

物理学前沿丛书

量子力学表象与变换论

——狄拉克符号法进展

范洪义 著

上海科学技术出版社

责任编辑 戴雪文

物理学前沿丛书

量子力学表象与变换论

-----狄拉克符号法进展

范洪义 著

上海科学技术出版社出版、发行

(上海瑞金二路 450 号)

从考了 & 上海发行所经销 商务印书馆上海印刷厂印刷

开本 850×1156 1/32 印张 17 插页 4 字数 436,000

1997年12月第1版 1997年12月第1次印刷

印数 1— 1 200

ISBN 7-5323-4024-4/O \cdot 201

定例: 30,00 元

如有质量问题,请与厂质量科联系。T: 56628900×13

内容提要

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,发展了量子力学的表象与变换理论。

全书共十九章。 第一章是问题的提出; 第二章介绍预备知识; 第三章提出有序算符内的积分技术; 第四章到第十九章, 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阅读。

A FRONTIER SERIES IN PHYSICS

Representation and Transformation Theory in Quantum Mechanics

Progress of Dirac's symbolic method

Fan Hongyi

SHANGHAI SCIENTIFIC & TECHNICAL PUBLISHERS

《物理学前沿丛书》编辑委员会

主 编 冯 端 常务编委 倪光炯

委 员 (以姓氏笔划为序)

王 迅 甘子钊 闵乃本李家明 汪克林 张其瑞 周孝谦 段一士 高崇寿陶瑞宝 顾世洧 顾秉林 侯伯宇 唐孝威 龚昌德 黄祖洽 葛墨林 蒲富格 戴元本

A FRONTIER SERIES IN PHYSICS

EDITORIAL BOARD

Editor-in-Chief Feng Duan

Executive Editor Ni Guangjiong

Members

Dai Yuanben Duan Yishi

Gan Zizhao Gao Chongshou

Ge Molin Gong Changde

Gu Binglin Gu Shiwei

Hou Boyu Huang Zuqia

Li Jiaming Min Naiben

Pu Fuke Tang Xiaowei

Tao Ruibao Wang Kelin

Wang Xun Zhang Qirui

Zhou Xiaoqian

我社在物理学界专家学者的热忱关怀下,历年来出了一些比较好的书,如《晶体生长的物理基础》(闵乃本著)、《原子物理学》(第一版杨福家著)、《原子结构核理论》(曾谨言、孙洪州编著)、《群表示论的新途径》(陈金全著)、《物理学中的群论》(陶瑞宝著)、《近代物理学》(倪光炯、李洪芳编著),等等。这些书受到国内外物理学界、出版界和读者的欢迎和好评。为进一步出好这方面的著作,我社拟出版《物理学前沿丛书》。其宗旨是:向国内外介绍我国第一流的物理研究成果,扩大我国物理研究成果在国内外的影响,促进学科的发展和交流。《物理学前沿丛书》包括的面:基础物理、应用物理和技术物理的前沿领域。

考虑到物理科学的特点,在大体统一的规格要求下,我们将充分发挥作者的特长,努力使本丛书具有丰富多采的风格。例如: (1)作者可以对一个专门分支学科,按自己的观点作比较全面深入的阐述,其中一部分内容反映作者自己的创造性工作: (2)作者也可以为着重反映自己有特色的、比较成熟的系统性研究,就某一个重要的课题作详细的介绍,但应包括必要的预备知识和有关课题在国际上的发展动态; (3)在某一领域或新课题的研究发展特别迅速的情况下,我们也可把系列学术报告或专门性讲座汇编起来,经过适当加工,再加上一个比较详细的前言介绍,以便尽快出版; (4) 在考虑书稿时应充分注意历年来"获奖"项目和国家基金会重点资助的项目。

我们希望,本丛书不仅可以作为高年级大学生和研究生的教材,而且对广大的教师和科研工作者有益,经若干年有了适当的积累之后,能够在一定程度上显示出我国物理学界的风貌。

我们诚恳希望得到物理学界广大专家的大力支持和指导, 使 这套书的出版达到预期的目的。

> 上海科学技术出版社 1992年10月

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,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,日以继夜地工作,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,笔者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 $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q\ q > \langle q | = 1$ 的理解总觉得肤浅,如果对此积分稍作改动后的形为 $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}q\ q}{\sqrt{\mu}} \langle q |$ 的积分"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, $|q\rangle$ 是举标本征东的集合内,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"动乱"中止了正常的教学活动,这些疑问直至 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。在本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《量子力学的原理》(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(见第一章),并首创了有序(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)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:

第一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么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。

第二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。

第三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,并为开拓新课题作准备。

第四章到第十九章,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,在读第十九章前,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,本书的绝大部分内容又是新颖的。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 Rochester 大学、New York 大学、Florida 大学、Nevada 大学、Houston 大 学讲学,又与美国的 Arkansas 大学和加拿大的 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 国科技大学、东南大学、南开大学讲学,与诸多教师进行了有益的 讨论,引起普遍的兴趣和反响。

笔者衷心感谢多年来鼓励开展这项研究的钱临照、谷超豪、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。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 应用的领域都涉及到了,相信越来越多的应用还会被找出来。

> 范洪义 1995年11月

I accepted the appointment to write this book several years ago, but just finished by now. The delay is partially owing to my early persuasion that books are written only by those who have no energy to conduct active research any more. For my colleagues home and abroad, as well as my students, gave me a lot of pushes and encouragement, however, I devoted the days and nights of the past six months to putting most of my research in the 16 years into a book. If the year-by-year research is persistent cultivation, the completion of the book is just the harvest; if the inquiries and explorations are like casting nets into the vast ocean of scientific knowledge, the summary is the collection of gains.

It was when I was in the middle school that I was deeply attracted by quantum mechanics, the governer of the microscopic world, but I didn't begin to read any book about it until having got the elementary knowledge about mathematics and physics in the two years following my enrollment in university. Although having read the leading chapters of "The Principles of Quantum Mechanics" by Dirac many times, I still felt that my understanding about the completeness of coordinate representation $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q \, |\, q \rangle \langle q | = 1 \text{ was very shallow, what's the "value" of the integral } \frac{1}{\sqrt{\mu}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q \, \left| \frac{q}{\mu} \right\rangle \langle q |$ then? During those days I deemed the integral meaningful,

because $|q\rangle$ is the eigenstate of the coordinate operator, where q is a real number. When $\mu>0$, $\left|\frac{q}{\mu}\right\rangle$ is in the set of eigenstates of coordinate operator, but I didn't know how to perform this integral. So two questions haunted in my mind: Why not execute it since it's an integral? What physical meaning does it bear? For all normal educational activities were held up by the "Cutural Revolution", these questions didn't find their solutions until the late 1970s when my knowledge was enough to trigger sparks in my mind.

It's well known that any revolutionary progress in physics lies in the divestment of prejudices and innovations in concepts and methods. Completely oringinal opinions were introduced in the beginning of this century when quantum mechanics germinated. Planck introduced the concept of energy quantum, and later Bohr pointed out the quantizing conditions for stationary states, which showed that some physical quantities connecting two states were necessary to further development of physics, and finally enlightened Heisenberg to express these quantities in the form of matrices, revealing that there is some kind of correspondence between matrix and mechanical variable. Based on the foregoing developments, Dirac noticed that it was inevitable for physicists to communicate with the mechanical variables of non-commutable algebra, and he felt the necessity of the theory of q-number, in which the q-number is independent of any matrix representation, simillar to tensors independent of coordinate system. In combining with Schrodinger's concept of state vectors, he introduced "ket", developed the relations between q-numbers and kets and finally produced

the symbolic method. He said: in "the principles of Quantum Mechanics", which was firstly published in 1929, "... the symbolic method ... deals directly in an abstract way with the quantities of fundamental importance ..." In this sense we can say that symbolic method bears the same meaning as Dirac's q-number theory.

If one considers symbolic method only a mathematical method, he acctually failes to grasp the revolutionary contribution Dirac made to physical concepts in quantum mechanics. Just as Dirac said: "a book on the new physics, if not purely descriptive of experimental work, must be essentially mathematical. All the same the mathematics is only a tool and one should learn to hold the physical ideas in one's mind without referring to the mathematical form". For "The symbolic method ... seems to go more deeply into the nature of things", "physicists once have to be used to these new concepts of q-numbers and state vectors".

Einstein said: "In the science of physics, the way to the more deeply elementary knowledge is connected with the most precise mathematical methods". To this Dirac felt no doubt. In the preface to the first edition of "the Principles of Quantum Mechanics", he said: "(The symbolic method) will be increasingly used in the future as it becomes better understood and its own special mathematics gets developed."

The author tries to realize the anticipation of Dirac, to develop his symbolic method, i. e. q-number, and to find new ways to get new q-numbers. To innovatively develop some discipline, one must be ready to propound questions, be sensitive to discern the unconventional from the conventional and to see new ideas in the ordinary. In this book,