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 10 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 λ，都有一对应的右矢 $|\lambda\rangle$，其是 A 的关于本征值 λ 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 φ 可用这些本征右矢展开[4]：

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

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 φ 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 φ 下进行可观测量 A 的测量的不确定度（假定波函数 φ 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 Φ，因为其元素的所有物理量都可计算。进一步来说，Φ 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 φ 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 Φ 是必要的。显然，Φ 应在 P, Q, H 的作用下不变。看上去 Φ 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 Φ 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 Φ 上都是良定义的。特别地，Heisenberg 不确定度关系在 Φ 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 ϕ 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。这时[8] 那些 $|p\rangle$ 获得了作为 Φ 上的反线性泛函的含义。即，$|p\rangle \in \Phi^\times$

[7]译者注：原文为：「coincide」。
[8]译者注：原文为：「It happens that」。