

量子力学狄拉克符号量纲问题

张瑜瑜¹ 胡自翔¹ 董建军¹ 汪克林²(¹ 重庆大学物理学院, 重庆 401331; ² 中国科技大学物理系, 安徽 合肥 230026)

摘要 在量子力学中波函数和狄拉克符号教学中, 很少思考到波函数的量纲问题, 而狄拉克引入的左矢和右矢是描述量子态的强大工具。然而, 关于狄拉克符号是否具有量纲的问题似乎很少被讨论, 似乎大家理所应当认为狄拉克符号只是一个没有量纲的数学符号而已。在本文中, 我们将详细讨论波函数和狄拉克符号的量纲问题, 以连续变量算符 $\hat{x}, \hat{p}$ 为例, 我们应选择它们无量纲的本征态矢而不是常用到的具有量纲的态矢, 在此选择下, 狄拉克 δ 函数也无量纲。狄拉克符号量纲问题的澄清将有助于学生更深入地理解量子力学符号的含义。

关键词 波函数; 狄拉克符号; 量纲分析

THE DIMENSION OF THE DIRAC NOTATION IN
QUANTUM MECHANICSZHANG Yuyu¹ HU Zixiang¹ DONG Jianjun¹ WANG Keling²(¹ College of Physics, Chongqing University, Chongqing 401331;² College of Physics, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026)

Abstract When teaching quantum mechanics, little consideration is given to the dimensional aspect of wave functions and the Dirac notation. The introduction of the Dirac notation, with its bra and ket vectors, is a powerful tool for describing quantum states. However, the question of whether the Dirac notation has dimensions is rarely discussed. It seems that it is commonly assumed that the Dirac notation is merely a dimensionless mathematical symbol. In this article, we will discuss the dimensional aspect of wave functions and the Dirac notation, which will help students develop a deeper understanding of the meaning behind quantum mechanical symbols.

Key words wave function; Dirac notation; dimensional analysis

自从量子物理的发展以来已经有一百多年了^[1-7], 薛定谔提出的方程成为波动量子力学的开始, 对于所描述的波函数的物理解释, 波恩对量子

态波函数的概率解释已经被人们广泛接受并成为量子物理的一个最重要的概念, 也是测不准关系, 量子纠缠等物理现象的起源。众所周知, 量子态

收稿日期: 2023-10-23

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(12075040); 重庆大学教改项目(量子基础物理的课程群建设); 教育部 2023 年高等学校物理学类专业教学指导委员会物理类教学研究项目(基于量子热力学的教研融合在《热学》课程中的探索); 国家自然科学基金(11974064); 重庆大学研究生教改项目(强化研究生科研创新能力培养的实践与探索); 重庆大学物理学院本科课程《量子力学》建设经费等。

通信作者: 张瑜瑜, 重庆大学物理学院教授, yuyuzh@cqu.edu.cn; 胡自翔, 重庆大学物理学院教授, zxhu@cqu.edu.cn。

引文格式: 张瑜瑜, 胡自翔, 董建军, 等. 量子力学狄拉克符号量纲问题[J]. 物理与工程, 2024, 34(4): 110-113.

Cite this article: ZHANG Y Y, HU Z X, DONG J J, et al. The dimension of the Dirac notation in quantum mechanics[J]. Physics and Engineering, 2024, 34(4): 110-113. (in Chinese)

可以在不同的表象中表示,包括坐标、动量和相互作用表象等,就像一个空间的矢量可以选择在不同的坐标系下表示一样。但一个实实在在存在的量子态及其相关的物理量是不依赖于其表象的选择的,因此,狄拉克引入了简洁的左矢和右矢符号(bra and ket)来表示一个独立于表象的态矢,这种简洁表示和运算被广泛应用于教科书^[8-10]。然而,在文献中很少讨论狄拉克符号是否具有量纲的问题,大多数学习者可能会简单地认为狄拉克符号只是一个数学符号而已,应该是没有量纲的。在本文中,我们将详细讨论描述量子态的狄拉克符号的量纲问题,我们发现狄拉克符号具有量纲的不确定性,无量纲表示只是其中的一个特殊情况^[11]。希望我们的讨论能对大家学习和教授量子物理相关知识的过程有所帮助。

为简单起见,我们以在一维空间运动的粒子为例。首先我们用中括号表示量纲分析,定义质量,长度和时间的量纲分别为

$[\text{mass}] = M$, $[\text{length}] = L$, $[\text{time}] = T$
一个无量纲物理量 Q 代表 $[Q] = 1$ 。因此坐标和动量的量纲分别为

$$[x] = L, \quad [p] = MLT^{-1}$$

根据它们自己的对易关系,可知普朗克常量的量纲为

$$[\hbar] = [x][p] = ML^2T^{-1}$$

如有一态矢,其狄拉克右矢符号表示为 $|\psi\rangle$, 其共轭左矢为 $\langle\psi|$, 虽然一个具体表象里它们之间是复共轭的关系,但在投影到具体表象之前,我们没有理由认为左矢与右矢具有相同的量纲,因此假设左右矢的量纲分别为

$$[|\psi\rangle] = A, \quad [\langle\psi|] = B$$

由于狄拉克符号满足归一化条件

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

因此 $[\langle\psi|\psi\rangle] = [\langle\psi|][|\psi\rangle] = AB = 1$, 也就是说,左右矢的量纲满足互逆关系

$$B = A^{-1}$$

首先,我们在坐标空间表象中讨论这个问题,定义连续坐标空间位形态(右)矢为 $\{|x\rangle\}$, 则其满足的本征方程为

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$$

其正交归一条件为

$$\langle x|y\rangle = \delta(x-y)$$

等式右边为狄拉克 δ 函数。态矢 $|\psi\rangle$ 在坐标空间

的表示为

$$\phi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle\psi|x\rangle^* \quad (1)$$

由于要满足概率守恒/粒子数守恒条件,空间波函数要满足以下归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1$$

对积分部分进行量纲分析,可知

$$[\phi(x)][\phi(x)][x] = 1$$

则我们得到坐标空间波函数具有量纲

$$[\phi(x)] = L^{-1/2},$$

同样,我们假设连续坐标空间位形的左、右态矢的量纲分别为

$$[\langle x|] = X_B, \quad [|x\rangle] = X_K$$

则从式(1)可知

$$L^{-1/2} = X_B A = X_K A^{-1}$$

因此

$$X_K = AL^{-1/2}, \quad X_B = A^{-1}L^{-1/2}$$

所以

$$A = X_K L^{1/2}, \quad X_K X_B = L^{-1}$$

上式告诉我们,位置空间的狄拉克 δ 函数具有长度倒数的量纲

$$[\langle x|y\rangle] = [\delta(x-y)] = L^{-1}$$

这与量子力学封闭关系一致

$$|\phi\rangle = \int \phi(y) |y\rangle dy$$

因为其量纲关系为

$$A = L^{-1/2} X_K L = X_K L^{1/2}$$

与以上结论自洽。

其次,我们从动量空间表象中再来讨论,类似的,我们定义连续动量空间位形态(右)矢为 $\{|p\rangle\}$, 则其本征方程

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$$

和正交归一条件为

$$\langle p|q\rangle = \delta(p-q)$$

态矢 $|\phi\rangle$ 在动量空间的表示为

$$\phi(p) = \langle p|\phi\rangle = \langle\phi|p\rangle^*$$

同理,我们假设动量的左右矢的量纲为:

$$[\langle p|] = P_B, \quad [|p\rangle] = P_K$$

易得 $[\phi(p)] = P_B A = P_K A^{-1}$ 。

由动量空间波函数归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(p)|^2 dp = 1$$

可知

$$[\phi(p)] = [p^{-1/2}] = (MLT^{-1})^{-1/2}$$

因此

$$(MLT^{-1})^{-1/2} = P_B A = P_K A^{-1} \quad (2)$$

即以上结论告诉我们,动量空间狄拉克 δ 函数也具有如下量纲

$$[\langle p | q \rangle] = [\delta(p - q)] = P_B P_K = (MLT^{-1})^{-1} \quad (3)$$

为了验证以上结论的自洽性,我们下面再考虑利用狄拉克符号连接 $\phi(x), \phi(p)$

$$\phi(p) = \int \langle p | x \rangle \phi(x) dx$$

其中

$$\langle p | x \rangle = \langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}$$

以上两个方程的量纲分别为

$$(MLT^{-1})^{-1/2} = P_B X_K L^{-1/2} L = P_B A$$

和

$$P_B X_K = [\hbar]^{-1/2} = (ML^2 T^{-1})^{-1/2}$$

再利用上面结果的 $X_K = AL^{-1/2}$ 后以上关于与上述式(2)和式(3)一致。

另外,对于一个用狄拉克符号表示的量子态 $|\Psi\rangle$,可以用一组正交基矢去展开

$$|\Psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle$$

展开系数为

$$C_n = \langle n | \Psi \rangle$$

且基矢满足正交归一条件

$$\langle n | m \rangle = \delta_{m,n}$$

狄拉克符号表示的量子态满足归一化条件

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{m,n} C_m^* C_n \langle m | n \rangle = 1$$

其量纲分析会导致一个显而易见的结论

$$[C_m^*] [C_n] [\langle m | n \rangle] = 1 \Rightarrow [C_n] = 1$$

即展开系数是无量纲的。但这里基矢 $|n\rangle$ 与态矢 $|\Psi\rangle$ 一样,其量纲应取

$$[|n\rangle] = A, \quad [\langle n|] = A^{-1}$$

因此, A 取任何量纲值都满足正交归一条件。其量纲由作用在它满足的本征方程所对应的力学量算符决定, $\hat{O}|n\rangle = O_n|n\rangle$ 。因此,狄拉克符号中左矢与右矢的量纲具有不确定性。但就像规范不变性一样,一个真实的物理态及其对应的可观测量应该不依赖于左矢与右矢的量纲的选择。因此,我们可采用固定一个的惯例来约定。

例如,我们约定取一个特殊的量纲 $[\phi] = A$, 即回到我们以前认识的状态, 对于一个物

理态,其狄拉克左矢与右矢的描述量纲相同,且都是无量纲的,这与狄拉克符号提出的初衷一致,不依赖于任何表象。但是,此时对于给定表象下的连续变量位置和动量对应的左矢与右矢却不是无量纲的。在此条件下我们有

$$X_B = X_K = L^{-1/2}$$

$$P_B = P_K = (MLT^{-1})^{-1/2}$$

以上结论是针对一维运动的粒子而言的,对于 n -维空间的粒子,以上讨论很容易扩展得到

$$X_B = X_K = L^{-n/2} \quad (4)$$

$$P_B = P_K = (MLT^{-1})^{-n/2} \quad (5)$$

因此,对于狄拉克符号描述的量子态,其波函数具有量纲的不确定性。在某些特殊情况下,我们可以选择特定的单位制,使得狄拉克符号描述的物理状态的波函数无量纲。因此,在使用狄拉克符号描述连续变量时,我们需要注意量纲的一致性,并遵循适当的单位制约定,如式(4)(5)所示。据此,两者对应的狄拉克 δ 函数也具有量纲。接下来,我们用谐振子问题中的表象变换再讨论一下,谐振子位置和动量算符与升降算符具有以下关系

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a^\dagger - a)$$

由量子力学基本对易关系 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, 易证

$$[a, a^\dagger] = 1$$

但如果只需要满足以上正则对易关系, $\hat{x}, \hat{p}$ 的定义可以具有任意性

$$\hat{x} = \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger)$$

$$\hat{p} = i\alpha \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a^\dagger - a)$$

也满足以上对易关系。 $a, a^\dagger$ 是没有量纲的算符,则 $\hat{x}, \hat{p}$ 是有量纲的算符。如果我们选择定义无量纲的算符

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger)$$

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a)$$

可求得 $\hat{X}, \hat{P}$ 两个算符的本征态分别为^[12-13]

$$|X\rangle = e^{\sqrt{X}a^\dagger - \frac{1}{2}a^{\dagger 2}} |0\rangle$$

$$|P\rangle = e^{i\sqrt{P}a^\dagger + \frac{1}{2}a^{\dagger 2}}|0\rangle$$

本征值为 X, P 且无量纲。容易验证 $|X\rangle, |P\rangle$ 也是 $\hat{x}, \hat{p}$ 的本征态。因此连续坐标和动量算符的本征态矢也可以是无量纲的态矢。这里便引出了一个问题, $\hat{x}, \hat{p}$ 有两种本征态? 还是一种? 一种与量纲有关, 一种与量纲无关。

但按照我们对量子狄拉克态矢的理解, 量子理论的态矢空间应该是无量纲的量子态矢空间, 因此选择无量纲的态矢 $|X\rangle, |P\rangle$ 作为 $\hat{x}, \hat{p}$ 的本征态矢应该是更加适合的。

结论

在狄拉克符号表示的态矢约定下, 量子理论的态矢空间应该是无量纲的态矢空间, 对于连续变量算符 $\hat{x}, \hat{p}$, 我们应选择 $|X\rangle, |P\rangle$ 作为其无量纲的本征态矢而不是常用到的具有量纲的 $|x\rangle, |p\rangle$ 。在此选择下, 狄拉克 δ 函数也无量纲。而具体物理量对应的算符则是可以有各种量纲的算符。在学习和应用量子力学时, 我们应该注意狄拉克符号的量纲问题, 以确保正确地理解和使用。

参考文献

- [1] PLANCK M. On the law of distribution of energy in the normal spectrum[J]. Annalen der Physik, 1901, 4(553): 1.
- [2] BOHR N. On the constitution of atoms and molecules[J]. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Maga-

- zine and Journal of Science, 1913, 26(153): 476.
- [3] EINSTEIN A. Zur Theorie der Lichterzeugung und Lichtabsorption[J]. Annalen der Physik, 1906(20): 199.
- [4] De BROGLIE L. Waves and quanta[J]. Nature, 1923, 112(2815): 540.
- [5] HEISENBERG W Z. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen[J]. Zeitschrift Für Physikalische Chemie, 1925(33): 879.
- [6] SCHRÖDINGER E. Discussion of probability relations between separated systems[C]. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. Cambridge University Press, 1936(32): 446.
- [7] DIRAC P A M. The quantum theory of the electron[C]. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1928, 117(778): 610.
- [8] DIRAC P M A. The principles of quantum mechanics[M]. Oxford: Oxford University Press, 1958.
- [9] SAKURAI J J, NAPOLITANO J. Modern quantum mechanics [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
- [10] GRIFFITHS D J, SCHROETER D F. Introduction to Quantum Mechanics[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2018.
- [11] SEMAY C, WILLEMYNS C T. Do bras and kets have dimensions[J]. European Journal of Physics, 2021(42): 025404.
- [12] 范洪义. 量子力学表象与变换论: 狄拉克符号法进展[M]. 2版. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2012.
- [13] 汪克林, 曹则贤. 量子物理若干基本问题[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2020.