量子系统哈密顿量的必要条件

汪克林[1] 曹则贤[2,†]
（1 中国科学技术大学近代物理系 合肥 230024）
（2 中国科学院物理研究所 北京 100190）

Necessary condition for a Hamiltonian to be proper in quantum mechanics

WANG Ke-Lin[1] CAO Ze-Xian[2,†]
(1 Department of Modern Physics，University of Science and Technology of China，Hefei 230024，China)
(2 Institute of Physics，Chinese Academy of Sciences，Beijing 100190，China)

2022－06－29收到
† email：zxcao@iphy.ac.cn
DOI：10.7693/wl20220906

摘 要 在此前的量子理论中，哈密顿量被要求是厄米算符，这既保证了其本征值谱为实又保证了动力学演化过程几率守恒。近年来，一些非厄米哈密顿量被发现同样满足这两条要求。然而，这两条要求都是哈密顿量可描述量子系统动力学的充分条件而非必要条件。文章中我们从量子化条件和动力学演化方程出发，考察一般形式的哈密顿量，表述为产生算符和湮灭算符之正规积的形式，欲为恰当的哈密顿量所应满足的必要条件。对于形如$\hat{H} = \hat{p}^2 + \mathrm{i}\hat{x}^3$和$\hat{H} = \hat{p}^2 - \hat{x}^4$这样的近年来得到广泛关注的非厄米哈密顿量，容易验证它们满足必要性条件。必要性条件可以用来及时排除那些不恰当的非厄米哈密顿量形式。

关键词 哈密顿量，厄米性，非厄米哈密顿量，必要条件，量子化条件，动力学方程

Abstract In quantum mechanics, the Hamiltonians are required to be hermitian, since hermiticity guarantees that the energy spectrum is real and the time evolution is unitary. However, some non-hermitian Hamiltonians are also found meeting these requirements. The hermiticity is essentially a sufficient condition. In the current article, we formulate the necessary condition for a Hamiltonian to be proper in quantum mechanics, regarding the quantization condition it follows and the role it plays in the governing equation of dynamic evolution. It can be confirmed that the Hamiltonians adopted in quantum mechanics, even the non-hermitian ones such as $\hat{H} = \hat{p}^2 + \mathrm{i}\hat{x}^3$ and $\hat{H} = \hat{p}^2 - \hat{x}^4$, meet such a necessary condition. The necessary condition provides the first criterium for the candidate Hamiltonians to be introduced.

Keywords Hamiltonian，hermiticity，non-hermitian Hamiltonian，necessary condition，quantization condition，dynamic equation

1 引言

作为用来描述物理系统动力学的哈密顿量，当被用于量子系统时，过去一直被要求是厄米算符，满足$\hat{H} = \hat{H}^+$。对哈密顿量施加这个狄拉克厄米性条件的理由是，哈密顿量的厄米性保证其能量谱全为实数，且保证系统在动力学演化过程中几率守恒，因为哈密顿量的厄米特性保证了动力学演化算符$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}$(设定$\hbar$=1)是酉正的。这个厄米性条件本质上应该算是个数学意义上的要求。因为

数学上的清晰证明，这个条件此前在物理文献中被爽快地接受了下来而未予深入讨论。然而，应该看到狄拉克厄米性条件只是个充分条件，却不是必要条件。2007年，Bender在一篇综述性文章中指出，可以找到一些非厄米的哈密顿量形式，比如$\hat{H}=\hat{p}^2+\mathrm{i}\hat{x}^3$和$\hat{H}=\hat{p}^2-\hat{x}^4$，满足本征值谱为实以及保证演化过程中几率守恒这两个条件[1]。基于非厄米哈密顿量的量子理论研究近年来得到了广泛的关注，也获得了很多新颖的关于非厄米哈密顿量所描述之量子体系的认识。然而，就笔者对文献的有限把握而言，关于什么样的哈密顿量是恰当的哈密顿量，即可用来描述量子体系动力学的哈密顿量，相关问题之必要条件的讨论是不充分的，如果不是未曾引起注意的话。有必要从量子理论的某些一般性要求出发，找到恰当的哈密顿量应满足的必要性条件。至于意义，一个最直接的作用就是可以迅速排除那些肯定无效的非厄米哈密顿量候选形式。实际上，尽可能全面地考察量子理论中的一些论述是有益的，一些先入为主的观念确曾妨碍了对问题的及时正确认识。比如，非厄米哈密顿算符此前只被用来描述耗散过程，它被认为不可能是基本的，因为相应的演化算符不是酉正的。如今我们知道这种观念有许多值得商榷的地方。

关于是否有必要讨论量子问题之充分必要条件的问题，在量子力学建立之初就有一个典型案例，即辐射能量量子化作为得到黑体辐射普朗克公式之充分必要条件的证明对确立量子理论的意义。1900年，普朗克引入辐射能量量子化的假设$E=nh\nu$，$n=0,1,2\cdots$得到了描述黑体辐射谱的普朗克公式。此后，普朗克为了摆脱这个辐射能量量子化假设进行了十余年的挣扎，为他赢得了“违背自己意愿的革命家”的称号。1912年，数学家庞加莱给出了辐射能量量子化是得到黑体辐射公式之充分必要条件的证明[2]。令人忍俊不禁的是，这个工作以后，普朗克否定自己提出的能量量子化假设的努力才终告消停，在这个过程中普朗克还提出了零点能的概念，以消除前述表述$E=nh\nu$中由$n=0$所带来的一些困惑[3]。

本文中，我们将从量子化条件(对偶物理量之间的对易关系)和动力学演化用薛定谔方程描述(演化算符为$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}$)这两个量子理论的基本要求出发，讨论可描述量子系统的恰当的哈密顿量所应该满足的必要性条件。此处具体讨论以一维情形为例，结论可以推广到多维空间的情形。

2 推导与讨论

哈密顿量是对偶的一对算符，位置算符$\hat{x}$，和动量算符$\hat{p}$，的函数。加于位置算符和动量算符之上的所谓量子化条件，表现为对易关系

$$\left[\hat{x},\ \hat{p}\right]=\mathrm{i}\,. \tag{1}$$

可对算符$\hat{x}$，$\hat{p}$作变换

$$\hat{p}=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left(a^+-a\right),\ \hat{x}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^++a\right)\ , \tag{2}$$

其中的湮灭算符a，和产生算符a^+，满足关系式

$$\left[a,\ a\right]=\left[a^+,\ a^+\right]=0,\ \left[a,\ a^+\right]=1\ . \tag{3}$$

这样，就把关于哈密顿量的讨论从用算符$\hat{x}$，$\hat{p}$的表示转向用算符a，a^+的表示。

在算符a，a^+表示中，哈密顿量总可以表示为正规积的形式

$$\hat{H}=\sum_{m,n}A_{mn}\left(a^+\right)^m\left(a\right)^n\ ,\ m,n=0,1,2\cdots \tag{4}$$

上述表示的合理性，可参考一般张量的表示或者几何代数中一般多矢量的表示加以理解。比如，一般的逆变二阶张量$T^{\mu\nu}$总可以写成由逆变矢量直积而来的特殊二阶张量$A^\mu B^\nu$相加而成，$T^{\mu\nu}=A^\mu B^\nu+A'^\mu B'^\nu+A''^\mu B''^\nu+\cdots$[4]。在代数几何中，一般多矢量可以由不同阶(grade)的齐次多矢量相加构成，而一定阶的齐次多矢量总可以表述为由基矢量通过外积所构成的单纯叶(pure blade)之和，形式与(4)可相类比[5]。将一般代数量表示为基之积然后求和，这是代数的本义。接下来关于哈密顿量的讨论都基于(4)式所给的一般形式。

在薛定谔图景中讨论量子系统的演化问题，湮灭算符和产生算符，a，a^+，是不依赖于时间的常算符，系统的状态函数随时间改变，遵从薛定谔方程。如果转而在Heisenberg图景中讨论，动力学算符须看作是时间依赖的，任意力学量算符$\hat{O}(t)$随时间t的变化遵从方程

$$\dot{\hat{O}} = \mathrm{i}\left[\hat{H},\ \hat{O}\right]. \tag{5}$$

在接下来的讨论中我们将采用Heisenberg图景。时间依赖的湮灭算符、产生算符应记为$a(t)$，$a^+(t)$的形式，不过为了简单，我们依然采用a，a^+的记号，只要谨记接下来的讨论是在Heisenberg图景下进行的即可。

对于$L = \frac{1}{2}M\dot{x}^2 - V(x)$这样的力学体系，有

$$\hat{p} = M\dot{\hat{x}}\ , \tag{6}$$

故而结合动力学方程(5)有关系式$\hat{p} = M\,\mathrm{i}\left[\hat{H}, \hat{x}\right]$，也即

$$\frac{1}{M}\left(a^+ - a\right) = \left[\sum_{m,n} A_{mn}\left(a^+\right)^m (a)^n,\ a^+ + a\right]. \tag{7}$$

求(7)式与湮灭算符a的对易式，得

$$\frac{1}{M} = \left[a, \left[\sum_{m,n} A_{mn}\left(a^+\right)^m (a)^n, a^+ + a\right]\right], \tag{8}$$

求(7)式与产生算符a^+的对易式，得

$$\frac{1}{M} = \left[a^+, \left[\sum_{m,n} A_{mn}\left(a^+\right)^m (a)^n, a^+ + a\right]\right]. \tag{9}$$

结合(8)与(9)，可得等式

$$\left[a, \left[\sum_{m,n} A_{mn}\left(a^+\right)^m (a)^n, a^+ + a\right]\right] = \left[a^+, \left[\sum_{m,n} A_{mn}\left(a^+\right)^m (a)^n, a^+ + a\right]\right]. \tag{10}$$

根据量子化条件(3)，有如下计算结果

$$\left[\sum_{m,n} A_{mn}\left(a^+\right)^m (a)^n, a^+ + a\right] = \sum_{m,n} A_{mn}\left\{n\left(a^+\right)^m a^{n-1} - m\left(a^+\right)^{m-1} a^n\right\}. \tag{11}$$

这样，由(10)式左侧可得

$$\left[a, \left[\sum_{m,n} A_{mn}\left(a^+\right)^m (a)^n, a^+ + a\right]\right] = \sum_{m,n} A_{mn}\left\{nm\left(a^+\right)^{m-1} a^{n-1} - m(m-1)\left(a^+\right)^{m-2} a^n\right\}, \tag{10a}$$

由右侧可得

$$\left[a^+, \left[\sum_{m,n} A_{mn}\left(a^+\right)^m (a)^n, a^+ + a\right]\right] = \sum_{m,n} A_{mn}\left\{nm\left(a^+\right)^{m-1} a^{n-1} - n(n-1)\left(a^+\right)^m a^{n-2}\right\}. \tag{10b}$$

也就是说，量子化条件和动力学算符演化方程要求(4)式中的哈密顿量一般形式须满足关系式

$$\sum_{m,n} A_{mn}\left\{nm\left(a^+\right)^{m-1} a^{n-1} - n(n-1)\left(a^+\right)^m a^{n-2}\right\} = \sum_{m,n} A_{mn}\left\{nm\left(a^+\right)^{m-1} a^{n-1} - m(m-1)\left(a^+\right)^{m-2} a^n\right\}. \tag{12}$$

等式(12)中，左右两侧的第一项是相同的，可相抵消，故得

$$\sum_{m,n} A_{mn} n(n-1)\left(a^+\right)^m a^{n-2} = \sum_{m,n} A_{mn} m(m-1)\left(a^+\right)^{m-2} a^n\ . \tag{13}$$

注意，(13)式不是数学意义上的恒等式，它并不总是成立的。(13)式构成一个一般形式的哈密顿量可以作为量子系统的恰当的哈密顿量，即在存在量子化条件(3)的前提下可用于方程(5)以描述量子系统的动力学演化过程，的必要条件。

进一步地，可在(13)式左侧引入替换$(n-2)\rightarrow n$，右侧引入替换$(m-2)\rightarrow m$，将(13)式改写成

$$\sum_{m,n} A_{m\,n+2}(n+1)(n+2)\left(a^+\right)^m a^n = \sum_{m,n} A_{m+2\,n}(m+1)(m+2)\left(a^+\right)^m a^n. \tag{14}$$

由于(5)式、(12)—(14)式中不同(m, n)组合的项是相互独立的，故而条件(12)—(14)意味着要求

$$A_{m\,n+2}(n+2)(n+2) = A_{m+2\,n}(m+1)(m+2). \tag{15}$$

这就是(4)式中一般形式的哈密顿量作为恰当的哈密顿量首先应该满足的必要条件。

在一般物理问题中，形如

$$\hat{H} = \hat{p}^2 + V_0\hat{x}^n \tag{16}$$

的哈密顿量，其中算符$\hat{x}$的幂指数n都是一个小的整数，因此哈密顿量一般形式中的算符幂指数$(m,\ n)$也是小的整数。对于m，$n \leqslant 3$的情形，必要条件(15)式具体罗列如下：

(i) $m = 0,\ n = 0,\quad A_{02} = A_{20}$；

(ii) $m = 0,\ n = 1,\quad 6A_{03} = 2A_{21}$；

(iii) $m = 0,\ n = 2,\quad 12A_{04} = 2A_{22}$；

(iv) $m = 0,\ n = 3,\quad 20A_{05} = 2A_{23}$；

(v) $m = 1,\ n = 0,\quad 2A_{12} = 6A_{30}$；

(vi) $m = 1,\ n = 1,\quad 6A_{13} = 6A_{31}$；

(vii) $m = 1,\ n = 2,\quad 12A_{14} = 6A_{32}$；

(viii) $m = 1,\ n = 3,\quad 20A_{15} = 6A_{33}$；

(ix) $m = 2,\ n = 0,\quad 2A_{22} = 12A_{40}$；

(x) $m=2,\ n=1,\qquad 6A_{23}=12A_{41}$；

(xi) $m=2,\ n=2,\qquad 12A_{24}=12A_{42}$；

(xii) $m=2,\ n=3,\qquad 20A_{25}=12A_{43}$；

(xiii) $m=3,\ n=0,\qquad 2A_{32}=20A_{50}$；

(xiv) $m=3,\ n=1,\qquad 6A_{33}=20A_{51}$；

(xv) $m=3,\ n=2,\qquad 12A_{34}=20A_{52}$；

(xvi) $m=3,\ n=3,\qquad 20A_{35}=20A_{53}$.

其它的(m,n)组合可以此类推。

现在考察(15)式可作为量子体系之恰当的哈密顿量应满足的必要条件，是否经得起检验。一般粒子处于外势中的量子系统，其哈密顿量取(16)式的形式。利用变换(2)，可将(16)式中的哈密顿量改写成产生算符和湮灭算符的函数

$$\hat{H}=-\frac{1}{2}(a^+-a)^2+V_0\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n(a^++a)^n\ . \tag{17}$$

具体地，对于当前受到广泛关注的非厄米哈密顿量

$$\hat{H}=\hat{p}^2+\mathrm{i}\hat{x}^3 \tag{18}$$

和

$$\hat{H}=\hat{p}^2-\hat{x}^4, \tag{19}$$

可以验证，当表示成产生算符和湮灭算符的正规积形式时，它们确实满足(15)式的必要条件。对于(18)式的哈密顿量，正规积形式中包括$3(a^+)^2a+a^3$项，显然这满足关系式$6A_{03}=2A_{21}$。又，对于(19)式的哈密顿量，正规积形式包括$6(a^+)^2a^2+a^4$项，显然满足关系式$12A_{04}=2A_{22}$。对于形如$\hat{H}=\hat{p}^2+V_0\hat{x}^5$的哈密顿量，问题稍微复杂一点，其正规积形式中，可见$A_{23}=10$，$A_{41}=5$，满足条件$6A_{23}=12A_{41}$；可见$A_{32}=10$，$A_{50}=1$，满足条件$2A_{32}=20A_{50}$；可见$A_{03}=9$，$A_{21}=27$，满足条件$6A_{03}=2A_{21}$。由此可以得出结论，不妨也将$\hat{H}=\hat{p}^2+V_0\hat{x}^5$当作一个恰当的哈密顿量加以研究，虽然我们不知道这个形式的哈密顿量可以用于什么样的量子体系。

接下来我们考察一下反例。比如如下形式的哈密顿量

$$\hat{H}=\hat{p}^2+V_0\hat{p}\hat{x}^2\ . \tag{20}$$

将势能项表示成产生算符和湮灭算符的正规积形式，其中有$(a^+)^2a-a^3$项，显然不满足关系式$6A_{03}=2A_{21}$。由此可以判定，形如(20)式的哈密顿量不是恰当的哈密顿量。又比如形如

$$\hat{H}=\hat{p}^2+V_0\hat{p}\hat{x}^3 \tag{21}$$

的哈密顿量，其势能项表示成产生算符和湮灭算符的正规积形式时，有$(a^+)^4$项，但$(a^+)^2a^2$项缺失，显然不满足关系式$12A_{04}=2A_{22}$。此外，有$2(a^+)^3a-2a^+a^3$项，它也不满足关系式$6A_{13}=6A_{31}$。由此可以判定，形如(21)式的哈密顿量不是恰当的哈密顿量。

3 小结

对于“什么样的哈密顿量才是可以用来描述量子体系的恰当的哈密顿量”这样的基本问题，至今的讨论，包括关于非厄米哈密顿量的研究，关注的都是充分条件。本文开启了对必要条件的讨论，得到了关于表示为湮灭算符和产生算符之正规积形式的哈密顿量在量子化条件的前提下可用于动力学演化方程所应该满足的必要条件。可以验证，那些过去已被当作恰当的量子系统哈密顿量，包括近年来得到关注的非厄米哈密顿量，是符合本文得到的必要条件的；反之，形如$\hat{H}=\hat{p}^2+V_0\hat{p}\hat{x}^2$或者$\hat{H}=\hat{p}^2+V_0\hat{p}\hat{x}^3$这样的没被采用过的哈密顿量则明显不符合必要条件。未来在构造量子体系的物理模型时，为了判定所采取的哈密顿量形式，尤其是非厄米哈密顿量，是否恰当时，通过这里的必要性条件检验是必要的。

参考文献

[1] Bender C M. Rep. Prog. Phys.，2007，70：947

[2] Poincaré H. J. Phys.，1912，2：5

[3] 曹则贤. 物理，2022，50(11)—51(8)，连载

[4] Dirac P A M. General Theory of Relativity. Wiley，1975

[5] Doran C，Lasenby A. Geometric Algebra for Physicists. Cambridge University Press，2003