# 扩张希尔伯特空间语言下的量子力学

Rafael de la Madrid Modino

2024 年 5 月 11 日

# 目录

# 前言

# 第一章　导言

本章将概述本论文的内容。这些内容主要是关于 Dirac 右矢、Lippmann -Schwinger 右矢、Gamow 向量的性质。

本文是关于 Dirac 右矢、Lippmann -Schwinger 右矢、Gamow 向量在扩张希尔伯特空间语言中的表述。Dirac 右矢是关联于一个可观测量的谱点的态向量。Lippmann -Schwinger 右矢是与散射理论有关的 Hamilton 量的本征右矢。它们对应于 等能[1] "入"散射态和"出"散射态。Gamow 向量是表示共振的态向量的右矢。我们的主要目标是展现：扩张希尔伯特空间是对刻画这些右矢而言最合适的框架。我们将用例子来说明这一点，而不是完全停留于抽象的讨论。主要用到的两个例子是谐振子和方势垒。

本文未讨论任何实验数据，而是关注于解释和理解这些数据的方法、思想和原则。我们将用配备各种边界条件的 Schrödinger 方程来作为提供数据的模型。Schrödinger 方程上的各种边界条件将给出 Dirac 右矢、Lippmann -Schwinger 右矢、Gamow 向量。这样的模型涉及了一种理想化，但这可能仍是理解这些态向量为何物的最佳方式。

须注意，RHS **不是**对量子力学的一种阐释，而是一种表述如 Dirac 右矢、Lippmann -Schwinger 右矢、Gamow 向量这样的启发性的物理概念的更自然、精确、逻辑化的语言。

[1]译者注：原文为：「monoenergetic」。

## 1.1 扩张希尔伯特空间简史

在 1920 年代末，Dirac 引入了量子力学的一种新数学模型，它是基于无穷维复内积向量空间上线性算子所构的一种 唯一的光滑而精致[2] 的抽象代数。Dirac 的**左矢**、**右矢**（源于内积的括号记法）的抽象代数模型在之后的年头里已证明是有着巨大的启发价值——尤其是在处理具有连续谱的 Hamilton 算子时。然而，在寻找一种可用于实际数值计算的线性代数时则出现了严重的困难。

Hilbert 空间 (HS) 是为量子力学提出的第一种数学 形式化 (idealization) 模型然而, 如 von Neumann 在他的书中解释的那样, HS 理论和 Dirac 体系是两回事。尽管有在 Hilbert 空间中实现 Dirac 模型的尝试, 仍有不少严重问题使得这体系无法给出左矢、右矢或 Dirac 函数, 或是无法给 Dirac 基向量展开以一个数学含义——而这种展开在涉及连续谱的量子力学的物理表述中都是及其重要的。当然，Dirac 在他的文字报告中表示：「我们目前所用的左矢和右矢构成了一个比 Hilbert 空间更一般的空间。」。

在 1940 年代末，为 Dirac 函数给出了精确的含义，它定义为一种测试函数空间上的线性泛函。这导向了泛函分析的一个新分支的发展：分布理论。

大约是与此同时，von Neumann 发表了 Hilbert 空间的由一个自伴算子诱导的直积分分解理论（也对更一般的情况成立）。这种谱理论更接近于经典 Fourier 分析，它代表了对更早的 von Neumann 谱理论的一项改进。

则总是认为 von Neumann 谱理论并非无穷维向量空间上线性算子理论的完整故事。获益于分布理论的发展，他与其学派引入了 扩张希尔伯特空间 (RHS) 。从这扩张希尔伯特空间和 von Neumann 的直积分分解出发，他们得以证明所谓核型谱定理（也称为 Gelfand -Maurin 定理）。该定理为算子的谱性质提供了更为彻底的信息，并在相同立足点上处理了连续谱与离散谱。

作为 Dirac 体系的一面，可观测量代数中元素的连续性在 1960 年代初得到了讨论。若可观测量代数中的两个算子满足正则（Heisenberg ）对

---

[2]译者注：原文为：「uniquely smooth and elegant」。

易关系，则它们中至少有一个不能在 Hilbert 空间拓扑下是连续的（即，有界的）。证明了 Hilbert 空间中有这样一些子定义域，其上可配备使得那些算子连续的拓扑。而这些子定义域中最大的就是 Schwartz 空间。

在 1960 年代末，一些物理学家独立地意识到 RHS 为 Dirac 体系的所有方面都提供了一个严格的数学表述。特别地，核型谱定理在数学理论中重新表述了 Dirac 基向量展开和 Dirac 左、右矢。之后，其他作者也得到了相同结论。如今，RHS 已成为教科书中的内容。

在过去一些年中，RHS 作为散射与衰变理论的自然的数学语言而出现。RHS 也被证明在其他理论物理领域中很有用处，如混沌映射的广义谱分解的构造。实际上，为以一种自恰[3] 的方式来处理散射与衰变，RHS 似乎是最为人所知的语言。这就是我们为何在此使用它。

Schrödinger 方程是统御量子系统行为的动力学方程。于是任何试图证明 RHS 包含量子力学所需的数学方法的尝试，都应展现 RHS 是 Schrödinger 方程 之解 (solutions of) 的自然框架。本论文的目的在于得到作为不同边界条件下 Schrödinger 方程的解的 Dirac 、Lippmann -Schwinger 、Gamow 右矢，并展示这些解是落在 RHS 中而非仅仅是在 HS 中。

最终，本文的这些结论将允许我们描绘出一个非常重要的结论：RHS 是处理散射与衰变的自然语言。

## 1.2 谐振子

若一可观测量的谱是离散的，则 Hilbert 空间的数学方法对于量子力学而言已是充分的。然而，若一可观测量的谱有连续的部分，Hilbert 空间的数学方法则还不够，需要这些方法的一种扩展。

物理学家使用 Dirac 的左右矢体系来处理连续谱。四种这种体系的最重要特性是：

1. 对于 $A$ 中谱的任一元素 $\lambda$，都有一对应的右矢 $|\lambda\rangle$，其是 $A$ 的关于本征值 $\lambda$ 的本征矢：
$$A\,|\lambda\rangle = \lambda\,|\lambda\rangle\,. \tag{1.1}$$

[3]译者注：原文为：「consistent」。

2. 一个波函数 $\varphi$ 可用这些本征右矢展开[4]：

$$\varphi = \int_{\mathrm{Spectrum}(A)} \mathrm{d}\lambda \, |\lambda\rangle \, \langle\lambda|\varphi\rangle \, . \tag{1.2}$$

3. 本征右矢按下面的规则归一化：

$$\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta(\lambda - \lambda'), \tag{1.3}$$

   其中 $\delta(\lambda - \lambda')$ 是 Dirac 函数。

4. 所有代数运算，如两个可观测量 $A, B$ 间的对易子

$$[A, B] = AB - BA. \tag{1.4}$$

   都是良定义的。

在量子力学中，可观测量被假定是定义于 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 上的自伴线性算子。若关联于一个可观测量的算子 $A$ 是无界的（这是量子力学中最常见的情况），$A$ 则仅定义在一个子域 $\mathcal{D}(A)$ 上，在其上 $A$ 得以是自伴的。在这种情况下，Hilbert 空间方法并不足以使 eqs. (1.1) to (1.4) 有意义。而 RHS 体系则提供了使它们得以有意义的所需的数学。

另一方面，量子力学的关键假设之一是，量

$$inner \varphi A \varphi \tag{1.5}$$

表示了在态 $\varphi$ 下进行可观测量 $A$ 的测量的结果期望值，且

$$\Delta_\varphi A = \sqrt{(\varphi, A^2\varphi) - inner \varphi A \varphi^2} \tag{1.6}$$

表示了在态 $\varphi$ 下进行可观测量 $A$ 的测量的不确定度（假定波函数 $\varphi$ 归一化到一了）。并不是 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 中的任一元素都能计算期望值 (1.5)，只有那些也属于 $\mathcal{D}(A)$ 的 $\varphi \in \mathcal{H}$ 才行。类似地，不确定度 (1.6) 也不能对 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 中的全部元素计算，而只能对 $\mathcal{D}(|A|)$ 中的计算。若我们取那些可计算期望值 (1.5)、不确定度 (1.6) 等物理量的可归一化函数为物理上的状态，那么很明显并非任一可平方归一化的函数（即，$\mathcal{H}$ 中的元素）

[4] 下式被称为 Dirac 基向量展开

都能表示一个物理状态。如我们将见到的，自然的物理波函数空间是 $\mathcal{H}$ 中的一个子空间 $\Phi$，因为其元素的所有物理量都可计算。进一步来说，$\Phi$ 也具备 Dirac 体系的所有好处。

作为例子，我们考虑谐振子。谐振子的代数包含有位置 $Q$ 和动量 $P$ 这两个可观测量。这些可观测量定义为 $\mathcal{H}$ 上的线性算子，并满足 Heisenberg 对易关系：

$$[P,Q] = PQ - QP = -i\hbar I. \tag{1.7}$$

众所周知的是，eq. (1.7) 意味着 $P$ 或[5] $Q$ 是一个无界算子。这意味着 $P$ 或 $Q$ 不能定义于整个 Hilbert 空间上——它们实际上定义域特定的稠密子域 $\mathcal{D}(P)$、$\mathcal{D}(Q)$ 上，在其上 $P$ 和 $Q$ 是自伴的。因此，表达式 $PQ - QP$ 不能定义在整个 Hilbert 空间上。此外，由于 $\mathcal{D}(P)$、$\mathcal{D}(Q)$ 在 $P$、$Q$ 的作用下不再是不变[6] 的，表达式 $PQ - QP$ 仅对那些满足 $\varphi \in \mathcal{D}(Q), \varphi \in \mathcal{D}(P), P\varphi \in \mathcal{D}(Q), Q\varphi \in \mathcal{D}(P)$ 的 $\varphi \in \mathcal{H}$ 有定义。因此，Heisenberg 对易关系 (1.7) 并非定义于整个 $\mathcal{H}$ 上，而仅定义于其一个子空间。回想起 eq. (1.7) 可推出 Heisenberg 不确定度关系：

$$\Delta_\varphi P \, \Delta_\varphi Q \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{1.8}$$

现在，若希望 $H, P, Q$ 的期望值

$$(\varphi, A\varphi), \quad A = H, P, Q, \tag{1.9}$$

$H, P, Q$ 的不确定度

$$\Delta_\varphi A, \quad A = H, P, Q, \tag{1.10}$$

和 Heisenberg 不确定度关系 (1.8) 是良定义的，则可平方归一化波函数 $\varphi$ 不但是处于 $\mathcal{H}$ 中，还须处于 $\mathcal{D}(P), \mathcal{D}(Q), \mathcal{D}(H), \mathcal{D}(|P|), \mathcal{D}(|Q|), \mathcal{D}(|H|)$ 中。

因此，一个使得物理量 eqs. (1.7) to (1.10) 能够计算的 $\mathcal{H}$ 的子域 $\Phi$ 是必要的。显然，$\Phi$ 应在 $P, Q, H$ 的作用下不变。看上去 $\Phi$ 的最佳候选是 $P, Q, H$ 的各阶幂的定义域之交：

$$\Phi = \bigcap_{n=0}^{\infty} \bigcap_{A=P,Q,H} \mathcal{D}(A^n). \tag{1.11}$$

[5]译者注：原文为：「either ... or ...」。

[6]译者注：原文为：「stable」。

eq. (1.11) 的空间是谐振子代数的极大不变子空间。在 $\Phi$ 上，所有的物理量如期望、不确定度都可以计算。代数关系如 Heisenberg 对易关系在 $\Phi$ 上都是良定义的。特别地，Heisenberg 不确定度关系在 $\Phi$ 上是良定义的。

谐振子的 Hamilton 算子的谱是离散的，且其本征矢是可平方归一化的（实际上，它们是 $\phi$ 的元素）。这意味着，就考虑 $H$ 的本征矢的而言，没有超出 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 的必要。然而，位置、动量可观测量的谱是连续的，且与实数集 重合[7] 。依照假定 eq. (1.1)，我们为 $P$ 的（连续）谱中的每一元素 $p$ 向量 $|p\rangle$：

$$P\,|p\rangle = p\,|p\rangle\,, \quad -\infty < p < +\infty. \tag{1.12}$$

根据 eq. (1.2)，一个波函数可用这些本征右矢展开：

$$\varphi = \infty_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p\,|p\rangle\,\langle p|\varphi\rangle\,. \tag{1.13}$$

显然，右矢 $|p\rangle$ 并不在 Hilbert 空间中——需要一个更大的线性空间来容纳它们。 为此那些 $|p\rangle$ 获得了新的含义，即 $|p\rangle \in \Phi^\times$，其中 $\Phi^\times$ 表示的是空间 $\Phi$ 上的反线性泛函所构成的集合。[8] 类似的考虑对位置算子 $Q$ 也成立：

$$Q\,|x\rangle = x\,|x\rangle\,, \quad |x\rangle \in \Phi^\times, \quad -\infty < x < +\infty. \tag{1.14}$$

$$\varphi = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\,|x\rangle\,\langle x|\varphi\rangle\,, \quad \varphi \in \Phi. \tag{1.15}$$

通过这种方式，谐振子的 Gelfand 三元组

$$\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^\times \tag{1.16}$$

就以一种自然的方式出现了。Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 是来自于波函数须可平方归一化的要求。子空间 $\Phi$ 是物理波函数的集合，即：可求任意期望、不确定度、对易子的波函数。对偶空间 $\Phi^\times$ 则包含了关联于 可观测量[9] 连续谱的右矢。这些右矢定义为空间 $\Phi$ 上的泛函，并可用于展开任意 $\varphi \in \Phi$，如 eq. (1.13) 或 eq. (1.15)。

[7]译者注：原文为：「coincide」。

[8]译者注：原文为：「It happens that those $|p\rangle$ acquire meaning as antilinear functionals over the space $\Phi$. That is, $|p\rangle \in \Phi^\times$, where $\Phi^\times$ represents the set of antilinear functionals over the space $\Phi$.」。

[9]译者注：原文为：「the observables of the algebra」。

这些思想将在??中详述，在那里我们将构造谐振子的扩张希尔伯特空间。谐振子将以一种不同于量子力学教材的视角被研讨。谐振子的标准处理手段是从算子代数的（位置）Schrödinger 实现出发，也就是说，将 $Q, P, H$ 的众所周知的微分表达式视为是可靠的。从这些表达式中可推出如 Heisenberg 对易关系这样的结果。亦可推出 Hamilton 算子的本征值是可数的，而相应的本征向量由 Hermite 多项式给出。也用到了[10] Dirac 体系的前述 预设[11] ，尽管未提及的是，Hilbert 空间的数学并不能与之 实现[12] 。在本文中，我们将不会把谐振子代数的位置实现视为是可靠的，而是从代数的假设中推出这一实现。我们将仅是假定一些 $P, Q, H$ 所满足的代数关系，亦即 Heisenberg 对易关系

$$[P, Q] := PQ - QP = -i\hbar I, \tag{1.17}$$

以及用 $P, Q$ 写出的 $H$ 的表达式

$$H = \frac{1}{2\mu}P^2 + \frac{\mu\omega^2}{2}Q^2. \tag{1.18}$$

我们将追加一个必要的假定，即能量算子至少存在一个本征向量 $\phi_0$:

$$H\phi_0 = \frac{\hbar\omega}{2}\phi_0. \tag{1.19}$$

从这一代数上的出发点,我们可先推出 $H$ 有可数个本征值 $\hbar\omega(n+1/2)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ 对应于某些本征向量 $\phi_0$。$\phi_n$ 所 张成[13] 的线性空间将被称为 $\Psi$。这一线性空间将配备以两种不同的拓扑：通常的 Hilbert 空间拓扑，它可从 $\Psi$ 中生成 $\mathcal{H}$；以及另一更强的 核型[14] 拓扑，它从 $\Psi$ 生成了 $\Phi$。这个核型拓扑将使得该代数中的元素都是连续算子。一旦构造出了 $\Phi$，我们就将构造出 $\Phi^\times$ 从而构造出谐振子的扩张希尔伯特空间:

$$\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^\times. \tag{1.20}$$

[10]译者注：原文为：「are also assumed」。
[11]译者注：原文为：「prescription」。
[12]译者注：原文为：「incorporate」。
[13]译者注：原文为：「span」。
[14]译者注：原文为：「nuclear」。

本征右矢 $|p\rangle, |x\rangle$ 将成为 $\Phi$ 上的连续反线性泛函，也就是说它们将是 $\Phi^{\times}$ 的元素。本征右矢方程 $Q|x\rangle = x|x\rangle$，$P|p\rangle = p|p\rangle$ 则 对应于[15] $\Phi$ 上的泛函方程。而后会给出 Gelfand -Maurin 定理的表述——它将保证位置、动量算子的一组完备广义本征向量集合的存在性，并展示该定理从数学上证明了那启发性的 Dirac 基向量展开 eq. (1.13) 和 eq. (1.15)。我们将推导谐振子的 Schrödinger 表示。在这一表示中，将得到 $P, Q, H$ 的基于微分算子的标准表达式。也将用函数与分布的空间来实现 RHS(1.20) 的位置。空间 $\Phi$ 将实现为 Schwartz 空间 $\mathcal{S}(\mathbb{R})$，而 $\Phi^{\times}$ 将由缓增分布空间 $\mathcal{S}(\mathbb{R})^{\times}$ 实现。因此 RHS(1.20) 的位置实现写作

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R}) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R})^{\times}. \tag{1.21}$$

$H$ 的本征向量 $\phi_n$ 将由 Hermite 多项式实现。

因此，我们将为谐振子的物理所需的操作给出一个适当的数学框架，并关注「谐振子算子代数 Schrödinger 实现何以可被单独讨论」的问题。重要的是，这种本文 **作为特例**[16]引入的实现可从 RHS 框架中的适当代数假定中推出。

## 方势垒的一个扩张希尔伯特空间

量子力学的基本方程是 Schrödinger 方程。因此，说明 RHS 包含有量子力学所需的数学方法就等同于是说明 Schrödinger 方程的解的自然框架是 RHS。为说明这一点，我们将使用方势垒的例子。

时相关 Schrödinger 方程写作

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) = H\varphi(t), \tag{1.22}$$

其中 $H$ 表示 Hamilton 算子，而 $\varphi(t)$ 表示波函数 $\varphi$ 中时间 $t$ 的值。Dirac 体系以下面的方式来形式上求解这一方程：对于每个 Hamilton 算子的谱 $\mathrm{Sp}(H)$ 中的能量值 $E$，存在一右矢 $|E\rangle$ 为 $H$ 的一个本征向量：

$$H|E\rangle = E|E\rangle, \quad E \in \mathrm{Sp}(H). \tag{1.23}$$

[15]译者注：原文为：「find their mathematical setting as」。

[16]译者注：原文为：「ad hoc」。

这些本征右矢形成了一组可展开任意波函数 $\varphi$ 如下的完备基:

$$\varphi = \int \mathrm{d}E \left|E\right\rangle \left\langle E|\varphi\right\rangle \equiv \int \mathrm{d}E \varphi(E) \left|E\right\rangle . \tag{1.24}$$

从 eq. (1.22) 所得的时相关解可通过对从 eq. (1.23) 所得的时不相关解进行 Fourier 变换来得到:

$$\varphi(t) = \int \mathrm{d}E e^{-iEt/\hbar} \varphi(E). \tag{1.25}$$

若 Hamilton 算子的谱有连续的部分，且若能量 $E$ 属于该谱的这一连续部分，则对应的作为 eq. (1.23) 的解的本征右矢 $|E\rangle$ 就不是平方可积的，也就是说 $|E\rangle$ 不是 Hilbert 空间的元素。如谐振子的情况那样，Hilbert 空间并不能处理这些不可归一化的右矢，而 RHS 框架可以。

RHS 框架的主要短板是它未提供构造 $\Phi, \Phi^{\times}$ 的方法。核型谱定理的一般表述仅仅是保证了本征右矢 $|E\rangle$ 的存在性，且它假定空间 $\Phi, \Phi^{\times}$ 已事先给出。因此，我们需要一个为 Schrödinger Hamilton 算子构造 RHS 的系统性步骤。本文的第四章将提供这一系统性步骤。为使其明晰，我们将在方势垒中阐释这一步骤，尽管同样的方法可适用于更为广泛的一类势能。

构造方势垒的 RHS 的步骤如下。首先，在径向位置表象中写下时无关 Schrödinger 方程:

$$\langle r|H|E\rangle \equiv h \langle r|E\rangle = E \langle r|E\rangle , \tag{1.26}$$

其中 $h$ 是下面的 Schrödinger 微分算子:

$$h \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + V(r), \tag{1.27}$$

而

$$V(r) = \begin{cases} 0 & 0 < r < a \\ V_0 & a < r < b \\ 0 & b < r < \infty \end{cases} \tag{1.28}$$

是方型垒势。通过对时无关 Schrödinger 方程 eq. (1.26) 应用 Sturm - Liouville 理论（Weyl 理论），可得到一个定义域 $\mathcal{D}(H)$ 使得微分算子 $h$ 在其上是自伴的。