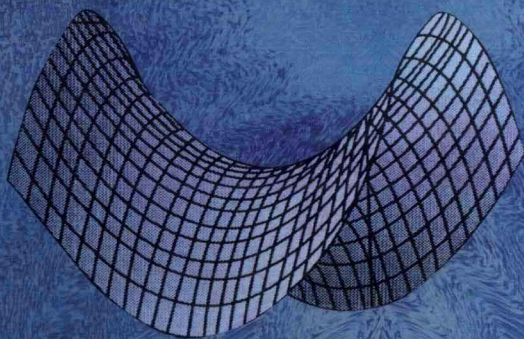


国家“十一五”重点图书

量子物理新进展系列

量子力学的 不变本征算符方法

范洪义 袁洪春 吴昊 著



上海交通大学出版社
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY PRESS

内 容 提 要

本书提出求量子体系能隙和能级公式的新方法,称之为“不变本征算符方法(invariant eigen-operator method, IEO 方法)”。这一方法是从 Heisenberg 创建矩阵力学的思想出发,关注能级的间隙,同时结合 Schrödinger 算符的物理意义,把本征态的思想推广到“不变本征算符”的概念,从而使得 Heisenberg 方程的用途更加广泛,求若干量子体系的能级更为简便。本书为量子力学、量子光学和固体物理提供了新方法,也为经典力学的简正坐标理论提供了新思路。本书适合对量子论有兴趣的广大学生、教师和理论科研人员阅读。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学的不变本征算符方法/范洪义,袁洪春,吴昊
著. —上海:上海交通大学出版社,2011

(量子力学新进展系列)

ISBN 978-7-313-07054-8

I. ①量… II. ①范…②袁…③吴… III. ①量子力学—算子演算—研究 IV. ①0413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 003350 号

量子力学的不变本征算符方法

范洪义 袁洪春 吴昊 著

上海交通大学出版社出版发行

(上海市番禺路 951 号 邮政编码 200030)

电话:64071208 出版人:韩建民

常熟市华通印刷有限公司印刷 全国新华书店经销

开本:850mm×1168mm 1/32 印张:7.25 字数:184 千字

2011 年 5 月第 1 版 2011 年 5 月第 1 次印刷

印数:1~2030

ISBN 978-7-313-07054-8/O 定价:35.00 元

版权所有 侵权必究

前 言

早在 1917 年,爱因斯坦在给克莱因的信中写道:“尽管我们用简单性原则选择复杂(现象),但是没有任何根据说明这种理论方法是永远恰当的(充分的)……我毫不怀疑,总有一天,因为我们现在还不能想象的理由,会出现另一个新的描述来代替现在这个。我相信,这种理论代谢的深化过程是没有尽头的。”因此在学习量子力学这门博大精深而又玄妙的学科时,有必要探讨新的方法以进入更深的物理境界。我国清代学者俞樾在《九九消夏录》曾对格物致知(即研究物理)写道:“致知在格物……是故格者,格之训正,经传屡见正也。”他又写道:“格,正也。欲致其知,在正其物,其物不正,知不可得而致也。”

我们不妨把“格”理解为研究,“正”理解为正派的研究学风和正确有效的方法。方法不对头,态度不端正,不可得知也。理论物理学家致力于用简单性原则去了解和透析复杂嶙峋的现象,并以自己的感觉(直觉)、以平易的方式感染与影响大众,此所谓“经传屡见正也”。以此为训,本书提出求量子体系能级的新方法,称之为“不变本征算符方法(invariant eigen-operator method, IEO 方法)”。这一方法是从 Heisenberg 创建矩阵力学的思想出发,关注能级的跃迁(间隙),同时结合 Schrödinger 算符的物理意义,把本征态的思想推广到“不变本征算符”的概念,从而使得 Heisenberg 方程的用途更加广泛,求若干量子体系的能级或能隙公式更为简便。

在以往的量子论中,求系统的能级一般归结于求解该系统哈密顿量的本征态方程(由薛定谔方程导出),很少用海森伯方程,究其原因,这也许部分是因为人们比较熟悉解微分方程(波动方程)

的缘故，部分是因为爱因斯坦觉得薛定谔相比海森伯而言，前者的贡献更大一些的原因。关于他们俩谁对量子论贡献大的问题，牵涉到历史上他们谁应先得 Nobel 奖。薛定谔和海森伯获奖的一个重要提名来自爱因斯坦，他说：“这两个人的贡献相互独立且意义深远，把一个奖项分给他们两人是不合适的。谁应该获奖这个问题很难决定。我个人认为薛定谔的贡献更大一些，因为我感觉与海森伯比较起来，他创立的概念将会有更深远的发展。如果由我做决定的话，我会首先把奖授予薛定谔。”在这封亲笔信脚注中，他加上这样一句话：“但这只是我个人的意见，也可能是错误的。”

但是狄拉克有他自己的看法，1963 年有人在采访狄拉克时问道：“你认为薛定谔排在第几位？”狄拉克回答说：“我认为他紧随海森伯之后。尽管在某些方面，薛定谔比海森伯头脑更聪明，因为海森伯从实验数据中得到很多帮助，而薛定谔所做的一切都只是靠他的大脑。”在另一个场合，狄拉克又说：“在我失败的地方海森伯取得了成功。当时有一大堆光谱的数据堆积着，而海森伯发现了恰当的方法去处理它们。他的成功开创了理论物理的黄金时代，在此以后的几年时间里，第二流的学生去做第一流的工作是不难的事情。”本书所介绍的方法也许从一个侧面支持了狄拉克的观点，指出了海森伯方程在求动力学系统能级时也能有所作为（有意思的是：在 1980 年狄拉克又指出由于薛定谔理论的诞生才有可能去考虑两个粒子间的对称的或反对称的波函数）。相信读者看了本书以后，会对海森伯方程青睐有加。

从写作本书的一开始，上海交通大学的谢绳武、叶取源和张杰先生就给予了热情的鼓励，在此深表谢意。作者范洪义在写作过程中得到妻子翁海光以及研究生的协助，他们是胡利云、徐学翔、范悦、陈俊华、李恒梅、唐绪兵、刘述光、许业军、吕翠红、任刚、谢传梅、王震、王帅、孟祥国，在此深表感谢。每当夜深人静、身心疲倦想偷点懒时，范洪义脑海里就会闪现慈母毛婉珍 50 多年前在灯下为小学生批阅作文时边读边改时的情景，她那消瘦的脸庞和慈祥

的目光浮现在儿子眼前，鞭策着他再打起精神，坚持工作一会儿。

科研作品的目标是“只令文字传青简，不使功名上景钟”。然作者鲜见寡闻，虽殚苦心，只抽孤绪，恐无当于大雅之林。宋代陈师道说：“书当快意读易尽，客有可人期不来。”作者祈望可人同行谅余之愚，对此书竅启未逮。

目 录

第 1 章 不变本征算符(IEO)方法的引入	1
1.1 IEO 方法的引入	2
1.2 IEO 方法的相关性质	6
1.2.1 系统有一阶本征算符和系统有 N 阶本征算符 等价	6
1.2.2 不变本征算符集和群映射	7
1.2.3 有关虚数本征值的说明	8
参考文献	9
第 2 章 IEO 方法研究谐振子系统能级	11
2.1 一维有坐标-动量耦合的量子谐振子	11
2.2 二维耦合量子谐振子	12
2.3 奇异谐振子模型	15
2.4 奇异参量放大器谐振子模型	19
2.5 全同耦合谐振子模型	23
参考文献	29
第 3 章 IEO 方法研究少体系统能级	31
3.1 存在运动耦合项的双原子系统	31
3.2 极化子模型	38
3.3 三原子系统	41
3.4 多原子分子系统	44
参考文献	48

第 4 章 IEO 方法求解链状哈密顿系统能级	49
4.1 一维晶格链系统	49
4.2 一维双原子链系统	52
4.3 一维不同耦合强度的双原子链系统	55
4.4 包含次近邻作用的双原子链	62
4.5 半无限原子链系统	65
4.6 Rubin 模型	69
4.7 Peierls 模型	74
4.8 量子叶轮	77
参考文献	85
第 5 章 IEO 方法求解复杂结构系统能级	87
5.1 电声相互作用系统	87
5.2 铁磁自旋链	91
5.3 复合晶格系统	95
5.4 四波混频模型	97
5.5 双模多光子系统	103
参考文献	108
第 6 章 IEO 方法求解均匀磁场中量子点的电子能谱	110
6.1 均匀磁场(UMF)下描述电子运动的纠缠态表象	110
6.2 IEO 方法求解 UMF 中各向同性量子点的电子能谱	112
6.3 IEO 方法求解 UMF 中各向异性量子点的电子能谱	115
6.4 UMF 下马鞍势中的电子能谱	119
6.5 IEO 方法求解自旋系统的能谱	122
参考文献	123

第 7 章 IEO 方法分析非对易坐标空间中的量子系统	125
7.1 非对易坐标空间中的纠缠态表象	125
7.2 双模谐振子系统	132
7.3 三模谐振子系统	136
参考文献	139
第 8 章 腰不变本征算符方法	141
8.1 Jaynes-Cummings (JC)模型的能隙	141
8.2 计入原子运动 Doppler 效应的双光子 JC 模型 哈密顿量能隙	148
8.3 三能级 Λ 型组态的原子的 JC 模型能隙	151
8.4 非线性多光子 JC 模型的能隙	156
8.5 多模多光子非线性广义 JC 模型的能隙	161
8.6 一种含耦合通道腔 QED 模型的能隙	167
参考文献	171
第 9 章 IEO 方法的扩展	175
9.1 IEO 方法中的微扰论	175
9.2 在相互作用绘景中分析 IEO 方法	177
9.3 IEO 方法用于二次型玻色子哈密顿量	180
9.4 IEO 方法用于二次型费米子哈密顿量	185
9.5 IEO 方法用于分析介观电路的量子效应	189
参考文献	192
第 10 章 由 IEO 方法启示求经典动力学系统的简正 坐标	194
10.1 IEO 方法的经典对应	194
10.2 由 IEO 方法求一维三粒子振动系统的简正坐标	199
10.3 由 IEO 方法求一个典型双原子线性链的简正	

第 1 章 不变本征算符(IEO) 方法的引入

量子力学的建立是 20 世纪物理学最重要的科研成果之一,它极大地推动了人类物质文明和精神文明的进步,深化了人们对自然的认识。要研究微观世界的物质结构和属性,只有在量子力学的理论基础上才有可能实现。可以说现代物理学的每一个分支都离不开量子力学的基础。

量子理论起源于 1900 年 Planck 为了解决黑体辐射的紫外灾难问题而提出的能量子假设^[1],而后得到了 Einstein 的光量子概念的支持与发扬^[2],Bohr 的原子量子论^[3]和 de Broglie 的物质波^[4]假设使得 Planck 的量子概念锦上添花。突破旧式(半经典-半量子)量子论的桎梏是 20 世纪 20 年代的事,Heisenberg 和 Schrödinger 分别提出两种形式不同却又被意识到是殊途同归相互等价的量子化方案——矩阵力学^[5]和波动力学^[6],前者是从粒子性和不连续性出发,而后者则依仗于波动性和连续性,它们后来被 Dirac 统一为 q 数理论。Dirac 引入 ket - bra 记号来表示量子态,用 $|\rangle$ 表示 Heisenberg 列矩阵,用 $|\rangle\langle|$ 表示 Heisenberg 方阵(算符),把 Schrödinger 波函数 $\psi(x)$ 改写为 $\langle x|\psi\rangle$,自然地引入了量子力学表象,奠定了量子力学表象变换论(其明显的发展可见于在 1997 年范洪义写的专著《量子力学表象变换论——Dirac 符号进展》)。而后 Born 提出波函数的统计解释^[7],Pauli 提出不相容原理,Dirac 引入电磁场的量子理论^[8],量子力学的理论框架终于正式确立。建立量子力学以及使之不断完善的历史丰碑上,闪耀着若干个 20 世纪最优秀的物理学家的光辉名字。

在量子力学的发展过程中,如何求解量子系统的能谱始终是

一个基本而关键的问题。长期以来,人们的一般做法都是根据系统的哈密顿量建立定态 Schrödinger 方程^[9],求解它得到能量本征态和本征值。但是在涉及微分方程求解时,常常遇到解不出的困难,步履维艰。与此同时,和 Schrödinger 方程有着同等重要地位的 Heisenberg 方程^[10],却很少被直接使用于求解能谱,人们的厚此薄彼主要原因是较熟悉微分方程求解的做法。量子力学史告诉我们,当初 Heisenberg 创建量子力学时,他所关心的不是粒子的坐标或动量,而关注物理上可观测的光谱,即两个能级之间的跃迁,这就牵涉两个态矢量,若用列矩阵代表态矢,就自然会用到矩阵计算(Born 先意识到这一点),据此,Heisenberg 引入了量子跃迁矩阵,即矩阵力学。可见 Heisenberg 的思路也应该是适合于处理能谱问题的,尽管长期以来人们没有给予足够的重视。

为了改善这种现状,经过研究发现,对于很多系统来说,在求量子体系能级时,除了直接处理 Schrödinger 波动方程的解,还可直接对算符进行操作来达到目的,我们把这一套对算符操作求量子体系能级的方法进行归纳总结,并称之为“不变本征算符方法(invariant eigen-operator method, IEO 方法)”^[11,12]。这一方法是从 Heisenberg 思想出发,关注能级的间隙,同时结合 Schrödinger 算符的物理意义,把本征态的思想推广到“不变本征算符”的概念,从而使得 Heisenberg 方程的用途更加广泛,在不少情形下,“不变本征算符”方法避免了对角化哈密顿量的传统做法,显得尤为简便。

1.1 IEO 方法的引入

古人云:“睫在眼前长不见,道非身处更何求”,IEO 方法的灵感来源于量子力学的最基本 Schrödinger 方程与 Heisenberg 方程的和谐。Schrödinger 把 $i \frac{d}{dt}$ 和哈密顿算符 H 视为等价(为方便起

见本文中取 $\hbar=1$),故而在很多文献里 $i \frac{d}{dt}$ 被称为 Schrödinger 算子。Schrödinger 方程为

$$i \frac{d}{dt} \psi = H \psi \quad (1.1)$$

对于一个不显含时间的哈密顿量 $H \left(\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \right)$, 其定态 Schrödinger 方程为 $H\psi = E\psi$ 。当转到 Heisenberg 表象中时, 一个力学量算符 $\hat{O}_e$ 的时间演化受 Heisenberg 方程支配, 即

$$i \frac{d}{dt} \hat{O}_e = [\hat{O}_e, H] \quad (1.2)$$

如果算符 $\hat{O}_e$ 满足

$$[\hat{O}_e, H] = \lambda \hat{O}_e \quad (1.3)$$

则有

$$i \frac{d}{dt} \hat{O}_e = \lambda \hat{O}_e \quad (1.4)$$

方程(1.4)可以看做是和能量本征态方程(1.1)“平行”的方程, 换句话说, 算符 $\hat{O}_e$ 在 $i \frac{d}{dt}$ 的作用下是“不变量”。这样, 如果算符 $\hat{O}_e$ 满足式(1.3), 就称它为系统的一个“一阶”不变本征算符。利用这些不变本征算符来求解系统能谱的方法相应地称为 IEO 方法。在波函数的定态本征方程中, 本征值 E 即表示系统的能量。而在引入的算符本征方程中, 本征值 λ 与系统哈密顿量的本征能谱有密切关系, 它对应的是系统的能级差。

为了说明这一点, 假设 $\{|\phi\rangle_i\}$ 是哈密顿量 H 的本征态集合, 且构成 Hilbert 空间的完备集。 $|\phi\rangle_a$ 和 $|\phi\rangle_b$ 是其中任意两个相邻的非简并本征态, 对应的能量本征值分别为 E_a 和 E_b , 即

$$H |\phi\rangle_a = E_a |\phi\rangle_a, \quad H |\phi\rangle_b = E_b |\phi\rangle_b \quad (1.5)$$

再根据式(1.3)有

$$\begin{aligned}
{}_a\langle\phi|[\hat{O}_e, H]|\phi\rangle_b &= {}_a\langle\phi|(\hat{O}_e H - H\hat{O}_e)|\phi\rangle_b \\
&= (E_b - E_a){}_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b \quad (1.6) \\
&= \lambda_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b
\end{aligned}$$

由于 $\hat{O}_e$ 是非零算符, 必然存在 $|\phi\rangle_a$ 和 $|\phi\rangle_b$ 使得 ${}_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b \neq 0$, 于是

$$\lambda = E_b - E_a = \Delta E \quad (1.7)$$

即 λ 是系统的一个能级差。例如, 一维谐振子的哈密顿量 $H_1 = \omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$, 则

$$i \frac{d}{dt} a = [a, H_1] = \omega a \quad (1.8)$$

所以, a 就是一维谐振子的哈密顿量 H_1 的“本征算符”, 相应的本征值为 ω , 也是系统的能级差。这完全符合用 Schrödinger 方程解的结果。

按照式(1.2), 当做一次微商 $\frac{d}{dt}$ 还不满足算符方程的话, 就再做第二次微商并再用海森伯方程, 若能使下式成立:

$$\left(i \frac{d}{dt}\right)^2 \hat{O}_e = [[\hat{O}_e, H], H] = \lambda \hat{O}_e \quad (1.9)$$

此时 $\hat{O}_e$ 称为“二阶”不变本征算符。由于 $\left(i \frac{d}{dt}\right)^2$ 对应于 H^2 , 所以 $\sqrt{\lambda}$ 就是两个相邻能级间的能隙。用类似于式(1.6)的证法可以说明这一点, 即

$$\begin{aligned}
{}_a\langle\phi|[[\hat{O}_e, H], H]|\phi\rangle_b &= {}_a\langle\phi|(\hat{O}_e H^2 - 2H\hat{O}_e H + H^2\hat{O}_e)|\phi\rangle_b \\
&= (E_b - E_a)^2 {}_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b \\
&= \lambda_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b \quad (1.10)
\end{aligned}$$

当矩阵元 ${}_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b \neq 0$, 两个态的能量间隔为 $E_b - E_a = \sqrt{\lambda}$ 。

再举一个例子, 量子光学中非简并参量放大器被用于实现参

量下转换过程,其哈密顿量为^[13]

$$H_2 = \omega(a^\dagger a + b^\dagger b) + g(ab - a^\dagger b^\dagger) \quad (1.11)$$

根据对易关系

$$[a^\dagger, H_2] = -\omega a^\dagger - gb, \quad [b, H_2] = \omega b + ga^\dagger \quad (1.12)$$

很容易得到

$$[[a^\dagger + b, H_2], H_2] = (\omega^2 + g^2)(a^\dagger + b) \quad (1.13)$$

从上式可以看出, $a^\dagger + b$ 可视为 H_2 的“本征算符”, 相应系统的能级间隔为 $\sqrt{\omega^2 + g^2}$ 。这里必须强调的是, 对于某一个系统哈密顿量的本征算符可能不是唯一的, 例如算符 $a^\dagger - b$ 也是 H_2 的一个“本征算符”, 即 $[[a^\dagger - b, H_2], H_2] = (\omega^2 + g^2)(a^\dagger - b)$ 。为了验证 $\sqrt{\omega^2 + g^2}$ 就是 H_2 的能级差, 用传统的对角化方法求解, 利用压缩变换^[14]

$$\begin{aligned} a &\rightarrow a \cosh \theta - ib^\dagger \sinh \theta, \\ b &\rightarrow b \cosh \theta - ia^\dagger \sinh \theta \end{aligned} \quad (1.14)$$

把 H_2 改写成

$$\begin{aligned} H_2 &\rightarrow (a^\dagger a + b^\dagger b)(\omega \cosh 2\theta - ig \sinh 2\theta) + \\ &2(ab - a^\dagger b^\dagger)(i\omega \sinh \theta \cosh \theta + g \cosh 2\theta) + \\ &2\omega \sinh^2 \theta - 2ig \sinh \theta \cosh \theta \end{aligned} \quad (1.15)$$

选择 $\theta = \theta_0$ 使得 $i\omega \sinh \theta_0 \cosh \theta_0 + g \cosh 2\theta_0 = 0$, 就有

$$H_2 \rightarrow \sqrt{\omega^2 + g^2} (a^\dagger a + b^\dagger b) + 2\omega \sinh^2 \theta_0 - 2ig \sinh \theta_0 \cosh \theta_0 \quad (1.16)$$

从式(1.16)可以看出 H_2 的能级差的确是 $\sqrt{\omega^2 + g^2}$ 。从这个例子看, IEO 方法比起对角化方法, 既简捷又有效。

对一个系统的哈密顿量 H , 事先选定算符 $\hat{O}_e$ 作为这个系统的不变本征算符, 按照式(1.3)从一阶开始作试探计算, 若作一次对易子就有 $[\hat{O}_e, H] = \lambda \hat{O}_e$, 那么该体系的能隙就是 λ , 若作一次和二次都不满足算符方程, 当做 n 次对易计算后有

$$\left(i \frac{d}{dt}\right)^n \hat{O}_e = [[[\hat{O}_e, H], H], \dots, H] = \lambda \hat{O}_e \quad (1.17)$$

那么该系统的能隙为 $\sqrt{\lambda}$ 。另外,若二次计算后 $\hat{O}_0$ 还不满足算符方程,也许应选取其他的算符 $\hat{O}_0'$ 作为本征算符再作试探。

借助 IEO 方法,充分利用海森伯方程,无需涉及系统的具体量子态和波函数,就可以简捷方便地得到某些量子系统的能量本征值信息。关键是要能够找到哈密顿量的“不变本征算符”,这种不变本征算符可以是一阶的,也可以是高阶的,同一个哈密顿量也可以有不同的“不变本征算符”,不同的“不变本征算符”也可以对应于同一能隙(算符意义下的简并),这些为尝试找“不变本征算符”提供了更多的机会,为求解某些量子系统的能谱信息提供了很大的方便。以下读者将看到,对于固体物理中有复杂周期结构的哈密顿量,用 IEO 方法求系统的准粒子谱颇为有效。

1.2 IEO 方法的相关性质

1.2.1 系统有一阶本征算符和系统有 N 阶本征算符等价

显然“有 N 阶本征算符” $\Rightarrow$ “有一阶本征算符”。现假设系统有 N 阶本征算符 $\hat{F}_1$ 满足

$$[[[\hat{F}_1, H], H], \dots, H] = \lambda \hat{F}_1 \quad (1.18)$$

令

$$\hat{F}_{n+1} = \lambda^{-1/N} [\hat{F}_n, H], \quad n = 1, 2, \dots, N-1 \quad (1.19)$$

例如

$$[\hat{F}_1, H] = \lambda^{1/N} \hat{F}_2, \quad [\hat{F}_2, H] = \lambda^{1/N} \hat{F}_3, \dots \quad (1.20)$$

联合式(1.18), (1.19)和(1.20), 可见

$$[[\hat{F}_1, H], H] = \lambda^{1/N} [\hat{F}_2, H]$$

$$[[[\hat{F}_1, H], H], H] = \lambda^{1/N} [[\hat{F}_2, H], H] = \lambda^{2/N} [\hat{F}_3, H]$$

$$\begin{aligned} [[[\hat{F}_1, H], H], \dots, H] &= \lambda^{1/N} [[\hat{F}_2, H], \dots, H] \\ &= \lambda^{(N-1)/N} [\hat{F}_N, H] = \lambda \hat{F}_1 \end{aligned} \quad (1.21)$$

所以,得

$$[\hat{F}_N, H] = \lambda^{1/N} \hat{F}_1 \quad (1.22)$$

把式(1.20)和式(1.22)相加,得到

$$\left[\sum_{n=1}^N \hat{F}_n, H \right] = \lambda^{1/N} \sum_{n=1}^N \hat{F}_n \quad (1.23)$$

于是 $\sum_{n=1}^N \hat{F}_n$ 就是一阶本征算符,即系统也存在一阶本征算符。在实际运用 IEO 方法求解时,可以视情况选择寻找一阶或者 N 阶本征算符。为方便计,不经特别说明时以下讨论均指一阶本征算符。

1.2.2 不变本征算符集和群映射

假设 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 都是哈密顿量 H 的不变本征算符

$$[\hat{F}, H] = \lambda \hat{F}, \quad [\hat{G}, H] = \mu \hat{G} \quad (1.24)$$

则有

$$[\hat{F}^\dagger, H] = -\lambda \hat{F}^\dagger \quad (1.25)$$

和

$$[\hat{F}\hat{G}, H] = (\lambda + \mu) \hat{F}\hat{G} \quad (1.26)$$

即 IEO 的共轭算符和相互乘积都是不变本征算符。由式(1.25)和(1.26)可得

$$[\hat{F}\hat{F}^\dagger, H] = 0 \quad (1.27)$$

综合上述几个式子,并对照群的定义,可以发现:用算符和哈密顿量 H 之间的对易运算可以把 IEO 集合映射到一个加法群。该群生成元的个数对应系统的自由度,群的所有元素对应了系统的所有能级差,由该群即可构造出系统的整体能谱。

1.2.3 有关虚数本征值的说明

用 IEO 方法求解系统能量的时候,有时会遇到 IEO 对应的本征值是虚数的情况,相应的物理解释是什么呢?

假设系统哈密顿量 H 的本征态集合为 $\{|\phi\rangle_n, n \in \mathbf{N}\}$,若有 H 的某个 IEO 满足

$$[\hat{F}, H] = i\lambda \hat{F} \quad (1.28)$$

式中, λ 为非零实数。则对于任意 $n, m \in \mathbf{N}$ 有

$${}_n\langle\phi|[\hat{F}, H]|\phi\rangle_m = (E_m - E_n){}_n\langle\phi|\hat{F}|\phi\rangle_m = i\lambda{}_n\langle\phi|\hat{F}|\phi\rangle_m \quad (1.29)$$

由于相应的本征值 E_n 和 E_m 都是实数,显然

$$E_n - E_m \neq i\lambda \quad (1.30)$$

故而有

$${}_n\langle\phi|\hat{F}|\phi\rangle_m = 0 \quad (1.31)$$

即算符 $\hat{F}$ 在 $\{|\phi\rangle_n\}$ 张成的空间中的矩阵元为 0,这就说明该系统的能量本征态不能构成 Hilbert 空间的一个完备集。

例如,一个含有压缩项的谐振子系统,其哈密顿量形式为^[15]

$$H = \omega a^\dagger a + i\eta(a^2 - a^{\dagger 2}) \quad (1.32)$$

式中, $\omega a^\dagger a$ 是谐振子项,而 $i\eta(a^2 - a^{\dagger 2})$ 则代表了压缩作用。通过对易关系

$$\begin{aligned} [a, H] &= \omega a - 2i\eta a^\dagger \\ [a^\dagger, H] &= -\omega a^\dagger - 2i\eta a \end{aligned} \quad (1.33)$$

容易发现湮灭算符 a 即是系统的一个二阶不变本征算符

$$[[a, H], H] = (\omega^2 - 4\eta^2)a \quad (1.34)$$

由 IEO 方法可知系统能级差

$$\Delta E = \sqrt{\omega^2 - 4\eta^2} \quad (1.35)$$

当初始频率和压缩参量满足 $\omega^2 > 4\eta^2$ 时,体系仍然满足谐振子性

质,能级差从压缩前的 ω 变成 $\sqrt{\omega^2 - 4\eta^2}$ 。而当 $\omega^2 < 4\eta^2$ 时, $\sqrt{\omega^2 - 4\eta^2}$ 不再是实数,此时体系已无所谓束缚的能量本征态。

参考文献

- [1] M. Planck, Über eine Verbesserung der Wienschen Spektralgleichung [J]. Verh. D. Phys. Ges. 1900, 2: 202.
- [2] A. Einstein, On a heuristic viewpoint concerning the production and transformation of light [J]. Ann. Der Physik, 1905, 17: 132.
- [3] N. Bohr, On the constitution of atoms and molecules [J]. Phil. Mag. 1913, 26: 1, 471, 857.
- [4] L. de Broglie, Ondes et quanta [J], Comptes Rendus, 1923, 177: 507.
L. de Broglie, Waves and quanta [J], Nature, 1923, 112: 540.
- [5] W. Heisenberg. Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematic und Mechanik [J]. Zeit. Physik, 1925, 33: 879.
M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan. Zur Quantenmechanik II [J]. Zeit. Physik, 1926, 35: 557.
- [6] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem, dritte Mitteilung [J]. Ann. der Physik, 1926, 80: 437.
E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem, erste Mitteilung [J]. Ann. der Physik, 1926, 79: 361.
E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem, zweite Mitteilung [J]. Ann. der Physik, 1926, 79: 489.
E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem, vierte Mitteilung [J]. Ann. der Physik, 1926, 81: 108.
- [7] M. Born. Quantenmechanik der Stoßvorgänge [J]. Zeitschrift für Physik, 1926, 38: 803.
- [8] P. A. M. Dirac. The quantum theory of dispersion [J]. Proc. Roy. Soc. A, 1927, 114: 243,
P. A. M. Dirac. Case of Resonance [J], Proc. Roy. Soc. A, 1927, 114: 710.