扩散通道的演化——二项-负二项组合态 / 127
- 9.13 在扩散通道的光子计数概率演化公式 / 130
- 9.14 光场在振幅衰减通道中的演化 / 134
- 9.15 双模压缩真空态的单模振幅衰减 / 137
- 9.16 振幅衰减主方程的积分形式解 / 138
- 9.17 在衰减通道的光子计数概率演化公式 / 141
- 9.18 Wigner 算符和正定化的 Wigner 算符在振幅衰减通道中的演化 / 143
- 10 有序算符内的积分理论研究量子转动 146
 - 10.1 用 $\mathcal{P}$ -排序算符内的积分理论导出 $\int d^3\mathbf{x} |\mathbf{R}\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}| = e^{(-iP)_t(\ln\mathbf{R})_{lk}X_k} / 147$
 - 10.2 计算 $\ln\mathbf{R}$ / 148
 - 10.3 量子转动算符 $\exp[i\psi\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}]$ 的出现 / 150
 - 10.4 用角动量算符的玻色实现显示其量子化 / 152
 - 10.5 关于转动算符的几个重要恒等式 / 154
 - 10.6 角动量相干态的引入 / 158
 - 10.7 角动量相干态的完备性预示存在半整数角动量 / 160
 - 10.8 角动量相干态与纠缠态, 新函数空间 / 161
 - 10.9 新函数空间的正交完备性 / 163
 - 10.10 用量子压缩的观点看量子转动——角动量算符的新玻色实现 / 164
 - 10.11 关于角动量算符的指数函数的分解定理 / 165
 - 10.12 分拆 $\exp[h(a^\dagger a - b^\dagger b) + ga^\dagger b + kb^\dagger a] / 166$
 - 10.13 将参量放大器作为角动量系统处理 / 168
 - 10.14 用有序算符内的积分理论讨论光分束器如何测量光场正交分量 / 170
- 11 量子摆理论 173
 - 11.1 量子摆的哈密顿量和海森堡方程 / 173
 - 11.2 摆的角动量的本征态 / 175
 - 11.3 摆的量子压缩机制 / 177

12 电子在均匀磁场中运动的纠缠态表象	178
12.1 电子坐标的本征态 / 178	
12.2 电子正则动量的本征态 / 179	
12.3 缓变磁场情况下的绝热不变量 / 181	
13 描述金融市场演化的量子力学状态方程的建立	183
13.1 金融市场状态演化方程的建立 / 183	
13.2 金融市场演化方程的解 / 184	
13.3 单一投资项目在金融市场中的演化——二项-负二项纠缠态的 提出 / 187	
13.4 单一项目投资在金融市场中的收益 / 188	
13.5 分析和讨论 / 189	
14 两能级原子辐射的描述	191
14.1 描述两能级原子辐射的主方程求解的纠缠态方法 / 191	
14.2 方程(14.21)解的 $\sum_{m,n=0} M_{m,n} \rho_0 M_{m,n}^\dagger$ 形式 / 195	
结语 1 学研量子力学贵在推理	201
结语 2 有序算符内的积分理论之前景	203
结语 3 读杨慎的《东流不溢》对学量子力学的启示	204
参考文献	205
索引	206

1 Dirac 符号 粒子数表象、海森堡方程和薛定谔方程

1.1 以粒子的产生和湮灭机制为例引入 Dirac 符号

历史上,普朗克在对黑体辐射的研究中发现了其辐射能量 ϵ 是不连续的,而与光的频率成比例, $\epsilon = \hbar\omega$, $\hbar = 1.057 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{s}$ (尔格·秒)是一个自然界的常数。不但如此,普朗克还将光描述为电磁能在一组电磁振子中的分布,而提出了黑体辐射公式。这一划时代的发现不但解决了“紫外灾难”问题带来的困惑(即任何有限能量体系都不能有过多的高频电磁振子存在),而且用纯理论方法建立了自然界的一个新标度(能量标度),顺理成章地提供了原子半径的表达式 $\frac{\hbar^2}{me^2} =$

$\frac{e^2}{mc^2} \left(\frac{\hbar c}{e^2} \right)^2$, $\frac{\hbar c}{e^2} = 137.03$, 为精细结构常数。 $\hbar$ 的发现使人们对物理世界的基本认识焕然一新,例如,它还自然地导致测量坐标和动量的不确定关系。事实上,一旦承认存在有能量子,就不能排除测量过程对被测现象的影响。例如,为了精确地测量原子中电子的坐标,必须用波长 λ 很短(即频率 ω 很高)的光子照射电子,以免衍射效应使得电子的图像模糊。而且,光作用于电子上的能量(或动量)应当小得可以不计,以免使得电子的位置和状态发生改变。但是很遗憾,用频率 ω 很高的光子照射电子,电子从量子流吸收的能量不可能小于 $\hbar\omega$ ($\hbar\omega = E$), 电子接收的动量必然大到 $\frac{2\pi}{\lambda} \hbar$ 。可见再精密的仪器和测量也无法回避这一不确定原理。这种不确定性使得量子力学的先驱者们意识到,必须用算符来描述可观测量,并引入期望值和方差的概念,这又预示了量子力学的概率性的特性。

继 1900 年普朗克以后,出现了爱因斯坦的光电效应解释(包括光的吸收、发射和传播的量子论)、玻尔-索末菲的原子定态轨道理论(圆满解释了氢光谱线(亮线

光谱),但此理论与加速电子的辐射理论抵触)、泡利的不相容原理(每一量子态不可能存在多于一个的费米子)、德布罗意的波-粒两象理论,直至 1926 年海森堡放弃研究电子轨道理论而从实验所能观察到的光谱线的频率和强度为研究起点,才与玻恩等揭示了坐标-动量的基本对易关系

$$[Q, P] = i\hbar \quad (1.1)$$

它不但是量子动力学的基础,也是不确定关系的理论源头。它告诉我们, Q 与 P 是不能同时精确地测定的,先测量坐标与先测量动量的两个结果不同。这样一来,处于坐标本征态(精确地测量坐标得 q 值)和处于动量本征态(精确地测量动量得 p 值)都只是理想的情形而不能实现。理想情况下,动量 p 值确定的波是单值平面波 e^{ipq} ,弥散在空间中,所以其 q 值不定;反之,当弥散的波收敛于一个点,如同一个经典意义下的有确定位置的质点,用 Dirac 发明的 δ 函数(称为 Delta 函数)表示,就无谓奢谈确定动量 p 的值。介于这两个理想情况之间的就是一个波包,它是若干个不同 p 值的平面波的叠加。可见坐标本征态和动量本征态的相悖相成反映了德布罗意的波-粒两象性。换言之,波-粒两象与海森堡的不确定原理自洽。值得指出,历史上,海森堡是在爱因斯坦的“正是理论决定什么是可以观察的”启发下,根据“只有能用量子力学的数学程式表示的那些情况,才能在自然界中找到”的基本原则,考虑了同时想知道一个波包的速度和其位置的最佳精度是多少的问题,而奠定不确定原理的。而 Dirac 则发现了 $[Q, P] = i\hbar$ 与经典物理的泊松括号的对应,鉴于坐标与动量不能两者兼顾,他又提出用多种表象(及其变换)来表述量子力学,他引入的符号法现在是量子力学的“语言”。

1.2 谐振子本征态的集合——“量子库”

历史上,海森堡想到对于大轨道上的玻尔原子,轨道频率几乎就等于辐射频率,原子就可被当作一个简谐振子来处理,利用量子公设,他导出了符合光谱线的频率和强度。以海森堡从可观察的光谱线的频率和强度为研究起点的思考模式为楷模,我们鉴于实验能够观察到光的产生和湮灭,觉得要向读者直观地介绍 Dirac 符号,以谐振子的量子化(量子的产生和湮灭机制)为例来阐述是较容易被接受的。这样做也兼顾到了薛定谔的波动力学,即从谐振子的经典振动本征模式容易过渡为量子能级。经典力学中,弦振动是一种典型的谐振子运动,固定弦的两端称为波节,当两端固定的弦的长度为 L ,则弦长必须是振荡波半波长的整数倍。只有这

样,整个弦长正好嵌入整数个半波长。另外,弦的振动有基频与泛频,因此谐振子的量子化既能保持与经典情形类似的特性,又符合德布罗意波的特征。虽然经典力学中没有粒子产生和湮灭的机制,但谐振子的振动可产生波,若将此与德布罗意的波-粒两象性参照,波的产生就对应产生粒子(或牵强地说,粒子伴随着一个波),所以要使理论能描述量子的产生和湮灭,就得把谐振子各种本征振动模式比拟为一个“量子库”。这可用以下方式完成:将经典谐振子的哈密顿量 $h = \frac{1}{2m}p^2 +$

$\frac{1}{2}m\omega^2 q^2$ 加上量子化条件 $[Q, P] = i\hbar$, 过渡为算符

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 Q^2 \quad (1.2)$$

用 Q 、 $\hat{P}$ 的组合定义算符 $a^\dagger$ 和 a :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} Q + i \frac{\hat{P}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) \quad (1.3)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} Q - i \frac{\hat{P}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) \quad (1.4)$$

根据式(1.1)易得

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (1.5)$$

由此可知式(1.2)可因式分解为

$$H = \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad N = a^\dagger a \quad (1.6)$$

鉴于经典谐振子有它的本征振动模式,按整数标记,所以量子谐振子也应有它的本征振动模式,记为 $|n\rangle$ (这个符号是 Dirac 发明的,称为“右矢”), n 是零或正整数, $|n\rangle$ 的集合就是谐振子的“量子库”(当 $n=0$, 仍有 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ 存在,称为零点能,这是经典力学理论所没有的)。把 $|n\rangle$ 是 $\hat{H}$ 的本征振动模式(本征态)这件事记为

$$a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle \quad (1.7)$$

打个比方,把 $|n\rangle$ 看作是一个盛 n 元钱的口袋, $a^\dagger a$ 就表示“数”钱的操作(算符)。具体说,对 $|n\rangle$ 以 a 作用,表示从口袋里取出一元钱, $n \rightarrow n-1$, 再将这一元钱放回口袋去(此操作以 $a^\dagger$ 对 $|n-1\rangle$ 作用表示),口袋里的钱又变回到 n 元,可见取

出一次又放回去相当于“数”钱的操作,口袋里还是 n 元钱。所以 a 是湮灭算符、 $a^\dagger$ 是产生算符,当口袋里没有钱(以 $|0\rangle$ 表示)就无法再从中取钱,所以

$$a|0\rangle = 0 \quad (1.8)$$

从 $a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle$ 这个方程可以解出

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (1.9)$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (1.10)$$

由此又可得到 $|n\rangle$ 是在 $|0\rangle$ 上产生 n 次的结果

$$|n\rangle = \frac{a^{\dagger n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad (1.11)$$

此式容易理解,因为它满足式(1.9)和式(1.10)。

1.3 左矢和右矢的“相引”与“相揖”表象及其变换

Dirac 符号具有“随物赋形”的特点,是理论思维的形象元素。 $|n\rangle$ 的“共轭虚量”记为 $\langle n|$,称为“左矢”,形象地可以看作是 $|n\rangle$ 在一个平面镜中的“虚像”。在有河有桥的地方,我们常看见“水中桥影成一圆”,本来是半圆形的桥补上其在水中的倒影就圆满了,所以把 $\langle m|$ 与 $|n\rangle$ 的“合璧”记为

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} = \begin{cases} 1, & m = n \text{ (比喻一桥和其倒影组成圆形)} \\ 0, & m \neq n \text{ (比喻一桥和另一桥的倒影不能成圆形)} \end{cases} \quad (1.12)$$

可见 $\langle | \rangle$ 表示一个数,或一个函数。左矢和右矢的另一组合是把它们写成 $|A\rangle\langle B|$ 的形式,它表示一个算符(操作),因为将它作用于另一个右矢 $|C\rangle$,得到 $|A\rangle\langle B|C\rangle = \langle B|C\rangle|A\rangle$,这也是一个右矢,因为 $\langle B|C\rangle$ 是一个数。 $|A\rangle\langle A|$ 称为纯态,而

$\sum_l C_l |A\rangle_l \langle B|$ 称为混合态,例如代表混沌光场的算符是 $\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+\frac{1}{2})\hbar\omega} |n\rangle\langle n|$ 。

从外观看, $\langle A|B\rangle$ 是左矢和右矢“相引”,而 $|A\rangle\langle B|$ 是右矢和左矢相互作揖,通俗地说,Dirac 符号“相引”与“相揖”的形式有不同的物理意义。

再从 $\langle n|a^\dagger a|n\rangle = n$, 以及

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n|a^\dagger \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (1.13)$$

可知

$$(a|n\rangle)^{\dagger} = \langle n|a^{\dagger} = \sqrt{n}\langle n-1| \quad (1.14)$$

$\langle n-1|$ 是 $|n-1\rangle$ 的共轭虚量, 所以 $a|n\rangle$ “在镜中” 的共轭虚量是 $\langle n|a^{\dagger}$, 记为

$$(a|n\rangle)^{\dagger} = [\sqrt{n}|n-1\rangle]^{\dagger} = \sqrt{n}\langle n-1| = \langle n|a^{\dagger} \quad (1.15)$$

操作“ $\dagger$ ”称为厄米共轭。量子谐振子的本征态的全体是完备的, 要求

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1 \quad (1.16)$$

称之为完备性关系, 以后我们将证明这确实如此。有完备性关系的态矢集合构成一个表象, 表象的特点是一个算符在它自身的本征态构成的表象中可以用数来描写; 集合 $|n\rangle (n=0, 1, 2, \dots)$ 作为力学量 $a^{\dagger}a$ 的本征函数系, 是抽象空间的一组基矢, 称为粒子数表象(或 Fock 表象)。任一态矢 $|\psi\rangle$ 可以由这组基矢和相应的展开系数表示

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\psi_n \quad (1.17)$$

$\langle n|\psi\rangle = \psi_n$ 称为 $|\psi\rangle$ 在粒子数表象中的波函数。

表象(representation)原指客观事物在人类大脑中的映象, 在量子论中用以描述不同“坐标系”下微观粒子体系的状态和力学量的具体表示形式。表象的功能使得态矢量可以用数来表示, 极大地简化了量子力学的表述, 降低了运算的难度, 节约了人们的思维脑力, 便于人们去理解和深化量子力学的新理论。坐标算符 Q 的本征态 $|q\rangle$ 的集合称为坐标表象, $Q|q\rangle = q|q\rangle$, 态矢量 $|\psi\rangle$ 在此表象中的波函数是 $\langle q|\psi\rangle$ 。历史上, 奥地利物理学家薛定谔首先在德布罗意波的基础上建立了波动方程, $|\langle q|\psi\rangle|^2$ 以波的形式描述了粒子在 q 处出现的概率(此解释为德国物理学家玻恩给出)。

$\langle | \rangle$ 也可用来表示表象变换, 例如用 $\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1$, 就有

$$|q\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|q\rangle \quad (1.18)$$

$\langle q|n\rangle$ 既可以说是粒子数态的波函数, 也代表从 $|n\rangle$ 表象到 $|q\rangle$ 表象的变换, 用 Dirac 符号可以方便地表述变换理论, 而德布罗意波-粒两象性则是引入表象的物理基础。而

不确定原理要求人们从多个表象来认识量子体系。

1.4 用 Dirac 符号表述不确定关系

Dirac 符号也可以从矩阵来理解, 右矢 $|A\rangle$ 代表列矩阵 $\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix}$, 取 $|A\rangle$ 的转置和

复数共轭得到 $\langle A|$, 记为 $(|A\rangle)^\dagger = \langle A|$, 也可用行矩阵 $(A_1^* \ A_2^* \ \cdots \ A_n^*)$ 表示, $|A\rangle$ 的归一记为 $\langle A|A\rangle = 1$, 则

$$\langle A|B\rangle = (A_1^* \ A_2^* \ \cdots \ A_n^*) \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_n \end{pmatrix} = (\langle B|A\rangle)^* \quad (1.19)$$

$\langle A|O|B\rangle$ 是一个数, 令 $O|B\rangle = |C\rangle$, 根据式(1.15)有 $\langle C| = \langle B|O^\dagger$, 所以

$$\langle A|O|B\rangle^* = \langle A|C\rangle^* = \langle C|A\rangle = \langle B|O^\dagger|A\rangle \quad (1.20)$$

厄米操作“ † ”的意思是指它的转置再取复数共轭的结果, 当 $O^\dagger = O$, 称 O 为厄米算符, 这时

$$\langle A|O|B\rangle^* = \langle B|O|A\rangle$$

因为厄米算符的本征值是实数, 量子力学的可观测量都用厄米算符表示。方矩阵简化为算符 $|\rangle\langle|$, 有

$$|A\rangle\langle B| = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix} (B_1^* \ B_2^* \ \cdots \ B_n^*) = \begin{pmatrix} A_1 B_1^* & A_1 B_2^* & \cdots & A_1 B_n^* \\ A_2 B_1^* & A_2 B_2^* & \cdots & A_2 B_n^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_n B_1^* & A_n B_2^* & \cdots & A_n B_n^* \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

从对于方矩阵的求迹可以认识到

$$\text{tr}(|A\rangle\langle B|) = \langle B|A\rangle \quad (1.22)$$