

第2章 经典物理回顾

本章我们复习经典力学中的拉格朗日形式和哈密顿形式，并用这两个框架分析物理问题。在此过程中我们还会进一步熟悉向量的指标运算，学习球坐标下的计算技巧。

经典的物体似乎都能分成粒子和波两种类型，为什么会有这两种不同的类型，本章的最后一节将会给出答案。

2.1 牛顿力学

在微观物理中，所有的力都是保守力。对于质量为 m 的粒子，牛顿第二定律给出的运动方程为，


$$m \frac{d^2 x^i}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x^i}, \quad i = 1, 2, 3.$$

这时二阶微分方程，需要两个边界条件，通常情况下取初始时刻的坐标 $x^i(t_0)$ 和速度 $dx^i/dt|_{t_0}$ 。

牛顿力学在逻辑上很直接，粒子在每个时刻根据自己的位置、速度和此时此刻受到的外界作用力，决定自己下一步应该如何运动。

对一般的势 V ，上述方程通常没有解析解，需要求助于数值方法。此时需要将微分变成差分，

$$\begin{aligned} \left. \frac{dx^i}{dt} \right|_t &= \frac{x^i(t + \Delta t) - x^i(t)}{\Delta t}, \\ \frac{d^2 x^i}{dt^2} &= \frac{1}{\Delta t} \left. \frac{dx^i}{dt} \right|_{t+\Delta t} - \left. \frac{dx^i}{dt} \right|_t \\ &= \frac{1}{\Delta t} \left\{ \frac{x^i(t + 2\Delta t) - x^i(t + \Delta t)}{\Delta t} - \frac{x^i(t + \Delta t) - x^i(t)}{\Delta t} \right\} \\ &= \frac{1}{(\Delta t)^2} \{x^i(t + 2\Delta t) - 2x^i(t + \Delta t) + x^i(t)\} \end{aligned}$$

 **练习 2.1** 假设一个质量为 m 的质点在 t_0 时刻的位置和速度分别为，

$$x^i(t_0) = a_0^i, \quad \left. \frac{dx^i}{dt} \right|_{t_0} = b_0^i,$$

粒子受力为 $F^i(t, \vec{x})$ ，用上述差分方法写出 $x^i(t + 2\Delta t)$

2.2 拉格朗日力学

牛顿力学的逻辑是从初始时刻向后演化。拉格朗日形式的思路完全不同，它试图回答给定初始 t_0 时刻的位置 $x^i(t_0)$ 和终止时刻 t_f 时刻的位置 $x^i(t_f)$ ，粒子为什么沿牛顿力学给出的路径行进，而不走其他的路径？或者说牛顿力学给出的路径有何特别之处？

定义 2.1 (拉格朗日量 (Lagrangian))

拉格朗日量或称拉式量定义为

$$L(t, x^i, \dot{x}^i) = T - V$$

，其中 T 是系统的动能， V 是系统的势能。



定义 2.2 (作用量 (Action))

作用量定义为

$$S[x(t)] = \int_{t_0}^{t_f} L(t, x^i, \dot{x}^i) dt$$

, 注意 $S[x(t)]$ 的自变量为函数 $x^i(t)$ 。给定 $x^i(t)$, 函数值是一个数字。这种将函数变成数字的映射叫做泛函。

**定理 2.1 (最小作用量原理)**

粒子选择的经典路径 $x_{cl}(t)$ 使作用量 $S[x_{cl}(t)]$ 取极值, 即

$$\left. \frac{\delta S}{\delta x^i(t)} \right|_{x^i=x_{cl}^i} = 0,$$

其中 $\delta/\delta x^i(t)$ 称为泛函微分。



思考: 在粒子刚开始运动的时候, 它是怎么知道哪条路径的作用量取极值的?

练习 2.2 从最小作用量原理推导出拉格朗日方程,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i} \right) - \frac{\partial L}{\partial x^i} = 0.$$

练习 2.3 考虑一个质量为 m 、体积可忽略的木块, 被一根胡克系数为 k 的弹簧连接到一个竖直的墙上。木块在水平平面做一维运动, 忽略弹簧质量和一切摩擦力。

- (1) 建立合适的坐标系, 写下动能和势能的表达式, 写出拉氏量, 并画出势能的函数曲线;
- (2) 用拉氏量解出运动学方程;
- (3) 若木块振动的振幅为 A , 求解木块出现在各处的概率。

练习 2.4 质量为 m 的质点在中心势场 $V(r)$ 中运动, 在极坐标下写出拉氏量, 并解出运动方程。

2.3 哈密顿力学

拉格朗日方程为二阶微分方程, 需要两组边界条件才能求解。二阶微分方程可以写成两个一阶微分方程, 比如 $m\ddot{x}^i = F^i$ 可写成 $\dot{x}^i = p^i/m$ 和 $\dot{p}^i = F^i$ 两个一阶方程。

为了保持更好的数学对称性, 哈密顿形式将拉格朗日形式中的广义速度 \dot{q}^i 替换成广义动量,

$$p^i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}.$$

定义 2.3 (哈密顿量 (Hamiltonian))

哈密顿量可以通过对拉格朗日量进行勒让德变换得到,

$$H(q^i, p^i) = \sum_i \dot{q}^i p^i - L(t, q^i, \dot{q}^i),$$

其中 \dot{q}^i 是 q^j 和 p^j 的函数。在哈密顿形式中, 广义坐标 q^i 和广义动量 p^i 的地位相同。



哈密顿形势下的动力学方程为:

$$\begin{aligned}\dot{q}^i &= \frac{\partial H}{\partial p^i}, \\ \dot{p}^i &= -\frac{\partial H}{\partial q^i}.\end{aligned}$$

练习 2.5 对于 n 个粒子的系统, 其中第 n 个粒子的质量为 m_i , 坐标记为 (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}) ,

- (1) 写出动能项 T ;
- (2) 若粒子受力均为保守力, 则可将势能项写成 $V(x_{ij})$, 写出拉格朗日量并推导出拉格朗日方程;
- (3) 用勒让德变换写出哈密顿量, 证明 $H = T + V$.

练习 2.6 若动能项有非对角项 $T = \sum_{ij} T_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j$, 且 $V = V(q^i)$, 证明 $\sum_i p^i \dot{q}^i = 2T$.

练习 2.7 用哈密顿形式得到练习 2.3 的运动方程。

练习 2.8 带电量为 q 的粒子在稳恒电磁场中的拉氏量为,

$$L = \frac{1}{2} m (\dot{x}^i)^2 - q\Phi + \frac{q}{c} \dot{x}^i A^i,$$

其中 Φ 为电势能, A^i 为矢势,

- (1) 写出 x^i 的共轭动量 p^i 的表达式;
- (2) 写出哈密顿量;
- (3) 和自由粒子的哈密顿量相比, 电磁场中带电粒子的哈密顿量有哪些不同? 为什么 A^i 不出现在势能项中?

定义 2.4 (泊松括号 (Poisson Bracket))

两个物理量 A 和 B 的泊松括号定义为,

$$\{A, B\}_{P.B.} = \frac{\partial A}{\partial q^i} \frac{\partial B}{\partial p^i} - \frac{\partial B}{\partial q^i} \frac{\partial A}{\partial p^i}.$$

若一个物理量 ω 不显含时间, 即 $\omega = \omega(q^i, p^i)$, 则,

$$\begin{aligned}\frac{d\omega}{dt} &= \frac{\partial \omega}{\partial q^i} \dot{q}^i + \frac{\partial \omega}{\partial p^i} \dot{p}^i \\ &= \frac{\partial \omega}{\partial q^i} \frac{\partial H}{\partial p^i} - \frac{\partial \omega}{\partial p^i} \frac{\partial H}{\partial q^i} \\ &= \{\omega, H\}_{P.B.}\end{aligned}$$

即 ω 为守恒量的充要条件是 ω 和 H 的泊松括号为零。

练习 2.9 证明运动方程可写成泊松括号的形式

$$\begin{aligned}\dot{q}^i &= \{q^i, H\}_{P.B.} \\ \dot{p}^i &= \{p^i, H\}_{P.B.}\end{aligned}$$

练习 2.10 证明泊松括号具有如下性质

- (1) $\{A, B\}_{P.B.} = -\{B, A\}_{P.B.}$
- (2) $\{A, B + C\}_{P.B.} = \{A, B\}_{P.B.} + \{A, C\}_{P.B.}$
- (3) $\{A, BC\}_{P.B.} = B\{A, C\}_{P.B.} + \{A, B\}_{P.B.}C$

练习 2.11 考虑空间中的两个粒子，质量分别为 m_1 和 m_2 ，坐标分别为 \vec{x}_1 和 \vec{x}_2 ，两粒子的相互作用由 $V(|\text{vec}x_1 - \vec{x}_2|)$ 描述，

(1) 写出该系统的哈密顿量

(2) 变换坐标到 $\vec{X} = \frac{m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2}{m_1 + m_2}$ 和 $\vec{x}_{12} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$ ，求新的哈密顿量。

2.4 波动光学 *

波动光学的基本方程即为 Maxwell 方程组，这里我们考虑光波在不均匀介质 (ϵ 是空间位置的函数，而 μ 为常数) 中的传播，需要用到无源的 Maxwell 方程组，

$$\nabla \times \vec{B} = \epsilon\mu \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (2.1a)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.1b)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.1c)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon \vec{E}) = 0 \quad (2.1d)$$

可以推出电磁波的波动方程，

$$\epsilon\mu \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \nabla \times \left(\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) = -\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\nabla (\nabla \cdot \vec{E}) + \nabla^2 \vec{E}. \quad (2.2)$$

由方程(2.1d)，可得

$$\nabla \cdot \vec{E} = -\frac{1}{\epsilon} (\nabla \epsilon) \cdot \vec{E}, \quad (2.3)$$

带入(2.2)即可得光波在介质中传播的方程，

$$\epsilon\mu \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \nabla \left(\frac{1}{\epsilon} (\nabla \epsilon) \cdot \vec{E} \right) + \nabla^2 \vec{E}. \quad (2.4)$$

在均匀介质中, $\nabla \epsilon = 0$ ，此时可以得到

$$\epsilon\mu \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \nabla^2 \vec{E}. \quad (2.5)$$

练习 2.12 证明(2.2)式和(2.3)式。

练习 2.13 证明平面波 $e^{ikz - i\omega t}$ 是方程(2.5)的解，并求出波速的表达式。

2.5 几何光学 *

尽管光是一种电磁波，但是在日常生活中，我们极少看到光的波动性质。我们看到光的直线传播，反射和折射等现象，更像是粒子的传播。在这一节中，我们简单复习几何光学的基本原理，在下一节，我们会看到几何光学是波动光学的一个重要近似。

当光的波长远小于光传播路径上的物体尺寸时，光的波动性可以忽略，此时可以应用几何光学。几何光学的基础是费马原理

定义 2.5 (费马原理 (Fermat's Principle))

两点之间的光线路径是使光程为极值的路径，即

$$\int ds n(\vec{x})$$

一阶变分为零，其中 n 为折射率， s 为路径的长度。



下面我们用费马原理推导光在折射率连续变化介质中的路径方程， P_1 和 P_2 两点间的光程为

$$\int_{P_1}^{P_2} n(x, y, z) ds = \int_{P_1}^{P_2} n(x, y, z) \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2} = \int_{P_1}^{P_2} n(x, y, z) \sqrt{(x')^2 + (y')^2 + 1} dz, \quad (2.6)$$

其中 $x' = dx/dz$, $y' = dy/dz$ 。光程为极值的路径可以用拉格朗日方程求解，此时拉氏量为，

$$L(x, y, z) = n(x, y, z) \sqrt{(x')^2 + (y')^2 + 1},$$

广义坐标为 x, y ，广义速度为 x', y' ， z 坐标在这里类似时间分量。利用拉格朗日方程可得，

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{dx}{ds} \right) - \frac{\partial n}{\partial x} = 0, \quad (2.7a)$$

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{dy}{ds} \right) - \frac{\partial n}{\partial y} = 0. \quad (2.7b)$$

👉 **练习 2.14** 用拉格朗日方程推导(2.7)式。

👉 **练习 2.15** 在(2.6)式中，我们选 z 为“时间”变量，我们同样可以选 x 或者 y 作为“时间”变量，此时得到的拉格朗日方程应该包括，

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{dz}{ds} \right) - \frac{\partial n}{\partial z} = 0, \quad (2.8)$$

证明由(2.7)的两个方程可以推导出上面 z 分量的方程。

提示：将 dz 写成 $\sqrt{ds^2 - dx^2 - dy^2}$ ，再令 $\dot{x} = dx/ds, \dot{y} = dy/ds$ ，带入上式计算对 s 的微分，然后将 x 和 y 对 s 的两阶导数用(2.7)消除即可。

综上，在几何光学框架内，光在非均匀介质中的路径由(2.7)和(2.8)中的任两个等式决定。

2.6 程函近似：从波动光学推出几何光学*

当光在非均匀介质中传播时，系统有两个特征尺度：光的波长 λ 和介电常数的变化率的倒数 $l \equiv \epsilon/|\nabla\epsilon|$ 。当 $\lambda \gg l$ 时，光主要表现波动性，应该用波动光学。当 $\lambda \ll l$ 时，光的粒子性为主，可以用波动光学，也可以用几何光学。在这一节中，我们在 $\lambda \ll l$ 的极限下，从波动方程(2.4)式推导出几何光学的(2.7)和(2.8)式。

将(2.4)式写成分量形式，

$$\epsilon\mu \frac{\partial^2}{\partial t^2} E^i(t, \vec{x}) = \nabla^2 E^i(t, \vec{x}) + \partial_i \left(\frac{1}{\epsilon} (\partial_j \epsilon) E^j(t, \vec{x}) \right). \quad (2.9)$$

这里我们显式地写出 E^i 对 t 和 \vec{x} 的依赖。 E^i 是个振荡的实数，对于这种线性方程，数学上通常先假设 E^i 为复数，最后通过取复数解的实部得到实数解。因为该方程是线性的，我们可以先研究单一频率的解，一般的解可以通过对单一频率的解进行积分得到。频率为 ω 的部分可以写成，

$$E^i(t, \vec{x}) = E^i(\vec{x}) e^{-i\omega t}.$$

代入(2.9)式可得，

$$\nabla^2 E^i(\vec{x}) + k^2 E^i(\vec{x}) + \partial_i \left(\frac{1}{\epsilon} (\partial_j \epsilon) E^j(\vec{x}) \right) = 0 \quad (2.10)$$

其中 $k = \sqrt{\varepsilon\mu_0}\omega = \frac{n(\vec{x})}{c}\omega$, c 为真空中光速。

未知的复函数 $E^i(\vec{x})$ 必然可以写成振幅和相位的形式: $E^i(\vec{x}) = \psi(\vec{x})e^{iS(\vec{x})}$ 的形式。若介质是均匀的, 那么(2.10)式的第三项为 0, 此时振幅 $\psi(\vec{x})$ 为常数, 相位 $S(\vec{x}) = \vec{k} \cdot \vec{x}$ 。对于非均匀介质, (2.10)的第三项不是 0, ψ 和 S 是 \vec{x} 的函数。由本节开头的说明, 我们考虑 $|\nabla\varepsilon|/\varepsilon \ll 1/\lambda$ 的情况, 此时(2.10)的第三项是一个小量。可以想象, 这时的解只会稍微偏离均匀介质时的解。为了后面计算方便, 我们将 $E^i(\vec{x})$ 写成,

$$E^i(\vec{x}) = \psi^i(\vec{x})e^{ik_0S(\vec{x})}, \quad (2.11)$$

其中 $k_0 = \sqrt{\varepsilon_0\mu_0}\omega = \frac{n_0}{c}\omega$ 为光在初始位置的波数, 其中 ε_0 和 n_0 分别为初始位置的介电常数和折射率。当 $|\nabla\varepsilon|/\varepsilon \ll 1/\lambda$ 时, $\psi^i(\vec{x})$ 随 \vec{x} 的变化很慢, $S(\vec{x})$ 几乎正比于 $|\vec{x}|$ 。

将(2.11)式代入(2.10)式, 分离开实部和虚部, 可以得到两个方程,

$$\left[k^2 - k_0^2 (\partial_j S)^2 \right] \psi^i + \partial^2 \psi^i + \partial_i \left(\frac{1}{\varepsilon} (\partial_j \varepsilon) \psi^j \right) = 0, \quad (2.12a)$$

$$2(\partial_j \psi^i)(\partial_j S) + \psi^i (\partial^2 S) + \frac{1}{\varepsilon} (\partial_j \varepsilon) \psi^j (\partial_i S) = 0. \quad (2.12b)$$

在(2.12a)式中, 第二项和第三项都是很小的数。因为波长 λ 很小, 所以第一项的 k 和 k_0 都是很大的数。为了使(2.12a)成立, 第一项中的两个大数必须几乎相消,

$$k^2 \approx k_0^2 (\partial_j S)^2 \Rightarrow (\partial_j S)^2 \approx \frac{k^2}{k_0^2} = \frac{\varepsilon(\vec{x})\mu}{\varepsilon_0\mu} = \frac{n^2(\vec{x})}{n_0^2} \quad (2.13)$$

这个近似即为程函 (eikonal) 近似。

练习 2.16 把(2.11)式代入(2.10)式, 推导出(2.12)中的两个方程。

在几何光学中, 光表现的像粒子流, 因此可以定义一个归一化矢量描述光束前进的方向,

$$\vec{u} = \frac{d\vec{r}}{ds} = \left(\frac{dx}{ds}, \frac{dy}{ds}, \frac{dz}{ds} \right),$$

可以验证 \vec{u} 是归一化的矢量: $|\vec{u}|^2 = (dx^2 + dy^2 + dz^2)/ds^2 = 1$ 。

现在我们回到(2.11)式, 因为相位是 $k_0S(\vec{x})$ 而 k_0 是常数, 所以 $S(\vec{x})$ 等于常数的曲面即为等相位面。因为波传播的方向必然垂直于等相位面, 可知 \vec{u} 必然平行与 ∇S 。由(2.13)式可知矢量 ∇S 的长度为 $n(\vec{x})/n_0$, 结合 \vec{u} 的归一化条件可知,

$$\vec{u} = \frac{d\vec{r}}{ds} = \frac{n_0}{n} \nabla S, \Rightarrow n \frac{d\vec{r}}{ds} = n_0 \nabla S. \quad (2.14)$$

写成分量形式, 两边对 s 求导可得,

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \left(n \frac{dx^i}{ds} \right) &= n_0 \frac{d}{ds} (\partial_i S) \\ &= n_0 \partial_i \left(\frac{dx^j}{ds} \frac{\partial S}{\partial x^j} \right) \\ &= n_0 \partial_i \left(u^j \frac{n}{n_0} u^j \right) \\ &= \partial_i n \end{aligned}$$

在第三行我们利用了(2.14)式, 在第四行中我们利用了 \vec{u} 的归一化条件。这个方程即为我们 在 2.5 节中推出来的几何光学的结果。

在这一节中, 我们考虑光在不均匀介质中的传播, 在 $|\nabla\varepsilon|/\varepsilon \ll 1/\lambda$ 的情况下, 利用程函近似, 从光的波动方程推导出光的传播路径, 和几何光学的结论一致。

思考: 考虑光的单缝衍射过程, 当逐渐增加入射波的频率时, 是如何从衍射条纹过渡到几何光学中的光束的? 不在光束上的那些波发生了什么?

2.7 从几何光学到波动光学*

上一节中我们在波动光学的方程中使用程函近似得到了几何光学方程，说明波动光学比几何光学包含更多的物理信息。那我们能否在几何光学的基础上“猜”出波动光学方程呢？为了简化计算，这一节中我们考虑光在均匀介质中的传播。

波动光学中相应的运动方程为(2.10)式，在均匀介质中第三项为零，得到的方程为，

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) E^i + k^2 E^i = 0, \quad (2.15)$$

注意此时 $k = \sqrt{\epsilon\mu}\omega = \frac{n}{c}\omega$ 为常数。

在均匀介质中几何光学计算光路的过程与 Lagrangian 形式相似，相应的拉氏量为，

$$L(x, y, z) = n\sqrt{(x')^2 + (y')^2 + 1}, \quad (2.16)$$

其中 $x' = dx/dz, y' = dy/dz, z$ 对应时间变量。本节的任务是从(2.16)式猜出(2.15)式。

因为(2.16)式和(2.15)式没有任何相似，我们换到哈密顿形式下试一试。 x 和 y 对应的广义动量为

$$p_x = \frac{nx'}{\sqrt{(x')^2 + (y')^2 + 1}}, \quad (2.17a)$$

$$p_y = \frac{ny'}{\sqrt{(y')^2 + (y')^2 + 1}}. \quad (2.17b)$$

相应的哈密顿量为，

$$H = -\sqrt{n^2 - p_x^2 - p_y^2}. \quad (2.18)$$

🔴 **练习 2.17** 推导(2.16)式和(2.18)式。

由(2.16)式和(2.18)式可得如下关系，

$$p_x^2 + p_y^2 + H^2 = n^2, \quad (2.19)$$

这个式子和(2.15)有相似之处，因为 x 和 p_x, y 和 p_y, z (注意这里 z 对应时间) 和 H 是哈密顿形式中互为对偶的量，若做如下替换，

$$H^2 \rightarrow -\frac{n^2}{k^2} \frac{1}{E^i} \frac{\partial^2 E^i}{\partial z^2}, \quad (2.20a)$$

$$p_x^2 \rightarrow -\frac{n^2}{k^2} \frac{1}{E^i} \frac{\partial^2 E^i}{\partial x^2}, \quad (2.20b)$$

$$p_y^2 \rightarrow -\frac{n^2}{k^2} \frac{1}{E^i} \frac{\partial^2 E^i}{\partial y^2}. \quad (2.20c)$$

这些变换依赖于 E^i ，因为我们考虑的是 E^i 的波动方程，如果一开始我们考虑磁场 B^i ，这里的 E^i 就得全部换成 B^i 。可见 E^i 并不是上述变换最本质的内容，只不过是微分算符作用的客体。更本质的变换应该为

$$H^2 \rightarrow -\frac{n^2}{k^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (2.21a)$$

$$p_x^2 \rightarrow -\frac{n^2}{k^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (2.21b)$$

$$p_y^2 \rightarrow -\frac{n^2}{k^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad (2.21c)$$

此时(2.19)是一个算符方程，可以应用在 E^i 或者 B^i 上，就能得到(2.15)式。至此，我们成功的从几何光学出发，在(2.21)式的变换后，得到了波动光学中的方程。

下面我们沿着这个思路再进一步，我们发现 p_x^2 和 p_y^2 对应的算符很像1.11节中介绍过的 \hat{K} 算符。利用 \hat{K} 算符的矩阵表示可得，

$$\langle x | \hat{K}^2 | x' \rangle = -\delta(x - x') \frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.22)$$

为了处理多维问题，我们需要将 \hat{K} 推广到其他维度。在1.4节，我们知道多维空间是一维空间的直乘，三维欧几里得空间可以写成 $V_x \otimes V_y \otimes V_z$ 。直乘空间中的算符可以由每个空间中算符的直乘定义，比如 $\hat{K}_x = \hat{K} \otimes I \otimes I$ 表示 V_x 空间中的 \hat{K} 算符和 V_y 、 V_z 空间中的单位算符，其在坐标基底下的矩阵表示为，

$$\langle \vec{x} | \hat{K}_x | \vec{x}' \rangle = -i\delta(x - x') \frac{d}{dx'} \delta(y - y') \delta(z - z'). \quad (2.23)$$

类似可以定义 \hat{K}_y 和 \hat{K}_z ，

$$\langle \vec{x} | \hat{K}_y | \vec{x}' \rangle = \delta(x - x') (-i) \delta(y - y') \frac{d}{dy'} \delta(z - z'), \quad (2.24a)$$

$$\langle \vec{x} | \hat{K}_z | \vec{x}' \rangle = \delta(x - x') \delta(y - y') (-i) \delta(z - z') \frac{d}{dz'} \quad (2.24b)$$

$$(2.24c)$$

因此(2.19)对应的算符方程可写为，

$$\hat{K}_x^2 + \hat{K}_y^2 + \hat{K}_z^2 = k^2. \quad (2.25)$$

算符方程必须作用在 Hilbert 空间中的态上，令 $|E^i\rangle$ 是某一个态，则有，

$$\left(\hat{K}_x^2 + \hat{K}_y^2 + \hat{K}_z^2 \right) |E^i\rangle = k^2 |E^i\rangle. \quad (2.26)$$

至此，我们通过将 Hamilton 形式中的力学量升级成算符，得到了 Hilbert 空间中相应的方程。这个方程在坐标基底，可以得到波动光学中相应的方程。我们也可以选择其他基底，得到其他形式的方程，这些方程都是等价的。

🔴 **练习 2.18** 证明(2.22)式。

🔴 **练习 2.19** 证明(2.26)式在坐标基底下的形式等于(2.15)式。

🔴 **练习 2.20** 在这道题里，我们仿照前面从几何光学到波动光学的步骤，从经典物理的 Hamilton 形式“猜”出描述非相对论粒子的 Schrödinger 方程。

(1) 写出在势场 $V(t, \vec{x})$ 中运动的非相对性粒子的哈密顿量。

(2) 由前几节的内容可知，我们需要将力学量 p^i 和 x^i 上升成算符：波数 $k \rightarrow \hat{K}$ ，位置 $x \rightarrow \hat{X}$ 。根据 de Broglie 的猜想，动量和波长的关系为 $p = h/\lambda$ ，由此可以得出 $p = \hbar k$ ，其中 $\hbar = h/(2\pi)$ 。所以我们需要将动量 p^i 升级成算符 $\hbar \hat{K}$ 。在前几节的推导中，我们得到了 $\langle \vec{x} | \hat{H} | \vec{x}' \rangle \propto i \frac{\partial}{\partial z}$ (注意那里 z 对应时间变量)。所以这里我们应该有

$$\langle \vec{x} | \hat{H} | \vec{x}' \rangle = \pm i \hbar^a c^b \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \frac{\partial}{\partial t},$$

其中 c 为真空中的光速。根据左右两边的量纲，计算 a 和 b 的值。

(3) 用(2)中推导出来的算符对应，将(1)中得到的力学量的方程升级到算符方程。将算符方程的两边作用到 Hilbert 空间中的态 $|\psi\rangle$ 上，得到 Schrödinger 方程。(保留 \hat{H} 中的 \pm 号)，并进一步写出方程在坐标基底下的形式。

(4) 最后我们来决定 \hat{H} 的符号。自由粒子 $V = 0$ 应对应最简单的波，即平面波，

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = \psi(\vec{x}) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)},$$

其中 $\omega > 0$ 为频率，带入上面推导出的波动方程，根据物理意义确定 \hat{H} 的符号。