

2022 秋量子力学 B

第一次习题课讲义

课程主讲老师：易为 教授

助教：刘丰铨，宋冰睿

2022 年 10 月 16 日

1 往周习题完成情况总结

总体上看，大家的作业上交及时、完成质量高，但仍有部分细节问题值得额外关注：

1. 部分同学不会使用或者不能熟练使用 Einstein 求和约定，如对于角动量算符的平方 \hat{L}^2 ，不少同学宁愿将其写作 $(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2)$ 的形式，也不利用 $\hat{L}_\alpha \hat{L}_\alpha$ 进行表示。对易子的计算贯穿量子力学课程的学习，同学们倘若能够熟练运用 Einstein 求和约定，或许能够一定程度上降低计算的复杂程度并提高计算的正确率。
2. 不少同学对常见的对易子性质的使用不够得心应手，对一些对易关系也不够熟悉。最本地，位置算符和动量算符的对易关系、角动量算符分量之间的对易关系一定要牢记于心；同时，作业中出现过的较为典型的对易关系（如第 3 次作业第 2、3 题）也建议大家多加熟悉（不需要会背，但应当能够熟练推导）。此外，这里我们再补充一个常用的对易关系。根据角动量算符与转动变换之间的联系，对于三维空间中任意的矢量算符 $\hat{\mathbf{A}}$ ，有：

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{A}_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{A}_\gamma \quad (1.1)$$

注意：三维空间中的位置矢量算符 $\hat{\mathbf{x}}$ 和动量矢量算符 $\hat{\mathbf{p}}$ 皆适用该结论。由此出发，可以快速证明：

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{p}^2] = 0, \quad \alpha = x, y, z \quad (1.2)$$

大家不妨一试。

3. 请大家务必熟悉利用对易子化简表达式的技巧。最一般地，倘若表达式 $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}$ 不易处理，但表达式 $\hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}$ 却是我们希望得到的，而对易子 $[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}]$ 又已知，我们即可以利用

$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} = [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] + \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} \quad (1.3)$$

对表达式进行化简。这一处理方法在第 3 次作业第 4 题和第 4 次作业第 6 题中均有使用，今后还将常常被应用。

另外，请大家在时间允许的情况下尽量抽空阅读作业的参考答案，我们会将批改作业过程中遇到的共性问题或者由题目引出的处理技巧一并编写进文档中。

2 自由电磁场量子化

历史上, 人们较早地认识了光的波粒二象性, 但电磁场能量量子化的理论支撑却在相当长的时间内处于空白. 从我们现在掌握的知识来看, 这是十分自然的: 早期发展的非相对论量子力学 (或经典量子力学) 对解释光和物质的相互作用乃至任何光所参与的过程无能为力, 因为后者本质上是相对论性的. 在现代的理论框架中, 辐射场理论属于量子电动力学的范畴. 我们显然无意自讨苦吃, 去讨论相对论协变性之类的令人头疼 (至少令笔者头疼) 的问题, 于是我们另辟蹊径, 从经典电磁场出发, 利用一次量子化程式和我们近期所学习的产生算符 \hat{a}^\dagger 和湮灭算符 \hat{a} 的性质, 讨论自由空间中电磁场的量子化问题. 在正式对具体问题进行分析前, 我们先简单介绍一次量子化程式.

2.1 一次量子化

所谓量子化, 指的便是参照系统的经典运动规律, 得到其量子运动规律. 一次量子化方法并没有强大的理论基础, 它事实上更像是一种 “约定”, 其合理性以理论与实验结果的一致性为支撑. 具体地, 一次量子化程式如下:

(1) 写出系统的 Hamiltonian 以及它所对应的经典 Hamilton 正则方程:

$$\begin{cases} \dot{q}_\alpha(t) = \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_\alpha} \\ \dot{p}_\alpha(t) = -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q_\alpha} \end{cases} \quad (2.1)$$

(2) 将以上两方程中的正则坐标 $q_\alpha(t)$ 和正则动量 $p_\alpha(t)$ 视作经典系统的量子对应中的算符, 亦即:

$$\begin{aligned} q_\alpha(t) &\rightarrow \hat{Q}_\alpha(t) \\ p_\alpha(t) &\rightarrow \hat{P}_\alpha(t) \end{aligned}$$

(3) 赋予算符 $\hat{Q}_\alpha(t)$ 和 $\hat{P}_\alpha(t)$ 如下对易关系:

$$\begin{cases} [\hat{Q}_\alpha(t), \hat{Q}_\beta(t)] = 0 \\ [\hat{P}_\alpha(t), \hat{P}_\beta(t)] = 0 \\ [\hat{Q}_\alpha(t), \hat{P}_\beta(t)] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}\hat{I} \end{cases} \quad (2.2)$$

(4) 写出量子系统的 Hamiltonian:

$$\hat{H} = H(\hat{Q}, \hat{P}) \quad (2.3)$$

经过以上手续, 我们便可以开始对量子系统进行研究和讨论.

注: 读者可能会疑惑: 迄今为止在我们课堂所及的范围内, 力学量似乎都是不显含时间的, 而这里的新算符都与时间有关, 这是否会增大问题的复杂程度? 这其中是否有疏漏? 两个问题的答案都是否定的. 事实上, 一次量子化程式给出的算符是在 Heisenberg 绘景下的算符, 它随时间演化而态不随时间演化; 迄今为止的课程一般在 Schrödinger 绘景下讨论问题, 其中算符不含时而态随时间演化. 在量子化后, 我们只需要再将 $t = 0$ 时刻的算符取为系统的新算符, 即 $\hat{A}^S = \hat{A}(t = 0)$, 即可进入 Schrödinger 绘景. 后续课程也将更系统地介绍两种绘景, 届时读者也许可以从一个更清晰的角度理解此问题.

2.2 准备工作

我们知道, 自由空间的电磁场满足 Maxwell 方程组:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{cases} \quad (2.4)$$

规定磁矢势 \mathbf{A} , 满足

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.5)$$

并取 Coulomb 规范

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (2.6)$$

不妨取电势为零, 则有:

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (2.7)$$

鉴于我们可以用磁矢势同时表示电场和磁场, 我们接下来将其作为考察对象. 将2.5和2.7代入2.4的第4式, 并利用

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} \quad (2.8)$$

有:

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} \quad (2.9)$$

这显然是波动方程的形式, 它的通解可以自然地写作:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int (\mathbf{A}_{\mathbf{k}} e^{i(\omega_{\mathbf{k}} t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^* e^{-i(\omega_{\mathbf{k}} t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}) d\mathbf{k} \quad (2.10)$$

其中 $d\mathbf{k} = dk_x dk_y dk_z$, 表示积分对所有的矢量 \mathbf{k} 进行; 同时, 被积函数中互相共轭的系数的选取保证了 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 作为物理量的实函数性质, 且有:

$$\omega_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}| c \quad (2.11)$$

其中 c 为光速. 然而, 矢量 $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$ 在处理上可能存在困难, 我们希望能将其化为分量形式, 以处理我们更加熟悉的标量. 显然, 根据 Coulomb 规范, 应当有:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{k}} = 0 \quad (2.12)$$

因此对于每个确定的 \mathbf{k} , 都可以找到与之垂直的两个单位矢量 $\mathbf{e}_{\mathbf{k},1}$ 和 $\mathbf{e}_{\mathbf{k},2}$, 满足:

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k},1} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k},2} = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \quad (2.13)$$

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k},1} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k},2} = 0 \quad (2.14)$$

可以将它们视作极化方向, 从而将 $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$ 展开为

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}} = A_{\mathbf{k},1} \mathbf{e}_{\mathbf{k},1} + A_{\mathbf{k},2} \mathbf{e}_{\mathbf{k},2} \quad (2.15)$$

在此基础上, 我们可以把2.10改写为

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda=1,2} \int \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \left(A_{\mathbf{k},\lambda} e^{i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + A_{\mathbf{k},\lambda}^* e^{-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right) d\mathbf{k} \quad (2.16)$$

据此, 我们可以分别利用2.7和2.5写出电场和磁场的表达式

$$\mathbf{E} = \sum_{\lambda=1,2} \int i\omega_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \left(-A_{\mathbf{k},\lambda} e^{i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + A_{\mathbf{k},\lambda}^* e^{-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right) d\mathbf{k} \quad (2.17)$$

$$\mathbf{B} = \sum_{\lambda=1,2} \int i\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \left(-A_{\mathbf{k},\lambda} e^{i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + A_{\mathbf{k},\lambda}^* e^{-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right) d\mathbf{k} \quad (2.18)$$

2.3 量子化程式

如我们在一次量子化一节所讨论的, 我们的阶段性目标应是写出电磁场的 Hamiltonian. 现在, 根据自由电磁场总能量的表达式, 我们有:

$$H = \frac{\varepsilon_0}{2} \int (\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2) d\mathbf{r} \quad (2.19)$$

计算得到 (具体过程见文档末附录):

$$H = \varepsilon_0 \sum_{\lambda=1,2} \int \omega_{\mathbf{k}}^2 \left(A_{\mathbf{k},\lambda} A_{\mathbf{k},\lambda}^* + A_{\mathbf{k},\lambda}^* A_{\mathbf{k},\lambda} \right) d\mathbf{k} \quad (2.20)$$

我们不妨令

$$H_{\mathbf{k},\lambda} = \varepsilon_0 \omega_{\mathbf{k}}^2 \left(A_{\mathbf{k},\lambda} A_{\mathbf{k},\lambda}^* + A_{\mathbf{k},\lambda}^* A_{\mathbf{k},\lambda} \right) \quad (2.21)$$

并对其进行考察. 不难想到, 只要我们能实现 $H_{\mathbf{k},\lambda}$ 的量子化, 我们就能够如法炮制, 将程式推广到整个系统上. 虽然 $A_{\mathbf{k},\lambda}$ 是经典量, 无需考虑与其它量相乘次序问题, 但在计算过程中我们仍然保留了相乘的次序以便观察. 相信读者已经注意到, 倘若将上式中的各个量用算符替代, 所得的表达式将与谐振子的 Hamiltonian 算符在形式上非常相似. 然而一次量子化要求我们只能将正则坐标与正则动量变为相应的算符, 注意到二者皆必须为实函数, 我们现在考虑基于上式中的复数 $A_{\mathbf{k},\lambda}$ 和 $A_{\mathbf{k},\lambda}^*$ 构造实函数.

自然地, 我们想到分别取出复数的实部和虚部, 即:

$$\begin{cases} \xi_{\mathbf{k},\lambda} = \frac{1}{2} (A_{\mathbf{k},\lambda}^* + A_{\mathbf{k},\lambda}) \\ \zeta_{\mathbf{k},\lambda} = \frac{i}{2} (A_{\mathbf{k},\lambda}^* - A_{\mathbf{k},\lambda}) \end{cases} \quad (2.22)$$

由此可以用 $\xi_{\mathbf{k},\lambda}$ 和 $\zeta_{\mathbf{k},\lambda}$ 表示 $A_{\mathbf{k},\lambda}$ 和 $A_{\mathbf{k},\lambda}^*$, 即:

$$\begin{cases} A_{\mathbf{k},\lambda} = \xi_{\mathbf{k},\lambda} + i\zeta_{\mathbf{k},\lambda} \\ A_{\mathbf{k},\lambda}^* = \xi_{\mathbf{k},\lambda} - i\zeta_{\mathbf{k},\lambda} \end{cases} \quad (2.23)$$

将其代回2.21, 得:

$$H_{\mathbf{k},\lambda} = 2\varepsilon_0 \omega_{\mathbf{k}}^2 (\xi_{\mathbf{k},\lambda}^2 + \zeta_{\mathbf{k},\lambda}^2) \quad (2.24)$$

然而, $\xi_{\mathbf{k},\lambda}$ 和 $\zeta_{\mathbf{k},\lambda}$ 的量纲不满足正则坐标和正则动量的要求, 因此我们令

$$\begin{cases} \xi_{\mathbf{k},\lambda} = b_{\mathbf{k},\lambda} q_{\mathbf{k},\lambda} \\ \zeta_{\mathbf{k},\lambda} = c_{\mathbf{k},\lambda} p_{\mathbf{k},\lambda} \end{cases} \quad (2.25)$$

其中 $b_{\mathbf{k},\lambda}$ 和 $c_{\mathbf{k},\lambda}$ 分别为实常数, $q_{\mathbf{k},\lambda}$ 和 $p_{\mathbf{k},\lambda}$ 分别为满足条件的正则坐标和正则动量. 不妨规定

$$\begin{cases} b_{\mathbf{k},\lambda} = \frac{\sqrt{m}}{2\sqrt{\varepsilon_0}} \\ c_{\mathbf{k},\lambda} = \frac{1}{2\omega_k \sqrt{m\varepsilon_0}} \end{cases} \quad (2.26)$$

则 $H_{\mathbf{k},\lambda}$ 形式上将与谐振子的经典 Hamiltonian 完全一致 (在接下来的讨论中我们将发现 m 的具体取值没有影响, 这事实上也是意料之中的).

现在, 我们将 $q_{\mathbf{k},\lambda}$ 和 $p_{\mathbf{k},\lambda}$ 分别转换成算符 $\hat{Q}_{\mathbf{k},\lambda}$ 和 $\hat{P}_{\mathbf{k},\lambda}$, 并赋予对易关系:

$$\begin{cases} [\hat{Q}_{\mathbf{k},\lambda}(t), \hat{Q}_{\mathbf{k},\lambda}(t)] = 0 \\ [\hat{P}_{\mathbf{k},\lambda}(t), \hat{P}_{\mathbf{k},\lambda}(t)] = 0 \\ [\hat{Q}_{\mathbf{k},\lambda}(t), \hat{P}_{\mathbf{k}',\nu}(t)] = i\hbar\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\lambda,\nu}\hat{I} \end{cases} \quad (2.27)$$

这样一来,

$$\begin{cases} \hat{\xi}_{\mathbf{k},\lambda} = \frac{\sqrt{m}}{2\sqrt{\varepsilon_0}}\hat{Q}_{\mathbf{k},\lambda} \\ \hat{\zeta}_{\mathbf{k},\lambda} = \frac{1}{2\omega_k \sqrt{m\varepsilon_0}}\hat{P}_{\mathbf{k},\lambda} \end{cases} \quad (2.28)$$

因而

$$[\hat{\xi}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{\zeta}_{\mathbf{k}',\nu}] = i\frac{\hbar}{4\omega_k \varepsilon_0}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\lambda,\nu}\hat{I} \quad (2.29)$$

$$\hat{A}_{\mathbf{k},\lambda} = \hat{\xi}_{\mathbf{k},\lambda} + i\hat{\zeta}_{\mathbf{k},\lambda} \quad (2.30)$$

$$[\hat{A}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{A}_{\mathbf{k}',\nu}^\dagger] = -2i[\hat{\xi}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{\zeta}_{\mathbf{k}',\nu}] = \frac{\hbar}{2\omega_k \varepsilon_0}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\lambda,\nu}\hat{I} \quad (2.31)$$

其中量子系统中的算符 $\hat{A}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger$ 与经典系统中的 $A_{\mathbf{k},\lambda}^*$ 相对应. 现在, 为了利用谐振子量子系统的结论, 引入

$$\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} = \sqrt{\frac{2\omega_k \varepsilon_0}{\hbar}}\hat{A}_{\mathbf{k},\lambda} \quad (2.32)$$

则立即有:

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{a}_{\mathbf{k}',\nu}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\lambda,\nu}\hat{I} \quad (2.33)$$

这正是谐振子问题中升降算符所满足的对易关系, 也是问题的核心所在, 在谐振子的处理中我们正是从此出发, 得到了一系列结论. 因此, 我们可以把谐振子中的结论悉数应用在电磁场量子化问题上. 事实上, 将2.32代入2.21, 并利用上式, 可以得到:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\mathbf{k},\lambda} &= \frac{1}{2}\hbar\omega_k(\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}) \\ &= \hbar\omega_k\left(\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} + \frac{1}{2}\hat{I}\right) = \hbar\omega_k\left(\hat{N}_{\mathbf{k},\lambda} + \frac{1}{2}\hat{I}\right) \end{aligned} \quad (2.34)$$

其中

$$\hat{N}_{\mathbf{k},\lambda} = \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} \quad (2.35)$$

即为波矢为 \mathbf{k} , 极化方向为 $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$ 的电磁场的粒子数算符, 它的本征值方程写作

$$\hat{N}_{\mathbf{k},\lambda} |n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle = n_{\mathbf{k},\lambda} |n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle \quad (2.36)$$

而此处所说的粒子即是我们所熟知的光子, 方程中的 n 即波矢为 \mathbf{k} , 极化方向为 $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$ 的光子数, 因此它实际上比谐振子系统的粒子数具有更实在的物理意义. 显然:

$$\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger |n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle \sim |n_{\mathbf{k},\lambda} + 1\rangle$$

$$\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} |n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle \sim |n_{\mathbf{k},\lambda} - 1\rangle$$

即 $\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger$ 使光子数增加 1, 而 $\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}$ 使光子数减少 1, 因此它们又被分别称为产生、湮灭算符. 最后, 我们可以利用已有结果, 对总 Hamiltonian 实施量子化, 得到:

$$\hat{H} = \sum_{\lambda=1,2} \int \hat{H}_{\mathbf{k},\lambda} d\mathbf{k} = \sum_{\lambda=1,2} \int \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\hat{N}_{\mathbf{k},\lambda} + \frac{1}{2} \right) d\mathbf{k} \quad (2.37)$$

现在, 我们已经完成了电磁场量子化的程式, 并具备了在量子力学体系中讨论电磁场作用效果 (如原子跃迁问题) 的基础.

和谐振子情形一致, 我们注意到电磁场也存在零点能. 即使所有态的光子数均为 0, 仍有:

$$H_0 = \sum_{\lambda=1,2} \int \frac{1}{2} \hbar\omega_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} = \int \hbar\omega_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} \quad (2.38)$$

为无穷大, 我们又称之为真空能. 作为一个完全由量子理论引致的结果, 它在实验上可以引起宏观的物理效果, 其中最著名的或许莫过于 Casimir 效应. 不过, 这又是另一个故事了. 倘若读者对此感兴趣, 可以考虑参看 J.J. Sakurai 和 Jim Napolitano 合著的《现代量子力学 (第二版)》7.6 节.

3 例题选讲

本部分题目来源于多本参考书，并配有参考解答。它们未必十分困难，但都一定程度上具备代表性以及较为清晰的物理图像。

1. 重要对易关系证明.

在 n 维空间中，请证明：

$$[\hat{x}_\alpha, G(\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n)] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial \hat{p}_\alpha} \quad (3.1)$$

$$[\hat{p}_\alpha, F(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_n)] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial \hat{x}_\alpha} \quad (3.2)$$

其中函数 F 和 G 均可以展开为其变量的幂级数形式。

解：作为例子，我们只证明第 1 式，而将第 2 式留给读者。依题意，有：

$$G(\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n) = \sum_{k_1, \dots, k_n} \left(c_{k_1, \dots, k_n} \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right) \quad (3.3)$$

而应用基本对易关系，有：

$$\left[\hat{x}_\alpha, \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right] = \hat{p}_1^{k_1} \cdots \hat{p}_{\alpha-1}^{k_{\alpha-1}} [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha^{k_\alpha}] \hat{p}_{\alpha+1}^{k_{\alpha+1}} \cdots \hat{p}_n^{k_n} \quad (3.4)$$

引用第 3 次作业第 2 题结论，即

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha^{k_\alpha}] = k_\alpha [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha] \hat{p}_\alpha^{k_\alpha-1} = i\hbar k_\alpha \hat{p}_\alpha^{k_\alpha-1} \quad (3.5)$$

不难得到：

$$\left[\hat{x}_\alpha, \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right] = i\hbar k_\alpha \hat{p}_1^{k_1} \cdots \hat{p}_{\alpha-1}^{k_{\alpha-1}} \hat{p}_\alpha^{k_\alpha-1} \hat{p}_{\alpha+1}^{k_{\alpha+1}} \cdots \hat{p}_n^{k_n} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{p}_\alpha} \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \quad (3.6)$$

因而

$$\begin{aligned} [\hat{x}_\alpha, G(\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n)] &= \sum_{k_1, \dots, k_n} \left(c_{k_1, \dots, k_n} \left[\hat{x}_\alpha, \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right] \right) \\ &= i\hbar \sum_{k_1, \dots, k_n} \left(c_{k_1, \dots, k_n} \frac{\partial}{\partial \hat{p}_\alpha} \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{p}_\alpha} \sum_{k_1, \dots, k_n} \left(c_{k_1, \dots, k_n} \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right) \\ &= i\hbar \frac{\partial G}{\partial \hat{p}_\alpha} \end{aligned} \quad (3.7)$$

即为欲证结论。

2. 利用对易关系计算力学量平均值.

设某量子力学体系由 Hamiltonian 算符

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}) \quad (3.8)$$

描写, 请计算对易关系

$$[\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{H}]$$

并据此证明: 对于任意 Hamiltonian 算符的本征态 $|\psi_H\rangle$, 有:

$$\left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} \right\rangle_{\psi_H} = \langle \hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla V(\hat{\mathbf{r}}) \rangle_{\psi_H} \quad (3.9)$$

解: 依题意, 利用 Einstein 求和约定, 有:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] &= \frac{1}{2m} [\hat{r}_\alpha \hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta \hat{p}_\beta] + [\hat{r}_\alpha \hat{p}_\alpha, V(\hat{\mathbf{r}})] \\ &= \frac{1}{2m} [\hat{r}_\alpha, \hat{p}_\beta \hat{p}_\beta] \hat{p}_\alpha + \hat{r}_\alpha [\hat{p}_\alpha, V(\hat{\mathbf{r}})] \\ &= i\frac{\hbar}{m} \delta_{\alpha\beta} \hat{p}_\beta \hat{p}_\alpha - i\hbar \hat{r}_\alpha \frac{\partial V(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \hat{r}_\alpha} \\ &= i\hbar \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} - \hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla V(\hat{\mathbf{r}}) \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

不难看出, 倘若对易子 $[\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{H}]$ 在 $|\psi_H\rangle$ 的平均值为零, 即可证得结论. 如果上述条件满足, 我们也称力学量 $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ 为守恒量 (具体的原因将在后续课程中提及, 我们在这里只强调对易子与守恒量、对称性间的联系). 我们假设:

$$\hat{H}|\psi_H\rangle = E_\psi|\psi_H\rangle \quad (3.11)$$

而考虑到:

$$\begin{aligned} \langle \psi_H | [\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] | \psi_H \rangle &= \langle \psi_H | (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \hat{H} | \psi_H \rangle - \langle \psi_H | \hat{H} (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) | \psi_H \rangle \\ &= E_\psi \langle \psi_H | (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) | \psi_H \rangle - E_\psi \langle \psi_H | (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) | \psi_H \rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

其中利用了 Hamiltonian 算符的 Hermitian 性质, 结合对易子的表达式, 立即得到:

$$i\hbar \left\langle \psi_H \left| \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} - \hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla V(\hat{\mathbf{r}}) \right) \right| \psi_H \right\rangle = \langle \psi_H | [\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] | \psi_H \rangle = 0 \quad (3.13)$$

亦即

$$\left\langle \psi_H \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} \right| \psi_H \right\rangle = \langle \psi_H | \hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla V(\hat{\mathbf{r}}) | \psi_H \rangle \quad (3.14)$$

即为欲证结论. 它又被称为量子力学版本的 Virial 定理, 在有心力场相关问题中有广泛的应用.

3. 力学量算符的矩阵表示及对角化.

设量子力学体系中的某一力学量算符有如下的 3×3 矩阵表示:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

请找到这个力学量算符的一组归一化本征矢量以及对应的本征值, 并寻找一个使得力学量算符有具体物理含义的量子力学体系.

解: 本题本身难度较低, 但我们希望通过它展现力学量算符和矩阵表示之间的关系, 也希望能够帮助读者从线性代数角度理解寻找本征态的方法. 以下楷体字部分为对问题的讨论, 其它部分为解答过程.

首先我们必须了解, 力学量算符不等于矩阵, 因此我们并不能武断地把矩阵本征值和本征向量与力学量本征值和本征矢量划上等号. 尽管如此, 我们依然能够借助矩阵论解决力学量本征值求解的问题. 下文即为对此的论证.

我们令该力学量算符为 \hat{A} , 令题给矩阵为 A , 并按照矩阵表示的定义, 规定:

$$A_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \quad (3.15)$$

其中 $\{|\alpha\rangle\}$ 为题目所选取的一组正交归一化基:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad (3.16)$$

现在, 我们希望找到另一组正交归一化矢量, 满足

$$\hat{A}|a_\alpha\rangle = a_\alpha|a_\alpha\rangle \quad (3.17)$$

不妨设

$$\hat{U}|\alpha\rangle = |a_\alpha\rangle \quad (3.18)$$

对所有 α 都成立, 很容易得到:

$$\hat{U} = \sum_{\alpha} |a_\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (3.19)$$

不难验证 \hat{U} 是酉的, 亦即

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I} \quad (3.20)$$

令

$$D_{\alpha\beta} = \langle a_\alpha | \hat{A} | a_\beta \rangle = \langle \alpha | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | \beta \rangle \quad (3.21)$$

显然矩阵 D 是对角阵. 这就是说, 我们的问题本质上归结为找到一个酉变换 \hat{U} , 使得 $\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}$ 在题目所选取的基下的矩阵表示对角化, 对角元即是对应的本征值, \hat{U} 对应的矩阵表示的列向量为本征矢量在题目所选取的基下的展开系数. 在矩阵论中, 问题即转化为求使得矩阵 A 对角化的正交矩阵 U 以及对角矩阵的对角元, 或者更简洁地, 求矩阵 A 的本征值和本征向量. 这是我们用矩阵论处理量子力学问题的基础.

现在我们计算. 按照求矩阵本征值的程式, 令:

$$\det(\lambda I - A) = 0 \quad (3.22)$$

得到久期方程:

$$\lambda(\lambda^2 - 1) = 0 \quad (3.23)$$

由是矩阵的本征值为 0 和 ± 1 , 解本征方程得到本征向量:

$$a_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad a_0 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \quad a_{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

因此, 转换回量子力学体系, 我们有: 力学量算符 \hat{A} 的本征值为 0 和 ± 1 , 对应的本征矢量可以表示为:

$$|a = +1\rangle = \frac{1}{2}|1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle \quad (3.25)$$

$$|a = 0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}|1\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}|3\rangle \quad (3.26)$$

$$|a = -1\rangle = \frac{1}{2}|1\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle \quad (3.27)$$

是为所求. 实际应用中, 倘若某粒子自旋为 1, 题述力学量算符则可视作其 z 向自旋角动量算符 \hat{S}_z .

4. 力学量算符相等的判据.

设算符 \hat{A} 和 \hat{B} 在某给定基上可用 \mathbb{C}^n ($n \in \mathbb{N}$) 上的两个矩阵来表示. 尝试证明: 若对于任意量子态 $|\psi\rangle$, 总有 $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle$, 则 $\hat{A} = \hat{B}$.

解: 欲证 \hat{A} 、 \hat{B} 相等, 只需证明其对应的 \mathbb{C}^n 上矩阵表示 (不妨记为 A 和 B) 相等, 也就是证明二者的每个矩阵元相等. 那么, 不妨令 $\hat{C} = \hat{A} - \hat{B}$, 问题即转化为证明 \hat{C} 的任意矩阵元均为 0. 更具体地, 我们选取一组正交完备基 $|e_\alpha\rangle$ ($\alpha = 1, \dots, n$), 那么只需在题给条件下证明 $C_{\alpha\beta} = \langle e_\alpha|\hat{C}|e_\beta\rangle = 0$.

首先, 对于 $\forall \alpha$ ($1 \leq \alpha \leq n$), 倘若取 $|\psi\rangle = |e_\alpha\rangle$, 由条件立即得到:

$$\langle e_\alpha|\hat{C}|e_\alpha\rangle = 0 \quad (3.28)$$

然后, 我们尝试通过构造计算矩阵元中的非对角元. 对于 $\forall \alpha, \beta$ ($1 \leq \alpha, \beta \leq n$), 取

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle = |e_\alpha\rangle + |e_\beta\rangle \\ |\psi_2\rangle = |e_\alpha\rangle + i|e_\beta\rangle \end{cases} \quad (3.29)$$

则

$$\begin{cases} \langle\psi_1|\hat{C}|\psi_1\rangle = \langle e_\alpha|\hat{C}|e_\beta\rangle + \langle e_\beta|\hat{C}|e_\alpha\rangle = 0 \\ \langle\psi_2|\hat{C}|\psi_2\rangle = i\langle e_\alpha|\hat{C}|e_\beta\rangle - i\langle e_\beta|\hat{C}|e_\alpha\rangle = 0 \end{cases} \quad (3.30)$$

对比以上两式, 立即得到 $C_{\alpha\beta} = \langle e_\alpha|\hat{C}|e_\beta\rangle = 0$. 所以 $\hat{C} = 0$, 从而 $\hat{A} = \hat{B}$, 即为欲证结论.

附录

A 推导过程补遗

本节阐述由2.19推导得到2.20的过程.

依照要求, 我们首先处理表达式

$$\frac{\varepsilon_0}{2} \int E^2 d\mathbf{r}$$

将电场的表达式2.18代入上式, 得:

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_0}{2} \int E^2 d\mathbf{r} &= \frac{\varepsilon_0}{2} \int \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} d\mathbf{r} \\ &= -\frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{\lambda=1,2} \sum_{\nu=1,2} \int \int \int \omega_{k'} \omega_k \mathbf{e}_{k',\nu} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} \left(-A_{k',\nu} e^{i(\omega_{k'} t - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})} + A_{k',\nu}^* e^{-i(\omega_{k'} t - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})} \right) \\ &\quad \left(-A_{k,\lambda} e^{i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + A_{k,\lambda}^* e^{-i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right) d\mathbf{r} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{\lambda=1,2} \sum_{\nu=1,2} \int \omega_k^2 \left[\mathbf{e}_{k,\nu} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (A_{k,\nu} A_{k,\lambda}^* + A_{k,\nu}^* A_{k,\lambda}) - \mathbf{e}_{-k,\nu} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (A_{-k,\nu}^* A_{k,\lambda}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,\nu} A_{k,\lambda} e^{2i\omega_k t}) \right] d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

其中应用了

$$\int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \quad (\text{A.2})$$

在此基础上, 我们不妨规定

$$\mathbf{e}_{-\mathbf{k},1} = -\mathbf{e}_{\mathbf{k},1} \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{e}_{-\mathbf{k},2} = \mathbf{e}_{\mathbf{k},2} \quad (\text{A.4})$$

不难检验它们与对应的波矢仍满足右手定则, 那么利用上式以及 $\mathbf{e}_{k,\lambda}$ 的正交归一性质, 有:

$$\begin{aligned} &\frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{\lambda=1,2} \sum_{\nu=1,2} \int \omega_k^2 \left[\mathbf{e}_{k,\nu} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (A_{k,\nu}^* A_{k,\lambda} + A_{k,\nu} A_{k,\lambda}^*) - \mathbf{e}_{-k,\nu} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (A_{-k,\nu}^* A_{k,\lambda}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,\nu} A_{k,\lambda} e^{2i\omega_k t}) \right] d\mathbf{k} \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{\lambda=1,2} \int \omega_k^2 \left[(A_{k,\lambda}^* A_{k,\lambda} + A_{k,\lambda} A_{k,\lambda}^*) - \mathbf{e}_{-k,\lambda} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (A_{-k,\lambda}^* A_{k,\lambda}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,\lambda} A_{k,\lambda} e^{2i\omega_k t}) \right] d\mathbf{k} \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} \int \omega_k^2 \left[\sum_{\lambda=1,2} (A_{k,\lambda}^* A_{k,\lambda} + A_{k,\lambda} A_{k,\lambda}^*) + (A_{-k,1}^* A_{k,1}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,1} A_{k,1} e^{2i\omega_k t}) - (A_{-k,2}^* A_{k,2}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,2} A_{k,2} e^{2i\omega_k t}) \right] d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

下面考虑对磁场的处理, 它与上文高度相似. 我们有:

$$\begin{aligned} &\frac{\varepsilon_0}{2} c^2 \int B^2 d\mathbf{r} \\ &= -\frac{\varepsilon_0}{2} c^2 \sum_{\lambda=1,2} \sum_{\nu=1,2} \int \int \int (\mathbf{k}' \times \mathbf{e}_{k',\nu}) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{k,\lambda}) \left(-A_{k',\nu} e^{i(\omega_{k'} t - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})} + A_{k',\nu}^* e^{-i(\omega_{k'} t - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})} \right) \\ &\quad \left(-A_{k,\lambda} e^{i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + A_{k,\lambda}^* e^{-i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right) d\mathbf{r} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} c^2 \sum_{\lambda=1,2} \int [|\mathbf{k}|^2 (A_{k,\lambda} A_{k,\lambda}^* + A_{k,\lambda}^* A_{k,\lambda}) - (-\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{-k,\lambda}) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{k,\lambda}) (A_{-k,\nu}^* A_{k,\lambda}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,\nu} A_{k,\lambda} e^{2i\omega_k t})] d\mathbf{k} \end{aligned}$$

$$= \frac{\varepsilon_0}{2} \int c^2 |\mathbf{k}|^2 \left[\sum_{\lambda=1,2} \left(A_{\mathbf{k},\lambda} A_{\mathbf{k},\lambda}^* + A_{\mathbf{k},\lambda}^* A_{\mathbf{k},\lambda} \right) - \left(A_{-\mathbf{k},1}^* A_{\mathbf{k},1}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-\mathbf{k},1} A_{\mathbf{k},1} e^{2i\omega_k t} \right) + \left(A_{-\mathbf{k},2}^* A_{\mathbf{k},2}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-\mathbf{k},2} A_{\mathbf{k},2} e^{2i\omega_k t} \right) \right] d\mathbf{k} \quad (\text{A.6})$$

将上两式相加，得：

$$\frac{\varepsilon_0}{2} \int (\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2) d\mathbf{r} = \varepsilon_0 \sum_{\lambda=1,2} \int \omega_k^2 (A_{\mathbf{k},\lambda} A_{\mathbf{k},\lambda}^* + A_{\mathbf{k},\lambda}^* A_{\mathbf{k},\lambda}) d\mathbf{k} \quad (\text{A.7})$$

至此推导完成.