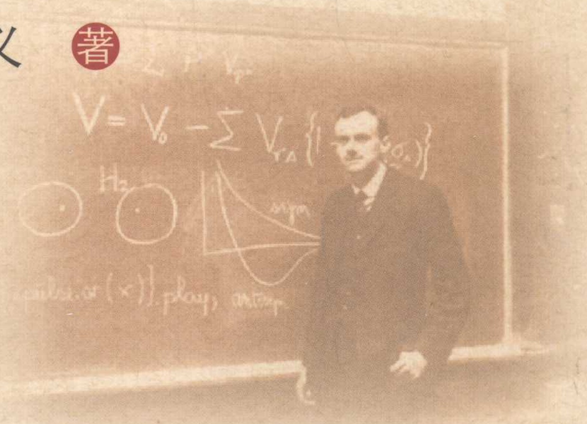
本科生用量子力学教材补遗

范洪义 著



中国科学技术大学出版社

本科生用量子力学教材补遗

范洪义 著

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

本书旨在向学习量子力学的本科生补充目前国内外教材匮乏的知识: 关于狄拉克符号法的有序算符内的积分理论、纠缠态表象论、量子衰减机制和算符排序论等. 补遗这些知识的基本重要性在于, 能帮助读者深刻理解量子力学数理结构和量子纠缠的本质, 以用于学研量子论的其他分支; 除了学到新知识、扩大眼界、欣赏科学美外, 读者还可以体会古人所云"智者见于未萌, 离路而得道", 培养从平凡中探索崎岖、发现并解决科研问题的创新思维能力.

本书适合广大物理系本科生学习, 对于学有潜力、思慧若渴的学生尤然, 也值得理论物理学工作者参考与借鉴.

图书在版编目（CIP）数据

本科生用量子力学教材补遗/范洪义著.—合肥：中国科学技术大学出版社, 2013.12

ISBN 978-7-312-03329-2

I. 本···　II. 范···　III. 量子力学 — 高等学校 — 教学参考资料　IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2013）第 318309 号

出版　中国科学技术大学出版社
　　　安徽省合肥市金寨路 96 号, 230026
　　　http://press. ustc. edu. cn
印刷　安徽省瑞隆印务有限公司
发行　中国科学技术大学出版社
经销　全国新华书店
开本　710 mm × 960 mm　1/16
印张　21.25
字数　350 千
版次　2013 年 12 月第 1 版
印次　2013 年 12 月第 1 次印刷
定价　38.00 元

前　言

教与学任何一门课, 必须先了解其用语（notation）. 量子论的用语是狄拉克（Dirac）符号. 狄拉克在年迈时曾回忆:

“*With regard to this notation, I had to face the problem of writing down symbols which would contain an explicit reference to those factors which it was important to mention explicitly, and which left understood those quantities which it was safe to leave understood, to keep at the back of one's mind and not to write down explicitly.* $\cdots$, *this led to to the notation which* $\cdots$ *has become the standard notation for use in quantum mechanics at the present time.*”

但是目前国内外流行的量子力学教科书都有几个方面明显的不足.

首先是对于量子力学的用语——狄拉克符号法只有初步的介绍, 因为是“蜻蜓点水”, 对于量子力学的表象与变换解释得不深不透（诚然, 狄拉克符号法本身带有一定的抽象性, 不易被初学者掌握）, 所以给人“虚晃一枪”的感觉, 这严重地影响了本科生对量子力学的理解, 以至于他们中的大多数在学完一学期的量子力学后, 对狄拉克符号的了解浮光掠影, 对量子力学数理结构似懂非懂, 没有深刻印象, 更不要说了然于胸了. 以狄拉克符号为语言的量子力学的数理结构不是某种纯形式化的东西, 也不完全是逻辑推导, 它是把对物理现象的感知上升到理论的重要环节与方法. 就像弄文学的人如果缺乏语感写不好文章一样, 不深入了解量子力学的用语也不会娴熟地、恰到好处地应用量子力学表象. 如果学生们一开始就能径以狄拉克符号为其思想之表象, 不必要处处“译”成函数, 那么学量子力学理论

就进步快了,坚持数年后就可达到洞若观火的境界.

其次,目前的高等量子力学教材关于算符的基本排序问题,例如,坐标–动量($Q-P$)算符函数的各种排序乏善可陈.

再者,尽管时下量子纠缠与量子信息已风靡物理界,但流行的教科书从未介绍过连续变量量子纠缠态表象的知识,这部分能深刻反映爱因斯坦等三人质疑量子论是否完备的知识体系长期以来被忽略了,更不要谈介绍纠缠态表象的各种应用了.

鉴于以上诸种不足,我们觉得有必要为本科生撰写一本量子力学知识补遗教材. 关于教学,物理学家费恩曼(Feynman)曾写道:“首先想好你为什么要学生学这个专题,然后想好你要学生知道什么,于是讲述的方法就会或多或少地由‘常识’(common sense)而来.”我们这本书要让读者熟悉量子论的用语和表象变换“常识”,这不但能进一步帮助他们扩充与时俱进的必要基础知识,提高研究物理的灵活性和想象力,还可以让他们认识到物理实在是可以用美的数学表现的. 而针对算符函数的各种排序,本书将指出求解此问题的新途径,即把它与量子力学表象变换相关,不但建立新的纯态表象,而且引入混合态表象. 关于量子纠缠态表象,本书在引入它后,将介绍它在研究量子退相干和激光的熵的演化等方面的应用.

“知之者不如好之者,好之者不如乐之者.”要提高本科生对量子力学的兴趣,一定要在基本点上下功夫,努力把寓于狄拉克符号法中深层次的物理内涵与应用潜力揭示出来,使他们达到知其然又知其所以然的新境界. 一如狄拉克本人所言:“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……”,“但是符号法看来更能深入事物的本质,它可以使我们用简洁精练的方式来表达物理规律,很可能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.”本书作者不才,几十年独辟蹊径地致力于实现狄拉克的愿望,在艰尝了如晚唐诗人贾岛“独行潭底影,数息树边身”那样的苦辛,又经历了“意有所郁结,不得通其道”的徘徊后,终于对深化与发展狄拉克符号法独有心得,发明了简单却又实用优美的有序算符内的积分技术(the technique of Integration Within an Ordered Product of operators,简称 IWOP 技术)来深化人们对

量子力学数理结构的认识, 展现了 “大道至简, 大美天成” 的景象, 正所谓 “二句三年得, 一吟双泪流. 知音如不赏, 归卧故山秋”. 国内优秀的前辈物理学家中最早欣赏有序算符内的积分技术的是两弹一星元勋彭桓武先生, 1989 年中国科学技术大学人事处将本书作者晋升教授的申报材料寄给他审批, 就得到了他的批准; 而后我国氢弹之父于敏先生曾两次赐信本书作者给予鼓励; 著名理论物理学家何祚庥先生等也称赞过这个理论, 可见他们的睿智与识才爱才. 在本书中作者将把平生所学与年轻的大学生们分享, 使得他们: (1) 初步掌握 IWOP 技术对发展狄拉克符号法的贡献, 了解它的若干优美的物理应用; (2) 深入了解量子力学表象与变换的本质; (3) 借助 IWOP 技术了解量子衰减的物理机制; (4) 引入混合态表象来掌握算符排序的新理论; (5) 了解 IWOP 技术对于发展量子力学与经典力学对应的贡献; (6) 了解用 IWOP 技术如何自然地引出压缩算符和纠缠态表象. 总之, 让他们欣赏量子力学中 “看似平凡却奇崛” 的一道风景, 了解物理–数学中蕴含的科学美, 在科学思想的培养与计算能力的提高方面都得到有效的训练, 以达到移情的目的, 并体会狄拉克所说的 “…… 一旦有了发现, 它往往显得那么明显, 以至于人们奇怪为什么以前会没有人想到它” 这句话的含义.

虽然天才物理学家费恩曼曾无可奈何地说: “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’……” 但是我们相信, 在掌握了对量子力学的 ket-bra 算符积分的 IWOP 技术, 及看到了狄拉克符号法中的韵律和美以后, 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.

胡适先生说: “凡成一种科学的学问, 必有一个系统, 决不是一些零碎堆砌的知识.” 狄拉克符号法经用 IWOP 技术发展后, 就有了生气与灵动, 不再是 “一幅山水画却缺乏动感”, 而是成为一个严密的、自洽的、内部可以自我运作的数理系统, 它把态矢量、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相融合, 不但可以导出大量有物理意义的新表象和新幺正算符, 而且提供了量子力学与经典力学对应的自然途径, 因而有重要的科学价值. 读者将体会到 IWOP 技术是如何实现将牛顿–莱布尼茨 (Newton-Leibniz)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数理基础之目的, 为量子力学推陈出新开辟了一个崭新的研究方向, 增添了别开生面的有趣篇章, 成为狄拉克符号法的有机组成部分, 也为数学界提供了一个新的研究领域. 人们对狄拉克符号法与连续变量纠缠态表象的认识会“更上一层楼”.

苏东坡学士说: “范淳夫讲书, 为今经筵讲官第一. 言简而当, 无一冗字, 无一长语, 义理明白, 而成文粲然, 乃得讲书三昧也.” 本书要补遗以往量子力学教科书, “接前人未了之绪, 开后人未启之端”, 需有才、有胆、有识、有力; “人有才则心思出, 有胆则笔墨从容, 有识则能取舍, 有力则可自成一家”. 这是一个很高的目标, 我们在写作时要以简练的符号和新的角度分析问题与解决问题, 以清晰的思路整理脉络, 以新颖的思想和有效简明的方法给读者以科研启蒙.

在写作过程中本书作者范洪义得到了中国科学技术大学校长侯建国, 副校长张淑林, 研究生院屠兢、古继宝、倪瑞和万红英的支持和有益帮助, 又得到中国科学技术大学出版社的诚挚约稿, 谨致谢意. 作者范洪义也感谢曾在门下求学的本科生和研究生们的合作, 他们是: 陈俊华、胡利云、袁洪春、杨阳、何锐、周军、李学超、王帅、王震、许业军、笪诚、唐绪兵等, 后生可畏对于师长也是一种鞭策. 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五十多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.

朱熹说: “人之为学, 当如救火追亡, 犹恐不及 …… 小立课程, 大做功夫.” 如今作者虽已年过六旬, 仍然有追求学术境界、补遗优美知识得以滋润身心的上进心和迫切性, 故写出此书与本科生、研究生交流. 但“书被催成墨尚浓”, 作者难免受学识之浅、时间有限所囿, 有误之处, 望四方读者不吝指教.

范洪义

2012 年 12 月于中国科学技术大学

目 次

前言 ………………………………………………………… i

第 1 章　IWOP 技术及单模新表象的建立途径 ………………………… 1

1.1　正规乘积内的积分技术 ………………………………………… 1

1.2　福克空间中坐标本征态的导出新法 …………………………… 9

1.3　坐标表象完备性的纯高斯积分形式及其应用 ………………… 11

1.4　厄米多项式算符 $\mathrm{H}_n(Q) =: (2Q)^n :$ 的新用途 …………………… 15

1.5　用表象完备性的纯高斯积分形式求粒子态的波函数 ………… 27

1.6　$1/Q$ 的厄米多项式展开 ……………………………………… 30

1.7　构建坐标 – 动量中介表象、完备性的纯高斯积分形式 ……… 31

1.8　相干态表象完备性的高斯积分形式及导出新法 ……………… 32

1.9　厄米多项式激发态 …………………………………………… 35

1.10　计算 $\langle m| Q^k |n\rangle$ 和矩 ……………………………………… 38

1.11　计算 $\langle m| \mathrm{e}^{fQ} |n\rangle$ 和累积量 ………………………………… 39

1.12　计算高斯势的微扰能级修正 ………………………………… 41

1.13　IWOP 技术用于推导径向坐标算符的公式 …………………… 42

第 2 章 IWOP 技术及双模新表象的建立途径 · 46

2.1 双模厄米多项式的引入与算符恒等式 $a^m a^{\dagger n} = (-\mathrm{i})^{m+n} \vdots \mathrm{H}_{m,n}(\mathrm{i}a^\dagger, \mathrm{i}a) \vdots$ · 47

2.2 算符恒等式 $a^{\dagger n} a^m = \vdots \mathrm{H}_{n,m}(a^\dagger, a) \vdots$ 与相应的积分变换 · · · · · · · · · · 48

2.3 双模厄米多项式的一个应用——求正规乘积算符的 P-表示 · · · · · · 52

2.4 从双模厄米多项式构建连续变量双模纠缠态 $|\xi\rangle$ · · · · · · · · · · · · · · 54

2.5 $|\eta\rangle$ 的施密特分解的导出 · 58

2.6 $|\eta\rangle$ 的施密特分解式在研究量子压缩时的应用 · · · · · · · · · · · · · · · · · · · 61

2.7 单边双模压缩算符 · 63

2.8 $|\eta\rangle$ 在粒子数表象中的施密特分解 · 65

2.9 描述“荷”上升、下降的算符与表象 · 68

2.10 描述约瑟夫森结方程的导出和库珀对数 – 相测不准关系 · · · · · · · · · 72

2.11 相干 – 纠缠态的构造 · 74

2.12 三模纠缠态的构造 · 77

第 3 章 IWOP 技术在构建与研究新光场态矢量时的若干重要应用 · · · · · · 80

3.1 从经典尺度变换到量子压缩算符的映射 · 80

3.2 单模压缩真空态 · 85

3.3 量子力学小波变换算符 · 86

3.4 光子减除单模压缩态——勒让德多项式的新级数展开 · · · · · · · · · · · · · · · 88

3.5 用 IWOP 技术构造压缩相干态表象 · 91

3.6 双模压缩算符的自然表象和正规乘积形式 · 92

3.7 双模压缩光场与热光场的关系 · 93

3.8 测双模压缩光场的单模光子数 · 94

3.9 怎样对预设的幺正变换构建积分型的 ket-bra 投影算符 · · · · · · · · · · · · · · 99

第 4 章　IWOP 技术在研究量子振幅衰减中的应用 ········ 102

4.1　广义转动算符恒等式的简捷导出 ········ 102

4.2　su(2) 转动的量子映射和角速度公式的导出 ········ 103

4.3　三维欧儿里得转动的量子映射 ········ 107

4.4　振子 – 振子两体相互作用引起的衰减 ········ 108

4.5　与振幅衰减的密度矩阵主方程的解的等价性 ········ 114

4.6　振子 – 多模振子的相互作用引起的衰减 ········ 117

4.7　用 IWOP 技术发现角动量算符的新玻色子实现 ········ 118

第 5 章　用纯态表象研究算符排序 ········ 123

5.1　算符的 $\mathfrak{Q}$ - 排序 ········ 124

5.2　算符的 $\mathfrak{P}$ - 排序 ········ 126

5.3　$\mathfrak{Q}$ - 排序算符与 $\mathfrak{P}$ - 排序算符的互换 ········ 127

5.4　应用于组合学 ········ 130

第 6 章　用混合态表象研究算符排序 ········ 132

6.1　威格纳算符和算符的外尔编序 ········ 132

6.2　把 $\mathfrak{Q}$ - 排序、$\mathfrak{P}$ - 排序算符转换为其外尔编序 ········ 139

6.3　从算符的外尔编序到其 $\mathfrak{Q}$ - 排序、$\mathfrak{P}$ - 排序的转换 ········ 140

6.4　化算符为外尔编序的公式 ········ 144

6.5　单模压缩算符的 $\mathfrak{Q}$ - 排序和 $\mathfrak{P}$ - 排序 ········ 145

6.6　双模压缩算符的外尔编序和 $\mathfrak{Q}$ - 排序及 $\mathfrak{P}$ - 排序 ········ 149

6.7　相似变换下的外尔编序算符的序不变性 ········ 152

第 7 章　算符在福克空间的新展开及应用 ········ 155

7.1　福克空间算符 $|m\rangle\langle n|$ 的外尔编序展开 ········ 156

7.2　代入 $|m\rangle\langle n| = \frac{2\sqrt{n!}}{\sqrt{m!}}(-1)^n \vdots (2a^\dagger)^{m-n} \mathrm{L}_n^{m-n}(4a^\dagger a) \vdots$ 的各种应用 ········ 157

7.3 a^{-1} 的外尔编序展开 159
7.4 求 $A_{m,n}$ 的新公式 161
第 8 章 对应光学菲涅耳变换的量子算符 165
8.1 量子光学菲涅耳算符的由来 167
8.2 柯林斯衍射公式的量子力学版本 171
8.3 柯林斯衍射公式的逆 171
8.4 菲涅耳算符的联合变换性质 173
8.5 经典光学算符方法和菲涅耳算符的分解 174
8.6 菲涅耳算符的另类分解 176
8.7 柯林斯公式的乘法规则 180
8.8 $\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{2}\left[\alpha P^2+\beta Q^2+\gamma(PQ+QP)\right]\right\}$ 作为菲涅耳算符 182
8.9 柯林斯衍射公式与量子层析函数的关系 184
第 9 章 多模指数二次型玻色算符的相干态表象及其正规乘积展开 190
9.1 $H=\omega_1 a_1^\dagger a_1+\omega_2 a_2^\dagger a_2+C\left(a_1^\dagger a_2+a_1 a_2^\dagger\right)+D\left(a_1^\dagger a_2^\dagger+a_1 a_2\right)$ 的能级 190
9.2 单模相似变换算符 194
9.3 辛变换及其在指数二次型玻色算符的相干态表象的映射 196
9.4 n-模玻色相互作用系统二次型哈密顿量的配分函数 204
第 10 章 连续变量纠缠态表象在量子光学中的应用 208
10.1 用纠缠态表象导出双模算符厄米多项式的若干恒等式 209
10.2 双模压缩数态 214
10.3 激发双模压缩态 216
10.4 关于双模压缩厄米多项式态的归一化 217
10.5 用 IWOP 技术将求系综平均化为求纯态平均 220
10.6 有限温度下的双模压缩真空态 223

第 11 章　用热纠缠态表象及特征函数解量子主方程 · · · · · · 230

11.1　在扩展的福克空间中热纠缠态表象的引入 · · · · · · 230

11.2　把特征函数转化为 $\langle\eta|$ 表象中的波函数 · · · · · · 233

11.3　解 $\langle\eta|$ 表象中的特征函数方程 · · · · · · 235

11.4　从 $\langle\eta=-\lambda|\ \rho\rangle$ 导出 ρ · · · · · · 239

第 12 章　激光过程中密度算符的演化 · · · · · · 242

12.1　描述激光过程的量子主方程的解 · · · · · · 245

12.2　粒子态在激光通道中的演化成二项 − 负二项联合分布态 · · · · · · 253

12.3　威格纳函数在激光过程中的演化 · · · · · · 255

12.4　激光过程中的光子数演化 · · · · · · 260

12.5　激光过程中熵的演化 · · · · · · 261

第 13 章　纠缠态表象求解能级和波函数 · · · · · · 264

13.1　用纠缠态表象导出有弹性力耦合的两个运动带电粒子的能级和波函数 · · · · · · 264

13.2　与质量有关的纠缠态表象及其压缩 · · · · · · 265

13.3　H_1 的能量本征态在 $\langle\xi|$ 表象 · · · · · · 269

13.4　波函数和能级 · · · · · · 272

13.5　有磁相互作用的两个运动带电粒子的能级和波函数 · · · · · · 274

13.6　用纠缠态表象求拉普拉斯微分的玻色实现 · · · · · · 278

13.7　若干双变数厄米多项式算符恒等式 · · · · · · 284

第 14 章　纠缠菲涅耳算符及其分解 · · · · · · 290

14.1　纠缠菲涅耳算符 · · · · · · 291

14.2　两个纠缠菲涅耳算符的乘法规则 · · · · · · 294

14.3　纠缠菲涅耳算符的分拆 · · · · · · 295

14.4　$F_2(A,B,C)$ 的其他分解式 · · · · · · 298

14.5 纠缠菲涅耳算符的外尔编序和坐标表象中纠缠菲涅耳算符的矩阵元 · 303

14.6 柱坐标中的柯林斯衍射变换的乘法规则和柯林斯衍射的逆变换 · · · 305

14.7 作为广义双模菲涅耳算符 · 309

第 15 章 描写电子在均匀磁场中运动的纠缠态表象及应用 · · · · · · · · · · · · · 313

15.1 描写电子在均匀磁场中运动的纠缠态表象的引入 · · · · · · · · · · · · 313

15.2 均匀磁场中的电子角动量在纠缠态表象中的表示 · · · · · · · · · · · · 315

15.3 在纠缠态表象中电子运动哈密顿量的表示和朗道波函数 · · · · · · · · 316

15.4 电子运动的轨道半径 – 相描述 · 318

15.5 电子轨迹的分析和轨道中心的不确定以及简并数 · · · · · · · · · · · · 320

15.6 磁场强度改变和附加谐振子势引起的量子压缩 · · · · · · · · · · · · · 321

15.7 电子运动的轨道半径 – 角动量纠缠态表象, 角动量的上升、下降 · · 323

结语 · 325

第 1 章　IWOP 技术及单模新表象的建立途径

1.1　正规乘积内的积分技术

狄拉克符号是随着量子力学的诞生应运而生的. 狄拉克曾回忆说: "…… 那时我是一个研究生, 除了研究外没有别的义务. 我感谢自己生逢其时的事实, 年长或者年轻几年都会使我失去机会." "…… 在量子力学刚诞生时, 一个三流物理学家可以做出一流的工作, 而现在, 一个一流物理学家只能做出三流的成果." 先让我们回顾一下狄拉克符号法或称为 q 数理论, q 理解为 quantum 或 queer(奇怪的), 它的来源和它已经有了哪些应用.

早在量子力学诞生阶段, 狄拉克就率先注意到 q 数的对易关系可与经典力学泊松括号类比, 揭示了量子力学与经典力学的某种对应关系; 其次, 用符号法可将矩阵力学纳入哈密顿形式体系; 再者, 对于薛定谔 (Schrödinger)表象和海森伯 (Heisenberg)表象, 两种学派曾因不同的数学形式 (波函数 $\psi(q)$ 形式和矩阵力学形式)争论不休, 后来薛定谔证明它们是殊途同归的, 而狄拉克则运用他的符号法所建立的变换理论使这一证明变得显然. 狄拉克用态矢 ket-bra 一方面把算符写成 $|\rangle\langle|$, 另一方面把 $\psi(q)$ 写为 $\langle q|\psi\rangle$ 提炼出 $\langle q|$ 来, 自然就有了表象的概念, 这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, 丰富与发展量子力学的内容. 关于符号法中的变换理论, 狄拉克曾说: “这是我一生中最使我兴奋的一件工作 ······”“变换论是我的至爱 (The transform theory (became) my darling). ”在另一个场合他又说: “我的许多论文仅仅来自一个十分偶然出现的想法的结果 ······ 但是我关于量子力学的物理诠释工作却是一种值得夸奖的成功. ”

那么, 进一步发展符号法的突破口在哪里呢? 巨人在前, 普通人能有机会站在巨人的肩上吗? 寻找有价值的科研方向的入口处, 即使对于有经验的人也有难度, 谁晓得哪个方向有宝可探呢? 作者曾写一对联, “诗境有禅顿悟易, 空门无框遁入难”, 既然不知道门在何处, 就可谓空门, 也就无门框, 无从进入, 所以选题是第一要紧的.

我们注意到狄拉克提出的坐标表象 (坐标算符 Q 的本征态 $|q\rangle$ 的集合)的完备性为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q\, |q\rangle\, \langle q| = 1, \tag{1.1}$$

它是从 $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q\, |\psi(q)|^2 = 1$ 提炼出来的, 此数学表达式在物理上代表在全空间找到粒子的概率为 1. 这是玻恩 (Born)为薛定谔的公式找到的解释: 在空间任何一个点上的波动强度 $|\psi(q)|^2$——数学上通过波函数的模的平方来表达, 是在这一点碰到粒子的概率的大小. 据此, 物质波有点类似流感. 假如流感波及一座城市, 这就意味着: 这座城市里的人患流行性感冒的概率增大了. 波动描述的是患病的统计图样, 而非流感病原体自身. 物质波以同样的方式描述的仅仅是概率的统计图样, 而非粒子自身数量. 那么把此式稍作变形为 $\int_{-\infty}^{+\infty} (\mathrm{d}q/\sqrt{\mu})\, |q/\mu\rangle\, \langle q|\,, \mu > 0$, 这个积分怎么做呢? 它的结果可能是什么? 又有什么物理意义? 这又是一个挑战, 因为 ket-bra 内包含了不可交换的东西. 这个貌似简单却涵义深刻的问题最早是由作者在 20 世纪 60 年代注意到, 而于 70 年代末给予解决的. 他提出了有序算符内的积分技术, 可以说是牛顿–莱布尼茨积分从对普通函数积分向 ket-bra 投影算符积分的扩充,体现了量子力学对数学进步的一种新需求, 或是说物理学家对发展数学也有责任 (使人想起狄拉克发明的 δ 函数曾促使了广义函数理论的发展).

物理诺贝尔奖得主威格纳 (Wigner)曾说: “在我的整个生涯中, 我发现最好是寻找这样的物理问题, 其解答看起来原本是简单的, 而在具体做的时候会揭示出这样的问题常常是很难完全处理得了的. ”威格纳所开拓的群论在量子物理中的应用就属于这类问题, 而积分 $\int_{-\infty}^{+\infty}(\mathrm{d}q/\sqrt{\mu})\,|q/\mu\rangle\langle q|$ 也可以算是威格纳说的那一类问题.

但困难在于经典力学中可以轻易完成的积分在量子物理中难以推广, 其根本原因是经典物理变数可对易, 而代表量子可观测量的算符通常不可对易 (即 ab 通常不等于 ba). 这一点也许使得人们对算符的积分想也不愿想. 范洪义提出的有序算符内的积分技术利用有序算符 (包括正规乘积、反正规乘积和外尔 (Weyl)编序)内玻色 (Boson)算符相互对易的性质, 把积分转变为有序算符内部的显式积分, 进行积分时视算符为可对易的普通参数但又不失其算符之本质, 并在积分完成之后通过对易关系取消有序算符的记号, 在本质上解决了这一问题. 从而赋予了符号法以新的内涵, 进一步完善了量子力学的数理基础. IWOP 技术既发展了狄拉克的符号法, 又推进微积分理论到一个新的领域, 使牛顿–莱布尼茨规则可以应用于对由 ket-bra 符号组成的算符的积分.

在介绍 IWOP 技术之前, 我们需要回顾一些原有的基本的量子力学表象基础知识. 表象 (representation)原指客观事物在人类大脑中的映象. 西方经典哲学认为事物背后存在本质, 本质通过表象部分地呈现出来, 而本质本身并不为人所见, 只能通过表象对它加以认识; 任何对本质的认识都是不全面的即相对真理; 真正完善、全面的认识 (绝对真理)不可达到. 量子力学符号法中的表象同样是作为认识量子态的本质 (体系状态)的方式而存在, 态矢本身是抽象的、本质的, 它的物理意义只有具体投影到某一特定表象才能为人们加以观察. 所以狄拉克写道: “The way in which the abstract quantities are to be replaced by numbers .... Each of these ways is called a representation and the set of numbers that replace an abstract quantity is called the representative of that abstract quantity in the representation.”即 “表象” 是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, 是表示态矢量的 “几何坐标架. ”力学量的本征函数系即此坐标系的一组基矢, 把系统状态的波函数

看成抽象空间中的态矢量由这组基矢展开的系数. 完备性是基矢成为表象的必要条件, 但完备性的证明则因其烦琐和缺乏普适性且有力的积分方法而成为历来困扰物理学家的一个难题, 这也极大地限制了新表象的发现. 由于针对不同的问题选取适当的表象进行求解往往可以达到事半功倍的效果, 新表象的缺乏也使得对量子力学中某些问题的探讨变得异常困难. IWOP 技术恰恰提供了解决此难题的新方法, 它赋予基本的坐标、动量表象完备关系以清晰的数学内涵并将其化为纯高斯 (Gauss)积分的形式, 从而使其成为对于数学家而言如同“2 × 2=4”一样简单的东西. 可以肯定地说, IWOP 技术在表象和变换理论中有着广泛的应用.

力学量的可观测性与相应算符的本征态的完备性是相互呼应的. 例如, 令 Q, $\hat{P}$ 分别为厄米 (Hermite)的坐标和动量算符, 它们满足海森伯正则对易关系 ($\hbar$ 为普朗克 (Planck)常数)

$$\left[Q, \hat{P}\right] = \mathrm{i}\hbar. \tag{1.2}$$

对于我们所熟知的坐标表象, 坐标 Q 的可观测性有相应的本征态, $Q\left|q\right\rangle = q\left|q\right\rangle$. 动量与坐标是一对共轭量, 所以也存在动量表象 $\left|p\right\rangle$, $\hat{P}\left|p\right\rangle = p\left|p\right\rangle$, 其完备性条件为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p \left|p\right\rangle\left\langle p\right| = 1. \tag{1.3}$$

属于不同本征值的本征态是相互正交的, 有

$$\left\langle q\right|\left. q'\right\rangle = \delta(q - q'), \qquad \left\langle p\right|\left. p'\right\rangle = \delta(p - p'), \tag{1.4}$$

且

$$\left\langle q\right|\hat{P} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left\langle q\right|, \qquad \left\langle p\right|Q = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\left\langle p\right|. \tag{1.5}$$

狄拉克指出 $\left\langle q\right|$ 与 $\left|p\right\rangle$ 的内积是

$$\left\langle q\right|\left. p\right\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}qp}, \tag{1.6}$$

这恰是傅里叶 (Fourier)变换的核. 在这里, 我们总结一下狄拉克符号法的优点：

(1) 表象能够反映波–粒二象性, 例如 $\left|p\right\rangle\left\langle p\right| = \delta\left(p - P\right)$ 是 δ 算符, 表明有一个粒子动量为 p, 呈现粒子性；而 $\left|p\right\rangle$ 在坐标表象的表示 $\left\langle q\right|\left. p\right\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}qp}$ 是