4. 正则量子化

在喀兴林老师的《高等量子力学》里第二章开头给出了五条基本假设，其中，基本假设三：在量子力学中，从经典力学的哈密顿量$H(p,q)$过渡到量子力学的算符形式$H(\hat{p},\hat{q})$，其中，坐标算符$\hat{x}$和动量算符$\hat{p}$满足对易关系$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$。这里的对易关系，就是一个假设。下面我们慢慢利用这个假设推导$\hat{p}$算符的坐标表象形式为偏导。这部分内容大部分摘自原书籍。

基于动量算符$\hat{P}$我们构造一个新的指数算符为$Q^\dagger(\xi)=e^{-\frac{i}{\hbar}\xi P}$

1. - 首先我们考虑对易关系$[X,Q^\dagger(\xi)]=XQ^\dagger(\xi)-Q^\dagger(\xi)X$。
2. - 然后利用已知条件和算符的性质，现在来证明$[X,Q^\dagger(\xi)]=i\hbar\frac{\partial}{\partial P}Q^\dagger(\xi)$：
     - 我们对$Q^\dagger(\xi)=e^{-\frac{i}{\hbar}\xi P}$进行泰勒展开：$e^{-\frac{i}{\hbar}\xi P}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\frac{i}{\hbar}\xi P)^n}{n!}=1-\frac{i}{\hbar}\xi P+\frac{(-\frac{i}{\hbar}\xi)^2P^2}{2!}-\cdots$。
     - 计算$XQ^\dagger(\xi)-Q^\dagger(\xi)X$：
       - $XQ^\dagger(\xi)=X\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\frac{i}{\hbar}\xi P)^n}{n!}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\frac{i}{\hbar}\xi)^n}{n!}XP^n$。
       - $Q^\dagger(\xi)X=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\frac{i}{\hbar}\xi)^n}{n!}P^nX$。
       - 对于XP^n-P^nX，利用$[X,P]=i\hbar$，通过数学归纳法可以证明$XP^n-P^nX=i\hbar nP^{n-1}$，这个证明在喀兴林老师的课本里有过程，读者自证也不难，或者在本笔记的第六节，里面再次用到这类公式时候会给出一个详细证明。
       - 那么$XQ^\dagger(\xi)-Q^\dagger(\xi)X=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\frac{i}{\hbar}\xi)^n}{n!}(XP^n-P^nX)$。
       - 把$XP^n-P^nX=i\hbar nP^{n-1}$代入上式：
         - $XQ^\dagger(\xi)-Q^\dagger(\xi)X=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\frac{i}{\hbar}\xi)^n}{n!}(i\hbar nP^{n-1})$。
         - 上面式子右侧其实已经看得出来是一个对P求导的结果，即$Q^\dagger(\xi)$关于P求导衍生式子:$i\hbar\frac{\partial Q^\dagger(\xi)}{\partial P}=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\frac{i}{\hbar}\xi)^n}{(n-1)!}(i\hbar)P^{n-1}$
3. 最后得到：
   - 由$[X,Q^\dagger(\xi)]=i\hbar\frac{\partial Q^\dagger(\xi)}{\partial P}=\xi Q^\dagger(\xi)$

在坐标表象$|x\rangle$上利用上述对易关系，得

$$\begin{aligned}XQ^\dagger(\xi)|x\rangle&=Q^\dagger(\xi)X|x\rangle+\xi Q^\dagger(\xi)|x\rangle\\&=(x+\xi)Q^\dagger(\xi)|x\rangle\end{aligned}$$

由此式可见，若$|x\rangle$是X的本征矢量，则$Q^\dagger(\xi)|x\rangle$也是本征矢量；若x是X的一个本征值，则$x+\xi$也是一个本征值。既然ξ为任意实数时上述推理均能成立，就可以得出结论：位置算符X的本征值可取一切实数。这一结论说明，在量子力学中粒子位置的可取值与经典力学中的情况并无不同。

此外也可以知道，X的一个本征矢量$|x\rangle$被算符$Q^\dagger(\xi)$作用后，可得出另一个本征矢量，其本征值为$x+\xi$：

$$Q^\dagger(\xi)|x\rangle = |x+\xi\rangle$$

$Q^\dagger(\xi)$的幺正性是显然的(但注意其不是厄米的)，因此$|x+\xi\rangle$也是归一化的。我们称$Q^\dagger(\xi)$为作用于位置本征矢量上的上升算符；由上式的左矢形式

$$\langle x|Q(\xi) = \langle x+\xi|$$

可知，算符$Q(\xi)$是左矢$\langle x|$的上升算符。

此外显然还有

$$\begin{gathered}Q(\xi)|x\rangle = |x-\xi\rangle \\ \langle x|Q^\dagger(\xi) = \langle x-\xi|\end{gathered}$$

可见算符$Q(\xi)$是右矢$|x\rangle$的下降算符，而$Q^\dagger(\xi)$是左矢$\langle x|$的下降算符。

对于动量P也可以作类似的讨论。引入算符

$$T^\dagger(\pi) = e^{\frac{i}{\hbar}\pi X}, \quad T(\pi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\pi X}$$

式中π为一实数，则有

$$\begin{gathered}T^\dagger(\pi)|p\rangle = |p+\pi\rangle, \quad T(\pi)|p\rangle = |p-\pi\rangle \\ \langle p|T^\dagger(\pi) = \langle p-\pi|, \quad \langle p|T(\pi) = \langle p+\pi|\end{gathered}$$

下面，我们讨论坐标表象的位置算符X的形式。首先位置算符在自己的表象，也就是位置表象，当然是满足$\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$。不过我们最好将算符改为矩阵元的形式，因为后续会用到，那么我们插入单位算符:

$$\int dx'|x'\rangle\langle x'|\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$$

用左矢$\langle x''|$作用到上式两边，得到：

$$\int dx'\langle x''|x'\rangle\langle x'|\hat{X}|x\rangle = x\langle x''|x\rangle$$
$$\int dx'\delta(x''-x')\langle x'|\hat{X}|x\rangle = x\delta(x''-x)$$
$$\langle x''|\hat{X}|x\rangle = x\delta(x''-x)$$

上面利用了坐标本征态的正交归一性，连续谱下的本征态的正交归一性正是用狄拉克函数的形式。因此我们得到了位置算符的矩阵元表示。这里的狄拉克函数也回答了上一节中，坐标相关算符$\hat{V}(x)$带有狄拉克函数的问题。下面我们回答动量算符的具体形式，既要回答其带狄拉克函数，又要回答其是偏导形式。

我们的目标是得到动量算符在坐标表象的具体形式，又因为根据本征态性质的假设，动量算符在自身的动量表象的形式毋庸置疑是已知的简单式子$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$，那么我们其实只要找到从动量表象到坐标表象的变换矩阵即可，也就是我们要求出$\langle x|p\rangle$，将其作用于坐标表象，然后对坐标积分，就会变成动量表象。为求动量本征矢量$|p\rangle$在位置表象的形式$\langle x|p\rangle$，令$|0_x\rangle = |x=0\rangle$表示算符$X$的本征值为零的本征矢量，$|0_p\rangle = |p=0\rangle$表示算符$P$的本征值为零的本征矢量：

$$\begin{aligned}\langle x|p\rangle &= \langle x|T^\dagger(p)|0_p\rangle = \langle x|e^{\frac{i}{\hbar}pX}|0_p\rangle \\ &= \langle x|e^{\frac{i}{\hbar}px}|0_p\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}px}\langle x|0_p\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}px}\langle 0_x|Q(x)|0_p\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}px}\langle 0_x|e^{\frac{i}{\hbar}xP}|0_p\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}px}\langle 0_x|0_p\rangle\end{aligned}$$

第一行用到动量上升算符的定义并且代入算符具体形式。第二行将其算符往左作用变为指数上本征值x，然后提取出本征值。第三行用到坐标上升算符的定义改写左矢，然后将算符作用于右矢，右矢此时动量p为0，因此得到本征值是$e^{\frac{i}{\hbar}x0} = 1$，也就是得到了最后一行。我们继续想个办法求最后一行里内积部分，考虑动量本征态的正交归一性，即狄拉克函数：

$$\begin{aligned}\delta(p-p') = \langle p'|p\rangle &= \int\langle p'|x\rangle\langle x|p\rangle \mathrm{d}x \\ &= \int e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}e^{\frac{i}{\hbar}px}|\langle 0_x|0_p\rangle|^2 \mathrm{d}x \\ &= |\langle 0_x|0_p\rangle|^2\int e^{-\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}\mathrm{d}x \\ &= |\langle 0_x|0_p\rangle|^2 2\pi\hbar\delta(p-p')\end{aligned}$$

第二行用到了上面证明过的内积结论直接代入，第三行提取无关项，第四行利用广义函数的定义，写成

狄拉克函数的形式。最后，消去狄拉克函数最终得到:

$$\langle 0_x | 0_p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

那么我们此时就得到了动量本征矢量和坐标本征矢量内积的结果：

$$\langle x | p \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}px} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

终于，前期准备差不多了，现在我们补充一下动量表象动量算符的矩阵元形式，这个式子跟之前推导坐标算符坐标表象矩阵元的过程没有区别，因此是显然的。

$$\langle p' | \hat{P} | p \rangle = p\delta(p' - p)$$

现在，我们将这个式子左边插入一个动量和坐标的内积，右边也插入一个内积，就可以得到坐标表象的动量算符:

$$\begin{aligned}
P_{x'x} = \langle x' | P | x \rangle &= \iint \langle x' | p' \rangle \mathrm{d}p' \langle p' | P | p \rangle \mathrm{d}p \langle p | x \rangle \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint e^{\frac{i}{\hbar}p'x'} p\delta(p' - p) e^{-\frac{i}{\hbar}px} \mathrm{d}p' \mathrm{d}p \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{i}{\hbar}(x'-x)p} p \mathrm{d}p = \frac{1}{2\pi\hbar} \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) 2\pi\hbar\delta(x' - x) \\
&= -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x) \\
&= \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x' - x)
\end{aligned}$$

第二行代入了动量算符矩阵元，第三行对狄拉克函数积分消元，随后利用狄拉克函数的定义改写指数函数，第四行简单合并同类项得到结果，第五行是换了个偏导变量。最终，这就证明了动量算符在坐标表象下是微分算符。并且这里的狄拉克函数，以及上面证明的坐标算符矩阵元的狄拉克函数，这就回答了上一节的问题。

在课上，教师展示了另外一种推法，但是笔者没看明白，觉得不太严格，其过程如下，同样对易关系:

$$\begin{aligned}
\hat{x}\hat{p} |\psi\rangle &= (\hat{p}\hat{x} + [\hat{x}, \hat{p}]) |\psi\rangle \\
&= \hat{p}\hat{x} |\psi\rangle + i\hbar |\psi\rangle
\end{aligned}$$

下一步移项:

$$
(\hat{x}\hat{p} - i\hbar)\,|\psi\rangle = \hat{p}\hat{x}\,|\psi\rangle
$$

$$
(\hat{x}\hat{p} - i\hbar\frac{\partial x}{\partial x})\,|\psi\rangle = \hat{p}(x\,|\psi\rangle)
$$

然后就是注意到如果$\hat{p}$是微分算符，那么上面的式子是成立的。但是貌似这个不太像推导...也有可能笔者没有听清听懂。但是反正喀兴林老师的书也有另一套严格地证明，条条大路通罗马嘛，就没太大必要纠结了。