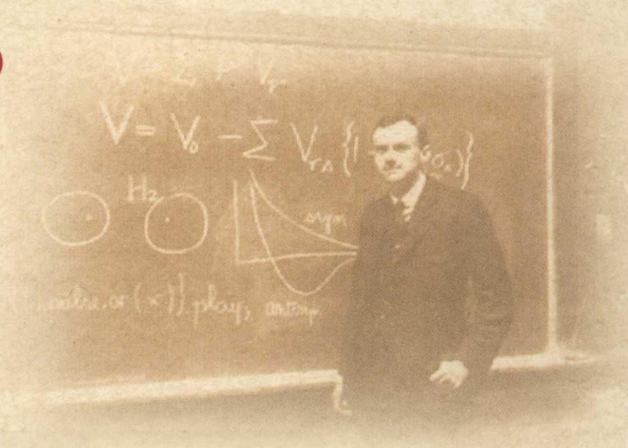
量子力学表象与变换论

狄拉克符号法进展

第2版

范洪义 著



中国科学技术大学出版社

量子力学表象与变换论

狄拉克符号法进展 第2版

范洪义 著

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

本书对狄拉克创立的表述量子论的符号法推陈出新，系统地建立了“有序算符内的积分(IWOP)技术”的理论，在更深层次上揭示符号法的优美和简洁，使狄拉克的表达得到更多的直接应用. 在看似已臻完美的量子力学理论体系中，开辟了一个全新的研究方向，别开生面地发展了量子力学的表象与变换理论，展现出广阔的应用前景.

全书共 19 章. 第 1 章是问题的提出；第 2 章介绍预备知识；第 3 章提出有序算符内的积分技术；第 4 章到第 19 章，介绍 IWOP 技术的各种应用和推广.

本书叙述由浅入深，表达也较严谨，适合理工科大学的学生、教师和各个领域的理论物理工作者以及对量子力学感兴趣的人阅读与欣赏.

图书在版编目(CIP)数据

量子力学表象与变换论：狄拉克符号法进展/范洪义著. —2 版. —合肥：中国科学技术大学出版社，2012. 3
ISBN 978-7-312-02769-7

Ⅰ. 量… Ⅱ. 范… Ⅲ. 量子力学—研究 Ⅳ. O413. 1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 267140 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 邮编：230026
http://press.ustc.edu.cn
印刷 中国科学技术大学印刷厂
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 29
字数 552 千
版次 1997 年 12 月第 1 版 2012 年 3 月第 2 版
印次 2012 年 3 月第 2 次印刷
定价 68.00 元

再 版 序

随着对狄拉克符号法研究的不断深入，人们对其重要性的认识也“更上一层楼”，由作者发明的对由狄拉克的 ket-bra 组成的算符的积分法现已被广大业内人士认为是量子力学表象与变换论进展的重要标志，也是经典力学向量子力学过渡的一座“桥梁”. 如果说第一个把牛顿-莱布尼兹积分推广到复平面去的是法国人(18 世纪数学家泊松)，那么首先把牛顿-莱布尼兹积分应用到狄拉克的 ket-bra 算符(20 世纪 80 年代开始做的研究工作，这也是数学与量子物理完美结合的一个例子)的就是中国物理学家. 可谓“意古直出茫昧始，气豪一吐阊阖风”.

值此《量子力学表象与变换论》再版，感谢广大读者的厚爱. 因为在以往的十几年中，这本书的原版一直是一书难求，所以现在将它再版以满足社会所需. 作者同时也非常感谢中国科学技术大学校长兼研究生院院长侯建国院士和副校长兼研究生院常务副院长张淑林教授对我的科技写作的支持.

范洪义

2012 年 2 月

序

一直以为写书是到老了搞科研精力不够时才做的事，由于这种潜意识，虽然出版社约稿好几年，但都没能下决心完成它.在国内外前辈、同行、出版社乃至研究生的关注和鼓励下，终于拿起笔静下心来花半年多的时间，夜以继日地工作，把16年来的若干研究凝聚成这本书.如果把年复一年的科研喻为不懈的耕耘，那么整理论文写成书也许就像金秋的收获；如果说昔日的探索犹如撒向科学知识之海的一张张网，那么如今的总结也许就是拉网收网的捕获.

记得在中学时，就对量子力学这一支配微观世界的学问有着浓厚的兴趣；进入大学后，有了两年的数理基础，就找了一本狄拉克的《量子力学原理》来读，前几章看了多遍，对于坐标表象的完备性$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q\,|q\rangle\langle q|=1$的理解总觉得肤浅，如果对此积分稍作改动，得到形为$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}q}{\sqrt{\mu}}\left|\frac{q}{\mu}\right\rangle\langle q|$的积分，其“值”是什么？笔者当时想，这个积分应该是有意义的，因为$|q\rangle$是坐标本征矢，q是实数.当$\mu>0$时，$\left|\frac{q}{\mu}\right\rangle$落在坐标本征态的集合内，可就是不知道如何去做这个积分.脑海里萦回着两个问题：既然是积分，为何不直截了当地去实行它？积分代表的物理意义又是什么？由于十年“文革”中止了正常的教学活动，这些疑问直至20世纪70年代末自己的知识积累到一定程度产生了灵感才得以解决.

众所周知，物理学的重大发展在于克服成见，在概念和方法上有所创新.在20世纪初量子力学的建立则引入了全新的观念.先是普朗克引入能量量子的概念，然后是玻尔提出定态的量子化条件概念，它表明物理学的进一步发展需要有一些联系两个态的物理量，这促使海森堡将同两个态相关的量写成一个矩阵行列，引入了矩阵是同力学量一一对应的物理思想.在此基础上，狄拉克注意到物理学家必须同不可对易代数的力学量打交道，认为有必要创造一种q数理论.这种q数与具有不依赖于坐标系而独立存在的张量相似，是不依赖于任何矩阵表示而独立存在的.在结合了薛定谔的波函数的物理思想后，狄拉克引入了态矢(ket)这一概念，建立了q数与态矢的关系，提出了符号法(Symbolic method)这一新理论.1929年他出版

的《量子力学原理》(The Principles of Quantum Mechanics) 就系统地总结了符号法,“用抽象的方式直接地处理有根本重要意义的一些量”. 可以说,符号法是狄拉克 q 数理论的同义语.

如果把符号法理解为只是一种数学方法,那就实际上没理解狄拉克在物理观念上对量子力学所做的革命性的贡献. 狄拉克说:“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”. 狄拉克的“符号法更能深入事物的本质”,“物理学家曾不得不去习惯这些 q 数与态矢的新概念”.

爱因斯坦曾指出:“在物理学中,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.” 对此,狄拉克深信不疑. 他在《量子力学原理》第一版前言中期望符号法“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”.

笔者努力去实现狄拉克的这个期望,发展他创立的符号法,即发展 q 数的概念,找出得到 q 数的新方法. 而要发展一门学科并有所创新,自然要善于发现和提出问题,在常规知识中寻找非常识,从司空见惯中发掘新内容. 笔者对狄拉克原有的表象理论结合变换理论,提出了一系列新问题(见第 1 章),首创了有序(包括正规乘积、反正规乘积和 Weyl 编序) 算符内的积分技术 (the Technique of Integration Within an Ordered Product(IWOP) of Operators),并利用这一技术去解决这些问题. 因此,本书是面对原始问题而极力推陈出新,并使之系统化的一本著作.

全书内容作如下安排:

第 1 章分析狄拉克符号法“抽象” 的原因何在. 物理上的深刻才能使“抽象” 成为可能. 另一方面,对“抽象” 作某些必要的诠释可以使读者更好地理解、应用与发展它. 正确地提出问题是解决问题的先导,所以该章围绕着如何方便地完成由经典变换向量子力学幺正算符过渡的若干例子,提出怎样实现对连续表象中不互为共轭虚量的 ket-bra 算符积分的问题.

第 2 章简要介绍一些预备知识. 它对阅读以后的章节是必需的,凡学过谐振子和 Fock 表象的读者都可从此章开始阅读本书.

第 3 章提出物理目标明确、数学描述简洁的有序算符内的积分技术(着重是正规乘积内的积分技术),按其英文简称常写为 IWOP 技术,以解决多年来悬而未决的若干问题,并为开拓新课题做准备.

第 4 章到第 19 章,给出有序算符内积分技术的各项应用与推广(包括反正规乘积及 Weyl 编序内的积分技术并发现和应用新的表象;在量子光学中的广泛应用

等).理论物理学家总是设法用尽可能简单的方式来说明对象,用所创建的理论尽可能广泛和深刻地描述事物及其相互联系,这是基本的研究目标.应该说明的是,在读第19章前,需准备一些量子场论的基本知识,诸如标量场与旋量场的量子化及自由电子狄拉克方程的理论.

通过阅读本书,读者可体会到狄拉克符号法的魅力所在,它使物理内涵变得更丰富、更优美、更简洁,能更清晰地反映物理规律,从而更容易为人们所理解.读者又可看到IWOP技术如何开拓符号法的应用潜力,使之得以充分而又自然地发挥;还可看到IWOP技术是如何在量子光学、群表示论、固体理论、耦合振子动力学、Wigner函数、经典力学向量子力学的过渡、统计力学、相干态与压缩态等诸多方面发挥积极作用的.

笔者希望读者能通过学习IWOP技术感受到量子力学数理基础内在的美.尽管本书的出发点是很基本的,凡初具量子力学知识的人都有能力读这本书,作者仍力图另辟蹊径朝深度、广度拓展.数学家希尔伯特认为,只有包含了数学的自然科学分支,它才有资格成为一门地地道道的科学.只有把一门自然科学中的数学内核完全揭示出来,才能理解它.相信读者会领略到IWOP技术确实起到了揭示狄拉克符号法内核的作用.

狄拉克符号法几乎是每个学习与研究量子力学的人都要了解的,故本书的内容具有基本性与普及性.此外,由于推陈出新,本书的绝大部分又是新颖的.它既适合于教学,又适合于科研需要,可供大学生、研究生作学习量子力学的补充教材.它有利于这些读者加强基本功,扩大知识面,培养发现问题和解决问题的能力,提高研究素质.对于从事理论物理、量子化学、量子光学、原子分子物理学、固体物理的研究人员,本书也能使之耳目一新.

在组织与整理本书的素材前,笔者曾先后在美国的罗切斯特(Rochester)大学、纽约(New York)大学、佛罗里达(Florida)大学、内华达(Nevada)大学、休斯敦(Houston)大学讲学,又与美国的阿肯达(Arkansas)大学和加拿大的新不伦瑞克(New Brunswick)大学合作交流过,还被邀请在1993年的国际相干态会议上作专题报告,介绍如何发展狄拉克符号法的思想.在国内,作者也曾在中国科学技术大学、东南大学、南开大学讲学,与诸多教师进行了有益的讨论,引起普遍的兴趣.

笔者衷心感谢多年来鼓励开展这项研究的钱临照、谷超豪、阮图南、朱清时、阎沐霖等教授.尤其是钱临照先生,他给予的高度重视是促使本书得以完成的一个动力.他特地为本书录了北宋文学家王安石的两句话:“看似寻常最奇崛,成如容易却艰辛.”这两句话对于每一个长期从事科学研究和基础教育的人来说,是形象而又真实的写照.如若本书的精华能以寻常知识为读者所接受,这正是笔者艰辛之余聊

以自慰的,也能告慰已故母亲毛婉珍的在天之灵.笔者还要真诚地感谢曾一起合作研究的老师和同事(他们的姓名及合作论文已分别列出在本书末的参考文献中),由于他们勤奋的工作及有益的讨论,加快了一些论文完成的进程.此外还要感谢上海科学技术出版社的戴雪文编审,他一丝不苟的敬业精神,使书稿能以尽可能完美的形式问世.

本书是在繁忙的科研与教学工作中挤时间写成的,祈望各方面读者不吝赐教.

最后,需要特别指出,本书虽然介绍了有序算符内的积分技术以及它的优美性、基础性和被普及的必要性,但并非将它的各种可应用的领域都涉及了,相信越来越多的应用还会被找出来.

范洪义

1995 年 11 月

目　次

第 1 章　问题的提出

狄拉克是量子力学创始人之一，他的名著《量子力学原理》[1]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．如英国《自然》杂志所评论的那样："《量子力学原理》是量子力学原理的标准著作，对于优秀的学生和资深的研究工作者都是必不可少的，他们总是会发现该书是获取知识和激励创造的新源泉．该书的第一版在 1930 年出版，它的创造性立即使它被公认是一本近代物理理论的经典著作．"该书内涵广深，而叙述简洁、精炼．在该书中，就非相对论量子力学内容而言，狄拉克总结了海森堡的用矩阵表示力学量的做法和薛定谔的按照德布罗意思想而在原子理论中引入的态的概念，提出了自己独特的表述量子论的数学形式——符号法，使量子论成为严密的理论体系．正如狄拉克后来回忆道[2]："海森堡和薛定谔给了我们两种形式的量子力学，马上就被发现是等价的．他们提供了两个图像，用一种确定的数学变换联系起来．""从海森堡的最初思想出发，人们就能在这方面取得相当迅速的进展，当时我正好是一名研究生，我十分庆幸自己生逢其时，使我有可能也加入这个行列．"[3]"我加入量子力学的早期工作，用非常抽象的观点，沿着依赖数学的步骤．我采取了由海森堡矩阵启迪的非对易代数作为一个新动力学的主要特征，并且检验经典动力学怎样能适应和符合于它．"[2]为了阐述他的理论，狄拉克用他的"神来之笔"引入了右矢和左矢的概念，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；他把非对易的量子变量称为 q 数，发展出比矩阵力学更为抽象的、普通的 q 数理论，其中包括表象理论（例如，代表坐标的力学量 Q 是一个 q 数，它的本征态是 $|q\rangle$，坐标表象 $|q\rangle$ 的正交完备性为 $\langle q'|q\rangle=\delta(q'-q)$，$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q\,|q\rangle\langle q|=1$），和以不对易量 q 数为基础的方程．狄拉克认为 q 数是"物理学家必须熟悉的一个新概念"．他说[4]："从一开始，当我第一次看到海森堡提出这些思想的原始论文时，我似乎觉得，其中最重要的思想就是：我们必须去处理服从不可对易代数的力学变量．我给这些力学变量引入了一个新名称，叫做 q 数．"狄拉克天才地把 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公式体系，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互相等价，而薛定谔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；他又得出了同时给出两个互为共轭变数的精确值是不可能的结论.在建立变换理论的过程中，狄拉克充分利用了他发明的 δ 函数.

《量子力学原理》是狄拉克敏锐的物理直觉和卓越的数学才能的结晶，它的出版表明量子力学已成为严密的、自洽的、优美的理论体系，它对量子论本身及其在其他各学科方面的应用起了奠基石的作用.例如，另一种量子化方案——Feynman 路径积分量子化理论的提出，就是得益于《量子力学原理》这本书.狄拉克最大的贡献——相对论量子理论（描述电子的狄拉克方程）则是该书另一重要内容.

半个多世纪以来，量子理论在若干代科技精英的不懈钻研下不断完善，使得“现在第一流的物理学家做第二流的工作都非常困难”[3].一般认为，量子论由古典物理观念演化而成，这一过程完成于 20 世纪 20 年代中叶后的两三年间，由于新颖的创想和数学形式的建立，以及物理意义和哲学解释，整个新理论的系统皆确立无遗.那么，狄拉克的符号法（Symbolic method）本身（包括表象理论、变换理论）究竟还能发展吗？现有的表述形式至善至美了吗？让我们先看看狄拉克本人在《量子力学原理》的第一版序言中是怎样讲的吧.狄拉克写道：“符号法，用抽象的方法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炼的方式来表达物理规律，很可能在将来当它变得更为被人们所了解，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.”[1]

狄拉克的《量子力学原理》再版了多次，所以他的这段话也强调了多次，因此我们对其应予以足够的重视与关注.

从这段话中我们领会到狄拉克期望着：① 他的抽象而深刻的 q 数理论在将来变得更为人们所了解（即目前理解得还不够）. ② 符号法本身的数学应有所发展. ③ 符号法应该有更多的物理应用.

科学进步的途径之一就是对常识提出合理的疑问，善于发问反映了科学家的素质，尼尔斯·玻尔曾谦逊地说过他不过也许比别人多知道一点问题.善于从平凡中发掘出不平凡的问题，也是科学思维的重要特点.事实上，与其他创新相比，对传统的基本见解的创新显得格外意义重大，因为它对现有科学知识将产生广泛的影响.那么，我们怎样从已作为基本常识接受下来的狄拉克的符号法中找出不平凡的问题来呢？

对于连续表象的完备性，如大家熟悉的坐标表象的完备性关系，我们不应局限