7.7 证明一个算符 a 和它的共轭算符遵从反对易关系 $\{a,a^\dagger\}=1$，则算符 $N=a^\dagger a$ 具有本征值为 0 和 1 的本征态。

解: 设 $|n\rangle$ 是 N 的具有本征值 n 的本征态，即

$$N|n\rangle = n|n\rangle \tag{1}$$

可以证明 $n\geqslant 0$，这是因为

$$n=\langle n|N|n\rangle=(a|n\rangle)^\dagger a|n\rangle\geqslant 0 \tag{2}$$

由于 $\{a,a^\dagger\}=1$，因此有

$$Na|n\rangle=(1-aa^\dagger)a|n\rangle=(1-n)a|n\rangle \tag{3}$$

(3)式表明 $a|n\rangle$ 也是 N 的一个本征态，本征值为 $1-n$。由(2)可知 $1-n\geqslant 0$，即 $n\leqslant 1$。不妨设

$$a|n\rangle=c_n|1-n\rangle \tag{4}$$

代回(2)式可以得到

$$n=|c_n|^2\langle 1-n|1-n\rangle=|c_n|^2$$

因此 $c_n=\sqrt{n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_n}$。若补充反对易关系

$$\{a,a\}=\{a^\dagger,a^\dagger\}=0 \tag{5}$$

则有

$$a^2|n\rangle=\frac{1}{2}\{a,a\}|n\rangle=0 \tag{6}$$

另一方面

$$a^2|n\rangle=a\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_n}\sqrt{n}|1-n\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta_n+\delta_{1-n})}\sqrt{n(1-n)}|n\rangle \tag{7}$$

式(6)和式(7)表明 $\sqrt{n(1-n)}=0$，即 $n=0,1$。这说明 n 的本征态只能具有本征值 0 或 1。

补 若 N 个全同粒子体系的哈密顿算符为

$$H=\sum_{k=1}^{n}T(x_k)+\frac{1}{2}\sum_{k\neq l=1}^{n}V(x_k,x_l)$$

写出对应的二次量子化形式并指出产生湮灭算符的基本对易或反对易关系。

解: 以平面波为基，单粒子算符 $\sum_k T(x_k)$ 的二次量子化形式为

$$\mathscr{T}=\sum_{k,k'}\langle k|T|k'\rangle a_k^\dagger a_{k'} \tag{8}$$

其中

$$\langle k|T|k'\rangle=\int\mathrm{d}^3x'\langle k|x'\rangle T(x')\langle x'|k'\rangle=\int\mathrm{d}^3x'T(x')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k-k')x}=\tilde{T}(k-k') \tag{9}$$

而 $\tilde{T}$ 为 $T(x)$ 的 Fourier 变换。代入(8)中得到

$$\mathscr{T}=\sum_{k,k'}\tilde{T}(k-k')a_k^\dagger a_{k'} \tag{10}$$

两粒子算符 $\frac{1}{2}\sum_{k\neq l}V(x_k,x_l)$ 的二次量子化形式为

$$\begin{aligned}\mathscr{V} &= \frac{1}{2}\sum_{kk',pp'}\langle kk'|V|pp'\rangle\, a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_{p'}a_p \\ &= \frac{1}{2}\sum_{kk',pp'}\int \mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y' V(x',y')\,\langle k|x'\rangle\,\langle x'|p\rangle\,\langle k'|y'\rangle\,\langle y'|p'\rangle\, a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_{p'}a_p \\ &= \frac{1}{2}\sum_{kk',pp'}\int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k-p)x'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k'-p')y'}\, a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_{p'}a_p \\ &= \frac{1}{2}\sum_{kk',pp'}\tilde{V}(k-p,k'-p')a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_{p'}a_p \end{aligned} \tag{11}$$

其中 $\tilde{V}(k,p)$ 是 $V(x,y)$ 的二维 Fourier 变换。

对于玻色子，产生湮灭算符满足对易关系

$$[a_k,a_{k'}] = [a_k^\dagger,a_{k'}^\dagger] = 0 \tag{12a}$$
$$[a_k,a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \tag{12b}$$

对于费米子，产生湮灭算符满足反对易关系

$$\{a_k,a_{k'}\} = \{a_k^\dagger,a_{k'}^\dagger\} = 0 \tag{13a}$$
$$\{a_k,a_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'} \tag{13b}$$

补 N 个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的无相互作用的全同粒子受外势 $V_0\delta(x)$ 作用，求以平面波为基时的哈密顿算符的二次量子化形式并指出相应产生与湮灭算符满足的基本关系，并利用微扰法给出基态能量。

解: 体系的哈密顿算符为

$$H = \sum_n \frac{p^2}{2m} + \sum_n V_0\delta(x_n) \tag{14}$$

以平面波为基时，哈密顿算符(14)中动能项的二次量子化形式为

$$\mathscr{T} = \sum_{k\lambda,k'\lambda'}\langle k\lambda|\frac{p^2}{2m}|k'\lambda'\rangle\, a_{k\lambda}^\dagger a_{k'\lambda'} \tag{15}$$
$$= \sum_{k\lambda,k'\lambda'}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}a_{k\lambda}^\dagger a_{k'\lambda'} \tag{16}$$
$$= \sum_{k\lambda}\frac{\hbar^2k^2}{2m}a_{k\lambda}^\dagger a_{k\lambda} \tag{17}$$

哈密顿算符(14)中外势项的二次量子化形式为

$$\begin{aligned}\mathscr{V} &= \sum_{k\lambda,k'\lambda'}\langle k\lambda|V_0\delta(x)|k'\lambda'\rangle\, a_{k\lambda}^\dagger a_{k'\lambda'} \\ &= V_0\sum_{k\lambda,k'\lambda'}\int \mathrm{d}x'\delta(x')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k-k')x'}\delta_{\lambda\lambda'}a_{k\lambda}^\dagger a_{k'\lambda'} \\ &= V_0\sum_{kk',\lambda}a_{k\lambda}^\dagger a_{k'\lambda}\end{aligned} \tag{18}$$

自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子为费米子，其产生湮灭算符服从反对易关系

$$\{a_{k\lambda}, a_{k'\lambda'}\} = \{a^\dagger_{k\lambda}, a^\dagger_{k'\lambda'}\} = 0 \tag{19a}$$

$$\{a_{k\lambda}, a^\dagger_{k'\lambda'}\} = \delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'} \tag{19b}$$

在该系统的基态下，N 个粒子自能量最低的单粒子态依次向上填充，因此总粒子数可以用阶跃函数表示为

$$N = \sum_{k\lambda} \theta(k_F - k) = 2\int \frac{L \times 2\,\mathrm{d}k}{2\pi}\theta(k_F - k) = \frac{2L}{\pi}k_F \tag{20}$$

其中用到了教材 (7.5.53) 式。相应的，能量的零级近似为

$$E^{(0)} = \sum_{k\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\theta(k_F - k) = \frac{2L}{\pi}\cdot\frac{k_F^3}{3} \tag{21}$$

能量一级近似为

$$E^{(1)} = V_0 \sum_{kk',\lambda} \langle\Omega| a^\dagger_{k\lambda} a_{k'\lambda} |\Omega\rangle \tag{22}$$

其中 $|\Omega\rangle$ 代表基态。要让内积 $\langle\Omega| a^\dagger_{k\lambda} a_{k'\lambda} |\Omega\rangle$ 非 0，必须取 $k' = k$，否则 $a^\dagger_{k\lambda}$ 会使得单粒子态 $|k\lambda\rangle$ 的占据数为 2，违反泡利不相容原理。故

$$\langle\Omega| a^\dagger_{k\lambda} a_{k'\lambda} |\Omega\rangle = \delta_{kk'} \langle\Omega| a^\dagger_{k\lambda} a_{k\lambda} |\Omega\rangle \tag{23}$$

而

$$E^{(1)} = V_0 \sum_{k\lambda} \theta(k_F - k) = NV_0 \tag{24}$$

因此，基态能量为

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} = N\left(\frac{k_F^2}{3} + V_0\right) = N\left(\frac{n^2\pi^2}{12} + V_0\right) \tag{25}$$

其中 $n := N/L$ 为粒子数密度。

8.10 证明狄拉克方程的连续性方程(8.2.11)。

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0 \tag{8.2.11}$$

解: 狄拉克方程给出哈密顿量

$$H = \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta m \tag{26}$$

代入薛定谔方程(8.1.1)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle \tag{8.1.1}$$

并取自然单位制 ($\hbar = 1$) 可以得到

$$\mathrm{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\Psi + \beta m\Psi \tag{27}$$

即

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\Psi - \mathrm{i}\beta m\Psi \tag{28a}$$

对方程(28a)取厄米共轭得到

$$\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t} = -\nabla\Psi^\dagger\cdot\boldsymbol{\alpha} + \mathrm{i}m\Psi^\dagger\beta \tag{28b}$$

其中用到了 $\boldsymbol{\alpha}$ 及 β 均为厄米矩阵的事实。因此

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t}\Psi + \Psi^\dagger \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ &= -(\nabla \Psi^\dagger \cdot \boldsymbol{\alpha})\Psi - \Psi^\dagger(\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \Psi) \\ &= -\nabla \cdot (\Psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \Psi) = -\nabla \cdot \boldsymbol{j}\end{aligned}$$

这代表

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0 \tag{8.2.11}$$

8.11 求自由粒子狄拉克方程(8.2.20)的本征值。

$$\begin{pmatrix} m & 0 & p & 0 \\ 0 & m & 0 & -p \\ p & 0 & -m & 0 \\ 0 & -p & 0 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} cu_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \tag{8.2.20}$$

解: 本征值 E 满足久期方程

$$\begin{aligned}\det(H - EI) &= \det \begin{pmatrix} m-E & 0 & p & 0 \\ 0 & m-E & 0 & -p \\ p & 0 & -m-E & 0 \\ 0 & -p & 0 & -m-E \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} m-E & p & & \\ p & -m-E & & \\ & & m-E & -p \\ & & -p & -m-E \end{pmatrix} \\ &= \big((m-E)(-m-E) - p^2\big)^2 \\ &= (E^2 - m^2 - p^2)^2 = 0 \end{aligned} \tag{29}$$

因此狄拉克方程(8.2.11)的本征值为

$$E = \pm\sqrt{p^2 + m^2} \tag{30}$$

且其重数均为 2。

补 对核子数为 Z 的类氢原子，估算其基态波函数大小分量模平方的比值。

解: 类氢原子的势给出

$$\Phi = -\frac{Ze}{r}, \quad \boldsymbol{A} = 0 \tag{31}$$

代入狄拉克方程的 2×2 矩阵形式中得到

$$\begin{pmatrix} m - \frac{Ze^2}{r} & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & -m - \frac{Ze^2}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{32}$$

对下半部分的方程为

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})u = \left(E + m + \frac{Ze^2}{r}\right) v \tag{33}$$

在非相对论近似下 $E \approx m$。由于 $\boldsymbol{\sigma}$ 与 $\boldsymbol{p}$ 分别为厄米的矩阵与厄米算符，有

$$|v|^2 = u^\dagger \frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})}{\left(E+m+\frac{Ze^2}{r}\right)^2} u \tag{34}$$

其中

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{p}^2 \tag{35}$$

而对类氢原子基态有

$$K = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} = \frac{Ze^2}{r} - \frac{1}{2}mZ^2\alpha^2 \tag{36}$$

这说明

$$\left|\frac{v}{u}\right| \approx \left(\frac{Ze^2}{2mr} - \frac{1}{4}Z^2\alpha^2\right)\left(1+\frac{Ze^2}{2mr}\right)^{-2} \tag{37}$$

补 若四个厄米矩阵 $M_i (i=1,2,3,4)$ 满足关系

$$M_iM_j + M_jM_i = 2\delta_{ij}$$

证明：

1) M_i 的本征值为 ±1；

2) M_i 的迹为 0；

3) M_i 必为偶数维矩阵。

解: 1) 在反对易关系

$$\{M_i, M_j\} := M_iM_j + M_jM_i = 2\delta_{ij}I \tag{38}$$

中取 $j=i$ 但是不自动求和，可以得到

$$M_iM_i = I \tag{39}$$

设 $|\psi\rangle$ 是 M_i 的本征值为 λ 本征态，那么

$$M_i^2|\psi\rangle = \lambda^2|\psi\rangle = |\psi\rangle \tag{40}$$

这代表 $\lambda^2=1$，即 λ 只能为 ±1。

2) 取 $j\neq i$，根据反对易关系(38)可以知道

$$M_iM_j = -M_jM_i \tag{41}$$

利用式(39)可以得到

$$\operatorname{tr} M_i = \operatorname{tr}(M_jM_jM_i) = -\operatorname{tr}(M_jM_iM_j)$$

另一方面有性质 $\operatorname{tr}(AB)=\operatorname{tr}(BA)$，因此

$$\operatorname{tr}(M_jM_jM_i) = -\operatorname{tr}(M_jM_iM_j) = -\operatorname{tr}(M_jM_jM_i) \tag{42}$$

这说明

$$\operatorname{tr} M_i = 0 \tag{43}$$

3) 矩阵的迹等于其所有本征值之和。奇数维矩阵共有奇数个本征值，而奇数个 $+1$ 或 -1 无论如何组合均不能使其和为 0。故 1) 与 2) 的结果表明 M_i 无论如何不可能为奇数维的矩阵，只能是偶数维的矩阵。