

国家“十一五”重点图书

量子物理新进展系列

量子力学语言 ——狄拉克符号法进阶

范洪义 袁洪春 著



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

量子物理新进展系列
上海科技专著出版资金资助项目

量子力学语言 ——狄拉克符号法进阶

范洪义 袁洪春 著

上海交通大学出版社

内 容 提 要

量子力学创始人之一狄拉克的符号法是学习研究量子论的人所必须习惯的“语言”，它对物理本质的深刻反映在某种程度上超越了时代，其内涵与美仍然需要进一步的认知。正如狄拉克本人所言：“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(IWOP)技术，实现了将牛顿-莱布尼茨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，进一步揭示了狄拉克符号法的科学美，开拓了连续变量纠缠态表象在多个物理领域的新应用，为量子力学开辟了一个崭新的研究方向。本书运用符号法，结合IWOP新技术和新表象，提出并阐述了很多新的有意义的物理课题。

本书可供高等院校物理学科的本科生和相关专业的研究生阅读与学习，也可供从事基础物理理论研究和应用的科研人员参考与借鉴，能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

量子力学语言：狄拉克符号法进阶/范洪义，袁洪春著。

—上海：上海交通大学出版社，2011

(量子物理新进展系列)

ISBN 978-7-313-07246-7

I. 量… II. ①范… ②袁… III. ①量子力学

IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 070222 号

本书出版由上海科技专著出版资金资助

量子力学语言

——狄拉克符号法进阶

范洪义 袁洪春 著

上海交通大学出版社出版发行

(上海市番禺路 951 号 邮政编码 200030)

电话：64071208 出版人：韩建民

常熟市华通印刷有限公司 印刷 全国新华书店经销

开本：850mm×1168mm 1/32 印张：10.25 字数：270 千字

2011 年 10 月第 1 版 2011 年 10 月第 1 次印刷

ISBN 978-7-313-07246-7/O 定价：60.00 元

版权所有 侵权必究

告读者：如发现本书中有质量问题请与印刷厂质量科联系

联系电话：0512-52391383

出版说明

科学技术是第一生产力。21世纪，科学技术和生产力必将发生新的革命性突破。

为贯彻落实“科教兴国”和“科教兴市”战略，上海市科学技术委员会和上海市新闻出版局于2000年设立“上海科技专著出版资金”，资助优秀科技著作在上海出版。

本书出版受“上海科技专著出版资金”资助。

上海科技专著出版资金管理委员会

前　　言

1926 年, Dirac(狄拉克)发表了“关于量子力学理论”的论文。不久, 爱因斯坦就写信给荷兰物理学家埃伦费斯特, 信中说: “我对 Dirac 感到很头疼, 就像走在令人眩晕的小径上, 在这种天才与疯狂之间保持平衡是很可怕的。”于是, 埃伦费斯特就写信给 Dirac, 说: “由于爱因斯坦非常希望理解您的论文, 我们一干就是几个小时试图理解它……我们要花很长时间才能理解你论著里的几页! 而且很多要点对我来说仍然像在漆黑的夜晚里无法看清。”大约在同一时期, 薛定谔在给玻尔的信中这样写道: “Dirac 有一种完全独创性、独特的思维方式, 他完全不知道他的论文对普通的读者是多么难。”

另一量子物理学大师海森伯则说: “在量子论中出现的困难……是有关语言运用问题。首先, 我们在使用数学符号与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去。”是 Dirac 在总结了海森伯的矩阵力学与薛定谔的波动力学后发明了阐述量子理论的精确而自恰的数学形式, 他发明的符号法是优秀而精辟的符号在现代物理学中应用的一次高潮。作为量子力学的标准语言, 符号法成功地引入了 q 数的表象和变换理论, “用抽象的方式直接地处理有根本重要意义的一些量”, “能深刻地反映物理本质”, 并能引申出量子物理中的一系列新概念。难怪玻尔说: “Dirac 是所有物理学家中最纯洁的灵魂。”

英国物理学家霍金这样论 Dirac 的贡献: “他写出了一篇出色的论文, 其中他阐述了任何系统的量子力学的一般规则。这些规则结合了海森伯和薛定谔的理论并指出它们的等价性。在现行量

子力学的三个奠基人中,海森伯和薛定谔的功劳是他们各自看到了量子理论的曙光,但是正是 Dirac 把他们看到的交织在一起,并揭示了整个理论的图像”。大数学家冯·诺依曼写过一本《量子力学的数学原理》,认为 Dirac 的理论体系“就其简洁和优美而言是很难超过的”。纳维尔·莫特曾这样评价 Dirac:“他是能够完全独立工作的极少数科学家之一,如果他有一个图书馆,他可能连一本书和期刊都用不着。”关于符号法中的变换理论,Dirac 本人曾说:“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,符号法是永垂不朽的。”

自古以来,以贴切地表现概念为目的,符号在人们的日常生活中扮演着重要的角色。为了无障碍的交流,古人发明了象形符号并通过组合将之演变成更为抽象的文字,如苏美尔的楔形文字、殷商的甲骨文;为了反映数目的概念,数字应运而生,其中阿拉伯数字以其简明和若干历史原因而最终为世界所通用;随着近代科学技术的发展,合适地诠释物体属性或描述物体运动状态及其变化过程成为时代的需求,与之相应的一系列物理量也用字母符号来加以表示。20世纪初量子力学的诞生扫除了物理学上空的两朵乌云,是物理学史上的重大事件,但量子的概念因其革命性的观点和特殊的运算规则而在相当一段时间里缺乏统一的、适当的描述。爱因斯坦在《物理学的进化》一书中曾提出:“我们可以说建立一种新理论不是像毁掉一个旧仓库,在那里建起一个摩天大楼。它倒是像在爬山一样,愈是往上爬愈能得到新的更宽广的视野,并且愈能显示出我们的出发点与其周围广大地域之间的出乎意外的联系。但是我们出发的地点还是在那里,还是可以看得见的,不过显得更小了,只成为我们克服种种障碍后爬上山巅所得到的广大视野中的一个极小的部分而已。”

理论物理也有视野或境界吗？读者也许要问，只听说中国的古典诗词有境界，怎么理论物理也有呢？诚然，中国唐诗宋词的一大特点是境界高雅、深邃、超逸，什么是境界呢，我们的肤浅理解是人们在读和写文艺作品时个人的感受能力或顿悟可以达到的地方，或是指精神上所能享受到愉悦或共鸣的境地。诗词中事、情、景交融升华的艺术成就越高，则境界就越高，高手的文章则往往从“有我之境”到“无我之境”，即“不知何者为我，何者为物”，“物我两忘”。我们在学习与写作理论物理论文时也有境界，它是我们对于论文的简洁性，质朴美以及潜在应用的感受能力之所及。当欣赏者自己能置身于内，并有所创新与发展时，那么境界就上升为意境。对于理论物理美感与简洁把握得越好，则境界就越高。Dirac 的论文是简洁与美的和谐结合，又有广泛的实用意义，所以其境界就高。所谓“高举远慕，有遗世之意”，我们在读他文章时，从开始不懂、生疏，到了解、掌握与欣赏，就开拓了我们的境界，就像读唐诗一样，从不会欣赏到会欣赏，是一种境界提高的过程。当我们能发展 Dirac 的若干前驱性工作，作出了令世人瞩目的新贡献时，境界就演变为意境，我们就从“有我之境”进化到了“无我之境”，完全陶醉在文章的优美谐调中。艺术风格有难有易，简易不是平庸与浮浅，简易是艺术最后的成就，古今中外最大的艺术作品都是简单而深刻的，从而能流芳百世，但要达到简易，必先经历磨难与锤炼。意境深远的理论物理作品看上去是水到渠成，不露雕凿痕迹，似乎是信手拈来，不假思索的，如 Dirac 描写电子的方程。范洪义所创造的符号法中的有序算符内的积分理论（简称 IWOP 技术），它将原本只适用于可对易函数的牛顿-莱布尼茨积分公式推广到由 Dirac 符号 ket-bra 组成的非对易量子算符的积分运算，不仅丰富了 Dirac 符号的运算规则，大大简化了计算，而且有利于揭示 Dirac 符号法蕴藏的和谐与优美。正如 Dirac 所说：“……对于一个有经典对应的量子动力学系统，量子理论中的幺正变换就是经典理论中切变换的对应。”而 IWOP 技术是找到这种对应的有效

方法。

总之,Dirac 的符号法是量子力学的“一种内在的生气、情感、灵魂、风骨和精神”,本书论述如何发展它到更高一层,以进一步体现量子力学理论作为一部艺术作品的意蕴,使读者能够直接从狄拉克符号法得到其物理思想之表象。

本书在筹划和写作过程中,作者范洪义得到妻子翁海光以及研究生的协助,他们是胡利云、徐学翔、范悦、陈俊华、许亚军、吕翠红、王帅、王震、孟祥国等,在此谨致谢意。也感谢上海交通大学领导谢绳武、叶取源、张杰和物理系叶庆好教授、庞乾骏教授等的大力支持及有益帮助。每当夜深人静、身心疲倦想偷点儿懒时,范洪义脑海里就会闪现慈母毛婉珍 50 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眼前,鞭策着他再打起精神,坚持工作一会儿。另一作者袁洪春在写作过程中得到了常州工学院光电工程学院的支持和妻子李恒梅的帮助,在此深表感谢。

科研作品贵在学府渊源,标新立异,方能使读者动其妍思,引其芳绪。人的精力与时光有限,而追求科学真理无涯,因此吾人读书,当读创意鲜明者、理论优美者、方法直捷者、叙述清晰者、悠久不朽者,以此五点为标准,则鲜见佳本也。本书作者不才,写作时尽量以此五点标准来要求自己,然终究水平有限,祈望四方读者批评教正。

目 录

第 1 章 正规乘积算符内积分技术发展 Dirac 符号法	1
1.1 Dirac 符号法的效用,功能及发展的切入点	1
1.2 正规乘积算符内的积分技术	6
1.3 用 IWOP 技术和正态分布讨论量子力学基本表象	10
1.3.1 坐标、动量表象的自然出现	11
1.3.2 坐标-动量中介表象的自然引入	15
1.3.3 相干态表象的自然导出	18
1.4 有趣的 Dirac 符号的积分——压缩算符	23
1.5 一维高斯扰动的能级修正	28
1.6 多模指数算符的正规乘积形式	31
1.7 反正规乘积算符内的积分技术	38
第 2 章 Weyl 编序算符内积分技术发展 Dirac 符号法	44
2.1 用 IWOP 技术导出 Wigner 算符的坐标表象表示	44
2.2 Wigner 算符的 Weyl 编序形式	46
2.3 算符 $\hat{X}^m \hat{P}^n$ 的 Weyl 编序展开形式	50
2.4 任意算符的 Weyl 编序展开公式	55
2.4.1 算符 $G(a^\dagger, a)$ 的经典 Weyl 对应的一般公式	55
2.4.2 任意算符的 Weyl 编序展开公式	57
2.5 Weyl 编序算符内的积分技术(IWWOP)	60
2.6 纯相干态密度算符的 Weyl 编序形式及其应用	63

第3章 用IWOP技术构造菲涅耳算符及其应用	67
3.1 从坐标表象到坐标-动量中介表象的幺正变换	67
3.2 菲涅耳算符的Weyl编序与分解	70
3.3 菲涅耳变换求解含时谐振子的演化	76
第4章 基于广义Randon变换构造多模纠缠态表象	82
4.1 用Wigner算符的广义Randon变换求纯态	82
4.2 量子力学的两体纠缠态表象	85
4.2.1 两粒子相对坐标与总动量的共同本征态 $ \eta\rangle$	85
4.2.2 两粒子质心坐标与相对动量的共同本征态 $ \xi\rangle$	87
4.2.3 两粒子质量不相等的情况	89
4.3 量子力学三体相容算符的共同本征态	90
第5章 两体连续纠缠态表象的应用	94
5.1 纠缠态表象中的Weyl变换、Wigner算符与Weyl对应规则	94
5.2 正定的纠缠Wigner算符与不同质量的两体纠缠态表象	100
5.3 用纠缠态表象求解动量耦合的两体动力学	105
5.3.1 在 $\langle\xi $ 表象中求解 \hat{H} 的能量本征波函数	105
5.3.2 在 $\langle\eta $ 表象中求解 \hat{H} 的能量本征波函数与能级	108
5.4 量子谐振子的二维高斯微扰	111
5.5 纠缠态表象求解复变量Fokker-Planck方程	114

第 6 章 量子相空间中的新积分变换	121
6.1 量子力学中范氏变换的出现	121
6.2 纠缠 Wigner 算符的新变换与应用	129
第 7 章 用 IWOP 技术导出若干算符恒等式与新积分公式	137
7.1 有关单变量 Hermite 多项式的算符恒等式与 新积分公式	137
7.1.1 $H_n(\hat{X}) = 2^n : \hat{X}^n :$ 的推导与应用	137
7.1.2 $H_n(\hat{X}) = 2^n : \hat{X}^n :$ 形式的推广	142
7.1.3 用 Hermite 多项式展开的新公式	147
7.1.4 \hat{X}^{-n} 的 Hermite 多项式展开	149
7.1.5 若干复杂的算符恒等式与积分公式	152
7.1.6 $(\mu a + v a^\dagger)^m$ 与 $H_m(\mu a + v a^\dagger)$ 的正规乘积 与反正规乘积形式	155
7.1.7 有关 Hermite 多项式的若干新积分公式	160
7.2 有关 Laguerre 多项式的算符恒等式	162
7.3 有关双变量 Hermite 多项式的算符恒等式与 积分公式	165
7.4 用纠缠态表象导出双变量 Hermite 多项式的 算符恒等式与积分公式	169
7.5 含有 Stirling 数的算符恒等式	178
第 8 章 用 IWOP 技术构造一种三体纠缠态表象及其 应用	184
8.1 新三体纠缠态表象的构造	185
8.2 新三体纠缠态的 Schmidt 分解	189

8.3 连续两体纠缠态的远程传输	191
8.4 新的三模 $SU(1,1)$ 压缩算符	193
8.5 三模纠缠 Wigner 算符	195
第 9 章 用 IWOP 技术求热场动力学中的热真空态	201
9.1 用 IWOP 技术导出的热真空态 $ 0(\beta)\rangle$	202
9.2 广义的热真空态 $ \phi(\beta)\rangle$	204
9.2.1 用 IWOP 技术导出 $ \phi(\beta)\rangle$	204
9.2.2 用 $ \phi(\beta)\rangle$ 导出系统的内能分布	206
9.2.3 $ \phi(\beta)\rangle$ 的 Wigner 函数与量子 Tomogram ...	207
9.3 广义的两模热真空态 $ \varphi(\beta)\rangle$	209
9.3.1 用 IWOP 技术导出 $ \varphi(\beta)\rangle$	209
9.3.2 用 $ \varphi(\beta)\rangle$ 导出系统的内能分布	212
9.3.3 利用广义 Feynman-Hermann 定理 验证热真空态	213
第 10 章 用 IWOP 技术研究四元数的积分和相干态	216
10.1 一些四元数积分公式的导出	217
10.2 从相干态 $ z\rangle$ 扩展到四元数相干态 $ w\rangle$	222
10.3 四元数相干态完备性的应用	223
第 11 章 指数算符的矩阵 LDU 分解法	226
11.1 对应于 2×2 变换矩阵的指数算符分解	226
11.2 对应于 3×3 变换矩阵的指数算符分解	228
11.3 对应于 $n \times n$ 变换矩阵的指数算符分解	233
第 12 章 s 编序算符内的积分技术及其应用	239
12.1 密度矩阵的 s 编序展开公式与 IWSOP 技术	240

12.1.1	带 s 参数的广义 Wigner 算符 与 Weyl 对应规则	240
12.1.2	密度矩阵的 s 编序展开公式——玻色子 情况	243
12.2	s 编序算符的恒等式	248
12.2.1	$a^{\dagger m}a^n$ 的 s 编序展开形式	248
12.2.2	$\textcircled{S} a^{\dagger m}a^n \textcircled{S}$ 的正规乘积形式	249
12.2.3	$\textcircled{S} a^{\dagger m}a^n \textcircled{S}$ 的 s' 编序展开形式	250
12.3	量子力学基本表象的 s 编序展开式	252
12.3.1	坐标表象与动量表象的 s 编序形式	252
12.3.2	纠缠态表象的 s 编序形式	257
12.4	含 s 参数的 Wigner 算符的 Randon 变换	261
12.4.1	$\Delta(x, p)$ 与 $ q\rangle_{\mu, v, v, \mu}\langle q $ 的 s 编序展开式	262
12.4.2	$(\mu\hat{X}+\nu\hat{P})^n$ 的 s 编序展开式	263
12.4.3	$H_n(\mu\hat{X}+\nu\hat{P})$ 的 s 编序展开式	265
12.5	压缩混沌光场的 Weyl 对应与 P 表示	266
第 13 章 量子光学中光子计数的新公式		269
13.1	密度算符 P 表示下的光子计数公式	270
13.2	带 s 参数的光子计数公式	276
第 14 章 费米系统的 IWSOP 技术及其应用		279
14.1	费米系统的相干态与 IWOP 技术	279
14.2	带 s 参数的费米系统 Wigner 算符与量子化 规则	282
14.3	费米密度矩阵的 s 编序展开公式与 IWSOP 技术	285

14.4 有关费米算符的 s 编序展开式	287
参考文献	291
结语	310

第1章 正规乘积算符内积分技术 发展 Dirac 符号法

1.1 Dirac 符号法的效用, 功能及发展的切入点

20世纪初普朗克在黑体辐射谱的研究中慧眼独具发现了量子, 宣告量子理论的诞生, 是物理学史也是人类文明史上的重大事件。随后, 量子力学的基本概念和规律(方程)分别由海森伯不确定原理(矩阵力学)和薛定谔方程(波函数)所揭示, 扬弃了玻尔旧量子论。关于量子理论的诞生 1995 年霍金曾评价道: “……海森伯和薛定谔的功劳是他们各自看到了量子理论的曙光, 但是正是 Dirac 把他们看到的交织在一起并揭示了整个理论的图像。”那么 Dirac 是靠什么来实现这个统一的呢? 他靠的就是发明了符号法(bra 和 ket), 以及用他的符号表征的表象与变换理论。理论物理学家温伯格认为科学发现的方法通常包括着从经验水平到前提的或逻辑上的不连续性的飞跃, 对于某些科学家来说(如爱因斯坦和 Dirac), 数学形式主义的美学魅力常常提示着这种飞跃的方向。

Dirac 发明的符号法使得量子力学新颖的基本概念和规律可用特殊的符号来统一地描写(物理学家赫兹认为好的符号比发明它的人还要聪明), 这种描述被证明为是贴切的、聪明的、简洁的、永恒的。自古以来, 以贴切地表现概念为目的, 符号在人们的日常生活中扮演着重要的角色。为了无障碍的交流, 古人发明了象形符号, 并通过组合将之演变成更为抽象的文字, 如苏美尔的楔形文字, 殷商的甲骨文。为了反映数目的概念, 数字应运而生, 其中阿拉伯数字以其简明和若干历史原因而最终为世界所通用。随着近代

科学技术的发展,合适地量度物体属性或描述物体运动状态及其变化过程成为时代的需求,与之相应的一系列物理量也用字母符号来加以表示.

用 Dirac 符号可把海森伯矩阵算符简化为 $| \rangle \langle |$ (Dirac 称之为 q 数, 右矢 $| \rangle$ 代表列矩阵, 左矢 $\langle |$ 代表行矩阵, $\langle |$ 是普通数(c 数); 而坐标空间薛定谔波函数 $\psi(x)$ 被表达为 $\langle x | \psi \rangle$, 注意这样以来, 就引入了坐标 x 表象. $\langle x | p \rangle$ 即代表表象变换. 表象(representation)原指客观事物在人类大脑中的映象, 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. 它把系统状态的波函数看成抽象空间中的态矢量, 力学量的本征函数系即此空间的一组基矢, 波函数由这组基矢和相应的展开系数表示. Dirac 符号法成功地引入了 q 数和表象理论^[1], “用抽象的方式直接地处理有根本重要意义的一些量”, 使得贴切地表达量子物理中的一系列新概念并进一步加以运算成为可能. Dirac 符号业已成为量子力学的标准语言.

Dirac 符号是随着量子力学的诞生而应运而生的, Dirac 曾回忆说:“……那时我是一个研究生, 除了研究外, 没有别的任务. 我感谢我生逢其时的事实, 年长几年或者年轻几年都给我机会.” Dirac 符号由于其简洁与高度的抽象, 从一开始就得到人们的青睐. 毫无疑问, 它也应该随着量子理论与实验的不断进展而日趋丰富、深化和完善, Dirac 符号是外在的量子世界与 Dirac 本人的精神世界发生联系时他所产生的一种特殊的感觉, 他之所以有这种与众不同的感觉是由于他有工科知识的背景, 具体地说是投影矢量空间的知识(或者张量的知识), 这种特殊的感觉经过理性的抽象后倾吐出来, 于是就有了态矢(bra 和 ket), 这是 Dirac 的天才之处. 因为一个好的符号不但能够简洁深刻地反映物理本质, 把物理内容与数学符号有机对应, 而且可以大量地节约人们思维的脑力. 例如他把一个跃迁矩阵元记为 $\langle out | \hat{X} | in \rangle$ 就形象地反映出初始状

态 $|in\rangle$ 经过一个仪器 (\hat{X} 作用) 而变为输出状态 $|out\rangle$.

在量子物理中, 通向更深入的基本知识的道路是与最简洁的数学描述相联系的, 所以 Dirac 说过: “……符号法, 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之时, 它将更多地被人们所采用.” 以下我们就努力实现 Dirac 的期望, 发展其符号法, 我们选择的研究方向是能否对连续的 ket-bra 组成的算符积分. 早在 1966 年末范洪义自学《量子力学原理》^[2]一书时就意识到对这类算符的积分存在困难, 例如怎样完成积分 $\int_{-\infty}^{+\infty} |x/2\rangle\langle x| dx = ?$, 其中 $|x\rangle$ 是坐标本征态, 尽管以往的书中有量子力学坐标表象的完备性 $\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x| dx = 1$. 这个问题乍一看似觉肤浅, 但实际上是一个 ground breakthrough stone corner 问题. 因为 17 世纪继牛顿-莱布尼茨发明微积分后, 在 18 世纪泊松是第一个把积分推广到复平面上的人, 所以泊松积分代表微积分发展的一个 stone corner. 而如今如何把使牛顿-莱布尼茨积分适用于 $|\rangle\langle|$ 的积分难道不是一个挑战吗?

范洪义记得中国科大原副校长、物理学家严济慈曾指出: “教书要深入浅出, 学习要浅入深出.” 注意这里指的学习是广义的, 即包含研究. 多年来在教育界“深入浅出”这个成语用得较多, 也是大众追求的目标; 但是对于“学习要浅入深出”, 严济慈先生的观点可谓惊世骇俗, 范洪义相信他琢磨的积分问题符合浅入深出的科研途径. 综观近代物理发展史可见, 很多理论物理的重大创新成果都来自“浅入深出”. 爱因斯坦是浅入深出做学问的大师, 例如, 他从光速不变推出狭义相对论; 从引力质量为何等于惯性质量入手, 建立广义相对论体系. 又如德布罗意注意到由相对论的质能关系式, 凡粒子皆有能量; 再由普朗克公式, 能量可关系于频率, 有频率皆表现为脉动, 而脉动的粒子就有波动性, 所以粒子总是同某种波动性相联系. 他于是导出了物质波长与物质粒子的动量之间存在