

量子力学数理基础进展

◎ 范洪义 唐绪兵 著

$$(X_1 - X_2)|\eta\rangle = \sqrt{2}\eta_1|\eta\rangle, \quad (P_1 + P_2)|\eta\rangle = \sqrt{2}\eta_2|\eta\rangle$$
$$\eta = \eta_1 + i\eta_2, \quad X_1 = (a + a^\dagger)/\sqrt{2}, \quad X_2 = (b + b^\dagger)/\sqrt{2}$$
$$\int \frac{d^2\eta}{\pi e^\lambda} |\eta e^{-\lambda}\rangle \langle \eta| = e^{a^\dagger b^\dagger \tanh \lambda} :e^{(a^\dagger a + b^\dagger b + 1) \ln \operatorname{sech} \lambda}: e^{-ab \tanh \lambda}$$

中国科学技术大学 精品 教材

量子力学数理基础进展

LIANGZI LIXUE SHULI JICHU JINZHAN

范洪义 唐绪兵 著

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

量子力学创始人之一 Dirac(狄拉克)的符号法是学习量子物理的人所必须习惯的“语言”,它对物理本质的深刻反映在某种程度上超越了时代,它的内涵与美仍然需要进一步的认知. 一如狄拉克本人所言,“符号法……在将来当它变得更为人们所了解,而且它本身的特殊数学得到发展时,它将更多地被人们所采用.”本书提出有序算符内的积分技术,实现了将 Newton - Leibniz(牛顿-莱布尼兹)积分直接用于由狄拉克符号组成的算符以达到发展量子论之数理基础的目的,为量子力学开辟了一个崭新的研究方向,增添了新篇章,不但进一步揭示了 Dirac 符号法的科学美,而且开拓了连续变量纠缠态表象在多个物理领域的新应用,人们对狄拉克符号的认识将“更上一层楼”,达到既知其然又知其所以然的新境界.

Einstein(爱因斯坦)坚持下面的观点:“创造者只能记得最简单的解决办法,并坚持这种简单化同样应该使世界变成可知的世界.”符号法结合我们的新技术和新表象简化了很多物理问题. 本书适合物理系本科生与研究生学习,也值得理论物理学工作者参考与借鉴,极大地提高他们对量子理论的鉴赏能力和科研能力.

图书在版编目(CIP)数据

量子力学数理基础进展/范洪义,唐绪兵著. —合肥: 中国科学技术大学出版社,
2008. 11

(中国科学技术大学精品教材)

“十一五”国家重点图书

ISBN 978 - 7 - 312 - 02173 - 2

I. 量… II. ①范… ②唐… III. 量子力学—高等学校—教材 IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 164367 号

中国科学技术大学出版社

安徽省合肥市金寨路 96 号, 230026

网址: <http://press.ustc.edu.cn>

安徽辉煌农资集团瑞隆印务有限公司印刷

全国新华书店经销

开本: 710×960 1/16 印张: 24 插页: 3 字数: 455 千

2008 年 11 月第 1 版 2008 年 11 月第 1 次印刷

印数: 1—3000 册

定价: 39.00 元

总序

2008年是中国科学技术大学建校五十周年。为了反映五十年来办学理念和特色,集中展示教材建设的成果,学校决定组织编写出版代表中国科学技术大学教学水平的精品教材系列。在各方的共同努力下,共组织选题281种,经过多轮、严格的评审,最后确定50种入选精品教材系列。

1958年学校成立之时,教员大部分都来自中国科学院的各个研究所。作为各个研究所的科研人员,他们到学校后保持了教学的同时又作研究的传统。同时,根据“全院办校,所系结合”的原则,科学院各个研究所在科研第一线工作的杰出科学家也参与学校的教学,为本科生授课,将最新的科研成果融入到教学中。五十年来,外界环境和内在条件都发生了很大变化,但学校以教学为主、教学与科研相结合的方针没有变。正因为坚持了科学与技术相结合、理论与实践相结合、教学与科研相结合的方针,并形成了优良的传统,才培养出了一批又一批高质量的人才。

学校非常重视基础课和专业基础课教学的传统,也是她特别成功的原因之一。当今社会,科技发展突飞猛进、科技成果日新月异,没有扎实的基础知识,很难在科学技术研究中作出重大贡献。建校之初,华罗庚、吴有训、严济慈等老一辈科学家、教育家就身体力行,亲自为本科生讲授基础课。他们以渊博的学识、精湛的讲课艺术、高尚的师德,带出一批又一批杰出的年轻教员,培养了一届又一届优秀学生。这次入选校庆精品教材的绝大部分是本科生基础课或专业基础课的教材,其作者大多直接或间接受到过这些老一辈科学家、教育家的教诲和影响,因此在教材中也贯穿着这些先辈的教育教学理念与科学探索精神。

改革开放之初,学校最先选派青年骨干教师赴西方国家交流、学习,他们在带回先进科学技术的同时,也把西方先进的教育理念、教学方法、教学

内容等带回到中国科学技术大学，并以极大的热情进行教学实践，使“科学与技术相结合、理论与实践相结合、教学与科研相结合”的方针得到进一步深化，取得了非常好的效果，培养的学生得到全社会的认可。这些教学改革影响深远，直到今天仍然受到学生的欢迎，并辐射到其他高校。在入选的精品教材中，这种理念与尝试也都有充分的体现。

中国科学技术大学自建校以来就形成的又一传统是根据学生的特点，用创新的精神编写教材。五十年来，进入我校学习的都是基础扎实、学业优秀、求知欲强、勇于探索和追求的学生，针对他们的具体情况编写教材，才能更加有利于培养他们的创新精神。教师们坚持教学与科研的结合，根据自己的科研体会，借鉴目前国外相关专业有关课程的经验，注意理论与实际应用的结合，基础知识与最新发展的结合，课堂教学与课外实践的结合，精心组织材料、认真编写教材，使学生在掌握扎实的理论基础的同时，了解最新的研究方法，掌握实际应用的技术。

这次入选的 50 种精品教材，既是教学一线教师长期教学积累的成果，也是学校五十年教学传统的体现，反映了中国科学技术大学的教学理念、教学特色和教学改革成果。该系列精品教材的出版，既是向学校五十周年校庆的献礼，也是对那些在学校发展历史中留下宝贵财富的老一代科学家、教育家的最好纪念。

何建南

2008 年 8 月

前　　言

论由 Dirac 符号组成的算符之积分

1. 从 Newton – Leibniz 积分谈起

现代科学始于 17 世纪 Newton – Leibniz 创立的微积分. 尤其是莱布尼兹发明了微分号 d 和积分号 \int , 大大简化了数学的表达方式, 也节约了人们的脑力. 数学家黎曼曾说: “只有在微积分发明之后, 物理学才成为一门科学.” 这以后, 积分学有两个主要的发展方向, 一个是复变函数的围道积分, 另一个是实变函数的勒贝格积分. Newton – Leibniz 积分推动了经典物理的发展. 量子力学是从经典力学“脱胎”而出的, 它虽与经典力学大相径庭, 却又是与之有着千丝万缕联系的一门科学. 由于量子力学中许多物理概念与经典力学的截然不同, 因此量子力学需要有自己的符号, 或是“语言”. Dirac 符号法是量子力学的标准“语言”, 自从 20 世纪初有了量子力学的萌芽, 就有了对于其数学符号的需求, 于是 Dirac 的符号应运而生. 而 Newton – Leibniz 发明微积分时并无 Dirac 符号, 该积分方法可否直接运用于对 Dirac 符号进行呢? 这个问题在量子力学建立后相当长的一段时间内没有得到足够的重视.

符号是一门科学的“元胞”, 是人们用以思考的“神经元”, 是反映物理概念的数学记号. 中国的汉字起源于甲骨文, 它是古代劳动人民从生产实践中抽象出来的象形符号并通过组合而演变成的文字符号(图 1 是殷商的甲骨文, 图 2 是苏美尔的楔形文字的演化, 图 3 和图 4 分别代表阿拉伯数字和拉丁字母的起源和演化, 它们并没有象形的意义, 只是符号而已). 由于思想是没有声音的语言, 当人们在思考时, 心目中的符号便在脑海这张无形无边的“纸”上写字. 例如人们在心算时, 就是在脑海里对阿拉伯数字符号做演算, 因此一套好的记号可以使头脑摆脱不必要的约束和负担, 使精神集

中于专攻. 这就在实际上大量增强了人们的脑力, 使人们的思考容易引入深处和关注问题的症结. 这正如音乐有五线谱和简谱两种记录方式, 但前者比后者要直观、方便

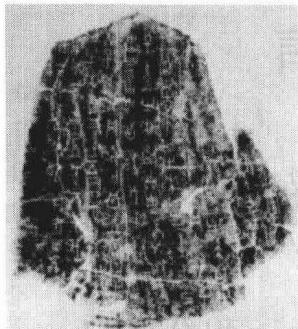


图 1 甲骨文

足	足
星	星
魚	魚
山	山

图 2 楔形文字



图 3 阿拉伯数字

腓尼基	希腊	早期拉丁	晚期拉丁
𐤀	Α	AA	A
𐤁	Β	[Β]	B
𐤂	Ϛ	C	C
𐤄	Δ>D	D	D
𐤅	ĒĒ	E	E

图 4 字母

和科学得多, 所以国际上都采用五线谱. 诚如 Heisenberg 在 1926 年所说: “在量子论中出现的最大困难……是有关语言运用问题. 首先, 我们在使用数学符号与用普通语言表达的概念相联系方面无先例可循; 我们从一开始就知道的只是不能把日常的概念用到原子结构上.” Einstein 也十分重视物理学中符号的正确运用, 他说: “任何写出的、讲过的词汇或语言在我思考的结构中似乎不起任何作用, 作为思维元素存在的物质实体似乎是某些符号和一些或明或暗的想象, 这些想象被‘随心所欲’地再生和组合, ……这些组合性的思维活动似乎是创造性思维的基本特征——这种思维活动产生于存在一种能用文字或其他符号与其他人交流的逻辑结构之前.” 正是 Dirac 奠定了量子力学的符号法, 引入了右矢 $| \rangle$ 和左矢 $\langle |$ 的记号, 在此基础上又建立了表象及相应的变换理论, 解决了量子力学的语言问题. 但如果仅仅把符号法理解为只是一种数学方法, 那就实际上没有理解 Dirac 在物理观念上对量子力学所作的革命性的贡献.

Dirac 说^[1]：“关于新物理的书如果不是纯粹描述实验工作的，就必须从根本上是数学性的。虽然如此，数学毕竟是工具，人们应当学会在自己的思想中能不参考数学形式而把握住物理概念。”Dirac 的符号法更能深入事物的本质。由他搭好的这个符号法框架，多年来被认为简明扼要而又深刻形象地反映了物理概念和物理规律。例如：他把入态记为 $|in\rangle$ ，经过仪器或相互作用（算符，用 \hat{F} 表示），而变为出态 $\langle out|$ ，这个过程形象地被记为 $\langle out|\hat{F}|in\rangle$ 。诚然，初学者在开始接触 Dirac 符号时，会感到抽象。关于抽象，基本粒子物理学家 Gell Mann（盖尔曼）曾这样说过：“在我们的工作中，我们总是处于进退两难的窘境之中；我们可能会不够抽象，并错失了重要的物理学；我们也可能过于抽象，结果把我们模型中假设的目标变成了吞噬我们的真实的怪物。”现在看来，Dirac 并不是为我们抽象出了一个“怪物”，而是物理学中的“天使”。

正如阿拉伯数字符号 0, 1, 2, …, 9 被发明后，需要引入相应的加、减、乘、除运算规则，而它们又是不断地被发展着，从平方、乘方、取对数……直到 Newton – Leibniz 发明微分、积分。因此，对量子力学符号也应发展相应的运算规则，特别是对连续态右矢和左矢所组成的投影算符 $|\rangle\langle|$ 的积分运算，从 1930 年 Dirac 的《量子力学原理》^[2]问世以来，并没有受到人们的关注去真正实现这类积分，为什么如此呢？其两个主要的原因可能是：① 天才的 Dirac 所创造的这套符号比较抽象，人们不知道它是怎么被想出来的，也没能真正地、完全地理解它，以致于也提不出对连续态右矢和左矢所组成的投影算符 $|\rangle\langle|$ 实现积分的问题，可谓曲高和寡；② 一般认为 Dirac 深入研究过的课题别人也很难再有所作为。尽管 Dirac 在该书中对符号法预言：“……在将来当它变得更为人们所了解，而且它本身的数学得到发展时，它将更多地被人们所采用。”但是从 1930 年到 1980 年的半个世纪中，我们没有看到一篇真正地、直接地发展 Dirac 符号法的文献，以致于人们慢慢遗忘了 Dirac 的这种期望。作者之一范洪义在 1967 年前后自学《量子力学原理》一书时就意识到 Newton – Leibniz 积分规则对由 Dirac 符号组成的算符的积分存在困难，原因是这些算符包含着不可对易的成分，例如怎样完成积分 $\int_{-\infty}^{\infty} dq |q/2\rangle\langle q| = ?$ ，其中 $|q\rangle$ 是坐标本征态， $|q/2\rangle\langle q|$ 蕴含着不对易的算符成分。当时正值“文化大革命”，正常的课堂教学和科研秩序被“革”掉了，所以他也无法向人请教。但是范洪义总想应当发明一个办法去实现这类积分，因为这类积分包括大量的幺正变换，也可用于表明各种表象的完备性；完成这类积分，人们就可以找到许多新的物理态与新的表象，从而推陈出新使量子力学有一个

别开生面的发展.换言之,他觉得必须要把对经典函数的 Newton - Leibniz 积分理论推广到对算符的积分,才能使符号法更完美、更实用.为了实现 Dirac 生前的期望,范洪义与其他一些中国学者倾心奋斗二十余年,发明了有序(包括正规乘积、反正规乘积和 Weyl 编序(或对称编序))算符(玻色型和费米型)内的积分技术,英文称之为 the Technique of Integration Within an Ordered Product (IWOP) of Operator^[3~12],达到了 Newton - Leibniz 积分理论可直接用于算符积分的目的.一位外国同事曾说:“只有在 IWOP 技术发明之后,量子力学的数理基础才趋于完善.”所以这位外国人在国际杂志上专门发表综述文章(Review),介绍和赞扬这一方法,并称之为“范氏”方法.在 IWOP 技术的基础上,范洪义根据 Einstein 等人的量子纠缠思想,不但创建了连续纠缠态表象,找到了大量的物理应用,而且革新和充实了量子光学的数理基础,明显地发展了相干态、压缩态、Wigner 函数和 Husimi 函数、位相算符等理论.可以说,如果一个人光知道 Dirac 符号,而不知道有序算符内的积分技术,那么他就看不到 Dirac 符号更深层次的美感与震撼力,也不能体会为什么 Dirac 曾不止一次地讲到他一生中最喜欢的工作就是用符号法对量子力学所作的诠释,更不用说灵活运用 Dirac 符号了.了解 IWOP 技术以后就可以对 Dirac 符号知其然又知其所以然,极大地提高科研能力和对量子理论的鉴赏能力,因为鉴赏本身也需要人们的创新思维.我国当代文学家王蒙曾在《符号的组合与思维的开拓》一文中指出^[13]:“语言是一种符号,但符号本身有它相对的独立性与主动性.思想内容的发展变化会带来语言符号的发展变化,当然,反过来说,哪怕仅仅从形式上制造新的符号或符号的新的排列组合,也能给思想的开拓以启发.”他又说:“思想比较丰富的人语言才能丰富,思想比较深沉的人语言才会深沉,思路比较灵活的人语言才好灵活.……反转过来,语言的灵活性、开拓性、想象力也可以促进思想的灵活、开拓,促进想象力的弘扬与经验的消化生发.”这就解释了为什么是 Dirac 而不是其他什么著名的物理学家发明了符号法,因为 Dirac 不但有极高的数学天分,而且具有不说废话的魅力.作者相信本书介绍的有序算符内的积分技术不但能成为 Dirac 符号法的有机组成部分,而且可以使读者研究物理的灵活性、开拓性、想象力得到极大的提高.一般认为数学、音乐和符号是提高人类智商的最有效训练,我们认为 Dirac 的符号和莫扎特的音乐有异曲同工之妙.当范洪义在国外讲学时,有的外国听众说:“如果 Dirac 还健在,他会感谢范洪义发展了他的符号法.”

2. 问题的提出

为了促进 Dirac 符号的发展,我们必须找到原有理论的不完美和局限性,正确地提出有普遍意义的问题,才能另辟蹊径给以解决.以下我们就四个方面置疑:

- (1) 对 Dirac 的抽象而深刻的 q 数理论我们还有什么不理解的?
 - (2) 如何发展符号法本身的特殊数学, 尤其是对符号的积分如何进行?
 - (3) 怎样找到符号法更多的物理应用?
 - (4) 怎样揭示与欣赏 Dirac 符号法更深层次的美感?

并努力把寓于 Dirac 符号法中深层次的物理内涵与应用潜力揭示出来, 在看似已臻完美的量子力学理论体系中开辟新的研究方向, 进一步体现符号法的强大生命力和永恒的科学价值, 验证 Dirac 所说的“符号法正在开创某种将来可能永垂不朽的东西”。

为了解答以上问题,让我们简单回顾一下诺贝尔奖得主 Dirac 对非相对论量子力学的贡献。“符号法”的正规使用起始于 Dirac 的名著《量子力学原理》^[2]一书中,该书自 1930 年问世以来,在半个多世纪中一直是该领域的一本基本的、权威的教科书。在该书中,就非相对论量子力学内容而言,Dirac 总结了 Heisenberg 的用矩阵表示力学量的做法和 Schrödinger(薛定谔)按照 de Broglie(德波罗意)思想在原子理论中引入态的概念,提出了自己独特的表述量子论的数学形式——符号法(Symbolic method),使得量子论成为严密的理论体系。正如 Dirac 后来回忆道:“Heisenberg 和 Schrödinger 给了我们两种形式的量子力学,马上就发现是等价的。他们提供了两个图像,用一种确定的数学变换联系起来”;“符号法,用抽象的方式直接地处理有根本重要意义的一些量……”;“但是符号法看起来更能深入事物的本质,它可以使我们用简洁精练的方式表达物理规律”。众所周知,天才的 Dirac 引入了左矢、右矢的概念,简洁而深刻地反映了量子力学中力学量和态矢之间的关系。在他发明 δ 函数的同时,把非对易的量子变量称为 q 数(对易的经典量称为 c 数),发展出比矩阵力学更为抽象的、普遍的 q 数理论,其中包括表象理论。例如,坐标的量子力学量 Q 是一个 q 数,它的本征态是 $| q \rangle$,坐标表象 $| q \rangle$ 的正交性为

$\langle q' | q \rangle = \delta(q' - q)$, 完备性为 $\int_{-\infty}^{\infty} dq | q \rangle \langle q | = 1$; 以及不对易量 q 数为基础的方程. 他把 q 数的对易关系类比于经典力学中的泊松括号, 把矩阵力学纳入哈密顿形式体系, 建立起非相对论量子力学中的普遍变换理论并用之证明矩阵力学和波动力学相互等价, 而 Schrödinger 方程的哈密顿量本征函数恰好是坐标表象到能量表象的变换函数. 另一方面, 左矢、右矢和线性算符这三种抽象的量, 不但能表述量子力学的若干基本规律, 而且是表象建立的基础. 表象的建立就如同几何中有了多种坐标系统. 这样, 一个抽象量在相应表象中的表示, 就相当于一个几何对象的坐标, 用具有类似数学性质的数字集合来代替抽象量. 对研究一个特定的动力学问题, 选择一个合适的表象, 对于问题的解决往往能起到事半功倍的效果, 所以表象具有运动学和动力学的双重意义.

Einstein 也曾称赞 Dirac 对量子力学作了“逻辑中最完美的说明”. 但是, 由于 Dirac 的符号法具有高度的抽象性, 要理解这种“完美”确实不是一件容易的事情. 这正如一位现代物理学家劳厄在《物理学史》中曾慨叹地写道: “尽管 Maxwell 的理论具有内在的完美性, 并和一切经验相符合, 但它只能逐渐地被物理学家们接受. 他的思想太不平常了, 甚至像赫姆赫兹和玻尔兹曼这样有超常才能的人, 为了理解它也花了几年的工夫.” 那么, 一代又一代的量子力学学者为了理解符号法又花了多少工夫呢? 他们真正理解了 Dirac 的符号法吗?

歌德曾说过: “独创性的一个最好的标志, 就是在选择题材之后, 能把它加以充分发挥, 从而使得大家承认, 压根儿想不到会在这个题材里发现那么多东西.” 即, 要善于从平凡中发掘不平凡的问题. 那么, 我们怎样从已经作为基本常识接受下来的 Dirac 的符号法中找到不平凡的问题呢?

宋代陈与义在《春日》一诗中写道: “朝来庭树有鸣禽, 红绿扶春上远林. 忽有好诗生眼底, 安排句法已难寻.” 我们希望有好的论题“生眼底”, 对于连续表象的完备性, 如动量表象的完备性 $\int_{-\infty}^{\infty} dp | p \rangle \langle p | = 1$, 大家可能是知其然, 而不知其所以然. 对于这个积分是如何实现的是否作过思考呢? 如果我们将这个完备性稍微作一下变化

$$S_1 = \sqrt{\mu} \int_{-\infty}^{\infty} dp | \mu p \rangle \langle p |, \quad \mu > 0, \quad (*1)$$

那么这个积分又是什么呢? 当 $\mu = 1$ 时的积分值为 1; 当 $\mu \neq 1$ 时我们又感迷茫了, 这是一个积分型的投影算符, 它代表从 $| p \rangle \rightarrow | \mu p \rangle$ 的变换. 这也说明 Dirac 表

象理论的确需要发展, 我们对 Dirac 符号法的理解确实应该更深入.

从双模坐标表象

$$| q_1, q_2 \rangle = | q_1 \rangle | q_2 \rangle = \begin{vmatrix} q_1 \\ q_2 \end{vmatrix}, \quad (* 2)$$

及其完备性, 我们可以构造出

$$U_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 dq_2 \begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} \left\langle \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} \right\rangle, \quad (* 3)$$

这里 A, B, C, D 都是实数, 且满足 $AD - BC = 1$.

(* 1) 和 (* 3) 是两个积分型的 ket-bra 算符, 都对应着量子力学的一种幺正变换; (* 1) 中 $| \mu p \rangle$ 是动量算符的本征值为 μp 的本征态. 在经典动量空间中表示 p 压缩 μ , 系数 $\sqrt{\mu}$ 是为了保证 S_1 幺正性而引入的; 而 (* 3) 所对应的是经典正则变换 $(q_1, q_2) \rightarrow (Aq_1 + Bq_2, Cq_1 + Dq_2)$. 这两个经典变换映射到量子力学 Hilbert 空间对应的量子力学幺正算符是什么呢? 怎样才能简洁解析地实现这类积分呢? 也就是说, 如果能创造一个理论去实现这类 ket-bra 型算符积分, 就等于为经典变换直接地过渡到量子力学幺正变换搭起了一座“桥梁”.

可以继续往下思考. 如积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq | q \rangle \langle -q | \quad (* 4)$$

表示的是宇称算符; 而

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 dq_2 | q_2, q_1 \rangle \langle q_1, q_2 | \quad (* 5)$$

表示的是一个两体置换算符. 又如处于 $\psi_a(q)$ 态的物理系统在空间转动后变为 $\psi_{a'}(q)$, 即

$$\psi_{a'}(Rq) = \psi_a(q), \quad (* 6)$$

其中 q 是三维坐标矢量; R 是三维欧几里得空间中的转动矩阵. 设三维空间中转动矩阵为 $D(R)$, 则有 $D(R) | \psi_a \rangle = | \psi_{a'} \rangle$. 又由 $\psi_{a'}(Rq) = \psi_a(q)$, 我们可以构造如下的积分型 ket-bra 算符

$$D(R) = \int d^3 q | Rq \rangle \langle q |. \quad (* 7)$$

再如质量分别是 m_1 和 m_2 的两个粒子, 在经典力学中, 从正则坐标 q_1, q_2 (p_1, p_2) 变成质心坐标 q_{cm} 和相对坐标 q_r 的关系是

$$\left. \begin{aligned} q_{\text{cm}} &= \mu_1 q_1 + \mu_2 q_2, & q_r &= q_2 - q_1; \\ P &= p_1 + p_2, & P_r &= \mu_1 p_2 - \mu_2 p_1. \end{aligned} \right\} \quad (* 8)$$

其中

$$\mu_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2}, \quad \mu_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2}.$$

我们需要在量子力学中找到一个么正算符 V 使得

$$VQ_1 V^{-1} = \mu_1 Q_1 + \mu_2 Q_2, \quad VQ_2 V^{-1} = Q_2 - Q_1, \quad (* 9)$$

这个么正算符 V 的构造是

$$V = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 dq_2 \left| \begin{pmatrix} 1 & -\mu_2 \\ 1 & \mu_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} \right\rangle \left\langle \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} \right|, \quad (* 10)$$

其中的矩阵是以下矩阵变换

$$\begin{pmatrix} \mu_1 & \mu_2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{\text{cm}} \\ q_r \end{pmatrix} \quad (* 11)$$

的逆矩阵. 要知道 V 的具体形式, 就需积分(* 10)式.

量子力学中遇到 ket-bra 积分的例子还很多, 例如关于连续基矢的完备性基本常识说明: 无论是坐标表象、动量表象, 还是相干态表象, 在它们的完备性表示中 ket 和 bra 是互为共轭虚量的. 那么是否还存在另一种可能性, 即由 ket 和 bra 所组成的投影算符的积分值仍是单位算符, 而 ket 和 bra 并不互为厄米共轭? 下面这个例子或许更有说服力. 用 Dirac 的 ket 来表述 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |q, t\rangle = H(t) |q, t\rangle. \quad (* 12)$$

定义时间演化算符 $U(t, t_0)$, 即

$$|q, t\rangle = U(t, t_0) |q, t_0\rangle, \quad U(t_0, t_0) = 1, \quad (* 13)$$

则可知么正算符 $U(t, t_0)$ 满足方程

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = H(t) U(t, t_0), \quad (* 14)$$

其解是一个积分解

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t', t_0), \quad (* 15)$$

因此 $U(t, t_0)$ 可以写成积分型的投影算符

$$U(t, t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dq |q, t\rangle \langle q, t_0|, \quad (* 16)$$

如果得到这个积分的显式, 就能导出这个系统的时间演化算符.

还可以列举出很多这样的积分型的投影算符形式,问题的关键在于要能简捷地完成积分.作者在 20 世纪 80 年代提出了有序算符内的积分技术(Integration Within an Ordered Product (IWOP) of Operators)成功地实现对 Dirac 的 ket-bra 型算符的积分,使得人们知道,原来 Dirac 发展的符号也是可以积分的,这就为 Newton - Leibniz 积分的发展开拓了一个新的方向,并且也为实现经典变换到量子么正变换的自然过渡提供了一条直接寻找显示形式的 q 数的新途径.物理概念的创新往往与数学的发展是齐头并进的,Einstein 曾指出:“在物理中,通向更深入的基本知识的道路是与最精密的数学方法相联系的”.IWOP 技术的出现不但革新了量子光学的数理基础,极大地丰富了量子光场的内容,扩展了量子光学与 Fourier 光学的联系,而且促进了量子力学的纠缠态理论的发展,而后者又是量子信息论的基础.所以,学习与掌握 IWOP 技术对于高屋建瓴地把握量子力学的理论十分有益,也是学习和研究量子光学理论的基本功.

近代美学家朱光潜先生在总结治学美学的经验时曾指出：“不通一艺莫谈美”。掌握 IWOP 技术才能更深入地欣赏 Dirac 符号法蕴含的美。

纵观人类科学发展史，每一个重要的理论体系无不为其后继理论留下相当的拓展空间，如牛顿力学之于理论分析力学、狭义相对论之于广义相对论，符号法的抽象性同样使它得以拓展成为一个完备、严整的理论体系。

3. 科研与著作的关系

在本书以前笔者范洪义已出版了三部“姊妹篇”的著作，它们分别是《量子力学表象与变换论——狄拉克符号法进展》^[14]、《量子力学纠缠态表象及应用》^[15]和《从量子力学到量子光学——数理进展》^[16]. 本书的写作原则是：在写作内容方面基本上不重复前三本书已介绍的内容，只是为了读者方便，才扼要地介绍有序算符内的积分理论与基本的纠缠态表象. 科研专著是优秀论文的积累与结晶，它不只是论文简单的包容与罗列，而是有条理的、有系统的归纳、整理与加工的产物. 在写科研专著时作者往往要以更高明的观点整理思想，以更简明的方法给读者以启示，在更深的层面上展开问题，以更新的角度分析问题与解决问题，可谓“会当凌绝顶，一览众

山小”。

科研专著又要脉络清晰、思想新颖鲜明、科学方法有效、叙述精炼、符号简练，这些都对作者提出了相当高的要求。在写作中作者在每一章结束时留给读者以思索的空间，并考虑到各个层次读者的水平不同，尽量地给予兼顾。所以科技专著的写作与科研是相辅相成、互相促进的。

一本好的科研专著对于好学上进的大学生与资深的科研人员是不可或缺的，他们总会在书中找到知识创新的源泉和探索自然奥秘的激情、找到怎样提出问题并解决问题的实例、体会学习系统地整理与扩大科学成果的经验，从而促进科研。因此有成就的科学家应该及时地把先进的、有价值的知识写成专著以影响科学界与教育界，指导年轻人。在这方面科学专著所起的作用，是一篇或几篇论文所不能替代的，因为好的专著是艺术，是经典作品，是超越时代的，有长远的历史价值与普及的意义。只要人类文明存在，它就会影响一代又一代的科研工作者。最近作者在上海某家大书店里看到一本书，书名是《影响人类历史的一百本科学著作》，其中物理类的著作有牛顿和狄拉克的书，可见科学大师的著作犹如阳光照耀着人类文明的进程。

在写科技专著时，作者十分注意把一系列论文的若干要点抽象出来，并且有机的联系在一起，使之具有最大可能的简单性。所谓简单性是指“这个体系包含的彼此独立的假设与公理最少”。Einstein 说得 very 明确：“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。”作者努力去实现这样的目标，即在写作专著时强调数学的简洁和物理思想的质朴。不但介绍知识，更重要的是介绍思想方法、给出思想体系，让读者有机会提高综合能力与洞察力。另一方面，在写作时，要努力做到数学优美，简洁和优美的要求往往是并存的，所以写好科技专著对作者也是一个很大的挑战。希望读者在看这本书的过程中触类旁通、举一反三，迸发出一些灵感，从而可以提出新的科研问题，促进科研的深入发展。孔子说：“温故而知新。”这个“温”字不仅仅是简单地重复“温习”，而应包含重新（以新的角度）深入思考的内涵；“温故”最好是为已知的理论重新构建数学和物理上的论证。这个“知”字也不仅仅是知晓明白，而是有“上下求索”的深意。

本书所建立的知识体系是作者 25 年来刻苦探索的结果，是作者一部分论文的节录，有诗为证：

忆寄论文

探幽不时觉迷茫，思陷囹圄惑寻常。

口到饭菜嚼石蜡，题系梦境睡圪床。
家务敷衍撞钟事，烛影寒更饥鼠望。
论文寄出尤思过，邮局门前几彷徨。

作者之一范洪义在写作过程中得到妻子翁海光以及研究生和本科生的协助，他们是傅亮、李超、陈俊华、蒋中华、陆海亮、叶万渝、吴昊、高炜博、刘述光、曹贺琳、任刚、严鹏、邵宇翀、江腾飞、王彤彤、郭琴、胡利云、范悦、王勇、桂卫军和王文芹，在此他深表感谢。每当夜深人静、身心疲倦想偷点儿懒时，范洪义脑子里就会闪现慈母毛婉珍 50 年前在灯下为小学生批阅作文时边读边改时的情景，她那清瘦的脸庞和慈祥的目光浮现在儿子眼前，鞭策着他再打起精神，坚持工作一会儿。

在结束这段前言时，让我们引用南宋理学家朱熹的诗：“半亩方塘一鉴开，天光云影共徘徊。问渠那得清如许，为有源头活水来。”这首诗历来被认为是指导学习的警句。我不揣浅薄，以一诗和之：

方塘云影迹费猜，半亩风光未遣怀。
山间连宵雷电雨，泉眼瀑閔一并开。

供读者参考。

本书是为庆祝中国科学技术大学建校 50 周年校庆而作，是作者对母校的一份不成敬意的报效。科学殿堂的大门说有则有，说无也无，“诗境有禅顿悟易，空门无框遁入难”，“步远量思绪，暮迟失景深”。作者之一范洪义虽然在科苑中摸进到“无框的空门”并边走边思索，跌跌撞撞地行了不少路，但总归因水平有限，“景深”不远，望各位读者批评教正。

作者谨识

2008 年 3 月 30 日

参 考 文 献

- [1] DIRAC P A M. Recollections of an exciting area: History of 20th Century Physics [M]. New York: Academic Press, 1977.
- [2] DIRAC P A M. The Principles of Quantum Mechanics [M]. Oxford: Clarendon Press, 1930.
- [3] FAN Hongyi. Recent Development of Dirac's Representation theory [M]//Feng D H, Klauder J R, Strayer M R. Coherent states. New York: Academic Press, 1994: 153.
- [4] FAN Hongyi, ZAIDI H R, KLAUDER J R. New approach for calculating the normally ordered form of squeeze operators [J]. Physical Review, 1987, D35(6): 1831 - 1834.
- [5] FAN Hongyi, ZAIDI H R. Squeezing and frequency jump of a harmonic oscillator [J]. Physics Review, 1988, A37(8): 2985 - 2988.
- [6] FAN Hongyi, VANDERLINDE J. Mapping of classical canonical transformations to quantum unitary operators [J]. Physical Review, 1989, A39(6): 2987 - 2993;
FAN Hongyi, VANDERLINDE J. Squeezed-state wave functions and their relation to classical phase-space maps [J]. Phys. Rev., A40(8): 4785 - 4788;
FAN Hongyi, VANDERLINDE J. Simple approach to the wave functions of one- and two-mode squeezed states [J]. Phys. Rev., A39(3): 1552 - 1555;
FAN Hongyi, CHEN Junhua. EPR Entangled States for Bipartite Kinematics and New Bosonic Representation of SU (2) Algebra [J]. Physical Review, 1996, A54 (1): 958 - 960.
- [7] FAN Hongyi. Squeezed states: Operators for two types of one- and two-mode squeezing transformations [J]. Physical Review, 1990. A41(3): 1526 - 1532.
- [8] FAN Hongyi, RUAN Tu-nan. Sci. Sin., 1984, A27: 392;
FAN Hongyi, RUAN Tunan. Some new applications of the coherent states [J]. Communications of Theoretical Physics, 1983, 2(4): 1289.
- [9] FAN Hongyi, XU Zhihua. Symplectic transformations in the n -mode coherent-state representation using integration within an ordered product of operators [J]. Physical Review, 1994, A50(4): 2921 - 2925;
FAN Hongyi, VANDERLINDE J. Generalized Bogolyubov Transformation [J]. Journal of Physics, 1990, A23: L1113 - L1117.
- [10] FAN Hongyi. Inverse operators in Fock space studied via a coherent-state approach [J]. Physical review, 1993, A47(5): 4521 - 4523;
FAN Hongyi, XIAO Min. Construction of optical networks by virtue of the IWOP technique [J]. Quantum and Semiclassical Optics, 1997, 9: 53 - 58.
- [11] FAN Hongyi. Coherent State Projection Operator Representation of Symplectic