量子力学

第二卷

[法]**A.Messiah**

制作:Tsungp Lee

Welcome to connect with me by Feynman_landau@sohu.com

目　　录

第　二　卷

第三部分　对称性和不变性

第十三章　量子力学中的角动量…… 1

1.引言

I.角动量的本征值和本征函数 …… 2

2.角动量定义　3.特征代数关系　4. J^2 和 J_z 的谱　5. J^2 和 J_z 的本征矢量　不变子空间 $\mathscr{E}^{(l)}$ 的构成　6.标准表象 $\{J^2 J_z\}$　7.结论

II.轨道角动量和球谐函数 …… 14

8. l^2 和 l_z 的谱　9.球谐函数的定义和构成

III.角动量与转动 …… 18

10.转动的定义　欧勒角　11.物理系统的转动　转动算符　12.可观测量的转动　13.角动量与无穷小转动　14.算符 $R(\alpha\beta\gamma)$ 的构成　15.转动 2π 角和半整数角动量　16.不可约不变子空间　转动矩阵 $R^{(l)}$　17.转动不变性和角动量守恒　转动简并

IV.自旋 …… 35

18.电子自旋的假说　19. $\frac{1}{2}$ 自旋和泡利矩阵　20. $\frac{1}{2}$ 自旋粒子的可观测量和波函数　旋量场　21.矢量场和自旋粒子　22.在原子中依赖于自旋的相互作用　23.与自旋有关的核子-核子相互作用

V.角动量相加…… 51

24.相加问题　25.两个角动量的相加定理　26.应用及举例　27.总角动量的本征矢量　克累布施-戈登系数

28.应用：二核子系统　29.三个或多个角动量相加　拉卡系数"3Sj"符号

VI.不可约张量算符 …… 6

30.标量算符的表示　31.不可约张量算符定义　32.不可约张量算符的表示　维格纳-爱卡特定理 33.应用

第十四章　全同粒子体系　泡利不相容原理 …… 8

1.量子理论中的全同粒子

I.对称化假设 …… 85

2.同类粒子和对称表象　3.置换算符　4.置换算符代数　对称化算子和反对称化算子　5.全同粒子和对称化假设　6.玻色子和玻色-爱因斯坦统计　7.费米子和费米-狄拉克统计　不相容原理　8.波函数总是必需对称化吗

II.应用 …… 10

9.　两个无自旋全同粒子的碰撞　10.　两个质子的碰撞　11.原子核的统计　12.复杂原子　中心场近似　13.原子的托马斯-费米模型　14.核子系统和同位旋　15.同位旋的效用　电荷无关性

第十五章　不变性和守恒定律　时间反演 …… 1

1.引言

I.数学补充　反线性算符 …… 135

2.三个有用的定理　3.希尔伯特空间的反线性算符　4.反线性变换　5.反线性算符及其表象

II.变换和变换群 …… 145

6.系统的动力学变量和动力学态的变换　7.　变换群　8.　变换算符群　9.连续群和无穷小变换　平移　转动　10.　有限群　反射

III.运动方程的不变性和守恒定律 …… 15

11.不变可观测量　12.　哈密顿量的对称性和守恒定律　13.动力学态的不变性和演化　14.斯塔克和塞曼效应的对称性

IV. 时间反演和微观可逆性原理 …… 167

15. 时间平移和能量守恒 16. 经典力学和量子力学中的时间反演 17. 时间反演运算 无自旋粒子 18. 时间反演的普遍定义 19. 时间反演和复共轭 20. 微观可逆性原理 21. 推论：克喇末简并 22. 实转动不变的哈密顿量

第四部分 近 似 方 法

第十六章 定态微扰 …… 185

1. 第四部分概述

I. 非简并能级微扰 …… 186

2. 按微扰的幂展开 3. 一级微扰 4. 氦原子基态 5. 原子核的库仑能 6. 高级修正 7. 刚性转子的斯塔克效应

II. 简并能级微扰

8. 基本理论 9. 无自旋-轨道力时的原子能级 10. 自旋-轨道力 LS 和 jj 耦合 11. LS 耦合的原子 自旋-轨道耦合引起的分裂 12. 塞曼效应和帕邢-巴克效应 13. H 的对称性和简并的消除 14. 准简并性

III. 各级微扰展开的明显表达式 …… 214

15. 哈密顿量 H 及其预解式 $G(\varepsilon)$ 16. 把 $G(\varepsilon)$、P、HP 展成 V 的幂级数 17. 本征值和本征态的计算

第十七章 与时间有关的薛定谔方程的近似解 …… 225

1. "表象"的改变和哈密顿量的一部分的微扰处理

I. 与时间有关的微扰理论 …… 228

2. 跃迁几率的定义和微扰计算 3. 核库仑激发的半经典理论 4. V 与时间无关的情形 未微扰能量的守恒 5. 应用于玻恩近似中的截面计算 6. 周期性微扰 共振

II. 哈密顿量的突然改变和绝热改变 …… 244

7.问题和结果　8.迅速变化和突然近似　9.磁场的突然倒向　10.绝热改变　一般原则　最简单情形　11.“转动轴表象”　12.绝热定理的证明　13.绝热近似　14.磁场的绝热倒向

第十八章　变分法及有关问题 …… 269

1.里兹变分法

I. 对束缚态的变分法 …… 27(

2.本征值问题的变分形式　3.分立能级的变分计算　4.一个简单的例子：氢原子　5.讨论　应用于激发能级的计算　6.氦原子基态

II. 哈特里和福克-狄拉克原子 …… 281

7.自洽场法　8.$E[\Phi]$ 的计算　9.福克-狄拉克方程　10.讨论　11.哈特里方程

III. 分子的结构 …… 289

12.概论　电子运动和核运动的分离　13.在固定核场中的电子运动　14.绝热近似　15.绝热近似中核的哈密顿量　16.玻恩-奥本海默方法　17. 关于双原子分子的一些概念

第十九章　碰撞理论 …… 311

1.引言

I. 自由波格林函数和玻恩近似 …… 312

2.散射振幅的积分表述　3.截面和 T 矩阵　微观可逆性　4.玻恩近似　5.散射的积分方程　6.玻恩展开　7.玻恩近似适用性的判据　8.原子对电子的弹性散射　9.中心势　相移计算　10.格林函数作为一个算符　它和 H_0 的预解式的关系

II. 普遍化为扭曲波近似 …… 333

11.广义玻恩近似　12.玻恩展开的普遍化　13.扭曲波的格林函数　14.应用 T 的定义和形式性质　15.关于 $\frac{1}{r}$ 势的注释

III. 复杂的碰撞和玻恩近似 …… 343

16.概述 截面 17.道 18.截面的计算 T矩阵 19.跃迁振幅的积分表述 20.玻恩近似及其普遍化 21.原子对快电子的散射 22.原子核的库仑激发 23.定态散射波的格林函数和积分方程 24. 两个散射中心对粒子的散射 25.简单散射 干涉 26.多重散射

IV. 跃迁振幅的变分法计算 …… 369

27.相移的稳定表达式 28.相移的变分计算 讨论 29.推广到复杂的碰撞

V. 跃迁矩阵的普遍性质 …… 376

30.通量守恒 S矩阵的幺正性 31.玻耳-佩尔斯-普拉捷克关系(光学定理) 32.微观可逆性 33. T矩阵的不变性

第五部分 相对论量子力学基础

第二十章 狄拉克方程 …… 387

I. 总导言 …… 387

1.相对论量子力学 2.符号 各种约定和定义 3.洛伦兹群 4.经典的相对论动力学

II. 狄拉克方程和克莱因-戈登方程 …… 397

5.克莱因-戈登方程 6.狄拉克方程 7.空间 $\mathscr{L}^{(1)}$ 的构成 狄拉克表象 8.狄拉克方程的协变形式 9.伴随方程 流的定义

III. 狄拉克方程的不变性质 …… 408

10.狄拉克矩阵的性质 11.狄拉克方程的形式对参考系作正时变换的不变性 12.固有群的变换 13.空间反射和正时洛伦兹群 14.协变量的构成 15.形式不变性的第二种表述: 态的变换 16.运动规律的不变性 17.变

换算符　动量　角动量　宇称　18.　守恒定律和运动常数
19.时间反演和电荷共轭　20.规范不变性
IV. 算符的解释和简单解 …… 433
21.狄拉克方程和对应原理　22.狄拉克粒子的动力学变量　23.自由电子　平面波　24.用洛伦兹变换得出平面波的结构　25.中心势　26.自由球面波　27.氢原子
V. 狄拉克方程的非相对论极限 …… 449
28.大分量和小分量　29.泡利理论作为狄拉克理论的非相对论极限　30.应用：超精细结构和偶极-偶极耦合　31.高级修正和福尔迪-沃思森变换　32.自由粒子的 FW 变换　33. 场内粒子的 FW 变换　34. 中心静电势中的电子　35.讨论和结论
VI. 负能解和正电子理论 …… 466
36.电荷共轭解的性质　37.负能解的不平常行为　38. 负能态的重新解释　“空穴”和正电子理论　39.“空穴”理论的困难
第二十一章　场的量子化　辐射理论 …… 477
1.引言
I. 实标量场的量子化 …… 479
2.经典自由场　简正振动　3.自由场的量子化　4.场的拉格朗日函数　$\Phi(\mathbf{r})$的共轭动量　5.复基函数　6.平面波　动量的定义　7.球面波　角动量的定义　8.空间和时间的反演
II. 场与原子系统的耦合 …… 499
9.场与粒子系统的耦合　10.弱耦合和微扰处理　11.能级移位　12.场粒子的发射　13.衰变态的量子理论　谱线宽度　14.弹性散射　色散公式　15.共振散射亚稳态的形成　16.场粒子的吸收(光电效应)　辐射俘获
III. 电磁辐射的经典理论 …… 531
17. 经典麦克斯韦-洛伦兹理论的方程组　18.经典理论

的对称性和守恒定律　19.电子的自能和经典半径　20.电磁势　规范选择　21.矢量场的纵向和横向部分　22.纵场的消除　23.能量　动量　角动量　24.自由辐射的哈密顿量　25.和粒子系耦合的辐射的哈密顿量

IV. 辐射的量子理论 …… 553

26.自由辐射的量子化　光子　27.平面波　辐射的动量　28.极化　29.多极展开　具有确定角动量和宇称的光子　30.辐射与原子系统的耦合　31.原子发射光子　偶极发射　32.低能康普顿散射　汤姆孙公式

附录 C.　矢量相加系数和转动矩阵 …… 578

附录 D.　群论基本知识 …… 611

第三部分　对称性和不变性

第十三章　量子力学中的角动量

1. 引言

和在经典力学中的情形一样，运动方程的对称性质在量子力学中也起着重大作用.在第十五章中，我们将对对称性及其推论作系统的全面的考查．本章专门论述与转动相联系的对称性，这是最重要的对称类型之一．正如在经典力学中那样，在量子力学中，一个系统作转动也会有角动量，运动方程的转动不变性表现为角动量是一运动常数．但与经典力学的情况也有差别，因为在量子力学中，角动量不是通常的矢量，而是矢量算符，它的三个分量是不对易的．

在第 I 节中，我们用角动量分量 J_x, J_y, J_z 的对易规则[关系式(13.3)]来定义角动量，而且在求解 J^2 和 J_z 的本征值问题时，我们仅利用这些对易规则和这三个分量是可观测量这一事实．这个方法是狄拉克首先提出的，在很多方面类似于第十二章中对谐振子的处理．

第 II 节专门研究一种特殊情况，即一个粒子的轨道角动量以及相应的本征函数(球谐函数)的构成．

在第 III 节中，我们建立起转动和角动量之间的联系.一个物理系统的转动由某个算符来实现，此算符依赖于总角动量的分量，它的形式由式(13.60)给出．我们将证明，运动方程的转动不变性与哈密顿量和这三个角动量分量对易这一条件等价，因而有角动量守恒定律．

实验指出，大多数粒子都具有内禀角动量，即自旋．自旋的概念将在第 IV 节中研究．

第 V 节专门讨论角动量相加这一重要问题．

各种量子力学算符可以用它们的转动变换规律来表征．具体地说有标量算符(对转动是不变的)、矢量算符，更普遍一些，有不可约张量算符，它们的变换性质特别简单．这些算符的特征也可用它们与角动量分量的极为简单的对易规则来说明．由此可得到，它们的表示具有某些值得注意的性质(维格纳-爱卡特定理)．本章第 VI 节(也就是最后一节)将论述这些性质以及它们的主要应用．

附录 C 是本章的一个补充．在那里收集了与转动、角动量相加有关的各种系数的最重要公式和主要性质．

I. 角动量的本征值和本征函数

2. 角动量定义

在处理单粒子量子系统时，我们已经遇到过角动量算符．按定义，一个粒子的角动量算符 $\boldsymbol{l}$ 为

$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}, \tag{13.1}$$

$\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 分别为该粒子的位置矢量和动量矢量．在波动力学中，$\boldsymbol{l}$ 用矢量算符[1] $(-i)\boldsymbol{r} \times \nabla$ 表述，它的三个分量是满足下列对易规则的微分算符：

$$[l_x, l_y] = il_z, \quad [l_y, l_z] = il_x, \quad [l_z, l_x] = il_y. \tag{13.2}$$

每一个分量都与角动量的平方对易，即

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2, \quad [\boldsymbol{l}, l^2] = 0.$$

在 §5.18 中已经导出过这些性质．我们记得，上述最后一个

---

1) 本章中选择单位使 $\hbar = 1$.

性质是关系式(13.2)的一个简单推论.

r, p 和 l 是矢量算符. 一个矢量算符 B 由它在三个正交坐标轴上的分量 B_x, B_y, B_z 来确定,其中 B_x, B_y, B_z 是通常意义上的算符. 给定这三个分量之后,我们就能够确定 B 在任一方向 u [由单位矢量 u (u_x, u_y, u_z) 规定]上的分量 B_u:

$$B_u \equiv (u \cdot B) = u_x B_x + u_y B_y + u_z B_z.$$

于是,我们可以确定 B 在任一其他正交坐标系中的分量. 如果我们遵守有关算符次序的几个注意事项,那末各种矢量代数的运算(求和、标量积、矢量积等)就可不加改变地应用于矢量算符(参看 §9.2).

现在考虑有 N 个粒子的量子系统. 和上面的作法一样,我们可以定义第 n 个粒子的角动量为 $l^{(n)} = r^{(n)} \times p^{(n)}$. 系统的总角动量是 N 个粒子角动量的矢量和:

$$L = \sum_{n=1}^{N} l^{(n)}.$$

因为每一个角动量都满足对易关系 (13.2),而且其中任一个角动量的分量和另一个角动量的分量对易,所以我们得到

$$[L_x, L_y] = \sum_{n} \sum_{n'} [l_x^{(n)}, l_y^{(n')}] = \sum_{n} [l_x^{(n)}, l_y^{(n)}]$$

$$= i \sum_{n} l_z^{(n)} = iL_z.$$

利用指标的循环置换,我们可得到类似的另两个关系式. 于是,总角动量分量的对易规则和单个角动量分量的对易规则相同.

由此,我们得到下述的角动量定义: **一个矢量算符 J,如果它的分量是可观测量,而且满足下列对易关系:**

$$[J_x, J_y] = iJ_z, \quad [J_y, J_z] = iJ_x, \quad [J_z, J_x] = iJ_y, \quad (13.3)$$

则称它为角动量.

从这三个关系式，我们可以对 $\boldsymbol{J}$ 在任意其他坐标系中的分量导出类似的关系式. 令 J_u, J_v, J_w 是 $\boldsymbol{J}$ 在三个正交坐标轴上的分量，而这三个坐标轴上的单位矢量 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}$ 的取向是这样规定的，以使 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{v}$ 成立. 我们容易证明关系式 $[J_u,J_v]=iJ_w$ 以及由指标循环置换而得到的另两个关系式[1]. 更普遍地讲，若 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 是任意两个矢量(或两个彼此对易而且也与 $\boldsymbol{J}$ 对易的矢量算符)，那末，我们可以得到

$$[\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{J},\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{J}]=i((\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{J}). \tag{13.4}$$

3. 特征代数关系

角动量的平方为

$$\boldsymbol{J}^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2.$$

它与 J_x, J_y, J_z 对易. 此性质是对易关系(13.3)的一个推论，而且可以用 §2 中得到角动量 $\boldsymbol{l}$ 的类似性质时所采用的同一方法导出. 我们用符号写成

$$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}^2]=0. \tag{13.5}$$

因此，$\boldsymbol{J}^2$ 与 $\boldsymbol{J}$ 的分量的任一函数对易.

我们引入两个厄密共轭算符:

$$J_+=J_x+iJ_y,\quad J_-=J_x-iJ_y. \tag{13.6}$$

J_+, J_-和 J_z 这三个算符完全决定了矢量算符 $\boldsymbol{J}$，而且对代数

---

1) 这些关系也可缩写成下述形式:

$$[J_i,J_j]=i\sum_k \varepsilon_{ijk}J_k \quad 或 \quad \sum_{ij}\varepsilon_{ijk}J_iJ_j=iJ_k,$$

其中 $i,j,k=u,v$ 或 w，而 ε_{ijk} 是带有三个指标的全反对称张量:

$$\varepsilon_{ijk}=\begin{cases}0, & \text{若有两个指标相同;}\\ +1, & \text{若 } i,j,k \text{ 可由 } u,v,w \text{ 的偶置换得到;}\\ -1, & \text{若 } i,j,k \text{ 可由 } u,v,w \text{ 的奇置换得到.}\end{cases}$$

第二种形式等价于下面的矢量算符方程:

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=i\boldsymbol{J}.$$

运算而言，它们比 J_x, J_y, J_z 更为方便. 从关系式(13.3)可导出它们之间的对易关系:

$$[J_z, J_+] = J_+, \tag{13.7a}$$

$$[J_z, J_-] = -J_-, \tag{13.7b}$$

$$[J_+, J_-] = 2J_z. \tag{13.7c}$$

另外，从方程(13.5)，我们得到

$$[\boldsymbol{J}^2, J_+] = [\boldsymbol{J}^2, J_-] = [\boldsymbol{J}^2, J_z] = 0. \tag{13.8}$$

$\boldsymbol{J}^2$ 由下式给出:

$$\boldsymbol{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2.$$

利用(13.7c)，我们可从上式导出两个恒等式:

$$J_-J_+ = \boldsymbol{J}^2 - J_z(J_z + 1), \tag{13.9a}$$

$$J_+J_- = \boldsymbol{J}^2 - J_z(J_z - 1). \tag{13.9b}$$

4. $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的谱

因为 $\boldsymbol{J}^2$ 和 $\boldsymbol{J}$ 的每一个分量都对易，所以能够建立 $\boldsymbol{J}^2$ 和 $\boldsymbol{J}$ 的一个分量（例如 J_z）的共同本征函数的一个完备集. J_x, J_y 和 J_z 是厄密的，而且遵从对易关系(13.3)，这一事实就使本征值谱受到严重的限制.

由于 $\boldsymbol{J}^2$ 是正定的厄密算符[1]之和，因而它也是正定的厄密算符. 它的本征值必需是正的(或 0)，今后将其写成 $j(j+1)$，而且用实量子数 $j(\geqslant 0)$ 来标记.

如果令 $|jm\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征矢量，对应的本征值分别为 $j(j+1)$ 和 m，我们就说 $|jm\rangle$ 代表角动量为 (jm) 的状态. 若 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 不构成互相对易的可观测量的一个完备集，

1) 这是 J_x, J_y 和 J_z 的厄密特性的一个结果. 对任一 $|u\rangle$, $\langle u|J_x^2|u\rangle$ 是矢量 $J_x|u\rangle$ 的模方，所以它 $\geqslant 0$. 由于 J_y^2 和 J_z^2 也有同样的性质，对任何一个 $|u\rangle$，都有 $\langle u|\boldsymbol{J}^2|u\rangle \geqslant 0$.

就可以存在若干个线性独立的状态 (jm)。 在这种情况下，$|jm\rangle$ 是一特定的刃矢，它总是在角动量 (jm) 的子空间中选出。 下面的证明对如此选取的任一矢量都是适用的。 加在 $|jm\rangle$ 上的条件仅仅是

$$\boldsymbol{J}^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle,$$
$$J_z|jm\rangle = m|jm\rangle.$$

考虑矢量 $J_+|jm\rangle$ 和 $J_-|jm\rangle$。 从恒等式(13.9a)和(13.9b)，我们得到

$$J_-J_+|jm\rangle = [j(j+1) - m(m+1)]|jm\rangle$$
$$= (j-m)(j+m+1)|jm\rangle, \quad (13.10a)$$
$$J_+J_-|jm\rangle = [j(j+1) - m(m-1)]|jm\rangle$$
$$= (j+m)(j-m+1)|jm\rangle. \quad (13.10b)$$

于是，矢量 $J_+|jm\rangle$ 和 $J_-|jm\rangle$ 的模方分别为

$$\langle jm|J_-J_+|jm\rangle = (j-m)(j+m+1)\langle jm|jm\rangle,$$
$$\langle jm|J_+J_-|jm\rangle = (j+m)(j-m+1)\langle jm|jm\rangle.$$

由希尔伯特空间的基本公理可知，这些模方不可能是负的，因此，

$$(j-m)(j+m+1) \geqslant 0, \quad (j+m)(j-m+1) \geqslant 0,$$

由此得到

$$-j \leqslant m \leqslant j.$$

此外，一个矢量是零的充分和必要条件是它的模方为零，所以

$J_+|jm\rangle = 0$ 当且仅当 $(j-m)(j+m-1) = 0$ 时；

类似地有

$J_-|jm\rangle = 0$ 当且仅当 $(j+m)(j-m+1) = 0$ 时。

因为 m 必然在间隔 $(-j,+j)$ 中，所以上述这些条件分别约化为 $m = j$ 和 $m = -j$。

若 $m \neq j$，则非零矢量 $J_+|jm\rangle$ 是角动量为 $(j,m+1)$ 的矢量。由规则(13.8)得到

$$\boldsymbol{J}^2 J_+|jm\rangle = J_+\boldsymbol{J}^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle;$$

又从(13.7a)导出

$$J_z J_+ = J_+(J_z + 1), \qquad (13.11a)$$

所以我们得到

$$J_z J_+|jm\rangle = J_+(J_z + 1)|jm\rangle = (m+1)J_+|jm\rangle.$$

利用 J_- 和 $\boldsymbol{J}^2$ 对易，以及由(13.7b)导出的下式

$$J_z J_- = J_-(J_z - 1), \qquad (13.11b)$$

我们对 $J_-|jm\rangle$ 也可得到类似的结果.

归纳起来，我们得出重要的定理：

如果 $|jm\rangle$ 是角动量为 (jm) 的矢量，而且模方为 N，那末:

(i) **必定有** $-j \leqslant m \leqslant j;$ (13.12)

(ii) **若** $m = j$，**则** $J_+|jm\rangle = 0;$

若 $m \neq j$，**则** $J_+|jm\rangle$ **必定是角动量为** $(j, m+1)$ **的矢量，而且它的模方为** $[j(j+1) - m(m+1)]N;$

(iii) **若** $m = -j$，**则** $J_-|jm\rangle = 0;$

若 $m \neq j$，**则** $J_-|jm\rangle$ **必定是角动量为** $(j, m-1)$ **的矢量，而且它的模方为** $[j(j+1) - m(m+1)]N.$

我们现在来考虑由算符 J_+ 重复作用在 $|jm\rangle$ 上而得到的一组矢量：

$$J_+|jm\rangle, J_+^2|jm\rangle, \cdots\cdots, J_+^p|jm\rangle, \cdots\cdots \qquad (13.13)$$

已知 $-j \leqslant m \leqslant j$. 如果 $m = j$，则 $J_+|jm\rangle = 0$. 如果 $m < j$，则 $J_+|jm\rangle$ 是一个角动量为 $(j, m+1)$ 的非零矢量. 所以，它具有 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的任一共同本征矢量所特有的性质(i)—(iii)，即必定有 $m+1 < j$. 若 $m+1 = j$，则 $J_+^2|jm\rangle = 0$. 若 $m+1 < j$，则 $J_+^2|jm\rangle$ 是一个角动量为 $(j, m+2)$ 的非零矢量，因此也有性质 (i)—(iii). 于是，对矢量(13.13)的这些性质的分析可以一步一步地继续下去. 很显然，这个序

列必需在某处终止．否则，我们可以建立如此的 J_z 的本征矢量，以致其本征值将会大于任意给定的一个数，而这与(13.12)相矛盾：按照(13.12)，J_z 的本征值不能大于 j．所以存在一个整数 $p(\geqslant 0)$，使 $J_+^p|jm\rangle$ 是一个角动量为 $(j, m+p)$ 的非零矢量，而且 J_+ 对它的作用等于 0；于是我们得到 $m+p=j$．这样，我们证明了 $(j-m)$ 是一个整数 $(\geqslant 0)$，而且 p 个矢量

$$J_+|jm\rangle, J_+^2|jm\rangle, \cdots\cdots, J_+^p|jm\rangle \qquad (13.14)$$

代表角动量完全确定的态．它们全都对应于 J^2 的同一本征值 $j(j+1)$，而分别和 J_z 的本征值

$$m+1, m+2, \cdots, m+p=j.$$

相对应．对 J_- 重复作用在 $|jm\rangle$ 上而得到的一组矢量作类似的考查，同样可证明 $j+m=q$ 也是一整数$(\geqslant 0)$，而且 q 个矢量

$$J_-|jm\rangle, J_-^2|jm\rangle, \cdots, J_-^q|jm\rangle \qquad (13.15)$$

代表角动量完全确定的态．它们全都对应于 J^2 的同一本征值 $j(j+1)$，而且分别和 J_z 的本征值

$$m-1, m-2, \cdots, m-q=j$$

相对应．因为 p 和 q 是两个非负整数，所以它们的和 $p+q=2j$ 也是一个非负整数．

总结这些结果，我们得出下面的基本定理：

(A) J^2 的可能本征值只能取 $j(j+1)$，其中 j 是非负的整数或半整数[1]：

$$j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots, \infty.$$

---

1) 本书自始至终把“半整数”理解为“奇整数的一半”，即 $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \cdots\cdots$.

（B）J_z 的可能本征值只能是整数或半整数：

$$m = 0, \pm\frac{1}{2}, \pm 1, \pm\frac{3}{2}, \pm 2, \cdots, \pm\infty.$$

（C）如果 $j(j+1)$ 和 m 分别是 J^2 和 J_z 的本征值，而且与这两个算符的一个共同本征态［即角动量为 (jm) 的态］对应，则 m 的可能值仅仅有 $(2j+1)$ 个：

$$-j, -j+1, \cdots, j-1, j.$$

5. J^2 和 J_z 的本征矢量　不变子空间 $\mathscr{E}^{(j)}$ 的构成

从角动量完全确定的一个矢量 $|jm\rangle$ 出发，重复运用算符 J_+ 和 J_-，总共可以构造出 $2j+1$ 个角动量完全确定的矢量．通常这些矢量是不归一的，但用下述方法可容易地构造出归一化的本征矢量．

设 $|jm\rangle$ 的模方等于 1．若 $m = j$，则 $J_+|jm\rangle = 0$；若 $m < j$，则它是角动量为 $(j, m+1)$ 的矢量．用 $|jm+1\rangle$ 代表由下式确定的模方为 1 的矢量：

$$J_+|jm\rangle = C_m|jm+1\rangle.$$

从上面给出的 $J_+|jm\rangle$ 的模方公式得到

$$|C_m|^2 = [j(j+1) - m(m+1)].$$

我们这样来选定 $|jm\rangle$ 的相位，使 C_m 是正实数．于是，

$$J_+|jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\,|jm+1\rangle.$$

用 J_- 乘上式两边，并且利用(13.10a)，我们得到

$$J_-|jm+1\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\,|jm\rangle.$$

对于矢量 $|jm+1\rangle$，可用同样的方法处理．这只要每处的 m 都用 $m+1$ 来替换就能做到．如果 $m+1 = j$，则 $J_+|jm\rangle = 0$．如果 $m+1 \neq j$，则利用和上面完全相同的约定来选定相位，我们可以构造出角动量为 $(j, m+2)$ 而且模方

为 1 的矢量 $|jm+2\rangle$. 如此继续下去,直至得到$|jj\rangle$ 为止.

用同样的方式,重复运用 J_-, 我们相继地构造出角动量分别为$(j,m-1),\cdots,(j,-j)$, 而且模方为 1 的矢量 $|jm-1\rangle,\cdots,|j-j\rangle$. 它们的相位用完全相同的约定来选定.

因而,从 $|jm\rangle$ 出发,我们构造出 $(2j+1)$ 个正交归一的矢量系列:

$$|jj\rangle,|jj-1\rangle,\cdots,|jm\rangle,\cdots|j-j\rangle, \tag{13.16}$$

它们满足本征值方程:

$$\boldsymbol{J}^2|j\mu\rangle = j(j+1)|j\mu\rangle, \tag{13.17}$$

$$J_z|j\mu\rangle = \mu|j\mu\rangle, \tag{13.18}$$

而且它们的相对相位已经这样选定,以致利用关系式

$$J_+|j\mu\rangle = \sqrt{j(j+1)-\mu(\mu+1)}\,|j\mu+1\rangle, \tag{13.19}$$

$$J_-|j\mu\rangle = \sqrt{j(j+1)-\mu(\mu-1)}\,|j\mu-1\rangle, \tag{13.20}$$

特别是利用关系式

$$J_+|jj\rangle = J_-|j-j\rangle = 0, \tag{13.21}$$

就可以从这些矢量中的一个得出另一个.

这 $(2j+1)$ 个矢量张成一个子空间. 因为算符 J_+,J_-,J_z 使这些矢量从其中的一个变换为另一个, 所以它们使 $\mathscr{E}^{(j)}$ 的任一矢量仍变换为 $\mathscr{E}^{(j)}$ 的某一矢量. 换言之, 它们使 $\mathscr{E}^{(j)}$ 保持不变. $\boldsymbol{J}$ 的分量的任一函数 $F(\boldsymbol{J})$(它只是算符 J_+,J_-,J_z 的函数) 也使 $\mathscr{E}^{(j)}$ 保持不变. 在第 III 节中我们将看到,量子系统的整体转动相当于这种类型的算符 $F(\boldsymbol{J})$ 作用到态矢量上. 所以,整个系统的任何转动都使 $\mathscr{E}^{(j)}$ 保持不变.

6. 标准表象 $\{\boldsymbol{J}^2J_z\}$

如果 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 不构成相互对易的可观测量的一个完备集, 则有很多为这两个算符所共有的基矢系. 即使它们构成

一个完备集，每个基矢的相位还可任意选定.

在 J^2 和 J_z 为对角的表象当中，有某些表象使角动量的运算特别简单，所以是更可取的. 我们称它们为**标准表象** $\{J^2 J_z\}$. 它们是这样的一些表象：在其中，某一确定的量子数 j 所对应的基矢可以分成一个系列或几个系列，每一系列由 $(2j+1)$ 个矢量组成，它们由关系式(13.19—20)联结起来. 每一系列都对应一个子空间 $\mathscr{E}^{(j)}$，整个希尔伯特空间是这些子空间的直和.

我们可用下述方法建立一个标准表象. 在 J^2 的本征值为 $j(j+1)$ 的那些本征矢量当中，我们考虑 $J_z = j$ 的那些本征矢量，它们构成希尔伯特空间的某一子空间 $\mathscr{F}^{(j)}$，其维数视情况而定，可以是一维的、数维的或无限维的. 在 $\mathscr{F}^{(j)}$ 中，我们总可以选出一个正交矢量的完备集 $|\tau jj\rangle$. 指标 τ 用来区分角动量都为 (jj) 的那些矢量，依情况而定，它可以取一个、数个或无限个数值(分立的或连续的；我们将假定它们是分立的). 按假设可得

$$\langle \tau jj | \tau' jj \rangle = \delta_{\tau\tau'}.$$

对于 $|\tau jj\rangle$ 中的每一个矢量，我们都可以将它和用 J_- 重复作用在其上而得到的 $2j$ 个矢量按上一节的方法联系起来，于是构成一个 $(2j+1)$ 维子空间 $\mathscr{E}^{(j)}$. 为了区分这些子空间，我们用 $\mathscr{E}(\tau j)$ 标记它们. 因而，子空间 $\mathscr{E}(\tau j)$ 的$(2j+1)$个基矢为

$$|\tau jj\rangle, |\tau j\, j-1\rangle, \cdots, |\tau j\, -j\rangle.$$

这些矢量是正交归一的，并且满足下面的基本关系：

$$J^2|\tau j\mu\rangle = j(j+1)|\tau j\mu\rangle \tag{13.22}$$

$$J_z|\tau j\mu\rangle = \mu|\tau j\mu\rangle \tag{13.23}$$

$$J_+|\tau j\mu\rangle = \sqrt{j(j+1)-\mu(\mu+1)}\,|\tau j\mu+1\rangle \tag{13.24}$$

$$J_-|\tau j\mu\rangle = \sqrt{j(j+1)-\mu(\mu-1)}\,|\tau j\mu-1\rangle. \tag{13.25}$$

我们容易从 (13.24) 和 (13.25) 导出下面的重要关系式(问题 13.1):

$$|\tau j\pm\mu\rangle=\sqrt{\frac{(j+\mu)!}{(2j)!(j-\mu)!}}\,J_{\mp}^{j\mp\mu}|\tau j\pm j\rangle \qquad (13.26)$$

$$|\tau j\pm j\rangle=\sqrt{\frac{(j+\mu)!}{(2j)!(j-\mu)!}}\,J_{\pm 1}^{j\mp\mu}|\tau j\pm\mu\rangle. \qquad (13.27)$$

容易证明子空间 $\mathscr{E}(\tau j)$ (j 给定，τ 可变)是互相正交的，而且对于 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值 $j(j+1)$，它们总起来构成一个子空间 $\mathscr{E}^{(j)}$. 其证明如下:

若 $\mu\neq\mu'$，则子空间 $\mathscr{E}(\tau j)$ 和 $\mathscr{E}(\tau' j)$ ($\tau\neq\tau'$) 的基矢 $|\tau j\mu\rangle$ 和 $|\tau' j\mu'\rangle$ 一定是正交的，因为它们对应着 J_z 的不同本征值；如果 $\mu=\mu'$，也同样是如此，因为重复应用(13.24)可知

$$\langle\tau' j\mu|\tau j\mu\rangle=\langle\tau' j\mu+1|\tau j\mu+1\rangle=\cdots$$
$$=\langle\tau' jj|\tau jj\rangle=\delta_{\tau\tau'}.$$

为了证明 $\boldsymbol{J}^2$ 的任一本征矢量(对应的本征值为 $j(j+1)$)是 $|\tau j\mu\rangle$ (τ 和 μ 可变，j 固定)的线性组合，只要证明角动量为 $(j\mu)$ 的任一矢量 $|\varpi j\mu\rangle$ 是同一个角动量的基矢 $|\tau j\mu\rangle$ 的线性组合就可以了. 从我们的起始假设可知，若 $\mu=j$，则这种论证是正确的. 若 $\mu\neq j$，则用算符 $J_{\mp}^{j\mp\mu}$ 作用到矢量 $|\varpi j\mu\rangle$ 上，并利用关系式(13.26)和(13.27)，我们又把问题约化到 $\mu=j$ 的情形.

于是，从角动量为 (jj) 的正交矢量的一个完备集出发，我们在子空间 $\mathscr{E}^{(j)}$ 中(对应 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值为 $j(j+1)$)建立了一个标准表象 $\{\boldsymbol{J}^2 J_z\}$ 的基矢. 对 $\boldsymbol{J}^2$ 的所有可能的本征值重复同样的运算，我们就可得到整个希尔伯特空间的一个标准基.

注意，在这样的表象中，表述 $\boldsymbol{J}$ 的分量的矩阵形式是特别

简单的(参看问题 13.2)。从(13.23),(13.24)和(13.25)得到

$$\begin{aligned}\langle\tau j\mu|J_z|\tau' j'\mu'\rangle &= \mu\delta_{\tau\tau'}\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}\\ \langle\tau j\mu|J_\pm|\tau' j'\mu'\rangle &= \sqrt{j(j+1)-\mu\mu'}\,\delta_{\tau\tau'}\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'\pm 1}.\end{aligned} \tag{13.28}$$

7. 结论

上面关于角动量性质的研究只不过用了它的对易关系和在希尔伯特空间中它的分量是厄密算符这一事实。单从这点出发,我们已经能够证明:量子数 j 只能取整数或半整数值,而且 J^2 的每一本征值 $j(j+1)$ 都对应着一个系列或几个系列的矢量,每一系列由 $(2j+1)$ 个线性独立的矢量构成。应用算符 J_- 和 J_+,从每一系列的任一矢量可以得到其中的另一个;这些矢量与量子数 m 的 $(2j+1)$ 个可能值

$$-j,-j+1,\cdots,j,$$

相对应。

然而,要完全解决本征值问题,这些假设是不充分的。有待确定的问题是

(1) 整数和半整数中的那些数实际上构成 j 的谱;

(2) 对每一个 j 值,由 $(2j+1)$ 个线性独立矢量构成的系列有多少?

这些问题的答案与所考虑的问题有关。单从对易关系式不能先验地排除这种情况:j 取单一值(整数或半整数),而和这本征值对应的由 $(2j+1)$ 个线性独立矢量构成的集合恰好只有一个,于是态矢量空间就是 $(2j+1)$ 维的。第 IV 节中,当涉及自旋问题时,我们就有这样的一个例子。

另一个重要的特殊情况是方程(13.1)所定义的单粒子的角动量 l。在第 II 节中,我们将对这种情况作详尽的讨论,而且会看到,j 的谱由 0 至∞的全部整数构成,所有半整数被排

除在外[1]。

II. 轨道角动量和球谐函数

8. l^2 和 l_z 的谱

我们再来讨论最初在 § 2 中考虑过的单粒子量子系统。选取 z 轴为极轴方向。可以将算符 $\boldsymbol{l}^2$ 和 $\boldsymbol{l}$ 的分量表述为极角 (θ, φ) 及其导数的函数[方程 $(B.82—84)$]. 在下面的讨论中，径向变数可以不考虑。我们想找到满足下列两个本征值方程的函数 $F_l^m(\theta,\varphi)$:

$$\boldsymbol{l}^2 F_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)F_l^m(\theta,\varphi) \qquad (13.29)$$

$$l_z F_l^m(\theta,\varphi) = mF_l^m(\theta,\varphi). \qquad (13.30)$$

因为任一波函数都是 r 的单值函数，所以当 φ 用 $\varphi + 2\pi$[2] 代替时，$F_l^m(\theta,\varphi)$ 应保持不变。方程 (13.30) 已经在 § 5.12 中研究过。由于 $l_z = -i\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$，$F_l^m(\theta,\varphi)$ 的形式必然是 $f_l^m(\theta,\varphi)e^{im\varphi}$ 这种类型(m 是整数)。由于 m 是整数，l 也必然是整数。所以，**没有半整数的轨道角动量。**

为了在整数(≥ 0)中间确定 $\boldsymbol{l}$ 的本征值及其简并度，我们先建立与角动量 (l,l) 对应的本征函数。这个函数由方程

$$l_z F_l^l(\theta,\varphi) = lF_l^l(\theta,\varphi) \qquad (13.31)$$

$$l_+ F_l^l(\theta,\varphi) = 0. \qquad (13.32)$$

---

1) 问题 13.15 处理的是另一种情况。在那里，J^2 和 J_z 构成互相对易的可观测量的一个完备集(对于每一个 j 值，由 $(2j+1)$ 个矢量所构成的系列只有一个)，而且 j 可以取所有整数和半整数值。在这谱中，由于整数和半整数值同时出现，所以把 J 当作角动量处理时，要对此系统的各个可观测量的物理意义加上某些限制(参看 § 15).

2) 还有，$F_l^m(0,\varphi)$ 和 $F_l^m(\pi,\varphi)$ 不依赖于 φ。下面找到的本征函数自动地满足这些条件。

确定．这些方程相当于 $m = l$ 情形下的方程组(13.29—30)．因为从(13.9a)得到

$$\boldsymbol{l}^2 = l_z(l_z + 1) + l_-l_+$$

所以由(13.32)和(13.31)得到(13.29)．反之亦然．一旦给出微分算符 l_z 和 l_+ [方程 (B.82—83)]，则一阶偏微分方程组(13.31—32)是容易求解的．从(13.31)得到

$$F_l^l(\theta,\varphi) = f_l(\theta)e^{il\varphi}.$$

此式代入(13.32)，我们得到微分方程

$$\left(\frac{d}{d\theta} - l\cot\theta\right) f_l(\theta) = 0,$$

它的解是 $\sin^l\theta$ 乘一任意常因子．对于 l ($\geqslant 0$) 的每一整数值，存在且只存在一个角动量为($l\hbar$)的本征函数（差一个任意常因子)，即

$$\sin^l\theta e^{il\varphi}.$$

于是，$\boldsymbol{l}^2$ 的谱就是数 $l(l+1)$ 的序列，其中 l **取 0 至∞的全部整数值**．对每一个本征值 $l(l+1)$，都相应地存在 $(2l+1)$ 个 l_z 的本征值 m，它们是区间 $(-l,+l)$ 上的$(2l+1)$ 个整数．对于每一个这样的数偶 (lm)，都相应地存在**一个且只有一个本征态**（假如我们只限于考虑角度 θ 和 φ 的函数)，就是说 $\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的谱全都是非简并的．

9. 球谐函数的定义和构成

与本征值 (lm) 对应的 $\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的共同本征函数还有一个任意常数未确定．我们将用归一化和一种适宜的相位约定来决定这个常数．这样，我们就得到阶为 (lm) 的球谐函数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$．

$Y_l^m(\theta,\varphi)$ 构成 θ 和 φ 的函数的一个正交集(在标量积的积分中，体积元是 $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$)．它也是一个**完备集**．完

备性的证明不在这里给出。

相位用下述方式[1]确定。我们首先要求 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 形成一种标准基。为此，只要它们满足在 $\{\theta,\varphi\}$ 表象中写出的方程(13.24—25)[参看 (B.89)]就足够了。于是，我们可以决定对应同一 l 值的 $(2l+1)$ 个球谐函数的相对相位，但其中有一个相位留待决定，比如说 $Y_l^0(\theta,\varphi)$。我们再要求 $Y_l^0(0,0)$是正实值，则它的相位也可以确定。

如果我们用 $|lm\rangle$ 代表 $\{\theta\varphi\}$ 表象中球谐函数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 所表述的矢量，那末这样确定的各个矢量满足方程 (13.24—25)。所以由方程(13.26)得到

$$|lm\rangle = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}}\, l_-^{l-m}|ll\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}}\, l_+^{l+m}|l-l\rangle.$$

换言之，

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}}\, l_-^{l-m}Y_l^l(\theta,\varphi) \quad (13.33)$$

$$= \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}}\, l_+^{l+m}Y_l^{-l}(\theta,\varphi). \quad (13.34)$$

在附录中给出了微分算符 l_- 和 l_+ 的显示形式[方程(B.83)]。从该处给出的表示式，我们推导出

$$l_\pm e^{i\mu\varphi}f(\theta) = \mp e^{i(\mu\pm1)\varphi}\left(\sin^{1\pm\mu}\theta\frac{d}{d(\cos\theta)}\sin^{\mp\mu}\theta\right)f(\theta).$$

对于任意的 $f(\theta)$，右边括号中的式子必须认为是作用在位于

---

1) 这种特别适宜的约定为大多数作者所采用。然而，对于时间反演不变性的讨论来说，当在组态空间中涉及波函数时，利用函数 $\mathcal{Y}_l^m(\theta,\varphi)\equiv i^lY_l^m(\theta,\varphi)$ 是更可取的(参看 §15.22)。

它右边的函数 $f(\theta)$ 上的一个算符. 所以，l_+ 和 l_- 重复作用在函数 $e^{i\mu\varphi}f(\theta)$ 上就给出

$$l_{\pm}^{s}e^{i\mu\varphi}f(\theta)=(\mp)^{s}e^{i(\mu\pm s)\varphi}\left(\sin^{s\pm\mu}\theta\frac{d^{s}}{d(\cos\theta)^{s}}\sin^{\mp\mu}\theta\right)f(\theta). \tag{13.35}$$

其中，μ 和 s 是整数.

从 §8 的讨论可知

$$Y_l^l(\theta,\varphi)=c_l\sin^l\theta e^{il\varphi},$$

c_l 是一个常数，它的模由 $Y_l^l(\theta,\varphi)$ 的归一化条件决定，得到

$$|c_l|=(4\pi)^{-\frac{1}{2}}\frac{\sqrt{(2l+1)!}}{2^l l!}. \tag{13.36}$$

它的相位有待于用上面采用过的约定来决定.

将 Y_l^l 的这一表示式代入方程 (13.33)，再借助于恒等式 (13.35)，我们得到

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=c_l\sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}}e^{im\varphi}\sin^{-m}\theta \times\frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}\sin^{2l}\theta. \tag{13.37}$$

当 $m=-l$ 时，这公式变为

$$Y_l^{-l}(\theta,\varphi)=(-)^l c_l e^{-il\varphi}\sin^l\theta. \tag{13.38}$$

将 Y_l^{-l} 的这一表示式代入(13.34)，再利用(13.35)，我们得到 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 的一个新的和前面的一个等价的表示式:

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=(-)^m c_l\sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}}e^{im\varphi}\sin^m\theta \times\frac{d^{l+m}}{d(\cos\theta)^{l+m}}\sin^{2l}\theta. \tag{13.39}$$

当 $m=0$ 时，这两个表示式是完全相同的:

$$Y_l^0(\theta,\varphi)=c_l\sqrt{\frac{1}{(2l)!}}\frac{d^l}{d(\cos\theta)^l}(1-\cos^2\theta)^l.$$

如果不计相乘常数，这恰恰是勒让德多项式 $P_l(\cos\theta)$ [方程 $(B,71)$]:

$$Y_l^0(\theta,\varphi)=(-)^l\frac{c_l 2^l l!}{\sqrt{(2l)!}}P_l(\cos\theta)$$

$$=(-)^l\frac{c_l}{|c_l|}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta).$$

$Y_l^0(0,0)$ 是正实数这个条件可用来选定相位:

$$\frac{c_l}{|c_l|}=(-)^l.$$

于是，$Y_l^m(\theta,\varphi)$ 的表示式(13.37)和(13.38)已完全确立.

附录 B 中给出的有关球谐函数的大多数性质，都可以直接从简练的形式(13.37)和(13.38)得出. 特别要注意到

$$Y_l^{-m}(\theta,\varphi)=(-)^m Y_l^{m*}(\theta,\varphi),$$

Y_l^m 是 $e^{im\varphi}\sin^{|m|}\theta$ 和 $l-|m|$ 次多项式的乘积，而且 $\cos\theta$ 部分的宇称是 $(-)^{l-|m|}$. 所以 Y_l^m 的宇称是 $(-)^l$(问题 13.4)，即

$$Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi)=(-)^l Y_l^m(\theta,\varphi).$$

III. 角动量与转动

10. 转动的定义　欧勒角

在这一节中，我们考察在普通空间中的转动的某些性质.

按定义，绕某一给定点 O 的转动是空间各点的一种整体位移，其中点 O 保持不动. 在这样的位移中，每一点 P 取一新的位置 P'，而且 P 和 P' 之间有一一对应关系. 也可以将绕 O 点的转动定义为空间各点之间的一种一一对应变换，在其中，

点 O 就变换成它本身，而距离(以及角度)和坐标轴指向[1]皆保持不变.

一个单位矢量 $\boldsymbol{u}$ 和一个角度 φ 决定一个特定的转动 $R_u(\varphi)$，即绕 $\boldsymbol{u}$ 规定的方向轴转动 φ 角(按通常的方式规定转动的正指向). 这样来规定同一转动的方式有无限多. 如果

$$\begin{aligned} u_1 &= u \\ \varphi_1 &= \varphi + 2n\pi \end{aligned} \quad \text{或} \quad \begin{aligned} u_1 &= -u \\ \varphi_1 &= -\varphi + 2n\pi \end{aligned} \quad (n \text{ 是任意整数}),$$

则 $R_u(\varphi)$ 和 $R_{u_1}(\varphi)$ 等同. 若 $\varphi=\varepsilon$ 是无穷小量，我们就说转动是**无穷小转动**. 容易写出矢量 $\boldsymbol{v}$ 在无穷小转动 $R_u(\varepsilon)$ 下的变换 $\boldsymbol{v}'$ 为

$$\boldsymbol{v}' \simeq \boldsymbol{v} + \varepsilon(\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{v}) \quad (\varepsilon \ll 1). \tag{13.40}$$

规定转动的另一方法是用它的欧勒角 α,β,γ 来实现. 令 $OXYZ$ 是笛卡儿坐标系 $Oxyz$ 经转动而得到的坐标系，Ou 是垂直于 Oz、OZ 的两个**有向**轴之一(图 13.1). 欧勒角[2]是

$$\alpha = (Oy, Ou),\ \beta = (Oz, OZ).\ \gamma = (Ou, OY).$$

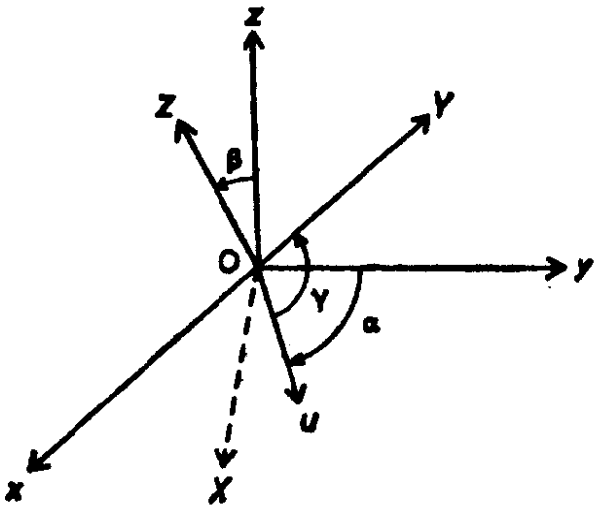


图 13.1 欧勒角的定义

1) 与反射变换恰成对照. 在反射变换中，距离保持不变但坐标轴的指向变号.

2) 这里采用的定义和通常在陀螺理论中采用的略有不同.

这转动是下述三个转动相继作用的结果：

(i) 绕 Oz 轴转动 α 角，即 $Rz(\alpha)$(Oy 变到 Ou)；

(ii) 绕 Ou 轴转动 β 角，即 $R_u(\beta)$ (Oz 变到 OZ)；

(iii) 绕 OZ 轴转动 γ 角，即 $Rz(\gamma)$ (Ou 变到 OY)。我们用 $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ 表示这转动，并写成

$$\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma) = \mathscr{R}z(\gamma)\mathscr{R}u(\beta)\mathscr{R}z(\alpha). \qquad (13.41)$$

角度 α,β,γ 是代数量，其正负依绕 Oz, Ou, OZ 轴的转动是正的还是负的而定。坐标系 $Oxyz$ 一经选定后，同一个转动可由若干组不同的欧勒角来规定。使

$$\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma) = \mathscr{R}(\alpha_1\beta_1\gamma_1)$$

的充分和必要条件是

$$\begin{aligned} &\alpha_1 = \alpha + 2\pi n_\alpha \qquad \alpha_1 = \alpha + \pi + 2\pi n_\alpha \\ &\beta_1 = \beta + 2\pi n_\beta \text{ 或 } \beta_1 = -\beta + 2\pi n_\beta \qquad (13.42) \\ &\gamma_1 = \gamma + 2\pi n_\gamma \qquad \gamma_1 = \gamma - \pi + 2\pi n_\gamma \end{aligned}$$

($n_\alpha, n_\beta, n_\gamma$ 是任意整数)。

每一转动 $\mathscr{R}$ 都可以和下述方式规定的 3×3 矩阵相联系。我们始终选择右手笛卡儿坐标系 $Oxyz$，其 Ox, Oy, Oz 方向上的单位矢量分别为 $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$。在转动下，这些矢量变换成三个新的矢量 $\boldsymbol{A}_1$, $\boldsymbol{A}_2$, $\boldsymbol{A}_3$。它们构成一个新的右手笛卡儿坐标系 $OXYZ$。每一个矢量 $\boldsymbol{A}_j$ 都是矢量 $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ 的线性组合[1]：

$$\boldsymbol{A}_j = \mathscr{R}[\boldsymbol{a}_j] = \boldsymbol{a}_i\mathscr{R}_{ij}, \quad \mathscr{R}_{ij} = (\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{A}_j).$$

这三个线性组合系数 $\mathscr{R}_{ij}$ 是 3×3 矩阵的元。我们用表述转动的同一个字母 $\mathscr{R}$ 来代表这个矩阵。转动完全由这矩阵决定，即如果 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{a}_iv_i$ 是空间中的任一矢量，它在坐标系 $Oxyz$ 上的坐标为 (v_1, v_2, v_3)，则由于转动它变换为矢量

1) 在这一节中，我们全都采用重复指标的求和约定，例如

$$\boldsymbol{a}_i\mathscr{R}_{ij} = \boldsymbol{a}_1\mathscr{R}_{1j} + \boldsymbol{a}_2\mathscr{R}_{2j} + \boldsymbol{a}_3\mathscr{R}_{3j}.$$

$$\boldsymbol{v}' = \mathscr{R}[\boldsymbol{v}] = \boldsymbol{A}_i V_i = \boldsymbol{a}_i \mathscr{R}_{ij} V_j.$$

$\boldsymbol{v}'$ 在坐标系 $Oxyz$ 上的分量为

$$V_i' = \mathscr{R}_{ij} V_j. \tag{13.43}$$

利用矩阵 $\mathscr{R}$，$\boldsymbol{v}'$ 就可从 $\boldsymbol{v}$ 得到.

由于 $\boldsymbol{A}_i$ 构成一个笛卡儿坐标系，所以实矩阵 $\mathscr{R}$ 是正交的和么模的:

$$\mathscr{R} = \mathscr{R}^*, \quad \tilde{\mathscr{R}} = \mathscr{R}^{-1}, \quad \det\mathscr{R} = 1.$$

坐标系 $Oxyz$ 一旦选定，与转动相关的矩阵也就唯一确定. 反之，每一个实的正交么模矩阵和一个转动，也只和一个转动相对应.

在附录 C [公式 (C.45)] 中，我们明显地给出了转动 $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ 相关的矩阵，其元素是欧勒角的函数. 举一例，当绕 Oz 轴转动 α 角时(即转动 $\mathscr{R}_z(\alpha)$)，上面述及的矢量 $\boldsymbol{v}$ 的坐标变换规律为

$$\begin{aligned} V_1' &= V_1\cos\alpha - V_2\sin\alpha \\ V_2' &= V_1\sin\alpha + V_2\cos\alpha \\ V_3' &= V_3. \end{aligned} \tag{13.44}$$

两个转动 $\mathscr{R}_1$ 和 $\mathscr{R}_2$ 的乘积，即先实施 $\mathscr{R}_1$ 然后紧接着实施 $\mathscr{R}_2$ 而得到的变换 $\mathscr{R} = \mathscr{R}_2\mathscr{R}_1$ 也是一个转动. 关系式 (13.41) 是这种乘积的一例. 把 $\mathscr{R}$ 的欧勒角写成 $\mathscr{R}_1$ 和 $\mathscr{R}_2$ 的欧勒角的函数是不容易的，但 $\mathscr{R}$ 的矩阵却容易从 $\mathscr{R}_1$ 和 $\mathscr{R}_2$ 的矩阵乘积得到

$$\mathscr{R} = \mathscr{R}_2\mathscr{R}_1.$$

11. 物理系统的转动　转动算符

在讨论一个给定的、和物理问题有关的转动时，可采用两种观点(对任何一种空间变换也一样). 对这两种观点必须清

楚地加于区分. 第一种(有时称为被动的转动)是转动参考轴,空间的各点以及各点的物理量不变动. 第二种(有时称为主动的转动)是参考轴保持不动而转动物理系统本身. 这两种观点是等价的. 转动坐标轴或者以相反方向转动物理系统本身是严格地等同的事件. 除有特别说明,以后我们采用第二种观点(物理系统的转动).

在量子力学中,由于动力学变量和动力学状态之间更缺乏直接的关系,因而定义"物理系统的转动"时,我们必须比在经典力学中更为谨慎. 为了简单起见,我们先考虑单个粒子的情形. 用 a 代表这粒子的一个可能动力学状态,$\psi(r)$ 代表 a 相应的波函数; 用 a' 代表这粒子经某一转动 $\mathscr{R}$ 而得到的状态,$\psi'(r)$ 代表 a' 对应的波函数:

$$a' \equiv \mathscr{R}[a], \quad \psi'(r) \equiv \mathscr{R}[\psi(r)].$$

当我们说状态 a 在转动 $\mathscr{R}$ 下变到 a' 时,其意思是: 不论对状态为 a' 的系统作何种观测,这些观测结果可以由一个转动 $\mathscr{R}$ 从对状态为 a 的同一系统作同样测量而得的结果推算出来. 例如,考虑位置的测量. 状态 a 和 a' 的几率分布分别是 $|\psi(r)|^2$ 和 $|\psi'(r)|^2$. 上面的叙述断定: 后者由前者经过转动而得到,**即后一函数在点 r 处的值等于前一函数在点 r_1 处的值,其中 r_1 经转动 $\mathscr{R}$ 变换为 r**:

$$|\psi'(r)|^2 = |\psi(r_1)|^2, \quad r_1 = \mathscr{R}^{-1}r. \tag{13.45}$$

类似地,如果 $\varphi(p)$ 和 $\varphi'(p)$ 是动量空间的波函数,它们分别和 ψ, ψ' 对应,那么我们一定有:

$$|\varphi'(p)|^2 = |\varphi(p_1)|^2, \quad p_1 = \mathscr{R}^{-1}p. \tag{13.46}$$

要满足所有这些条件,显然只需要函数 ψ' 在 r 的值等于函数 ψ 在 r_1 的值,即

$$\psi'(r) \equiv \mathscr{R}[\psi(r)] = \psi(\mathscr{R}^{-1}r). \tag{13.47}$$

可以证明，这也是必要条件[1]. 所以波函数是完全确定的.

关系式(13.47)使 ψ 和 ψ' 之间建立起一一对应. 显然这种对应是线性的. 换言之，存在一个算符 R，使得

$$\psi' = R\psi.$$

由于 ψ 和 ψ' 的模方相等，

$$\int|\psi'(r)|^2dr = \int|\psi(\mathscr{R}^{-1}r)|^2dr = \int|\psi(r_1)|^2dr_1,$$

所以 R 是么正的. (为了得到最后的那个积分，我们作了变数变换 $r_1 = R^{-1}r$，而且利用了体积元dr在转动 R^{-1} 下是不变的这一事实.)

所有这些都可容易地推广到N个粒子的系统. 波函数 $\psi(r^{(1)}r^{(2)}\cdots r^{(N)})$ 在转动 $\mathscr{R}$ 下变换为

$$\mathscr{R}[\psi(r^{(1)}\cdots r^{(N)})] = \psi(\mathscr{R}^{-1}r^{(1)},\cdots,\mathscr{R}^{-1}r^{(N)})$$
$$= R\psi(r^{(1)},\cdots r^{(N)}). \qquad (13.48)$$

如上面的一样，转动算符 R 也是线性和么正的.

在十分普遍的意义下，一个么正算符 R 与物理系统的一个转动$\mathscr{R}$相联系. R 作用到转动前的系统的动力学态矢 $|a\rangle$ 上，就给出转动后的动力学态矢 $|a'\rangle$:

$$RR^\dagger = R^\dagger R = 1 \qquad (13.49)$$

$$|a'\rangle = R|a\rangle. \qquad (13.50)$$

从(13.50)出发，直接利用密度算符的定义，我们很容易导出这变换规律. 令 ρ 是描写系统的某一状态(纯态或混合态)的密度算符; ρ'是这状态经转动 $\mathscr{R}$ 而得到的状态的密度算符，那末我们有

$$\rho' \equiv \mathscr{R}[\rho] = R\rho R^\dagger. \qquad (13.51)$$

---

1) §15.6 给出普遍的证明. 实际上，用这些条件仍不能确定 φ' 函数的相因子. 如果我们要求下面定义的算符 R 形成一个与转动群同构的群则这相因子是固定的. 这里已经这样作了.

12. 可观测量的转动

除转动系统本身之外，我们也可以转动观测仪器．我们已经确定了态矢量的变换规律．现在来确定那些能对系统进行的各种测量操作的可观测量的变换规律．

设Q是一个可观测量，而 $Q'=\mathscr{R}[Q]$ 是它经转动 $\mathscr{R}$ 的变换．在物理上，可观测量Q代表一种测量操作，而Q至Q'的变换表示测量仪器的一个整体转动． 所以，对状态为 $|a\rangle$ 的系统作Q测量的平均值等于对状态为 $|a'\rangle\equiv\mathscr{R}[|a\rangle]$ 的系统作 Q' 测量的平均值，即

$$\langle a|Q|a\rangle=\langle a'|Q'|a'\rangle.$$

由于 $|a'\rangle=R|a\rangle$，此式可写成

$$\langle a|Q|a\rangle=\langle a|R^{\dagger}Q'R|a\rangle.$$

由于上式对任意的 $|a\rangle$ 都成立，我们得出(参看 § 7.5)

$$Q=R^{\dagger}Q'R,$$

$$Q'=RQR^{\dagger}. \qquad (13.52)$$

即

因而，在转动 $\mathscr{R}$ 下，可观测量经历和态矢量相同的一个么正变换．

尤其是，如果可观测量 S 是标量[1] (即它对转动是不变的)，则对任意的 R 都有

$$S'\equiv RSR^{\dagger}=S.$$

由于R是么正的，此式可写成

$$[R,S]=0. \qquad (13.53)$$

因此在转动下不变的可观测量与所有转动算符对易．

矢量算符是另一种特别令人感兴趣的情况． 我们沿用

1) 本章全采用标量的这一定义．以后把转动下不变的量分为标量和赝标量，前者在作反射变换时是不变的，而后者就要乘于(-1).

§ 10 的符号，而且用 $\boldsymbol{K}$ 代表分量为 $K_i=(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}_i)$ 的矢量算符. 如果我们让转动 $\mathscr{R}$ 作用于算符 K_1(即 $\boldsymbol{K}$ 在 Ox 上的分量)上，则得到的算符 K_1' 是 $\boldsymbol{K}$ 在 OX 上的分量. 普遍而言有 $\mathscr{R}[\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}]=\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}$，此处 $\boldsymbol{a}'=\mathscr{R}[\boldsymbol{a}]$. 于是，

$$K_i'\equiv\mathscr{R}[K_i]=\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{A}_i=K_j\mathscr{R}_{ji}.$$

因此，$\boldsymbol{K}$ 的笛卡儿分量的变换规律是

$$K_i'\equiv RK_iR^{\dagger}=\tilde{\mathscr{R}}_{ij}K_j. \tag{13.54}$$

注意，和在(13.43)中的一样，这里出现的是 $\tilde{\mathscr{R}}$(即 $\mathscr{R}$ 的逆算符)而不是 $\mathscr{R}$ 本身：$\boldsymbol{K}$ 的分量在转动 $\mathscr{R}$ 下的变换类似于某矢量的分量在转动 $\mathscr{R}^{-1}$ 下的变换.

13. 角动量与无穷小转动

现在我们能够建立系统的角动量和它的无穷小转动算符之间的基本关系了.

先考虑 § 11 的单个粒子情况. 按变换规律(13.47)，绕 Oz 旋转 α 角的转动 $\mathscr{R}_z(\alpha)$ 将函数 $\Psi(x,y,z)$ 变换为[参看方程(13.44)]

$$\mathscr{R}_z(\alpha)[\Psi(x,y,z)]=\Psi(x\cos\alpha+y\sin\alpha,\ -x\sin\alpha+y\cos\alpha,z).$$

特别是，这表达式右边各项在点 (x,y,z) 作泰勒展开并只取 ε 的一次项，无穷小转动就给出：

$$\begin{aligned}R_z(\varepsilon)[\Psi(x,y,z)]&\simeq\Psi(x+y\varepsilon,-x\varepsilon+y,z)\\&\simeq\Psi(x,y,z)+\varepsilon\left(y\frac{\partial\Psi}{\partial x}-x\frac{\partial\Psi}{\partial y}\right)\\&\simeq(1-i\varepsilon l_z)\Psi(x,y,z).\end{aligned}$$

此式的最末一行是根据微分算符 $l_z(\hbar=1)$ 的定义得到的. 所以，无穷小转动算符的形式为

$$R_z(\varepsilon)\simeq 1-i\varepsilon l_z.$$

对绕 $\boldsymbol{u}$ 的无穷小转动作同样的论证，给出

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) = 1 - i\varepsilon(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{u}).$$

对于 N 个粒子的系统可得到类似的结果。从 (13.48) 而不象上面那样从(13.47)出发，并作类似的处理，得出

$$\mathscr{R}_x(\varepsilon) \simeq 1 - i\varepsilon L_x,$$

更一般地可得

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) \simeq 1 - i\varepsilon(L\cdot\boldsymbol{u}),$$

此处的 $\boldsymbol{L}$ 是系统的总角动量.

总结起来:

若 $\boldsymbol{J}$ 是一系统的总角动量，则它在任一轴 $\boldsymbol{u}$ 上的分量和绕这一轴的无穷小转动算符之间的关系为

$$\boxed{R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) \simeq 1 - i\varepsilon(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})} \qquad (13.55)$$

当系统没有经典类比时，这一基本关系式就用来作为总角动量的定义.

要使这一定义是前后一致的，我们必须证实算符 $(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})$ 是矢量算符 $\boldsymbol{J}$ 在 $\boldsymbol{u}$ 上的分量. 为此，只要证明每一个无穷小转动 $\mathscr{R}_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ 唯一地对应一个无穷小转动算符 $R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ 就足够了[1]. 由矢量的变换定律(13.40)可知，在只保留到 ε 的一次方时，操作 $\mathscr{R}_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ 等价于几个操作的乘积 $\mathscr{R}_x(\varepsilon u_x)\mathscr{R}_y(\varepsilon u_y)\times\mathscr{R}_z(\varepsilon u_z)$，所以

$$\begin{aligned} R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) &\simeq R_x(\varepsilon u_x)R_y(\varepsilon u_y)R_z(\varepsilon u_z) \\ &\simeq 1 - i\varepsilon(u_xJ_x + u_yJ_y + u_zJ_z). \end{aligned}$$

从这个定义得到：任一标量算符 S 与 $\boldsymbol{J}$ 的分量对易 [方程 (13.53)]，

$$[(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{J}), S] = 0. \qquad (13.56)$$

关系式(13.55)也规定了 $\boldsymbol{J}$ 的分量与一般矢量算符 $\boldsymbol{K}$ 的

---

1) 这相当于假定转动算符构成一个群.

分量之间的对易规则. 令 $K_a \equiv \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}$ 是 $\boldsymbol{K}$ 在单位矢量 $\boldsymbol{a}$ 上的分量. 按定义,作转动 $\mathscr{R}_u(\varepsilon)$ 时,它的变换是

$$K_a' \equiv R_u(\varepsilon)K_aR_u^{\dagger}(\varepsilon) \simeq K_a - i\varepsilon[J_u, K_a].$$

但由矢量 $\boldsymbol{a}$ 的变换规律[方程(13.40)]得到

$$K_a' = \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}' \simeq \boldsymbol{K}\cdot[\boldsymbol{a} + \varepsilon(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{a})].$$

让这两个表达式中 ε 的一次方项相等,就得出

$$[J_u, K_a] = i\boldsymbol{K}\cdot(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{a}),$$

即

$$\boxed{[(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{J}),(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{K})] = i((\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{K})} \qquad (13.57)$$

式中的 $\boldsymbol{K}$ 用 $\boldsymbol{J}$ 来代替,就再次得出角动量的特征性的对易关系[方程(13.4)].

总角动量的下述定义和上面说法等价: 如果一个系统的基本可观测量是标量算符 S_1, S_2, $\cdots$ 和矢量算符 $\boldsymbol{K}_1$, $\boldsymbol{K}_2\cdots$ 的分量,则系统的总角动量可以定义为这样一个矢量算符 $\boldsymbol{J}$, 它的分量和所有的 S 对易,并且和 $\boldsymbol{K}$ 的分量之间满足对易关系(13.57).

如果不是所有矢量 $\boldsymbol{K}_1$, $\boldsymbol{K}_2\cdots$ 都满足关系式(13.5), 则即使 $\boldsymbol{J}$ 满足角动量算符的特征性对易规则(13.4), 它也不是系统的总角动量. 因而, 在 § 11 所考虑的 N 粒子情况中, 由若干个角动量 $\boldsymbol{l}^{(i)}$ 相加而成的矢量算符都可以满足关系式(13.4),但只有全体 $\boldsymbol{l}^{(i)}$ 之和 $(\boldsymbol{L})$ 才符合总角动量的定义.

14. 算符 $R(\alpha\beta\gamma)$ 的构成

任一有限转动可看作是一系列无穷小转动的结果. 对应的转动算符是相应的一系列无穷小转动算符的乘积. 由于这些无穷小转动算符是总角动量的完全确定的函数 [方程(13.55)], 故任一有限转动算符也可表述为总角动量的函数.

转动 $\mathscr{R}_u(\varphi)$ 是绕 $\boldsymbol{u}$ 轴相继作一系列无穷小转动的结

果. 例如,

$$\mathscr{R}_u(\varphi + d\varphi) = \mathscr{R}_u(d\varphi)\mathscr{R}_u(\varphi).$$

令 $J_u \equiv (\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})$ 而且应用公式(13.55),就得到

$$\begin{aligned} R_u(\varphi + d\varphi) &= R_u(d\varphi)R_u(\varphi) \\ &= (1 - iJ_u d\varphi)R_u(\varphi), \end{aligned}$$

或者

$$\frac{d}{d\varphi} R_u(\varphi) = -iJ_u R_u(\varphi) \quad (R_u(0) = 1).$$

这个微分方程容易积分而给出

$$R_u(\varphi) = e^{-i\varphi J_u}. \tag{13.58}$$

现在考虑由欧勒角 (α,β,γ) 所确定的转动 $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$. 在§10已看到,$\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$可看作是相继绕 Oz, Ou, OZ 轴分别转动 α,β,γ 角度的结果(图 13.1). 所以我们有

$$R(\alpha\beta\gamma) = R_z(\gamma)R_u(\beta)R_z(\alpha).$$

借助(13.58),上式右边三个转动可用角动量分量 J_z, J_u 和 J_z 表示出来,

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\gamma J_z}e^{-i\beta J_u}e^{-i\alpha J_z}. \tag{13.59}$$

必须注意上式右边三个指数因子的次序.

我们将此式写成只有角动量在坐标轴上的分量出现的形式. 转动 $\mathscr{R}_z^{(\alpha)}$ 将算符 J_y 变为算符 J_u, 根据算符的变换规律(13.52),有

$$J_u = R_z(\alpha)J_y R_z^{\dagger}(\alpha) = e^{-i\alpha J_z}J_y e^{+i\alpha J_z}.$$

因而

$$e^{-i\beta J_u} = e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}e^{+i\alpha J_z}.$$

此式代入(13.59)的右边,得到

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\gamma J_z}e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}.$$

类似地,相继运用转动 $\mathscr{R}_z^{(\alpha)}$ 和 $\mathscr{R}_u^{(\beta)}$ 可从 J_z 得到 J_Z, 于是象上面的 J_u 那样,可将 J_Z 消去,最终得到

$$\boxed{R(\alpha\beta\gamma)=e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}e^{-i\gamma J_z}} \qquad (13.60)$$

15. 转动 2π 角和半整数角动量

由方程(13.58)得

$$R_u(2\pi) = e^{-2\pi i J_u}.$$

虽然绕 u 轴作 2π 转动回到了起始位置上，但对应的转动算符并非必然地等于 1 . 在 J_u 是对角的表象中，这一转动算符是对角的，而且当 J_u 的本征值是整数(或半整数)时，它的对角元等于 1 (或−1).

让 D 是 J^2 的这样一个函数，当 j 是整数时，它的本征值为 1 ；当 j 是半整数时，它的本征值为−1 . D 是一个可观测量并且有下面的特征性质:

(1) $\frac{1}{2}(1+D)$ 是投影到 j 为整数的子空间上的投影算符;

(2) $\frac{1}{2}(1-D)$ 是投影到 j 为半整数子空间上的投影算符;

(3) $D^2 = 1$

(4) D 与所有的转动算符对易:

$$[D,R] = 0.$$

显然

$$R_u(2\pi) = D. \qquad (13.61)$$

为了使 $R_u(2\pi) = 1$，角动量就必须只取整数值. 另一方面，我们总是有

$$R_u(4\pi) = D^2 = 1.$$

无穷小转动和无穷小算符 R 之间有一一对应 [参看定义(13.55)]，并不意味着: 对有限转动来说也存在类似的对应.

把有限转动写成一系列无穷小转动的乘积的方式是无穷多的，上面讨论过的算符 $R_n(\varphi)$ 和 $R(\alpha\beta\gamma)$ 各与其中的一种相对应．没有先验的理由假定另一种方式会给出同样的算符．

可以证明(此处从略)：每一个有限转动 $\mathscr{R}$ 只和两个算符 R' 和 R'' 对应，两者之间差别一个"转动 2π"，

$$R'' = DR'. \tag{13.62}$$

到现在为止，我们所遇到的物理系统的总角动量只能取整数值，在这种情形下 $D = 1, R' = R''$．所以对刃矢的转动而言，每一个转动 $\mathscr{R}$ 对应一个且只对应一个算符．如果系统有半整数角动量的态，则算符 R' 和 R'' 是不相同的．

我们需要讨论两个不同的算符描写同一转动这件事．只要不产生可观测的效果，那末一个刃矢作 2π 转动后不再是同一刃矢，这在原则上不会引起任何困难．显然，如果事先使某些观测仪器转动 2π 角，实验结果是不会改变的；处于同一位置上的两个相同的计数器，必然给出同一个答案．所以，如果 Q 代表一个可观测量，则它在转动 2π 下必然是不变的；更一般地说，如果我们把某一转动 $\mathscr{R}$ 作用在 Q 上，那末所得到的可观测量不应和作转动时的特殊路径选择有关，即

$$R'QR'^{\dagger} = R''QR''^{\dagger}.$$

"转动 2π" 不变性足于保证有这种更普遍的性质．形式上，它可写成

$$[D, Q] = 0. \tag{13.63}$$

按定义，一个可观测量是一个厄密算符，而且它有一个完备的本征矢量集．代表物理量的一个算符必须是一个可观测量，这是保证量子力学自洽性的必要条件．然而，逆命题并不一定正确．我们把和一个物理可测量的量相联系的可观察量称为**物理可观测量**．前面的分析表明：任一物理可观测量必

须遵从关系式 (13.63)[1]. 在研究一个物理系统时，通常总是不言而喻地假定系统的所有可观测量都是物理可观测量. 虽然这个假定常常能使讨论方便些，但并不是本质的东西. 更严格的限制条件可能成立，但不会使理论概念作重大的修改. 关系式(13.63)正是一种这样的限制. 在讨论全同粒子时，我们将会遇到其他的限制[2].

鉴于上述的讨论，量子力学的原理并不排除半整数的角动量的存在. 实际上，在自然界中已观测到了.

16. 不可约不变子空间　转动矩阵 $R^{(J)}$

正如在 § 5 末尾所说的，(13.60) 式表明任一转动算符都是总角动量分量的函数. 所以在作转动时，§ 5 所建造的空间 $\mathscr{E}^{(J)}$ 的各矢量仍变换为它的诸矢量，即**空间 $\mathscr{E}^{(J)}$ 是转动不变的**[3].

更恰当地说，如果 $|u\rangle$ 是这空间中任一选定的矢量，则由 $|u\rangle$ 经转动而得的矢量 $R|u\rangle$ 的集合张成整个空间 $\mathscr{E}^{(J)}$. 我们把具有这种性质的空间称为**对转动是不可约的**. 另一方面，如果在 $\mathscr{E}^{(J)}$ 中至少存在一矢量 $|v\rangle$，使得集合 $R|v\rangle$ 仅仅部分地张成 $\mathscr{E}^{(J)}$，那末 $\mathscr{E}^{(J)}$ 对于转动就是可约的.

$\mathscr{E}^{(J)}$ 的不可约性的证明如下：令 $\mathscr{E}_1^{(J)}$ 代表由矢量 $R|u\rangle$ 张成的空间. 由于

$$J_+|u\rangle \equiv (J_x+iJ_y)|u\rangle = \frac{1}{\varepsilon}(1-i+iR_x(\varepsilon)-R_y(\varepsilon))|u\rangle.$$

---

1) 在本书中讨论的所有物理系统的可观测量(包括半整数本征值的角动量)都满足(13.63). 因而，可观测量和物理可观测量的区分纯是学院式的. 然而，可以想像出一些系统，它们的可观测量并不都满足(13.53)；问题 13.5 就是一例.

2) 关于(13.63)那种类型的关系式及其推论（超选择规则）的普遍讨论，可参考 wick, wightman 和 wigner, *phys. Rev.* **88**(1952) 101.

3) 今后我们用大写字母 J, M 来表示总角动量的量子数.

所以 $J_+|u\rangle$ 属于 $\mathscr{E}_1^{(J)}$；对 $J_-|u\rangle$ 也如此．更一般地说，J_+ 或 J_- 作用到 $\mathscr{E}_1^{(J)}$ 的某个矢量上而得到的矢量都属于 $\mathscr{E}_1^{(J)}$．现在考虑展开式 $|u\rangle = \sum_M |JM\rangle\langle JM|u\rangle$．用 m 代表能使 $\langle JM|u\rangle \neq 0$ 的最小 M 值．由 §5 的方法可知，矢量 $J_+^{J-m}|u\rangle$ 是正比于 $|JJ\rangle$ 的非零矢量，因而 $|JJ\rangle$ 属于 $\mathscr{E}^{(J)}$．但是，J_- 重复作用于 $|JJ\rangle$ 上，我们可得出全部的 $|JM\rangle$，它们也属于 $\mathscr{E}^{(J)}$．所以，$\mathscr{E}_1^{(J)}$ 包含着 $\mathscr{E}^{(J)}$ 的基矢完备集．因此，两个空间是全同的．证毕．

正如在 §6 中所指出的，一个物理系统的刃矢空间由若干个 $(2J+1)$ 维子空间 $\mathscr{E}(\tau J)$ 的直和构成，此处 τ 代表一组量子数，用来区别那些具有相同 J^2 本征值的态．每一个 $\mathscr{E}(\tau J)$ **对转动来说都是一个不可约的不变子空间**．在标准表象 $\{J^2 J_z\}$ 中，J 在这些子空间中的分量由非常简单的且与 τ 无关的矩阵来表述．类似地，在各个 $\mathscr{E}(\tau J)$ 中，每一个转动算符 $R(\alpha\beta\gamma)$ 由某个 $(2J+1)$ 维的矩阵 $R(\alpha\beta\gamma)$ 来表述．**这矩阵与 J 有关但和量子数 τ 无关**．按定义，

$$\begin{aligned} R^{(J)}_{M'M}(\alpha\beta\gamma) &= \langle \tau JM | R(\alpha\beta\gamma) | \tau JM' \rangle \\ &= \langle JM | e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z} | JM' \rangle . \end{aligned} \tag{13.64}$$

这些矩阵构成算符 $R(\alpha\beta\gamma)$ 的一种特别方便的表象，通常是在必须改变态矢量或可观测量的取向时就利用这种表象．它们就是所谓的**转动矩阵**．在附录 C（第 IV 节）给出它们的主要性质和其中一些显示表达式．

只从这些矩阵的定义就可以得出：子空间 $\mathscr{E}(\tau J)$ 的 $(2J+1)$ 个基矢在一给定的转动 $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ 中，它们按下述规律变换：

$$R(\alpha\beta\gamma)|\tau JM\rangle = \sum_{M'} |\tau J'M'\rangle R^{(J)}_{M'M}(\alpha\beta\gamma). \tag{13.65}$$

容易证明逆定律，即如果 $(2J+1)$ 个矢量 $|u_M\rangle(M=-J,-J+1,\cdots+J)$ 作转动时，它们相互地按下面规律变换，

$$R(\alpha\beta\gamma)|u_M\rangle=\sum_{M'}|u_{M'}\rangle R^{(J)}_{M'M}(\alpha\beta\gamma), \quad (13.66)$$

则它们满足本征值方程

$$J^2|u_M\rangle=J(J+1)|u_M\rangle,\ J_z|u_M\rangle=M|u_M\rangle,$$

而且按照关系式(13.24—25)，可通过 J_+ 和 J_- 的作用而从它们中的一个得到另一个.

17. 转动不变性和角动量守恒　转动简并

常可把一个量的转动不变性表述为角动量的一个特殊性质. 这是由于任一转动都可表述为一系列无穷小转动的乘积. 所以如果某个物理量对这些无穷小转动是不变的. 则它对任一转动也是不变的. 通过关系(13.55)，角动量就出现在无穷小转动下的不变性条件中.

因而对一个波函数或一个刃矢$|\rangle$来说，其转动不变性的必要和充分条件是，总角动量的任意分量作用在其上，都得零:

$$J|\rangle=0.$$

实际上，只要

$$J^2|\rangle=0 \quad (13.67)$$

就够了.

粒子的 S-态波函数就属这种情形. 这类波函数仅与变数 r 有关. 至于几个粒子的波函数，当它仅仅依赖于粒子之间的距离和粒子位置矢量之间的夹角时，也属于这种情形[1].

类似地，一个可观测量 S 具有转动不变性[条件 (13.53)]

1) 这和相加定理(问题 13.5)的证明过程中遇到的 $(l+l')P_l(\cos\alpha)=0$ 这个性质可相比拟.

的必要和充分条件是角动量分量与它对易，

$$[J,S]=0. \tag{13.68}$$

我们对哈密顿量的转动不变性予以特别的注意．如果对任一R，有

$$[R,H]=0, \tag{13.69}$$

则**运动方程具有转动不变性**：在时刻t_0，两个态矢量由某一转动联系，则它们在时间的发展过程中就始终是这样的关系．很显然，如果$|\psi(t)\rangle$满足薛定谔方程，那么不论R是什么样的，都有

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right)R|\psi(t)\rangle=R\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right)|\psi(t)\rangle=0,$$

所以 $R|\psi(t)\rangle$ 也是薛定谔方程的解．

类似地，如果$|\rangle$是H的本征矢量．则通过转动而得到的全部态矢 $R|\rangle$ 也是H的属于同一本征值的本征矢量，即和H的每一个本征值对应的子空间是转动不变的．

运动方程的转动不变性的全部后果都包含在如下的关系式中：

$$[J,H]=0, \tag{13.70}$$

此式表明H对无穷小转动具有不变性．

当这些关系得到满足时，算符 $\boldsymbol{J}^2$，J_z 和H对易，而求解H的本征值问题就大大地简化了，我们可以在 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的共同本征函数当中去寻找H的本征函数．不仅如此，和同一 J 值对应的能谱是相同的，在 $(2J+1)$ 个可能M值的本征函数之间，可通过 J_+ 或 J_- 的重复作用而从其中的一个得到另一个．换言之，能量的本征值与M无关．给定 J 值对应的每一本征值 E_j 对应一个系列或几个系列的 $(2J+1)$ 个本征矢量．通过 J_+ 或 J_- 的重复作用，可从各系列的本征矢量中的一个得

到另一个，而且这些本征矢量张成转动的不可约不变子空间. 我们称这类简并为**转动简并**.

中心场中的单粒子情形(第九章)就是目前这个讨论的一个极好实例. 中心场中的单粒子哈密顿量显然是转动不变的，直接检验可知它和角动量 $\boldsymbol{l}$ 的三个分量对易. 第九章的方法恰好是在 $\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的本征值分别为 $l(l+1)$ 和 m 的共同本征函数当中寻找 H 的本征函数，即在具有

$$\chi_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi).$$

这种形式的函数当中寻找. 这样就把问题约化为求解 r 的二阶微分方程. 不仅如此，由于 m 不出现在微分方程中，因此对这样确定的每一个径向函数，我们能一共构造出 $(2l+1)$ 个 H 的本征函数，它们有相同的本征值.

如上所述，我们现在已看出经典力学与量子力学之间有明显的相似之处。当经典系统的运动方程对坐标轴的转动具有不变性时，则系统的总角动量是守恒的. 这一性质允许我们得到运动的一次积分，而这就大大地简化了方程的求解. 同样在量子力学中，运动方程对转动的不变性导致总角动量守恒. 然而在这里，由于角动量的分量之间并不对易，因而守恒定律不能那样简单地表达出来.

IV. 自　　旋

18. 电子自旋的假说

薛定谔理论是简单地应用对应原理得到的，即使把相对论修正置于一边，它也不能说明复杂原子的性质. 这里需要有两个重要的修正，它们都没有任何经典力学的类比，从而人们能予见到它们的存在. 其一是，在薛定谔理论中只应保留那些在置换电子坐标时具有完全确定对称性的解. 这就是大

家知道的泡利原理，我们将在第十四章中研究它，在目前的讨论中，可以不考虑．其二是关于电子自旋的假说．

支持这个假说的主要论据来自对置于磁场中的复杂原子行为的研究(塞曼效应和斯特恩-革拉赫实验)．

已经写出过含有Z个电子(不考虑自旋)的原子的薛定谔方程[方程(2.30)]．如果我们假定原子核是无限重的，则它的位置与原子质心重合．那末在质心系中，哈密顿量就是

$$H_0 = \sum_{i=1}^{Z}\left(\frac{P_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i}\right) + \sum_{i<j}\frac{e^2}{|r_i - r_j|}. \qquad (13.71)$$

为了得到同一原子处于矢量势 $A(r)$ 所描写的静磁场中的哈密顿量，我们只需用 $P_i - \frac{cA(r_i)}{C}$ 代替 P_i．特别是对于均匀磁场 $\mathscr{H}$，$A = \frac{1}{2}(\mathscr{H} \times r)$，

$$\left(p - \frac{e}{c}A\right)^2 = p^2 - \frac{e}{c}(A \cdot p + p \cdot A) + \frac{e^2}{c^2}A^2$$

$$= p^2 - \frac{e}{c}(\mathscr{H} \cdot l) + \frac{e^2}{4c^2}\mathscr{H}^2 r_\perp^2,$$

此处，$r_\perp^2$ 是 r 在垂直于磁场 $\mathscr{H}$ 的平面内的投影的平方．哈密顿量变为

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc}\mathscr{H} \cdot L + \frac{e^2}{8mc^2}\mathscr{H}^2 \sum_{i=1}^{Z} r_{i\perp}^2;$$

L 是Z个电子的总角动量：$L = \sum_i (r_i \times p_i)$．

在我们要研究的现象中，上式第三项的贡献完全可以忽

略[1]. 因而我们在相当好的近似内得到

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc}(\mathscr{H} \cdot \boldsymbol{L}). \tag{13.72}$$

如果每一个在轨道上作圆周运动的电子产生一个正比于其角动量的磁矩

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2mc}\boldsymbol{l},$$

则我们正好得到上式，其中比例常数(迴磁比)精确地等于相应的经典理论值(即 $e/2mc$). 在这个解释中，原子的总磁矩等于 Z 个磁矩之和，即

$$\mathscr{M} = \frac{e}{2mc}\boldsymbol{L},$$

而且在磁场 $\mathscr{H}$ 中的原子的能量与无磁场时的能量之间相差一磁能项 $(-\mathscr{M} \cdot \mathscr{H})$.

如果我们考虑到 H_0 既是转动不变的，又与 $\boldsymbol{L}$ 的三个分量对易，则容易从公式(13.72)导出某些重要性质.

我们取 $\mathscr{H}$ 的方向为 z 轴. H_0, $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 有共同本征函数集 $|nLM\rangle$，而且相应的 H_0 的本征值 E_0^{nL} 与 M 无关，并有 $(2L+1)$ 重简并[2].

---

1) 在原子的抗磁性中，这一项是重要因素. 已知 $\langle r^2\rangle \simeq 10^{-16}cm^2$，我们可以认为它的数量级为 $(Ze^2/12mc^2)\mathscr{H}^2\langle r^2\rangle$. 它和能级间距 $\frac{e\hbar\mathscr{H}}{2mc}$ 的比值约小于 $10^{-9}\times\mathscr{H}$ (高斯)，即使是很强的磁场和很重的原子，它仍是一个可忽略的小量. 因此，以后出现的各种不一致并不是因为忽略 3 这一项所造成的.

2) 如果这些本征值中有若干个偶然地重合(如氢原子)，则简并度比较高. 设 $E_0^{nL} = E_0^{n'L'}$，则简并度为 $(2L+1)+(2L'+1)$. 在这种情况下，上面所作的论证在细节上要作某些修正. 然而，如果我们处处都用 L 和 L' 中较大的值来代替 L，则结论仍适用. 特别是，每一塞曼多重态具有奇数个等距离能级的结论不必修改.

H是H_0和L_z的函数[见方程(13.72)],所以有同样的本征函数集. 矢量$|nLM\rangle$对应的本征值是

$$E^{nLM} = E_0^{nL} - M\mu_B\mathscr{H}, \qquad (13.73)$$

此处

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \text{（玻耳磁子）}. \qquad (13.74)$$

由于M可取$-L$至$+L$之间的全部整数值，每一个能级E_0^{nL}在磁场$\mathscr{H}$的作用下分裂成按照(13.73)式分布的$(2L+1)$个等间隔的能级. 因此,我们得出下述理论预言:

(1) 由于磁场$\mathscr{H}$的作用,原子的每一个能级E_0^{nL}分裂成$(2L+1)$个等间隔的多重结构;

(2) 这些能级分布在E_0^{nL}的两侧，而且它们至E_0^{nL}的平均距离为零;

(3) 两相邻能级间的距离等于$\mu_B\mathscr{H}$，它与所考虑的原子无关,而与$\mathscr{H}$成正比.

这些理论预言仅仅部分地被实验证实. 有两个重大的不一致:

(a) 在奇Z原子中,多重态数目全是偶数的,如果L取半整数,则正好能得出此结果;

(b) 在同一多重态中,相邻能级间的距离是$g\mu_B\mathscr{H}$. 当从某一多重态到另一多重态时，因子g(朗德因子)可在颇大的范围内变化.

斯特恩-革拉赫实验(§ 1.10)直接地证实了存在半整数的角动量. 当原子束的大多数原子处于基态时，在屏幕上观测到的斑点数等于基态的多重数. 对于银原子，我们一共观测到两个斑点.因此银原子的基态角动量是1/2.更普遍地说，奇Z原子总是给出偶数个斑点，这是半整数角动量的特征.

上述(a)和(b)两点同时出现在反常塞曼效应的研究中.

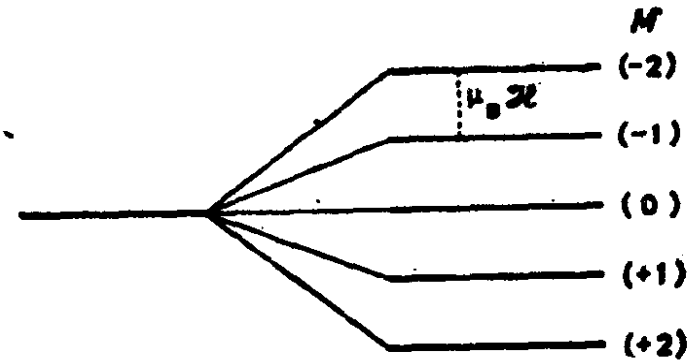


图 13.2　D态 ($L=2$) 的塞曼效应
左边是无磁场时的能级;右边是 $\mathscr{H}\neq 0$ 时的能级.

用光谱数据通常可以同时确定发生光学跃迁的状态的多重性和它们各自的朗德因子.

为了克服这些困难，需要引入半整数角动量和不同于 $e/2mc$ 的迴磁比. 采用电子自旋的假说就能非常简单地做到这一点 (Uehlenbeck 和 Goudsmit, 1925):

每个电子有一内禀角动量或者自旋 s，其大小是 $\hbar/2$(自旋 $\frac{1}{2}$)，而且伴随一磁矩

$$\mu_s = g_s \frac{e}{2mc} s. \tag{13.75}$$

g_s 是一可调整的常数. 如果取

$$g_s \simeq 2. \tag{13.76}$$

则理论和实验非常吻合. g_s 的这一数值可用相对论的电子论来解释(第二十章).

实验证明，核子(质子和中子)也有 $\frac{1}{2}$ 自旋，通过相关的

磁矩的测量可以直接证明之[1].

在这一大节的其余部分,我们将论述自旋为 1 / 2 的粒子的非相对论理论(泡利理论).

19. $\frac{1}{2}$ 自旋和泡利矩阵

设 $\boldsymbol{s}$ 是自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子的内禀角动量(或自旋矢量).按这假设,$\boldsymbol{s}^2$ 的本征值正好是 $s(s+1)=\frac{1}{2}\times\frac{3}{2}=\frac{3}{4}$. 每一分量(例如 s_z)的取值是 $\pm\frac{1}{2}$. 我们假定这些是非简并的. 所以,$\boldsymbol{s}$ 的分量是作用在二维空间上的算符. 在这空间中一种可能的基矢是由 $\boldsymbol{s}^2$ 和 s_z 的两个本征矢量

$$|+\rangle=\left|\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right\rangle,\ |-\rangle=\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle$$

所构成.

如果采用这样的基矢,我们就容易写出算符 s_x,s_y,s_z 的矩阵表示. 它们是 J_x, J_y, J_z 矩阵[矩阵元由方程(13.28)给定]的特例.

除角动量对易关系的特征之外,$\boldsymbol{s}$ 的分量遵从特殊的关系:

$$s_x^2=s_y^2=s_z^2=\frac{1}{4},\ s_+^2=s_-^2=0.$$

由于

1) 如果 μ_p,s_p,M_p 分别代表质子的磁矩、自旋和质量,则[参看方程(13.75)]

$$\mu_p=g_p\frac{e}{2M_pc}s_p.$$

对中子也有类似的公式. 实验给出 $g_p=5.59,g_n=-3.83$.

$$s_+^2 = (s_x + is_y)^2 = (s_x^2 - s_y^2) + i(s_x s_y + s_y s_x),$$

我们得到

$$s_x s_y + s_y s_x = 0,$$

即算符 s_x, s_y, s_z 是反对易的[1].

引入泡利矩阵 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 是方便的，它由下式定义：

$$s = \frac{1}{2}\sigma. \tag{13.77}$$

具体的形式为：

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

它们的主要性质可从其定义出发得到，而且很容易用其具体形式加于验证，总结如下：

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1. \tag{13.78}$$

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z. \tag{13.79a}$$

$$\sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x. \tag{13.79b}$$

$$\sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y. \tag{13.79c}$$

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i. \tag{13.80}$$

$$\mathrm{Tr}\sigma_x = \mathrm{Tr}\sigma_y = \mathrm{Tr}\sigma_z = 0. \tag{13.81}$$

$$\det\sigma_x = \det\sigma_y = \det\sigma_z = -1. \tag{13.82}$$

由这些我们可导出重要恒等式(问题 13.9)：

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}) + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}), \tag{13.83}$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个任意的矢量[2].

因为 $\boldsymbol{s}$ 是角动量，作转动 $\mathscr{R}_n(\varphi)$ 时，自旋空间中的矢量

---

1) 如果 $AB + BA = 0$，就说这两个算符 A, B 是反对易的.

2) 或者是两个矢量算符，但要求其分量与 σ 的分量对易. 在这种情况下，必须考虑恒等式两边的 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的次序. 例如：

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}).$$

变换由转动算符 $R_u^{(s)}(\varphi)$ 来实现，根据(13.58)，它是

$$R_u^{(s)}(\varphi) \equiv e^{-\frac{1}{2}i\varphi\sigma_u},$$

此处，$\sigma_u \equiv (u \cdot \sigma)$. 对指数作展开，并且将求和分成 σ_u 的偶次项和奇次项，借助如下关系式[参看方程(13.83)]

$$\sigma_u^{2p} = 1, \quad \sigma_u^{2p+1} = \sigma_u,$$

我们得到非常简单的公式：

$$R_u^{(s)}(\varphi) = \cos\frac{1}{2}\varphi - i\sigma_u \sin\frac{1}{2}\varphi. \qquad (13.84)$$

注意，作 2π 转动的转动算符等于-1，这和 § 15 的结果相一致.

根据(13.60)，表述转动 $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ 的算符是

$$R^{(s)}(\alpha\beta\gamma) = e^{-\frac{1}{2}i\alpha\sigma_z}e^{-\frac{1}{2}i\beta\sigma_y}e^{-\frac{1}{2}i\gamma\sigma_z}. \qquad (13.85)$$

它的显示形式可利用得到 $R_u^{(s)}(\varphi)$ 的同一方式来计算，在附录中已给出[见公式(c,74)].

这里所考虑的空间的矢量与普通空间的矢量有某些相似之处. 后者是具有三个分量的几何实体，而且在转动变换下，按完全确定的规律从某一个变成另一个. 这一点在我们现在所考虑的情况中也是如此[变换规律 (13.85)]，不过它们不是三个分量而是两个分量. 我们称它们为**旋量**.

20. $\frac{1}{2}$ 自旋粒子的可观测量和波函数　旋量场

现在考虑自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子. 它的基本变量可以分成二类：轨道变量和内禀或自旋变量. 前者是位置 r 和动量 p 的分量，它们遵从基本的对易关系 ($\hbar=1$)：

$$[r_i, p_j] = i\delta_{ij}.$$

后者是自旋 s 的分量，它们遵从对易关系：

$$[s_i, s_j] = i\varepsilon_{ijk}s_k,$$

此外必须满足补充条件 $s^2 = \frac{3}{4}$.

因为轨道变量和自旋变量对易，粒子的态矢量空间 $\mathscr{E}$ 是轨道空间 $\mathscr{E}^{(0)}$ 和自旋空间 $\mathscr{E}^{(s)}$ 的张量积(参看 § 8.7)：

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}^{(0)} \otimes \mathscr{E}^{(s)}$$

$\mathscr{E}^{(0)}$ 是无自旋粒子的态空间，$\mathscr{E}^{(s)}$ 是上一小节中建立的二维空间.

为了表述 $\mathscr{E}$ 的矢量，通常选择对 r 和 s_z 是对角的表象. 于是，每一矢量 $|\psi\rangle$ 可用波函数

$$\psi(r, \mu) = \langle r\mu|\psi\rangle \tag{13.86}$$

表示，它是连续变量 $r = (x, y, z)$ 和分立变量 μ 的函数，μ 代表 s_z 的本征值，它只取两个值 $\pm \frac{1}{2}$.

单粒子的总角动量是

$$j = l + s. \tag{13.87}$$

系统的基本变量是三个矢量算符 r, p, s 的分量. 显然，j 和这些量满足总角动量所特有的对易关系(13.57)，因为 $l = r \times p$ 以及 r, p 都满足这些关系，而且 l 与 s 对易；s 本身就满足这些关系，又与 $r \cdot p$ 对易.

现在可导出转动算符 $R(\alpha\beta\gamma)$ [方程(13.60)]. 由于 l 和 s 对易，那末它可写成两个对易算符的乘积形式：

$$R(\alpha\beta\gamma) = R^{(s)}(\alpha\beta\gamma)R^{(0)}(\alpha\beta\gamma), \tag{13.88}$$

$R^{(s)}(\alpha\beta\gamma)$ 由方程(13.85)确定，是转动自旋的算符；$R^{(0)}(\alpha\beta\gamma)$ 由

$$R^{(0)}(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha l_z}e^{-i\beta l_y}e^{-i\gamma l_z}$$

确定，它是转动轨道的算符.

作 2π 转动时，$R^{(0)} = 1$ 而 $R^{(s)} = -1$. 所以在这样的转

动下，所有的刃矢变号．然而，所有基本的可观测量对 2π 转动是不变的．由 § 15 的讨论可知，在它们的物理解释上并不产生什么困难．

为了方便，通常取

$$\psi\left(r,\pm\frac{1}{2}\right)=\psi_{\pm}(r),$$

而且把波函数 $\psi(r,\mu)$ 写成二分量波函数的形式：

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_{+}(r)\\ \psi_{-}(r)\end{pmatrix}.$$

对每一 r 值，ψ 代表空间 $\mathscr{E}^{(r)}$ 的一个刃矢，即

$$\langle r|\psi\rangle=\psi_{+}(r)|+\rangle+\psi_{-}(r)|-\rangle. \tag{13.89}$$

换言之，波函数被考虑为旋量场[1]．

将这些考虑推广到有 Z 个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子系统上是容易的．整个系统的态空间是各个粒子态空间的张量积．具体地说，总自旋空间是 2^{Z} 维的，而且是 Z 个自旋空间的张量积．于是对各个自旋可引入一系列泡利矩阵 $\sigma^{(i)}$．自旋的整体转动可通过总自旋

$$S=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{Z}\sigma^{(i)}. \tag{13.90}$$

来表达．

自旋的 2π 整体转动用算符 $(-)^{Z}$ 表述．

1）作转动 $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ 时，旋量场 ψ 变换为

$$\mathscr{R}[\psi]=R\psi=R^{(1/2)}\begin{pmatrix}\psi_{+}(\mathscr{R}^{-1}r)\\ \psi_{-}(\mathscr{R}^{-1}r)\end{pmatrix}.$$

这是(13.88)的直接结果．$R^{(1/2)}$ 是对应 $J=\frac{1}{2}$ 的转动矩阵．我们可将这变换规律和标量场的公式(13.47)作比较．对矢量场也得到类似的公式，不过要用 $R^{(1)}$ 代替 $R^{(1/2)}$（参考 § 21）．

21. 矢量场和自旋粒子

强调一下旋量场概念和我们较为熟悉的矢量场概念之间的相似性是有好处的.

令 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ 是与物理系统相联系的矢量场.例如,它可以是磁场或电场,或我们即将讨论的自旋为 1 的粒子的波函数.

我们来考查 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ 经历转动时是如何变换的. 令 $\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r})$ 是物理系统作整体转动 $\mathscr{R}$ 后的场:

$$\boldsymbol{A}' = \mathscr{R}[\boldsymbol{A}].$$

在点 $\boldsymbol{r}$ 处的场 $\boldsymbol{A}'$ 可由转动 $\mathscr{R}$ 作用在矢量 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_1)$ 上而得到,而 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_1)$ 是在点 $\boldsymbol{r}_1 = \mathscr{R}^{-1}\boldsymbol{r}$ 处的场 $\boldsymbol{A}$,即 [参看方程(13.43)和(13.47)]

$$A_i'(r) = \mathscr{R}_{ij}A_j(\mathscr{R}^{-1}r) \quad (i=x,y,z).$$

因此,绕 Oz 轴转动 α 角,得到[参看方程(13.44)]

$$\boldsymbol{A}' = \mathscr{R}_z(\alpha)[\boldsymbol{A}] \quad \boldsymbol{r}_1 = (x\cos\alpha + y\sin\alpha,$$
$$-x\sin\alpha + y\cos\alpha, z)$$
$$A_x'(r) = A_x(r_1)\cos\alpha - A_y(r_1)\sin\alpha$$
$$A_y'(r) = A_x(r_1)\sin\alpha + A_y(r_1)\cos\alpha$$
$$A_z'(r) = A_z(r_1).$$

具体说,绕 Oz 轴作无穷小转动 ε 时,得出

$$\mathscr{R}_z(\varepsilon)[\boldsymbol{A}] = (1 - i\varepsilon(l_z + s_z))\boldsymbol{A}, \qquad (13.91)$$

其中 l_z 是上面定义的微分算符,而 s_z 是下面定义的算符:

$$s_z\begin{pmatrix} A_x(r) \\ A_y(r) \\ A_z(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -iA_y(r) \\ iA_x(r) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

s_z 将给定点上的每一个场分量变换为同一点上三个场分量的特定线性组合. $\boldsymbol{A}$ 由三个笛卡儿分量 A_x, A_y, A_z 确定, s_z 可用矩阵表述为:

$$s_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

类似地可确定算符 s_x 和 s_y，它们的矩阵表示分别为

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

我们容易证明 s_x, s_y, s_z 满足角动量分量特有的对易关系。用 $\boldsymbol{s}$ 代表这个角动量。计算其平方，得到

$$s^2 = 2.$$

它对应着一个 $s = 1$ 的角动量。按定义，我们称 $\boldsymbol{s}$ 为矢量场的内禀角动量或自旋。

象 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ 这样的场可描写自旋为 1 的粒子。令

$$A_i(r) = A(r, i) \quad (i = x, y \text{ 或 } z),$$

$A(\boldsymbol{r}, i)$ 是既与位置变量有关，又与指标 i 有关的波函数，其中 i 可取三个数值，它构成描写粒子取向的内部变量。两个这种类型的波函数的标量积是

$$\langle B, A \rangle = \sum_i \int B^*(r, i) A(r, i) \mathrm{d}r = \int (\boldsymbol{B}^*, \boldsymbol{A}) \mathrm{d}r. \quad (13.92)$$

象 $\boldsymbol{l}$ 这样的算符只作用在位置变量上，而 $\boldsymbol{s}$ 作用在内部变量 i 上，显然 $\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{s}$ 对易，因为它们作用在不同的变量上。绕 x 轴作无穷小转动的算符由方程(13.91)确定；我们同样可得出绕其它任意轴作无穷小转动的算符；利用定义 (13.55)，我们得到粒子的总角动量[参看方程(13.87)]为

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}.$$

更一般地说，矢量场的任一线性变换可看作是某一线性算符作用的结果，而这算符可表示成三个基本矢量算符

$$\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p} = -i\nabla, \boldsymbol{s}.$$

的函数。尤其是，我们得到重要的恒等式：

$$\mathrm{curl} = \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p}. \tag{13.93}$$

利用 curl 的定义和上面给出的矩阵 s_x, s_y, s_z 的显示形式，很容易证实上式成立。

标量积、转动、或更一般地说线性变换的概念与所选的表象无关。波函数 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},i)$ 代表粒子在某一表象中的动力学状态。在此表象中，内部变量部分的基矢与三个轴 Ox, Oy, Oz 上的单位矢量相对应；这些基矢(即 $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$) 分别是 s_x, s_y, s_z 的本征值为 0 的本征矢量 (参看问题 13.10)。为了更加方便，常常选择这样的表象：基矢是 s_z 的本征矢量，即 $1+\rangle$, $10\rangle$, $1-\rangle$; 它们的本征值分别为 $+1$, 0, -1. 利用 §6 中确定的标准规则，由它们中的一个可得到另一个。在这新表象中，s_x, s_y 和 s_z 由满足关系式(13.28) ($j=j'=1$) 的矩阵来表述，而与矢量场 $\boldsymbol{A}$ 相联系的刃矢 $|A\rangle$ 用波函数

$$A(r,\mu) = A_\mu(r)\quad(\mu=+,0,-),$$

表述。由定义[参方程(13.89)]

$$\langle r|A\rangle = A_+(r)|+\rangle + A_0(r)|0\rangle + A_-(r)|-\rangle.$$

我们得到

$$\begin{aligned} A_+ &= -\frac{\sqrt{2}}{2}(A_x - \mathrm{i}A_y)\\ A_0 &= A_z \\ A_- &= \frac{\sqrt{2}}{2}(A_x + \mathrm{i}A_y). \end{aligned} \tag{13.94}$$

22. 在原子中依赖于自旋的相互作用

由于固有磁矩的存在，使得置于电磁场中的电子的哈密顿量含有一些依赖于自旋的项.

尤其是，当存在磁场 $\mathscr{H}(r)$ 时，我们由对应原理的启示而得到**直接耦合项**：

$$-\mu \cdot \mathscr{H}(r) = -\mu_B \sigma \cdot \mathscr{H},$$

其中，μ 是方程(13.75—76)确定的固有磁矩.

这不是唯一的附加项. 即使对纯静电势，显然也会出现自旋-轨道耦合项，因为在这种势中运动着的电子会"感觉到"一磁场，而这磁场能够与 μ 相互作用. 这种出自经典力学中的论据，对于经验地决定自旋-轨道耦合来说，可以作为一个导引. 可是，因为我们在这里处理的是相对论效应（在 $v \ll c$ 极限下，它趋于 0），因此从电子的相对论方程导出这一项是更可取的. 按 v/c 展开并且保留非零的最低级项，就能做到这一点. 这个问题将在第二十章研究. 在球对称的势 $v(r)$ 中，自旋-轨道相互作用项显然对转动是不变的，所以它与总角动量 j 的三个分量对易. 从相对论性理论得到的自旋-轨道耦合项为

$$\frac{\hbar^2}{2m^2c^2}(l \cdot s)\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}. \tag{13.95}$$

基于同样的理由，复杂原子的 Z 个电子的哈密顿量 H_0，除方程 (13.71) 所示的库仑项外，还包含自旋-轨道项. 这些附加项与总角动量

$$J = L + S$$

对易，但不单独地与 L 和 S 对易，这和 H_0 的其余部分有不同之处. 此外，虽然它们对总能量的贡献相对很小(很重的原子除外)，但它们的存在对原子光谱产生定性的修正，即解除简并，因此不能忽略不计[1]。

置于均匀磁场 $\mathscr{H}$ 中的原子的哈密顿量 H，可如此得出：运用 § 18 的处理，得到无外场时的哈密顿量 H_0，再加上

1) 为了完整起见，还应注意到核磁矩存在引起的修正(超精细结构).

直接的磁相互作用项$-\sum_i \boldsymbol{\mu}^{(i)} \cdot \mathscr{H}$. 如果忽略包含$\mathscr{H}^2$的"抗磁项"[如同我们对方程(13.72)的作法一样],就得到

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}_0 - \frac{e}{2mc}[\mathscr{H} \cdot (\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})]. \qquad (13.96)$$

23. 与自旋有关的核子-核子相互作用

作为另一个依赖于自旋的相互作用的例子，我们来考虑两个核子的相互作用.令M_0是核子质量,$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$是它们的相对位置，$\boldsymbol{p}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2)$是它们的相对动量,$\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1$和$\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$是它们各自的自旋. 质心运动完全可以和相对运动分离. 下面考虑的动力学变量和动力学态全都是指相对运动部分. 轨道角动量为

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p},$$

总自旋为

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2). \qquad (13.97)$$

总角动量为

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}. \qquad (13.98)$$

哈密顿量为

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{M_0} + V.$$

经常提到的具有转动不变性的相互作用有四种类型:

$$V_1(r) \qquad (13.99a)$$

$$V_2(r)(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \qquad (13.99b)$$

$$V_3(r)(\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S}) \qquad (13.99c)$$

$$V_4(r)\left[3\frac{(\sigma_1\cdot r)(\sigma_2\cdot r)}{r^2}-\sigma_1\cdot\sigma_2\right]. \quad (13.99d)$$

后三式中的依赖于自旋的算符是按其传统的形式写出。它们可以有不同的表达形式。(13.97)两边作平方并利用恒等式

$$\sigma_1^2=\sigma_2^2=3,$$

我们就得到

$$\sigma_1\cdot\sigma_2=2S^2-3, \quad (13.100)$$

(13.98)两边作平方,得到

$$L\cdot S=\frac{1}{2}(J^2-L^2-S^2). \quad (13.101)$$

从方程(13.97),得到

$$(S\cdot r)^2=\frac{1}{4}[(\sigma_1\cdot r)+(\sigma_2\cdot r)]^2$$

$$=\frac{1}{4}[(\sigma_1\cdot r)^2+(\sigma_2\cdot r)^2+2(\sigma_1\cdot r)(\sigma_2\cdot r)]$$

$$=\frac{1}{2}[(\sigma_1\cdot r)(\sigma_2\cdot r)+r^2].$$

所以

$$(\sigma_1\cdot r)(\sigma_2\cdot r)=2(S\cdot r)^2-r^2,$$

从而有

$$S_{12}=3\frac{(\sigma_1\cdot r)(\sigma_2\cdot r)}{r^2}-\sigma_1\cdot\sigma_2 \quad (13.102)$$

$$=2\left[3\frac{(S\cdot r)^2}{r^2}-S^2\right], \quad (13.102')$$

算符 S_{12} 称为"张量算符",而相互作用(13.99d)是"张量力"。

如果 V 是(13.99)类型的相互作用的线性组合,那末哈密顿量对转动和反射(作反射时,r 和 p 分别变成$-r$ 和$-p$,自旋算符保持不变)是不变的。后一个不变性将在以后讨论。

现在我们只需注意到如下各点：P 是这样的算符，它作用到 $\psi(\boldsymbol{r})$ 上就得到 $\psi(-\boldsymbol{r})$；P 的本征函数是宇称完全确定的函数。反射不变性意味着 $[H_1P]=0$；如果哈密顿量具有这种性质，那末我们可以在具有确定宇称的函数当中寻找它的本征函数。

相互作用(13.99)是按对称性程度的递减来排列的。

第一种与自旋无关。

第二种分别与 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 对易。它不仅对整体转动是不变的，而且在只有轨道部分或只有自旋部分转动时也是不变的。如果 V 只含(13.99a)和(13.97b)形式的项，则可以在 $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, L_z, S_z 的共同本征函数当中寻找 H 的本征函数，相应的本征值具有 $(2L+1)(2S+1)$ 重转动简并，并且与 L_z, S_z 的本征值无关。

如果 V 还包括(13.99c)的项，那末 H 仍与 $\boldsymbol{L}^2$ 和 $\boldsymbol{S}^2$ 对易，但不再单独地对空间转动或自旋转动保持不变。它的本征函数可以在 $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的共同本征函数当中寻找，而其本征值只有 $(2J+1)$ 重转动简并。

相互作用 (13.99d)是四者当中对称性程度最低的。它仍与 $\boldsymbol{S}^2$ 对易(由(102′)得 $[\boldsymbol{S}^2, S_{12}]=0$)，但不再与 $\boldsymbol{L}^2$ 对易。如果 V 包含着 (13.99d) 的项，则 H 的本征函数可在 P, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的共同本征函数当中寻找。

V. 角动量相加

24. 相加问题

在很多问题中，哈密顿量对转动是不变的，因此它与总角动量 $\boldsymbol{J}$ 的分量对易。于是，我们可以在 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的共同本征函数当中寻找哈密顿量的本征函数。因此列出角动量为

(JM)的矢量是很重要的.

对中心场中的无自旋粒子这种简单情况(第九章)，总角动量就是轨道角动量 l，而且总角动量的本征函数的形式为 $x(r)Y_l^m(\theta\varphi)$. 在普遍情况下，J 是各个角动量之和:

$$J=\sum_i j_i,$$

即它是系统粒子的轨道角动量和自旋之和. 通常我们知道怎样来建造单个角动量的本征矢量. 对 §13 所考虑的两核子系统的情况，我们有

$$J=L+\frac{1}{2}\sigma_1+\frac{1}{2}\sigma_2, \tag{13.103}$$

而且单个角动量的本征函数的形式是 $\psi(r)Y_l^m(\theta\varphi)|\mu_1\rangle|\mu_2\rangle$，其中 μ_1 和 μ_2 取 $\frac{1}{2}$ 或 $-\frac{1}{2}$，依核子 1 和核子 2 的自旋是朝上还是朝下而定. 角动量相加问题是，将这些个别的本征函数作线性组合起来，以便得到总角动量的完备本征函数集.

25. 两个角动量的相加定理

最简单的问题是两个角动量的相加.

假设

$$J=j_1+j_2,$$

其中 j_1 和 j_2 分别是系统 1 和系统 2 的角动量，而这两个系统又构成我们所要研究的总系统. 假定我们已建造了 j_1^2, j_2^2, j_{1z} 和 j_{2z} 的一个完备的共同本征矢量集:

$$|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle, \tag{13.104}$$

α 代表完整地规定动力学态所必需的附加量子数. 或者如果愿意的话，α 也可以是可观测量 A 的本征值，其中 A 与 $j_1^2, j_2^2, j_{1z}, j_{2z}$ 一起构成一个对易可观测量的完备集，它也与 j_1, j_2 的

分量对易. 其次我们假定矢量(13.104)对角动量 1 和 2 来说构成一标准基. 每一组量子数 $(\alpha j_1 j_2)$ 对应着和不同数偶 $(m_1 m_2)$ 一样多的矢量. 正如前面 § 6 所作的,重复应用 $j_{1\pm}$ 或 $j_{2\pm}$, 可从这些矢量中的一个得到另一个. 而且这些矢量张成一个 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 维的子空间 $\mathscr{E}(\alpha j_1 j_2)$.

注意, $A, \boldsymbol{j}_1^2, \boldsymbol{j}_2^2$ 与 $\boldsymbol{J}$ 对易. 所以我们可在这些算符的本征矢量当中寻找 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征矢量, 而且如此造出的各个子空间 $\mathscr{E}(\alpha j_1 j_2)$ 可以分别地作处理. 我们来考虑一特定的 $\mathscr{E}$, 为简化符号, 用 $|m_1 m_2\rangle$ 代表这子空间的矢量 $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$; 用 $|JM\rangle$ 代表这空间中的总角动量本征矢量(就是假定 J 和 M 足以确定它们,我们将证明情况确是如此).

在这一小节, 我们决定数偶 (JM) 的可能数值和它们各自的简并度. 在 § 27 将讨论本征矢量的构成问题.

这问题的求解以下面两点为基础:

(a) 每一个矢量 $|m_1 m_2\rangle$ 都是 J_z 的本征矢量,其本征值为

$$M = m_1 + m_2.$$

证明: 因为 $J_z = j_{1z} + j_{2z}$,所以

$$J_z|m_1 m_2\rangle = (m_1 + m_2)|m_1 m_2\rangle.$$

(b) 对于 J 的每一值,相应有某一数 $N(J)$, 它是总角动量的 $(2J+1)$ 个本征矢量的线性无关系列数. 重复应用 J_+ 或 J_-, 每一系列中的矢量都可从其中的一个得到另一个, 这些矢量分别与 M 的 $(2J+1)$ 个可能取值对应: $-J, -J+1, \cdots, +J$.

若用 $n(M)$ 代表本征值 M 的简并度,就有[1]

---

1) 相同的论证已在三维谐振子问题中(§ 12.15)使用过.

$$n(M) = \sum_{J \geqslant |M|} N(J)$$

从而

$$N(J) = n(J) - n(J+1). \qquad (13.105)$$

只要对M的每一可能值都确定了 $n(M)$,就能求得 $N(J)$. 由(a)可知,$n(M)$就是符合 $M = m_1 + m_2$ 条件的数偶$(m_1 m_2)$的数目:

$$M = m_1 + m_2$$

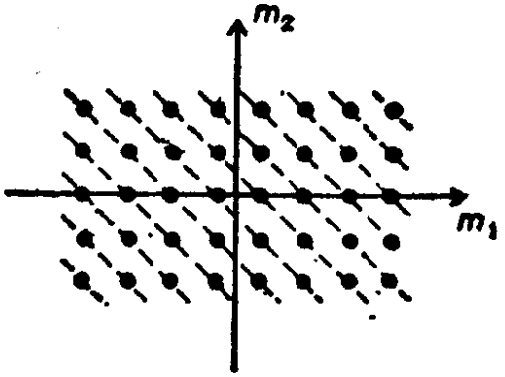


图 13.3 找到 $M = m_1 + m_2$ 的可能值以及它们出现的次数 $n(M)\left(j_1 = \frac{7}{2};\ j_2 = 2\right)$.

为了找出这个数，利用图 13.3 的图解是方便的. 在其中,每一数偶 (m_1, m_2) 由一个横坐标为 m_1，纵坐标为 m_2 的点来代表. $n(M)$就是斜线 $x + y = M$ 上的点数,对 $j_1 > j_2$ 的情况,我们得到

$$n(M) = \begin{cases} 0 & \text{当 } |M| > j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 + 1 - |M| & \text{当 } j_1 + j_2 \geqslant |M| \geqslant |j_1 - j_2| \\ 2j_2 + 1 & \text{当 } |j_1 - j_2| \geqslant |M| \geqslant 0. \end{cases}$$

将这些代入(13.105),得到

$$N(J) = 1 \text{ 当 } J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \cdots, |j_1 - j_2|.$$

由此得出基本的相加定理：**在矢量** $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ $(\alpha, j_1, j_2$ **固**

定；m_1, m_2 变化)张成的 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 维空间中，

(i) **J 的可能值是**[1]

$$j_1+j_2, j_1+j_2-1, \cdots, |j_1-j_2|;$$

(ii) **J 的每一值对应且只对应一个系列的 $(2J+1)$ 个总角动量本征矢量** $|JM\rangle$.

26. 应用及举例

我们首先指出相加定理的一个明显的推论：由任意数目的角动量相加而成的总角动量可取整数或半整数值，这依半整数角动量的个数是偶数或奇数而定.

我们就要看到，下面的所有例子都有这种性质.

第一例. 考虑两个 $\frac{1}{2}$ 自旋的相加. 此时态空间是四维的，总自旋可取两个值：0，1.

$S=0$ 恰好对应矢量 $|00\rangle$，我们称这自旋态为**单态.**

$S=1$ 对应三个矢量 $|11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle$，它们是**三重态**的三个矢量.

把分别作用在单态和三重态上的投影算符 P_0 和 P_1 写成 $\boldsymbol{S}^2$ 或 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 的函数是容易的. 由于 $\boldsymbol{S}^2=S(S+1)$，故 $\boldsymbol{S}^2$ 的本征值是 0(单态)或 2(三重态). 由此[参看恒等式(13、100)]得到

$$P_0=1-\frac{1}{2}\boldsymbol{S}^2=\frac{1}{4}(1-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$$

$$P_1=\frac{1}{2}\boldsymbol{S}^2=\frac{1}{4}(3+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2).$$

注意，

---

1) 换言之，J 的所有取值都使 j_1+j_2+J 为整数，而且 j_1, j_2, J 构成某三角形的边.

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = P_1 - 3P_0. \qquad (13.106)$$

第二例. 考虑一个自旋为 1/2 的粒子. 它的轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 和自旋耦合成总角动量 j. j 可以取两个值:

$$j = l + \frac{1}{2}, \quad j = l - \frac{1}{2},$$

若 $l = 0$ (s态), 则除外, 此时 j 只能取一个值 $j = \frac{1}{2}$. 因此, j 可取从 1/2 至∞的所有半整数值,而且每一个值都和**宇称相反**的两项(以及两个系列的 $(2j+1)$ 个矢量)相对应.

最后一例, 我们考虑 § 23 讨论过的二核子系统. 现在必须耦合三个角动量: 一个轨道角动量和二个自旋 [方程 (13.98)]. 首先耦合自旋得到总自旋 $\boldsymbol{S}$,它有两个可能值: 0 和 1. 然后 $\boldsymbol{S}$ 与相对坐标的角动量 $\boldsymbol{L}$ 耦合, L 取所有正整数值或 0. 每一数偶 (LS) 对应 $(2S+1)(2L+1)$ 个矢量, 由这些矢量的线性组合可得到总角动量的本征矢量. 从相加定理得出 J 的下列数值:

单态: $S = 0$ $J = L$

三重态: $S = 1$ $\begin{cases} J = L-1, L, L+1 & \text{若} L \neq 0 \\ J = 1 & \text{若} L = 0. \end{cases}$

我们使用如下的光谱学符号来表述这样构成的光谱项:

L 的数值用 § 9.6 中约定的大写字母来表示; 字母的左上角标是 $2S+1$ (总自旋的多重性), 而右下角标是 J. 例如 ${}^3D_2$代表 $L = 2$、自旋三重态、总角动量 $J = 2$ 的项. J 的每一值对应 4 项[总共有 $4(2J+1)$ 个矢量]. 但 $J = 0$ 除外, 它只有两项. 下面列出开头四个 J 值对应的各个光谱项:

$J = 0$		${}^3P_0$		${}^1S_0$
$J = 1$	${}^3S_1$	${}^3D_1$	${}^3P_1$	${}^1P_1$
$J = 2$	${}^3P_2$	${}^3F_2$	${}^3D_2$	${}^1D_2$

$$J=3 \quad {}^3D_3 \quad {}^3G_3 \quad {}^3F_3 \quad {}^1F_3$$

同样的符号通常也用在上面考虑过的自旋为 1/2 的粒子上．此时，轨道角动量用小写字母代表(大写字母仍用来表示几个粒子系统的总角动量)，左上角标已简略．开头四个 j 值对应的光谱项为：

$$j=\frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \quad \frac{5}{2} \quad \frac{7}{2}$$

$$s_{\frac{1}{2}}p_{\frac{1}{2}} \quad p_{\frac{3}{2}}d_{\frac{3}{2}} \quad d_{\frac{5}{2}}f_{\frac{5}{2}} \quad f_{\frac{7}{2}}g_{\frac{7}{2}}$$

27. 总角动量的本征矢量　克累布施-戈登系数

由相加定理可知，每一数偶 (JM) 对应总角动量的一个本征矢量 $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$．为了明确地规定这矢量，我们取它的模方为 1，而且用适当的约定来固定它的相位(下面我们还要回来讨论这问题)．与 $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ 类似，在子空间 $\mathscr{E}(\alpha j_1 j_2)$ 中，矢量 $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ 构成一种正交基．从一种基变到另一种基是通过么正变换

$$|\alpha j_1 j_2 JM\rangle=\sum_{m_1 m_2}|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\langle\alpha j_1 j_2 m_1 m_2|\alpha j_1 j_2 JM\rangle. \tag{13.107}$$

来实现的．

这个变换的系数有一个重要性质：**它们与α无关，只与** j_1, j_2, J, m_1, m_2, M **有关**．在子空间 $\mathscr{E}(\alpha j_1 j_2)$ 中，$|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ 是标准表象的基矢，此时 $\boldsymbol{j}_1$ 和 $\boldsymbol{j}_2$ 的分量用与 α 无关的矩阵来表述[参看方程(13.28)]．由此可知：表述 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的矩阵也与 α 无关，而且它们的共同本征矢量的分量

$$\langle\alpha j_1 j_2 m_1 m_2|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$$

也有同样的性质．因此，这些都具有纯几何的特性，只与所涉

及的角动量及其取向有关，而与系统 1 和 2 的构成角动量的那些动力学变量的物理本性无关．我们称这变换系数为克累布施-戈登（C-G）系数或矢量相加系数，并写成 $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$．利用这符号，(13.107)变成

$$|\alpha j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle . \quad (13.108)$$

为了完全确定 C-G 系数，还要固定矢量 $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ 的相位．对于某一 J 值所对应的 $(2J+1)$ 个矢量的相对相位，我们采用 §6 的标准约定．于是 $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ 被确定到只剩下一个依赖于 J 的相位尚待确定．为了确定它，我们要求 $|\alpha j_1 j_2 JJ\rangle$ 在 $|\alpha j_1 j_2 j_1 J - j_1\rangle$ 上的分量是正实数，即

$$\langle j_1 j_2 j_1 m_2 | JJ\rangle \geqslant 0, \quad (13.109)$$

C-G 系数的很多性质都可直接从其定义导出．

从相加定理看出，为了使 $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle$ 不为 0，必须同时有(**选择定则**)

$$m_1 + m_2 = M, \quad |j_1 - j_2| \leqslant J \leqslant j_1 + j_2 .$$

我们在下面证明，应用实系数的递推关系，能从系数 $\langle j_1 j_2 j_1 J - j_1 | JJ\rangle$ 得出给定 J 值的所有 C-G 系数．因为此系数是实的，所以其余的也是实数．

另外，由于 C-G 系数是么正变换的系数它们满足**正交关系**:

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J'M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \quad (13.110a)$$

$$\sum_{JM} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | JM\rangle = \delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'} . \quad (13.110b)$$

在最简单的情况下，我们可以直接决定线性组合(13.108)．当 $J = j_1 + j_2$ 和 $M = J$ 时，我们有

$$|\alpha j_1 j_2 j_1 + j_2 j_1 + j_2\rangle = |\alpha j_1 j_2 j_1 j_2\rangle .$$

让 $J_- = j_{1-} + j_{2-}$ 重复作用到此式的两边，我们可构造

出和 $J=j_1+j_2$ 相对应的全部 $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$. 此后,我们构造出系列 $J=j_1+j_2-1$ 的全部矢量,从 $M=J$ 对应的那个开始,它由相位条件(13.109)以及它与 $|\alpha j_1 j_2 j_1+j_2\ \ j_1+j_2-1\rangle$ 正交的性质所完全决定,重复应用 J_-,就作出所有其余的矢量. 如此等等.

在两个$\frac{1}{2}$自旋相加的情况下,总自旋的本征矢量可按此方式从单个自旋的本征矢量$|++\rangle$,$|+-\rangle$,$|-+\rangle$和$|--\rangle$得到. 结果如下表:

	$S=1$	$S=0$
$M=1$	$\|11\rangle=\|++\rangle$	
$M=0$	$\|10\rangle=\frac{\|+-\rangle+\|-+\rangle}{\sqrt{2}}$	$\|00\rangle=\frac{\|+-\rangle-\|-+\rangle}{\sqrt{2}}$
$M=-1$	$\|1-1\rangle=\|--\rangle$	

当相加比较大的角动量时,需要用比较复杂的计算方法. 可建立各种递推关系[方程(C.18—20)]. 例如,J_+或J_-作用到(13.108)两边就得到[见方程(C.19)和(C.18)]:

$$\begin{aligned}&\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\,\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM+1\rangle\\&=\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}\,\langle j_1 j_2 m_1-1 m_2|JM\rangle\\&\quad+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}\,\langle j_1 j_2 m_1 m_2-1|JM\rangle\end{aligned}\tag{13.111}$$

$$\begin{aligned}&\sqrt{J(J+1)-M(M-1)}\,\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM-1\rangle\\&=\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)}\,\langle j_1 j_2 m_1+1 m_2|JM\rangle\\&\quad+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)}\,\langle j_1 j_2 m_1 m_2+1|JM\rangle.\end{aligned}\tag{13.112}$$

当 $M=J$ 时,(13.111)的左边为零. 于是可用此式得出所有的系数$\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JJ\rangle$,它们是其中某个(例如$\langle j_1 j_2 j_1 J-j_1|JJ\rangle$)的各种倍数. 利用矢量 $|\alpha j_1 j_2 JJ\rangle$ 的归一化条件

$$\left(\sum_{m_1 m_2}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JJ\rangle^2 = 1\right)$$

和相位条件(13.109)，这些系数就完全决定了．重复应用递推关系(13.112)，可推出所有其余的C-G系数．这是拉卡所采用的计算C-G系数的方法，它集中地体现在公式（*C*.21）中[1]．

除了已经提到的那些性质外，C-G系数还有极重要的**对称性质**，它使制表大为方便．C-G系数的这些重要性质可在附录C(第Ⅰ节)中找到，在那里也有比较简单的系数表．

28. 应用：二核子系统

作为利用角动量相加处理具有转动不变性的系统的例子，我们再次讨论§23的二核子系统．我们将研究含有各种形式的自旋依赖势的薛定谔方程．现在的讨论只限于(13.99)类型的那些势．

假定势的形式为

$$V = V_1(r) + V_2(r)(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2).$$

在这种情形下，哈密顿量与 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 对易，其本征函数是自旋函数 $|S\mu\rangle$ 与轨道角动量(lm)完全确定的、r 的函数的乘积．由(13.106)可知，当 $S = 0$ 或 1 时，势是不相同的．因此，这种薛定谔方程的求解等价于解无自旋粒子在中心势内的两个薛定谔方程．每一个方程与 S 的两个可能值之一对应．如果 $S = 0$，本征函数的轨道部分是无自旋粒子在势 $V_1 - 3V_2$ 中

---

1) 为了将这种计算进行到底，必须利用拉卡提出的恒等式：

$$\sum_s \frac{(a+s)!(b-s)!}{(c+s)!(d-s)!} = \frac{(a+b+1)!(a-c)!(b-d)!}{(c+d)!(a+b-c-d+1)!}$$

其中 a,b,c,d 是整数而且 $a \geq c \geq 0$，$b \geq d \geq 0$；s 取从 $-c$ 至 $+d$ 的所有整数值．

的轨道部分；如果 $S=1$，则是粒子在势 V_1+V_2 中的轨道部分。本征值问题约化为对每一数偶(LS)求解径向方程。

如果势的形式是

$$V=V_1(r)+V_2(r)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)+V_3(r)(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}),$$

则哈密顿量不再分别地对空间转动和自旋转动具有不变性。但由于它仍与 $\boldsymbol{L}^2$ 及 $\boldsymbol{S}^2$ 对易，我们可寻找 $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_Z 的共同本征函数。每一组 (LSJ) 对应一类函数，它对角度 θ, φ 和自旋变量的依赖性是完全确定的，通过 C-G 系数，可明显地表述为

$$\Psi^M_{LSJ}\equiv F(r)\mathscr{Y}^M_{LSJ}$$

$$\mathscr{Y}^M_{LJ}=\sum Y^m_L(\theta,\varphi)|S\mu\rangle\langle LSm\mu|JM\rangle. \quad (13.113)$$

因此，$^1P_1$ 态的三个函数是“角度有关”的，$\mathscr{Y}^M_{101}=Y^M_1|00\rangle$$(M=0,\pm1)$。$^3D_2$ 态的 5 个函数是

$$\mathscr{Y}^M_{212}=\sum_{m\mu}Y^m_2|1\mu\rangle\langle 21m\mu|2M\rangle\ (M=0,\pm1,\pm2).$$

根据(13.100)和(13.101)，哈密顿量作用于这类函数时就有

$$H\Psi^M_{LSJ}=\left[-\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{L(L+1)}{r^2}+V_{LSJ}\right]\Psi^M_{LSJ},$$

其中，

$$V_{LSJ}(r)=V_1(r)+[2S(S+1)-3]V_2(r)+\frac{1}{2}[J(J+1)-L(L+1)-S(S+1)]V_3(r)$$

解薛定谔方程的问题就约化为解径向方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{L(L+1)}{r^2}+V_{LSJ}(r)\right]F(r)=EF(r).$$

的问题．于是，我们就有一个类似于无自旋粒子在中心势中运动的问题，唯一的差别在于：对于不同的三重态 (LSJ)，"有效的中心势" $V_{LSJ}(r)$ 是不同的[1]．

最后一例．我们考虑形如

$$V = V_C(r) + V_T(r)S_{12}.$$

的势．由于"张量"力的存在，哈密顿量不再与 $\boldsymbol{L}^2$ 对易，但仍和 $\boldsymbol{S}^2$ 对易，也和 §23 中引入的"宇称"算符 P 对易．因此，可在 P，$\boldsymbol{S}^2$，$\boldsymbol{J}^2$，J_z 的共同本征函数当中寻找 H 的本征函数，即在总角动量 (JM)，宇称和 s 值完全确定的函数当中寻找．

如果 $S=0$，必然有 $L=J$（因而 $P=(-)^J$），而且本征函数必然具有 $F(r)\mathscr{Y}^M_{J0J}$ 的形式．再者，由于 $\boldsymbol{S}|00\rangle=0$，从 (13.102′) 得到

$$S_{12}\mathscr{Y}^M_{J0J}\equiv S_{12}Y^M_J(\theta,\varphi)|00\rangle = 0.$$

因此，$F(r)$ 满足角动量为 J 的粒子在势 $V_C(r)$ 中的径向方程．

如果 $S=1$ 和 $P=(-)^J$，必然有 $L=J$；而且和以前一样，本征函数的"角度依赖"完全由下式确定：

$$\Psi^M_{J1J} = F(r)\mathscr{Y}^M_{J1J}.$$

可以证明（问题 13.11）：$S_{12}\mathscr{Y}^M_{J1J} = 2\mathscr{Y}^M_{J1J}$．于是，$F(r)$ 满足角动量为 J 的粒子在势 $V_C(r)+2V_T(r)$ 中的径向方程．

如果 $S=1$ 和 $P=(-)^{J+1}$，则 L 的可能值只能是 $J+1$ 和 $J-1$（$J=0$ 除外；此时只有 $L=1$）．所以本征函数的形式为

$$\Psi \equiv F_{J-1}(r)\mathscr{Y}_- + F_{J+1}(r)\mathscr{Y}_+,$$

1）对 $S=0$ 的情况，自旋-轨道力消失，因而对于任意的 L 和 J，都有

$$V_{LoL} = V_1 - 3V_2.$$

类似地，如 $S=1$ 和 $L=J$，"有效势"与 L 无关：

$$V_{L1L} = V_1 + V_2 - V_3.$$

为了简化书写，这里令 $\mathscr{Y}_{\pm}\equiv\mathscr{Y}^{M}_{J\pm1\,1J}$. S_{12} 作用在 $\mathscr{Y}_{+}$ 或 $\mathscr{Y}_{-}$ 上所得到的结果仍是这两个函数的组合（问题 11）. 因此，$(H-E)\Psi$ 也是这两个函数的线性组合，其系数是 r 的函数. 写出 $(H-E)\Psi=0$ 就相当于使这两个系数为 0，从而得到 $F_{J-1}(r)$ 和 $F_{J+1}(r)$ 的两个二阶微分方程组.

作为一个例子，我们写出 $J=1$ 时的耦合径向方程组. 在研究氘核时就遇到这一情况. 波函数是 $^3S_1$ 态和 $^3D_1$ 态的混合，可取如下的形式：

$$\Psi\equiv\frac{1}{r}u_S(r)\mathscr{Y}^{M}_{011}+\frac{1}{r}u_D(r)\mathscr{Y}^{M}_{211}.$$

由于(问题 13.11)

$$\begin{aligned}
&S_{12}\mathscr{Y}^{M}_{011}=\sqrt{8}\,\mathscr{Y}_{211} \qquad S_{12}\mathscr{Y}^{M}_{211}=\sqrt{8}\,\mathscr{Y}^{M}_{011}-2\mathscr{Y}^{M}_{211},\\
&\boldsymbol{L}^2\mathscr{Y}^{M}_{011}=0 \qquad\qquad \boldsymbol{L}^2\mathscr{Y}^{M}_{211}=6\mathscr{Y}^{M}_{211},
\end{aligned}\tag{13.114}$$

而且因为

$$H\equiv-\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r+\frac{\hbar^2\boldsymbol{L}^2}{M_0r^2}+V_C(r)+V_T(r)S_{12},$$

所以方程 $(H-F)\Psi=0$ 等价于

$$\begin{aligned}
&\left[\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+E-V_C(r)\right]u_S=\sqrt{8}\,V_T(r)u_D\\
&\left[\frac{\hbar^2}{M_0}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{6}{r^2}\right)+E+2V_T(r)-V_C(r)\right]u_D\\
&\quad=\sqrt{8}\,V_T(r)u_S.
\end{aligned}\tag{13.115}$$

29. 三个或多个角动量相加　拉卡系数“3nj”符号

§28 中研究过的二核子系统提供了一个例子：系统的总角动量是三个角动量之和[见方程(13.103)]. 我们没有求助于复杂的技巧就能研究这个特别简单的例子. 现在来说明一

般情况下的三个角动量相加问题.

设系统由角动量分别为 j_1, j_2 和 j_3 的子系统 1,2 和 3 组成. 总角动量为

$$J = j_1 + j_2 + j_3.$$

现在,角动量相加问题就是: 在 $(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)$ 个矢量

$$|\alpha j_1 j_2 j_3 m_1 m_2 m_3\rangle$$

所张成的空间中找出总角动量的本征矢量,这些矢量有完全确定的量子数 α, j_1, j_2, j_3. 在这里 α 也象在 §25 中一样确定,它在下面不起什么作用,索性略去. 有几种方式能构造出角动量为(JM)的矢量.

(i) 我们可以耦合 j_1 和 j_2 (图 13.4a),从而得到角动量 $J_{12} = j_1 + j_2$,然后耦合 J_{12} 和 J_3 得到 J. 按这种方式,我们得到 j_1^2, j_2^2, j_3^2, J_{12}^2 和 J_z 的共同本征矢量:

$$|(j_1 j_2) J_{12}, j_3; JM\rangle$$

$$= \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ M_{12} m_3}} |j_1 j_2 j_3 m_1 m_2 m_3\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J_{12} M_{12}\rangle \langle J_{12} j_3 M_{12} m_3 | JM\rangle. \tag{13.116}$$

(ii) 我们可以耦合 j_2 和 j_3 (图 13.4b),从而得到角动量 $J_{23} = j_2 + j_3$,然后耦合 j_1 和 J_{23} 得到 J. 按这种方式,我们得到 j_1^2, j_2^2, j_3^2, J_{23}^2, J^2 和 J_z 的共同本征矢量:

$$|j_1, (j_2 j_3) J_{23}; JM\rangle$$

$$= \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ m_1 M_{23}}} |j_1 j_2 j_3 m_1 m_2 m_3\rangle \langle j_2 j_3 m_2 m_3 | J_{23} M_{23}\rangle \langle j_1 J_{23} m_1 M_{23} | JM\rangle. \tag{13.117}$$

(iii) 我们可以耦合 j_1 和 j_3,从而得到 J_{13},然后耦合 J_{13} 和 j_2 得到 J.



a) $j_1 + j_2 = J_{12}$ $J_{12} + j_3 = J$ b) $j_2 + j_3 = J_{23}$ $j_1 + J_{23} = J$

图 13.4 三个角动量的不同耦合方式

因此，为了构成总角动量，我们可在三个不同的基矢集中间作出选择．在很多问题中，若能从一个集变换到另一个集是有好处的．这里所涉及的变换是幺正变换．例如，我们有

$$|j_1,(j_2j_3)J_{23};JM\rangle = \sum_{J_1} |(j_1j_2)J_{12},j_3;JM\rangle\langle(j_1j_2)J_{12},j_3J|j_1,(j_2j_3)J_{23}J\rangle \tag{13.118}$$

显然这幺正变换的系数与 α 无关，其理由和 C-G 系数不依赖于 α 的理由一样．J_+ 或 J_- 作用于(13.118)两边，容易看出：它们也与 M 无关，这样就只和 6 个角动量 $j_1, j_2, j_3, J_{12}, J_{23}$ 和 J 有关．

不直接使用这些系数而使用拉卡系数 W 或维格纳的“6j”符号是更方便的，其定义为：

$$\begin{aligned}\langle(j_1j_2)J_{12},j_3J|j_1,(j_2j_3)J_{23}J\rangle &= \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}\\ &\quad\times W(j_1j_2Jj_3;J_{12}J_{23})\\ &= (-)^{j_1+j_2+j_3+J}\\ &\quad\times\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}\begin{Bmatrix}j_1j_2J_{12}\\ j_3JJ_{23}\end{Bmatrix}.\end{aligned}$$

从它们的定义可知，W 系数只不过是对四个 C-G 系数的指标“m”求和．除了最简单的自变量之外，直接计算这些系数是很繁琐的，因为首先要计算很多 C-G 系数，然后用这些系数构成极复杂的式子．拉卡成功地得到了切实可用的 W 的表达

式[见公式(C.36)]. 对大多数常见的自变量而言，W系数是有表可查的.

"$6j$" 符号和W系数的差别仅仅表现在它们的符号上. "$6j$"符号有极重要的对称性质. 这是我们对它感兴趣的主要原因.

W和"$6j$"的主要性质已汇集在附录C的第II节中.

上面对三个角动量相加的处理可以推广到n个角动量相加的情况，

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2 + \cdots + \boldsymbol{j}_n. \qquad (13.119)$$

通过两个角动量的耦合: $\boldsymbol{j}_i + \boldsymbol{j}_k = \boldsymbol{J}_{ik}$，我们把问题约化为$(n-1)$个角动量的相加，(13.119)右边的矢量$\boldsymbol{j}_i$和$\boldsymbol{j}_k$已由它们的和$\boldsymbol{J}_{ik}$代替. 重复这运算，我们把问题约化为$(n-2)$个角动量相加，如此继续下去. 于是，通过引入$(n-2)$个中间角动量，我们完成了$n$个角动量的相加，而且按此方式可构成总角动量的一种基矢集.

在此方式中，可构成若干个不同的基矢集. 我们已经看到，当$n=3$时，这样的基矢集有三个. 可以证明，在一般情况下有$\frac{1}{2}n!$个. 利用实系数的幺正变换，可实现从一个集到另一个集的变换. 不难看出，此变换系数既不依赖于α也不依赖于$\boldsymbol{J}$的分量J_Z的本征值M，它们仅仅依赖于量子数J，$j_1, \cdots, j_n$和$(n-2)$个双指标的量子数(例如J_{ik})，其中J_{ik}决定基矢集中的某一中间角动量的大小，总计有$1+n+2(n-2)=3(n-1)$个量子数"j". 这系数可书写成"$3(n-1)j$"符号的形式，它是三个角动量相加时引入的"$6j$"符号的推广. "$3(n-1)j$"符号是对$2(n-1)$个C-G系数的指标"m"的求和. 四个角动量相加时出现的"$9j$"符号的主要性质见附录C的第III节.

VI. 不可约张量算符[1]

30. 标量算符的表示

如果可观测量是转动不变的，则它的每一本征值的子空间也是转动不变的. 在 § 17 中，已经提到过这一重要性质. 在那里所处理的可观测量虽是哈密顿量，但所论及的性质显然对任何标量可观测量也是成立的.

正如现在就要证明的，更一般来说，即使不是对角的标量可观测量，也可以在某一标准表象中用极其简单的矩阵表示出来.

令 $|\tau JM\rangle$ 是标准表象 $\{\mathbf{J}^2 J_Z\}$ (§6的符号)的基矢，s 是一标量算符(不一定是可观测量). 根据假定，有

$$[\boldsymbol{J}, S] = 0.$$

由此可知：矢量 $S|\tau' J' M'\rangle$ 象 $|\tau' J' M'\rangle$ 一样，也是角动角为 $(J'M')$ 的矢量，并且与任一不同角动量的矢量正交. 所以，如果 $J \neq J'$ 或 $M \neq M'$，则矩阵元 $\langle \tau JM|S|\tau' J' M'\rangle = 0$. 此外，因为 J_+ 与 s 对易，所以当 $J = J'$ 和 $M = M'$ 时，我们得到

$$\begin{aligned}
&\langle \tau JM|S|\tau' JM\rangle \\
&= [J(J+1) - M(M-1)]^{-1/2}\langle \tau JM|SJ_+|\tau' JM-1\rangle \\
&= [J(J+1) - M(M-1)]^{-1/2}\langle \tau JM|J_+S|\tau' JM-1\rangle \\
&= \langle \tau JM-1|S|\tau' JM-1\rangle.
\end{aligned}$$

这就证明了矩阵元与 M 无关. 这两个性质可概括为

$$\langle \tau JM|S|\tau' J' M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} S^{(J)}_{\tau\tau'}, \qquad (13.120)$$

---

1) 关于不可约张量代数以及它在量子力学的角动量理论中的应用，已有系统论述，可参看 U. Fano 和 G. Racah, *Irreducible Tensorial Sets* (Academic Press Inc., New York, 1959).

其中 $S_{\tau\tau'}^{(J)}$ 是只依赖于 J, τ 和 τ' 的量. 当 s 是可观测量时，矩阵 $S_{\tau\tau'}^{(J)}$ 是厄密的，而且可以对角化.

31. 不可约张量算符定义

现在将(13.120)推广到一类我们称之为不可约张量算符上. 它不是转动不变的，但对转动有特别简单的变换规律.

张量算符概念是矢量算符概念的推广.

我们从张量的定义讲起. 设有一个 n 维空间 $\mathscr{E}_n$，在一个转动中，$\mathscr{E}_n$ 的矢量仍线性地变换为 $\mathscr{E}_n$ 的矢量：每一个转动都与 $\mathscr{E}_n$ 的一个线性算符相联系. 按定义，$\mathscr{E}_n$ 的矢量是有 n 分量的张量. 因此，旋量和普通空间的矢量分别是 2 和 3 分量张量；§ 6 规定的子空间 $\mathscr{E}(\tau J)$ 的矢量是有 $(2J+1)$ 个分量的张量；量子系统的刃矢空间中的刃矢是具有无限个分量的张量.

如果我们在 $\mathscr{E}_n$ 中选择一个基矢集，则上面定义的每一种张量都由它的 n 个分量来表述；转动可用作用在这些分量上的 $n \times n$ 矩阵来表述. 因此，笛卡儿坐标系所描写的普通空间矢量的转动由 § 10 规定的矩阵 $\mathscr{R}$ 给定. 类似地，如果我们在 $\mathscr{E}(\tau J)$ 中建立一个标准表象，则 $\mathscr{E}(\tau J)$ 的任一张量 $|u\rangle$ 可用它的 $(2J+1)$ 个分量 $u_M \equiv \langle \tau J M | u \rangle$ 来表述；作转动 $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ 时，它的分量变换成 u'_M，利用转动矩阵 $R^{(J)}_{(\alpha\beta\gamma)}$ (§ 16) 得到

$$u'_M = \sum_{M'} R^{(J)}_{MM'}(\alpha\beta\gamma) u_{M'}. \qquad (13.121)$$

再举一例. 我们考虑由矢量 $\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{W}$ 的各分量相乘而得到的 9 个量 $ViWj(ij = 1, 2, 3)$. 这些量是某一张量(我们写为 $\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}$)的 9 个分量. 作转动时它们变换为

$$[\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}]'_{ij} \equiv V'_i W'_j = \mathscr{R}_{ik}\mathscr{R}_{jl} V_k V_l$$

$$= \mathscr{R}_{ik}\mathscr{R}_{jl}[\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}]_{kl}.$$

能够构造出多种多样的张量，**不可约张量**在其中享有特殊的地位. 按定义，如果空间 $\mathscr{E}_n$ 对转动是不可约的，则在此空间中定义的张量就是不可约张量.

普通空间的矢量、旋量、空间 $\mathscr{E}(\tau J)$ 的矢量都是不可约张量.

另一方面，张量 $\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}$ 是可约的. 定义 $\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}$ 的那个 9 维空间是三个不可约不变子空间（对转动而言）的直和，这些子空间的维数分别为 1,3,5. 所以，$\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}$ 在这些子空间上的投影是不可约张量，它们是（不管相乘常数）：标量积 $\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W}$、矢量 $\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{W}$ 和不可约的 5 分量张量[在转动时，这个张量象二次调和多项式一样变换(参看 § 13.10)[1]].

同样，§25 中的 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 维空间中的矢量是具有 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 个分量的可约张量. 利用相加定理可将它分解为若干个不可约部分.

在概念上，从张量过渡到张量算符和从矢量过渡到矢量算符是一样的.

如果作转动时，n 个算符是线性地从一个变为另一个，而且其规律和 $\mathscr{E}n$ 空间的 n 个线性无关矢量的变换相同，则这些算符是一个 n **维张量算符**的分量[2]. 这 n 个分量的线性变

---

1) 转动矩阵显然与这张量所选择的表象有关. 在其分量为

$$\frac{1}{2}(V_1W_2+V_2W_1),\ \frac{1}{2}(V_2W_3+V_3W_2),\ \frac{1}{2}(V_3W_1+V_1W_3),$$
$$V_1W_1-V_2W_2,\ 2V_3W_3-V_1W_1-V_2W_2.$$

的表象中，它们的变换类似于如下的线性无关多项式的变换，

$$xy,\ yz,\ zx,\ x^2-y^2,\ 2z^2-x^2-y^2.$$

2) 因此，这变换规律和 $\mathscr{E}_n$ 的一个矢量在 n 个基矢上的分量的变换规律有所不同. 同样，矢量算符 K 的分量的变换规律(13.54)不同于矢量 $\boldsymbol{V}$ 在同一种基矢上的分量的变换规律(13.43). 特别要注意到规律(13.122)和(13.121)之间的差别.

换给出 n 个新的算符，可以把它们考虑为同一张量算符在另一表象中的分量。如果空间 $\mathscr{E}n$ 是不可约的，则称这张量算符是不可约的。

矢量算符是一种特殊类型的不可约张量算符。

如果 $\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{W}$ 是两个矢量算符，则 9 个算符 V_iW_j 是一个可约张量算符的分量，此张量算符是三个不可约张量算符(即标量 $\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W}$、矢量 $\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{W}$ 和一个张量算符(例如，由注释给出的 5 个分量所确定)的直和。

张量算符完全可用它在给定表象中的分量对转动的变换规律来**定义：如果作转动时，$(2k+1)$ 个算符 $T_q^{(k)}(q=-k,-k+1,\cdots k)$ 按下面的规律变换，**

$$RT_q^{(k)}R^{-1}=\sum_{q'}T_{q'}^{(k)}R_{q'q}^{(k)}. \tag{13.122}$$

则它们是 k 阶不可约张量算符 $T^{(k)}$ 的标准分量。

这样的变换规律与 $|kq\rangle$ 的变换规律一样，而 $|kq\rangle$ 的 $(2k+1)$ 维空间(对转动是不可约)中的标准表象的基矢，它的变换规律为

$$R|kq\rangle=\sum_{q'}|kq'\rangle R_{q'q}^{(k)}.$$

如果对任一无穷小转动，(13.122)都成立，则对于任意的转动，它也成立。对于无穷小转动，R 由(13.55)给定；矩阵 $R^{(k)}$ 容易由其定义 (13.64) 得到，而且规律 (13.122) 等价于 $T_q^{(k)}$ 与总角动分量的如下对易关系：

$$[J_\pm,T_q^{(k)}]=\sqrt{k(k+1)-q(q\pm1)}\;T_{q\pm1}^{(k)} \tag{13.123a}$$

$$[J_z,T_q^{(k)}]=qT_q^{(k)}. \tag{13.123b}$$

可以和(13.23—25)相比较的关系式(13.123)给出不可约张量算符 $T^{(k)}$ 的另一种定义(和上面作的严格等价)。

如果 $T_q^{(k)}$ 代表物理量，则它们对 2π 转动必须保持不变(参看 § 15)．因此 k **是整数**．我们以后只考虑整数阶的不可约张量算符．

容易证明：$(2k+1)$个算符

$$S_q^{(k)} \equiv (-)^q T_{-q}^{(k)\dagger}$$

满足关系式(13.123)(问题 13.16)，因此是 k 阶不可约张量算符 $S^{(k)}$ 的标准分量．按定义，$S^{(k)}$ 和 $T^{(k)}$ 互为厄密共轭，

$$S^{(k)} = T^{(k)\dagger}$$

(由于 k 是整数，显然厄密共轭是互逆运算)．

标量是零阶不可约张量算符．矢量算符是 1 阶不可约张量算符：如果 K_x，K_y，K_z 是一个矢量算符的笛卡儿分量，则它的标准分量为

$$K_1^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(K_x + iK_y),\quad K_0^{(1)} = K_z,$$

$$K_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(K_x - iK_y). \qquad (13.124)$$

[可以看出，这里的系数与(13.94)的不同]

$(2k+1)$ 个球谐函数 $Y_q^k(\theta\varphi)$ $(q = -k, \cdots +k)$ 当作算符时，它们是 k 阶不可约张量算符 $\boldsymbol{Y}^{(k)}$ 的标准分量．

32. 不可约张量算符的表示　维格纳-爱卡特定理

不可约张量算符的最重要的性质都可由维格纳-爱卡特定理得到，这定理是：

在标准表象 $\{J^2 J_z\}$ **中，基矢由** $|\tau JM\rangle$ **表述，** k **阶不可约张量算符** $T^{(k)}$ **的第** q **个标准分量的矩阵元** $\langle \tau JM | T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle$ **等于** C-G **系数**

$$\langle J' k M' q | JM \rangle$$

和一个不依赖于 M，M'，q **的量的乘积．**

于是，

$$\langle \tau JM | T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \langle \tau J \| T^{(k)} \| \tau' J' \rangle \times \langle J' k M' q | JM \rangle, \quad (13.125)$$

其中，$\langle \tau J \| T^{(k)} \| \tau' J' \rangle$ 是一个称为**约化矩阵元**的量. 它对于不同张量算符是不一样的，而且与指标 τ, J, τ', J' 有关(因子 $1/\sqrt{2J+1}$ 只是为了方便而引入的).

为了证明这定理，我们考虑 $(2k+1)(2J'+1)$ 个矢量 $T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle$ $(q = -k, \cdots, +k;\ M' = -J', \cdots, +J')$，以及这些矢量的如下线性组合

$$|\sigma J'' M''\rangle = \sum_{M'q} T_q^{(k)} |\tau' J' M'\rangle \langle J' k M' q | J'' M''\rangle.$$

应用 C-G 系数的正交关系，得到[方程(13.110b)]

$$T_q^{(k)} |\tau' J' M'\rangle = \sum_{J''M''} |\sigma J'' M''\rangle \langle J' k M' q | J'' M''\rangle. \quad (13.126)$$

注意，诸矢量 $T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle$不必是线性独立的，某些$|\sigma J'' M''\rangle$可以为 0.

从(13.123a)和(13.124)得到

$$\begin{aligned} J_+ T_q^{(k)} |\tau' J' M'\rangle &= [J_+, T_q^{(k)}] |\tau' J' M'\rangle + T_q^{(k)} J_+ |\tau' J' M'\rangle \\ &= \sqrt{k(k+1) - q(q+1)}\, T_{q+1}^{(k)} |\tau' J' M'\rangle \\ &\quad + \sqrt{J'(J'+1) - M'(M'+1)} \\ &\quad \times T_q^{(k)} |\tau' J' M' + 1\rangle, \end{aligned}$$

因而

$$\begin{aligned} & J_+ |\sigma J'' M''\rangle \\ &= \sum_{M'q} T_q^{(k)} |\tau' J' M'\rangle \{\sqrt{k(k+1) - q(q-1)} \\ &\quad \times \langle J' k M' q - 1 | J'' M''\rangle \end{aligned}$$

$$+\sqrt{J'(J'+1)-M'(M'-1)}\langle J'kM'$$
$$-1q|J''M''\rangle\}.$$

由 C-G 系数的递推关系(13.111)可知，上式右边的括号{…}等于

$$\sqrt{J''(J''+1)-M''(M''+1)}\langle J'kM'q|J''M''+1\rangle,$$

因而，矢量 $|\sigma'J''M''+1\rangle$ 出现于

$$J_+|\sigma J''M''\rangle=\sqrt{J''(J''+1)-M''(M''+1)}$$
$$\times|\sigma J''M''+1\rangle.$$

用同样的方式能证明：

$$J_-|\sigma J''M''\rangle=\sqrt{J''(J''+1)-M''(M''-1)}|\sigma J''M-1\rangle$$
$$J_z|\sigma J''M''\rangle=M''|\sigma J''M''\rangle.$$

从这三式，我们得出结论：对应同一J''值的$(2J''+1)$个矢量$|\sigma J''M''\rangle$具有如下性质：

(i) 或者它们全是零，或者

(ii) 它们是角动量为$(J''M'')$的(不归一)本征函数；它们之间可按标准的约定而从其中一个得到另一个。

所以，标量积$\langle\tau JM|\sigma J''M''\rangle$全为零，但$J''=J$和$M''=M$的那些情形(如果它们存在的话)除外，就是说，有$(2J+1)$个标量积$\langle\tau JM|\sigma JM\rangle$不为零，但它们与$M$无关。

根据(13.126)，矩阵元$\langle\tau JM|T_q^{(k)}|\tau'J'M'\rangle$为

$$\langle\tau JM|T_q^{(k)}|\tau'J'M'\rangle=\sum_{J''M''}\langle\tau JM|\sigma J''M''\rangle$$
$$\times\langle J'kM'q|J''M''\rangle.$$

证毕。

在维格纳-爱卡特定理的最重要推论中有算符$T_q^{(k)}$的**选择定则：**

只有同时满足条件

$$q = M - M' \tag{13.127}$$

$$|J - J'| \leqslant k \leqslant J + J'. \tag{13.128}$$

矩阵元 $\langle \tau JM | T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle$ **才不等于零.** 这两个定则是(13.125)式右边的C-G系数的直接结果. 在实践中，后面那个定则是最有用的. 通常把它表述为如下的推论形式[1]:

如果 $A^{(k)}$ **是** k **阶不可约张量算符的分量，则当** k **不满足不等式** $|J - J'| \leqslant k \leqslant J + J'$ **时，** $A^{(k)}$ **在角动量为** J, J' **的两矢量之间的矩阵元必须为零.**

33. 应用

在原子物理和核物理中，特别是在 β 衰变中，在电磁辐射以及一般的角关联问题中，维格纳-爱卡特定理有很多应用.

我们以原子核发射电磁辐射(γ 发射)为例. 设原子核从激发态 $\mathcal{N}^*$ 跃迁到基态 N 时，发射 γ 射线:

$$\mathcal{N}^* \to \mathcal{N} + \gamma.$$

用 J 和 J' 分别表示原子核 N 和 N^* 的自旋(总角动量). 在 γ 发射理论中已证明: 发射极化为 ν、方向为 $\Omega = (\theta, \varphi)$ 的 γ 射线的几率幅正比于矩阵元

$$\langle \tau JM | H(\Omega, \nu) | \tau' J' M' \rangle,$$

它是某一算符 $H(\Omega, \nu)$ 在始终[2]两态矢之间的矩阵元. $H(\Omega, \nu)$ 可按球谐函数展开(这里不详述[3])，它只取两种类型(宇称相反) 的不可约张量算符的级数形式: 电的和磁的多极矩. 电 2^l 极矩 $Q^{(l)}$ 是 l 阶不可约张量算符，其宇称为 $(-)^l$; 磁 2^l 极矩 $M^{(l)}$ 是 l 阶不可约张量算符，其宇称为 $(-)^{l+1}$. 常见的

1) 在这一推论中的分量 $A^{(k)}$ 不必是标准分量，即标准分量的任意线性组合也有同样的性质.

2) 参看 § 21.31.

3) 参看 J. Blatt 和 V. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics* (Wiley, New York, 1952), 第 12 章及附录 B.

多极矩有：

(i) 磁矩(按通常的含义)，它是磁偶极矩 $\boldsymbol{M}^{(1)}$；

(ii) 四极矩(按通常的含义)，它是电四极矩 $\boldsymbol{Q}^{(2)}$.

根据张量算符的选择定则，只有满足下面条件的多极矩才有不为零的贡献：

$$|J-J'|\leqslant l\leqslant J+J' \tag{13.129}$$

(也有字称选择定则，我们在这里未作考虑)．另外，由维格纳-爱卡特定理可知，满足条件(13.129)的多极矩分量 $Q_m^{(l)}$ 的贡献正比于 C-G 系数 $\langle J'lM'm|JM\rangle$；只需知道比例系数(即约化矩阵元 $\langle\tau J\|\boldsymbol{Q}^{(l)}\|\tau'J'\rangle$) 就可以求出这些贡献的大小．

因此，知道了符合选择定则的多极矩的约化矩阵元，就可求得跃迁几率．实际上，多极展开是迅速收敛的，而且重要的贡献只来自最低级的一个或两个多极矩．

在计算静电磁场中原子或原子核的能级移位时，也会遇到偶宇称多极矩 ($\boldsymbol{M}^{(1)}$、$\boldsymbol{Q}^{(2)}$，……)．因此，通过原子与均匀磁场的耦合，可测定它的磁矩；通过原子与不均匀电场耦合，可测定它的电四极矩．实际上，所测量的是这些算符对被考虑的核状态的平均值，即矩阵元

$$\langle\tau JM|M_m^{(1)}|\tau JM'\rangle,\ \langle\tau JM|Q_m^{(2)}|\tau JM'\rangle,\text{等等．}$$

或者，是对角约化矩阵元(其实是同一回事)

$$\langle\tau J\|M^{(1)}\|\tau J\rangle,\ \langle\tau J\|Q^{(2)}\|\tau J\rangle,\text{等等．}$$

注意，若 $J=0$，则磁矩必为零；如 $J=0$ 或 $\frac{1}{2}$，则四极矩必为零．一般地说，如果 $2J<l$，则自旋为 J 的原子核的 2^l 极矩必为零．

练 习 与 问 题

1.从 $(2j+1)$ 个矢量

$$|\tau j\mu\rangle\ (\mu=-j,-j+1,\cdots,+j)$$

之间的关系式(13.24)和(13.25)出发，证明关系式(13.26)和(13.27)．

2.证明：在 J_x 和 J_z 是实矩阵(因而是对称)的任一表象中，J_y 是纯虚矩阵(因而是反对称的).

(注意，标准表象属于这个范畴)

3.证明：如果一个算符与角动量矢量的两个分量对易，则它也与第三个分量对易.

4.设 l 为某一粒子的轨道角动量，θ 和 φ 是它的极坐标角；P 是"宇称算符"，它的效用是以原点为中心作一反射，P 对函数 $F(\theta,\varphi)$ 的作用由下式定义：

$$PF(\theta,\varphi) = F(\pi - \theta,\varphi + \pi).$$

证明 $[P,l] = 0$，进而证明球谐函数有完全确定的、只依赖于量子数 l 的宇称，决定其宇称.

5.设 r，r' 是普通空间中的两个矢量；$\Omega\equiv(\theta,\varphi)$，$\Omega'\equiv(\theta,'\varphi')$ 分别是它们的极坐标角；l，l' 是相应的角动量算符. 令 $\alpha(0\leqslant\alpha\leqslant\pi)$ 是 r 和 r' 之间的夹角：$r\cdot r' = rr'\cos\alpha$. 勒让德多项式 $P_l(\cos\alpha)$ 含有 $\cos\alpha$，因而是 r 和 r' 的极坐标角的函数. 证明 $P_l(\cos\alpha)$ 满足偏微分方程.

$$l^2P_l(\cos\alpha) = l'^2P_l(\cos\alpha) = l(l+1)P_l(\cos\alpha)$$
$$(l_i + l_i')P_l(\cos\alpha) = 0 \qquad (i = x,y,z).$$

由此再导出相加定理：

$$\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\cos\alpha)\equiv Y_l^0(\alpha)Y_l^0(0) = \sum_{m=-l}^{+l}(-)^mY_l^m(\Omega)Y_l^{-m}(\Omega').$$

6.u，v，w 是三个单位矢量并构成右手笛卡儿坐标系. 证明无穷小转动(第 III 节的符号)

$$\hat{\mathscr{R}}\equiv\mathscr{R}_v^{-1}(\varepsilon)\mathscr{R}_u^{-1}(\varepsilon)\mathscr{R}_v(\varepsilon)\mathscr{R}_u(\varepsilon)$$

与 $\mathscr{R}_w^{(-\varepsilon^2)}$ 的差只含高于 ε^2 的高阶项. 从方程(13.58)出发，直接计算无穷小转动算符 $\hat{R}$ 至 ε^2 阶，并验证对易关系 $[J_u,J_v] = iJ_w$.

7.利用对易关系(13.56)，验证两个矢量算符 $\boldsymbol{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 的标量积 $\boldsymbol{A}\cdot\mathbf{B} = A_xB_x + A_yB_y + A_zB_z$ 与总角动量的所有分量对易.

8.证明：

$$\exp(-i\beta J_y) = \exp\left(\frac{1}{2}i\pi J_x\right)\exp(-i\beta J_z)\exp\left(-\frac{1}{2}i\pi J_x\right).$$

由此再导出：矩阵元 $\langle JM|\exp(-i\beta J_y)|JM'\rangle$ 是以 $\sin\frac{\beta}{2}$ 和 $\cos\frac{\beta}{2}$ 为变数的 $2J$ 次多项式.

9.证明恒等式

$$(\sigma\cdot A)\ (\sigma\cdot B) = (A\cdot B) + i\sigma\cdot(A\times B).$$

[$\sigma\equiv(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ 是泡利矩阵，A 和 B 是与 σ 对易的矢量算符，但 A 和 B 彼此不一定对易].

10.设 s 是自旋为 1 的粒子的内禀角动量 ($s^2 = s(s+1) = 2$).

(i) 证明：对任一分量 $S_u\equiv(s\cdot u)$，都有

$$s_u^3 = s_u\exp(-i\varphi s_u) = 1 - i\sin\varphi s_u - (1-\cos\varphi)s_u^2,$$

并求出转动矩阵 $R^{(1)}(\alpha\beta\gamma)$ 的显示表达式.

(ii) 令 $|z\rangle$ 是模方为 1 而且 $S_z|z\rangle = 0$ 的矢量，而$|x\rangle$和$|y\rangle$分别为$|z\rangle$绕 Oy 轴转动 $\frac{\pi}{2}$ 和绕 Ox 轴转动 $\left(-\frac{\pi}{2}\right)$得到的矢量. 证明下列关系式：

$$s_x|x\rangle = 0 \quad s_x|y\rangle = i|z\rangle \quad s_x^2|y\rangle = |y\rangle$$
$$s_x|z\rangle = -i|y\rangle \quad s_x^2|z\rangle = |z\rangle.$$

以及由 x, y, z 的循环置换所得到的那些关系式. 利用这些进一步证明 $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ 构成一种正交基；而且在这种基中，S_x,S_y,S_z 的矩阵正是 §21 所给定的.

(iii) 证明

$$\langle i|R(\alpha\beta\gamma)|j\rangle = \mathscr{R}_{ij}(\alpha\beta\gamma)\ (i,j = x,y\text{ 或 }z)$$

(符号和 §10，§14 的相同)

11.令 S 是二核子系统的总自旋，证明算符 $Q\equiv(S\cdot r)^2/r^2$ 是投影算符. 证明张量算符 $S_{12}\equiv 2[3Q - S^2]$ 满足恒等式 $S_{12}^2 = 4S^2 - 2S_{12}$，而且它的本征值只能是 0,2,−4. 决定 Q 和 S_{12} 作用在 §28 引入的角变数和自旋的函数 $\mathscr{Y}_{lsJ}^{M}$ 上的结果.

[如采用缩写符号

$$\mathscr{Y}^{(0)}\equiv\mathscr{Y}_{J0J}^{M},\ \mathscr{Y}_0^{(1)}\equiv\mathscr{Y}_{J1J}^{M},\ \mathscr{Y}_\pm^{(1)}\equiv\mathscr{Y}_{J\pm1J}^{M},$$

可得到

$$Q\mathscr{Y}^{(0)} = 0 \qquad (2J+1)Q\mathscr{Y}_+^{(1)} = J\mathscr{Y}_+^{(1)} + \sqrt{J(J+1)}\mathscr{Y}_-^{(1)}$$

$$Q\mathscr{D}_0^{(1)} = \mathscr{D}_0^{(1)} \quad (2J+1)Q\mathscr{D}_-^{(1)} = \sqrt{J(J+1)}\mathscr{D}_+^{(1)} + (J+1)\mathscr{D}_-^{(1)}.$$

12.考虑自旋为 1/2 的粒子，证明：在给定轨道角动量 l 的态空间中，算符

$$\frac{l+1+\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2l+1} \text{ 和 } \frac{l-\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2l+1}$$

分别为投影到总角动量为 $j=l+\frac{1}{2}$，$j=l-\frac{1}{2}$的状态上的投影算符.

13.两个相等的角动量 $j_1=j_2=j$ 相加时，不利用 C-G 系数的对称性质就能证明：对换 m_1 和 m_2 时，总角动量的本征函数或者是对称的(不变)或者是反对称的[乘以 (-1)]，而且这种对称性质只依赖于 J. 再证明：它们可以是对称的，也可以是反对称的，这要依 $(-1)^{2j+J}$ 等于 1 或 -1 而定.

14.我们用 $J^2\{A\}$ 代表算符 A 和角动量分量的函数，形式如下：

$$J^2\{A\} \equiv [J_x,[J_x,A]] + [J_y,[J_y,A]] + [J_z,[J_z,A]].$$

证明：如果 $T^{(k)}$ 是 k 阶不可约张量算符，则它的分量满足关系式

$$J^2\{T_q^{(k)}\} = k(k+1)T_q^{(k)}.$$

15.设 a_r，$a_r^\dagger$ $(r=1,2)$ 是二维的各向同性谐振子的湮灭和产生算符：

$$[a_r,a_s] = [a_r^\dagger,a_s^\dagger] = 0 \quad [a_r,a_s^\dagger] = \delta_{rs}.$$

我们规定

$$S = \frac{1}{2}\left[a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2\right]$$

$$J_1 = \frac{1}{2}[a_2^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_2] \quad J_2 = \frac{1}{2}i[a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2]$$

$$J_3 = \frac{1}{2}\left[a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2\right].$$

其中，J_1，J_2，J_3 可考虑为某一矢量算符 J 的笛卡儿分量[注意，沿用 § 12.14 的符号，则 $L=2J_z$]，

(i) 证明：J 满足角动量特有的对易关系 $J\times J = iJ$，而且

$$J^2 = S(S+1) \quad (\because [S,J]=0).$$

(ii) 进而将 J 考虑为系统的角动量，分别用 $j(j+1)$ 和 m 代表 J^2 和 J_3 的本征值. 证明: J^2 和 J_3 构成一种对易的可观测量的完备集，而且 j 可取所有 $\geqslant 0$ 的整数和半整数值，即

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{2}{2}, 2, \cdots, \infty.$$

再证明: 矢量 $[(j+m)!(j-m)!]^{-1/2}(a_1^\dagger)^{j+m}(a_2^\dagger)^{j-m}|0\rangle$ 构成标准表象 $\{J^2, J_3\}$ 的基矢.

(iii) 证明: $a_1^\dagger$ 和 $a_2^\dagger$ 分别是 $\frac{1}{2}$ 阶的不可约张量算符的 $\frac{1}{2}$ 分量和 $\left(-\frac{1}{2}\right)$ 分量;而且 $Ra_r^\dagger R^{-1}(r=1,2)$ 能表示成 $a_1^\dagger$ 和 $a_2^\dagger$ 的线性组合，其中 R 代表转动算符:

$$R = \exp(-i\alpha J_3)\exp(-i\beta J_2)\exp(-i\gamma J_3)$$

决定组合系数.

(iv) 利用上面的结果证明维格纳公式(C.72)和附录 C 给出的 $R^{(j)}$ 矩阵的主要性质(合成和分解公式除外).

16.证明: 如果 $(2k+1)$ 个算符 $T_q^{(k)}(q=-k, \cdots\cdots +k)$ 满足对易关系(13.123)，则 $(2k+1)$ 个算符 $S_q^{(k)} \equiv (-1)^q T_{-q}^{(k)+}$ 也有同样的性质.

17.证明: 积分

$$\int Y_{l_1}^{m_1}(\theta,\varphi)Y_{l_2}^{m_2}(\theta,\varphi)Y_{l_3}^{m_3}(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega$$

正比于 $(-1)^{m_3}\langle l_1 l_2 m_1 m_2 | l_3 - m_3\rangle$，而比例系数与 m_1, m_2, m_3 无关. 决定此系数[利用问题 13.5 的相加定理].

18.证明: 看来是 r 的函数的"张量"算符

$$S_{12} \equiv 2\left[3\frac{(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})^2}{r^2} - \boldsymbol{S}^2\right]$$

只与角度 θ, φ 有关(通过 2 阶**球谐函数**). [我们得到

$$\begin{aligned} S_{12} &= \left(\frac{24\pi}{5}\right)^{1/2}\{S_+^2 Y_2^2 - (S_-S_z + S_zS_-)Y_2^1 + \sqrt{\frac{2}{3}}(3S_z^2 - \boldsymbol{S}^2)Y_2^0 \\ &\quad + (S_+S_z + S_zS_+)Y_2^{-1} + S_+^2 Y_2^{-2}\} \\ &= \left(\frac{24\pi}{5}\right)^{1/2}(\mathbf{S}^{(1)}\cdot\mathbf{Y}^{(2)}). \end{aligned}$$

其中，S_{11} 是 2 阶不可约张量算符 $\boldsymbol{S}^{(2)}$ 和 $\boldsymbol{Y}^{(2)}$ 的标量积[按定义(C.87)的含义，其中 $\boldsymbol{S}^{(2)}$ 和 $\boldsymbol{Y}^{(2)}$ 分别与自旋、轨道变量有关.]

19.设 K_u 代表矢量算符 $\boldsymbol{K}$ 在给定方向上的分量，J_u 是总角动量 $\boldsymbol{J}$ 在同一方向上的分量. 又设 $|\tau Ja\rangle$，$|\tau Jb\rangle$ 是同一子空间 $\mathscr{E}(\tau J)$ 的两个刃矢(§ 16 的定义). 证明:

$$\langle \tau Ja|K_u|\tau Jb\rangle = \langle \tau Ja|J_u|\tau Jb\rangle \frac{\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K}\rangle}{J(J+1)},$$

其中，$\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K}\rangle$ 代表标量算符 $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K}$ 在这子空间上的平均值:

$$\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K}\rangle = \langle \tau Ja|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K}|\tau Ja\rangle.$$

[就是说，$\boldsymbol{K}$在 $\mathscr{E}(\tau J)$ 中的矩阵元与它的"投影" $J(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K})/J(J+1)$ 的矩阵元相同.]

第十四章　全同粒子体系　泡利不相容原理

1. 量子理论中的全同粒子

如果两个粒子的物理性质严格地相同，以致不可能用实验观察来区分它们，就称它们为全同粒子．**全同粒子的不可区别性**在古典力学中无关紧要，在量子力学中却引起一个严重的问题．

作为一个明确的例证，我们考虑两个全同粒子的碰撞，以及它们的全同性对理论的影响程度．

如果系统服从古典力学规律，则它们在任何时刻的力学状态由粒子 1 的位置和动量 $\xi^{(1)}=(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{p}^{(1)})$ 以及粒子 2 的位置和动量 $\xi^{(2)}=(\boldsymbol{r}^{(2)},\boldsymbol{p}^{(2)})$ 决定；而系统的演变则由与这十二个变量有关的某个哈密顿函数决定，

$$H(\xi^{(1)},\xi^{(2)})=H(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{p}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(2)},\boldsymbol{p}^{(2)}).$$

若势能 $V(\boldsymbol{r})$ 只与两粒子之间的距离有关，而粒子的质量是m，则

$$H(\xi^{(1)},\xi^{(2)})=\frac{\boldsymbol{p}^{(1)2}}{2m}+\frac{\boldsymbol{p}^{(2)2}}{2m}+V(|\boldsymbol{r}^{(1)}-\boldsymbol{r}_2^{(2)}|). \quad (14.1)$$

因为粒子是全同的，所以当两粒子置换时，也就是把粒子 1 的力学状态赋予粒子 2、把粒子 2 的状态赋予粒子 1 时，不会引起系统的力学性质的改变．具体来说，函数H对这种交换是不变的：

$$H(\xi',\xi'')=H(\xi'',\xi'). \quad (14.2)$$

另一方面，任何时刻系统的状态只能确定到变量 1 和 2

仍可置换的程度;在给定时刻对系统作一次观测,只能指明一个粒子在某状态 ξ',另一个在别的状态 ξ'',而不能确定是哪个粒子在哪个状态. 这一点似乎造成了困难,但我们将看到,这只是表面上的困难. 假设在 t_0 时刻一个粒子在状态 ξ'_0 中,另一个在状态 ξ''_0 中. 这里有二种可能性: 或者是第一个粒子在 ξ'_0 中,或者是第二个粒子在 ξ'_0 中. 然而这两种都对应着相同的物理状态,因为 H 具有(14.2)式的对称性质. 在 t_0 时刻分别处于 ξ'_0 和 ξ''_0 的粒子的运动规律 $\xi'(t)$ 和 $\xi''(t)$ 在这两种情形下是相同的. 把从 ξ'_0 开始的粒子称为粒子 1,从 ξ''_0 开始的称作粒子 2,或者相反,这仅仅是一种约定而已.

如果二粒子系统服从量子力学的规律,就不这么简单了. 以上的分析的起始部分可以一字一字地重复,两粒子的全同性再次表现在置换它们的力学变量时哈密顿量是不变的[(14.2)式],而且可以更普遍地说,在这种置换下任何物理可观察量都是不变的. 同古典力学中的一样,这在确定系统的状态时将引起某些含混,现在这种含混更为深刻,因而其后果也更为严重.

假定在碰撞前对系统的观测表明,一个粒子处在状态 $\psi'_0(r)$,而另一个在状态 $\psi''_0(r)$[1]. 实际上,这些函数描述的是局限在空间不同区域的波包. 因此函数

$$\begin{aligned}\psi_0(r^{(1)},r^{(2)}) &= \psi'_0(r^{(1)})\psi''_0(r^{(2)})\\ \bar{\psi}_0(r^{(1)},r^{(2)}) &= \psi''_0(r^{(1)})\psi'_0(r^{(2)})\end{aligned} \tag{14.3}$$

是线性独立的,起始的观测不能确定系统究竟是在 ψ_0 态还是在 $\bar{\psi}_0$ 态. 更精确地说,这种观测就是同时测定一组相容的变量,而函数 ψ_0 和 $\bar{\psi}_0$ 就是与这种测量所给出的一组数据相对

1) 我们假定这两个全同粒子是无自旋的,这样可突出古典和量子理论的差别.

应的两个本征函数. 因为这些函数的任意线性组合 $\lambda\phi_0 + \mu\bar{\phi}_0$ 都有相同的性质，所以起始的观测不能判定是哪个线性组合代表系统的起始状态，我们称这是**交换简并**.

现在来考察系统随时间的演变. 令 $\phi(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, t)$ 和 $\bar{\phi}(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, t)$ 是薛定谔方程的解，它们分别与起始状态 ϕ_0 和 $\bar{\phi}_0$ 相对应. 因为哈密顿量具有(14.2)式的对称性质，所以通过置换自变量 $\boldsymbol{r}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{r}^{(2)}$，就可以从这两个解中的一个得出另一个. 在这种置换中引入对称的和反对称的函数是方便的，

$$\phi^{(S)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi + \bar{\phi}) \quad \phi^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi - \bar{\phi}),$$

它们是薛定谔方程分别对应于起始条件

$$\phi_0^{(S)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0 + \bar{\phi}_0) \quad \phi_0^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0 - \bar{\phi}_0)$$

的解. 如果起始时系统的状态是

$$\Psi_0 = \alpha\phi_0^{(A)} + \beta\phi_0^{(S)} \quad (|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1),$$

则在以后的时刻 t，其状态将是

$$\Psi(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, t) = \alpha\phi^{(A)} + \beta\phi^{(S)}, \tag{14.4}$$

在 $\boldsymbol{r}'$ 找到一个粒子，而在 $\boldsymbol{r}''$ 找到另一个粒子的几率密度 $P(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')$ 是[1)]

$$P(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'') = |\Psi(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|^2 + |\Psi(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')|^2 \tag{14.5}$$

$$= 2[|\alpha|^2|\phi^{(A)}(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)})|^2 + |\beta|^2|\phi^{(S)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|^2]. \tag{14.6}$$

要使这个式子与 α 和 β 无关，必须有：

$$|\phi^{(A)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')| = |\phi^{(S)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|.$$

只要两粒子没有发生相互作用，而且两个波包 $\phi'(\boldsymbol{r})$ 和 $\phi''(\boldsymbol{r})$

---

1) 为了得到第二行的式子，我们利用了函数 $\phi^{(A)}$ 和 $\phi^{(S)}$ 的对称性质：$\Psi(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') = -\alpha\phi^{(A)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'') + \beta\phi^{(S)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')$.

没有重迭，则这个等式对所有的 r' 和 r'' 都成立．一般说来，当这些条件之一不满足时，等式就不再正确．我们只要考虑几个特殊情形就很容易确信这一点．例如，假设两个粒子并不相互作用 $[V(r^{(1)}-r^{(2)})=0]$，并且它们相向地自由运动．那末 ψ 是两个自由波包的乘积：$\psi=\psi'(r^{(1)},t)\psi''(r^{(2)},t)$．在某一段时间内，波包发生重迭，这就是说，在空间的一个区域中，函数 $\psi'(r)$ 和 $\psi''(r)$ 都不为零．若 r 是这个区域中的一点，则

$$|\psi^{(S)}(r,r)|=\sqrt{2}\,|\psi'(r)\psi''(r)|\neq 0,$$

而对于任意一个 r 有

$$|\psi^{(A)}(r,r)|=0 \tag{14.7}$$

另一个有趣的例子是在中心势场中的散射问题，它将在 §9 中叙述．在那里我们将证明：$\psi^{(A)}$ 的散射振幅是奇次球面分波的迭加，而 $\psi^{(S)}$ 的散射振幅是偶次球面分波的迭加．一般说来，这两个振幅的绝对值不相同，因此微分截面决定性地依赖于比例 $|\alpha|^2/|\beta|^2$．

总之，交换简并的存在是真正困难的根源，因为它妨碍我们对碰撞后系统的测量结果的统计分布作出精确的理论预言．

这个困难在引入下述的**对称化假设**后得以克服，这个假设完全确定了线性组合(14.3)式中的系数 α 和 β，并且使它本身容易被实验验证．

两个全同粒子体系的力学状态对于此两粒子的置换，或者是完全对称的 $(\alpha=0,\ \beta=1)$，或者**是完全反对称的** $(\alpha=1,\beta=0)$．

这两种可能性实际上都存在，至于是那一种则取决于所考虑的粒子的特性．在本章第 I 节中，我们给出它的一般形式以及它的主要推论．第 II 节中专讲应用．

在论述过程中要用到置换的一些基本性质，它们列在附录D的§14中[1)].

I. 对称化假设

2. 同类粒子和对称表象

考虑有N个粒子的体系，描述第i个粒子的力学量是它的坐标$\boldsymbol{r}^{(i)}$，动量$\boldsymbol{p}^{(i)}$和自旋$\boldsymbol{s}^{(i)}$的函数以后将这三个矢量合起来用$\xi^{(i)}$表示．给定了第i个粒子的自旋数值，我们就可以建立其力学状态空间$\mathscr{F}^{(i)}$．整个系统的力学状态空间$\mathscr{E}$是张量积

$$\mathscr{E} = \mathscr{F}^{(1)} \otimes \mathscr{F}^{(2)} \otimes \cdots \otimes \mathscr{F}^{(N)}. \tag{14.8}$$

按定义，如果两个粒子有相同的自旋就称它们是**同类的**(同类并不必然地意味全同)．一个粒子的可观察量和态矢量将和另一个粒子的可观察量和态矢量是一一对应的．因此，就可能交换这两个同类粒子．更普遍地讲，如果n个粒子是同类的，则这n个粒子的$n!$个置换是确定的运算，其中每一个都相应于$\mathscr{E}$空间的某个算符．我们现在着手建立这些置换算符．为简化讨论，假定$n = N$.

考虑N个同类粒子中的一个．ξ是它的一组基本可观察量，$\mathscr{F}$是它的态矢量空间．令q是$\mathscr{F}$中的对易可观察量的完全集，$|q_\kappa\rangle$是q的一组本征基矢，对应的本征值是q_κ(κ是一个或一组指标，用来区别不同的本征值)．于是

$$\langle q_\kappa | q_\mu \rangle = \delta_{\kappa\mu} \tag{14.9}$$

例如，q可以是$\boldsymbol{r}$的三个分量x、y、z和自旋沿z方向的分量

---

1) 附录D中汇集的群论基础对理解本章来说并不是必需的．其中§14的内容对于其它部分是独立的，它所用到的群论概念只是与群有关的某些定义(群，类，不可约子群等)，这些在附录D的§2中叙述.

s_z. 系统中的每一个粒子 $a(a=1,2,\cdots N)$ 都有它自己的对易可观察量集合 $q^{(a)}$. 很明显，集合 $Q\equiv(q^{(1)},q^{(2)},\cdots q^{(N)})$ 是 $\mathscr{S}$ 空间中的对易可观察量的一个完全集，而且 $\mathscr{S}^{(1)}$, $\mathscr{S}^{(2)},\cdots\mathscr{S}^{(N)}$ 空间的基矢的张量积所组成的矢量

$$|q_\alpha^{(1)},q_\beta^{(2)},\cdots q_\nu^{(N)}\rangle\equiv|q_\alpha\rangle^{(1)}|q_\beta\rangle^{(2)}\cdots|q_\nu\rangle^{(N)} \quad (14.10)$$

构成 $\mathscr{S}$ 中的算符和矢量的某个表象——Q 表象的基矢. 我们称这种表象为**对称表象**.

3. 置换算符

矢量(14.10)式表述的状态显然是粒子 1 在状态 $|q_\alpha\rangle$，粒子 2 在状态 $|q_\beta\rangle\cdots$，粒子 N 在状态 $|q_\nu\rangle$ 的状态：N 个粒子之间的置换改变了它们在 $|q_\alpha\rangle,|q_\beta\rangle,\cdots|q_\nu\rangle$ 中的分布，因此$\{Q\}$的另一个(一般说来是不相同的)基矢代替了(14.10)[1]. 于是这种运算在这些正交基矢之间建立了一一对应关系，从而在态矢量空间中确定了某些线性么正算符. N 个粒子的每一种置换就以这种方式对应于一个具有么正性质的置换算符 P:

$$PP^\dagger=P^\dagger P=1. \quad (14.11)$$

这样，在 (12) 对换下，即粒子 1 和粒子 2 相互对换，矢量(14.10)变成表示粒子 1 在状态 $|q_\beta\rangle$，粒子 2 在状态 $|q_\alpha\rangle$，其他粒子仍和原来一样的状态矢量；相应的置换算符 $P_{(12)}$ 由方程

$$P_{(12)}|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\cdots q_\nu^{(N)}\rangle=|q_\beta^{(1)}q_\alpha^{(2)}q_\gamma^{(3)}\cdots q_\nu^{(N)}\rangle$$

决定.

为了简化书写，我们在 $N=3$ 的情形下继续研究置换. 所阐明的基本原则当然适用于 N 的一切值. 作为一个例子，我

1) 当 N 个单体状态 $|q_\alpha\rangle,\cdots|q_\nu\rangle$ 不是全部不同时，某些置换仍使矢量(14.10)不变；如果这些状态全部相同，则(14.10)对所有的置换都不变.

们来确定置换(123)对应的算符 $P_{(123)}$。 在此置换中， 1 取代 3 ，2 取代 1 ，3 取代 2：

$$P_{(123)}|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle = |q_\gamma^{(1)}q_\alpha^{(2)}q_\beta^{(3)}\rangle, \tag{14.12}$$

如果 $|\psi\rangle$ 是 $\mathscr{E}$ 中的矢量，则

$$P_{(123)}|\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} P_{(123)}|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle\langle q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}|\psi\rangle$$

$$= \sum_{\alpha\beta\gamma} |q_\gamma^{(1)}q_\alpha^{(2)}q_\beta^{(3)}\rangle\langle q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}|\psi\rangle,$$

给最后一行中的角标重新命名，它就变成：

$$P_{(123)}|\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} |q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle\langle q_\beta^{(1)}q_\gamma^{(2)}q_\alpha^{(3)}|\psi\rangle. \tag{14.13}$$

若 $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ 是 $|\psi\rangle$ 在 $\{Q\}$ 表象中的波函数 ($\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ 是在 $|q_\alpha\rangle$ 找到粒子 1 ，在 $|q_\beta\rangle$ 找到粒子 2 ， 在 $|q_\gamma\rangle$ 找到粒子 3 的几率振幅)，则波函数 $P_{(123)}|\psi\rangle$ 是：

$$P_{(123)}\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = \psi(q_\beta, q_\gamma, q_\alpha). \tag{14.14}$$

它是以置换(123)的逆置换作用到 $\psi(q_\alpha, q_\beta, q_\gamma)$ 的宗量上而得到的函数。

对于象

$$|u^{(1)}v^{(2)}w^{(3)}\rangle = |u\rangle^{(1)}|v\rangle^{(2)}|w\rangle^{(3)}$$

这样形式的矢量，它在置换中的变换规律特别简单。 它与 $\{Q\}$ 表象的基矢的变换规律相同。 P 作用到这种矢量上的结果恰好是置换 p 作用到处于单体态 $|u\rangle$, $|v\rangle$, $|w\rangle$ 中的粒子 1,2,3 上而得的矢量，即[见(14.12)式]

$$P_{(123)}|u^{(1)}v^{(2)}w^{(3)}\rangle = |w^{(1)}u^{(2)}v^{(3)}\rangle.$$

证明是很简单的。现在，(14.13)式成为

$$P_{(123)}|u^{(1)}v^{(2)}w^{(3)}\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} |q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle\langle q_\alpha|w\rangle\langle q_\beta|u\rangle\langle q_\gamma|v\rangle$$

右边正好是 $|w^{(1)}u^{(2)}v^{(3)}\rangle$ 按 $\{Q\}$ 表象的基矢的展开式。

在此特殊情形下所证实的这个性质是普遍的属性（问题14.1），给定置换所对应的置换算符 P 与定义它时所选用的特殊的对称表象无关.

正如 P 作用在某个矢量上得到的另一个矢量就是对原来这个矢量经过置换 p 而得到的那个矢量，$\mathscr{E}$ 中的一个给定算符 $F(\xi^{(1)},\xi^{(2)},\cdots\xi^{(N)})$ 经么正算符 P 所作的变换也给出一个算符，它也是由置换 p 作用在 F 的宗量上来得到. 如果令

$$p=\begin{pmatrix}1 & 2\cdots N\\ \alpha_1 & \alpha_2\cdots\alpha_N\end{pmatrix}.$$

我们有

$$PF(\xi^{(1)},\xi^{(2)},\cdots\xi^{(N)})P^{\dagger}=F(\xi^{(\alpha_1)},\xi^{(\alpha_2)},\cdots\xi^{(\alpha_N)}),\quad(14.15)$$

特例是

$$P_{(123)}F(\xi^{(1)},\xi^{(2)},\xi^{(3)})P^{\dagger}_{(123)}=F(\xi^{(2)},\xi^{(3)},\xi^{(1)})\quad(14.16)$$

（$\xi^{(2)}$ 取代 $\xi^{(1)}$，$\xi^{(3)}$ 取代 $\xi^{(2)}$，$\xi^{(1)}$ 取代 $\xi^{(3)}$）.

为了证实这个规则，只要证明当 F 是系统的任一基本可观察量时它成立就足够了. 考虑某个这种可观察量，总可以建立一个它在其中是对角的的表象. 例如，假定它是上述的 $\{Q\}$ 表象中的 $q^{(i)}$ 的之一. 为了证明 $Pq^{(i)}P^{\dagger}=q^{(\alpha_i)}$，只要证明两边对 $\{Q\}$ 中的所有基矢的作用都相同就足够了. 这种证明是不难的，我们这里只在特殊情形 $N=3$，$i=1$，$p=$(123)下进行证明：

$$\begin{aligned}P_{(123)}q^{(1)}P^{\dagger}_{(123)}|q^{(1)}_{\alpha}q^{(2)}_{\beta}q^{(3)}_{\gamma}\rangle&=P_{(123)}q^{(1)}|q^{(1)}_{\beta}q^{(2)}_{\gamma}q^{(3)}_{\alpha}\rangle\\&=q_{\beta}P_{(123)}|q^{(1)}_{\beta}q^{(2)}_{\gamma}q^{(3)}_{\alpha}\rangle\\&=q_{\beta}|q^{(1)}_{\alpha}q^{(2)}_{\beta}q^{(3)}_{\gamma}\rangle\\&=q^{(2)}|q^{(1)}_{\alpha}q^{(2)}_{\beta}q^{(3)}_{\gamma}\rangle.\end{aligned}$$

当应用到可观察量上，置换的这个定义符合人们关于可观察量的置换的直观想法：可观察量 B 经置换 p 作用所得的可观察量 $PBP^{\dagger}$ 具有和 B 相同的本征值谱，而 $PBP^{\dagger}$ 的本征矢

量则由置换算符 P 作用于 B 的具有同一本征值的本征矢量上而得到.

特别是,如对于N个粒子的 $N!$ 个置换中的每一个,都有 $PBP^{\dagger} = B$,即对于任意的 P 都有

$$[P,B] = 0,$$

则 B 对 N 粒子的置换是不变的. 如果是这样,我们就称 B 对 N 个粒子是**对称的**.

4. 置换算符代数　对称化算子和反对称化算子

两个相继的置换 p',p'' 和单个置换 $p = p''p'$ 等价. 从置换算符的定义可知,对于相应的算符 P,P',P'' 显然也有同样的关系:

$$P = P''P', \tag{14.17}$$

由此可知,置换算符和它们对应的置换都遵从相同的代数关系[1].

特别是,任何 P 都能表示成若干个对换的乘积. 对于同一个 P,通常可以有许多种这样的乘积,但是所有这些乘积总是包含偶数个或奇数个对换. 置换的宇称是十还是一,取决于对换数目是偶数还是奇数,并且记为 $(-)^P$. 如果 P,P',P'' 有(14.17)的关系,则显然有 $(-)^P = (-)^{P'+P''}$.

某些置换与它们自己的逆置换相等. 显然,对换就是这样,在这种情形下[见方程(14.11)],相应的算符就是一个可观察量,其可能的本征值是 ± 1,

---

1) 特别是 $P_{(123)} = P_{(12)}P_{(23)}$. 我们来证明 $P_{(12)}$ 和 $P_{(23)}$ 相继地作用到波函数 $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$上可再次得到(14.14),令 $\psi_1(q_\alpha q_\beta q_\gamma) \equiv P_{(23)}\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$,于是 $\psi_1(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = \psi(q_\alpha q_\gamma q_\beta)$,并且 $P_{(123)}\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = P_{(12)}\psi_1(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = \psi_1(q_\beta q_\alpha q_\gamma) = \psi(q_\beta q_\gamma q_\alpha)$. 先将置换(12)作用,再用置换(23)作用于 $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ 的宗量上也得到相同的结果.

例如考虑对换 (ij):

$$P_{(ij)}^2 = 1. \tag{14.18}$$

本征值为 $+1$ 的本征矢量在对换(ij)下是不变的，按定义，它们对 i 和 j 是对称的. 投影到一个所有矢量对 i 和 j 都是对称的矢量空间上的投影算符是**对称化算子**:

$$S_{[ij]} = \frac{1}{2}(1 + P_{(ij)}), \tag{14.19}$$

本征值为 -1 的本征矢量在对换(ij)下改变符号，按定义，它们对 i 和 j 是反对称的. 投影到一个所有矢量对 i 和 j 都是反对称的矢量空间上的投影算符是**反对称化算子**

$$A_{[ij]} = \frac{1}{2}(1 - P_{(ij)}), \tag{14.20}$$

显然有:

$$\begin{aligned} &S_{[ij]} + A_{[ij]} = 1 \qquad P_{(ij)}S_{[ij]} = S_{[ij]}P_{(ij)} = S_{[ij]} \\ &S_{[ij]} - A_{[ij]} = P_{(ij)} \quad P_{(ij)}A_{[ij]} = A_{[ij]}P_{(ij)} = -A_{[ij]}, \end{aligned} \tag{14.21}$$

任何矢量都可分解为两个矢量之和，其中一个对 i 和 j 是反对称的，另一个对 i 和 j 是对称的. 我们在 § 1 中讨论两个全同粒子的碰撞时已用过这类分解.

至此，力学状态的对称性和反对称性概念还只对置换 $P_{(ij)}$ 作了定义，下面我们将它推广到更普遍的 $N!$ 个置换 P 的情形.

取 $\mathscr{E}$ 中的一个矢量 $|u\rangle$，并将 $|u\rangle$ 以及由它通过置换得到的所有矢量张成的子空间记作 $\mathscr{E}_u$，根据 $N!$ 个矢量 $P|u\rangle$ 是线性独立或者线性相关，$\mathscr{E}_u$ 的维数可以等于或者小于 $N!$.

一种极端的情形是对于所有的 P，$P|u\rangle$ 都代表同一状态:

$$P|u\rangle = c_P|u\rangle. \tag{14.22}$$

对常数 c_P 有一些限制条件。如果 P 是对换，我们知道 c_P 仅取值为 ± 1。并且，因为任一对换(ij)等于乘积$(1i)(2j)(12)(2j)(1i)$，所以

$$P_{(ij)} = P_{(1i)}P_{(2i)}P_{(12)}P_{(2j)}P_{(1i)},$$

因而

$$c_{(ij)} = c^2_{(1i)}c^2_{(2j)}c_{(12)} = c_{(12)}. \tag{14.23}$$

所以常数 c 对所有的对换都相同：$c_{对换}=+1$ 或者 $c_{对换}=-1$，又因任何置换 p 都是对换的乘积，所以与之对应的常数 c_P 是 $c_{对换}$ 的某个乘幂，这个乘幂是偶的还是奇的，取决于 p 是偶置换还是奇置换。

于是我们得出结论：(14.22)式只在下列两情形下得到满足：

(a) 对于所有的 $p, c_p = 1$ 则 $P|u\rangle = |u\rangle$ (14.24)

(b) 对于所有的 $p, c_p = (-)^p$，则 $P|u\rangle = (-)^p|u\rangle$ (14.25)

根据矢量适合(a)或者(b)，我们说它对于N个粒子的置换是**对称的**或者是**反对称的**。

对称矢量构成$\mathscr{E}$中的一个子空间 $\mathscr{E}^{(S)}$，而反对称矢量构成$\mathscr{E}$的另一个子空间 $\mathscr{E}^{(A)}$，它与 $\mathscr{E}^{(S)}$ 正交。我们现在要证明对应的投影算符分别是：

$$S = \frac{1}{N!}\sum_P P \quad A = \frac{1}{N!}\sum_P (-)^P P \tag{14.26}$$

($\sum_P$ 遍及 $N!$ 个可能的置换)，考虑一种按某个任意顺序排列的置换序列，用一置换算符 P_1 从右边或从左边去乘序列中的每一项，只能改变它们在序列中的顺序，因此

$$P_1 S = SP_1 = S \quad P_1 A = AP_1 = A, \tag{14.27}$$

将每一个置换 P 用它的逆置换 $P^\dagger$ 代替也只改变了这些置换的顺序，又因为置换和逆置换有相同的字称，我们有

$$S = S^{\dagger} \quad A = A^{\dagger}, \tag{14.28}$$

从方程式(14.27)和定义(14.26)很容易推得关系式:

$$S^2 = S \quad A^2 = A, \tag{14.29}$$

和

$$SA = AS = 0. \tag{14.30}$$

关系式(14.27—30)说明 S 和 A 是正交投影算子. 如果 $|u\rangle$ 在 $\mathscr{E}^{(S)}$ 中,那末从(14.24)得到:

$$S|u\rangle = \frac{1}{N!}\sum_P P|u\rangle = \left(\frac{1}{N!}\sum_P\right)|u\rangle = |u\rangle.$$

相反,如果$|\rangle$是一任意矢量,那末从(14.27)得

$$PS|\rangle = S|\rangle.$$

所以 S 的确是到 $\mathscr{E}^{(S)}$ 上的投影算子. 类似地可以证明 A 是到 $\mathscr{E}^{(A)}$ 上的投影算子.

当 $N = 3$ 时, A 和 S 可以明显地写成:

$$S = \frac{1}{6}(1 + P_{(12)} + P_{(23)} + P_{(31)} + P_{(123)} + P_{(321)})$$

$$A = \frac{1}{6}(1 - P_{(12)} - P_{(23)} - P_{(31)} + P_{(123)} + P_{(321)}).$$

正如此例清楚地表示出的,如果 $N > 2$,则 $S + A \neq 1$. 实际上当 $N > 2$ 时, $S + A$ 到状态矢量空间的投影对 N 个粒子的偶置换是不变的. 是 $\mathscr{E}$ 的一个子空间.

回到上述的 $\mathscr{E}_u$ 空间.对于任意 P,我们从方程式(14.27)导出

$$SP|u\rangle = S|u\rangle \quad AP|u\rangle = (-)^P A|u\rangle,$$

于是, 张成 $\mathscr{E}_u$ 空间的全部矢量 $P|u\rangle$ 在 $\mathscr{E}^{(S)}$ 中都有相同的投影. 而且在 $\mathscr{E}^{(A)}$ 中的投影也相同(不计符号). 所以根据 $S|u\rangle$ 不等于零或等于零而有: **$\mathscr{E}_u$ 包含一个且仅有一个对称矢量, 或者什么也没有**; 同样地,根据 $A|u\rangle$ 不是零或是零而

有：$\mathscr{E}_n$包含一个且仅有一个反对称矢量，或者什么也没有[1].

5. 全同粒子和对称化假设

如果上述系统的N个粒子不仅是同类的，而且是全同的，那末在置换这些粒子时这个系统的力学性质都不发生变化．从这不变性可以得到关于系统的运动定律和可观察量的重要推论．

设$|\psi_0\rangle$是系统在起始时刻t_0的状态，那末下一时刻的状态则由演化算符$U(t,t_0)$作用而得到：$|\psi_t\rangle = U(t,t_0)|\psi_0\rangle$．如果起始的状态是$P|\psi_0\rangle$，则系统状态的演变除了置换$P$以外完全相同，并且它在$t$时刻的状态将是$P|\psi_t\rangle$，因此

$$U(t,t_0)P|\psi_0\rangle = P|\psi_t\rangle = PU(t,t_0)|\psi_0\rangle$$

因为对任何$|\psi_0\rangle$此式都成立，故

$$[P,U(t,t_0)] = 0. \tag{14.31}$$

若H是系统的哈密顿量，$U(t,t_0)$是薛定谔方程

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t,t_0) = HU(t,t_0)$$

的解，起始条件为：$U(t_0,t_0) = 1$．从(14.31)及它对t的微分所得的关系，我们得到

$$[P,H] = 0. \tag{14.32}$$

反之，若H和P对易，则$U(t,t_0)$和它在置换下的变换$PUP^\dagger$是相等的，因为它们满足带有相同起始条件的同一薛定谔方程．因而U和P对易．于是运动方程在置换下不变的充分和必要条件就是H对所有的P都满足(14.32)式．

---

1) 如果$N!$个矢量$P|u\rangle$是线性独立的，则这些矢量的特殊线性组合$S|u\rangle$和$A|u\rangle$一定不为零．在此情形下，$\mathscr{E}_n$包含一个对称矢量和一个反对称矢量．

下面考虑系统的物理可观察量[1] B. 令 $|u\rangle$ 是 B 的本征值为 b 的本征矢量，如果系统是处在状态 $|u\rangle$，那末测量 B 必定得到结果 b；如果系统处在由置换算符 P 作用于 $|u\rangle$ 所得的状态 $P|u\rangle$，则测量 B 必定得出同样的结果

$$BP|u\rangle = bP|u\rangle.$$

而且对任何 P，它都成立. 换句话说，由 N 个粒子的所有可能的置换作用到 $|u\rangle$ 上而产生的 $\mathscr{E}_u$ 空间，它的每一个矢量必须也是 B 的同一本征值的本征矢量(交换简并). 对于 B 的所有本征值，这都正确的充要条件(见 § 7.15)是：对于任何 P，有

$$[B,P] = 0. \tag{14.33}$$

总之，如果 N 个粒子系统的哈密顿量 H 以及所有的物理可观察量对这些粒子是对称的，则此 N 个粒子是全同的.

因此，如果我们希望通过同时测量每个粒子的变量 q 来确定系统的状态，则这种确定最好也只能到交换简并[2]许可的程度；我们能够断定 N 个粒子的总数中有 n_1 个粒子在 $|q_1\rangle$ 态，n_2 个粒子在 $|q_2\rangle$ 态，$\cdots n_\kappa$ 个粒子在 $|q_\kappa\rangle$ 态$\cdots(n_1 + n_2 + \cdots + n_\kappa + \cdots = N)$，但是由于粒子的全同性，每一个这种状态仍然是没有确定的. 在 $\{Q\}$ 表象中有 $(N!/n_1!n_2!\cdots n_\kappa!\cdots)$ 个具有所要求的特性的基矢，令 $\mathscr{E}(n_1,n_2\cdots n_\kappa\cdots)$ 为这些矢量(由 $N!$ 个置换作用到其中之一上而得出)所张成的空间. 系统的状态一定可用此空间中的一个矢量来表示，但

---

1) "物理可观察量" (Physical observable) 一词的含义已在 § 14.15 中给出，这里所作的在置换下不变性的分析可以和该节的物理可观察量对"转动 2π"的不变性的分析相比较.

2) $q^{(1)},q^{(2)}\cdots q^N$ 在 $\mathscr{E}$ 空间中构成对易可观察量的完全集，但是只有它们的对称函数才是物理可观察量，不过这些量在 $\mathscr{E}$ 空间中不构成完全集. 即将引入的对称化假设将态矢量空间限制为 $\mathscr{E}$ 中的某一子空间. 在此子空间中，物理可观察量构成一个完全集(因此，交换简并完全被消除).

是上述的观测不能够确定是那一个矢量，然而，正如我们在§1的例子中所看到的，理论的预言与它是那一个矢量有关．所以这种含混是真正困难的根源．引入对称化假设就能消除这种困难：

N粒子系统的状态对于N个粒子的置换必需或者全是对称的，或者全是反对称的．

究竟采用那一种取决于全同粒子的本性，具有对称态的粒子称为**玻色子**．而具有反称态的粒子称为费米子(这些名字的起因以后会讲清楚)．**实验证明**：在自然界存在的自旋为1/2的基本粒子是费米子(电子、质子、中子等等)而自旋为整数的粒子为玻色子(光子、π介子等等)．

以上定义的$\mathscr{H}(n_1,n_2\cdots n_s\cdots)$空间不会包含一个以上的对称矢量和一个以上的反对称矢量．因此对称化假设完全消除了交换简并．有待于证明的是：它和量子力学关于物理系统的运动与物理量的测量的基本假设不相矛盾．

我们来考虑玻色子的情形(费米子可以同样处理)．前一节已定义了到对称态的投影算符S，它是置换算符的一种特殊组合[(14.26)式]，所以和系统的演化算符$U(t,t_0)$对易：

$$[S,U(t,t_0)]=0. \tag{14.34}$$

而且和物理可观察量对易：

$$[S,B]=0. \tag{14.35}$$

(14.34)式说明：如果系统开始处于对称态，只要它未受到干扰，则它总是保持在对称态中，现假定对系统完成一次理想测量B，从(14.35)式可知S和B至少有一共同的基矢集．若系统的状态是对称的，则态矢量的按这组基矢展开的式子只包含B的对称本征矢量．因此可以肯定：测量B的操作仍使系统保持在对称态中．

6. 玻色子和玻色-爱因斯坦统计

考虑有N个玻色子的系统，系统的态矢量在$\mathscr{H}$中张成子空间$\mathscr{H}^{(S)}$，我们可以用下列方法由$\{Q\}$表象中的矢量构成$\mathscr{H}^{(S)}$的基矢。

在每一个子空间$\mathscr{H}(n_1,n_2,\cdots n_\kappa\cdots)$中，只能构成一个（而且仅有一个）归一化的对称矢量（确定到包含一个未定位相）：

$$\left[\frac{N!}{n_1!n_2!\cdots n_\kappa!\cdots}\right]^{1/2} S|q_1^{n_1}q_2^{n_2}\cdots q_\kappa^{n_\kappa}\cdots\rangle, \quad (14.36)$$

$|q_1^{n_1}q_2^{n_2}\cdots q_\kappa^{n_\kappa}\cdots\rangle$是$\{Q\}$的基矢，其中前$n_1$个粒子在$|q_1\rangle$态，其次的$n_2$个粒子在$|q_2\rangle$态，…再后的$n_\kappa$个粒子在$|q_\kappa\rangle$态，…。$S$是以前定义的对称化算子[(14.26)式]；括号里的常数是归一化常数($0!=1$)。证明如下：占据相同状态的两个粒子的相互交换并不改变$|q_1^{n_1}q_2^{n_2}\cdots q_\kappa^{n_\kappa}\cdots\rangle$，而占据不同状态的两个粒子的相互交换则给出$\{Q\}$的另一个基矢。更普遍地讲，这个矢量对于不改变$N$个粒子在单体状态$|q_1\rangle$，$|q_2\rangle$，$\cdots$ $|q_\kappa\rangle$，$\cdots$中分布的$\prod_i n_\kappa! = n_1!\,n_2!\cdots n_\kappa!\cdots$个置换中的任何一个是不变的，而任何一个其他的置换则将它改变成$\{Q\}$的另一个基矢。将$N!$个置换都作用到$|q_1^{n_1}q_2^{n_2}\cdots q_\kappa^{n_\kappa}\cdots\rangle$上，我们便得到$\mathscr{H}(n_1,n_2\cdots n_\kappa\cdots)$的$(N!/n_1!n_2!\cdots n_\kappa!\cdots)$个基矢。其中每一个重复$(\Pi n_\kappa!)$次。矢量(14.36)等于这些矢量之和再乘以$[\Pi n_\kappa!/N!]^{1/2}$，所以它是对称的和归一化的。证毕。

于是对于每一组满足

$$n_1+n_2+\cdots+n_\kappa+\cdots=N$$

的非负整数序列n_1，n_2，$\cdots n_\kappa\cdots$，系统有一个（而且仅有一

个)对称状态，用矢量(14.36)表示. 这样构成的矢量集合在 $\mathscr{H}^{(S)}$ 中构成一组正交归一基.

其次我们要证明：**玻色子气体服从玻色-爱因斯坦统计**. 所谓玻色子气体是指数目很大的N个玻色子组成的系统，其中玻色子之间的作用足够弱，因此在第一级近似下可以忽略. 于是，系统的哈密顿量H可以写成N个单体哈密顿量之和：

$$H = h^{(1)} + h^{(2)} + \cdots + h^{(i)} + \cdots h^{(N)}. \qquad (14.37)$$

根据玻尔兹曼理论，当系统处于最可几的"宏观态"时，系统达到了热力学平衡. 一个给定的"宏观态"实际上是一系列相互之间很接近，以致在宏观的水准上不可能区分它们的量子态(或"微观态"). 根据各态经历假说，具有同一能量的微观状态都是等几率的，因此某个给定的宏观态的几率正比于组成它的不同微观态的数目. 系统的热力学平衡的确定本质上取决于此数目. 假定 h 包括在确定表象 $\{Q\}$ 的力学量集合 q 中，N个粒子在各种可能的单体状态

$$|q_1\rangle, |q_2\rangle, \cdots |q_\kappa\rangle \cdots$$

中的每一种分布.

$$n_1, n_2, \cdots n_\kappa \cdots$$

决定了系统的一个(而且只有一个)微观状态[用(14.36)表示]. 这正是玻色-爱因斯坦统计的假设. 在这假设中，粒子被认为是不可区别的，因而若系统的某些状态的区别只在于占据不同单体态的粒子是不同的，就可以认为它们是同一微观状态. 但在麦克斯韦-玻尔兹曼统计中，则假定各个粒子在微观水准上是可分辨的，而且把对应同一种分布 $n_1 n_2 \cdots n_\kappa \cdots$ 的 $[N!/\pi n_\kappa!]$ 个系统状态都看作是不同的微观状态.

重要注释. 描述处于热力学平衡的系统的密度算符的一般表达式

$$\rho = e^{-H/kT}/\mathrm{Tr}e^{-H/kT}. \qquad (14.38)$$

以及在§13.25中由它推出的公式在此仍然正确. 对称化假设引起的深刻差异来源于如下事实: ρ 现在是 $\mathscr{E}^{(S)}$ (而不是 $\mathscr{E}$)中的算符, 因而量子统计的各种运算, 特别是求迹的运算必须在此更受限定的空间中进行. 于是当 H 是 (14.37) 的形式时, ρ 被认为是 $\mathscr{E}$ 空间中的算符, 它是各个单体空间 $\mathscr{F}^{(1)}$, $\mathscr{F}^{(2)}, \cdots \mathscr{F}^{(N)}$ 中定义的算符的张量积:

$$\rho = \prod_{i=1}^{N} [e^{-h^{(i)}/kT} / \mathrm{Tr} i e^{-h^{(i)}/kT}]$$

但是如果 ρ 是 $\mathscr{E}^{(S)}$ 的算符, 则这个因式化完全失去意义, 因为这 N 个因子的每一个都不是 $\mathscr{E}^{(S)}$ 的算符.

7. 费米子和费米-狄拉克统计 不相容原理

对于有 N 个费米子的系统可以进行与前节类似的分析. 它的状态在 $\mathscr{E}$ 中张成子空间 $\mathscr{E}^{(A)}$.

从 $\{Q\}$ 表象出发, 我们在每个子空间 $\mathscr{E}(n_1, n_2 \cdots n_\kappa \cdots)$ 中取一归一化的反对称矢量(如果存在的话), 便可构成反对称正交矢量的完备集, 存在这种矢量的必要和充分条件是 $A|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle$ 不为零. 我们假定在整数 $n_1, n_2 \cdots n_\kappa \cdots$ 中至少有一个大于 1, 在 $|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle$ 所表示的状态中至少有二个粒子(例如第 i 个和第 j 个)占据同一个单体量子态, 因此此矢量对于这两个粒子的交换是对称的, 即

$$|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle = \frac{1}{2}(1 + P_{(ij)})|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle.$$

但是由(14.27)得到

$$A(1 + P_{ij}) = 0.$$

所以

$$A|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle = 0. \qquad (14.39)$$

换句话说, 两个费米子不能占据相同的单体量子态, 这就是泡

利不相容原理[1].

现假设在任一单体量子态中最多只有一个粒子($n_\kappa = 0$, 或1). 矢量

$$A|q_1^{n_1}q_2^{n_2}\cdots q_\kappa^{n_\kappa}\cdots\rangle \equiv \frac{1}{N!}\sum_P (-)^P P|q_1^{n_1}q_2^{n_2}\cdots q_\kappa^{n_\kappa}\cdots\rangle$$

是$N!$个相互正交的矢量之和，因此肯定不为零. 它的模方是$(1/N!)$,如果 $|q_\alpha\rangle, |q_\beta\rangle, \cdots |q_\nu\rangle$ 是N个被占据的单体量子态,则它对应的反对称态可用归一化的矢量

$$\sqrt{N!}\, A|q_\alpha^{(1)}, q_\beta^{(2)}\cdots q_\nu^{(N)}\rangle$$

表示，这个矢量可以写成 $N \times N$ 行列式的形式(斯莱特行列式):

$$\sqrt{N!}\, A|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}\cdots q_\nu^{(N)}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} |q_\alpha\rangle^{(1)}|q_\alpha\rangle^{(2)}\cdots|q_\alpha\rangle^{(N)} \\ |q_\beta\rangle^{(1)}|q_\beta\rangle^{(2)}\cdots|q_\beta\rangle^{(N)} \\ \vdots \\ |q_\nu\rangle^{(1)}|q_\nu\rangle^{(2)}\cdots|q_\nu\rangle^{N} \end{vmatrix}. \tag{14.40}$$

这个等式可直接由行列式的定义证明. 此外，当N个单体量子态中有某些是相同态时，(14.40)式仍然成立，这时行列式中有两行或两列以上完全相同，于是再次体现了泡利不相容原理.

因此,在单体量子态 $|q_1\rangle, |q_2\rangle, \cdots, |q_\kappa\rangle\cdots$中挑选出的每一组$N$个**不同的**状态 $|q_\alpha\rangle, |q_\beta\rangle, \cdots, |q_\nu\rangle$ 对应着一个(且仅有一个)反对称态，它可用矢量(14.40)表示. 这样组成的矢量集合在 $\mathscr{S}^{(A)}$ 中构成一正交基.

费米子气体服从费米-狄拉克统计. 其证明与玻色子的情形相似. 只是微观态的计数是不同的. 每一组N个不同

1) 不相容原理是泡利在 1925 年作为电子的普遍特性提出的，它使得人们能够解释复杂原子的结构(见 § 12).

的单体量子态确定一个(且仅有一个)费米子系统的微观状态(由矢量(14.40)表示). 这正好是费米-狄拉克统计的假设; N 个粒子是不可区别的，而且在任一单体量子态中不可能有一个以上的粒子.

前一节最后的话也适用于费米子，处于热力学平衡的费米子系统的密度算符由(14.38)式给出，现在它当然是 $\mathscr{E}^{(A)}$ 中的算符.

于是,全同粒子有三种类型的统计,它们之间的差别体现在下表所示的态矢量空间的定义中.

统　　计	麦克斯韦-玻尔兹曼	玻色-爱因斯坦	费米-狄拉克
粒子的特征	可区分	不可区分	不可区分 +不相容
态矢量空间	$\mathscr{E}$	$\mathscr{E}^{(S)}$	$\mathscr{E}^{(A)}$

8. 波函数总是必需对称化吗

我们考虑一个由 n 个全同粒子组成的系统. 若粒子是电子,则系统的状态要用反对称波函数表示,然而这些电子不是宇宙中仅有的电子，要忽略其他电子而把这系统当成不同于剩下的电子的系统来处理. 就假定了 n 个电子的力学性质不受其他电子存在的影响. 这就引起一个问题: 这样的假设有无充分的根据? 或者，建立起这几个电子与其他电子之间的某种关联时,对称化假设是否使这个假说不再有效?

实际上,系统的电子都处于某一空间区域 D,我们所关心的力学性质都与在此区域中要进行的测量相对应，只要其余电子仍在 D 之外，而且它们与系统中的电子之间的相互作用可以忽略,那么它们就可以直接略去. 这是一个普遍的结果，对费米子和玻色子都同样适用. 我们这里就两个费米子的特

殊情形来证明.

如果忽略所有其他粒子的存在，则两个费子的力学状态用某个归一化的反对称化波函数 $\varphi(1.2)$ 来表示，1 和 2 分别代表粒子 1 和 2 的坐标与自旋分量 s_z，一般说来，系统的状态（例如 χ）是用归一化的反对称波函数 $\chi(1.2)$ 来表示的. 如果在给定时刻系统处于状态 φ，则它在此时的力学性质由几率

$$w = |\langle\chi|\varphi\rangle|^2 \tag{14.41}$$

的集合给定.

事实上，这两个费米子是 N 个费米子系统的一部分，我们来看看这些力学性质是否与我们正确地考虑其余 $(N-2)$ 个电子的存在时所得的结果相同. 令 $\Psi(3,4,\cdots,N)$ 是描写其余 $(N-2)$ 个费米子的力学状态的归一化反对称波函数. 如果费米子 1 和 2 与费米子 $3,4,\cdots N$ 不是全同的，那么整个系统的状态要用

$$\varphi(1,2)\Psi(3,4,\cdots,N)$$

来表示，并且只要头两个费米子与其余的费米子之间的相互作用可以忽略. 这种因式化性质就会保持. 实际上，正确地表示整个系统状态的矢量 $|\Phi\rangle$ 与反对称矢量 $A|\varphi\Psi\rangle$ 成正比，其中 A 是 N 个粒子的反对称算子[见定义(14.26)].

根据假说，波包 φ 和 Ψ 并不重迭，更确切地说，两个费米子一定是在特定的空间区域 D 内，而其余的电子全在 D 之外，再者，我们只关心在 D 之内的两个费米子的力学性质，

用 $\Theta(3,4,\cdots,N)$ 代表一个模方为 1 的反对称波函数，当 $(N-2)$ 个位置矢量 $\boldsymbol{r}^{(3)},\cdots,\boldsymbol{r}^{(N)}$ 中的任一个在 D 内时，它就等于零，Θ 代表 $(N-2)$ 个费米子全在 D 之外的系统的状态，按照假说，ψ 是一个这种类型的函数. 如果 $\Theta_1,\Theta_2,\cdots,\Theta_i,\cdots$ 构成这类函数的正交完全集，则

$$\Psi = \sum_i \Theta_i \langle \Theta_i | \Psi \rangle .$$

我们用 $\chi(1.2)$ 代表 1 和 2 的具有相反性质的归一化反对称波函数，即只要矢量 $r^{(1)}$ 和 $r^{(2)}$ 中有一个在 D 之外，χ 就为零．因此 χ 代表两个在 D 之内的费米子的状态． 按照假说，φ 是这种函数．

N 个粒子的置换可以按照它们对矢量 $|\chi\Theta\rangle$ 的作用分成两类． 第一类置换记作 F，最多只能改变 $|\chi\Theta\rangle$ 的符号，它们就是交换 1 和 2 以及（或者）3，4，…， N 之间作交换的 $2!(N-2)!$ 个置换，于是

$$F|\chi\Theta\rangle = (-)^f|\chi\Theta\rangle,$$

其余的所有置换记作 G，在这些置换里粒子 1 、 2 中至少有一个与其余 $(N-2)$ 个粒子中的一个交换．因此 $G|\chi\Theta\rangle$ 代表粒子1,2 中至少有一个明确地是在 D 之外的状态，它与 $|\chi\Theta\rangle$ 类型的任一矢量都正交

$$\langle \chi'\Theta' | G | \chi\Theta \rangle = 0.$$

现在我们可以导出下列等式:

$$\begin{aligned}\langle \chi'\Theta' | A | \chi\Theta \rangle &= \frac{1}{N!}\sum_P (-)^p \langle \chi'\Theta' | P | \chi\Theta \rangle \\ &= \frac{1}{N!}\sum_F (-)^f \langle \chi'\Theta' | F | \chi\Theta \rangle \\ &= \frac{2!(N-2)!}{N!}\langle \chi'\Theta' | \chi\Theta \rangle, \qquad (14.42)\end{aligned}$$

注意，$A|\chi\Theta\rangle$ 的模方是 $\langle \chi\Theta | A | \chi\Theta \rangle$，即 $2!\ (N-2)!/N!$.

我们现在希望知道 D 内的二个费米子处在状态 χ 的几率 w，如果其余 $(N-2)$ 个费米子与这两个费米子可区分，则系统的状态就用 $|\varphi\Psi\rangle$ 表示，所要求的几率是

$$\sum_i |\langle \chi\Theta_i|\varphi\Psi\rangle|^2 = |\langle\chi|\varphi\rangle|^2\left(\sum_i |\langle\Theta_i|\Psi\rangle|^2\right)$$

$$= |\langle\chi|\varphi\rangle|^2. \qquad (14.43)$$

因为N个费米子是全同的，所以系统的状态是

$$|\Phi\rangle = \sqrt{\binom{2}{N}}A|\varphi\Psi\rangle\left(\binom{2}{N} = \frac{N!}{2!(N-2)!}\right),$$

而要求的几率就是发现系统处于下列正交反对称矢量表示的任一状态的几率.

$$|X_i\rangle = \sqrt{\binom{2}{N}}A|\chi\Theta_i\rangle$$

也就是

$$w = \sum_i |\langle X_i|\Phi\rangle|^2 = \binom{2}{N}^2 \sum_i |\langle\chi\Theta_i|A|\varphi\Psi\rangle|^2.$$

由(14.42)和(14.43)得到

$$w = \sum|\langle\chi\Theta_i|\varphi\Psi\rangle|^2 = |\langle\lambda|\varphi\rangle|^2,$$

这正好是(14.41)式.

于是，我们可以忽略其余$N-2$个费米子的存在，而且仍然得到正确的结果.

II. 应　　用

9. 两个无自旋全同粒子的碰撞

这里我们再继续讨论§1中提到的碰撞问题.

令$(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{P})$和$(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$分别是质心和相对粒子的力学变量.

$$\boldsymbol{R} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}^{(1)} + \boldsymbol{r}^{(2)}),\ \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(2)}, \qquad (14.44)$$

哈密顿量是

$$H=\frac{\boldsymbol{P}^2}{4m}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{m}+V(\boldsymbol{r}), \tag{14.45}$$

而系统在任意给定时刻的力学状态用与 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 有关的某个波函数 $\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})$ 表示.

当互换这两个粒子时，$\boldsymbol{R}$ 不变，而 $\boldsymbol{r}$ 变为 $-\boldsymbol{r}$，波函数满足对称化假设，因此我们有[1)]

$$\Psi(\boldsymbol{R},-\boldsymbol{r})=\pm\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}). \tag{14.46}$$

正号对应于两粒子是玻色子的情形，负号对应于费米子的情形.

我们首先处理假定两粒子是可区别时的同一问题. 其解已在第十章 I 节中给出. 这里我们简要地回顾一下，仍保持该章 § 4—7 中用过的符号. 碰撞前($t\ll 0$)由靶粒子和入射粒子束中的某个粒子所构成的系统状态用相对速度 $\boldsymbol{V}=\hbar\boldsymbol{k}\Big/\frac{1}{2}m$ 和碰撞参数 $\boldsymbol{b}$ 表征. 它表示成乘积 $\Phi(\boldsymbol{k}_t)\varphi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r},t)$ 的形式，其中 Φ 和 φ 是两个模方为 1 的自由波包[2)]，如果我们选用质心坐标系，则 $\Phi(\boldsymbol{k},t)$ 波的群速度为零. 而 $\varphi(\boldsymbol{r},t)$ 波以速度 $\boldsymbol{v}$ 传播，在计算截面的情况下，$\varphi(\boldsymbol{r},t)$ 的扩展是可以忽略的. 其形式一旦选定就不变，并且由(10.13)给出:

$$\varphi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r},t)=e^{-i\boldsymbol{k},\boldsymbol{b}-iEt/\hbar}\chi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t-\boldsymbol{b})e^{i\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}}. \tag{14.47}$$

---

1) 置换是不同于空间反射的运算，在空间反射时 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 都改变符号，现在讨论的粒子是无自旋的，而且我们会看到质心不起重要作用. 由于它们对"相对粒子"的波函数的作用相同，这两个运算是容易混淆的.

2) 严格地讲，起始状态应该用(14.3)形式的乘积表示，因为它们发生在碰撞之前，粒子之间一直没有关联，乘积 $\Phi\varphi$ 只对特殊形式的 Φ 和 φ 才能变成(14.3)，例如

$$\Phi\varphi\sim\exp[i(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}+\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})-a/4(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}_0)^2+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)^2].$$

然而，截面的计算与起始波包的特定形式无关，而且由 $\Phi\varphi$ 形式的波包造成的误差是可以忽略的. 这一点已隐含地包括在 § 10.7 的讨论中.

碰撞以后（$t \gg 0$），由这些起始条件决定的波函数记为 $\Psi_b(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r},t)$，它变成

$$\Psi_b(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r},t) = \Phi(\boldsymbol{k},t)[\varphi_b(\boldsymbol{r},t) + \psi_b^{(d)}(\boldsymbol{r},t)], \tag{14.48}$$

其中 $\psi_b^{(d)}(\boldsymbol{r},t)$ 表示发散的波包[(10.20)式]

$$\psi_b^{(d)}(\boldsymbol{r},t) \sim e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}-iEt/\hbar}\chi[\boldsymbol{u}(r-vt)+\boldsymbol{s}-\boldsymbol{b}]f(\theta\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{14.49}$$

因为采用质心座标系，所以波包 $\Phi(\boldsymbol{R},t)$ 保持在原点，而且粒子 1 散射到 $\Omega = (\theta, \varphi)$ 方向上截面 $\sigma^{(1)}(\Omega)$ 等于相对粒子散射到同一方向的截面，[§ 10.6]即

$$\sigma^{(1)}(\Omega) = |f(\theta,\varphi)|^2, \tag{14.50}$$

粒子 2 散射到 Ω 方向上的截面 $\sigma^{(2)}(\Omega)$ 等于相对粒子散射到相反方向上的截面，即

$$\sigma^{(2)}(\Omega) = |f(\pi-\theta,\varphi+\pi)|^2. \tag{14.51}$$

若这两个粒子是全同的，则这种作法要作二点重要修正：

(a) 探测器不再能区别粒子 1 和 2，因此截面必需重新定义.

(b) 波函数 Ψ_b 要适当的对称化.

修正(a)不是量子力学所特有的，我们定义 $\sigma(\Omega)$ 为单位时间内单位入射通量被散射到立体角 $(\Omega,\Omega+d\Omega)$ 中的粒子(1 和 2)数，即[见(14.5)式]

$$\sigma(\Omega) = \sigma^{(1)}(\Omega) + \sigma^{(2)}(\Omega). \tag{14.52}$$

如果我们保留通常的总截面的定义，即单位时间内单位入射通量下被散射的粒子总数，则(14.52)的这个定义给出

$$\sigma^{(tot)} = \frac{1}{2}\int \sigma(\Omega)d\Omega. \tag{14.53}$$

另一方面，(b)项修正却是特有的量子效应，正如现在要证明的，适当对称化的，具有像 $\Psi_b(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r},t)$ 那样的起始条件

的波包可用下式

$$\hat{\Psi}_b(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_b(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r},t)\pm\Psi_b(\boldsymbol{R},-\boldsymbol{r},t)]$$

来表示.碰撞前,即 $t\ll 0$,函数 $\hat{\Psi}_b$ 的形式是 $\Phi(\boldsymbol{R},t)\hat{\varphi}_b(r,t)$,其中[见(14.47)式]

$$\hat{\varphi}_b(\boldsymbol{r},t)=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}-iEt}\frac{1}{\sqrt{2}}[\chi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t-\boldsymbol{b})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

$$\pm\chi(-\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t-b)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}],$$

因此 $\Phi\hat{\varphi}$ 是两个波之和，第一项代表在质心系中的碰撞的起始状况是：粒子 1 撞击粒子 2,相对速度为 $\boldsymbol{v}$,碰撞参数为 $\boldsymbol{b}$;第二项代表粒子 1 和粒子 2 的地位互换的情况．因为这两个波没有重迭,(由于 $t\ll 0$)，并且两者的模方都是 1/2，所以 $\Phi\hat{\varphi}$ 是模方为 1 的波函数,它和 $\Phi\varphi$ 一样，是描写两个粒子在质心学中以相对速度 $\boldsymbol{v}$ 和碰撞参数 $\boldsymbol{b}$ 所作的相互碰撞.

碰撞以后，正如 Ψ_b 那样，$\hat{\Psi}_b$ 是两项之和的形式(见(14.48)式)．第一项 $\Phi\hat{\varphi}$ 表示透射波,它不参与截面计算;第二项 $\Phi\hat{\Psi}^{(d)}$ 表示散射波，而且将从 Ψ_b 得到 $\hat{\Psi}_b$ 那样的对称化运算作用到 $\psi^{(d)}$ 上,就可以从 $\Phi\psi^{(d)}$ 得到 $\hat{\psi}_b^{(d)}$:

$$\hat{\psi}_b^{(d)}(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_b^{(d)}(\boldsymbol{r},t)\pm\psi_b^{(d)}(-\boldsymbol{r},t)],$$

再回到渐近表达式(14.49),我们看到:通过把散射振幅 $f(\theta\varphi)$ 变成对称化振幅

$$\hat{f}(\theta\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2}}[f(\theta\varphi)\pm f(\pi-\theta,\varphi+\pi)].$$

而完成了由 $\Phi\psi^{(d)}$ 到 $\Phi\hat{\psi}^{(d)}$ 的过渡． 用粒子可区分时的同一办法,可从散射波包的表达式得到散射截面:

$$\sigma^{(1)}(\Omega)=|\hat{f}(\theta,\varphi)|^2=\frac{1}{2}|f(\theta,\varphi)\pm f(\pi-\theta,\varphi+\pi)|^2$$

$$\sigma^{(2)}(\Omega) = |\hat{f}(\pi-\theta,\varphi+\pi)|^2 = \sigma^{(1)}(\Omega).$$

于是，按照定义(14.52)，有

$$\sigma(\Omega) = 2|f(\theta,\varphi)|^2 = |f(\theta,\varphi)\pm f(\pi-\theta,\varphi+\pi)|^2. \tag{14.54}$$

记住：散射振幅就是薛定谔方程

$$\frac{\hbar^2}{m}(\Delta + k^2)\psi(\boldsymbol{r}) = V(r)\psi(\boldsymbol{r})$$

具有渐近形式

$$e^{ikz} + f(\theta\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

的定态解中的发散波的系数.

按照粒子是玻色子还是费米子，对称化的散射振幅 $\hat{f}(\theta\varphi)$ 等于 $f(\theta\varphi)$ 的偶宇称部分的 $\sqrt{2}$ 倍，或等于 $f(\theta\varphi)$ 的奇宇称部分的 $\sqrt{2}$ 倍，若 V 是中心势场，则 $f(\theta)$ 的偶宇称部分就是各偶次分波贡献的总和；奇宇称部分就是奇次分波贡献的总和，当能量很低，以致主要贡献来自 s 分波时，两个无自旋"费米子"几乎不能相互散射；而两个玻色子的散射截面是它们可以区分时的 4 倍.（散射振幅乘上 $\sqrt{2}$，截面是这个对称化振幅的模方的两倍，两个因素合在一起给出了倍数 4）

10. 两个质子的碰撞

上一节的处理方法很容易推广到两个有自旋的全同粒子的碰撞，作为例子，我们讨论两个具有中心势相互作用的质子的碰撞，总自旋是运动常数，但是在单态和三态中相互作用可以不同，令 $f_s(\theta)$ 和 $f_t(\theta)$ 为相应的(未对称化)散射振幅.

因为质子是费米子，描述两质子系统的波函数对于两个粒子的交换应该是反对称的，如果这个波函数代表三重态，则

它对自旋的交换是对称的，因而对 $r^{(1)}$ 和 $r^{(2)}$ 的交换是反对称的，而对称化的散射振幅是

$$\hat{f}_t(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2}}[f_t(\theta)-f_t(\pi-\theta)].$$

因此，三重态的质子之间的相互散射截面是

$$\sigma_t(\theta)=2|\hat{f}_t(\theta)|^2=|f_t(\theta)-f_t(\pi-\theta)|^2.$$

如果这个波函数代表单态，则它对自旋的交换是反对称的，因而对空间座标的交换是对称的，而对称化散射振幅是

$$\hat{f}_s(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2}}[f_s(\theta)+f_s(\pi-\theta)],$$

因而在处于单态的两个质子的相互散射截面是：

$$\sigma_s(\Omega)=2|\hat{f}_s(\theta)|^2=|f_s(\theta)+f_s(\pi-\theta)|^2.$$

假如靶和入射粒子束都由非极化质子组成，那末在每次碰撞中入射粒子和靶粒子的自旋都是无规则分布的，因为三重态的空间是三维的，单态的空间是一维的，故始态的总自旋有3/4的几率是三重态，1/4的几率是单态，因此

$$\begin{aligned}\sigma(\Omega)&=\frac{3}{4}\sigma_t(\Omega)+\frac{1}{4}\sigma_s(\Omega)\\&=\frac{3}{4}|f_t(\theta)-f_t(\pi-\theta)|^2\\&\quad+\frac{1}{4}|f_s(\theta)+f_s(\pi-\theta)|^2\end{aligned}\tag{14.55}$$

此外，若力与自旋无关，则

$$f_s(\theta)=f_t(\theta)=f(\theta).$$

于是我们得到

$$\begin{aligned}\sigma(\Omega)=&|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2-\frac{1}{2}[f^*(\theta)f(\pi-\theta)\\&+f(\theta)f^*(\pi-\theta)].\end{aligned}\tag{14.56}$$

特别是，如果在极低能量下，核力可以忽略，而且 $V(r)$ 可以当作相斥的库仑势 e^2/r，则振幅 $f(\theta)$ 由公式(11.33)给出，而散射截面由**莫特公式**给出：

$$\sigma(\Omega)=\left(\frac{e^2}{4E}\right)^2\left[\sin^{-4}\frac{\theta}{2}+\cos^{-4}\frac{\theta}{2}\right.$$

$$\left.-\sin^{-2}\frac{\theta}{2}\cos^{-2}\frac{\theta}{2}\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}\ln\left(\tan^2\frac{\theta}{2}\right)\right)\right],\quad(14.57)$$

其中 E 是质心系中的能量，v 是两个质子的相对速度，将它与卢瑟福公式[见(11.36)式]比较是有益的.

经典计算只能得出莫特公式的头二项：

$$\sigma_{cl}(\Omega)=\left(\frac{e^2}{4E}\right)^2\left[\sin^{-4}\frac{\theta}{2}+\cos^{-4}\frac{\theta}{2}\right].$$

第三项纯粹是由于 $f(\theta)$ 和 $f(\pi-\theta)$ 之间干涉的量子效应.当 $e^2/\hbar v\gg 1$时，它急剧地在 0 附近振荡.离 $\theta=\frac{1}{2}\pi$ 角越远(不论两个方向中的哪一个)，振荡越急剧.在 $\hbar\to 0$ 的极限情形，虽然仍保持相同振幅，但这种振荡变得越剧烈，因此 $\sigma(\Omega)$ 在很小的(但不为零)立体角 $\rho(\Omega)$ 内的平均值会趋于截面 $\sigma_{cl}(\Omega)$.

11. 原子核的统计

在许多问题中，原子核可看作是具有一定自旋 j 的粒子.

在原子物理领域中，这是一个很好的近似. 一个原子核是 $\mathcal{N}$ 个核子的集合，Z 个质子和 N 个中子 ($\mathcal{N}=Z+N$). 其力学量是这 $\mathcal{N}$ 个核子的基本变量的函数，令 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 是质心的位置和动量 (见 § 9.13)，ρ 表示全体内部变量——核子自旋以及核子间的相对位置和动量. 其中值得注意的是内变量的总角动量 $\boldsymbol{j}$，即所谓的核自旋： $\boldsymbol{j}$ 是 $\mathcal{N}$ 个单核子自旋

和（$\mathcal{N}-1$）个相对轨道角动量之总和。按照角动量合成规则，j 可以是整数和半整数，这取决于 $\mathcal{N}$ 是偶数还是奇数.

无外场时，质心的运动可分离出来，而且系统的哈密顿量变成两项之和：质心的动能 $P^2/2M$（M 是核的总质量）和内能 $h(\rho)$，后者包括各核子的动能及它们之间的相互作用能. h 有一定数目的束缚态。用 ε_0 表示基态的本征值。因为核子之间的相互作用力在转动下是不变的，所以 $h(\rho)$ 与 $\boldsymbol{j}$ 的三个分量对易（见第十三章）。$h(\rho)$ 的分立谱的每个本征值对应某个自旋值 j，而且简并度为 $(2j+1)$。以后用 j 代表基态的自旋，用 μ 表示 j_z 的可能值（$\mu=-j,-j+1,\cdots,+j$），χ_μ 代表角动量为 $(j\mu)$ 的基态的本征函数：

$$h(\rho)\chi_\mu=\varepsilon_0\chi_\mu \quad j_z\chi_\mu=\mu\chi_\mu,$$

$(2j+1)$ 个矢量 χ_μ 的不同仅仅在于它们的取向，通过 j_+ 和 j_- 的反复作用，可以由它们之间的一个得到另一个。从而构成矢量算符 $\boldsymbol{j}$ 的表象的一组可能的基矢。核半径大约是 10^{-13}—10^{-12}cm。因此在处于 χ_μ 态的核中核子之间的平均距离也是这个数量级. 只要核停留在基态，则系统的波函数就是 $\sum_\mu \psi(\boldsymbol{R},\mu)\chi_\mu$ 的形式，而且我们可以把它当成这样的粒子，它的自旋为 j，它的波函数在 $\{\boldsymbol{R},j_z\}$ 表象中是 $\psi(\boldsymbol{R},\mu)$，因为哈密顿量中的 $h(\rho)$ 可以用常数 ε_0 代替，而且 $\psi(\boldsymbol{R},\mu)$ 随时间的演变像质量为 M 的自由粒子的波函数一样（不计及一个没有物理意义的常数相因子.）

若原子核在外场中，例如电势为 $V(r)$ 的电场，则哈密顿量中除了包括已经考虑的各项外，还包括 Z 个质子与外场的相互作用项，此时只能近似地把它当作自旋为 j 的粒子，因为哈密顿量不再与 $h(\rho)$ 对易，然而如果外场在数量级为核半径的距离内变化很小，它仍然是一个很好的近似，因为这时在每

个质子上的外场数值可以用质心处的数值代替，于是附加的相互作用变成 $ZeV(\boldsymbol{R})$，因而哈密顿量有 $\sum_{\mu}\psi(\boldsymbol{R},\mu)\chi_{\mu}$ 形式的本征态，其中 $\psi(\boldsymbol{R},\mu)$ 是质量为 M，自旋为 j，电荷为 Ze 的粒子在电势[1]$V(\boldsymbol{R})$ 中的定态.

考虑 n 个全都处于基态的原子核的系统，只要它们相距足够远，那末把它们每一个都当成具有给定自旋的粒子是很恰当的近似，正如在分子或固体中那样. 如果用 $\boldsymbol{R}^{(i)}$ 表示第 i 个核的位置，用 $\mu^{(i)}$ 表示其自旋的 z 分量，则系统的波函数是 $\boldsymbol{R}^{(i)}$ 和 $\mu^{(i)}$ 的函数，其运动由依赖于变量 $\boldsymbol{R}^{(i)},\boldsymbol{P}^{(i)},\boldsymbol{j}^{(i)}$ 的某个哈密顿量所决定.

我们来考察对称化假设对这种简化描述将有何种影响. 可以预料：只有当某些核是全同粒子时才涉及对称化. 这可以用类似于 § 8 中的论证来证明. 两个不同的原子核是可以区别的，尽管其成份(中子或质子)是全同的.

因此，我们来考虑两个自旋为 j 的全同的原子核系统，我们用波函数

$$\psi(\boldsymbol{R}^{(1)},\mu^{(1)};\boldsymbol{R}^{(2)},\mu^{(2)})$$

描述这系统的状态. 两个核的互换是下式定义的 P 运算：

$$P\psi=\psi(\boldsymbol{R}^{(2)},\mu^{(2)};\boldsymbol{R}^{(1)},\mu^{(1)}).$$

实际上，系统包含了 $2Z$ 个质子和 $2N$ 个中子，其力学状态由矢量

$$\Psi=\sum_{\mu_1\mu_2}\psi(\boldsymbol{R}^{(1)},\mu^{(1)};\boldsymbol{R}^{(2)},\mu^{(2)})\chi^{(1)}_{\mu_1}\chi^{(2)}_{\mu_2}$$

对质子以及对中子作反对称化而得到.

---

1) 对此近似的一级修正仍保留着核的这种图象. 它们来源于核的四极矩(若 $j\geqslant 1$)，四极矩可以表示成 j 的分量的函数，这样导至核自旋与外场的耦合.

P运算是将第一个原子核的质子和中子与第二个核的质子和中子进行互换. 即总共作了 $\mathcal{N}$ 次基本互换，因为在每次互换中反对称化矢量都改变符号，于是得出

$$P\Psi = (-)^{\mathcal{N}}\Psi,$$

因此

$$P\phi = (-)^{\mathcal{N}}\phi.$$

以上的论述可以很容易地推广到包含两个以上的全同核系统. 波函数对于全同原子核的置换是对称的还是反对称的，要根据这些原子核是包含偶数个还是奇数个核子而定. 换言之，若原子核

(a) 包含**偶**数个核子，则它是**玻色子**；

(b) 包含**奇**数个核子，则它是**费米子**.

在那些纯核效应看来不太重要的许多现象中，这种统计的差异就表现得很突出. 在极低温度下液氦(He^4)的奇异特性就是这种情形. He^4 服从玻色-爱因斯坦统计；同位素 He^3 服从费米-狄拉克统计，在此温度下它们的行为是根本不同的.

另一个例子是共核双原子分子带光谱，不久(§ 18.17)我们就来讨论这个例子.

12. 复杂原子　中心场近似

泡利原理对于复杂原子光谱有深刻的影响.

在没有外场的情形下，原子的哈密顿量与它的 Z 个电子的自旋无关；而且是由(13.17)式给定的，精确的讲，应该加上自旋-轨道耦合项，但对现在的讨论来说，它可以忽略. 除了氢原子($Z = 1$)这种特殊情形外，这样的哈密顿量的本征值问题是不可能精确地求解的.

为了确定原子的定态，我们常用独立粒子近似或中心场

近似. 按照这种近似，每个电子与其他电子无关地在势场 $V(r)$ 中运动. $V(r)$ 表示核的吸引作用和其他电子的平均推斥作用. 这后一作用显然和电子力学状态有关，因此，用单个势场 $V(r)$(即使是近似地)不能说明原子的整个能谱. 但是如果我们只限于讨论基态和第一激发态. $V(r)$ 就可以一举确定下来，而且 $V(r)$ 选择得越合适，近似就越好. 电子的全部影响体现在对核库仑场的屏蔽作用上.只要远离原子核，这种作用就更明显: $V(r)$ 在原点附近是 $-\frac{Ze^2}{r}$ 的形式；随着 r 的增加，势场逐渐偏离这种纯库仑场；在渐近区，势场变成 $-e^2/r$，就现在的讨论来说，这些半定量的考虑已足够了. 下面我们讨论两种系统地确定 $V(r)$ 的方法: 托马斯-费米方法 (§ 13)和哈特里-福克方法(第十八章)

在中心场近似中，哈密顿量写成:

$$H = h^{(1)} + h^{(2)} + \cdots + h^{(z)}, \qquad (14.58)$$

其中

$$h = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r).$$

H的本征矢量是 $Z \times Z$ 的斯莱特行列式. 它们是由 h 的一组基矢构成的. H的对应给定的斯莱特行列式的本征值等于出现在行列式中的 Z 个单体态的能量之和. 因此一旦得到单体哈密顿量 h 的本征值问题的解，H的本征值问题就容易解决了.

h 是一个自旋为 1/2 的粒子在一个与自旋无关的中心场中的哈密顿量，无自旋粒子的相应的本征问题的解已在第九章中给出. 自旋的唯一的影响是使每个能级的简并度加倍. $h, \boldsymbol{l}^2, l_z$ 和 s_z 组成一个相互对易的可观察量的完全集合，其本征矢量 $|nlmm_s\rangle$ 用四个量子数 n, l, m, m_s 标记. 自旋量子

数 m_s 可以取 $\pm\frac{1}{2}$，主量子数 n 与氢原子问题中的定义相同（径向波函数的节点数是 $n-l-1$）. 因为每个状态的能量 ε_{nl} 只与 n，l 有关，故每个单体态能级是 $2(2l+1)$ 度简并的.

在能谱中，ε_{nl} 能级的顺序并不严格地依赖于 $V(r)$ 的形式. 当 l 给定能级按 n 增加的顺序排列. 如果 $V(r)$ 就是核库仑场，则对应同一 n 的所有能级（$l=0,1,2,\cdots n-1$）都重合（见图 10.1）. 其他电子的屏蔽效应使得这些能级随电子离核的平均距离的增加而增高. 因此能级随 n，l 的增加而增高. 如果只限于研究基态和第一激发态. 则对所有的原子，单体态能级的相继顺序近乎相同，即

$$1s\ 2s2p\ 3s3p[4s\ \ 4d]4p[5s\ \ 4d]5p[6s\ \ 4f\ \ 5d]6p[7s\ \ 5f\ \ 6d]$$
$$2\ \ 2\ 6\ \ 2\ 6\ \ 2+10\ \ 6\ \ 2+10\ \ 6\ \ 2+14+10\ 6\ \ 2+14+10$$

括号内的能级近乎重合. 而且从一个原子到另一个原子时，其顺序可以改变，每一项下面的数字是该能级的简并度.

对于每一组 Z 个不同的单体态都相应有一个斯莱特行列式，因而对应有原子的一个定态. 这个状态的能量是所有组成它的单体态能量之和. 并且只与占据各个能级 ε_{nl} 的电子数有关. 在各个单体态能级上的占据数的一种分布确定了一个**组态**. 按照这个定义，属于同一组态的状态有相同的能量.

令 ν_i 为占据在能级 ε_i 上的电子数，ν_i 最多等于能级的简并度 g_i，若 $\nu_i=g_i$，则这些电子就形成一个**封闭壳层**；若 $\nu_i<g_i$，则壳层是**不封闭**的. ν_i 个电子在此能级的 g_i 个单体态中有

$$g_i!/\nu_i!(g_i-\nu_i)!$$

种不同的分布方式. 因此，几乎所有的组态都是简并的，仅有的例外是那些封闭壳层. 它们是非简并的.

基态的组态是把 Z 个电子放置在最低能级所组成. 因此它们分布在确定的 h 层内，前$(h-1)$个壳层是满的，最后一层一般是不满的，只有几个特殊的 Z 值($Z = 2,4,10,12,18$ 等)的情形才是例外.

以碳原子($Z = 6$)为例，基态时，$1s$ 和 $2s$ 壳层是满的，剩下的两个电子在 $2p$ 壳层. 由于两个电子在该壳层的六个状态中有$\binom{2}{6} = 15$ 种分布方式，所以碳原子基态(在独立粒子近似下)是 15 重简并的. 在氖($Z = 10$)的情形下，基态由三个封闭壳层$1s,2s$ 和 $2p$ 组成，因此是非简并的.

在最低的壳层中的电子也是最靠近原子核的，原子的化学性质实际上与这些电子的运动无关. 在化学反应所涉及的低能量范围内，原子间的相互作用，基本上(即使不是完全)依赖于最外层电子的运动. 因此，外层电子结构相似的两种电子具有相似的化学性质. 比如说，所有稀有气体(Ne,A,Kr,Xe)的外壳层都有封闭的 p 壳层； 所有卤素 (F,Cl,Br,I) 的都有缺一个一个电子的 p 壳层；而碱金属 (Na,K,Rb,Cs) 的都有只填充了一个电子的 s 壳层，下面正好有一个填满了的 p 壳层. 十分普遍的是，假如我们知道电子壳层的顺序，就很容易地指出各种化学元素在周期表中的位置[1].

13. 原子的托马斯-费米模型

当 $Z \gg 1$ 时，可以应用托马斯-费米的半经典方法来确

---

1) 对原子的化学性质的更详尽的量子力学解释，见 M. Born. *Atomic Physics*. 6th ed (Blackie, Glasgow, 1957); L. Pauling 和 E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1935). 关于原子光谱的一般理论见 E. V. Condon 和 G. H. Shortry, *The Theory of Atomic Spectra*. 4th ed (Cambridge University Press, 1957); G. Racah, *Phys. Rev.* **62**(1942) 438 和 **63**(1943)367.

定原子基态的势能.

设 $\rho(r)$ 是当原子处于基态时在体积元 $(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}+d\boldsymbol{r})$ 中找到电子的几率密度，我们假定这个函数是球对称的. 它满足归一化条件.

$$4\pi\int_0^\infty \rho(r)r^2dr = Z. \tag{14.59}$$

Z 个电子形成围绕着原子核的平均密度为 $-e\rho(r)$ 的电子云. 这样，原子中的电荷产生一个平均电势 $\Phi(r)$，它来源于:

(i) 核的点电荷，位于原点，电荷为 Ze:

(ii) 密度为 $-e\rho(r)$ 的连续电荷分布，

从数学上讲，Φ 是泊松方程

$$\Delta\Phi \equiv \frac{1}{r}\left(\frac{d^2}{dr^2}r\right)\Phi = 4\pi e\rho \tag{14.60}$$

的解，它在原点的行为是

$$\lim_{r\to 0} r\Phi = Ze. \tag{14.61}$$

在 $Z \gg 1$ 的极限情形，一个电子的电场比起所有其余电子的电场要小得多，而且在独立粒子近似中，我们可以用 $-e\Phi(r)$ 代表作用到每个电子上的势能.

原子的基态是这样的状态: Z 个电子占据着一个质量为 m 的粒子在势场 $-e\Phi(r)$ 中的 Z 个最低量子态. 因此密度 $\rho(r)$ 是最低的 Z 个能级的密度 $|\psi|^2$ 之和. 这意味着 $\rho(r)$ 和势能 $-e\Phi$ 之间存在着泛函关系. 为决定此关系，我们借助以下的**"半经典"近似.**

在经典极限情形，能量间隔 $(\varepsilon+d\varepsilon)$ 内的定态数目正比于此间隔在该经典粒子的相空间中所占的体积. 比例因子是 $2/h^3$，它是 § 6.11 中所给的数值的两倍，这是由于电子有二个自旋态. 因此在 Z 个最低的量子态被占据的原子中，电

子的能量分布就和Z个经典粒子的统计混合分布相同．这些经典电子在相空间中的密度等于

$$n(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})=\begin{cases}2/h^3 & \text{若 } \varepsilon\equiv\dfrac{p^2}{2m}-e\Phi<\varepsilon_0\\ 0 & \text{若 } \varepsilon>\varepsilon_0,\end{cases}\tag{14.62}$$

ε_0是被占据的最高能级的能量．由于能量的零点可以任意选定，我们取 $\varepsilon_0=0$．

根据经典近似的宗旨，我们假定这些电子和这种经典统计混合有相同的空间分布：

$$\rho(r)=\int n(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})d\boldsymbol{p}=\frac{2}{h^3}\int_{\varepsilon<0}d\boldsymbol{p},$$

ε用它的$\boldsymbol{p}$和Φ的表示式代替，经过简单的积分，得到

$$\rho(r)=\begin{cases}\dfrac{8\pi}{3h^3}(2me\Phi)^{3/2} & \text{若 } \Phi>0\\ 0 & \text{若 } \Phi<0,\end{cases}\tag{14.63}$$

将(14.63)代入(14.60)的右边，得到一个Φ的二阶微分方程，和(14.59)，(14.61)一起，这个函数就完全被确定了．关系式(14.61)，(14.63)，(14.59)和(14.62)是托马斯-费米模型的基本关系式．

要从这些关系式中导出Φ和ρ，作下列变量和函数的变换就会方便些：

$$r=Z^{1/3}bx\quad \Phi=\frac{Ze}{r}\chi.\tag{14.64}$$

其中

$$b=\frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{me^2}\approx 0.5\times 10^{-8}\text{cm}.\tag{14.65}$$

从(14.63)我们得到ρ为无量纲量χ和x的函数：

$$\rho = \begin{cases} \dfrac{Z^2}{4\pi b^3}\left(\dfrac{\chi}{x}\right)^{3/2} & \text{若 } \chi > 0 \\ 0 & \text{若 } \chi < 0, \end{cases} \tag{14.66}$$

基本方程(14.60)等价于方程

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \begin{cases} \chi^{-\frac{1}{2}}\chi^{3/2} & \text{若 } \chi > 0 \\ 0 & \text{若 } \chi < 0. \end{cases} \tag{14.67}$$

条件(14.61)给出 $\chi(0) = 1$. 从方程式(14.67)来看，$\chi(x)$ 显然在$(0,+\infty)$范围内最多只有一个零点. 若 x_0 是这个零点的位置，则 $(0,x_0)$ 区间 χ 是正的；在 (x_0,∞) 区间内 χ 是负的，因此，考虑到(14.64)，(14.66)和(14.67)，(14.59)变成

$$1 = \int_0^{x_0} \sqrt{x}\ \chi^{3/2}dx = \int_0^{x_0} x\chi''dx = x\chi' - \chi\Big|_0^{x_0}$$
$$= x_0\chi'(x_0) + 1$$

这个条件要求：在 χ 本身为零的点，χ' 也为零. 这意味着该点必在无穷远处.

于是，方程

$$\chi'' = x^{-1/2}\chi^{3/2} \tag{14.68}$$

的解 $\chi(x)$，并满足条件：

$$\chi(0) = 1 \quad \chi(\infty) = 0, \tag{14.69}$$

$\chi(x)$ 要用数值积分求出，图 14.1 给出这积分的结果. 知道了 $\chi(x)$，我们就能求出 $\rho(r)$ 和 $\Phi(r)$.

为了使经典近似合理，Z 个单体电子态的大部分都应在“大量子数范围”，即 $Z \gg 1$. 对于一个给定的原子，由托马斯-费米模型所给出的电子密度 $\rho(r)$ 和静电势 $\Phi(r)$ 就是如下极限情形下所得的结果[1]：把作用量子 h 和电子电荷$(-e)$

---

1) 在原点附近 $(r<b/Z)$ 以及渐近区 $(r\gg b)$，托马斯-费米方法估算的电子密度都偏高. 在原点，$\rho(r)$ 是按 $r^{-3/2}$ 发散，而没有保持常数；在无穷远处，它按 r^{-6} 趋于零，而没有按指数趋于零.

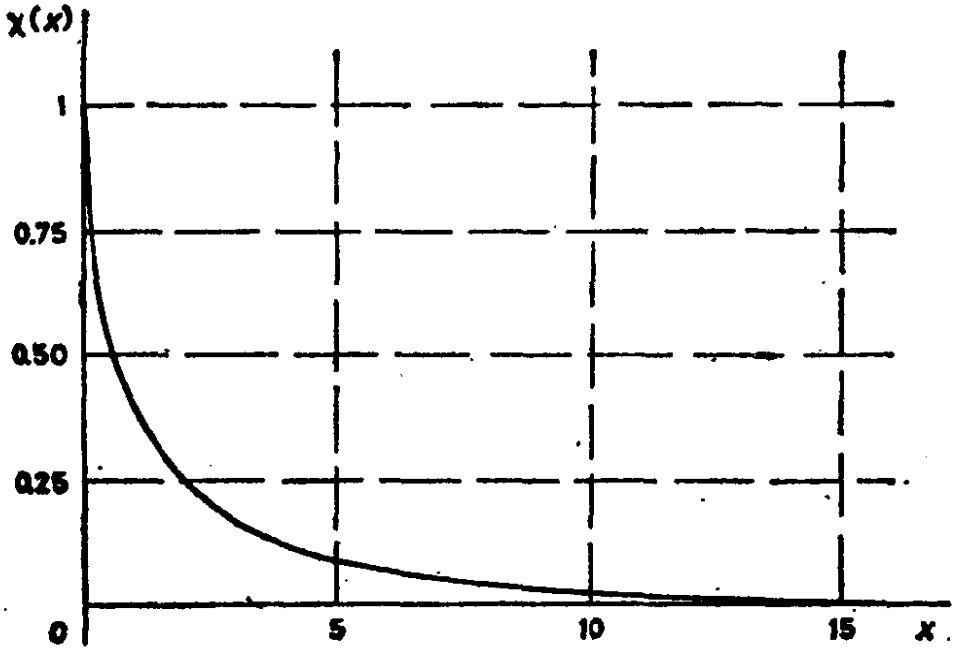


图 14.1　利用方程 (14.64—14.66) 得到的对任意 Z 值的托马斯-费米的 $\chi(x)$ 函数：
$\chi'' = x^{-1/2}\chi^{3/2}$　$\chi(0) = 1$　$\chi(\infty) = 0$

当成无穷小，而电子数 Z 当成无穷大，但特征长度 $\hbar^2/me^2$ 和电子云的总电荷 $(-Ze)$ 仍是常数.

托马斯-费米模型允许我们对原子半径作一估算. 由于电子密度只在无穷远处才为零. 因此原子在空间中并不占据着很明确的范围. 所以必须定义原子半径. 我们说的原子半径是指包含了原子的 Z 个电子的给定的 $(1-\alpha)$部分、中心在原点的球体的半径 $R(\alpha)$,按照这个定义有

$$(1-\alpha)Z = 4\pi\int_0^R \rho(r)r^2dr.$$

令

$$R(\alpha) = Z^{1/3}bX(\alpha),$$

利用(14.64),(14.66)和(14.68)，经过简短的计算得到 X 的下列方程:

$$\chi(X) - X\chi'(X) = \alpha.$$

这个方程必需数字求解.

如果我们对所有的原子采用相同的 α，则它们的 X 也都相同，故原子的半径将与 $Z^{1/2}$ 成正比.

$\alpha = \frac{1}{Z}$ 时，对应的半径为

$$\bar{R} = R\left(\frac{1}{Z}\right) = Z^{-1/2} bX\left(\frac{1}{Z}\right),$$

它是除了一个电子以外，包含了所有其余电子的球的半径. 图 14.2 给出了以 Z 为变量的 $\bar{R}$ 函数，很明显，它实际上与 Z 无关 ($\bar{R} \simeq 2—3 \times 10^{-8}$cm).

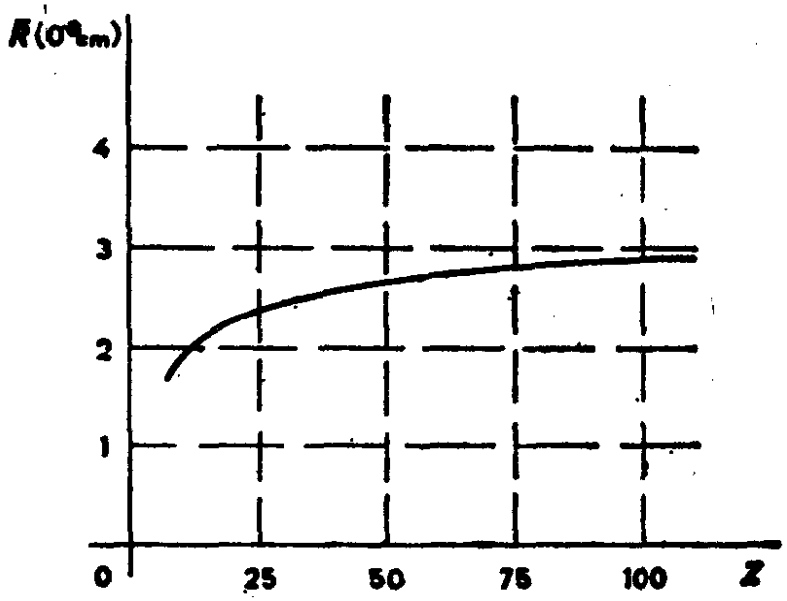


图 14.2 托马斯-费米原子的 $\bar{R}$ 与 Z 的关系

$$4\Pi \int_0^R \rho(r) r^2 dr = Z - 1$$

14. 核子系统和同位旋

我们来考察 Z 个质子和 N 个中子组成的一个系统. 它的运动是由某个哈密顿量所决定. 中子和质子是同类粒子，为

了区分它们，我们用 1 到 Z 的整数标记质子，用 $Z+1$ 到 $Z+N=\mathcal{N}$ 的整数标记中子，A_Z 代表头 Z 个粒子的反对称化算符；A_N 表示后 N 个粒子的反对称化算符。我们仍使用 §2—4 中的符号。令

$$\varphi(q^{(1)},q^{(2)},\cdots,q^{(Z)},q^{(Z+1)},\cdots,q^{(\mathcal{N})})$$

是对称表象 $\{Q\}$ 中表示这系统的一个可能状态的波函数。φ 服从反对称化条件

$$A_N\varphi=\varphi \quad A_Z\varphi=\varphi. \tag{14.70}$$

还有另外一种描述 Z 个质子和 N 个中子系统的形式，它和上述形式完全等价。在这第二种形式中，质子和中子不再看成是两种不同的粒子，而是同一种粒子(**核子**)的两种不同状态。把所讨论的系统看成是 $\mathcal{N}$ 个核子系统，其中 Z 个处于质子状态；N 个处于中子状态，于是 $\mathcal{N}$ 个核子是全同费米子，系统的状态对于这 $\mathcal{N}$ 个全同费米子的置换是反对称的。本节的目的是叙述这种新形式，并证明它与通常的形式等价。

为了区分质子态和中子态，每个核子必需赋予一个新的力学量(它的电荷)，它有两种可能值。我们用 $\tilde{\omega}$ 和 ν 表示相应的本征态：$\tilde{\omega}$ 表示质子态；ν 表示中子态。核子的电荷空间和自旋空间相同是二维的。因此我们可以用类似于自旋空间中引入算符的方式来定义一个算符，而且它具有相同的数学性质。在以 $\tilde{\omega}$ 和 ν 为基矢的表象中，我们特地考虑三个泡利矩阵。和矢量 $\boldsymbol{\sigma}\equiv(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ 类似，这三个矩阵在电荷空间是矢量算符 $\boldsymbol{\tau}\equiv(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)$，矢量

$$\boldsymbol{t}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\tau} \tag{14.71}$$

与自旋 $\boldsymbol{s}$ 类似，称它为核子的**同位旋**，我们看到

$$t_3\tilde{\omega}=\frac{1}{2}\ \tau_3\tilde{\omega}=\frac{1}{2}\tilde{\omega} \qquad t_3\nu=\frac{1}{2}\ \tau_3\nu=-\frac{1}{2}\nu,$$

到质子态和中子态的投影算符分别是 Π_ω 和 Π_ν，由

$$\Pi_\omega = \frac{1}{2}(1+\tau_3)\ \Pi_\nu = \frac{1}{2}(1-\tau_3) \qquad (14.72)$$

给定。表示核子电荷的算符是

$$e\Pi_\omega = \frac{1}{2}(1+\tau_3)e.$$

$\mathcal{N}$ 个单体的电荷空间的乘积就是具有 $\mathcal{N}$ 个核子的系统的电荷空间 $\mathcal{S}_C$。系统的总电荷用算符

$$C = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} e\Pi_\omega^{(i)} = e\left(\frac{1}{2}\mathcal{N} + T_3\right) \qquad (14.73)$$

表示，T_3 是**总同位旋**

$$\boldsymbol{T} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{t}^{(i)} \qquad (14.74)$$

的第三分量。

取 $\mathcal{N}$ 个 $\tilde{\omega}$ 矢量和 ν 矢量相乘，得到 $\mathcal{S}_C$ 中的一组正交基。特别是在基矢量

$$\zeta = \tilde{\omega}^{(1)}\tilde{\omega}^{(2)}\cdots\tilde{\omega}^{(z)}\nu^{(z+1)}\cdots\nu^{(\mathcal{N})}$$

表示的电荷态中，头 Z 个粒子是质子，后 N 个粒子是中子。下面我们只研究电荷 $C = Ze$ 的态，即

$$T_3 = \frac{1}{2}(Z-N).$$

对应此本征值，我们可以作出 $N!/Z!N!$ 个基矢。其中典型的一个是

$$\zeta_\alpha = \tilde{\omega}^{(\alpha_1)}\tilde{\omega}^{(\alpha_2)}\cdots\tilde{\omega}^{(\alpha_Z)}\nu^{(\alpha_{Z+1})}\cdots\nu^{(\alpha_{\mathcal{N}})},$$

它表示这样的状态：Z 个粒子 $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_Z$ 是质子，而其余的是中子。

$\mathcal{N}$ 个核子系统的刃矢是 $\mathcal{S}_C$ 空间和其他力学变量的 $\mathcal{S}_0$

空间的张量积所形成的空间中的矢量，在置换这 $\mathcal{N}$ 个核子时，对电荷和其他变量进行同样的置换，若 P_C 表示给定的电荷置换；P_0 表示其他变量的同一置换，则整个置换用算符

$$P = P_0 P_C$$

表示，$\mathcal{N}$ 个核子系统的反对称化算符是

$$A = \frac{1}{\mathcal{N}!}\sum_P (-)^P P = \frac{1}{\mathcal{N}!}\sum_P (-)^P P_0 P_C. \qquad (14.75)$$

总电荷为 Ze 的系统状态是 $\mathscr{E}_C \otimes \mathscr{E}_0$ 空间中的那些 Φ 矢量，它们符合反对称化条件

$$A\Phi = \Phi, \qquad (14.76)$$

并且满足方程

$$T_3\Phi = \frac{1}{2}(Z - N)\Phi. \qquad (14.77)$$

现在来证明：满足条件(14.76)和(14.77)的矢量 Φ 与 $\mathscr{E}_0$ 空间中满足条件(14.70)的 φ 之间有一一对应关系，即

$$|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!Z!}}\, A|\varphi\rangle|\zeta\rangle, \qquad (14.78)$$

$$|\varphi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!Z!}}\, \langle\zeta|\Phi\rangle, \qquad (14.79)$$

而且这种一一对应关系使得标量积守恒。

考虑一个服从条件(14.70)的矢量 $|\varphi\rangle$，由(14.78)式得到的相应的 $|\Phi\rangle$，显然满足(14.76)及(14.77)，因为 T_3 与 A 对易，并且 $T_3|\zeta\rangle = \frac{1}{2}(Z - N)|\zeta\rangle$.

我们接着证明部分标量积(14.79)再次矢量 $|\varphi\rangle$. 利用(14.75)和(14.78)得到

$$\sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!Z!}}\langle\zeta|\Phi\rangle=\sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!Z!}}\langle\zeta|A|\Phi\rangle \tag{14.80}$$

$$=\frac{1}{N!Z!}\sum(-)^{p}P_0|\varphi\rangle\langle\zeta|P_C|\zeta\rangle,$$

这里的 $\mathcal{N}!$ 个置换可分为两组：第一组为 F，它是只在头 Z 个粒子之间作交换以及(或者)只在后 N 个粒子之间作交换的置换．F 的这 $(N!Z!)$ 个置换保持矢量 $|\zeta\rangle$ 不变，而使矢量 $|\varphi\rangle$ 乘以 $(-)^{f}$：

$$\langle\zeta|F_C|\zeta\rangle=1\quad F_0|\varphi\rangle=(-)^{f}|\varphi\rangle.$$

第二组是 G，它使矢量 ζ 变成另一个矢量 ζ_α：因此

$$\langle\zeta|G_C|\zeta\rangle=0,$$

于是在(14.80)右边的求和式中有 $N!Z!$ 个非零项．每一项都等于 $|\varphi\rangle$，由此得出所要的结果(14.79)．

很容易看出：对应关系(14.76)使得标量积不变，因为如果 $|\Phi\rangle$ 和 $|X\rangle$ 分别对应 $|\varphi\rangle$ 和 $|\chi\rangle$，那末由于

$$|X\rangle=\sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!Z!}}A|\chi\rangle|\zeta\rangle,$$

以及 $|\Phi\rangle$ 服从(14.76)和(14.78)，得到

$$\langle X|\Phi\rangle=\sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!Z!}}\langle\chi|\langle\zeta|\Phi\rangle=\langle\chi|\varphi\rangle.$$

还需要证明的是这种对应关系具有 1 对 1 的性质．令 $|\Phi\rangle$ 是服从条件(14.76)和(14.77)的矢量，而 $|\varphi\rangle$ 是和 (14.76) 相联系的矢量，由于(14.77)，Φ 是矢量 $|\zeta_\alpha\rangle$ 的线性组合，其系数是 $\mathscr{E}_0$ 空间中的矢量：

$$|\Phi\rangle=\sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!Z!}}\sum_{\alpha}|\varphi_\alpha\rangle|\zeta_\alpha\rangle,$$

$|\varphi\rangle$ 是右边的求和式中 $|\zeta\rangle$ 的系数．一个 F 类的置换作用在

Φ上就给出

$$F|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!Z!}}\sum_{\alpha}(F_0|\varphi_\alpha\rangle)(F_C|\zeta_\alpha\rangle), \quad (14.81)$$

还有

$$F|\Phi\rangle = (-)^l|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!Z!}}\sum_{\alpha}(-)^l|\varphi_\alpha\rangle|\zeta_\alpha\rangle, \quad (14.82)$$

至于 F_C 对 $|\varphi_\alpha\rangle$ 的作用，只使它变成另一个 $|\zeta_\alpha\rangle$，特殊的是，它使 $|\zeta\rangle$ 保持不变. 因此在 $F|\Phi\rangle$ 的展开式中，$|\zeta\rangle$ 的系数就是(14.81)式右边的 $F_C|\zeta\rangle$ 的系数. 令它和(14.82)中的 $|\zeta\rangle$ 的系数相等，得到

$$F_0|\varphi\rangle = (-)^l|\varphi\rangle.$$

这表明: 与 $|\Phi\rangle$ 对应的 $|\varphi\rangle$ 确实具有反对称性质 (14.70). 证毕.

Z 个质子和 N 个中子的任一状态在通常的形式中用矢量 $|\varphi\rangle$ 表示，而在新形式中用相应的矢量 $|\Phi\rangle$ 表示，因为这是一种一一对应的关系，并保持标量积不变，所以利用通常形式的矢量求得的几率振幅等于用新形式的矢量求得的几率振幅，从而保证了两种形式的等效性. 如果一个力学量在通常的形式中用算符 Q 表示，则在新形式中用 $\mathscr{S}_0 \times \mathscr{S}_C$ 空间的算符 $\hat{Q}$ 表示，$\hat{Q}$ 对 $\mathcal{N}$ 个核子是对称的. 它与 Q 有相同的本征值谱，而它的本征矢量可用关系式 (14.78) 从 Q 的本征矢量得到. $\hat{Q}$ 是对称算符，其矩阵元满足方程式

$$\langle X|\hat{Q}|\Phi\rangle = \langle\chi|Q|\varphi\rangle. \quad (14.83)$$

作为一个例子，假定核子间有二体力，我们来写出 $\hat{H}$.

哈密顿量是

$$H = K + V, \quad (14.84)$$

其中 K 是总动能. 若 $k_p(\xi)$ 和 $k_n(\xi)$ 分别是质子和中子的动能，则有

$$K = K_p + K_n,$$

其中

$$K_p = \sum_{i \leqslant Z} k_p^{(i)} \quad K_n = \sum_{i>Z} k_n^{(i)}.$$

总位能 V 包含 $\frac{1}{2}\mathcal{N}(\mathcal{N}-1)$ 个两体相互作用项，有 $\frac{1}{2}Z(Z-1)$ 个质子-质子作用项

$$V_{pp} = \sum_{i<j<Z} v_{pp}^{(ij)},$$

$v_{pp}^{(ij)} \equiv v_{pp}(\xi^{(i)}, \xi^{(j)})$ 表示质子 i 和 j 之间的相互作用势能；此外还有 ZN 个质子-中子相互作用项

$$V_{pn} = \sum_{i<Z} \sum_{j>Z} v_{pn}^{(ij)}$$

和 $\frac{1}{2}N(N-1)$ 个中子-中子相互作用项

$$V_{nn} = \sum_{j>i>Z} v_{nn}^{(ij)},$$

因此总位能是

$$V = V_{pp} + V_{pn} + V_{nn}.$$

与 K 对应的算符 $\hat{K}$ 是

$$\hat{K} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} (k_p^{(i)} \Pi_\omega^{(i)} + k^{(i)} \Pi_\nu^{(i)}), \qquad (14.85)$$

它确实是对称的，并且还与 A 对易，为了证明它满足 (14.83)，我们回到矢量 $|\Phi\rangle$ 和 $|X\rangle$ 以及投影算子 Π_ω 和 Π_ν 的定义上来：

$$\frac{N!Z!}{\mathcal{N}!}\langle X|\hat{K}|\Phi\rangle = \langle \chi\zeta|A\hat{K}A|\varphi\zeta\rangle$$
$$= \langle \chi\zeta|\hat{K}A|\varphi\zeta\rangle$$

$$= \langle \chi\zeta | KA | \varphi\zeta \rangle .$$

由此得出

$$\langle X | \hat{K} | \Phi \rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!Z!}} \langle \chi\zeta | K | \Phi \rangle .$$

因为K不作用到电荷变量上，故部分标量积$\langle \zeta | K | \Phi \rangle$等于$K$作用到$\langle \zeta | \Phi \rangle$上的结果，应用(14.79)，我们得到

$$\langle X | \hat{K} | \Phi \rangle = \langle \chi | K | \varphi \rangle .$$

与此类似，对应于V的算符是

$$\hat{V} = \hat{V}_{pp} + \hat{V}_{pn} + \hat{V}_{nn}, \tag{14.86}$$

其中

$$\hat{V}_{pp} = \sum_{i<j<\mathcal{N}} v_{pp}^{(ij)} \Pi_{\varpi}^{(i)} \Pi_{\varpi}^{(j)} \tag{14.86a}$$

$$\hat{V}_{pn} = \sum_{i<j<\mathcal{N}} v_{pn}^{(ij)} [\Pi_{\varpi}^{(i)} \Pi_{\nu}^{(j)} + \Pi_{\nu}^{(i)} \Pi_{\varpi}^{(j)}] \tag{14.86b}$$

$$V_{nn} = \sum_{i<j<\mathcal{N}} v_{nn}^{(ij)} \Pi_{\nu}^{(i)} \Pi_{\nu}^{(j)}, \tag{14.86c}$$

它们可以用与证明$\hat{K}$相同的方法去证明.

以上关于质子和中子系统的理论也能应用到包含两种以上的费米子系统. 考虑一个包含r种、同类的但能区分的费米子系统：n_1个1类费米子，n_2个2类费米子，……n_r个r类费米子. 与其将不同类的费米子看成不同的粒子，不如将这r种费米子看成同一种费米子的不同状态$|1\rangle, |2\rangle, \cdots |r\rangle$，并把这系统看作是$n_1 + n_2 + \cdots + n_r$个同一种费米子的系统，其中$n_1$个处于$|1\rangle$态，$n_2$个处于$|2\rangle$态，……$n_r$个处于$|r\rangle$态. 利用在核子体系中已用过的方法，可以证明这种"同位"形式与原来的形式等价. 这种讨论同样也适用于玻色子系统，只要把各处的反对称化运算变成对称化运算(问题14.9).

15. 同位旋的效用　电荷无关性

考虑$\mathcal{N}$个核子的系统，只要涉及的是有限的Z个质子和N个中子，那么把质子和中子当成不同的粒子(通常的形式)比之把它们当成不同的电荷态的核子(同位旋形式)更为直观简单.

另一方面，当涉及原子核系统的电荷是不守恒的现象时，则同位旋形式是不可少的. 典型的例子是β衰变，在核的β放射性衰变中，核子数保持不变，但一个中子转变为质子，在这种现象的理论中，人们把核当成$\mathcal{N}$个核子的系统，它与量子化的电子场和中微子场相互作用. β衰变的理论已超出本书的范围，这里只作为一个例子提及它.

除此之外，对同位旋形式感兴趣的主要原因在于如下事实：核相互作用实际上与核子的电荷无关.

中子和质子的质量在0.2% 的误差范围内是相等的，因此核子的动能实际上与电荷无关.

$$k_p = k_n = k, \tag{14.87}$$

在一定程度上纯电磁相互作用可以忽略[1]，核子-核子的势能也近似地与电荷无关：

$$v_{pp} = v_{pn} = v_{nn} = v. \tag{14.88}$$

我们将在核子之间只有二体力作用的假设[2]之下来考察电荷无关性的推论.

---

1) 电磁效应只在核子之间的距离足够大时（$\gg 10^{-13}$cm）才起重要作用；距离大时，v_{pn}和v_{nn}实际上是零. v_{pp}就变成二个质子之间的库仑斥力，有关核力与电荷无关的实验证据的讨论见上章第33节附注提到的 Blatt 和 Weisskopf 著作，也可见 D. H. Wilkinson. *Phil. Mag.* **1** (1956) 1031.

2) 为证明电荷无关性和不变性(14.91)等价，是不必作此限制的，它可以在更普遍的情形下利用附录D§18的定理证明.

在通常的形式中，电荷无关性的假设表现在H的以下两种特性上：

(i) H与Z和N无关，只与粒子的总数$\mathcal{N}$有关；

(ii) 它对这$\mathcal{N}$个粒子的置换是对称的。而不是只对质子之间的置换、或者中子之间的置换对称。

这些特性是(14.87)和(14.88)的直接结果，如果它们成立，则哈密顿量(14.82)取如下形式：

$$H=\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} k^{(i)}+\sum_{i<j<\mathcal{N}} v^{(ij)}, \tag{14.89}$$

其中$\sum_{i<j<\mathcal{N}}$与(14.86a, b, c)式中的一样。是对$\mathcal{N}$个粒子集合的全部$\frac{1}{2}\mathcal{N}(\mathcal{N}-1)$个数偶$(ij)$求和。

在同位旋形式中，电荷无关性反映在哈密顿量H与电荷变量无关上，并且显然有

$$\hat{H}=H, \tag{14.90}$$

等式右边的H看成是$\mathscr{E}_0\otimes\mathscr{E}_C$空间中的算符，这可以通过同位旋形式中算符的定义(14.83)来证明，或直接从(14.85)和(14.86)计算$\hat{K}$和$\hat{V}$(假定(14.87)和(14.88)成立)后一方法给出$\hat{V}$

$$\hat{V}=\sum_{i<j<\mathcal{N}} v^{(ij)}[\Pi_n^{(i)}\Pi_n^{(j)}+\Pi_n^{(i)}\Pi_p^{(j)}+\Pi_p^{(i)}\Pi_n^{(j)}+\Pi_p^{(i)}\Pi_p^{(j)}].$$

由于

$$\Pi_n^{(i)}+\Pi_p^{(i)}=1,$$

所以

$$\hat{V}=\sum_{i<j<\mathcal{N}} v^{(ij)}=V.$$

因为$\hat{H}$与电荷变量无关，它和总同位旋的三个分量对

易:

$$[\hat{H},\boldsymbol{T}]=0. \tag{14.91}$$

现在我们证明其逆定理也成立，即如果 $\hat{H}$ 满足(14.91)．则 $\hat{H}$ 可以写成与电荷变量无关的算符形式．

$\hat{H}$ 是每个粒子的普通变量 ξ 和电荷变量 τ 的某个函数，考虑到我们的关于力的属性的假设，这个函数的形式必定是

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{A}\hat{k}^{(i)}+\sum_{i<j<A}v^{(ij)},$$

其中 $\hat{k}^{(i)}$ 只与变量 i 有关，$v^{(ij)}$ 只与变量 i 和 j 有关，然而同位旋和普通的自旋有相同的数学性质．特别是矢量 $\boldsymbol{\tau}^{(i)}$ 的分量具有泡利矩阵的所有特性，这就使得[见(13.78—79)式] $\boldsymbol{\tau}^{(1)},\cdots\boldsymbol{\tau}^{(A)}$ 的分量的任意函数 $\hat{H}$ 总可以表示成这些算符的线性函数．又因为 $\hat{H}$ 与 $\hat{T}$ 对易，它对 $\mathscr{S}_C$ 中的转动是不变量，所以 $\hat{H}$ 是矢量 $\boldsymbol{\tau}^{(1)},\cdots\boldsymbol{\tau}^{A}$ 的标量函数；$v^{(ij)}$ 是 $\boldsymbol{\tau}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{\tau}^{(j)}$ 的线性标量函数，因此其形式必需是

$$v^{(ij)}=a^{(ij)}+(\boldsymbol{\tau}^{(i)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(j)})b^{(ij)},$$

其中 $a^{(ij)}$ 和 $b^{(ij)}$ 仅是轨道和自旋变量的函数，为了完成证明，我们只需证明：$(\boldsymbol{\tau}^{(i)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(j)})$ 对 $\mathscr{S}_0\otimes\mathscr{S}_C$ 空间的**反对称**矢量的作用和仅对 $\mathscr{S}_0$ 空间的变量有作用的一个算符的作用是相同的．$(\boldsymbol{\tau}^{(i)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(j)})$ 与 $P_C^{(ij)}$ 的关系是由狄拉克等式给出的

$$P_C^{(ij)}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\tau}^{(i)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(j)}), \tag{14.92}$$

$P_C^{(ij)}$ 是电荷空间中与对换 (ij) 相应的算符．

为了证实(14.92)式，我们引入 (ij) 对的同位旋:

$$\boldsymbol{t}_{ij}=\boldsymbol{t}^{(i)}+\boldsymbol{t}^{(j)}.$$

电荷空间中的任意状态都是 $t_{ij}=1$ 的状态 $|1\rangle$ 和 $t_{ij}=0$ 的状态 $|0\rangle$ 之和．任何三重态都对 i 和 j 对称，任何单态都对 i 和 j 反对称．于是

$$t_{ij}^1|1\rangle = 2|1\rangle \quad t_{ij}^1|0\rangle = 0$$
$$P_C^{(ij)}|1\rangle = |1\rangle \quad P_C^{(ij)}|0\rangle = -|0\rangle,$$

因此

$$P_C^{(ij)} = t_{ij}^1 - 1,$$

由此并利用等式

$$t_{ij}^1 = \frac{1}{2}(3 + \tau^{(i)} \cdot \tau^{(j)})$$

可导出(14.92),由此得到

$$\tau^{(i)} \cdot \tau^{(j)} = 2P_C^{(ij)} - 1.$$

但在 $\mathscr{E}_0 \otimes \mathscr{E}_C$ 的反对称矢量空间中有

$$P^{(ij)} = P_C^{(ij)} P_0^{(ij)} = -1,$$

于是

$$P_C^{(ij)} = -P_0^{(ij)}.$$

因而算符 τ^i、$\tau^{(j)}$ 可以用作用在普通空间的变量上的算符

$$-2P_0^{(ij)} - 1$$

代替. 证毕.

电荷无关性与电荷空间中的转动不变性等价. 这是非常普遍的[1]. 因为所有关于转动的数学推导都适用于电荷空间中的转动的这一特殊情况(同位旋的相加, 维格纳-爱卡特定理,选择定则等等). 这种等价性提供了一种把核力的电荷无关性考虑在内的非常方便的方法.

练 习 和 问 题

1.在 §2 中, 同类粒子系统的 N 个粒子的置换 p 所对应的算符 P, 是通过它对给定的对称表象 $\{Q\}$ 的基矢的作用来定义, 试证明这个定义与所选的表象无关.

---

1) 见前一个注释.

2. 用 S_n 和 A_n 代表对粒子 $1\cdots\cdots n$ 的对称化和反对称化算符，而 S_{n-1}，A_{n-1} 代表对粒子 $1\cdots\cdots n-1$ 的对称化和反对称化算符，证明：

$$S_n = \frac{1}{n}\left[1 + \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right] S_{n-1} = \frac{1}{n} S_{n-1}\left[1 + \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right]$$

$$A_n = \frac{1}{n}\left[1 - \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right] A_{n-1} = \frac{1}{n} A_{n-1}\left[1 - \sum_{i=1}^{n-1} P_{in)}\right].$$

3. 证明在 N 个同类粒子系统的对称可观察量当中，只有在 $N=2$ 时可以有一个对易的可观察量的完全集.

4. 试求质子-质子散射截面(在质心坐标系中)，设入射质子沿给定方向 O_u 上完全极化$\left(\text{沿 } O_u \text{ 方向的自旋分量为} +\frac{1}{2}\right)$，并且靶质子为：

(i) 在同一方向上完全极化；

(ii) 在相反方向上完全极化$\left(\text{沿 } O_u \text{ 方向上的自旋是} -\frac{1}{2}\right)$；

(iii) 非极化

将(14.56)式与此三种情形下所得的表示式作比较.

5. (14.56)式给出的是自旋为 1/2 的两个费米子的散射截面(相互作用与自旋无关). 如果两个全同粒子是：(i)自旋为 i 的费米子 (ii) 自旋为 i 的玻色子时，截面将如何修改?

6. 在原子的托马斯-费米模型中，计算各个电子与原点的平均距离 $\langle r\rangle$，并将它与氢原子的$\langle r\rangle$数值比较$\left(\text{利用积分}\int_0^\infty x(x)dx \simeq 1.8\right)$.

7. 原子序数为 Z 的原子经 p 次电离，利用托马斯-费米模型计算电子密度 $\rho(r)$，证明 $\rho(r)$ 的表示式 (14.66) 仍然正确，b 和 x 的定义与§ 13 [见(14.64—65)式]中的相同. 而且出现在表示式中的函数 $x(x)$ 是方程(14.67)的解，它在$(0,\infty)$区间的某一点 x_0 变为零，并满足条件

$$x(0) = 1 \quad x'(x_0) = -p/Zx_0.$$

考察 $\rho(r)$ 曲线和静电势 $\Phi(r)$ 的普遍性质.

8. 考虑 Z 个电子的系统，其哈密顿量与自旋无关. 证明：对总自旋分量 S_z 有定值 H 的状态，其能谱与用下列办法得到的相同(即相同的能级位置和简并度)：把自旋为 $\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$的电子当作不同类的费米

子处理，其中头 $\left(\frac{1}{2}Z + M\right)$个电子处于$\frac{1}{2}$自旋状态中，其余的在$-\frac{1}{2}$状态中.

9.对 r 种同类但不相同的 $\mathcal{N}$ 个费米子系统，用 n_1 个 1 类的费米子，n_2 个 2 类的费米子，…n_r个 r 类的费米子（$n_1+n_2+\cdots+n_r=\mathcal{N}$），建立§14 中所定义的“同位旋”形式. 当这$\mathcal{N}$个粒子是玻色子而不是费米子时，这个形式应作何种修改?

第十五章[1] 不变性和守恒定律 时间反演

1. 引言

这一章专门系统阐述物理系统的运动方程对某些变换具有的不变性，以及它们对系统属性作出的一些推论.

第 I 节给出若干数学补充.

在第 II 节中，我们阐述变换和变换群的一般性质. 动力学变量和状态的每一个变换 $\mathscr{T}$ 都伴随一个变换算符 T，它作用在描述状态的刃矢上. T 必须是**幺正线性**的，或者是**幺正反线性**的，而且利用系统的基本可观测量的变换规律，可将它确定到只差一个任意相因子. 事实上，除时间反演外，T 总是线性的. 物理学的各种变换可以构成某些变换群 $\mathscr{G}$，其中每一个群又和一个变换算符群 G[2] 相联系. 回顾这些最重要的群之后，我们列举一些简单的例子，用于说明 $\mathscr{G}$ 为有限群或连续群(它的有限变换定义为一系列无穷小变换的相继作用)时，G 是怎样构成的.

在第 III 节中，我们讨论与不变性密切相关的问题. 在该节中的变换是时间无关的和线性的，所得的结果只不过是以前讨论转动时得到的那些结果的简单推广而已 (第十三章). 假定动力学态对某一群 $\mathscr{G}$ 的变换具有不变性等价于假定哈

---

1) 第四部分(第十六章至第十九章)与本章关系甚小，如果需要的话，可先行阅读；其中少数特别标明的内容虽与本章有关，但第一次读本书时可略去.

2) 这一章用到群及其表示有关的一些概念，可在附录D的第 I 和第 II 节找到.

密顿量H与群G的算符对易．于是，由G的算符构成的任一个可观测量为运动常数．因此每一个G不变性对应一些**守恒定律**．考虑H的这些对称性之后，我们可以简化它的对角化，并且对它的本征值的简并性也能作出一些预言．

时间反演不变性与其余的不变性有所不同．这是由于它的物理含义以及它对应反线性算符造成的．我们在第 IV 节中讨论这些问题．

经典力学和量子力学之间的惊人相似性在这一章中处处都会表现出来，特别在变换的定义，在运动方程的不变性与哈密顿量对称性之间的联系，以及存在守恒定律等问题上．

I. 数学补充　反线性算符

2. 三个有用的定理

定理 I. 两个线性算符A和B相等的充分和必要条件是

$$\langle u|A|u\rangle = \langle u|B|u\rangle.$$

定理 II. 两个线性算符A和B在不计相因子时相等，即

$$A = Be^{i\alpha} \tag{15.1}$$

的充分和必要条件是对任何$|u\rangle$和$|v\rangle$下式成立

$$|\langle u|A|v\rangle| = |\langle u|B|v\rangle|. \tag{15.2}$$

定理 III. 如果空间$\mathscr{E}$的矢量之间存在一一对应$\mathscr{T}$（被确定到差一个任意常数），而且它使标量积保持不变，则总可以适当地选择相因子，使得$\mathscr{T}$或者是么正线性的，或者是么正反线性的．

定理 I 已在第七章(§ 5)讲过．为了完整起见，这里还是简要地提一下．

关于定理 II，显然(15.2)是(15.1)的一个推论．为了证明其逆也是正确的，我们选择一个具体的表象，在这表象中我们

分别用 A_{ij} 和 B_{ij} 代表 A 和 B 的矩阵元。因为这一表象的基矢满足(15.2),我们得到

$$|A_{ij}| = |B_{ij}| \text{ 对所有的 } i, j. \tag{15.3}$$

令 $|u\rangle$ 是第 i 个基矢,$|v\rangle$ 是第 j 和第 k 个基矢的线性组合,则对复系数 x_j 和 x_k 的所有取值,我们类似地得到

$$|A_{ij}x_j + A_{ik}x_k| = |B_{ij}x_j + B_{ik}x_k|.$$

考虑到 (15.3),上一方程写成

$$\mathrm{Re}[x_j x_k^*(A_{ij}A_{ik}^* - B_{ij}B_{ik}^*)] = 0.$$

为了使此式对任意的 $x_j x_k^*$ 都成立,要求

$$A_{ij}A_{ik}^* - B_{ij}B_{ik}^* = 0.$$

由此[并考虑到(15.3)]得到

$$\frac{A_{ij}}{B_{ij}} = \frac{A_{ik}}{B_{ik}}. \tag{15.4}$$

对于给定的 i,上面的讨论也适用于各个列指标 j 和 k,因此证明了比值 A_{ij}/B_{ij} 与 j 无关;我们又可以对换行和列,再重复上面的论证,于是证明了这个比值也与 i 无关. 根据(15.3),A 和 B 的矩阵元的模是相等的. 因此,这个比值必需是模为 1 的数:

$$\frac{A_{ij}}{B_{ij}} = e^{i\alpha} \quad (\text{对所有的 } i \text{ 和 } j).$$

换言之,在不计相因子 $e^{i\alpha}$ 时,算符 A 和 B 相等. 证毕.

下面考虑定理 III. 根据假设,$\mathscr{E}$ 的每一矢量 $|u\rangle$ 对应一个由规则 $\mathscr{T}$ 决定的矢量 $|u'\rangle$. $|u'\rangle$ 可确定到只相因子未定. 我们对矢量 $|u'\rangle$ 的相位作特定的选择,那末,规则 $\mathscr{T}$ 就确定了 $\mathscr{E}$ 的矢量之间的一一对应:

$$|u'\rangle = \mathscr{T}[|u\rangle] \quad |u\rangle = \mathscr{T}^{-1}[|u'\rangle], \tag{I}$$

而且这对应保持标量积的模不变:

$$|\langle u'|v'\rangle| = |\langle u|v\rangle|. \tag{II}$$

令 $$|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |n\rangle, \cdots \tag{15.5}$$
是$\mathscr{E}$中的正交矢量的完备集. 与它们相应的集
$$|1'\rangle, |2'\rangle, \cdots, |n'\rangle, \cdots \tag{15.5'}$$
也是正交完备的. 正交的原因在于: 由 (II) 可知, $\mathscr{T}$ 使模方和正交性不变; 完备的原因在于: 若存在一个矢量 $|a'\rangle$, 它与 (15.5') 的所有矢量正交,则矢量 $|a\rangle \equiv \mathscr{T}^{-1}[|a'\rangle]$ 与 (15.5) 的所有矢量正交,但按假设这是不可能的.

令
$$u_n \equiv \langle n|u\rangle \quad u'_n \equiv \langle n'|u'\rangle, \tag{15.6}$$
我们要证明: 对带撇刃矢的相位作适当的选择, 则下面两个关系式中总有一个成立,
$$u'_n = u_n, \text{ 对任意的 } |u\rangle \text{ 和 } n, \tag{15.7a}$$
$$u'_n = u_n^*, \text{ 对任意的 } |u\rangle \text{ 和 } n, \tag{15.7b}$$
注意,由条件 (II), 显然有:
$$|u'_n| = |u_n|,$$
因此,我们只需研究 u'_n 和 u_n 之间的相位关系就能作出回答.

为此, 我们要求 $|1'\rangle + |n'\rangle$ 对应于 $|1\rangle + |n\rangle$, 并以此来固定各个基刃矢的相位.

我们先就 $|u\rangle$ 是"实"刃矢的情况 (即所有 u_n 是实数)证明关系式(15.7). 将 (II) 应用到 $|u\rangle$ 和 $|1\rangle + |n\rangle$ 的标量积上,得到
$$|u_1 + u_n| = |u'_1 + u'_n|.$$
如果我们选择 $|u'\rangle$ 的相位, 使 $u'_1 = u_1$, 就得到所希望的结果: $u'_n = u_n$. 上面的论证不能用于 $u_1 = 0$ 的情形, 不过将上述论证扩充到适用于此种情况也是容易的,这里不再叙述.

现在考虑任意的刃矢 $|u\rangle$. 将 (II) 应用到 $|u\rangle$ 和"实"刃矢 $|j\rangle + |j+1\rangle + \cdots + |j+k\rangle$ 的标量积上,得到

$$\left|\sum_{s=0}^{k} u_{j+s}\right| = \left|\sum_{s=0}^{k} u'_{j+s}\right|, \tag{15.8}$$

此式对任意的 j 和 s 都成立. 为了使这结果形象化，利用 $|u\rangle$ 和 $|u'\rangle$ 的下述几何表示甚为方便：让 $|u\rangle$ 与折线 (Γ) 相联系，(Γ) 是在复平面上由 $|u\rangle$ 的各个分量 $u_1, u_2, \cdots, u_n, \cdots$ 所代表的矢量按首尾相接而得到的折线. 类似地，$|u'\rangle$ 用折线 (Γ') 表述，(Γ') 由 $u'_1, u'_2, \cdots, u'_n, \cdots$ 所代表的矢量按同样的方式得到. (15.8) 意味着：(Γ) 的任意两个顶点之间的距离等于 (Γ') 的相应顶点之间的距离. 因此，或者 (a)：通过一个转动，(Γ) 可以和 (Γ') 重合；或者 (b)：通过一个转动和一个相对于实轴的反射，(Γ) 可以和 (Γ') 重合.

在情况 (a) 中，我们利用 $u'_1 = u_1$ 这要求来选择 $|u'\rangle$ 的相位. 按此选择，(Γ) 和 (Γ') 相重合，即

$$u'_n = u_n, \text{ 对任意的 } n.$$

在情况 (b) 中，我们这样选择相位，使得 $u'_1 = u_1^*$. 从而 (Γ') 是 (Γ) 对实轴的镜像，即

$$u'_n = u_n^*, \text{ 对任意的 } n.$$

最后，我们证明：实际上，只有两种可能性，所有刃矢或者属于情况 (a)，或者属于情况 (b).

为了明确起见，假定特定的矢量 $|j\rangle + e^{i\alpha}|k\rangle$ $(\alpha \neq n\pi)$ 属于情况 (a). 于是，任意矢量 $|u\rangle$（它的分量 u_j, u_k 不为 0，且它的相对相位不等于 $n\pi$）必然也属于情况 (a)，只要将性质 (II) 应用到 $|u\rangle$ 和 $|j\rangle + e^{i\alpha}|k\rangle$ 的标量积上，就立即证实这一点. 此论证很容易加于推广，使之适用于矢量的分量 u_j, u_k 或者为 0，或者相对相位等于 $n\pi$ 的情形. 同样的论证也适用于情况 (b).

总之，有两种可能性：

情况 (a). 采用适当的相位选择，关系式 (15.7a) 仍适用.

相应的$\mathscr{T}$显然是线性的. 更准确地说,有

$$\langle u'|v'\rangle = \langle u|v\rangle. \tag{15.9a}$$

从而证实这是幺正的线性对应.

情况 (b). 采用适当的相位选择,关系式 (15.7b) 仍适用. 相应的$\mathscr{T}$显然是**反线性**的. 更准确地说,有

$$\langle u'|v'\rangle = \langle u|v\rangle^*. \tag{15.9b}$$

按照下面即将给出的反线性算符的幺正性定义,它是幺正的反线性对应. 证毕.

3. 希尔伯特空间的反线性算符

希尔伯特空间中的反线性算符的性质与线性算符类似. 我们将简要地把它们列举在下面,顺序与我们在第七章中列举线性算符性质时的相同.

定义. 对刃矢的作用

如果希尔伯空间中的每一刃矢 $|u\rangle$ 对应某一刃矢$|v\rangle$,而且这种对应是反线性的,则我们称 $|v\rangle$ 是某一反线性算符 A 作用于 $|u\rangle$ 上的结果,并且写成

$$|v\rangle = A|u\rangle. \tag{15.10}$$

反线性性质写成

$$A(\lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle) = \lambda_1^*(A|1\rangle) + \lambda_2^*(A|2\rangle). \tag{15.11}$$

反线性算符完全由它对 $\mathscr{S}$ 中各个矢量(线性无关且构成一个完全集)的作用效果所确定,显然由它对$\mathscr{S}$的基矢的作用效果所确定.

代数运算

如同线性算符一样,我们定义:

(i) **与常数相乘.** 若 $c \neq c^*$, 则

$$\boxed{cA = Ac^*} \tag{15.12}$$

(注意，$cA \neq Ac$)；

(ii) 两个反线性算符之**和**（为了叙述完整，在此提及一下)；

(iii) **乘积**. 如果 A_1，A_2 是反线性算符，则乘积 A_1A_2 定义为

$$(A_1A_2)|u\rangle = A_1(A_2|u\rangle),$$

它是线性算符. 若 A 是反线性的，而 B 是线性的，则乘积 AB 是反线性的. 更普遍而言，若 $A,B,\cdots,L$ 总共有 $p+q$ 个算符，其中 p 个是线性的，q 个是反线性的，则乘积 $(AB\cdots L)$ 是线性的 (q 为偶数)，或者是反线性的 (q 为奇数).

这些乘积全都满足结合律，但一般不对易. 对易子的定义和线性算符的一样，而且相应的代数规则 (5.63—66) 仍然适用.

逆算符

如果 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$ 之间的对应关系 (15.10) 具有一对一的特征，则定义 A 的逆算符 A^{-1} 为：

$$|u\rangle = A^{-1}|v\rangle.$$

按定义，如果同时有

$$AB = 1 \quad BA = 1. \tag{15.13}$$

则反线性算符 A 和 B 彼此互逆.

如果 $A,B,C,\cdots,L$ 中的每一个算符不是线性的就是反线性的，而且每一个算符都有其逆算符，则它们乘积的逆算符是存在的，并且由下式给定，

$$(ABC\cdots L)^{-1} = L^{-1}\cdots C^{-1}B^{-1}A^{-1}. \tag{15.14}$$

对刁矢的作用

设 A 是反线性算符，$\langle x|$ 是一刁矢，则标量积 $\langle x|(A|u\rangle)$ [它是 $|u\rangle$ 的线性函数]确定一个刁矢(参看 § 7.3)，用 $\langle\eta|$ 表示. 按定义，

$$\langle\eta| = \langle x|A. \tag{15.15}$$

$\langle x|$ 和 $\langle\eta|$ 之间的对应是反线性的，

$$(\lambda_1\langle 1| + \lambda_2\langle 2|)A = \lambda_1^*(\langle 1|A) + \lambda_2^*(\langle 2|A). \tag{15.16}$$

按此定义，我们得到标量积之间的如下恒等式：

$$\boxed{(\langle x|A)|u\rangle = [\langle x|(A|u\rangle)]^*} \tag{15.17}$$

此式可和线性算符的恒等式 (7.17) 相比拟。 在现在的情况下，我们不能把圆括号去掉.

为了确定算符作用于刁矢上的三种代数运算和逆运算，我们采用线性算符那样的方式. 和常数 c 的相乘由下式给定 [参看 (15.12)]:

$$\langle x|(cA) = c^*(\langle x|A) = \langle x|(Ac^*). \tag{15.18}$$

其余的无需改变.

重要的注释

关系式 (15.12) 和 (15.17) 概括了通常的运算和那些包含反线性算符的运算之间的差异:

(i) 对给定的常数 c，若将它看成是刃空间或刁空间中的算符，则它不与反线性算符对易，除非它是实数;

(ii) 在标量积中，必须明确地指明 A 是从它的右侧作用在刃矢上，还是从它的左侧作用在刁矢上.

实际上，为了避免符号含义上的可能混乱，圆括号是经常需要的. 例如，考虑两个反线性算符的积 A_1A_2. 此时，符号 $\langle u|A_1A_2|v\rangle$ 的含义是不明确的，但我们能写成下面的不会有任何含混的形式，

$$\begin{aligned}\langle u|(A_1A_2)|v\rangle &= (\langle u|A_1A_2)|v\rangle = [(\langle u|A_1)(A_2|v\rangle)]^* \\ &= \langle u|(A_1A_2|v\rangle).\end{aligned} \tag{15.19}$$

类似地，考虑线性算符 $|u\rangle\langle v|$ 与反线性算符 A 的乘积 $(A|u\rangle\langle v|)$. 符号 $A|u\rangle\langle v|w\rangle$ 和 $\langle w|A|u\rangle\langle v|$ 带来混乱，但我们

能写成下面的不致有任何的含混的形式，

$$(A|u\rangle\langle v|)|w\rangle = A(|u\rangle\langle v|w\rangle) = (A|u\rangle)\langle v|w\rangle^*, \tag{15.20}$$

以及

$$\langle w|(A|u\rangle\langle v|) = (\langle w|A)|u\rangle\langle v| = [\langle w|(A|u\rangle)]^*\langle v|. \tag{15.21}$$

4. 反线性变换

伴随(或厄密共轭)反线性算符

按定义，如果对任意的 $|u\rangle, A^\dagger|u\rangle$ 都是共轭于 $\langle u|A$ 的刃矢，则 $A^\dagger$ 是反线性算符 A 的伴随算符. 伴随算符也是反线性算符.

对于任意的 $|u\rangle$ 和 $|t\rangle$，都有

$$\langle t|(A^\dagger|u\rangle) \equiv \langle u|(A|t\rangle). \tag{15.22}$$

这个恒等式相当于 (7.20). 除此之外，§ 7.7 中陈述的各种性质都可不加改变就用在这里. 特别是，如果 $A, B, C, \cdots, L$ 中的每个算符不是线性的就是反线性的，则有 [参看方程 (15.14)]

$$(ABC\cdots L)^\dagger = L^\dagger \cdots C^\dagger B^\dagger A^\dagger. \tag{15.23}$$

反么正算符

若 A 是反线性的而且 $A^{-1} = A^\dagger$，即

$$AA^\dagger = A^\dagger A = 1.$$

则它是反么正的.

如果在 $(p+q)$ 个算符 $A, B, C, \cdots, L$ 中，有 p 个是么正的，另外 q 个是反么正的，则乘积 $ABC\cdots L$ 是么正的(当 q 为偶数)或是反么正的(当 q 为奇数).

线性算符和矢量的反么正变换

一个反么正算符 K 确定 $\mathscr{E}$ 空间的矢量和线性算符的一个

反么正变换，在这种变换中：

任意的刃矢 $|u\rangle$ 变换为 $|\hat{u}\rangle \equiv K|u\rangle$；

任意的线性算符 B 变换为 $\hat{B} \equiv KBK^{\dagger}$；

任意的刁矢 $\langle v|$ 变换为 $\langle \hat{v}| \equiv \langle v|K^{\dagger}$.

在这样的变换中有：

(i) 刃矢和刁矢之间的共轭关系以及算符之间的厄密共轭关系保持不变. 如果 B 是一个可观测量，则 $\hat{B}$ 也是一个可观测量，而且有相同的本征值谱；B 的每一本征值的子空间变换为 $\hat{B}$ 的同一本征值的子空间.

(ii) 标量积变换为它的复共轭，

$$\langle \hat{u}|\hat{B}|\hat{v}\rangle = \langle u|B|v\rangle^{*}; \tag{15.24}$$

(iii) 作为一个算符来考虑，任一常数 c 变换成它的复共轭，

$$KcK^{\dagger} = c^{*}; \tag{15.25}$$

(iv) 矢量以及(或)算符之间的各种关系也满足这些量的变换，如果我们把所有系数用它们的复共轭代替的话. 换言之，如果我们把系数当作算符对待，则矢量以及(或)算符之间的各种方程对 K 变换保持不变. 例如，对易关系

$$[q,p] = i\hbar \quad [J_x,J_y] = i\hbar J_z \tag{15.26a}$$

分别变换成

$$[\hat{q},\hat{p}] = -i\hbar \quad [\hat{J}_x,\hat{J}_y] = -i\hbar \hat{J}_z. \tag{15.26b}$$

5. 反线性算符及其表象

和 $\{Q\}$ 表象相联系的复共轭算符 K_Q

按定义，K_Q 是这样一个算符，它将 $\{Q\}$ 表象中的各个波函数变换成它们的复共轭. **它依赖于所采用的表象，而且明显地和基矢的相位有关.**

令 $|1\rangle, |2\rangle, \cdots\cdots, |n\rangle$ 代表 $\{Q\}$ 的基矢. K_Q 是反线性

算符，它使这些矢量保持不变，

$$K_Q|n\rangle = |n\rangle. \tag{15.27}$$

所以，K_Q 是完全确定的．很明显，

$$K_Q{}^\dagger = K_Q \quad K_Q^2 = 1, \tag{15.28}$$

故 K_Q 是反么正的． 显然它具有上面提到的性质，就是：**在反么正变换 K_Q 中，$\{Q\}$ 表象中的矩阵变换成它的复共轭．**因而有

$$\langle n|(K_Q|u\rangle) = \langle n|u\rangle^* \quad (\langle v|K_Q)|n\rangle = \langle v|n\rangle^*$$

$$\langle m|(K_QBK_Q)|n\rangle = \langle m|B|n\rangle^* \ (B \text{ 是线性算符}).$$

于是，在 $\{Q\}$ 表象中，K_Q 的作用只在于取复共轭．如果我们注意到任意的反线性算符 A 是 K_Q 和某个线性算符的乘积，即 A 可写成

$$A = (AK_Q)K_Q = K_Q(K_QA). \tag{15.29}$$

则很容易推出 A 的作用．上式中 (AK_Q) 和 (K_QA) 是线性算符，通过变换 K_Q，可从其中的一个得到另一个，

$$K_QA = K_Q(AK_Q)K_Q.$$

[若 A 是反么正的，则 (K_QA) 和 (AK_Q) 是么正的．]

表象变换

现在考虑另一个表象 $\{\Xi\}$．用 K_Ξ 代表和这个表象相联系的复共轭算符，其余的用 § 7.21 的符号．特别是，矢量和线性算符的变换矩阵是么正矩阵 $S(\xi;n)\equiv\langle\xi|n\rangle$.

若这个矩阵是实矩阵，那末新的基矢对 K_Q 是不变的，换言之，

$$\text{若 } S = S^*, \text{ 则 } K_\Xi = K_Q.$$

在这种情况下，在 $\{\Xi\}$ 表象中和一给定的反线性算符 A 相联系的线性算符 AK_Ξ 和 $K_\Xi A$ 是相同的，正如在 $\{Q\}$ 表象中和 A 相联系的那些算符一样．

在其他情况下，AK_Ξ 不同于 $K_\Xi A$．从矩阵 $(AK_Q)_Q$（在

{Q} 表象中表述 AK_Q) 导出矩阵 $(AK_\Xi)_\Xi$ (在{Ξ}表象中表述 AK_Ξ) 是有好处的. 我们得到

$$\langle\xi|(AK_\Xi)|\xi'\rangle = \langle\xi|(AK_Q)(K_QK_\Xi)|\xi'\rangle$$

$$= \sum_{mn}\langle\xi|m\rangle\langle m|(AK_Q)|n\rangle\langle n|(K_QK_\Xi)|\xi'\rangle$$

$$= \sum_{mn}\langle\xi|m\rangle\langle m|(AK_Q)|n\rangle\langle n|\xi'\rangle^*,$$

即

$$(AK_\Xi)_\Xi = S(AK_Q)_Q\tilde{S}. \tag{15.30}$$

类似地,有

$$(K_\Xi A)_\Xi = (AK_\Xi)^*_\Xi = S^*(K_QA)_QS^\dagger. \tag{15.31}$$

II. 变换和变换群

6. 系统的动力学变量和动力学态的变换

我们已经规定了"物理系统的转动"及"物理系统的粒子置换"的含义.

更普遍地说,实现系统的变换 $\mathscr{T}$ 就是,在**保持系统的物理性质不变**的情况下,把它的每个变量和每个状态用新的变量和新的状态来替代.

于是,变换 $\mathscr{T}$ 在动力学变量之间建立起一一对应,它将给定的变量 B 变换为同一系统的另一个变量 B':

$$B' \equiv \mathscr{T}[B].$$

按假设,B 和 B' 有相同的谱,而且 B 的每个本征值所对应的本征态变换成 B' 的同一本征值所对应的本征态.这两个条件表明:在动力学变量作变换时,系统的物理性质保持不变.虽然我们能够不涉及测量方法就明确地表述这些守恒条件,但是若将变换 $\mathscr{T}$ 看作是与变量 B 有关的仪器的一种变换,就容

易使这变换形象化．此时，这仪器的变换就是与变量 B' 有关的仪器．同样可规定动力学变量的位移(转动、平移)，动力学变量的反射(点反射、面反射)……等等．

从动力学变量的变换概念出发，我们容易过渡到态的变换．令 $|u\rangle$ 是描写系统各种可能的动力学态的矢量．我们总可以把它看成是对易可观测量完备集的共同本征矢量，因而是确定的(相因子未定)．它的变换

$$|u'\rangle \equiv \mathscr{T}[|u\rangle]$$

是变换后的可观测量的共同本征矢量．所以，$\mathscr{T}$ 确立了(相因子未定)态矢之间的一一对应．

根据假设，这样的变换使动力学态的物理性质保持不变：两种几率相等，其中之一是对处于 $|u'\rangle$ 态的系统进行测量时发现它处于 $|v'\rangle$ 态(即 $|v\rangle$ 的变换)的几率；另一个是对处于 $|u\rangle$ 态的同一系统进行同样测量时发现它处于 $|v\rangle$ 态的几率，换言之，

$$|\langle u'|v'\rangle|^2 = |\langle u|v\rangle|^2 \quad (\text{对所有 } |u\rangle \text{ 和} |v\rangle).$$

所以，在上述的一一对应中，标量积的模保持不变．根据定理III，变换后的矢量的相位总可以这样来固定：使这变换不是幺正的，就是反幺的．于是可以写成：

$$|u'\rangle = T|u\rangle, \tag{15.32}$$

T 可以是幺正的，也可以是反幺正的算符，依变换性质而定．但在两种情况下都有：

$$TT^\dagger = T^\dagger T = 1. \tag{15.33}$$

从矢量的变换规律 (15.32)，我们容易导出密度算符的变换规律：

$$\rho' = T\rho T^\dagger. \tag{15.34}$$

我们再来讨论可观测量的变换．由于在我们所讨论的变换中，系统的物理性质保持不变，所以平均值也保持不变．于

是对可观测量 B，就有

$$\langle u'|B'|u'\rangle = \langle u|B|u\rangle,$$

或者[1]

$$\langle u|(T^{\dagger}B'T)|u\rangle = \langle u|B|u\rangle,$$

从定理 I 和性质(15.33)，得到

$$B' = TBT^{\dagger} \quad B = T^{\dagger}B'T. \tag{15.35}$$

从(15.35)式，我们得出重要的性质：在我们所讨论的变换中，如果 T 是线性的，则系统的可观测量之间的任何代数关系保持不变；如果 T 是反线性的，则上述代数关系式代之以复共轭的代数关系式.

这对可观测量的变换规律加上了非常严的限制条件. 任一个可观测量 B 是系统的基本可观测量 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n, \cdots$ 的实函数 $F(\xi)$. 它的变换必须是 $B' = F(\xi')$. 所以，**一旦我们知道了基本可观测量的变换规律，就完全决定了变换 $\mathscr{T}$**，即一旦知道了函数 $f_1(\xi), \cdots\cdots, f_n(\xi), \cdots$，像下面这样，

$$\mathscr{T}[\xi_n] = \xi'_n = f_n(\xi).$$

变换 $\mathscr{T}$ 也就完全被决定了. 这些也决定 ξ' 的对易关系. 后者必须满足上面提到的保持代数关系不变的要求. 因此只有两种可能性：**变换或者使基本的对易关系保持不变，或者使之变号**[2].

在第一种情况下，与此变换相联系的算符 T 是线性的；在第二种情况下，则是反线性的[参看方程 (15.26a、b)].

算符 T 必须满足

---

1) 这结果对线性算符 T 是显然的，但对反线性算符 T 也正确，因为 $\langle u|B|u\rangle$ 是实数.

2) 经典力学的变换(正则变换)使系统的每一对动力学变量 (A_{cl}, B_{cl}) 的泊松括号保持不变. 类似地，在量子力学中，使物理性质保持不变的变换也保持相应的表达式 $\frac{1}{i\hbar}[A,B]$ 不变.

$$\xi'_n = T\xi_n T^\dagger. \tag{15.36}$$

T的各种物理性质都包含在这种关系中. 然而它们还不能完全决定 T. 令 T_1 是另一个幺正(或反幺正)算符,它满足同样的关系式. 我们就有(为了书写简单,略去指标 n):

$$T_1^\dagger \xi' T_1 = \xi.$$

所以

$$T_1^\dagger T \xi T^\dagger T_1 = \xi,$$

或

$$[T_1^\dagger T, \xi] = 0 \text{ 对任意的 } \xi. \tag{15.37}$$

如果我们假定态空间$\mathscr{E}$对可观测量 ξ 是**不可约的**, 即$\mathscr{E}$不包含对 ξ 不变的子空间,那末,只有当 $T_1^\dagger T$ 为常数时,(15.37)式才成立.

此结果已包含在舒尔引理中 (§*D*.8), 可直接证明如下. 令 $|u\rangle$ 是对易的可观测量**完备集**的共同本征矢量. 由于 $C = T_1^\dagger T$ 与完备集中的每一算符对易, 所以 $|u\rangle$ 必须是 C 的一个本征矢量: $C|u\rangle = c|u\rangle$. 因 C 与系统的可观测量的任意函数 $F(\xi)$ 对易,又有

$$CF(\xi)|u\rangle = cF(\xi)|u\rangle \text{ 对任意的 } F(\xi).$$

但由矢量 $F(\xi)|u\rangle$ 张成的空间是$\mathscr{E}$的不变子空间 (对 ξ 而言); 而根据假设, $\mathscr{E}$是不可约的, 因此这子空间只能是$\mathscr{E}$本身, 于是 $C = c$.

正如我们直到目前都这样做的, 若假定态空间的每个矢量可以看成是对易可观测量完全集之中的一个本征矢量, 则这样的不可约性质自动地得到保证 (问题 15.1). 显然, 只有当所说的可观测量是物理可观测量时, 上面的讨论才是有意义的. 以后我们总是假定 $\mathscr{E}$ 对物理可观测量[1] 是不可约的.

---

1) 参看 Wick, Wightman 和 Wigner, *Phys. Rev.* **88** (1952) 101, 在那里可放弃不可约的假定.

作此假定后，常数 c 的模必须等于 1，因为 T 和 T_1 是么正的. 于是，可写成

$$T_1 = e^{i\alpha}T.$$

小结：**每一个变换 $\mathscr{T}$ 与一个么正或反么正算符 T 相联系，T 由系统的基本变量的变换规律**[方程 (15.36)]**确定到只相因子未定；如果变换使对易关系保持不变，则 T 是么正的；如果 $\mathscr{T}$ 使对易关系改变符号，则 T 是反么正的.**

T 的相因子可任意选定，而且不改变变换的物理性质，不影响可观测量和密度算符的变换规律，也不改变算符之间的代数运算.

7. 变换群

我们讨论过的各种变换可构成若干变换**群**. 这里使用的"群"是在数学意义上说的(参看 § *D*.2).

变换 $\mathscr{T}_1$ 和 $\mathscr{T}_2$ 的**乘积** $\mathscr{T}_{21} = \mathscr{T}_2\mathscr{T}_1$ 是先作 $\mathscr{T}_1$ 然后作 $\mathscr{T}_2$ 而得到的变换. 不计相因子，变换算符 T_{21} 等于乘积 T_2T_1. 所以，这类乘积是**可结合**的，但并不一定是可对易的.

恒等变换 $\mathscr{I}$ 使每一个可观测量仍变换为它本身，$\mathscr{I}$ 对应的算符是任意的相因子乘以一.

变换 $\mathscr{T}$ 的**逆变换** $\mathscr{T}^{-1}$ 由关系式 $\mathscr{T}^{-1}\mathscr{T} = \mathscr{T}\mathscr{T}^{-1} = \mathscr{I}$ 定义. 因为 $\mathscr{T}$ 规定了一种一一对应关系，所以逆变换总是存在的.

于是，§6 中定义的各种变换可看作是某个群 $\mathscr{G}$ 的元素.

在各种群当中，物理意义最明显的是**空间变换**(平移，转动，反射)**群以及它的各种子群**，关于后者，我们可以举出诸如平移群，绕定点的转动群，位移群 (平移×转动)，对点和平面的反射群，转动-反射群 (绕定点转动×对同一点作反射)，晶

体中的对称群.

在上一章中,我们遇到了另一种类型的群,即同类粒子的**置换群**，我们也考虑了某些变量而不管其它变量的置换以及熟知的电荷空间中的置换群. 对于核子系统，这些群就是**同位旋转动群**或电荷空间的转动群.

分别地处理各种变换有方便之处（显然花费较多时间). 首先一个是伽利略坐标变换. 为了完整起见，这里简要地提及一下(问题 15.7). 伽利略变换与纯洛伦茨变换(由空间转动构成,即第五部分将要讨论的固有洛伦兹群)的非相对论极限等价. 还有时间平移和时间反演群. 在第 IV 节中,我们将讨论时间平移和反演. 本大节的余下部分，我们只讨论不明显包含时间的变换.

8. 变换算符群

令 $[\mathscr{T}]$ 是变换 $\mathscr{T}_1,\mathscr{T}_2,\cdots,\mathscr{T}_i,\cdots$ 的集合，我们能使集合中的每一元素 $\mathscr{T}_i$ 都与一个算符 T_i 相联系,这算符确定态空间的矢量和算符的变换. T 由它的物理性质来确定(相因子未定)，在这里相因子可任意选择. 因而我们得到变换算符的一个集合$[T]$,它的元素与 $[\mathscr{T}]$ 的元素一一对应.

现在假定 $[\mathscr{T}]$ 是某一个群 $\mathscr{G}$. 这并不一定就能认为 $[T]$ 具有群的性质. 在 $[\mathscr{T}]$ 和 $[T]$之间的对应中，只有不计相因子时,乘积才保持不变.对每一乘积

$$\mathscr{T}_k = \mathscr{T}_j\mathscr{T}_i,$$

我们都有

$$T_k = e^{i\alpha_{ji}^k}T_jT_i,$$

其中，α_{ji}^k 是某个相位,它与 T_i, T_j, T_k 的相位选择有关. 为了使 $[T]$ 是一个群,要求所有的 α_{ji}^k 为 0. 此时，$[T]$ 与群 $\mathscr{G}$ 同构.

如能选择 T_i 的相位，使[T]具有群的性质，那么这显然是一种最方便的选择．对某些群来说，这种可能性是存在的，但不是所有群都能这样．当系统包含奇数个半整数自旋粒子时，这种可能性对置换群是存在的，但对转动群(§ 13.15)则不然．对后者，由方程 (13.60) 确定的转动算符 $R(\alpha\beta\gamma)$ 构成一个群，但对每一个转动 $\mathscr{R}$ 却有两个彼此差一个符号的 R 算符．如果取其中之一作为 [R] 的元素，则我们建立了转动与转动算符之间的一一对应，但乘积只有不计正负号时才保持不变，集合[R]不具有群的性质．

为了得到具有群性质的一个变换算符集合，要求和 $\mathscr{T}_i$ 相联系的不是单个算符 T_i，而是具有不同相因子的一个算符集合 (T_i)．如果适当地选择 (T_i)，那么由此得到的变换算符集合 $\{T\}$ 构成一个群 G，而且同态于群 $\mathscr{G}$．令(1) 是和变换 $\mathscr{I}$ 相联系的算符集合．(1)的元素是算符 1 以及 1 乘某个相因子而得的其它元素．它是 G 的一个不变子群，而且商群 $G/(1)$ 同构于 $\mathscr{G}$ (参看 § D.5)．

于是，我们构成很多具有群性质的集合[1]．实际上，我们就选定其中的一种．显然是挑选尽可能简单的一种．我们就用这办法来得到一个同态于群 $\mathscr{G}$ 的变换算符群 G．

直到目前为止，对量子理论中遇到的各种情况，我们总有可能这样来选择：使 $\mathscr{G}$ 的每一个元素或者对应 G 的一个算符(同构)，或者做不到这一点时，就对应 G 的两个算符(彼此差一负号)．当系统包含偶数个半整数自旋粒子时，第一种可

---

1) 其中有一个是最复杂的，它是由每个 $\mathscr{T}_i$ 所联系的、并满足 (15.36) 的全体算符组成．在这情况中，(T_i) 的元素可通过其中的一个乘任意相因子来得到．实际上，总有可能对 T_i 附加实数条件，使相因子固定到只正负号未定，而不破坏群性质．因此，集合 (T_i) 恰有两个元素，它们彼此差一个负号(参看本章 § 18 的注)．

能性总是可以实现的．至于第二种可能性，我们已经举过一个例子，就是半整数自旋的转动．在讨论时间反演有关的问题时，我们还会遇到别的例子，它总是出现在系统包含奇数个半整数自旋粒子的情况中．

9. 连续群和无穷小变换　平移　转动

作为上述理论的一个实例，我们来为某些群 $\mathscr{G}$ 构造出群 G．先考虑连续群，就是那些群，它们有无穷多个依赖于一个或几个连续参数的元素，特别是那些有限变换可通过一系列无穷小变换来实现的群．转动群和空间平移群就属于这种情况．于是，为了得到可观测量在任一群运算下的变换，我们只须知道它的无穷小变换．群的每一个无穷小变换都和一个无穷小变换算符，即与 1 相差无穷小的么正算符[1]相联系．

为了简单起见，设群元素只与一个连续参数 α 有关，并作这样的选择，使

$$\mathscr{T}(\alpha) \underset{\alpha\to 0}{\to} \mathscr{I}.$$

若只取 $\delta\alpha$ 的第一阶，则和 $\mathscr{T}(\delta\alpha)$ 相联系的无穷小变换算符可写成：

$$T(\delta\alpha) = 1 - i\Theta\delta\alpha,$$

其中，Θ 是厄密算符(因 T 是么正的)．

如果作变换 $\mathscr{T}(\delta\alpha)$ 时，可观测量 ξ 变换为 $\xi + \delta\xi$，则得到[方程 (7.96)]：

$$\delta\xi = -i\delta\alpha[\Theta, \xi],$$

即

---

1) 它不可能是反么正的．考虑两个互不对易的可观测量．作无穷小变换时，它们发生无穷小的改变．所以，它们的对易子不可能作有限大小的改变，特别是不可能变号．

$$[\Theta,\xi]=\mathrm{i}\frac{\delta\xi}{\delta\alpha}. \tag{15.38}$$

对于一个给定的变换 $\mathscr{T}(\delta\alpha)$，$\delta\xi/\delta\alpha$ 是已知的，而且关系式 (15.38) 确定 Θ 到只一个常数未定的程度[1].

例如，考虑一个粒子沿着 Ox 轴作平移. 令 $\boldsymbol{r}\equiv(x,y,z)$，$\boldsymbol{p}\equiv(p_x,p_y,p_z)$，$\boldsymbol{s}\equiv(s_x,s_y,s_z)$ 分别代表粒子的位置，动量，自旋矢量. 作平移变换 $\mathscr{T}_x(a)$ [即沿 Ox 轴平移一个矩离 a] 时，9 个基本变量中除 x 变为 $x-a$[2] 外，其余的保持不变，

$$T(a)xT^{\dagger}(a)=x-a. \tag{15.39}$$

特别是在无穷小变换 $\mathscr{T}_x(\delta x)$ 中，$\delta x=-\delta\alpha$，而且所有其它的 $\delta y,\cdots,\delta s_z$ 等于 0. 因而相应的厄密算符 Θ_x 满足下面的对易规律:

$$[\Theta_x,x]=-\mathrm{i}$$
$$[\Theta_x,y]=\cdots=[\Theta_x,s_z]=0.$$

由此得出

---

1) 在经典力学中，作无穷小位移 $\mathscr{T}(\delta\alpha)$ 时，各个变量 ξ 的改变量 $\delta\alpha\partial\xi/\partial\alpha$ 由泊松括号决定，

$$\frac{\partial\xi}{\partial\alpha}=\{\tau,\xi\},$$

其中，τ 是与变量 α 相联系的共轭动量. 可观测量 $\hbar\Theta$ 是 τ 的量子类同量 [绕 u 作无穷小转动时，τ 是角动量在 u 方向上的分量].

2) 实际上，x 的变换 x' 等于 $x-a$ 而不是 $x+a$. 令 $|b\rangle$ 是 x 的本征矢量，对应的本征值为 b. $|b\rangle$ 的变换为 $|b'\rangle$，它也是 x 的本征矢量，对应的本征值为 $b+a$，

$$x|b\rangle=b|b\rangle \quad x|b'\rangle=(b+a)|b'\rangle.$$

但从可观测量的变换的定义得到

$$x'|b'\rangle=b|b'\rangle,$$

其中

$$x'=x-a.$$

这一论证可以和 § 13.12 中的相比较.

$$\Theta_x = \frac{px}{\hbar} + k_0,$$

其中 k_0 是任意的实常数，我们让它等于 0。把这样的处理方法推广到 N 个粒子系统的平移变换上是容易的，得到

$$\boxed{\Theta_x = \frac{P_x}{\hbar}} \tag{15.40}$$

其中，$P_x = \sum_{i=1}^{N} p_x^{(i)}$ 是 N 个粒子的**总动量在 Ox 轴上的分量**.

因此，无穷小平移 $\mathscr{T}_x(\delta a)$ 联系着一个无穷小么正算符：

$$T_x(\delta a) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} P_x \delta a.$$

有限变换算符 $T_x(a)$ 可选择为

$$T_x(a) = \exp(-\mathrm{i}P_x a/\hbar),$$

将上式代入 $T_x(a)$ 的定义式 (15.39)，就很容易证实它是正确的。这样确定的算符所构成的群同构于沿 Ox 轴方向平移的平移群。特别是，我们得到

$$T_x(a)T_x(b) = T_x(b)T_x(a) = T_x(a+b).$$

沿 Ox 轴方向平移的平移群是平移群的一个子群。一个特定的平移 $\mathscr{T}(\boldsymbol{a})$ 由矢量 $\boldsymbol{a}$ 确定，其中 $\boldsymbol{a}$ 是确定系统动力学态位移的矢量。所以，平移群依赖于三个连续参数（即 $\boldsymbol{a}$ 的分量）。它的合成规则是

$$\mathscr{T}(\boldsymbol{a})\mathscr{T}(\boldsymbol{b}) = \mathscr{T}(\boldsymbol{b})\mathscr{T}(\boldsymbol{a}) = \mathscr{T}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}).$$

将上面的结果推广到任意的平移变换上，我们就得出和无穷小平移 $\mathscr{T}(\boldsymbol{\epsilon})$ 相联系的算符：

$$\boxed{T(\epsilon) \simeq 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{\epsilon})} \tag{15.41}$$

其中 $\boldsymbol{P}$ 是 N 粒子系统的总动量. 由此得出和平移 $\mathscr{T}(\boldsymbol{a})$ 相联系的算符为

$$\boxed{T(\boldsymbol{a}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}} \tag{15.42}$$

这样确定的算符 T 构成一个群,它与平移群同构,因为

$$T(\boldsymbol{a})T(\boldsymbol{b}) = T(\boldsymbol{b})T(\boldsymbol{a}) = T(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}).$$

转动群是三参数连续群的另一个例子. 在第十三章已定义了转动算符. 定义式 (13.55) 与上面的(15.41)相当. 总角动量 $\boldsymbol{J}$ 在转动群中所处的地位有如总动量 $\boldsymbol{P}$ 在平移群中所处的地位. 利用对易关系(13.56)和(13.57),总角动量在 $\boldsymbol{u}$ 方向的分量 $(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{J})$ 可确定到只一个常数未定的程度. (13.56) 和 (13.57) 两式分别给定标量和矢量可观测量绕 $\boldsymbol{u}$ 作的无穷小转动. 我们要求 $\boldsymbol{J}$ 本身是一个矢量算符[1],由此条件就固定了任意常数.

转动算符 R 被定义为一系列无穷小转动的乘积. 由此导出公式(13.60),它和上面的(15.42)式相当. 这些算符构成一个群. 如果系统包含偶数个半整数自旋粒子, 则此群与转动群同构;但若系统包含奇数个半整数自旋粒子,则只同态于转动群. 这一点已经讨论过,此处不再论述.

(15.42) 和 (13.60)确定的算符 T 和 R 以及它们的所有乘积组成的集合也构成一个群. 如果系统包含偶数个半整数自旋粒子,则此群与位移群同构;否则只同态于位移群. 在后一情况,群的每一元素对应两个彼此相差一个符号的算符.

---

1) 此条件等价于条件: $R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ 是群的无穷小算符.

10. 有限群　反射

在各种群当中，点反射群无疑是最简单的．它总共有两个元素，即单位元 $\mathscr{I}$ 和反射 $\mathscr{S}_0$，而且 $\mathscr{S}_0^2 = \mathscr{I}$．作变换 $\mathscr{S}_0$ 时，极矢量 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{p}$ 变号，轴矢量 $\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{s}$ 不变．因为 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 同时变号，所以这变换保持轨道变量的对易关系不变，也保持自旋分量的对易关系不变．因此，决定一个粒子反射的算符 S_0 是线性么正算符，满足下面的关系：

$$S_0 \boldsymbol{r} S_0^\dagger = -\boldsymbol{r}$$
$$S_0 \boldsymbol{p} S_0^\dagger = -\boldsymbol{p}$$
$$S_0 \boldsymbol{s} S_0^\dagger = \boldsymbol{s}. \tag{15.43}$$

如不管相因子，上面这些关系式就确定了算符 S_0．进一步为了使算符 S_0 和 I 构成一个同构于反射群的群，我们必需要求

$$S_0^2 = 1 \quad (S_0 = S_0^\dagger), \tag{15.44}$$

这就使 S_0 的相位可确定到只正负号未定．

具体指明 S_0 对某一表象（例如 $\{\boldsymbol{r}, S_z\}$）的基矢的作用效果，它就完全被决定．我们采用如下的定义：

$$S_0 |\boldsymbol{r}\mu\rangle = |(-\boldsymbol{r})\mu\rangle. \tag{15.45}$$

这定义与 (15.43)，(15.44) 一致（问题 15.2）．按此定义，波函数的反射由下面的规则给定，

$$S_0 \psi(\boldsymbol{r}, \mu) = \psi(-\boldsymbol{r}, \mu).$$

算符 S_0 正是 § 13.23 引入的宇称算符．它是具有两个本征值 ± 1 的可观测量．将这些讨论推广到若干粒子的系统上并不困难．

反射 S_0 与所有转动 $\mathscr{R}$ 对易．反射群的各元素与转动群的各元素的乘积构成转动-反射群．还应注意，S_0 与任一转动算符对易，因为后者是总角动量 $\boldsymbol{J}$ 的函数；而且 S_0 与 $\boldsymbol{J}$ 对易，原因是：由 (15.43) 可得

$$S_0 \boldsymbol{J} S_0^{\dagger} = \boldsymbol{J}.$$

于是，由 S_0，R 算符以及它们的乘积组成的集合也构成一个群．当群 $[R]$ 与转动群（整数总自旋）同构时，它与转动-反射群同构；否则(即半整数总自旋)，它只同态于转动-反射群，我们就使转动-反射群的每一个元素与两个算符(彼此差一符号)相联系．特别是，和纯反射相联系的两个算符是 $+S_0$ 和 $-S_0$；和单位元相联系的两个算符是 $+I_0$ 和 $-I_0$．

我们再讨论一个不同类型的反射，即平面型反射．令 $\mathscr{S}_u$ 是对垂直于单位矢量 $\boldsymbol{u}$ 的平面作反射．$\mathscr{S}_u$ 是转动-反射群的一个特定变换，即 $\mathscr{S}_0$ 与绕 $\boldsymbol{u}$（或 $-\boldsymbol{u}$）作 π 角转动的乘积，

$$\mathscr{S}_u = \mathscr{S}_0 \mathscr{R}_u(\pi). \tag{15.46}$$

注意

$$\mathscr{S}_u^2 = \mathscr{I}. \tag{15.47}$$

因此，$\mathscr{S}_u$ 和 $\mathscr{I}$ 构成一个群，而且可按照点反射的模式来研究这个群．其次，借助 (15.43)，我们能从其中一个群的性质推出另一个群的性质．

我们只考虑单粒子的情况．算符 S_u 是幺正线性算符，满足下面的关系：

$$\begin{aligned} S_u \boldsymbol{r} S_u^{\dagger} &= \boldsymbol{r} - 2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{r}) \\ S_u \boldsymbol{p} S_u^{\dagger} &= \boldsymbol{p} - 2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{p}) \\ S_u \boldsymbol{s} S_u^{\dagger} &= -\boldsymbol{s} + 2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{s}). \end{aligned} \tag{15.48}$$

S_u 的表达式可取为

$$S_u = S_0 R_u(\pi) = S_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})}. \tag{15.49}$$

由此得到

$$S_u^2 = S_0^2 \mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})} = (-)^{2J}. \tag{15.50}$$

采用这样的相位选择，在半整数自旋情形下，就有

$$S_u^2 = -1.$$

为了使变换算符的集合构成一个群，$\mathscr{S}_u$ 必须和两个算符 S_u

和 $-S_\pi$[1] 相联系.

另一类型的有限群是 n 个全同粒子的置换群. 在第十四章中,我们已研究过这种群. 对每一个置换,都有一个线性么正的置换算符与之对应;因此,所得的算符集合构成一个群,并与置换群[2]同构. 在这里不再讨论这些问题,我们只加上一个重要的结论: 置换与空间变换对易,正是由于它们的这种构成方式,置换算符和空间变换算符具有相同的性质.

III. 运动方程的不变性和守恒定律

11. 不变可观测量

现在我们考虑不变性本身的问题. 令 $\mathcal{G}$ 是某个变换群. 用 G 代表它相应的变换算符群,用 T_i 代表群 G 的一个特定的元素. 假定所有的 T_i 都是线性么正的. 唯一需要引用反线性算符的变换是时间反演,我们将在第 IV 节研究它.

可观测量 Q 对群的变换保持不变这事实可用条件 $T_iQT_i^\dagger = Q$ 来表述,即

$$[Q, T_i] = 0 \text{ (对任意的 } T_i), \qquad (15.51)$$

对转动群的情形 (§ 13.17),我们已分析过这些对易规则的各种推论. 利用群的概念和群 G 的线性表示的各种性质,可以在非常普遍的方式下将这些推论陈述出来(参看附录 D,特别是 § D.9). 用 $|\tau j\mu\rangle$ 代表与群 G 相适应的标准表象的基矢.

---

1) 如果我们只考虑群 $\{S_\pi, \mathcal{I}\}$,则让 $S_\pi = i^{2J}S_0R_\pi(\pi)$ 是更好的;由此得到 $S_\pi^2 = I$. 采用此种新的相位选择,乘法规则 (15.46) 只在不计相因子时才保持不变.

2) 同样的结果也可以这样得到: 与奇置换相联系的所有算符用它们的反号算符代替. 采用这样的新相位约定,第十四章的全部论述都可以进行下去,所得结果的唯一差别在于: 各个公式由于出现(一)号而复杂化,其它并无变化.

这些矢量用三个量子数(或三组量子数)标记. j 用来指明 $|\tau j\mu\rangle$ 所隶属的那个不可约表示. μ 用来区分一个给定的不可约表示中的各个基矢. τ 是许可的附加量子数（如果需要的话)，它用来区分各个正交等价不可约子空间. 我们有意识地采用 § 13.6 的符号. 通过这里的讨论使之更普遍化. (13.120) 的普遍化是 Q 的最重要的性质，即

$$\langle \tau j\mu | Q | \tau' j' \mu' \rangle = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}Q^{(j)}_{\tau\tau'}. \qquad (15.52)$$

在附录D中给出了一个完整的证明[参看方程 (D.20)].

在多数情况下，不必明显地运用群表示的一般理论，就有可能推导出这个关系式. 为此，我们只需在 T_j 的函数当中找出:

(i) 对所有群运算保持不变的可观测量集合 J，它的本征值可用一个量子数(或一组量子数) j 标记;

(ii) 不与群的全体运算对易但却彼此对易的可观测量集合 M，它的本征值用 μ 标记;

Q，J 和 M 显然构成一个对易可观测量集合，而且在 J 和 M 是对角的任意一种表象中，Q 有特别简单的表示矩阵，由 (15.52) 式给出.

这个方法曾成功地应用于转动群 [参看方程 (13,120)]. 在这特定情况中，我们找到了一个属于 (i) 类的可观测量 (即 $\boldsymbol{J}^2$) 以及一个属于 (ii) 类的可观测量 (即 J_z). 这方法也可应用到转动-反射群上. 对 (i) 类可观测量，我们找出 $\boldsymbol{J}^2$ 和 S_0 (即总角动量和宇称); 对 (ii) 类可观测量，我们找出 J_z. 注意，M 的选择有一些随意性. 对转动的情况，通常实用的做法是取 J_z，但取 J_x 或 J_y 或 $\boldsymbol{J}$ 的其它分量也可以.

各别地将 $Q^{(j)}_{\tau\tau'}$ 对角化，就可得到 Q 的本征态，每个 $Q^{(j)}_{\tau\tau'}$ 对应 J 的一个全完确定的本征值. 于是，每一个 j 对应 Q 的一组本征值 $q^{(j)}_i$. 如有必要区分这些本征值，我们就使用量

子数(或数) s. 令 d_j 是 μ 的可能值的数目(在转动情况下,有 $2j+1$ 个),这些 μ 值对应同一个矩阵 $Q^{(j)}_{\mu}$. 因此,这矩阵的每一个非简并本征值是 Q 的 d_j 重简并本征值; 这个矩阵的每一个 p 重简并本征值是 Q 的 pd_j 重简并本征值. 若 $d_j \neq 1$,则 Q 的与量子数 j 对应的所有本征值都是简并的, 它们的简并度为 d_j 的倍数. 这种简并是 Q 对 G 保持不变的直接后果,以后称为 G **简并**.

12. 哈密顿量的对称性和守恒定律

设哈密顿量 H 对群 $\mathcal{G}$ 的变换是不变的. 那末,上面说到的关于不变可观测量的全部论述都可应用. 从对易规则

$$[H, T_i] = 0 \quad \text{对 } G \text{ 的任意算符 } T_i. \tag{15.53}$$

出发, 我们就可构成 J 类和 M 类可观测量. 它们和 H 一起构成一个能同时对角化的可观测量集合. 其次, H 的谱具有 G 简并.

像在经典力学中的一样, 哈密顿量的对称性引出各个守恒定律.就是说,由于任一个与 H 对易又不显含时间的可观测量是运动常数,我们得出很显然的性质:

若 H 对一个群的变换是不变的, 则任一个作为群算符函数的可观测量是一个运动常数.

举例说, 上面规定的 (J, M) 集合的可观测量就具备这样的性质; 又因它们可对易, 所以它们能同时给定精确的值; 而且在整个时间过程中,这一组精确值保持不变.

因而, 每一个群都联系着一些守恒定律. 每当守恒的可观测量有经典类同量时, 这些守恒定律便与相应的经典守恒定律相同[1]. 最常见的守恒定律列举如下:

---

1) 和无穷小位移相联系的可观测量就是这种情况(参看本章 §9 的注).

(i) **平移不变性与总动量守恒定律.** 哈密顿量对平移变换具有不变性的充分和必要条件是它对无穷小平移具有不变性,即[参看方程 (15.41)]

$$[H,\boldsymbol{P}]=0, \tag{15.54}$$

其中 $\boldsymbol{P}$ 是系统的总动量. 因此总动量的三个分量是运动常数,而且总动量守恒. 其次,由于 P_x, P_y, P_z 互相对易,三者可同时地完全确定. 所以它的大小在时间进程中保持不变.

(ii) **转动不变性和角动量守恒.**

在第十三章已研究过转动不变性,它可表述为如下条件.

$$[H,\boldsymbol{J}]=0.$$

(iii) **反射不变性和宇称守恒.**

从哈密顿量对点反射具有不变性,即

$$[H,S_0]=0, \tag{15.55}$$

可导出宇称 S_0 是运动常数.

(iv) **置换不变性和对称性守恒.**

在全同粒子系统中,哈密顿量对这些粒子的任一置换 P 是不变的. 即

$$[H,P]=0 \qquad (\text{对任意的}P).$$

由此导出:由 P 构成的任何可观测量是运动常数. 对分别投影到对称态和反对称态上的投影算符 S 和 A,显然有:

$$[H,S]=0 \quad [H,A]=0.$$

所以 S 和 A 是运动常数. 在第十四章已看到,算符 S 和 A 的这种性质是对称化假设具备内在一致性的必要条件.

(v) **电荷无关性和同位旋守恒.**

令 $\boldsymbol{T}$ 是核子系统的总同位旋. 若核子-核子作用力与电荷无关,则系统的哈密顿量对同位旋空间中的转动具有不变性,即

$$[H,\boldsymbol{T}]=0. \tag{15.56}$$

所以，$\boldsymbol{T}$ 的分量是运动常数，而且作为这些分量函数的任一可观测量也是运动常数．特别是 $\boldsymbol{T}^2$ 和 T_z 为运动常数（注意，T_z 守恒就是电荷守恒）．

13. 动力学态的不变性和演化

现在我们要证明：若H对群 $\mathscr{G}$ 是不变的，那末演化算符 $U(t,t_0)$ 对群$\mathscr{G}$也是不变的．按定义，$U(t,t_0)$ 是积分方程

$$U(t,t_0)=1+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t HU(t',t_0)dt'.$$

的解．上式两边用 T_i 左乘和用 $T_i^\dagger$ 右乘，再考虑到 T_i 的么正性和性质 (15.53) 得到

$$T_iU(t,t_0)T_i^\dagger=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^t HT_iU(t',t_0)T_i^\dagger dt'.$$

由于U和 $T_iUT_i^\dagger$ 满足同样的积分方程，所以它们相等，由此得到

$$[U(t,t_0),T_i]=0\ (\text{对}G\text{的任一算符}\ T_i).\qquad(15.57)$$

在U对群变换具有不变性的物理后果中就有上节说的守恒定律．然而，若 $|\phi(t)\rangle$ 是运动方程的一个解，则变换后的矢量 $T_i|\phi(t)\rangle$ 也是一个解，(因为U和 T_i 对易)．这两个矢量描述的动力学态在各个时刻都通过变换 $\mathscr{T}_i$ 彼此对应．因此，动力学态的运动规律对群G的变换具有不变性：

两个动力学态开始时由群 $\mathscr{G}$ 的某个变换 $\mathscr{T}_i$ 联系起来，即 $\mathscr{T}_i$ 将其中的一个态变换为另一个态，那末，在整个时间过程中，这种性质保持不变．

这种不变性可以用测量操作的术语等价地表述为：

假定在时刻 t_0 用一种方式置备一个系统．在以后的时刻 t，我们对它进行某种测量操作．如果我们不变化任何情况，而将群的某一变换 $\mathscr{T}_i$ 作用到始态上（即作用到用来置备系

统的仪器上)**和被测量的量上**(即作用到用于观测的仪器上)，**则测量结果不会改变.**

例如，假定系统处于矢量 $|\varphi\rangle$ 描述的纯态上，我们测定它出现在 $|\chi\rangle$ 描述的纯态上的几率. 这些态的变换分别由矢量 $T_i|\varphi\rangle$ 和 $T_i|\chi\rangle$ 描写. 由对易规则(15.57)，我们导出几率等式:

$$|\langle\chi|T_i^\dagger U(t,t_0)T_i|\varphi\rangle|^2 = |\langle\chi|U(t,t_0)|\psi\rangle|^2. \quad (15.58)$$

更普遍地说，令 ρ_0 是描写准备时刻 t_0 的系统状态之密度算符，而 ρ 是描写测量时刻 t 的密度算符. 一种典型的测量是决定被测定的物理量的大小落在某个范围 D 的几率. 用 P_D 代表投影到 D 对应的本征态子空间上的投影算符，那末，这几率为:

$$w = \mathrm{Tr}\rho P_D = \mathrm{Tr}U(t,t_0)\rho_0 U^\dagger(t,t_0)P_D. \quad (15.59)$$

现在假定我们从始态 $\rho_0' \equiv T_i\rho_0 T_i^\dagger$ 开始，而且测量是对第一次实验中被考虑的物理量的变换而进行的. 与 D 范围内的本征值相对应的投影算符为 $P_D' \equiv T_i P_D T_i^\dagger$. 这种新的测量结果为

$$w' = \mathrm{Tr}U(T_i\rho_0 T_i^\dagger)U^\dagger(T_i P_D T_i^\dagger). \quad (15.60)$$

考虑到 T_i 的幺正性及其迹的性质之后，由 (15.57)得出

$$w' = w. \quad (15.61)$$

事实上，若 (15.58) 对任意的 $|\varphi\rangle$ 和 $|\chi\rangle$ 都适用，则 (15.61) 式必然成立.

上面所做的论述在于: 假定 H 对群 $\mathcal{G}$ 的变换具有不变性，并由此导出动力学态对群 $\mathcal{G}$ 也具有不变性. 反之，我们可**假定运动规律对 $\mathcal{G}$ 具有不变性，并研究这假设所能得出的推论.** 这样的假设等价于假定: 对群的每一个变换 $\mathcal{T}_i$，方程 (15.58) 总是成立的 (不论 $|\varphi\rangle$ 和 $|\chi\rangle$ 是什么). 或者等价于 (参看定理 II) 假定 U 和 $T_i^\dagger U T_i$ 在不计相因子时是相等的，

$$T_i^{\dagger}U(t,t_0)T_i = e^{i\alpha_i}U(t,t_0). \qquad (15.62)$$

相因子 $e^{i\alpha_i}$ 受一些约束. 对物理中遇到的大多数群来说，要求它们等于 1[1].

以后我们总是假定这种相位条件是可实现的，甚至当内在一致性并不要求这样时也如此. 不变性假设可写成:

$$[T_i, U(t, t_0)] = 0.$$

在无穷小 U 算符的情况下，

$$U(t + dt, t) = 1 - \left(\frac{i}{\hbar}\right) H dt.$$

我们再次得到哈密顿量的对称性，

$$[T_i, H] = 0.$$

于是，对运动规律作出任何一种不变性的假设都导至哈密顿量具有一种对称性质. 对孤立的量子系统（无外场），通常假定对位移群具有不变性. 这相当于假定空间是均匀的（平移不变）和各向同性的（转动不变）. 直至目前为止，这假设并没有和实验抵触.

在相当多年前，人们也认为物理系统的运动规律对反射具有不变性. 在那些只涉及电磁相互作用和所谓核相互作用（使原子核紧紧地聚集一起）的所有现象中，实验结果都证实了这种认识. 然而实验证明，某些相互作用，特别是使原子核发生 β 衰变的相互作用，破坏了空间反射不变性，这些相互作

---

1) 这是由于如下事实所致: $e^{i\alpha_i}$ 是群 $\mathcal{G}$ 的一维表示，它们是 t 的连续函数. 当 $t \to t_0$ 时，它们都趋于 1. 若 $\mathcal{G}$ 是有限群，或者至少 $\mathcal{T}_i$ 是有限群的一个元素，则存在一个整数 p，使得 $\mathcal{T}_i^p = \mathcal{T}$；由此得出: $e^{i\alpha_i}$ 是 1 的 p 次根中的一个. 上面提到的连续性条件要求 $e^{i\alpha_i} = 1$. 点反射和面反射就是这种变换的例子. 如果群仅有的一维表示是恒等表示，则显然对每一个群运算，都有 $e^{i\alpha_i} = 1$. 转动群和位移群属于此类. 另一方面，如果使运动规律保持不变的群只限于平移群，则不必要求所有相位 α_i 等于 0.

用比上述的要弱得多. 每当这种弱相互作用可被忽略时，物理系统的运动规律就具有反射不变性，宇称是守恒的. 在只有电磁相互作用的原子物理中，显然正是这种情形.

当存在外场时，运动规律的不变性与外场的对称性有关. 作为说明，我们考虑原子物理中的二个例子，即斯塔克效应和塞曼效应.

14. 斯塔克和塞曼效应的对称性

斯塔克效应

考虑置于外电场 $\mathscr{E}$ 中的原子系统. 设 $\mathscr{E}$ 的方向沿 z 轴. 这样的电场对平移、绕 Oz 轴转动、面反射（反射面平行于 z 轴）是不变的. 出现在这里的不变群是平移群与面反射群(反射面包含 Oz 轴)的乘积.

假定质心运动已被分离出去，我们只考虑相对运动的哈密顿量 H 的各种可能状态. H 对面反射群（反射面包含 Oz 轴)是不变的. 下面的讨论既不涉及问题的细节，也不涉及系统与电场的耦合强度，唯一需要的基础就是这种不变性.

令 $\mathscr{S}_m$ 是任意的包含 Oz 轴的面反射；S_m 是它相应的算符. S_m 的相位选择成这样，使 $S_m^2 = I$. 因为我们讨论的群由反射 $\mathscr{S}_m$ 和绕 Oz 轴的无穷小转动生成，所以群的任意变换算符都是 S_m 和 J_z 的函数. 于是，总共有两个彼此独立的运动常数. 由于 S_m 和 J_z 不对易:

$$S_m J_z S_m = -J_z. \tag{15.63}$$

因此，H 的某些本征值必然是简并的.

往下，我们注意到 J_z^2 与 J_z, S_m 都对易，因而与群的所有算符对易. J_z^2 是群的 J 类可观测量（§11 的定义). 我们可以取 J_z 或 S_m 作为 M 类可观测量. 对前者，定态按 J_z 的本征值分类；对后者，定态按 (J_z^2, S_m) 集合分类.

假定系统包含偶数个半整数自旋粒子．于是，J_Z 取各种整数值，用 m 代表其中某一特定值．若 $|\rangle$ 是此值对应的定态，那末 $S_\pi|\rangle$ 是一个定态，它的能量和对应于 J_Z 本征值为 $-m$ 的能量相同．若 $m \neq 0$，则这两个态必须正交．如果定态按 J_Z 的本征值分类，则两个相反本征值 m 和 $-m$ 给出的能谱相同，各个能级的简并度相同．换言之，能级只与 $|m|$ 有关；与 $|m| \neq 0$ 对应的各个能级存在偶数简并度．

若定态是按 (J_Z^2, S_π) 的本征值分类，我们同样可得到这结果．用符号 m^+ 和 m^- 代表这些本征值．m 是非负整数，它的平方等于 J_Z^2 的本征值．m 的右上角标取“+”或“−”，依 S_π 的本征值是 $+1$ 或 -1 而定．举一例，我们考虑 m^+ 态，

$$J_Z^2|m^+\rangle = m^2|m^+\rangle \quad S_\pi|m^+\rangle = |m^+\rangle.$$

若 $m \neq 0$，矢量 $J_Z|m^+\rangle$ 不等于 0．从 (15.63) 可得

$$S_\pi(J_Z|m^+\rangle) = -J_Z S_\pi|m^+\rangle = -(J_Z|m^+\rangle).$$

因此，J_Z 作用到任一个 m^+ 态就得到 m^- 态．若前者是定态，则后者也是，而且对应相同的能级：能级只与正整数 m 有关，全都有偶数简并度．$m = 0$ 的情况例外：0^+ 和 0^- 态的能级可以不相同．

塞曼效应

现在考虑置于恒定磁场 $\mathscr{H}$ 中的原子系统．令 $\mathscr{H}$ 的方向沿 z 轴．作平行于 z 轴的面反射时，$\mathscr{H}$ 改变符号．另一方面，$\mathscr{H}$ 对原点为中心的反射 $\mathscr{S}_0$ 是不变的．因此，外场的不变群由平移、绕 Oz 轴转动、反射 $\mathscr{S}_0$ 生成．象在斯塔克效应中的一样，我们只考虑相对运动的哈密顿量 H．H 对绕 Oz 轴的转动和以原点为中心的反射是不变的．设 S_0 是宇称算符，它的相位这样选定，使 $S_0^2 = I$．群的所有变换可表述为可观测量 J_Z 和 S_0 的函数，其中 J_Z 和 S_0 对易，

$$S_0 J_Z S_0 = J_Z.$$

所以 H 对这个群变换具有不变性，且不引起任何对称性的简并.[1)]

H, S_0, J_z 可同时对角化，这三个可观测量的各个共同本征矢量所描述的定态对这群的变换是不变的. 得出这个结果的唯一基础是 H 的对称性质，而不依赖于系统与磁场的耦合强度以及具体的细节.

IV. 时间反演和微观可逆性原理

15. 时间平移和能量守恒

在含时间的各种变换中，最简单的就是时间平移. 在经典力学中，运动方程对时间平移的不变性导出众所周知的能量守恒定律（要求哈密顿函数与时间无关）. 在量子力学中，我们也有类似的性质.

令 $|\psi(t)\rangle$ 是运动方程的一个可能解. 系统的运动规律对时间平移 τ 具有不变性这种说法等价于另一种说法：存在另一个解 $|\psi'(t)\rangle$，它描写 t 时刻的动力学态，也就是前一个解在 $t+\tau$ 时刻表示的态，即

$$|\psi'(t)\rangle = e^{i\alpha(t,\tau)}|\psi(t+\tau)\rangle.$$

为了使运动方程的每一个解都有这种性质，要求 U 算符具有下面的性质：

$$U(t,0) = e^{i\alpha(t,\tau)}U(t+\tau,\tau), \qquad (15.64)$$

其中，$\alpha(t,\tau)$ 是相位，它可以依赖于 t 和 τ. 对于无穷小的 t，令 $f(\tau) = \left.\dfrac{\partial\alpha}{\partial t}\right|_{t=0}$，因而得到

1) 换言之，这个群的所有不可约表示都必须是一维的.

$$1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(0)\mathrm{d}t=(1+if(\tau)\mathrm{d}t)\left(1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(\tau)\mathrm{d}t\right),$$

即

$$H(\tau)=H(0)+\hbar f(\tau). \tag{15.65}$$

如果运动规律对任意的时间平移具有不变性，则方程(15.64)对所有的 τ 也应该成立．换言之，不计时间的实函数相加项时，哈密顿量是常量．事实上，此实函数可取为零，这并不改变系统的任何物理性质． 哈密顿量 $H(t)$用它在 $t=0$ 时的大小来代替， 这样做的唯一效果是 $U(t,\ t_0)$ 乘以相因子 $[\mathrm{i}\int_0^t f(t')dt']$ (问题 15.6)．

因此，若运动规律对时间平移具有不变性，我们就可以假定哈密顿量与时间无关． 以后我们总是这样做． 由(15.64)得出 $U(t,\ t_0)$ 对时间平移的不变性：

$$U(t+\tau,\tau)=U(t,0). \tag{15.66}$$

16. 经典力学和量子力学中的时间反演

这一节的其余部分所考虑的系统都是保守系统．常常出现这样的情况，这些系统的运动规律不仅对时间平移而且对时间反演都是不变的.在经典力学中，我们也遇到这类不变性.

经典力学的拉格朗日函数是速度的二次多项式．对很多系统而言，一次项不出现，而且有

$$L_{\mathrm{cl}}(\dot{q},q)=L_{\mathrm{cl}}(-\dot{q},q).$$

孤立的粒子系统总是具有这种对称性．静外场的引入并不一定破坏这种性质．例如，纯电场就保持这种对称性；但另一方面，磁场导致速度有关的线性耦合项的出现，因而破坏了这种对称性．当这种对称性有效时，动量 p 是速度的齐次线性函数，而且哈密顿函数有类似的对称性质．

为了使讨论不那么形式化，我们就一个特别简单的情况

(置于静势中的粒子)来考虑这种对称性引出的后果. 这时,

$$H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r})\equiv\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})=H(-\boldsymbol{p},\boldsymbol{r}). \qquad (15.67)$$

由此得出,运动方程的全部解 $\boldsymbol{r}(t)$ 对时间都是可逆的,即如下定义的函数 $\boldsymbol{r}_{\rm rev}$ 也是运动方程的一个解:

$$\boldsymbol{r}_{\rm rev}(t)=\boldsymbol{r}(-t) \qquad (15.68)$$

这两个解的对应关系如图 15.1 所示. 在一个解中粒子在时

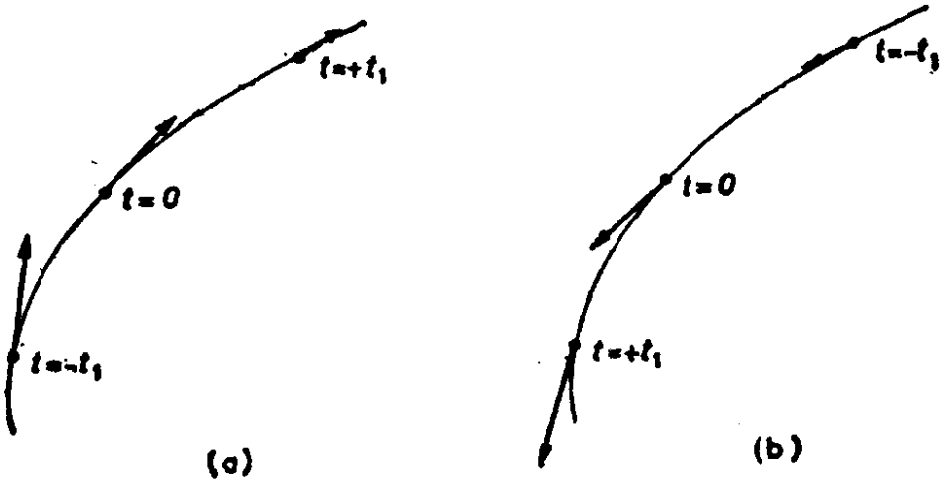


图 15.1 两个经典轨道在组态空间中的表述:
(a) 和 (b) 互为时间反演. $r_a(t)=r_b(-t),\dot{r}_a(t)=-\dot{r}_b(-t)$.

刻 t 的位置等于它在另一解中时刻 $(-t)$ 的位置; 在一个解中粒子在时刻 t 的速度与它在另一个解中时刻 $(-t)$ 的速度方向相反. 在两个解中, 动量之间的对应与速度之间的对应相同:

$$\boldsymbol{p}_{\rm rev}(t)=-\boldsymbol{p}(-t). \qquad (15.69)$$

现在考虑类似的量子系统,它的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r},t). \qquad (15.70)$$

哈密顿量是实算符,如果将 t 变成 $-t$, 而且上式两边取复共

轭，得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r},-t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right]\psi^*(\boldsymbol{r},-t). \tag{15.71}$$

换言之，若 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 是薛定谔方程的解，则函数

$$\psi_{\mathrm{rev}}(\boldsymbol{r},t)\equiv\psi^*(\boldsymbol{r},-t) \tag{15.72}$$

也是一个解.

ψ 和 ψ_{rev} 之间的对应情况完全相似于上述的两个经典解之间的对应[方程 (15.68—69)]. 用 $P(\boldsymbol{r},t)$ 和 $\Pi(\boldsymbol{p},t)$ 分别代表 t 时刻的位置和动量的几率密度. 容易证明:

$$P_{\mathrm{rev}}(\boldsymbol{r},t)=P(\boldsymbol{r},-t) \tag{15.68$_r$}$$

$$\Pi_{\mathrm{rev}}(\boldsymbol{p},t)=\Pi(-\boldsymbol{p},-t). \tag{15.69′}$$

17. 时间反演运算. 无自旋粒子

正如在上一例中所看到的，薛定谔方程的解对时间的可逆性起因于哈密顿量 $H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r})$ 对 $\boldsymbol{p}$ 变成 $-\boldsymbol{p}$ 的变换具有不变性. 实际上，这正是波动力学中为什么用实微分算符表达 H 的原因所在. 于是，我们要定义动力学变量和动力学态的一种变换，我们称之为**时间反演**. 在其中，$\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 分别变换为 $\boldsymbol{r}$ 和 $-\boldsymbol{p}$. 用算符 K 代表这变换的作用，而用 $\mathscr{K}$ 代表变换本身. 根据定义，

$$K\boldsymbol{r}K^\dagger=\boldsymbol{r}\qquad K\boldsymbol{p}K^\dagger=-\boldsymbol{p}. \tag{15.73}$$

这变换改变对易关系的符号，所以 K 是**反么正算符**(参看 §6). 它被 (15.73) 式确定到只相因子未定. 令 K_0 是和这波动力学表象相联系的复共轭算符(此类反么正算符已在 §5 定义). 因为在此表象中表述 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的矩阵分别是实数的和纯虚数的，K_0 显然满足 (15.73). 所以，我们可取 K_0 为时间反演算符:

$$K = K_0.$$

采用这种相位选择，K作用在波函数上就得到它的复共轭：

$$K\Phi(\boldsymbol{r}) = \Phi^*(\boldsymbol{r}).$$

假定 $\boldsymbol{p}$ 用（$-\boldsymbol{p}$）代换时H不变，这相当于假定

$$[K,H] = 0. \tag{15.74}$$

反么正算符K作用于薛定谔方程两边，得出：

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}K|\psi(t)\rangle = HK|\psi(t)\rangle,$$

即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(K|\psi(-t)\rangle) = H(K|\psi(-t)\rangle).$$

因此，若 $|\psi(t)\rangle$ 满足薛定谔方程，那么矢量

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{rev}} \equiv K|\psi(-t)\rangle. \tag{15.75}$$

也满足同一个薛定谔方程。矢量 $|\psi\rangle_{\mathrm{rev}}$ 在 t 时刻表述的动力学态就是矢量 $|\psi\rangle$ 在（$-t$）时刻描述的动力学态的时间反演变换。这就是薛定谔方程解的可逆性质，正如上一小节所叙述的一样。

从定义 (15.73) 得出：变换 $\mathscr{K}$ 与各种空间变换(平移、转动和反射)对易。还要注意到，K与第II节定义的空间变换算符对易[1]。特别是，K与动量的三个分量反对易，因而与无穷小平移算符对易。类似地，K与角动量的三个分量反对

---

1) 如果变换 $\mathscr{K}$ 与另一个变换 $\mathscr{T}$ 对易，就必须有 $KT = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}TK$，相因 $2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ 与T算符的选择有关。很容易看出，如果再要求 $KT = TK$，则T可确定到只正负号未定的程度。

当变换群 $\mathscr{T}$ 与 $\mathscr{K}$ 对易时，这就使得我们能对它所联系的算符群G的各种可能的复杂性引出某些结论。对 (T_i) [§ 8 的符号]，我们可取两个变换算符，它们与K对易。特别是，(1) 代表对偶 (+1, −1)。这些对偶(相差一符号)组成的集合 $\{T\}$ 显然是一个群，而且可选作群 G。

易:

$$K(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})K^{\dagger}=-(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}),\qquad(15.76)$$

因而与无穷小转动算符对易.

18. 时间反演的普遍定义

为了将时间反演的含义扩展到最普遍的粒子系统，我们必须定义自旋变量的时间反演. 由于自旋是一种独特的角动量，它的变换应类似于轨道角动量[方程(15.76)]，即

$$K\boldsymbol{s}K^{\dagger}=-\boldsymbol{s}.\qquad(15.77)$$

时间反演运算使自旋反向. 这个定义使 $\mathscr{H}$ 与空间变换(例如转动) 的对易性质得以保持. 此外，根据 (15.76) 和 (15.77)，K 与总角动量 $\boldsymbol{J}$ 的各个分量反对易:

$$K\boldsymbol{J}K^{\dagger}=-\boldsymbol{J},\qquad(15.78)$$

因而 K 与转动算符对易[参看问题 (15.8)]；也就是说，由于 K 是反线性的，(15.78) 式给出:

$$Ke^{-i(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})\varphi/\hbar}K^{\dagger}=\exp\left[+\frac{i}{\hbar}\varphi(K(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})K^{\dagger})\right]$$

$$=e^{-i(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})\varphi/\hbar}.$$

下面我们对自旋为 s 的粒子构造出时间反演算符. 这个算符由 (15.73)和(15.77)确定. 用 K_0 代表采用 $\{\boldsymbol{r},s_z\}$ 表象时的复共轭算符，其中各基矢的相对相位按通常的约定来固定；特别是，自旋空间的基矢就是第十三章的"标准"选择中所规定的. 因此有

$$K_0\boldsymbol{r}K_0=\boldsymbol{r}\quad K_0\boldsymbol{p}K_0=-\boldsymbol{p}\qquad(15.79)$$

$$K_0s_xK_0=s_x\quad K_0s_yK_0=-s_y\quad K_0s_zK_0=s_z.\qquad(15.80)$$

令

$$K=TK_0.\qquad(15.81)$$

由于 $T=KK_0$ 和 $T^{\dagger}=K_0K^{\dagger}$，(**线性**) 么正变换 T 给出:

$$TrT^{\dagger} = r \quad TpT^{\dagger} = p \tag{15.82}$$

$$Ts_xT^{\dagger} = -s_x \quad Ts_yT^{\dagger} = s_y \quad Ts_zT^{\dagger} = -s_z. \tag{15.83}$$

方程(15.82)和(15.83)给出变量 r,p,s 对**自旋单独绕 y 轴转动 π 时的变换**. 令 $Y^{(s)}$ 是实现此种转动的算符,

$$Y^{(s)} = e^{-i\pi s_y/\hbar}.$$

T 和 $T^{(s)}$ 只差别一个相因子. 由于这相因子没有物理意义,可让它等于 1,就得到:

$$K = Y^{(s)}K_0 = e^{-i\pi s_y/\hbar}K_0. \tag{15.84}$$

对粒子自旋为 $\frac{1}{2}$ 的特殊情况,

$$K = -i\sigma_y K_0. \tag{15.85}$$

所有这些都可以毫不困难地推广到 N 粒子系统上. 此时,算符 K 变为各个粒子的时间反演算符的张量积. 若 K_0 是取标准表象 $\{r^{(1)}S_z^{(1)}\cdots r^{(N)}S_z^{(N)}\}$ 时的复共轭算符, $Y^{(s)}$ 是内禀自旋绕 Oy 轴转动 π 角时的转动算符,又采用上述的相位选择,则我们得到

$$\boxed{K = Y^{(S)}K_0 = e^{-i\pi S_y/\hbar}K_0} \tag{15.86}$$

19. 时间反演和复共轭

时间反演运算 $\mathscr{K}$ 与复数共轭有很多相似之处. 引伸一下,我们以后就称两个互为时间反演变换的线性算符为**复共轭**. 特别是,对于一个算符 Q,

(i) 若 $KQK^{\dagger} = Q$,则它是**实**的;

(ii) 若 $KQK^{\dagger} = -Q$,则它是**纯虚**的.

任一个实常数都是实算符. 常数 i 是纯虚算符. i 与一个实算符的乘积是纯虚算符;两个实算符之和或积也是实算符.

不能混淆实数性和厄密性的含义. 关于这方面,我们要

指出下面两点：

(a) 和厄密共轭的情况相反，在给定的表象中，两个复共轭算符不必用(两个)复共轭矩阵来表述；

(b) 上面的复共轭定义不是唯一可能的．任一个平方等于 $\mathscr{I}$ 的反么正变换都可当作复共轭来处理．

在我们的复共轭定义中，位置可观测量全是实的；动量和自旋全是纯虚的；第 II 节定义的空间变换算符是实的 (问题 15.8)．

复共轭的概念可扩充到包括矢量在内的情形．我们定义**矢量 $|\rangle$ 的复共轭就是矢量 $K|\rangle$**．这并不是互逆对应(除非 $K^2=I$)．从 $\mathscr{K}^2=\mathscr{I}$ 并不一定能得出 $K^2=I$，只能得出 K^2 与所有动力学变量对易，因而它是一个常量．容易证明 (问题15.9)：此常量的数值与定义 K 时所采用的相位选择无关、而且只有两个可能值 ±1．这数值可从 K 的表达式 (15.86) 计算出来．由于 K_0 与 $Y^{(S)}$ 对易，而且 $K_0^2=I$，所以有

$$K^2=(Y^{(S)})^2=e^{-2\pi iS_y/\hbar}, \tag{15.87}$$

或者

$$\boxed{K^2=(-)^n} \tag{15.88}$$

其中，n 是系统包含的半整数自旋粒子的数目．

若 $K^2=1$ (n 偶数)，则矢量的复共轭是互逆对应，我们就能定义各个实矢量．若

$$K|r\rangle=|r\rangle.$$

则矢量 $|r\rangle$ 是实的．按定义，一个**实表象**的所有基矢都是实的．

为了建立一种实基矢，我们按下述方式进行．从任意选定的一个矢量 $|a\rangle$ 出发，让 $|a\rangle$ 和 $K|a\rangle$ 线性地组合成模方为 1 的实矢量．

$$|a^r\rangle = c|a\rangle + c^*(K|a\rangle).$$

$|a^r\rangle$ 的实的特征是很明显的. 可调整常数 c, 使 $|a^r\rangle$ 的模方为 1. 容易证明总能这样做. 于是, 我们取一个与 $|a^r\rangle$ 正交的矢量 $|b\rangle$, 并用同样的方式构成模方为 1 的实矢量 $|b^r\rangle$. 由于 $K|a^r\rangle = |a^r\rangle$, 又按假设, $\langle a^r|b\rangle = 0$, 我们得到:

$$\langle a^r|(K|b\rangle) = (\langle a^r|K^\dagger)(K|b\rangle) = \langle a^r|b\rangle^* = 0,$$

因而 $|b^r\rangle$ 与 $|a^r\rangle$ 正交. 我们再取另一个与 $|a^r\rangle, |b^r\rangle$ 正交的矢量 $|c\rangle$, 并构成矢量 $|c^r\rangle, \cdots$ 如此继续下去, 直至构成了一个完全集.

实表象有一些令人感兴趣的性质, 和 K 相联系的复共轭算符就是 K 算符本身. 任一个实算符都用一个实矩阵表述. 两个复共轭算符用复共轭的矩阵表述. 联结两个实表象的么正矩阵是实的.

若 $K^2 = -1$ (n 奇数), 则没有实矢量. 然而, 因 $K = -K^\dagger$, 故对任一矢量 $|u\rangle$, 都有

$$\langle u|(K|u\rangle) \equiv \langle u|(K^\dagger|u\rangle) = -\langle u|(K|u\rangle) = 0.$$

我们得出如下的令人感兴趣的性质:

两个复共轭矢量 $|\rangle$ 和 $K|\rangle$ 是正交的.

另外, 若矢量 $|b\rangle$ 与两个复共轭矢量 $|a\rangle$, $K|a\rangle$ 正交, 则它的复共轭 $K|b\rangle$ 也与 $|a\rangle, K|a\rangle$ 正交, 从这个性质出发, 采用 $K^2 = 1$ 情况中的证明方式, 我们容易断定: 存在一种完全由复共轭矢量偶构成的基矢.

20. 微观可逆性原理

正如我们假定系统的运动规律对空间变换是不变的一样 (§ 13), 我们也可以假定运动规律对时间是可逆的, 就是说, 若 $|\psi(t)\rangle = U(t, 0)|\psi\rangle$ 描述系统的一个可能运动状态, 则矢量

$$|\psi(t)\rangle_{rev} = KU(-t,0)|\psi\rangle,$$

也描述这系统的一个可能运动状态，因而等于 $U(t,0)K|\psi\rangle$（不计相因子）。假定这性质对所有的 $|\psi\rangle$ 都成立，那末时间可逆性假说可写成

$$U(t,0)K = e^{i\alpha(t)}KU(-t,0).$$

这假设只能应用于保守系统上。用 H 代表哈密顿量，就得到

$$U(t,0) = e^{-iHt/\hbar} \quad U(-t,0) = e^{+iHt/\hbar} = U^\dagger(t,0).$$

由此得出

$$U(t,0) = e^{i\alpha}(KU^\dagger(t,0)K^\dagger). \tag{15.89}$$

用 K 左乘上式两边，又用 $K^\dagger$ 右乘上式两边，而且利用 $K^2 = K^{\dagger 2} = (-)^n$ 这事实，就得到

$$U^\dagger(t,0) = e^{i\alpha}(KU(t,0)K^\dagger).$$

此式与(15.89)的厄密共轭式

$$U^\dagger(t,0) = e^{-i\alpha}(KU(t,0)K^\dagger),$$

相比较，我们看出：$e^{i\alpha}$ 只能取两个值 (± 1)。但 $e^{i\alpha}$ 是 t 的连续函数，而且 $t=0$ 时，它等于 1，所以必然有 $e^{i\alpha}=1$。应用(15.89)于无穷小算符

$$U(dt,0) = 1 - \frac{i}{\hbar}Hdt,$$

得到

$$1 - \frac{i}{\hbar}Hdt = K\left[1 + \frac{i}{\hbar}Hdt\right]K^\dagger$$

即

$$KHK^\dagger = H. \tag{15.90}$$

因此，**若保守系统的运动规律对时间是可逆的，则哈密顿量是实的，反之亦然**(逆定理的证明见 § 17)。

可逆性假设通常表述为**微观可逆性原理**，这是一种与上

面的说法略有不同的方式，如下所述：

当保守系统在起始时刻 t_0 处于 $|\varphi\rangle$ 态时，用 w 代表发现它在时刻 t 处于状态 $|\chi\rangle$ 的几率；当系统在起始时刻 t_0 处于 $K|\chi\rangle$ 态时，用 w_{rev} 代表它在时刻 t 处于状态 $K|\varphi\rangle$ 的几率. 微观可逆性原理就是：

$$w_{rev} = w, \tag{15.91}$$

(对所有的 $|\varphi\rangle, |\chi\rangle, t_0$ 和 t)

条件(15.9)可写成

$$|(\langle\varphi|K^\dagger)(U(t,t_0)K|\chi\rangle)|^2 = |\langle\chi|U(t,t_0)|\varphi\rangle|^2.$$

此式与(15.58)式可比拟. 由于

$$\begin{aligned}(\langle\varphi|K^\dagger)(UK|\chi\rangle) &= \langle\varphi|(K^\dagger UK)|\chi\rangle^* \\ &= \langle\chi|(K^\dagger U^\dagger K)|\varphi\rangle,\end{aligned}$$

它又可以写成

$$|\langle\chi|(K^\dagger U^\dagger K)|\varphi\rangle| = |\langle\chi|U|\varphi\rangle|.$$

因为任何 $|\varphi\rangle$ 和 $|\chi\rangle$ 都满足此式，所以不计相因子时，U 和 $K^\dagger U^\dagger K$ 相等(定理 II). 重复上面有关 $e^{i\alpha}$ 的论证，同样可证明这里的相因子必须等于 1. 因此，微观可逆性原理要求

$$\boxed{U(t,t_0) = K^\dagger U^\dagger(t,t_0)K} \tag{15.92}$$

在 U 是无穷小算符的情况下，这恰好是哈密顿量的不变性条件(15.90)[1].

通常假定：无外场时，任何量子系统的演化都满足微观可逆性原理. 直至现在，这假设并没有和实验发生冲突. 当存在外场时，这原理可以成立，也可以不成立，依外场对时间反演有无不变性而定. 静电场具有这种不变性. 这是容易理解的，因为静电场的源是固定不动的电荷，静电荷分布并不因

1) 因 $U^\dagger(t_2,t_1) = U(t_1,t_2)$，方程(15.92)也可以写成
$$U(t_2,t_1) = K^\dagger U(t_1,t_2)K.$$

时间反演而改变. 另一方面,静磁场的源是固定不变的电流. 时间反演改变了电流的方向,因而静磁场方向也改变. 所以,存在外磁场时,微观可逆性原理不再成立,即使磁场与时间无关也如此.

21. 推论: 克喇末简并

正如其它的对称性一样, H的实数性也反映在相应的本征值问题具有某种特殊的性质上.

若 $|u\rangle$ 是H的一个本征矢量,

$$H|u\rangle = E|u\rangle,$$

则它的复数共轭 $K|u\rangle$ 也是H的一个本征矢量,而且对应同一个本征值 E;就是说,按假设有

$$HK = KH,$$

又因 E 是实的,得到

$$H(K|u\rangle) = K(H|u\rangle) = (KE|u\rangle) = E(K|u\rangle).$$

所以,本征值 E 的子空间 $\mathscr{E}_E$ 对反么正变换 K 是不变的,而且我们可利用 § 19 的结果. 依 $K^2 = \pm 1$, 有两种情况需要考虑.

第一种情况. $K^2 = +1$ $\left(\text{偶数个 } \frac{1}{2} \text{ 自旋的粒子}\right)$. 对每一个子空间 $\mathscr{E}_E$, 我们可以选择一种正交基,使它的全体矢量都是实的. 于是,H至少有一种基,它的全体矢量都是实的.

第二种情况. $K^2 = -1$ $\left(\text{奇数个 } \frac{1}{2} \text{ 自旋的粒子}\right)$. 对每一个子空间 $\mathscr{E}_E$, 我们可选择一种正交基,使之能作出复共轭矢量偶. 于是, 每一个子空间 $\mathscr{E}_E$ 的维数为偶数: **H的每一个本征值至少是二重简并, 而且它的简并度必为偶数.** 这种类型的简并称为**克喇末简并.**

某些系统除时间反演不变外，不再具有别的对称性．处于不对称晶格中的原子就属这种情况．此原子可当作置于纯静电外场中的系统来处理．它的哈密顿量是实的．如果它有奇数个电子，则它的所有能级都有二重简并．引入磁场可消除这种简并．

22. 实转动不变的哈密顿量

如果哈密顿量H除时间反演不变外还有别的对称性，那么，上一节的结果仍成立，但他们的重要性就失去很多．维格纳[1]系统地研究了下面几种情形的H的性质：

(i) H是实的，有 $[K,H]=0$；

(ii) H对线性变换群的变换 T_i 是不变的，$[T_i,H]=0$；

(iii) 变换 T_i 与时间反演对易：

$$[K,T_i]=0.$$

我们在这里只讨论不变群是转动群[2]的情况．

---

1) E. P. Wigner, *Göttinger Nachrichten*, **31** (1932) 546.

2) 对给定的一个群 G，H 是实的这一事实有这样的作用：或者使“G 简并”是双重的，或者使H在一个其基矢满足某种“实数性”条件的表象中能够对角化．详细结果如下（参看维格纳的上述引文）：

令 $G^{(j)}$ 是群G的不可约表示，$G^{(j)*}$ 是共轭表示．K作用在其中一个表示的一个矢量上就得到其它一个表示的某个矢量．$G^{(j)}$ 和 $G^{(j)*}$ 或者等价，或者不等价；对前一情况，两者可互相变换，那么 $G^{(j)*}=SG^{(j)}S^{\dagger}$，而且矩阵 S 具有性质 $SS^*=\pm 1$．我们称 $\boldsymbol{G}$ 为群G在 H 的某一本征值的子空间上的表示．还要考虑三种情况：

(a) 若 $G^{(j)*}$ 与 $G^{(j)}$ 不等价，则当 $\boldsymbol{G}$ 分解成不可约分量时，这两个表示出现的次数相同（双重简并）；

(b) 若 $G^{(j)*}\simeq G^{(j)}$ 而且 $SS^*K^2=-1$，则在 $\boldsymbol{G}$ 的分解过程中，$G^{(j)}$ 出现偶数次（双重简并）；

(c) 若 $G^{(j)*}\simeq G^{(j)}$ 而且 $SS^*K^2=+1$，则 $\boldsymbol{G}$ 的各个分量 $G^{(j)}$ 的基矢能选择成符合“实数”条件的要求：$KS|u\rangle=|u\rangle$．

转动群的表示都属于情况 (c)．

设 Y 是绕 y 轴转 π 角的转动算符（不要和上面引入的只有自旋转动的算符 $Y^{(S)}$ 混淆）。令

$$K_y = Y^\dagger K = e^{i\pi J_y/\hbar}K. \tag{15.93}$$

$Y^\dagger, K$ 与 $\boldsymbol{J}^2$ 对易，但与 J_x 反对易。所以 K_y 与 $\boldsymbol{J}^2$，J_x 对易，也与 J_+, J_- 对易：

$$Y^\dagger K(J_x \pm iJ_y) = Y^\dagger(-J_x \pm iJ_y)K = (J_x \pm iJ_y)Y^\dagger K.$$

又因 $[Y, K] = 0$ 和 $Y^2 = K^2 = (-)^n$ [参看 (15.88) 式]，得到

$$K_{y^2} = 1. \tag{15.94}$$

反么正变换 K_y 可当作复共轭处理，如同 § 19 中对 K 的处理一样。为了和后者相区分，我们将利用引号来标记这种新型的共轭。因此，“实”（线性）算符是一个与 K_y 对易的算符。矢量 $|\rangle$ 的“复共轭”就定义为矢量 $K_y|\rangle$。由于 $K_y^2 = 1$，因此存在“实”矢量、“实”表象。“实”算符作用到“实”矢量上仍得到“实”矢量。在“实”表象中，“实”算符用实矩阵描述。

由于 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_x 是“实”的，我们可以在角动量 (jj) 的空间（矢量都是“实”的）中构造出一种基。J_+ 和 J_- 也是“实”的，标准基的矢量可用 § 13.6 的方法由这些矢量构造出来，它们也都是“实”的。

令 $|\tau j\mu\rangle$ 是“实”标准基的矢量。若 H 对转动和时间反演是不变的，则它与 $\boldsymbol{J}, K_y$ 对易；而且在 $\{\tau j\mu\}$ 表象中它用 (15.52) 类型的实矩阵表述，即

$$\langle \tau j\mu|H|\tau' j'\mu'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}H^{(j)}_{\tau\tau'}$$

其中，$H^{(j)}_{\tau\tau'}$ 都是实的。由此得出：H 具有**转动简并性，另外还至少有一种能构成“实”标准基的正交本征矢量系。**

取更简单空间的基矢的张量积，就能建立 $\mathscr{S}$ 空间的“实”基矢。假定

$$\mathscr{S} = \mathscr{S}_1 \otimes \mathscr{S}_2 \otimes \cdots$$

而且对每个组元空间 $\mathscr{E}_i$，我们定义了转动和时间反演算符. 对每一个 $\mathscr{E}_i$，有一个“复共轭”算符 $K_y^{(i)}=Y^{(i)\dagger}K^{(i)}$；与之相联系；和整个空间相联系的算符 K_y 是这些 $K_y^{(i)}$ 的张量积：

$$K_y=K_y^{(1)}K_y^{(2)}\cdots$$

“实”矢量的张量积仍是“实”矢量. 特别是，我们能在 $\mathscr{E}$ 空间中构造出一种“实”基矢集合，办法是对各个组元空间的矢量（它们构成角动量的“实”标准基）取张量积. 从 $\mathscr{E}$ 空间的这种基出发，通过角动量相加，我们可以在这个空间中构造出总角动量的标准基. 由于 C-G 系数为实数，所以这样构造出来的标准基的矢量也都是“实”的.

我们来谈谈与球谐函数的“实数性”有关的一些问题，以此结束这一章.

令 $\omega=(\theta,\varphi)$ 是一个粒子的位置矢量 $\boldsymbol{r}$ 的角坐标，而 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 是描述角动量为 (lm) 的状态的球谐函数. 在此特殊情况（$\hbar=1$）下，

$$K_y=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi l_y}K_0$$

所以[方程(13.92)和(C.62)]，

$$K_yY_l^m(\omega)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi l_y}Y_l^{m*}(\omega)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi l_y}(-)^mY_l^{-m}(\omega)$$
$$=(-)^lY_l^m(\omega).$$

因此，如果 l 为偶数，则球谐函数 Y_l^m 是“实”的；如果 l 为奇数，则它是“纯虚”的. 另一方面，函数

$$\mathscr{Y}_l^m(\omega)=\mathrm{i}^lY_l^m(\omega)$$

构成轨道角动量的一种“实”标准基.

令 $\omega_p=(\theta_p,\varphi_p)$ 是同一粒子的动量 $\boldsymbol{p}$ 的角坐标，$Y_l^m(\theta_p,\varphi_p)$ 是 $\{\boldsymbol{p}\}$ 表象中描写角动量为 (lm) 的状态的球谐函数. 可以证明(问题 15.10)：

$$K_0=S_0K_p,$$

其中 S_0 是宇称算符[方程(15.45)]；K_p 是和 $\{\boldsymbol{p}\}$ 表象相联系

的复共轭算符．由此得出

$$K_y Y_l^m(\omega_p) = Y_l^m(\omega_p).$$

$Y_l^m(\omega_p)$ 构成轨道角动量的一种“实”标准基．这些“实数性”的考虑可以毫不困难地扩展到普遍情况下的不可约张量算符上(参看问题 15.12)．

练 习 与 问 题

1．假定系统的态矢量空间 $\mathscr{E}$ 是一系列子空间的直和 $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2 + \cdots$，这些子空间对系统的物理可观测量的系综具有不变性．证明：到这些子空间上的投影算符 $P_1, P_2, \cdots$ 与各个物理可观测量对易；$\mathscr{E}$ 的矢量并不都具有对易物理可观测量的一个完备集之中共同本征矢量的性质．

2．证明(15.45)定义的算符 S_θ 满足(15.43)和(15.44)式，而且显然有关系式：$S_\theta \boldsymbol{p} S_\theta^\dagger = -\boldsymbol{p}$．

3．对自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子，以垂直于 $\boldsymbol{u}$ 的平面为反射面的反射算符是两个算符的乘积，其中之一只作用在轨道变量上，另一个只作用在自旋变量上．证明：若对相因子作特定的选择，后者等于 $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{u})$；再证明：乘积 $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{v})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{u})$ 描写两个相继反射，分别以垂直于矢量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的平面为反射面，它等于绕轴 $(\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{v})/|\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{v}|$ 转 $2(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ 角度的自旋转动算符．

4．自旋为 s 的粒子束被依赖于自旋的势所散射．令 $\boldsymbol{p}_i$ 是起始的动量．被散射到某个方向的粒子靠光阑挑选．令 $\boldsymbol{p}_f$ 是此种粒子的动量，D 是散射平面，即包含 $\boldsymbol{p}_i$ 和 $\boldsymbol{p}_f$ 的平面．假定入射粒子是非极化的，因而它们的自旋状态由密度算符 $\rho_i = \frac{1}{2s+1}$ 来描述．证明：若相互作用势对转动和以原点为中心的反射具有不变性，则描写散射粒子的自旋状态的密度算符 ρ_f 对平面 D 是对称的。

5．证明：描写一个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子自旋状态的密度算符可以

表述为

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\sigma});$$

其中，$\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 是粒子自旋矢量的 2 倍；$\boldsymbol{p}$ 是一个矢量，其大小介于 0 与 1 之间，它完全确定了粒子的极化状态.

再返回到问题 15.4，并假定 $s = \frac{1}{2}$，证明：决定散射粒子极化的矢量 $\boldsymbol{p}_f$ 垂直于散射平面.

6. 证明：若时间的任意实函数加到系统的哈密顿量上，则演化算符 $U(t,t_0)$ 只不过是被某个相因子所乘而已.

7. 在坐标系的伽利略变换中，粒子的 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{p}$，s 变量分别变换为 $\boldsymbol{r} - \boldsymbol{v}t$，$\boldsymbol{p} - m\boldsymbol{v}$，$s$. 证明这样的变换可用算符

$$G(\boldsymbol{v},t) = \exp[\mathrm{i}\boldsymbol{v} \cdot (m\boldsymbol{r} - \boldsymbol{p}t)/\hbar].$$

来实现. 适用于 N 个粒子系统的同一变换可用算符 $G(\boldsymbol{v},t) = \exp[\mathrm{i}\boldsymbol{v} \cdot (M\boldsymbol{R} - \boldsymbol{P}t)/\hbar]$ 来实现，其中 M，$\boldsymbol{R}$，$\boldsymbol{P}$ 分别为质心的质量、位置、动量.

[注意. 对于给定的 t，所有伽利略变换构成一个群；如采用这里规定的相位，则变换算符也构成一个群.]

若

$$G^{\dagger}(\boldsymbol{v},t)U(t,t_0)G(\boldsymbol{v},t_0) = U(t,t_0) \times \text{相因子}$$

则运动规律对这种变换具有不变性. 证明这样的条件等价于“薛定谔方程的伽利略不变性条件”：

$$G^{\dagger}(\boldsymbol{v},t)\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right]G(\boldsymbol{v},t) = \left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right] + f,$$

其中，f 是时间的任意实函数；而且薛定谔哈密顿量实际上满足这样的条件 $(f = 0)$.

8. 证明：平移算符、转动算符、反射算符 S_0 [定义 (15.45)] 与时间反演算符 K 对易，而且这一性质与 K 定义式中出现的任意相位的选择无关.

9. 证明：若反么正算符的平方为常数，则此常数或者是 $+1$，或者是 -1.

10. 令 K_p 是和 $\{p\}$ 表象相联系的复共轭算符，K_0 是和 $\{r\}$ 表象相联系的复共轭算符，S_0 是反射算符 [定义 (15.45)]. 证明: $K_0 = S_0K_p$; 又在时间反演下，波函数 $\Phi(p)$ 变换成

$$K\Phi(p) = \Phi^*(-p).$$

11. 设有一个对时间反演不变的系统. 令 B 是此系统的纯虚可观测量(参看 §19，如动量、自旋、轨道角动量等等). 证明:

(i) 若定态是非简并的，则 B 在此态上的平均值为 0;

(ii) B 到任一能量本征值的子空间上的投影的迹为 0.

12. $T_q^{(k)}(q = -k, -k+1, \cdots, +k)$ 代表不可约张量算符 $T^{(k)}$ 的标准分量. 按定义，$T^{(k)}$ 的复共轭是张量算符，它的 $q = 0$ 的分量是 $T_0^{(k)}$ 的时间反演变换(按此定义，实矢量算符的笛卡儿分量对时间反演具有不变性，而虚矢量算符的笛卡儿分量则变号). 证明: $T^{(k)}$ 的复共轭的标准分量是 $(-)^k T^{(k)}$ 的相应分量的复共轭算符 (在 §22 的意义上)；而且在"实"标准表象的特定情况下，矩阵元 $\langle \tau j\mu | T_q^{(k)} | \tau' j' \mu' \rangle$ 是实的(若 $i^k T^{(k)}$ 是实的)，或者是纯虚的(若 $i^k T^{(k)}$ 是纯虚的).

[注意，这个性质在角关联问题上有直接的应用，因为它给定了各个多极贡献的相对相位(不计正负号).]

第四部分　近似方法

第十六章　定 态 微 扰

1. 第四部分概述

在量子力学中，能够精确求解的少数几个问题都是很特殊而简单的体系。实际上没有不作近似就能进行研究的物理体系。物理学家的技巧在于正确地决定各种影响的相对重要性，并在每一种情形下采用恰当的近似方法。严格说来，有多少问题就有多少近似方法。 在这里一一处理它们是不可能的。在本书中，我们仅给出那些值得系统叙述的相当普遍的方法。其中有些已经讲过，值得指出的有：第四章的古典近似和 WKB 方法；第十章的散射问题的相移方法。 其他方法将是这第四部分的主题。

在数学上，量子体系的研究归结为确定其演化算符 $V(t, t_0)$，或者至少确定 $V(t,t_0)$ 的某些特性。当哈密顿量 H 与时间无关时，它简化为解 H 的本征值问题。对于这种情形，

$$U(t,t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar},$$

因此 U 的特性直接和 H 的特性有关。当 H 与时间有关时，情况更复杂些。然而很明显，H（在这种情况下它与时间有关）的本征值和本征函数对于确定 U 的性质将是很重要的。

总的来说，碰撞问题(它具有连续谱本征值)比束缚态问题更困难些。碰撞问题在这部分最后一章（第十九章）中讨论。其余三章（十六至十八章）基本上只涉及到束缚态问题，虽然所陈述的方法最终也可推广到非束缚态上。束缚态问题本身可分为两类：一类是求定态的问题，或更确切地说是求

解H的本征值问题；另一类是从一定态到另一定态的跃迁问题.对于求解H的本征值问题,通常采用三种近似方法:(一)WKB 方法(第四章). 它的基础是古典近似，即大量子数和短波长近似;(二)定态微扰方法. 从与H有微小差别的H_0的本征值问题的精确解出发，将H的本征函数和本征值展成差值（$H-H_0$）的幂级数;（三）变分法. 当以上两种方法失效,但对要找的本征函数的一般形式有直观的猜想时,可用变分法. 本章讲定态微扰. 第十八章讲变分法. 第十七章用来计算跃迁,更普遍地说,是论述对哈密顿量作时间上的修正而求束缚态演化的主要方法.

I. 非简并能级微扰

2. 按微扰的幂展开

假定哈密顿量H可以写成“无微扰的哈密顿量”H_0和微扰项之和，为方便起见，微扰项写成λV的形式，其中λ是实参数，V和H_0一样,都是与时间无关的厄密算符:

$$H=H_0+\lambda V. \tag{16.1}$$

我们假设H_0的本征值问题已解得,因此已知其本征值

$$E_1^0, E_2^0, \cdots, E_i^0$$

和其相应的本征矢量集$|E_i^0\alpha\rangle$，量子数α用来区分属于同一简并本征值的那些本征矢量:

$$H_0|E_i^0\alpha\rangle=E_i^0|E_i^0\alpha\rangle. \tag{16.2}$$

H的本征值谱随λ而连续变化. 当$\lambda=0$时,它与H_0的本征值谱重合. 考虑H_0的一给定本征值E_a^0，我们要计算H的本征值(当$\lambda\to 0$时，趋向E_a^0)，并要确定相应的H的本征态. 为简化书写，我们假定H_0的本征值谱全部是分立的；如果H_0的谱有一部分是连续的,只要E_a^0属于分立谱,以下的讨

论仍然正确.

当本征值 E_a^0 是非简并时，方法特别简单，本节全都假设它是这样的.

设 E 为 H 的当 $\lambda \to 0$ 时趋于 E_a^0 的本征值. 它也是非简并本征值，其相应的本征矢量 $|\psi\rangle$ 确定到仍包含一个可任意取定的常数. 对于 $|\psi\rangle$ 我们采用如下的定义:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{16.3}$$

$$\langle 0|\psi\rangle = \langle 0|0\rangle = 1, \tag{16.4}$$

这里我们令 $|E_a^0\rangle = |0\rangle$. 根据此定义，当 $\lambda \to 0$ 时，$|\psi\rangle$ 趋于 $|0\rangle$.

如果微扰 λV 足够小，则有理由假设 E 和 $|\psi\rangle$ 可以展成 λ 的收敛得很快的幂级数,即可写成:

$$E = E_a^0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \cdots + \lambda^n\varepsilon_n + \cdots \tag{16.5}$$

$$|\psi\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \cdots + \lambda^n|n\rangle + \cdots \tag{16.6}$$

在这些级数中，只保留头几项就得到 E 和 $|\psi\rangle$ 的近似表达式.

微扰方法就是要决定(16.5) 和 (16.6)两式中的各个展开系数. 为此,我们将(16.1)、(16.5)和(16.6)代入(16.3)式的两边,于是它就成为两个 λ 幂级数的等式. 要使此等式成立,则 λ 的各次幂的系数应相等. 依次得到:

$$(H_0 - E_a^0)|0\rangle = 0 \tag{16.7^0}$$

$$(H_0 - E_a^0)|1\rangle + (V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0 \tag{16.7^1}$$

$$(H_0 - E_a^0)|2\rangle + (V - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0 \tag{16.7^2}$$

$$\cdots\cdots$$

$$(H_0 - E_a^0)|n\rangle + (V - \varepsilon_1)|n-1\rangle\cdots - \varepsilon_n|0\rangle = 0. \tag{16.7^n}$$

$$\cdots\cdots$$

条件 (16.4) 变成

$$\langle 0|1\rangle = \langle 0|2\rangle = \cdots = \langle 0|n\rangle = \cdots = 0 \tag{16.8}$$

方程(16.7^0)确定了零级本征值和本征矢量．条件(16.8)和方程式(16.7^1)确定了对这两个量的一级修正．方程(16.7^2)则确定二级修正，……，方程(16.7)确定第 n 级修正．

我们来证明方程式 (16.7^n) 通过较低级的修正有效地确定了 ε_n 和 $|n\rangle$．为此，我们在 H_0 的基矢上投影，投影到 $|0\rangle$ 上，并利用 (16.8) 得到：

$$\varepsilon_n = \langle 0|V|n-1\rangle. \tag{16.9}$$

投影到 H_0 的其他基矢上，得到 $|n\rangle$ 在各个基矢上的分量：

$$\begin{aligned}\langle E^0\alpha|n\rangle = \frac{1}{E_a^0 - E^0}[&\langle E^0\alpha|(V-\varepsilon_1)|n-1\rangle \\ &-\varepsilon_2\langle E^0\alpha|n-2\rangle - \cdots\cdots \\ &-\varepsilon_{n-1}\langle E^0\alpha|1\rangle] \\ &(E_a^0 \neq E^0).\end{aligned}$$

因为 $\langle 0|n\rangle = 0$，所以 $|n\rangle$ 已完全确定．为方便起见，取

$$Q_0 \equiv 1 - |0\rangle\langle 0| = \sum_{E^0\neq E_a^0} \Sigma_\alpha |E^0\alpha\rangle\langle E^0\alpha|$$

和

$$\frac{Q_0}{a} \equiv Q_0 \frac{1}{E_a^0 - H^0} Q_0 = \sum_{E^0\neq E_a^0} \frac{\Sigma_\alpha |E^0\alpha\rangle\langle E^0\alpha|}{E_a^0 - E_0}. \tag{16.10}$$

利用这些符号可以写出

$$\begin{aligned}|n\rangle = \frac{Q_0}{a}[&(V-\varepsilon_1)|n-1\rangle - \varepsilon_2|n-2\rangle \\ &-\cdots-\varepsilon_{n-1}|1\rangle].\end{aligned} \tag{16.11}$$

公式(16.9)和(16.11)与(16.7^n)等价，于是证明完毕．

3. 一级微扰

对于 $n=1$ 的情形，写出(16.9)式和(16.11)式，便得到了

由方程式(16.7[1])决定的一级修正.

公式(16.9)给出能级的一级修正

$$\boxed{\varepsilon_1 = \langle 0|V|0\rangle}, \tag{16.12}$$

因此,准确到一级小的E的公式是

$$E = \langle 0|H|0\rangle + O(\lambda^2). \tag{12.13}$$

它正好是用无微扰的哈密顿量H_0的本征矢量来计算得的哈密顿量H的平均值.

公式(16.11)给出本征矢量的一级修正:

$$|1\rangle = \frac{Q_0}{a}(V - \varepsilon_1)|0\rangle,$$

但由于 $Q_0|0\rangle = 0$, 此式简化成:

$$|1\rangle = \frac{Q_0}{a}V|0\rangle. \tag{16.14}$$

所以,矢量$|\phi\rangle$准确到一级的表示式为

$$|\phi\rangle = \left(1 + \lambda\frac{Q_0}{a}V\right)|0\rangle + O(\lambda^2). \tag{16.15}$$

它的模方是

$$\begin{aligned}\langle\phi|\phi\rangle &= \langle 0|0\rangle + \langle\phi|Q_0|\phi\rangle \\ &\simeq \langle 0|0\rangle + \lambda^2\langle 1|1\rangle = 1 + \lambda^2\langle 1|V\frac{Q_0}{a^2}V|0\rangle \\ &= 1 + O(\lambda^2).\end{aligned}$$

根据(16.14)式,$|0\rangle$的一级修正在H_0的其他基矢上的分量由公式

$$\lambda\langle E^0\alpha|1\rangle = \frac{\langle E^0\alpha|(\lambda V)|0\rangle}{E_a^0 - E^0}. \quad (E^0 \neq E_a^0) \tag{16.16}$$

给出. 因此, 沿$|E^0\alpha\rangle$的分量等于用这两个未微扰本征态$|0\rangle$和$|E^0,\alpha\rangle$的能量之差去除联结这两个态的微扰矩阵元.

这个量的微小程度是微扰幂级数收敛快慢的度量.

4. 氦原子基态

作为第一个例子[1]，我们用微扰方法计算氦原子基态能量,或者更普遍地说，计算任何 $(Z-2)$ 次电离原子的基态能量,这种原子是由电荷为 Ze 的原子核和二个电子组成,假设原子核不动,因此哈密顿量H就是两个电子在势场

$$-\frac{Ze^2}{r_1}-\frac{Ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}$$

中的哈密顿量,其中 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 分别是第一,二个电子的位矢,而 $r_{12}=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$ 是它们之间的距离.

如果忽略相互排斥项 $\frac{e^2}{r_{12}}$,哈密顿量简化成两个独立粒子在库仑场 $-\frac{Ze^2}{r}$ 中的哈密顿量.对应的本征值问题可以准确地求解.把它取作我们的"无微扰哈密顿量".而 $\frac{e^2}{r_{12}}$ 当作微扰项，H_0 的基态对应于两个电子都处于 $1s$ 态.

令 E_{H} 为氢原子基态的结合能，H_0 的基态能量为两个电子能量之和,即是

$$E_a^0=-2Z^2E_{\mathrm{H}}.$$

相应的本征函数是各个电子本征函数的乘积,即(参见 §B3)

$$\Phi_a(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=e^{-(r_1+r_2)/a}/\pi a^3,$$

其中

$$a=a_0/Z=\hbar^2/Zme^2(\simeq Z^{-1}\times 0.53\times 10^{-8}\mathrm{cm}).$$

微扰 e^2/r_{12} 的第一级影响可由公式 (16.12) $(\lambda=1)$ 给

---

1) 本例取自 L. Panling 和 E. B. Wilson 的著作，*Introduction to Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1935).

出：

$$\varepsilon_1 = \int \Phi_a V \Phi_a d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2$$

$$= \frac{e^2}{\pi^2 a^6} \int \frac{e^{-2(r_1+r_2)/a}}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2. \tag{16.17}$$

这是两个密度分别为 $-e\rho_1(r_1)$ 和 $-e\rho_2(r_2)$ 的球对称分布的电荷的静电能。其中

$$\rho_1(r) = \rho_2(r) = e^{-2r/a}/\pi a^3. \tag{16.18}$$

为计算积分

$$I = \int d\boldsymbol{r}_1 \int d\boldsymbol{r}_2 \frac{\rho_1(r_1)\rho_2(r_2)}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|},$$

我们利用展开式 (*B*99)。对上式的角度作积分，得到：

$$I = 16\pi^2 \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \rho_1(r_1)\rho_2(r_2) r_1^2 r_2^2 / r_>$$

$$= 16\pi^2 \int_0^\infty \rho_1(r_1) r_1 dr_1 \left\{ \int_0^{r_1} \rho_2(r_2) r_2^2 dr_2 \right.$$

$$\left. + r_1 \int_{r_1}^\infty \rho_2(r_2) r_2 dr_2 \right\}. \tag{16.19}$$

表 16.1 He, Li^+, Be^{++} 基态的结合能

	1	2	3	4	5	6
	Z	E_a^0	ε_1	$E_{pert} = E_a^0 + \varepsilon_1$	E_{var}	E_{exp}
He · ·	2	−108	34	− 74	− 76.6	− 78.6
Li^+ · ·	3	−243.5	50.5	−193	−195.6	−197.1
Be^{++} · ·	4	−433	67.5	−365.5	−368.1	−370.0

注：表中能量以电子伏特为单位。第 2、3、4 列分别给出无微扰能量，一级微扰。两者之和(即微扰理论的一级近似基态能量)。第 5 列是 §18.6 中变分法的计算值。第 6 列是基态能量的实验值(取自上面提到的 L. Pauling 和 E. B. Wilson 的著作)。

利用(16.18)计算出 I 后，我们得到 $\varepsilon_1 = e^2 I$ 是

$$\varepsilon_1 = \frac{5}{4} Z E_H . \tag{16.20}$$

可以预期：电子之间的排斥能越比原子核的吸引能小，则这个近似的误差会越小，即 Z 越大误差也越小．这正是在表 16.1 中看到的情形．表中我们将 He，Li^+，Be^{++} 基态的结合能的观测值与微扰论计算值作了比较．微扰展开式的收敛速度比我们原来设想的要快．所以在一级近似下计算的结合能数值就和观测值相当符合．甚至对氦的情形（$Z=2$）也如此．

5. 原子核的库仑能

在原子核中，核子之间的距离的数量级为 10^{-13}cm．在此距离内，核力比质子之间的库仑斥力强得多．因此后者可当作微扰．H_0 则是核子的动能与特定核力源的势能之和．V 由库仑斥力项组成：

$$V=\sum_{i<j<z}\frac{e^2}{r_{ij}}, \tag{16.21}$$

（$r_{ij}=|r_i-r_j|=$ 第 i 个和第 j 个质子之间的距离）

我们要用微扰理论计算库仑斥力项所引起的移位 E_c．

用 j 代表未微扰态的自旋，这个态有 $(2j+1)$ 度简并，即有 $(2j+1)$ 个正交归一的未微扰态 Φ^j_μ，每个态对应着总角动量 J_z 分量的各个不同的 μ 值．

尽管有此简并度，我们仍用上述微扰理论的结果．这是因为微扰势能 V 和 H_0 一样，是转动不变量．我们可以在给定角动量 $(j\mu)$ 的状态的子空间 $\mathscr{E}(j\mu)$ 中来处理本征值问题．在此子空间中，基态不是简并的，而能级的一级修正恰好由公式(16.12) 给出．

$$E_c\simeq\langle\Phi^j_\mu|V|\Phi^j_\mu\rangle. \tag{16.22}$$

可以看出这项修正与 μ 无关；库仑微扰项没有消除简并．事实上，对于各级修正这一点都是成立的，因为 H 与 H_0 一样在

转动下是不变量．因此它和 H_0 必需都具有转动简并性．

函数 Φ_μ^j 取决于 Z 个质子和 $N = \mathcal{N} - Z$ 个中子的坐标和固有自旋． 因为它对质子是反对称的，故 V 中的 $\frac{1}{2}Z(Z-1)$ 项贡献相同．因此，有 $E_c = \frac{1}{2}Z(Z-1)\varepsilon$，其中

$$\varepsilon = \langle \Phi_\mu^j | (e^2/r_{12}) | \Phi_\mu^j \rangle$$
$$= \sum_{\text{自旋}} \int |\Phi_\mu^j|^2 (e^2/r_{12}) \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_Z \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{Z+1} \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\mathcal{N}},$$

求和 $\sum_{\text{自旋}}$ 遍及所有核子的自旋变量．我们令

$$\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \sum_{\text{自旋}} \int |\Phi_\mu^j|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_3 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\mathcal{N}}.$$

$\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ 是同时找到质子 1 在 $\boldsymbol{r}_1$ 点，质子 2 在 $\boldsymbol{r}_2$ 点的几率密度．于是有

$$\varepsilon = \int (e^2/r_{12}) \rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2.$$

为计算 E_c，我们采用极粗略的模型，其中两个质子之间的相关性被忽略不计[1]，

$$\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \simeq \rho(\boldsymbol{r}_1)\rho(\boldsymbol{r}_2), \tag{16.23}$$

其中密度 $\rho(r)$ 取成半径为 R 的球内的均匀电荷分布．

$$\rho(r) = \begin{cases} \dfrac{3}{4\pi R^3} & r < R \\ \text{若} & \\ 0 & r > R \end{cases}, \tag{16.24}$$

这里计算和 §4 的计算类似．将以上的密度代入到公式 (16.19) 给出的积分式 I 中，最后得出：

---

1) 我们肯定把 E_c 计算得大了，因为在其他都不变的情况下，Pauli 原理会使 $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_2$ 时的 $\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ 变得小些．

$$E_c \simeq \frac{3}{5} Z(Z-1) \frac{e^2}{R}. \tag{16.25}$$

虽然公式(16.25)是对 E_c 的比较粗略的估算，但它可用来证明核力的电荷无关性(参阅§14.15).为此目的,同位旋形式是很合适的,根据无关性假设,无微扰哈密顿量在电荷空间中是转动不变量，同一同位旋的多重态具有相同的结合能.在给定的同位旋多重态的两个成份之间观察到的结合能之差应等于其库仑能之差，如果我们取

$$R = 1.45 \mathcal{N}^{1/2} \times 10^{-13}\text{cm},$$

则利用公式(16.25)来合理地计算镜核基态能量之差是可能的.

6. 高级修正

写出 $n = 2$ 时的(16.9)和(16.11)的形式,并利用一级修正(16.12)和(16.14)，就得到由(16.7²)式决定的二级修正,它给出:

$$\varepsilon_2 = \langle 0|V|1\rangle = \langle 0|V \frac{Q_0}{a} V|0\rangle \tag{16.26}$$

$$|2\rangle = \frac{Q_0}{a}(V - \varepsilon_1)|1\rangle$$

$$= \left[\frac{Q_0}{a} V \frac{Q_0}{a} - \frac{Q_0}{a^2} V|0\rangle\langle 0|\right] V|0\rangle. \tag{16.27}$$

更高级的修正也可类似地获得.式子写出来很长，但是在一种重要的特殊情况下,即当所有的低级微扰能修正都为零,可以简化.因为如果

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \cdots\cdots = \varepsilon_{n-1} = 0 \tag{16.28}$$

递推公式(16.9)和(16.11)给出:

$$\varepsilon_n = \langle 0|V \left(\frac{Q_0}{a} V\right)^{n-1} |0\rangle \tag{16.29}$$

$$|n\rangle = \frac{Q_0}{a} V|n-1\rangle = \left(\frac{Q_0}{a} V\right)^2 |n-2\rangle = \cdots$$

$$= \left(\frac{Q_0}{a} V\right)^n |0\rangle. \tag{16.30}$$

而条件 (16.28) 写成:

$$\langle 0|V|0\rangle = \langle 0|V \frac{Q_0}{a} V|0\rangle = \cdots$$

$$= \langle 0|V \left(\frac{Q_0}{a} V\right)^{n-2} |0\rangle = 0. \tag{16.28'}$$

当以上条件不满足时，计算到 n 级修正的事是很少有的. 微扰方法只有在级数收敛得足够快、低级修正就足够精确时才是有用的. 运算的复杂程度将随着级次的增加而迅速的增加,以致计算无法再进行下去.

可是高级修正的普遍性质对于研究微扰展开式的收敛性还是有意义的. 将(16.26)式用 V 在 $\{|E^0\alpha\rangle\}$ 表象中的矩阵元写出,我们得到 ε_2 的表示式:

$$\varepsilon_2 = \sum_{E^0 \neq E_a^0} \frac{\Sigma_\alpha |\langle 0|V|E^0\alpha\rangle|^2}{E_a^0 - E^0} \cdot \tag{16.31}$$

微扰效果的大小，正比于矩阵元 $\lambda\langle 0|V|E^0\alpha\rangle$ 和能量差值 $|E_a^0 - E^0|$ 之比.更普遍地,可以粗略地认为,微扰级数的收敛性取决于矩阵元 $\lambda\langle E^0\alpha|V|E^{0\prime}\alpha'\rangle$ (其中, $|E^0\alpha\rangle$ 和 $|E^{0\prime}\alpha\rangle$ 是 H_0 的能量为 E^0 和 $E^{0\prime}$ 的本征态)与差值 $|E_a^0 - E^0|$ 和 $|E_a^0 - E^{0\prime}|$ (即未微扰能量 E_a^0 与 E^0, $E^{0\prime}$ 的差)的比值的微小程度如何.

在等式 (16.31) 右边取每一项绝对值的上限，可以得到 ε_2 的上限. 将各项分母用 E_a^0 与其最靠近的能级之间隔 $\delta E_{\min}$ 代替,得到:

$$|\varepsilon_2| \leqslant \frac{1}{\delta E_{\min}} \sum_{E^0 \neq E_a^0} \sum_{\alpha} \langle 0|V|E^0\alpha\rangle\langle E^0\alpha|V|0\rangle$$

或者

$$|\varepsilon_2| \leqslant \frac{1}{\delta E_{\min}} \langle 0|VQ_0V|0\rangle.$$

将 Q_0 的定义代入，我们有

$$\begin{aligned}\langle 0|VQ_0V|0\rangle &= \langle 0|V(1 - |0\rangle\langle 0|)V|0\rangle \\ &= \langle 0|V^2|0\rangle - \langle 0|V|0\rangle^2 = (\Delta V)^2,\end{aligned}$$

这里的 $(\Delta V)^2$ 是微扰势在状态 $|0\rangle$ 的均方偏差. 由此我们可以写成:

$$|\varepsilon_2| \leqslant \frac{(\Delta V)^2}{\delta E_{\min}}. \tag{16.32}$$

7. 刚性转子的斯塔克效应

一般说来，ε_2 的计算要比 ε_1 的计算困难得多，因为 ε_1 中只有一项 V 的矩阵元，而在 (16.31) 式中包含无限项矩阵元. 但是有时 (16.31) 式中的大部分矩阵元都为零. 因而在右边求和号中只包含有限的几项.

举一个例，我们来考虑刚性转子的斯塔克能级移位. 这类问题在研究双原子分子在电场中极化时就出现了. 在把振动量子当成无限大来处理的极限情况下，刚性转子就代表双原子分子中那两个核的运动. 转子仅有的自由度是确定其空间方位的角变量 (θ, φ). 令 L 表示转子的角动量，$I = mr_0^2$ 为转动惯量 ($m \equiv$ 约化质量，$r_0 \equiv$ 核间距离). 它的哈密顿量为

$$H_0 = \frac{\mathbf{L}^2}{2I},$$

其本征函数为球谐函数 $Y_l^m(\theta\varphi)$，我们将 Y_l^m 所表示的矢量记成 $|lm\rangle$，相应的能量本征值只与 l 有关：

$$H_0|lm\rangle = E_l^0|lm\rangle \qquad E_l^0 = \frac{\hbar^2}{2I}\,l(l+1).$$

在有均匀电场$\mathscr{E}$的情形下（$\mathscr{E}$沿着 z 轴），哈密顿量包含一附加项。

$$V = -d\mathscr{E}\cos\theta.$$

其中，d 为转子的电偶极矩。我们用微扰理论来计算这一附加项的影响。

在 $\{|lm\rangle\}$ 表象中，差不多所有的 V 的矩阵元都为零[1]。因此要有

$$\langle l_1m_1|V|l_2m_2\rangle \neq 0,$$

就必须要求[参阅 $(C.16)$ 和 $(C.17)$]：

$$m_1 = m_2 \quad l_1 = l_2 \pm 1.$$

当这些条件满足时，我们可以从下列公式导出矩阵元［参阅 $(B.90)$］，

$$\langle lm|\cos\theta|l-1m\rangle = \langle l-1m|\cos\theta|lm\rangle = \left(\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{16.33}$$

除了 $l=0$ 的能级外，其他所有未微扰的能级都是简并的。但是 H_0 及 $H \equiv H_0+V$ 都和 L_z 对易，因此可以在 L_z 的每一个给定本征值 m 的子空间 $\mathscr{S}_m$ 中，分别求解 H 的本征值问题。在每一个这种子空间中，H_0 的谱是非简并的，而上述的微扰方法就可以应用了。

这样，我们考虑 $\mathscr{S}_m$ 中的未微扰态 $|lm\rangle$。由上述的选择

---

1) 这些突出的性质是由于 V 为一阶不可约张量算符的 $q=0$ 分量，并且它的宇称为 (-1).

定则，

$$\langle lm|V|lm\rangle = 0.$$

所以能级的一级修正为零，由 (16.31) 式给定的二级修正，根据同一选择定则，化简成对应于 $l\pm1$ 的二项：

$$\varepsilon_2^{lm} = \frac{2I(d\mathscr{E})^2}{\hbar^2}\sum_{l'\neq l}\frac{|\langle lm|\cos\theta|l'm\rangle|^2}{l(l+1)-l'(l'+1)}$$

$$= \frac{2I(d\mathscr{E})^2}{\hbar^2}\left[\frac{|\langle lm|\cos\theta|l+1\ m\rangle|^2}{l(l+1)-(l+1)(l+2)}\right.$$

$$\left.+\frac{|\langle lm|\cos\theta|l-1\ m\rangle|^2}{l(l+1)-l(l-1)}\right].$$

利用 (16.33)，等式右边的括号很容易计算而得到

$$\varepsilon_2^{lm} = \frac{(d\mathscr{E})^2}{E_l^0}\ \frac{l(l+1)-3m^2}{2(2l-1)(2l+3)}.$$

于是，二级近似的能级公式是

$$E_{lm} \simeq E_l^0\left[1+\left(\frac{d\mathscr{E}}{E_l^0}\right)^2\frac{l(l+1)-3m^2}{2(2l-1)(2l+3)}\right]. \quad (16.34)$$

因为能量 E_{lm} 只与 l 和 m^2 有关，简并度只是部分消除，m 只有正负之别的那些状态仍然重合在一起．这种剩余的简并度在所有各级微扰中都保留着．其原因是H对斯塔克效应的对称性是不变量，也就是对于包含 OZ 诸平面反射群具有不变性．在 §13 中我们还要回到这个问题上来．

II. 简并能级微扰

8. 基本理论

假设未微扰哈密顿量的本征值 E_a^0 是 g_a 重简并的，我们保留§2的符号，并用 $\mathscr{E}_a^0$ 标记相应于 E_a^0 的子空间，P_0 是向 $\mathscr{E}_a^0$ 的投影算子．

当 $\lambda \to 0$ 时 H 可以有不止一个的本征值趋向 E_a^0. 我们记这些本征值为 $E_1, E_2, \cdots, E_n$; 其简并度依次为 $g_1, g_2, \cdots, g_n$; 对应的子空间分别为 $\mathscr{E}_1, \mathscr{E}_2, \cdots, \mathscr{E}_n$; 有

$$g_1 + g_2 + \cdots + g_n = g_a,$$

并且在 $\lambda \to 0$ 时, 空间 $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2 + \cdots + \mathscr{E}_n$ 趋向 $\mathscr{E}_a^0$, 如果 P 是向 $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2 + \cdots + \mathscr{E}_n$ 的投影算子, 则它是 λ 的连续函数, 并且

$$P \xrightarrow[\lambda \to 0]{} P_0.$$

确定这种 H 的本征值和本征函数的微扰理论, 要比确定未微扰本征值是非简并时的情形复杂得多. 在第 III 节中将给出可分解成任何级次的严格解. 在此先不管严格性, 只在最低的近似下, 研究 §2 的方法应用到现在的问题中, 将有什么结果.

设 E 为本征值 $E_1, E_2, \cdots, E_n$ 中的一个, $|\psi\rangle$ 是 E 所对应的本征函数之一. 在 $\lambda \to 0$ 的极限下, $|\psi\rangle$ 趋向某一矢量 $|0\rangle$. 暂时只能肯定 $|0\rangle$ 是属于 $\mathscr{E}_a^0$ 空间的矢量. 我们假定 E 和 $|\psi\rangle$ 可用展开式 (16.5) 和 (16.6) 表示, 并有归一化条件 (16.4), 展开系数之间的关系由 (16.7) 和 (16.8) 决定. 并可以逐个确定.

(16.7^0) 式要求 $|0\rangle$ 属于 $\mathscr{E}_a^0$;

$$P_0|0\rangle = |0\rangle. \tag{16.35}$$

(16.7^1) 式向 $\mathscr{E}_a^0$ 投影给出

$$P_0(V - e_1)|0\rangle = 0, \tag{16.36}$$

而向补空间投影给出

$$Q_0|1\rangle = \frac{Q_0}{a} V|0\rangle, \tag{16.37}$$

其中我们取

$$Q_0 = 1 - P_0 \tag{16.38}$$

而 Q_0/a 则是(16.10)式所规定的.

方程式(16.36)是子空间 $\mathscr{E}_a^0$ 中的一个本征值方程: ε_1 是算符 P_0VP_0 在 $\mathscr{E}_a^0$ 中的本征值，$|0\rangle$ 是相应的本征矢量. 在 $|E^0\alpha\rangle$ 表象中,方程式变成

$$\Sigma_{\alpha'}\langle E_a^0\alpha|V|E_a^0\alpha'\rangle\langle E_a^0\alpha'|0\rangle = \varepsilon_1\langle E_a^0\alpha|0\rangle.$$

于是一级修正 ε_1 可以由对角化一个 $g_a \times g_a$ 的矩阵来得到，而这个矩阵的矩阵元是

$$V_{\alpha\alpha'} \equiv \langle E_a^0\alpha|V|E_a^0\alpha'\rangle.$$

ε_1 的可能值就是这个矩阵的本征值. 如果它有 g_a 个不同的本征值,则它们都是非简并的,因而微扰完全消除了简并. 若有小于 g_a 个不同的本征值，则其中某些仍是简并的，因而简并只是部分地消除了.

如果一级修正 ε_1 是非简并本征值,则相应的本征态 $|0\rangle$，在零级内就完全确定了，它由(16.7^0)和(16.7^1)确定到只剩一个常数未定的程度. $|\psi\rangle$ 的一级修正在 $\mathscr{E}_a^0$ 的补空间上的投影 $Q_0|1\rangle$ 由(16.37) 式给出，除了有条件(16.4)外， 它在 $\mathscr{E}_a^0$ 上的投影仍未确定. 如果 ε_1 是 g_1 重简并的，则 (16.7^0) 式和 (16.7^1) 式只是说明 $|0\rangle$ 属于对应的 g_1 维子空间,要更精确的决定 $|0\rangle$，必需作更高级的近似.

选定某一 ε_1 值,将(16.7^2)向 ε_1 的子空间投影，可以得到二级修正 ε_2. 这个子空间记作 $\mathscr{E}_a^{(1)}$，它包含在 $\mathscr{E}_a^0$ 中.我们用 $P^{(1)}$ 表示相应的投影算子. P' 表示向 $\mathscr{E}_a^0$ 中它的补空间的投影算子:

$$P_0 = P^{(1)} + P' \quad P^{(1)} + P' + Q_0 = 1.$$

于是有

$$P^{(1)}H_0 = P^{(1)}P_0H_0 = E_a^0P^{(1)}$$

$$P^{(1)}V = P^{(1)}V(P^{(1)} + P' + Q_0) = \varepsilon_1P^{(1)} + P^{(1)}VQ_0.$$

(16.7^2) 式的投影给出

$$P^{(1)}VQ_0|1\rangle - \varepsilon_2 P^{(1)}|0\rangle = 0,$$

于是利用(16.37)式得

$$P^{(1)}\left[\left(V\frac{Q_0}{a}V\right) - \varepsilon_2\right]|0\rangle = 0. \tag{16.39}$$

二级修正的(16.39)式类似于一级修正的(16.36)式。正如 ε_1 是 P_0VP_0 在 $\mathscr{E}_a^0$ 中的本征值一样，ε_2 是 $P^{(1)}V\frac{Q_0}{a}VP^{(1)}$ 在 $\mathscr{E}_a^{(1)}$ 中的本征值，相应的本征矢量是 $|0\rangle$。

如果 ε_1 是非简并本征值($g=1$)，则 $|0\rangle$ 由较低级方程决定，并有

$$\varepsilon_2 = \langle 0|V\frac{Q_0}{a}V|0\rangle,$$

这与非简并情形一样.如果与此相反($g_1>1$)，则 ε_2 的计算就涉及求一个 $g_1\times g_1$ 矩阵的本征值．若这些本征值都不相同，则在二级近似下简并就完全被消除，若不是这样，必要时还要继续求高级近似.

在某些情形下，各级中都残留有简并，我们已在核库仑能(§5)和刚性转子的史塔克效应中(§7)见过此例．通常通过对 H 和 H_0 的对称性的考察，就可以预计未微扰能级的简并度在微扰 λV 的作用下能消除到什么程度．在§13中将对这一点给出系统的讨论，我们先用原子物理中的几个一级计算的例子来说明这种方法.

9. 无自旋-轨道力时的原子能级

在第十四章中，我们研究过中心场近似下(§14.12) Z个电子原子的能级．这个近似下哈密顿量 H 替换成

$$H_C = \sum_{i=1}^{Z}\left[\frac{p_i^2}{2m} + V_C(r_i)\right].$$

这里只考虑了各电子间的静电斥力的平均值. 令 V_1 为精确的库仑相互作用与 H_C 的势能之差:

$$V_1 = \sum_{i<j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_i \left[V_C(r_i) + \frac{Ze^2}{r_i} \right]. \quad (16.40)$$

若我们在 H 中忽略与电子自旋有关的项,则写成:

$$H \simeq H_C + V_1, \quad (16.41)$$

并将 V_1 当作微扰处理,就可以从 H_C 的谱得到 H 的谱. 在 §10 中将讨论包含与自旋有关的力时所需要作的修正.

通常 H_C 的本征值都是高度简并的. 微扰 V_1 至少部分地消除了这种简并. 在 H_C 的某个本征值邻近的 H 的能级,可以由在该本征值的子空间中对角化 V_1 而得到. 特别是,H 的基态和第一激发态可通过在 H_C 的最低本征值 E_0 的子空间 $\mathscr{E}_0$ 中对角化 V_1 而得到.

H 的对称性可使对角化问题大为简化. 因为 H(和 H_C 相同)与自旋无关. 它不仅对整个转动是不变的. 而且对仅轨道变量的转动,或对仅自旋变量的转动也是不变的; H 不仅与总自旋角动量 $\boldsymbol{J}$ 对易,而且也与总轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 和总自旋 $\boldsymbol{S}$[1] 对易. 因为 H_C 与 H 有相同的对称性,算符 $P_0V_1P_0$ 也和 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 对易;它在 $\mathscr{E}_0$ 中的本征态可以用 L^2, S^2, L_z 和 S_z 的本征值来标记. 而且其本征值只与 L 和 S 有关,每个本征值的简并度是 $(2L+1)(2S+1)$.

用 $|\gamma LSM_LM_S\rangle$; 代表 $\mathscr{E}_0$ 中的标准基 $\{\mathbf{L}^2L_z, \mathbf{S}^2S_z\}$ 的矢量,量子数 γ 用来区别具有相同轨道角动量和自旋的状态,在相应的表象中,$P_0V_1P_0$ 的矩阵具有很简单的形式:

$$\langle \gamma LSM_LM_S | V_1 | \gamma' L'S'M'_LM'_S \rangle$$

---

1) 此外,H 对于只是轨道变量的置换是不变的,但是由于泡利原理,从 §D.18 的定理可知,这和自旋的转动不变性等价.

$$= \delta_{LL'}\delta_{SS'}\delta_{M_L M'_L}\delta_{M_S M'_S}\mathscr{V}^{(LS)}_{\gamma\gamma'}.$$

为了实现对角化，只要将和各个量子数偶 (LS) 对应的矩阵 $\mathscr{V}(LS)$ 对角化.

我们以碳原子为例，它的基态组态是$1s^2 2s^2 2p^2$，即两个满壳层 $1s$ 和 $2s$ 以及一个只有二个电子的未满 $2p$ 壳层. 它是 $\binom{6}{2} = 15$ 重简并的. 为了找出数偶 (LS) 的可能取值及其简并度，即对应于 $(2L+1)(2S+1)$ 个矢量的数目. 我们可以不管满壳层而只考虑二个$2p$ 电子(问题 16.3).

不考虑泡利原理，二个 $2p$ 电子可组成的不同光谱项有

$$^3S\ \ ^3P\ \ ^3D\ \ ^1S\ \ ^1P\ \ ^1D.$$

因为自旋的三重态和单态分别对应于自旋交换的对称和反对称态. 而 S 和D态属于一种，P 态属于另一种，这两种分别对应于轨道变量交换的对称与反对称态. 所以上表中满足这个原理的光谱项为

$$^3P\ \ ^1S\ \ ^1D,$$

共有 $9+1+5=15$ 个线性无关的反对称态. 正如所预期的. 在 $\{LSM_L M_S\}$ 基中(在此特例中，量子数 γ 是多余的)，微扰 V_1 必需是对角化的. 它总计有三个不同的本征值，$\mathscr{V}(^3P)$，$\mathscr{V}(^1S)$ 和 $\mathscr{V}(^1D)$，分别是 9、1 和 5 重简并的，当单粒子态波函数都已知时，进行数字的计算是不困难的. 计算表明 ^3P 能级明显地低于其余二个能级 (图 16.1)[1)]

---

1) 一般说来，一个给定组态的能级是随总自旋 S 的减少而增高的 (洪德规则). 这是因为在 (16.40) 式中第二项对各能级的贡献相同，所以能级的高低顺序仅仅决定于排斥项 $\Sigma e^2/|r_i - r_j|$，这一项随电子间的间距增加而减少，因而也是随波函数轨道部分更反对称化而减少. S 越大则波函数的自旋部分越对称 (§D. 18)，因此 S 越大其轨道部分就更反对称.

10. 自旋-轨道力 LS 和 jj 耦合

(16.41)式只是近似地给出了H的表达式，它还应包括与自旋有关的项，我们将这一项记为 V_2：

$$H = H_C + V_1 + V_2. \tag{16.42}$$

在第一步近似下，可以认为每个电子在势场 $V_C(r)$ 中独立运动．其自旋 s 是按(13.95)式与其轨道角动量耦合的，于是一个很好的近似是

$$V_2 \simeq \sum_{i=1}^{z} (\boldsymbol{l}_i \cdot \boldsymbol{s}_i) g(r_i), \tag{16.43}$$

其中

$$g(r) = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\mathrm{d}V_C}{\mathrm{d}r}. \tag{16.44}$$

为了正确地考虑这一项的影响，我们必需把在 §9 的处理中的V换成 $V_1 + V_2$，然而，$V_1 + V_2$ 的对称性比 V_1 差；

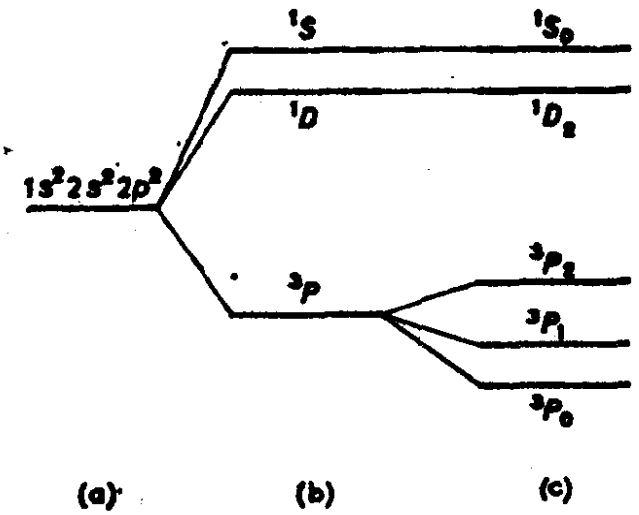


图 16.1 碳原子的基态能级

(a) 中心场近似 ($V_1 = V_2 = 0$). (b) 忽略自旋轨道耦合 ($V_2 = 0$) (c) 包括自旋轨道耦合.

$V_1 + V_2$ 与 $\boldsymbol{J}$ 对易，但既不和 $\boldsymbol{L}$ 也不和 $\boldsymbol{S}$ 对易．因此，加上自旋轨道耦合项后，在未微扰的本征值的子空间中将微扰对角化的问题大为复杂了．只有当 V_1 和 V_2 中的一项比另一项小很多时，问题才变得相对简单一些．

如果 $V_1 \gg V_2$，在第一步近似中可先略去 V_2，每个组态将给出一系列能级，其中每个能级对应一个完全确定的数偶 (LS)，并有 $(2L+1)(2S+1)$ 简并度（见 §9），对应的本征矢量是由组态的单电子波函数组成的斯莱特行列式的特殊线性组合．它们是 L^2, S^2, L_z 和 S_z 的本征矢量．然后，把 V_2 当成对应于这种能级的各个子空间中的小微扰来处理．对每个 J 值 $(J = L+S, L+S-1, \cdots\cdots, |L-S|)$，相应地有 V_2 的一个本征值．简并度为 $2J+1$．对应的本征矢量 $|\gamma LSJM\rangle$ 是 L^2, S^2, J^2 和 J_z 的本征矢量．这种将组态耦合成总角动量的本征矢量的方法，称为罗塞尔-桑德斯（Russel-Saunders）耦合．或称 LS 耦合．

如果 $V_2 \gg V_1$，在第一步近似中可以略去 V_1，于是哈密顿量成为 $H_C + V_2$，这是独立粒子在势场 $V_C + (\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})g(r)$．中运动的哈密顿量．设每个粒子的总角动量为 $\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}$，自旋轨道耦合项 $(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})g(r)$ 将轨道角动量不为零的每一个单粒子态都分裂成 $j = l \pm \frac{1}{2}$ 的二个能级，而部分地消除了简并度，对应的本征矢量用量子数 $(nljm)$ 标志．除此以外，处理 $H_C + V_2$ 的方法全都和 H_C 的作法相类似（§14.12）．每个 H_C 的组态导至一定数目的 $H_C + V_2$ 的组态．只要确定了它们，就可以把 V_1 当成各个组态中的微扰来处理，对于 J 的各个可能值相应有一个（或几个）本征值，简并度为 $(2J+1)$．相应的本征矢量是 j_i^2, J^2 和 J_z 的本征矢量．这种由基态组态的斯莱特行列式，耦合成总角动量本征矢量的方法称为 jj 耦

合.

下表中总结这两种方法.

LS 耦合	jj 耦合
(V_1) $\boldsymbol{L}=\Sigma_i \boldsymbol{l}_i$ $\boldsymbol{S}=\Sigma_i \boldsymbol{s}_i$	(V_2) $\boldsymbol{j}_i=\boldsymbol{l}_i+\boldsymbol{s}_i$
(V_2) $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$	(V_1) $\boldsymbol{J}=\Sigma_i \boldsymbol{j}_i$

V_2 的相对重要性随 $Z^{1)}$ 的增加而迅速增加. 在轻原子或中等原子中,$V_1 \gg V_2$, 因而 LS 耦合是良好的近似;在重原子(从 Pb 开始)中, V_1 和 V_2 在数量级相同, 基态组态的能级结构介乎 LS 耦合与 jj 耦合给出的结果之间.

11. LS 耦合的原子 自旋-轨道耦合引起的分裂

我们来考虑在 LS 耦合情形 $(V_1 \gg V_2)$ 时, 自旋-轨道耦合的作用. 我们把 V_2 当作 H_C+V_1 的能级的微扰来处理.

在 §9 中已叙述了未微扰哈密顿量的能谱. 每个能级对应着特定的 L 和 S 值. 并有 $(2L+1)(2S+1)$ 简并度;相应的本征矢量的子空间, 是由一组轨道角动量和自旋完全确定的矢量, 记作 $|\alpha LSM_L M_S\rangle$, 所张成. 量子数 α 用来指明能级属于 H_C 的那个组态, 并且也用于区分同一组态中具有相同 LS 值的各个能级.

在各个未微扰能级的子空间 $\mathscr{E}(\alpha LS)$ 中对角化 V_2 就得到微扰能. 现在证明在各个子空间 $\mathscr{E}(\alpha、L、S)$ 中, V_2 的

---

1) V_1 是有起伏的一项,它对每个电子的能级的影响大致是按 $\sqrt{Z}$ 而增加的,每个电子的自旋-轨道耦合能大致是按 Z^2 而增加的. 它可由托马斯-费米模型估算。耦合项与 $\left(\frac{1}{r}\right)(dV_C/dr)$ 的平均值成正比, 利用 §14.13 的符号,可近似地给出

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V_C}{\mathrm{d}r}\simeq\frac{Z^2e^2}{b^3}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\chi}{x}\right).$$

矩阵元与算符 $A(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})$ 的矩阵元相同，这里 A 是未微扰能级 (αLS) 的一个特征常数：

$$\langle\alpha LSM_LM_S|V_2|\alpha LSM'_LM'_S\rangle$$
$$=A\langle\alpha LSM_LM_S|(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})|\alpha LSM'_LM'_S\rangle. \qquad (16.45)$$

证明：因为基矢是反对称的，V_2 中的 Z 项对矩阵元的贡献都相等．［(16.43) 式］．因此我们只需处理一项，例如 $(\boldsymbol{l}_1\cdot\boldsymbol{s}_1)g(r_1)$ 项就可以了．(由于不会引起混淆，以下我们就略去指标 1．)从 $\boldsymbol{l}$ 的任一分量 l_m 及 $\boldsymbol{s}$ 的任一分量 s_μ，可以构成一个算符 $g(r)l_ms_\mu$，这个算符既是只对轨道变量旋转的不可约矢量算符的分量，又是只对自旋变量转动的不可约矢量算符的分量．算符 L_mS_μ 有同样的性质．应用维格纳-爱卡脱定理 (Wigner-Eckart)，很容易导出(参阅问题 13.1)：

$$\langle\alpha LSM_LM_S|gl_ms_\mu|\alpha LSM'_LM'_S\rangle$$
$$=a\langle\alpha LSM_LM_S|L_mS_\mu|\alpha LSM'_LM'_S\rangle,$$

其中，a 是与磁量子数 M_L,M'_L,M_S,M'_S,m,μ．无关的常数，由此得到

$$\langle\alpha LSM_LM_S|g(r)(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})|\alpha LSM'_LM'_S\rangle$$
$$=a\langle\alpha LSM_LM_S|(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})|\alpha LSM'_LM'_S\rangle.$$

各项乘以 Z，令 $A=Za$，我们就得到 (16.45) 式．

在子空间 $\mathscr{E}(\alpha LS)$ 中，V_2 在 $\{\alpha,L,SM_LM_S\}$ 表象中不是对角的，但它是转动不变量．很明显，它在 $\{\alpha LSJM\}$ 表象中是对角的，这个表象的基矢是 $\mathscr{E}(\alpha LS)$ 中 J^2 和 J_z 的本征矢量．因为

$$\boldsymbol{J}^2=\boldsymbol{L}^2+\boldsymbol{S}^2+2\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S},$$

利用(16.45)式，我们有

$$\langle\alpha LSJM|V_2|\alpha LSJM\rangle$$
$$=\frac{1}{2}A\langle\alpha LSJM|(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{S}^2)|\alpha LSJM\rangle$$

$$= \frac{1}{2} A\hbar^2[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)].$$

(16.46)

于是，有多少个可能的 J ($J = L + S, \cdots\cdots, |L - S|$)，未受微扰能级 ($\alpha LS$) 就分裂成多少个能级. 这些能级的简并度分别是 $2J + 1$，而微扰能由公式(16.46) 给出.

在图 16.1 中给出了碳原子在 LS 耦合时基态组态的能级图. 只有 ^3P 态受自旋-轨道耦合能项的影响，它分裂成三个能级 $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$. 由于在此特定情形下 $A > 0$. 这些能级的顺序是随 J 增加而排列的. 其中最低态是 $^3P_0$ 态.

12. 塞曼效应和帕邢-巴克效应

在以上三节中，我们考察了无外场时原子能级的结构. 现在考虑置于均匀磁场 $\mathscr{H}$ 中的原子，其哈密顿量由无外场时原子的哈密顿量 H_0，加上一项 W 而成[见 (13.96)式]. 其中

$$W = -\frac{e}{2mc}[\mathscr{H} \cdot (\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S})] \qquad (16.47)$$

(以及我们忽略了的包含 $\mathscr{H}^2$ 的"反磁性"项).

塞曼效应

对于很小的 $\mathscr{H}$，W 可当作微扰来处理. 因为 H_0 对转动是不变的，它的每个能级对应总角动量的一个确定的 J 值. 我们将假定 $J \neq 0$[1]，在此情形，能级有 $2J + 1$ 度简并. 这种简并被微扰 W 消除.

设 E_0 是未微扰能级之一，J 是其总角动量，$|E_0JM\rangle$ 是

---

1) 如果 $J = 0$ (反磁性原子)，能级移位对于 $\mathscr{H}$ 的一次效应为零，在计算 $\mathscr{H}$ 的二次效应的能级移位时，反磁性项的贡献就不能略去.

张成本征值 E_0 的子空间的 J^2 和 J_z 的本征矢量. 由磁场引起的能级移位是矩阵

$$\langle E_0JM|W|E_0JM'\rangle$$

的本征值. 当我们取 Z 轴平行于 $\mathscr{H}$ 时，这个矩阵自然就是对角的. 因为此时 W 与 J_z 对易.

根据维格纳-爱卡脱定理，矢量算符 $\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{J}$ 在 E_0 的子空间中的矩阵元，也是成正比的.

$$\langle E_0JM|(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})|E_0JM'\rangle = g\langle E_0JM|\boldsymbol{J}|E_0JM'\rangle. \tag{16.48}$$

比例因子 g 叫做朗德因子，它等于这些算符的约化矩阵元的比值，它是所考虑的能级 E_0 的一个特征数量. 特别是

$$\langle E_0JM|(L_z+2S_z)|E_0JM'\rangle = gM\hbar\delta_{MM'},$$

采用前面所作的坐标轴的选择.

$$W = -\frac{e\mathscr{H}}{2mc}(L_z+2S_z).$$

如果将玻尔磁子记作 μ_B [(13.74)式]，就有

$$\langle E_0JM|W|E_0JM'\rangle = -Mg\mu_B\mathscr{H}\delta_{MM'}.$$

于是微扰完全消除了简并. 而且由塞曼公式

$$E = E_0 - Mg\mu_B\mathscr{H}\quad(M=-J,-J+1,\cdots,+J), \tag{16.49}$$

得到了 $(2J+1)$ 个能级.

LS 耦合中朗德因子的计算

朗德因子 g 是由公式(16.48)定义的，假定 LS 耦合方式适用于所讨论的原子，因此沿用 §11 的符号，无外场时原子能级用量子数 αLSJ 标记.

为了求出 g，我们用两种方法计算平均值

$$\langle\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})\rangle \equiv \langle\alpha LSJM|(\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}))|\alpha LSJM\rangle.$$

(*a*) 利用恒等式

$$\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})=\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{S}^2+\frac{\mathrm{d}1}{2}(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{S}^2),$$

我们有

$$\langle\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})\rangle=\frac{1}{2}[3J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)]\hbar^2.$$

(*b*) 在 $\{\alpha LSJM\}$ 表象中，直接将矩阵相乘，并且利用 (16.48) 式，我们得到(参阅问题 13.19)

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})\rangle&=\sum_{i=x\,y\,z}\sum_{M'}\langle\alpha LSJM|J_i|\alpha LSJM'\rangle\\&\quad\times\langle\alpha LSJM'|(L_i+2S_i)|\alpha LSJM\rangle\\&=g\langle\alpha LSJM|\boldsymbol{J}^2|\alpha LSJM\rangle\\&=gJ(J+1)\hbar^2.\end{aligned}$$

把这两个结果等同起来，就得到

$$g=1+\frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}.\quad(16.50)$$

帕邢-巴克效应

上述的微扰理论，只在微扰W引起的能级分裂．比未微扰能级间距离小得多时才适用．当 LS 耦适合时，这意味着W比自旋-轨道耦合能 V_2 小，或更确切地说 [见 (16.46) 式和 (16.49) 式]．

$$|g|\mu_B\mathscr{H}\ll A\hbar^2.$$

相反地，我们假设磁场足够强，使得

$$A\hbar^2\ll\mu_B\mathscr{H}.$$

在这种情形下，自旋-轨道耦合比起磁场耦合来可以忽略，因此后者可以当作哈密顿量

$$H_C+V_1.$$

能级的微扰来处理. 沿用 § 11 的符号，每个未微扰能级用量子数 (αLS) 标记，并有简并度 $(2S+1)(2L+1)$. 微扰部分地消除了此简并. 这种效应称帕邢-巴克效应，在相应的子空间中对角化 W 可得到相对于未微扰能级 $E_{\alpha LS}$ 的移位. 因为 W 与 L_z 和 S_z 对易，微扰矩阵在 $\{\alpha LSM_LM_S\}$ 表象中是对角的:

$$\langle \alpha LSM_LM_S|W|\alpha LSM'_LM'_S\rangle$$
$$= -\mu_B\mathscr{H}(M_L+2M_S)\delta_{M_LM'_L}\delta_{M_SM'_S}.$$

因此能级的移位是由公式

$$E = E_{\alpha LS} - \mu_B\mathscr{H}(M_L+2M_S)$$
$$(M_L=-L,\cdots,+L;\quad M_S=-S,\cdots,+S)$$

给出.

如果 $L\neq 0$ 和 $S\neq 0$，求得的某些能级还有简并，引入自旋-轨道耦合项，就至少可以部分地消除这些残留的简并.

13. H 的对称性和简并的消除[1]

前面的例子 (§5, 7, 9, 10, 11, 12) 表明对称性的考虑在简并能级的微扰计算中是重要的. 简并本征值的出现，几乎总是与哈密顿量的对称性相联系的. H_0 和 H 的不变群的知识，使得人们可以预言微扰能够消除 E_α^0 的简并到什么程度. 并且使微扰能的计算变得很方便.

在以前研究过的所有例子中，未微扰的 H_0 对于某个群 G_0 是不变的，而微扰 λV 对于 G_0 的某个子群 G 是不变的. 例如，在刚性转子的史塔克效应(§ 7)的情形，G_0 是转动反射群，而 G 是包含 Z 轴的平面反射群(参阅第 15 章 §14).

---

1) 本节是这一章中唯一需要用第十五章的结果和少许群论概念的一节. 初次阅读可略去.

仍用 §15.11 的符号. 我们可以利用 G 的算子，构成可观察量 J 和 M，它们的本征值分别用量子数 j 和 μ 标记. 对于每一个 j 值，有群的一个确定的不可约表示与之对应，用 d_j 代表这个表示的维数. 对于给定的 j，可以有 d_j 个不同的 μ 值，以区别此表示的 d_j 个基矢. 每一对本征值 $(j\mu)$，对应态矢量空间 $\mathscr{E}$ 的某个子空间 $\mathscr{E}(j\mu)$. 因为 H 和 H_0 对 G 是不变的，因此它们与 J 和 M 都对易. 所以可在每个子空间 $\mathscr{E}(j\mu)$ 中，各自求解相应的本征值问题. 在给定的 j 对应的 d_j 个子空间中，我们得到具有相同简并度的同一本征值谱.

假设 E_a^0 是 H_0 在 $\mathscr{E}(j\mu)$ 中的，具有 p_j 度简并的本征值. 按照上面的说明，有

$$g_a = \Sigma_j p_j d_j. \tag{16.51}$$

在子空间 $\mathscr{E}(j\mu)$ 中，微扰的引入可能或多或少地消除未微扰能级的简并度(假设 $p_j > 1$)；如果 H 没有比 G 群更多的对称性，那么问题中的简并度通常完全被消除，而且得到 p_j 个不同的能级. **因此在整个空间 $\mathscr{E}$ 中，微扰的引入最多将无微扰能级分裂成 $\Sigma_j p_j$ 个不同的能级，当 $\mathscr{E}(j\mu)$ 中的简并度全都被消除时，这些能级中的每一个都对应一个特定的 j 值，并有 d_j 度简并；否则，其简并度是 d_j 的倍数.**

得到这些结果仅仅基于这样的事实：H 具有 G 的对称性，并且是 λ 的连续函数，当 $\lambda \to 0$ 时，H 趋向 H_0. **这些结果对各级微扰的计算都正确.**

如果子空间 $\mathscr{E}_a^0$ 对于 G 群是不可约的，则在 (16.15) 求和式中只包含一项[1]，而且 E_a^0 能级的简并在任何级微扰中都不会消除. 这种情形一般发生在 H_0 没有比 H 更多的对称性时

---

1) $\mathscr{E}_a^0$ 对 G 是一个不变子空间，而且确定了此群的某个 g_a 维表示(记作 G_a)，从公式(16.51)，它分解为不可约部分的公式为 $G_a \simeq \Sigma_j p_j G^{(j)}$.

($G_0 = G$)，我们在计算核的库仑能时已经见过这种例子(§5).

另一方面，在§7的情况中，G确实是G_0的子群．本征值E_l^0的子空间$\mathscr{E}_l^0$是$(2l+1)$重简并的，它对G_0是不可约的，但对G(若$l \neq 0$)是可约的．在这种特殊情形下(参阅§15.14)，J是本征值为m^2的算符L_z^2，本征值可用量子数$|m|$标记($|m| = 0,1,2\cdots\cdots$)，对应的不可约子空间的维数是

$$d_{|m|} = \begin{cases} 2 & |m| \neq 0 \\ 1 & |m| = 0. \end{cases}$$

在这种情形下，(16.51)式变成：

$$g_l \equiv 2l+1 = \sum_{|m|=0}^{l} d_{|m|}.$$

于是，微扰最多使能级E_l^0分裂成$l+1$个不同的能级，其中$|m| = 0$的能级是非简并的．其余的都是二重简并．这就是§7中所见到的情形．必须强调指出：这种对称性的考虑仅仅给出简并消除的上限；只要微扰计算继续到足够高级近似，这个极限终将达到．在§7的情形中，二级近似就达到了此极限．

14. 准简并性

当两个能级E_a^0、E_b^0彼此靠得很近，以致微扰V引起的修正，比$|E_a^0 - E_b^0|$还要大时，以上的微扰方法就不再适用了，然而只要适当修改未微扰哈密顿量的定义和微扰，对这种"准简并"情形仍然可以应用微扰方法．

令P_i^0是向H_0的本征值E_i^0的子空间的投影算子，则有

$$H_0 = \Sigma_i E_i^0 P_i^0.$$

上面提到的修改主要是将此式中的 $E_a^0P_a^0$ 和 $E_b^0P_b^0$ 改成 $E_a^0(P_a^0+P_b^0)$，其中 E_a^0 是介于 E_a^0 和 E_b^0 之间的一数值．于是我们得到了一个新的未微扰的哈密顿量，它的本征值 E_a^0 有 g_a+g_b 重简并．所以微扰

$$V+(E_a^0-E_a^0)P_a^0+(E_b^0-E_a^0)P_b^0$$

对 E_a^0 的修正可以计算出来．

在处理帕邢-巴克效应时所应用的方法（§12），本质上是这里所叙述的方法，这时磁场 $\mathscr{H}$ 相对很强，因而给定的 LS 项的能级移位，不再小于它们之间的间距．因此我们取 H_C+V_1 为未受微扰的哈密顿量，而不是取 $H_C+V_1+V_2$．这相当于用单个能级 $E_{\alpha LS}$，代替一组相邻的能级 $E_{\alpha LSJ}(J=|L-S|\cdots\cdots|L+S|)$．因此，对于微扰 V_2+W 对 $E_{\alpha LS}$ 引起的修正，我们可照常进行微扰计算．在纯粹的帕邢-巴克效应中，磁场 $\mathscr{H}$ 很强，以致作为第一步近似，在计算中可以忽略 $V_2(V_2\ll W)$．在 §12 中就是这样做的．当 V_2 与 W 的数量级相同时，这种近似不再合适，而微扰计算就更为复杂了（问题 16.7 和 16.8）．

III. 各级微扰展开的明显表达式[1]

15. 哈密顿量 H 及其预解式 $G(z)$[2]

本节中我们扼要地提出一种明显地表示各级微扰展开式的方法．加滕[3] 提出的这个方法，是将哈密顿量 H 的预解式

1）本节在初次阅读时可略去．

2）有些作者采用名词“格林函数”，而不用“预解式”．

3）T. Kato, *Prog. Theor. Phys.* **4**, 154 (1949)．加藤主要是对微扰方法的收敛条件有兴趣，而他的方法对本问题的讨论特别有用．在大多数遇到的问题中，微扰展开式是渐近展开式，在本节中，我们先不管加藤文章中的这些数学特性．

$G(z)$ 展成微扰的幂级数. 本节我们定义 $G(z)$ 并叙述其特性.

按定义，如果 H 是一个可观察量，它的**预解式**是复变量 z 的函数[1]:

$$G(z) \equiv \frac{1}{z - H}. \tag{16.52}$$

图16.2给出了复变数 z 的平面，H 的谱标明在其实轴上，一般说来，H 谱有分立部分和连续部分，连续谱在分立谱的右边，并延伸到无限远处. $G(z)$ 是一个它的奇点组成 H 的谱的解析函数.

为简单起见，我们假定 H 的谱全部是分立的，用 E_0, E_1, $\cdots E_i \cdots$ 代表本征值. 向 E_i 的子空间的投影算子记作 P_i:

$$HP_i = E_iP_i. \tag{16.53}$$

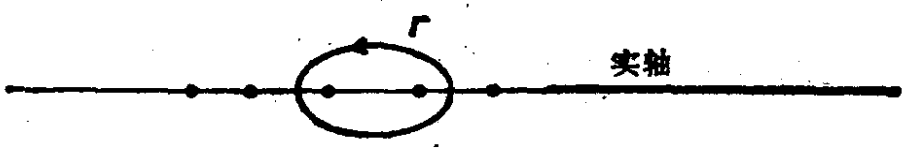


图 16.2 z 复平面和围道 Γ 的定义，H 的谱标在实轴上的加粗印刷的位置处.

---

1) 按照定义，如果存在一常数 M，使得对于任意的 $|u\rangle$ 都有

$$\frac{\langle u|Q^\dagger Q|u\rangle}{\langle u|u\rangle} \leqslant M,$$

则这希尔伯特空间中的算符 Q 是有界的，按定义，M 的最低值是这算符 Q 的上界或模方，并记作 $\|Q\|$. 在极其严格的意义上，代数和解析的各种运算，特别是级数的收敛性概念. 微分概念等等都可以扩展到不限于希尔伯特空间的有界算符的情形(参看 M H. Stone, *Linear transformations in Hilbert space* (Amer. Math.Soc., New York, 1932))

从数学的观点来看，$G(z)$ 的最大意义在于它在整个复平面内(除去 H 的本征值所在处)，都是有界的. 它是 z 的一个解析函数，它的那些奇点组成 H 的谱. 若 $\Delta(z)$ 是 z 到最邻近的一个 H 本征值的距离之平方，则有 $\|G(z)\| = 1/\Delta(z)$.

因此正交和封闭关系为

$$P_iP_j = \delta_{ij}P_i \tag{16.54}$$

$$\Sigma_i P_i = 1. \tag{16.55}$$

由定义 (16.52)，得到

$$G(z)P_i = \frac{P_i}{z - E_i},$$

因而

$$G(z) = \sum_i \frac{P_i}{z - E_i}. \tag{16.56}$$

H的每一个分立本征值是 $G(z)$ 的一个单极点. 其残数是投影算子 P_i，即

$$P_i = \frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma_i} G(z)dz. \tag{16.57}$$

其中 Γ_i 是复平面中、包括 E_i 但不包括 $G(z)$ 的其他奇点的封闭围道. 更普遍地讲，如果 Γ 是复平面上不经过 H 的任何本征值的封闭围道，而且 P_Γ 是与此围道内的各个本征值相联系的投影算子 P_i 的总和，则得到

$$P_\Gamma = \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma G(z)dz. \tag{16.58}$$

将 (16.58) 乘以 H，并注意到等式

$$(z - H)G \equiv G(z - H) \equiv 1,$$

我们得到重要公式

$$HP_\Gamma = \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma zG(z)dz. \tag{16.59}$$

16. 把$G(z)$、P、HP 展成 V 的幂级数

我们现在考虑微扰问题本身. H和 H_0 的预解式分别是

$$G \equiv \frac{1}{z - H_0 - \lambda V} \quad G_0 \equiv \frac{1}{z - H_0}. \tag{16.60}$$

注意到

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{z - H_0 - \lambda V} \\
&\quad = \frac{1}{z - H_0}[(z - H_0 - \lambda V) + \lambda V]\frac{1}{z - H_0 - \lambda V} \\
&\quad = \frac{1}{z - H_0} + \frac{1}{z - H_0}\lambda V \frac{1}{z - H_0 - \lambda V}.
\end{aligned}$$

所以 G 是积分方程

$$G = G_0(1 + \lambda V G) \tag{16.61}$$

的解.

将此方程反复迭代，得出 G 的微扰幂级数展开式[1)]

$$G = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n G_0 (V G_0)^n. \tag{16.62}$$

采用 §8 中的符号，现在来求 P 的微扰幂级数展开式，对于足够小的 λ，在 z 平面内一定存在一个围道，它同时包含了未微扰本征值 E_a^0 和 H 的本征值(当 $\lambda \to 0$ 时，H 的这些本征值趋于 E_a^0)，而不包括 H 和 H_0 的其他所有的本征值. 把这种围道记作 Γ_a，由 (16.58) 得到

$$P = \frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma_a} G(z)\mathrm{d}z.$$

将 G 用 (16.62) 式代入，并交换求和与积分的次序，我们得到了 P 的按 λ 展开的幂级数：

---

1) 这个展开式的收敛半径为 $\|\lambda V G_0\|$. 如果 $\|\lambda V\| < \Delta_0(z)$，则它绝对收敛. 其中 $\Delta_0(z)$ 是由 z 到最邻近的 H_0 本征值之间的距离的平方.

$$P = P_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n A^{(n)}, \tag{16.63}$$

其中

$$A^{(n)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_a} G_0 (V G_0)^n \mathrm{d}z. \tag{16.64}$$

函数 $G_0(VG_0)^n$ 在围道 Γ_a 内仅有的奇点是在 E_a^0 处的 $n+1$ 阶极点. 由(16.64)式看出，$A^{(n)}$ 正好是该极点的残数.

为了计算此残数，我们利用 G_0 在 E_a^0 处的洛朗 (Lanrent) 级数展开式，利用 (16.56) 很容易计算出展开系数，得到

$$G_0 = \frac{P_0}{z - E_a^0} + \sum_{k=1}^{\infty} (-)^{k-1} (z - E_a^0)^{k-1} \frac{Q_0}{a^k}.$$

仿照加藤的作法，我们引入 $S^k (k \geqslant 0)$，其定义是

$$S^k = \begin{cases} -P_0 & k = 0 \\ \dfrac{Q_0}{a^k} & k \geqslant 1, \end{cases} \tag{16.65}$$

于是上面的展开式变成:

$$G_0 = \sum_{k=0}^{\infty} (-)^{k-1} (z - E_a^0)^{k-1} S^k. \tag{16.66}$$

$A^{(n)}$ 是 $G_0(VG_0)^n$ 的洛朗展开式中 $(z - E_a^0)^{-1}$ 的系数，考虑到 (16.66)，很容易得出:

$$A^{(n)} = -\Sigma_{(n)} S^{k_1} V S^{k_2} V \cdots V S^{k_{n+1}}, \tag{16.67}$$

这里 $\Sigma_{(n)}$ 遍及所有满足条件

$$k_1 + k_2 + \cdots + k_{n+1} = p. \tag{16.68}$$

的非负整数集合

$$k_1, k_2, \cdots, k_{n+1}.$$

我们给出 P 的展开式中的头几项作为实例:

$$P = P_0 + \lambda\left(P_0V\frac{Q_0}{a} + \frac{Q_0}{a}VP_0\right)$$
$$+ \lambda^2\left(P_0V\frac{Q_0}{a}V\frac{Q_0}{a} + \frac{Q_0}{a}VP_0V\frac{Q_0}{a}\right.$$
$$+ \frac{Q_0}{a}V\frac{Q_0}{a}VP_0 - P_0VP_0V\frac{Q_0}{a^2} - P_0V\frac{Q_0}{a^2}VP_0$$
$$\left. - \frac{Q_0}{a^2}VP_0VP_0\right) + \cdots \tag{16.69}$$

从（16.59）式出发，用同样的方法可以得到 HP 的展开式，我们有

$$(H - E_a^0)P = \sum_{n=1}^{\infty}\lambda^n B^{(n)}, \tag{16.70}$$

其中

$$B^{(n)} = \Sigma_{(n-1)}S^{k_1}VS^{k_2}V\cdots VS^{k_{n+1}}. \tag{16.71}$$

于是

$$(H - E_a^0)P = \lambda P_0VP_0 + \lambda^2\left(P_0VP_0V\frac{Q_0}{a} + P_0V\frac{Q_0}{a}VP_0\right.$$
$$\left. + \frac{Q_0}{a}VP_0VP_0\right) + \cdots \tag{16.72}$$

17. 本征值和本征态的计算

待求的 H 的本征值和本征矢量是 $\mathscr{E}$ 空间的算符 HP 的本征值和本征矢量，其中 P 是这空间的投影算子. 因为我们知道如何构成 P 和 HP，可以把问题约化为在 g_a 维空间中对角化一个矩阵的问题.

非简并情形. $g_a = 1$

在此情形下，H 的本征函数是 $P|0\rangle$，它的模方（即

$\langle 0|P|0\rangle$) 的展开式，很容易由算子 P 的展开式得出. $P|0\rangle$ 是本章第 I 段中作出的本征矢量 $|\psi\rangle$ 乘一个倍数，很容易看出，后者的模是 $1/\langle 0|P|0\rangle$.

本征能量 E_a 由方程 $HP = E_aP$ 给出. 因为 $\mathrm{Tr}P = \mathrm{Tr}P_0 = 1$，我们有 [(16.70) 式]

$$E_a = \mathrm{Tr}HP = E_a^0 + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n(\mathrm{Tr}B^{(n)}),$$

也就是

$$\varepsilon_n = \mathrm{Tr}B^{(n)}. \tag{16.73}$$

因为 $B^{(n)}$ 的每一项至少含 P_0 一次，并且由于熟知的迹的性质，所以有等式:

$$\mathrm{Tr}MP_0N = \mathrm{Tr}P_0NM = \langle 0|NM|0\rangle,$$

这样就容易将 ε_n 表示成一个确定的算符在未微扰态$|0\rangle$中的平均值. E_a 的展开式的头几项是:

$$\begin{aligned} E_a = {} & E_a^0 + \lambda\langle 0|V|0\rangle + \lambda^2\langle 0|V\frac{Q_0}{a}V|0\rangle \\ & + \lambda^3\left(\langle 0|V\frac{Q_0}{a}V\frac{Q_0}{a}V|0\rangle\right. \\ & \left. - \langle 0|V\frac{Q_0}{a^2}V|0\rangle\langle 0|V|0\rangle\right) + \cdots \end{aligned} \tag{16.74}$$

这些都和第 I 段的结果 ((16.12) 式和(16.26)式)一致.

简并情形: $g_a \neq 1$

此时与其在 $\mathscr{E}_a$ 中直接求解 HP 的本征值问题，不如换成在 $\mathscr{E}_a^0$ 中解一个类似的对角化问题。

我们假设，$\mathscr{E}_a$ 中的任何矢量都可看作是 $\mathscr{E}_a^0$ 的某个已知矢量在 $\mathscr{E}_a$ 中的投影 (在非简并情形，这个假设无疑是成立的). 因为 $\mathscr{E}_a$ 和 $\mathscr{E}_a^0$ 有相同的维数，因此投影算子 P 在 $\mathscr{E}_a$ 和

$\mathscr{E}_a^0$ 的矢量之间建立了一对一的关系。并且可以推知 P_0 也建立了这样的对应关系。当 λ 足够小时，两个子空间的这种非"正交"性质显然是存在的。

因此，$\mathscr{E}_a$ 中 H 的任一本征矢量能够表示成 $P|E_a^0\alpha\rangle$ 的形式，而且满足方程

$$HP|E_a^0\alpha\rangle = E_aP|E_a^0\alpha\rangle.$$

$\mathscr{E}_a$ 中满足此等式的矢量之间的一个充分和必要条件是：它们在 $\mathscr{E}_a^0$ 中的投影相等，

$$P_0HP|E_a^0\alpha\rangle = E_aP_0P|E_a^0\alpha\rangle.$$

如果令

$$H_a = P_0HPP_0, \quad K_a = P_0PP_0. \tag{16.75}$$

上式变成

$$H_a|E_a^0\alpha\rangle = E_aK_a|E_a^0\alpha\rangle. \tag{16.76}$$

可以认为 K_a 和 H_a 是 $\mathscr{E}_a^0$ 空间中的算符，K_a 是一正定的厄密算符，H_a 是此空间的厄密算符。方程式 (16.76) 是一个普遍化的本征值方程。本征值 E_a 是久期方程 (参阅 §7.17)

$$\det(H_a - xK_a) = 0$$

的解。它们就是要求的本征能量。相应的本征矢量 $|E_a^0\alpha\rangle$ 在 $\mathscr{E}_a$ 中的投影，就是 H 的本征矢量。

分别从 HP 和 P 的展开式出发，很容易推得 H_a 和 K_a 的展开式 [(16.69) 和 (16.72) 式]

$$K_a = P_0 - \lambda^2P_0V\frac{Q_0}{a^2}VP_0 + \cdots \tag{16.77}$$

$$H_a = E_a^0K_a + \lambda P_0VP_0 + \lambda^2P_0V\frac{Q_0}{a}VP_0 + \cdots \tag{16.78}$$

将 H_a 和 K_a 的展开式取到给定的级次，就得到该级次下的近似本征值 E_a，因此所得结果与最初的理论的结果在较高级次的数量上有所不同。

对于第一级近似，两种方法的结果准确地相同．在作比较时，必需仔细区别 $|E_\alpha^0\alpha\rangle$ 和初级的理论中的$|0\rangle$．$|0\rangle$是当 $\lambda \to 0$ 时，$|E_\alpha^0\alpha\rangle$ 的极限．

布洛赫[1]给出一个和加藤的方法很类似的，但可以导出更简单的展开式的方法，它基于以下事实：由

$$PP_0 \equiv \mathscr{U}K_\alpha, \quad \mathscr{U}P_0 \equiv \mathscr{U} \tag{16.79}$$

定义的算符 $\mathscr{U}$ 具有特别简单的展开式：

$$\mathscr{U} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \mathscr{U}^{(n)} \tag{16.80}$$

$$\mathscr{U}^{(n)} = \sum_{(n)}{}' S^{k_1} V S^{k_2} V \cdots V S^{k_n} V P_0 \tag{16.81}$$

$\Sigma'_{(n)}$ 遍及所有满足下列条件

$$k_1 + k_2 + \cdots + k_p \geqslant p \quad (p = 1, 2, \cdots, n-1)$$

$$k_1 + k_2 + \cdots + k_n = n \tag{16.82}$$

的非负整数集合 $k_1, k_2, \cdots, k_n$，很明显 $P_0\mathscr{U} = P_0$，而且 $P\mathscr{U} = \mathscr{U}$，$\mathscr{U}$ 作用在 $\mathscr{S}_\alpha^0$ 的矢量上就得出 $\mathscr{S}_\alpha$ 的矢量，后者在 $\mathscr{S}_\alpha^0$ 中的投影就是原来在 $\mathscr{S}_\alpha^0$ 中的那个矢量．

按照 $\mathscr{U}$ 的定义，方程式(16.76)等效于

$$(P_0 H \mathscr{U} - E_\alpha) K_\alpha |E_\alpha^0\alpha\rangle = 0. \tag{16.83}$$

布洛赫方法中的这个方程相当于加藤方法中的方程(16.76)，这是 $\mathscr{S}_\alpha^0$ 中一个**非厄密**算符[2] $P_0 H \mathscr{U} \equiv H_\alpha K_\alpha^{-1}$ 的普遍化的本征方程，其本征值就是所要求的本征能量，对应的本征矢量 $K_\alpha|E_\alpha^0\alpha\rangle$ 是H的本征矢量在 $\mathscr{S}_\alpha^0$ 中的投影．这个本征矢量本身要由算符$\mathscr{U}$的作用而得到．如果还记得

---

1) C. Bloch, *Nuclear Physics* **6**, (1958). 329.

2) K_α 作为 $\mathscr{S}_\alpha^0$ 空间的算符来考虑，它有逆算符，作为整个希尔伯特空间的算符，很明显它没有逆算符．

$$P_0H\mathscr{U} = E_a^0P_0 + \lambda P_0V\mathscr{U}.$$

那么 $P_0H\mathscr{U}$ 的展开式就很容易从 $\mathscr{U}$ 推得，头几项是：

$$P_0H\mathscr{U} = E_a^0P_0 + \lambda P_0VP_0 + \lambda^2P_0V\frac{Q_0}{a}VP_0 + \cdots$$

看来它们比 H_a 和 K_a 的式子简单些[见(16.77)式和(16.78)式]

在非简并情形下，能量就是：

$$E_a = \langle 0|H\mathscr{U}|0\rangle,$$

由此我们直接得出其展开式中逐次的系数：

$$\varepsilon_n = \Sigma'_{(n-1)}\langle 0|VS^{k_1}VS^{k_2}V\cdots VS^{k_n}V|0\rangle.$$

练习与问题

1．在哈密顿量 $(p^2 + m^2\omega^2q^2)/2m$ 中加上相互作用 $V(q)$，应用微扰理论计算下列两种情形的一级和二级能级移位：

(a) $$V = \frac{1}{2}m\alpha^2q^2$$

(b) $$V = bq.$$

在这两种情形下，能级移位都能严格求解．比较微扰论结果和严格结果．

2．考虑薛定谔理论中氢原子（第 11 章）．不变电场 $\mathscr{E}$（相互作用为 $-e\mathscr{E}, r$）能够将每个能级的简并度消除到什么程度？证明 $n = 2$ 时，能级在一级近似中分裂为三个等距离的能级（能级间隔为 $3e\mathscr{E}\hbar^2/me$），并求各能级的简并度．

3．证明在中心场近似中，满壳层电子的总角动量，总轨道角动量，总自旋都为零．由此结果证明对于一给定组态，线性独立矢量（LSM_LM_S）数目，和只计算未满壳层电子所得到的结果相同．

4．碳原子基态组态的光谱项在 jj 耦合时是什么样的？证明在 jj 耦合和 LS 耦合下，都得到相同的总角动量数值和相同的多重性（§11），说明为什么．

5．氮原子（$Z = 7$）的基态组态是 $1s^22s^23p^3$，LS 耦合情形下，不

同的光谱项是哪些?

6. 应用 §13 中的方法来研究 § 9、10、11 中的复杂原子，列出 H_C, V_1, V_2 的对称性;说明相继引入微扰 $V_i(i=1,2)$ 时，将如何消除 H_C 的简并度:

(a) 在 LS 耦合情形. (b) 在 jj 耦合情形.

7.钠原子($Z=11$)的基态组态是 $1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^1$,其第一激发组态是 $1s^22s^22p^63p^1$. 所以钠的基态是 $^1S_{1/2}$,头两个激发态是 $^2P_{1/2}$, $^2P_{3/2}$. 研究一个不变磁场 $\mathscr{H}$ 对这些能级的影响，分别计算朗德因子. $\mathscr{H}$ 的强度逐渐由塞曼区增大到帕邢-巴克区. 给出 $2P$ 能级的公式，它是参数 $\rho=\mu_B\mathscr{H}/A\hbar^2$ 的函数,其中 μ_B 是玻尔磁子，A 是 §11 中引入的自旋-轨道耦合常数 ($A>0$)，画出相应的曲线.

8. 对碳原子的基态 ^3P，讨论与前题相同的问题(能级是久期方程的根，其中一个是三次方程,不解这些久期方程就可得到曲线的主要特征).

9. g_a 重简并的能级,在引入微扰 V 后得到的能级 $E_1,E_2,\cdots,E_n$ 可以用重心 $\langle E\rangle$ 和均方根偏差 ΔE 表征，其中 $\langle E\rangle$ 和 ΔE 的定义分别是(用 §8 中的符号):

$$\langle E\rangle=\frac{1}{g_a}\sum_{i=1}^{n}g_iE_i \qquad (\Delta E)^2=\frac{1}{g_a}\sum_{i=1}^{n}g_i(E_i-\langle E\rangle)^2.$$

证明近似到 V 的一级小量时有

$$\varepsilon\equiv\langle E\rangle-E_a^0\simeq\frac{1}{g_a}\mathrm{Tr}P_0V, \quad (\Delta E)^2\simeq\frac{1}{g_a}\mathrm{Tr}P_0(V-\varepsilon)P_0(V-\varepsilon).$$

对于微扰

$$V=A(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})+\frac{e\hbar}{2mc}\mathscr{H}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}).$$

应用以上公式计算前面两题. 证明在这些情形下 $\varepsilon=0$，给出 $\Delta E=0$ 的公式,并考察它作为问题 17.7 中定义的参数 ρ 的函数的变化规律.

第十七章　与时间有关的薛定谔方程的近似解

1. “表象”的改变和哈密顿量的一部分的微扰处理

本章用两节专门叙述与时间有关的薛定谔方程的近似解法，已知量子体系在 t_0 时刻处于某个力学状态，要求确定系统在此后的某时刻 t 的状态. 因此，问题就在于尽可能精确地确定算符 $U(t,t_0)$，即描述薛定谔“表象”中系统的力学状态随时间的演化的算符.

我们简略地回顾 $U(t,t_0)$ 的主要性质，只要系统的哈密顿量 $H(t)$ 已经给定，这个算符就完全确定了，它由积分方程

$$U(t,t_0)=1-i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t}H(\tau)U(\tau,t_0)d\tau \tag{17.1}$$

来确定，或者，等效地由薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)=H(t)U(t,t_0) \tag{17.2}$$

和初始条件

$$U(t_0,t_0)=1. \tag{17.3}$$

确定，由于$H(t)$是厄密的，故U是么正的

$$U(t,t')U^{\dagger}(t,t')=U^{\dagger}(t,t')U(t,t')=1. \tag{17.4}$$

另外还有合成定律[1]

$$U(t,t')=U(t,t'')U(t'',t'), \tag{17.5}$$

---

1) 此式的物理意义是很明显的，为证明此式，我们注意到若设V是么正的，并与时间无关. 则 $U(t,t'')V$ 是薛定谔方程 (17.2) 的解，为了使得对任何 t 值它都等于 $U(t,t')$，只要它对于特殊 t 值（例如 $t=t''$）等于 $U(t'',t')$ 就足够了. 由此得到 $V=U(t'',t')$

由此得

$$U^{\dagger}(t,t') = U(t',t). \tag{17.6}$$

(17.1) 式取厄密共轭可以得到U的另一个等效的定义. 考虑到(17.6)式，得出:

$$U(t,t_0) = 1 - i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} U(t,\tau)H(\tau)d\tau. \tag{17.7}$$

本章叙述的方法，是以下列的形式的演化为基础的. 设哈密顿量H能够写成下列形式:

$$H(t) = H^{(0)}(t) + V(t), \tag{17.8}$$

其中 $H^{(0)}(t)$ 是薛定谔方程的哈密顿量，它的解已知，设 $U^{(0)}(t,t_0)$ 是对应于 $H^{(0)}(t)$ 的演化算符:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U^{(0)}(t,t_0) = H^{(0)}(t)U^{(0)}(t,t_0)\quad U^{(0)}(t_0,t_0) = 1. \tag{17.9}$$

因为 $U^{(0)}(t,t_0)$ 已知，如果我们能做出么正算符

$$U_I(t,t_0) = U^{(0)\dagger}(t,t_0)U(t,t_0). \tag{17.10}$$

就能确定 U. U_I 的物理意义已在 § 8.14 中给出: 它是中间"表象"的态演化算符，这个表象是薛定谔表象径么正变换 $U^{(0)\dagger}(t,t_0)$ 导出的. 一个简单的计算表明，U_I 随时间的变化规律由哈密顿量

$$V_I(t) = U^{(0)\dagger}(t,t_0)V(t)U^{(0)}(t,t_0). \tag{17.11}$$

决定. (详细推导见 § 8.14). 换句话说，$U_I(t,t_0)$ 是由下式决定的.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_I(t,t_0) = V_I(t)U_I(t,t_0)\quad U_I(t_0,t_0) = 1, \tag{17.12}$$

或者等效地由

$$U_I(t,t_0) = 1 - i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} V_I(\tau)U_I(\tau,t_0)d\tau. \tag{17.13}$$

决定.

$U_I(t, t_0)$ 具有演化算符的全部性质，特别是满足方程(17.1—7)，其中 $H(t)$ 全部换成 $V_I(t)$.

通过反复迭代，至少形式上能得到积分方程 (17.1)，(17.7) 和 (17.13) 的解. 因此，(17.13)式右边的 $U_I(t,t_0)$ 用

$$1 - i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{\tau} V_I(\tau')U_I(\tau', t_0)d\tau'$$

代入就得到

$$U_I(t,t_0) = 1 - i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} V_I(\tau)d\tau + (i\hbar)^{-2}\int_{t_0}^{t} d\tau \times \int_{t_0}^{\tau} d\tau' V_I(\tau)V_I(\tau')U(\tau', t_0). \tag{17.14}$$

相继迭代得到展开式

$$U_I(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} U_I^{(n)}(t,t_0), \tag{17.15}$$

其中 $U_I^{(n)}$ 是如下的积分，

$$U_I^{(n)} = (i\hbar)^{-n}\int_{t>\tau_n>\tau_{n-1}>\cdots>\tau_1>t_0} d\tau_n d\tau_{n-1}\cdots d\tau_1 \times V_I(\tau_n)V_I(\tau_{n-1})\cdots V_I(\tau_1). \tag{17.16}$$

由此结果，并利用定义 (17.10) 和(17.11)，我们得到U的下列展开式：

$$U(t,t_0) = U^{(0)}(t,t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t,t_0) \tag{17.17}$$

$$U^{(n)}(t,t_0) = (i\hbar)^{-n}\int_{t>\tau_n>\tau_{n-1}>\cdots>\tau_1>t_0} d\tau_n d\tau_{n-1}\cdots d\tau_1 \times U^{(0)}(t,\tau_n)V(\tau_n)U^{(0)}(\tau_n,\tau_{n-1}) \times V(\tau_{n-1})\cdot\cdots\cdot U^{(0)}(\tau_2,\tau_1)V(\tau_1) \times U^{(0)}(\tau_1,t_0). \tag{17.18}$$

展开式(17.15)和(17.17)是V的幂级数，$U^{(0)}(t,t_0)$越接近$U(t,t_0)$. 则此级数收敛得越快，它们是本章所述方法的基础. $U^{(0)}$表示零级近似；$U^{(1)}, U^{(2)}, \cdots U^{(n)}, \cdots$分别表示对它的1，2，$\cdots n$，$\cdots$级修正. 实际上，随着级次的增高，这些修正的计算变得越来越复杂. 通常只取最低的几级修正.

I. 与时间有关的微扰理论

2. 跃迁几率的定义和微扰计算

以上的方法特别适用于$H^{(0)}$**与时间无关**的情形. 在此情形下，演化算符变得很简单：

$$U^{(0)}(t,t') = \exp[-iH^{(0)}(t-t')/\hbar]. \qquad (17.19)$$

假设$H^{(0)}$的本征值问题已解决. 除非另有说明，为书写简单，假定能谱全部是分立的. 令$|a\rangle, |b\rangle, \cdots, |k\rangle, \cdots$是$H^{(0)}$的本征矢量的完全集合；$E_a^0, E_b^0, \cdots, E_k^0, \cdots$是相应的本征值. 我们将应用下列符号：

$$\omega_{kl} = (E_k^0 - E_l^0)/\hbar \qquad (17.20)$$

$$V_{kl}(t) = \langle k|V(t)|l\rangle. \qquad (17.21)$$

ω_{kl}是对应于$l \to k$态跃迁的"玻尔频率"，$V_{kl}(t)$是$V(t)$的相应的矩阵元.

我们假设在起始时刻t_0系统是处在$H^{(0)}$的一个本征态中，例如a态. 我们要计算在下一时刻t，对系统进行测量时发现它处于$H^{(0)}$的不同状态（例如处于b态）的几率. 按定义，这个量是从$a \to b$的**跃迁几率**；记作$W_{a\to b}$. 很明显，

$$W_{a\to b} = |\langle b|U(t,t_0)|a\rangle|^2. \qquad (17.22)$$

如果V为零，则表述系统在t时刻的状态的矢量，与表述系统始态的矢量$|a\rangle$只差一个因子$\exp[-iE_a^0(t-t_0)/\hbar]$，并且$W_{a\to b}$为零，$U(t,t_0)$用展开式(17.17)代替，得到几率振

幅$\langle b|U(t,t_0)|a\rangle$ 展成V的幂级数的式子:

$$\langle b|U(t,t_0)|a\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\langle b|U^{(n)}|a\rangle. \qquad (17.23)$$

$U^{(n)}$ 已由(17.18)给出.

在以上定义的 $\{H^{(0)}\}$ 表象中,各级对振幅的贡献为

$$\langle b|U^{(1)}|a\rangle = -i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t}d\tau[e^{-iE_b^0(t-\tau)/\hbar} \times V_{ba}(\tau)e^{-iE_a^0(\tau-t_0)/\hbar}] \qquad (17.24^1)$$

$$\langle b|U^{(2)}|a\rangle = (i\hbar)^{-2}\sum_k\int_{t_0}^{t}d\tau\int_{t_0}^{\tau}d\tau'[e^{-iE_b^0(t-\tau)/\hbar} \times V_{bk}(\tau)e^{-iE_k^0(\tau-\tau')/\hbar}V_{ka}(\tau')e^{-iE_a^0(\tau'-t_0)/\hbar}] \qquad (17.24^2)$$

$$\langle b|U^{(3)}|a\rangle = (i\hbar)^{-3}\sum_k\sum_l\int_{t_0}^{t}d\tau\int_{t_0}^{\tau}d\tau' \times\int_{t_0}^{\tau'}d\tau''[e^{-iE_b^0(t-\tau)/\hbar}V_{bk}(\tau) \times e^{-iE_k^0(\tau-\tau')/\hbar}V_{kl}(\tau')e^{-iE_l^0(\tau'-\tau'')/\hbar} \times V_{la}(\tau'')e^{-iE_a^0(\tau''-t_0)/\hbar}]. \qquad (17.24^3)$$

在所有这些式子中,求和遍及 $\{H^{(0)}\}$ 的全部基矢.

相继的各级贡献可形象地用图 17.1 来表示.

图 (i) 表示第一级贡献,或更确切地说是表示(17.24^1)式右边括号中的乘积,实线代表系统在时间过程中的演化,从 t_0 到 τ,演化由未微扰的哈密顿量 $H^{(0)}$ 确定,因此系统仍处在状态 a 中,它的态矢量只是简单地乘以因子

$$\exp[-iE_a^0(\tau-t_0)/\hbar].$$

在 τ 时刻,系统在微扰的影响下从状态 a 过渡到状态 b,给出

跃迁矩阵元 $V_{ba}(\tau)$. 从 τ 到 t，系统仍按 $H^{(0)}$ 而演化，因此系统就停留在状态 b 中，给出因子 $\exp[-iE_b(t-\tau)/\hbar]$. 于是，按照从下到上的图解，可以得到括号中从右到左的三个因子. 将此乘积对 τ 积分就得到第一级贡献.

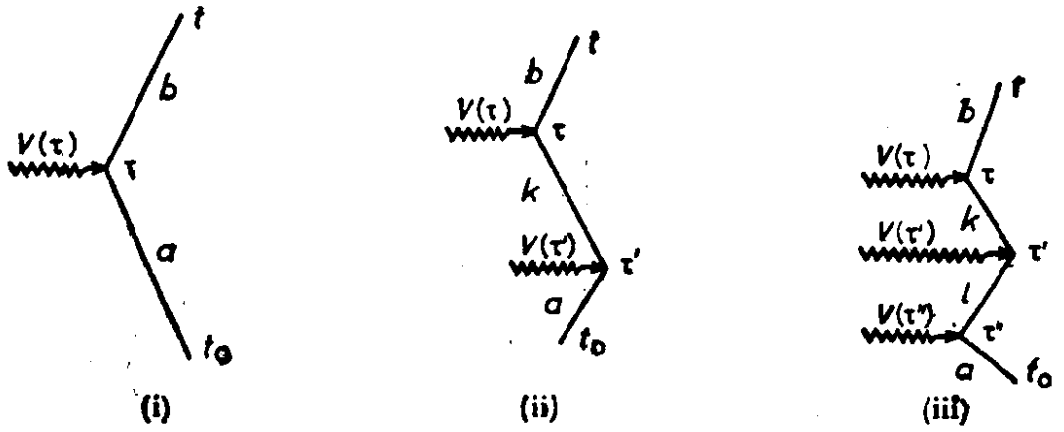


图 17.1　代表相继的几级对 a 态到 b 态的跃迁几率振幅的贡献的图形.
(i) 一级　(ii) 二级　(iii) 三级

与此相似，图 (ii) 表示二级修正. 由 t' 到 τ' 系统按 $\hat{H}^{(0)}$ 而演化，接着在 $V(\tau')$ 的影响下，由始态 a 过渡到中间态 k，然后从 τ' 到 τ 又按 $H^{(0)}$ 变化，接着在 $V(\tau)$ 的影响下从 k 态过渡到末态 b，最后从 τ 到 t 仍按 $H^{(0)}$ 变化. 于是我们得到了等式 (17.24²) 右边括号中依次从右到左的五个因子，对 τ' 和 τ 积分 $(\tau' < \tau < t)$ 并对所有的中间态求和，就得出二级贡献. 鉴于表示二级跃迁随时间变化的这种形式，与实态 a 和 b 相反，人们通常称 k 态为**虚态**，并说二级跃迁是由一个虚态而实现的.

按同样的方式，图 (iii) 表示的三级跃迁经过二个虚态 k 和 l 才完成. 微扰总共三次起作用，依次在时刻 τ''，τ' 和 τ，使系统从 a 到 l，再由 l 到 k，最后由 k 到 b. 类似地. n 级跃迁经过 $(n-1)$ 个虚态才完成.

取展开式(17.23)的前 n 项所得到的量，就是要求的准确到 n 级的几率振幅. 按定义，它的模的平方就是 n 级跃迁几率[1]. 即

$$W_{a\to b} \simeq |\langle b|U^{(1)}|a\rangle + \langle b|U^{(2)}|a\rangle + \cdots + \langle b|U^{(n)}|a\rangle|^2.$$

特别是，**一级跃迁几率**为

$$W_{a\to b} \simeq |\langle b|U^{(1)}|a\rangle|^2 = \hbar^{-2}\left|\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ba}\tau} V_{ba}(\tau)d\tau\right|^2. \tag{17.25}$$

注意，在此近似下，

$$W_{b\to a} \simeq W_{a\to b}.$$

一般说来，这个关系在高级近似下不再成立. 请不要与微观可逆性的特征混淆了，它仅在哈密顿量对时间反演是不变时才满足 $W_{Kb\to Ka} = W_{a\to b}$ 在这种情形下，此式对各级近似都严格成立(见 §15.20).

3. 核库仑激发的半经典理论

我们讨论核被带电粒子(例如质子[2])库仑激发，作为理论应用的例子.

假设一束单能的质子与靶核碰撞，在碰撞的过程中核从基态跃迁到激发态，我们要计算跃迁到一给定激发态 β 的截面.

核的电荷记作 Ze，R 为其半径. J_α 和 J_β，E_α 和 E_β 分别是 α 态和 β 态的自旋和能量. 有 $2J_\alpha + 1$ 个线性独立的 α

---

1) 所得的表示式，至少一直到 $n+1$ 级都正确地代表 $W_{a\to b}$ 展成 V 的幂级数形式. 如果 $\langle b|U^{(1)}|a\rangle = 0$. 得到的精确度高于 $n+1$ 级.

2) 关于库仑激发及其在核结构研究中的应用见 Alder 等人，*Rev. Mod. Phys.* **22**(1963)432. 这里给出的半经典处理见 K. A. Ter-Martyrosian, *J. Exptl. Theoret. Phys. URSS* **28** (1952) 284.

态，它们之间可用沿某一给定量子化方向的自旋分量 M_α 来区别. 这些态用矢量 $|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle$ 表示. 设 H_N 是核的哈密顿量，那么

$$H_N|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle \quad (M_\alpha = -J_\alpha,\cdots,J_\alpha),$$

同样地有：

$$H_N|\beta J_\beta M_\beta\rangle = E_\beta|\beta J_\beta M_\beta\rangle \quad (M_\beta = -J_\beta,\cdots,J_\beta).$$

用 $E = \frac{1}{2}Mv^2$ 代表在核-质子的质心系中的入射能量；$\Delta E = E_\beta - E_\alpha$ 为核的激发能；Ω_α 为入射质子的方向；Ω_β 为非弹性散射质子的方向；θ 为此二方向间的夹角. 要计算的量是质子非弹性地散射到 Ω_β 方向，而核从$(\alpha J_\alpha M_\alpha)$态变到$(\beta J M_\beta)$态的过程的截面：

$$d\sigma(\Omega_\alpha M_\alpha \to \Omega_\beta M_\beta)/d\Omega.$$

现在来分析质子-核间的相互作用，当入射质子到核的质心的距离 r 很大时 $(r \gg R)$，相互作用减为单纯的库仑作用 Ze^2/r；r 变得越小，相互作用就越来越偏离这种简单形式，只要 $r > R$，这种偏离纯粹来源于电磁作用，基本上归结为严格的库仑作用与 Ze^2/r 项之差. 也就是

$$V = e^2\sum_{i=1}^{Z}\left(\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i|} - \frac{1}{r}\right) \qquad (17.26)$$

($\boldsymbol{r}_i$ 是核中第 i 个质子的位矢).

一旦质子“穿进”核中 $(r < R)$，核相互作用本身开始起作用，而且大大超过了电磁相互作用.

如果能量 E 够低，库仑斥力 $\frac{Ze^2}{r}$ 阻止质子接近核，因而它在整个碰撞过程中总起主要作用，于是在第一步近似下，质子-核的运动由哈密顿量

$$H^{(0)} = H_N + \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} + \frac{Ze^2}{r}\right),$$

决定，其中 $p^2/2M$ 是质子的动能. 质子的运动与核的运动是完全分离的. 当质子经历一个弹性散射过程而后者仍停留在基态时，微分截面由卢瑟福公式 (6.29) 给出:

$$d\sigma_R/d\Omega = \frac{1}{4}a^2\sin^{-4}\frac{1}{2}\theta,$$

其中 a 是经典运动中最接近距离的一半:

$$a = \frac{1}{2}\frac{Ze^2}{E}. \tag{17.27}$$

以上的近似只要

$$a \gg R. \tag{17.28}$$

都成立，另外我们再设

$$\frac{\Delta E}{E} \ll 1 \tag{17.29}$$

$$\gamma \gg 1, \tag{17.30}$$

其中

$$\gamma = \frac{a}{\lambda\!\!\!^{-}} = \frac{Ze^2}{\hbar v}. \tag{17.31}$$

由于质子-核相互作用与 $\frac{Ze^2}{r}$ 的偏离，非弹性碰撞可能发生. 根据条件 (17.28)，质子"穿入"核内很少，这些偏离基本上归结为 V 项. 由于条件 (17.30)，库仑散射可以经典地处理 (§6.5)，质子的运动是一个大小可以忽略的波包的运动，它的中心 $\boldsymbol{r}(t)$ 服从相应的经典运动方程，在一给定的非弹性碰撞 ($\Omega_\alpha M_\alpha \to \Omega_\beta M_\beta$) 中，我们也可把质子的运动作经典处理. 如果忽略 V，经典运动方程的解是已知的，这意味着在碰撞中质子传递给核的能量 ΔE 也可忽略不计. 如果条件 (17.29) 能

满足，则这个近似是合理的，于是质子的轨迹 $r(t)$ 也就确定了. V 是作用在核的力学变量上的、与时间有关的微扰:

$$V(t)=e^2\sum_{i=1}^{Z}\left[\frac{1}{|r(t)-r_i|}-\frac{1}{r(t)}\right],$$

而且能引起 $(\alpha J_\alpha M_\alpha)\to(\beta J_\beta M_\beta)$ 跃迁，跃迁几率 $W_{\alpha\to\beta}$ 很小(以后可以证实: $W_{\alpha\to\beta}\ll 1$). 我们只取一级近似，从(17.25)得到

$$W_{\alpha\to\beta}=\hbar^{-2}\left|\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(\Delta E)t/\hbar}\langle\beta J_\beta M_\beta|V(t)|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle dt\right|^2. \tag{17.32}$$

所要求的截面是此几率与卢瑟福截面的乘积:

$$d\sigma(\Omega_\alpha M_\alpha\to\Omega_\beta M_\beta)=\left(\frac{1}{4}a^2\sin^{-4}\frac{1}{2}\theta\right)W_{\alpha\to\beta}d\Omega. \tag{17.33}$$

还需计算 $W_{\alpha\to\beta}$，我们只给出这个计算的大概，而省略那些细节. r_i 和 $r(t)$ 的极坐标分别用 (r_i,Ω_i)、(r,Ω) 表示. 后者是时间 t 的函数. 如果把 $|r(t)-r_i|^{-1}$ 展成球谐函数[见公式 $(B.99)$]，则得到

$$V(t)=\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}(-)^m Q_l^m T_l^{-m}, \tag{17.34}$$

其中

$$Q_l^m=\sum_{i=1}^{Z}e r_i^l Y_l^m(\Omega_i) \tag{17.35}$$

$$T_l^m(t)=\frac{4\pi e}{2l+1}\frac{Y_l^m(\Omega)}{r^{l+1}}. \tag{17.36}$$

这个展开式只在 $r_i<r$ 时有效. 由于质子没有"穿入"核内，上述条件总是可满足的. 把这些式子代入(17.32)，得到

$$W_{\alpha\to\beta}=\left|\sum_{lm}(-)^m S_l^{-m}\langle\beta J_\beta M_\beta|Q_l^m|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle\right|^2 \qquad (17.37)$$

$$S_l^m=\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\Delta E)t/\hbar}T_l^m(t)\mathrm{d}t/\hbar. \qquad (17.38)$$

系数 S_l^m 只取决于质子的经典轨迹. 并能由数字积分得出.

$(2l+1)$ 个算符 $Q_l^m(m=-l,\cdots,+l)$ 是**电 2^l 极矩** $\boldsymbol{Q}^{(l)}$ 的标准分量(见 § 13.33). 因此,在公式(17.37)中只有那些满足角动量和宇称选择定则的非零矩阵元出现:

$$|J_\alpha-J_\beta|\leqslant l\leqslant J_\alpha+J_\beta \quad m=M_\beta-M_\alpha$$

$$\Pi_\alpha\Pi_\beta=(-)^l \qquad (17.39)$$

(Π_α, Π_β 分别是 α 态和 β 态的宇称). 根据维格纳-爱卡脱定理,又得

$$\langle\beta J_\beta M_\beta|Q_l^m|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle$$
$$=(2J_\beta+1)^{-\frac{1}{2}}\langle J_\alpha l M_\alpha m|J_\beta M_\beta\rangle\langle\beta\|\boldsymbol{Q}^{(l)}\|\alpha\rangle.$$

由于选择定则(17.39),在(17.37)中的求和只限于对宇称已定的有限个 l 值和单个 m 值. 粗略的计算表明,在所有情形下,"$l+2$"的贡献都大致等于"l"的贡献的 $\left(\frac{R}{a}\right)^2$ 倍. 因此我们只保留选择定则允许的最小 l 值所对应的项就可以了. 我们称这个值为 l_0,它或者是 $|J_\alpha-J_\beta|$,或者是 $|J_\alpha-J_\beta|+1$,我们有

$$W_{\alpha\to\beta}\simeq\frac{\langle J_\alpha l_0 M_\alpha m|J_\beta M_\beta\rangle^2}{(2J_\beta+1)}|S_{l_0}^{-m}|^2|\langle\beta\|\boldsymbol{Q}^{(l_0)}\|\alpha\rangle|^2$$

$$(m=M_\beta-M_\alpha).$$

将此式代入(17.33),我们得了一个可与实验比较的理论截面公式:

在一个靶核不是定向排列的实验中,而又未观察到受激

核的极化时，测得的截面是上面求得的截面对 M_α 的 $2J_\alpha+1$ 个可能值求平均. 并对 $2J_\beta+1$ 个可能的 M_β 值求和的结果，考虑到克莱伯希-戈登 (Clebsch-Gordon) 系数的正交关系. 它给出:

$$\frac{d\sigma_{\alpha\to\beta}}{d\Omega}=\frac{a^2}{4(2J_\alpha+1)(2l_0+1)}|\langle\beta\|Q^{(l_0)}\|\alpha\rangle|^2 \times\left[\sin^{-4}\frac{1}{2}\theta\sum_m|S^m_{l_0}|^2\right].$$

这个截面对角度的依赖关系由式中括号内的式子给出，而且必须作数字计算，注意，核的始态和末态仅仅通过其自旋，宇称和电 2^{l_0} 跃迁极矩 $\langle\beta\|Q^{l_0}\|\alpha\rangle$ 的模的平方出现在此式中，而且式中最后那个量只是一个简单的比例常数. 因此这个公式和实验对比是确定核结构的这些特征量的一个很直接的方法.

4. V 与时间无关的情形 未微扰能量的守恒

当 V 不明显地依赖时间时，公式(17.24)中对时间的积分很容易积出，而且有某些简单的性质，我们只限于讨论**一级跃迁**.

取 $t_0=0$. 于是从公式(17.25)得:

$$W_{a\to b}\simeq|V_{ba}|^2f(t,\omega_{ba})/\hbar^2, \tag{17.40}$$

其中

$$f(t,\omega)=\left|\int_0^t e^{i\omega\tau}d\tau\right|^2=2(1-\cos\omega t)/\omega^2. \tag{17.41}$$

$f(\tau,\omega)$ 是如图 7.2 所示的 ω 的函数. 注意，在 $\omega=0$ 附近有很窄的尖峰，它的宽度是 $2\pi/t$. 还应注意到，利用残数方法很容易证明:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}f(t,\omega)d\omega=2\pi t, \tag{17.42}$$

而且从（A-15b）得到

$$f(t,\omega)\underset{t\to\infty}{\sim}2\pi t\delta(\omega). \tag{17.43}$$

对于给定的 t 值，$W_{a\to b}$ 按简单的方式依赖于终态 b，除了包含一常数外，它等于微扰矩阵元 $\langle b|V|a\rangle$ 的模方乘以因子 $f(t,\omega_{ba})$，这个因子依赖于 $a\to b$ 跃迁的玻尔频率．因为这个权重因子在 $\omega_{ba}=0$ 点具有宽度为 $2\pi/t$ 的明显的尖峰，跃迁将集中发生在末态能量接近始态能量的宽度为

$$\delta E_0\simeq 2\pi\hbar/t$$

的能带内，换句话说，**跃迁过程中未微扰能量在 $2\pi\hbar/t$ 范围内是守恒的．**

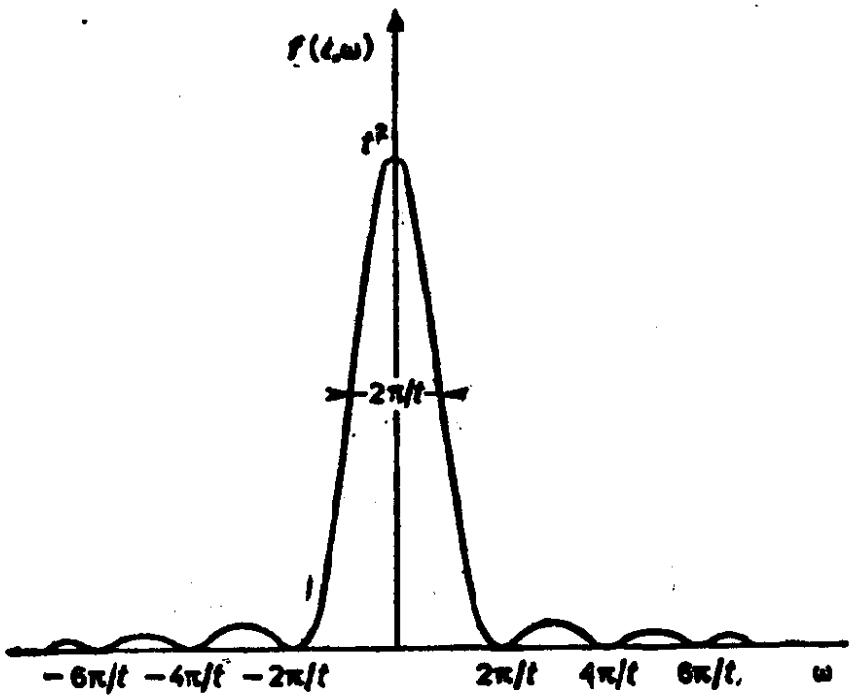


图 17.2　函数 $f(t,\omega)=2(1-\cos\omega t)/\omega^2$

这个结果有点像时间-能量不确定关系式（§ 9.10 和 §13.13）．然而必需注意，这里所说的能量是 $H^{(0)}$ 而不是系统的总能量（包括微扰）；而时间 t 是测量 $H^{(0)}$ 以后的一段时间，并不是系统演化的特征时间．

对于给定的状态 b，$W_{a\to b}$ 随时间的变化也由因子 $f(t,\omega_{ba})$ 给出. 如果跃迁过程中未微扰能量是严格守恒的 $(\omega_{ba}=0)$，则它简单地随 t^2 而增加；如果不是，则它是在 0 和 $4/\omega_{ba}^2$ 之间振荡，同期为 $2\pi/\omega_{ba}$ 的函数，$W_{a\to b}$ 也以同样的周期围绕平均值 $2|V_{ba}|^2/|E_b-E_a|^2$ 振荡，并且只有在那些比此周期小的 t 值时，才有 t^2 的形式.

我们与其讨论跃迁到一个特定的状态，不如讨论**跃迁到一组能量相近的状态**，这就是经常遇到的跃迁到连续谱的情形，在即将要说明的某些极限条件下，可以求出**单位时间的跃迁几率**.

为此我们来考虑 $H^{(0)}$ 的连续谱的一组特定的本征矢量序列，$|b\rangle$ 是其中的一个，$E(b)$ 是相应的 $H^{(0)}$ 的本征值.

在跃迁几率的定义中，必须特别注意 $|b\rangle$ 的归一化形式，我们假设它们按

$$\langle b|b'\rangle=\delta(b-b')/n(b),$$

来归一化，其中 $n(b)$ 是一正的实函数. 对变量 b 处在某个范围 B 中的状态的投影算子是

$$P_B=\int_B|b\rangle n(b)\mathrm{d}b\langle b|.$$

如果把 $E(b)$ 取作新变量，而 $B(E)$ 是相应的积分域，则

$$P_B=\int_{B(E)}|b\rangle\rho_b(E)\mathrm{d}E\langle b|, \tag{17.44}$$

其中

$$\rho_b(E)=n(b)\mathrm{d}b/\mathrm{d}E. \tag{17.45}$$

通常称 $\rho_b(E)$ 为**能级 b 在能量 E 处的密度**. 按照 (17.44)，它确实是单位能量间隔中矢量 b 的数目. 很明显，$\rho_b(E)$ 取决于 $|b\rangle$ 的归一化形式.

这样，跃迁到 B 区域中的一个状态的几率 $W_{a\to B}$ 是：

$$W_{a\to B}=\langle a|U^\dagger(t,0)P_BU(t,0)|a\rangle$$

$$= \int_{B(E)} W_{a\to b}\rho_b(E)\mathrm{d}E. \tag{17.46}$$

(17.46) 式可以这样得到：P_B 用公式 (17.44) 代替，并取

$$W_{a\to b} = |\langle b|U(t,0)|a\rangle|^2. \tag{17.47}$$

这里的 $W_{a\to b}$ 形式上相当于由(17.22)定义的 $a\to b$ 的跃迁几率．计算那个量的各个步骤在这里都适用．特别是，将 (17.40) 代入 (17.46) 式右边，可得出一级微扰的跃迁几率 $W_{a\to B}$：

$$W_{a\to B} \simeq \int |V_{ba}|^2\rho_b f(t,\omega_{ba})\mathrm{d}E/\hbar^2, \tag{17.48}$$

其中 $V_{ba} \equiv \langle b|V|a\rangle$ 通过参数 b 而随 E 变化．

作为一个明确的例子，我们考虑到处于间隔 $\left(E_1 - \frac{1}{2}\varepsilon, E_1 + \frac{1}{2}\varepsilon\right)$ 的那些能级 b 的跃迁．假设宽度 ε 是足够小的，以致在此间隔内 V_{ba} 和 ρ_b 实际上都是常数，因此可以拿到积分号外边，我们还假设 t 足够大，使得 ε 比函数 f 的振荡周期大很多：

$$\varepsilon \gg 2\pi\hbar/t. \tag{17.49}$$

于是容易算出(17.48)式右边的积分．考虑两种情形：

(i) f 的主峰在积分域外(能量不守恒的跃迁)，这时 f 可用它在几个周期内的平均值代替，由此得到与时间无关的表示式：

$$W_{a\to B} \simeq 2\varepsilon\rho_b(E_1)|V_{ba}|^2/(E_1 - E_a)^2.$$

(ii) f 的主峰在积分域内(能量守恒的跃迁)主峰对积分的贡献是主要的，把积分限扩展到无穷所引起的误差很小，因此 [见 (17.42) 式]

$$W_{a\to B} \simeq 2\pi\hbar^{-1}|V_{ba}(E_a)|^2\rho_b(E_a)t.$$

按照不等式 (17.49)，这个几率比其余所有的几率之和都大．

现引入单位时间的跃迁几率：

$$w_{a\to B} \equiv \mathrm{d}W_{a\to B}/\mathrm{d}t.$$

从以上所得结果我们可以得出结论：对能量不守恒的跃迁，单位时间的跃迁几率为零；对能量守恒的跃迁，单位时间的跃迁几率由下面的重要公式表述：

$$\boxed{w_{a\to B} \simeq \frac{2\pi}{\hbar}|V_{ba}|^2\rho_b} \qquad (17.50)$$

其中，矩阵元 $V_{ba} \equiv \langle b|V|a\rangle$；能级密度 ρ_b 与那些能量等于始态的能量的状态 b 有关.

要使公式 (17.50) 成立，t 必需足够大，使得条件(17.49)满足；同时 t 又要足够小，使得一级近似能适用 ($w_{a\to B}t \ll 1$)

以上的证明有利于说明公式(17.50)的意义和适用条件. (17.50)还可以更简单地获得：将 (17.40) 式右边的 f 用其渐近式(17.43)代入，结果是

$$W_{a\to b} \underset{t\to\infty}{\sim} 2\pi\hbar^{-1}|V_{ba}|^2\delta(E_b - E_a)t, \qquad (17.51)$$

然后将此式代入 $W_{a\to B}$ 的定义式[(17.46)式]中.

5. 应用于玻恩近似中的截面计算

从公式 (17.50) 可以导出称为**玻恩近似**的碰撞截面的表示式，它就是对粒子和靶的相互作用势能的一级近似. 在这里，我们对这公式给出一种不太严格但比较简单的推导. 此公式的严格推导将在第十九章中给出.

我们考虑一种最简单的可能情况：粒子被势场 $V(r)$ 散射，势场当作微扰，未微扰哈密顿量就是自由粒子的哈密顿量：

$$H = H^{(0)} + V(\boldsymbol{r}) \qquad H^{(0)} = \boldsymbol{p}^2/2m.$$

$H^{(0)}$ 的本征态是平面波 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$，这样的波表示动量为 $\boldsymbol{p}=$

$\hbar\boldsymbol{k}$，密度为一的归一化状态．我们用 $|\boldsymbol{k}\rangle$ 表示相应的刃矢量，它们服从正交和封闭关系：

$$\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}'\rangle = (2\pi)^3\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \quad \int|\boldsymbol{k}\rangle\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\langle\boldsymbol{k}| = 1.$$

因此在 $\boldsymbol{k}$ 矢量空间中，如此归一化的状态的密度是常数，并等于 $(2\pi)^{-3}$，在间隔 $(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}+\mathrm{d}\boldsymbol{k})$ 中的状态数为 $\mathrm{d}\boldsymbol{k}/(2\pi)^3$，我们关注的是动量在给定方向 Ω 上的状态，而且用 $\rho(E)$ 表示像前一节那样定义的状态密度[公式 (17.45)]，[初看起来，这个函数似乎与 Ω 有关，但马上可以看到，事实并非如此]：$\rho(E)d\Omega dE$ 是动量在立体角$(\Omega,\Omega+d\Omega)$内，能量 $E=p^2/2m$ 在 $(E,E+dE)$ 范围内的状态数．因此有：

$$\rho(E)\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E = \mathrm{d}\boldsymbol{k}/(2\pi)^3 = \mathrm{d}\boldsymbol{p}/(2\pi\hbar)^3,$$

由于 $\mathrm{d}\boldsymbol{p} = p^2\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}p$，故

$$\rho(E)\mathrm{d}E = p^2\mathrm{d}p/(2\pi\hbar)^3,$$

于是

$$\rho(E) = \frac{p^2}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}E} = \frac{mp}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{17.52}$$

现在计算能量为 $E=\frac{1}{2}mv_a^2$ 的单能入射粒子束被散射到一给定方向 Ω_b 的截面．令 $\hbar\boldsymbol{k}_a$ 是入射粒子的动量；$\hbar\boldsymbol{k}_b$ 是相应于同一能量但方向为 Ω_b 的动量．在一级近似下，由公式 (17.50) 给出了系统从初态 $|\boldsymbol{k}_a\rangle$ 到能量在 E 附近，而其动量在立体角 $(\Omega_b,\Omega_b+d\Omega)$ 内的那个 b 态的单位时间的跃迁几率 $w_{a\to B}d\Omega$：

$$w_{a\to B}\mathrm{d}\Omega \simeq 2\pi\hbar^{-1}|\langle\boldsymbol{k}_b|V|\boldsymbol{k}_a\rangle|^2\rho(E)\mathrm{d}\Omega. \tag{17.53}$$

令 $d\sigma_{a\to b}/d\Omega$ 为微分散射截面，$d\sigma_{a\to b}$ 为单位入射粒子通量在单位时间内被散射到立体角 $(\Omega_b,\Omega_b+d\Omega)$ 内的粒子

数，因为 $|k_a\rangle$ 代表通量为 v_a 的波，所以有

$$d\sigma_{a\to b} = w_{a\to B}/v_a.$$

$w_{a\to b}$ 用近似式(17.53)代入，得到

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega} \simeq \frac{2\pi}{\hbar v_a}|\langle k_b|V|k_a\rangle|^2\rho_b(E), \qquad (17.54)$$

其中 $\rho_b(E)$ 是末态密度[(17.52)式]，而

$$\langle k_b|V|k_a\rangle = \int e^{i(k_a-k_b)r}V(r)dr$$

是引起跃迁的势场的矩阵元.

6. 周期性微扰　共振

在一级近似下[公式 (17.25)]，跃迁几率 $W_{a\to b}$ 与函数 $V_{ba}(t)$ 的谐波分析中的频率为 ω_{ba} 的振幅的模方成正比，这里按惯例，在区间 (t_0, t) 以外取 $V_{ba} = 0$. 当 V 与时间无关时，其谐波分析特别简单，正如我们已见的，它导致未微扰能量守恒. 在更普遍的情形下，当 V 是 t 的周期函数时，它也很简单，而且存在一种有重要实际意义的现象——共振现象.

假设 V 是时间的频率为 ω 的正弦函数. 因为它是厄密算符. 所以可以写成

$$V = Ae^{i\omega t} + A^\dagger e^{-i\omega t},$$

这里 A 是某个与时间无关的算符. 一级近似的跃迁几率 $W_{a\to b}$ 是(令 $t_0 = 0$):

$$W_{a\to b} \simeq \hbar^{-2}|\langle b|A|a\rangle\int_0^t e^{i(\omega_{ba}+\omega)\tau}d\tau + \langle b|A^\dagger|a\rangle \cdot \times\int_0^t e^{i(\omega_{ba}-\omega)\tau}d\tau|^2,$$

它可与公式(17.40)相比.

这里的跃迁振幅由二项组成，当 t 足够大时，除非 $\omega_{ba}+\omega$ 近乎为零，也就是除非 E_b 在

$$E_b = E_a - \hbar\omega, \qquad (17.55)$$

点附近$\left(\text{宽度为}\ \frac{2\pi\hbar}{t}\right)$的能带内，第一项是很小的．而且第二项也是很小的，除非 E_b 在

$$E_b = E_a + \hbar\omega. \tag{17.55'}$$

点附近(同样宽度)的能带内．

实际上 t 很大 ($t \gg 2\pi/\omega$)，足以使这两能带没有重迭．因此 $W_{a\to b}$ 是很小的，除非跃迁过程中未微扰系统发射或吸收了能量 $\hbar\omega$，如公式(17.55)和(17.55')所表明的．

在第一种情形下，跃迁振幅中只包括第一项，跃迁几率化简成：

$$W_{a\to b} \simeq |A_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba} + \omega)/\hbar^2.$$

这个结果和(17.40)的主要差别是 $\omega_{ba}+\omega$ 代替了 ω_{ba}，用完全类似于 §4 的作法，我们考虑到 $E_a - \hbar\omega$ 附近一组能级(能量范围为 $\Delta E \gg 2\pi\hbar/t$) 的跃迁，并在适当的条件下确定单位时间的跃迁几率．它仍由公式 (17.50) 给出．仅有的差别是：现在的 V_{ba} 和 ρ_b 与能量比始态的小 $\hbar\omega$ 的那些状态 b 有关．同样的分析也适用于系统吸收能量 $\hbar\omega$ 的跃迁（参看问题 17.2)．

现在来考虑更普遍情形：V 是时间的任意周期函数，其频率为 ω．这里我们只讲结果，而把证明留给读者．于是，有付里叶展开式

$$V = \sum_{s=1}^{\infty} (A_s e^{is\omega t} + A_s^{\dagger} e^{-is\omega t}).$$

如果 $t \gg 2\pi/\omega$，则这个级数的每一项对一级跃迁几率的贡献互不相干，因为各项引起的跃迁对应着不同的能量转移．在"A_s 跃迁"时，系统失去能量 $s\hbar\omega$ (在 $2\pi\hbar/t$ 以内)；在"$A_s^{\dagger}$ 跃迁"时，系统得到能量 $s\hbar\omega$ (在 $2\pi\hbar/t$ 以内)．

II. 哈密顿量的突然改变和绝热改变

7. 问题和结果

一个经常出现的问题是求系统状态由于外场改变而发生的变化。一个典型的例子是一个原子置于磁场的情形。一般说来，所得结果关键性地依赖于哈密顿量发生改变的那段时间 T。本节我们讨论 T 很小(突然改变)和 T 很大(绝热改变)的极限情形。

假设哈密顿量从 t_0 时刻的某个起始值 H_0 连续的变化到 t_1 时刻的某个终值 H_1，我们取：

$$T = t_1 - t_0 \qquad s = (t - t_0)/T,$$

并用 $H(s)$ 表示当 $t = t_0 + sT$ 时的哈密顿量的取值，它是 s 的连续函数，并有

$$H(0) = H_0 \qquad H(1) = H_1.$$

系统从 t_0 到 t_1 的演化现在只取决于参数 T(它用于度量从 H_0 到 H_1 的变化速率)。为了方便，取

$$U(t,t_0) = U_T(s).$$

我们的问题主要是求出 $U(t_1,t_0)$，也就是 $U_T(1)$。并考察它与 T 的关系。

在上述两种极限情形下，结果非常简单。

当 $T \to 0$ 的极限情形，也就是有无限大的变化速率时，系统的力学状态仍然不变：

$$\lim_{T\to 0} U_T(1) = 1. \tag{17.56}$$

当 $T \to \infty$ 的极限情形，也就是无限慢地改变(或绝热改变)时，若系统最初处于 H_0 的本征态， 则在以后要说明的某些条件下，**它由此态连续地变为 H_1 的本征态(在时刻 t_1)，** 这

个重要结论就是通常所说的"**绝热定理**"[1]

8. 迅速变化和突然近似

上述的第一种结果可直接从描述系统演化的算符的方程(17.1)得出，利用§7的符号，它可写成：

$$U_T(s) = 1 - i\hbar^{-1}T\int_0^s H(s)U_T(s)\mathrm{d}s.$$

在 $T \to 0$ 的极限下，右边第二项变为零，因此得到所要求的结果(17.56).

当 T 足够小时，在一级近似范围内，我们可以假设 $v_T(1) = 1$，这就叫做"突然近似".

令 $|0\rangle$ 表示系统在 t_0 时刻的态矢量，Q_0 是向与 $|0\rangle$ 正交的矢量空间的投影算子. 设 $|0\rangle$ 的模方是1，则有

$$Q_0 = 1 - |0\rangle\langle 0|.$$

突然近似就是取

$$U(t_1, t_0)|0\rangle \simeq |0\rangle.$$

在初态以外的其他态中找到系统的几率 $\tilde{\omega}$，是对这个近似所包含的误差的一种度量：

$$\begin{aligned}\tilde{\omega} &= \langle 0|U^{\dagger}(t_1, t_0)Q_0U(t_1, t_0)|0\rangle \\ &= \langle 0|U_T^{\dagger}(1)Q_0U_T(1)|0\rangle. \qquad (17.57)\end{aligned}$$

对此近似的修正可以用§1中提出的微扰方法来计算，在现在的情形下，

$$(H^{(0)} = 0, V = H),$$

---

1) 它也称为爱伦费斯特定理，爱伦费斯特在这方面的工作只涉及到经典力学和旧量子论，将此定理推广到量子力学的主要是 M. Born 和 U. Fock, *Zeit. f. Phys.* **51** (1928) 165; 以及 T. Kato. *Journ. Phys. Soc. Jap.* **5** (1950) 435; K. O. Friedrichs. *On the Adiabatic Theorem in Quantum Theory*. Report IMM. NYU-218 (New York 1955).

零级近似简单地就是算符 1，而展开式(17.17)给出：

$$U_T(1) = 1 - i\hbar^{-1}T\int_0^1 H(s)ds + (i\hbar)^{-2}T^2 \times\int_0^1 ds_1\int_0^{s_1} ds_2 H(s_1)H(s_2) + \cdots \tag{17.58}$$

尤其是，将此展开式代入 (17.57) 式右边，就得到 $\tilde{\omega}$ 展成 T 的幂级数. 由于 $Q_0|0\rangle = 0$，最低级项是 T^2，将 (17.58) 式头两项代入，并取

$$\bar{H} = \int_0^1 H(s)\,ds = \frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_1} H dt. \tag{17.59}$$

于是有

$$\tilde{\omega} = \frac{T^2}{\hbar^2}\langle 0|\bar{H}Q_0\bar{H}|0\rangle + O(T^3).$$

又因为

$$\langle 0|\bar{H}Q_0\bar{H}|0\rangle = \langle 0|\bar{H}^2|0\rangle - \langle 0|\bar{H}|0\rangle^2 = (\Delta\bar{H})^2,$$

这里，$\Delta\bar{H}$ 是可观察量 $\bar{H}$ 在 $|0\rangle$ 状态的均方根偏差，因此得

$$\tilde{\omega} = \frac{T^2(\Delta\bar{H})^2}{\hbar^2} + O(T^3). \tag{17.60}$$

于是突然近似的适用条件 $\tilde{\omega} \ll 1$ 要求[1]：

$$\boxed{T \ll \hbar/\Delta\bar{H}} \tag{17.61}$$

条件(17.61)只不过是时间-能量不确定关系的一种特殊形式而已，按照定义 (17.59)，$\bar{H}$ 是系统的哈密顿量在 (t_0, t) 间隔中的平均值，因此在此时间间隔内，系统的演化大致由哈密顿量 $\bar{H}$ 所决定. 根据时间-能量不确定关系，服从这种运

---

1) $\tilde{\omega}\ll 1$ 的条件不意味着 $U_1(t, t_0)|0\rangle \simeq |0\rangle$，只要求这两个矢量相差一位相因子，然而，公式 (17.60) 要求展开式(17.58)收敛得很快，而且一般说来，(17.61) 是它的充分条件.

动方程的系统状态在时刻 $\hbar/\Delta\bar{H}$ 以前不会有明显的改变．所以条件（17.61）确实是系统的状态在 T 时间后的改变可忽略的条件．

9. 磁场的突然倒向

作为一个应用的例子，我们考虑均匀磁场中的原子在磁场方向突然倒向时将会发生的现象．假定 LS 耦合图象适用于此原子，而且磁场相当强，足以完全拆散总轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 和总自旋 $\boldsymbol{S}$ 的耦合(帕邢-巴克效应)．为简单起见，我们还假定磁场总是平行 z 轴，而且从 $-\mathscr{H}_0$ 变到 $\mathscr{H}_0$ 是按照线性规律变化的：

$$\mathscr{H}(t) = \mathscr{H}_0[2s - 1] = \mathscr{H}_0[2(t - t_0)/T - 1]. \tag{17.62}$$

根据第十六章的讨论（§9—12），系统的哈密顿量的形式是

$$H = H^{(0)} + A(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}) - \frac{e}{2mc}(L_z + 2S_z)\mathscr{H}(t), \tag{17.63}$$

$H^{(0)}$ 是 LS 耦合图象中的未微扰哈密顿量．因为按照(17.62)式的规律，磁场对时间的平均值为零．故 H 对时间的平均值等于无外场时原子的哈密顿量：

$$\bar{H} = H^{(0)} + A(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}).$$

我们现假定起始时系统处于 $\bar{H}$ 的某一本征态，由于在该时刻有帕邢-巴克效应的条件，这以这态矢量很近于 §16.11 中定义的矢量 $|\alpha LSM_LM_S\rangle$ 中的一个，因此我们取 $|0\rangle = |\alpha LSM_LM_S\rangle$．$\Delta\bar{H}$ 的计算很简单．因为 $|\alpha LSM_LM_S\rangle$ 是 $H^{(0)} + AL_zS_z$ 的本征矢量．只有 $\frac{1}{2}[L_+S_- + L_-S_+]$ 才有贡

献．计算得到

$$\Delta\bar{H} = \frac{1}{2} A\hbar^2[2(L(L+1) - M_L^2)(S(S+1) - M_S^2) - 2M_L M_S]^{\frac{1}{2}}.$$

括号中的数值因子的数量级为 1［在两种极限的情形下：$M_L = \pm L$，$M_S = \pm S$，它为零）．因此偏差 $\Delta\bar{H}$ 是数量级为 $A\hbar^1$ 的量．也就是自旋-轨道耦合引起 LS 能级分裂的数量级．

因此，如果

$$T \ll \frac{1}{A\hbar}, \tag{17.64}$$

迅速变化条件 (17.61) 就满足了；当我们反转磁场时，态矢量实际上仍然不变，要保持原子的力学状态不变，只要态矢量仅变化一个位相因子．因此，为了使磁场反向时原子还停留在同样的状态中，不等式(17.64)是充分的条件，而不是必要的，在 §14 的末尾我们再回到这一问题上来．

10. 绝热改变　一般原则　最简单情形

我们在本节的其余部分将考虑另一种极限情形，即哈密顿量的变化非常缓慢，仍沿用 §7 的符号．

首先要建立绝热定理，它是 $H(s)$ 的分立谱状态的一种特性，为简单起见，我们假设 H 的谱全部是分立的[1]．但这并不是必要的假设．

用 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_i, \cdots$ 标记 H 的本征值；$P_1, P_2, \cdots, P_i \cdots$ 是到它们对应的子空间中的投影算子，设这些量都是 s 的连续函数．另外我们假设：

1）分立的本征值及对应的子空间满足下面要指出的连续性，非交叉和可微分条件就足够了，见本章第 7 节末附注中引述的 T. Kato 的文章．

(i) 整个跃迁期间 $0 \leqslant s \leqslant 1$，**各个本征值都保持是不同的**.

$$\varepsilon_j(s) \neq \varepsilon_k(s)，\text{对任意 } j,k. \tag{17.65}$$

(ii) 在整个间隔内，导数 $dP_j/ds, d^2P_j/ds^2$ 是确定的，而且是分段连续的.

演化算符 $U_T(s)$ 满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{d}{ds} U_T(s) = TH(s)U_T(s), \tag{17.66}$$

哈密顿量 $H(s)$ 由下式给定:

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s)P_j(s). \tag{17.67}$$

绝热定理指出 $U_T(s)$ 具有渐近特性[1]:

$$\lim_{T\to\infty} U_T(s)P_j(0) = P_j(s)\lim_{T\to\infty} U_T(s) \tag{17.68}$$

$$(j = 1,2,\cdots).$$

我们首先假设 $H(s)$ 的每一个本征值的子空间保持不变:

$$P_j(s) = P_j(0) \equiv P_j \qquad (j = 1,2,\cdots).$$

此时 $H(s)$ 有简单的形式

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s)P_j,$$

而且不论 s 取何值，$H(s)$ 都和各个投影算子 P_j 对易，因此每一个 P_j 都是运动常数:

$$U_T(s)P_jU_T^{\dagger}(s) = P_j. \tag{17.69}$$

关系式 (17.69) 对任何 T 都成立，对 $T \to \infty$ 更不必说了.

---

1) 这个特性与 §7 中给出的性质等价，如果 $|j\rangle$ 是 $H(0)$ 的本征值为 $\varepsilon_j(0)$ 的本征矢量，则 $P_j(0)|j\rangle = |j\rangle$，而且 (17.68) 给出

$$\lim_{T\to\infty} U_T(s)|j\rangle = P_j(s)\lim_{T\to\infty} U_T(s)|j\rangle.$$

于是在 $T\to\infty$ 时，如 §7 中所说的，$U_T(s)|j\rangle$ 趋向于 $\varepsilon_j(s)$ 的子空间中的一个矢量.

此外，在此特殊情形下方程式（17.66）可以精确地积分，并得出：

$$U_T(s) = \exp\left(-\mathrm{i}T\int_0^s H(\sigma)\mathrm{d}\sigma/\hbar\right) = \sum_j e^{-\mathrm{i}T\varphi_j(s)/\hbar}P_j. \tag{17.70}$$

这里我们利用了符号

$$\varphi_j(s) = \int_0^s \varepsilon_j(\sigma)\mathrm{d}\sigma. \tag{17.71}$$

因此我们得出结论：若系统的态矢量在 t_0 时刻是 H_0 的本征值为 $\varepsilon_j(0)$ 的本征矢量，则在 t_1 时刻的态矢量只和它相差一个位相因子 $e^{-iT\varphi_j(1)/\hbar}$.

11. “转动轴表象”

在一般情况下，如果哈密顿量 $H(s)$ 的本征矢量经受希尔伯特空间中的某个转动，则薛定谔方程的精确积分就不再可能．处理这普遍情形的第一步是尽可能通过适当的“表象”变换消除此转动运动．

为此，我们引入具有下列性质的么正算符 $A(s)$：

$$P_j(s) = A(s)P_j(0)A^{\dagger}(s) \quad (j = 1,2,\cdots). \tag{17.72}$$

么正变换 $A(s)$ 使 $H(0)$ 的任一组基矢转换成 $H(s)$ 的一组基矢，使 $H(0)$ 的每一个本征矢量变换成 $H(s)$ 的一个本征矢量．

$A(s)$ 由起始条件

$$A(0) = 1 \tag{17.73}$$

和微分方程

$$\mathrm{i}\hbar\mathrm{d}A/\mathrm{d}s = K(s)A(s) \tag{17.74}$$

明确地决定，其中 $K(s)$ 是一个合适的厄密算符，满足(17.72)的充要条件是 $K(s)$ 服从对易关系

$$[K(s),P_j(s)] = i\hbar dP_j/ds \quad (j = 1,2,\cdots). \tag{17.75}$$

因为这些式子可以直接从 (17.72) 式两边对 s 微分来得到，所以是必要条件；它们又是充分的，因为，由于 $A(s)$ 和 $P(s)$ 分别满足方程 (17.74) 和(17.75)，表示式

$$A^{\dagger}(s)P_j(s)A(s)$$

对 s 的微分为零。因此它等于起始值 $P_j(0)$

关系式(17.75)没有完全确定 $K(s)$，如果在 $K(s)$ 上加上算符 $\sum_K P_k(s)f_k(s)P_k(s)$，其中 $f_k(s)$ 是任意的与 s 有关的算符，则它们仍然满足(17.75)。换句话说，投影 $P_j(s)K(s)P_j(s)$ $(j = 1,2,\cdots)$ 可以任意固定，由于一些立即可以看清楚的理由，我们强加如下的附加条件来消除这种任意性：

$$P_j(s)K(s)P_j(s) = 0 \qquad (j = 1,2,\cdots). \tag{17.76}$$

这样就给出(问题 17.5)

$$K(s) = i\hbar\sum_j (dP_j/ds)P_j(s).$$

么正变换 $A^{\dagger}(s)$ 使薛定谔“表象”的算符和矢量变换成一种新的“表象”(即“转动轴表象”)的矢量和算符，可观察量 $H(s)$ 变换成

$$H^{(A)}(s) = A^{\dagger}(s)H(s)A(s),$$

借助 (17.67) 和 (17.72) 式，得到

$$H^{(A)}(s) = \sum_j \varepsilon_j(s)P_j(0). \tag{17.77}$$

同样地 $K(s)$ 变成

$$K^{(A)}(s) = A^{\dagger}(s)K(s)A(s). \tag{17.78}$$

在这新“表象”中，演化算符是

$$U^{(A)}(s) = A^{\dagger}(s)U_T(s). \tag{17.79}$$

它由

$$i\hbar dU^{(A)}/ds = [TH^{(A)}(s) - K^{(A)}(s)]U^{(A)}(s). \tag{17.80}$$

$$U^{(A)}(0) = 1 \tag{17.81}$$

决定[参考§1的方程(17.12),其中必需取 $V = TH - K$].

12. 绝热定理的证明

如果和 $TH^{(A)}$ 相比，$K^{(A)}$ 可以忽略,则方程式 (17.80) 的积分是很容易的，于是我们就得到了 § 10 中讨论过的最简单情形,用 $\Phi_T(s)$ 表示所得到的薛定谔方程的解:

$$i\hbar d\Phi_T/ds = TH^{(A)}(s)\Phi_T(s) \tag{17.82}$$

$$\Phi_T(0) = 1. \tag{17.83}$$

我们得到[方程 (17.20)]

$$\Phi_T(s) = \sum_j e^{-iT\varphi_j(s)/\hbar}P_j(0), \tag{17.84}$$

φ_j 仍由(17.71)规定.

然而,由(17.77)和(17.78)可以看到，$H^{(A)}(s)$ 和 $K^{(A)}(s)$ 与 T 无关. 因此在 $T \to \infty$ 的极限下,可以认为(17.80)右边 $K^{(A)}$ 的影响将完全被 $TH^{(A)}$ 所掩盖,从而 $U^{(A)}(s)$ 将趋向于 $\Phi_T(s)$. 我们将会看到这确实如此. 因此,[方程(17.79)]

$$U_T(s) \underset{T\to\infty}{\sim} A(s)\Phi_T(s). \tag{17.85}$$

为了证明这个结果,我们先作一个新的么正变换,并取

$$W = \Phi_T^\dagger U^{(A)} = \Phi_T^\dagger A^\dagger U_T. \tag{17.86}$$

从(17.80)和(17.82)出发,我们很容易导出这一新的么正算符所满足的方程,它的积分形式是

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar}\int_0^s \bar{K}(\sigma)W(\sigma)d\sigma, \tag{17.87}$$

其中

$$\bar{K}(s) = \Phi_T^\dagger(s)K^{(A)}(s)\Phi_T(s) \tag{17.88}$$

$$= \Phi_T^\dagger A^\dagger K A \Phi_T. \tag{17.89}$$

我们将证明核 $\bar{K}(s)$ 是一些频率随 T 无限地增长的振荡函数之和,因而当 $T\to\infty$ 时,沃尔特拉(*Volterra*)方程 (17.87) 右边的积分趋于零.

任意的算符 Q 能够分解成如下[1]的形式:

$$Q = \sum_i \sum_k P_i(0) Q P_k(0).$$

往后我们将采用符号

$$Q_{ik} \equiv P_i(0) Q P_k(0).$$

由 (17.72), (17.84) 和(17.89)得

$$\bar{K}_{ik} = e^{iT(\varphi_i - \varphi_k)/\hbar} K_{ik}^{(A)}$$

$$K_{ik}^{(A)} = A^+(s) P_i(s) K(s) P_k(s) A(s). \qquad (17.90)$$

根据条件 (17.76), $K_{ii}^{(A)} (i = 1,2,\cdots)$ 全为零. 因此在 $\bar{K}$ 的分解式中,对角部分 $\bar{K}_{ii}$ 全都为零:

$$\bar{K}_{ii} = 0 \qquad (i = 1,2,\cdots). \qquad (17.91)$$

非对角部分 $\bar{K}_{ik} (i \neq k)$ 包含一个振荡因子

$$e^{iT(\varphi_i - \varphi_k)/\hbar} \equiv \exp\left[i\hbar^{-1} T \int_0^s (\varepsilon_i(\sigma) - \varepsilon_k(\sigma)) d\sigma\right].$$

振荡的圆频率由指数的位相对 s 微分得出,它是

$$T|\varepsilon_i(s) - \varepsilon_k(s)|/\hbar.$$

根据假设(17.65),差值 $\varepsilon_i - \varepsilon_k$ 决不为零,因此当 $T \to \infty$ 时频率随 T 一样增加.

现考虑算符

$$F(s) \equiv \int_0^s \bar{K}(\sigma) d\sigma. \qquad (17.92)$$

根据 (17.91),其对角元素全是零:

$$F_{ii} = 0.$$

非对角元素用下式给出

$$F_{ik} = \int_0^s e^{iT(\varphi_i - \varphi_k)/\hbar} K_{ik}^{(A)} d\sigma \quad (i \neq k). \qquad (17.93)$$

$K_{ik}^{(A)}$ 与 T 无关,是 s 的连续函数. 但是指数的位相与 T 有关,

---

1) 这里所用的步骤主要在于采用 $H(0)$ 是对角化的某个表象, 同时避免 $H(0)$ 能级的可能简并和基矢位相的任意性所引起的各种麻烦.

因此 F_{jk} 的形式是 $\int_0^t e^{iT\alpha(\sigma)}f(\sigma)d\sigma$，其中 $f(\sigma)$ 是连续函数，而 $\alpha(\sigma)$ 是单调连续函数. 这样一个积分在 $T\to\infty$ 时是趋向零的，的确，分部积分后它变成：

$$F_{jk}(s)=\frac{\hbar}{iT}\left[e^{iT(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar}\frac{K_{jk}^{(A)}}{\varepsilon_j-\varepsilon_k}\right|_0^s - \int_0^s e^{iT(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar}\left[\frac{d}{d\sigma}\left(\frac{K_{jk}^{(A)}}{\varepsilon_j-\varepsilon_k}\right)\right]d\sigma\Bigg]. \quad (17.94)$$

很明显，如果 $K_{jk}^{(A)}, K_{jk}^{(A)}$ 和 ε_j，ε_k 对 s 的微商保持有限，则括号内的式子也是有限的，因此 F_{jk} 将和 $\frac{1}{T}$ 一样渐近地趋于零. 总之，当 $T\to\infty$ 时. 我们有

$$F(s)=O\left(\frac{1}{T}\right).$$

现在，(17.87) 式右边的积分经分部积分后可以写成：

$$F(s)W(s)-\int_0^s F(\sigma)\frac{dW}{d\sigma}d\sigma,$$

或者再写成

$$F(s)W(s)-i\hbar^{-1}\int_0^s F(\sigma)\bar{K}W(\sigma)d\sigma, \quad (17.95)$$

在这里，我们已考虑到方程式 $dW/ds=i\bar{K}W/\hbar$，(17.95) 式的两项都包含因子 F，因此当 $T\to\infty$ 时它们像 $\frac{1}{T}$ 一样趋于零，其结果是[1]

1) 严格讲，以上的论证只有当 $K(s)$ 在整个间隔(0，1)都有界时才成立(见第十六章 § 15 的附注)，于是能证明：$\|F(s)\|$ 像 $\frac{1}{T}$ 一样随 s 而一致地趋于零. 用 κ 和 ε 分别表示 $\|K(s)\|$ 和 $\|F(s)\|$ 的上限，由于 W，Φ 和 A 都是么正的，K，$K^{(A)}$ 和 KW 的模方都相等；类似地，F 和 FW 的模方也相等，由此得

$$\|FW\|\leqslant\varepsilon,\ \left\|\int_0^s F\bar{K}Wd\sigma\right\|<\varepsilon\kappa s.$$

因为 $W-1$ 由(17.95)给定，故

$$\|W-1\|\leqslant\varepsilon(1+\kappa s).$$

$$W = 1 + O\left(\frac{1}{T}\right). \tag{17.96}$$

将(17.96)代入W的定义式(17.86)，得到

$$U_T(s) \underset{T\to\infty}{\sim} A(s)\Phi_T(s)\left[1 + O\left(\frac{1}{T}\right)\right], \tag{17.97}$$

这样就完成了(17.85)式的证明.

因为 $\Phi_T(s)$ 与投影算子 $P_j(0)$ 对易(见(17.84)式)，并且么正算符 $A(s)$ 具有性质(17.72)，所以

$$A(s)\Phi_T(s)P_j(0) = P_j(s)A(s)\Phi_T(s).$$

因此渐近公式(17.97)确实证明了关系式(17.68)，证毕.

13. 绝热近似

如果T足够大，或者更恰当地说，如果 **$H(t)$ 的基矢转动得足够慢**，则作为一级近似，$U_T(1)$ 可用其渐近形式

$$U(t_1,t_0) = U_T(1) \simeq A(1)\Phi_T(1). \tag{17.98}$$

代替，这就称为**绝热近似.**

令 $|0\rangle$ 是模方为 1 的矢量，它描述系统在 t_0 的状态；又令 Q_0 是到它的互补空间上的投影算子，绝热近似在于把U写成

$$U(t,t_0)|0\rangle \simeq A(1)\Phi_T(1)|0\rangle.$$

这个近似所包含的误差由几率 η 来量度，其中 η 是 t_1 时刻发现系统处在不同于 $A(1)\Phi_T(1)|0\rangle$ 的状态中的几率. 到与此矢量正交的空间上的投影算子为

$$Q_1 = A(1)\Phi_T(1)Q_0\Phi_T^{\dagger}(1)A^{\dagger}(1),$$

因此

$$\begin{aligned}\eta &= \langle 0|U^{\dagger}(t_1,t_0)Q_1U(t_1,t_0)|0\rangle \\ &= \langle 0|W^{\dagger}(1)Q_0W(1)|0\rangle.\end{aligned}$$

绝热近似的修正可以用 §1 的微扰方法计算，这里 $A(1)$

$\times\Phi_T(1)$ 起 $U^{(0)}$ 的作用，而 $W(1)$ 起 U_I 的作用，这个方法就在于只保留由迭代方程 (17.87) 所得到的W的展开式的头几项，若我们取一级修正，则有

$$W(1) \simeq 1 + (\mathrm{i}F/\hbar), \tag{17.99}$$

其中 F 是 (17.92) 定义的算符 $F(1)$

这个展开式也可用来计算 η，用类似于突然近似中计算 $\tilde{\omega}$ 的作法得出：

$$\eta \simeq \hbar^{-2}\langle 0|FQ_0F|0\rangle = (\Delta F/\hbar)^2, \tag{17.100}$$

其中 ΔF 是可观察量 F 在状态 $|0\rangle$ 中的均方根偏差．绝热近似成立的条件[1] $\eta \ll 1$ 变成

$$\Delta F \ll \hbar.$$

这里所得的一般形式的这个结果，其用处比突然近似相应结果[关系式(17.61)]少得多，建立这里的可观察量 F 要比建立突然近似中的可观察量 $\bar{H}$ 困难得多．$\bar{H}$ 是 $H(t)$ 的简单积分的结果，但要计算 F 就必须在间隔 (t_0,t_1) 内的每一点解决 $H(t)$ 的本征值问题，并对每一点建立算符 $A(s)$.

让我们就系统开始时处于 $H(0)$ 的某一本征态的情形，来考察绝热近似的适用性条件，事实上，这也是唯一有实际意义的情形．

以后我们不再用 s 替代，而用变量 t 本身，因此，t 时刻的哈密顿量的本征值用 $\varepsilon_i(t)$ 表示；对应的投影算子用 $P_i(t)$ 表示；给出"转轴"的算符用 $A(t)$ 表示；算符 $\Phi_T(s)$ 用 $\Phi(t)$ 表示．所以定义 (17.67) 和(17.84)转换成下面的定义：

$$H(t) = \sum_i \varepsilon_i(t)P_i(t), \tag{17.101}$$

$$\Phi(t) = \sum_i \exp\left[-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\varepsilon_i(\tau)\mathrm{d}\tau/\hbar\right]P_i(0). \tag{17.102}$$

---

1) 对这个关系式可以作类似于(17.61)式注解中的那些说明，它对突然近似的适用性判据作了评注．

而确定 A 的方程式 (17.73) 和 (17.74) 变成:

$$i\hbar dA/dt = K'(t)A(t) \qquad A(0) = 1, \tag{17.103}$$

其中

$$K'(t) = K(s)/T = i\hbar\sum_i (dP_i/dt)P_i(t). \tag{17.104}$$

从 F 的定义 (17.92), 我们得到

$$F = F(t_1) - \int_t^{t_1} \Phi^\dagger(t)A^\dagger(t)K'(t)\,A(t)\Phi(t)dt. \tag{17.105}$$

为简单起见,进一步假设 $H(t)$ 的谱全部是非简并的。我们选取哈密顿量 H_0 的一组基矢 $|1\rangle_0, |2\rangle_0, \cdots, |j\rangle_0, \cdots$, 它们经过变换 $A(t)$ 的作用得到 $H(t)$ 的一组基矢记为 $|1\rangle_t$, $|2\rangle_t, \cdots |j\rangle_t \cdots$. 对于任意 t, 都有

$$\left.\begin{aligned} &|j\rangle_t = A(t)|j\rangle_0 \\ &H(t)|j\rangle_t = \varepsilon_j(t)|j\rangle_t \\ &P_j(t) = |j\rangle_{tt}\langle j| \end{aligned}\right\} (j = 1,2,\cdots). \tag{17.106}$$

设系统在 t_0 时刻的态矢量为 $|0\rangle$, 在绝热近似下, 它在 t_1 时刻的态矢量等于(不计相因子) $|i\rangle_1 = A(t)|i\rangle_0$

$$U(t_1,t_0)|i\rangle_0 \simeq \exp\left[-i\int_{t_0}^{t_1}\varepsilon_i(\tau)d\tau/\hbar\right]|i\rangle_1. \tag{17.107}$$

找到系统处于 $H(t)_1$ 的另一个本征态(例如 $|j\rangle_1$) 的几率 $p_{i\to j}(j \neq i)$ 是

$$p_{i\to j} = |{}_1\langle j|U(t_1,t_0)|i\rangle_0|^2.$$

上述的微扰计算给出:

$$p_{i\to j} \simeq |{}_0\langle j|F|i\rangle_0|^2/\hbar^2. \tag{17.108}$$

为了和(17.100)式的结果一致,我们有

$$\eta_i = \sum_{j\neq i} p_{i\to j} \simeq \hbar^{-2}\sum_{j\neq i} {}_0\langle i|F|j\rangle_{00}\langle j|F|i\rangle_0.$$

利用公式(17.102),(17.104),(17.105)以及(17.106)所给出的 $|j\rangle_t$ 的性质,得到:

$$ {}_0\langle j|F|i\rangle_0 = i\hbar\int_{t_0}^{t_1}\alpha_{ji}(t)\exp\left[i\int_{t_0}^{t}\omega_{ji}(\tau)d\tau\right]dt, $$

其中

$$ \alpha_{ji} \equiv {}_0\langle j|A^{\dagger}(t)(dP_i/dt)A(t)|i\rangle_0 = {}_t\langle j|(d|i\rangle_t/dt) \tag{17.109} $$

$$ \omega_{ji}(t) = [\varepsilon_j(t) - \varepsilon_i(t)]/\hbar. \tag{17.110} $$

因此从(17.108)得

$$ p_{i\to j} \simeq \left|\int_{t_0}^{t_1}\alpha_{ji}(t)\exp\left[i\int_{t_0}^{t}\omega_{ji}(\tau)d\tau\right]dt\right|^2. \tag{17.111} $$

α_{ji} 和 ω_{ji} 的物理解释可以直接从定义(17.109)和(17.110)得出。$\alpha_{ji}(t)$ 是 $H(t)$ 的本征矢量的转动速度的量度，它是 $|i\rangle_t$ 轴的速度沿 $|j\rangle_t$ 的分量。$\omega_{ji}(t)$ 是跃迁 $i\to j$ 的"玻尔频率"。

(17.111)式右边的被积函数是函数 $\alpha_{ji}(t)$ 和频率为 $\omega_{ji}(t)$ 的振荡指数的乘积。若 α_{ji} 和 ω_{ji} 与时间无关，就容易进行积分。得出。

$$ p_{i\to j} \simeq \left|\frac{\alpha_{ji}}{\omega_{ji}}\right|^2 2(1-\cos\omega_{ji}T). $$

因此 $p_{i\to j}$ 是数量级为 $|\alpha_{ji}/\omega_{ji}|^2$ 的量。如果 α_{ji} 和 ω_{ji} 不恰好是常数，而是随时间相当平缓地变化，那么 p_{ij} 最多就是比值 $|\alpha_{ji}/\omega_{ji}|^2$ 在区间 (t_0,t) 内所达到的最大值：

$$ p_{i\to j} \lesssim \max\left|\frac{\alpha_{ji}(t)}{\omega_{ji}(t)}\right|^2. \tag{17.112} $$

类似地，η_i 的数量级最多是(17.112)式右边的量对所有不同于 i 的 j 求和所得的大小。这个和通常小于 $|\alpha_i^{\max}/\omega_{ji}^{\min}|^2$，其中 $\omega_i^{\min}$ 是从 i 跃迁到其最邻近能级的最小玻尔频率，而 $\alpha_i^{\max}$ 是定义为

$$ \alpha_i^2(t) = \sum_{j\neq i}|\alpha_{ji}(t)|^2. $$

的正值的最大值.

回顾 α_{ii} 的定义 (17.109)，并注意到[1]

$$ {}_t\langle i|\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|i\rangle_t\right)=0, \tag{17.113}$$

我们看到：α_i 是矢量 $d|i\rangle_t/dt$ 的长度，也就是本征矢量 $|i\rangle_t$ 的"角速度"，因此在大多数情况下，如果

$$ \boxed{\left|\frac{\alpha_i^{\max}}{\omega_i^{\min}}\right|^2=\left|\frac{|i\rangle_t\text{ 的最大角速度}}{|i\rangle_t\text{ 的最小玻尔频率}}\right|^2\ll 1} \tag{17.114}$$

则条件 $\eta_i\ll 1$ 一定能满足.

条件 (17.114) 可作为绝热近似适用性的判据，实际上这是过严的限制. 但是有使用起来相对容易些这个好处. 特别值得指出的是：为了计算(17.112)式右边出现的 $\alpha_i(t)$ 或者 $|\alpha_{ji}(t)|$，并不需要确定 $A(t)$；我们只需要解 $H(t)$ 的本征值问题，并决定矢量 $|i\rangle_t$，$|j\rangle_t$ (不计相因子)，此外，我们能证明

$$ \alpha_{ji}(t)=-{}_t\langle j|\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}|i\rangle_t/\hbar\omega_{ji}(t)$$

(参阅问题 17.6).

14. 磁场的绝热倒向

现在我们再回到 §9 中的问题. 沿用同样的符号，仍从相

---

1) 从(17.104)和(17.106)，我们有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|j\rangle_t=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A(t)|j\rangle_0=\frac{\mathrm{d}P_j}{\mathrm{d}t}|j\rangle_t\quad(j=1,2,\cdots).$$

将等式 $P_j(t)|j\rangle_t=|j\rangle_t$ 逐项微分所得结果与此结果比较，得 $P_j(d|j\rangle_t/dt)=0$，因此

$${}_t\langle j|\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|j\rangle_t\right)=0\quad(j=1,2,\cdots). \tag{17.113'}$$

$|j\rangle_t$ 是 $H(t)$ 的本征矢量，利用这条件，矢量 $|j\rangle_t$ 被确定到只差一个位相因子未定，这个位相因子由条件(17.113')来固定.

同的起始条件出发，但现在假设条件(17.64)不再满足了.

哈密顿量由 (17.63) 给出，可以看到 α、L、S 和 $M_J = M_L + M_S$ 是好量子数(无论 t 如何，$H(t)$ 与 $J_z = L_z + S_z$ 对易). 因此，如果 $|\alpha LSM_LM_S\rangle$ 是起始态矢量，则它后来的演化都发生在具有相同 α, L, S 和 $M_L + M_S$ 值的矢量空间中.

我们详细地讨论系统的起始状态是 ^2P 态的情形，总共有 6 个不同的 ^2P 态，即 6 个基矢量 $|\alpha 1\frac{1}{2}\ M_LM_S\rangle$ $\left(M_L = 1, 0, -1; M_S = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right.$，以后用 $\left.|M_LM_S\rangle$ 表示$\right)$ 的线性组合. 因为它们都是 $H^{(0)}$ 的本征态，我们可以把它们所对应的本征值作为能量的零点. 对应于 H 的那些能级是很容易求得的(问题 17.7). 它们是参数 $\rho = \mu_B\mathscr{H}/A\hbar^2$ 的函数，并在图 17.3 中描绘出来 ($\mu_B = e\hbar/2mc$ = 玻尔磁子). 每一能级对应于一确定的 $M_J = M_L + M_S$ 值，对应的本征矢量在极限 $\rho \to \pm\infty$ 下都趋向一特定的 $|M_LM_S\rangle$，如图所示. 我们依次考察 $M_J = \frac{3}{2}$ 和 $M_J = \frac{1}{2}$ 的情形.

首先讨论 $M_J = \frac{3}{2}$ 的情形. 对于 J_z 的这个值只有一个态，对应的矢量是 $|1\ \frac{1}{2}\rangle$. 对于任意的 t，它必需是 H 的一个本征态. 简单计算得出

$$H\left|1\ \frac{1}{2}\right\rangle = A\hbar^2\left(\frac{1}{2} - 2\rho(t)\right)\left|1\ \frac{1}{2}\right\rangle.$$

如果原子起始时是在 $|1\frac{1}{2}\rangle$ 态，则有 § 10 所说的薛定谔方程的平凡积分情形. 在时间的进程中，原子仍处于相同状态，其

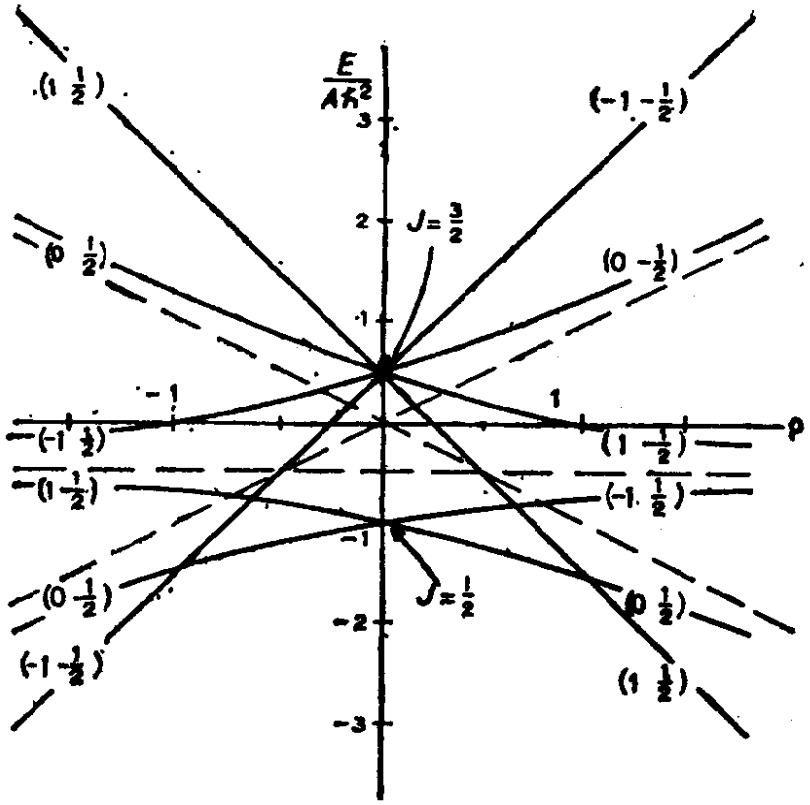


图 17.3　以磁场强度 $\mathscr{H}(\rho=\mu_B\mathscr{H}/A\hbar^2)$ 的函数的形式表出的^2P 能级的位置．每条曲线末端括号中的数字是两种极限 $\rho\to\pm\infty$ 情形下，各本征态的量子数 (M_L,M_S)

态矢量只是简单地乘上一个位相因子

$$\exp\left[-\mathrm{i}A\hbar\int_{t_0}^{t}\left(\frac{1}{2}-2\rho(\tau)\right)\mathrm{d}\tau\right].$$

在磁场线性变化的情形下［(17.62)式］，态矢量在 T 时间后等于

$$\exp(-\mathrm{i}A\hbar T)\left|1\ \frac{1}{2}\right\rangle.$$

无论什么 T，上式都成立，特别是在 $A\hbar T\ll 1$ 的极限情形下，我们得到和突然近似相同的结果，即矢量 $|1\ \frac{1}{2}\rangle$ 本身．

接着讨论 $M_J=\frac{1}{2}$ 的情形，这个 J_z 值对应 H 的两个本

征态，每个都是矢量 $|0\,\frac{1}{2}\rangle$ 和 $|1\,\frac{1}{2}\rangle$ 的线性组合，为了在这两个矢量所张的子空间中求解 $H(t)$ 的本征值问题，我们取这两个矢量为基矢，此时 $H(t)$ 表示成矩阵

$$A\hbar^2\begin{pmatrix} -\rho & \frac{1}{2}\sqrt{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

如果引入泡利矩阵 $\vec{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$，上述矩阵可以写成特别方便的形式：

$$H(t)=\frac{1}{4}A\hbar^2[(-2\rho-1)+\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}], \quad (17.115)$$

矢量 $\boldsymbol{b}$ 的分量是

$$b_x=2\sqrt{2}, \quad b_y=0, \quad b_z=1-2\rho.$$

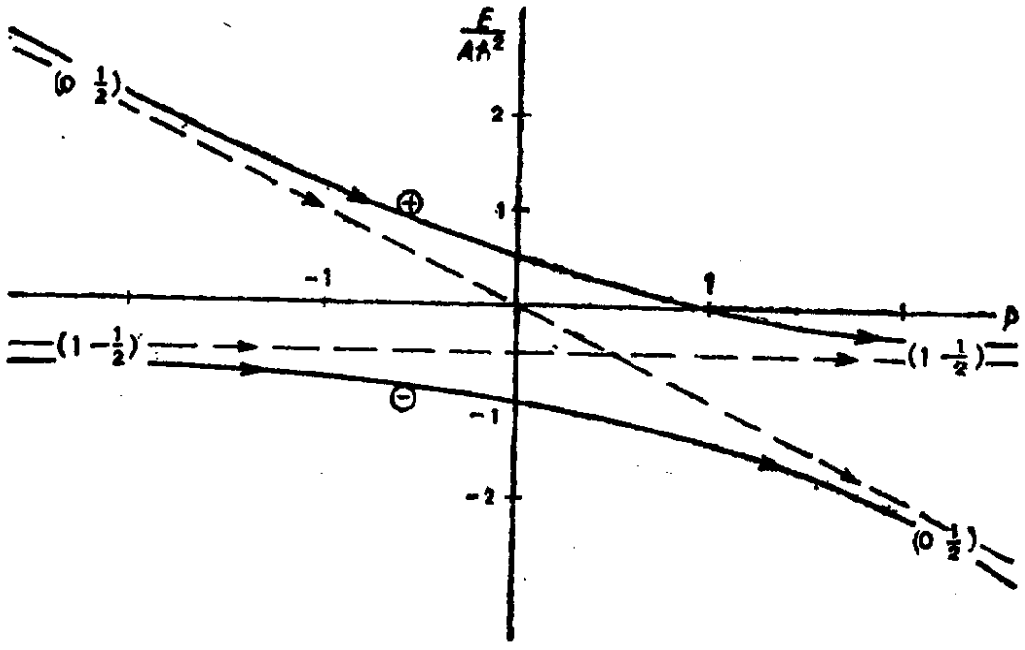


图 17.4 $M_J=\frac{1}{2}$ 的两个 ^2P 能级在磁场倒向时的演化(符号同图 17.3)，实线表示绝热倒向，虚线表示迅速倒向的情形

我们还引入沿着 $\boldsymbol{b}$ 的单位矢量 $\boldsymbol{u}$:

$$\boldsymbol{b} = b\boldsymbol{u} \qquad b = \sqrt{8 + (1 - 2\rho)^2}$$
$$\boldsymbol{u} = \left(\frac{2\sqrt{2}}{b}, 0, \frac{1 - 2\rho}{b}\right). \tag{17.116}$$

注意，矢量 $\boldsymbol{b}$ 和矢量算符 $\boldsymbol{\sigma}$ 从属的三维空间与普通的三维空间毫无关系；我们仅仅将它当作一种简单的数学技巧，以便用类似于普通空间那样的数学技巧推出某些性质.

从(17.115)和(17.116)，得到

$$H(t) = \frac{1}{4} A\hbar^2[(-1 - 2\rho) + b(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{u})], \tag{17.117}$$

因此 $H(t)$ 是算符 $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{u})$ 的函数，这使得相应的本征值问题易于求解：我们得到本征值 $\frac{1}{4} A\hbar^2(-1 - 2\rho \pm b)$ 和投影算子 $P_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{u})$. 用 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 表示相应的本征矢量. 它们可确定到只差一个位相待定，而此位相可由(17.106)的第一个条件来固定. 但是，往下的讨论并不涉及位相，我们这里就不去理会它了. 很容易求出这两个能级和投影算子作为参数 $\rho(t)$ 的函数的连续演化(图 17.3 和 17.4). 当 ρ 从 $-\infty$ 变到 $+\infty$ 时，本征矢量 $|+\rangle$ 从 $|0\,\frac{1}{2}\rangle$ 变到 $|1-\frac{1}{2}\rangle$(不计位相因子). 相应的能级沿着图 17.4 中双曲线的上面一支而变化；与此同时，本征矢量 $|-\rangle$ 从 $|1-\frac{1}{2}\rangle$ 变到 $|0\frac{1}{2}\rangle$，相应的能级沿着双曲线的下面一支而变化.

例如，设系统起始时是处在状态 $|0\,\frac{1}{2}\rangle$，若磁场倒向足

够慢，系统的态矢量总是等于 $|+\rangle$（不计位相因子），而且一旦磁场已倒向，系统就实际上处于 $|1\frac{1}{2}\rangle$ 态．此绝热变化适用性的判据可应用上节的讨论来确定．沿用同样的符号，我们得到[见关系式(17.112)]

$$\eta_+ = p_{+\to-} \lesssim \max\left|\frac{\alpha(t)}{\omega(t)}\right|^2 \ll 1, \qquad (17.118)$$

其中 $\omega(t)$ 是跃迁 $+\to-$ 的玻尔频率：

$$\omega(t) = \frac{1}{2}A\hbar b = \frac{1}{2}A\hbar\sqrt{8+(1-2\rho)^2},$$

$\alpha(t)$ 是 $|+\rangle$ 的速率在 $|-\rangle$ 上的投影，因此

$$|\alpha(t)| = |\langle -|(\mathrm{d}P_+/\mathrm{d}t)|+\rangle|$$
$$= \frac{1}{2}|\langle -|(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{u}/\mathrm{d}t|+\rangle|.$$

因为 $\mathrm{d}\boldsymbol{u}/\mathrm{d}t$ 是垂直于 $\boldsymbol{u}$ 的矢量，并且 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 是 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{u})$ 的本征矢量，所以有

$$|\alpha(t)| = \frac{1}{2}\left|\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}}{\mathrm{d}t}\right| = \frac{\sqrt{8}}{8+(1-2\rho)^2}\left|\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}\right|.$$

若磁场是按线性规律 (17.62) 倒向，则当 $\rho = +\frac{1}{2}$ 时 $|\alpha/\omega|$ 达到极大，即

$$\max\left|\frac{\alpha}{\omega}\right| = \frac{1}{2}\frac{\mu_B\mathscr{H}_0}{A\hbar^2}\times\frac{1}{A\hbar T}.$$

如果

$$T' = \frac{2A\hbar^2}{\mu_B\mathscr{H}_0}T \gg (1/A\hbar). \qquad (17.119)$$

则条件(17.118)可实现．T' 是磁耦合能 $\mu_B\mathscr{H}$ 从 $-2A\hbar^2$ 变到 $2A\hbar^2$ 所必需的时间．这段时间内，$|+\rangle$ 基本上从 $|0\frac{1}{2}\rangle$

状态转到 $|1-\frac{1}{2}\rangle$ 状态. 公式(17.119)表明这段时间要比作为跃迁+→−的特征的周期 $1/A\hbar$ 长.

将绝热变化的这一条件和迅速变化的条件 (17.64)作一比较是很有意思的,事实上,后者是一个过分严格的条件. 它是态矢量在磁场倒向的整个时间 T 内保持不变的必要条件,但是,除了上面定义的那段时间 T' 以外,哈密顿量的本征矢量在这段时间内是保持不变的,而系统的态矢量只不过乘了一个相因子而已. 在磁场倒向这段时间内,为了使力学状态本身保持不变,也就是说为了态矢量(除了相因子以外)保持不变,只要在 H 的本征矢量发生转动的那段时间 T' 内,迅速变化条件能以实现就足够了,也就说

$$T' \ll \frac{1}{A\hbar} \tag{17.120}$$

就足够了. (见问题 17.8)

练 习 和 问 题

1. 令 u_1 和 u_2 是两个相互正交的本征态,它们与某个系统的哈密顿量 H_0 的一个两重简并能级相对应. 引入常微扰 V 可消除简并,并使能级分成距离为 ε 的两能级. 假定系统起始时处于状态 u_1,在一段时间 T 内引入微扰 V. 设 $W_{1\to 2}$ 是去掉微扰以后找到系统处在 u_2 态的几率. 试证明 $W_{1\to 2}$ 是 T 的角频率为 $\varepsilon/\hbar$ 的周期函数,并让实在 $\varepsilon T \ll \hbar$ 的极限下所得到的是一级微扰理论的结果. 不论 T 是怎样,$W_{1\to 2}$ 可以忽略的条件是什么?

2. 氢原子受到振荡电场 $\mathscr{E} = \mathscr{E}\cos\omega t$ 的作用,其圆频率 ω 大于氢原子电离频率 $me^4/2\hbar^3$,若氢原子起始时处于基态,试求单位时间内跃迁到电离态的几率(假定电离态可用平面单色波表示). 在此激发过程中反射的电子的角分布如何?[注意: 此处描述的过程就是光电效应,因而得到的是一种对光电效应的电磁场未量子化的半经典处理,其结

果与量子化了的电磁场所得的正确结果相同（见问题 21.12）].

3．在 β 衰变中，原子核发射一个速度通常接近光速 c 的电子，而且其电荷从 Z_e 变为 $(Z+1)e$，说明这个跃迁过程对于其他电子的效果可以作为突然近似处理．将此方法应用于氚 H^3（$\equiv$1 质子 +2 中子）蜕变成 He^3（$\equiv$1 中子 +2 质子），这时蜕变电子的平均动能只有 16 kev（$mc^2 = 500$kev）．氚原子起始时处于基态，衰变后，He^+ 离子处于 $1s$ 态、$2s$ 态，$l \neq 0$ 态的几率各是多少？

4．设 $H(t)$ 是一非保守系的哈密顿量，假定有一个与时间无关的矢量 $|u\rangle$ 满足方程式 $H(t)|u\rangle = \varepsilon(t)|u\rangle$．证明矢量

$$\exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\varepsilon(\tau)\mathrm{d}\tau/\hbar\right)|u\rangle$$

满足此系统的薛定谔方程．

5．令 $p_1, p_2, \cdots, p_j, \cdots$ 是正交投影算子的一个完全集．假定其中每一个都是参量 s 的连续、可微分的函数，而且当 s 变化时，正交和封闭关系仍保持：

$$P_jP_k = \delta_{jk}P_k \qquad \Sigma_jP_j = 1.$$

证明算符

$$K(s) \equiv \mathrm{i}\hbar\Sigma_j(\mathrm{d}P_j/\mathrm{d}s)P_j \equiv -\mathrm{i}\hbar\Sigma_jP_j(\mathrm{d}P_j/\mathrm{d}s)$$

是厄密的，并且服从对易关系 (17.75)，再证明它还满足等式

$$P_jKP_j = 0 \quad (j = 1,2\cdots)$$

$$P_jKP_k = \mathrm{i}\hbar P_j(\mathrm{d}P_k/\mathrm{d}s)P_k = -\mathrm{i}\hbar P_j(\mathrm{d}P_j/\mathrm{d}s)P_k.$$

6．$p_j(s)(j = 1, 2\cdots)$ 如前题所设，证明算符

$$H(s) = \Sigma_j\varepsilon_j(s)P_j(s),$$

的导数服从方程式

$$P_j(\mathrm{d}H/\mathrm{d}s)P_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_j)P_j(\mathrm{d}P_k/\mathrm{d}s)P_k + \delta_{jk}(\mathrm{d}\varepsilon_k/\mathrm{d}s)P_k.$$

其中 $\varepsilon_j(s)$ 是 s 的可微分的函数．

由此导出方程 (17.109) 所定义的角速度 $\alpha_{ji}(t)$ 也可以由关系式

$$\alpha_{ji}(t) = \frac{-1}{\hbar\omega_{ji}(t)}\,{}_t\langle j|\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}|i\rangle_t \quad (j \neq i).$$

给出．

7．一固定大小的均匀磁场 $\mathscr{H}$ 以不变的角速度 α 绕某一轴转动（此轴与它成 θ 角），在此磁场中放入一个自旋为 J 的无限重的粒子．我们取 $\hbar = 1$，用 $u(t)$ 表示平行于磁场的单位矢量，并取 $\gamma = \mu\mathscr{H}$，其中 μ 是粒子的迴磁比．因此自旋 J 的运动由哈密顿量 $H(t) = -\gamma \times (J \cdot u)$ 决定．令 $t = 0$ 为起始时刻，J_0 是 J 沿 $u(0)$ 方向的分量，J_z 是沿磁场转动轴方向的分量．

构造出给定“转轴”的么正算符，然后证明在薛定谔表象中的演化算符精确地由下式给出：

$$U(t) = \exp(-i\alpha J_z t)\exp[i(\gamma J_0 + \alpha J_z)t].$$

对此例证实绝热定理，用直接计算和用 §13 的方法证明绝热近似适用性判据是 $(\alpha\sin\theta/\gamma)^2 \ll 1$．

8．我们考虑 § 14 中定义的系统的薛定谔方程在 $M_J = \frac{1}{2}$ 时的情形．令 $\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}$ 是在该节定义的表象中此方程解的分量，取 $t_0 = -\frac{1}{2}T$ 并令

$$T' = 2A\hbar^2 T/\mu_B\mathscr{H}_0 (\ll T) \quad \kappa = 4/A\hbar T'.$$

证明：

$$u = y\exp(-i\kappa\xi^2) \quad v = i(dy/d\xi)\exp(-i\kappa\xi^2),$$

其中 y 是变量 $\xi = A\hbar t/\sqrt{2}$ 的函数，并满足方程

$$y'' - \frac{1}{2}i\left(\sqrt{2} + 4\kappa\xi\right)y' + y = 0.$$

如果我们取 $x = \xi + (\sqrt{2}/4\kappa)$，则此方程的通解可以写成

$$y = A_0 F\left(\frac{i}{4\kappa}\middle|\frac{1}{2}\middle| i\kappa x^2\right) + A_1 x F\left(\frac{1}{2} + \frac{i}{4\kappa}\middle|\frac{3}{2}\middle| i\kappa x^2\right).$$

始态是 $|0\ \frac{1}{2}\rangle$，用超越几何函数的渐近形式证明：在 T 时间间隔末尾，系统仍处在同一状态的几率 $\tilde{\omega}$ 由下式［当 $T \gg (T'/A\hbar)^{1/2}$ 时才适用］给定：

$$\tilde{\omega} = \left(\frac{1-\gamma}{1+\gamma}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad \gamma = \tanh\frac{\pi}{4\kappa}.$$

证实条件(17.119)和(17.120)实际上分别对应于绝热变化和迅速变化.

第十八章　变分法及有关问题

1. 里兹变分法

除了只能在很窄的范围内应用的 WKB 方法之外，还有两种近似地解分立谱能级和波函数的基本方法：微扰法(十七章)和变分法，本章专门讲变分法.

变分法是一种非常普遍的方法，只要方程式能够写成变分形式就能应用，它所涉及的原理如下所述. 待求的解属于某个函数空间 $\mathscr{F}$，设 Ψ 是该空间的一任意函数，假定所要求的方程的解是在 $\mathscr{F}$ 中的，能使某个泛函 $Q[\Psi]$ 是稳定的函数，所以，这个方程就等价于变分方程

$$\delta Q = 0. \tag{18.1}$$

里兹变分法则是在比 $\mathscr{F}$ 空间更受限定的 $\mathscr{F}'$ 空间的函数中寻找(18.1)式的解.

例如，假定 $\mathscr{F}$ 是一给定的量子体系的全部波函数的集合，则 $\mathscr{F}'$ 可为那些特定波函数 $\Phi(a,b,c)$ 的子集，$\Phi(a,b,c)$ 用一定数目的连续参数来标记，并且只张成 $\mathscr{F}$ 空间的一部分，作为 Φ 的泛函，Q 这个量就简化为变分参量 $a, b, \cdots$ 的简单函数：

$$q(a,b,\cdots) = Q[\Phi(a,b,\cdots)].$$

每一组使这函数是稳定的数值 $a_0, b_0, \cdots$ 确定了方程式(18.1)的一个近似解 $\Phi_0(a_0, b_0, c_0, \cdots)$.

这个方法成功的关键在于选择试探波函数空间 $\mathscr{F}'$，试探波函数既要足够简单以利于计算，但又必需在一个相当大或一个选择得合适的范围内变化，使得到的解接近精确解.

实际上，Q 的稳定值具有确定的物理意义，变分法的一个主要优点是对这些量自动地提供了一种精确估算，很明显，近似解 Φ_0 越接近于精确解 Ψ_0，则 $Q[\Phi_0]$ 和 $Q[\Psi_0]$ 之间的差值越小；另外由于 $Q[\Psi]$ 在 $\Psi = \Psi_0$ 点取稳定值，这个差和 Φ_0 与 Ψ_0 之差相比是高阶无穷小，所以变分法对于那些能够取泛函稳定值形式的量的计算是非常有用的，尤其是对于束缚态能级的计算. 在第十九章我们将看到：它还能够应用于计算散射振幅.

本章第 I 段讲述用变分法计算分立谱能级，另外两段我们用或多或少与变分法直接有关的方法处理两个重要问题：用哈特里方法和福克-狄拉克方法确定复杂原子在中心场近似下的波函数（第 II 段）；以及在玻恩-奥本海默绝热近似下处理分子（第 III 段）.

I. 对束缚态的变分法

2. 本征值问题的变分形式

在用变分法确定束缚态时，所用的稳定值泛函是能量的平均值. 我们要证明以下的定理[1]：

定理：设 H 为量子体系的哈密顿量，而 $E[\Psi]$ 为其能量的平均值

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \tag{18.2}$$

这个平均值可看成是态矢量空间的矢量的泛函，则任何使此平均值为稳定值的态矢量是 H 的分立谱的本征矢量，反之亦

1) 这个定理对于希尔伯特空间的厄密算符的分立谱而言是普遍成立的，在以下的证明中只用到了 H 的厄密特性.

然，相应的本征值就是泛函 $E[\Psi]$ 的稳定值.

要注意，这里引入的矢量 $|\Psi\rangle$ 具有**有界的模方**：函数空间$\mathscr{F}$（§1 的定义)就是系统的力学状态的希尔伯特空间. 因此这定理指出：在此希尔伯特空间中，H的本征函数就是变分方程

$$\delta E = 0. \tag{18.3}$$

的解.

还应注意，泛函 $E[\Psi]$ 与 $[\Psi]$ 的模方和位相都无关，因此附加到这两个量上的任何条件都不影响此定理的有效性，特别是，有时为了方便，将 $|\Psi\rangle$ 的变化范围限制为模方为 1 的矢量，正如本章的某些例子中所做的那样.

定理的证明

计算 $E[\Psi]$ 的变分，我们得到

$$\begin{aligned}\langle\Psi|\Psi\rangle\delta E &= \delta(\langle\Psi|H|\Psi\rangle) - E\delta(\langle\Psi|\Psi\rangle)\\ &= \langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle + \langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle.\end{aligned}$$

因此，只要 $\langle\Psi|\Psi\rangle$ 保持有限并不等于零，方程式 (18.3) 就等效于

$$\langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle + \langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle = 0. \tag{18.4}$$

刃矢 $|\delta\Psi\rangle$ 是 $|\Psi\rangle$ 的变分，刁矢 $\langle\delta\Psi|$ 是 $|\Psi\rangle$ 的共轭刁矢的变分，因此变分 $|\delta\Psi\rangle$ 和 $\langle\delta\Psi|$ 是不独立的. 然而它们可以被当作独立的来处理. 由于方程式(18.4)对任意的无穷小刃矢 $|\delta\Psi\rangle$ 都成立，我们可以将 $|\delta\Psi\rangle$ 换成 $i|\delta\Psi\rangle$，于是得到第二个方程式：

$$-i\langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle + i\langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle = 0,$$

取 (18.4) 和 (18.5) 的线性组合，我们可以导出两个等效的方程.

$$\langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle = 0,\ \langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle = 0.$$

如果我们承认 $|\delta\Psi\rangle$ 和 $\langle\delta\Psi|$ 是任意的并且是独立的[1]，则这两个方程与单个方程(18.4)等价.

于是我们有二个关系式

$$(H-E)|\Psi\rangle=0,\quad \langle\Psi|(H-E)=0,$$

也就是

$$(H-E[\Psi])|\Psi\rangle=0 \tag{18.5a}$$

$$(H^{\dagger}-E^{*}[\Psi])|\Psi\rangle=0. \tag{18.5b}$$

现在H是厄密的 $(H=H^{\dagger})$，所以关系式 (18.5a) 和 (18.5b) 是等同的. 因此方程式 (18.3) 和 (18.5a) 是等效的：所以任何使 E 取极值的刃矢 $|\Psi_1\rangle$ 是H的本征值为 $E[\Psi_1]$ 的本征刃矢.

反过来，令 $|\Psi_1\rangle$ 是一个模方有界的本征刃矢，E_1 是其对应的本征值:

$$H|\Psi_1\rangle=E_1|\Psi_1\rangle.$$

用 $\langle\Psi_1|$ 从左边标量相乘上式，得到

$$E_1=E[\Psi_1].$$

因此 $|\Psi_1\rangle$ 满足方程式 (18.5a)，而且也满足方程式 (18.5b)，因为H是厄密的并且 E_1 是实数，因此当 $\Psi=\Psi_1$ 时，$E[\Psi]$ 的确取稳定值. 证毕.

本基本定理由下列引理补充:

引理. 不论系统的力学状态如何，其能量平均值等于或大于基态的能量:

$$E[\Psi]\geqslant E_0. \tag{18.6}$$

为了证明此不等式，只要在H是对角的表象中计算出上式左右两边的差值就可以了. 为了书写简单，假定H的谱整个都

---

1) 这是一个普遍的规则，其原因在于这个事实：方程 (18.4) 是 $|\delta\Psi\rangle$ 和 $\langle\delta\Psi|$ 的一个线性关系式，而在刃矢和刁矢之间的对应关系是反线性关系.

是分立的. 令 $E_0, E_1, \cdots, E_n, \cdots$ 是顺序增高的能级，而 $P_0, P_1, \cdots, P_n, \cdots$ 是到它们各自的子空间上的投影算子，利用等于 1 的分式，我们得到

$$E[\Psi] - E_0 = \frac{\langle \Psi | (H - E_0) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} (E_n - E_0) \frac{\langle \Psi | P_n | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}.$$

因为在此求和式中的每一项都大于或等于零，所以本身也是如此，这就证明了 (18.6) 式.

3. 分立能级的变分计算

在 §1 的普遍讨论中可以看出，把矢量 $|\Psi\rangle$ 的变化范围局限于态矢量空间的一部分，就能得到变分方程 (18.3) 的近似解. 如果这个局限的范围 $\mathscr{F}'$ 选择得好，我们可获得近似程度很好的 H 的某些本征矢，而且对应的能量本征值的近似程度就更好.

当试探波函数线性地依赖于变分参数时，也就是当 $\mathscr{F}'$ 也是一矢量空间时，这个方法显得特别简单. 于是 $\mathscr{F}'$ 是 $\mathscr{F}$ 的一个子空间，子空间的意义如通常使用的一样 (§7.2)

我们用 P 代表到 $\mathscr{F}'$ 的投影算子，用 Φ 代表 $\mathscr{F}'$ 中的任意矢量，用 H_P 代表哈密顿量到 $\mathscr{F}'$ 的投影:

$$H_P = PHP. \tag{18.7}$$

$E[\Phi]$ [定义 (18.2)] 等于 H_P 的平均值，但是，H_P 是厄密的，并且把 $\mathscr{F}'$ 中的矢量线性的变换为 $\mathscr{F}'$ 中的矢量，所以可以把它当作 $\mathscr{F}'$ 中的厄密算符，对它可以应用 §2 中的基本定理，因此变分方程

$$\delta E[\Phi] = 0 \tag{18.8}$$

等效于本征值方程

$$H_p\Phi = E\Phi. \tag{18.9}$$

在这里，变分的近似在于，把H的本征值问题变为同样类型但必定更易于求解的问题，因为是在更局限的空间求解。

注意它与微扰法（§16.8）的类似性，特别是，如果$\mathscr{F}'$是未微扰哈密顿量的一给定本征值的子空间，则变分法求出的能级与一级微扰计算得出的能级相同。

4. 一个简单的例子：氢原子

为了熟悉这个方法，现将它应用于计算氢原子的基态，并将结果与第十一章的精确解比较。

我们取

$$a_0 = \hbar^2/me^2 \quad E_H = \frac{1}{2}(e^2/\hbar c)^2 mc^2 \quad \rho = r/a_0.$$

因为我们是求角动量完全确定(l,m)的本征态，故取试探波函数的形式为

$$\Phi = a_0^{-3/2}\frac{u(\rho)}{\rho}Y_l^m(\theta,\varphi).$$

简单的计算得到：

$$E[\Phi] = -E_H\frac{\int_0^\infty u^*\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho}\right)u\,d\rho}{\int_0^\infty |u|^2 d\rho}.$$

我们只限于讨论s态$(l = m = 0)$，而对三种不同的试探波函数计算能量的稳定值：

$$u_1 = \rho e^{-b\rho}, \quad u_2 = \frac{\rho}{b^2+\rho^2}, u_3 = \rho^2 e^{-b\rho}.$$

每个试探波函数都仅仅依赖于一个参数b。每种情形下

的 $E[\Phi]$ 因而都归结为 b 的函数，而变分计算就在于求出此函数的极小值. 计算不难，其结果在表 18.1 中给出. 首先列出的是试探波函数的模方 $N^2=\langle\Phi|\Phi\rangle$ 作为 b 的函数的解析表示式和能量的平均值，然后是极小点的位置 $b_{\min}$ 和该点的 E_{var} 值. 将 E_{var} 和基态能量 $E_0=-E_H$ 作比较，并将近似解 Ψ_{var} 和基态波函数 Ψ_0 作比较是有意思的. 为此在表 18.1 中给出了归一化的径向部分 $(u/v)_{\text{var}}$，而对应的曲线画

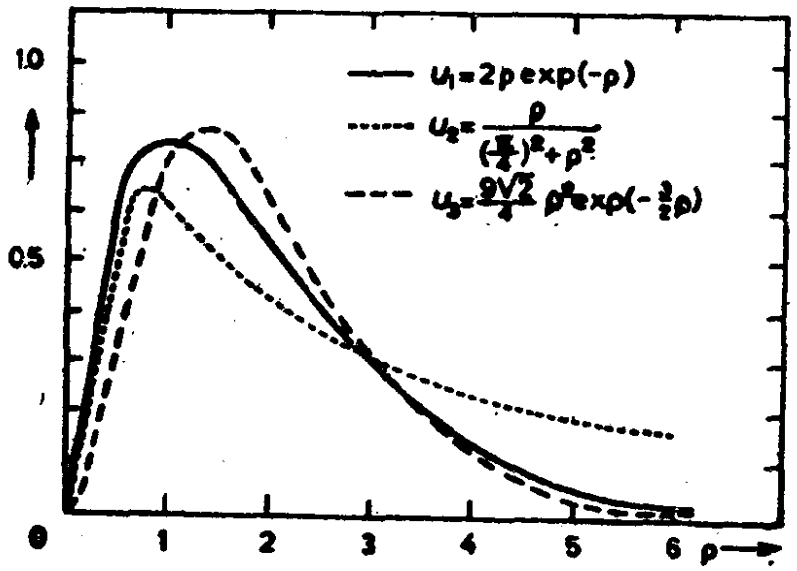


图 18.1 用 §4 的变分法计算的氢原子基态的归一化径向波函数

在图 18.1 中. 并且把它都和精确径向波函数 $2\rho e^{-\rho}$ 来比较. 表中还给出了相应于三种近似解 Ψ_{var} 的平均值 $\langle r\rangle_{\text{var}}$ 以及 $\varepsilon=1-|\langle\Psi_0|\Psi_{\text{var}}\rangle|^2$ 这个量. (假定 Ψ_0 和 Ψ_{var} 是归一化的)；ε 是 Ψ_{var} 和基态之间的差别的极好度量(它是 Ψ_{var} 的正交于 Ψ_0 的分量之振幅的模平方).

所有三种试探波函数都与基态波函数一样没有径向节点，因此可以期望它们更类似于基态波函数，而不是激发态波函数. 数值 E_{var} 更接近基态能量 $-E_H$，而不是其他能级

表 18.1　氢原子基态的变分计算

$u(b,\rho)=$	1	2	3
	$\rho e^{-b\rho}$	$\frac{\rho}{b^2+\rho^2}$	$\rho^2 e^{-b\rho}$
$N^2=$	$1/4b^3$	$\pi/4b$	$3/4b^5$
$E(b)/E_H=$	b^2-2b	$(\pi-8b)/2\pi b^2$	$\frac{1}{3}b^2-b$
$b_{min}=$	1	$\frac{1}{4}\pi$	$\frac{3}{2}$
$E_{var}=$	$-E_H$	$-0.81E_H$	$-0.75E_H$
$\frac{E_{var}-E_0}{E_1-E_0}=$	0	0.25	0.33
$(u/N)_{var}=$	$2\rho e^{-\rho}$	$\rho\left[\left(\frac{1}{4}\pi\right)^2+\rho^2\right]^{-1}$	$\frac{1}{4}\times 9\sqrt{2}\,\rho^2 e^{-\frac{3}{2}\rho}$
$\langle r\rangle_{var}=$	$1.5a_0$	∞	$1.66a_0$
$\varepsilon=1-\lvert\langle\Psi_0\lvert\Psi_{var}\rangle\rvert^2=$	0	0.21	0.05

$\left(\text{第一激发态能级 } E_1=-\frac{1}{4}E_H\right)$.为了证明这些预言的正确性,在表18.1的每个 E_{var} 值下面列出相应的比值$(E_{var}-E_0)/(E_1-E_0)$，对于基态能量的变分计算的误差，它是一种很好的量度．最好的结果是由试探波函数 u_1 得出的，它得到精确的基态波函数和本征值；注意到 u_1 在原点与 s 态波函数有相同的行为$(\propto\rho)$,并有相同的指数衰减型的渐近行为（对于库仑场以外的吸引势场,我们就不会得到精确的波函数,但结果仍然是出色的)． 函数 u_2 在原点的行为是合适的，但其渐近行为完全与精确解的不同．它给出的 $E_{var}=-0.81E_H$ 还令人满意．与此相反，u_3 在原点有很不正确的行为$(\propto\rho^2)$,但在无穷远处却正确地按指数下降，给出的结果就差一些．考察数量 $\langle r\rangle_{var}$ 和 ε 表明： 整体而言，u_3 要比 u_2 更接近精确

解，但得出的能级结果反而较差，这一事实突出地说明：在原点处的行为对于计算能量的重要性，这一点本质上是由于势场的吸引特性造成的.

5. 讨论　应用于激发能级的计算

变分法是非常有力的一种方法，但是评定其结果的意义却很困难.

没有一种确实可靠的方法能知道它给出的近似值是对那个能级的，更无法估算误差. 然而，通过把所得的 Ψ_{var} 的一般形式和精确解对比(节点数，在原点和在无穷远点的行为)，或者至少与我们对精确解的先验知识比较，常常可以对第一个问题作出回答. 实际上，总是选择简单的解析形式以及很有限数目的振荡(或节点)的试探波函数. 因此它完全有可能接近于基态.

上面的讨论说明**变分法特别适合于基态能级的计算**，它给出该能级的上限值(引理 18.6). 遗憾的是没有一种可靠的方法来估算误差的数量级(参看问题 18.1). 一切都和试探波函数的选择和灵活性有关，也就是依赖于函数空间 $\mathscr{F}'$ 的选择和扩展范围.

由于需要更复杂的试探波函数和难以解释结果，特别是难以知道误差的大小和符号，使得变分法更难用于计算激发态能级. 但是有两种情形，这样计算是可行的.

第一种情形. 当基态波函数 Ψ_0 已知时，试探波函数可以在与 Ψ_0 正交的波函数中选择，此时，泛函 $E[\Phi]$ 至少等于第一激发态能量 E_1:

$$E[\Phi] \geqslant E_1. \tag{18.10}$$

因而变分法给出 E_1 的上限(见问题 18.2). 如果基态的精确解未知，但我们却有一个近似解 Φ_0 (例如由变分计算求得).

此时，只要 Φ_0 和 Ψ_0 相差很小，即如果

$$\varepsilon_0 = 1 - |\langle \Psi_0 | \Phi_0 \rangle|^2 \ll 1,$$

我们就可以由与 Φ_0 正交的试探波函数出发，应用变分法计算 E_1.（Ψ_0，Φ_0 的模方为 1），对应于稳定值的解 Φ_1（假定其模方为1）不再与 Ψ_0 正交，并可能违反不等式 (18.10)，但是必需有(问题 18.3)

$$|\langle \Phi_1 | \Psi_0 \rangle|^2 < \varepsilon_0. \tag{18.11}$$

由此有

$$E[\Phi_1] \geqslant E_1 - \varepsilon_0(E_1 - E_0). \tag{18.12}$$

第二种有利情况是当 H 具有某些对称性时. 例如假定 H 有转动不变性，因而本征函数和本征值可以按量子数 j，m 分类，令角动量 (jm) 的诸函数张成一空间 $\mathscr{E}(jm)$. 我们可以在 $\mathscr{E}$ 中选择一试探波函数，由变分法计算各 (jm) 能级，特别是对其中最低的能级，变分法自然会得出其上限值（问题 18.4).

6. 氦原子基态

在本节内，我们应用变分法计算氦原子以及更普遍的如 Li^+，Be^{++} 等等 $(Z-2)$ 次离化原子的基态能级，同样的问题已在 §16.4 中用微扰法处理过. 除非特别指明，我们将沿用同样的符号.

我们把微扰理论给出的零级近似波函数作为试探波函数：

$$\Phi_a(r_1, r_2) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-(r_1+r_2)/a}.$$

所不同的是这里把 a 作为变分参数，而不是给定值 a_0/Z.

试探波函数模方是 1，能量平均值是

$$E(a)=\langle\varphi_a|H|\varphi_a\rangle=\iint\varphi_a^*(H\varphi_a)\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2.$$

系统的哈密顿量可写成这样的形式

$$H=k_1+k_2+v_1+v_2+V_{12},$$

其中 $k_i(i=1,2)$ 表示第 i 个电子的动能，$v_i=Ze^2/r_i$ 是它和原子核的相互作用，V_{12} 是两个电子之间的相互作用，因此 $E(a)$ 是这五个算符的平均值的总和。注意到波函数 φ_a 能写成 $\varphi_a=f_a(\boldsymbol{r}_1)f_a(\boldsymbol{r}_2)$ 的形式，这些量的计算可以大大简化，其中 $f_a(\boldsymbol{r})$ 是一个电子在电荷 $Z'e$ 的库仑场中的基态本征函数，

$$Z'=a_0/a$$

由此得到这个电子的总能量是 $-Z'^2E_H$，动能的平均值为 $+Z'^2E_H$，位能的平均值为 $-2Z'^2E_H$（问题 11.1）。于是，

$$\langle\varphi_a|k_i|\varphi_a\rangle=Z'^2E_{\mathrm{H}},$$

$$\langle\varphi_a|v_i|\varphi_a\rangle=-2Z'^2E_{\mathrm{H}}(Z/Z')=-2ZZ'E_{\mathrm{H}}.$$

§ 16.4 的计算（公式 16.17—20）仍然成立而给出：

$$\langle\varphi_a|V_{12}|\varphi_a\rangle=\frac{5}{4}Z'E_{\mathrm{H}},$$

由此有

$$E(a)=2E_{\mathrm{H}}\left(Z'^2-2\left(Z-\frac{5}{16}\right)Z'\right).$$

这个式子可看作是 a 的函数，或者等效地看成 Z' 的函数，当

$$Z'=Z-\frac{5}{16}\qquad(18.13)$$

时，它有极小值，此极小值是

$$E_{\mathrm{var}}=-2\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2E_{\mathrm{H}}.\qquad(18.14)$$

在 § 16.4 中的表 1（第五列）中列出了对应于 He，Li^+，Be^{++}

的 E_{var} 的数值，将这些值与一级微扰计算值比较是有意思的。注意到

$$E_{var} = -2Z^2E_H + \frac{5}{4}ZE_H - \frac{25}{128}E_H$$

$$= E_{pert} - \frac{25}{128}E_H,$$

因此所得数值要比微扰计算得出的数值小一个与 Z 无关的量：

$$\frac{25}{128}E_H = 2.64\text{eV}.$$

这正是一个如我们所期望的较好的近似。尽管如此，E_{var} 仍然大于实验值，与不等式 (18.6) 一致。

变分法得出的本征函数有简单的物理解释，它表示两个独立的粒子在电荷为 $Z'e$ 的库仑场中运动，其中 $Z'e$ 由(18.13)式给出。这个电荷比核电荷少 $\frac{5}{16}e$，在此近似中，这差值表示在核电荷场中运动的每个电子所感受到的、由于其他电子的存在而产生的屏蔽作用。

增加试探波函数的灵活性可以获得更加接近精确本征值的 E_{var}，实际上，可以不用只有一个变分参数 a 的试探波函数，而采用 φ_a 与 r_1，r_2 和 r_{12} 的一定幂次的多项式的乘积，多项式的系数也都作为变分参数，所得的 E_{var} 值随多项式复杂性的增加而逐渐地减少，而且趋近于精确值，Hylleraas 曾经用这方法得到与实验非常一致的理论值[1]。

---

1) Hylleraas, *Zeit. f. Phys.* **65** (1930) 209: 在 Condon 和 Shortry 的原子光谱理论 (*Theory of Atomic Spectra*) (Cambridge, 4*thed*, 1957) 345 页给出了 Hylleraas 计算的详细结果，Hylleraas 方法收敛得很快，有八个变分参数的计算值稍微小于实验值，明显地和不等式(18.6)矛盾. 事实上由于相对论效应(可以估算)，实验值 E_{exp} 稍稍大于 H 的基态本征值 E_0. Hylleraas 方法是计算 E_0(不是 E_{exp}) 的非常精确的方法.

II. 哈特里和福克-狄拉克原子

7. 自洽场法

我们已经给出了量子力学处理复杂原子的大致的轮廓. 从独立粒子近似入手，各个粒子都独立地在核的吸引作用和其他电子的平均排斥作用的势场中运动. 在此近似中，用某一个斯莱特行列式表示原子波函数，它应选得尽可能接近原子的薛定谔方程的精确解，最好的选择是用变分法以任意一个斯莱特行列式 Φ 作试探波函数而得到的波函数. 变分法的这种十分重要的特殊情形称为自洽场方法. 这里我们阐述其主要步骤而不去详细计算[1].

这个方法不仅应用于原子，也可应用到分子中或固体中的电子，更普遍地讲，可应用到任何外场中的全同粒子体系，虽然本节都以原子为例，但下面的处理是立即可以应用到更普遍的情形的.

8. $E[\Phi]$ 的计算

Z个电子系统的哈密顿量写成

$$H = H_1 + H_2 \tag{18.13}$$

$$H_1 = \sum_{i=1}^{Z} h^{(i)}, \quad h^{(i)} = \frac{\boldsymbol{p}^{(i)2}}{2m} + V(\boldsymbol{r}^{(i)}) \tag{18.14}$$

$$H_2 = \sum_{i<j} w^{(ij)}. \tag{18.15}$$

---

1) 关于此方法的详细处理和实际应用，参考 D. R. Hartree, *The Calculation of Atomic Structures* (Wiley, 1957). 也可参考 Condon 和 Shortley 上页注中的引文.

第一项 H_1，包括动能和外场(原子核的电场)的势能，它是 Z 个相同的单个粒子的哈密顿量之和，第二项 H_2 是诸电子的相互作用能，即 $\frac{1}{2}Z(Z-1)$ 个相同项之和，每一项代表一对电子之间的相互作用能；$w^{(ij)}$ 是第 i 个和第 j 个电子之间的势能．如果忽略与自旋有关的力，则 $w^{(ij)}$ 就是静电排斥势：

$$w^{(ij)} = e^2/r_{ij}(r_{ij} \equiv |r_i - r_j|). \tag{18.16}$$

以下的处理与 $w^{(ij)}$ 的具体形式无关，我们简单地假设 $w^{(ij)}$ 只是第 i 和第 j 个电子的力学量的函数，并且这个函数对于置换 (ij) 是对称的．

因为 $E[\Phi]$ 与试探波函数 Φ 是否归一化无关，通常总是将它归一．利用第十四章的符号，我们将它写成

$$|\Phi\rangle \equiv (Z!)^{\frac{1}{2}}A|\hat{\Phi}\rangle, \tag{18.17}$$

这里 A 是 (14.26) 所定义的反对称算子：

$$A \equiv \frac{1}{Z!}\sum_P (-)^P P, \tag{18.18}$$

而 $|\hat{\Phi}\rangle$ 是 Z 个任意的、正交的、单粒子的刃矢的张量积：

$$|\hat{\Phi}\rangle \equiv |\alpha\rangle^{(1)}|\beta\rangle^{(2)}\cdots|\zeta\rangle^{(Z)} \equiv |\alpha^{(1)}\beta^{(2)}\cdots\zeta^{(Z)}\rangle \tag{18.19}$$

$$\langle\lambda|\mu\rangle \equiv \delta_{\lambda\mu} \quad (\lambda,\mu = \alpha,\beta,\cdots,\zeta). \tag{18.20}$$

于是归一化条件自动满足

$$\langle\Phi|\Phi\rangle = 1. \tag{18.21}$$

$E[\Phi]$ 是 H_1 和 H_2 的平均值之和，它们的计算是比较容易的，因为 H_1 和 H_2 对置换是不变的，又与 A 对易，并且 A 是一投影算子 $(A^2 = A)$．

H_1 的平均值依次地变为

$$\langle H_1\rangle \equiv \langle\Phi|H_1|\Phi\rangle = Z!\langle\hat{\Phi}|H_1 A|\hat{\Phi}\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{Z} \sum_{P} (-)^P \langle \hat{\Phi} | h^{(i)} P | \hat{\Phi} \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{Z} \langle \hat{\Phi} | h^{(i)} | \hat{\Phi} \rangle .$$

将 $|\hat{\Phi}\rangle$ 用其定义(18.19)代入，最后一式变成

$$\langle H_1 \rangle = \sum_{\lambda} \langle \lambda | h | \lambda \rangle \quad (\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta). \tag{18.22}$$

于是 $\langle H_1 \rangle$ 正好是单个粒子哈密顿量 h 在被电子占据的 Z 个量子态中的平均值之和.

类似地，$\langle H_2 \rangle$ 可以写成算符 w 在两个量子态之间的矩阵元之和的形式，依次地有

$$\langle H_2 \rangle = \langle \Phi | H_2 | \Phi \rangle = Z! \langle \hat{\Phi} | H_2 A | \hat{\Phi} \rangle$$

$$= \sum_{i<j} \sum_{P} (-)^P \langle \hat{\Phi} | w^{(ij)} P | \hat{\Phi} \rangle$$

$$= \sum_{i<j} \langle \hat{\Phi} | w^{(ij)} (1 - P_{(ij)}) | \hat{\Phi} \rangle ,$$

即

$$\langle H_2 \rangle = \sum{}' (\langle \lambda^{(1)} \mu^{(2)} | w^{(12)} | \lambda^{(1)} \mu^{(2)} \rangle - \langle \lambda^{(1)} \mu^{(2)} | w^{(12)} | \mu^{(1)} \lambda^{(2)} \rangle), \tag{18.23}$$

求和 $\sum'$ 遍及 $\frac{1}{2} Z(Z-1)$ 对单粒子的状态 λ, μ; 它们可由 Z 个单粒子的状态 $\alpha, \beta, \cdots, \zeta$ 构成. 括号中的第一项是相互作用能对刃矢 $|\lambda^{(1)} \mu^{(2)}\rangle$ 的平均值，其中电子 1 在 λ 态，电子 2 在 μ 态; 第二项是**交换项**，即 w 在状态 $|\lambda^{(1)} \mu^{(2)}\rangle$ 和 $|\mu^{(1)} \lambda^{(2)}\rangle$ 之间的矩阵元[注意，交换项是实数，并且有

$$\langle \lambda^{(1)} \mu^{(2)} | w^{(12)} | \mu^{(1)} \lambda^{(2)} \rangle = \langle \mu^{(1)} \lambda^{(2)} | w^{(12)} | \lambda^{(1)} \mu^{(2)} \rangle .$$

这个特性源于 $w^{(12)}$ 是厄密的，并且在置换(12)下是不变的].

$\langle H_2 \rangle$ 也可以写成:

$$\langle H_2\rangle = \frac{1}{2}\sum_\lambda\sum_\mu(\langle\lambda^{(1)}\mu^{(2)}|w^{(12)}|\lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle$$
$$-\langle\lambda^{(1)}\mu^{(2)}|w^{(12)}|\mu^{(1)}\lambda^{(2)}\rangle)$$
$$(\lambda,\mu=\alpha,\beta,\cdots,\zeta). \tag{18.24}$$

最后得

$$E[\Phi]=\langle H_1\rangle+\langle H_2\rangle, \tag{18.25}$$

这里，$\langle H_1\rangle$ 和 $\langle H_2\rangle$ 是由公式(18.22)和(18.24)给出

9. 福克-狄拉克方程

在自洽场近似中，薛定谔方程的变分法解是能使 $E[\Phi]$ 对 Z 个正交矢 $|\lambda\rangle$ $(\lambda=\alpha,\beta,\cdots\zeta)$ 取极值的解。我们说 E 对服从 Z^2 个条件 (18.20) 的 Z 个矢量的变分是极值，也就等于说(拉格仑日乘子法)存在 Z^2 个能满足变分方程：

$$\delta E-\sum_\lambda\sum_\mu\varepsilon_{\lambda\mu}\delta\langle\mu|\lambda\rangle=0 \tag{18.26}$$

的常数 $\varepsilon_{\lambda\mu}(\lambda,\mu=\alpha,\beta,\cdots,\zeta)$。

Z^2 个常数 $\varepsilon_{\lambda\mu}$ 可以看成是某个 $Z\times Z$ 矩阵 ε 的元素。ε 是厄密矩阵。因为，由于 E 是实数，$\delta(E)$ 也是实数，我们可以从(18.26)的复共轭方程减去方程(18.26)，得到

$$\sum_\lambda\sum_\mu(\varepsilon_{\lambda\mu}-\varepsilon^*_{\mu\lambda})\delta\langle\mu|\lambda\rangle=0,$$

这就要求：

$$\varepsilon_{\lambda\mu}=\varepsilon^*_{\mu\lambda}.$$

Z 个矢量 $|\alpha\rangle,|\beta\rangle,\cdots,|\zeta\rangle$在单粒子量子态空间的某个子空间 $\mathscr{E}_\Phi$ 中构成一种正交基。这个子空间的基矢的变化的结果会使 $|\Phi\rangle$ 乘上一个位相因子。为了说明这一点，用 S 表示决定基矢变化的 $Z\times Z$ 么正矩阵，并用 $|\alpha'\rangle,|\beta'\rangle\cdots|S'\rangle$ 表示新的基矢

$$|\lambda'\rangle = \sum_\lambda |\lambda\rangle S_{\lambda\lambda'}.$$

根据熟知的行列式乘积的性质，Z 个新矢量的斯莱特行列式等于 Z 个旧矢量的行列式乘以 $\det S$，于是

$$|\Phi'\rangle = (\det S)|\Phi\rangle.$$

因为 S 是么正的，故 $|\det S| = 1$. 由此可知泛函 $E[\Phi]$在基矢改变时是不变量，而变分方程(18.26)决定了在基矢的这种变化范围内的序列 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \cdots |\zeta\rangle$.

从 (18.26) 式容易证明类似的方程

$$\delta E - \sum_\lambda \sum_\mu \varepsilon'_{\lambda\mu} \delta\langle\mu'|\lambda'\rangle = 0$$

也是正确的，其中 ε' 是 ε 经 $S^\dagger$ 变换后的矩阵.

$$\varepsilon'_{\lambda\mu} = (S^\dagger \varepsilon S)_{\lambda\mu}.$$

特别是，可以如此选择 S，而使 ε' 是对角的. 因为变分问题不会因为限制基矢的选择就改变，所以我们以后要求 ε 是对角的. 于是变分方程(18.26)变成

$$\delta E - \sum_\lambda e_\lambda \delta\langle\lambda|\lambda\rangle = 0. \qquad (18.26')$$

回到方程式 (18.22)，(18.24) 和 (18.25)，我们很容易算出 δE，而且 (18.26) 式左边成为有 $2Z$ 个变分 $\langle\delta\lambda|$ 和 $|\delta\lambda\rangle$ $(\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta)$ 的一种齐次线性组合的形式. 把这些变分看成是独立的 [参考本章 § 2 后一脚注]，并考虑到 H 的厄密性，让齐次式对这些变分的任何取值都等于零，便得出(这里不详细给出推导) Z 个正交矢量

$$|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \cdots, |\zeta\rangle,$$

的 Z 个方程组，即方程式

$$h^{(1)}|\lambda\rangle^{(1)} + \sum_\mu{}^{(2)}\langle\mu|w^{(12)}|\mu\rangle^{(2)}|\lambda\rangle^{(1)} - \sum_\mu{}^{(2)}\langle\mu|w^{(12)}|\lambda\rangle^{(2)}|\mu\rangle^{(1)} = e_\lambda|\lambda\rangle^{(1)} \qquad (I)$$

$$(\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta).$$

注意，左边最后两项没有 1/2 因子。等式两边点乘[1]$\langle\lambda|$ 并对 λ 求和，得出

$$\sum_\lambda e_\lambda = \langle H_1\rangle + 2\langle H_2\rangle = E[\Phi] + \langle H_2\rangle. \quad (18.27)$$

以后还要讨论这个关系式。

实际上，单粒子刃矢常用它们的波函数

$$u_\lambda(q) = \langle q|\lambda\rangle$$

表示，其中 $q = (r, m_s)$ 为空间和自旋坐标。

这里引入电子密度是方便的：

$$\rho(q,q') = \langle q|\rho|q'\rangle = \sum_\mu u_\mu(q)u_\mu^*(q'). \quad (18.28)$$

这是到前面定义的那个 $\mathscr{E}_\Phi$ 空间上的投影算符

$$\rho = \sum_\mu |\mu\rangle\langle\mu|$$

的矩阵表示，对角矩阵元

$$\rho(q) = \rho(q,q) = \sum_\mu |u_\mu(q)|^2 \quad (18.29)$$

是在 q 点找到电子的几率密度。

相互作用 $w^{(ij)}$ 是变量 $q^{(i)}, q^{(j)}$ 的某个对称的实函数，以后记成 $w(q^{(i)}, q^{(j)})$。取

$$W_{exc}(q,q') = \rho(q,q')w(q,q') \quad (18.30)$$

$$W(q) = \int \rho(q')w(q,q')\mathrm{d}q', \quad (18.31)$$

按惯例，$\int \mathrm{d}q'$ 表示对空间积分及对自旋求和。利用这些符号，(I) 表示一组积分微分方程组：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(q)\right]u_\lambda(q) + W(q)u_\lambda(q)$$

$$-\int W_{exc}(q,q')u_\lambda(q')\mathrm{d}q' = e_\lambda u_\lambda(q) \quad (II)$$

$$(\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta).$$

这些方程就是**福克-狄拉克积分微分方程**。

这组方程可以用迭代法求解。从密度的一个近似值 ρ_0 开始，代入 (18.30)和(18.31) 得到 W 和 W_{exc} 的近似值，将这些值代入 (II)，得到一个本征值方程，它的头一次的 Z 个解 $u_\alpha^{(1)}, \cdots, u_\zeta^{(1)}$ 给出新的密度值 ρ_1；从 ρ_1 开始并重复这些运算又得出新的密度值 ρ_2，如此等等。如果它收敛，则序列 $\rho_0, \rho_1, \rho_2, \cdots$ 趋向精确解 ρ。这里不讨论收敛的判据和收敛的速率。很明显，它们与 ρ_0 的选择有关。

10. 讨论

方程组 (II) 中的每个方程都和某个薛定谔方程类似，后者决定原子的 Z 个电子所占据的 Z 个单粒子态当中的一个。然而，这些并不是真正的本征值方程，因为算符 W 和 W_{exc} 与电子密度有关，从而本征解 $u_\alpha, u_\beta, \cdots, u_\zeta$ 包含在哈密顿量的定义式中。尽管如此，考察这些单粒子哈密顿量，并试图给它的各项以一种物理意义是有意思的。

为此目的，假设 $\rho^{(\lambda)}$ 为除 λ 态以外的 $(Z-1)$ 个态被占据时的电子密度：

$$\rho^{(\lambda)} = \sum_{\mu \neq \lambda} |\mu\rangle\langle\mu| = \rho - |\lambda\rangle\langle\lambda|,$$

$$\rho^{(\lambda)}(q,q') = \rho(q,q') - u_\lambda(q)u_\lambda^*(q'),$$

并在定义(18.30)和(18.31)式中用 $\rho^{(\lambda)}$ 代替 ρ，得到的表示式分别为 $W_{exc}^{(\lambda)}$ 和 $W^{(\lambda)}$。我们还引入 $|\lambda\rangle$ 态的电子产生的平均势 $X^{(\lambda)}$：

$$X^{(\lambda)}(q) = \int |u_\lambda(q')|^2 w(q,q')\mathrm{d}q'. \qquad (18.32)$$

$W^{(\lambda)}$ 是电子处于其余 $(Z-1)$ 个被占据态时所产生的平均势，而 W 是所有电子产生的平均势：

$$W(q) = W^{(\lambda)}(q) + X^{(\lambda)}(q).$$

方程组 (II) 中涉及 λ 态的方程可写成

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(q)\right]u_\lambda(q) + W^{(\lambda)}(q)u_\lambda(q)$$

$$-\int W^{(\lambda)}_{exc}(q,q')u_\lambda(q')dq' = e_\lambda u_\lambda(q) \qquad \text{(III)}$$

$$(\lambda = \alpha,\beta,\cdots,\zeta),$$

因 $W^{(\lambda)}(q)u_\lambda(q)$ 与 $W(q)u_\lambda(q)$ 差一"自能项" $X^{(\lambda)}(q)u_\lambda(q)$，而且

$$\int W^{(\lambda)}_{exc}(q,q')u_\lambda(q')dq'$$

$$= \int W_{exc}(q,q')u_\lambda(q')dq' - X^{(\lambda)}(q)u_\lambda(q).$$

用 (III) 的形式表达出在 λ 态的电子的"薛定谔方程"是容易解释的，哈密顿量表示电子在核和其他电子的平均场所合成的场中的能量，它有四项：动能 $-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}$，核势能 $V(q)$，由于其他 $(Z-1)$ 个电子的存在而有的平均势能 $W^{(\lambda)}(q)$，第四项也是来自其他电子，它代表 λ 态和其余 $(Z-1)$ 个被占据态之间的**交换效应**. 我们看到交换效应导致内积分核 $W^{(\lambda)}_{exc}(q,q')$ 所确定的非定域势.

这种解释假定本征值 e_λ 代表电子在 λ 态的能量. 由福克-狄拉克方程给出的 Z 个量 $e_\alpha, e_\beta, \cdots, e_\zeta$，作为一个很好的近似，实际上是原子的 Z 个电子的**电离能**. 但是，显然这些单粒子能量之和并不代表 Z 个电子系统的总能量. 在累加这些单粒子能量时，计及它们的动能一次，核位能一次，但是相互作用能算了两次. 为了得到总能量，还必须从中减去平均相互作用能，也就是数量 $\langle H_2\rangle$. 这个结果在前面已经得到 [公式 (18.27)].

11. 哈特里方程

如果在方程组 (III) 中忽略交换项，就得到一组简单得多的方程组：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(q) + W^{(\lambda)}(q)\right] u_\lambda(q) = e_\lambda u_\lambda(q) \qquad (\lambda = \alpha,\beta,\cdots,\zeta). \tag{IV}$$

哈特里仅仅靠直觉的论证而提出的这些方程式也能由变分法得到。如果我们用类似于方程式 (18.19) 中的那样的单粒子刃矢的简单乘积作为试探波函数，而不用公式(18.17)的那个反对称乘积 $|\Phi\rangle$，就能做到这点[1]。

哈特里方程和福克-狄拉克方程一样可以用迭代法求解。由于没有交换项，计算就大为缩短。然而这组方程的对称性不如福克-狄拉克方程，因为哈特里哈密顿量 $h + w^{(\lambda)}$ 对所有单粒子量子态是不相同的。这使得 Z 个哈特里方程的本征解不是相互正交的，而且在此方法的应用中引起了某些困难，这些困难就不在这里讨论了。

III. 分子的结构

12. 概论　电子运动和核运动的分离

一个分子是若干个原子的束缚态。因此它是由一定数目的原子核以及绕核运动的电子组成，找出这样一个复杂系统的定态，是一个很困难的问题，然而它有一个可使问题简化的特性：电子的质量比核的质量小很多，而它们受到的力的大

1) 这并未为这些方程的正确性提供一种有道理的解释，因为与刃矢 $|\Phi\rangle$ 不同，$|\hat{\Phi}\rangle$ 不属于系统的刃矢空间.

小都大致相当．因之，核的运动比电子运动慢得多，作为很好的近似，这两种运动——核运动和电子运动——可以分开来处理。

确实，在第一级近似下，电子“看到的”核是固定不动的力心，它们的力学状态就是绕固定核运动的一个电子系统的力学状态．因为核运动得很慢，所以电子的力学状态绝热地跟着它所处势场的这种渐进的演化（见第十七章，第II大节）．反过来，在核的任意可觉察的位移中，电子已绕核旋转了多次，所以核实际上只感受到一种平均的作用．核与电子之间的相互作用用几个电子周期内的平均值代替，从而可得到核运动的很好的近似． 应用这种办法得到一个薛定谔方程，电子的变量完全不出现在此方程中，以这种分离变量方法为基础的近似方法称为绝热近似。

本节的目的是给出这个方法的大致轮廓，并讨论其适用的条件．我们先用核运动的半经典分析并粗略估算各种影响的大小来完成上述的讨论。

在核的薛定谔方程中，势能仅仅与各核之间的距离有关．因为分子存在着，这个势能对某些十分确定的、有限的核间距离的数值必定具有极小值．这个极小值对应着系统的稳定平衡点，核可以在这平衡点左右作小振动．在核的这些内部振动上再迭加系统作为一个整体的平移和转动． 引入质心后，平动可以完全与其他运动分开，它如同一个质量为系统总质量的自由粒子的运动．在下面的讨论中，我们都假定这种分离已经完成，而只考虑核的振动和转动。

用m代表电子的质量，M表示数量级为核质量的一个质量，a为分子中核间的平均距离．大致上有[1)]

---

1) 氢分子的这个质量比是最大的．这时 $(m/M)_{H_2}\simeq 0.5\times 10^{-3}$.

$$a \simeq 10^{-8}\text{cm} \qquad m/M \simeq 10^{-3}\text{—}10^{-5}. \tag{18.33}$$

分子的线度大致是 a 的数量级，这个量给出电子运动幅度的数量级．根据不确定关系，电子的动量应是 $\hbar/a$ 的数量级，对应的动能大致是 $\hbar^2/ma^2$，这个量大致给出了基态电子的结合能的量级，也给出电子能级间隔的数量级：

$$\varepsilon_{el} \simeq \hbar^2/ma^2 \tag{18.34}$$

(比较此处的估算与在 § 11.3 中所作的估算)．

关于核的运动，我们首先考虑其转动．系统转动惯量的数量级是 Ma^2．因为角动量平方的量子变化的数量级为 $\hbar^2$，所以转动能级量子变化的数量级为

$$\varepsilon_{rot} \simeq \hbar^2/Ma^2. \tag{18.35}$$

在一级近似中，振动可以看成量子为 $\varepsilon_{vib} = \hbar\omega$ 的谐振动．把势能的零点选在核的稳定平衡位置上，若有一个核移动了一段距离 a，系统获得势能 $\frac{1}{2}M\omega^2a^2$；但是因为这等于一个原子和其余原子完全分开，因此等于增了 ε_{el} 大小的能量，于是，我们有

$$M\omega^2a^2 \simeq \hbar^2/ma^2,$$

因此

$$\varepsilon_{vib} \simeq \hbar^2/(mM)^{\frac{1}{2}}a^2. \tag{18.36}$$

将(18.34—36)相比较，我们得到

$$\varepsilon_{rot} \ll \varepsilon_{vib} \ll \varepsilon_{el}.$$

如果更精确些，我们按照玻恩和奥本海默[1]的办法，并引入参数

$$\kappa = (m/M)^{\frac{1}{4}}, \tag{18.37}$$

---

1) M. Born. 和 J. R. Oppenheimer. *Ann. der. Phys.* **84** (1927) 457 关于玻恩-奥本海默的原来的理论见 § 16.

则得到

$$\varepsilon_{\mathrm{rot}} \simeq \kappa^2 \varepsilon_{\mathrm{vib}} \simeq \kappa^4 \varepsilon_{\mathrm{el}}. \tag{18.38}$$

现在，能级间隔 ε 对应着一经典频率 $\varepsilon/\hbar$. 所以我们可以得出结论：电子的运动比核的振动快．核的振动比整个的转动快，这与本节开始时的说明相符．各种运动的频率之比的数量级为 κ^2，也就是约 0.01． 在整个分子转动一个周期内，核围绕其平衡位置大约振动了 100 次，而电子大约绕核作了 100000 次旋转．

13. 在固定核场中的电子运动

按照前节的半经典理论，我们现在来考虑求解分子的定态问题． 因为我们的目的不是详细计算而是给出大概轮廓，所以只要在不影响方法原理的情况下，我们将毫不犹豫地作简化假设，特别是我们要把电子和核都当作无自旋的粒子处理．

我们用指标 i 和 j 分别标志电子和核的自由度，用 x_i 和 X_j 分别标记电子和核的坐标，令 M_j 表示坐标为 X_j 的那个核的质量，令 T_e 为电子的动能，令 T_N 为核的动能，而令 V 为分子中各种粒子间的相互作用势．分子的哈密顿量是这三项之和：

$$H = T_{\mathrm{N}} + T_{\mathrm{e}} + V. \tag{18.39}$$

我们有

$$T_{\mathrm{N}} = -\sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j} \frac{\partial^2}{\partial X_j^2}, \qquad T_{\mathrm{e}} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}, \tag{18.39'}$$

$V = V(x, X)$ 是电子的和核的坐标的某一函数，它是系统中每一对粒子间的库仑作用之和．

考虑在 (18.39) 中忽略核的动能项所得的较简单的哈密顿量

$$H^{(0)} = T_e + V, \tag{18.40}$$

$H^{(0)}$ 是系统在 $M_j \to \infty$ 极限下的哈密顿量，而其定态就是原子核固定不动情况下的电子系统的那些状态，因为在 $H^{(0)}$ 中不包含对 X_j 的导数，因而

$$[X_j, H^{(0)}] = 0,$$

所以 $H^{(0)}$ 和 X_j 可以同时对角化．换句话说，在求解 $H^{(0)}$ 的本征值问题时，我们可以指定核的位置坐标为确定的数值 X'_j，并在 X_j 的这些特定值对应的本征矢量中间寻找 $H^{(0)}$ 的本征矢量．用符号 X' 表示给定的一组 X'_j．对于每一组 X' 相应有一组用量子数 n 标志的 $H^{(0)}$ 的本征值 $W_n(X')$．对于给定的 n 和 X'，将有一个或几个线性独立的本征矢量．在后一种情形，我们可用一附加指标（例如 s）来区别它们．于是 $H^{(0)}$ 的薛定谔方程具有如下的形式：

$$H^{(0)}|nsX'\rangle = W_n(X')|nsX'\rangle. \tag{18.41}$$

在 $\{x, X\}$ 表象中，本征矢量 $|nsX'\rangle$ 用波函数

$$\varphi_{ns}(x, X')\delta(X - X') \tag{18.42}$$

表示，而函数 φ 是薛定谔方程

$$[T_e + V(x, X')]\varphi_{ns}(x, X') = W_n(X')\varphi_{ns}(x, X'). \tag{18.43}$$

的解．

在 (18.43) 中，X' 起了一个简单的参数的作用，而我们就有了当各核的位置固定在 X' 时，这分子的电子的薛定谔方程．这个方程的每一个解都对应于 $H^{(0)}$ 的一个 (18.42) 那样形式的本征函数．对于 X' 的所有可能值，(18.43) 的全部解组成 $H^{(0)}$ 的本征函数的完全集合．在以下的讨论中，归一化的讨论是重要的，我们将取正交的本征函数，当 $\varphi_n(x, X')$ 只被看成是 x 的函数时，它的模方等于 1，这种情况就自然成立．

本征值问题(18.34)式与寻求原子的定态问题相类似，可以用类似的方法求解（例如自洽场法）. 然而在目前的情形下，有几个力心，所以原子问题中的对称性，即使不是全部也大部分被破坏了.

让我们简短地讨论一下这个对称性问题[1]. 势 $V(x,X)$ 对整个系统的平移、转动、反射是不变的，对时间反演和各全同粒子的交换也是不变的. 假定核的位置现在固定于 X'. 把 $V(x,X')$ 只当作是 x 的函数，它的对称性就是上述的那些对称性（保持核的 X' 不变）. 因而双原子分子（如 HCl）绕联结氢和氯原子核的轴转动时，$V(x,X')$ 是不变的. 它对通过该轴的平面的反射也是不变的. 这些连同时间反演不变性就是剩下的全部对称性. 在足够复杂的分子中就只剩下时间反演的不变性了，被看成只是 x 的函数 $H^{(0)}$ 的对称性很明显与 $V(x,X)$ 的对称性相同，能级 $W_n(X')$ 的简并度与这些对称性质有关(参阅第十五章).

为了避免简并引起的复杂性，我们假设 $V(x,X')$ 只有时间反演不变性. 由于我们讨论的是分子（而不是自由基），所以电子数是偶数，而且是 § 15.21 中讨论的第一种情形. 进一步假设这里没有偶然简并. 所以我们断定 $W_n(X')$ 是非简并的，我们还可选择位相，使得 $\varphi_n(x,X')$ 是实数.

我们用下列两点总结本节的论述.

作为只作用于变量 x 的算符，$H^{(0)}$ 及其本征值都是参量 X' 的连续函数，其本征函数也是如此(只要取定其位相)，这就是说，对于一给定的 n，$W_n(X')$ 和 $\varphi_n(x,X')$ 都是 X' 的连续函数.

---

1) 分子中电子波函数的对称性质的普遍讨论参见 L. D. Landau 和 E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon Press, London, 1958).

作为作用于全部变量的算符(参看方程(18.41)), $H^{(0)}$ 对前列举的与 $V(x, X')$ 有关的各种变换是不变的，因此从 $|nX'\rangle$ 经过这些变换之一而得到的矢量是属于同一本征值 $W_n(X')$ 的 $H^{(0)}$ 的本征矢量. 换句话说，在这些变换作用于 X' 时，$W_n(X')$ 是不变的. 尤其是，$W_n(X')$ 仅仅取决于核间的距离，也就只取决于它们所形成的几何图形，所以当这图形作位移(平动或转动)或被它的像代替(反映)时，$W_n(X')$ 都不改变.

14. 绝热近似

在前节中我们考虑了核固定时电子的定态. 现在假定核按一定的规律 $X'(t)$ 缓慢地运动. 如果这种运动足够慢，电子的力学状态将绝热地跟上它所处的势场的变动: 假定 t_0 时刻电子处于能级 $W_n(X'(t_0))$ 所对应的状态 $(n, X'(t_0))$，也就是用波函数 $\varphi_n(x, X'(t_0))$ 表示的状态;而在 t 时刻它们将处于 $(n, X'(t))$ 状态，这个态是由 $(n, X'(t_0))$ 连续地变化而来，而 n 保持不变.

这个近似的适用条件在 § 17.13 中已讨论过 [见判据(17.114)]. 找到电子处在 (n, X') 以外的状态中的几率 η_n 是

$$\eta_n \simeq \left|\frac{\alpha_n}{\omega_n}\right|^2, \tag{18.44}$$

其中 α_n 是矢量 $\varphi_n(x, X')$ 的"角速度"，ω_n 是与能级 $W_n(X')$ 相应的最小玻尔频率.

我们利用 §12 中的半经典理论分析来估算这个量. 电子能级间距已由(18.34)给出，我们有

$$\omega_n \simeq \varepsilon_{c1}/\hbar \simeq \hbar/ma^2. \tag{18.45}$$

为了估算 α_n，先估算一下 $\dfrac{\partial \varphi_n}{\partial X_j'}$ 的模方. 根据假设，φ_n 是模

方为 1 的实函数，我们知道：将一个原子与分子的其余部分分开时，它的核必需从其平衡位置移动大约 a 的距离，也就是从函数 $\varphi_n(x, X')$ 变换到一个与它正交的函数时，需要的增量为 $\Delta X' \simeq a$ 数量级。由此可知：$\dfrac{\partial \varphi_n}{\partial X_i}$ 大致等于 φ_n 除以 a，而其模方的数量级是 $1/a^2$：

$$\int\left(\frac{\partial \varphi_n}{\partial X_i}\right)^2 \mathrm{d}x \simeq \frac{1}{a^2}. \tag{18.46}$$

按定义，α_n^2 是(实)函数 $d\varphi_n/dt$ 的模方，如果 $v_i = \dfrac{\partial X_i'}{\partial t}$ 是 X_i' 的速度，则 α_n^2 是函数 $\sum_j v_j\left(\dfrac{\partial \varphi_n}{\partial X_j}\right)$ 的模方．大约是

$$\alpha_n^2 \simeq \frac{1}{a^2}\sum_i v_i^2.$$

如果用 t_N 表示核的动能，则有

$$\alpha_n^2 \simeq \frac{t_N}{M a^2}. \tag{18.47}$$

将 (18.45) 和 (18.47) 代入 (18.44) 得

$$\eta_n \simeq \kappa^4 \frac{t_N}{\varepsilon_{el}}. \tag{18.48}$$

这种半经典近似分析可作为寻找分子定态的指导．下一步考虑哈密顿量 H 的本征值问题．从(18.39)和(18.40)，有

$$H = H^{(0)} + T_N. \tag{18.49}$$

如果核的动能项 T_N 可以忽略，那末分子的哈密顿量就归结为 $H^{(0)}$，而且每个定态 $|nX'\rangle$ 就将对应电子的一个确定的量子数 n 和核的一个确定的位置 X'． 核始终固定在 X'，而电子的运动用函数 $\varphi_n(x, X')$ 描述．T_N 使 X' 附近的 $H^{(0)}$ 的本征矢量发生耦合．

在绝热近似中，我们省略了电子量子数不同的那些矢量之间的耦合，并假设 n 是一个好量子数:

$$n \simeq \text{常数} \tag{18.50}$$

于是H的本征矢量是对应于一定 n 值的 $|n,X'\rangle$ 的线性组合，因此具有如下的形式

$$\int |nX'\rangle\phi(X')\mathrm{d}X', \tag{18.51}$$

其中 $\phi(X')$ 是 X' 的一个任意函数. 在 $\{x,X'\}$ 表象中，这种矢量是用

$$\Phi_n(x,X) \equiv \varphi_n(x,X)\phi(X). \tag{18.52}$$

这样形式的波函数来表示.

在此近似下，**应用变分法，取 $\Phi_n(x,X)$ 为试探波函数**，我们可获得H的本征函数. 于是我们有试探波函数在态矢量空间的子空间(即如 (18.51) 那种矢量的空间 $\mathscr{E}_n$) 内变化. 在 §3 中我们已经看到这方法能得出此子空间中的本征值问题[见方程(18.9)]. 在现在这种情形下，可得到未知函数 $\phi(X)$ 的薛定谔方程. 我们用 H_n 表示此方程的哈密顿量. 它是H到 $\mathscr{E}_n$ 上的投影，它只作用于核的力学量. H_n 的本征值就是对应于电子量子数为 n 的分子能级.

所造成的误差可以根据本节开始部分的讨论来估算. 设 Φ_n 是近似解之一，Ψ_n是相应的精确解，假定它们都是归一化的.差值

$$\delta\Psi \equiv \Psi_n - \Phi_n$$

表示精确解与绝热极限的偏离. 实质上它是子空间 $\mathscr{E}_n$ 之外的矢量，其模方等于前面定义的 η_n. 于是借助于 (18.48)，得到

$$\iint |\delta\Psi|^2\mathrm{d}x\mathrm{d}X \simeq \kappa^4\left\langle\frac{T_N}{\varepsilon_{el}}\right\rangle \simeq \kappa^4\frac{\varepsilon_{vib}}{\varepsilon_{el}} \simeq \kappa^6.$$

换句话说，大体上有

$$\delta\Psi \simeq \kappa^3\Phi', \tag{18.53}$$

其中 Φ' 是与 $\mathscr{S}_n$ 空间正交的函数，模方为 1. 由于泛函

$$E[\Psi] = \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

在解 Ψ_n 附近是稳定的，所以用函数 Φ_n 计算能量时带来的误差是变分 $\delta\Psi$ 的二级小量. 即

$$\delta E \simeq \langle\delta\Psi|H|\delta\Psi\rangle = \kappa^6\langle\Phi'|H|\Phi'\rangle \simeq \kappa^6\varepsilon_{el}.$$

与(18.38)式比较，得:

$$\delta E/\varepsilon_{rot} \simeq \kappa^2(\simeq 10^{-2} \ll 1). \tag{18.54}$$

因此，绝热近似在求分子波函数时引入了数量级为 κ^3 的误差[公式 (18.53)]，而所求出的能量的误差要比转动能级间距小 κ^2 倍[公式(18.54)].

15. 绝热近似中核的哈密顿量

我们现在应用变分法来求 $\phi(X)$ 的“薛定谔方程”.

我们还记得 $\varphi_n(x,X)$ 是方程 (18.43) 的实数解，它的模方对 x 积分等于 1.

$$\varphi_n^*(x,X) = \varphi_n(x,X) \tag{18.55}$$

$$\int \varphi_n^2(x,X)\mathrm{d}x = 1. \tag{18.56}$$

由于 φ_n 是 X 是连续函数，因而它可确定到只剩正负号未定(可以任意选定)的程度. 对 (18.56) 式进行微分得到下列方程:

$$\int \varphi_n \frac{\partial\varphi_n}{\partial X_i}\mathrm{d}x = 0. \tag{18.56'}$$

$$\int \varphi_n \frac{\partial^2\varphi_n}{\partial X_i^2}\mathrm{d}x = -\int\left(\frac{\partial\varphi_n}{\partial X_i}\right)^2\mathrm{d}x. \tag{18.56''}$$

它们在下面是有用的. 函数 $\phi(X)$ 是坐标 X 的任意平方可积函数.

这样就规定了试探波函数的变化域. 现把泛函 $E(\Phi_n)$ 写成 $\phi(X)$ 的一个泛函形式. 从 φ_n 的性质很容易得出

$$\langle \Phi_n | \Phi_n \rangle = \iint |\Phi_n|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}X = \int |\phi|^2 \mathrm{d}X. \tag{18.57}$$

还可以写出

$$\langle \Phi_n | H | \Phi_n \rangle = \iint \Phi_n^*(H\Phi_n)\mathrm{d}x\mathrm{d}X = \int \phi^*(H_n\phi)\mathrm{d}X, \tag{18.58}$$

如果取

$$H_n\phi = \int \varphi_n(x,X)[H\varphi_n(x,X)\phi(X)]\mathrm{d}x. \tag{18.59}$$

则其结果是

$$E[\Phi_n] = \frac{\int \phi^*(H_n\phi)\mathrm{d}X}{\int |\phi|^2 \mathrm{d}X} \tag{18.60}$$

恒等式 (18.59) 是 $\phi(X)$ 空间的特定算符 H_n 的定义式. 很明显，它是线性算符，而且可以证明它是厄密的 (下面将证实). 在绝热近似中，分子的薛定谔方程的本征函数是使 $E[\Phi_n]$ 对 $\phi(X)$ 的变分取极值的那些函数. 根据 (18.60)，这些就是本征值方程

$$H_n\phi = E\phi \tag{18.61}$$

的解. 这就是所要求的“薛定谔方程”.

与电子量子数 n 对应的分子能级是 H_n 的本征值. 相应的本征函数是 Φ_n，利用薛定谔方程 (18.61)的对应的解(或几个解)来代替(18.52)中的 $\phi(X)$ 便得到 Φ_n.

利用 Φ_n 的性质，我们可以完成(18.59)中的许多积分，从

而得到 H_n 的更合用的表示式.

由 (18.43) 得

$$H^{(0)}\varphi_n(x,X)\psi(X) = W_n(X)\varphi_n(x,X)\psi(X);$$

由此并借助于 (18.56),得到

$$\int \varphi_n[H^{(0)}\varphi_n\psi]\mathrm{d}x = W_n(X)\psi(X). \qquad (18.62)$$

从核的动能的表示式 (18.39′) 得

$$T_N\varphi_n\psi = \sum_i \left(\frac{-\hbar^2}{2M_i}\right)\left[\varphi_n\frac{\partial^2\psi}{\partial X_i^2} + 2\frac{\partial\varphi_n}{\partial X_i}\frac{\partial\psi}{\partial X_i} + \frac{\partial^2\varphi_n}{\partial X_i^2}\psi\right],$$

在它两边乘以 $\varphi_n(x,X)$ 并对 x 积分,可以计算出

$$\int \varphi_n(T_N\varphi_n\psi)\mathrm{d}x,$$

我们分别考虑右边括号内三项的贡献,利用 (18.56),立刻得出第一项的贡献,就是

$$T_N\psi = \sum_i \left(\frac{-\hbar^2}{2M_i}\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial X_i^2}. \qquad (18.63)$$

因为有(18.56′),第二项的贡献为零. 第三项是 ψ 与一个确定函数 $W_n'(X)$ 的乘积,利用(18.56″)式, $W_n'(X)$ 可以写成

$$W_n'(X) = \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i}\int\left(\frac{\partial\varphi_n}{\partial X_i}\right)^2\mathrm{d}x. \qquad (18.64)$$

于是,最后得到

$$\int \varphi_n(T_N\varphi_n\psi)\mathrm{d}x = (T_N + W_n')\psi. \qquad (18.65)$$

从定义(18.59)以及方程(18.49),(18.62)和(18.65),我们有

$$H_n = T_N + W_n' + W_n. \qquad (18.66)$$

(18.66)式中的三项很容易得到解释.

势能 $W_n(X)$ 是 $H^{(0)}$ 的平均值，也就是核之间的相互作用能和处于量子态 n 的电子的平均能量之和，其中态 n 与核的确定位置相对应，根据 § 12 的讨论，$W_n(X)$ 在核组成的几何图形的稳定平衡点 X_0 处具有最小值.

其余两项来自对电子力学状态平均而得到的各核子动能. 由此给出，除动能 T_N 本身之外，还有一势能项 $W'_n(X)$. 后者[1]是对势能 W_n 的一种小修正. 将 (18.46) 的估算代入(18.64)，得到

$$W'_n(X_0) \simeq \frac{\hbar^2}{Ma^2}.$$

因此，$W'_n(X)$ 是与转动量子同数量级的正量.

16. 玻恩-奥本海默方法

玻恩和奥本海默[2]最初处理分子的方法与上面讲的变分法有些不同. 他们将哈密顿量 H 展成 κ 的幂级数，并用通常的微扰方法去解决相应的本征值问题.

上节中我们用 X_0 代表 $W_n(x)$ 的极小点位置. 事实上，因为 W_n 在核的整体转动下是不变的(顺便注意到，W'_n 一般不是这样)，所以这个平衡点只能确定到仍允许有一转动的程度，更精确的说，设 $X=(\omega,\xi)$，其中 ω 代表确定核的整体方位的三个角变量(双原子分子有两个角变量)，ξ 是固定核之间相对位置的一组径向变量. W_n 仅仅取决于 ξ，而平衡位置则与径向位置的一组特定值对应.

---

1) 这一项的出现类似于经典系统的运动方程中出现离心能项（当采用转动参考系时).

2) 参看(18.37)式处注释中的引文.

按照玻恩和奥本海默的作法，引入新的径向变量 u：

$$\xi = \xi_0 + \kappa u.$$

u 表示核离开其平衡位置的距离(用合适的单位). 因为 κ 大致等于核振动的振幅与电子运动的幅度之比，u 变化的范围与 x 的数量级相同，即和 a 同一数量级.

作了这种变量变换之后，将 H 中的势能展成 u 的幂级数，从而得到 H 的关于 κ 的幂级数展开式. T_N 项是 κ^2 次项，为了精确地得到转动能级，这展开式需要取到 κ^4 项. 如果展开式取到 κ^5 项，就得到了绝热近似的(包括了更高次无限小量)结果. 只有取到 κ^6 项和更高次项，才会出现差别. 这和 § 12 的数量级分析相符.

17. 关于双原子分子的一些概念

我们不再进一步普遍地研究分子的绝热近似. 特别是不讨论转动和振动的分离. 为了进行这个分离，引入三组变数代替原来的两组，以便对变分法的应用作些改进，这三组变数是：确定分子整体方位的角变量，固定核间相对位置的变量，以及确定电子相对于核的位置的变量. 最后我们只限于对双原子分子作一些简要的说明.

一旦完成了质心运动的分离，两个核的力学量就描述一个核对另一个核的相对运动. 在此情形下，坐标集 X 就简化成矢量 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{R}_2$ 的坐标，它给定了第一个核相对第二个核的位置，电子相对于核的质量中心的坐标仍用 x 表示. 为简单起见，忽略自旋[1]. 用 $\boldsymbol{L}$ 表示电子的轨道角动量，$\boldsymbol{G}$ 表

1) 如果自旋轨道耦合能比转动量子小，自旋的存在不会明显地影响结果，和原子的 LS 耦合情形相同，它反映在精细结构上，在相反的情形下，光谱的一般形式就大大地改变了，见本章 § 13 注释中的朗道和栗弗希兹的著作.

示核的角动量($\boldsymbol{G}=\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P}$). 而系统的总角动量用$\boldsymbol{K}$表示:

$$\boldsymbol{K}=\boldsymbol{G}+\boldsymbol{L}. \tag{18.67}$$

最后，用 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}=\boldsymbol{R}/R)$ 表示沿分子轴线方向的单位矢量，并用脚标 u 标志矢量沿此方向的分量. 顺便提一下，请注意算符等式

$$\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{R}=0. \tag{18.68}$$

因而 $G_u(=\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{u})$ 恒等于零，并有

$$K_u=L_u.$$

其余的都保留前一节的符号.

首先考虑电子的运动. $H^{(0)}$ 作为只作用到电子变量上的算符，其对称性和史塔克效应的对称性相同: $H^{(0)}$ 对绕 $\boldsymbol{u}$ 的转动和对包含 $\boldsymbol{u}$ 的平面的反射下是不变的. 如果是两全同核，则 $H^{(0)}$ 对于反演 ($x\to -x$) 也是不变的. 目前，我们暂且不管这一特殊情形.

为了将状态分类，我们只要参照 § 15.14 中史塔克效应的讨论. $H^{(0)}$ 的每一能级都对应 L_u^2 的一给定本征值，L_u^2 的本征值可以写成 $\hbar^2\Lambda^2$ 的形式，其中 Λ 是一个取所有非负整数的量子数. 根据光谱学的惯例，对应于头三个值 $\Lambda=0,1,2$ 的项分别用大写希腊字母 Σ,Π,Δ 表示. 若 $\Lambda\neq 0$ 则能级是二重简并的. 我们能够找到两个相应的本征函数，它们对应的角动量沿分子轴的分量分别是 $\hbar\Lambda$ 和 $-\hbar\Lambda$. Σ 能级 ($\Lambda=0$) 是非简并的. 根据这些本征矢量对于通过分子轴的一个平面的反射是不变的或改变其符号，它们可分成两类 Σ^+ 和 Σ^-. 对于大多数双原子分子来说，基态是 Σ^+ 态.

我们现在来考虑总哈密顿量. 电子的能级出现简并仅是表面上的复杂因素. 可以证明，实际上 T_N 引起的 $\hbar\Lambda$ 和 $-\hbar\Lambda$ 态之间的耦合比转动能级间隔小. 因此可以略去. 换句话说，在(18.60)的近似之外，再加第二个近似: $L_u=$ 常数.

另一方面虽然 §14 和 §15 中的变分法的应用方式适于普遍特性的讨论，但它难以分离出转动和振动，是很明显的．这个困难来源于，修正项 $W'_n(R)$ 通常对转动不是不变的．因此从一开始就考虑 H 和 $H^{(0)}$ 的转动不变性，并且寻找具有给定总角动量的 H 的本征函数是更有利的．$H^{(0)}$ 的本征函数可用下列各量表征：

(i) 总角动量量子数 K 和 m_K（m_K 是 $\boldsymbol{K}$ 沿空间一固定轴上的分量，不要与 K_u 相混）；

(ii) 标记电子状态的量子数，即 n 和当 $\Lambda \neq 0$ 时的 s（$s \equiv L_u$ 的正负号）；

(iii) 核间距离 R．

于是薛定谔方程(18.41)可写成

$$H^{(0)}|Km_KnsR\rangle = W_n(R)|Km_KnsR\rangle. \qquad (18.69)$$

绝热近似就是在十分确定的 K，m_K，n 和 s 所对应的矢量子空间中寻求 H 的本征矢量．即形式为

$$\int_0^\infty |Km_KnsR\rangle y(R)\mathrm{d}R \qquad (18.70)$$

的矢量［可与 (18.51)的形式比较］，像在 § 14 和 § 15 中的那样，现在应用变分法来导出径向函数 $y(R)$ 的薛定谔方程，其本征值是对应于量子数 K 和 n 的分子能级（这些能级与 m_K，s 无关）．

这个径向方程的哈密顿量 h 由 § 15 的方法得到，我们可从 $H^{(0)}$ 得出贡献 $W_n(R)$．为了计算核动能 T_N 的贡献，将这个算符写成形式

$$T_N = \frac{P_R^2}{2M} + \frac{G^2}{2MR^2}, \qquad (18.71)$$

（M 是核的折合质量；P_R 是径向动量）并将右边两项分开处理是方便的．很容易证明头一项给出：

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}R^2}+w'_n(R), \tag{18.72}$$

其中 $w'_n(R)$ 是与 K, m_K, s 无关的小修正. 对于代表转动动能的第二项的贡献却需要更细致的考查.它等于 $\hbar^2/2MR^2$ 与算符 G^2 在 (18.70)给出的那些矢量的子空间中的平均值的乘积. 利用 (18.67),我们可以写出

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{G}^2\rangle &= \langle(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{L})^2\rangle \\ &= \hbar^2K(K+1)-2\langle \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{L}\rangle+\langle \boldsymbol{L}^2\rangle.\end{aligned}$$

因为 $|Km_KnsR\rangle$ 是 L_u 的本征态, $\boldsymbol{L}$ 沿垂直于 $\boldsymbol{u}$ 的轴上的分量的平均值为零. 因此考虑到(18.68)式,得到

$$\langle \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{L}\rangle = \langle K_uL_u\rangle = \langle L_u^2\rangle = \hbar^2\Lambda^2.$$

另一方面, $\langle \boldsymbol{L}^2\rangle$ 是只与 n 有关的某个正数. 如果令

$$W'_n(R) \equiv (\langle \boldsymbol{L}^2\rangle - 2\hbar^2\Lambda^2)/2MR^2,$$

我们得到表示转动能贡献的表示式

$$\frac{\hbar^2K(K+1)}{2MR^2}+w''_n(R). \tag{18.73}$$

小修正 $w'_n(R)$ 和 $w''(R)$ 可以合并成势能项 $W_n(R)$. 于是径向哈密顿量变成

$$h \equiv -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}R^2}+\frac{\hbar^2K(K+1)}{2MR^2}+W_n(R). \tag{18.74}$$

这是一个质量为 M, 角动量为 K 的粒子在势场 $W_n(R)$ 中的哈密顿量.

注意, 整数 K 的可能值与 n 有关, 通过固定 n, 我们可固定 Λ,又因为 $K \geqslant |K_u|$, 所以

$$K \geqslant \Lambda. \tag{18.75}$$

能级 E 是 h 的本征值,它可通过解径向方程

$$hy(R) = Ey(R).$$

而得到. 对于给定的 K 和 n, 这些就是质量为 M, 角动量为

K的粒子在势场 $W_n(R)$ 中的能级. 为了区别它们，我们利用另一个量子数 v。 n 是电子量子数，v 是振动量子数，K 是转动量子数.

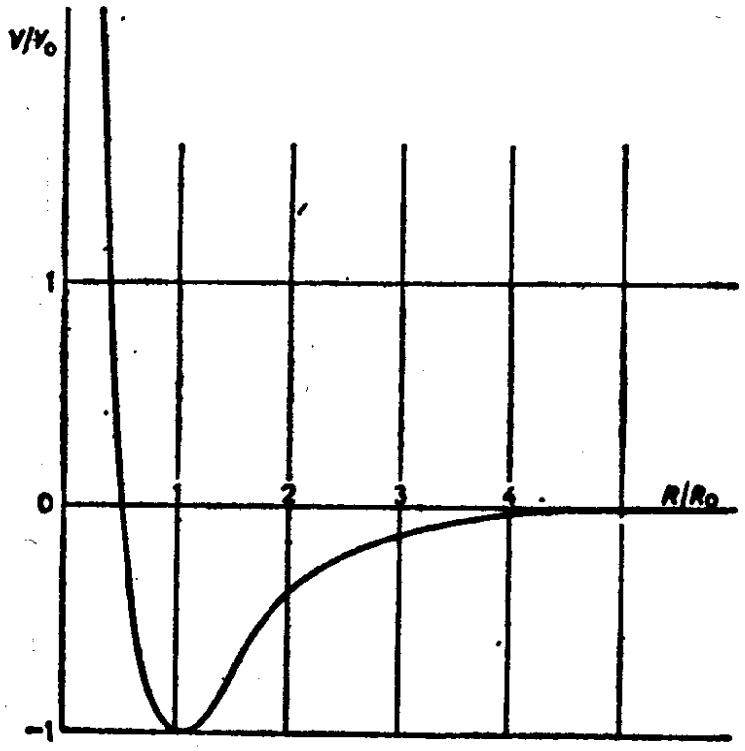


图 18.2 莫尔斯势. $V = V_0(e^{-2(R-R_0)/b} - 2e^{-(R-R_0)/b})$. R_0 是平衡时核间距离. V_0 为平衡点势阱深度，势阱最小处的锐度随比值 b/R_0的大小而变，图中采用相应于氢分子的 $b/R_0 = 0.68$.

所得到的能谱的基本特征取决于 $W_n(R)$ 的一般形式. $W_n(R)$ 在核间距离的某个数值 R_0 处有尖锐的极小，其中 R_0 对应于分子的稳定平衡位置. 实验证明: 在平衡位置附近，莫尔斯势[见图 18.2 和问题 (18.5)]常常可用作 $W_n(R)$ 的很好近似. 那些最低能级的波函数 $y(R)$ 仍集中在 R_0 附近的很小区间内[宽度大约为 κR_0]，它描写核在平衡位置附近的振动.

在一级近似下(简谐振子)，转动能项中的 R 可以用 R_0 代

替，$W_n(R)$ 可用它在 $q = R - R_0$ 处的幂级数展开式的头两项代替．利用符号

$$B_n = \hbar^2/2MR_0^2,\ W_n(R_0) = E_n,\ W_n''(R_0) = M\omega_n^2,$$

从而得出径向方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dq^2} + E_n + \frac{1}{2}M\omega_n^2 q^2 + B_n K(K+1)\right] y = E_{nvK} y.$$

这是简谐振子的薛定谔方程，因此我们有：

$$E_{nvK} = E_n + \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_n + K(K+1)B_n \quad (18.76)$$

$$(v = 0,1,2,\cdots; K = \Lambda, \Lambda+1, \Lambda+2, \cdots).$$

于是能量是三项之和：电子能量 E_n，振动能 $\left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_n$ 和转动能 $K(K+1)B_n$．量子 $\hbar\omega_n$ 和 B_n 的数量级大小进一步证实了 § 12 的分析以及继而得到的关于分子光谱的推论[1]．

这里我们不详细讨论由于自旋的存在而要求理论的必要修改．

我们只提及自旋与核统计的一个特别引人注目的效应．因为核自旋和分子其余部分的耦合是可以完全忽略的，所以主要效应是每一能级都存在自旋简并性或多重性，分子的本征函数的形式是

$$\Psi = \Phi(\boldsymbol{R}, x)\chi(\mu_1, \mu_2),$$

---

1) 对于氢分子（Σ^+态）的电子基态，取 $E_0 = -4.72\text{eV}$，$\hbar\omega_0 = 0.54\text{eV}$ 和 $B_0 = 0.0074\text{eV}$ 这些值时，其头几个能级便用此公式精确地表示．这些数值相应的核间距离 $R_0 = 0.74\times10^{-8}\text{cm}$．由莫尔斯势 $W_0(R)$（见图 18.2 和问题 18.5，取 $V_0 = 4.72\text{eV}$，$R_0 = 0.74\times10^{-8}\text{cm}$，$b = 0.68R_0$）得到一个更好的转动谱和振动谱表示式，这分子的离解能是 $V_0 - \frac{1}{2}\hbar\omega_0$．

而简并度等于能够构成的线性独立的函数 $\chi(\mu_1, \mu_2)$ 的数目. 如果 j_1 和 j_2 是两个核的自旋，则这种函数共有 $(2j_1+1)\times(2j_2+1)$ 个. 若两个核是不同的，则对 ψ 没有限制，因而每个能级的多重性就是 $(2j_1+1)(2j_2+1)$. 若两个核是自旋为 $j(j_1=j_2=j)$ 的全同核，按照它们是玻色子或费米子，即 j 是整数或半整数，则 ψ 对于交换

$$(\boldsymbol{R}\leftrightarrow-\boldsymbol{R},\mu_1\leftrightarrow\mu_2)$$

必须是对称的或反对称的. 在 χ 的 $(2j+1)^2$ 维空间中能够作出 $(j+1)(2j+1)$ 个对称函数和 $j(2j+1)$ 个反对称函数[问题 13.13]. 所以多重性 g 取决于 $\psi(\boldsymbol{R},x)$ 是对称的还是反对称的. 换句话说，只取决于 Φ 对核反射的宇称性，用 $\tilde{\omega}(\tilde{\omega}=\pm1)$ 标记此宇称性，我们有

$$g=\begin{cases}(j+1)(2j+1) & j(2j+1) & \text{若 } \tilde{\omega}=+1\\ j(2j+1) & (j+1)(2j+1) & \text{若 } \tilde{\omega}=-1\end{cases}$$

（j 整数　　j 半整数）

这种效应之所以值得注意是由于这样一个事实：它与总轨道角动量的宇称性有关. 可以证明

$$\tilde{\omega}=(-)^K\tilde{\omega}_e,$$

其中 $\tilde{\omega}_e(=\pm1)$ 取决于和 Φ 对应的电子波函数的宇称性质. 如果 $\Lambda\neq0$，每个能级对应有两个具有相反 $\tilde{\omega}_e$ 值的波函数，与之相反，对于 Σ 能级 $(\Lambda=0)$，就只有一个电子波函数. $\tilde{\omega}_e$ 有完全确定的数值 $(+1$ 或 $-1)$，而且从一转动能级变为另一转动能级时，多重性 g 以一种具有特征性的方式而改变[1].

共核双原子分子的 Σ 能级的这些能谱特点明显地在这

1) 特别是，当 $j=0$ 时，$\tilde{\omega}=-1$ 的那些能级不存在，而且 K 只能取十分确定的宇称.

些分子的“带光谱”中显示出来．因为具有不同自旋波函数的状态之间的光学跃迁几率是很小的．所以实际观察到的跃迁都保持K的宇称守恒．另外，在通常的观察条件下，偶数K对应的谱线与奇数K对应的谱线的相对强度直接与上面计算的多重性的比值有关，或者是 $(j+1)/j$ 或者是 $j/(j+1)$，根据 $\tilde{\omega}_e$ 的符号和核是玻色子或费米子而定． 这就提供了一个测定核自旋的非常直接的方法．

练 习 和 问 题

1．E_0 和 ψ_0 分别是一给定量子体系的基态能量和波函数，用变分法得出能量 E_{var} 和波函数 ψ_{var}． 假定 ψ_0 和 ψ_{var} 是归一的． 令 $\varepsilon = 1 - |\langle\psi_0|\psi_{var}\rangle|^2$， ε 是 ψ_{var} 到与 ψ_0 正交的子空间上的投影的模方，并且是 ψ_{var} 态与 ψ_0 态差距的平方的度量．证明

$$E_{var} - E_0 \geqslant \varepsilon(E_1 - E_0)$$

(E_1 是第一激发能级的能量)．证实它与 §4 的结果相符，并进行讨论．

2．设氢原子的基态波函数已知，取 $u = \rho e^{-b\rho}$ 的一部分(与基态波函数正交)作为试探波函数 (§4 的符号)，计算第一激发态的能级，与精确的本征值和本征函数比较，并作讨论．

3．证明不等式(18.11) 和 (18.12)．

4．取试探波函数 $u = \rho^{l+1}e^{-b\rho}$ (§4 的符号)．计算氢原子对应角动 l 的最低能级．与精确结果比较，并作说明．

5．考虑一个质量为M的粒子在一维势场

$$V(q) = V_0[e^{-2q/b} - 2e^{-q/b}]$$

(莫尔斯势) 中运动，求出相应的波函数和能级．注意：作下列函数变换和变量变换：

$$\xi = 2K_0 b e^{-q/b}, \quad w(\xi) = e^{\frac{1}{2}\xi}\xi^{-\kappa b}\psi(q),$$

其中

$$K_0 = \sqrt{2MV_0}/\hbar \quad \kappa = \sqrt{-2ME}/\hbar.$$

可将波动方程变换成拉普拉斯方程，我们求出有限数目的分立能级，它

与指标 n 的关系由公式

$$E_n = -V_0\left(1 - \frac{n+\frac{1}{2}}{K_0 b}\right)^2 \quad \left(0 \leqslant n \leqslant K_0 b - \frac{1}{2}\right)$$

决定。

第十九章　碰撞理论

1. 引言

到现在为止，我们仅仅考虑了最简单的碰撞问题，即一个基本粒子被一个势(具体说是中心势)所散射以及两个基本粒子的互相散射．当相对运动和质心运动可分离时，第二个问题就约化为第一个问题．这类问题的处理已在第 10 章讲过了，而且通过库伦散射(第十一章第 II 节)和两个全同粒子互相散射(§ 14.9—10)的处理，对它作了补充．其次，在 § 17.5 中，对一个粒子被一个势散射的问题，我们把 $V(\boldsymbol{r})$ 当作微扰处理，而且只考虑第一级效应，由此得到了一个特别简单的表示式[见方程 (17.54)]．然而，§ 17.5 的工作所依据的截面定义多少还有些问题，因而严格推导这公式是有意义的．

这一章的目的在于：一方面，建立一种能够处理复杂粒子之间碰撞的形式体系；另一方面，推广前几章的微扰论和变分法，用于碰撞截面的计算．

这些问题可用两种不同的方式处理．第一种，先对 §17.5 的定义(即截面等于单位入射通量单位时间的几率)作严格的论证，然后把这些量与演化算符 $U(t,t')$ 在极限情况下($t\to+\infty$ 和 $t'\to-\infty$) 的矩阵元联系起来．第二种是推广第十章(第 I 节)的处理方式，把截面直接地与薛定谔方程定态解的渐近行为联系起来．显然，第二种与我们在这一章所采用的作法等价[1]．

---

1) 关于第一种方式，参看 B. Lippman 和 J. Schwinger, *Phys. Rev.* **79**(1949) 469 或 M. Gell-Mann 和 M. L. Goldberger, *Phys. Rev.* **91**(1953)398．在这两种陈述中，截面的定义有一些不确切之处．有关这一问题的讨论以及可能的改善曾由 S. Sunakawa 给出，*Prog. Theor. Phys.* **14** (1955)175.

这一章共分五节. 前两节主要就一个粒子在势 $V(r)$ 中的简单情况建立形式体系和讲述微扰方法. 在第 III 节中，将这些扩展到复杂的碰撞情形. 第IV 节论述变分方法. 在第V节中，我们给出碰撞振幅的某些性质，这些性质是直接地从哈密顿量的普遍性质，诸如厄密性，时间反演不变性以及其他不变性推出来的.

I. 自由波格林函数和玻恩近似

2. 散射振幅的积分表述

在这一节和下一节中，我们讨论一个质量为 m 的粒子被势 $V(r)$ 散射的问题. 用 H_0 代表动能算符，H 代表总哈密顿量:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \tag{19.1}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r). \tag{19.2}$$

我们假定势 $V(r)$ 比 $\frac{1}{r}$ 更快地趋于 0，至于具有 $\frac{1}{r}$ 行为的势，将在 § 15 中作简要的讨论.

下面引入几种类型的波. 我们用合适的符号来区别它们. 字母 φ 代表平面波，字母 ψ 代表哈密顿量 H 的定态解. 对于一个给定的传播矢量 $\boldsymbol{k}$，我们可以确定:

(i) 平面波 $\varphi_{\boldsymbol{k}} = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$;

(ii) 定态波 $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$ 和 $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}$ 的特征是，它们分别具有下述渐近行为

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \text{出射波},$$

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \text{入射波}.$$

特别是，若 $\boldsymbol{k}_a$ 是入射粒子的传播矢量，而 E 是其能量

[$k_a = k = (2mE)^{\frac{1}{2}}$]，那末完全的定态散射波函数(§ 10.3 的定义)就是 $\psi_{k_a}^{(+)}$.这种波及其相应的散射振幅 $f_{k_a}^{(+)}$ 由下面的条件决定：

$$H\psi_{k_a}^{(+)} = E\psi_{k_a}^{(+)} \qquad \psi_{k_a}^{(+)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} + f_{k_a}^{(+)}(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}. \quad (19.3)$$

我们用 $d\sigma_{a\to b}/d\Omega$ 表示出射方向为 Ω_b 的散射截面. 在第十章中，我们已证明：

$$d\sigma_{a\to b}/d\Omega = |f_{k_a}^{(+)}(\Omega_b)|^2. \quad (19.4)$$

设 $\boldsymbol{k}_b$ 是方向为 Ω_b 而长度为 k 的矢量.在整个这一节中，只出现由矢量 $\boldsymbol{k}_a$ 和 $\boldsymbol{k}_b$ 决定的定态波. 所以，我们将分别用 a 和 b 代替指标 $\boldsymbol{k}_a$ 和 $\boldsymbol{k}_b$，使书写简化.

我们从确立散射振幅的非常普遍的性质开始. 考虑两个势$U(\boldsymbol{r})$和$\hat{U}(\boldsymbol{r})$，而且分别用 ξ 和 $\hat{\xi}$ 代表相应的哈密顿量的定态解. 我们特别注意 $\hat{\xi}_b^{(-)}$ 和 $\xi_a^{(+)}$ 这样的解：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}\right]\hat{\xi}_b^{(-)} = E\hat{\xi}_b^{(-)} \quad (19.5)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right]\xi_a^{(+)} = E\xi_a^{(+)} \quad (19.6)$$

$$\hat{\xi}_b^{(-)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{r}} + \hat{f}_b^{(-)}(\Omega)\frac{e^{-ikr}}{r} \quad (19.7)$$

$$\xi_a^{(+)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} + f_a^{(+)}(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}. \quad (19.8)$$

现在要证明：

$$\langle\hat{\xi}_b^{(-)}|(U-\hat{U})|\xi_a^{(+)}\rangle = \int \hat{\xi}_b^{(-)*}(\boldsymbol{r})[U(\boldsymbol{r})-\hat{U}(\boldsymbol{r})]\xi_a^{(+)}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}$$

$$= -\frac{2\pi\hbar^2}{m}[f_a^{(+)}(\Omega_b) - \hat{f}_b^{(-)*}(-\Omega_a)], \quad (19.9)$$

(按约定，$-\Omega_a$ 代表 Ω_a 的反方向)这个证明类似于 § 10.17 中用来得到相移积分表述的作法. 不致引起含混时，我们有时

省略指标 b 和 a 以及符号"$\wedge$". 用 $\xi^{(-)*}$ 乘(19.6),并减去用 $\xi^{(+)}$ 乘(19.5)的复共轭所得的方程,因 $\hat{U}$ 是实的,所以有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\xi^{(-)*}(\Delta\xi^{(+)})-(\Delta\xi^{(-)*})\xi^{(+)}]+\xi^{(-)*}\cdot(U-\hat{U})\xi^{(+)}=0.$$

对以原点为中心、R 为半径的球体积分，我们得到

$$\langle\xi^{(-)}|(U-\hat{U})|\xi^{(+)}\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{R\to\infty}\cdot\int_{r<R}[\xi^{(-)*}(\Delta\xi^{(+)})-(\Delta\xi^{(-)*})\xi^{(+)}]d\boldsymbol{r}. \quad (19.10)$$

尽管 Δ 具有厄密特性，右边的积分在极限情况下也不必为 0，因为 ξ 不是平方可积函数. 为了计算这积分，我们利用格林定理将它变换成半径为 R 的球面积分.

如果 ξ_1 和 ξ_2 是 r 的函数,则我们用 $W[\xi_1,\xi_2]$ 表示"径向朗斯基函数":

$$W[\xi_1,\xi_2]=\xi_1\frac{\partial\xi_2}{\partial r}-\xi_2\frac{\partial\xi_1}{\partial r},$$

用 $\{\xi_1,\xi_2\}$ 表示 $W[\xi_1,\xi_2]$ 在球面上的积分:

$$\{\xi_1,\xi_2\}=\int W[\xi_1,\xi_2]|_{r=R}R^2d\Omega=\int W[r\xi_1,r\xi_2]|_{r=R}d\Omega. \quad (19.11)$$

利用格林定理，得到

$$\{\xi_1,\xi_2\}=\int_{r<R}[\xi_1(\Delta\xi_2)-(\Delta\xi_1)\xi_2]d\boldsymbol{r},$$

于是方程(19.10)可写成

$$\langle\xi^{(-)}|(U-\hat{U})|\xi^{(+)}\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{R\to\infty}\{\xi^{(-)*},\xi^{(+)}\}. \quad (19.12)$$

面积分 $\{\xi^{(-)*},\xi^{(+)}\}$ 趋于一个常数. 这个常数是容易决定的，

只要 ξ 及其径向导数按 $1/r$ 幂作渐近展开，并保留头一项．用(19.7)和(19.8)代入，我们得到

$$\lim_{R\to\infty}\{\xi^{(-)*},\xi^{(+)}\}=\lim_{R\to\infty}\{e^{-ik_b\cdot r},e^{ik_a\cdot r}\}+\lim_{R\to\infty}\left\{e^{-ik_b\cdot r},f^{(+)}\frac{e^{ikr}}{r}\right\}+\lim_{R\to\infty}\left\{f^{(-)*}\frac{e^{ikr}}{r},e^{ik_a\cdot r}\right\}+\lim_{R\to\infty}\left\{f^{(-)*}\frac{e^{ikr}}{r},f^{(+)}\frac{e^{ikr}}{r}\right\}. \tag{19.13}$$

平面波的渐近形式由下式给定(问题19.1)：

$$e^{ik\cdot r}\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{2\pi}{ikr}[\delta(\Omega_r-\Omega_k)e^{ikr}-\delta(\Omega_r+\Omega_k)\cdot e^{-ikr}]+O\left(\frac{1}{r^2}\right). \tag{19.14}$$

在右边的括号中，Ω_r 和 Ω_k 分别代表矢量 r 和 k 的方向．δ 函数由下面这性质决定．

$$\int\delta(\Omega'-\Omega)\varphi(\Omega')d\Omega'=\varphi(\Omega),$$

式中 φ 是角度 Ω 的任意函数．如果(19.13)式右边的平面波用其渐近表示式代替，则角度的积分很容易完成．因 k_b 和 k_a 有相同的大小，第一项变为 0(与问题 19.2 的结果一致)．其次，唯一不为 0 的贡献来自平面波的**入射部分**，并等于 $-4\pi f^{(+)}\cdot(\Omega_b)$．对第三项也是如此，其贡献为 $4\pi f^{(-)*}(-\Omega_a)$．第四项为 0．所以，我们得出

$$\lim_{R\to\infty}\{\xi^{(-)*},\xi^{(+)}\}=-4\pi[f^{(+)}(\Omega_b)-f^{(-)*}(-\Omega_a)].$$

将此结果代入(19.12)，我们就得到(19.9)．证毕．

性质(19.9)是值得注意的，这主要由于它与势 U 及 $\hat{U}$ 的具体形式无关．仅仅要求势是实的，并且它们下降比 $1/r$ 更快．

作为第一个应用，我们取

$$U = V \qquad \hat{U} = 0.$$

关系式(19.9)给出:

$$\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_a^{(+)}(\Omega_b). \tag{19.15}$$

散射振幅的这一积分表示式在下两小节中当作玻恩近似的出发点.

其次,我们取

$$U = \hat{U} = V.$$

由于(19.9)的左边变为 0,所以,右边的两个振幅相等:

$$f_a^{(+)}(\Omega_b) = f_b^{(-)*}(-\Omega_a). \tag{19.16}$$

最后,我们取

$$U = 0, \qquad \hat{U} = V.$$

由关系式(19.9)得出

$$\langle \psi_a^{(-)} | V | \varphi_a \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_b^{(-)*}(-\Omega_a). \tag{19.17}$$

从(19.15—17),我们得出重要的等式:

$$\langle \psi_i^{(-)} | V | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle. \tag{19.18}$$

3. 截面和 T 矩阵　微观可逆性

如果(19.4)中的散射振幅用它的积分表示式(19.15)代替,我们得到

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} |\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle|^2.$$

为了得到一个类似于(17.54)那样的公式,我们依照§17.5的定义[见方程(17.52)]并用 $v = \frac{\hbar k}{m}$ 代表初速度,引入能量 E 处的状态密度:

$$\rho(E) = (2\pi\hbar)^{-3} p^2 (dp/dE) = m\hbar k/(2\pi\hbar)^3,$$

那末上一方程变为[1]:

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega}=\frac{2\pi}{\hbar v}|\langle\varphi_b|V|\psi_a^{(+)}\rangle|^2\rho(E). \qquad (19.19)$$

由于$|\psi_a^{(+)}\rangle$和$|\varphi_b\rangle$不是同一表象中的基，因而$\langle\varphi_b|V|\varphi_a^{(+)}\rangle$并不真是算符 V 的矩阵元. 引入如下定义的 T 矩阵是方便的，

$$T_{a\to b}\equiv\langle\varphi_b|T|\varphi_a\rangle=\langle\varphi_b|V|\psi_a^{(+)}\rangle. \qquad (19.20)$$

我们称T为**跃迁矩阵**，称**矩阵元** $T_{a\to b}$ **为** $a\to b$ **的跃迁振幅**. 注意，这些矩阵元是在相同能量的平面波之间作的. 显而易见，我们可以设想T是希尔伯特空间中满足条件(19.20)的一个算符. 但是这条件不能完全决定它，只能决定它在平面波表象中的某些矩阵元，即对应于特定能量的波之间的矩阵元. 要完全决定 T，我们还必须决定对应其它能量(不同于 E)的波之间的矩阵元. 这一点留在以后去做.

公式(19.19)现在可以写成:

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega}=\frac{2\pi}{\hbar v}|T_{a\to b}|^2\rho(E). \qquad (19.19')$$

在继续讨论之前，我们讨论一下微观可逆性这个性质. 分别用指标 Ka 和 Kb 标记对应于动量为 $-\boldsymbol{k}_a$ 和 $-\boldsymbol{k}_b$ 的各种波. 我们可得出平面波之间的显而易见的关系式:

$$\varphi_{-k}=\varphi_k^*.$$

其次，由于哈密顿量H是实的，因而

$$\psi_{-k}^{(\mp)}=\psi_k^{(\pm)*}.$$

尤其是

$$\varphi_a=\varphi_{Ka}^* \qquad \psi_b^{(-)}=\psi_{Kb}^{(+)*}.$$

由于V是实的，“矩阵元”$\langle\psi_b^{(-)}|V|\varphi_a\rangle$和$\langle\varphi_{Ka}|V|\psi_{Kb}^{(+)}\rangle$

1) 在碰撞理论的其他表述中(参看本章 § 1 所注出的文献)，此式自然地从截面的定义引出.

代表同一个积分. 于是,(19.18)也可以写成

$$\langle \varphi_{Ka}|V|\psi_{Kb}^{(+)}\rangle = \langle \varphi_b|V|\psi_a^{(+)}\rangle,$$

或者由定义(19.20),我们还能写成

$$T_{Kb\to Ka} = T_{a\to b}. \tag{19.21}$$

毫无疑问,这两个振幅有相同的模. 现在回到(19.19′)上,我们得出**弹性散射的微观可逆性**[1]:

$$d\sigma_{Kb\to Ka}/d\Omega = d\sigma_{a\to b}/d\Omega. \tag{19.22}$$

4. 玻恩近似

公式(19.19)是**精确**的,此式由公式(10.2)推出,和(10.2)类似,它将截面和定态散射解 $\psi_a^{(+)}$ 联系起来. 在现在的情况下,后者不再以它的渐近形式出现,而是作为积分中的一个因子出现. 如果我们用一近似解代替它,就得到截面的近似公式.

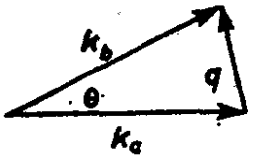


图19.1

特别是,当 $V(r)$ 足够小时,$\psi_a^{(+)}$ 与入射平面波 φ_a 的差别不大. 在跃迁振幅的计算中,可用 φ_a 代替 $\psi_a^{(+)}$. 由此得到**玻恩近似**:

$$T_{a\to b} \simeq T_{a\to b}^{(B)} = \langle \varphi_b|V|\varphi_a\rangle. \tag{19.23}$$

在这近似中,(19.19)约化为公式(17.54). 这说明我们的猜想是正确的,即在 $V(r)$ 可当作微扰处理的极限情况下,它给出截面的一个近似公式.

设

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}_b - \boldsymbol{k}_a,$$

$\hbar\boldsymbol{q}$ 是碰撞过程中传递给粒子的动量(图19.1). 这矢量的大小与两个矢量 $\boldsymbol{k}_a$ 和 $\boldsymbol{k}_b$ 之间的散射角 θ 有如下的关系:

---

1) 对于中心势,这性质也可从转动不变性推出. 这里我们看到,对于非中心势,它也是成立的.

$$q = 2k\sin\frac{1}{2}\theta \qquad (k = k_a = k_b). \tag{19.24}$$

从(19.23)得到

$$T^{(B)}_{a\to b} = \int e^{-iq\cdot r}V(r)dr = \mathscr{V}(q). \tag{19.25}$$

于是在玻恩近似中，散射截面有特别简单的形式：

$$\frac{d\sigma^{(B)}_{a\to b}}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}|\mathscr{V}(q)|^2. \tag{19.26}$$

它正比于碰撞过程中传递动量所对应的 $V(r)$ 的傅里叶分量的模方. 注意，能量和角度的依赖关系全都包括在矢量 q 中.

对于中心势，情况还更简单. 对角度积分后，(19.25)的右边变为

$$\mathscr{V}(q) = \frac{1}{q}\int_0^\infty \sin qr\,V(r)r\,dr. \tag{19.27}$$

现在微分截面只与动量传递的大小 $\hbar q$ 有关. 至于总截面 σ_{tot}，如果我们用 q 而不用 θ 作积分变量，那末

$$\sigma^{(B)}_{tot} = \frac{m^2}{2\pi\hbar^4k^2}\int_0^{2k}\mathscr{V}^2(q)q\,dq. \tag{19.28}$$

从这些公式出发，我们可以对高能的截面行为作出若干普遍的结论. 用 a 代表势 $V(r)$ 的力程. 由于实函数 $V(r)$ 只在线度为 a 的范围内取可察知的值，因而它的傅里叶变换只在原点附近线度为 $\frac{1}{a}$ 的区域内取可察知的值[1].

所以，截面只在 $q\lesssim\frac{1}{a}$ 范围内是相对地重要的. 依照(19.24)，与这个范围对应的散射角是

$$\sin\frac{1}{2}\theta\lesssim\frac{1}{2ka}.$$

---

1) 在现在的讨论中，a 可取作一个长度，其量级为势分布的均方偏差：

$$\frac{V^2(r)}{\int V^2(r')dr'}.$$

在高能的情况下（$ka \gg 1$），散射基本上是**集中在朝前的方向上**，即在 θ 小于 $\frac{1}{ka}$ 的锥体内．基于玻恩近似得到的这些结论可以和 § 10.13 中一个硬球的高能散射结果相比较．

总截面象 $\frac{1}{E}$ 一样趋于零．从(19.28)明显看出有这结果．(19.28)的渐近形式是

$$\sigma_{\text{tot}}^{(B)} \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{m^2}{2\pi\hbar^4 k^2}\int_0^\infty \mathscr{V}^2(q)q\,dq. \qquad (19.29)$$

将这些推广到非中心势，并无什么困难．

5. 散射的积分方程

直至现在，$\psi_a^{(+)}$ 被规定为满足某种边界条件的薛定谔方程的解．现在就要证明，它也是某个积分方程的解．采用这种新的定义，我们能够将 $\psi_a^{(+)}$ 写成 V 的幂级数的展开形式，而且能够对玻恩近似的正确程度作出估计．

为此目的，我们利用恒等式[1]

$$(\Delta + k^2)\frac{e^{ikr}}{r} = -4\pi\delta(r).$$

由此可知函数

$$\mathscr{G}(r,r') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} \qquad (19.30)$$

具有下面的性质

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + k^2)\mathscr{G}(r,r') = \delta(r-r'). \qquad (19.31)$$

---

1) 作为一种分布(在 Schwartz 的意义上)来考虑，e^{ikr}/r 是各阶可微．为了得出它的拉普拉斯式，我们利用恒等式

$$\Delta(1/r) = -4\pi\delta(r)$$

以及性质 $\quad \Delta(fg) = (\Delta f)g + 2(\nabla f)\cdot(\nabla g) + f\Delta g.$

$\mathscr{G}(r,r')$ 是能量 $E=\hbar^2k^2/2m$ 的自由粒子格林函数。其复共轭函数也有同样的性质。

关于 $\psi_a^{(+)}$ 的薛定谔方程可写成

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta+k^2)\psi=V\psi. \tag{19.32}$$

暂时假定函数 $F(r)=V(r)\psi(r)$ 是已知的。那末，方程(19.32)是 ψ 的非齐次偏微分方程。由(19.31)可知，函数

$$\hat{\psi}(r)=\int\mathscr{G}(r,r')F(r')\mathrm{d}r'$$

是它的一个解，再加上齐次方程的通解 $\psi(r)$，就得到非齐次方程的通解。换言之，如果 ψ 遵从方程(19.32)，则 $\psi-\hat{\psi}$ 是一个有相同能量的自由波：

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta+k^2)(\psi-\hat{\psi})=0, \tag{19.33}$$

而且反之亦然。

要完全决定 $\psi-\hat{\psi}$，只需找出它的渐近形式。我们首先证明，$\hat{\psi}$ 渐近地趋于一个出射波。在(19.30)中，代入渐近公式

$$|r-r'|=r\left[1-2\frac{r\cdot r'}{r^2}+\frac{r'^2}{r^2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\underset{r\to\infty}{\sim} r-\frac{r}{r}\cdot r'+O\left(\frac{r'}{r}\right),$$

对于 $r\gg r'$ 情况，我们得到

$$\frac{\mathrm{e}^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot r'}+O\left(\frac{r'}{r}\right), \tag{19.34}$$

由此导出

$$(\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{r}/r)$$

$$\hat{\psi}(r)\underset{r\to\infty}{\sim}-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\int\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot r'}V(r')\psi(r')\mathrm{d}r'. \tag{19.35}$$

当 r 远大于势的力程($r\gg a$)时，这个公式是适用的。因而，若 ψ 的渐近形式由(19.3)给定，则 $\psi-\hat{\psi}$ 也有($\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}_a\cdot r}$ + 出射

波）这样的渐近形式．因为它也满足方程(19.33)，所以它必须为平面波 $e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}$．于是，

$$\psi_a^{(+)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} V(\boldsymbol{r}')\psi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'. \quad (19.36)$$

方程(19.36)等价于(19.3)，我们称它为**散射积分方程**．

借助于(19.34)，$\psi_a^{(+)}$ 的渐近行为可以直接从(19.36)的右边看出；性质(19.15)就可用这种方式来证明．

$\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 用其复共轭 $\mathcal{G}^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 替代，我们可重复进行上面的分析．$\mathcal{G}^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})$ 也是自由粒子的格林函数，但它与入射波渐近行为相对应．由此得出积分方程

$$\psi_a^{(-)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{-ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} V(\boldsymbol{r}')\psi_a^{(-)}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'. \quad (19.37)$$

6. 玻恩展开

方程(19.36)和(19.37)可用迭代法求解．这方法类似于求解含时间的微扰论方程(17.13)时所用过的方法．

考虑方程(19.36)，用平面波 $e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}$ 代替右边积分号内的 $\psi_a^{(+)}$，就有

$$\psi_1^{(+)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} + \int \mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}'}d\boldsymbol{r}'.$$

接着再用 $\psi_1^{(+)}$ 代入，我们得到

$$\psi_2^{(+)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} + \int \mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi_1^{(+)}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'.$$

再代入 $\psi_2^{(+)}$，我们得出一个新的波函数 $\psi_3^{(+)}$，如此继续下去．在合适的条件下，用这种方法给出的级数收敛于精确解 $\psi_a^{(+)}$．那末，$\psi_a^{(+)}$ 可用 V 的幂展开来表述，即

$$\psi_a^{(+)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} + \sum_{n=1}^{\infty}\int K_n(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}'}d\boldsymbol{r}', \quad (19.38)$$

此处，

$$K_n(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \int K_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'')K_{n-1}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'' \quad (n>1)$$

$$K_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \mathscr{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}').$$

这就是定态散射波的**玻恩展开**. 将 $\psi_a^{(+)}$ 的上述展开式代入积分 $\langle\varphi_b|V|\psi_a^{(+)}\rangle$ 中，我们可以得出 $T_{a\to b}$ 的类似展开式. 它是 V 的幂展开式，而且对足够小的 V[1]，它是收敛的. 玻恩近似就在于只保留第一项.

7. 玻恩近似适用性的判据

为了确保玻恩近似是正确的，在 $T_{a\to b}$ 的计算中，用平面波 φ_a 代替 $\psi_a^{(+)}$ 所带来的误差必须是可以忽略的. 所以，在势 V 存在的范围内，要求精确的定态波只与平面波有很小的差别.

令 $$\psi'(\boldsymbol{r}) = \psi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}) - e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}},$$

我们得出条件:

$$|\psi'(\boldsymbol{r})| \ll 1 \qquad (19.39)$$

(在 V 比较大的某点 $\boldsymbol{r}$ 上).

取 ψ' 的玻恩展开式中的第一项，我们就能估计出 ψ' 的值. 让 z 轴沿着 $\boldsymbol{k}_a$ 的方向，变量有一明显变化后，我们得到

$$\psi'(\boldsymbol{r}) \simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2}e^{ikz}I(\boldsymbol{r})$$

$$I(\boldsymbol{r}) = \int e^{ik(R+Z)}V(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{R}/R.$$

由于 k 出现在指数上，$|I|$ 与能量有关. 但是积分号下的量被

1) 有关玻恩近似收敛性的研究，可参考 R. Jost 和 A. Pais, *Phys. Rev.* **82** (1951) 840; W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* **26** (1954) 292.
在含时间的微扰方法中出现的积分方程（第十七章）是维他里型的. 若 $U^{(0)}$ 和 V 是函数而不是算符，则用迭代法得到的 U 展开式常常是收敛的. 发散的唯一可能原因是由于 $U^{(0)}$ 和 V 是希尔伯特空间中的算符. 另一方面，我们这里所考虑的积分方程是弗雷德霍姆型的，而且玻恩展开式不总是收敛的.

它的模代替，我们就得到一个与能量无关的上限：

$$|I| < \int |V(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})|\mathrm{d}\boldsymbol{R}/R. \qquad (19.40)$$

势的力程用 a[1] 代表，它的平均深度用 V_0 代表．在变数 $\boldsymbol{r}$ 的适当范围内，这个上限近似为 $2\pi V_0 a^2$．所以，若

$$V_0 \ll \hbar^2/ma^2. \qquad (19.41)$$

则玻恩近似在各种能量下都是正确的．

显然，这个条件太严了．能量足够低时（即当 $ka \ll 1$），因子 $e^{ik(R+Z)}$ 在势范围内[2]实际上是一常数，只有在这时，积分 $|I|$ 才能达到 (19.40) 所规定的限制．如果是相反的情况，即 $ka \gg 1$，则这个因子在势的整个范围内迅速地振荡．因此，以上的处理过于保守了．当 $k \to \infty$ 时，这些振荡变得非常迅速，积分 $|I|$ 趋于 0．所以，我们可以期望足够高能时，玻恩近似是适用的．

I 在高能时的渐近行为可由稳定相位方法得到．主要的贡献来自振荡相因子是稳定的那些点周围的区域，即半直线 $X = Y = 0, Z < 0$ 的邻近区域．计算的细节不在这里给出[3]．我们得到

$$I \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{2\pi i}{k}\int_{-\infty}^{z} V(x,y,z')\mathrm{d}z' + O(k^{-2}). \qquad (19.42)$$

于是，在这一极限情况下，在我们感兴趣的 $\boldsymbol{r}$ 的邻域内，$|I|$ 的量级是 $2\pi V_0 a/R$．所以，如果我们有

$$ka \gg 1 \qquad V_0 \ll \hbar^2 k/ma. \qquad (19.43)$$

则判据 (19.39) 得到满足．

中能时(19.41)不成立，为了得出这时玻恩近似适用性的

---

1) 参看本章 § 4 的注释．

2) 若 V 的符号不变，我们精确地得到 $f(\boldsymbol{r}) \underset{k\to 0}{\sim} \int V(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{R}/R$．

3) 例如，参考 L. I. Schiff, *Phys. Rev.* **103** (1956) 443.

判据，我们必须处理每一具体情况的积分．实际上，通常处理势范围内所选定的适当的个别点，比如说点 $r=0$．对中心势，作角度积分后，我们求出

$$I(0)=\frac{2\pi i}{k}\int_0^\infty (1-e^{2ikr})V(r)dr,$$

这与性质 (19.40) 和 (19.42) 很一致．因此判据变为

$$\left|\int_0^\infty (1-e^{2ikr})V(r)dr\right| \ll \hbar^2k/m. \qquad (19.44)$$

在碰撞问题中，与截面有关的一个特征量是与粒子间力程 a 相对应的**几何截面** $4\pi a^2$，当玻恩近似适用时，总截面比这个量小得多，即

$$\sigma_{tot} \ll \text{几何截面} \qquad (19.45)$$

让我们就两种极限情况 $ka \ll 1$ 和 $ka \gg 1$ 来论证这个不等式．为此，我们利用总截面的表达式 (19.28)．按定义[方程 (19.25)]，在原点附近，线度为 $\frac{1}{a}$ 的范围内，函数 $\mathscr{V}(q)$ 的量级为 $(2\pi)^{3/2}V_0a$，而在其他地方实际上是零．把这些结果代入 (19.28) 的右边，我们得到

$$\sigma_{tot}^{(B)}/4\pi a^2 \approx 2\pi(V_0ma^2/\hbar^2)^2 \qquad \text{若 } ka \ll 1$$

$$\sigma_{tot}^{(B)}/4\pi a^2 \approx \frac{1}{2}\pi(V_0ma/\hbar^2k)^2 \qquad \text{若 } ka \gg 1.$$

玻恩近似的适用条件，在第一种情况下是不等式 (19.41)；在第二种情况下是(19.43)．在这两种情况下，都有：$\sigma_{tot}^{(B)}/4\pi a^2 \ll 1$．

不等式(19.45)是玻恩近似适用性的必要条件，但不是充分条件．由于共振效应，例如慢电子被原子散射时的冉邵尔-汤森德效应，有时会发生截面远小于几何截面，但玻恩展开式并不迅速收敛的情况．在实际工作中，共振效应对入射能量的变化很敏感，因而很容易被辨认出来．由于这些限制，对玻

恩近似的适用性作出判断来说，不等式(19.45)是最有用的判据。

8. 原子对电子的弹性散射

作为一个应用，我们考虑一个带电粒子被一个原子弹性散射的情形。在这里要做的简化处理中，我们把原子当作一种电荷分布，而且用玻恩近似来计算带电粒子被这电荷分布产生的势所散射的截面。如果我们是在玻恩近似适用的范围内进行(参看§21)，则这个方法实际上给出正确的截面。为了明确起见，我们假定入射粒子是电子。正常地说，我们本应考虑入射电子与原子中电子之间的交换效应，但由于在玻恩近似适用的能量下，它只给出很小的改正。因此，这种效应可忽略。

按假定，原子是中性的。我们用Z代表原子序数；用$\rho(r)$代表电子密度，即

$$\int \rho \mathrm{d}r = Z.$$

电势满足泊松方程

$$\Delta\varphi = -4\pi e[Z\delta(r) - \rho(r)]. \tag{19.46}$$

电子受到势

$$V(r) = -e\varphi(r),$$

的作用。这势也满足类似的方程，它的傅里叶变换给定了$\mathscr{V}(q)$和$F(q)$之间的关系：

$$q^2\mathscr{V}(q) = 4\pi e^2[Z - F(q)], \tag{19.47}$$

其中，$\mathscr{V}(q)$由(19.25)或(19.27)定义，而函数$F(q)$为

$$F(q) = \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\cdot r}\rho(r)\mathrm{d}r = q^{-1}\int_0^\infty \sin qr\,\rho(r)r\mathrm{d}r. \tag{19.48}$$

借助(19.47)，在玻恩近似下的截面[方程(19.26)]是

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{4[Z - F(q)]^2m^2e^4}{\hbar^4q^4}. \tag{19.49}$$

我们称 $F(q)$ 为电子密度的**形状因子**. 它的一般形式很容易从 $\rho(r)$ 的表示式推出. 特别是,我们得出

$$F(0) = Z.$$

如果 a 是原子半径,即电子与原子核的平均距离,那末, 因子 F 只在 $q \lesssim \frac{1}{a}$ 的范围内有可觉察的值.

作为一个例子,如果电子密度由下式表述,

$$\rho(r) = \frac{Ze^{-r/a}}{2a^3},$$

那末, 形状因子就是

$$F(q) = Z[1 + q^2a^2]^{-2}.$$

当 $qa \gg 1$ 时,即对很大的散射角:

$$\sin\frac{1}{2}\theta \gg \frac{1}{2ka},$$

形状因子实际上为零 $[F(q) \ll Z]$,而公式 (19.49) 实质上约化为卢瑟福公式,它给出的截面仅包含原子核引起的散射,电子的效应可忽略.

另一方面,一旦 $qa \lesssim 1$ 时, 电子的效应变得显著起来, 所以对小角度, 即

$$\sin\frac{1}{2}\theta \lesssim \frac{1}{2ka}. \qquad (19.50)$$

屏蔽效应是明显的. 这与经典图象一致. 在那里, 小的散射角度对应着大的碰撞参数.

最后,我们以考查玻恩近似的适用性来结束我们的讨论.

势的力程为 a 的数量级. 按费米-托马斯模型作的一个估计:

$$a \simeq \frac{Z^{-\frac{1}{3}}\hbar^2}{me^2}.$$

对于势的平均值,我们可以取 $r = a$ 时的库伦势,即

$$V_0 \simeq \frac{Ze^2}{a}.$$

在下面，我们使用熟知的符号：

$$v = \frac{\hbar k}{m}, \qquad \gamma = \frac{Ze^2}{\hbar v};$$

因此

$$ka = Z^{\frac{2}{3}}\gamma^{-1}.$$

判据 (19.41) 要求 $Z^{\frac{2}{3}} \ll 1$，所以，这判据总是不能实现的. 因此，玻恩近似只有在能量足够高时才是正确的. 在高能范围 ($ka \gg 1$)，即 $\gamma \ll Z^{\frac{2}{3}}$，判据 (19.43) 要求 $\gamma \ll 1$.

总结起来，只有在能量足够高时，即

$$\gamma \ll 1,$$

玻恩近似才是正确的. 在这情况下，屏蔽效应只对非常小的角度才明显. 在 (19.50) 规定的范围之外，即范围

$$\theta \lesssim \gamma$$

之外，它在实际上是可忽略.

通过对高能小角度的角分布进行精确的测量，并利用公式 (19.49) 来解释所测结果，就可以实验决定形状因子.

9. 中心势　相移计算

当我们有一中心势时，振幅 $T_{a\to b}$ 便只与散射角

$$\theta(\cos\theta = \boldsymbol{k}_a \cdot \boldsymbol{k}_b/k^2)$$

有关，而且可作如下展开：

$$T_{a\to b} = 16\pi^2 \Sigma_{lm} T_l Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}}_b) Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}_a) \qquad (19.51)$$

$$= 4\pi \Sigma_l (2l+1) T_l P_l(\cos\theta).$$

将此式与展开式 (10.31) 作一比较，容易找出系数 T_l 和相移的关系：

$$T_l = -\hbar^2 e^{i\delta_l} \sin\delta_l / 2mk. \qquad (19.52)$$

另一方面，又可以把积分 $\langle\varphi_b|V|\psi_a^{(+)}\rangle$ 中的 φ_b 和 $\psi_a^{(+)}$ 按球谐函数展开，从而直接地得到展开式 (19.51)．利用球谐函数的正交关系，角度积分是容易完成的．系数 T_l 以径向积分的形式出现．令

$$\psi_a^{(+)} = 4\pi\Sigma_{lm} i^l \phi_l(r) Y_l^m(\hat{k}_a) Y_l^{m*}(\hat{r}), \qquad (19.53)$$

我们得到

$$T_l = \int_0^\infty j_l(kr) V(r) \phi_l(r) r^2 dr. \qquad (19.54)$$

容易看出 (问题 19.4)：

$$\phi_l \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right)/kr.$$

比较关系式 (19.52) 和 (19.54)，我们容易得到 § 10.17[方程 (10.73)] 中给出的 $\sin\delta_l$ 的积分表述．在 l 分波充分趋近于自由波的极限情况下，此式化为相移的玻恩公式[方程(10.75)]．

用同样的方法，从散射的积分方程出发，我们得到 ϕ_l 的积分方程．为此，利用格林函数的如下展开式 (问题 19.4) 是合适的：

$$\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} = 4\pi k \Sigma_{lm} j_l(kr_<) h_l^{(+)}(kr_>) Y_l^{m*}(\hat{r}') Y_l^m(\hat{r}). \qquad (19.55)$$

在此式中，$r_<$ 和 $r_>$ 分别代表两个长度 r 及 r' 中比较小的和比较大的．将(19.53)，(19.55)和平面波展开式代入积分方程 (19.36) 中，我们得到出射分波的积分方程：

$$\phi_l(r) = j_l(kr) - (2mk/\hbar^2) \int_0^\infty j_l(kr_<) \cdot h_l^{(+)}(kr_>) V(r') \phi_l(r') r'^2 dr'. \qquad (19.56)$$

对这个方程作迭代，我们得到 ϕ_l 按 V 的幂次展开的式子．

10. 格林函数作为一个算符　它和 H_0 的预解式的关系

在上一小节中，格林函数表现为积分方程中的一个核．它

也可以考虑为按下式定义的算符 $G_0^{(+)}$ 的矩阵表示：

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \langle \boldsymbol{r}|G_0^{(+)}|\boldsymbol{r}'\rangle. \tag{19.57}$$

我们考虑一矢量 $|u\rangle$，而且用 $U(\boldsymbol{r})$ 代表它所对应的波函数 $u(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}|u\rangle$；应用 $G_0^{(+)}$ 而得的矢量 $G_0^{(+)}|u\rangle$ 由下面的函数来表示，

$$\langle \boldsymbol{r}|G_0^{(+)}|u\rangle = \int \mathscr{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')u(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'. \tag{19.58}$$

类似地，我们定义算符 $G_0^{(-)}$ 为

$$\mathscr{G}^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \langle \boldsymbol{r}|G_0^{(-)}|\boldsymbol{r}'\rangle. \tag{19.59}$$

因为 $\mathscr{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 对于 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{r}'$ 是对称的，可得

$$G_0^{(-)} = G_0^{(+)\dagger}. \tag{19.60}$$

指标 0 指明这些算符是和自由粒子哈密顿量 H_0 相联系．(+) 和 (−) 分别标明相应的渐近行为．从格林函数［方程 (19.34)］的渐近形式看出它们是

$$\langle \boldsymbol{r}|G_0^{(\pm)}|u\rangle \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kr}}{r}\int \mathrm{e}^{\mp \mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}u(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'. \tag{19.61}$$

$$(\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{r}/r)$$

这结果对任一有限模方的矢量（这条件保证了右边的积分是收敛的）都适用．

注意这些算符的极度的奇异性．除非 $u(\boldsymbol{r})$ 对长度为 k 的传播矢量的傅里叶分量全为 0，否则，对一个平方可积函数来说，$\langle \boldsymbol{r}|G_0^{(\pm)}|u\rangle$ 在无限远处的下降不是足够快的．换言之，$G_0^{(+)}$ 和 $G_0^{(-)}$ 作用到希尔伯特空间的一个矢量上，一般来说得到一个不属于这个空间的矢量．所以，严格地说，$G_0^{(+)}$ 和 $G_0^{(-)}$ 不是希尔伯特空间的算符．

然而，他们可以象下面这样定义为希尔伯特空间算符的极限：

$$G_0^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{1}{E - H_0 \pm \mathrm{i}\varepsilon}(\varepsilon > 0). \tag{19.62}$$

右边被看成是预解式 $(z - H_0)^{-1}$（参看第十六章第 III

节)。对复变数 z 的全部取值(H_0 的本征值,即正实轴上的点除外),它是希尔伯特空间的(有界)算符。预解式在正实轴附近的行为由(19.62)给定。如果 z 从实轴的上面 ($\mathrm{Im}z > 0$)趋向 E,则 $(z - H)^{-1}$ 趋向于 $G_0^{(+)}$;如果 z 从实轴的下面 ($\mathrm{Im}z < 0$) 趋向于 E,则 $(z - H_0)^{-1}$ 趋于 $G_0^{(-)}$。

(19.62)式的证明如下。从 $\{\boldsymbol{p}\}$ 表象中的 $(z - H_0)^{-1}$ 的(对角)矩阵出发,应用熟知的么正变换,得到它在 $\{\boldsymbol{r}\}$ 表象中的矩阵:

$$\langle \boldsymbol{r}|(z - H_0)^{-1}|\boldsymbol{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})}\left(z - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right)^{-1} d\boldsymbol{k}',$$

角度积分容易完成。引入如下定义的量:

$$z = \hbar^2\zeta^2/2m \qquad \mathrm{Re}\zeta > 0,$$

而且令

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}',$$

那么,我们得到

$$\langle \boldsymbol{r}|(z - H_0)^{-1}|\boldsymbol{r}'\rangle = \frac{m}{\pi^2\hbar^2 R}\int_0^\infty \frac{k' \sin k'R}{\zeta^2 - k'^2}\, dk'$$

$$= \frac{m}{\pi\hbar^2 R}\,\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k' e^{ik'R}}{\zeta^2 - k'^2}\, dk'.$$

如果我们用上半平面内的无限大的半圆围道使积分路线封闭,那末,上式最末一个积分的大小并不改变。于是,围道积分等于 $2\pi i$ 乘上半平面的各个极点的残数之和。在现在的情况下,恰好只有一个极点,它的位置与 $\mathrm{Im}z$ 的符号有关,所以积分依赖于 $\mathrm{Im}z$ 的符号 (图 19.2):

(a) $\mathrm{Im}z > 0$。 极点是 $k' = \zeta$,残数为 $-\frac{1}{2}e^{i\zeta R}$;

(b) $\mathrm{Im}z < 0$。 极点是 $k' = -\zeta$,残数为 $-\frac{1}{2}e^{-i\zeta R}$。

结果为

$$\langle \boldsymbol{r}|(z - H)^{-1}|\boldsymbol{r}'\rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \times \begin{cases} e^{i\zeta R}/R & \text{若 } \mathrm{Im}z > 0 \\ e^{-i\zeta R}/R & \text{若 } \mathrm{Im}z < 0. \end{cases}$$

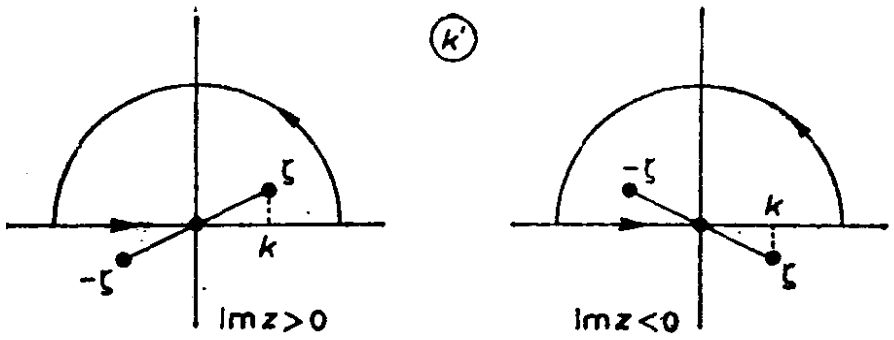


图19.2

这些表达式要和 $\mathscr{G}(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{r}')$ 的表达式[方程 (19.30)] 相比较. 在 z 趋于 E 的极限情况，ζ 趋于 k，上面所计算的矩阵元趋于 $\mathscr{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 或 $\mathscr{G}^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$，这依取极限过程中 z 的虚部是正的还是负的而定. 证毕.

算符本身与其表示矩阵比较起来，常常更容易进行代数运算.因此，利用算符 $G_0^{(+)}$ 和 $G_0^{(-)}$ 而不用格林函数本身常常有好处. 但是，这些算符是奇异的，对他们的运算要谨慎和精明[1]. 严格的意义上说，应该用规则算符 $(E-H_0\pm i\varepsilon)^{-1}$ 来代替他们，而且作极限 $\varepsilon\to 0$ 时，要小心地考查. 当用算符 $(E-H_0\pm i\varepsilon)^{-1}$ 代替 $G_0^{(\pm)}$ 时，总是理解为: ε 是正实数，而且这式子是要在极限情况 $\varepsilon\to 0^+$ 下考虑的.

我们现在可把积分方程(19.36)和(19.37) 写成下面的形式:

$$\psi_a^{(\pm)}=\varphi a+G_0^{(\pm)}V\psi_a^{(\pm)} \tag{19.63}$$

---

1) 特别是，必须注意到，G 仅作用在有限模方的矢量上. 可用下例来说明一种易犯的错误，如果忘记了这些算符的奇异特征，就会出现这种错误. 从关系式(19.31)以及格林函数对于 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{r}'$ 的对称性，我们得到

$$(E-H_0)G_0^{(\pm)}=1,\quad G_0^{(\pm)}(E-H_0)=1.$$

这些关系式意味着: 每一式的左边作用在有限模方的矢量上都得到同样的矢量，再没有别的了. 然而，如果从表面上看去，就会断言: $E-H_0$ 存在逆算符，这显然是不对的;而且 $G_0^{(+)}$ 和 $G^{(-)}$ 两者有相同的逆算符，所以彼此相等，这也是不对的.

或

$$\psi_a^{(\pm)} = \varphi_a + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V\psi_a^{(\pm)}. \qquad (19.63')$$

对这些方程作迭代，我们得到玻恩展开式：

$$\psi_i^{(\pm)} = \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (G_0^{(\pm)}V)^n\right]\varphi_a. \qquad (19.64)$$

在这些表示式中，符号 ψ 和 φ 或者代表定态波本身，或者代表他们的刃矢（不引起混乱时，我们采用符号 $|\rangle$）.

上式两边的刃矢分别用其共轭的刁矢代替，我们就从这些式子得出共轭方程. 由于 H_0 是厄密的，我们有

$$G_0^{(+)\dagger} = G_0^{(-)} \qquad G_0^{(-)\dagger} = G_0^{(+)}. \qquad (19.65)$$

从 (19.63)，得到

$$\langle\psi_a^{(\pm)}| = \langle\varphi_a| + \langle\psi_a^{(\pm)}|VG_0^{(\mp)} \qquad (19.66)$$

从 (19.64)，我们得到玻恩展开式

$$\langle\psi_a^{(\pm)}| = \langle\varphi_a|\left[1 + \sum_{n=1}^{\infty}(VG_0^{(\mp)})^n\right]. \qquad (19.67)$$

II. 普遍化为扭曲波近似

11. 广义玻恩近似

可以有这样的情况：对利用玻恩近似来说，势 $V(r)$ 太大，但我们对相近的势 V 的散射问题可以精确求解. 把两者之差当作微扰来处理是有利的. 只要将第 I 节的处理作简单的推广，我们就很容易做到这一点.

设

$$V(r) = U_1(r) + W_1(r) \qquad (19.68)$$
$$H_1 = H_0 + U_1(r).$$

因而有

$$H = H_1 + W_1. \tag{19.69}$$

H_1 是非微扰哈密顿量，W_1 是微扰．我们假定：U_1 和 V 比 $\frac{1}{r}$ 更快地趋于 0．在 § 15 中，我们再普遍化到势 $\frac{1}{r}$ 的情况．假定 H_1 的定态是已知的，并用字母 χ 来代表，而对应的振幅用 g 代表，其余的用 § 2 的符号．$\chi_a^{(+)}$ 和 $g_a^{(+)}$ 定义为：

$$H_1\chi_a^{(+)} = E\chi_a^{(+)} \qquad \chi_a^{(+)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\mathbf{k}_a\cdot\mathbf{r}} + g_a^{(+)}(\Omega)e^{ikr}/r.$$

第 I 节中关于哈密顿量 H 的全部结果显然对 H_1 也成立．特别是，对于哈密顿量 H_1 所决定的能量为 E 的碰撞，我们可以定义一个用 $T^{(1)}$ 来代表的跃迁矩阵：

$$T^{(1)}_{a\to b} \equiv \langle\varphi_b|T^{(1)}|\varphi_a\rangle = \langle\varphi_b|U_1|\chi_a^{(+)}\rangle = \langle\chi_b^{(-)}|U_1|\varphi_a\rangle. \tag{19.70}$$

在 § 2 的结果中．我们还记得：

$$g_b^{(-)*}(-\Omega_a) = g_a^{(+)}(\Omega_b) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}T^{(1)}_{a\to b}.$$

从 (19.9)，我们得到差 $T_{a\to b} - T^{(1)}_{a\to b}$ 的积分表示式．取

$$\hat{U} = U_1, \qquad U = V,$$

我们有

$$\begin{aligned}\langle\chi_b^{(-)}|W_1|\varphi_a^{(+)}\rangle &= -\frac{2\pi\hbar^2}{m}[f_a^{(+)}(\Omega_b) - g_b^{(-)*}(-\Omega_a)]\\ &= -\frac{2\pi\hbar^2}{m}[f_a^{(+)}(\Omega_b) - g_a^{(+)}(\Omega_b)]\\ &= T_{a\to b} - T^{(1)}_{a\to b}.\end{aligned} \tag{19.71}$$

用同样的方法，取 $\hat{U} = V$ 和 $U = V_1$，我们得出

$$\langle\phi_b^{(-)}|W_1|\chi_a^{(+)}\rangle = T_{a\to b} - T^{(1)}_{a\to b}. \tag{19.72}$$

顺便说明一下，关系式

$$\langle\varphi_b^{(-)}|W_1|\chi_a^{(+)}\rangle = \langle\chi_b^{(-)}|W_1|\phi_a^{(+)}\rangle, \tag{19.73}$$

是(19.71)和(19.72)的一个明显的结果，也是关系式(19.18)

的一个推广.

这两个积分表示式的任一个都可作为微扰处理的出发点. 我们取 (19.71), 由此得出

$$\boxed{T_{a\to b} = T^{(1)}_{a\to b} + \langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \phi_a^{(+)} \rangle} \qquad (19.74)$$

跃迁振幅的这一公式是精确的. 第一项是 W_1 不存在时的结果, 第二项是 W_1 引起的改正. 对于足够小的 W_1, 精确的定态波函数 $\phi_a^{(+)}$ 与 $\chi_a^{(+)}$ 的差别不大. 在改正项中, 可用 $\chi_a^{(+)}$ 代替 $\phi_a^{(+)}$. 因此, 我们得到在微扰 W_1 作用下的一级跃迁振幅:

$$T_{a\to b} \simeq T^{(1)}_{a\to b} + \langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle. \qquad (19.75)$$

这是玻恩近似 [参看方程 (19.23)] 的普遍化. 在微扰积分

$$\langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle \equiv \int \chi_b^{(-)*}(\boldsymbol{r}) W_1(\boldsymbol{r}) \chi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}. \qquad (19.76)$$

中, 请注意到与出射波和入射波对应的定态解是同时出现的, 并注意它们各自的位置.

如果取 $U_1 = 0$, 我们就得到玻恩近似的结果. 在一般情况下, $U_1 \neq 0$ 时, 计算这个积分显然比计算玻恩公式中的积分更为困难. 当 U_1 和 V 两者都是球对称时, 情况变得略为简单. 我们可以利用下面的展开式 (问题 19.4):

$$\chi_k^{(\pm)} = \frac{4\pi}{kr} \sum_{lm} i^l e^{\pm i\eta_l} F_l(k; r) Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}}) Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}), \qquad (19.77)$$

其中 $F_l(k, r)$ 代表径向方程

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U_1 + k^2\right] y = 0, \qquad (19.78)$$

的规则解, 其渐近行为是

$$F_l(k; r) \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr - \frac{1}{2} l\pi + \eta_l\right). \qquad (19.79)$$

这里的 η_l 是 l 分波在势 U_1 中的相移. 将 $\chi_a^{(+)}$ 和 $\chi_b^{(-)}$ 的展开式代入积分式 (19.76) 中, 并对角度进行积分, 我们得到

$$\langle\chi_b^{(-)}|W_1|\chi_a^{(+)}\rangle = \frac{4\pi}{k^2}\sum_l(2l+1)P_l(\cos\theta)e^{2i\eta_l}$$

$$\cdot\int_0^\infty F_l^2(k;r)W_1(r)dr.$$

显然，W_1的范围越小，这个展开式的收敛性就越好.

12. 玻恩展开的普遍化

为了找出高级改正，我们必须将 $\psi_a^{(+)}$ 按 W_1 的幂展开.为此，我们采用类似于第 I 节的方法来找出 $\psi_a^{(+)}$ 的积分方程.对它可作迭代，从而给出所期望的展开式.

用 $G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 代表哈密顿量 H_1 的格林函数，对应的能量为 $E=\hbar^2k^2/2m$，并且具有出射波的渐近行为. 按定义，它是 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{r}'$ 的对称函数，并且满足偏微分方程.

$$(E-H_1)G_1^{(+)} \equiv \left[\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta+k^2)-U_1\right]G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$$

$$=\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}), \qquad (19.80)$$

当 $r\to\infty$ 而 r' 保持不变时，其渐近行为像 e^{ikr}/r 一样. 按定义，

$$\langle\boldsymbol{r}|G_1^{(+)}|\boldsymbol{r}'\rangle \equiv G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}').$$

是某个算符 $G_1^{(+)}$ 的矩阵表示. 我们在下一小节将证明，总是存在一个而且只有一个函数 $G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 具有这些性质.

采用 §5 的方法，用这个函数代替自由波的格林函数，我们就得出积分方程. 把 $\psi_a^{(+)}$ 的薛定谔方程写成下面的形式：

$$(E-H_1)\psi_a^{(+)} \equiv \left[\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta-k^2)-U_1\right]\psi_a^{(+)} = W_1\psi_a^{(+)}.$$

注意，由于方程 (19.80)，函数

$$\psi_a^{(+)} - \int G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')W_1(\boldsymbol{r}')\psi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'$$

满足“齐次方程”

$$(E-H_1)\chi = 0.$$

由于这个函数和 $\chi_a^{(+)}$ 有相同的渐近形式，它必须等于 $\chi_a^{(+)}$。因此，$\phi_a^{(+)}$ 满足积分方程

$$\phi_a^{(+)} = \chi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}) + \int G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')W_1(\boldsymbol{r}')\phi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'. \quad (19.81)$$

从方程 (19.81)，容易得出 $\phi_a^{(+)}$ 的 W_1 幂展开式。将这展开式代入 (19.74) 右边的“矩阵元”中，我们得到 $T_{a\to b}$ 按 W_1 的幂展开式。如果只保留这展开式的前两项，就得到近似公式 (19.75)。

$G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 的复共轭也是 H_1 的能量为 E 的格林函数，它就是函数 $G_1^{(-)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$，具有入射波的渐近行为。用类似的方法，我们从这些性质可导出积分方程

$$\phi_a^{(-)} = \chi_a^{(-)} + \int G_1^{(-)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')W_1(\boldsymbol{r}')\phi_a^{(-)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'. \quad (19.82)$$

从方程 (19.82) 出发并利用 (19.73)，我们也可以得出 $T_{a\to b}$ 按 W_1 的幂展开式。显然结果是相同的。

13. 扭曲波的格林函数

格林函数 $G_1^{(+)}$ 和 $G_1^{(-)}$ 的存在尚待证明。我们将要证明，通过方程 (19.62) 的自然推广，它们可以定义为 H_1 的预解式的极限，即

$$G_1^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon\to 0^+} \frac{1}{E - H_1 \pm \mathrm{i}\varepsilon}. \quad (19.83)$$

类似地，对 E 的每一个值，都可以把它和 H 结合成下面的函数

$$G^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon\to 0^+} \frac{1}{E - H \pm \mathrm{i}\varepsilon}. \quad (19.84)$$

我们先考虑算符 $G^{(+)}$ 和 $G^{(-)}$，并证明：

$$(E - H)G^{(\pm)} = 1, \qquad G^{(\pm)}(E - H) = 1. \quad (19.85)$$

设 $|u\rangle$ 是任一有限模方的矢量，显然有

$$(E-H)\frac{1}{E-H+i\varepsilon}|u\rangle=|u\rangle-\frac{i\varepsilon}{E-H+i\varepsilon}|u\rangle. \tag{19.86}$$

右边第二项的模方是

$$\begin{aligned}N(\varepsilon)&=\varepsilon^2\langle u|\frac{1}{(E-H)^2+\varepsilon^2}|u\rangle\\&=\varepsilon\int|u(E')|^2\frac{\varepsilon}{(E-E')^2+\varepsilon^2}dE'.\end{aligned}$$

上式第二行是采用一种H在其中为对角的表象来得到的. $|u(E')|^2dE'$是能量为E'的$|u\rangle$的分量之模方. 由δ函数的一个熟知性质[方程(4.15c)]可知，当$\varepsilon\to 0$时，积分趋于$\pi|u(E)|^2$. 于是，在这极限下，模方$N(\varepsilon)$趋于0. 所以，当$\varepsilon\to 0$时，方程(19.26)变为

$$(E-H)G^{(+)}|u\rangle=|u\rangle.$$

这对于任一有限模方的矢量$|u\rangle$[1]都正确，我们得到

$$(E-H)G^{(+)}=1.$$

(19.85)的另一个关系式可用同样的方法证明.

用类似的方式，可证明

$$(E-H_1)G_1^{(\pm)}=1,\qquad G_1^{(\pm)}(E-H_1)=1. \tag{19.87}$$

方程(19.85)和(19.87)表明，$G^{(\pm)}$和$G_1^{(\pm)}$分别是H和H_1的能量为E的格林函数. 在$\{r\}$表象中，这两式给出格林函数的特征偏微分方程. 于是，方程(19.87)的第一式给出方程(19.80).

在上面的证明中，我们相当细致地考查了取极限$\varepsilon\to 0^+$过程，因为它有重要的作用. 以后，我们不再拘泥于这些，而是按本章第10节末的约定，常常用$[E-H\pm i\varepsilon]^{-1}$代替$G^{(\pm)}$，用$[E-H_1\pm i\varepsilon]^{-1}$代替$G_1^{(\pm)}$，这里的$\varepsilon$是无限小的正实数.

1) 本章§10中注释的结论完全可应用到这里.

象 § 16.16 开头那样来作，我们得到基本的恒等式：

$$\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}-\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}=\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}V\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon} \tag{19.88a}$$

$$=\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}V\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}. \tag{19.88b}$$

分别用 H_1 和 U_1 代替 H 和 V，又分别用 H_1 和 W_1 代替 H_0 和 V，我们得到类似的恒等式。

作为恒等式 (19.88) 的第一个应用，我们能导出关系式[1]

$$(1+G^{(\pm)}V)(1-G_0^{(\pm)}V)=1 \tag{19.89a}$$

$$(1-G_0^{(\pm)}V)(1+G^{(\pm)}V)=1. \tag{19.89b}$$

现在，方程 (19.63) 可写成

$$[1-G_0^{(\pm)}V]\phi_a^{(\pm)}=\varphi_a.$$

算符 $(1+G^{(\pm)}V)$ 作用在这方程的两边，并利用(19.89a)来简化左边，我们得到重要的公式：

$$\phi_a^{(\pm)}=\left(1+\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}V\right)\varphi_a. \tag{19.90}$$

由于 H 是厄密的，我们显然有

$$G^{(\pm)\dagger}=G^{(\mp)}. \tag{19.91}$$

所以，方程 (19.90) 的共轭方程是

$$\langle\phi_a^{(\pm)}|=\langle\varphi_a|\left(1+V\frac{1}{E-H\mp i\varepsilon}\right). \tag{19.92}$$

现在，我们能够分别从 $G_0^{(+)}$ 和 $G_0^{(-)}$ 得到 $G^{(+)}$ 和 $G^{(-)}$ 的渐近行为。如果 $|u\rangle$ 是一个在无限远处足够快地下降的矢

---

1) 我们不能从这些恒等式推论出 $[1+G^{(\pm)}V]$ 和 $[1-G_0^{(\pm)}V]$ 是互逆的，甚至不能得出它们当中的每一个有逆算符的结论。参看本章 § 10 中的注释。

量，则从 (19.88b) 得到

$$G^{(\pm)}|u\rangle = G_0^{(\pm)}|\mathscr{Y}\rangle,$$

其中，

$$|\mathscr{Y}\rangle = (1 + VG^{(\pm)})|u\rangle.$$

如果矢量$|\mathscr{Y}\rangle$在无限远处[1]的下降也是足够快的，我们可应用 (19.61)，得出

$$\langle r|G^{(\pm)}|u\rangle \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{\pm ikr}}{r}\langle\varphi_{\pm k}|\mathscr{Y}\rangle. \qquad (19.93)$$

$$(k = kr/r).$$

所以，$G^{(\pm)}$ 作用在希尔伯特空间的矢量上通常给出一个矢量，其渐近行为象一个纯粹的出射波；而 $G^{(-)}$ 给出一个矢量，其渐近行为象一个纯粹的入射波．(19.93) 右边的$|\mathscr{Y}\rangle$用它的定义式代替，再利用如下事实 [方程 (19.91)]：

$$\langle\varphi_{\pm k}|(1 + VG^{(\pm)}) = \langle\phi_{\pm k}^{(\mp)}|,$$

我们就求出

$$\langle r|G^{(\pm)}|u\rangle \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{\pm ikr}}{r}\langle\phi_{\pm k}^{(\mp)}|u\rangle. \qquad (19.94)$$

可以看到：出现在 $G^{(+)}$ 的渐近式中的是 $\phi_k^{(-)}$ 波，而出现在 $G^{(-)}$ 的渐近式中的是 $\phi_{-k}^{(+)}$ 波．

$G_1^{(+)}$ 和 $G_1^{(-)}$ 有类似的性质，显然也有如下的渐近行为

$$\langle r|G_1^{(\pm)}|u\rangle \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{\pm ikr}}{r}\langle\chi_{\pm k}^{(\mp)}|u\rangle. \qquad (19.95)$$

$$(k = kr/r).$$

当 U_1 是球对称时，格林函数 $G_1^{(\pm)}$ 容易用径向方程 (19.78) 的解来表达．我们求得 (问题 19.4)：

$$\langle r|G_1^{(\pm)}|r'\rangle = -\frac{2m}{\hbar^2 k}\frac{1}{rr'}\sum_{lm} e^{\pm i\eta_l} F_l(k;r_<)u_l^{(\pm)}(k;r_>)$$

---

1) 如果在无限远处，V 的行为与 $\frac{1}{r}$ 相似，那末，以下的推导是不成立的．

$$\cdot Y_l^{m*}(\hat{r}')Y_l^m(\hat{r}). \qquad (19.96)$$

此处，$r_<$ 和 $r_>$ 分别是两个长度 r 和 r' 当中比较小的一个和比较大的一个；η_l 和 F_l 已在 § 11 中定义；$u_l^{(\pm)}$ 是方程(19.78)的不规则解，其渐近行为是

$$u_l^{(\pm)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{\pm i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}.$$

容易证明：显示形式(19.96)是 $G_1^{(+)}$ 和 $G_1^{(-)}$ 所具有的特征性质.

14. 应用 T 的定义和形式性质

利用在 § 13 中给出的格林函数的形式特性，我们只作某些简单的代数运算就可以得出以前得到的大部分结果．这种方法的好处是：一方面，形式上很简单；另一方面，容易普遍化.

具体说来，我们得到积分方程(19.81)和(19.82)的下述形式：

$$\phi_a^{(\pm)} = \chi_a^{(\pm)} + \frac{1}{E - H_1 \pm i\varepsilon} W_1 \phi_a^{(\pm)}. \qquad (19.97)$$

比较 (19.97) 两边的渐近行为，我们得到关系式 (19.74).

也可证明：

$$\chi_a^{(\pm)} = \left[1 + \frac{1}{E - H_1 \pm i\varepsilon} U_1\right] \varphi_a, \qquad (19.98)$$

$$\phi_a^{(\pm)} = \left[1 + \frac{1}{E - H \pm i\varepsilon} W_1\right] \chi_a^{(\pm)}, \qquad (19.99)$$

这些证明留给读者.

我们也可以给出 T 的一个形式定义．关系式 (19.20) 仅仅给出 T 在相同能量的平面波之间的矩阵元．考虑到方程(19.90)，这个关系式可写成

$$\langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | \left[V + V \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V\right] | \varphi_a \rangle. \qquad (19.100)$$

令

$$T = V + V\frac{1}{E - H + i\varepsilon}V. \qquad (19.101)$$

我们就将上一关系式普遍化. 在这个定义中，E 起一个简单的参数的作用，$T(z)$是复变数 z 的函数

$$T(z) = V + V\frac{1}{z - H}V$$

在 z 趋于实值 E 但仍留在上半平面 $(\mathrm{Im}z > 0)$ 时的极限值.

利用恒等式(19.88a)和(19.88b)，对方程(19.101)的右边作变换，我们容易得到算符 T 的下列积分方程:

$$T = V + T\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}V \qquad (19.102a)$$

$$T = V + V\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}T. \qquad (19.102b)$$

在实践中，通常遇到的是能量为 E 的自由波之间的 T 矩阵元，特别是能量为 E 的平面波之间的 T 矩阵元.

作为一个实例，我们只用 T 的形式性质就可证明微观可逆性关系式 (19.21). 用 K 表示 (反线性的) 时间反演算符. H_0 在时间反演下显然是不变的，而且还有

$$\varphi_{Ka} = K\varphi_a, \qquad \varphi_{Kb} = K\varphi_b. \qquad (19.103)$$

我们假定 H 也有这样的不变性质:

$$KHK^\dagger = H,$$

即

$$KVK^\dagger = V.$$

从定义 (19.84) 和 (19.101)，我们相继地得到

$$KG^{(+)}K^\dagger = G^{(-)} = G^{(+)\dagger}$$

和

$$KTK^\dagger = T^\dagger. \qquad (19.104)$$

从上述的时间反演下 T 的变换规律，我们导出

$$\begin{aligned} T_{Kh\to Ka} &= (\langle\varphi_a|K^\dagger)T(K|\varphi_b\rangle) \\ &= \langle\varphi_a|(K^\dagger TK)|\varphi_b\rangle^* \\ &= \langle\varphi_b|(K^\dagger T^\dagger K)|\varphi_a\rangle \\ &= \langle\varphi_b|T|\varphi_a\rangle = T_{a\to b}. \end{aligned}$$

这就是微观可逆性关系式.

15. 关于 $\frac{1}{r}$ 势的注释

在上几节中，我们处处假定势 $V(r)$，$U_l(r)$ 和 $W_l(r)$ 在无限远处比 $\frac{1}{r}$ 下降得更快. 这是已讨论过的各种波和格林函数具有上述渐近行为的必要条件. 然而，作某些修改，当 $V(r)$ 和 $U_l(r)$ 两者有 $\frac{1}{r}$ 的行为，但他们之差 $W_l(r)$ 比 $\frac{1}{r}$ 更快地趋于零时，同样的处理仍可使用. 渐近形式的不同仅仅表现在指数的辐角上需要附加一个正比于 $\ln 2kr$ 的项；u_l 和 F_l 的渐近形式的辐角也要作同样的修改. 除去这些不同点之外，方法和结果实际上是一样的. 特别是，格林函数的定义 (19.83) 和(19.84)仍然适用. 积分方程(19.97)和基本方程(19.74)也是可满足的. 在 W_l 可当作小微扰处理的极限情况下，公式 (19.75) 仍成立.

III. 复杂的碰撞和玻恩近似

16. 概述 截面

在这一节中[1]，我们将上两节的考虑扩充为任意两个粒子

1) 为了要更详尽的了解本节所引入的术语，可参看 J. Blatt 和V. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics* 第 8 章(Wiley, New York, 1952).

之间的碰撞．我们是在普遍意义下使用“粒子”这一词的．在这里，粒子可以有内部结构．在基本粒子（如电子、质子和中子）的情况下，内部变量约化为自旋变量．但是，我们也考虑由若干基本粒子构成的复杂粒子，如离子、原子、原子核等．

设有两个粒子（基本粒子或复杂粒子）A 和 X 发生碰撞．一般地说，可以观测到三种类型的效应：

（a）**弹性散射**．在弹性散射中，粒子只简单地发生偏转，而它们各自的内部量子态没有任何变化，

$$A + X \to A + X.$$

（b）**非弹性散射**．在非弹性散射中，除发生偏转外，还有粒子的内部状态变化[1]．例如，发射出来时它们分别处于状态 A' 和 X'

$$A + X \to A' + X'.$$

（c）**重排碰撞**（或更确切地称为**反应**）．在重排碰撞中，A 和 X 交换了一定数目的作为其组分的基本粒子．或者更一般地讲，系统 $(A + X)$ 分解为两个或更多个不同的粒子；例如在碰撞中出现了粒子 B 和 Y（不同于 A 和 X），

$$A + X \to B + Y.$$

化学反应是分子之间的重排碰撞，而核反应是原子核之间的重排碰撞．下面给出若干例子．

两个粒子碰撞的特征物理量是截面．对弹性散射而言，这概念已经在第 10 章（§ 2）定义过了．更一般地说，**在一给定的碰撞过程中，发生某种事件的截面等于单位时间单个靶核上出现这种事件的数目除以对准靶核的入射粒子通量．**

为了明确地规定 A 和 X 碰撞的截面，碰撞的初始条件，即

1）这种变化可以只有自旋的翻转．这里所采用的定义与通常的作法略有不同．通常的作法是根据粒子内能有或没有变化而将散射过程区分为非弹性或弹性散射．

量子态以及粒子A和X的速度必须准确地予于规定. 在通常的实验条件下,其中一个(比如说X)的速度为0. 实际上,通常是处于静止的X型的靶粒子被A型的单能粒子束所轰击. 然而,由于质心运动完全可以和相对运动分离,所以,简单的运动学考虑就可以找出因参考系改变而造成的不同初始条件所对应的截面之间的联系. 具体说,对§10.7的方法(参看问题10.2)作显然的推广,我们就能够使实验室坐标系(X的速度为0)中的截面与质心坐标系(质心速度为0)中的截面联系起来. 下面所考虑的所有截面都是对质心坐标系而言.

以后,用E表示质心坐标系中的总能量,而H代表相对运动的哈密顿量(加上质心能量就得到总哈密顿量).

17. 道

在处理复杂碰撞问题时,极为有用的一个概念是**道**. 道是指碰撞过程中,系统"分裂成碎片"的各种可能的模式. 这些模式之一是两个入射粒子本身,我们称它为**入射道**. 在弹性碰撞中,两个粒子都留在入射道中. 在另两种反应类型中,出射道不同于入射道,它们是非弹性碰撞还是重排碰撞,这要根据出现在出射道中的粒子与入射道中的粒子是相同还是不相同而定. 以后我们用特定的希腊字母表示道.

每一道都和若干个参数及物理量相联系. 为了简单,我们经常假定这些反应道由两个粒子构成.

现在我们考虑由两个粒子C和Z构成的γ道. 矢量r_γ确定C相对于Z的位置,换言之,$r_\gamma = r_C - r_Z$,此处,r_C和r_Z分别代表C和Z的质心的位置. 同样地,我们定义相对动量p_γ和约化质量M_γ:

$$M_\gamma = \frac{M_C M_Z}{M_C + M_Z};$$

γ 道的动能是 $p_\gamma^2/2M_\gamma$.

描述这道中粒子的内部量子态的波函数 φ_γ（模方为 1）是 C 和 Z 各自的波函数 φ_C 和 φ_Z 之乘积. 如果 h_C 和 h_Z 是这些粒子的哈密顿量，我们有

$$h_C\varphi_C = e_C\varphi_C, \qquad h_Z\varphi_Z = e_Z\varphi_Z$$

$$\varphi_\gamma = \varphi_C\varphi_Z, \qquad e_\gamma = e_C + e_Z,$$

e_γ 是 γ 道中粒子的总内能.

最后，令 V_γ 为粒子 C 和 Z 之间的相互作用，即 C 中每个基本粒子与 Z 中每个基本粒子之间的相互作用势之和. 在 $r_\gamma \to \infty$ 的极限情况下，V_γ 趋于 0. 以后，我们经常假定它比 $\frac{1}{r_\gamma}$ 更快地下降. 正如 § 15 所指出的，推广到 $\frac{1}{r_\gamma}$ 势是容易做到的.

系统的哈密顿量为

$$H = H_\gamma + V_\gamma, \tag{19.105}$$

其中，

$$H_\gamma = h_C + h_Z + p_\gamma^2/2M_\gamma. \tag{19.106}$$

18. 截面的计算 T 矩阵

在上面所考虑的碰撞中，入射道是 $(A + X)$ 道，用符号 α 表示. 为了完全确定初始条件，需要知道始态粒子的相对动量 $\hbar\boldsymbol{k}_\alpha$. 我们将用字母或指标 $a = (\alpha \cdot \boldsymbol{k}_a)$ 表示初始条件. 这样就有

$$E = e_a + \hbar^2k_a^2/2M_a. \tag{19.107}$$

假定反应 $A + X \to B + Y$ 是可能发生的. 在这种情况下，我们就说 $(B + Y)$ 道或 β 道是**开道**. β 道的粒子携带大小完全确定的相对动量 $\hbar k_b$ 而出射. 由能量守恒给出：

$$E = e_\beta + \hbar^2k_b^2/2M_\beta. \tag{19.108}$$

要使 β 道是开道，显然 $E - e_\beta$ 必须是正的.

可以使平面波

$$\Phi_a = \varphi_a e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}_a}, \tag{19.109}$$

及两个定态波 $\Psi_a^{(+)}$ 和 $\Psi_a^{(-)}$ 与每组初始条件 a 联系起来. $\Psi_a^{(+)}$ 是 H 的定态解，它对应于能量 E，而且在入射道中有（$e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}_a}$+出射波）这样的渐近行为，但在所有的其他开道中，只单纯有出射波. $\Psi_a^{(-)}$ 类似地用入射波来规定. 根据这些定义，我们得出

$$H_a\Phi_a = E\Phi_a \tag{19.110}$$

$$H\Psi_a^{(\pm)} = E\Psi_a^{(\pm)}, \tag{19.111}$$

而且对于任一开道 γ（假定没有多于两个粒子的道）都有

$$\Psi_a^{(\pm)} \underset{r_a\to\infty}{\sim} \varphi_a[e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}_a} + f_{a a}^{(\pm)}(\Omega_a)e^{\pm ik_a r_a}/r_a]$$

$$\underset{r_\gamma\to\infty}{\sim} \varphi_\gamma f_{a\gamma}^{(\pm)}(\Omega_\gamma)e^{\pm ik_\gamma r_\gamma}/r_\gamma \quad (\gamma \neq \alpha). \tag{19.112}$$

我们假设，定态解 $\Psi_a^{(+)}$ 和 $\Psi_a^{(-)}$ 是存在的.

截面直接地与 $\Psi_a^{(+)}$ 的渐近行为相联系. 用 $d\sigma_{a\to b}/d\Omega_\beta$ 表示粒子 B 在 Ω_b 方向发射出来的截面，就得到

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega_\beta} = \frac{v_b}{v_a}\,|f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b)|^2, \tag{19.113}$$

此处，$v_a = \hbar k_a/M_a$ 是入射速度，而 $v_b = \hbar k_b/M_\beta$ 是碰撞后出射粒子 B 的相对速度. 这些结果的证明不过是第十章[1] § 4—6 所得结果的简单推广. 留给读者来证明.

现将 § 3 的考虑普遍化，我们就发现可用如下定义的跃迁矩阵 T 来描写能量为 E 的碰撞现象，

$$T_{a\to b} \equiv \langle b|T|a\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_\beta} f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b). \tag{19.114}$$

---

1) 这个结果也可以通过推广 § 10.2 的论证而得到. 截面等于 B 粒子的通量 $v_b|f_{a\alpha}^{(+)}(\Omega_b)|^2$ 与入射通量 v_a 之比.

从 (19.113) 和 (19.114)，得到

$$\boxed{\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega_\beta}=\frac{2\pi}{\hbar v_a}|T_{a\to b}|^2\rho_b(E)} \tag{19.115}$$

这里，$\rho_b(E)$ 代表按照 § 17.5 规定的各终态的态密度．公式 (19.115)是公式(19.19′)的推广．$T_{a\to b}$ 是 $a\to b$ 的跃迁振幅．

19. 跃迁振幅的积分表述

为了找出 T_{a-b} 的积分表述，我们将性质 (19.9) 普遍化．

令 H 和 $\hat{H}$ 是我们所考虑的量子系统的两个可能的哈密顿量：H 和 $\hat{H}$ 有同样的动能，但他们的势能可以不同．我们假定，这种差别都比 $\frac{1}{r}$ 更快的渐近地趋于 0．用 Ψ 和 $\hat{\Psi}$ 分别表示 H 和 $\hat{H}$ 的能量为 E 的定态解．应注意到，某些道对 H 所制约的碰撞来说是开道，但对 $\hat{H}$ 所制约的碰撞来说却是闭道，反之亦然．我们假定 β 道对 $\hat{H}$ 所制约的碰撞来说是开道．所以，对应于初始条件 $b\equiv(\beta\cdot k_b)$，存在一个解 $\hat{\Psi}_b^{(-)}$．于是，我们得到

$$\hat{H}\hat{\Psi}_b^{(-)}=E\hat{\Psi}_b^{(-)}, \tag{19.116}$$

而且对任一开道 δ（假定没有多于两个粒子的道），也有

$$\hat{\Psi}_b^{(-)}\underset{r_\beta\to\infty}{\sim}\varphi_\beta[e^{ik_b\cdot r_\beta}+\hat{f}_{b\beta}^{(-)}(\Omega_\beta)e^{-ik_b r_\beta}/r_\beta]$$

$$\underset{r_\delta\to\infty}{\sim}\varphi_\delta\hat{f}_{b\delta}^{(-)}(\Omega_\delta)e^{-ik_\delta r_\delta}/r_\delta \qquad (\delta\neq\beta). \tag{19.117}$$

可以证明：

$$\langle\hat{\Psi}_b^{(-)}|(H-\hat{H})|\Psi_a^{(+)}\rangle=-\frac{2\pi\hbar^2}{M_\beta}f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b)$$

$$+\frac{2\pi\hbar^2}{M_a}\hat{f}_{ba}^{(-)*}(-\Omega_a). \tag{19.118}$$

采用得到性质(19.9)的同一方式就能完成这一证明．用

$\hat{\Psi}_b^{(-)*}$ 乘方程(19.111)以及用 $\Psi_a^{(+)}$ 乘方程(19.116)的复共轭方程，两者相减，我们得到

$$[\hat{\Psi}_b^{(-)*}(H\Psi_a^{(+)}) - (H\hat{\Psi}_b^{(-)})^*\Psi_a^{(+)}] + \hat{\Psi}_b^{(-)*}(H - \hat{H})\Psi_a^{(+)} = 0.$$

对自旋变数求和并对整个组态空间积分，我们得出关系式(19.118)。由于 Ψ 和 $\hat{\Psi}$ 的模方都不是有限的，尽管 H 是厄密的，但上式方括号内的贡献不一定为零。为了计算这贡献，我们先在组态空间的有限体积内计算积分，然后当这体积趋于无限时，再取这个积分的极限。利用格林定理，体积分可变换为面积分[1]，后者具有各开道 ν 的有关项(都包含着 Ψ 和 $\hat{\Psi}$)之和的形式。我们得到

$$\langle\hat{\Psi}_b^{(-)}|(H - \hat{H})|\Psi_a^{(+)}\rangle = \sum_\nu \frac{\hbar^2}{2M_\nu}\lim_{R_\nu\to\infty}\{\hat{\Psi}_a^{(-)*}, \Psi_b^{(+)}\}_\nu, \quad (19.119)$$

符号 $\{\cdots\}_\nu$ 是 §2 中引入的符号的推广。按定义，

$$\{F_1, F_2\}_\nu = \left\langle\int\left(F_1\frac{\partial F_2}{\partial r_\nu} - F_2\frac{\partial F_1}{\partial r_\nu}\right)\Big|_{r_\nu=R_\nu} R_\nu^2 d\Omega_\nu\right\rangle,$$

符号 $\langle\int\cdots d\Omega_\nu\rangle$ 表示对相对距离 r_ν 之外的所有变数求和或积分。(19.119)右边各项中的 Ψ，$\hat{\Psi}$ 及其径向导数可分别用公式(19.112)和(19.117)给出的渐近形式代替。对于任一个与 α，β 不同的道，$\Psi_a^{(+)}$ 完全是出射波；$\Psi_b^{(-)}$ 完全是入射波。所以 $\{\cdots\}$ 渐近地趋于0。另一方面，对于 α 和 β 道，括号内的贡献

---

1) 我们还记得，有若干种方法可分离出质心。但是量

$$x \equiv \left(\sum_j M_j r_j^2\right)^{1/2}$$

与约化的方式无关。其中，$r_1, r_2, \cdots r_j \cdots$ 代表特定的约化方式对应的相对坐标，而 $M_1, M_2, \cdots, M_j, \cdots$ 是相应的质量(参考§9.13)。这里的积分体积可用条件 $x \leqslant X$ 来确定，此处 X 是一个正的量，其值大于相互作用力程。利用格林定理，我们可以把体积分变换成超球面 $x = X$ 上的积分。在极限 $X\to\infty$ 时，它趋于(19.119)右边的表示式。

不为0，这是因为在两个渐近形式当中有一个出现平面波项，其计算和§2中的相同，而且得出关系式(19.118)右边的两项．证毕．

基本关系式(19.118)能写成更切实可用的形式．为此，我们在特殊情况($\hat{H}=H$)下应用(19.118)；由于左边变为0，我们得到

$$\frac{1}{M_\beta}f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b)=\frac{1}{M_\alpha}f_{b\alpha}^{(-)*}(-\Omega_a).$$

此式和定义T的关系式[方程(19.114)]比较，我们就得到等价的定义：

$$\langle b|T|a\rangle=-\frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha}f_{b\alpha}^{(-)*}(-\Omega_a). \qquad (19.114')$$

这两个定义可等同地应用到与哈密顿量$\hat{H}$相联系的跃迁矩阵$\hat{T}$上．考虑到这些关系，性质(19.118)就变为

$$\langle b|T|a\rangle=\langle b|\hat{T}|a\rangle+\langle\hat{\Psi}_b^{(-)}|(H-\hat{H})|\Psi_a^{(+)}\rangle. \qquad (19.120)$$

我们以后要用的就是这种形式．

当α道对$\hat{\Psi}_b^{(-)}$波来说是闭道时，如果我们让$\langle b|\hat{T}|a\rangle=0$，则这个关系式仍是正确的．类似地，当$\beta$道对$\Psi_a^{(+)}$波来说是闭道时，如果我们让$\langle b|T|a\rangle=0$，则这个关系式也是正确的．

特别是，如果$\hat{H}=H_\beta$，则$\Psi_\beta^{(-)}$约化为平面波Φ_β．又因为$H-H_\beta=V_\beta$，关系式(19.120)给出

$$\langle b|T|a\rangle=\langle\Phi_b|V_\beta|\Psi_a^{(+)}\rangle. \qquad (19.121)$$

类似地，如果我们用H_α代替H，同时用H代替$\hat{H}$，(19.120)给出

$$\langle b|T|a\rangle=\langle\Psi_b^{(-)}|V_\alpha|\Phi_a\rangle. \qquad (19.122)$$

不论碰撞是什么类型，弹性碰撞($\alpha=\beta$)、非弹性碰撞($\alpha\neq\beta, V_\alpha=V_\beta$)或重排碰撞($V_\alpha\neq V_\beta$)，所有这些性质都是

适用的.

20. 玻恩近似及其普遍化

在方程 (19.121) 的右边,用平面波 Φ_a 代替 $\Psi_a^{(+)}$,就得到**玻恩近似**[参见方程 (19.23)]**中的** $a \to b$ **的跃迁振幅**:

$$T_{a\to b} \simeq T_{a\to b}^{(B)} = \langle \Phi_b | V_\beta | \Phi_a \rangle. \qquad (19.123)$$

在方程 (19.122) 的右边,用 Φ_b 代替 $\Psi_a^{(-)}$,我们得到同样的近似值. 实际上,如果我们用 H_α 代替 H 以及用 H_β 代替 $\hat{H}$,则 (19.120) 给出

$$\langle \Phi_b | V_\beta | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b | V_\alpha | \Phi_a \rangle. \qquad (19.124)$$

于是,我们也可以写成

$$T_{a\to b}^{(B)} = \langle \Phi_b | V_\alpha | \Phi_a \rangle. \qquad (19.123')$$

在势 V_β 存在的区域内,如果 $\Psi_a^{(+)}$ 与 Φ_a 的差别足够小,则从(19.120)到(19.123)的推论过程是正确的;在势 V_α 存在的区域内,如果 $\Psi_b^{(-)}$ 与 Φ_b 的差别足够小,则从 (19.122) 到 (19.123′)的推论过程也是正确的. 这两个条件虽然看起来不同,但显然是等价的. 两者都假定 $\Psi_a^{(+)}$, $\Psi_b^{(-)}$ 可分别用平面波 Φ_a, Φ_b 代替.

用更接近于精确的定态解 $\Psi_a^{(+)}$ 和 $\Psi_b^{(-)}$ 的波函数代替平面波,我们可以得到更精确的公式.

例如,假定 V_α 能写成形式

$$V_\alpha = U_\alpha + W_\alpha,$$

而且对应于能量 E 的哈密顿量 $H_\alpha + U_\alpha$ 的定态解已知. 用 X 代表这些解,用 $T^{(x)}$ 表示相应的跃迁矩阵,特别是,用 $X_a^{(+)}$ 代表与初始条件 a 对应的"出射波"解. 我们得到

$$\begin{aligned} T_{a\to b}^{(X)} &= \langle \Phi_b | (H_\alpha + U_\alpha - H_\beta) | X_a^{(+)} \rangle \\ &= \langle \Phi_b | (V_\beta - W_\alpha) | X_a^{(+)} \rangle. \end{aligned} \qquad (19.125)$$

如果 W_α 足够小,那末,$X_a^{(+)}$ 与 $\Psi_a^{(+)}$ 的差别也很小.

类似地，假定 V_β 能写成形式

$$V_\beta = U_\beta + W_\beta,$$

而且对应于能量 E 的哈密顿量 $H_\beta + U_\beta$ 的定态解已知. 我们用 Ξ 代表这些解，用 $T^{(\Xi)}$ 代表对应的跃迁矩阵. 特别是用 $\Xi_b^{(-)}$ 代表对应于初始条件 b 的"入射波"解. 我们得到

$$T_{a\to b}^{(\Xi)} = \langle \Xi_b^{(-)} | (V_\alpha - W_\beta) | \Phi_a \rangle. \qquad (19.126)$$

如果 W_β 足够小，那末，$\Xi_b^{(-)}$ 与 $\Psi_b^{(-)}$ 的差别也很小.

根据 (19.120)，我们有

$$T_{a\to b} = T_{a\to b}^{(X)} + \langle \Psi_b^{(-)} | W_\alpha | X_a^{(+)} \rangle \qquad (19.127)$$

$$= T_{a\to b}^{(\Xi)} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_\beta | \Psi_a^{(+)} \rangle. \qquad (19.128)$$

$T_{a\to b}$ 的这两个表达式是精确的. 在 (19.127) 中，用 $\Xi_b^{(-)}$ 代替 $\Psi_b^{(-)}$，而在(19.128)中用 $X_a^{(+)}$ 代替 $\Psi_a^{(+)}$，我们就得出近似的表达式:

$$T_{a\to b} \simeq T_{a\to b}^{(X)} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_\alpha | X_a^{(+)} \rangle \qquad (19.129)$$

$$\simeq T_{a\to b}^{(\Xi)} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_\beta | X_a^{(+)} \rangle. \qquad (19.130)$$

虽然，当 $W_\alpha \neq W_\beta$ 时，这两个表达式在形式上是不同的，但它们却总是相等的. 这一点是容易看出来的，只要应用 (19.120) 并用 $H_\alpha + U_\alpha$ 代替 H，用 $H_\beta + U_\beta$ 代替 $\hat{H}$.

这些公式构成玻恩近似[参看方程 (19.75)]的一种推广形式. 它们比在表达式(19.121)中只简单地用 $X_a^{(+)}$ 代替 $\Psi_a^{(+)}$ 而得到的结果更好. 实际上，我们已经得到[见方程(19.125)]

$$\langle \Phi_b | V_\beta | X_a^{(+)} \rangle = T_{a\to b}^{(X)} + \langle \Phi_b | W_\alpha | X_a^{(+)} \rangle,$$

这近似式相当于在表达式 (19.127) 中用 Φ_b 而不是用 $\Xi_b^{(-)}$ 代替 $\Psi_b^{(-)}$. 由于类似的原因，公式 (19.129) 和 (19.130) 比 (19.122) 的右边用 $\Xi_b^{(-)}$ 代替 $\Psi_b^{(-)}$ 而得到的表示式更好些.

21. 原子对快电子的散射

作为玻恩近似本身的一个实例，我们来考虑快电子被原

子所散射.

我们假定核是无限重的，并固定在原点上. 系统的哈密顿量为

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + h + V(\boldsymbol{r}, A).$$

第一项是入射电子的动能，第二项是原子的哈密顿量，而第三项是相互作用能，

$$V(\boldsymbol{r}, A) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{i=1}^{Z} \frac{e^2}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|}, \qquad (19.131)$$

其中，$\boldsymbol{r}$ 是入射电子的位置矢量，而

$$\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots \boldsymbol{r}_Z$$

是原子中的电子的位置矢量. 另外，令

$$\varphi_0, \varphi_1, \cdots \varphi_n, \cdots,$$

代表 h 的本征函数，相应的本征值是

$$e_0, e_1, \cdots e_n, \cdots.$$

我们考虑非弹性散射过程. 在这过程中电子的动量从 $\hbar\boldsymbol{k}_0$ 变到 $\hbar\boldsymbol{k}_n$，而原子从基态 φ_0 过渡到激发态 φ_n. 在碰撞过程中，能量是守恒的，我们得到

$$\hbar^2(k_0^2 - k_n^2) = 2m(e_n - e_0).$$

用 $\hbar\boldsymbol{q}$ 代表动量的传递，

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}_n - \boldsymbol{k}_0.$$

注意，关系式 (19.24) 在这里不能应用，但是

$$q^2 = (k_0 - k_n)^2 + 4k_0k_n\sin^2\frac{1}{2}\theta. \qquad (19.132)$$

除入射电子只简单地被散射并损失一部分动能这种直接过程外，入射电子还可以和原子中的一个电子交换. 当被散射的电子速度与原子中电子的速度同一量级，即当 $k_n a \simeq 1$ 时，这样的交换效应是重要的.

在玻恩近似适用的条件下，交换效应很小。在这里就不考虑它了。基于同样的考虑，我们把入射电子当作和原子的电子有所区别的来处理。应用公式 (19.123)，我们得到玻恩近似下的跃迁振幅：

$$T_{0\to n} \simeq \int e^{-iq\cdot r}\varphi_n^*(A)V(r,A)\varphi_0(A)\mathrm{d}r\mathrm{d}A. \quad (19.133)$$

这正是一个粒子在 $V_n(r)$ 势中发生 $\hbar q$ 动量传递时玻恩近似的跃迁振幅，其中

$$V_n(r) = \int \varphi_n^*(A)V(r,A)\varphi_0(A)\mathrm{d}A. \quad (19.134)$$

不论 n 取何值，这一结果都是正确的，在弹性散射中 ($n = 0$) 同样可应用。

为了将所得结果写成类似于§ 8 中所得到的形式，我们引入电子密度：

$$\rho_n(r) = Z\int \varphi_n^*(r,r_2,\cdots,r_Z)\varphi_0(r,r_2,\cdots,r_Z)\mathrm{d}r_2\cdots\mathrm{d}r_Z \quad (19.135)$$

以及相应的形状因子

$$F_n(q) = \int e^{-iq\cdot r}\rho_n(r)\mathrm{d}r.$$

在弹性散射的情况下($n = 0$)，我们容易得到基态的电子密度和相应的形状因子 [参看方程 (19.48)]：

$$\rho_0(r) = \rho(r), \qquad F_0(q) = F(q).$$

如果把方程 (19.131) 给出的 $V(r,A)$ 的显示形式代入 $V_0(r)$ 的积分定义式中，我们就看出：$V_0(r)$ 是电子与电荷分布

$$e[Z\delta(r) - \rho(r)]$$

的库仑相互作用势。这正好是§ 8 中所采用的散射势。因此，在那里所采用的模型是正确的。

现在考虑非弹性碰撞 ($n \neq 0$)。用方程 (19.131) 给出的 $V(r,A)$ 的显示形式代入 $V_n(r)$ 的积分定义式中。由于函数

φ_0 和 φ_n 的正交性，Ze^2/r 项的贡献为零，其它项给出的贡献等于一个电子在电荷分布 $[-e\rho_n(\boldsymbol{r})]$ 所产生的场中的库仑势．重复 § 8 的作法，我们得到

$$T_{0\to n} \simeq -4\pi e^2 F_n(\boldsymbol{q}). \qquad (n \neq 0)$$

因此，非弹性散射截面的玻恩近似结果为

$$\frac{d\sigma_{0\to n}}{d\Omega} = 4\frac{m^2e^4}{\hbar^4}\frac{k_n}{k_0}\frac{|F_n(\boldsymbol{q})|^2}{q^4}. \qquad (19.136)$$

请注意这个公式和弹性散射公式 (19.49) 的相似性．角分布依赖于因子 $|F_n(\boldsymbol{q})|^2/q^4$．$F_n(\boldsymbol{q})$ 的形式容易从 $\rho_n(\boldsymbol{r})$ 的形式导出．特别是，$F_n(0) = 0$．此外，如果 a 是原子的半径，则仅在 $qa \lesssim 1$ 的区域中，因子 $F_n(\boldsymbol{q})$ 才显著地不同于零．当玻恩近似适用时 ($\gamma \ll 1$)，我们得到 $k_0 a \gg 1$，这相当于入射能量远大于量级为 $\hbar^2/ma^2$ 的原子能级之间的距离．由此可知，$(k_0 - k_n)a$ 的量级为 $1/k_0 a$．因为当 θ 从 0 增加到 2π 时，q 从 $k_0 - k_n$ 变到 $k_0 + k_n$，所以在同样的间隔内 [参看方程 (19.132)]，qa 从 $1/k_0 a$ 变到 $2k_0 a$．依照以前的讨论，电子最可能被散射到满足 $qa \lesssim 1$ 条件的角度内，即被散射到下述小角范围内：

$$\theta \lesssim \frac{1}{k_0 a}.$$

原则上说，非弹性散射可用来测定电子的位置．按假定，入射波包的横向线度远大于 a，所以动量的横向分量的不确定性远小于 $\hbar/a$．假定我们能够检测出原子的量子态的变化，那么刚刚非弹性散射之后，电子的位置在量级为 a 的不确定范围内是已知的．然而，它的动量方向只在 $1/k_0 a$ 的准确度内是知道的．于是，所讨论的动量的横向分量还有量级为 $\hbar/a$ 的不确定性．这与第四章所说的有关位置测量的结论一致 (具体可参考利用威耳孙云室进行测量的讨论，见第四章 § 12

末的注释).

22. 原子核的库仑激发

作为广义玻恩近似的一个例证，我们再来考虑在§17.3中处理过的问题，但不再使用经典近似.

除另有说明，我们采用§17.3中的符号. 假定入射能量足够低而能实现条件(17.28). 另一方面，作经典处理而需要的条件(17.29)和(17.30)却不必满足. 由于入射能量低于库仑势垒的高度(Ze^2/R)，在碰撞中质子"穿透"到核内的几率很小. 因此，我们可以预期特殊的核相互作用的效应是小的，现在我们不考虑它. 那末，碰撞由哈密顿量 $H^{(0)}+V$ 决定.

我们用 a 和 b 分别代表碰撞的初始和终结的情况，而且相应的 $H^{(0)}$ 的本征解用 $X_a^{(+)}$ 和 $X_b^{(-)}$ 表示. 由于在 $H^{(0)}$ 中质子的变数完全可以从核变数中分离出来，所以 $X_a^{(+)}$ 是始态 α 的核波函数与质子的库仑散射波函数 $\xi_a^{(+)}(\boldsymbol{r})$ 之乘积，$\xi_a^{(+)}$ 描述一个能量为 E 而初始动量为 $\hbar\boldsymbol{k}_a$ 的质子被势 Ze^2/r 散射的定态散射态；类似地，$X_b^{(-)}$ 是 β 态的核波函数与质子的"入射波"型[1]的库仑波函数 $\xi_b^{(-)}(\boldsymbol{r})$ 之乘积，$\xi_b^{(-)}$ 代表一个能量为 $(E-\Delta E)$ 而动量为 $\hbar\boldsymbol{k}_b$ 的质子被势 Ze^2/r 散射的波函数. 由于 $X_a^{(+)}$ 对 β 道没有贡献，准确的公式(19.127)给出

$$T_{a\to b}=\langle\Psi_b^{(-)}|V|X_a^{(+)}\rangle.$$

如果把 V 当作很小的微扰来处理，那末，我们可以忽略它对 $\Psi_b^{(-)}$ 的贡献，并可用 $X_b^{(-)}$ 代替 $\Psi_b^{(-)}$，从而给出与广义玻恩公式(19.129)相一致的结果：

$$T_{a\to b}=\langle X_b^{(-)}|V|X_a^{(+)}\rangle.$$

1) 它的球谐函数展开式由(19.77)给定，F_l 取规则库仑解. 注意 $\xi_b^{(-)}=\xi_{k_b}^{(+)*}$.

由于当 $r < R$ 时，X 波实际上不存在，我们可用 V 的展开式 (17.34) 来代替它本身，因而得到

$$T_{a\to b} = \Sigma_{lm}(-)^m R_l^{-m}\langle \beta J_\beta M_\beta | Q_l^m | \alpha J_\alpha M_\alpha\rangle$$

$$R_l^m = \frac{4\pi Z e}{2l+1}\int \xi_b^{(-)*}(\boldsymbol{r})\frac{Y_l^m(\Omega)}{r^{l+1}}\xi_a^{(+)}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \quad (19.137)$$

应用关系式 (19.115)，我们得到库仑激发的截面. 所得到的这个表达式非常类似于半经典理论所得到的. 后者可用 $A(d\sigma_R/d\Omega)^{1/2}S_l^m$ 代替 R_l^m 而得到，其中 A 是由关系式 (19.20) 所规定的正常数：$A^2 = 4\pi^2\hbar^4 v_a/M^2 v_b$. 的确，在条件 (17.29—30) 可实现的根极情况下，对积分 R_l^m 的主要贡献来自经典轨道的邻域，而且应用稳定相移方法可以得出半经典的结果.

§ 17.3 末尾所给出有关选择定则的讨论可以不加改变就应用到这里. 特别是，对于靶核是不定向的以及不测定激发核极化的那些实验来说，我们有

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to b}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{(2J_a+1)(2l_0+1)}\frac{M^2 v_b}{4\pi^2\hbar^4 v_a}$$

$$\times |\langle\beta\|Q^{(l_0)}\|\alpha\rangle|^2(\Sigma_m|R_{l_0}^m|^2).$$

上面的处理可推广到包含核相互作用的情况. 用 V_{PA} 代表质子与核 A 的核子之间的核相互作用势. 当 $r < R$ 时，V_{PA} 是非常强的，而当 $r > R$ 时，V_{PA} 实际上变为0. 我们以后就把 V_{PA} 包含在 $H^{(0)}$ 中. 把 V 分为内外两部分：$V = V_{\mathrm{int}} + V_{\mathrm{ext}}$ 是恰当的. 根据这样的定义，

$$V_{\mathrm{ext}} = \begin{cases} V & \text{若 } r > R \\ 0 & \text{若 } r < R, \end{cases}$$

而且 V_{int} 也包含在 $H^{(0)}$ 中. 经这些修改后，上面作过的变数分离不总是可能的，而且 $X_a^{(+)}$ 和 $X_b^{(-)}$ 也不总是单纯的弹性散射波. 现在，广义玻恩近似给出

$$T_{a\to b} \simeq T_{a\to b}^{(\mathrm{x})} + \langle X_b^{(-)}|V_{\mathrm{ext}}|X_a^{(+)}\rangle.$$

第一项 $T^{(X)}_{\alpha\beta}$ 是核激发项. 它是我们在外区($r > R$)用点库仑相互作用代替质子与核之间的相互作用时所得到的跃迁振幅. 于是，只有当质子穿透到核内时才可能发生 $\alpha \to \beta$ 激发. 第二项是库仑激发项本身.

由于库仑势垒的存在以及核力的性质（短程而且很强），所以 $X^{(+)}_{\alpha}$ 和 $X^{(-)}_{\beta}$ 波在低能时有窄共振的特征，这类似于第十章（第 IV 大节）研究过的散射共振现象. 知道了这些共振的特征参数（各个开道中的共振能量和共振宽度），就可以在外区[1]构造出这些波，并计算跃迁振幅的这两项. 在共振范围之外，质子实际上并不穿透到核内，$T^{(X)}_{\alpha\beta}$ 是可以忽略的，公式 (19.137) 给出的库仑激发振幅就是很好的近似. 在 (19.137) 中，X 是纯库仑散射波. 当通过共振峰时，来自 $T^{(X)}_{\alpha\beta}$ 的贡献不再是可忽略的，而且其与能量的关系有典型的共振形状[参看方程(10.64)]; 同时，库仑激发振幅与公式(19.137)有很大的偏离. 两个振幅对总截面的贡献相干.

23. 定态散射波的格林函数和积分方程

§ 13 中的考虑容易推广到包含着复杂系统时的碰撞问题. 对于各个哈密顿量 H, H_α，等等，我们可相应地引入格林函数 $[E - H \pm i\varepsilon]^{-1}, [E - H_\alpha \pm iE]^{-1}$，等等. 除符号上有一些变化外，§ 13 的结果在这里都是适用的，而且可用类似的方法导出诸如性质 (19.85)，恒等式(19.88)和(19.89) 以及这些函数的渐近形式. 例如对每个开道 γ[参看方程 (19.94)]，得到

$$\left\langle r_\gamma \left| \frac{1}{E - H \pm i\varepsilon} \right| u \right\rangle \underset{r_\gamma \to \infty}{\sim} -\frac{M_\gamma}{2\pi\hbar^2} \varphi_\gamma \frac{e^{\pm i k_c r_\gamma}}{r_\gamma} \langle \Psi^{(\mp)}_{(\gamma, \pm k_c)} | u \rangle$$

$$(\boldsymbol{k}_c = k_c \boldsymbol{r}_\gamma / r_\gamma).$$

---

1) 在本章 § 16 的注释所列书中，对这个问题作了详尽的处理.

利用格林函数的这些性质，我们能导出积分方程

$$\Psi_\alpha^{(\pm)} = \Phi_\alpha + \frac{1}{E - H_\alpha \pm i\varepsilon} V_\alpha \Psi_\alpha^{(\pm)} \qquad (19.138)$$

$$\Psi_\alpha^{(\pm)} = X_\alpha^{(\pm)} + \frac{1}{E - H_\alpha - U_\alpha \pm i\varepsilon} W_\alpha \Psi_\alpha^{(\pm)} \qquad (19.139)$$

.等等，以及公式

$$\Psi_\alpha^{(\pm)} = \left(1 + \frac{1}{E - H \pm i\varepsilon} V_\alpha\right) \Phi_\alpha \qquad (19.140)$$

$$= \left(1 + \frac{1}{E - H \pm i\varepsilon} W_\alpha\right) X_\alpha^{(\pm)}. \qquad (19.141)$$

从这些积分方程或从这些公式，容易导出跃迁振幅的玻恩展开式．将公式 (19.140) 代入(19.121)而且格林函数作展开，我们得到

$$\langle b|T|a\rangle = \langle \Phi_b|\left(V_\beta + V_\beta \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V_\alpha\right)|\Phi_a\rangle \qquad (19.142)$$

$$= \langle \Phi_b|\left(V_\beta + V_\beta \frac{1}{E - H_\alpha + i\varepsilon} V_\alpha + \cdots\right)|\Phi_a\rangle. \qquad (19.143)$$

在第 I 大节和第 II 大节这样的特殊情况中，跃迁振幅完全可以用方程(19.101)或积分方程 (19.102) 决定的 T 算符的矩阵元来确定．当处理复杂碰撞时，再也不可能定义一个唯一的算符．然而，从方程 (19.142) 看出，在能量为 E 的情况中，α 道至 β 道的任一跃迁振幅都可以考虑为如下定义的一个算符 $T^{\beta\alpha}$ 的矩阵元，

$$T^{\beta\alpha} = V_\beta + V_\beta \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V_\alpha. \qquad (19.144)$$

注意，在重排碰撞 ($V_\alpha \neq V_\beta$) 的情况下，这些矩阵元不再符合用矩阵表示算符的通常定义，因为出现在公式

$$T_{a\to b} = \langle \Phi_b|T^{\beta\alpha}|\Phi_a\rangle \qquad (19.145)$$

中的矢量$|\Phi_a\rangle$和$\langle\Phi_b|$是不正交的.

24. 两个散射中心对粒子的散射

上一小节的形式考虑的主要意义在于它们的普遍性和它们为处理复杂问题提供了一个框架. 为了熟悉这种形式理论,我们将它应用到一个简单的问题上,并以此来证明若干熟知的结果.

我们考虑一个粒子被两个散射中心散射的问题, 例如一个电子被两个原子散射. 我们在下面的讨论中忽略了交换效应,但不对入射粒子的波长作特别的假定.

我们假设散射原子的核是无限重的, 并把它们当作固定中心来处理. 取核 1 在坐标原点,而且用 $\boldsymbol{R}$ 代表从核 1 到核 2 的矢量(参看图 19.3). 假定距离 $\boldsymbol{R}$ 远大于原子的线度: $a \ll \boldsymbol{R}$. 碰撞由哈密顿量

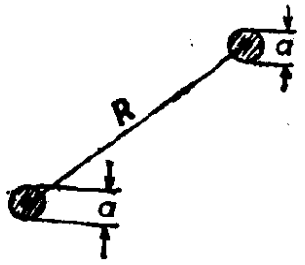


图 19.3

$$H = H_0 + V, \quad (19.146)$$

所决定,其中,

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + h_1 + h_2 \quad (19.146')$$

$$V = V_1 + V_2. \quad (19.146'')$$

h_1 和 h_2 分别为原子 1 和原子 2 的哈密顿量, 而 V_1 和 V_2 是它们与入射粒子的相互作用势. 最后,我们用 G_0 代表自由波格林函数:

$$G_0 \equiv (E - H_0 + i\varepsilon)^{-1}.$$

一个粒子被两个原子散射(弹性或非弹性)的跃迁矩阵可表示为玻恩展开式,

$$T = V + VG_0V + VG_0VG_0V + \cdots \quad (19.147)$$

用 $V_1 + V_2$ 代替 V, 我们得到 T 按 V_1 和 V_2 的幂次展开的式

子：

$$T = V_1 + V_2 + V_1G_0V_1 + V_1G_0V_2 + V_2G_0V_1 + V_2G_0V_2 + V_1G_0V_1G_0V_1 + V_1G_0V_1G_0V_2 + \cdots.$$

在下面的讨论中，我们不对 V_1 或 V_2 的强度作特别的假设．所以，这个展开式不一定迅速收敛，因而不能作为一个近似方法的出发点．然而，重新组合各项，从而构成一个很快收敛的展开式，是可能的．

所谈到的重新组合是基于以下的论断．我们在 r 是对角的表象中考虑二阶项 $V_1G_0V_2$ 的矩阵元的计算．G_0（即自由波格林函数）的任一矩阵元都包含有因子 $e^{ik|r-r'|}/|r-r'|$．因为 V_1 实质上局限在原点邻近的一个小范围内．V_2 实质上局限在点 $\boldsymbol{R}$ 邻近的一个小范围内，所以，这个因子的量级为 $\frac{1}{R}$．同样的论断可应用在 $V_2G_0V_1$ 项中．粗略地说，项 $V_1G_0V_2$ 和 $V_2G_0V_1$ 比项 $V_1G_0V_1$ 和 $V_2G_0V_2$ 小 a/R 倍，这个论断照样可应用于各高级项．这就启发我们按 G_0 出现在 V_1 和 V_2 之间的次数来对各项进行分类．此后我们这样说：如果 G_0 完全不出现在 V_1 和 V_2 之间，则这一项是一阶项；如果 G_0 在 V_1 和 V_2 之间出现一次，则这一项是二阶项，……如果 G_0 在 V_1 和 V_2 之间出现 $(n-1)$ 次，则这一项是 n 阶项，如此等等．在这种说法中，$V_1G_0V_1$ 和 $V_2G_0V_2$ 是一阶项，$V_1G_0V_2$ 和 $V_2G_0V_1$ 是二阶项．

我们引入单体跃迁矩阵 T_1 和 T_2 定义如下：

$$T_i = V_i + V_iG_0T_i \qquad (i = 1,2)$$
$$= V_i + V_iG_0V_i + V_iG_0V_iG_0V_i + \cdots \qquad (19.148)$$

当我们忽略入射粒子与原子 2 的相互作用时，T_1 就是由于原子 1 的散射的跃迁矩阵；当我们忽略入射粒子与原子 1 的相互作用时，T_2 就是由于原子 2 的散射的跃迁矩阵．各阶的贡

献就可用 T_1, T_2 和 G 来表达. 这些表达式容易通过简单的验证来决定. 第一阶给出 $T_1 + T_2$, 第二阶给出 $T_1G_0T_2 + T_2G_0T_1$, $\cdots$ 等等. 所以我们得到

$$T = (T_1 + T_2) + (T_1G_0T_2 + T_2G_0T_1) + (T_1G_0T_2G_0T_1 + T_2G_0T_1G_0T_2) + \cdots \quad (19.149)$$

展开式(19.149)是我们这种处理的出发点. 容易说明各项的意义. 一阶项表示粒子或者被原子 1 (T_1 项) 或者被原子 2 (T_2 项)所散射; 二阶项表示二重散射: $T_1G_0T_2$ 表示入射粒子被原子 2 散射 (算符 T_2), 然后散射粒子从 2 传播到 1 (算符 G_0), 最后粒子被原子 1 所散射(算符 T_1). 类似地, 每一个 n 阶项表示粒子被原子 1 和 2 交替地接连不断的散射了 n 次.

因此, 每一项联系的机制可用含时微扰论采用过的图解(图 17.1) 来形象地表示; 在图 19.4 中, 列举了两个这样的图.

展开式(19.149) 使二散射体问题的跃迁振幅与单散射体问题的跃迁振幅联系起来.

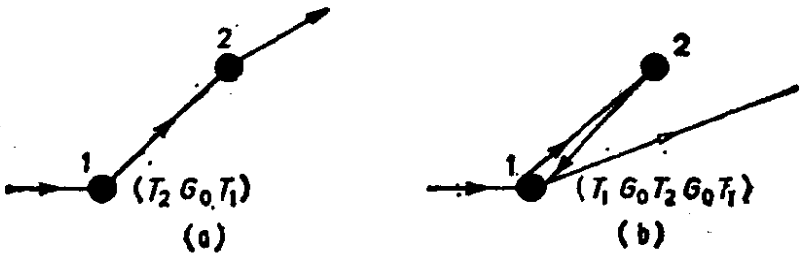


图 19.4 展开式 (19.149) 中两项的图解

为了简单起见, 我们假定两个原子是全同的, 而且用 $t(e)$ 代表能量为 e 的单散射体问题的跃迁振幅, 即粒子被位于原点的一个原子所散射的跃迁振幅.

我们用 $|\boldsymbol{k}mn\rangle$ 代表 H_0 的本征矢量, 它是平面波 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ (描述动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$ 的入射粒子)与原子 1 的波函数 φ_m 和原子 2 的

波函数 φ_n 的乘积，因此

$$H_0|\boldsymbol{k}mn\rangle = \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + e_m + e_n\right)|\boldsymbol{k}mn\rangle.$$

这里采用的规一化是

$$\langle \boldsymbol{k}'m'n'|\boldsymbol{k}mn\rangle = (2\pi)^3\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\delta_{mm'}\delta_{nn'}.$$

类似地，$|\boldsymbol{k}m\rangle$ 代表平面波 $e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$ 与单散射体问题中的原子波函数 φ_m 之乘积.

从 T_1 的定义(19.148)，我们容易推出

$$\langle \boldsymbol{k}'m'n'|T_1(E)|\boldsymbol{k}mn\rangle = \delta_{nn'}\langle \boldsymbol{k}'m'|t(E-e_n)|\boldsymbol{k}m\rangle. \tag{19.150}$$

类似地，我们可以使 T_2 的矩阵元与位于点 $\boldsymbol{R}$ 处的单个原子所引起的散射跃迁矩阵元联系起来；后者从 $t(e)$ 得到(对 $\boldsymbol{R}$ 作整体平移). 由此求出

$$\langle \boldsymbol{k}'m'n'|T_2(E)|\boldsymbol{k}mn\rangle = \delta_{mm'}e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{R}}\langle \boldsymbol{k}'n'|t(E-e_m)|\boldsymbol{k}n\rangle. \tag{19.151}$$

公式(19.150)和(19.151)能应用于任意类型的跃迁上. 甚至如果态 $|\boldsymbol{k}mn\rangle$，$|\boldsymbol{k}m'n'\rangle$ 与不同 E 的能量对应时，它们也是适用的.

25. 简单散射　干涉

作为展开式(19.149)的第一个应用，我们来计算一个粒子被两个原子弹性散射的截面.

假设这两个原子一直处于基态 φ_0，而且用 $\boldsymbol{k}_0$ 和 $\boldsymbol{k}$ 分别代表入射和散射的波矢量，即考虑 $(\boldsymbol{k}_0 00)\to(\boldsymbol{k}00)$ 的跃迁. 我们得到

$$k = k_0, \qquad E = \hbar^2k^2/2m + 2e_0.$$

为了计算跃迁振幅，我们在展开式(19.149)中仅取第一级项：

$$T \simeq T_1 + T_2. \tag{19.152}$$

考虑到(19.150)和(19.151)，并令

$$\boldsymbol{q} \equiv \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0$$

$$\langle \boldsymbol{k}0|t(E - e_0)|\boldsymbol{k}_0 0\rangle \equiv \langle \boldsymbol{k}|t|\boldsymbol{k}_0\rangle,$$

我们求出

$$\langle \boldsymbol{k}00|T|\boldsymbol{k}_0 00\rangle \simeq [1 + e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}}]\langle \boldsymbol{k}|t|\boldsymbol{k}_0\rangle. \tag{19.153}$$

在干涉的基本理论中，此式被看作是决定散射振幅的关系式. 借助于(19.153)，可以找出两个原子引起的弹性散射截面 $\frac{d\Sigma}{d\Omega}$ 与截面 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ 之间的关系，其中 $\frac{d\sigma}{dn}$ 是 $(\boldsymbol{k}_0 0) \to (\boldsymbol{k}0)$ 的跃迁截面，即单原子引起的同一弹性散射的截面. 前者用合适的因子乘 $\langle \boldsymbol{k}00|T|\boldsymbol{k}_0 00\rangle$ 的模方得出，后者用同一因子乘 $\langle \boldsymbol{k}|t|\boldsymbol{k}_0\rangle$ 的模方得到. 因此，从关系式(19.153)得出

$$d\Sigma/d\Omega \simeq 2I(\Omega)d\sigma/d\Omega \tag{19.154}$$

$$I(\Omega) = 1 + \cos(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}). \tag{19.155}$$

在公式(19.154)中，出现因子 $I(\Omega)$ 的原因在于各个原子的散射波之间发生了干涉. 如果这干涉现象不发生，我们就得到 $I(\Omega) = 1$，而且截面 $\frac{d\Sigma}{d\Omega}$ 就等于原子 1 和 2 的单个散射截面之和.

我们考察 $I(\Omega)$ 作为散射角的函数的行为，就可以得到干涉理论的通常结果. 我们仅仅讨论两个极限：与 R 相比，波长 $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ 是很大或很小的情况.

如果 $\lambda \gg R$，则无论什么散射角都有 $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k} \ll 1$，故 $I(\Omega) = 2$；两个原子引起的散射截面等于单个截面的四倍，即等于干涉现象不存在时的两倍.

若 $\lambda \ll k$，则当散射角变化时，$I(\Omega)$ 的大小在 0 到 2 之间迅速地振荡. 令矢量 $\boldsymbol{k}_0$ 和 $\boldsymbol{k}$ 对 $\boldsymbol{R}$ 的夹角分别为 α_0 和 α，

则有

$$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}=\frac{2\pi R(\cos\alpha_0-\cos\alpha)}{\lambda}.$$

所以，每当 $(\cos\alpha-\cos\alpha_0)$ 是 λ/R 的半整数倍时，$I(\Omega)$就变为 0；每当 $(\cos\alpha-\cos\alpha_0)$ 是 λ/R 的整数倍时，$I(\Omega)$就等于 2，而对应的 α 大小分别给出干涉最小和干涉最大的方向．干涉条纹的宽度的数量级为 λ/R．观察到这些干涉效应的可能性取决于探测仪器的角分辨率．探测器所记录的是进入某个有限大小的立体角 $\delta\Omega=(\delta\alpha)^2$ 内的粒子数目．此计数率等于 $\frac{d\Sigma}{d\Omega}$ 在这有限角度内的积分．在此角度内，$\frac{d\Sigma}{d\Omega}$的角度依赖性实质上由因子 $I(\Omega)$ 给定．如果 $\delta\alpha\gg\frac{\lambda}{R}$，则 $I(\Omega)$ 在此角度内有很多振荡，而且可用其平均值代替．对 $I(\Omega)=1$ 和对两个原子的散射是不相干[1] 的这两种情况，所得结果是相同的．另一方面，如果 $\delta\alpha\ll\lambda/R$，则在此角度内，$I(\Omega)$实际上是常数，对于观测干涉现象来说，探测器的分辨率是足够的．

现在我们考虑非弹性碰撞．此时，两个原子当中有一个从基态过渡到第 n 激发态．用 $\boldsymbol{k}_n$ 代表散射波的波矢量，满足下式

$$E=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}+\varepsilon_0+\varepsilon_n.$$

截面 $\frac{d\Sigma_n}{d\Omega}$ 是 $(\boldsymbol{k}_0 00)\to(\boldsymbol{k}_n n0)$ 跃迁的截面 $d\Sigma_{n0}/d\Omega$ 和 $(\boldsymbol{k}_0 00)\to(\boldsymbol{k}_n 0n)$ 跃迁的截面 $d\Sigma_{0n}/d\Omega$ 之和．在近似公式 (19.152) 中，我们仅仅保留了 T 展开式中的简单散射项，因而这些是容易计算的．在跃迁 $(\boldsymbol{k}_0 00)\to(\boldsymbol{k}_0 n0)$ 中，原子 1 受激

1) 这结果是对 §2 所作结论的一个证实和一个更精确的说明，此结论乃是关于将靶核看成独立散射体的条件．

发，而原子 2 留在基态. T_2 的贡献显然为 0［参看方程 (19.151)］，T_1 的贡献给出过程 $(\boldsymbol{k}_0 0) \to (\boldsymbol{k}_n n)$ 的截面 $d\sigma_n/d\Omega$，即单个原子对粒子的弹性散射. 跃迁 $(\boldsymbol{k}_0 00) \to (\boldsymbol{k}_n 0n)$ 对应相反的情况：T_1 的贡献为 0，而 T_2 的贡献给出 $d\sigma_n/d\Omega$. 最后得到

$$\frac{d\Sigma_n}{d\Omega} = \frac{d\Sigma_{n0}}{d\Omega} + \frac{d\Sigma_{0n}}{d\Omega} = 2\frac{d\sigma_n}{d\Omega}$$

与弹性散射中发生的相反，每个原子犹如它单独存在那样起作用：原子 1 和原子 2 非弹性地引起的散射波对应着不同的道，而且是不会干涉的.

26. 多重散射

现在考虑 $(\boldsymbol{k}_0 00) \to (\boldsymbol{k}pq)$ 跃迁：原子 1 和原子 2 分别从基态过渡到它们的第 p 激发态和第 q 激发态，显然有

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + e_p + e_q.$$

用 $d\Sigma_{pq}/d\Omega$ 表示这种跃迁的截面.

在跃迁过程中，因为两个原子都改变了量子态，所以简单散射项 T_1 和 T_2 的贡献变为 0，我们必需取 T 的展开式到第二阶. 于是给出

$$\langle \boldsymbol{k}pq | T | \boldsymbol{k}_0 00 \rangle \simeq A_{12} + A_{21}, \tag{19.156}$$

其中，

$$A_{ij} \equiv \langle \boldsymbol{k}pq | T_i G_0 T_j | \boldsymbol{k}_0 00 \rangle. \tag{19.157}$$

图 19.5 给出这两个二重散射振幅的图解.

我们先计算 A_{21}. 考虑条件 $a \ll R$，我们在 $\{\boldsymbol{r}mm\}$ 表象中进行计算. 注意到 G_0 与 h_1, h_2 对易，我们就得到

$$A_{21} = \iint f_2(\boldsymbol{r}'') g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') f_1(\boldsymbol{r}') d\boldsymbol{r}'' d\boldsymbol{r}', \tag{19.158}$$

其中，

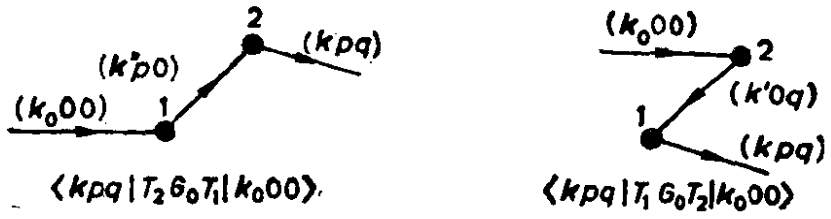


图 19.5　二重散射振幅的图解

$$f_1(\boldsymbol{r}') \equiv \langle \boldsymbol{r}' p0 | T_1 | \boldsymbol{k}_0 00 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'} \langle \boldsymbol{k}' p0 | T_1 | \boldsymbol{k}_0 00 \rangle d\boldsymbol{k}' \tag{19.159}$$

$$f_2(\boldsymbol{r}'') \equiv \langle \boldsymbol{k}pq | T_2 | \boldsymbol{r}'' p0 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{r}''} \cdot \langle \boldsymbol{k}pq | T_2 | \boldsymbol{k}'' p0 \rangle d\boldsymbol{k}'' \tag{19.160}$$

$$g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') \equiv \langle \boldsymbol{r}'' p0 | G_0 | \boldsymbol{r}' p0 \rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{iK_p|\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}'' - \boldsymbol{r}'|}. \tag{19.161}$$

在最后一个表达式中，$\boldsymbol{K}_p$ 是一个由

$$E = \frac{\hbar^2 K_p^2}{2m} + \varepsilon_p + \varepsilon_0.$$

给定的正量．我们也使用矢量 $\boldsymbol{K}_p$，它的定义是

$$\boldsymbol{K}_p \equiv K_p \boldsymbol{R}/R.$$

由于 T_1 的性质，函数 $f_1(\boldsymbol{r}')$ 仅仅在以原点为中心半径为 a 的区域内才明显地不为零；由于 T_2 的性质，$f_2(\boldsymbol{r}'')$ 仅仅在以 $\boldsymbol{R}$ 点为中心、半径为 a 的区域内才明显地不为零．所以，在积分(19.158)中，我们可以用 $g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')$ 按 $\boldsymbol{r}'/R$ 和 $(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{R})/R$ 的幂次展开的第一项代替它本身．在这样做的过程中，我们使计算 A_{fi} 的误差为 a/R．量级由于

$$|\boldsymbol{r}'' - \boldsymbol{r}'| \simeq R + \boldsymbol{R}\cdot(\boldsymbol{r}'' - \boldsymbol{R} - \boldsymbol{r}')/R + \cdots$$

得到

$$g(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}') \simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\boldsymbol{k}_p\cdot(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}')}}{R}. \qquad (19.162)$$

把表达式(19.159),(19.160)和(19.162)代入(19.158)的右边，并完成积分运算，我们得出

$$A_{21} \simeq -(m/2\pi\hbar^2R)\langle \boldsymbol{k}pq|T_2|\boldsymbol{K}_p p0\rangle\langle \boldsymbol{K}_p p0|T_1|\boldsymbol{k}_0 00\rangle. \qquad (19.163)$$

类似地,如果我们用 $\boldsymbol{K}_q$ 表示如下所定义的矢量.

$$\boldsymbol{K}_q \equiv -K_q\boldsymbol{R}/R, \qquad E = \frac{\hbar^2K_q^2}{2m} + \varepsilon_0 + \varepsilon_q,$$

则我们得出 A_{12} 的表示式:

$$A_{12} \simeq -(m/2\pi\hbar^2R)\langle \boldsymbol{k}pq|T_1|\boldsymbol{k}_q 0q\rangle\langle \boldsymbol{k}_q 0q|T_2|\boldsymbol{k}_0 00\rangle. \qquad (19.164)$$

其误差的量级为 a/R.

注意,出现在(19.163)和(19.164)式中的 T_1 和 T_2 的矩阵元对应能量守恒的跃迁. 所以，应用关系式 (19.150) 和 (19.151)，我们可以用单个原子的包括非弹性散射在内的跃迁振幅来表达 A_{21} 和 A_{12}. 这对截面 $d\Sigma_{pq}/d\Omega$ 来说，也是正确的,因为

$$\begin{aligned}\frac{d\Sigma_{pq}}{d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar v_0}|A_{21}+A_{12}|^2\rho(E)\\ &= \frac{2\pi}{\hbar v_0}|A_{21}|^2\rho(E) + \frac{2\pi}{\hbar v_0}|A_{12}|^2\rho(E)\\ &\quad + \frac{2\pi}{\hbar v_0}(A_{21}^*A_{12} + A_{21}A_{12}^*)\rho(E). \qquad (19.165)\end{aligned}$$

我们得到结果:

$$d\Sigma_{pq}/d\Omega = (d\sigma_p(\boldsymbol{k}_0 \to \boldsymbol{K}_p)/R^2d\Omega)(d\sigma_q(\boldsymbol{K}_p \to \boldsymbol{k})/d\Omega) + (d\sigma_q(\boldsymbol{k}_0 \to \boldsymbol{K}_q)/R^2d\Omega)(d\sigma_p(\boldsymbol{K}_q \to \boldsymbol{k})/d\Omega) + \text{干涉项}. \qquad (19.166)$$

我们把干涉项的计算留给读者自己作. 在此式中，符号

$d\sigma_n(\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}')/d\Omega$ 表示单个原子对粒子的非弹性散射 $(\boldsymbol{k}_0 0)\to(\boldsymbol{k}' n)$ 的截面.

公式(19.166)中的前两项精确地等于初等的经典处理所给出的结果. 按经典的考虑,可以料想到二重散射能以两种不同的方式发生: 或者一个粒子首先与原子 1 发生非弹性散射而飞向原子 2, 然后再与原子 2 发生非弹性散射而至最终的方向;或者首先与原子 2 发生散射而飞向原子 1,然后再与原子 1 发生散射而到最终的方向. 这两个过程的截面分别由表达式(19.166)的第一和第二项给定. 我们必须对它们再附加两种类型的散射波之间的干涉项. 关于这些干涉项,我们可以作出类似于 § 25 中的那些论断. 为了观测干涉项,探测器的分辨本领必须足以区分量级为 λ/R 的角度.

如果 $\lambda\ll a$,那末,单体的截面主要集中于朝前的方向上,偏转角大于 λ/a 的散射振幅实际上变为 0. 所以,容易从方程(19.163—165)看出,如果两个原子排列在相距 λ/a 范围内,那末二重散射只能发生在入射方向上,即 $\boldsymbol{k}_0/\!/\boldsymbol{R}$ 或 $\boldsymbol{k}_0/\!/(-\boldsymbol{R})$. 在第一种情况中,$A_{12}$ 是可忽略的,但 A_{21} 对小偏转却是重要的,即对于 $\boldsymbol{k}/\!/\boldsymbol{k}_0$ 方向的 $\frac{\lambda}{a}$ 角度内,粒子首先被原子 1 散射然后再被原子 2 散射到几乎平行于其入射方向的方向上. 在第二种情况中,原子 1 和 2 的地位作了互换. 在威耳孙云室中观察电离粒子的"轨迹"正是以这些结果为基础的(参看第四章 §12 末的注).

IV. 跃迁振幅的变分法计算

27. 相移的稳定表达式

变分方法已在确定能级时使用过(第十八章). 在这一节

中，我们扼要地叙述一下怎样用它来计算相移，更普遍一点说，如何用它来计算跃迁振幅．为此，我们必须将这些振幅表述为散射波函数的泛函，这泛函对波函数在正确值附近变动是稳定的．上一节给出的跃迁振幅的积分表达式对这个目的是不适用的，因为它们不是稳定的．例如，把 T_l 的表达式(19.54)看作 ψ_l 的泛函来考虑，当 ψ_l 是径向方程的正确解时，它就不是稳定的．类似地，把 $T_{a\to b}$ 的表达式 (19.127) 作为 $\psi_b^{(-)}$ 的泛函来考虑，当 $\psi_b^{(-)}$ 在其正确值附近变动时，它也不是稳定的．对这些物理量，已经提出若干种稳定的表达式．我们在这里讲述许温格[1]提出的一种，它已被证明是最有用的．

在这一小节中，我们考虑一个粒子在中心势中的情况，并且找出跃迁振幅按球谐函数展开的系数 T_l [参看展开式(19.51)] 的稳定表达式．除了一些更改外，我们在下面的描写中仍然用 §9 的符号．

如果 $\psi_a^{(+)}$ 是完全的定态散射波，则分波 ψ_l 满足积分方程(19.56)．为了以后普遍化的目的，我们将 ψ_l 写成如下形式：

$$\psi_l(r) = j_l(kr) + g_l^{(+)}V\psi_l, \tag{19.167}$$

其中，$g_l^{(+)}$ 是积分算符，它的核是格林函数：

$$g_l^{(+)}(r,r') \equiv -(2mk/\hbar^2)j_l(kr_<)h_l^{(+)}(kr_>), \tag{19.168}$$

换言之，

$$g_l^{(+)}V\psi_l \equiv \int_0^\infty g_l^{(+)}(r,r')V(r')\psi_l(r')r'^2\mathrm{d}r'.$$

我们也将用符号 $\langle\varphi_1,\varphi_2\rangle$ 表示两个径向函数 φ_1,φ_2 的标量积：

---

1) 特别参看前面已提到的 B. Lippmann 和J. Schwinger 的文章．M. Moe 和 D. S. Saxon 曾讨论过计算相移的各种变分表达式的各自优点，参看 *Phys. Rev.* **111** (1958) 950.

$$\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle \equiv \int_0^\infty \varphi_1^*(r)\varphi_2(r)r^2\mathrm{d}r.$$

所以，T_l 的积分形式(19.54)可以写成

$$T_l = \langle j_l, V\psi_l \rangle. \tag{19.169}$$

现在我们令

$$A[\psi] \equiv \langle j_l, V\psi \rangle = \langle \psi^*, Vj_l \rangle$$

$$= \int_0^\infty j_l(kr)V(r)\psi(r)r^2\mathrm{d}r, \tag{19.170}$$

$$B[\psi] \equiv \langle \psi^*, (V - Vg_l^{(+)}V)\psi \rangle$$

$$= \int_0^\infty \psi^2(r)V(r)r^2\mathrm{d}r - \int_0^\infty\int_0^\infty (\psi(r)V(r)$$

$$\times g_l^{(+)}(r,r')V(r)\psi(r'))r^2\mathrm{d}r r'^2\mathrm{d}r', \tag{19.171}$$

再考虑依赖于函数 ψ 的一个泛函：

$$\mathscr{T}_l[\psi] \equiv \frac{A^2}{B}, \tag{19.172}$$

ψ 的变化区域仅由 $r^2|\psi|^2$ 是局部可积这一条件规定. (19.167) 和 (19.169) 的一个显而易见的推论是

$$\mathscr{T}_l[\psi_l] = T_l.$$

还要注意，$\mathscr{T}_l$ **既不依赖于函数 ψ 的归一化**(当用一任意常数乘 ψ 时，它是不变的)，**也不依赖于 ψ_l 在 $V(r) = 0$ 的区域内的取值**. 所以，对任一函数 ψ_l，$\mathscr{T}_l$ 取同一值 T_l，只要 ψ_l 满足条件

$$\psi_l(r) = Cj_l(kr) + g_l^{(+)}V\psi_l \quad \text{如果 } V(r) \neq 0 \tag{19.167a}$$

(C 是任意常数)，这个条件比方程 (19.167) 的限制少些.

我们现在将 $\delta\mathscr{T}_l$ 看作是 $\delta\psi$ 的函数，并计算它的变分. 由定义 (19.172)，得到

$$\delta\mathscr{T}_l = \frac{2A}{B}\delta A - \frac{A^2}{B^2}\delta B.$$

其中，

$$\delta A = \int_0^\infty \delta\psi V(r) j_l(kr) r^2 \mathrm{d}r = \langle \delta\psi^*, V j_l \rangle,$$

再考虑到 V 是实的，$g_l^{(+)}(r,r')$ 对 r 和 r' 是对称的，就得到

$$\delta B = 2\langle \delta\psi^*, (V - V g_l^{(+)} V)\psi \rangle.$$

所以，我们可以写出

$$\delta\mathscr{T}_l = \frac{2A}{B^2}\langle \delta\psi^*, F \rangle,$$

其中，

$$F(r) = B[\psi] V(r) j_l(kr) - A[\psi] V(r)(\psi - g_l^{(+)} V\psi).$$

任意的 $\delta\psi$ 都有 $\delta\mathscr{T}_l = 0$ 的充分和必要条件是，$F(r)$ 为零。为此，对于 $V(r)$ 不为零的任一点，$j_l(kr)$ 和 $\psi - g_l^{(+)} \times V\psi$ 必须成比例，即 ψ 是满足方程 (19.167a) 的那些函数 ψ_l 当中的一个。容易证实这也是充分条件。于是，$\mathscr{T}_l$ 的稳定值等于我们正好要计算的振幅：

$$T_l = \mathscr{T}_l|_{st}, \tag{19.173}$$

为了使计算中仅仅用实函数，我们分离 $g_l^{(+)}(r,r')$ 的实部和虚部。实部是格林函数

$$g_l^{(1)}(r,r') \equiv -(2mk/\hbar^2) j_l(kr_<) n_l(kr_>),$$

而且我们得到

$$g_l^{(+)}(r,r') = g_l^{(1)}(r,r') - \mathrm{i}(2mk/\hbar^2) j_l(kr) j_l(kr').$$

把这表示式代入 $\mathscr{T}_l$ 的定义式中[即 $B[\psi]$ 的表示式 (19.171)]，我们可以把 (19.171) 写成等价的形式：

$$T_l^{-1} = \mathscr{T}_l^{-1}\Big|_{st} = \frac{\langle \psi^*, (V - V g_l^{(1)} V)\psi \rangle}{\langle j_l, V\psi \rangle^2}\Big|_{st} + \mathrm{i}\frac{2mk}{\hbar^2},$$

由于从方程 (19.52) 得到

$$T_l^{-1} - i(2mk/\hbar^2) = -2mk\cot\delta_l/\hbar^2,$$

所以，我们有如下的 $k\cot\delta_l$ 的稳定表示式：

$$k\cot\delta_l = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\langle\psi^*,(V - Vg_l^{(1)}V)\psi\rangle}{\langle j_l,V\psi\rangle^2}\Bigg|_{st}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\int_0^\infty \psi^2 V r^2 dr - \int_0^\infty\int_0^\infty (\psi(r)V(r)g_l^{(1)}(r,r')\right.$$

$$\left.\times V(r')\psi(r'))r^2 dr r'^2 dr'\right]\left[\int_0^\infty j_l(kr)V(r)\psi(r)r^2 dr\right]^{-2}\Bigg|_{st}, \tag{19.174}$$

容易证明：使方程(19.174)右边为稳定的 ψ_l 可取成实函数，而且对试验函数附加这样的实数条件并不改变所得到的变分性质.

28. 相移的变分计算 讨论

方程(19.174)是变分方法计算相移的出发点. 这个方程右边的泛函这样来计算：ψ 用一个依赖于若干参数的试验函数 φ 代替，而且这泛函对这些参数的变化取稳定值. 试验函数 φ 越接近于精确解 ψ，所得的 $k\cot\delta_l$ 的近似值就越接近于精确值. 正如已经指出过的，我们这里叙述的许温格变分方法的主要优点之一是：所得结果与 φ 的归一化和 φ 在势为零的区域内的取值无关. 所以，为了使这个方法变得精确，只要试验函数在势的范围内的大概形式和精确解相同就够了. 误差的估计实质上就是基于这些半定量的考虑，而且正如能级的变分计算那样，大多数是经验性的.

如果在 (19.174) 的右边，我们只限于用自由波 $j_l(kr)$ 代替 ψ，就得到

$$k\cot\delta_l = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1-\Delta_l}{\langle j_l, V j_l\rangle} \tag{19.175}$$

其中

$$\Delta_l \equiv \frac{\langle j_l, V g_l^{(1)} V j_l\rangle}{\langle j_l, V j_l\rangle} \tag{19.176}$$

这个公式显然比玻恩近似[方程(10.75)]给出的更精确. 在 $\Delta_l \ll 1$ 的极限情况,它等价于二级玻恩近似,但在 Δ_l 不是很小的情况下,它常常更好.

为了说明这两个方法之间的关系,我们来处理低能极限情况下方势阱对 s 波的散射. 取

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < r_0 \\ 0 & r > r_0. \end{cases} \tag{19.177}$$

我们用上面列举的各种方法来计算散射长度

$$a = -\lim_{k\to 0}(k\cot\delta)^{-1}.$$

而且将这些结果和精确计算给出的作比较. 计算并不困难. 如果令 $b = (2mV_0r_0^2/\hbar^2)^{1/2}$,则结果由下面的公式给出:

精确计算;

$$a = -\left(\frac{\tan b}{b} - 1\right) r_0;$$

变分计算[公式(19.175)]:

$$a_{\text{var}} = -\frac{\frac{1}{3}b^2}{1-\frac{2}{5}b^2} r_0;$$

玻恩近似:

$$a_{\text{B}} = -\frac{1}{3}b^2 r_0;$$

二级玻恩近似:

$$a_B^{(2)} = -\left(\frac{1}{3}b^2 + \frac{2}{15}b^4\right)r_0.$$

表19.1

比较几种方法计算的散射长度，它是参数 $b = (2mV_0r_0^2/\hbar^2)^{1/2}$ 的函数，取 r_0 为长度单位.

b	精确计算 a	稳定公式(19.175) a_{var}	玻恩近似 二级 $a_B^{(2)}$	玻恩近似 一级 $a_B^{(1)}$
0	0	0	0	0
0.1π	−0.034	−0.034	−0.034	−0.033
0.2π	−0.156	−0.156	−0.152	−0.132
0.3π	−0.460	−0.459	−0.401	−0.296
0.4π	−1.449	−1.428	−0.859	
$\frac{\pi}{2}$	∞(*)	−63.2(**)	−1.63	
0.6π	2.63	2.81	−2.9	
0.7π	1.63	1.72		
0.8π	1.29	1.38		
0.9π	1.11	1.21		
π	1.00	1.12		

* $a = \infty$ 相当于存在一个零能量的束缚态

** 当 $b = 0.503\pi$ 时，a_{var} 变为无限而且改变正负号.

玻恩近似适用性的判据由不等式(19.43)给定，即

$$b \ll 1$$

(b 用来度量势阱的深度，即束缚的 s 态的数目). 上面四个公式的数值结果列在表 19.1 中. 注意，对于相对地大的 b 值，一直到 $\frac{\pi}{2} < b < \pi$ 的范围，a_{var} 仍是极好的近似，但此时的玻恩展开肯定已经不收敛.

29. 推广到复杂的碰撞

前面的理论可以推广到更一般的碰撞问题中. 我们不讨

论这样的可能推广的细节，而限于就两个复杂粒子的弹性或非弹性散射情况给出跃迁矩阵的稳定表示式.

除另有说明，我们仍用第 III 节的符号. $a \to b$ 的跃迁振幅由下式给定:

$$T_{a\to b} = \langle \Phi_b | V_\beta | \Psi_a^{(+)} \rangle = \langle \Psi_b^{(-)} | V_\alpha | \Phi_a \rangle .$$

这些表示式对于 $\Psi_a^{(+)}$ 和 $\Psi_b^{(-)}$ 的变化并不是稳定的. 由于我们考虑的是散射过程，非微扰哈密顿量是相等的，所以我们可以让

$$H_\alpha = H_\beta = H_0 \qquad V_\alpha = V_\beta = V$$
$$G_0^{(+)} = G_0^{(-)\dagger} = [E - H_0 + i\varepsilon]^{-1}.$$

我们知道

$$|\Phi_a\rangle = (1 - G_0^{(+)} V) |\Psi_0^{(+)}\rangle$$
$$\langle \Phi_b | = \langle \Psi^{(-)} | (1 - V G_0^{(+)}).$$

振幅 $T_{a\to b}$ 也就由下式给定:

$$T_{a\to b} = \frac{\langle \Psi_b^{(-)} | V | \Phi_a \rangle \langle \Phi_b | V | \Psi_a^{(+)} \rangle}{\langle \Psi_b^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_a^{(+)} \rangle} \qquad (19.178)$$

此式对于函数 $\Psi_a^{(+)}$ 和 $\Psi_b^{(-)}$ 的独立变化是稳定的. 这就是 § 27 中给出的 T_l 的隐定表示式的推广.

除去最简单的，例如两个基本粒子相互碰撞的情况，实际利用此式所遇到的一个主要困难就是找出格林函数 $G_0^{(+)}$ 的显示表达式. 然而，在并不需要[1]用 $G_0^{(+)}$ 的显示式的那些论证中，它有时是有用的. 在所有的情况下，它的应用是十分有限的.

V. 跃迁矩阵的普遍性质

T 矩阵的某些性质可直接从支配碰撞过程的哈密顿量的

1) 参看前面所引的 B. Lippmann 和 J. Schwinger 的文章.

特征性质导出. 有一些性质已在以上各节中指出过. 然而，还没有强调指出它们具有很大的普遍性. 本节将要系统地研究这个问题.

30. 通量守恒 S矩阵的幺正性

T矩阵的某些性质不过是支配碰撞过程的哈密顿量的厄密性的简单推论. 积分表示式(19.121)和(19.122)就是这种性质. 利用和§19相同的方法，我们将得到两个新关系式，称为通量守恒关系式.

沿用§19的符号，并考虑两个对应于同一能量E的定态波函数$\Psi_a^{(+)}$和$\Psi_b^{(-)}$，我们得到

$$\Psi_b^{(+)*}(H\Psi_a^{(+)}) - (H\Psi_b^{(+)})^*\Psi_a^{(+)} = 0.$$

此式对自旋求和并对组态空间的有限体积作积分而得的一个量也为零. 应用格林定理，这个量可变换为一个面积分. 在表面趋于无限的极限情况下，这个面积分取若干项(对应于不同的道)之和的形式(参看本章§19的注释)，所以我们得到

$$0 = \sum_\nu \frac{\hbar^2}{2M_\nu} \lim_{R_\nu\to\infty} \{\Psi^{(+)*}, \Psi_a^{(+)}\}_\nu. \qquad (19.179)$$

这方程的右边要和(19.119)的右边来比较. $\Psi_b^{(+)}$，$\Psi_a^{(+)}$用它们在每一道中的渐近形式代替，就可以处理(19.179)式，并得到

$$\begin{aligned} 0 = {} & \frac{\hbar^2}{2M_\beta} \lim_{R_\beta\to 0} \left\{ e^{-ik_b\cdot r_\beta}, f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_\beta) \frac{e^{ik_b r_\beta}}{r_\beta} \right\}_\beta \\ & + \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \lim_{R_\alpha\to 0} \left\{ f_{b\alpha}^{(+)*}(\Omega_\alpha) \frac{e^{-ik_a r_\alpha}}{r_\alpha}, e^{ik_a\cdot r_\alpha} \right\}_\alpha \\ & + \sum_\nu \frac{\hbar^2}{2M_\nu} \lim_{R_\nu\to 0} \left\{ f_{b\nu}^{(+)*}(\Omega_\nu) \frac{e^{-ik_n r_\nu}}{r_\nu}, f_{a\nu}^{(+)}(\Omega_\nu) \frac{e^{ik_n r_\nu}}{r_\nu} \right\}_\nu . \end{aligned}$$

前二项贡献的计算可仿照§2的作法. 第三项是对所有道(包括α和β)的求和，从符号$\{\ \}_\nu$的定义出发，计算这一项并不困难. 与§19中的计算情形相反，这一项的贡献并不为

零．我们最终得到

$$0 = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_\beta} f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b) + \frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha} f_{b\alpha}^{(+)*}(\Omega_a)$$

$$+ \sum_\nu \frac{i\hbar^2 k_n}{M_\nu} \int f_{b\nu}^{(+)*}(\Omega_\nu) f_{a\nu}^{(+)}(\Omega_\nu) d\Omega_\nu .$$

依照定义(19.114)，可用 T 矩阵的矩阵元代替 $f(\Omega)$．我们得到

$$0 = \langle b|T|a\rangle - \langle b|T^\dagger|a\rangle + 2\pi i \sum_\nu \rho_\nu(E)$$

$$\times \int \langle b|T^\dagger|n\rangle d\Omega_\nu \langle n|T|a\rangle . \qquad (19.180)$$

在这里，我们已经用 $|n\rangle$ 代表 ν 道中方向沿着 Ω_ν 的平面波，而且利用了态密度的如下规定：

$$\rho_\nu(E) = \frac{M_\nu k_n}{(2\pi)^3\hbar^2} .$$

$T^\dagger$ 由通常的厄密共轭的定义来给定：

$$\langle m|T^\dagger|n\rangle = \langle n|T|m\rangle^* .$$

用 $\Psi^{(-)}$ 替换 $\Psi^{(+)}$，我们也能完成上面的运算，这就给出

$$0 = \sum_\nu \frac{\hbar^2}{2M_\nu} \lim_{R_\nu\to\infty} \{\Psi_a^{(-)}, \Psi_b^{(-)*}\}_\nu . \qquad (19.179')$$

从关系式(19.179)出发，将 a 和 b 互换，以及用 $\Psi^{(-)*}$ 代替 $\Psi^{(+)}$ 就得到上式．只要在上面的计算中作必要的替换，而且用 (19.114′) 代替 T 矩阵元的定义式 (19.114)，就可对(19.179′)右边各项进行计算．我们得到

$$0 = \langle b|T|a\rangle - \langle b|T^\dagger|a\rangle + 2\pi i$$

$$\times \sum_\nu \rho_\nu(E) \int \langle b|T|n\rangle d\Omega_\nu \langle n|T^\dagger|a\rangle . \qquad (19.180')$$

下面我们对关系式(19.180)和(19.180′)作第二种，也是

更形式的证明. 从关系式

$$\langle b|T|a\rangle = \langle \Phi_b|V_\beta|\Phi_a\rangle + \langle \Phi_b|V_\beta \frac{1}{E-H+i\varepsilon}V_\alpha|\Phi_a\rangle$$

$$\langle b|T^\dagger|a\rangle = \langle \Phi_b|V_\alpha|\Phi_a\rangle + \langle \Phi_b|V_\beta \frac{1}{E-H-i\varepsilon}V_\alpha|\Phi_a\rangle,$$

我们得到[两式相减并应用 (19.124) 和 (A.15c)]:

$$\langle b|(T-T^\dagger)|a\rangle = -2\pi i\langle \Phi_b|V_\beta\delta(E-H)V_\alpha|\Phi_a\rangle. \tag{19.181}$$

我们假定: 定态波 $\Psi_n^{(-)}$ 的集合 ($\Psi_n^{(-)}$ 延展于H的整个谱) 用一个合适的分立谱的完备归一本征矢量集(如果存在的话)来补充,就构成H的一个完备正交本征矢量集,因而我们有封闭关系

$$(2\pi)^{-3}\sum_n |\Psi_n^{(-)}\rangle\langle\Psi_n^{(-)}| = 1. \tag{19.182}$$

[求和遍及H的全体能谱,分立谱也包括在内]. 我们又假定 $\Psi_n^{(+)}$ 也满足封闭关系

$$(2\pi)^{-3}\sum_n |\Psi_n^{(+)}\rangle\langle\Psi_n^{(+)}| = 1. \tag{19.182'}$$

利用 (19.182),我们可以把 (19.181) 右边的标量积变成

$$\langle \Phi_b|V_\beta\delta(E-H)V_\alpha|\Phi_a\rangle \equiv (2\pi)^{-3}$$
$$\times\sum_n\langle \Phi_b|V_\beta|\Psi_n^{(-)}\rangle\delta(E-E_n)\langle\Psi_n^{(-)}|V_\beta|\Phi_a\rangle$$
$$-\sum_\nu\rho_\nu(E)\int\langle b|T^\dagger|n\rangle d\Omega_\nu\langle n|T|a\rangle,$$

从这里我们导出关系式(19.180). 利用(19.182')并用同样的方法可得关系式 (19.180').

对于任意的 a 和 b, T 和 $T^\dagger$ 的矩阵元都满足方程 (19.180) 和 (19.180'). 可以把它们写成更简单的形式:

$$T - T^\dagger + 2\pi i T^\dagger T = 0 \tag{19.183}$$

$$T - T^{\dagger} + 2\pi i T T^{\dagger} = 0. \qquad (19.183')$$

我们对矩阵积 $T^{\dagger}T$ 和 $TT^{\dagger}$ 中的哑标采用了适当的求和约定，即指标 ν 的权重由 ν 道中的态密度因子 $\rho_{\nu}(E)$ 来代表. 注意，出现在这里的矩阵元都是能量为 E 的各态之间的矩阵元.

现在我们引入 S 矩阵:

$$S \equiv 1 - 2\pi i T. \qquad (19.184)$$

这个矩阵是能量为 E 的各种碰撞问题的一个特征量，而且其矩阵元被定义在能量为 E 的各个态之间类似于 T 的矩阵元. 用 S 和 $S^{\dagger}$ 表达方程(19.180)和(19.180′)中的 T 和 $T^{\dagger}$，我们就得到

$$S^{\dagger}S = SS^{\dagger} = 1. \qquad (19.185)$$

S 矩阵是幺正的

还可以证明: 如果 $U(t,t')$ 是系统的演化算符，那末

$$S = \lim_{\substack{t\to+\infty \\ t'\to-\infty}} U(t,t').$$

要证明此式就必须很小心地处理取极限的过程，在此不再讨论这些问题[参看本章第一节的注释所引的文献].

31. 玻耳-佩尔斯-普拉捷克关系(光学定理)

我们就特殊情况 ($a = b$) 来考虑关系式(19.180)[注意，当 $a = b$ 时，关系式(19.180)和(19.180′)是恒等的]. 于是我们有

$$\langle a|T|a\rangle - \langle a|T|a\rangle^{*} = -2\pi i \sum_{\nu}\int |\langle n|T|a\rangle|^{2}\rho_{\nu}(E)\mathrm{d}\Omega_{\nu}. \qquad (19.186)$$

右边的积分就是截面 $\mathrm{d}\sigma_{a\to n}/\mathrm{d}\Omega_{\nu}$ (不计因子 $2\pi/\hbar v_a$)，所以

$$\sum\int |\langle n|T|a\rangle|^{2}\rho_{\nu}(E)\mathrm{d}\Omega_{\nu} = \frac{\hbar v_a}{2\pi}\sum_{\nu}\int \frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to n}}{\mathrm{d}\Omega_{\nu}}\mathrm{d}\Omega_{\nu}$$

$$= \frac{\hbar v_a}{2\pi}\sigma_a^{\text{tot}},$$

此处，σ_a^{tot} 是始态 a 对应的碰撞总截面. 再注意到(19.186)，我们得出

$$\sigma_a^{\text{tot}} = -\frac{2}{\hbar v_a}\,\text{Im}T_{aa}.$$

为了将这个表示式写成更熟悉的形式，用朝前的散射振幅 $f_{aa}^{(+)}(\Omega)$ [我们简单地用 $f_a(0)$ 代表，参看方程 (19.114)]表示 T_{aa}:

$$T_{aa} \equiv \langle a|T|a\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha} f_a(0).$$

于是，

$$\boxed{\sigma_a^{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k_a}\,\text{Im}f_a(0)} \qquad (19.187)$$

这就是联系总截面与朝前散射振幅虚部的玻耳-佩尔斯-普拉捷克公式.

32. 微观可逆性

如果 H 对时间反演是不变的，那末 T 矩阵满足**微观可逆性关系式**(参看 §15.20):

$$\boxed{T_{Kb\to Ka} = T_{a\to b}} \qquad (19.188)$$

对一个粒子被实势散射的简单情况，这个关系式已经得到证明(§3 和 §14). §14 的形式证明略加修改后也可以用到普遍的情况中. K 是时间反符算符. 分别用 Ka 和 Kb 代表经过时间反演(动量和自旋反号)从 a 和 b 得到的始态和终态；更严格地说，

$$\Phi_{Kb} \equiv K\Phi_b \qquad \Phi_{Ka} \equiv K\Phi_a.$$

为了证明关系式(19.188)，我们利用决定跃迁振幅的表示式(19.142)，因而有

$$T_{Kb\to Ka} = \langle \Phi_{Ka}| \left[V_\alpha + V_\alpha \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V_\beta \right] |\Phi_{Kb}\rangle$$

$$= (\langle \Phi_a | K^\dagger) \left[V_\alpha + V_\alpha \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V_\beta \right] (K|\Phi_b\rangle).$$

由于K是反么正的而且与H, V_α, V_β对易，此式就给出

$$T_{Kb\to Ka} = \langle \Phi_b | \left[V_\alpha + V_\beta \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V_\alpha \right] |\Phi_a\rangle$$

$$= \langle \Phi_b | \left[V_\beta + V_\beta \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V_\alpha \right] |\Phi_a\rangle.$$

上式第二行是利用(19.124)得到的，它等于公式(19.142)所给出的振幅$T_{a\to b}$. 证毕.

平方(19.188)两边，并用截面$d\sigma_{a\to b}/d\Omega$和$d\sigma_{Kb-Ka}/d\Omega$表示所得的结果，那末我们得到截面的微观可逆性关系式:

$$v_b d\sigma_{Kb\to Ka}/\rho_a(E)d\Omega_\alpha = v_a d\sigma_{a\to b}/\rho_b(E)d\Omega_\beta. \quad (19.189)$$

我们在这里已经利用了这样的事实: $v_{Kb} = v_b, \rho_{Ka} = \rho_a$. 从速度和态密度的定义[见方程(17.52)]，我们对每一道，都得到

$$v_n \rho_n = p_n^2/(2\pi\hbar)^3 = k_n^2/(2\pi)^3\hbar.$$

所以，关系式(19.189)可以写成(约定$d\Omega_\alpha = d\Omega_\beta = d\Omega$)

$$\boxed{k_b^2 d\sigma_{Kb\to Ka} = k_a^2 d\sigma_{a\to b}} \quad (19.190)$$

33. T 矩阵的不变性

我们现在来研究H对于转动、反射，或更一般说对于么正算符描述的变换的不变性所带来的一些后果. 我们依次考虑对于某一变换和对于某种变换群的不变性的后果.

如果 H, H_α, H_β 对某一么正变换 X 是不变的，那末得出关系式(参看 § 15.13)

$$T_{X\alpha\to X b} = T_{\alpha\to b}. \tag{19.191}$$

[注意，由于左边振幅对应的反应的含义所致，这个关系式不同于微观可逆性关系式.]

要证明 (19.191)、只需注意到：根据定义 (19.144)，算符 $T^{\beta\alpha}$ 对变换 X 也是不变的，

$$X^\dagger T^{\beta\alpha} X = T^{\beta\alpha},$$

所以，

$$T_{X\alpha\to X b} \equiv \langle \Phi_b | X^\dagger T^{\beta x} X | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b | T^{\beta\alpha} | \Phi_a \rangle \equiv T_{\alpha\to b}.$$

我们从 (19.191) 容易得到下面的截面之间的关系式：

$$d\sigma_{X\alpha\to X b} = d\sigma_{\alpha\to b}, \tag{19.192}$$

此式可以与 (19.190) 相比.

现在假定总哈密顿量 H 和各个"非微扰"哈密顿量 H_α, $H_\beta, \cdots$ 对某一群 G 的变换是不变的. 正如我们将要看到的，这就导致 T 矩阵有某些性质，这些性质类似于 § 15.11 中表示可观测量的矩阵对 G 不变而得到的那些性质.

为了明白这一点，我们采用 § 15.11 的符号，而且考虑该节定义的可观测量 J 和 M 的两个集. 设 ν 是能量为 E 的碰撞过程中的一个开道. H_ν, J, M 组成一个对易的可观测量集. 用 $|\nu E_\nu \tau_\nu j\mu\rangle$ 表示共同的基矢(我们假定它是与群 G 相适应的标准基，虽然这个限制是不重要的). 指标 ν 标明所考虑的道；E_ν 是 H_ν 的本征值；j 和 μ 分别代表 J 和 M 的本征值；τ_ν 是附加量子数，它在一个范围(随 E_ν, j 和 μ 的值而改变)内变化. 这些矢量是正交的：

$$\langle \nu E_\nu \tau_\nu j\mu | \nu E'_\nu \tau'_\nu j' \mu' \rangle = \delta(E_\nu - E'_\nu)\delta_{\tau_\nu \tau'_\nu}\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}.$$

为了简单起见，我们设指标 τ_ν 是分立的. 当我们讨论二粒子道，而且群 G 是转动群或者以转动群为其子群的群，情况就正

是这样．于是 τ_ν 取**有限**数目的分立值．

现在考虑能量 E 固定的碰撞和从某一道 ν 到另一道 ν' 的跃迁．按上面的假设，相应的算符 $T^{\nu\nu'}$ [定义 (19.144)] 对群 G 的变换是不变的．由性质 (15.52) 的一个显而易见的推广，我们得到

$$\langle \nu E\tau_\nu j\mu|T^{\nu\nu'}|\nu' E\tau_{\nu'} j'\mu'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}\langle \nu\tau_\nu|T^{(j)}|\nu'\tau_{\nu'}\rangle, \tag{19.193}$$

其中，$\langle \nu\tau_\nu|T^{(j)}|\nu'\tau_{\nu'}\rangle$ 与量子数 j,τ_ν 和 $\tau_{\nu'}$ 有关，但与 μ 无关．方程(19.193)概括了对群 G 的不变性的全部推论．

所以，每一对开道 $(\nu\nu')$ 都对应着一定数目的系数 $\langle \nu\tau_\nu|T^{(j)}|\nu'\tau_{\nu'}\rangle$．和给定 j 值 (j 和 E 固定；$\nu,\nu',\tau_\nu,\tau_{\nu'}$ 可变) 对应的那些系数构成一个方阵，我们用 $T^{(j)}$ 表示它．这阵类似于 T 矩阵，但通常它的维数较小．特别是，如果 G 包含转动群而且不存在多于两个粒子的开道，则 $T^{(j)}$ 是有限维矩阵；其次，如果只有一个开道而且两个粒子的自旋为 0，则 $T^{(j)}$ 只是一维的，即它是一个普通的数，而且等于展开式 (19.51) 所规定的系数 T_l (不计一个容易确定的因子)．

容易将跃迁振幅 $T_{a\to b}$ 展开成 $T^{(j)}$ 的矩阵元的级数形式．为了做到这一点，我们从定义(19.145)出发，利用 α 道和 β 道的标准基的封闭关系和性质(19.193)进行变换．这展开式的各个系数与平面波 Φ_a 和 Φ_a 到所说的基矢上的投影有关．Φ_n 代表 ν 道中能量为 E 的平面波，我们能写出

$$\langle \Phi_n|\nu E_\nu\tau_\nu j\mu\rangle = \delta(E - E_\nu)\langle \Phi_n|\nu\tau_\nu j\mu\rangle. \tag{19.194}$$

采用这符号，经过简短的计算，我们得到

$$T_{a\to b} = \sum_{j\mu}\sum_{\tau_\alpha\tau_\beta}\langle \Phi_b|\beta\tau_\beta j\mu\rangle\langle \beta\tau_\beta|T^{(j)}|\alpha\tau_\alpha\rangle\langle \alpha\tau_\alpha j\mu|\Phi_a\rangle. \tag{19.195}$$

这个展开式是(19.51)的普遍化．象(19.51)那样，当收敛迅速

的时候，它是特别有用的。这种情况通常发生在入射道和出射道中的波长大于核力力程的那些核碰撞问题中。而且在这种情况下，它经常被利用[参看 P.343 的注 1 所引的文献]。

练 习 和 问 题

1．证明渐近性质：

$$\exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{2\pi}{iqr}[\delta(\Omega_r-\Omega_q)e^{iqr}-\delta(\Omega_r+\Omega_q)e^{-iqr}]+O\left(\frac{1}{r^2}\right).$$

(i) 利用平面波按球谐函数的展开式和球谐函数的封闭性；

(ii) 直接寻求

$$\int \exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\varphi(\Omega_r)d\Omega_r.$$

的渐近形式[$\varphi(\Omega)$ 是方向 $\Omega\equiv(\theta,\varphi)$ 的连续函数；Ω_r 和 Ω_q 分别是矢量 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 的方向]。

2．证明：对于波长相同 ($q_1=q_2$) 的两个平面波 $\exp(i\boldsymbol{q}_1\cdot\boldsymbol{r})$ 和 $\exp(i\boldsymbol{q}_2\cdot\boldsymbol{r})$，我们可得到精确的关系式

$$\{\exp(i\boldsymbol{q}_1\cdot\boldsymbol{r}),\exp(i\boldsymbol{q}_2\cdot\boldsymbol{r})\}=0,$$

无论 R 是什么。[§ 2 中 $\{\cdots\}$ 的定义]。

3．计算玻恩近似中的散射截面：

(i) 深度为 V_0 而半径为 a 的方势阱；

(ii) 高斯势

$$V=V_0\exp(-r^2/a^2);$$

(iii) 汤川势

$$V=\frac{V_0\exp(-Kr)}{Kr}.$$

就这三种特殊情形检验 § 4 关于高能角分布一般形状的论断，确定总截面的渐近形式。

4．一个质量为 m 的粒子在短程势 $V(r)$，($rV\underset{r\to\infty}{\to}0$) 中的哈密顿量为

$$H\equiv-(\hbar^2/2m)\Delta+V(r).$$

当能量$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ 时，l 分波的径向方程是

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V + k^2\right] y_l = 0.$$

$F_l(k;r)$ 代表规则解，$u_l^{(+)}(k;r)$ 和$u_l^{(-)}(k;r)$ 分别代表“出射”和“入射”解；这些解归一化成

$$F_l(k;r) \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right)$$

$$u_l^{(\pm)}(k;r) \underset{r\to\infty}{\sim} \exp\left[\pm \mathrm{i}\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right)\right].$$

(i) 证明定态波 $\Psi_k^{(\pm}$ (§2的定义)可展开成

$$\Psi_k^{(\pm} = \frac{4\pi}{kr}\sum_{lm} \mathrm{i}^l \exp(\pm \mathrm{i}\delta_l) Y_l^{m*}(\hat{k}) Y_l^m(\hat{r}) F_l(k;r).$$

(ii) 证明下式定义的函数 $G^{(\pm)}(r,r')$ 是算符 $(E-H)$ 的格林函数：

$$\frac{\hbar^2}{2m}G^{(\pm)}(r,r') = -\frac{1}{krr'}\sum_{lm}\exp(\pm \mathrm{i}\delta_l) Y_l^{m*}(\hat{r}) Y_l^m(\hat{r}')$$
$$F_l(k;r_<) u_l^{(\pm)}(k;r_>),$$

即它是 r 和 r' 的对称函数并满足方程

$$(E-H)G^{(\pm)}(r,r') = \delta(r-r');$$

它的渐近行为是

$$G^{(\pm)}(r,r') \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\exp(\pm \mathrm{i}kr)}{r}\psi_{-k}^{(-)}(r').$$

$$(k = kr/r)$$

[当 V 有类似于 $\frac{1}{r}$的渐近行为时，如果我们适当地重新定义 F_l 和 $u_l^{(\pm)}$，那末这些公式仍旧可用；但 $G^{(\pm}$ 的渐近形式必须相应地重新规定。]

5. 证明公式 (19.151).

第五部分　相对论量子力学基础

第二十章　狄拉克方程

I. 总　导　言

1. 相对论量子力学[1]

直到现在，所有的应用都建立在薛定谔方程的基础上.这个方程是利用对应原理从非相对论经典力学的哈密顿形式导出来的，它具有导出它的那个哈密顿量的全部不变性。特别是，如果系统是孤立的，则它对空间转动和平移是不变的。也可以证明它对伽利略变换是不变的（参看问题 15.7）。所以，由薛定谔理论予言的物理性质对伽利略参考系变换是不变的，但对相对论原理所要求的洛伦兹参考系变换却不是不变的。因为只有在低速的极限情况下，伽利略变换才接近于洛伦兹变换，所以可以预料到（实验已证实）：这个理论仅仅在粒子速度远小于光速时（$v \ll c$）才能正确地描写有关的现象。特别要指出，光与物质相互作用的所有现象（如光的发射、吸收和散射）都超出非相对论量子力学的框架.

在详尽阐述相对论量子力学时，遇到的主要困难之一来自**粒子数守恒定律一般说来不再是真实**的这一事实。由于质量和能量的等价性（这是相对论的最重要推论之一），所以每当相互作用引起的能量传递等于或超过粒子的静止质量时，就可以产生或吸收一些粒子。相对论量子力学要成为一个完

1）为了读这一章，附录D的第 I 和第 II 节的知识是需要的

备的理论，它必须在一个单独的方案中不仅包括量子态不同的动力学态，而且还要包括组成这些状态的基本粒子的数目和本性是不同的那些动力学态。为此，我们必须采用量子化场这个概念，通常给相对论量子力学以量子场论这个名称的原因就在此。在现有的形式下，这种理论并没有摆脱困难，甚至未能避免矛盾，但它却说明了大量实验事实。

本书的第五部分(也就是最后一部分)作为量子场论的一个导引，同时也介绍一些计算电子动力学有关的某些相对论效应以及带电粒子与电磁场相互作用的基本方法。

这部分分成两章。

现在这一章专门阐述相对论量子力学中最简单的问题之一，即自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子在给定力场中的运动问题。最重要的例子之一就是电子在电磁场中的运动。这电磁场是非量子化的，而我们试图用具有相对论不变性要求的波动方程来描写系统的演化。这方程也必须满足对应原理并在非相论近似下得出泡利理论。这样的方程是存在的，称为狄拉克方程。在回顾洛伦兹群和经典的相对论力学之后（第 I 节），我们着手建立狄拉克方程（第 II 节），而且对其不变性作详尽的研究（第 III 节）。在本章的其余各节中，我们讨论这理论的物理意义，而且在评述它的主要应用过程中，我们阐明它与经典力学（第 IV 节）、非相对论量子力学（第 V 节）和量子场论（第 VI 节）的联系。

下一章致力于量子化场概念，阐明电磁辐射以及它与原子系统、核系统相互作用的初等量子理论。

2. 符号　各种约定和定义

单位。 除了少数明显的例外，以后出现的所有表达式都采用使下式成立的单位，

$$\hbar = c = 1.$$

采用这个特别选择的单位后，时间的量纲是长度；能量、动量和质量的量纲是长度的倒数；电荷是无量纲的量（$e^2 \equiv e^2/\hbar c \simeq 1/137$）。一般表达式可以从量纲一致性的简单考虑来重新建立。

坐标。一个时刻 t 和普通空间的一点 $\boldsymbol{r} \equiv (x,y,z)$ 确定一个时空点。我们用 x^0,x^1,x^2,x^3 代表这一点的坐标。$x^0 = ct$ 是时间坐标；$x^1 \equiv x$，$x^2 \equiv y$，$x^3 \equiv z$ 是三个空间坐标。更普遍地讲，我们分别用 0,1,2,3 代表四矢量或张量在坐标轴 t,x,y,z 上的分量。希腊字母指标代表 4 矢量或张量的时空分量，因而可取四个值：0、1、2、3；罗马字母指标代表通常的空间分量，因而取三个值：1、2、3。于是，

$$x^\mu \equiv (x^0,x^k) \equiv (x^0,x^1,x^2,x^3)$$
$$(\mu = 0,1,2,3) \quad (k = 1,2,3).$$

度规张量　协变和逆变指标

空间时间度规是一个赝欧几里德度规，由如下的**度规张量**确定：

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

或

$$g_{00} = 1,\ g_{kk} = -1,\ g_{\mu\nu} = 0 \text{ 若 } \mu \neq \nu. \quad (20.1)$$

我们要分清**协变**矢量（其变换象 $\partial/\partial x^\mu$ 一样）和**逆变**矢量（其变换象 x^μ 一样）。更一般地说，要分清协变张量的分量和逆变张量的分量。按照通常的约定：协变指标写为下标，逆变指标写为上标。这样，a^μ 代表逆变矢量，它对应的协变矢量 a_μ 可利用度规张量得到：

$$a_\mu = \sum g_{\mu\nu} a^\nu,$$

由此给出

$$a_0 = a^0, \qquad a_k = -a^k.$$

我们以后总是采用**重复指标的求和约定**. 按此约定，前面那个关系就变成

$$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu.$$

类似地，利用张量 $g^{\mu\nu}$ 可将指标上提：

$$a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu.$$

在目前的情况下，我们也有

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}.$$

另外还有

$$g^\nu_\mu = g_{\mu\rho} g^{\rho\nu} = g^\mu_\nu = \delta^\nu_\mu,$$

其中，δ^ν_μ 是克罗内克符号：

$$\delta^\nu_\mu = \begin{cases} 1 & \text{若} \quad \mu = \nu \\ 0 & \text{若} \quad \mu \neq \nu. \end{cases}$$

3 矢量 4矢量 标量积

对于 3 矢量（或普通空间的矢量），我们仍采用通常的符号，即用黑体字母代表，其长度用相应的一般印刷体字母代表.

逆变 4 矢量 a^μ 的三个空间分量构成一个 3 矢量. 用上面的符号，有

$$a^\mu \equiv (a^0, a^1, a^2, a^3) \equiv (a^0, \boldsymbol{a}) \qquad \boldsymbol{a} \equiv (a_x, a_y, a_z)$$

$$a^1 = a_x \quad a^2 = a_y \quad a^3 = a_z \quad a \equiv (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a})^{\frac{1}{2}}$$

$$= [a_x^2 + a_y^2 + a_z^2]^{\frac{1}{2}}.$$

当不致于和 3 矢量 $\boldsymbol{a}$ 的长度混淆时，我们有时略去指标而且简单地就用 a 代表 4 矢量 a^μ.

两个 4 矢量 a^μ 和 b^μ 的标量积由收缩其中一个的逆变分量与另一个的协变分量得到，即 $a_\mu b^\mu$ 或者 $a^\mu b_\mu$：

$$a_\mu b^\mu = a^\mu b_\mu = a^0 b^0 - \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}, \tag{20.2}$$

a^μ 的模方是 $a_\mu a^\mu = (a^0)^2 - a^2$。

4 矢量的分类

4 矢量可按它们的模方的正负分成三类：

$a_\mu a^\mu < 0$　　a^μ 是类空矢量，

$a_\mu a^\mu = 0$　　a^μ 是零矢量，

$a_\mu a^\mu > 0$　　a^μ 是类时矢量。

这种分类与矢量对于光锥 $x_\mu x^\mu = 0$ 的不同位置相对应。后两种情况可进一步依时间分量的正负分成：

$a^0 > 0$，　矢量指向未来；

$a^0 < 0$，　矢量指向过去。

梯度　微分算符

我们回到符号 $\nabla \equiv (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$ 和 $\Delta \equiv \nabla\cdot\nabla$ 上来。四个偏微分算符 $\partial/\partial x^\mu$ 构成一协变矢量，称为梯度算符，用符号 ∂_μ 代表：

$$\partial_\mu \equiv \partial/\partial x^\mu \equiv (\partial/\partial x^0, \partial/\partial x^1, \partial/\partial x^2, \partial/\partial x^3) \equiv (\partial/\partial ct, \nabla). \tag{20.3}$$

我们也使用“逆变梯度”：

$$\partial^\mu \equiv g^{\mu\nu}\partial_\nu \equiv (\partial/\partial ct, -\nabla). \tag{20.4}$$

达朗伯算符□的定义[1]如下（参看 § 11.12）：

$$\Box \equiv \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \equiv \partial_\mu\partial^\mu. \tag{20.5}$$

$\varepsilon^{\lambda\mu\nu\rho}$ 张量

$\varepsilon^{\lambda\mu\nu\rho}$ 代表对四个指标完全反对称的张量，如果有两个指标相同，则它等于 0；如果$(\lambda\mu\nu\rho)$是(0 1 2 3)的偶置换，则它等于+1；如果 $(\lambda\mu\nu\rho)$ 是 (0 1 2 3)的奇置换，则它等于−1。

1）很多作者使用的符号□与这里所定义的算符差一个负号。

电磁场

电磁势由矢量势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ 和标量势 $\varphi(\boldsymbol{r},t)$ 组成，而且构成一个 4 矢量 A^μ：

$$A^\mu \equiv (\varphi, \boldsymbol{A}). \tag{20.6}$$

电场 $\mathscr{E}$ 和磁场 $\mathscr{H}$ 由下式确定：

$$\mathscr{E} = -\nabla\varphi - \partial A/\partial x^0, \quad \mathscr{H} = \mathrm{curl}\boldsymbol{A}. \tag{20.7}$$

$\mathscr{E}$ 和 $\mathscr{H}$ 的分量构成一个反对称的空间 -时间张量 $F_{\mu\nu}$，其定义如下：

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu}. \tag{20.8}$$

或

$$F_{\mu\nu} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \mathscr{E}_x & \mathscr{E}_y & \mathscr{E}_z \\ -\mathscr{E}_x & 0 & -\mathscr{H}_z & \mathscr{H}_y \\ -\mathscr{E}_y & \mathscr{H}_z & 0 & -\mathscr{H}_x \\ -\mathscr{E}_z & -\mathscr{H}_y & \mathscr{H}_x & 0 \end{pmatrix}, \tag{20.9}$$

我们也使用下面定义的 4 矢量算符 D_μ：

$$D_\mu \equiv \partial_\mu + \mathrm{i}eA_\mu \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x^0} + \mathrm{i}e\varphi, \nabla - \mathrm{i}e\boldsymbol{A}\right). \tag{20.10}$$

3. 洛伦兹群

参考系的洛伦兹变换是**实线性**的坐标变换，它使各个空间-时间点之间的距离的**模方保持不变**. 在这样的变换中，空间-时间点的新坐标 x'^μ 可通过旧坐标 x^μ 得到：

$$x'^\mu = \Omega^\mu_\nu x^\nu + a^\mu.$$

实矢量 a^μ 描述空间-时间轴的一个简单的平移. 下面我们单独地处理平移，而且称这齐次变换 $(a^\mu = 0)$[1] 为洛伦兹变换：

$$x'^\mu = \Omega^\mu_\nu x^\nu. \tag{20.11}$$

---

1) 包括平移在内的所有洛伦兹变换构成的群通常称为**非齐次洛伦兹群或庞加莱群**.

通过指标的提升和下降，可从矩阵 Ω_ν^μ 得出矩阵 Ω_μ^ν，$\Omega^{\mu\nu}$，$\Omega_{\mu\nu}$（例如：$\Omega^{\mu\nu}=g_\nu^\rho\Omega^\mu\rho$）。给定这些矩阵中的任一个就决定了所考虑的洛伦兹变换。实数性和模方不变的条件被写为：

$$\Omega_{\mu\nu}^*=\Omega_{\mu\nu} \tag{20.12}$$

$$\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\lambda}=\Omega_{\nu\mu}\Omega^{\lambda\mu}-\delta_\nu^\lambda. \tag{20.13}$$

由此得出

$$\det|\Omega_\nu^\mu|=\pm1, \tag{20.14}$$

逆变换可写成

$$x^\mu=x'^\nu\Omega_\nu^\mu. \tag{20.15}$$

这些变换构成一个群，即**全洛伦兹群**。它是使 4 矢量之间的标量积保持不变的实线性变换群。

如果 $\Omega^{00}>0$，则这变换使类时矢量仍变为类时矢量，即这些矢量的时间分量的正负号保持不变。这样的变换称为正时变换，这些特殊的洛伦兹变换组成的集合称为**正时洛伦兹群**。

如果还有 $\det|\Omega_\nu^\mu|=+1$，则这变换也使普通空间中的笛卡儿坐标系的指向*保持不变，称它为固有洛伦兹变换。这些变换的集合构成一个群，称为**固有洛伦兹群**，用 $\mathscr{L}_0$ 代表。

固有洛伦兹群的所有变换都可看作是一系列无穷小变换连续作用的结果。**无穷小的洛伦兹变换**矩阵 $\Omega_{\mu\nu}$ 的形式是

$$g_{\mu\nu}+\omega_{\mu\nu},$$

其中，$\omega_{\mu\nu}$ 是无穷小量。条件 (20.12) 和 (20.13) 给出：

$$\omega_{\mu\nu}=\omega_{\mu\nu}^*,\qquad \omega_{\mu\nu}+\omega_{\nu\mu}=0. \tag{20.16}$$

所以，$\omega_{\mu\nu}$ 是实的反对称张量。

令

$$Z_{\mu\nu}^{(\alpha\beta)}=-Z_{\mu\nu}^{(\beta\alpha)}=g_{\mu\alpha}g_{\nu\beta}-g_{\mu\beta}g_{\nu\alpha}. \tag{20.17}$$

---

* 即坐标系是左手的或右手的特征。——译者

$Z_{\mu\nu}^{(\alpha\beta)}$ 是一个反对称张量，它只有两个不为0的元素：$+1$ $(\mu=\alpha,\nu=\beta)$ 和-1 $(\mu=\beta,\nu=\alpha)$。ε 是一个无穷小量，

$$g_{\mu\nu}-\varepsilon Z_{\mu\nu}^{(\alpha\beta)}$$

是一个特定的无穷小洛伦兹变换矩阵（在 $x^\alpha x^\beta$ 平面中"转动" ε 角）。

这种类型的无穷小变换一共有6种。在平面 x^1x^2,x^2x^3 和 x^3x^1 内的"转动"分别是绕 Oz，Ox 和 Oy 轴旋转 ε 角的空间转动；在平面 x^1x^0,x^2x^0,x^3x^0 内的"转动"分别是在 Ox,Oy,Oz 方向上以速度 ε 运动的特殊洛伦兹变换[1]。

除无穷小变换外，还可定义不同类型的反射：熟知的空间反射 s $(x^0\to x^0,x^k\to -x^k)$ 和时间反射 t $(x^0\to -x^0,x^k\to x^k)$。正时群是由变换 $\mathscr{L}_0$，反射 s 和它们的乘积 $s\mathscr{L}_0$ 组成的。完全群由变换 $\mathscr{L}_0$，$s\mathscr{L}_0$，$t\mathscr{L}_0$ 和 $st\mathscr{L}_0$ 构成。完全群的这4个分支的性质总结在下表中。

分支	$\mathrm{Det}\lvert\Omega_\nu^\mu\rvert$	Ω^{00}	群		
$\mathscr{L}_0$	$+1$	>0	固有	正时	完全
$s\mathscr{L}_0$	-1	>0			
$t\mathscr{L}_0$	-1	<0			
$st\mathscr{L}_0$	$+1$	<0			

1) 如果新参考系是由旧参考系绕 Oz 轴转动有限角度 φ 而得到的，则有
$x'^1=x^1\cos\varphi+x^2\sin\varphi$，$x'^2=x^2\cos\varphi-x^1\sin\varphi$，$x'^3=x^3$，$x'^0=x^0$.
如果是由沿 Ox 方向的速度为 $v=\tanh\varphi$ 的特殊洛伦兹变换得到的，则有
$x'^1=x^1\cosh\varphi-x^0\sinh\varphi$，$x'^0=x^0\cosh\varphi-x^1\sinh\varphi$，$x'^2=x^2$，
$x'^3=x^3$.
上面所考虑的变换相当于 $\varphi=\varepsilon=$无穷小量的情形。

4. 经典的相对论动力学

我们回顾静止质量为 m、电荷为 e 的经典粒子在电磁场 $(\varphi, \boldsymbol{A})$ 中的动力学性质.

令 $\boldsymbol{v}$ 是粒子的速度:

$$\boldsymbol{v} \equiv \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}. \tag{20.18}$$

我们定义相对论质量 M 和力学动量[1] $\boldsymbol{\pi}$ 为:

$$M \equiv \frac{m}{\sqrt{1-v^2}}, \qquad \boldsymbol{\pi} \equiv M\boldsymbol{v}, \tag{20.19}$$

$(M, \boldsymbol{\pi})$ 是模方为 m^2 的 4 矢量 π^μ:

$$M^2 - \boldsymbol{\pi}^2 = m^2, \tag{20.20}$$

而且它指向未来 $(M > 0)$.

在没有外场的情况下,粒子作均速直线运动: $\boldsymbol{v}$=常量.

当存在电磁场时, 粒子的轨迹由下面的方程决定:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\pi}}{\mathrm{d}t} - e[\boldsymbol{\mathscr{E}} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\mathscr{H}}] \equiv \boldsymbol{F}. \tag{20.21}$$

这是一个质点的相对论动力学基本方程. 矢量 $\boldsymbol{F}$ 是通常所说的**洛伦兹力**.

由 (20.21) 我们得到方程:

$$\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t} - (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{F}) - e(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\mathscr{E}}), \tag{20.21'}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\pi}) - \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F}, \tag{20.22}$$

它们分别是质量和力学动量矩的运动规律.

引入粒子的固有时间 τ, 可将这些关系式写成协变形式. 按定义,

---

1) 为了不和动量相混淆. 在本书中约定: 动量是坐标的拉格朗日正则共轭量(参看第二章 § 4 的注释).

$$d\tau = (dx^\mu dx_\mu)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \sqrt{1 - v^2}dt.$$

定义一个 4 速度:

$$u^\mu \equiv dx^\mu/d\tau \equiv (dt/d\tau,\ \boldsymbol{v}dt/d\tau) \quad (u^\mu u_\mu = 1).$$

它与 m 的乘积给出力学 4 动量:

$$\pi^\mu \equiv mu^\mu \equiv (M, \boldsymbol{\pi}).$$

在形式上,方程(20.21)和(20、21′) 等价于下面的协变方程:

$$\frac{d\pi^\mu}{d\tau} = eF^{\mu\nu}u_\nu, \tag{20.23}$$

或

$$\frac{du^\mu}{d\tau} = \frac{e}{m}F^{\mu\nu}u_\nu,$$

$F^{\mu\nu}$ 是电磁张量[见式(20.8—9)].

这些运动规律可以从拉格朗日或哈密顿形式导出 (参看问题 1.5). 动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 E 构成一个 4 矢量 p^μ,它与 4 矢量 π^μ 的关系是

$$p^\mu = \pi^\mu + eA^\mu, \tag{20.24}$$

即

$$E = M + e\varphi, \qquad \boldsymbol{p} = \boldsymbol{\pi} + e\boldsymbol{A}.$$

根据关系式(20.24) 和 (20.20),哈密顿函数定义为

$$H \equiv e\varphi + \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + m^2}, \tag{20.25}$$

从 (20.25),我们得出哈密顿正则方程:

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \frac{\boldsymbol{\pi}}{M}, \qquad \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -e\,\mathrm{grad}(\varphi - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}).$$

其中第一式是速度的定义. 利用 $\mathscr{E}$ 和 $\mathscr{H}$ 的定义[方程(20.7)]和

$$\frac{d\boldsymbol{A}}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\mathrm{grad}\right)\boldsymbol{A},$$

我们容易验证其中第二式等价于 (20.21).

II. 狄拉克方程和克莱因-戈登方程

5. 克莱因-戈登方程

由于电子有自旋，寻找电子的相对论波动方程的问题变得较为复杂，我们首先找出零自旋粒子（例如 π 介子）的相对论波动方程. 由于这样的粒子没有内部自由度，它的波函数 Ψ 只与变量 $\boldsymbol{r}$ 和 t 有关. 设 m 是它的质量，e 是它的电荷；而且假定它在电磁势 $A^\mu \equiv (\varphi, \boldsymbol{A})$ 中运动.

为了找到波动方程，我们凭经验来利用对应原理，这将保证我们能够在经典近似适用时得到经典的运动规律.

我们记得薛定谔的对应规则是

$$E \to \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}, \qquad \boldsymbol{p} \to -\mathrm{i}\nabla. \tag{20.26}$$

令 $p^\mu \equiv (E \cdot \boldsymbol{p})$，这个规则可更简单地写成

$$p^\mu \to \mathrm{i}\partial^\mu. \tag{20.26'}$$

从哈密顿量的表达式 (20.25) 得到

$$E = e\varphi + \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + m^2}. \tag{20.27}$$

从上式并利用规则 (20.26)，我们得到波动方程

$$\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)\Psi = \left[\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\nabla - e\boldsymbol{A}\right)^2 + m^2\right]^{\frac{1}{2}}\Psi.$$

这个方程有两个严重的缺点： 首先，空间和时间坐标之间的不对称使相对论不变性及其推论没有清楚地显示出来；其次，右边的算符在平方根内，除非场 $\boldsymbol{A}$ 为 0，否则实际上是不易处理的.

人们取关系式(20.20)作为相应运算的出发点，以避免这两个困难，得到

$$(E - e\varphi)^2 - (\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 = m^2. \qquad (20.28)$$

此式与(20.27)不等价，而且对更一般的关系

$$E = e\varphi \pm \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + m^2}, \qquad (20.29)$$

只有＋号与真实的经典解相对应；一号代表负质量解，没有任何物理意义．因此取(20.28)作为出发点，我们引出**无用的负质量解**.

对应运算应用到 (20.28) 上，得出**克莱因-戈登方程**

$$\left[\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)^2 - \left(\frac{1}{\mathrm{i}}\nabla - e\boldsymbol{A}\right)^2\right]\Psi = m^2\Psi. \qquad (20.30)$$

此式也可以写成

$$(D_\mu D^\mu + m^2)\Psi \equiv [(\partial_\mu + \mathrm{i}eA_\mu)(\partial^\mu + \mathrm{i}eA^\mu) + m^2]\Psi = 0, \qquad (20.30')$$

这个方程的相对论不变性是极明显的.

让我们简要地考虑一下这个方程的解释[1]. 为了简化讨论，我们只限于讨论无外场的情况. 于是，就得到(参看 § II.12)

$$(\Box + m^2)\Psi = 0. \qquad (20.31)$$

这是对时间的二阶微分方程，所以为了在往后的任意时刻都能完全决定 Ψ，我们必须知道初始时刻的 Ψ 和 $\partial\Psi/\partial t$．这个困难是容易克服的，如果我们假定系统在给定时刻的动力学状态不是由 Ψ 函数而是由 Ψ 和 $\partial\Psi/\partial t$ 这两个函数的集合或这两个函数的线性组合，即

$$\Phi = \Psi + \frac{\mathrm{i}}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \qquad \chi = \Psi - \frac{\mathrm{i}}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

来表述. 这等价于假定系统的状态由具有两个分量 (Φ 和 χ)

---

1) 更完全的叙述可参看 H. Feshbach 和 F. Villars, *Rev. Mod. Phys.* **30**(1958) 24. 在此文中也可找到主要的文献索引.

的波函数来表述．此波函数必须满足一个对时间是一阶导数的微分方程，它容易从克莱因-戈登方程推出来．在非相对论极限下，粒子的能量与其静止质量相近，所以

$$\mathrm{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \simeq m\Psi$$

而且

$$\chi \ll \Phi.$$

当二个分量中的一个与另一个相比是可忽略时，我们就得到非相对论的薛定谔理论．在这理论中，零自旋粒子的动力学状态由一个分量的波函数来表述．

为了阐释波函数，我们必须定义位置几率密度 P 和几率流密度 $\boldsymbol{j}$，它们满足连续性方程(参看 § 4.4)：

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0, \tag{20.32}$$

或者用符号 $j^\mu \equiv (P \cdot \boldsymbol{j})$ 将上式写成

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \tag{20.33}$$

由于 Ψ 和 Ψ^* 两者都满足方程 (20.31)，所以

$$\Psi^*(\Box\Psi) - (\Box\Psi^*)\Psi = 0,$$

由达朗伯算符的定义，得到

$$\partial_\mu[\Psi^*(\partial^\mu\Psi) - (\partial^\mu\Psi^*)\Psi] = 0.$$

如果我们取 j^μ 正比于上式左边方括号内的量，则连续性方程成立．比例常数可如此确定：在非相对论极限下，j^μ 能重新回到通常的定义上来，因而取

$$j^\mu = \frac{\mathrm{i}}{2m}[\Psi^*(\partial^\mu\Psi) - (\partial^\mu\Psi^*)\Psi],$$

即

$$P(\boldsymbol{r},t) = \frac{\mathrm{i}}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi\right] \tag{20.34}$$

$$j(r,t)=\frac{1}{2im}[\Psi^*(\nabla\Psi)-(\nabla\Psi^*)\Psi].$$

仔细考察 (20.24) 可看出：**几率密度 $P(r,t)$ 不是正定的**. 这是克莱因-戈登方程的主要困难之一.

与前一个有关的另一个困难是可能存在"负能解."例如，如果我们考虑无外场时方程的平面波解，

$$\Psi=\exp[-i(Et-p\cdot r)].$$

将此式代入 (20.31)，就得到

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

因此出现负能解$-\sqrt{p^2+m^2}$. 它们的出现显然是由于上面已提到的在理论中引入了负质量(更恰当说，应称之为负质量解，不过当外场为 0 时，质量和能量的区分是一种虚构).

依照泡利和韦斯科夫[1] 的方式，我们对 4 矢量 j^μ 和平均值定义的阐释作了修正后，就能解决这些困难. 根据这个重新阐释的理论，ej^μ 代表电流密度 4 矢量；尤其是，$eP(r,t)$ 代表电荷密度. 所以方程(20.23)是电荷守恒方程. 另一方面，粒子数是不守恒的. 此"矛盾"可这样解释：可能存在相反电荷的粒子对的湮灭和产生. 这现象只有在场论的范围内才能以令人满意的方式来考虑. 所以用这种方式来陈述时，**理论只是单电荷的而不是单粒子的**. 与此相反，在狄拉克理论中，我们能够定义正定的几率密度 P. 然而我们将看到，负能困难仍然存在，而且也不能用完全令人满意的方式把狄拉克理论考虑作单粒子理论 (第 VI 节).

6. 狄拉克方程

现在我们试图建立电子的相对论波动方程. 按狄拉克的

1) W. Panli 和 V. Weisskopt, *Helv. Phys. Acta* 7(1934) 709. 也可参看 H. Feshbach 和 F. Villars 的上述论文(前一个注释).

办法，我们从类比非相对论量子力学着手.

正如非相对论理论中的电子是用二分量旋量（转动时它的变换类似于大小为 1/2 的角动量)来表述一样，相对论理论中的电子必须用具有若干个分量的波函数（它们对较大的洛伦兹变换群有很确定的变化规律）来描写. 波函数 Ψ 的第 s 个分量用 $\Psi_s(\boldsymbol{r},t)$ 代表. Ψ 可写成单列矩阵的形式:

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{vmatrix}.$$

象在非相对论中的情况一样，可以认为给定时刻的 Ψ 是轨道变量 $\boldsymbol{r}$ 和固有(或自旋)变量 s ($s = 1,2,\cdots N$) 的函数. 这样的一个波函数表述某个态矢量 $|\Psi(t)\rangle$，而且这些态的空间 $\mathscr{S}$ 是轨道变量空间 $\mathscr{S}^{(0)}$ 和自旋变量空间 $\mathscr{S}^{(s)}$ 的张量积:

$$\mathscr{S} = \mathscr{S}^{(0)} \otimes \mathscr{S}^{(s)},$$

在合适的表象中，波函数 Ψ 就表述这个矢量:

$$\Psi(\boldsymbol{r},s;t) \equiv \psi_s(\boldsymbol{r},t) \equiv \langle \boldsymbol{r}s|\Psi(t)\rangle.$$

进一步作类比，我们用下式定义位置几率密度，

$$P(\boldsymbol{r},t) = \sum_{s=1}^{N} |\psi_s|^2. \tag{20.35}$$

由这些假设，波动方程必须取下面的形式:

$$\mathrm{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_D \Psi, \tag{20.36}$$

其中，H_D 是态矢量空间中的厄密算符. 为了看出这一点，我们注意到: 一方面，由于 Ψ 完全决定每一时刻电子的动力学态，因此波动方程对时间的依赖必须是一阶的；另一方面，为了保证 $P(\boldsymbol{r},t)$ 的定义有自洽性（参见 § 4.3)，H_D 必须是厄密的.

因为我们要寻找相对论的波动方程，所以也要求空间坐

标和时间之间有某种形式上的对称性，即波动方程对空间变量也是一阶的。

我们先考虑无外场情况下的电子。那么哈密顿量对平移必须是不变的，因此它与 r 无关。考虑上面的全部假设之后，H_D 可写成

$$H_D = \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta m, \tag{20.37}$$

其中，算符 $\boldsymbol{p}$ 具有对应规则(20.26)指出的那种意义，即 $\boldsymbol{p} = -i\nabla$，而且 $\boldsymbol{\alpha}(\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ 和 β 代表 4 个只作用在自旋变量上的厄密算符。如果采用符号 $E \equiv i\partial/\partial t$，则波动方程写成

$$[E - \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} - \beta m]\Psi = 0. \tag{20.38}$$

为了决定 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β，我们求助于对应原理：要求这个方程的解满足克莱因-戈登方程，即

$$[E^2 - \boldsymbol{p}^2 - m^2]\Psi = 0. \tag{20.39}$$

方程 (20.38) 左乘算符 $[E + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta m]$，得出二阶方程：

$$[E^2 - \sum_k (\alpha^k)^2 (p^k)^2 - \beta^2 m^2 - \sum_{k<l} (\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k) \times p^k p^l - \sum_k (\alpha^k \beta + \beta \alpha^k) m p^k]\Psi = 0.$$

如果 4 个算符 $\boldsymbol{\alpha}$，β 互相对易而且它们的平方为1：

$$(\alpha^k)^2 = 1 \quad \alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k = 0 \quad (k \neq l)$$
$$\beta^2 = 1 \quad \alpha^k \beta + \beta \alpha^k = 0, \tag{20.40}$$

则上面的方程与方程(20.39)是恒等的。方程 (20.38) 称为狄拉克方程，其中的矩阵 $\beta, \boldsymbol{\alpha}$ 选择为厄密的而且满足关系式 (20.40)。

从自由电子的这一方程出发，作如下的代换：

$$E \to E - e\varphi, \quad \boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A} \tag{20.41}$$

[e 是电子的电荷 ($e < 0$)]，我们就得到电磁场 $(\varphi, \boldsymbol{A})$ 中的电子的狄拉克方程：

$$[(E-e\varphi)-\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})-\beta m]\Psi=0,\quad(20.42)$$

即

$$\left[\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-e\varphi\right)-\boldsymbol{\alpha}\cdot(-\mathrm{i}\nabla-e\boldsymbol{A})-\beta m\right]\Psi=0.\quad(20.43)$$

此式与方程(20.36)比较，我们找到有外场时的狄拉克哈密顿量的表达式：

$$H_D=e\varphi+\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})+\beta m.\quad(20.44)$$

7. 空间$\mathscr{E}^{(s)}$的构成　狄拉克表象

$\mathscr{E}^{(s)}$ 尚待构成．这个空间的算符是 4 个基本算符 β，α_x，α_y，α_z 和它们所能构成的一切函数．$\mathscr{E}^{(s)}$ 对这算符集合是不可约的．

为了构造 $\mathscr{E}^{(s)}$，我们利用这 4 个基本算符的厄密特征和规定其代数性质的关系式 (20.40)．

这些性质类似于非相对论 $\frac{1}{2}$ 自旋理论中的三个算符 σ_1，σ_2，σ_3 的性质．在非相对论情况下，自旋变量空间 $\mathscr{E}^{(\sigma)}$ 是二维的．可依下述方式构成它．由于 σ_3 是厄密的，而且 $\sigma_3^2=1$，因此它只有两个可能的本征值 ±1．此外，σ_3 的每一个本征矢量都伴随一个具有相反本征值的本征矢量．例如考虑一个矢量 $|+\rangle$，它使得 $\sigma_3|+\rangle=|+\rangle$．因为 σ_3 和 σ_1 是反对易的，矢量 $|-\rangle\equiv\sigma_1|+\rangle$ 就有性质：$\sigma_3|-\rangle=(-1)|-\rangle$．于是得到 $\sigma_3|\pm\rangle=|\mp\rangle$ 和 $\sigma_3|\pm\rangle=(\pm1)|\pm\rangle$．所以，由矢量 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 张成的空间对算符 σ_3，σ_1 以及它们的函数(具体如 $\sigma_2\equiv\mathrm{i}\sigma_1\sigma_3$)是不变的．这空间，从它的构成来看，是不可约的．因此它就是我们所要找的空间 $\mathscr{E}^{(\sigma)}$．在以 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 为基矢的表象中，算符 σ_1，σ_2 和 σ_3 由泡利矩阵来表述[参看 § 13.19

或公式 (7.65)]。

为了构造 $\mathscr{E}^{(s)}$，我们把问题约化为上述情况。通过如下的定义引入算符 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 和 ρ_1, ρ_2, ρ_3：

$$\sigma_z = -i\alpha_x\alpha_y, \quad \sigma_x = -i\alpha_y\alpha_z, \quad \sigma_y = -i\alpha_z\alpha_x \tag{20.45}$$

$$\rho_3 = \beta, \quad \rho_1 = \sigma_z\alpha_z = -i\alpha_x\alpha_y\alpha_z, \quad \rho_2 = i\rho_1\rho_3 = -\beta\alpha_x\alpha_y\alpha_z; \tag{20.46}$$

4 个基本算符可用 β 和 σ 表述，如下式：

$$\beta = \rho_3, \quad \alpha^k = \rho_1\sigma^k. \tag{20.47}$$

所以构造 $\mathscr{E}^{(s)}$ 的问题就在于构造一个对 ρ，σ 是不可约的空间。容易看出：

(i) 各个 ρ 和 σ 之间互相对易；

(ii) σ 是三个反对易的厄密算符，其平方为 1；

(iii) ρ 是三个反对易厄密算符，其平方为 1。所以（参看 § 8.7）有：

(i) $\mathscr{E}^{(s)}$ 是空间 $\mathscr{E}^{(\rho)}$ 和空间 $\mathscr{E}^{(\sigma)}$ 的张量积：

$$\mathscr{E}^{(s)} = \mathscr{E}^{(\rho)} \otimes \mathscr{E}^{(\sigma)}$$

其中，$\mathscr{E}^{(\rho)}$ 对 ρ 是不可约的，$\mathscr{E}^{(\sigma)}$ 对 σ 是不可约的；

(ii) $\mathscr{E}^{(\sigma)}$ 是可用上述方法构成的二维空间；

(iii) $\mathscr{E}^{(\rho)}$ 也是可用同样方法构成的二维空间。因此，$\mathscr{E}^{(s)}$ **是 4 维的**。

在下一节，我们将证明 σ 与自旋有关，而 ρ 与能量的正负号有关。狄拉克方程也有负能解，这与克莱因-戈登方程相似，而且起因也一样。特别是，我们将会看到：$\boldsymbol{\alpha}$ 是一极矢量算符，而 $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 是轴矢量算符。此外，形式上有

$$\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha} = 2i\boldsymbol{\sigma}. \tag{20.48}$$

电子的自旋是 $\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$。能量的正负号大致由 $\beta = \rho_3$ 的本征值决定。

所以电子的动力学状态用一个有 4 个分量的函数 Ψ 来描述，Ψ 的分量数目也就是非相对论 $\frac{1}{2}$ 自旋理论中波函数分量数目的两倍. 这种表象称为**狄拉克表象**，在此表象中，ρ 和 σ 取泡利矩阵的形式[参看方程 (7.65-66)]；波函数的每一分量与自旋在 Oz 轴上的一种取向对应，并且大体上与能量的正负号对应.

8. 狄拉克方程的协变形式

狄拉克方程(20.43)是狄拉克本人最先提出来的.这种形式最适宜于进行物理阐释和过渡到非相对论极限. 现在我们提出第二种形式，它对空间和时间坐标更为对称，因而在相对论协变性问题中占有极重要地位的时候，它是更方便的.

为此目的，用 β 左乘 (20.43) 两边，而且令

$$\gamma^\mu \equiv (\gamma^0,\gamma^1,\gamma^2,\gamma^3) \equiv (\gamma^0,\boldsymbol{\gamma}) \tag{20.49}$$

$$\gamma^0 \equiv \beta \quad \boldsymbol{\gamma} \equiv \beta\boldsymbol{\alpha}.$$

我们得到

$$\boxed{[i\gamma^\mu D_\mu - m]\Psi \equiv [\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) - m]\Psi = 0} \tag{20.50}$$

根据定义(20.49)，容易从 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 的性质得出 γ^μ 的性质. 从 10 个关系式 (20.40) 得出 10 个等价的关系：

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}. \tag{20.51}$$

$\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 的厄密条件等价于条件：

$$\gamma^{0\dagger} = \gamma^0, \quad \gamma^{k\dagger} = -\gamma^k, \tag{20.52}$$

也可写成简缩的形式：

$$\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0. \tag{20.53}$$

把指标的提升和下降的通常规则扩充到 γ 上，并令

$$\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu \tag{20.54}$$

是方便的。

注意，

$$\gamma_0 = \gamma^0, \quad \gamma_k = -\gamma^k \tag{20.55}$$

$$\gamma^\mu = \gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu^{-1}. \tag{20.56}$$

9. 伴随方程 流的定义

我们已经定义了正定的位置几率密度[方程 (20.35)]。正如上面指出的，狄拉克哈密顿量的厄密特征保证了这一定义是自洽的。现在我们定义流密度，而且证明：用狄拉克方程的解来定义的流密度满足连续性方程。我们首先利用狄拉克形式对这个问题作完整的讨论，然后用协变形式重复这论证。

假定我们已经选择了 β 和 α 的特定的表象。因此波函数 ψ 是 4 行一列矩阵

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix},$$

它的厄密共轭用

$$\Psi^\dagger \equiv (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*).$$

代表。自旋空间中的算符是 4 × 4 矩阵。可以定义部分标量积(在其中只对自旋变数求和)，用圆括号表示这样的标量积，因此几率密度 P 写作

$$P(\boldsymbol{r}, t) \equiv (\Psi^\dagger \Psi). \tag{20.57}$$

另外，β_{st} 代表矩阵 β 的第 s 行第 t 列的元素：

$$(\Psi^\dagger \beta \Psi) \equiv \sum_t \sum_s \psi_s^* \beta_{st} \psi_t.$$

如果 Ψ 是狄拉克方程的解，即

$$\mathrm{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=H_D\Psi \tag{20.58}$$

$$=\left[e\varphi+\sum_k\alpha^k\left(-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x^k}-eA^k\right)+\beta m\right]\Psi,$$

那么，$\Psi^\dagger$ 是厄密共轭方程的解. 对(20.58)取复数共轭，而且其中每个矩阵都用其转置代换，就得出共轭方程：

$$\mathrm{i}\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t}=-\Psi^\dagger H_D \tag{20.59}$$

$$=-e\varphi\Psi^\dagger-\sum_k\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x^k}-eA^k\right)\Psi^\dagger\alpha^k-m\Psi^\dagger\beta.$$

用 $\Psi^\dagger$ 左乘(20.58)式作标积，用 Ψ 右乘 (20.59) 式作标积，然后两式相加得到

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^\dagger\Psi)=-\mathrm{i}\sum_k\frac{\partial}{\partial x^k}(\Psi^\dagger\alpha^k\Psi). \tag{20.60}$$

我们看出：上式左边是几率密度的时间导数，而右边是如下定义的一个矢量 $j(r,t)$ 的散度：

$$j(r,t)\equiv(\Psi^\dagger\alpha\Psi). \tag{20.61}$$

$j(r,t)$ 就是我们要找的流密度，而且(20.60)等价于连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t}P+\nabla\cdot j=0.$$

从狄拉克方程的协变形式[方程(20.50)]出发，上面的作法可以重复进行. (20.50) 的厄密共轭是：

$$(-\mathrm{i}\partial_\mu-eA_\mu)\Psi^\dagger\gamma^{\mu\dagger}-m\Psi^\dagger=0. \tag{20.62}$$

[其中，符号 $\partial_\mu\Psi^\dagger\gamma^{\mu\dagger}$ 是单行 4 列矩阵 $(\partial\Psi^\dagger/\partial x^\mu)\ \gamma^{\mu\dagger}$.]为了方便，令

$$\bar{\Psi}=\Psi^\dagger\gamma^0,\quad \Psi^\dagger=\bar{\Psi}\gamma^0. \tag{20.63}$$

考虑到关系式(20.53)，并用 γ^0 左乘方程(20.62)，得到比较简明的形式：

$$\boxed{(-i\partial_\mu - eA_\mu)\bar{\Psi}\gamma^\mu - m\bar{\Psi} = 0} \qquad (20.64)$$

显然，这个方程等价于 (20.59)．我们称 $\bar{\Psi}$ 为 Ψ 的**伴随**，而称 (20.64) 为**伴随方程**.

用 $\bar{\Psi}$ 对(20.50)从左边作标量相乘，用 Ψ 对 (20.64) 从右边作标量相乘，然后相减，得到

$$i\partial_\mu(\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi) = 0.$$

定义流密度 4 矢量为

$$j^\mu \equiv (\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi), \qquad (20.65)$$

上式等价于连续性方程

$$\partial_\mu j^\mu = 0.$$

容易验证 $j^\mu \equiv (P, \boldsymbol{j})$．因此，我们得到了所期望的以协变形式写出的连续性方程．在下一节，我们将证明 j^μ 的 4 个分量的确构成一个 4 矢量.

III. 狄拉克方程的不变性质

10. 狄拉克矩阵的性质

作为研究狄拉克方程的不变性的一个准备，我们现在对 4 个 4 × 4 矩阵 $\gamma^\mu \equiv (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$ 的性质作系统的讨论．γ^μ 满足下面的关系式:

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}I, \qquad (20.66)$$

其中，I 是单位矩阵．矩阵关系式(20.66)类似于算符关系式 (20.51)．然而这里引入的矩阵无需满足么正条件(20.53)．下面所述的全部性质都只是关系式 (20.66) 的推论.

γ^A 矩阵．因为 γ^μ 是反对易的，而且其平方等于 $+I$ 或 $-I$，所以几个 γ^μ 的各种乘积是相等的(不计正负号)．表 1 列出 16 个这样的特定的 γ^A 矩阵．这些矩阵分为 5 类，用 (S)，

(V),(T),(A)和(P)来代表。而且各类分别有1，4，6，4，1个基元。这样分类的理由到本节末尾(§14)就清楚了。

表1　　γ^A　　矩阵

矩　　阵	显　　式	
	$(\gamma^A)^2 = I$	$(\gamma^A)^2 = -I$
(S) $I \equiv$	I	
(V) $\gamma^\mu \equiv \{\gamma^0, \gamma^k\} \equiv$	γ^0	γ^1　γ^2　γ^3
(T) $\gamma^{[\lambda\mu]} \equiv \{\gamma^k\gamma^0, \gamma^5\gamma^0\gamma^k\} \equiv$	$\gamma^1\gamma^0$　$\gamma^2\gamma^0$　$\gamma^3\gamma^0$	$\gamma^2\gamma^3$　$\gamma^3\gamma^1$　$\gamma^1\gamma^2$
(A) $\gamma^{[\lambda\mu\nu]} \equiv \{\gamma^0\gamma^5, \gamma^k\gamma^5\} \equiv$	$\gamma^1\gamma^2\gamma^3$	$\gamma^0\gamma^2\gamma^3$　$\gamma^0\gamma^3\gamma^1$　$\gamma^0\gamma^1\gamma^2$
(P) $\gamma^{[\lambda\mu\nu\rho]} \equiv \gamma^5$		$\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$

很明显，$(\gamma^A)^2$按不同的情况或者等于I或者等于$-I$。其中有6个矩阵(其平方等于I)分组在左列中；另有10个矩阵(其平方等于$-I$)分组在右列中。

在所有这些矩阵中，只有I与其余的对易。如果$\gamma^A \neq I$，则它与16个矩阵中的8个反对易，与另外的8个对易。

特别是，如下定义[1]的矩阵

$$\gamma^5 \equiv \gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \tag{20.67}$$

与γ^μ反对易：

$$\gamma^5\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^5 = 0. \tag{20.68}$$

γ^5的平方为

$$(\gamma^5)^2 = -I. \tag{20.69}$$

逆矩阵 (γ_A)。我们用下面的关系式定义γ_μ：

$$\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu. \tag{20.70}$$

显然

$$\gamma^\mu = [\gamma_\mu]^{-1}.$$

1) 指标4通常用来代表如下定义的时间分量：

$$x^4 = ix^0 = ict.$$

由此推知，得到 γ^A 的逆算符的规则是将其中的各个 γ^μ 的顺序倒过来并且每个 γ^μ 都用 γ_μ 代替. 我们用 γ_A 代表如此得到的表达式，则有

$$\gamma_A\gamma^A = \gamma^A\gamma_A = I. \tag{20.71}$$

用这样的方法构造逆算符，得出:

$$\gamma_5 = \gamma_3\gamma_2\gamma_1\gamma_0.$$

迹和行列式

$$\mathrm{Tr}\gamma^A = \begin{cases} 4 & \text{若 } \gamma^A = I \\ 0 & \text{若 } \gamma^A \neq I. \end{cases} \tag{20.72}$$

为了看出这一点，设 $\gamma^A \neq I$，并令 γ^B 是与 γ^A 反对易的 8 个矩阵:

$$\gamma^A = -\gamma^B\gamma^A\gamma_B.$$

那末，我们有

$$\mathrm{Tr}\gamma^A = -\mathrm{Tr}\gamma^B\gamma^A\gamma_B = -\mathrm{Tr}\gamma_B\gamma^B\gamma^A = -\mathrm{Tr}\gamma^A = 0.$$

顺便指出 (问题 20.3)，

$$\det\gamma^A = 1.$$

重排引理. 通过简单的检验可证实下述引理:
如果我们用 16 个 γ^A 矩阵集合中的某一个矩阵右乘(或左乘)其中的各个矩阵，则得到16个矩阵的同一个集合，只是顺序和正负号有可能改变.

线性独立和不可约性. 利用重排引理和迹的性质，容易证明:

(i) 16 个 γ^A 矩阵是线性独立的;

(ii) 任一个 4 阶矩阵 M 可由 γ^A 的某个线性组合唯一地确定:

$$M = \sum_A m_A\gamma^A \qquad m_A = \frac{1}{4}\mathrm{Tr}\gamma_A M;$$

(iii) 与每个 γ^μ 对易的(因此也与各个 γ^A 对易的)任一矩

阵都是单位矩阵的某个倍数.

如果 $[M,\gamma^\mu]=0$(对任意的 μ),则 $M=$常数$\times I$.

基本定理. 设 γ^μ 和 $\gamma^{\mu'}$ 是满足关系式(20.66)的 4 个 4 阶矩阵的两个集合,则存在一个非奇异的矩阵 S ($\det S\neq 0$),它被确定到一个常数未定,而且满足下列关系

$$\gamma^\mu = S\gamma'^\mu S^{-1} \quad (\mu=0,1,2,3). \tag{20.73}$$

我们采用下述方式来证明这个定理. 一个 γ^μ 集合 (γ'^μ 集合)对应一个 γ^A 集合 (γ'^A 集合)[上面已说明了它们的定义和主要性质]. 于是,每一个给定的 γ^A 对应某一个 γ'^A 矩阵,指标 A 可取所有的 16 个不同值. 令 F 是某个矩阵,并用 S 代表如下规定的矩阵:

$$S \equiv \sum_A \gamma'^A F \gamma_A,$$

其中,求和号 $\sum_A$ 遍及指标 A 的 16 个可能取值.

用 γ^B 表示一个特定的矩阵,它的逆矩阵用 γ_B 表示,它在另一系中对应的矩阵用 γ'^B 表示,按重排引理得到

$$\gamma'^B S\gamma_B \equiv \sum_A \gamma'^B\gamma'^A F\gamma_A\gamma_B = \sum_A \gamma'^A F\gamma_A \equiv S,$$

所以

$$\gamma'^B S = S\gamma^B. \tag{20.74}$$

为了证实 S 满足关系式(20.73),需证明 S 有逆矩阵. 为此引入矩阵 T,其定义是

$$T \equiv \sum_A \gamma^A G\gamma'_A,$$

其中 G 是任意的矩阵. 用类似的推理可证明:

$$\gamma^B T = T\gamma'^B.$$

所以,

$$\gamma^B TS = T\gamma'^B S = TS\gamma^B,$$

不论 γ^B 是什么. 由于 TS 与任一 γ^B 矩阵对易,故它是单位矩阵的某个倍数: $TS = cI$. 相乘常数由下式给定:

$$c = \frac{1}{4}\,\mathrm{Tr}TS = \frac{1}{4}\sum_A\sum_B \mathrm{Tr}\gamma^A G\gamma'_A\gamma'^B F\gamma_B$$

$$= \frac{1}{4}\,\mathrm{Tr}G\left(\sum_A\sum_B \gamma'_A\gamma'^B F\gamma_B\gamma^A\right) = 4\mathrm{Tr}GS.$$

现在,总可以选择 F 使得 S 至少有一个不为 0 的元素,因为: 如果对于各个 F, S 都为 0, 则 16 个 γ^A 矩阵不是线性独立的. 因此,总可以这样选择 G,使得

$$\mathrm{Tr}GS \equiv \sum_s\sum_t G_{st}S_{ts} = \frac{1}{4};$$

于是 $c = 1, T = S^{-1}$. 因此, S 有一逆矩阵,而且(20.74)两边右乘 S^{-1} 就得到(20.73).

如果有同样性质的另一个矩阵 S', 则 $S^{-1}S'$ 与所有的 γ^μ 对易,所以 $S^{-1}S' =$常数$\times I$. 反之,如果 S 具有性质 (20.73), 则 S 的任一倍数也有这样的性质. 因此我们证明了非奇异矩阵 S 是存在的,而且它被确定到一个常数未定. 证毕.

么正的 γ^μ 阵矩. 如果满足关系式(20.66)的矩阵是么正的,

$$\gamma_\mu \equiv \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 = \gamma^{\mu\dagger}, \qquad (20.75)$$

则所有的 γ^A 矩阵都是么正的,因此推知,它们是厄密的或反厄密的(依 $(\gamma^A)^2$ 等于$+I$ 或$-I$ 而定).

由于下述推论(这推论的证明留给读者), 基本定理变得完善:

设 γ^μ 和 γ'^μ 是两组满足关系式(20.66)的 4 个 4 阶么正矩阵,则存在一个么正矩阵 U(相因子未定),使得

$$\gamma'^\mu = U\gamma^\mu U^\dagger (\mu = 0,1,2,3).$$

复共轭 B 矩阵. 特别是,如果 γ^μ 是么正的而且满足关

系式(20.66)，则 4 个复共轭矩阵 $\gamma^{\mu *}$ 也是么正的而且满足关系式(20.66)。应用上面的推论，通过一么正变换可从 $\gamma^{\mu *}$ 得到 γ^{μ}。以后用 B（除相因子外它是确定的）代表这样的变换矩阵：

$$\gamma^{\mu} = B\gamma^{\mu *}B^{\dagger} \quad \gamma^{\mu *} = B^{*}\gamma^{\mu}\tilde{B}. \tag{20.76}$$

可以证明（问题 20.4）B 是反对称的，

$$B = -\tilde{B}$$

或者(实际上是同一回事)

$$BB^{*} = B^{*}B = -I. \tag{20.77}$$

如 γ 矩阵是狄拉克表象中的那些矩阵，则有：

$$B \equiv B_{D} = \gamma^{2}\gamma^{5}$$
$$= -i\rho_{3}\sigma_{y}.$$

对这样的特定情况，性质(20.77)是容易被证实的。

11. 狄拉克方程的形式对参考系作正时变换的不变性

为了满足相对论原理的要求，狄拉克方程和连续性方程在各个洛伦兹参考系中应有相同的形式。事实上，相对论原理只要求它对固有洛伦兹变换[1]是不变的，但这个理论在形式上对全洛伦兹群也是不变的。我们先详尽研究对正时群的不变性。时间反演不变性的阐述放到本节末尾，它与狄拉克方程的其它不变性有关，但不直接与洛伦兹变换发生联系。

所以我们假定：在参考系 R 中，电子的动力学状态用满足狄拉克方程的 4 分量波函数描述：

$$[\gamma^{\mu}(i\partial_{\mu} - eA_{\mu}(x)) - m]\Psi(x) = 0. \tag{20.78}$$

1) 而且也对空间和时间平移是不变的．这样的不变性很容易用类似于本小节的理由加于证明．如果坐标轴原点用 4 矢量 a^{μ} 作了位移，即 $x'^{\mu} = x^{\mu} + a^{\mu}$，则 $A'_{\mu}(x') = A_{\mu}(x)$，而且波函数的变换规律[即类似于(20.85)]就变为

$$\Psi'(x') = \Psi(x).$$

假定我们已经为空间 $\mathscr{S}^{(s)}$ 的各算符一劳永逸地选定了一个表象，因而符号 γ^μ 代表完全确定的矩阵，而且关系式(20.78)包含 4 个方程 ($s=1,2,3,4$)：

$$\sum_{t=1,2,3,4}\sum_{\mu}(\gamma^\mu)_{st}\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x^\mu}-eA_\mu(x^0x^1x^2x^3)\right)$$

$$\times\psi_t(x^0x^1x^2x^3)-m\psi_s(x^0x^1x^2x^3)=0,$$

它们是波函数的 4 个分量 $\psi_s(x)$ 应满足的方程.

在新的参考系 R' 中考虑同一系统. 通过某个正时洛伦兹变换 $\mathscr{L}$，从 R 得到 R'：

$$(R')=\mathscr{L}(R).$$

$\mathscr{L}$ 由一个具有性质(20.12)和(20.13)(此外 $\Omega_0^0>0$)的矩阵 Ω_ν^μ 来表征，它决定了参考系 R 中某一点的坐标 x^μ 与**同一点**在参考系 R' 中的坐标 x'^μ 之间的线性对应关系，即决定了逆变矢量的变换规律[方程(20.11)和(20.15)]. 我们用符号写成

$$x'=\mathscr{L}x,\quad x=\mathscr{L}^{-1}x'. \tag{20.79}$$

偏微分算符的变换相似于协变矢量：

$$\partial_\mu=\partial'_\nu\Omega_\mu^\nu. \tag{20.80}$$

如果用 $A'_\mu(x')$ 代表 4 矢量势在新参考系中的协变分量，则它们与 $A_\mu(x)$ 的关系也由协变矢量的变换规律决定：

$$A_\mu(x)\equiv A_\mu(\mathscr{L}^{-1}x')=A'_\nu(x')\Omega_\mu^\nu. \tag{20.81}$$

把 $\Psi(x)$ 看作新坐标的函数，则它满足方程

$$[\hat{\gamma}^\mu(\mathrm{i}\partial'_\mu-eA'_\mu(x'))-m]\Psi(\mathscr{L}^{-1}x')=0, \tag{20.82}$$

其中，

$$\hat{\gamma}^\mu\equiv\Omega_\rho^\mu\gamma^\rho. \tag{20.83}$$

将(20.80)和(20.81)代入(20.78)，即得到(20.82).

4 个 γ^μ 矩阵是么正的，而且满足关系式(20.66). 4 个 $\hat{\gamma}$ 矩阵不必是么正的，但因 Ω_ν^μ 的正交性[关系式(20.13)]，它们

也满足关系式(20.66),即

$$\hat{\gamma}^{\mu}\hat{\gamma}^{\nu}+\hat{\gamma}^{\nu}\hat{\gamma}^{\mu}=\Omega^{\mu}_{\rho}\Omega^{\nu}(\gamma^{\rho}\gamma^{\sigma}+\gamma^{\sigma}\gamma^{\rho})$$

$$=2\Omega^{\mu}_{\rho}g^{\rho\sigma}\Omega^{\nu}_{\sigma}=2g^{\mu\nu}.$$

所以由§10的基本定理可知，存在一个非奇异的、使 $\hat{\gamma}$ 变换为 γ 的矩阵 Λ（被确定到一个常数未定）：

$$\hat{\gamma}^{\mu}\equiv\Omega^{\mu}_{\rho}\gamma^{\rho}=\Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda \qquad (20.84)$$

$$(\mu=0,1,2,3).$$

此式代入(20.82),并令

$$\Psi'(x')=\Lambda\Psi(x)\equiv\Lambda\Psi(\mathscr{L}^{-1}x'), \qquad (20.85)$$

再用 Λ 左乘两边，则得到：

$$[\gamma^{\mu}(i\partial'_{\mu}-eA'_{\mu}(x'))-m]\Psi'(x')=0.$$

这个波动方程描述系统在新参考系中的时间演化．它在形式上与(20.78)相同．所以，狄拉克方程的形式对参考系的正时变换是不变的，而且波函数的变换规律由方程(20.85)给定．

一般来说，矩阵 Λ（可确定到一个常数未定）不能选择为么正的．然而现在可证明常数总能如此选择，使得

$$\Lambda^{\dagger}=\gamma^{0}\Lambda^{-1}\gamma^{0}, \qquad (20.86)$$

那么，Λ 就可确定到只余下一个任意的相因子未定．

因为 Ω^{μ}_{ρ} 是实的，γ^{μ} 是么正的并满足(20.75)，所以比较(20.83)及其厄密共轭就得到

$$\hat{\gamma}^{\mu\dagger}=\gamma^{0}\hat{\gamma}^{\mu}\gamma^{0}.$$

取(20.84)的厄密共轭，并将上式代入其中，容易得到

$$\hat{\gamma}^{\mu}=(\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0})\gamma^{\mu}(\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0})^{-1}.$$

此式与(20.84)比较，又看出：矩阵 $\Lambda\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0}$ 与4个 γ^{μ} 对易．因而它是单位矩阵的倍数，

$$\Lambda^{\dagger}=c\gamma^{0}\Lambda^{-1}\gamma^{0}. \qquad (20.87)$$

下面证明这个常数 c 必需是正实数．从(20.87)和(20.84)得到

$$\Lambda^{\dagger}\Lambda = c\gamma^0(\Lambda^{-1}\gamma^0\Lambda) = c(Q_0^0 + \sum_k Q_k^0\gamma^0\gamma^k),$$

考虑到(20.72)，则有 $\mathrm{Tr}\Lambda^{\dagger}\Lambda = 4cQ_0^0$. 由于有限维厄密矩阵 $\Lambda^{\dagger}\Lambda$ 的迹必需是正实数，Q_0^0 又是正实数，所以 c 也是正实数. 因此 $\sqrt{c}$ 乘 Λ 而得的矩阵也是 Λ 矩阵，而且满足方程(20.86). 证毕.

由波函数的变换规律(20.85)，我们得到伴随函数的变换规律:

$$\bar{\Psi}' \equiv \Psi'^{\dagger}\gamma^0 = \Psi^{\dagger}\Lambda^{\dagger}\gamma^0 = \bar{\Psi}\gamma^0\Lambda^{\dagger}\gamma^0,$$

考虑到(20.86)，就有

$$\bar{\Psi}'(x') = \bar{\Psi}(x)\Lambda^{-1}. \qquad (20.88)$$

利用这个变换规律，读者容易证明: 伴随方程(20.64)在形式上对参考系的正时变换也是不变的.

余下要证明的是连续性方程在形式上具有的不变性，或者更确切地说，(20.65)定义的 j^{μ} 的变换类似于逆变4矢量[1]的变换.

从(20.85)，(20.88)和(20.84)出发，容易证明:

$$j'^{\mu}(x') \equiv (\bar{\Psi}'\gamma^{\mu}\Psi') = (\bar{\Psi}\Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda\Psi) = Q_{\rho}^{\mu}(\bar{\Psi}\gamma^{\rho}\Psi)$$
$$= Q_{\rho}^{\mu}j^{\rho}(x).$$

对每一个洛伦兹变换，Λ 由条件(20.84)和(20.86)确定(相因子未定). **在目前的情况下，这个相因子并无物理意义.** 在尽可能的情况下，去除相因子上的任意性，同时使 Λ 构成一个同态于正时洛伦兹群(参看§15.8的讨论)的群，这是我们所希望的.

因为 Q_{ν}^{μ} 是实的，条件(20.84)给出:

$$Q_{\nu}^{\mu}\gamma^{\nu *} = (\Lambda^*)^{-1}\gamma^{\mu *}\Lambda^*,$$

1) 另外，波函数的归一化与参考系有关，而且将 j^0 解释为位置几率密度是不恰当的.

所以，引用么正矩阵 B [见定义 (20.76)]，就得出

$$Q^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu} = (B\Lambda^{*}B^{\dagger})^{-1}\gamma^{\mu}(B\Lambda^{*}B^{\dagger}).$$

比较此方程与(20.84)，我们看到：$B\Lambda^{*}B^{\dagger}\Lambda^{-1}$ 与 4 个 γ^{μ} 矩阵对易，因此它是单位矩阵的倍数．容易看出 [例如计算 det $(BA^{*}B^{\dagger}\Lambda^{-1})$] 这个倍数就是相因子，换言之，

$$\Lambda^{*} = e^{i\lambda}B^{\dagger}\Lambda B.$$

因为 Λ 可以确定到只有一个未定的相因子，故经常可选择这个相因子为 $e^{i\lambda} = 1$．以后我们经常这样作，于是 Λ 就确定到只余下正负号未定．

总之，每一个正时洛伦兹变换对应**两个** Λ 矩阵(彼此差别一个符号)，它们由下面三个条件确定：

$$Q^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu} = \Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda \tag{20.89a}$$

$$\Lambda^{\dagger} = \gamma^{0}\Lambda^{-1}\gamma^{0} \tag{20.89b}$$

$$\Lambda^{*} = B^{\dagger}\Lambda B. \tag{20.89c}$$

很显然，这样确定的 Λ 矩阵的集合构成一个群，而且这个群同态于正时洛伦兹群．在 § 12 中我们将看到，Λ 符号上的任意性在不违背这个群性质[1]的条件下是不能去除的．

12. 固有群的变换

现在我们来求方程 (20.89) 所确定的 Λ 矩阵的显示表达

---

1) 不用条件 (20.89c)，还可以取更普遍的条件：$\Lambda^{*} = \eta B^{\dagger}\Lambda B$，其中 η 是一个与所考虑的具体洛伦兹变换有关的常数．如果 η 构成洛伦兹群的一个阿贝耳表示，则 Λ 的群性质就得以保存．所以，对固有群 $\mathscr{L}_{0}$ 的变换，要求 $\eta = 1$，这再次得到条件 (20.89c)．对于反射型的变换，即对于 $s\mathscr{L}_{0}$ 分支的那些变换，可在下述两种可能性之间进行选择：

(a) $\eta = 1$(对任意的 $s\mathscr{L}_{0}$)，由此得到 (20.89c)；

(b) $\eta = -1$ (对任意的 $s\mathscr{L}_{0}$)，由此则得到 $\Lambda^{*} = -B\Lambda B^{\dagger}$．

显然，这理论的物理内容与这种选择无关．与上述的 (a) 和(b)分别对应的两个群 $G^{(a)}$ 和 $G^{(b)}$ 都同态于正时洛伦兹群，但它们彼此并不同构．特别是，与 s 对应的两个矩阵，其平方等于 I (对 $G^{(a)}$) 或者等于 $-I$ (对 $G^{(b)}$) [参看本章第13节的注释]

式. 在这一小节，我们只限于讨论固有群的变换.

首先考虑无穷小变换. 6 个无穷小"转动" $g_{\mu\nu}-\varepsilon Z_{\mu\nu}^{(\alpha\beta)}$ 中的每一个都对应一个矩阵 $\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon)$，它与单位矩阵相差一无穷小量，因而可写成下面的形式：

$$\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon)\simeq I+\mathrm{i}\varepsilon S_{\alpha\beta}, \tag{20,90}$$

其中，$S_{\alpha\beta}$ 是要确定的有限矩阵. 我们有

$$[\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon)]^{-1}\simeq\Lambda^{(\alpha\beta)}(-\varepsilon)\simeq I-\mathrm{i}\varepsilon S_{\alpha\beta}.$$

因此，从 (20.89) 式的性质得出

$$-\varepsilon g^{\mu\nu}Z_{\nu\rho}^{(\alpha\beta)}\gamma^{\rho}=-\mathrm{i}\varepsilon[S_{\alpha\beta},\gamma^{\mu}],$$

或者利用 (20.17) 得到

$$[S_{\alpha\beta},\gamma^{\mu}]=\mathrm{i}(\delta_{\beta}^{\mu}\gamma_{\alpha}-\delta_{\alpha}^{\mu}\gamma_{\beta}).$$

$S_{\alpha\beta}$ 和 γ^{μ} 的对易关系与矩阵 $\frac{1}{2}i\gamma_{\alpha}\gamma_{\beta}$ 和 γ^{μ} 的对易关系相同. 因此它们的差同 4 个 γ^{μ} 矩阵对易，而且是一个常数. 容易看出：只有当这个常数为零时，条件(20.89b)和(20.89c)才得到满足. 为了方便，令

$$\sigma_{\mu\nu}\equiv\frac{1}{2}\mathrm{i}[\gamma_{\mu},\gamma_{\nu}] \tag{20.91}$$

$$\equiv\mathrm{i}\gamma_{\mu}\gamma_{\nu}\qquad(\mu\neq\nu).$$

由此得到

$$\boxed{S_{\alpha\beta}=\frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}} \tag{20.92}$$

符号 $S_{\alpha\beta}$ 和 $\sigma_{\alpha\beta}$ 以后也当作分别由矩阵 $S_{\alpha\beta}$ 和 $\sigma_{\alpha\beta}$ 表示的算符来使用. 以后还会看到：$S_{\alpha\beta}$ 是描写粒子内禀角动量（或自旋）的反对称张量算符(6个分量). 准确地说，自旋是这个算符的空间部分 (3 个分量). $S_{\alpha\beta}$ 与 § 6 及 § 7 中的算符 $\boldsymbol{\sigma}$ 和 $\boldsymbol{\alpha}$ 通过下述关系联系起来：

$$S_{10}=\frac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_x \qquad S_{20}=\frac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_y \qquad S_{30}=\frac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_z \tag{20.93a}$$

$$S_{23}=\frac{1}{2}\sigma_x \qquad S_{31}=\frac{1}{2}\sigma_y \qquad S_{12}=\frac{1}{2}\sigma_z. \tag{20.93b}$$

固有洛伦兹群的任一有限变换可看作是一系列相继的无穷小变换的乘积. 所以,取上面确定的无穷小变换矩阵的乘积,就可以得到和参考系作有限变换相对应的 Λ 矩阵. 如果我们按此方式进行,则条件 (20.89b) 和 (90.89c) 将自动地满足,我们就得到两个可能的 Λ 矩阵之一.

特别是,在平面 $x^\alpha x^\beta$ 中作 φ 角的"转动"是这个平面内的一系列无穷小转动矩阵之积,因而描述这种变换的矩阵 $\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varphi)$ 是:

$$\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varphi)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi S_{\alpha\beta}}, \tag{20.94}$$

于是 (参看 §20.3 的第二个注释),如果变换是速度方向沿着 x 轴而大小为 $v=\tanh\varphi$ 的特殊洛伦兹变换,那末考虑到关系式 (20.93a) 和 α_x 的性质,我们就有

$$\Lambda^{xt}(\varphi)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha_x\varphi}=\cosh\frac{1}{2}\varphi-\alpha_x\sinh\frac{1}{2}\varphi. \tag{20.95}$$

更一般地说,设 $\Lambda_{sp}(v)$ 是速度为 $\boldsymbol{v}$ 的特殊洛伦兹变换对应的矩阵,则

$$\Lambda_{sp}(\boldsymbol{v})=\cosh\frac{1}{2}\varphi-(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{u})\sinh\frac{1}{2}\varphi,$$

其中,

$$\boldsymbol{u}\equiv\boldsymbol{v}/v, \qquad \varphi=\tanh^{-1}v.$$

$$b\equiv 1/\sqrt{1-v^2}=\cosh\varphi. \tag{20.96}$$

经过简单的计算,上式变为

$$\Lambda_{sp}(\boldsymbol{v}) = \frac{1}{\sqrt{2(1+b)}}[1+b-(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{v})b]. \qquad (20.97)$$

现在考虑通常意义下的转动. 对绕 Oz 轴的转动，公式 (20.94) 给出:

$$\Lambda^{(xy)}(\varphi) = e^{iS_{12}\varphi} = e^{\frac{1}{2}i\sigma_z\varphi} = \cos\frac{1}{2}\varphi + i\sigma_z\sin\frac{1}{2}\varphi. \qquad (20.98)$$

更一般地，若绕平行于单位矢量 $\boldsymbol{u}$ 的轴旋转 φ 角，则矩阵 $\Lambda_{\boldsymbol{u}}(\varphi)$ 为

$$\Lambda_{\boldsymbol{u}}(\varphi) = \cos\frac{1}{2}\varphi + i\sigma_{\boldsymbol{u}}\sin\frac{1}{2}\varphi, \qquad (20.99)$$

其中

$$\sigma_{\boldsymbol{u}} \equiv (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{u}).$$

现在我们就来讨论狄拉克方程所描写的粒子的自旋. 自旋由内部变量对于空间转动的变换性质所决定. 方程 (20.99) 给出了作转动时内部变量的变换矩阵的普遍表达式. 此式与方程 (20.84) 给出的式子之间的唯一差别是 $\sigma_{\boldsymbol{u}}$ 前面的符号. 通过变换 $\varphi\to-\varphi$，此两式可互相转变. 由此可知这两个矩阵是互逆的. 这种差别来自这样一个事实: 在第 8 章中，我们考虑变量和态转动，同时让坐标轴固定不动；而在这里我们却采用相反的观点. 我们现在看出: 狄拉克波函数在转动中的变换和 $\frac{1}{2}$ **自旋粒子**的波函数的变换一样.

尤其要注意，绕任一轴作 2π 转动都不再回复到单位矩阵，实际上有

$$\Lambda_{\boldsymbol{u}}(2n\pi) = (-)^n I, \qquad (20.100)$$

这是半整数自旋的特征性质. 由此清楚地看出: Λ 符号上的任意性在不破坏它们构成一个群的性质时是不能除去的.

我们以后将狄拉克理论中的波函数称为**旋量**.

13. 空间反射和正时洛伦兹群

一旦决定了参考系作固有洛伦兹变换时旋量的变换规律,则我们只需要知道作反射 s 时旋量的变换规律,就能决定参考系作任一正时变换时旋量的变换规律.[1]

用 Λ_s 代表参考系作反射 s 时所对应的矩阵. 在此情况下,(20.85) 变为

$$\Psi'(t,\boldsymbol{r}) = \Lambda_s\Psi(t,-\boldsymbol{r}). \tag{20.101}$$

条件 (20.89a) 给出:

$$\Lambda_s^{-1}\gamma^0\Lambda_s = \gamma^0 \quad \Lambda_s^{-1}\gamma^k\Lambda_s = -\gamma^k,$$

因此

$$\Lambda_s = c_s\gamma^0.$$

常数 c_s 由 (20.89b) 和 (20.89c) 决定,我们得到:

$$c_s = \pm 1.$$

所以,

$$\Lambda_s = \pm\gamma^0. \tag{20.102}$$

根据上面所说的[1], Λ_s 被确定到只剩下正负号未定的程度.

14. 协变量的构成

从旋量 $\Psi(x)$ 的分量及其伴随 $\bar{\Psi}(x)$ 的分量,我们一共可构造出 16 个线性独立的 x^0, x^1, x^2, x^3 的函数. 它们是 Ψ 和 $\bar{\Psi}$ 的双线性组合. 可将它们分成 5 种具有确定张量特征的场,就是标量 S、矢量 V^μ、两个指标的反对称张量 $T^{[\mu\nu]}$、三个

---

1) 公式 (20.102) 相当于在 §20.11中的最后一个注释中选择 (a)所得到的;如选择 (b),则有

$$\Lambda_s = \pm i\gamma^0.$$

指标的反对称张量（赝矢量）$A^{[\lambda\mu\nu]}$、四个指标的反对称张量(赝标量)P. 所有这些都列在表 20.2 中.

利用旋量Ψ和$\bar{\Psi}$的变换规律[方程 (20.85) 和 (20.88)]，以及矩阵Λ和相应的洛伦兹变换系数 Q_ν^μ 之间的关系式(20.89a)，便可容易地证明上述的张量特征.

我们记得，赝标量的变换规律与标量的变换规律的差别只在于有一个附加因子 $\det|Q_\nu^\mu|$:

$$P(x') = \det|Q_\nu^\mu|P(x).$$

表 20.2 对 Ψ 和 $\bar{\Psi}$ 是双线性的张量

张　　量	分量的数目	属　　性
$S(x) \equiv(\bar{\Psi}\Psi)$	1	标量
$V^\mu(x) \equiv(\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi)$	4	矢量
$T^{(\mu\nu)}(x) \equiv(\bar{\Psi}\gamma^\mu\gamma^\nu\Psi)$ $(\mu\neq\nu)$	6	二阶张量
$A^{(\lambda\mu\nu)}(x) \equiv(\bar{\Psi}\gamma^\lambda\gamma^\mu\gamma^\nu\Psi)(\lambda\neq\mu,\mu\neq\nu,\nu\neq\lambda)$	4	赝矢量
$P(x) \equiv(\bar{\Psi}\gamma^5\Psi)$	1	赝标量

因此，对固有洛伦兹变换而言，赝标量场和标量场的变换是一样的；但在反射 s 中，则差别一个正负号. 类似地，赝矢量和矢量的差别仅表现在有一个附加因子 $\det|Q_\nu^\mu|$.

矢量 $V^\mu(x)$ 已经被解释为流密度 4 矢量，

$$V^\mu(x) \equiv j^\mu(x).$$

对其他的协变量也可作出解释. 比如，若不计常数，$T^{[\mu\nu]}$ 等于张量 $S^{\mu\nu}$，可解释为自旋密度:

$$T^{[\mu\nu]} = -2iS^{\mu\nu}(x) \equiv -2i(\bar{\Psi}S^{\mu\nu}\Psi).$$

15. 形式不变性的第二种表述: 态的变换

在上一小节中，每一变换都被看作是在参考坐标系上的

运算，而物理系统是不改变的．相反地，也可使变换作用到物理系统上，而坐标轴保持不变．我们在第三部分中系统地采用第二种观点（特别参看§13.11的结论部分）．虽然结果是用不同的语言表达的，但两个观点显然是等价的．

为了弄清这种等价性，令(S)是在参考系(R)中用旋量$\Psi(x)$描写的物理系统的状态，(S')是变换$\mathscr{L}$作用到(S)上得到的态，而$(\hat{R})$是$\mathscr{L}$的逆变换作用到(R)上得到的参考系（参看图20.1）：

$$(S')=\mathscr{L}(S),\quad (\hat{R})=\mathscr{L}^{-1}(R).$$

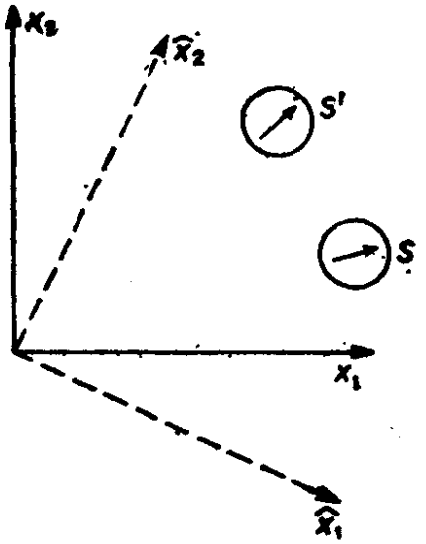


图20.1　用两种方式考察一个洛伦兹变换：参考系作变换$(\hat{x}\to x)$，系统作变换$(S\to S')$.

考虑下面三个旋量：

$\Psi(x)$ 是在参考系(R)中表示(S)的旋量；

$\hat{\Psi}(\hat{x})$ 是在参考系$(\hat{R})$中表示(S)的旋量；

$\Psi'(x)$ 是在参考系(R)中表示(S')的旋量．

显然，$\hat{\Psi}$和Ψ'的幅角有相同的大小时，它们是相等的，

$$\Psi'(x)=\hat{\Psi}(x).\tag{20.103}$$

$\hat{\Psi}$和Ψ之间的对应关系已在§11中建立．由于通过变换$\mathscr{L}$

可从（$\hat{R}$）过渡到（R），利用（20.85），且用 Λ 代表与 $\mathscr{L}$ 相联系的矩阵，则得到

$$\Psi(\xi) = \Lambda\hat{\Psi}(\mathscr{L}^{-1}\xi).$$

所以，

$$\Psi'(x) = \Lambda^{-1}\Psi(\mathscr{L}x). \tag{20.104}$$

和方程(20.85) 相比较，可看出：**态的变换可用参考系的变换算符的逆算符来实现.**

这些结论也可应用到狄拉克粒子在其中运动的电磁场. 这场用（A）来代表，而它经变换 $\mathscr{L}$ 得到的场用（A'）来代表：

$$(A') = \mathscr{L}(A).$$

考虑下面三个（协变）4 矢量：

$A_\mu(x)$ 是在参考系（R）中表示（A）的矢量，

$\hat{A}_\mu(\xi)$ 是在参考系（$\hat{R}$）中表示（A）的矢量，

$A'_\mu(x)$ 是在参考系（R）中表示（A'）的矢量.

我们能够重复上面对旋量所作的证明. 显然得到

$$A'_\mu(x) = \hat{A}_\mu(x). \tag{20.105}$$

但按 (20.81)，有

$$\hat{A}_\mu(\mathscr{L}^{-1}x) = A_\nu(x)Q^\nu_\mu,$$

因此，

$$A'_\mu(x) = A_\nu(\mathscr{L}x)Q^\nu_\mu. \tag{20.106}$$

现假定 $\Psi(x)$ 满足势 $A_\mu(x)$ 中的狄拉克方程：

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) - m]\Psi = 0. \tag{20.107}$$

考虑到等式(20.103)和(20.105)，由狄拉克方程的形式对参考系变换（R）→（$\hat{R}$）的不变性给出：

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA'_\mu) - m]\Psi' = 0. \tag{20.108}$$

所以，形式的不变性可用下面方式表述：**如果 $\Psi(x)$ 满足势 $A_\mu(x)$ 中的狄拉克方程，则通过变换 $\mathscr{L}$ 得到的态 $\Psi'(x)$ 满足变换后的势 $A'_\mu(x)$ 中的狄拉克方程.**

16. 运动规律的不变性

一般地说，方程(20.107)和(20.108)是不同的．但当外势(A)对变换$\mathscr{L}$不变时，即

$$A'_\mu(x) = A_\mu(x),$$

则它们是全同的．在这情况下，Ψ和Ψ'满足**同一个**波动方程．因此，**动力学态的运动规律对于能使外势保持不变的任一变换$\mathscr{L}$来说，都是不变的．**

在上述的全部论述中，$\mathscr{L}$是任意的正时洛伦兹变换．然而，已述的全部讨论都可对空间-时间**平移**重复进行[参看§20.11中的头一个注释]．

当$\mathscr{L}$是描述空间或时间平移时，上面提到的两个性质(方程形式的不变性和运动规律的不变性)都是成立的．

17. 变换算符　动量　角动量　宇称

为了按第十五章建立的普遍方案来把这种分析继续下去，我们把变换规律(20.104)写成

$$\Psi' = T\Psi, \tag{20.109}$$

其中，T是一个合适的线性算符．于是，狄拉克方程对变换的不变性可用下面的算符关系式来表述：

$$T\mathscr{D}(A)T^{-1} = \mathscr{D}(A'), \tag{20.110}$$

其中，$\mathscr{D}(A)$和$\mathscr{D}(A')$分别代表在势A和A'中的狄拉克算符：

$$\mathscr{D}(A) \equiv \gamma^\mu(\mathrm{i}\partial_\mu - eA_\mu). \tag{20.111}$$

那么，运动规律对变换$\mathscr{L}$的不变性的条件就由如下的对易关系表述：

$$[T,\mathscr{D}(A)] = 0. \tag{20.112}$$

算符T是容易构造出来的，它是一个仅作用到自旋变量

上的算符 $T^{(s)}$ 与另一个仅作用到轨道变量上的算符 $T^{(0)}$ 的乘积:

$$T = T^{(s)} \otimes T^{(0)}.$$

比较 (20.109) 和 (20.104),看出:

$$T^{(s)} = \Lambda^{-1}, \tag{20.113}$$

此处,Λ 代表§11定义的 Λ 矩阵所表示的算符.

让我们就无穷小的洛伦兹平移、"转动"以及反射 s 等情况,导出 T 的显示形式.

对平移,$T^{(s)} = 1$. 引入微分算符

$$\boxed{p_\mu \equiv i\partial_\mu} \tag{20.114}$$

p_μ 代表**能量-动量** 4 **矢量**(更严格讲,是能量-动量 4 矢量的协变分量). 对于沿着 x^α 轴方向作无穷小平移 ε,我们得到:

$$T = 1 + i\varepsilon p_\alpha.$$

现在考虑在平面 $x^\alpha x^\beta$ 作 ε 角度的"无穷小转动". 在这种情形下,我们有

$$\begin{aligned}(\mathscr{L}x)^\mu &= x^\mu - \varepsilon Z^{(\alpha\beta)\mu}_{\quad\nu} x^\nu \\ &= x^\mu - \varepsilon(\delta^\mu_\alpha x_\beta - \delta^\mu_\beta x_\alpha).\end{aligned}$$

如果 $\phi_s(x)$ 是旋量 $\phi(x)$ 的一个特定分量,那末,只保留到 ε 的一次项,就得出

$$\phi_s(\mathscr{L}x) \simeq \phi_s(x) + \varepsilon\left(x_\alpha \frac{\partial \phi_s}{\partial x^\beta} - x_\beta \frac{\partial \phi_s}{\partial x^\alpha}\right),$$

如果我们引入微分算符

$$L_{\alpha\beta} \equiv x_\alpha p_\beta - x_\beta p_\alpha, \tag{20.115}$$

则上面的方程变成下述形式:

$$\phi_s(\mathscr{L}x) \simeq (1 - i\varepsilon L_{\alpha\beta})\phi_s(x).$$

另一方面,从 (20.90) 和 (20.113) 得到

$$T^{(s)} \simeq (1 - i\varepsilon S_{\alpha\beta}),$$

其中，$S_{\alpha\beta}$ 由方程(20.92)确定。最后，在“无穷小转动”的情况下，给出旋量变换规律的公式 (20.109) 变为：

$$\begin{aligned}\Psi'(x) &\simeq (1 - i\varepsilon S_{\alpha\beta})(1 - i\varepsilon L_{\alpha\beta})\Psi(x)\\ &\simeq (1 - i\varepsilon J_{\alpha\beta})\Psi(x),\end{aligned}$$

其中

$$\boxed{J_{\alpha\beta} \equiv L_{\alpha\beta} + S_{\alpha\beta} \equiv x_\alpha p_\beta - x_\beta p_\alpha + \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}} \quad (20.116)$$

$J_{\alpha\beta}$ 的三个空间分量 J_{23}，J_{31} 和 J_{12} 分别与绕 Ox，Oy 和 Oz 轴的无穷小转动相联系，它们是总角动量 $\boldsymbol{J}$ 的分量，而且有

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$$

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}, \qquad \boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}. \quad (20.117)$$

$\boldsymbol{L}$ 的分量仅作用到轨道变量上：$\boldsymbol{L}$ 是轨道角动量。$\boldsymbol{S}$ 的分量仅作用到内部变量上：$\boldsymbol{S}$ 是粒子的自旋矢量。

读者可验证：$\boldsymbol{J}$，$\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 满足角动量特有的对易关系，而且 $\boldsymbol{S}$ 具有如下性质：

$$\boldsymbol{S}^2 = \frac{3}{4}$$

这是 $\frac{1}{2}$ 自旋粒子的特征。

与空间反射 [1] 相联系的算符称为宇称算符，并用 P 代表。用 $P^{(0)}$ 代表轨道宇称算符：

$$P^{(0)}\Psi(t,\boldsymbol{r}) = \Psi(t,-\boldsymbol{r}).$$

根据 (20.113)，我们可以在 P 的两个表示式（差别一个符号）当中作出选择。这些表示式很容易从 § 13 的讨论中[参看关系式 (20.102)]得到。我们采用最方便的一种形式：

$$\boxed{P = \gamma^0 P^{(0)}} \quad (20.118)$$

1)参看本章末的证明附注.

注意 P 是厄密的，而且 $P^2 = 1$.

18. 守恒定律和运动常数

如果变换与时间有关，则相应的算符 T 将明显地把 Ψ 的时间依赖表现出来. 在时间平移和特殊洛伦兹变换中，这种情况尤其突出.

另一方面，对于任一与时间无关的变换，定义 T 的作用并不依赖于受 T 作用的态矢量的运动规律. 因此，T 可定义为作用在态矢量和系统的可观测量上的算符（正如第十五章第 II 节所做的）. 那么，态的运动规律的不变性就可以表达成守恒定律的形式.

例如，如果 $\mathscr{L}$ 是空间变换，T 是反射算符、无穷小平移算符和无穷小转动算符的某种函数，即 P, $\boldsymbol{J}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的某种函数；所以，T 与 γ^0 对易. 又因

$$\gamma^0\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} - H_D\right) \equiv \mathscr{D}(A) - m,$$

在此情况下，对易关系 (20.112) 与下式等价：

$$[T, H_D] = 0.$$

这条件与 § 15.12 所讨论的相同，而且在那里已说到的关于哈密顿量的对称性与守恒定律之间的联系可应用到这里来.

因此，如果 $A_\mu(x)$ 对平移是不变的，就得到对易关系

$$[\boldsymbol{p}, H_D] = 0$$

和动量守恒. 如果 $A_\mu(x)$ 是球对称的，就有

$$[\boldsymbol{J}, H_D] = 0$$

和总角动量守恒. 如果 $A_\mu(x)$ 对原点的反射是不变的，就有

$$[P, H_D] = 0,$$

而且宇称是守恒的.

19. 时间反演和电荷共轭

在这一小节，我们证明狄拉克方程的形式对于两个反线性运算（即时间反演和电荷共轭）是不变的．为此，引入态矢量空间的一个反幺正算符 $K^{1)}$ 是方便的，而 K 具有某些特别简明的普遍性质．

反幺正算符 K．按定义，K 是反幺正算符，它使 $\boldsymbol{p}$ 变换成 $-\boldsymbol{p}$，而使 $\boldsymbol{r}$ 和 γ^μ 保持不变，即

$$K\boldsymbol{r}K^\dagger = \boldsymbol{r}, \quad K\boldsymbol{p}K^\dagger = -\boldsymbol{p}. \tag{20.119}$$

$$K\gamma^\mu K^\dagger = \gamma^\mu \quad (\mu = 0,1,2,3). \tag{20.120}$$

可以证明，这样的算符是存在的，被确定到相因子尚未固定，而且有下面的性质：

$$K^2 = -1. \tag{20.121}$$

如果 K 是存在的，则从关系式(20.119—120)和态矢量空间对基本算符 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{p}$ 和 γ^μ 是不可约的这一事实出发，就可以确定 K（相因子未定）．现在我们选一特定的表象（例如狄拉克表象），那末，各个 γ^μ 算符由矩阵 γ^μ_D 表述．用 B_D 代表“B 矩阵”（它使 γ^μ_D 变换为相应的复数共轭）所描述的算符．在这里，B_D 被考虑为总空间的（么正）算符，而不只是自旋空间的算符．它是一个与 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{p}$ 对易的么正算符．令 K_D 是与这个表象相联系的复数共轭算符（§ 15.5 的定义）．关系式(20.76)给出

$$\gamma^\mu = B_D(K_D\gamma^\mu K_D^\dagger)B_D^\dagger.$$

所以，反幺正算符

$$K \equiv B_D K_D$$

满足关系式(20.120)．由于 B_D 与 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{p}$ 对易，而且从 K_D 的定义有

$$K_D\boldsymbol{r}K_D = \boldsymbol{r}, \quad K_D\boldsymbol{p}K_D = -\boldsymbol{p},$$

1) K 不是时间反演算符．以后用 K_T 代表时间反演算符．

故K也满足(20.119)．又因为$K_D=K_D^{\dagger}$,所以(20.77)给出

$$B_D(K_DB_DK_D)\equiv K^2=-1.$$

这正是(20.121)．显然,如果用任意相因子乘K,则这些仍是正确的．证毕．

电荷共轭．用K左乘方程(20.107)两边,而且利用K是反线性的,又与$\gamma^\mu,\partial_\mu,A_\mu(x)$对易的事实,可得

$$[\gamma^\mu(-i\partial_\mu-eA_\mu(x))-m]K\Psi(x)=0. \quad (20.122)$$

所以,$K\Psi$满足一个波动方程,它和狄拉克方程的差别仅仅在于$(-i)$代换了$(+i)$．用γ^5乘此方程两边．由于γ^5与γ^μ反对易,但与方程式左边括号内的所有其他算符对易,我们得到:

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu+eA_\mu(x))-m]\gamma^5K\Psi(x)=0. \quad (20.123)$$

令

$$\boxed{K_C\equiv\gamma^5K} \quad (20.124)$$

$$\Psi^C(x)\equiv K_C\Psi(x). \quad (20.125)$$

方程(20.123)变为

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu+eA_\mu(x))-m]\Psi^C(x)=0. \quad (20.126)$$

$\Psi^C(x)$所满足的这个方程与$\Psi(x)$所满足的方程仅仅差别一电荷符号．因此，**如果$\Psi(x)$描写质量为m，电荷为e的狄拉克粒子在势$A_\mu(x)$中的运动，则$\Psi^C(x)$描写同样质量而电荷相反$(-e)$的狄拉克粒子在同样的势$A_\mu(x)$中的运动．**

我们称旋量$\Psi(x)$和$\Psi^C(x)$是彼此电荷共轭的,而且称变换K_C为**电荷共轭变换．**

从K和γ^5的性质导出:

$$K_C^2=1. \quad (20.127)$$

因此,$\Psi(x)$和$\Psi^C(x)$之间的对应是互逆的．容易证明电荷共轭与平移和正时洛伦兹变换对易．更准确地讲，如果$L\Psi$是

Ψ 在这些变换之一作用下的变换，则在一个平移或一个固有洛伦兹变换情形下，它的电荷共轭是 $L\Psi^C$；而在反射情形下是 $-L\Psi^C$（参看问题 20.5）.

时间反演. 狄拉克方程的时间反演不变性可直接证明，但从电荷共轭的上述结果出发也是简便的.

一个给定的势 $A_\mu(t,\boldsymbol{r})$ 由某些运动着的带电粒子产生. 时间反演势 $A'_\mu(t,\boldsymbol{r})$ 由这些电荷的逆运动得到. 在这种变换中，电流和磁场改变符号，但电荷和电场保持不变，即

$$\mathscr{H}'(t,\boldsymbol{r}) = -\mathscr{H}(-t,\boldsymbol{r}), \quad \mathscr{E}'(t,\boldsymbol{r}) = \mathscr{E}(-t,\boldsymbol{r}).$$

由此看出，A_μ "象一个赝矢量那样变换":

$$\boldsymbol{A}'(t,\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{A}(-t,\boldsymbol{r}) \quad A'_0(t,\boldsymbol{r}) = A_0(-t,\boldsymbol{r}).$$

如果在方程 (20.126) 中，我们使 $t \to -t$，则得到

$$[-\gamma^0(\mathrm{i}\partial_0 - eA'_0(t,\boldsymbol{r}))$$

$$+ \sum_k \gamma^k(\mathrm{i}\partial_k - eA'_k(t,\boldsymbol{r})) - m]\Psi^C(-t,\boldsymbol{r}) = 0.$$

上式两边用 $\gamma^5\gamma^0$ 相乘，由于 $\gamma^5\gamma^0$ 与 γ^0 反对易但与 γ^k 对易，故得

$$[\gamma^\mu(\mathrm{i}\partial_\mu - eA'_\mu(t,\boldsymbol{r})) - m]\Psi'(t,\boldsymbol{r}) = 0, \quad (20.128)$$

其中，

$$\Psi'(t,\boldsymbol{r}) \equiv \gamma^5\gamma^0\Psi^C(-t,\boldsymbol{r})$$

$$= \gamma^0 K\Psi(-t,\boldsymbol{r}). \quad (20.129)$$

我们引入(反么正的)时间反演算符:

$$\boxed{K_T \equiv \gamma^0 K} \quad (20.130)$$

按定义，$\Psi'(t,\boldsymbol{r})$ 是 $\Psi(-t,\boldsymbol{r})$ 的时间反演变换，它满足方程 (20.128). 因此，如果 Ψ 满足势 A_μ 中的狄拉克方程，则它的时间反演变换 Ψ' 满足势 A'_μ（用时间反演从 A_μ 得到）中的狄拉克方程.

特别是，如果 A_μ 对时间反演不变（例如，粒子在恒定电场：$\boldsymbol{A}=0$ 和 $\frac{\partial \boldsymbol{A}_0}{\partial t}$ 中运动），则 Ψ 和 Ψ' 都遵从同一个狄拉克方程。

由 γ^0 和 K 的性质得出：

$$K_T^2=-1. \tag{20.131}$$

我们已经在非相对论情况下得到过[方程（15.88）]这个结果（半整数角动量系统的特征）。有关的推论（特别是克喇末简并）在这里也是适用的。

用 ρ 和 σ（参看 §10 末尾）表达 B_D，我们容易从(20.124)和(20.130)的定义出发得到等价的关系：

$$K_C=\mathrm{i}\rho_2\sigma_y K_D$$

$$K_T=\mathrm{i}\sigma_y K_D.$$

在狄拉克表象中对算符 K_C 和 K_T 作运算时，这些关系是有用的。

20. 规范不变性

为了完整起见，我们在此提一提规范不变性（参看§21.20）。

改变电磁势的规范意味着分量 $A_\mu(x)$ 用

$$A'_\mu(x)\equiv A_\mu(x)-\partial_\mu G(x), \tag{20.132}$$

替换。其中，$G(x)$ 是空间-时间坐标的一个任意函数。由此得到

$$A'_0=A_0-\frac{\partial G}{\partial t},\qquad \boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\nabla G.$$

电场和磁场对这样的变换是不变的。

如果 $\Psi(x)$ 是势 A_μ 中的狄拉克方程的解，则

$$\Psi'(x)\equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}eG(x)}\Psi(x), \tag{20.133}$$

显然是势 A'_μ 中的狄拉克方程的解。这就是狄拉克方程的规范不变性。

IV. 算符的解释和简单解

21. 狄拉克方程和对应原理

当电磁势不为零时，狄拉克方程的解满足一个不同于克莱因-戈登方程但却符合对应原理要求的二阶方程。

为了得出此方程，我们可以从协变形式(20.50)出发，算符$(-i\gamma^\lambda D_\lambda - m)$从左侧作用于该式，就给出：

$$[\gamma^\lambda\gamma^\mu D_\lambda D_\mu + m^2]\Psi = 0. \tag{20.134}$$

由 γ^μ 算符的代数性质，得到

$$\gamma^\lambda\gamma^\mu \equiv g^{\lambda\mu} + \frac{1}{2}[\gamma^\lambda,\gamma^\mu]. \tag{20.135}$$

更换哑算，我们有

$$[\gamma^\lambda,\gamma^\mu]D_\lambda D_\mu \equiv -[\gamma^\lambda,\gamma^\mu]D_\mu D_\lambda = \frac{1}{2}[\gamma^\lambda,\gamma^\mu][D_\lambda,D_\mu]. \tag{20.136}$$

从算符 D_μ 的定义[方程(20.10)]，得到：

$$[D_\lambda,D_\mu] \equiv ie[\partial_\lambda,A_\mu] + ie[A_\lambda,\partial_\mu] \tag{20.137}$$
$$\equiv ie\left(\frac{\partial A_\mu}{\partial x^\lambda} - \frac{\partial A_\lambda}{\partial x^\mu}\right) \equiv ieF_{\lambda\mu}.$$

方程(20.134-137)给出

$$\gamma^\lambda\gamma^\mu D_\lambda D_\mu \equiv D_\mu D^\mu + eS^{\lambda\mu}F_{\lambda\mu}, \tag{20.138}$$

其中，$S^{\lambda\mu}$ 描述粒子的自旋[定义(20.92)]。因而方程(20.134)可写成

$$[D_\mu D^\mu + eS^{\lambda\mu}F_{\lambda\mu} + m^2]\Psi = 0. \tag{20.139}$$

比较(20.139)和克莱因-戈登方程(20.30′)，我们看出：两者的差别在于下面的项：

$$eS^{\lambda\mu}F_{\lambda\mu}, \tag{20.140}$$

这是粒子的自旋与电磁场的耦合项，这一项没有经典的相似，而且当经典近似适用时，其贡献可忽略. 因此，狄拉克波包的运动和克莱因-戈登波包的运动是相同的.

22. 狄拉克粒子的动力学变量

我们经常对狄拉克理论中的一些动力学变量给予物理解释. 现在我们以更系统的方式来考虑这一问题，而且特别指明量子理论中和§4中的各种经典量相对应的那些变量.

在这一讨论中，理论的相对论不变性不起重大的作用. 我们采用和非相对论量子力学相同的观点：系统由某些动力学变量决定，这些变量遵从一种含义明确的代数学，而狄拉克方程[例如，以狄拉克形式表述的方程(20.36)和(20.44)]描写薛定谔"表象"中动力学态的演化.

所以，往后就把时间当作一个简单的参量，而空间坐标则属于系统的动力学变量. 基本变量是 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 以及内部变量 α 和 β. 整个表象理论都可不加改变地应用到这里. 特别是，在狄拉克表象中，态矢量 $|\Psi\rangle, |\Phi\rangle\cdots$ 由坐标 x, y, z 的4分量波函数 $\Psi(\boldsymbol{r}), \Phi(\boldsymbol{r})\cdots\cdots$ 来表述. 在这表象中，标量积 $\langle\Phi|\Psi\rangle$ 定义为既对描述内部自由度的指标的4个可能值求和，又对坐标 x, y, z 积分：

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \sum_{s=1}^{4}\int \varphi_s^*(\boldsymbol{r})\psi_s(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

标量积的这一定义与§6中的位置几率密度的定义[公式(20.35)]一致. 更一般而言，我们在这里将不加改变地采用本书第一部分陈述的关于理论的统计解释. 特别是，算符 Q 对系统状态的平均值由下式给出：

$$\langle Q\rangle = \langle u|Q|u\rangle,$$

其中，$|u\rangle$是描述状态的归一化刃矢.

理论中的不作用于内部自由度的可观测量有显而易见的解释. 具体说，我们有:

$\boldsymbol{r}$ 是位置矢量，

$\boldsymbol{p}$ 是拉格朗日正则动量，在本书中简称为动量，

$\boldsymbol{\pi} \equiv \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$，是力学动量.

在 $\boldsymbol{r}$ 的函数中有一个算符

$$\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0),$$

它是到本征值 $\boldsymbol{r}_0$ 的子空间上的投影算符，它表示在点 $\boldsymbol{r}_0$ 处的位置几率密度.

在依赖于内部自由度的那些可观测量中，我们定义: [1)]

能量:

$$H \equiv e\varphi + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi} + \beta m; \tag{20.141}$$

相对论质量:

$$M \equiv H - e\varphi \equiv \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi} + \beta m; \tag{20.142}$$

$\boldsymbol{r}$ 处的流密度:

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}_0) \equiv \boldsymbol{\alpha}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0); \tag{20.143}$$

总角动量:

$$\boldsymbol{J} \equiv (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}) + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}; \tag{20.144}$$

自旋:

$$\boldsymbol{S} \equiv \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}; \tag{20.145}$$

宇称:

$$P \equiv \beta P^{(0)}. \tag{20.146}$$

H和M的定义是基于和经典力学的对应；$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)$的定义是

1) 注意，$\boldsymbol{p}$ 与规范的选择有关；只有总系统(粒子+电磁场)的动量与规范选择无关. 同样的论断可应用到能量H和总角动量 $\boldsymbol{J}$ 上(参看§21.23).

从连续性方程引出的；J,S 的定义与作转动时态的变换有关，p 的定义与作反射时态的变换有关.

最后，对应原理导致把 α 解释为粒子的速度. 这个解释也由流的表达式所指出. 为了确证这一点，我们将经典方程(20.18)，(20.19)，(20.21) 与相应的量子方程作一比较. 为此，我们显然必须过渡到海森伯"表象".

在海森伯表象中，变量 r 和 π 的海森伯方程写成:

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}[r,H]$$

$$\frac{\mathrm{d}\pi}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}[\pi,H] + \frac{\partial\pi}{\partial t}.$$

将前面给出的 H 和 π 的表示式代入上式的右边，并利用算符 r，p，α 和 β 的对易或反对易关系，经过相当繁琐但却不难的计算后，可得 (问题 20.6):

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \alpha \tag{20.147}$$

$$\frac{\mathrm{d}\pi}{\mathrm{d}t} = c(\mathscr{E} + \alpha \times \mathscr{H}). \tag{20.148}$$

从(20.142)和 α 的性质得到恒等式

$$\pi = \frac{1}{2}(M\alpha + \alpha M). \tag{20.149}$$

如果将 α 考虑为经典速度 v，则在海森伯表象中，动力学变量的方程 (20.147—149) 分别与经典动力学变量的方程 (20.18)，(20.21) 和 (20.19) 恒同.

注意，速度 α 的各分量是不对易的，而且每一分量共有两个本征值 $+c$ 和 $-c$ (在现在所使用的单位中就是 $+1$ 和 -1). 在这里，我们没有遇到原则困难，但是要指出，现象的经典图象不能过于认真看待. 在 § 37 中我们再回来讨论这

个问题.

23. 自由电子　平面波

在这一大节的其余部分,我们来考查狄拉克方程的解,首先是无外场的情形,然后是静中心势的情形. 解狄拉克方程和求哈密顿量 H_D 的本征解是一回事. 除非另有说明,否则计算是在狄拉克表象中进行,而且我们经常使用 § 7 引入的算符 ρ_1, ρ_2, ρ_3 和 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$.

首先假定外场为零. 此时,哈密顿量 H_D 与动量的三个分量对易. 因此,我们希望找到对应于动量 $\boldsymbol{p}$ 完全确定的 H_D 的本征解. 这样的解是平面波,即如下形式的函数:

$$u(\boldsymbol{p})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}},$$

其中,$u(\boldsymbol{p})$ 是与 $\boldsymbol{r}$ 无关的 4 分量旋量. 它由本征值方程

$$Hu(\boldsymbol{p}) = Eu(\boldsymbol{p}), \tag{20.150}$$

确定;这里的 H 是 $\mathscr{E}^{(3)}$ 空间的算符:

$$H \equiv \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta m \equiv \rho_1(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) + \rho_3 m. \tag{20.151}$$

简单的计算给出

$$H^2 = p^2 + m^2.$$

所以,H 的可能本征值只有两个 $\pm\sqrt{p^2+m^2}$. 即

$$E = \varepsilon E_p \quad (\varepsilon = \pm 1)$$

$$E_p = \sqrt{p^2+m^2}. \tag{20.152}$$

容易证明(例如,利用 ρ_2 与 H 是反对易的事实),这两个本征值是双重简并的.

自旋在 $\boldsymbol{p}$ 方向的分量 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}/2p$ 与 H 对易. 这一点可从表达式(20.151)的后一式看出(自旋的其它分量与 H 不对易). 因此,应该寻求 H 和 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}/2p$ 的共同本征解. 我们得到下面 4 对本征值:

$$\left(+E_p,+\frac{1}{2}\right)\quad\left(+E_p,-\frac{1}{2}\right)$$
$$\left(-E_p,+\frac{1}{2}\right)\quad\left(-E_p,-\frac{1}{2}\right).$$

其中每一对都对应一个本征态．相应的本征旋量容易由两个本征值方程求出．求这旋量的另一种方法将在下一小节中介绍．

当 $\boldsymbol{p}$ 方向与 z 轴重合时，情况是特别简单的，4 个本征旋量的各分量(归一化的)列在表 20.3 中．我们记住，在狄拉克表象中，β 和 σ_z 由对角矩阵表达．

表 20.3　在狄拉克表象中，动量为 $\boldsymbol{p}\equiv(0,0,p)$ 的平面波对应的旋量分量($E_p=\sqrt{m^2+\boldsymbol{p}^2}$).

能量 $E=$		正能量 $+E_p$		负能量 $-E_p$	
自旋 $\sigma\cdot\boldsymbol{p}/2p\equiv\frac{1}{2}\sigma_z$		$\curvearrowleft$ $+\frac{1}{2}$	$\curvearrowright$ $-\frac{1}{2}$	$\curvearrowleft$ $+\frac{1}{2}$	$\curvearrowright$ $-\frac{1}{2}$
$\left(\frac{2E_p}{E_p+m}\right)^{1/2}\times$	$u_1=$	1	0	$-\frac{p}{E_p+m}$	0
	$u_2=$	0	1	0	$\frac{p}{E_p+m}$
	$u_3=$	$\frac{p}{E_p+m}$	0	1	0
	$u_4=$	0	$-\frac{p}{E_p+m}$	0	1

四个旋量都已归一化：$u^\dagger u=1$.

24. 用洛伦兹变换得出平面波的结构

当 $A_\mu=0$ 时，狄拉克方程的某一解的任一洛伦兹变换还是狄拉克方程的另一解．特别是，动量为 $\boldsymbol{p}$ 的平面波能用洛伦兹变换从动量为零的平面波得到．现在我们叙述以这种考虑为基础的一种方法，由此构造出上一小节的旋量 $u(\boldsymbol{p})$.

对于零动量，方程 (20.150) 变为

$$\beta m u(0) = E u(0).$$

两个可能的本征值是 $+m$ 和 $-m$. 本征值 $\varepsilon m(\varepsilon = \pm 1)$ 对应的旋量是 $u^{(\varepsilon)}(0)$，它是算符 β 的本征矢量. 假设这矢量是归一化的，而且自旋方向以任意的方式固定. 因此，$u^{(\varepsilon)}(0)$ 是确定的 (不包括相因子).

平面波

$$\Psi_0^{(\varepsilon)} = u^{(\varepsilon)}(0)\, e^{-i\varepsilon m t}$$

是狄拉克方程的一个解，它对应的动量为零；而能量为 εm，即对应于能量-动量 4 矢量 $(\varepsilon m, 0)$.

我们在一个新参考系中来考虑上面这个解，而新参考系相对于上一个旧参考系的速度为 $\boldsymbol{v} = -\boldsymbol{p}/\varepsilon\sqrt{m^2 + p^2} = -\boldsymbol{p}/\varepsilon E_p$. 在这新参考系中粒子的能量-动量为

$$p^\mu \equiv (\varepsilon E_p, \boldsymbol{p}). \tag{20.153}$$

于是，这个解由平面波

$$\begin{aligned}\Psi_p^{(\varepsilon)} &= \Lambda_{sp}(\boldsymbol{v}) u^{(\varepsilon)}(0) \exp(-ip^\mu x_\mu) \\ &= [\Lambda_{sp}(\boldsymbol{v}) u^{(\varepsilon)}(0)] \exp[-i(\varepsilon E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})].\end{aligned}$$

来表述. 所以，括号中的项正比于我们要找的旋量 $u(\boldsymbol{p})$ 中的一个，以后用 $u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p})$ 代表. 它的模方是相应的流 4 矢量的时间分量. 它可以从 $u^{(\varepsilon)}(0)$ 相应的流 4 矢量用洛伦兹变换得到，就等于

$$b \equiv (1 - v^2)^{-\frac{1}{2}} = E_p/m.$$

因此，我们采用如下定义：

$$u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p}) \equiv b^{-\frac{1}{2}} \Lambda_{sp}(\boldsymbol{v}) u^{(\varepsilon)}(0).$$

把 (20.97) 式代入上面的定义中，并令 $\boldsymbol{v}$、b 取上面给出的值，就得到

$$u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p}) = [2E_p(m + E_p)]^{-\frac{1}{2}} [m + E_p + \varepsilon \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}] u^{(\varepsilon)}(0), \tag{20.154}$$

这就是所要求的表达式。具体说，如果 $u^{(s)}(0)$ 是 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})$ 的本征态，则 $u^{(s)}(\boldsymbol{p})$ 也是。因此，在这里，它就是上一小节定义的旋量当中的一个。当 $\boldsymbol{p}$ 的方向沿着 z 轴时，就得到表 3 的那些结果。

(20.154) 式也可以写成下面的形式：

$$u^{(s)}(\boldsymbol{p})=[2E_p(m+E_p)]^{-\frac{1}{2}}[m+\gamma^\mu p_\mu]u^{(s)}(0),\quad(20.155)$$

其中，p_μ 代表方程 (20.153) 所定义的能量-动量 4 矢量。

25. 中心势

现在考虑狄拉克粒子在静中心势中的本征解。这时狄拉克哈密顿量是

$$H_D\equiv\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+\beta m+V(r).\qquad(20.156)$$

它对转动和反射是不变的：

$$[H_D,\boldsymbol{J}]=0,\quad[H_D,P]=0.$$

因此，我们寻找具有完全确定的角动量和宇称的本征解。

把本征解 Ψ 写成下面的形式更为方便：

$$\Psi=\begin{pmatrix}\Phi\\ \chi\end{pmatrix},\qquad(20.157)$$

其中，

$$\Phi\equiv\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix},\qquad\chi\equiv\begin{pmatrix}\phi_3\\ \phi_4\end{pmatrix}.\qquad(20.158)$$

将 Ψ 投影到 $\beta=+1$ 和 $\beta=-1$ 的子空间上，我们得到

$$\frac{1}{2}(1+\beta)\Psi=\begin{pmatrix}\Phi\\ 0\end{pmatrix},\qquad\frac{1}{2}(1-\beta)\Psi=\begin{pmatrix}0\\ \chi\end{pmatrix}.\qquad(20.159)$$

Φ 和 χ 是 r 和自旋的 z 轴分量 μ 的函数。也可以把它们看作是径向变量 r 和“角变量”(θ,φ,μ) 的函数。这样一来，它们完全类似于泡利理论中的波函数。

令 Ψ 是 J^2，J_z 和 P 的共同本征函数。角动量的量子数用

(JM)代表．为了方便，我们用量子数 $\tilde{\omega}$ 来标明宇称：

$$\tilde{\omega}=\begin{cases}+1,\text{对于宇称为}(-)^{J+\frac{1}{2}}\text{的态},\\ -1,\text{对于宇称为}(-)^{J-\frac{1}{2}}\text{的态}.\end{cases}\tag{20.160}$$

于是，根据假设，有

$$\boldsymbol{J}^2\begin{pmatrix}\Phi\\ \chi\end{pmatrix}=J(J+1)\begin{pmatrix}\Phi\\ \chi\end{pmatrix},\qquad J_z\begin{pmatrix}\Phi\\ \chi\end{pmatrix}=M\begin{pmatrix}\Phi\\ \chi\end{pmatrix}$$

$$P^{(0)}\begin{pmatrix}\Phi\\ \chi\end{pmatrix}=(-)^{J+\frac{1}{2}\tilde{\omega}}\begin{pmatrix}\Phi\\ -\chi\end{pmatrix}.\tag{20.161}$$

令 $\mathscr{Y}^M_{LJ}(\theta,\varphi,\mu)$ 是总角动量为 (JM) 的本征函数，它由 L 阶球谐函数和 $\frac{1}{2}$ 自旋的波函数合成．球谐函数的宇称为 $(-)^L$ 另外，按角动量合成规则，L 只能取两个值：

$$L=l\equiv J+\frac{1}{2}\tilde{\omega}\qquad L=l'\equiv J-\frac{1}{2}\tilde{\omega},\tag{20.162}$$

而且 $\mathscr{Y}^M_{lJ}$ 和 $\mathscr{Y}^M_{l'J}$ 这两个函数的宇称是相反的．前者是 $(-)^{J+\frac{1}{2}\tilde{\omega}}$，后者是 $(-)^{J-\frac{1}{2}\tilde{\omega}}$．依照方程(20.161)，$\Phi$ 是 (r,θ,φ,μ) 的函数，其角动量为 (JM)，宇称为 $(-)^{J+\frac{1}{2}\tilde{\omega}}$．因此，它必须等于 r 的函数与 $\mathscr{Y}^M_{lJ}$ 的乘积．类似的论证指出，χ 是 r 的函数与 $\mathscr{Y}^M_{l'J}$ 的乘积．

总之，如果 $\Psi^M_{\tilde{\omega}J}$ 是表述角动量为 (JM)，宇称为 $(-)^{J+\frac{1}{2}\tilde{\omega}}$ 的态，则它可写成形式

$$\Psi^M_{\tilde{\omega}J}=\frac{1}{r}\begin{pmatrix}F\,\mathscr{Y}^M_{lJ}\\ \mathrm{i}G\,\mathscr{Y}^M_{l'J}\end{pmatrix},\tag{20.163}$$

其中，l 和 l' 由方程(20.162)给定，而 F 和 G 是 r 的任意函数．

现在来考虑本征值问题：

$$H_D\Psi^M_{\tilde{\omega}J}=E\Psi^M_{\tilde{\omega}J}.\tag{20.164}$$

为了解这方程，我们在算符 H_D 中将“角变量”与径向变量分

离．这种处理方法完全类似于第九章中所作的．

引入径向动量 P_r 和“径向速度” α_r：

$$p_r \equiv -\mathrm{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r \tag{20.165}$$

$$\alpha_r \equiv \boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{r}} = \rho_1(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})/r. \tag{20.166}$$

由恒等式 (13.83)，得到

$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$$
$$= rp_r + \mathrm{i}(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}).$$

用 α_r/r 左乘上式，并利用显然有的性质 $\alpha_r^2 = 1$，就得到恒等式：

$$\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} \equiv \alpha_r\left(p_r + \frac{\mathrm{i}}{r}(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})\right). \tag{20.167}$$

我们来考查算符 $1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$．容易证明：

$$1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L} = \boldsymbol{J}^2 + \frac{1}{4} - \boldsymbol{L}^2.$$

再由 (20.163)，容易看出：$\boldsymbol{L}^2$ 对 $\Psi^M_{\tilde{\omega}J}$ 的作用和算符

$$\left(J+\frac{1}{2}\tilde{\omega}\beta\right)\left(J+\frac{1}{2}\tilde{\omega}\beta+1\right) \equiv J(J+1) +$$

$$\frac{1}{4} + \frac{1}{2}\tilde{\omega}\beta(2J+1).$$

的作用等价．因此，

$$(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})\Psi^M_{\tilde{\omega}J} = -\frac{1}{2}\tilde{\omega}(2J+1)\beta\Psi^M_{\tilde{\omega}J}. \tag{20.168}$$

把关系式(20.167)和(20.168)代入方程(20.164)中，得到

$$\left[\alpha_r\left(p_r - \frac{\mathrm{i}\tilde{\omega}\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\beta\right) + m\beta + V(r)\right]\Psi^M_{\tilde{\omega}J} = E\Psi^M_{\tilde{\omega}J}.$$

这个本征函数用表达式(20.163)代替，算符 p_r 和 α_r 用它

们的定义(20.165)和(20.166)代替，再利用下面的恒等式(参看问题 20.8)

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\mathscr{Y}^{M}_{lJ}=-\mathscr{Y}^{M}_{l'J} \tag{20.169}$$
$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\mathscr{Y}^{M}_{l'J}=-\mathscr{Y}^{M}_{lJ},$$

这个方程就变成径向函数 $F(r)$ 和 $G(r)$ 的两个微分方程组，即

$$\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\tilde{\omega}\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]G=(E-m-V)F \tag{20.170a}$$

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\tilde{\omega}\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]F=(E+m-V)G. \tag{20.170b}$$

这些方程所处的地位和非相对论量子理论中的方程(9.20)一样。

对角度积分后，$\Psi^{M}_{\tilde{\omega}J}$ 的模方由下式给定：

$$\langle\Psi^{M}_{\tilde{\omega}J}|\Psi^{M}_{\tilde{\omega}J}\rangle=\int_0^\infty(|F|^2+|G|^2)\mathrm{d}r, \tag{20.171}$$

它可与非相对论理论中的表达式(9.21)相比较。

关于 F 和 G 的正则性，可用完全类似于非相对论理论中对 $y_l(r)$ 的正则性的讨论方式来进行。在此不详细论述。

26. 自由球面波

当 $V=0$ 时，上一小节的方法给出自由电子的狄拉克方程的定态解，它们有完全确定的角动量和宇称；这些就是狄拉克自由球面波。

在此情况中，方程(20.170b)给出

$$G=\frac{1}{E+m}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\tilde{\omega}\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]F. \tag{20.172}$$

此式代入 (20.170a),得到

$$(E^2-m^2)F=\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\tilde{\omega}\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]\times\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\tilde{\omega}\frac{\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]F$$

$$=\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{\left(J+\frac{1}{2}\right)\left(J+\tilde{\omega}+\frac{1}{2}\right)}{r^2}\right]F.$$

容易证明:

$$\left(J+\frac{1}{2}\right)\left(J+\tilde{\omega}+\frac{1}{2}\right)=l(l+1),$$

其中,l 是方程(20.162)所规定的整数. 因此,如果用非相对论能量与 $2m$ 的乘积替代 (E^2-m^2),则上面的方程与非相对论理论中的自由波径向方程相同. 对 E^2-m^2 的任一正值,有且只有一个规则解. 如令

$$k=\sqrt{E^2-m^2}\quad(|E|\geqslant m)$$

则上面的方程变为

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+k^2\right]F=0.$$

其规则解为(不包括常数因子):

$$F=rj_l(kr).$$

利用关系式(20.172),得到相应的 G 函数. 利用递推关系(B.42)和(B.43)[前者对应 $\tilde{\omega}=1$,后者对应 $\tilde{\omega}=-1$,两者的 $\gamma=0$],就得到

$$G=\frac{\tilde{\omega}k}{E+m}rj_{l'}(kr).$$

总之，对处于间隔 $(-m,+m)$ 外的任一能量 E，都存在一个角动量为 (JM) 而宇称为 $(-)^{J+\frac{1}{2}\tilde{\omega}}$ 的自由球面波．采用 (20.163) 的形式，它可写成：

$$Cst.\times\begin{pmatrix}|E+m|^{\frac{1}{2}}j_l(\sqrt{E^2-m^2}r)\mathscr{Y}^M_{lJ}\\ i\tilde{\omega}\varepsilon|E-m|^{\frac{1}{2}}j_{l'}(\sqrt{E^2-m^2}r)\mathscr{Y}^M_{l'J},\end{pmatrix}\tag{20.173}$$

其中，$\varepsilon=E/|E|$．

27. 氢原子

作为第二个例子，我们考虑电子在原子核的库仑场中的束缚态问题．将核当作电荷为电子电荷 $(-Z)$ 倍的点电荷并固定在原点[1]．所以，我们必须找出狄拉克粒子在中心势

$$V=-\frac{Ze^2}{r}.$$

中的束缚态．这本征值问题能严格求解．这里只给出方法的概要，它是 § 11.4 中所述方法的一个简单推广．

考察径向方程组 (20.170) 的解的渐近行为，可看出：E 必须限制在间隔 $(-m,+m)$ 之中．我们所要求的本征值是这样一些：它们对应的解在原点是规则的，而且渐近行为类似于 $\exp(-\sqrt{m^2-E^2}r)$．

令

$$\varkappa=\sqrt{m^2-E^2}\quad \nu=\sqrt{\frac{m-E}{m+E}}\tag{20.174}$$

$$\zeta=Ze^2\qquad \tau=\tilde{\omega}\left(J+\frac{1}{2}\right),\tag{20.175}$$

1) 这相当于假定核是无限重的．由此而引起的误差是不能忽略的，因为它与相对论效应同一量级．如果式中的电子质量都用折合质量代替，则这误差的大部分被抵消．

而且引入变量

$$\rho \equiv \varkappa r. \tag{20.176}$$

方程组 (20.170) 就等价于

$$\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{\tau}{\rho}\right)G=\left(-\nu+\frac{\zeta}{\rho}\right)F \tag{20.177a}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{\tau}{\rho}\right)F=\left(\nu^{-1}+\frac{\zeta}{\rho}\right)G. \tag{20.177b}$$

我们寻求如下形式的解:

$$F(\rho)=\rho^{s}\mathrm{e}^{-\rho}(a_0+a_1\rho+a_2\rho^2+\cdots)\quad(a_0\neq 0) \tag{20.178a}$$

$$G(\rho)=\rho^{s}\mathrm{e}^{-\rho}(b_0+b_1\rho+b_2\rho^2+\cdots)\quad(b_0\neq 0). \tag{20.178b}$$

将这些展开式代入方程 (20.177),并且让同次项相等,就得到一系列方程,其中第一个方程确定 s, 其余的方程通过逆推关系决定系数 $a_0, b_0, a_1, b_1, \cdots\cdots a_n, b_n\cdots\cdots$. s 的方程有两个根: $\pm\sqrt{\tau^2-\zeta^2}$. 使 F 和 G 在原点满足规则条件 $F(0)=G(0)=0$ 的充分必要条件是 $s>0$. 于是, 只留下正根[1]:

$$s=\sqrt{\tau^2-\zeta^2}.$$

因此,对每一个 E 值,都存在一个在原点是正则的解. 一般地说,在无限远处它的行为类似于 $\rho^{s}e^{\rho}$, 除非(20.178)的两个展开式只包含有限项, 而这只能出现在某些特定 E 值的情形中,这些 E 值就是所要找的能级. 计算表明,能级由下述公式给出:

$$m\left[1+\frac{\zeta^2}{(n'+s)^2}\right]^{-\frac{1}{2}},$$

其中 ,n'是径向量子数,即 (20.178)中的多项式的次数. 对 n'

1) 我们假设$\zeta<|\tau|$,即$Ze^2<(J+\frac{1}{2})$. 若 $Z<137$(实际上经常是这样的情况), 则这个条件总能满足. 反之, 则对原点的正则性的条件的讨论变得很困难.

的每一个正值和每一个 $\tilde{\omega}$ 值，存在一个正则解. 当 $n'=0$ 时，对 $\tilde{\omega}=-1$，存在一个正则解：但对 $\tilde{\omega}=+1$，则无正则解。

我们引入主量子数

$$n=J+\frac{1}{2}+n'.$$

于是，上述结果可重新陈述如下. 分立能谱的能级与两个量子数 n 和 J 有关：

$$E_{nJ}=m\left[1+\frac{Z^2e^4}{(n-\varepsilon_J)^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \tag{20.179}$$

$$\varepsilon_J=J+\frac{1}{2}-\sqrt{\left(J+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2e^4} \tag{20.179'}$$

其中，n 可取所有的正整数值，而 J 取间隔 $(0,n)$ 中的所有半整数值：

$$n=1,2,\cdots,\infty;\qquad J=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\cdots,n-\frac{1}{2}.$$

每一个 J 对应两个系列的解，它们的宇称相反，各有 $(2J+1)$ 个. 但 $J=n-\frac{1}{2}$ 时例外，此时只对应一个系列的解，有 $(2J+1)$ 个，宇称为 $(-)^{n-1}$. 与其标出宇称，还不如标出 l 值（即旋量的前两个分量的轨道角动量）. 我们记得旋量的宇称是 $(-)^l$.

光谱学符号 nl_j 通常用来区分这些解的不同系列. 下面列出前几个能级（依次增加）以及相应的光谱项（每一项有 $(2J+1)$ 重简并）：

$$n=1\quad J=\frac{1}{2}\quad 1s_{1/2}\qquad\qquad (n'=0)$$

$$n=2\quad J=\frac{1}{2}\quad 2s_{1/2},\quad 2p_{1/2}\quad (n'=1)$$

$$J=\frac{3}{2}\quad 2p_{3/2}\qquad (n'=0)$$

$$n=3\quad J=\frac{1}{2}\quad 3s_{1/2}\quad 3p_{1/2}\qquad (n'=2)$$

$$J=\frac{3}{2}\quad 3p_{3/2}\quad 3d_{3/2}\qquad (n'=1)$$

$$J=\frac{5}{2}\qquad 3d_{5/2}\qquad (n'=0).$$

如果公式 (20.179) 展开成 Z^2e^4 的幂级数，则得到

$$E_{nJ}=m\left[1-\frac{Z^2e^4}{2n^2}-\frac{(Z^2e^4)^2}{2n^4}\left(\frac{n}{J+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)+\cdots\right].$$

其中，第一项是质量项．第二项 $(-Z^2e^4/2n^2)$ 精确地等于非相对论理论中给出的能级．第三项及以后各项是相对论修正项．这些修正部分地消除了非相对论能级的“偶然简并”．对固定的 n，每一项的结合能 $m-E$ 略有增加；这种增加仅与 J 有关：J 越小，增加越大．

氢原子和类氢原子（例如熟知的 He^+）的精细结构的实验结果大体上与这些预料一致．

然而，这种一致是不完全的．在氢原子[1]的 $n=2$ 能级的精细结构上已观测到最大的分歧．在非相对论近似中，三个能级 $2s_{\frac{1}{2}}$，$2p_{\frac{3}{2}}$，$2p_{\frac{1}{2}}$ 是相等的；在狄拉克理论中，能级 $2s_{\frac{1}{2}}$ 和 $2p_{\frac{3}{2}}$ 仍是相等，但 $2p_{\frac{1}{2}}$ 能级略低一些（间隔～10^{-4}eV 的数量级）．能级间距 $2p_{\frac{3}{2}}-2p_{\frac{1}{2}}$ 与理论一致，但能级 $2s_{\frac{1}{2}}$ 低于能级 $2p_{\frac{1}{2}}$ 而间距 $2s_{\frac{1}{2}}-2p_{\frac{1}{2}}$ 约等于间距 $2p_{\frac{3}{2}}-2p_{\frac{1}{2}}$ 的 1/10．这个效应就是著名的兰姆移位．要解释它，我们必须严格地处理电

1) W. E. Lamb 和 R. C. Retherford, *Phys. Rev.* **72** (1947) 241.

子、质子和量子化的电磁场之间的相互作用。在狄拉克理论中，只保留了这种相互作用的主要项，即库仑势。兰姆移位反映了对这种近似的“辐射修正”[1]。

V. 狄拉克方程的非相对论极限

28. 大分量和小分量

考虑正能平面波，其分量给出在表 20.3 中。设能量 E_p 与静止能量差别不大：

$$W \equiv E_p - m \ll m.$$

因此，非相对论近似是适用的，动能 W 近似等于 $\frac{1}{2}mv^2$，我们有

$$\frac{W}{m} \simeq \frac{1}{2} v^2 \ll 1.$$

即将看到，$\beta = +1$ 对应的非零分量远大于 $\beta = -1$ 对应的分量：

$$\sigma_z = +1 \qquad \frac{u_3}{u_1} = \left(\frac{W}{W+2m}\right)^{\frac{1}{2}} \simeq O\left(\frac{v}{c}\right) \ll 1$$

$$\sigma_z = -1 \qquad \frac{u_4}{u_2} = -\left(\frac{W}{W+2m}\right)^{\frac{1}{2}} \simeq O\left(\frac{v}{c}\right) \ll 1.$$

对于自由球面波[参看 (20.173) 式]或氢原子的本征函数（参看问题 20.10 确定的著名的特殊本征解）也看到类似的情况。这表明：在非相对论近似中，旋量 Ψ 的两个分量 Ψ_3 和 Ψ_4（它们对应 β 的本征值为 -1）是很小的，并且可忽略。因此，狄拉克理论等价于二分量理论。

为了明显地指出这一点，我们将狄拉克旋量写成

1) 最近对 $2s_{1/2}-2p_{1/2}$ 的测量给出 1057.77±0.70 Mc/s（Mc/s≡兆周/秒）。用量子电动力学考虑“辐射修正”所得到的理论值是 1057.99±0.2 Mc/s [C. M. Sommerfield, *Phys. Rev.* **107** (1957) 328].

(20.157)的形式，其中 Φ 和 χ 由方程(20.158)或(20.159)所定义。正如在§25中已经注意到的，Φ 和 χ 可看作是二分量非相对论理论的态矢量空间中的矢量。

采用这些符号后，在狄拉克表象和形式中，能量为 E 的定态狄拉克方程可写成：

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}))\chi+(e\varphi+m)\Phi=E\Phi \quad (20.180a)$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}))\Phi+(e\varphi-m)\chi=E\chi. \quad (20.180b)$$

令

$$\boldsymbol{\pi}=\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}, \quad M=E-e\varphi$$

$$W=E-m, \qquad M'=\frac{1}{2}(m+M)$$

$$=m+\frac{1}{2}(W-e\varphi). \quad (20.181)$$

解方程(20.180b)得出 χ，然后代入方程(20.180a)中，得到

$$\chi=\frac{1}{2M'}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\Phi \quad (20.182)$$

$$\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\frac{1}{2M'}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})+e\varphi\right]\Phi=W\Phi. \quad (20.183)$$

方程组(20.182—183)严格等价于狄拉克方程。

在非相对论极限下，

$$W,e\varphi,\boldsymbol{p},e\boldsymbol{A}\ll m, \quad M'\simeq m. \quad (20.184)$$

从方程(20.182)，显然有

$$\chi\ll\Phi,$$

而且这两个量的比值的量级是 $\frac{p}{m}$（即 v/c）。χ 和 Φ 分别是通常所说的**小分量**和**大分量**。

在本节的其余部分中，我们将使用“偶”和“奇”算符的概念，根据定义：

(i) 一个算符 $\mathscr{P}$ 是"偶"的，如果它夹在小分量与大分量之间的矩阵元为零(例如 $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{L}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{J}, P(\boldsymbol{r}_0), \beta$)；

(ii) 一个算符 $\mathscr{I}$ 是"奇"的，如果它夹在小分量与大分量之间的矩阵元不为零 (例如 $\boldsymbol{\alpha}, \beta\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{r}^5, \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)$)。

一种等价的说法： $\mathscr{P}$ 是与 β 对易的算符；而 $\mathscr{I}$ 是与 β 反对易的算符，即

$$\mathscr{P} = \beta\mathscr{P}\beta, \quad \mathscr{I} = -\beta\mathscr{I}\beta. \tag{20.185}$$

任一算符 Q 都可表示为一个"偶"算符和一个"奇"算符之和，而且这种分解是唯一的：

$$Q = \frac{1}{2}[Q + \beta Q\beta] + \frac{1}{2}[Q - \beta Q\beta].$$

两个"偶"算符或两个"奇"算符之积是"偶"算符，一个"偶"算符与一个"奇"算符之积是"奇"算符。

29. 泡利理论作为狄拉克理论的非相对论极限

我们现在回到方程组 (20.182—183) 上。在波函数的归一化中，由于忽略小分量而引起的误差约为 $\frac{v^2}{c^2}$ 的量级。同一量级的误差也发生在方程 (20.183) 中的算符 M' 用质量 m 替代的时候。在这近似中，方程 (20.183) 变成某一哈密顿量的本征值方程的形式：[1]

$$H_{n.r.}\Phi = W\Phi, \tag{20.186}$$

其中，

$$H_{n.r.} \equiv \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}) + e\varphi, \tag{20.187}$$

1) 方程 (20.183) 不是真实的本征值方程，因为左边括号内的算符通过 M' 而依赖于"本征值" W.

它作用在二分量波函数上．方程(20.186)决定能量W到$\frac{v^2}{c^3}$的准确度．

为了将 $H_{n.r.}$ 写成更熟悉的形式，我们利用恒等式(20.183)．注意到 $\boldsymbol{\pi}$ 的各分量是不对易的，并且

$$\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi} = \mathrm{ie\ curl}\ \boldsymbol{A} = \mathrm{ie}\mathscr{H}.$$

我们就得到

$$H_{n.r.} \equiv \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 - \frac{e}{2m}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathscr{H}) + e\varphi. \quad (20.188)$$

可以看出 $H_{n.r.}$ 是泡利理论中的哈密顿量，对应的粒子质量为 m，电荷为 e，固有角动量为

$$\boldsymbol{\mu} = \mu_B \boldsymbol{\sigma} \quad (\mu_B \equiv \text{玻耳磁子} = e/2m).$$

狄拉克理论不仅预言了电子固有磁矩的存在，而且还给出正确的大小(§13.18)．这是狄拉克理论的主要成就之一[1]．

为了证明在现在所考虑的近似下，狄拉克理论等价于二分量泡利理论，我们必须找到与狄拉克理论中的算符相对应的、但仅作用在大分量上的算符．

实际上这是可以做到的，因为计算中涉及的算符仅与它们在状态 Ψ'，Ψ'' 之间的矩阵元有关，其中 Ψ' 和 Ψ'' 的能量是正的，而且足够接近于静止质量，以致非相对论近似适用．

如果我们涉及的是一个偶算符$\mathscr{P}$，则矩阵元$\langle \Psi'' | \mathscr{P} | \Psi' \rangle$

---

1) 实际上，实验值 μ_{exp} 与电子磁矩的狄拉克理论值稍有差异[P. Kusch 和 H.M. Foley, *Phys. Rev.* **72** (1947) 1256]．比较近期的测量给出

$$\Delta\mu_{exp} \equiv \mu_{exp} - \mu_B = (1.165 \pm 0.011) \times 10^{-3} \mu_B.$$

量子电动力学的"辐射修正"能说明这种反常磁矩的存在，并给出（参看 Sommerfield 的上述引文）：

$$\Delta\mu_{th} = 1.163 \times 10^{-3} \mu_B.$$

顺便提一下，在狄拉克算符上附加一项 $\kappa\mu_B\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ 而得到的方程也具有狄拉克方程的全部不变性．而且对任一给定的常数值 κ，这方程所描写的是质量为 m，电荷为 e，固有磁矩为 $(1+\kappa)\mu_B$ 的粒子．

取形式：

$$\langle \Phi'' | \mathscr{P} | \Phi' \rangle + \langle \chi'' | \mathscr{P} | \chi' \rangle .$$

第二项比第一项小 $(v/c)^2$ 倍，而且在这里的近似讨论中，它可以忽略。因此，$\mathscr{P}$ 可用它到大分量空间的投影代替：在非相对论的泡利理论中，这个投影代表的物理量就是狄拉克理论中 $\mathscr{P}$ 所代表的。

如果我们涉及的是一个奇算符 $\mathscr{I}$，就有

$$\langle \Psi'' | \mathscr{I} | \Psi' \rangle = \langle \Phi'' | \mathscr{I} | \chi' \rangle + \langle \chi'' | \mathscr{I} | \Phi' \rangle .$$

在这里，小分量明显地包含在右边的各项中。然而，在现在的近似下，方程 (20.182) 给出：

$$|\chi\rangle = \rho_1 \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2m} |\Phi\rangle .$$

由此得到

$$\langle \Psi'' | \mathscr{I} | \Psi' \rangle = \frac{1}{2m} \langle \Phi'' | [\mathscr{I} \rho_1 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) \rho_1 \mathscr{I}] | \Phi' \rangle .$$

因此，$\mathscr{I}$ 可用它到大分量空间的投影

$$\frac{1}{2m} [\mathscr{I} \rho_1 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) \rho_1 \mathscr{I}] .$$

来代替。

于是，“速度” $\boldsymbol{\alpha} = \rho_1 \boldsymbol{\sigma}$ 可用大分量空间中的算符

$$\frac{\boldsymbol{\pi}}{m} \equiv \frac{\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) \boldsymbol{\sigma}}{2m} .$$

代替。

类似地，点 $\boldsymbol{r}_0$ 处的流密度

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0) \equiv \rho_1 \boldsymbol{\sigma} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0),$$

可用大分量空间中的算符

$$(\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0))_{n.r.} \equiv \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \boldsymbol{\sigma} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2m} \right) + \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2m} \right) \boldsymbol{\sigma} \delta (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$$

代替．再应用恒等式(13.83)，将它写成

$$(\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0))_{n.r.} \equiv \boldsymbol{j}^{(\mathrm{I})} + \boldsymbol{j}^{(\mathrm{II})} \tag{20.189}$$

$$\boldsymbol{j}^{(\mathrm{I})} \equiv \frac{\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{\pi} + \boldsymbol{\pi}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)}{2m} \tag{20.190a}$$

$$\boldsymbol{j}^{(\mathrm{II})} \equiv \frac{\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\sigma}) - (\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\sigma})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)}{2m}. \tag{20.190b}$$

所以在这极限中，狄拉克电流 $e\boldsymbol{j}$ 由两项组成．第一项 $e\boldsymbol{j}^{(\mathrm{I})}$ 和薛定谔理论中的电流（参看问题 9.1）完全一样．为了解释第二项，我们考虑它在大分量 Φ' 和 Φ'' 之间的矩阵元．计算表明：

$$\langle\Phi''|e\boldsymbol{j}^{(\mathrm{II})}|\Phi'\rangle = \frac{e}{2m}\mathrm{curl}\langle\Phi''|\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{\sigma}|\Phi'\rangle.$$

这是磁流项，而且

$$\frac{e}{2m}\langle\Phi''|\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{\sigma}|\Phi'\rangle \equiv \langle\Phi''|\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{\mu}|\Phi'\rangle,$$

这个量可解释为磁矩密度．即将看到这磁流的散度为零，因此它对连续性方程并无贡献．

30. 应用：超精细结构和偶极-偶极耦合

我们现在考虑原子电场（用静电势 $\varphi(r)$ 描述）中的一个电子，并且研究核磁矩 $\boldsymbol{M}$ 所产生的场的效应．位于坐标原点的磁偶极 $\boldsymbol{M}$ 所产生的场可用如下的矢量势描写：

$$\boldsymbol{A} \equiv \frac{\boldsymbol{M}\times\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{20.191}$$

$$\equiv \mathrm{curl}(\boldsymbol{M}/r). \tag{20.191'}$$

这场的存在使得狄拉克哈密顿量中增加一附加项$(-e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A})$．

为了决定非相对论近似下这场的效应，我们用上一小节

的方法计算算符$(-\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A})$的非相对论极限．我们也可以直接地考查由于出现$\boldsymbol{M}$而对泡利哈密顿量(20.188)的修正．这两种方法是等价的．现在采用第二种．

如果我们只保留M的线性项，则泡利哈密顿量包含两个补充项：

$$l_a=-\frac{e}{2m}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})$$

$$l_b=-\frac{e}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathscr{H})=-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathscr{H};$$

其中，$\mathscr{H}$是偶极子$\boldsymbol{M}$产生的场．

l_a是自旋-轨道耦合项(核的自旋，电子的轨道角动量)．显然$\mathrm{div}\boldsymbol{A}=0$[参看方程(20.191′)]，所以

$$l_a=-\frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p},$$

将(20.191)式代入上式右边，而且引入电子的轨道角动量$\boldsymbol{L}\equiv\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$，就得到

$$l_a=-\frac{e\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{L}}{mr^3}. \tag{20.192}$$

l_b是自旋-自旋或偶极-偶极耦合项．借助(20.191′)式，可计算出：

$$l_b=-\boldsymbol{\mu}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{A})=-\boldsymbol{\mu}\cdot\left[\nabla\times\left(\nabla\times\frac{\boldsymbol{M}}{r}\right)\right]$$

$$=(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{M})\Delta\left(\frac{1}{r}\right)-[(\boldsymbol{\mu}\cdot\nabla)(\boldsymbol{M}\cdot\nabla)]\left(\frac{1}{r}\right). \tag{20.193}$$

当$r\neq0$时，完成上式中的微分运算，就容易计算出l_b是

$$\frac{3(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{r})-(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\mu})r^2}{r^5}.$$

作为一个简单函数来考虑，(20.193) 式在原点有 $\frac{1}{r^3}$ 型的奇异性. 为了决定算符 l_b 起的作用，考查 l_b 与一规则函数 $f(r)$ 的乘积在 $r=0$ 的小邻域内的积分结果是合适的. 为此，将 l_b 写成形式

$$l_b = \frac{2}{3}(\mu \cdot M)\Delta\left(\frac{1}{r}\right) - [(\mu \cdot \nabla)(M \cdot \nabla) - \frac{1}{3}(\mu \cdot M)\Delta]\left(\frac{1}{r}\right). \qquad (20.193')$$

式中，第二项是在 r 的函数空间中的二阶张量算符. 如要完成上述的积分，需将 $f(r)$ 按球谐函数展开. 只有二阶球谐函数的系数对角度的积分有贡献；这些贡献在原点至少像 r^2 那样迅速下降而消失；(20.193) 的第二项的贡献也为零(尽管它在原点有 $\frac{1}{r^3}$ 类型的奇异性). 借助恒等式 (A.12)，第一项可改写为：$-\left(\frac{8}{3}\pi\right)(\mu \cdot M)\,\delta(r)$. 因此，对任意的包括原点在内的 r，都有

$$l_b = -\frac{8\pi}{3}(M \cdot \mu)\,\delta(r) - \frac{1}{r^3} \times \left[3\left(M \cdot \frac{r}{r}\right)\left(\mu \cdot \frac{r}{r}\right) - (M \cdot \mu)\right]. \qquad (20.194)$$

公式(20.192)和(20.194)适用于非相对论极限情况，而且许可在 v^2/c^2 的精确度内决定原子能级的超精细结构. 特别是，S 电子对超精细结构的贡献由常数项 $-\frac{8}{3}\mu \cdot M\delta(r)$ 给定.

31. 高级修正和福尔迪-沃恩森变换

就 $\frac{v}{c}$ 的最低级而论，狄拉克理论和二分量的泡利理论等

价．正如上面作的，从方程 (20.182—183) 出发，我们能得出高级相对论修正项．为此，将 $\frac{1}{M'}$ 展开成

$$\frac{1}{M'}=\frac{1}{m}\left[1-\frac{W-e\varphi}{2m}+\left(\frac{W-e\varphi}{2m}\right)^2-\cdots\right).$$

因为

$$\left\langle\frac{W-e\varphi}{2m}\right\rangle\simeq\left\langle\frac{\pi^2}{4m^2}\right\rangle\simeq O\left(\frac{v^2}{c^2}\right),$$

所以，上式实质上是 v^2/c^2 的幂级数展开式．如果这展开式只保留第一项，就得到泡利理论 (§ 29)．如果在展开式中不只保留第一项，就得到高级相对论修正项．然而，一旦考虑了 v^2/c^2 级的修正，则在形式上，狄拉克理论 (20.182—183) 不再等价于二分量理论．这是因为：

(i) 在归一化和计算偶算符的矩阵元时，来自小分量的贡献不再是可忽略的；

(ii) 严格地讲，方程 (183) 不再是本征值方程(参看本章 § 29 前一个注释)．

虽然这个方法不会因此就毫无用处，但应用起来以及对所得结果解释就不那么容易．福尔迪和沃思森[1] 已经提出另一方法，使我们在 v/c 的任一给定的阶内，能用二分量理论逼近狄拉克理论．它实质上是对狄拉克理论中的波函数和算符选择一个合适的么正变换．在新的“表象”中 (我们称之为 FW “表象”)，狄拉克哈密顿量在 $\frac{v}{c}$ 的给定的阶内是“偶”算符．因此，在这样的近似下，波动方程中的小分量和大分量是完全不耦合的．所以就可以忽略小分量，从而得到所要的二分量理论．这二分量理论中的算符是从 FW “表象”中的“偶”

1) L.L. Foldy 和 S.A. Wouthuysen, *Phys. Rev.* **78**(1958) 29.

算符而不是从旧"表象"中的算符得到. 由此导致对非相对论量子力学算符(特别是位置算符)的一种新解释. 在许多方面比旧的解释更令人满意. 本节的其余部分用来讨论 FW 变换及其在狄拉克方程的非相对论近似中的应用.

32. 自由粒子的 FW 变换

在自由粒子的情况下,小分量和大分量在 $\frac{v}{c}$ 的各阶中都完全不耦合.

我们来考虑狄拉克哈密顿量

$$H_0 \equiv \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta m.$$

令 Γ_+ 和 Γ_- 分别为到正能解和负能解上的投影算符:

$$\Gamma_\pm \equiv \frac{1}{2}\left[1 \pm \frac{H_0}{E_p}\right] = \frac{1}{2}\left[1 \pm \frac{\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta m}{E_p}\right]. \quad (20.195)$$

$$E_p \equiv \sqrt{m^2 + p^2}.$$

用 B_+ 和 B_- 分别代表投影到大分量空间和小分量空间上的投影算符:

$$B_\pm \equiv \frac{1}{2}(1 \pm \beta).$$

按定义,使我们过渡到 FW "表象"的算符 U 将 Γ_+ 变换成 B_+, 将 Γ_- 变换成 B_-. 用带撇的符号代表 FW "表象"中的矢量和算符. 我们得到

$$U^\dagger U = UU^\dagger = 1.$$

$$\Gamma'_\pm \equiv U\Gamma_\pm U^\dagger = B_\pm.$$

我们也要求 U 对平移、转动、反射是不变的. 因此, U 是确定的(相因子未定), 这一点留给读者证明. 固定这个相因子, 就得到

$$U = \sqrt{\frac{2E_p}{m+E_p}}\,\frac{1}{2}\left[1+\beta\frac{H_0}{E_p}\right] \tag{20.196}$$

$$= \sqrt{\frac{m+E_p}{2E_p}} + \beta\frac{\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}}{\sqrt{2E_p(m+E_p)}}. \tag{20.196'}$$

容易验证，此式具有我们所期望的全部性质.

因为U与时间无关，所以在FW“表象”中，哈密顿量 H_F 决定态的演化，它由下面的方程给定:

$$H_F = UH_DU^\dagger,$$

借助(20.196)式，得出

$$H_F = \beta E_p \equiv \beta(m^2+\boldsymbol{p}^2)^{\frac{1}{2}}. \tag{20.197}$$

由于 H_F 是偶算符，所以在下述运动方程中，大分量 Φ' 和小分量 χ' 完全不耦合:

$$\mathrm{i}\frac{\partial\Phi'}{\partial t} = E_p\Phi' \tag{20.198a}$$

$$\mathrm{i}\frac{\partial\chi'}{\partial t} = -E_p\chi'. \tag{20.198b}$$

如果我们限于讨论正能解(特别是非相对论能量)，则对 $\frac{v}{c}$ 的所有级，狄拉克理论都严格地等价于方程(20.198)所描述的二分量理论.

算符U和$\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{J}$，字称算符P对易，但不和$\boldsymbol{r}$对易. 在$\boldsymbol{r}$为对角的表象中，它是一个具有如下矩阵元的积分算符:

$$\langle\boldsymbol{r}|U|\boldsymbol{r}'\rangle = \iint\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle d\boldsymbol{p}\langle\boldsymbol{p}|U|\boldsymbol{p}'\rangle d\boldsymbol{p}'\langle\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{r}'\rangle,$$

利用(20.196')，得到

$$\langle\boldsymbol{r}|U|\boldsymbol{r}'\rangle = (2\pi)^{-3}\int\left[\sqrt{\frac{m+E_p}{2E_p}}\right.$$

$$\left.+\beta\frac{\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}}{\sqrt{2E_p(m+E_p)}}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p},$$

$\langle r|U|r'\rangle$是$(r-r')$的函数. 当$|r-r'|\gg\frac{1}{m}$时,它实际上变为零;但当$|r-r'|$较小或和$\frac{1}{m}$同量级时, 它有不容忽略的数值. 所以,FW 变换是非定域变换. 在这表象中,旋量$\Psi'(r)$(即$\Psi(r)$的变换)由$\Psi(r)$在r邻近的一个体积(线度$\sim\frac{1}{m}$,即粒子的康普顿波长)内取某种平均来得到.

在 FW "表象"中,粒子的位置由算符

$$r'\equiv UrU^{\dagger}.$$

描述. 这个算符不同于r. 沿用福尔迪和沃思森的说法,在 FW "表象"中由r'表述的这个量被称为**平均位置**. 在通常的"表象"中,它由某个算符R描述,而且$R'\equiv r$. 所以

$$R\equiv U^{\dagger}rU.$$

在狄拉克表象中,R是非定域算符. 粗略地讲,它对于旋量$\Psi(r)$的作用大致相当于用r去乘,并且每一点的旋量值就用它在该点邻域内(量级为$\frac{1}{m}$)的平均值代替. 上面说的平均位置这名称就是这样来的.

如果Q'是 FW "表象"中的"偶"算符,则它在上述二分量理论中对应的可观测量$Q_{n.r.}$可这样得到: 只保留Q'在大分量空间的各矢量之间的矩阵元,即$Q_{n.r.}\equiv B_{+}Q'B_{+}$. 特别是,在二分量理论中,表述位置的可观测量$r$与"平均位置"$R$相对应,而不与狄拉克理论中的位置算符对应[1].

1) 按照这里所作的解释,二分量理论中的轨道角动量$r\times p$,自旋σ不与狄拉克理论中的轨道角动量,自旋相对应,但与"平均角动量"$R\times p$,"平均自旋"Σ对应. 其中,Σ是与 FW"表象"中的σ对应的算符: $\Sigma'\equiv\sigma$. 读者可以验证: 平均自旋的每一分量,平均角动量的每一分量与自由粒子的哈密顿量对易. 自旋本身和轨道角动量本身却没有这样的性质. 还要注意:

$$J\equiv(r\times p)+\frac{1}{2}\sigma=(R\times p)+\frac{1}{2}\Sigma.$$

33. 场内粒子的 FW 变换

当场存在时，狄拉克哈密顿量取如下形式

$$H = \beta m + \mathscr{I} + \mathscr{P}$$

$$\mathscr{I} \equiv \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\alpha} \cdot (\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}), \quad \mathscr{P} \equiv e\varphi.$$

一般而言，不存在如此的一个“表象”：在其中，哈密顿量严格地是“偶”算符，但不断应用么正变换却可得到另外的“表象”，在那里，哈密顿量包含着 $\frac{v}{c}$ 的越来越高阶的“奇”部分.

为了看出这一点，我们作么正变换

$$U = \exp(\beta\mathscr{I}/2m).$$

在新表象中决定状态演化的哈密顿量 H_1 由下式给定：

$$H_1 = UHU^\dagger - iU\partial U^\dagger/\partial t.$$

利用 $\beta\mathscr{I}$ 与 $(\beta m + \mathscr{I})$ 反对易这事实和 $U^\dagger = \exp(-\beta\mathscr{I}/2m)$，得到

$$\begin{aligned} U(\beta m + \mathscr{I})U^\dagger &= U^2(\beta m + \mathscr{I}) \\ &= \beta m[\cos(\mathscr{I}/m) + (\mathscr{I}/m)\sin(\mathscr{I}/m)] \\ &\quad + m[(\mathscr{I}/m)\cos(\mathscr{I}/m) - \sin(\mathscr{I}/m)]. \end{aligned}$$

利用下面的算符恒等式(对任意两个算符 A 和 B 都适用，参看问题 8.4)，

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2}[A,[A,B]] + \cdots$$

$$+ \frac{1}{n!}\underbrace{[A,[A,\cdots[A,[A,B]]\cdots]]}_{n\text{个括号}} + \cdots$$

我们可将 $U\mathscr{P}U^\dagger$ 和 $iU\partial U^\dagger/\partial t$ 展成 $\frac{\mathscr{I}}{m}$ 的幂级数.

我们只给出 $\mathscr{I}$ 与时间无关时 H_1 的计算结果. 由于我

们只涉及第一级近似，可令 $H' = H$. 因而得到

$$H_1 = \beta m + \mathscr{P}_1 + \mathscr{I}_1$$

$$\mathscr{P}_1 = \mathscr{P} + \beta\frac{\mathscr{I}^2}{2m} - \frac{1}{8}m\left[\frac{\mathscr{I}}{m},\left[\frac{\mathscr{I}}{m},\frac{\mathscr{P}}{m}\right]\right]$$

$$-\frac{1}{8}\beta m\left(\frac{\mathscr{I}}{m}\right)^4 + \cdots$$

$$\mathscr{I}_1 = m\left(\frac{1}{2}\beta\left[\frac{\mathscr{I}}{m},\frac{\mathscr{P}}{m}\right] - \frac{1}{3}\left(\frac{\mathscr{I}}{m}\right)^3\right) + \cdots$$

H_1 的“偶”部分和“奇”部分的展开式中的这些项使我们对 $\mathscr{P}_1$ 的确定准确到 $(\mathscr{I}/m)^6$ 或 $(\mathscr{P}/m)(\mathscr{I}/m)^4$（取两者中较大的），以及对 $\mathscr{I}_1$ 的确定准确到 $(\mathscr{I}/m)^5$ 或 $(\mathscr{P}/m)(\mathscr{I}/m)_3$（取两者中较大的）. 所以，$H_1$ 的“奇”部分比 H 的“奇”部分小一个因子，这因子和 $\mathscr{P}/m,(\mathscr{I}/m)^2$ 两者中较大的一个同量级. 在非相对论极限下，$\frac{\mathscr{P}}{m}$ 和 $\frac{\mathscr{I}}{m}$ 的量级分别为 $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ 和 $\left(\frac{v}{c}\right)$，所以 $\mathscr{I}_1$ 的量级为 $\left(\frac{v}{c}\right)^3$.

我们现在把对 H 作过的运算又用于 H_1，即利用算符

$$U_1 = \exp(\beta\mathscr{I}_1/2m).$$

作新的么正变换. 用 H_2 代表新的哈密顿量. H_2 的“奇”部分 $\mathscr{I}_2$ 比 H_1 的“奇”部分小一个因子，这因子和 $\mathscr{P}_1/m,(\mathscr{I}/m)^2$ 两者中较大的一个同量级；在非相对论极限下，$\frac{\mathscr{P}_1}{m}$ 的量级为 $\left(\frac{v}{c}\right)^2$，$\left(\frac{\mathscr{I}_1}{m}\right)^2$ 的量级为 $\left(\frac{v}{c}\right)^6$. 所以，$\mathscr{I}_2$ 的量级为 $\left(\frac{v}{c}\right)^5$. 如果忽略这种量级的项，则 H_2 是“偶”算符，由下式给定：

$$H_2 \simeq \beta m + \mathscr{P}_2 + O(v^5)$$

$$\simeq \beta m + \mathscr{P} + \beta\frac{\mathscr{I}^2}{2m}$$

$$-\frac{1}{8}m\left[\frac{\mathscr{I}}{m},\left[\frac{\mathscr{I}}{m},\frac{\mathscr{D}}{m}\right]\right]-\frac{1}{8}\beta m\left(\frac{\mathscr{I}}{m}\right)^4+O(v^5)$$

$$\simeq \beta m+e\varphi+\frac{1}{2m}\beta(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^2-\frac{e}{8m^2}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}],$$

$$[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),\varphi]]-\frac{1}{8m^3}\beta(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^4+O(v^5).$$

类似地，如果忽略 $\left(\frac{v}{c}\right)^3$ 量级的项，则 H_1 是“偶”算符，由下式给定：

$$H_1\simeq\beta m+e\varphi+\frac{1}{2m}\beta(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^2+O(v^3).$$

现在我们可以象自由粒子的情况那样过渡到二分量理论。在 $\left(\frac{v}{c}\right)^5$ 的准确度内，正能解由大分量空间中的波函数 Φ' 来表述，Φ' 遵从方程

$$i\frac{\partial\Phi'}{\partial t}=(m+H'_{n.r.})\Phi',$$

其中，$(m+H'_{n.r.})$ 是 H_2 的上述近似表达式在大分量空间上的投影，即

$$H'_{n.r.}=e\varphi+\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^2-\frac{e}{8m^2}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),$$

$$[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),\varphi]]-\frac{1}{8m^3}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^4. \qquad (20.199)$$

前二项是泡利理论中的哈密顿量，后两项是对非相对论能量 $H_{n.r.}$ 的量级的 $(v/c)^2$ 的相对论修正。

简单的计算得到

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^4=(\boldsymbol{\pi}^4-e(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathscr{H}))^2 \qquad (20.200)$$

$$[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),\varphi]]=\mathrm{div}\mathscr{E}+2\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathscr{E}\times\boldsymbol{\pi}), \qquad (20.201)$$

这些表达式能使我们把 $H'_{n.r.}$ 写成更熟悉的形式.

因此,接连运用足够多的这种么正变换,我们就可以构造出一种二分量理论,它能给出直到 $\frac{v}{c}$ 的任意级的正能态.每一个新的变换都使误差降低约$\left(\frac{v}{c}\right)^2$倍. 级数收敛性的讨论却比较麻烦,在大多数情况下,它很可能是一种渐近展开式. 粗略地讲,这是按算符 $\boldsymbol{p}/m\left[\text{即 } \frac{\hbar}{mc}\nabla\text{和 } \frac{\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right]$ 的幂级数展开.因此,级数的收敛速率依赖于势$(\boldsymbol{A},\varphi)$在量级为 $\frac{\hbar}{mc}$ 的空间范围[和量级为 $\frac{\hbar}{mc^2}$ 的时间间隔,即光通过康普顿波长所需的时间]内的变化情况.

34. 中心静电势中的电子

作为上一小节所述办法的一个应用,我们考虑中心静电势$V(r)\equiv e\varphi(r)$中的一个电子. 对此情况,$\boldsymbol{A}(r)=0$,而且泡利理论中的哈密顿量恰恰就是通常薛定谔理论中的哈密顿量:

$$H_{n.r.}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r).$$

如果人们希望一直计算到刚刚高于 v^2/c^2 的级,那么就必须用 $H'_{n.r.}$ 代替 $H_{n.r.}$. 这等于在 $H_{n.r.}$ 中加上(20.199)的最后两项. 在现在的情况下,

$$e\boldsymbol{\mathscr{E}}=-\operatorname{grad}V=-\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}$$

$$e\operatorname{div}\boldsymbol{\mathscr{E}}=-\Delta V,$$

由此得到[考虑关系式(20.200)和(20.201)]:

$$H'_{n.r.}=H_{n.r.}-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})$$

$$+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V. \tag{20.202}$$

其中，第一改正项 $\left(\text{即}-\frac{p^4}{8m^3c^2}\right)$ 是对动能 $\frac{p^2}{2m}$ 的相对论修正；第二修正项是自旋-轨道耦合项[参看公式(13.95)]；第三修正项 $\left(\text{即}\ \frac{\hbar^2\Delta V}{8m^2c^2}\right)$ 是对中心势的修正，即通常所说的达尔文项。如果 $V(r)=-Ze^2/r$（纯库仑势），则达尔文项等于

$$(\pi Ze^2\hbar^2/2m^2c^2)\delta(\boldsymbol{r}),$$

而它只影响 s 态。

35. 讨论和结论

正如无势的情况一样，当势场存在时，二分量非相对论理论中的算符是FW“表象”中的算符在大分量空间上的投影。具体说，非相对论理论中的算符 $\boldsymbol{r}$ 与我们称之为“平均位置”的算符 $\boldsymbol{R}$ 相同。在狄拉克理论中，粒子与电磁势的相互作用是定域的互相作用。换言之，粒子与其所在位置 $\boldsymbol{r}$ 处的电磁势发生相互作用。当我们过渡到FW“表象”（$\boldsymbol{r}$ 在这里代表“平均位置”）时，这相互作用就变换成非定域的相互作用，这种作用是来自电磁势在粒子邻域（线度近于 $\hbar/mc$）内的各个取值的贡献；如果势 $(\boldsymbol{A},\varphi)$ 在这邻域内的变化是小的，这相互作用可以用泰勒展开式来表示，而展开式包含这势及它的各阶导数在 $\boldsymbol{r}$ 处的取值。诸如 $H'_{n.r.}$[见方程(20.199)和(20.202)]这样的哈密顿量包含这种展开式的第一项。

于是，在非相对论极限中，狄拉克电子不表现为点电荷，而是一个电荷分布，同时电流扩展到线度为 $\hbar/mc$ 的区域内。

这就解释了出现含磁矩的相互作用项($-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathscr{H}$ 相互作用，自旋-轨道相互作用)和出现展延的电荷分布(达尔文项)的原因.

最后，我们注意到：对于在原点是奇异的势(例如 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{M}\times\boldsymbol{r}/r^3$ 或 $\varphi=-\frac{Ze}{r}$)，严格地说，应用非相对论近似是不合理的，因为在 $r=0$ 的邻域，$e\boldsymbol{A}/m$ 和 $e\varphi/m$ 并不是很小.如果这一节描述的逐次逼近法充分地继续下去，就会在非相对论哈密顿量中出现一些在原点有足够奇异的项，这些项对能量的贡献是无限的. 解决此困难的办法已在上面的讨论中提到. 在非相对论哈密顿量中，$\boldsymbol{A}$和φ 由它们在某一区域(线度约为 $\hbar/mc$)的平均值代替. 假如非相对论近似确实是合理的，则我们这样作相当于对计算过程中遇到的所有奇异表达式中的奇异性进行截断处理，截断的地点离原点约为 $\hbar/mc$. 为了使非相对论近似能应用于上面考虑的两种情况，下面的条件是充分的[1]:

$$e|\boldsymbol{A}|\ll mc^2,\quad e\varphi\ll mc^2$$

(在$r=\hbar/mc$ 处).

VI. 负能解和正电子理论

36. 电荷共轭解的性质

§ 19 所规定的电荷共轭概念在下面的讨论中对我们是有用的. 电荷共轭是反线性的，而且在如下两个波函数之间是

---

1) 如果 m_N 是原子核的质量，则 $|\boldsymbol{M}|\simeq Ze\hbar/m_Nc$. 在 $r=\hbar/mc$ 处，$\frac{eA}{mc^3}$ 的量级是 $(e^2/\hbar c)(Zm/m_N)$，即$10^{-5}\sim10^{-6}$. 所以，我们对超精细结构耦合的计算是完全合理的. 考虑§ 34 的例子，$e\varphi/mc^2$ 的量级为 $Ze^2/\hbar c$. 所以，如果 $Z\ll137$，则计算是适用的.

互逆对应，这两个波函数描述两个质量都为m但电荷相反(一个为$+e$，另一个为$-e$)的粒子在相同的电磁势$(\boldsymbol{A},\varphi)$中的运动。

若第一个粒子的物理量用$Q(e)$来描写，则第二个粒子的同一物理量用$Q(-e)$描写。因此，两者的动量都用$\boldsymbol{p}\equiv -i\nabla$描述，而能量在一种情况下由

$$H(e)\equiv \boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})+\beta m+e\varphi$$

描述；在另一情况下由

$$H(-e)\equiv \boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})+\beta m-e\varphi$$

描述。

考虑某一解$\Psi(\boldsymbol{r},t)$和它的电荷共轭解$\Psi^C(\boldsymbol{r},t)$。我们要比较一下这些解所描写的状态的物理性质。已知

$$\Psi^C=K_C\Psi, \tag{20.203}$$

其中，K_C是方程(20.124)规定的反线性算符。符号$\langle Q\rangle$代表Q在状态Ψ中的平均值，而$\langle Q\rangle_C$代表同一算符在状态Ψ^C中的平均值。假定Ψ和Ψ^C是已归一化的，我们有

$$\langle Q\rangle=\langle\Psi|Q|\Psi\rangle$$
$$\langle Q\rangle_C=\langle\Psi^C|Q|\Psi^C\rangle.$$

由关系式(20.203)得到

$$\langle Q_C\rangle=(\langle\Psi|K_C^\dagger)(QK_C|\Psi\rangle)$$
$$=\langle\Psi|(K_C^\dagger QK_C)|\Psi\rangle^*=\langle\Psi|(K_C^\dagger Q^\dagger K_C)|\Psi\rangle$$

由此得到平均值之间的关系式：

$$\langle Q\rangle_C=\langle(K_C^\dagger Q^\dagger K_C)\rangle. \tag{20.204}$$

利用这个关系式和反么正变换K_C的性质，可找到状态Ψ中和电荷共轭态中的平均值之间的关系：

$$\langle\beta\rangle_C=-\langle\beta\rangle \quad \langle\boldsymbol{\alpha}\rangle_C=\langle\boldsymbol{\alpha}\rangle \quad \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_C=-\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$$
$$\langle\boldsymbol{r}\rangle_C=\langle\boldsymbol{r}\rangle \quad \langle\boldsymbol{p}\rangle_C=-\langle\boldsymbol{p}\rangle \quad \langle\boldsymbol{L}\rangle_C=-\langle\boldsymbol{L}\rangle$$
$$\langle P(\boldsymbol{r}_0)\rangle_C=\langle P(\boldsymbol{r}_0)\rangle \quad \langle\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)\rangle_C=\langle\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)\rangle \quad \langle\boldsymbol{J}\rangle_C=-\langle\boldsymbol{J}\rangle$$

$$\langle H(-e)\rangle_C = -\langle H(e)\rangle. \qquad (20.205)$$

可以看出：**互为电荷共轭的两个解在空间各处有相同的几率密度和流密度**，因而有相反的电荷密度和电流密度，**有相反的能量**，即电荷共轭改变了能量的正负号.

37. 负能解的不平常行为

作了这些准备之后，我们就能够详细地讨论负能问题.

先考虑自由粒子的情况. 在§23中已给出狄拉克方程的解. 能谱由两个连续带 $(-\infty,-mc^2)$ 和 $(mc^2,+\infty)$ 构成，两带被一间隔 $2mc^2$ 分开(图20.2a). 其中的第一带对应负能态：$E=-E_p=-\sqrt{m^2+p^2}$；第二带对应正能态.

我们来研究自由波包的运动. 即将证明：一般地说，只有在平均的意义上才能认为波包的中心沿着经典轨迹运动. 为此，我们积分海森堡"表象"中的运动方程：

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\mathrm{i}[H,\boldsymbol{r}]=\boldsymbol{\alpha} \qquad (20.206)$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}}{\mathrm{d}t}=\mathrm{i}[H,\boldsymbol{\alpha}]=\mathrm{i}(H\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\alpha}H)-2\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}H$$

$$=2\mathrm{i}\boldsymbol{p}-2\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}H, \qquad (20.207)$$

$\boldsymbol{p}$ 和 H 是不随时间而变的常量. 方程(20.207)是容易积分的，得到

$$\boldsymbol{\alpha}(t)=\left(\boldsymbol{\alpha}(0)-\frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}Ht}+\frac{\boldsymbol{p}}{H}.$$

因此，我们明显地得出 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}$ 对 t 的依赖性. 方程(20.206)是容易积分的，得到

$$\boldsymbol{r}(t)=\boldsymbol{r}(0)+\frac{\boldsymbol{p}}{H}t+\mathrm{i}\left(\boldsymbol{\alpha}(0)-\frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\frac{\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}Ht}}{2H}. \qquad (20.208)$$

方程(20.208)将 t 时刻的海森堡"表象"中的算符 $\boldsymbol{r}$ 表述为算符 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{\alpha}$ 在初始时刻 $t=0$ 的取值的函数. 由此得到任意的波包中心 $\langle \boldsymbol{r} \rangle$ 的运动规律. 将它和经典规律

$$\boldsymbol{r}_{\mathrm{cl}}(t) = \boldsymbol{r}_{\mathrm{cl}}(0) + \left(\frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)_{\mathrm{cl}} t.$$

相比较是有益的. 自由波包不是经典的匀速直线运动，而是一种复杂的运动，这是由于附加了速度为 $\langle \boldsymbol{p}/H \rangle$ 的匀速直线运动项和迅速振荡运动项

$$\left\langle \mathrm{i}\left(\boldsymbol{\alpha}(0) - \frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\frac{\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}Ht}}{2H} \right\rangle,$$

而引起的. 振荡项的振幅和周期的量级分别为 $\hbar/2mc$ 和 $\hbar/2mc^2$. 这个振荡运动称为"擅动（zitterbewegung）".

如果波包仅由正能或仅由负能波叠加而成，则"擅动"项变为0. 为了看出这一点，只要证明

$$\dot{\Gamma}_{\pm}\left(\boldsymbol{\alpha} - \frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\frac{\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}Ht}}{2H}\Gamma_{\pm} = 0;$$

就足够了，其中 Γ_+ 和 Γ_- 分别是到正能态和负能态上的投影算符[定义(20.195)]. 进而可得

$$[H, \boldsymbol{\alpha}] = 2\boldsymbol{p} - 2\boldsymbol{\alpha}H$$

$$[\Gamma_{\pm}, \boldsymbol{\alpha}] = \pm\frac{\boldsymbol{p}}{E_p} \mp \boldsymbol{\alpha}\frac{H}{E_p},$$

因为 $H\Gamma_{\pm} = \pm E_p\Gamma_{\pm}$，所以导出:

$$0 \equiv \Gamma_{\pm}[\Gamma_{\pm}, \boldsymbol{\alpha}]\Gamma_{\pm} = \Gamma_{\pm}\left(\frac{\boldsymbol{p}}{H} - \boldsymbol{\alpha}\right)\Gamma_{\pm},$$

利用 H 与 Γ_+, Γ_- 对易这事实，由此就可得出已经提及的性质. 所以"擅动"是由于波包的正能分量和负能分量之间的相干造成的.

"擅动"是负能的一个奇妙的效应，但它本身并不构成一

种困难. 当研究没有负能态成份的波包运动时就出现了困难. 此时,"擅动"是不存在的,波包中心描写的是速度为

$$v = \left\langle \frac{p}{H} \right\rangle = -\left\langle \frac{p}{E_p} \right\rangle$$

的匀速直线运动,即在动量 $\langle p \rangle$ 的反方向上运动. 特别是,在非相对论极限下($H \simeq -mc^2$),得到 $V = -\frac{\langle p \rangle}{m}$,即粒子似乎有负质量($-m$)的行为.

在研究静场中的波包运动时,这困难变得更为明显.

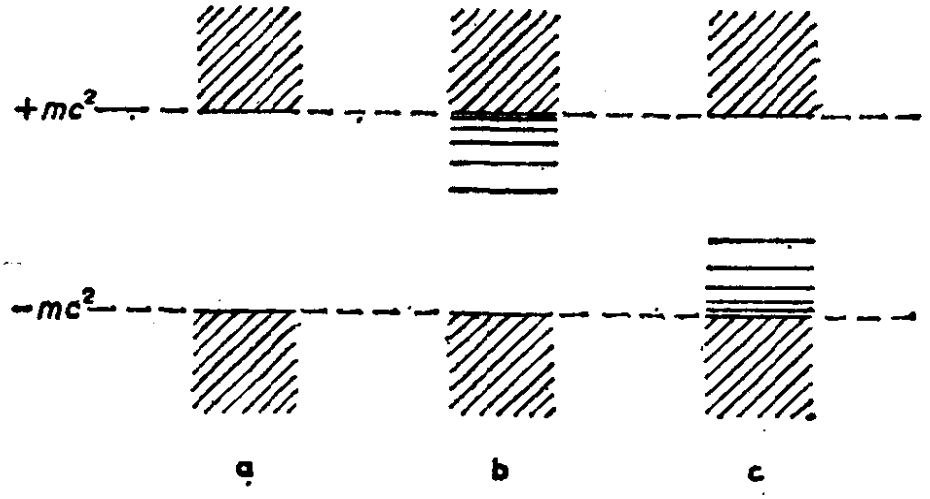


图 20.2 狄拉克电子的能谱:(*a*) 自由运动,(*b*) 吸引势 $-\frac{Ze^2}{r}$,(*c*) 排斥势 $\frac{Ze^2}{r}$.

例如考虑吸引库仑势$\left(-\frac{Ze^2}{r}\right)$中的一个电子. 能谱(参看图 20.2*b*)由连续的正能带 $(mc^2, +\infty)$,一系列低于 mc^2 的正能级,连续的负能带 $(-\infty, -mc^2)$ 组成. 图示负能态时要记住: 按电荷共轭,它们对应同质量反电荷粒子(即正电子)在同一势中的状态,或者相当于对应排斥势 $\frac{Ze^2}{r}$中的电子态. 在这样的对应中,能量变了号,而且小分量和大分量彼此交换,

但几率密度和流密度保持不变[参看方程(20.205)]. 在排斥势 Ze^2/r 中的电子能谱画在图 20.2*c* 中. 排斥势中的正能连续谱对应于吸引势中的负能连续谱.

我们考虑负能波包在势 $-\frac{Ze^2}{r}$ 中的运动. 设非相对论近似是适用的 ($Ze^2 \ll 1$, 能量近于 $-mc^2$). 此波包的运动与电荷共轭对应的正能波包的运动相同. 特别是, 在非常低速的极限下, 经典近似适用(参看 § 6.5), 而且波包中心的运动实质上是经典电子在反号势中的运动, 即**负质量**($-m$)**的粒子**在势 $-Ze^2/T$ 中的运动: 速度与动量方向相反, 加速度与力的方向相反. 这样的情况在实验上还从来没有观测到.

38. 负能态的重新解释"空穴"和正电子理论

就其本身而论, 负能解是没有物理意义的. 如果能够使正能态和负能态之间完全不耦合, 则负能态是完全可略去的. 然而, 事情并不是这样.

例如, 考虑正能态 E_+ 上的一个自由电子, 并使它在时间间隔 $(0, t)$ 内处于频率为 ω 的射频场中. 如果 t 足够长, 场的强度又不太大, 则所产生的效应可用 § 17.6 的方法计算. 可以看出: 电子跃迁到 $E_+ + \hbar\omega$ 或 $E_+ - \hbar\omega$ 的几率是不为零的. 特别是, 如果

$$\hbar\omega > E_+ + mc^2,$$

则后一种跃迁是到负能态上的跃迁.

作为另一个例子, 我们考虑氢原子的全部能谱(图 20.2*b*). 由于电子与电磁场的耦合, 使得从原子的一个给定状态到另一个能量更低的状态的辐射跃迁几率总是不为零. 后果是: 氢原子束缚态上的一个电子, 即使它是孤立的情况, 也会发生量子跃迁而到达负能态上, 并发射一个或几个光子; 又

因为能级是没有下界的，所以氢原子不可能有稳定态[1]。

为了避免这些困难，狄拉克作了下面的假设：在所谓的“真空”中，所有负能态都被电子占满。由于所有负能态都被占据，而电子又遵从费米-狄拉克统计，所以加到这个“真空”上的电子必需处于正能态上。

所以“真空”表现为一种密度无限大的完全简并的费米气体。其次，还假定它是完全不可观测的，不产生任何引力的或电磁的效应。一个给定状态的可观测的物理性质将是这状态的和这真空的之差。因此，观测到的系统（电子＋真空）的电荷等于系统总电荷与“真空”电荷之差，即电子电荷。类似地，观测到的系统的能量等于总能量与“真空”能量之差，也就是电子的能量。至此，我们用这种方式重新定义了真空，进而重新解释了可测量的物理量。这样做所带来的唯一后果是：由于不相容原理[2]，向负能态的跃迁被禁止。

我们现在考虑，当负能“海”丢失一个电子时，我们会观测到什么呢？应用上面所说的有关可观测量的物理性质的约定，可以断定：这个“空穴”的电荷与所丢失的电子的电荷相反，它也有反号的能量（即正能量）和反方向的动量。不管所丢失的那个电子是否在哈密顿量的本征态中，这些考虑都是成立的，特别是，如果这丢失的电子形成一个以速度 v 运动的波包，则这个“空穴”将以同样的速度运动但有反方向的动量。所以，这个“空穴”的作用有如一个质量为 $+m$ 但电荷为 $-e$ 的粒子。这样的粒子已在自然界中观察到，称之为**正电子**。

在电磁场或其他适当的微扰作用下，电子可以从负能“海”跃迁到正能态上。一个负能的“空穴”表现为一个正电子。

1）克莱因提出了一个著名佯谬，它以另一种方式显示出：存在一种跃迁几率不为零的通向负能态上的跃迁。克莱因佯谬在很多专著中都有详细说明，例如参看本书第一卷§ 1.1 的注释中提到的玻恩的著作。

2）特别是，“擅动”效应自动地被消除。

因此在这样的转变中，产生了一对正反粒子. 实验上已观察到正电子-电子对的产生.

类似地，如果负能海有一个“空穴”，则正能态的某个电子可以跃迁到这个未被占据的负能态上并放出光子. 实验上也已观察到电子-正电子对湮灭并发射光子的现象.

39. “空穴”理论的困难

上面简要地描述的“空穴”理论使狄拉克理论与不存在负能态、存在正电子、存在正负电子对的产生和湮灭等实验事实协调起来. 因此，它成为理论向前发展的重要一步. 然而，它也有一系列的局限和困难.

首先，它是不完备的. 由于假定负能态几乎全部被占据，**这个理论不再是单粒子理论了**，即使它的目的在于描述单电子. 因而，单粒子的狄拉克理论的陈述形式(如我们在本章中所叙述的)不足于描写这样的一种情况，只能在场论的框架内，人们有希望作出一种自洽的描述.

空穴理论仅仅是迈向正确的量子化电子场理论的第一步. 它的优点是提供了一个简单的图象，因此可作为一种正确理论的导引，但言之过甚时，就会出现矛盾和困境.

例如，上面规定的真空是由无限数目的电子组成，但又假定这些电子没有相互作用，这是不自洽的.

这个理论的另一个弱点是电子和正电子处于明显地不对称的地位. 人们也能够构造出一种相应的电荷共轭理论，在其中正电子扮演粒子的角色，而电子扮演空穴的角色，这样并不对物理结论带来任何改变. 在场论形式中，从方程对电荷共轭的不变性出发，所有这些困难都可以避免.

最后还要注意到，甚至负能态的定义也与所用的电磁势有关. 在 § 37 所考虑的两种情况中，即自由粒子和库仑场中

的粒子，负能态的空间是不相同的．例如，当氢原子基态波函数展开成平面波级数时，人们就会得到一项虽弱但不为零的来自负能平面波的贡献．在上述的“真空”定义中，所讨论的负能态正是属于这些自由粒子的．当场不存在时，这样来定义真空的确是很自然的．外电磁场的引入改变了这“真空”的状态(粒子对产生)，真空像一种可极化的介质那样在起作用，在此方式下，“真空”中的粒子电荷似乎比它实际的要小一些．这样的效应也可以在场论中找到．空穴理论预言了这些效应，但给不出一个可靠而自洽的方法来计算这些效应．

证明的附注(参看 § 20.17)

为了完全准确，对所讨论的宇称问题应该像下面这样来提出．正时洛伦兹群的变换 S 和洛伦兹变换算符群 $G^{(a)}$ 的两个变换对应，即 S' 和 S''．它们分别由两个宇称算符 P' 和 P'' 来表述，其中，$P'=c'\gamma^0P^{(0)}$，$P''=c''\gamma^0P^{(0)}$，$c'=-c''$．集合 (c',c'') 决定了粒子的**固有宇称**．依照 § 13 的讨论，存在两个可能的固有宇称，即(+1，−1)和(−1，+1)，它们与群 $G^{(a)}$ 的两个不等价不可约表示对应．因为我们在这里只涉及单个粒子，所以，固有宇称的这种标记方式是有些“学究式的”．但在量子场论中，当必须考虑几种不同粒子之间的相互作用时，上面的作法就是切题的．

如果选定的洛伦兹算符群是 $G^{(b)}$ 而不是 $G^{(a)}$ (参看 § 20.11 末和 § 20.13 的注释)，也能应用类似的处理．会再次看到：固有宇称有两个可能值，即 $(+i,-i)$ 和 $(-i,+i)$．

应注意，与文献上经常提到的相反，旋量的固有宇称的可能数目不是 4 个，而是 2 个．

练 习 和 问 题

1．证明：如果 ψ' 满足 A^μ 场的克莱因-戈登方程，则满足连续性方

程的流 4 矢量是

$$j^\mu = \frac{\mathrm{i}}{2m}\left[\Psi^*(D^\mu\Psi) - \Psi(D^\mu\Psi)^*\right] \equiv \frac{\mathrm{i}}{2m}$$

$$\times\left[\Psi^*(\partial^\mu\Psi) - \Psi(\partial^\mu\Psi^*)\right] - \frac{e}{m}\,A^\mu\Psi^*\Psi$$

（参看问题 4.1）.

2．考虑一氢原子，在其中的电子由遵从克莱因-戈登方程的同质量、同电荷的粒子来代替．因此，分立谱的能级由如下的本征值方程决定:

$$\left[\triangle + m^2 - \left(E - \frac{e^2}{r}\right)^2\right]\Psi(r) = 0.$$

证明: 这个方程可用分离角度和径向变量的方法精确地求解，而且分立谱的能级与量子数 n, l 的依赖关系是

$$E^{nl} = m\left(1 + \frac{e^4}{(n - s_l)^2}\right)^{-1/2} \quad s_l = l + \frac{1}{2} - \left[\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - e^4\right]^{1/2}$$

$$[n = 1,2,\cdots,\infty; \quad l = 0,1,\cdots,n-1].$$

将这能谱与非相对论薛定谔理论给出的进行比较.

3．证明表 1(§ 10)规定的所有 γ^A 矩阵（不必是么正的）的行列式为 1.

4．若 B 是 § 10 结尾所规定的矩阵，则可以证明 $BB^* = B^*B = -I$ [首先证明:

(i) BB^*是单位矩阵的某一倍数，因此，$BB^* = B^*B = \pm I$;

(ii) 无论对用来定义 B 的 4 个么正矩阵 γ^μ 的那一种体系而言，BB^*是相同的.]

5．证明§19定义的(反么正)电荷共轭算符 K_C 有下列性质:

$$K_C p_\mu K_C^\dagger = -p_\mu, \quad K_C J_{\alpha\beta} K_C^\dagger = -J_{\alpha\beta}$$

$$K_C P K_C^\dagger = -P, \quad K_C K_T K_C^\dagger = -K_T.$$

由这些式子出发，再利用 § 17 所作的有关变换算符相位的选择，推出: K_C 与平移算符，固有洛伦兹变换算符对易，而与空间反射算符，时间反演算符反对易．相位选择需作怎样的修改才能使 K_C 与所有这些变换算符对易?

6．从狄拉克哈密顿量出发，导出海森堡“表象”中的算符 r 和 π 的运动方程(20.147)和(20.148)．类似地导出方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\pi})+\frac{1}{2}\sigma\right]=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F},\quad \frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{F}\equiv e\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\mathscr{E}},$$

其中，$\boldsymbol{F}$ 是“洛伦兹力”：$\boldsymbol{F}\equiv e(\boldsymbol{\mathscr{E}}+\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{\mathscr{H}})$；将这些与经典电动力学方程(20.22)和(20.21′)相比较．

7．在无场的情况下，狄拉克方程的任何解都是克莱因-戈登方程的解．举反例说明逆叙述是不成立的．

8．证明恒等式(20.169)．

9．将动量为 $\boldsymbol{p}$(方向沿正轴)的狄拉克平面波按自由球面波展开．

10．对氢原子波函数作系统的研究，让径向函数 F 和 G 彼此相乘．检验 $n'=0$ $\left(\therefore J=n-\frac{1}{2}\right)$和 $l=n-1$ 所对应的能级．可以得到(采用§27的符号)

$$E_{n,n-1/2}=m\left(1-\frac{e^4}{n^2}\right)^{1/2}$$

$$F=Cst.\times\rho^s e^{-\rho},\quad G=-\nu F,$$

其中，

$$s=\sqrt{n^2-e^4},\quad \kappa=me^2/n,\quad \rho=\kappa r,\quad \nu=\kappa/(E+m)\simeq e^2/2n.$$

11．用§27描述的方法计算狄拉克理论所预言的氢原子能级．

12．将狄拉克理论给出的氢原子能级的精细结构和克莱因-戈登理论对同质量，同电荷的粒子在同样的库仑场中运动(参看问题22.2)时给出的结果作比较．

13．针对氢原子能级 $2s_{1/2}$，$2p_{1/2}$，$2p_{3/2}$，用(20.202)式给出的 $H_{n.r.}$ 计算 $\frac{v^2}{c^2}$ 阶的相对论修正．证明在此近似下，状态 $2s_{1/2}$ 和 $2p_{1/2}$ 仍有相同的能级，并与精确处理(§27)得到的结果作比较．

第二十一章　场的量子化　辐射理论

1. 引言

这最后一章的目的有二：一方面，使读者熟悉量子化场的概念，并为量子场论(它的物理意义，成功之处和局限性)提供一个导引；另一方面，给出有关电磁辐射量子论以及电磁辐射与原子系统或核系统耦合的初等处理.

我们采用已经用于粒子系统的非相对论量子理论中的同一方法来建立场的量子理论. 这个方法以对应原理为基础并从经典场的哈密顿正则形式出发. 唯一的不同是：现在要把这个方法应用到无限自由度的系统上. 这样得到的陈述形式称为哈密顿形式.

这种形式的主要缺点是它在形式上不是协变的[1]. 从经典场的协变方程出发并采用使这些方程的协变特征不受破坏的量子化方法，将理论纳入完全的协变形式也是可能的. 这样的形式在实用和概念两方面都有无可置疑的好处. 由于表达式自动地具有简洁和对称的形式，使很多计算具有简单的特征. 不过，协变形式需要构造复杂的数学框架，而哈密顿形式使用比较熟悉的概念，比较适于初学.

本章分四节，前两节讨论最简单类型的场(实标量场). 第1节论述自由场，在其中我们给出经典场及其变异的量子化

---

1) 这显然并不意味着相对论原理被违背. 然而，这理论的相对论不变性不是先验地就显然成立的，而是需要证明的. 本书未给出这个证明.

方法，给出态矢量空间的定义以及相应的量子态的解释. 在第II节，我们考虑这种场与粒子系统的耦合，借助这简单模型来考查场与原子系统或核系统相互作用的特征性质. 这一节所处理的那些应用是为了说明量子场论的方法、物理意义和困难而挑选出来的. 最后两节讨论电磁辐射. 在第III节中，我们回顾经典理论. 在第IV节中，我们简要地论述量子理论及其应用. 有关标量场的大多数讨论和技巧很容易推广到辐射场的情形，对后一情况只作很简要的重述，着重注意两者的差异。这种差异起源于电磁势具有矢量的特征以及光子质量为零这个事实[1].

---

1) 关于量子电动力学，已有很多论著. 我们特别列举下面一些著作: W. Heitler, *The Quantum Theory of Radiation* (Oxford University Press, *second edition*, 1944); A. I. Akhiezer 和 V. B. Berestetsky, *Quantum Electrodynamics* (*translated from the Russian by* Consultants Bureaux Inc. (1956)); J. M. Jauch 和 F. Röhrlich, *The Theory of Photons and Electrons* (Addison Wesley, Cambridge, 1956); N. N. Bogoliubov 和 D. V. Shirkov, *Introduction to The Theory of Quantized Fields* (*translated from the Russian by* G. M. Volkoff; Interscience Publishers Inc., New York, 1959); S. S. Schweber, *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory* (Row, Peterson and Company, 1961); W. E. Thirring, *Principles of Quantum Electrodynamics* (*translated from the German by* J. Bernstein; Academic Press, New York, 1958). Heitler 的书采用哈密顿形式并论述这理论在原子物理中的主要应用. Akhiezer 和 Berestetsky 的书以及 Jauch 和 Röhrlich 的书对协变形式给出了很完整的说明，对应用也作了很完整的评述. Bogoliubov 和 Shirkov 的书以及 Schweber 的书(采用更完整的方式)都是在协变形式下对量子场论作了统一的阐述，包括对重正化问题和场论中有关因果性问题的详尽讨论. Thirring 的书对协变形式作了全面的考查，并详细地讨论了它的物理意义和困难. 关于场算符的可测量性也可以查阅 N. Bohr 和 L. Rosenfeld 的经典性文章，*Det. Klg. Danske Viddenskab. Selskab.* **12**, No. 8(1933) 以及 *Phys. Rev.* **78** (1950) 794.

I. 实标量场的量子化

2. 经典自由场　简正振动

在每一时刻 t，一个实经典标量场由它在空间中的每一点 $\boldsymbol{r}$ 的振幅来确定. 可以把它看作是一个具有无限自由度的动力学系统. 每一个空间点都对应系统的一个特定的坐标，这就是场在这一点的振幅.

这样一个系统的动力学与有限自由度系统的动力学在本质上并无差别. 然而，由于这些坐标是用**连续**参数（例如点 $\boldsymbol{r}$ 的三个分量 x, y, z）来标记，所以对时间的微分要用偏微分来代替. 系统的演化由如下形式的运动方程决定:

$$\ddot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t) \equiv \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = F[\Phi(\boldsymbol{r}, t), \dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)],$$

其中，F 是振幅 $\Phi(\boldsymbol{r}, t)$ 及其偏导数 $\dot{\Phi} \equiv \partial\Phi/\partial t$（两者取同一时刻 t）的泛函. 如果我们已知它在初始时刻 t_0 的位置和速度，即它的坐标 $\Phi(\boldsymbol{r}, t_0)$ 和时间导数

$$\dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t_0) \equiv \left.\frac{\partial\Phi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t}\right|_{t=t_0}.$$

则任一给定时刻的系统动力学态也就被决定了.

在对非齐次洛伦兹群变换是不变的各种方程中，最简单的是克莱因-戈登方程:

$$[\Box + \mu^2]\Phi \equiv \ddot{\Phi} - \Delta\Phi + \mu^2\Phi = 0. \qquad (21.1)$$

这个方程对 Φ 是线性齐次的，它是自由场的运动规律. μ 是一个常量. 以后我们会看到，μ 就是与量子化场相联系的粒子的质量(§21.6).

如果方程 (21.1) 左边不出现 $\Delta\Phi$ 项，则系统的各个坐标的运动是彼此独立的，每一个坐标都会作频率为 μ 的简谐振

荡，但振幅和位相与初始条件有关. $\Delta\Phi$ 项使这些简谐振荡耦合起来.

正如我们就要证明的，引入简正坐标后，这样一组互相耦合的振子可以变换为一组互相独立的振子.

用 $f_1, f_2, \cdots\cdots$ 代表 r 的实函数的一个完备正交集，它们满足厄密算符$(-\Delta)$的本征值方程，相应的本征值谱展延于 0 到 $+\infty$. 与函数 f_i 对应的本征值用 k_i^2 表示. 所以，我们有

$$(\Delta + k_i^2)f_i = 0 \tag{21.2}$$

$$\int f_i(\boldsymbol{r})f_j(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta_{ij} \tag{21.3}$$

$$\sum_i f_i(\boldsymbol{r})f_i(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'). \tag{21.4}$$

由正交性和封闭关系式(21.3)和(21.4)得到下面的展开式：

$$\Phi(\boldsymbol{r}, t) = \sum_i q_i(t)f_i(\boldsymbol{r}) \tag{21.5}$$

$$q_i(t) = \int f_i(\boldsymbol{r})\Phi(\boldsymbol{r}, t)\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{21.6}$$

$q_1, q_2, \cdots\cdots q_i \cdots\cdots$就是所需要的简正坐标. 由方程(21.6)和(21.1)得到

$$\ddot{q}_i + \omega_i^2 q_i = 0, \tag{21.7}$$

其中

$$\omega_i = (k_i^2 + \mu^2)^{\frac{1}{2}}. \tag{21.8}$$

因此，每个 q_i 的运动方程实际上是独立的谐振子方程，其频率为 ω_i. 依照方程(21.5)，场振幅是这些独立振子的线性叠加.

在以上的所有陈述中，我们假定了基函数 f 可用分立指标标记. 实际上，由于算符$(-\Delta)$的谱是连续的(从 0 展延到 $+\infty$)，所以这些函数与一组指标有关，其中至少有一个是连续的. 对连续指标，也很容易重复上面所作的分析，除了少数

几处明显的、但在这里不详细讨论的修改，所得结果本质上仍是相同的。然而，连续指标的存在或多或少地使量子处理复杂化。为了避免这些非本质的复杂性，我们将假定：场局限在一个有限的空间体积内，它在这个体积的表面上满足适当的边界条件，而且我们所要计算的物理量可以从我们真实地计算的量通过无限地增大这个体积的办法来得到。这类技巧已在 § 5.11 作过描述。它显然不是严格的。还要注意到，它以一种人为的方式部分地破坏了理论的不变性。

3. 自由场的量子化

上面这种过渡到简正坐标的处理提出一种非常简单的将实标量场量子化的方法。其要领在于将经典场的每一个简正振动模式与同频率的量子振子联系起来（参考第 12 章）。

让我们用简正坐标写出经典哈密顿量。设 p_i 是与 q_i 共轭的动量。因此，方程(21.7)等价于下面的哈密顿方程：

$$\dot{q}_i = p_i, \quad \dot{p}_i = -\omega_i^2 q_i.$$

这些式子也可以从第 i 个自由度取如下形式的哈密顿量

$$h_i = \frac{1}{2}(p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2), \tag{21.9}$$

来得到。因而，总哈密顿量的表达式是：

$$H = \sum_i h_i. \tag{21.10}$$

用遵从对易关系 ($\hbar = 1$)

$$[q_i, p_j] = i\delta_{ij}. \tag{21.11}$$

的可观测量代替实动力学变量 q_i 和 p_i，就可以得到相应的量子化场。

这里的每一振动模式都与一系列分立的等间隔的能级相对应，这些能级的公式是

$$E_{n_i} = \left(n_i + \frac{1}{2}\right)\omega_i \ (n_i = 0, 1, 2, \cdots, \infty). \tag{21.12}$$

在此引入分别用b_i和$b_i^\dagger$表示的湮灭算符和产生算符是方便的:

$$\begin{aligned} b_i &= (2\omega_i)^{-\frac{1}{2}}(\omega_i q_i + \mathrm{i}p_i) \\ b_i^\dagger &= (2\omega_i)^{-\frac{1}{2}}(\omega_i q_i - \mathrm{i}p_i). \end{aligned} \tag{21.13}$$

可观测量之间的对易规则 (21.11) 等价于下面的厄密共轭算符之间的对易规则:

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}. \tag{21.14}$$

h_i 的本征矢量由 $b_i^\dagger$ 重复作用于基态本征矢量来得到[参看方程(12.20)].

取部分哈密顿量 $h_1, h_2, \cdots\cdots h_i \cdots\cdots$的本征态作张量积就得到$H$的本征态的完全集. 部分哈密顿量的各个状态用量子数 $n_1, n_2, \cdots\cdots$标记;总能量是部分能量之和:

$$E_{n_1 n_2 \cdots n_i \cdots} = \sum_i \left(n_i + \frac{1}{2}\right)\omega_i. \tag{21.15}$$

H的归一化本征矢量可用下述公式从基态矢量 $|0\rangle$ 得出:

$$|n_1 n_2 \cdots n_i \cdots\rangle = \prod_i \frac{(b_i^\dagger)^{n_i}}{(n_i!)^{\frac{1}{2}}}|0\rangle. \tag{21.16}$$

点 $\boldsymbol{r}$ 处的场是一厄密算符 $\Phi(\boldsymbol{r})$, 由下式确定:

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_i q_i f_i(\boldsymbol{r}), \tag{21.17}$$

此式是用对应原理从经典关系式(21.5)导出的.

用 b_i 和 $b_i^\dagger$表达 Φ 是有用的. 从方程(21.3)和(21.17)得到

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_i (2\omega_i)^{-\frac{1}{2}}(b_i + b_i^\dagger) f_i. \tag{21.18}$$

至此, 场表现为量子化振子的一个集合. 在上面所考虑的定态情况中, 每一个量子数 n 代表某一特定的简正模式的振动量子数目. 但我们也可以给出H的本征态,更一般地说, 给出系统的算符, 这些算符的粒子解释的要点曾在 § 12.6 中

陈述过。n_i 就代表能量为 ω_i 的状态 f_i 中的粒子数目；它是某个算符 N_i，即"状态 f_i 的粒子数"算符的本征值，N_i 由下式确定：

$$N_i = b_i^\dagger b_i. \tag{21.19}$$

其中，b_i 是状态 f_i 的粒子湮灭算符，$b_i^\dagger$ 是状态 f_i 的粒子产生算符。

只有当给定的动力学态的总能量是出现在这个态上的粒子的能量之和时，刚才的解释才是自洽的。正如 § 12.6 已经注意到的，只要在(21.10)式右边求和号内的每一 h_i 项中去掉常数项 $\frac{1}{2}\omega_i$，就足以做到这一点。哈密顿量作这样的修改显然对运动方程不发生影响，而且新的哈密顿量具有所期望的性质，即

$$H = \sum_i N_i\omega_i. \tag{21.20}$$

特别是，真空是一个能量为零的态，即刃矢 $|0\rangle$ 所代表的状态。类似地，矢量 $b^\dagger|0\rangle$ 代表有一个粒子的状态，其能量就是这个粒子的能量 ω_i。

这里所考虑的粒子是不可区分的，而且总系统的动力学态完全由占居在各个态 $f_1, f_2, \cdots\cdots f_i \cdots\cdots$ 上粒子数 $n_1, n_2, \cdots\cdots n_i$ 决定。这些"占居"数可取 0 至 $+\infty$ 之间的任一整数。所以，这样的粒子遵从玻色-爱因斯坦统计(参看 § 14.6)，这样的量子化场代表一个数目不确定的**玻色子系统**。

我们通过讨论有关系统基态的问题来结束这一小节。量子化场的真空极不同于经典真空。在经典场的情况下，所谓真空，或最低能态，是指场处处为零的状态。在量子化场的情况下，给定点的场 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 是一个算符，它与哈密顿量不对易。由 b_i 和 $b_i^\dagger$ 的性质，很容易看出 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 的真空期望值为零，但

它的均方偏差却不为零. 实际上，利用场的表达式(21.18)可得

$$\langle \Phi^2(\boldsymbol{r})\rangle_0 \equiv \sum_i \sum_j \frac{1}{2}(\omega_i\omega_j)^{-\frac{1}{2}}\langle 0|b_i + b_i^\dagger)(b_i + b_j^\dagger)|0\rangle f_i(\boldsymbol{r})f_i(\boldsymbol{r}),$$

又由于

$$\langle 0|(b_i + b_i^\dagger)(b_j + b_j^\dagger)|0\rangle = \langle 0|b_ib_j^\dagger|0\rangle = \delta_{ij},$$

我们得到

$$\langle \Phi^2\rangle_0 = \sum_i \frac{f_i^2(\boldsymbol{r})}{2\omega_i}.$$

上式右边是由正项组成的级数，因此是一非零正量. 事实上可以证明这个级数是发散的.[1] 发散量的出现是无限自由度系统的特征，也是量子场论中一系列困难的根源. 在第 II 节中，我们将再次回到这问题上来.

4. 场的拉格朗日函数 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 的共轭动量

在继续讨论之前，让我们再回到经典场，并简要地叙述一下将拉格朗日和哈密顿形式推广到无限自由度系统的问题. 如果坐标用一组分立的指标标记，则这样的推广是一目了然的. 我们在讨论简正坐标时所用的就是这样的推广. 如果坐标依赖于连续指标，尤其是，场的“位置”用它在空间各点的振幅来确定时，则情况变得复杂. 我们现在感兴趣的正好是坐标的这种选择.

拉格朗日函数 L 是系统的坐标和速度分量的函数. 在现在的情况下，它是 Φ 和 $\dot{\Phi}$ 的泛函. 我们假定它可用下式表述：

$$L = \int \mathscr{L}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{21.21}$$

---

1) 另一方面，这场对有限体积积分得出有限的涨落. 此涨落随积分体积的减小而增加. 在积分体积为 0 的极限情况下，它趋于无穷.

拉格朗日密度 $\mathscr{L}$ 通过 Φ，Φ 的梯度的三个分量，$\dot{\Phi}$ 而依赖于 r、t：

$$\mathscr{L} \equiv \mathscr{L}\left(\Phi, \frac{\partial \Phi}{\partial x^k}, \dot{\Phi}\right).$$

知道 L 就可确定作用量积分：

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L\mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}r \mathscr{L}. \tag{21.22}$$

I 是 $\Phi(r,t)$的某一泛函．由最小作用量原理[见方程(1.12)]

$$\delta I = 0 \quad (\text{设 } \delta\Phi(t_1) = \delta\Phi(t_2) = 0) \tag{21.23}$$

可得到运动方程． 由关系式(21.22)清楚地看出：**如果在洛伦兹群变换下，$\mathscr{L}$ 象标量一样变换**，则运动规律遵从相对论原理． 加在 $\mathscr{L}$ 上的这个条件使寻找拉格朗日函数变得比较容易．

在现在情况下，拉格朗日方程由振幅 $\Phi(r,t)$ 的偏微分方程替代．这个方程很容易从最小作用量原理导出：

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\Phi}} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x^k}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\partial\Phi/\partial x^k)} - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \Phi} = 0. \tag{21.24}$$

这就是场的运动方程．

为了严格地决定场坐标，必须设想整个空间被分割成很多无穷小的基元，每一个基元 $(r, r + dr)$ 与系统的一个坐标(即量 $\Phi(r, t)dr$) 相对应． 运动定律决定这些坐标作为时间函数的变化情形． 按通常的定义，坐标 $\Phi(r, t)dr$ 的共轭动量由 $\mathscr{L}$ 对速度分量 $\dot{\Phi}(r, t)dr$ 的泛函导数给定，即

$$\Pi(r, t) \equiv \frac{\delta L}{\delta \dot{\Phi}(r,t)\mathrm{d}r} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\Phi}}. \tag{21.25}$$

这里所用的泛函导数概念是偏导数概念的自然推广． δL 是当 $\dot{\Phi}$ 在点 r 邻近一个小体积 dr 内作无穷小量改变 $\delta\dot{\Phi}$ (但在空间的其余各点 $\dot{\Phi}$ 保持不变)时 L 的变分．

既然对每个坐标都定义了共轭动量，那末应用通常的定义[方程(1.13)]可得出哈密顿函数 H. 它是 Φ 和 Π 的泛函:

$$H \equiv H[\Phi, \Pi] \equiv \int \Pi \dot{\Phi} \mathrm{d}\boldsymbol{r} - L,$$

或者

$$\begin{aligned} H &= \int \mathscr{H} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \\ \mathscr{H} &\equiv \mathscr{H}\left(\Phi, \frac{\partial \Phi}{\partial x^k}, \Pi\right) = \Pi \dot{\phi} - \mathscr{L}. \end{aligned} \tag{21.26}$$

我们称 $\mathscr{H}$ 为哈密顿量密度. 哈密顿正则方程 [参看方程(1.14)]如下:

$$\begin{aligned} \dot{\phi} &= \frac{\delta \mathscr{H}}{\delta \Pi} \\ \dot{\Pi} &= -\frac{\delta \mathscr{H}}{\delta \Phi} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta \mathscr{H}}{\partial(\partial \Phi / \partial x)}. \end{aligned} \tag{21.27}$$

在自由标量场的情况下，函数

$$\begin{aligned} \mathscr{L} &= \frac{1}{2}\left[(\partial_\mu \Phi)(\partial^\mu \Phi) - \mu^2 \Phi^2\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\dot{\Phi}^2 - (\nabla \Phi)^2 - \mu^2 \Phi^2\right] \end{aligned} \tag{21.28}$$

可取作拉格朗日密度，因为此式代入方程(21.24)中能得到方程 (21.1).

在这种情况中，Φ 的共轭动量是

$$\Pi = \dot{\Phi}. \tag{21.29}$$

利用定义(21.26)，得到哈密顿函数:

$$H = \frac{1}{2}\int (\Pi^2 + (\mathrm{grad}\Phi)^2 + \mu^2 \Phi^2) \mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{21.30}$$

上面确定的函数 H 与方程 (21.10) 以简正坐标写出的相同. 为了证明这一点，只要将 Φ 和 Π 按 q_i 和 p_i 展开的式子代

替它们本身并利用 f 的那些性质. Φ 的展开式由方程(21.5)给定,至于 Π 的展开式,由(21.25)得到:

$$\Pi(\boldsymbol{r}, t)\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \frac{\delta L}{\delta \dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)} = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\delta \dot{q}_i}{\delta \dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)}.$$

因为按定义,$p_i = \partial L/\partial \dot{q}_i$;又按方程(21.6),得

$$\dot{q}_i = \int f_i(\boldsymbol{r})\dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)\mathrm{d}\boldsymbol{r},$$

由此有

$$\frac{\delta \dot{q}_i}{\delta \dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)} = f_i(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r},$$

所以我们得到

$$\Pi(\boldsymbol{r}, t) = \sum_i p_i f_i(\boldsymbol{r}). \tag{21.31}$$

上述的那些代换给出

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \left[p_i p_j \int f_i f_j \mathrm{d}\boldsymbol{r} + q_i q_j \int (\nabla f_i \cdot \nabla f_j)\mathrm{d}\boldsymbol{r} + \mu^2 q_i q_j \int f_i f_j \mathrm{d}\boldsymbol{r} \right]. \tag{21.32}$$

作分部积分并利用方程(21.2),得到

$$\int (\nabla f_i \cdot \nabla f_j)\mathrm{d}\boldsymbol{r} = -\int f_i \Delta f_j \mathrm{d}\boldsymbol{r} = k_i^2 \int f_i f_j \mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

上式代入(21.32)的右边,再利用 f 的正交关系[方程(21.3)]和 ω_i 的定义[方程(21.8)],最后得到已有的结果:

$$H = \frac{1}{2} \sum_i (p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2).$$

[我们记得此式与表达式(21.20)相差一个无穷大常数].

为了把场量子化,不论我们取 q_i 和 p_i,还是取 b_i 和 $b_i^\dagger$ 或 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 和 $\Pi(\boldsymbol{r})$ 作基本的变量,结果都不应该有什么不同. Φ

和Π的对易关系有特别简单的形式。这对易关系可从b和$b^\dagger$的对易关系得到。方程(21.13)给出：

$$p_i = \frac{1}{2} i \sqrt{2\omega_i}(b_i^\dagger - b_i).$$

此式代入展开式(21.31)，得到

$$\Pi(\boldsymbol{r}) = \sum_i \frac{1}{2} i \sqrt{2\omega_i}(b_i^\dagger - b_i) f_i. \tag{21.33}$$

利用展开式(21.18)和(21.33)，b和$b^\dagger$的对易关系以及封闭关系(21.4)，得到下面的对易关系：

$$\begin{aligned} &[\Phi(\boldsymbol{r}), \Phi(\boldsymbol{r}')] = [\Pi(\boldsymbol{r}), \Pi(\boldsymbol{r}')] = 0 \\ &[\Phi(\boldsymbol{r}), \Pi(\boldsymbol{r}')] = i\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'). \end{aligned} \tag{21.34}$$

5. 复基函数

在上一小节，我们已看到不利用简正坐标而怎样使场量子化。不过，利用简正坐标通常能使计算和量子化场的解释简化。由于(−△)的本征值是简并的，所以在基函数和简正坐标的选择上有很大的任意性。

另外，经过一个非常简单的推广，有可能借助复基函数将场量子化.在这一小节,我们先说明这个更一般的量子化方法,然后证明所得到的量子化场与基函数的选择无关.

用$u_1, u_2, \cdots\cdots u_s, \cdots\cdots$代表一种基函数的完全正交集，$\omega_i$是相应的能量。于是[参看方程(21.2—4)和(21.8)]有，

$$\int u_s^* u_t d\boldsymbol{r} = \delta_{st} \quad \sum_s u_s(\boldsymbol{r}) u_s^*(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{21.35}$$

$$(\Delta + k_s^2) u_s = 0 \tag{21.36}$$

$$\omega_s = (k_s^2 + \mu^2)^{\frac{1}{2}}. \tag{21.37}$$

每一个模式u_s与两个厄密共轭算符a_s和$a_s^\dagger$相联系。这些算符遵从的对易规则是[参看方程(21.14)]

$$[a_s, a_t] = [a_s^\dagger, a_t^\dagger] = 0,$$
$$[a_s, a_t^\dagger] = \delta_{st}, \tag{21.38}$$

这些使我们能构造出系统的动力学态空间. 一个量子化谐振子就这样和一个模式 u_s 联系起来. a_s 和 $a_s^\dagger$ 分别解释为状态 u_s 中粒子的湮灭算符和产生算符. 系统的可观测量是湮灭算符和产生算符的函数. 特别是, 可观测量

$$N_s \equiv a_s^\dagger a_s$$

描述状态 u_s 中的粒子数. 场 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 由下面的开展式[参看方程(21.18)] 给定:

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_s (2\omega_s)^{-\frac{1}{2}}(a_s u_s(\boldsymbol{r}) + a_s^\dagger u_s^*(\boldsymbol{r})), \tag{21.39}$$

共轭动量 $\Pi(\boldsymbol{r})$ 由展开式[参看方程(21.33)]

$$\Pi(\boldsymbol{r}) = \sum_s \frac{1}{2}\mathrm{i}(2\omega_s)^{+\frac{1}{2}}(a_s^\dagger u_s^*(\boldsymbol{r}) - a_s u_s(\boldsymbol{r})) \tag{21.40}$$

给定. 支配系统演化的哈密顿量是[参看方程 (21.20)]

$$H = \sum_s a_s^\dagger a_s \omega_s. \tag{21.41}$$

我们现在建立 a 及 $a^\dagger$ 和 § 3 中的算符 b 及 $b^\dagger$ 的关系, 并且证明这里确定的系统实际上与 § 3 所确定的量子系统相同.

我们已经用 s 代表区分各个 u 函数的量子数集合. 按约定, 这集合包括一个决定能量的量子数以及用来区分对应同一能量值的那些函数的附加量子数集合 σ. 我们用波数 k 标记能量:

$$\omega = (k^2 + \mu^2)^{\frac{1}{2}}. \tag{21.42}$$

因此,

$$S \equiv (k, \sigma).$$

类似地，区别各个 f 函数的量子数集合 i 包括用来确定能量的波数 k 和某个附加量子数集合 ρ，即 $i \equiv (k, \rho)$.

从 $f_{k\rho}$ 函数(对应某一给定的 k 值)过渡到 $u_{k\sigma}$ 函数 (对应同样的 k 值)是利用幺正变换

$$u_{k\sigma} = \sum_{\rho} T_{\sigma\rho} f_{k\rho}, \quad f_{k\rho} = \sum_{\sigma} (T^{\dagger})_{\rho\sigma} u_{k\sigma} \tag{21.43}$$

$$(T \equiv \text{幺正矩阵})$$

来实现. 所有下面出现的量都将和一个完全确定的 k 值相联系，我们以后就略去指标 k.

展开式(21.18) 和 (21.39) 代表同一算符 $\Phi(r)$ 以及展开式(21.33) 和 (21.40) 代表同一算符 $\Pi(r)$ 的充分和必要条件是：对任意的 k 值，都有

$$\sum_{\sigma} a_{\sigma} u_{\sigma} = \sum_{\rho} b_{\rho} f_{\rho}.$$

考虑到(21.43)的第二式，上式可等价地写成

$$a_{\sigma} = \sum_{\rho} T^{*}_{\sigma\rho} b_{\rho}, \tag{21.44}$$

或

$$a^{\dagger}_{\sigma} = \sum_{\rho} T_{\sigma\rho} b^{\dagger}_{\rho}. \tag{21.44†}$$

因此，一方面我们建立了 a 和 b 之间的对应关系. 另一方面又建立了 $a^{\dagger}$ 和 $b^{\dagger}$ 之间的对应关系. 这种对应是线性的，更准确地说，产生算符 $b^{\dagger}$ 和 $a^{\dagger}$ 之间的线性对应关系 [(21.44)式]与 f 和 u 之间的线性对应关系 [方程 (21.43)] 是恒同的.

从关系式(21.44)和(21.44†)可以得出：展开式(21.18)和(21.39) 代表同一个场 $\Phi(r)$. 为了保证这两个场量子化的方法是等价的，我们要求这样确定的 a 和 $a^{\dagger}$ 遵从对易关系(21.38)，而且要求方程(21.20)确定的哈密顿量 H 可通过展开式 (21.41)而用算符 a 和 $a^{\dagger}$ 表述. 利用 T 矩阵的幺正性很容

易证明这两点. 我们从后一性质得到: 对每一 k 值，都有

$$[a_\sigma, a_{\sigma'}^\dagger] = \sum_{\rho\rho'} T_{\sigma\rho}^* T_{\sigma'\rho'} [b_\rho, b_{\rho'}^\dagger]$$

$$= \sum_{\rho\rho'} T_{\sigma\rho}^* T_{\sigma'\rho'} \delta_{\rho\rho'} = \delta_{\sigma\sigma'},$$

由此有

$$[a_s, a_{s'}^\dagger] = \delta_{ss'}.$$

类似地，对每一 k 值，都有

$$\sum_\sigma a_\sigma^\dagger a_\sigma = \sum_{\rho\rho'} \sum_\sigma T_{\sigma\rho} T_{\sigma\rho'}^* b_\rho^\dagger b_{\rho'}$$

$$= \sum_{\rho\rho'} \delta_{\rho\rho'} b_\rho^\dagger b_{\rho'} = \sum_\rho b_\rho^\dagger b_\rho,$$

由此我们得到所期望的 H 的表达式.

6. 平面波　动量的定义

在各种复基函数集合当中，平面波是值得重视的一种. 正如下面要证明的，它们与动量完全确定的各个状态相对应.

为了引入分立的指标，我们假定场被局限在边长为 L 的立方体中，而且要求函数 u_s 在立方体边界上是周期性的，即

$$u_s\left(\frac{1}{2}L, y, z\right) = u_s\left(-\frac{1}{2}L, y, z\right),$$

以及两个类似的关于 y 和 z 的方程. 这些条件是 § 5.11 描述过的周期性条件的一种简单推广.

因此，我们可以取平面波作为基函数:

$$u_k = L^{-3/2} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}. \tag{21.45}$$

其波矢量的分量是 $\frac{2\pi}{L}$ 的整倍数:

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}.$$

取 n_x, n_y, n_z 的所有可能的整数值

$$n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots$$

就得到基函数的正交完备集。对每一个平面波，我们有一个湮灭算符 a_k 和一个产生算符 $a_k^\dagger$ 与之相联系。场 $\Phi(r)$ 由下面的展开式表达[参看方程 (21.39)]:

$$\Phi(r) = \sum_k (2\omega_k L^3)^{-\frac{1}{2}}(a_k e^{ik\cdot r} + a_k^\dagger e^{-ik\cdot r}), \quad (21.46)$$

其共轭动量是[参看方程 (21.40)]:

$$\Pi(r) = \sum_k i\left(\frac{\omega_k}{2L^3}\right)^{\frac{1}{2}}(a_k^\dagger e^{-ik\cdot r} - a_k e^{ik\cdot r}), \quad (21.47)$$

哈密顿量是[参看方程 (21.41)]:

$$H = \sum_k (a_k^\dagger a_k)\omega_k, \quad (21.48)$$

上面的求和遍及 k (即 n_x, n_y, n_z) 的所有可能取值。

正如在 § 5.11 所作的说明一样，让 L 无限地增加就得到正确的结果。在取这种极限时，求和号被积分号代替。在小区域 $(k, k+\delta k)$ 中，包含着 n_x, n_y, n_z 这三个数的 $(L/2\pi)^3\,\delta k$ 个可能的值。如果我们假定取极限 $L \to \infty$ 时，求和号中的各项可当作 k 的连续函数处理，则每一个求和号 Σ 可用积分号

$$\int \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk.$$

代替，其中 $\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$ 是波矢量空间中的态密度。通常使用**能级密度**一词，它是单位能量间隔、单位立体角内的状态数目。能级密度 $\rho_L(\omega')$ 是能量的函数。波矢量在立体角 $(\Omega, \Omega+d\Omega)$ 内而能量在 $(\omega, \omega + d\omega)$ 之中的状态数目 $\rho_L d\Omega d\omega$ 由下式给定:

$$\rho_L \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}\omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2 \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega} \mathrm{d}\omega \mathrm{d}\Omega$$

$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \omega k \mathrm{d}\omega \mathrm{d}\Omega.$$

故

$$\rho_L(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \omega k \tag{21.49}$$

[参看方程 (17.52)].

事实上,完全可以避免使用立方体这种人为办法,而是从延展于整个空间的平面波出发. 那么,波矢量 $\boldsymbol{k}$ 就可取所有的值,不再有什么限制. 所论及的波依赖于三个**连续指标** k_x, k_y, k_z. 用克罗内克符号表述的归一化就被 δ 函数表述的归一化所替代.

因此,取下面的函数作为基函数:

$$u(\boldsymbol{k}) \equiv u(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{r}) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{(2\pi)^{3/2}},$$

其中每一个都与厄密共轭算符 $a(\boldsymbol{k})$ 和 $a^\dagger(\boldsymbol{k})$ 相联系. 各个有关公式都可在上面公式的基础上按如下的规则得到: 各处的 u_k 用 $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} u(\boldsymbol{k})$ 代替, a_k 用 $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} a(\boldsymbol{k})$ 代替,符号 Σ 用 $\int \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d\boldsymbol{k}$ 代替. 因此,基函数的特征性质可写成 [参看方程 (21.35—37)]:

$$\int u^*(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{r}) u(\boldsymbol{k}'; \boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')$$

$$\int u(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{r}) u^*(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{r}') \mathrm{d}\boldsymbol{k} = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$$

$$(\Delta + k^2) u(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{r}) = 0$$

$$\omega(k) = (k^2 + \mu^2)^{\frac{1}{2}}.$$

算符 a 和 $a^\dagger$ 的对易关系是[参看方程 (21.38)]:

$$[a(\boldsymbol{k}), a(\boldsymbol{k}')] = [a^\dagger(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = 0$$
$$[a(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}').$$

场量 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 和 $\Pi(\boldsymbol{r})$ 由积分式表述 [参看方程 (21.39) 和 (21.40)]:

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{\sqrt{2\omega}} (a(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + a^\dagger(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}})$$

$$\Pi(\boldsymbol{r}) = (2\pi)^{-3/2}\,\mathrm{i}\int\sqrt{\frac{\omega}{2}}\,\mathrm{d}\boldsymbol{k}(a^\dagger(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - a(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}),$$

哈密顿量是[参看方程 (21.41)]:

$$H = \int a^\dagger(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k})\omega(\boldsymbol{k})\,\mathrm{d}\boldsymbol{k}.$$

尚需建立场动量 $\boldsymbol{W}$ 和平面波展开之间的关系.

按定义,矢量算符 $\boldsymbol{W}$ 与公式 (15.41) 给定的无穷小变换有关. 在有限平移 $\mathscr{T}(\boldsymbol{a})$ 变换下 (§15.9 的符号),点 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0$ 处的场振幅算符 $\Phi(\boldsymbol{r}_0)$ 变换为点 $(\boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{a})$ 处的场振幅算符 $\Phi(\boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{a})$,其中 $\boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{a}$ 是 $\boldsymbol{r}_0$ 通过平移得到的[1]. 类似地,$\Pi(\boldsymbol{r}_0)$ 变换为 $\Pi(\boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{a})$. 把可观测量的这个变换规律应用于 $\boldsymbol{a}$ 是一个无穷小矢量 $\boldsymbol{\epsilon}$ 的情况中,我们就得到

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{W}, \Phi(\boldsymbol{r}_0)] &= \mathrm{i}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla\Phi|_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0} \\ [\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{W}, \Pi(\boldsymbol{r}_0)] &= \mathrm{i}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla\Pi|_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0}.\end{aligned} \tag{21.50}$$

由于这些对易规则对任意的 $\boldsymbol{r}_0$ 都必须成立,所以 $\boldsymbol{W}$ 被确定到一个相加常矢量未定. 因此,$\boldsymbol{W}$ 在 x 轴上的分量 W_x 除一个相加常数外是确定的算符,由下面的对易关系给定:

---

1) 注意和 §15.9 定义的 (参看 (15.36) 式附近的注释) 可观测量 x 的变换规律的差别. 这里的 $\boldsymbol{r}_0$ 是确定空间点的参数,而在该处的场振幅是可测量的.

$$[W_x, \Phi(r_0)] = \mathrm{i}\left.\frac{\partial \Phi}{\partial x}\right|_{r=r_0} \tag{21.51}$$

$$[W_x, \Pi(r_0)] = \mathrm{i}\left.\frac{\partial \Pi}{\partial x}\right|_{r=r_0}, \tag{21.52}$$

如果

$$W_x = -\int \Pi \frac{\partial \Phi}{\partial x}\,\mathrm{d}r + Cst. \tag{21.53}$$

则上面的对易关系式成立. 对上式分部积分得出等价的表达式:

$$W_x = \int \frac{\partial \Pi}{\partial x}\Phi\,\mathrm{d}r + Cst. \tag{21.54}$$

公式 (21.53) 代入 (21.51) 的左边，并考虑到对易关系 (21.34)，得到

$$\left[-\int \Pi(r)\frac{\partial \Phi(r)}{\partial x}\mathrm{d}r, \Phi(r_0)\right]$$

$$= -\int [\Pi(r), \Phi(r_0)]\frac{\partial \Phi(r)}{\partial x}\mathrm{d}r$$

$$= \mathrm{i}\int \delta(r - r_0)\frac{\partial \Phi(r)}{\partial x}\mathrm{d}r$$

$$= \mathrm{i}\left.\frac{\partial \Phi}{\partial x}\right|_{r=r_0}.$$

类似地; 如果我们用公式 (21.54) 代替 W_x，则可证明关系式 (21.52) 是成立的.

能写出对 W_y, W_z 的类似公式. 因此,我们得到了 $\boldsymbol{W}$ 的三个分量，其中有一常数未定. 要求 $\boldsymbol{W}$ 是一个矢量就能确定这个常数. 从而得到场动量的下述等价表达式:

$$\boldsymbol{W} = -\int \Pi(\nabla\Phi)\mathrm{d}r \tag{21.55}$$

$$= + \int (\nabla \Pi)\Phi \, d\boldsymbol{r}. \tag{21.56}$$

[注意，在形式上经典理论也能引出相同的动量定义].

现在用 a_k 和 $a_k^\dagger$ 算符表述 $\boldsymbol{W}$. 为此，方程 (21.55) 右边的 Φ 和 Π 用其相应的展开式[方程 (21.46) 和 (21.47)] 代替，并利用平面波的正交关系，得到

$$\boldsymbol{W} = \frac{1}{2} \sum_k \boldsymbol{k}(a_k^\dagger a_k + a_k a_k^\dagger - a_k a_{-k} - a_{-k}^\dagger a_k^\dagger),$$

或者考虑到 a 和 $a^\dagger$ 的对易关系而得到

$$\boldsymbol{W} = \sum_k (a_k^\dagger a_k)\boldsymbol{k} + \frac{1}{2} \sum_k \boldsymbol{k}(1 - a_{-k} a_k - a_{-k}^\dagger a_k^\dagger).$$

求和号 Σ_k 表示对所有可能的 $\boldsymbol{k}$ 值求和. 在上式的第二个求和中，当 $\boldsymbol{k} \to -\boldsymbol{k}$ 时，圆括号内的表达式不变. 给定的一个 $\boldsymbol{k}$ 和 $(-\boldsymbol{k})$ 所对应的两项相差一个符号，于是第二求和变为零.这样就有

$$\boldsymbol{W} = \sum_k (a_k^\dagger a_k)\boldsymbol{k}. \tag{21.57}$$

由此式我们容易得到 $\boldsymbol{W}$ 与 a 及 $a^\dagger$ 的对易关系:

$$[\boldsymbol{W}, a_k] = -\boldsymbol{k} a_k \tag{21.58}$$

$$[\boldsymbol{W}, a_k^\dagger] = +\boldsymbol{k} a_k^\dagger. \tag{21.59}$$

如果我们假定状态 u_k 中的粒子动量是 $\boldsymbol{k}$，则公式 (21.57—59) 有简明的解释. 因为 $(a_k^\dagger a_k)$ 是状态 u_k 中的粒子数，公式 (21.57) 简洁地表明: 场的总动量等于构成它的所有粒子的动量之和. .类似地，关系式 (21.58) 和 (21.59) 就和 a_k 和 $a_k^\dagger$ 分别是动量为 $\boldsymbol{k}$ 的粒子湮灭算符和产生算符的解释一致. 实际上，如果 $|\boldsymbol{W}\rangle$ 是本征值为 $\boldsymbol{W}$ 的总动量本征矢量，则从方程 (21.58) 可知，矢量 $a_k|\boldsymbol{W}\rangle$ (它是非零矢量，即场至少包含一个动量为 $\boldsymbol{k}$ 的粒子)满足下面的本征值方程:

$$W a_k|W\rangle = a_k(W-k)|W\rangle = a_k(W-k)|W\rangle$$
$$-(W-k)a_k|W\rangle.$$

用同样的方式，可从方程 (21.59) 得到

$$W a_k^\dagger|w\rangle = (w+k)a_k^\dagger|w\rangle.$$

注意，动量为 k 的粒子的能量是 $\omega = (k^2+\mu^2)^{1/2}$. 因此，**它们是质量为 μ 的粒子.**

7. 球面波　角动量的定义

平面波是很常用的基函数. 然而，球面波也是有用的. 此时基函数的形式为

$$u_{klm} = Cst.j_l(kr)Y_l^m(\theta,\varphi) \qquad (21.60)$$

它依赖于一个连续指标 k 和二个分立指标 l 和 m. 为了使指标都是分立的. 可让场局限于半径为 R 的球内，并且要求基函数在球面上为零. 让 R 无限地增大，就得到正确的结果.

上一小节所作的全部分析都可以对这些新基函数重复进行. 因此，可引入球面波 u_{klm} 描述的状态中的粒子湮灭算符和产生算符 a_{klm} 和 $a_{klm}^\dagger$. 可以证明：正如平面波所描述的是动量完全确定的状态一样，球面波所描述的是角动量完全确定的状态. 场的总角动量 $\boldsymbol{l}$ 由下式得到，

$$\boldsymbol{l} = -\int \Pi(\boldsymbol{l}\Phi)d\boldsymbol{r} \qquad (21.61)$$

其中 $\boldsymbol{l}$ 代表算符 $-i(\boldsymbol{r}\times\nabla)$ 并从左边作用在函数 Φ 上：

$$\boldsymbol{l}\Phi = -i\boldsymbol{r}\times(\nabla\Phi).$$

也可以使用等价的公式：

$$\boldsymbol{l} = \int(\boldsymbol{l}\Pi)\Phi d\boldsymbol{r}.$$

a_{klm} 和 $a_{klm}^\dagger$ 分别解释为能量等于 $\omega = (k^2+\mu^2)^{\frac{1}{2}}$ 而角动量是 (lm) 的粒子的湮灭算符和产生算符. 其次，给定的 l 和 k

所对应的（$2l+1$）个算符 $a^{\dagger}_{klm}$ 是 l 阶不可约张量算符的标准分量；（$2l+1$）个算符 a_{klm} 是厄密共轭张量算符(§13.30的定义)的标准分量(但阶与符号不包括在内)。

8. 空间和时间的反演

使运动方程保持不变的各种变换当中，尚有空间和时间的反演。其中每一种都完全由场 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 及其共轭动量的变换规律决定，相应的么正或反么正变换算符被确定到相因子未定。

在**空间反演**的情况中，有关的规律是

$$\Phi(\boldsymbol{r})\to\Phi(-\boldsymbol{r}),\quad \Pi(\boldsymbol{r})\to\Pi(-\boldsymbol{r}). \tag{I}$$

这个规律是标量场的特征。与这变换相对应的算符 S_0 是么正的(因此，场的对易关系在变换中是不变的)。因为理论中的所有算符都是 Φ 和 Π 的函数，所以从(I)很容易导出它们在空间反射时的变换规律。特别是，对于和平面波相联系的算符 a 和 $a^{\dagger}$，按照我们对这些算符所作的解释，可得

$$\begin{aligned} S_0 a_k S_0^{\dagger} &= a_{-k} \\ S_0 a_k^{\dagger} S_0^{\dagger} &= a_{-k}^{\dagger}. \end{aligned} \tag{II}$$

在**时间反演**的情况中，场 Φ 保持不变，但它的速度变号。因此变换规律是:

$$\Phi(\boldsymbol{r})\to\Phi(\boldsymbol{r}),\qquad \Pi(\boldsymbol{r})\to-\Pi(\boldsymbol{r}). \tag{I'}$$

由于作这样的变换时，场的对易关系变号，所以这个变换对应的算符 K 是**反么正的**。从(I')可毫不困难地得到平面波所联系的算符 a 和 $a^{\dagger}$ 的变换规律；依照我们对这些算符所作的解释，有

$$\begin{aligned} K a_k K^{\dagger} &= a_{-k} \\ K a_k^{\dagger} K^{\dagger} &= a_{-k}^{\dagger}. \end{aligned} \tag{II'}$$

所以，在作空间反演和时间反演时，这些产生算符和湮灭算符

以同一方式变换．然而，必须记住，不能混淆这两个变换：一个是么正的，另一个是反么正的．

关系式(I)或(II)和(I′)或(II′)分别决定了 S_0 和 K(相因子未定)．为了消除相因子上的任意性，我们要求，矢量 $|0\rangle$ 对所有这些变换都是不变的：

$$S_0|0\rangle = |0\rangle, \quad K|0\rangle = |0\rangle.$$

II. 场与原子系统的耦合

9. 场与粒子系统的耦合

我们现在考虑场与一个粒子相互作用．当用若干粒子组成的系统代替这单粒子时，下面论述的大部分内容无需作改动．

整个系统(粒子＋场)的动力学变量是各个子系统的基本变量的函数．为了简单起见，设粒子是无自旋的，我们取它的位置矢量 $\boldsymbol{R}$ 和动量 $\boldsymbol{p}$ 为基本变量．对于场的基本变量，我们可取成 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 和 $\Pi(\boldsymbol{r})$，或者是类似于上一小节所定义的产生和湮灭算符的完全集．以后我们经常使用与平面波解相联系的算符 a 和 $a^\dagger$(参看§6)．

整个系统的状态张成一个空间，它是粒子的态空间 $\mathscr{E}_{\text{part}}$ 与自由场的态空间 $\mathscr{E}_{\text{field}}$ 的乘积：

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_{\text{part}} \otimes \mathscr{E}_{\text{field}}.$$

总系统的哈密赖量是三项之和：

$$H = H_{\text{part}} + H_{\text{field}} + H'. \tag{21.62}$$

如果两个子系统完全不耦合，则上式前两项分别决定各个子系统的演化．最后一项代表相互作用能．

H_{field} 是自由场的哈密顿量．上面已给出了几个等价的表达式．我们应特别注意方程(21.48)．H_{part} 是粒子的哈密

顿量，它决定粒子在 Φ 场不存在时的演化．设所考虑的粒子处于一势中，它的质量用 M 代表．又假定

$$M \gg \mu,$$

而且粒子的运动可用非相对论近似处理，即

$$H_{\text{part}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} + V(R). \tag{21.63}$$

剩下的是确定 H'．假设相互作用正比于粒子所在地点 $\boldsymbol{R}$ 处的场振幅，就得到 H' 的最简单的可能表达式：

$$H' = g\Phi(\boldsymbol{R}) \tag{21.64}$$

$$= gL^{-3/2}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}(a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} + a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}). \tag{21.64'}$$

其中，g 是无量纲的常数，通常称为**耦合常数**．利用展开式 (21.46)，可从 H' 的第一表达式得到第二表达式．

这个特定的相互作用形式可从相对论不变性的考虑而几乎唯一地决定．然而这里所讨论的理论从一开始就包含着非相对论的近似．这不仅是因为 H_{part} 缺乏相对论原理所要求的协变性质，而且也因为单粒子的物质系统(更一般地说，是粒子数确定的系统）这个概念本身在相对论量子力学中不再是正确的．在选取 H' 时，必须注意理论的这两个限制．在第二十章中所作的狄拉克方程的非相对论近似的讨论，可当作现在探讨的一个指导．在那里已指出：质量为 M 的非相对论粒子与场的相互作用不是定域相互作用［如方程 (21.64) 给出的］，而是一种和粒子所在点邻域 $\left(\text{线度为}\ \frac{1}{M}\right)$ 中场的各种取值有关的相互作用．这启示我们应该用下式代替 H' 的表达式 (21.54)：

$$H' = g\int \Phi(\boldsymbol{r})\rho(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}|)d\boldsymbol{r}, \tag{21.65}$$

其中，$\rho(\boldsymbol{r}) \equiv \rho(r)$ 是实的球对称函数．满足归一化条件

$$\int \rho(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} \equiv 4\pi \int_0^\infty \rho(r)r^2 dr = 1,$$

而且它主要集中于原点周围、半径为 $\frac{1}{M}$ 的区域中（参看21.1a）．方程(21.65)右边的 $\rho(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}|)$ 若用 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})$ 代替，则得到(21.64)．

我们把如下定义的函数 $C(k)$ 称为截断函数：

$$C(k) = \int e^{+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\rho(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}.$$

$C(k)$ 是实的球对称函数，并满足条件

$$C(0) = 1,$$

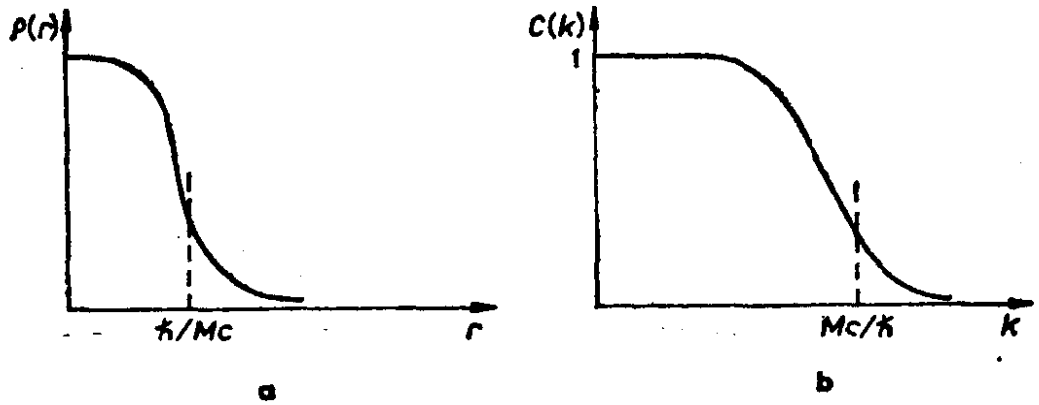


图 21.1　$\rho(r)$ 和 $C(k)$ 的形式

根据熟知的傅立叶变换的性质，它集中于点 $k=0$ 周围的半径为 M 的区域内(参看图21.1b)．将 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 的展开式(21.46)代入方程(21.65)的右边并作简短的计算，得到

$$H' = gL^{-3/2}\sum_{\boldsymbol{k}} \frac{C(k)}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}(a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} + a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}). \qquad (21.66)$$

此式与 (21.64′) 的差别仅仅在于上式的每项都出现因子 $C(k)$．这个因子去除了高频项(即 $k \gtrsim M$ 的项)对相互作用的贡献．

正如现在就要证明的，对高频作这样的遏制是与非相对论近似相一致的。展开式(21.66)的每一项都对应于，粒子传递一定大小的动量和能量给予场，或与之相反。$a_k e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}$ 项对应的是一个粒子从场那里吸收一个动量为 $\boldsymbol{k}$ 而能量为 ω_k 的粒子，$a_k e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}$ 则是场产生一个动量为 $\boldsymbol{k}$ 能量为 ω_k 的粒子，而与场耦合的粒子减少了同样多的动量和能量。当 $k \gtrsim M$ 时，动量和能量的传递是足够大的，以致质量为 M 的粒子的粒子数守恒被破坏，场可以吸收这粒子或产生另一个质量为 M 的粒子。因此，只有当高频项的贡献可忽略时，非相对论近似才是正确的，而且如果所得的结果是正确的，那么结果不会由于引入 $C(k)$ 而改变。进一步说，结果应对 $C(k)$ 的形状不敏感。在以后的计算中，我们将假定：

$$C(k)=\begin{cases}1 & \text{for } 0 \leqslant k \leqslant K\\ 0 & \text{for } k > K,\end{cases} \tag{21.67}$$

参数 k 取量级为 M 的数值。

最后，我们考查一下 H 的不变性。显然，如方程(21.65)所规定的，H' 对整个系统（场＋粒子）的任一种位移是不变的，因为容易证明它与系统的总动量 $\boldsymbol{P}+\boldsymbol{W}$ 和总角动量 $(\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P})+\boldsymbol{l}$ 对易。如果在反射操作中标量场 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 变换为 $\Phi(-\boldsymbol{r})$，则 H' 对反射也是不变的。H_{field} 也具备所有这些性质。若 $V(R)=0$，则对 H_{part} 也同样是正确的，因而对 H 也正确。如果 $V(R)\neq 0$，则 H_{part} 仅对转动和反射是不变的，那末，H 对转动和反射也是不变的，但对平移则不然。

这里所考虑的量子系统的意义在于：它以简化的形式显示出与电磁辐射场相互作用着的原子的基本性质，这里所说的粒子扮演原子的角色，而标量场扮演电磁辐射。主要的差别在于：电磁场的粒子，即光子，其质量为 0，自旋为 1；而现在所研究的场粒子，其自旋为 0，静止质量不为 0。在本节的

其余部分中，将用这样的简化模型来研究电磁场存在时原子的某些典型性质.

10. 弱耦合和微扰处理

对于足够小的 g，H' 可当作小扰动处理，从而可以应用第十六和十七两章的方法.

非微扰哈密顿量为

$$H_0 \equiv H_{\text{field}} + H_{\text{part}}.$$

在微扰论中，人们采用 H_0 是对角的表象. 我们将采用一种它的基矢可按下述方式得到的表象：用 $|\alpha\rangle$，$|\beta\rangle,\cdots|\lambda\rangle\cdots$ 代表 H_{part} 的完备正交本征矢量集，H_{part} 是 $\mathscr{E}_{\text{part}}$ 空间中的一个算符；又用 E_α，$E_\beta,\cdots E_\lambda$ 代表对应的本征能量(按能量递增次序排列). 用 $\mathscr{E}_{\text{field}}$ 空间中的粒子真空矢量 $|0\rangle$ 乘这矢量集中的某一矢量 $|\lambda\rangle$ 就得到 $\mathscr{E}$ 空间的一个矢量. 为了简化，这个矢量也用 $|\lambda\rangle$ 代表. 显然有

$$H_0|\lambda\rangle = E_\lambda|\lambda\rangle.$$

在 $\mathscr{E}_{\text{field}}$ 空间中，H_{field} 的完备正交本征矢量集可用产生算符 $a_k^\dagger$ 重复作用在矢量 $|0\rangle$ 上来得到[参看方程 (21.16)]. 以同样的方式，用产生算符 $a_k^\dagger$ 重复作用在上面规定的各个矢量 $|\alpha\rangle$，$|\beta\rangle,\cdots,|\lambda\rangle\cdots$ 上，就可以得出 $\mathscr{E}$ 空间中的 H_0 的完备正交本征矢量集，这就是所需要的基矢. 用 $|n\rangle$ 代表这些基矢中的一个，E_n 代表对应的本征能量，即

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

在动力学态 $|n\rangle$ 中，粒子处于 H_{part} 的某一本征态，而场包含着给定数目的动量完全确定的粒子.

实际上，在以下的讨论中只涉及场粒子数不多的那些矢量. 这些矢量用希腊字母标记，它们标出粒子的动力学状态和每个场粒子的波矢量. 使用这样的符号，$|\lambda k\rangle$ 就代表一个

动量为 $\boldsymbol{k}$ 的场粒子和一个处于 λ 态的粒子结合在一起的状态；而 $|\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle$ 代表两个动量分别为 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k}'$ 的场粒子和一个处于 λ 态的粒子结合在一起的状态，如此等等．注意：

$$\begin{aligned} H_0|\lambda\boldsymbol{k}\rangle &= (E_\lambda + \omega_k)|\lambda\boldsymbol{k}\rangle \\ H_0|\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle &= (E_\lambda + \omega_k + \omega_{k'})|\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle. \end{aligned} \tag{21.68}$$

还有

$$|\lambda\boldsymbol{k}\rangle = a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}|\lambda\rangle,$$

若 $\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}'$，则

$$|\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle = a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} a_{\boldsymbol{k}'}{}^{\dagger}|\lambda\rangle.$$

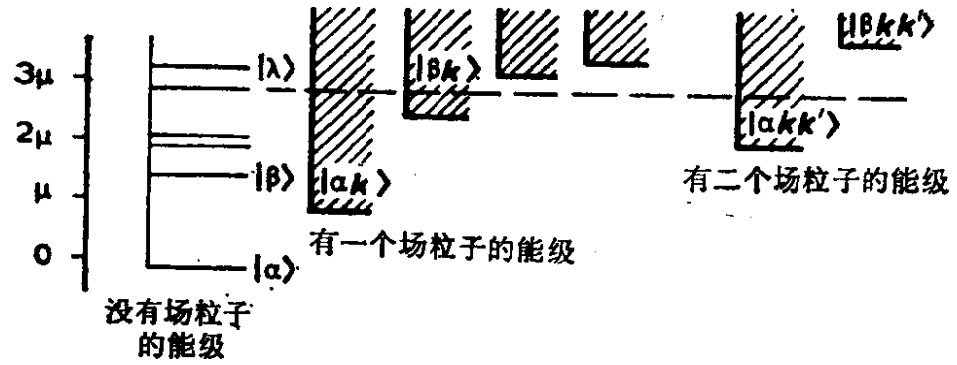


图 21.2　典型的 H_0 的最低几个能级图

图 21.2 给出哈密顿量 H_0 的最低几个能级的典型能谱图．根据画这类图解的通常习惯（参看图 11.1，12.1…等等），在基态之上的能级的高度等于这些能级的能量与基态的能量之差．因而，相同能量的能级位于同一高度．图中的能级是按它们对应的本征态的性质而分类的．在左边一列中，可找到没有任何场粒子的状态所对应的能级．其次是若干列具有一个场粒子的状态，其中每一列对应粒子的某种量子态，头一列对应粒子处于基态的 $|\alpha\boldsymbol{k}\rangle$．当取极限 $L \to \infty$ 时，它是一连续谱带，从最小值开始，此值与存在单个零动量的场粒子相对应，因而比 $|\alpha\rangle$ 能级高出 μ 值；第二列与状

态 $|\beta\boldsymbol{k}\rangle$ 对应，在那里粒子处于第一激发态，如此等等．在一个场粒子能级之后，又有二个场粒子的能级，它们也有很多列，每一列都对应着粒子的一个完全确定的量子态．如此等等．

微扰 H' 使这些能级耦合．在上面规定的表象中，这样的耦合项可用一个特别简单的矩阵描述．从 (21.66) 看出：**只有场粒子数相差为一的那些基矢之间的 H' 矩阵元不为 0**．利用产生和湮灭算符的性质，很容易计算出这些矩阵元，得到：

$$\langle\lambda|H'|\nu\boldsymbol{k}\rangle = \langle\nu\boldsymbol{k}|H'|\lambda\rangle^* = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} g\frac{C(k)}{\sqrt{2\omega_k}}\langle\lambda|U(\boldsymbol{k})|\nu\rangle \qquad (21.69a)$$

$$\langle\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'|H'|\nu\boldsymbol{k}\rangle = \langle\nu\boldsymbol{k}|H'|\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle^* = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} g\frac{C(k)}{\sqrt{2\omega_k}}\langle\lambda|U^\dagger(\boldsymbol{k}')|\nu\rangle \quad (\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{k}'). \qquad (21.69b)$$

[若 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$，(21.69b) 右边需乘 $\sqrt{2}$]．在这些表达式中我们取

$$U(\boldsymbol{k}) \equiv \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}}{(2\pi)^{3/2}}. \qquad (21.70)$$

无论怎样弱的耦合，都对能谱产生性质上的改变，因为多数束缚态变成不稳定的，可以跃迁到较低能态并发射一个或几个场粒子．例如，考虑图 21.3 所示的 $|\lambda\rangle$ 态．在同一能级上有若干连续态，即 $|\alpha\boldsymbol{k}\rangle$ 或 $|\beta\boldsymbol{k}\rangle$ 类型的单个场粒子态和 $|\alpha\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle$ 类型的两个场粒子态．很小的微扰 H' 的引入就使分立本征态与一个场粒子态耦合，一个场粒子态与二个场粒子态耦合……等等．所以，有可能引起从 $|\lambda\rangle$ 态到属于同一能级的连续态的“辐射”跃迁．$|\lambda\rangle$ 态的这些可能的衰变模式已图解在图 21.3 中．只有能量高于基态但又不足于发射一个

质量为 μ 的场粒子的那些束缚态（即能量小于 $E_\alpha+\mu$ 的状态）才能保持稳定．在图 21.2 的例子中，只有基态是稳定的．

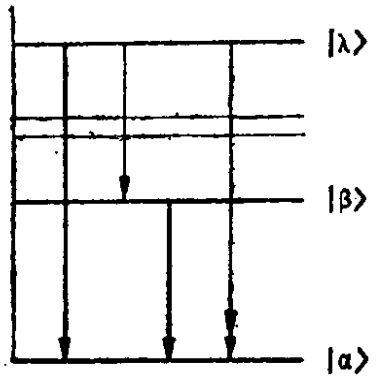


图 21.3

耦合项 H' 的存在也导致束缚态能级发生某种移位．我们将看到，这是一种二级效应．然而，它对稳定性和粒子的各种状态的衰变模式发生影响，其原因在于很小的能级移位就足于引起某种能量上许可的“辐射”跃迁（没有这种移位，发生这种跃迁是不可能的），或者引起相反的效应．

11. 能级移位

作为第一个应用，我们计算上一小节末已经提到的能级移位．这一简单的微扰计算显示出场论的主要困难，而且使我们对这理论的物理意义和局限性有所了解．

我们考虑一个稳定能级，例如基态能级，并且应用定态微扰方法计算出由于耦合项 H' 的存在而引起的能级移位．为了简单起见，设所考虑的能级是非简并的．由于 H' 具有 H_{part} 的全部不变性，所以对简并能级的处理并无根本的不同．在第一级微扰中，能级移位由公式 (16.12) 给定．从上面给出的 H' 的性质出发得到

$$\langle\alpha|H'|\alpha\rangle=0.$$

所以，计算必需取到第二级．用 δE_α 代表二级修正，得到（参看 § 16.6）

$$\delta E_\alpha=\left\langle\alpha|H'\frac{1}{E_\alpha-H_0}H'|\alpha\right\rangle. \tag{21.71}$$

我们在上面所规定的表象中计算此式．唯一的中间态是

含有一个场粒子的那些态．注意到关系式 (21.68)，(21.69a) 和 (21.70)，我们相继地得到

$$\delta E_\alpha = \sum_n \langle \alpha | H' | n \rangle \frac{1}{E_\alpha - E_n} \langle n | H' | \alpha \rangle$$

$$= \sum_\nu \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{|\langle \alpha | H' | \nu \boldsymbol{k} \rangle|^2}{E_\alpha - E_\nu - \omega_k}$$

$$= g^2 \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \sum_\nu \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{C^2(k) |\langle \alpha | U_k | \nu \rangle|^2}{2\omega_k \quad E_\alpha - E_\nu - \omega_k},$$

按 § 6 所描述的技巧，用积分代替对 $\boldsymbol{k}$ 的求和，再采用方程 (21.67) 给定的截断函数，得到

$$\delta E_\alpha = -g^2 \int_{k \leqslant K} d\boldsymbol{k} \sum_\nu \frac{|\langle \alpha | U(\boldsymbol{k}) | \nu \rangle|^2}{2\omega(\omega + E_\nu - E_\alpha)}. \qquad (21.72)$$

由于我们涉及的是基态，所以在 (21.72) 右边的求和号中，各项的能量分母都是正的．因此得到

$$\delta E_\alpha < 0,$$

分母中的 $(E_\nu - E_\alpha)$ 用它的最小值 (即 0) 代替 (E_α 是基态能量)，就得出 $|\delta E_\alpha|$ 的上限．再利用封闭关系 $\sum_\nu |\nu\rangle\langle\nu| = 1$，上式中对 ν 求和就容易进行．由于 $UU^\dagger = (2\pi)^{-3}$，所以这求和等于 $(2\pi)^{-3}/2\omega^2$．对角度积分之后得到

$$|\delta E_\alpha| < \frac{g^2}{4\pi^2} \int_0^K \frac{k^2}{\omega^2} dk. \qquad (21.73)$$

(21.73) 中的积分能严格地计算出来．因 $K \gg \mu$，所以它略比 K 小，结果为

$$|\delta E_\alpha| < \frac{g^2 K}{4\pi^2}. \qquad (21.74)$$

采用下面的方法可对 (21.72) 右边的大小作出更好的估计．若直接应用封闭关系，$U(\boldsymbol{k})$ 用其定义式 (21.70) 代替，

则得

$$\delta E_\alpha = -\frac{g^2}{8\pi^3}\int_{k\leqslant K}\langle\alpha|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}(\omega + H_{\text{part}} - E_\alpha)^{-1}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle\frac{d\boldsymbol{k}}{2\omega}. \tag{21.75}$$

么正算符 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}$ 与 $\boldsymbol{R}$ 对易，并且将 $\boldsymbol{p}$ 变换为 $(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k})$，由此得到

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}H_{\text{part}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} = \frac{(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k})^2}{2M} + V(R)$$

$$= H_{\text{part}} + \frac{k^2}{2M} - \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{k}}{M},$$

因此

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}(\omega + H_{\text{part}} - E_\alpha)^{-1}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}$$

$$= \left(\omega + \frac{k^2}{2M} + H_{\text{part}} - E_\alpha - \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{k}}{M}\right)^{-1}.$$

把此式代入 (21.75) 的右边，得到

$$\delta E_\alpha = -\frac{g^2}{8\pi^3}\int_{k\leqslant K}\langle\alpha|\left(\omega + \frac{k^2}{2M} + H_{\text{part}} - E_\alpha - \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{k}}{M}\right)^{-1}|\alpha\rangle\frac{d\boldsymbol{k}}{2\omega}.$$

上式右边括号内的 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{k}/M$ 项可忽略，因为粒子速度 $\boldsymbol{p}/M$ 在 $|\alpha\rangle$ 态的平均值远小于 1（非相对论近似）。利用这近似并对角度作积分，得到

$$\delta E_\alpha \simeq -\frac{g^2}{4\pi^2}\int_0^K \frac{k^2}{\omega^2}\left(1 + \frac{k^2}{2M\omega}\right)^{-1}dk, \tag{21.76}$$

此式与 (21.73) 式右边的差别仅表现在积分号内多一个因子 $[1+(k^2/2M\omega)]^{-1}$。由于 $\mu \ll k \approx M$，在积分区间内，这个因子约在 1 至 2/3 之间。故可写成

$$\delta E_a = -\frac{sg^2K}{4\pi^2} \quad (s\lesssim 1). \tag{21.77}$$

出现在此式中的数值常数 s 的大小也在 2/3 到 1 之间.

为了估计这效应的大小，我们就如下情况计算出它的量级： 在模型中出现的各个物理量的大小就是原子领域[1]所遇到的那些量的数量级. 因此，M 是电子的质量，g 是精细结构常数:

$$g^2 \simeq 10^{-1}. \tag{21.78}$$

相邻能级之间的距离用 D/M 表示:

$$\frac{D}{M} \simeq 10^{-4} - 10^{-5}. \tag{21.79}$$

采用这些数据后得到

$$|\delta E_a/D| \approx g^2M/4\pi^2D \approx 100.$$

由此可知这是一个很大的效应，远远大于实际观测到的移位. 这看来会使人怀疑微扰论的可用性和所得结果的物理意义.

然而，在理论和实验之间作有意义的比较时，必须考虑下面一点事实： 出现在非微扰能级计算中的质量 M 并不是实验上观测到的质量. 后者是通过测量“自由”粒子（即在势 $V(R)$ 之外的粒子）的能量和动量得到的，这样的“自由”粒子仍然与场有耦合，故测量得到的是:

$$M_{\text{exp}} = M + \delta M,$$

其中，δM 代表由于场的存在而对“自由”粒子静止能的贡献. 在现在的情形下，简短的计算给出

---

1) 由于耦合形式不相同，所以标量理论所给出的数字结果不可能和辐射量子论给出的完全一致. 为了比较相似的物理量，常数 g^2 应这样固定，使得偶极跃迁几率的大小和原子的偶极跃迁几率大小是同一量级［参看方程 (21.81) 和 (21.245)］，即 $g^2/4\pi \approx 1/137$.

$$\delta M \approx -\frac{g^2 K}{4\pi^2}.$$

更准确地说，对 δM 计算到二级微扰项就得出方程 (21.76) 右边的项(问题 21.2). 所以，能级移位几乎完全由质量的这种“重正化”[1]决定.

当用薛定谔理论或狄拉克理论计算氢原子能级时，人们用的是电子的实验质量. 这就使得电子与辐射场耦合的主要部分已被考虑在内了，这也就说明了计算出来的能谱为什么和观测到的如此一致.

“实验上观测到的移位” $\delta E'_\alpha$ 是计算的移位 δE_α 与移位 $\delta E_\alpha^{(0)}$ 之差，这里的 $\delta E_\alpha^{(0)}$ 只不过是在粒子的哈密顿量中用实验质量(亦称为“重正化”质量)代替理论质量而得到的. 在我们的模型中，“重正化”质量的这种代替与用下面的量代替 H_{part} 相一致:

$$\delta M + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2(M+\delta M)} + V(R).$$

而且实质上导致全体能级出现一整体移位 δM. 由此得到

$$\delta E_\alpha^{(0)} = \delta M \left(1 - \left\langle \alpha \left| \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M^2} \right| \alpha \right\rangle\right).$$

如果在微扰方法中，我们只取到二级，那末 $\delta E'_\alpha = \delta E_\alpha - \delta E_\alpha^{(0)}$ 的计算并不存在严重的困难，而且给出 $|\delta E'_\alpha/D|$ 的量级大小为 10^{-3}. 这是一个合理的数量级.

然而由此所得到的 $\delta E'_\alpha$ 值仍需谨慎对待，它表明对截断函数的选择是很敏感的. 一个符合实际的计算必须完全从相对论性理论出发. 的确，我们在这里遇到量子场论中的一个

---

1) 假定在 $K \approx M$ 处截断，我们得到 $\delta M/M \approx 10^{-3}$. 所以，质量的相对修正是很小的，这恰恰是使用微扰方法的前提. 然而，如果不引入截断函数，则得到的 δM 是一个发散积分. 以后我们还要回到这个困难上来.

困难问题．在现阶段，还没有完全令人满意的解决．在相对论性理论中，相互作用完全是定域的，而且可以得到 δM 的一个公式：$\delta M = ZM$，其中 Z 是发散积分（参看前一个的注）．类似地，δE_a 和 $\delta E_a^{(0)}$ 也由发散积分决定．这样一来，$\delta E_a'$ 的表达式就变为∞—∞这样的不确定型．

实际上，这种不确定性是在相对论不变性的基础上用一个特别的（ad hoc）约定来消除．由此能得到与实验[1]很一致的结果．然而，这样的计算方法的严格道理到现在还没有找到．

暂且记下这些局限性，我们还是继续对这样一个能正确地说明很多实验事实的简单模型作研究．诸如质量"正重化"这类效应只能在协变形式的框架内得到满意的处理，当它们出现时，我们就只作唯象的考虑．

12. 场粒子的发射

我们现在讨论那些因耦合项 H' 的出现而变得不稳定的态．

在这一小节中，我们应用含时间的微扰论（§ 17.4）来计算各种"辐射跃迁"的单位时间的跃迁几率．

为了确定起见，设 H_0 的能谱如图 21.2 所示，并且考虑其中的 $|\lambda\rangle$ 态．能量上许可的跃迁(图 21.3) 只有这些：跃迁到基态并发射一个或二个场粒子（$3\mu > E_\lambda - E_a > 2\mu$)；或者跃迁到第一激发态并发射一个场粒子（$2\mu > E_\lambda - E_a > \mu$)．在下面，我们只考虑发射一个场粒子的跃迁．发射两个场粒子的跃迁属于更高级的过程，若其它都相同，则它通常比一个场粒子的发射过程小 g^2 倍．所以，如果我们在微扰计算

---

1) 参看 § 20.27 末的注释．

中只取到一级为止，则可略去两个场粒子的发射.

粒子开始处于 $|\lambda\rangle$ 态. 我们要求出它在单位时间内跃迁到 $|\alpha\rangle$ 态并在立体角 $(\Omega,\Omega+d\Omega)$ 发出一个场粒子的几率，即 $\lambda\to\alpha\boldsymbol{k}$ 的单位时间跃迁几率，其中 $\boldsymbol{k}$ 是 $d\Omega$ 内的一个矢量. 在一级微扰下，这几率由下式决定[参看 (17.50)]:

$$w_{\lambda\to\alpha\boldsymbol{k}}d\Omega=2\pi|\langle\lambda|\boldsymbol{H}'|\alpha\boldsymbol{k}\rangle|^2\rho L(\omega)d\Omega, \quad (21.80)$$

其中，场粒子的能量 ω 满足能量守恒定律:

$$\omega=\omega_{\lambda\alpha}\equiv E_\lambda-E_\alpha.$$

考虑到关系式 (21.49)，(21.69a) 和 (21.70)，(21.80) 式就变为

$$w_{\lambda\to\alpha\boldsymbol{k}}=2\pi g^2\frac{|\langle\lambda|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle|^2}{2\omega}\frac{\omega k}{(2\pi)^3}$$

$$=\frac{g^2k}{8\pi^2}|\langle\lambda|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle|^2. \quad (21.81)$$

对角度积分，就得到单位时间内 $\lambda\to\alpha$ 的跃迁几率 (用 $\Gamma_{\lambda\to\alpha}$ 表示):

$$\Gamma_{\lambda\to\alpha}\equiv\int w_{\lambda\to\alpha\boldsymbol{k}}d\Omega=\frac{g^2k}{8\pi^2}\int|\langle\lambda|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle|^2d\Omega. \quad (21.82)$$

还可求出跃迁到 β 态的一个类似公式. 单位时间的总跃迁几率 Γ_λ 为

$$\Gamma_\lambda=\Gamma_{\lambda\to\alpha}+\Gamma_{\lambda\to\beta}. \quad (21.83)$$

Γ_λ 是 $|\lambda\rangle$ 态的**寿命**的倒数，由下述的半经典的论证可看出这一点. 考虑粒子的一个统计系综. 用 $N_\lambda(t)$ 代表 t 时刻处于$|\alpha\rangle$态的粒子数. 用 $\Gamma_\lambda N_\lambda(t)dt$ 代表在时间间隔 $(t,t+dt)$ 内发生辐射跃迁的粒子数. 因而有

$$N_\lambda(t+dt)=(1-\Gamma_\lambda dt)N_\lambda(t)$$

或

$$\frac{dN_\lambda}{dt}=-\Gamma_\lambda N_\lambda.$$

于是得到

$$N_\lambda(t) = N_\lambda(0)e^{-\Gamma_\lambda t}. \tag{21.84}$$

这是人们熟知的**指数衰变规律**，其寿命等于 $1/\Gamma_\lambda$. 在这里所处理的例子中，实际上有两种可能的衰变模式: $\lambda \to \alpha$ 和 $\lambda \to \beta$. 而且前者对后者的**分支比**为: $\Gamma_{\lambda\to\alpha}/\Gamma_{\lambda\to\beta}$.

显然，上面的半经典论证并不能认为是对指数衰变规律的证明，因为对跃迁几率的微扰处理只在 $\Gamma_\lambda t \ll 1$ 时才适用(参看 § 17.4 末的讨论)，即 t 足够小，以致态矢量与其初始值差别很小. 如时间比较长，则需要作更精细的处理，这将在 § 13 给出.

为了决定 Γ 的数量级，我们再回到 § 11 的那些数据和符号上来. 对于不太大的激发能，我们有 $k \approx D$; 又因粒子波函数的延展 $\langle R\rangle$ 约为 $(2MD)^{-\frac{1}{2}}$, 于是得到

$$k\langle R\rangle \approx (D/2M)^{\frac{1}{2}} \simeq 5\times 10^{-3} \ll 1.$$

所以，处理 $\langle\lambda|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle$ 时，指数因子可用其泰勒展开式的头一个非零贡献项代替(长波近似). 这一项的数量级实质上由角动量**选择规则**确定. 在合适的情况下(偶极跃迁)，得到

$$|\langle\lambda|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle| \simeq |\langle\lambda|\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}|\alpha\rangle| \approx k\langle R\rangle,$$

由此有

$$\Gamma_{\lambda\to\alpha} \approx \frac{g^2k}{2\pi}(k\langle R\rangle)^2 \approx 10^{-6}D.$$

如果我们对 Γ_λ 取同样的值，则我们得到的寿命 $1/\Gamma_\lambda$ 远大于(10^6 倍)粒子在势中运动的特征周期. 所以，如我们已经作过的那样，把引起场粒子发射的 H' 当作一个小微扰来处理是合理的.

直接从公式 (21.80) 出发，并利用能级密度的定义、能量守恒和封闭性关系，能得到形式上很简单但又很普遍的 Γ_λ 的

表达式. 依次得出[1)]

$$\Gamma_\lambda = 2\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_\nu \int d\boldsymbol{k}|\langle\lambda|H'|\nu\boldsymbol{k}\rangle|^2\delta(E_\lambda - E_\nu - \omega)$$

$$= 2\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_\nu \int d\boldsymbol{k}\langle\lambda|H'\delta(E_\lambda - H_0)|\nu\boldsymbol{k}\rangle\langle\nu\boldsymbol{k}|H'|\chi\rangle$$

$$= 2\pi\langle\lambda|H'\delta(E_\lambda - H_0)H'|\lambda\rangle. \qquad (21.85)$$

这个表达式在下面的讨论中是很有用的.

13. 衰变态的量子理论　谱线宽度

在这一小节中,我们给出衰变态演化的精确的量子处理. 我们将证明 § 12 的简化论证所得的结果实质上是正确的,而且对粒子数衰减而言,指数规律显然是一个很好的近似. 我们也将引出能级移位和谱线宽度这些重要概念.

设系统在初始时刻 $t = 0$ 处于 H_0 的某一束缚态中,对应的本征值是 E_λ. 我们考虑它的时间演化过程.

直至现在,我们假设 E_λ 是 H_0 的非简并本征值. 当我们讨论所得的结果时,我们作了这简化假设,但下面的处理对简并情形也是可用的. 用 $\mathscr{E}_\lambda$ 表示非微扰能 E_λ 的束缚态所张成的子空间, P_λ 和 Q_λ 分别表示到 $\mathscr{E}_\lambda$ 和到它的补空间的投影算符:

$$H_0P_\lambda = P_\lambda H_0 = E_\lambda P_\lambda,\ P_\lambda + Q_\lambda = 1.$$

令 $U(t)$ 是系统的演化算符:

$$U(t) \equiv e^{-iHt}. \qquad (21.86)$$

我们要解决的问题是计算 $t > 0$ 时的 $P_\lambda U(t)P_\lambda$.

---

1) 表达式 (21.85) 在很多问题中都会遇到. 在第一级微扰计算中,它是单位时间的跃迁几率的普遍表达式. 从 § 17.4 的理论,即从 (17.40) 式出发,并利用出现在该式中的 f 函数的渐近形式 (17.43),我们也可直接导出此式.

引入予解式

$$G(z) \equiv \frac{1}{z - H}. \tag{21.87}$$

$G(z)$ 是复变数 z 的函数，它的奇点就是 H 的本征值(分立本征值是简单的极点，连续谱是割线)。因此有[1]

$$U(t) = -\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixt}[G(x^+) - G(x^-)]\,dx$$

$$(x^{\pm} \equiv x \pm i\varepsilon). \tag{21.88}$$

用下式引进定义在 $\mathscr{E}_\lambda$ 空间上的算符 $\mathscr{U}$ 和 $\mathscr{G}$：

$$\mathscr{U}(t) = P_\lambda U(t) P_\lambda, \quad \mathscr{G}(z) = P_\lambda G(z) P_\lambda, \tag{21.90}$$

它们之间的关系如下：

$$\mathscr{U}(t) = -\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixt}[\mathscr{G}(x^+) - \mathscr{G}(x^-)]\,dx$$

$$(x^{\pm} \equiv x \pm i\varepsilon). \tag{21.91}$$

为了得到 $\mathscr{G}$ 的切实可用的表达式，令

$$H = H_\lambda + H''$$

$$H_\lambda \equiv P_\lambda H P_\lambda + Q_\lambda H Q_\lambda = H_0 + Q_\lambda H' Q_\lambda$$

$$H'' \equiv P_\lambda H Q_\lambda + Q_\lambda H P_\lambda = P_\lambda H' Q_\lambda + Q_\lambda H' P_\lambda.$$

---

1) 关系式 (21.88) 可直接利用 ε 是正无穷小量这事实 [参看方程(A.15e)] 得到：

$$G(x^{\pm}) \equiv \frac{1}{x - H \pm i\varepsilon} = PP\,\frac{1}{x - H} \mp i\pi\delta(x - H). \tag{21.89}$$

注意，当 $t>0$ 时，$G(x^-)$ 对 (21.88) 右边的积分的贡献等于 0。
更一般地说，$U(t)$ 和 $G(z)$ 由下面的变换公式联系起来：

$$G(z) = -i\int_0^{\eta\infty} e^{izt}U(t)\,dt, \qquad U(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_C e^{-izt}G(z)dz,$$

[η 是 $\mathrm{Im}\,z$ 的符号；C 是复平面上的积分围道，它从 $(\infty + i\varepsilon)$ 到 $(\infty - i\varepsilon)$ 并且包括 $G(z)$ 的全部奇点(即左半边的 H 的全部本征值)]。
在 H 的对角表象中，很容易证明这一点。

注意，

$$H_1P_\lambda = P_\lambda H_1 = E_\lambda P_\lambda \qquad [Q_\lambda, H_1] = 0$$

$$P_\lambda H'' = H''Q_\lambda \qquad Q_\lambda H'' = H''P_\lambda .$$

从这些关系式和下面的算符恒等式

$$(A - B)^{-1} \equiv A^{-1} + A^{-1}B(A - B)^{-1},$$

出发，我们得到

$$\frac{1}{z - H} = \frac{1}{z - H_1} + \frac{1}{z - H_1} H'' \frac{1}{z - H} \tag{21.92}$$

$$= \frac{1}{z - H_1} + \frac{1}{z - H_1} H'' \frac{1}{z - H_1}$$

$$+ \frac{1}{z - H_1} H'' \frac{1}{z - H_1} H'' \frac{1}{z - H} \tag{21.93}$$

$$P_\lambda \frac{1}{z - H} P_\lambda = \frac{P_\lambda}{z - E_\lambda} + \frac{1}{z - E_\lambda} \left(P_\lambda H'' \frac{1}{z - H_1} H'' P_\lambda \right)$$

$$\times P_\lambda \frac{1}{z - H} P_\lambda . \tag{21.94}$$

(21.94) 式是 $\mathscr{S}_\lambda$ 空间中算符之间的关系式，即

$$\mathscr{G}(z) = \frac{1}{z - E_\lambda} [1 + \mathscr{W}(z)\mathscr{G}(z)], \tag{21.95}$$

其中，

$$\mathscr{W}(z) \equiv P_\lambda H'' \frac{1}{z - H_1} H'' P_\lambda = P_\lambda H' Q_\lambda \frac{1}{z - Q_\lambda H Q_\lambda} Q_\lambda H' P_\lambda . \tag{21.96}$$

从方程 (21.95) 得到

$$\mathscr{G}(z) = \frac{1}{z - E_\lambda - \mathscr{W}(z)} . \tag{21.97}$$

方程 (21.96)、(21.97) 和 (21.91) 是精确的方程，它们可作为计算 $\mathscr{U}(t)$ 的出发点。

方程 (21.96) 和 (21.97) 分别规定 $\mathscr{W}(z)$ 和 $\mathscr{G}(z)$ 是复变数 z 的函数，其中 z 是在被 H 的连续本征值所割开的平面上. 我们特别对这些函数在割线邻近的行为感兴趣. 利用关系式(21.89)，我们可以分离出 $\mathscr{W}(x^{\pm})$ 的厄密和反厄密部分. 从而得到

$$\mathscr{W}(x^{\pm}) = \Delta(x) \mp \frac{1}{2} i\Gamma(x) \tag{21.98}$$

$$\Delta(x) \equiv P_\lambda H' P P \frac{1}{x - Q_\lambda H Q_\lambda} H' P_\lambda \tag{21.99}$$

$$\Gamma(x) \equiv 2\pi P_\lambda H' \delta(x - Q_\lambda H Q_\lambda) H' P_\lambda. \tag{21.100}$$

注意，$\Gamma(x)$ 是正定厄密算符.

以后我们假设 E_λ 是 H_0 的非简并本征值[1].

按假设，系统在 $t = 0$ 时处于本征态 $|\lambda\rangle$ 中. 我们要决定往后任一时刻 t 它的态矢量

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\lambda\rangle, \tag{21.101}$$

特别是要知道这矢量在 $|\lambda\rangle$ 上的分量.

上面讨论的算符 $\mathscr{U}(t)$，$\mathscr{G}(z)$，$\mathscr{W}(z)$，$\Delta(x)$ 和 $\Gamma(x)$ 可用它们在 $|\lambda\rangle$ 上的平均值代替，并且当作简单函数来处理.

---

1) 在大多数实际情况中，E_λ 的简并性是由于附加一耦合项 H' 时 H_0 仍有一种不变性引起的. 例如，在自旋为 J 的核发生放射性衰变中，$2J+1$ 重简并是由于转动不变性造成的，即当引起衰变的耦合项附加到非微扰哈密顿量中，这个转动不变性仍然存在. 由于 $\mathscr{E}_\lambda$ 是不可约子空间，而且算符 $\mathscr{W}(z)$，$\mathscr{G}(z)$ 和 $\mathscr{U}(t)$ 是不变的，所以后者是单位矢量的某个倍数，而且可用非简并情况的方式来计算它们. $\mathscr{E}_\lambda$ 空间的每一个态有相同的放射性衰变规律：相同的寿命，相同的能级移位.

另一方面，如果这些对称条件不再成立，就会有几种寿命和能级移位. 这就是氢原子第一激发能级上所发生的情况(参看 §20.27 末有关兰姆移位的讨论). 另一个例子是 K° 玻色子. 普遍情况的处理实质上与非简并情况相同. 利用同样的近似，我们得出 $\mathscr{U}(t)$ 的表达式：

$$\mathscr{U}(t) \simeq \exp[-i(E_\lambda + \mathscr{W}(E_\lambda^+))t],$$

此式是 (21.109) 的推广. 非厄密算符 $\mathscr{W}(E_\lambda^+)$ 的本征值的实部和虚部分别决定各个能级的移位和相应的寿命.

因此，方程(21.90)，(21.99)和(21.100)分别用下列方程代替：

$$\mathscr{U}(t) \equiv \langle\lambda|U(t)|\lambda\rangle \qquad \mathscr{G}(z) \equiv \langle\lambda|G(z)|\lambda\rangle \quad (21.102)$$

$$\Delta(x) \equiv \left\langle\lambda|H'\mathrm{PP}\left(\frac{1}{x - Q_\lambda H Q_\lambda}\right)H'|\lambda\right\rangle \quad (21.103)$$

$$\Gamma(x) \equiv 2\pi\langle\lambda|H'\delta(x - Q_\lambda H Q_\lambda)H'|\lambda\rangle, \quad (21.104)$$

方程(21.97)和(21.91)分别给出

$$\mathscr{G}(x^\pm) = [x - E_\lambda - \Delta(x) \pm \frac{1}{2}\mathrm{i}\,\Gamma(x)]^{-1} \quad (21.105)$$

$$\mathscr{U}(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}xt}F(x)\mathrm{d}x, \quad (21.106)$$

其中

$$F(x) \equiv \mathrm{i}(\mathscr{G}(x^+) - \mathscr{G}(x^-)) = \frac{\Gamma(x)}{(x - E_\lambda - \Delta(x))^2 + \frac{1}{4}\Gamma(x)^2}. \quad (21.107)$$

直至现在，我们未作任何近似。为了定出 $F(x)$ 和 $\mathscr{U}(t)$，我们假定耦合是弱的，而且在 $\Delta(x)$ 和 $\Gamma(x)$ 的表达式(21.103)和(21.104)中只保留 H' 的最低级项。为此，只需在这些式子中用 H_0 代替 $Q_\lambda H Q_\lambda$。于是，很容易计算 $\Delta(x)$ 和 $\Gamma(x)$。图21.4给出 $\Gamma(x)$ 的形状。当 Δ 和 Γ 足够小时，$F(x)$ 在 $x = E_\lambda$ 附近有很陡的最大值。对积分的主要贡献就来自这个范围。因此，在计算这个积分时，慢变化函数 $\Delta(x)$ 和 $\Gamma(x)$ 可用它们在 $x = E\lambda$ 点上的值代替，即

$$\Delta(E_\lambda) \equiv \delta E_\lambda, \quad \Gamma(E_\lambda) \equiv \Gamma_\lambda, \quad (21.108)$$

这相当于用下面的函数代替函数 $F(x)$ [参看图21.5]：

$$F_\lambda(x) = \frac{\Gamma_\lambda}{(x - E_\lambda - \delta E_\lambda)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_\lambda^2}.$$

在这里，函数Δ和Γ对x的依赖关系已取为偶极跃迁型的：

$$\Delta(x) \simeq C_{st} = \delta E_\lambda \qquad \frac{\Gamma(x)}{\Gamma_\lambda} \simeq \frac{(x - E_\lambda + \xi)^3}{\xi^3}$$

$$(\xi = E_\lambda - E_\alpha - \mu).$$

我们已经取 $\delta E_\lambda/\xi = 0.2$，$\Gamma_\lambda/\xi = 0.1$.

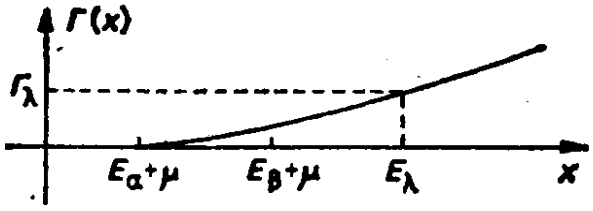


图 21.4　$\Gamma(x)$ 的图形，注意当 $x<E\alpha+\mu$ 时，$\Gamma(x)=0$

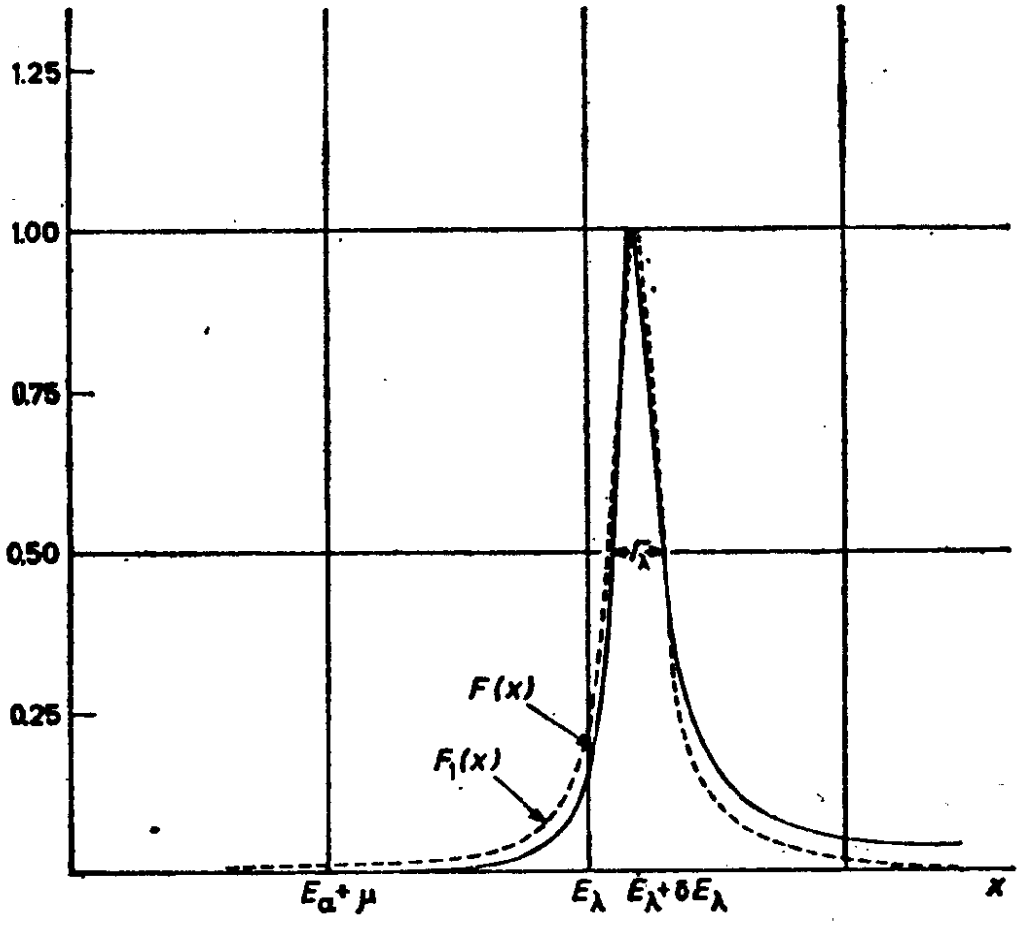


图 21.5　$F(x)$ 和 $F_1(x)$ 的典型图形

$U(t)$ 的误差比

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}|F(x)-F_1(x)|\mathrm{d}x.$$

的绝对值更小.

如果和 $E_\lambda-E_\alpha-\mu$ 及 $E_\lambda-E_\beta-\mu$ 比较起来，Γ_λ 及 δE_λ 是足够小的，那末就相对值而言，它们依然是很小的，除非时间很长的($t\gg 1/\Gamma_\lambda$). 于是就容易完成上面的积分，得到

$$\mathscr{U}(t)\simeq \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_\lambda+\delta E_\lambda)t-\frac{1}{2}\Gamma_\lambda t}. \tag{21.109}$$

所以，

$$|\mathscr{U}(t)|^2=\mathrm{e}^{-\Gamma_\lambda t}. \tag{21.110}$$

这就是所期待的指数衰变规律.

寿命的大小 $\frac{1}{\Gamma_\lambda}$ 已在§12中作了计算 [参看方程 (21.84—85),(21.104) 和 (21.108)].

按照公式 (21.109)，耦合项 H' 对能级 λ 的修正主要是对它附加一复数能量

$$\delta E_\lambda-\frac{1}{2}\mathrm{i}\Gamma_\lambda.$$

实部 δE_λ 是能级移位，它具有类似于稳定能级移位的形式[参看方程 (21.71),(21.103) 和 (21.108)]；虚部是衰变态所特有的，如不计正负号，它就是能极的半宽度. 它与指数下降规律的存在密切相关.

现在我们在弱耦合近似下计算 $|\psi(t)\rangle$ 的其他分量. 在此近似中，不为零的分量就是那些在只有一个场粒子的态矢量上的分量:

$$|\Psi(t)\rangle=\mathscr{U}(t)|\lambda\rangle+\sum_{\nu k}h_{\nu k}(t)|\nu k\rangle \tag{21.111}$$

$$h_{\nu k}(t)=\langle \nu k|U(t)|\lambda\rangle. \tag{21.112}$$

从方程 (21.92) 得到

$$\langle \nu \boldsymbol{k}|G(z)|\lambda\rangle = \langle \nu \boldsymbol{k}|(z - H_1)^{-1}H''|\lambda\rangle \mathscr{G}(z).$$

此方程是精确的。 弱耦合近似就是把上式右边分母中的 H_1 用 H_0 代替，它给出

$$\langle \nu \boldsymbol{k}|G(z)|\lambda\rangle = \langle \nu \boldsymbol{k}|H'|\lambda\rangle (z - \omega - E_\nu)\mathscr{G}(z).$$

从 $G(z)$ 矩阵元的这个近似值出发，应用 (21.88) 式，就得到相应的 $U(t)$ 矩阵元的近似值，其中有一积分，可用留数方法计算。对于充分大的 t，只有来自实轴上的极点的贡献是重要的，得到

$$h_{\nu\lambda}(t) \simeq \langle \nu \boldsymbol{k}|H'|\lambda\rangle \left.\frac{e^{-ixt}}{x - E_\lambda - \Delta(x) + \frac{1}{2}i\Gamma(x)}\right|_{x=\omega+E_\nu} \cdot \quad (\Gamma t \geqslant 1)$$

当 t 很大时(大于衰变寿命)，此式的模方给出系统处于状态 $(\nu \boldsymbol{k})$ 上的几率，可写成

$$|h_{\nu\lambda}(\infty)|^2 = |\langle \nu \boldsymbol{k}|H'|\lambda\rangle|^2 \frac{\Gamma(\omega + E_\nu)}{F(\omega + E_\nu)}, \quad (21.113)$$

其中，$F(x)$ 是方程 (21.107) 规定的函数。 按上面已经提到的 $F(x)$ 的性质(参看图 21.5)，只有当 $\omega + E_\nu \approx E_\lambda$ 时，即对于大体上能保持非微扰能守恒的跃迁，$|h_{\nu\lambda}(\infty)|^2$ 才有显著的大小。在现在所处理的例子中，就是 $\nu = \alpha$ 和 $\nu = \beta$。对于这些情况，我们可用 $F_1(x)$ 代替 $F(x)$。因此，对于 $\lambda \to \alpha \boldsymbol{k}$ 跃迁，得到公式

$$|h_{\nu\lambda}(\infty)|^2 = \frac{|\langle \alpha \boldsymbol{k}|H'|\lambda\rangle|^2}{(\omega + E_\alpha - E_\lambda - \delta E_\lambda)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_\lambda^2}. \quad (21.114)$$

按此公式，跃迁过程中发射的场粒子的能量分布是**"洛伦兹规律"**的，其**宽度**为 Γ_λ 并集中在 $E_\lambda + \delta E_\lambda - E_\alpha$ 这一点附近，即集中在玻耳跃迁频率(已作**能级移位** δE_λ 的改正)附近。

按照时间-能量不确定关系，辐射跃迁过程中发射场粒子的**谱线宽度**等于寿命的倒数(采用 $\hbar = 1$ 的单位制)。

关于这些结果的意义，应该指出下列几点。

首先，为了将诸如(21.114)这样的分布规律和实验结果作比较，应该指出起始状态 $|\alpha\rangle$ 在实验上是怎样实现的。在§15中我们再来谈这一点。

除此之外，上面的处理还有一些严重的局限性。如果我们取§11的数字结果，我们就会看到：δE_λ 和 δE_α 是同一量级的，因此它比能级间距大得多。然而，若用 $\delta E_\lambda^{(0)}$ 代表质量重正化引起的效应，则可证明：和能级间距比较起来，差值

$$\delta E'_\lambda = \delta E_\lambda - \delta E_\lambda^{(0)}$$

是一很小的修正。这里所遇到的困难完全和§11中已相当详细讨论过的困难相同。那里的讨论在这里可逐点重复进行。

最后一点，显然与计算振幅 $h_{\nu\boldsymbol{k}}$ 时采用的弱耦合近似有关，我们既没有考虑能影响跃迁的那些能级的可能移位，也没有特别地考虑有一些能级因耦合项 H' 的出现而变得不稳定这个事实。

对于向稳定能级或与始态寿命比较起来是长寿命能级的跃迁，我们对公式(21.114)可作修改，使刚才提及的两个效应包括在内。在哈密顿量 H_{part} 中，用实验质量代替 M，所得到的能级用 $E_\alpha^{(0)}, \cdots E_\lambda^{(0)} \cdots$ 表示。改正后的公式是

$$|h_{\nu\boldsymbol{k}}|^2_{\text{cor}} = \frac{|\langle \alpha\boldsymbol{k}|H'|\lambda\rangle|^2}{(\omega + E_\alpha^{(0)} + \delta E'_\alpha - E_\lambda^{(0)} - \delta E'_\lambda)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_\lambda^2}. \tag{21.114'}$$

这是通常可和实验结果相比较的一种公式。符合程度很好。

14. 弹性散射　色散公式

为结束这一大节，我们考虑一些简单的碰撞问题。

第一个问题．我们讨论一个场粒子被一个处于基态的粒子弹性散射的情形，$\boldsymbol{k}_i$ 代表入射的场粒子的波矢量，$\boldsymbol{k}_f$ 代表碰撞后观测到的场粒子的波矢量(大小与碰撞前相同)．所考虑的跃迁是

$$i \to f \equiv (\alpha \boldsymbol{k}_i) \to (\alpha \boldsymbol{k}_f).$$

令

$$k_i = k_f = k, \qquad \omega_i = \omega_f = \omega,$$

并用 E 代表系统的初始能量

$$E = \omega + E_\alpha. \tag{21.115}$$

由普遍公式得到的截面为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{2\pi}{\text{入射通量}} |T_{i\to f}|^2 \rho_f(E). \tag{21.116}$$

其中 $T_{i\to f}$ 是跃迁振幅：

$$T_{i\to f} \equiv \langle f|T|i\rangle \equiv \langle \alpha \boldsymbol{k}_f|T|\alpha \boldsymbol{k}_i\rangle \tag{21.117}$$

$$T = H' + H' \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\varepsilon} H'. \tag{21.118}$$

入射通量等于入射速度 $\frac{k}{\omega}$ 与 $|\alpha \boldsymbol{k}_i\rangle$ 中场粒子密度的乘积．采用本小节用的归一化，它就是 $L^{-3}k/\omega$；$\rho_f(E)$ 是能量 E 处的终态密度[参看方程 (21.49)]．我们有

$$\frac{2\pi\rho_f(E)}{\text{入射通量}} = \frac{L^6\omega^2}{4\pi^2}.$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{L^6\omega^2}{4\pi^2} |T_{i\to f}|^2. \tag{21.119}$$

在以上的全部讨论中我们假定了碰撞理论的基本公式完全适用于现在的情况，作为我们的出发点的方程(21.116)和(21.118)实质上分别等价于方程(19.115)和(19.144)．细小的差别仅仅是由于定义跃迁振幅时的符号、采用的单位和

波函数的归一化有所不同造成的.

然而,在现在的情况下,这些公式并不完全正确. 它们是基于下述假定建立起来的,即假定碰撞**前后**系统的演化几乎完全由哈密顿量 H_0 决定,而相互作用 H' 完全可以忽略. 这样的假定在第 10 章和第 19 章所述的碰撞问题中是完全合理的,但在这里却不再成立.

作为例子, 我们考查一下碰撞前系统的状态. 那时粒子处在基态,场粒子由一个对准粒子运动的波包来描述. 波包尚未到达原点邻近的一个小区域 (粒子在其中运动)时,场粒子和粒子的相互作用是可忽略的,而且场粒子的演化像它是自由的一样. 在这一点上,现在的情况和通常的碰撞理论并无不同. 不过相互作用 H' 仍然不能忽略,因为入射场粒子即使和粒子远离时,这粒子也总是与场耦合在一起. 准确地说,其始态不是哈密顿量 H_0 的本征态 $|\alpha\rangle$ (对应的能量为 E_α),而是哈密顿量 H 的本征态 $|\bar{\alpha}\rangle$. 在极限情形下 $(g \to 0)$, $|\bar{\alpha}\rangle$ 与 $|\alpha\rangle$ 重合,它的本征能量 $E_\alpha + \delta E_\alpha$ 已在§11作了计算.

为了使理论变得正确,现在的理论必需考虑到"物理态" $|\bar{\alpha}\rangle$ 和非微扰态 $|\alpha\rangle$ 之间的差别. 如果耦合是足够弱的,则实质上导致质量重正化的效果,而碰撞机制本身不受影响[1].

在这些条件下,如果在非微扰哈密顿量中,我们用实验质量 $M + \delta M$ 代替质量 M,则通常的碰撞理论公式仍适用.

现在把 H' 当作微扰处理以计算截面. 因此, T 可用它的玻恩展开式[参看方程 (19.143)] 代替. 在第一级近似中,振幅显然为零:

$$\langle \alpha \boldsymbol{k}_f | H' | \alpha \boldsymbol{k}_i \rangle = 0.$$

---

1) 在更高级近似中,必须考虑由于粒子周围出现虚的场粒子而使入射场粒子与粒子的相互作用有所修正. 实质上,这个修正是通过耦合常数("电磁重正化")的修正来描述的.

因此我们必须取第二级. 用 $T_{i\to f}^{(B)}$ 表示 H' 取至第二级时的振幅,得到

$$T_{i\to f}^{(B)} = \left\langle \alpha \boldsymbol{k}_f | H' \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} H' | \alpha \boldsymbol{k}_i \right\rangle \tag{21.120}$$

$$= \sum_n \langle \alpha \boldsymbol{k}_f | H' | n \rangle \frac{1}{E - E_n + i\varepsilon} \langle n | H' | \alpha \boldsymbol{k}_i \rangle . \tag{21.120'}$$

在上式第二行中,求和遍及哈密顿量 H_0 的全部基矢. 由于 H' 具有很特殊的形式,求和号中的大多数项为零. 贡献不为零的虚态可以分成两类:

(1) 没有场粒子的态 $|\nu\rangle$;

(2) 包含两个动量各为 $\boldsymbol{k}_i$ 和 $\boldsymbol{k}_f$ 的场粒子态 $|\nu \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f\rangle$.

第一类对应的跃迁是:

$$(\alpha \boldsymbol{k}_i) \to (\nu) \to (\alpha \boldsymbol{k}_f),$$

在这种跃迁中, 粒子吸收入射的场粒子之后发射一个场粒子到终态上. 第二类对应的跃迁是

$$(\alpha \boldsymbol{k}_i) \to (\nu \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f) \to (\alpha \boldsymbol{k}_f)$$

在这种跃迁中,始态的场粒子被吸收之前,终态的场粒子已发射出来.

引入玻耳频率

$$\omega_{\nu\alpha} = E_\nu - E_\alpha \quad (>0). \tag{21.121}$$

得到

$$T_{i\to f}^{(B)} = \sum_\nu \left[\frac{\langle \alpha \boldsymbol{k}_f | H' | \nu \rangle \langle \nu | H' | \alpha \boldsymbol{k}_i \rangle}{\omega - \omega_{\nu\alpha}} - \frac{\langle \alpha \boldsymbol{k}_f | H' | \nu \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f \rangle \langle \nu \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f | H' | \alpha \boldsymbol{k}_i \rangle}{\omega + \omega_{\nu\alpha}} \right]. \tag{21.122}$$

应用方程 (21.69) 和 (21.70) 并取 $C(k) = 1$ (如 $k \ll M$, 这当然是合理的),可得

$$T_{i\to f}^{(B)}=\frac{L^{-3}g^2}{2\omega}\sum_{\nu}\left[\frac{X_\nu}{\omega-\omega_{\nu\alpha}}-\frac{X'_\nu}{\omega+\omega_{\nu\alpha}}\right],\quad(21.123)$$

其中，

$$X_\nu\equiv\langle\alpha|e^{-i\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{R}}|\nu\rangle\langle\nu|e^{i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle\quad(21.124)$$

$$X'_\nu\equiv\langle\alpha|e^{i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{R}}|\nu\rangle\langle\nu|e^{-i\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle.\quad(21.124')$$

这些式子代入 (21.119) 的右边，得到二级玻恩近似的截面：

$$\frac{d\sigma_{i\to f}^{(B)}}{d\Omega}=\frac{g^4}{16\pi^2}\left|\sum_{\nu}\left(\frac{X_\nu}{\omega-\omega_{\nu\alpha}}-\frac{X'_\nu}{\omega+\omega_{\nu\alpha}}\right)\right|^2.\quad(21.125)$$

在这个级数中，每一项代表上面所述的一种跃迁的贡献. 在所有情况相同的条件下，入射能量越接近于跃迁过程所涉及的虚态能量，对截面的贡献也越大. 当这两个能量相等时，相应的项变为无限大. 在第一类跃迁中，中间态发射一个场粒子而衰变到基态，对其中的每一跃迁，ω 都有一个这样的临界值.

每当越过一个临界值时，例如 $E_\lambda(\omega_{\lambda\alpha}>\mu)$，分母 $\omega-\omega_{\lambda\alpha}$ 变为零并变号，$X_\lambda/(\omega-\omega_{\lambda\alpha})$ 项就无限地增加，截面公式趋于发散. 无论耦合常数是怎么小，但在这范围内[1]，玻恩近似显然不完全适用. 实际上，截面还是有限的，但有一个很陡的最大值. 我们即将看到，这是一种共振现象，它完全类似

---

1) 在长波近似下 $(k\langle R\rangle\ll1)$，$|X_\lambda|\simeq(k\langle R\rangle)^2$；如果令 $\Delta\omega=|E-E_\lambda|$ 并且只保留来自重要项的贡献，则 (21.125) 式给出

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\simeq\frac{g^4}{16\pi^2}\left(\frac{k^2\langle R\rangle^2}{\Delta\omega}\right)^2.$$

依照已知的判据(§ 19.7)，当总截面等于几何截面 $4\pi\langle R\rangle^2$ 的量级时，玻恩近似不再适用. 现在就发生在

$$\Delta\omega\lesssim\frac{g^2k}{4\pi}(k\langle R\rangle).$$

若采用 § 11 给出的数据，则这是非常狭窄的范围，数量级为 $10^{-4}D$ (但远大于宽度 Γ_λ).

于第十章（§ 14—16）所研究过的。

15. 共振散射亚稳态的形成

为了计算某一临界能量（例如 E_λ）附近的弹性散射截面，我们再回到跃迁振幅的精确表示式。按定义(21.117)和(21.118)，有

$$\langle f|T|i\rangle = \sum_{nn'}\langle f|H'|n\rangle\left\langle n\left|\frac{1}{E-H+i\varepsilon}\right|n'\right\rangle\langle n'|H'|i\rangle. \tag{21.126}$$

玻恩近似就在于：在展开式(21.126)的每一项中，精确的格林函数 $(E-H+i\varepsilon)^{-1}$ 用非微扰哈密顿量的格林函数 $(E-H_0+i\varepsilon)^{-1}$ 代替[参看方程(21.120)和(21.120′)]。如果耦合常数足够小，则这个近似对所有项都是正确的，但 $n=\lambda, n'=\lambda$ 的项除外。对于这一项，当能量跨越 E_λ 时，因子 $\langle\lambda|(E-H_0+i\varepsilon)^{-1}|\lambda\rangle$ 无限地增长。我们用 $A^{(res)}$ 表示这一项：

$$A^{(res)} = \langle f|H'|\lambda\rangle\left\langle\lambda\left|\frac{1}{E-H+i\varepsilon}\right|\lambda\right\rangle\langle\lambda|H'|i\rangle, \tag{21.127}$$

两者之差用 $A^{(pot)}$ 表示：

$$\langle f|T|i\rangle = A^{(res)} + A^{(pot)}. \tag{21.128}$$

我们要利用玻恩近似来计算 $A^{(pot)}$。所得的公式与(21.123)的差别仅仅在于：对态 ν 的求和中不出现 $X_\lambda/(\omega-\omega_{\lambda\alpha})$ 项。A^{res} 尚待计算。

在(21.127)中，H' 的矩阵元用其显示形式[参看方程(21.69)和(21.124)]代替，得到

$$A^{(res)} = L^{-3}g^2\frac{X_\lambda}{2\omega}\mathscr{G}(E^+), \tag{21.129}$$

其中，$\mathscr{G}(E^+)$ 是 § 13 引入的格林函数的平均值，即

$$\mathcal{G}(E^+) \equiv \left\langle \lambda \left| \frac{1}{E - H + i\varepsilon} \right| \lambda \right\rangle. \qquad (21.130)$$

此函数已在 § 13 中作过计算，结果由方程 (21.105) 给出. 将如此得到的表达式代入方程 (21.129)，就有

$$A^{(res)} = \frac{L^{-3}g^2}{2\omega} \frac{X_\lambda}{E - E_\lambda - \Delta(E) + \frac{1}{2} i\Gamma(E)}. \qquad (21.131)$$

$A^{(res)}$ 的这个表达式是精确的. 它和玻恩近似给出的结果的差别仅仅表现在：分母中出现复数项 $\Delta(E) - \frac{1}{2} i\Gamma(E)$. 这一附加项消除了奇异性. 它的特性已在 § 13 中作过阐述. 在弱耦合近似中，$\Delta(E) - \frac{1}{2} i\Gamma(E)$ 的大小用它在 $E = E_\lambda$ 处的值代替 [参看方程 (21.103)，(21.104) 和 (21.108)]，这肯定是合理的，因为在我们感兴趣的能带中，可忽略它随能量的变化. 从而得到

$$A^{(res)} = \frac{L^{-3}g^2}{2\omega} \frac{X_\lambda}{E - E_\lambda - \delta E_\lambda + \frac{1}{2} i\Gamma_\lambda}, \qquad (21.132)$$

此式的特征是散射振幅有一个以点 $E_\lambda + \delta E_\lambda$ 为中心的宽度 Γ_λ.

在第十章里，我们讨论了散射共振以及它们**与衰变态存在的关系**，现在可重复进行这样的讨论. 采用更进一步的细致一些的模型，对于散射振幅、微分截面、总截面和散射波穿透过程中的“延迟”(参看问题 21.4)，我们容易得出实际上和 § 10.15 完全相同的表达式(假如 $A^{(pot)}$ 可忽略). 上面所说的共振与衰变态 $|\lambda\rangle$ 有关，$|\lambda\rangle$ 的性质已在 § 12 和 § 13 作过讨论.

为了对截面进行精确测量，特别是为了要显示它随能量变化的特征，我们要求入射波包的能量不确定性 $\Delta\omega$ 足够小，

以致散射振幅在间隔 $\Delta\omega$ 内实际上保持不变;在共振峰附近，这就要求

$$\Delta\omega \ll \Gamma_\lambda. \tag{21.133}$$

因此，碰撞时间 $1/\Delta\omega$ 远大于寿命 $1/\Gamma_\lambda$，而后者是非可观测量.

如果不是上面的情况,而是有互补条件

$$\Delta\omega \gg \Gamma_\lambda, \tag{21.134}$$

的话,那么就可能观测到现象的时间发展过程,而且有可能在量级为 $\frac{1}{\Delta\omega}$ 的渡越时间之后显示出衰变态 $|\lambda\rangle$ 的指数下降规律的特征. 这是因为散射振幅在共振区[见方程(21.132)]有相当特殊的形式. 只要逐一重复 § 10.16 的计算,这形式是容易确定的.

这是一个非常普遍的结果，不仅适用于散射而且也适用于所有的碰撞. 任一碰撞共振(由它的能量 E 和宽度 Γ 确定)都与某一亚稳态(能量也是 E,寿命为 $\frac{\hbar}{\Gamma}$)相联系. 在和通常观测共振的实验条件互补的实验条件下，这种亚稳态是可以被观测的[1].

16. 场粒子的吸收(光电效应)　辐射俘获

到现在为止,我们所处理的问题只涉及粒子的束缚态.在这一小节中,我们处理两个问题: 场粒子的吸收和辐射俘获.

---

1) 在这里,系统的同一性质有两种互补形式,因为两者都是从系统的预解式 $G(z)$ 的同一性质引出的. 预解式由方程 $G(z)=(z-H)^{-1}$ 规定,它定义在被 H 的连续谱割开的平面上，而且只在实轴上(即 H 的本征值)有奇异性. 然而，它解析延拓到其它黎曼叶上却可以出现其他奇异性. 共振和衰变态是由于下述事实造成: G 在下半平面的第二黎曼叶的实轴附近的点 $z=E-\frac{1}{2}i\Gamma$ 处有一极点.

这些问题涉及到粒子的各种可能的非束缚态.

我们假定 $\lim_{R\to\infty} V(R)=0$，因此，粒子子系统能谱包含负能量 $E_\alpha, E_\beta, \cdots E_\lambda, \cdots$等分立束缚态和能量从0至$+\infty$的非束缚连续态. 分别用 $\Psi_q^{(+)}$ 和 $\Psi_q^{(-)}$ 代表波矢量为 $\boldsymbol{q}$ 的定态波(按§19.2的定义). 根据定义，它们是 H_{part} 的本征解，对应的能量为

$$E=\frac{q^2}{2M}. \tag{21.135}$$

它们也可以看作是 H_0 的本征解，代表耦合项 H' 可忽略时的总系统的碰撞定态. 又用 $\phi_q^{(+)}$ 和 $\phi_q^{(-)}$ 代表把耦合考虑在内时对应的碰撞定态.

现在设粒子处于基态，并用速度为 $\boldsymbol{k}/\omega$ 的场粒子的单能束轰击它. 若入射场粒子的能量 ω 大到足于"电离原子"，即如果

$$\omega>(-E_\alpha),$$

则场粒子可完全被吸收，把它的全部能量传递给粒子；粒子被释放出来，其动能 E 等于接收到的能量 ω 和结合能 $(-E_\alpha)$ 之差:

$$E=\omega+E_\alpha.$$

这个过程可以看作是光电效应.(第一章§4).

我们来计算一个动量为 $\boldsymbol{k}$ 的场粒子被吸收并在给定方向释放出一个粒子的截面. 用 $\boldsymbol{q}$ 代表方向沿粒子出射方向的矢量，但其长度与能量 E 的关系由 (21.135) 式决定. 因此，我们所考虑的跃迁是

$$i\to f\equiv(\alpha\boldsymbol{k})\to(\boldsymbol{q}).$$

正如在弹性散射中的那样，我们假定通常的碰撞理论的公式可应用(如同§14那样的限制条件也适用于这里). 所以，截面由公式 (21.116) 给定，其中入射通量的表达式仍和上面的

一样，但 $\rho_f(E) = Mq/(2\pi)^3$. 跃迁振幅如下[参看方程(19.122)]:

$$T_{i\to f} \equiv \langle \boldsymbol{q}|T|\alpha\boldsymbol{k}\rangle = \langle \Psi_{\boldsymbol{q}}^{(-)}|H'|\alpha\boldsymbol{k}\rangle.$$

若只取 H' 的最低级项，则在上面的矩阵元中可用 $\phi_{\boldsymbol{q}}^{(-)}$ 代替 $\Psi_{\boldsymbol{q}}^{(-)}$ [参看方程 (19.129—130)]，由此得到

$$T_{i\to f} \simeq \langle \phi_{\boldsymbol{q}}^{(-)}|H'|\alpha\boldsymbol{k}\rangle = (L^{-3}g^2/2\omega)^{\frac{1}{2}}\langle \phi_{\boldsymbol{q}}^{(-)}|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle,$$

因而

$$\frac{d\sigma(\alpha\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{q})}{d\Omega} \simeq \frac{g^2}{8\pi^2}\frac{Mq}{k}|\langle \phi_{\boldsymbol{q}}^{(-)}|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle|^2. \qquad (21.136)$$

我们能用同样的办法计算逆反应的截面. 在逆过程中，以初始动量 $\boldsymbol{q}$ 传播的粒子被俘获到势 $V(R)$ 的 α 态中，并发射一个动量为 $\boldsymbol{k}$ 的场粒子:

$$\boldsymbol{q}\to\alpha\boldsymbol{k}.$$

取 H' 的一级项，得到

$$\frac{d\sigma(\boldsymbol{q}\to\alpha\boldsymbol{k})}{d\Omega} \simeq \frac{g^2}{8\pi^2}\frac{Mk}{q}|\langle \alpha|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\phi_{\boldsymbol{q}}^{(+)}\rangle|^2. \qquad (21.137)$$

这个公式可直接得到，也可以应用 $\boldsymbol{q}\to\alpha\boldsymbol{k}$ 和 $(k\alpha)(-\boldsymbol{k})\to(-\boldsymbol{q})$ 这两个反应(互为时间反演变换)之间的微观可逆性关系 (19.190)，从上面得到的公式导出. 实际上有

$$\langle \alpha|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\phi_{\boldsymbol{q}}^{(+)}\rangle = \langle \phi_{-\boldsymbol{q}}^{(-)}|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}(K|\alpha\rangle).$$

III. 电磁辐射的经典理论

17. 经典麦克斯韦-洛伦兹理论的方程组

电磁辐射的经典理论建立在麦克斯韦方程组[1]的基础上:

---

1) 与处理标量场时所作的相反，在这里，我们不利用合理化单位制. 因此，在方程 (21.139) 的右边出现 4π 这样的因子.

$$\operatorname{curl}\mathscr{E}+\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial t}=0 \tag{21.138a}$$

$$\operatorname{div}\mathscr{H}=0 \tag{21.138b}$$

$$\operatorname{curl}\mathscr{H}-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial t}=4\pi\boldsymbol{s} \tag{21.139a}$$

$$\operatorname{div}\mathscr{E}=4\pi s^0. \tag{21.139b}$$

这些方程决定着电场 $\mathscr{E}$ 和磁场 $\mathscr{H}$（存在密度为 s^0 的电荷分布和密度为 $\boldsymbol{s}$ 的电流分布）的时间演化。 $\boldsymbol{s}$ 和 s^0 满足连续性方程：

$$\operatorname{div}\boldsymbol{s}+\frac{\partial s^0}{\partial t}=0,$$

此式是方程组 (21.139) 的一个显然的推论，由此得到电荷守恒定律.

麦克斯韦方程组被洛伦兹方程所补充，后者决定电荷在电磁场中的运动. 按此方程，在每一时刻，带电流体的惯性力密度被电磁力密度

$$\boldsymbol{f}=s^0\mathscr{E}+(\boldsymbol{s}\times\mathscr{H}). \tag{21.140}$$

所平衡. 根据电子的经典洛伦兹理论，物质无例外地由粒子组成，每一个粒子有确定的质量和电荷. 为了得到每个粒子的运动方程，我们只需就电荷集中在无限小体积时取洛伦兹方程的极限. 例如考虑一个质量为 m，电荷为 e 的粒子，用 $\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{\Pi}$ 分别代表它的位置、速度和力学动量 [$\boldsymbol{\Pi}=M\boldsymbol{V}$, 其中 M 是 (20.20) 式定义的相对论质量]. 这个粒子所贡献的电荷、电流密度 s^0 和 $\boldsymbol{s}$ 如下：

$$s^0=e\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}),\quad \boldsymbol{s}=e\boldsymbol{V}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}). \tag{21.141}$$

在 $\boldsymbol{R}$ 附近的小区域内对 $\boldsymbol{f}$ 作积分，就得出粒子所感受到的电磁力 $\boldsymbol{F}$. 由洛伦兹方程给出[参看方程 (20.22)]：

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Pi}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{F} = e(\mathscr{E} + \boldsymbol{V} \times \mathscr{H}). \qquad (21.142)$$

在这方程中，$\mathscr{E}$ 和 $\mathscr{H}$ 代表电场和磁场在点 $\boldsymbol{R}$ 处所具有的值．我们记得

$$\boldsymbol{V} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t} = \frac{\boldsymbol{\Pi}}{M} = \frac{\boldsymbol{\Pi}}{\sqrt{m^2 + \boldsymbol{\Pi}^2}}, \qquad (21.143)$$

方程 (21.142) 和 (21.143) 是粒子处于场内的运动方程．

上面的所有方程和定义都可重新写成协变的形式．按照定义 (20.9)，$\mathscr{E}$ 和 $\mathscr{H}$ 构成一个反对称张量 $F_{\mu\nu}$；s^0 和 $\boldsymbol{s}$ 构成电流-电荷密度 4 矢量 $s_\mu = (s^0, \boldsymbol{s})$．麦克斯韦-洛伦兹方程组变为[1]

$$\varepsilon^{\kappa\lambda\mu\nu}\partial_\lambda F_{\mu\nu} = 0 \qquad (21.138')$$

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi s^\nu, \qquad (21.139')$$

而且连续性方程变为 $\partial_\nu s^\nu = 0$．力密度 $\boldsymbol{f}$ 是 4 矢量

$$f^\mu = F^{\mu\nu}s_\nu. \qquad (21.140')$$

的空间部分．类似地，$\boldsymbol{F}dt$ 是 4矢量 $e\,F^{\mu\nu}dx_\nu$ 的空间部分；$\boldsymbol{\Pi}$ 是 § 20.4 定义的 4 矢量 $\Pi^\mu = (M, \boldsymbol{\Pi})$ 的空间部分．引入粒子的**固有时间**和它的速度 4 矢量，方程 (21.142) 在用 M 的类似方程补充后也能写成协变形式．

18. 经典理论的对称性和守恒定律

经典理论的相对论不变性导出一些对称性和守恒定律．我们现在详细考虑能量和动量守恒，并简要地考虑角动量守恒以及空间反射和时间反演对称性．为了简化讨论，假设系

---

1) 引入对偶电磁张量：$\hat{F}^{\kappa\lambda} = \frac{1}{2}\varepsilon^{\kappa\lambda\mu\nu}F_{\mu\nu}$，方程 (21.138′) 能变成更简单的形式：

$$\partial_\lambda \hat{F}^{\kappa\lambda} = 0.$$

统只有一个粒子(电子)，至于推广到包含若干粒子的系统上是很容易的。

为了得到能量和动量守恒定律，我们先证明：当 $F^{\mu\nu}$ 遵从麦克斯韦-洛伦兹方程时，(21.140′) 定义的 f^{μ} 等于某一张量的散度。

从方程 (21.139′) 得到

$$f^{\mu} = F^{\mu\nu}s_{\nu} = \frac{1}{4\pi} F^{\mu\nu}(\partial^{\rho}F_{\rho\nu})$$

$$= \frac{1}{4\pi}[\partial^{\rho}(F^{\mu\nu}F_{\rho\nu}) - F_{\rho\nu}(\partial^{\rho}F^{\mu\nu})]. \qquad (21.144)$$

然而，考虑到 F 是反对称张量，由 (21.138′) 得到

$$F_{\rho\nu}(\partial^{\rho}F^{\mu\nu}) = \frac{1}{2} F_{\rho\nu}(\partial^{\rho}F^{\mu\nu} + \partial^{\nu}F^{\rho\mu}) = \frac{1}{2} F_{\rho\nu}(\partial^{\mu}F^{\rho\nu})$$

$$= \frac{1}{4}\partial^{\mu}(F_{\rho\nu}F^{\rho\nu}) = \frac{1}{4} g^{\mu\rho}\partial_{\rho}(F_{\kappa\lambda}F^{\kappa\lambda}).$$

把此式代入 (21.144) 的右边，并令

$$T^{\mu\rho} = \frac{1}{4\pi}\left(F^{\mu\nu}F^{\rho}_{\nu} - \frac{1}{4} g^{\mu\rho}F_{\kappa\lambda}F^{\kappa\lambda}\right), \qquad (21.145)$$

就得到

$$f^{\mu} = \partial_{\rho}T^{\mu\rho}. \qquad (21.146)$$

这就是所要求的结果。

$T^{\mu\rho}$ 是“能量-动量”张量，在它的定义中若明显地写出场分量来，就有

$$T^{00} = -\frac{1}{8\pi}(\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2)$$

$$T^{k0} = T^{0k} = -\frac{1}{4\pi}[\mathcal{E} \times \mathcal{H}]$$

$$T^{kl} = T^{lk} = \frac{1}{4\pi}\left[\mathcal{E}_k\mathcal{E}_l + \mathcal{H}_k\mathcal{H}_l\right.$$

$$+\frac{1}{2}\delta_{kl}(\mathscr{E}^2-\mathscr{B}^2)\Big].$$

我们用下面的在整个空间积分的式子来定义场的能量 W^0 和动量 $\boldsymbol{W}$：

$$W^0=\frac{1}{8\pi}\int(\mathscr{B}^2+\mathscr{E}^2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{21.147a}$$

$$\boldsymbol{W}=\frac{1}{4\pi}\int(\mathscr{B}\times\mathscr{E})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \tag{21.147b}$$

即

$$W^\mu=-\int T^{\mu 0}\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{21.148}$$

在这里，并不能先验地认为 W^μ 是一个 4 矢量. 然而，利用能量-动量守恒定律可以证明它确是 4 矢量.

为了显示出能量-动量守恒定律，我们将粒子的运动方程写成

$$\frac{\mathrm{d}\,\Pi^\mu}{\mathrm{d}t}=\int f^\mu\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

只要积分体积 V 包含代表粒子位置的点，这个方程对任何 V 都是成立的. 把 f^μ 的 (21.146) 式代入，就得到

$$\frac{\mathrm{d}\,\Pi^\mu}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\int_V T^{\mu 0}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right)+\int_V\left(\sum_k\frac{\partial T^{\mu k}}{\partial x^k}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

第二个积分很容易变换为体积 V 的边界曲面的积分. 现在将体积 V 扩展为整个空间. 假定在无穷远处电磁场足够快地趋于零. (在此，这假设是完全合理的). 因此面积分趋于 0. 考虑到 (21.148) 的定义，得出

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Pi^\mu+W^\mu)=0.$$

这说明上面所采用的场能量和场动量定义是有理由的，而且也就是总系统(粒子＋场)的能量和动量守恒定律：

$$M + W^0 = Cst. \tag{21.149a}$$

$$\boldsymbol{\Pi} + \boldsymbol{W} = Cst. \tag{21.149b}$$

如果对场的角动量取如下的定义：

$$\boldsymbol{l} = \frac{1}{4\pi}\int [\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{\mathscr{E}} \times \boldsymbol{\mathscr{H}})]\, d\boldsymbol{r}. \tag{21.150}$$

则作类似的论证，可导出总角动量守恒：

$$(\boldsymbol{R} \times \boldsymbol{\Pi}) + \boldsymbol{l} = Cst. \tag{21.151}$$

如果系统包含若干个粒子，则 $\boldsymbol{\Pi}$ 和 M 必须用动量之和以及相对论质量之和代替，而 $(\boldsymbol{R} \times \boldsymbol{\Pi})$ 用角动量之和代替．作了这些明显的修改之后，三个守恒定律 (21.149a)、(21.149b) 和(21.150)仍然成立．

现在考虑空间和时间反射．

如果我们把电荷 e 当作真标量，把场 $F^{\mu\nu}$ 当作真张量处理，则运动方程对空间反射 $(t \to t, \boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r})$ 是不变的．按此约定，S^0 的变换类似于三维空间的标量函数的变换，$\boldsymbol{s}$ 和 $\boldsymbol{\mathscr{E}}$ 的变换类似于极矢量场的变换，$\boldsymbol{\mathscr{H}}$ 的变换类似于轴矢量场的变换．具体说来，我们得到下面的变换规律：

$$\boldsymbol{\mathscr{E}}(t, \boldsymbol{r}) \to -\boldsymbol{\mathscr{E}}(t, -\boldsymbol{r}), \quad \boldsymbol{\mathscr{H}}(t, \boldsymbol{r}) \to +\boldsymbol{\mathscr{H}}(t, -\boldsymbol{r}). \tag{21.152}$$

如果我们把电荷 e 当作标量而把 $F^{\mu\nu}$ 当作“赝张量”处理，则运动方程对时间反演 $(t \to -t, \boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r})$ 是可逆的．采用这样的约定，作为 $\boldsymbol{r}$ 的函数的 S^0 和 $\boldsymbol{\mathscr{H}}$ 对时间反演是不变的，但 $\boldsymbol{s}$ 和 $\boldsymbol{\mathscr{E}}$ 变号：

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\mathscr{E}}(t, \boldsymbol{r}) \to +\boldsymbol{\mathscr{E}}(-t, \boldsymbol{r}), \\ &\boldsymbol{\mathscr{H}}(t, \boldsymbol{r}) \to -\boldsymbol{\mathscr{H}}(-t, \boldsymbol{r}). \end{aligned} \tag{21.153}$$

19. 电子的自能和经典半径

讲到这里，我们应提及经典辐射理论的一个严重困难．在

上面所作的全部讨论中，都假定每个粒子的电荷集中在很小的体积内(例如一个小球，其半径 a 趋向于 0). 实际上，这样的严格的点电荷假设是不自洽的. 我们考虑一个孤立的、静止在坐标系原点上的电子，并计算这个电子产生的场能量 δ_m. 这个能量通常称为**静电自能**. 根据 § 11 的论证，它实际上是**质量重正化项**，该处的论证不必更动就可应用在这里. 实验上观察到的质量为

$$m_{\exp} = m + \delta m.$$

因为在外区 ($r > a$) 的电场是 $e\boldsymbol{r}/r^3$，所以公式 (21.147a) 给出

$$\delta m > \frac{e^2}{8\pi}\int \frac{d\boldsymbol{r}}{r^4} = \frac{e^2}{2a},$$

又因为 $\delta_m < m_{\exp}$，所以得到：$a > e^2/2m_{\exp}$ 长度

$$r_0 = \frac{e^2}{m_{\exp}} \ (\simeq 2.82 \times 10^{-13}\text{cm})$$

称作**电子的经典半径**. 所以，经典电子是一有限大小(量级为 r_0) 的客体. 然而，这理论却不能说明此客体的稳定性，更不能详细说明其内部结构，即在 $r < r_0$ 范围内的电荷和电流分布，这是因为电子的组元之间的电磁力主要是排斥力，它使电子有离散的倾向. 为了保证电子是稳定的，必须有一种起源于非电磁的内聚力来平衡排斥力. 在相对论理论中，引入这样的力之后遇到严重的困难. 实际上，它本身就包含了与电子内部结构有联系的"特定"假设. 所以，我们只能期望对那些不紧密地和电子结构细节有关的现象作出正确的说明，即波长足够大 ($\lambda \gg r_0$)[1] 的情况.

---

1) 量子理论也有一个有类似起源的"紫外灾难". 不过，经典的和量子的理论之间的相似性不能推得太远. 有一些效应(诸如对产生)使我们赋予"量子电子"具有一个数量级为 $\hbar/mc$ 的半径，即比 r_0 大 137 倍.

20. 电磁势　规范选择

按下式的定义［参看方程 (20.7)］而引入矢量势 $\boldsymbol{A}$ 和标量势 φ:

$$\mathscr{H} = \operatorname{curl} \boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{\mathscr{E}} = -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} - \operatorname{grad}\varphi. \tag{21.154}$$

就可得到和方程组(21.138)等价的，但更简单的方程式.此时，方程(21.138)自然地成立.方程(21.139)等价于下述方程组:

$$\ddot{\boldsymbol{A}} - \Delta \boldsymbol{A} + \operatorname{grad}(\dot{\varphi} + \operatorname{div} \boldsymbol{A}) = 4\pi \boldsymbol{s} \tag{21.155a}$$

$$\ddot{\varphi} - \Delta\varphi - \frac{\partial}{\partial t}(\dot{\varphi} + \operatorname{div} \boldsymbol{A}) = 4\pi s^0. \tag{21.155b}$$

方程 (21.154) 只能把 $\boldsymbol{A}$ 和 φ 确定到还有一个任意函数未定的程度. 如果 $G(t, \boldsymbol{r})$ 是空间和时间的任意函数并作如下的代换:

$$\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A} - \operatorname{grad} G, \quad \varphi \to \varphi + \frac{\partial G}{\partial t}. \tag{21.156}$$

则这些方程仍然成立.

这样的一组代换称为**规范变换**(参看 § 20.20).

所有这些关系式可以写成完全协变的形式. 势 $\boldsymbol{A}$ 和 φ 构成一个4矢量 A^μ［参看方程 (20.6)］. 根据方程 (21.154)，A^μ 是一个旋度为 $F^{\mu\nu}$ 的矢量［参看方程 (20.8)］. A^μ 可确定到含有一个任意函数的梯度. 规范变换 (21.156) 只不过是附加一个梯度项而已:

$$A^\mu \to A^\mu + \partial^\mu G \quad (G \text{ 任意}). \tag{21.157}$$

方程 (21.155) 变为

$$\Box A^\mu - \partial^\mu(\partial_\nu A^\nu) = 4\pi s^\mu. \tag{21.158}$$

加上**洛伦兹补充条件**

$$\partial_\nu A^\nu = 0. \tag{21.159}$$

规范中的任意性可以部分地消除，但又不破坏理论的协变形式.

因而，电磁势的运动方程取更简单的形式，

$$\Box A^{\mu} = 4\pi s^{\mu}. \tag{21.160}$$

令 χ 是方程 $\Box\chi = 0$ 的任意一个解. 洛伦兹条件确定电磁势的规范到允许有这种 χ 函数的程度，换言之，场强 $F^{\mu\nu}$ 的定义以及方程 (21.15a) 和 (21.160) 对洛伦兹**规范变换**(有时称作特殊的规范变换)

$$A^{\mu} \to A^{\mu} + \partial^{\mu}\chi \qquad (\Box\chi = 0). \tag{21.161}$$

是不变的.

如果附加条件

$$\operatorname{div} \boldsymbol{A} = 0. \tag{21.162}$$

我们也可得到非常简单的运动方程. 与洛伦兹条件相反，条件 (21.162) 不再保持理论在形式上的协变性. 然而，它有一个好处，就是完全消除了规范中的任意性. 这样定义的规范通常称作**辐射规范**. 以后采用的就是这种规范. 在研究这种规范的辐射理论之前，我们要回顾一下矢量场分解的重要性质.

21. 矢量场的纵向和横向部分

任一实数的或复数的矢量场 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ 可看作是两个场的叠加:

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{B}_{\parallel}(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{B}_{\perp}(\boldsymbol{r}), \tag{21.163}$$

其中之一(即 $\boldsymbol{B}_{\parallel}$) 是无旋的，另一个(即 $\boldsymbol{B}_{\perp}$) 是无散度的. 因此，

$$\operatorname{curl} \boldsymbol{B}_{\parallel} = 0, \quad \operatorname{div} \boldsymbol{B}_{\parallel} = \operatorname{div} \boldsymbol{B} \tag{21.164}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{B}_{\perp} = 0, \quad \operatorname{curl} \boldsymbol{B}_{\perp} = \operatorname{curl} \boldsymbol{B}. \tag{21.165}$$

如果我们限制它是平方可积矢量场，则这种分解是唯一

的[1]. 按定义，这样确定的场 $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ 和 $\boldsymbol{B}_{\perp}$ 分别构成场 $\boldsymbol{B}$ 的纵向和横向部分. 另外，我们得到

$$\boldsymbol{B}_{\parallel} = \operatorname{grad} U \quad U(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{\operatorname{div}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{21.166}$$

$$\boldsymbol{E}_{\perp} = \operatorname{curl}\boldsymbol{V} \quad \boldsymbol{V}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi}\int \frac{\operatorname{curl}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}'. \tag{21.167}$$

利用傅立叶变换，很容易得出这种分解. 我们分别用 $\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{b}_{\perp}$ 和 $\boldsymbol{b}_{\parallel}$ 代表 $\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{B}_{\perp}$ 和 $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ 的傅立叶变换：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{b}(\boldsymbol{k}) &= (2\pi)^{-3/2}\int \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r} \\ \boldsymbol{b}_{\parallel}(\boldsymbol{k}) &= \cdots \qquad\qquad \text{etc.} \end{aligned} \tag{21.168}$$

方程 (21.164) 和 (21.165) 分别等价于下面的方程：

$$\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{b}_{\parallel} = 0 \qquad \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}_{\parallel} = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}_{\perp} = 0 \qquad \boldsymbol{k}\times\boldsymbol{b}_{\perp} = \boldsymbol{k}\times\boldsymbol{b}.$$

其中，$\boldsymbol{b}_{\parallel}$ 是 $\boldsymbol{b}$ 在矢量 $\boldsymbol{k}$ 方向的投影，因此称 $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ 为纵向部分[2]；$\boldsymbol{b}_{\perp}$ 是 $\boldsymbol{b}$ 在矢量 $\boldsymbol{k}$ 的垂直方向上的投影，因此称 $\boldsymbol{B}_{\perp}$ 为横向部分. 方程 (21.166) 和 (21.167) 分别等价于下面的方程：

$$\boldsymbol{b}_{\parallel} = \frac{\boldsymbol{k}(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{k})}{k^2} \qquad \boldsymbol{b}_{\perp} = \frac{\boldsymbol{k}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{k})}{k^2}. \tag{21.169}$$

(21.166) 定义的函数 U 的傅立叶变换为

$$u(\boldsymbol{k}) = -\mathrm{i}\frac{(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{k})}{k^2}.$$

[注意，$\frac{1}{r}$ 的傅立叶变换是 $\sqrt{\pi}/\pi k^2$].

---

1) 我们也必须假定 $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ 和 $\boldsymbol{B}_{\perp}$ 是平方可积的. 有时也对平方不可积的场作这种分解. 于是，纵向部分和横向部分就明确地由方程 (21.166) 和 (21.167) 来分别确定.

2) 不要混淆 $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的径向部分，后者是 $\boldsymbol{B}$ 在矢量 $\boldsymbol{r}$ 上的投影，即 $\boldsymbol{B}_{\mathrm{rad}} = \boldsymbol{r}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{r})/r^2$. 注意，一般情况下，纯横场的径向部分不为 0.

在更一般的方式中，平方可积的矢量场空间（即自旋为1的粒子的波函数空间）是两个正交子空间（纵场空间和横场空间）的**直和**。在这里所想像的分解正是将 $\boldsymbol{B}$ 写成它在这两个互补子空间上的投影之和。只要选取适当的基，这些投影自动地就可以得到。用

$$\boldsymbol{L}^{(1)}, \boldsymbol{L}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{L}^{(\lambda)}, \cdots$$

代表正交纵场的完全集；用

$$\boldsymbol{T}^{(1)}, \boldsymbol{T}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{T}^{(\tau)}, \cdots$$

代表正交横场的完全集：

$$\operatorname{curl} \boldsymbol{L}^{(\lambda)} = 0, \quad \int (\boldsymbol{L}^{(\lambda)*} \cdot \boldsymbol{L}^{(\lambda')}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta_{\lambda\lambda'} \tag{21.170a}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{T}^{(\tau)} = 0, \quad \int (\boldsymbol{T}^{(\tau)*} \cdot \boldsymbol{T}^{(\tau')}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta_{\tau\tau'} \tag{21.170b}$$

$$\sum_{\lambda} L_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{r}) L_j^{(\lambda)*}(\boldsymbol{r}') + \sum_{\tau} T_i^{(\tau)}(\boldsymbol{r}) T_j^{(\tau)*}(\boldsymbol{r}')$$

$$= \delta_{ij}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{21.170c}$$

$$(i, j = x, y \text{ 或 } z).$$

令

$$\beta_{\parallel}^{(\lambda)} = \int (\boldsymbol{L}^{(\lambda)*} \cdot \boldsymbol{B}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{r},$$

$$\beta_{\perp}^{(\tau)} = \int (\boldsymbol{T}^{(\tau)*} \cdot \boldsymbol{B}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{21.171}$$

我们就得到

$$\boldsymbol{B}_{\parallel} = \sum_{\lambda} \beta_{\parallel}^{(\lambda)} \boldsymbol{L}^{(\lambda)}, \quad \boldsymbol{B}_{\perp} = \sum_{\tau} \beta_{\perp}^{(\tau)} \boldsymbol{T}^{(\tau)}. \tag{21.172}$$

使用傅立叶变换就在于选择一个特定的基，即纵向和横向平面波场。每一个波矢量都与一个纵场

$$\boldsymbol{L}^{(\boldsymbol{k})} = (2\pi)^{-3/2} \hat{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \quad (\hat{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{k}/k) \tag{21.173a}$$

和两个正交的横场

$$T^{(k\tilde{\omega})} = (2\pi)^{-3/2}\epsilon^{(\tilde{\omega})}e^{ik\cdot r} \qquad (\tilde{\omega} = 1, 2) \quad (21.173b)$$

相联系，$\epsilon^{(1)}$ 和 $\epsilon^{(2)}$ 是两个任意的互相正交但又垂直于 k 的单位矢量[1]：

$$k \cdot \epsilon^{(1)} = k \cdot \epsilon^{(2)} = 0 \qquad (21.174a)$$

$$\epsilon^{(1)*} \cdot \epsilon^{(1)} = \epsilon^{(2)*} \cdot \epsilon^{(2)} = 1, \quad \epsilon^{(1)*} \cdot \epsilon^{(2)} = 0. \quad (21.174b)$$

通过下式[参看方程(21.169)]

$$b_{\parallel} = \beta_{\parallel}^{(k)}k, \quad b_{\perp} = \sum_{\tilde{\omega}} \beta_{\perp}^{(k\tilde{\omega})}\epsilon^{(\tilde{\omega})}. \qquad (21.175)$$

B 在这种基中的分量[定义(21.171)]与 $b_{\parallel}$ 及 $b_{\perp}$ 联系起来. 在这里，平面波依赖于连续指标 k，并且归一化为 $\delta(k-k')$. 为了使指标都是分立的，按照常用的技巧，可以把系统封闭在边长为 L 的立方体中. 于是，定义(173a,b)中的常数 $(2\pi)^{-\frac{1}{2}}$ 必须用 $L^{-\frac{1}{2}}$ 来代替.

在其它基中，球面波是常用的. 我们在§29中再来谈这问题.

22. 纵场的消除

在麦克斯韦方程组中，严格说，方程(21.138b)和(21.139b)并不是运动方程，不过是加在场 $\mathscr{E}$ 和 $\mathscr{H}$ 上的约束. 它们确定这些场的纵向部分.

我们从方程(21.138b)看到 $\mathscr{H}_{\parallel} = 0$，而从方程(21.139b)看到：**$\mathscr{E}_{\parallel}(t, r)$ 是电荷分布 $s_0(t, r)$ 所产生的静电场**. 所以，为了确定系统的动力学态，只要一方面给定电荷和电流分布(即粒子的位置和速度)；另方面又给定横场 $\mathscr{H}$ 和 $\mathscr{E}_{\perp}$ 就足够了. 因此，有可能以另一方式来陈述这理论，使

---

[1] 这些矢量不必是实的. 按定义，一个矢量是实矢量，如果它的笛卡儿分量是实数的话. 矢量 k 是实矢量. 两个复矢量 A 和 B 的标量积定义为

$$A^* \cdot B \equiv A_x^*B_x + A_y^*B_y + A_z^*B_z.$$

电磁场的纵向部分完全被消除.

我们不直接作这种消除,而宁愿首先在辐射规范[参看方程(21.162)]中引入电磁势$(\varphi, \boldsymbol{A})$. 这只不过是变量的一种改变. 按定义,$\boldsymbol{A}$场是纯横场:

$$A_{\parallel} = 0, \qquad \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_{\perp}. \tag{21.176}$$

利用方程(21.154)或下式

$$\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\parallel} = -\operatorname{grad}\varphi \tag{21.177}$$

$$\boldsymbol{\mathscr{H}} = \operatorname{curl}\boldsymbol{A}, \qquad \boldsymbol{\mathscr{E}}_{\perp} = -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}. \tag{21.178}$$

旧变量可以用新变量表示. 在上式中,φ由方程(21.155b)决定,在现在的情况下,它被写成

$$\Delta\varphi = -4\pi s^0. \tag{21.179}$$

求出:

$$\varphi(t, \boldsymbol{r}) = \int \frac{s^0(t, \boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}\, d\boldsymbol{r}', \tag{21.180}$$

从这个方程,我们得到上面已提到的用s^0表示$\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\parallel}$的表达式. 为了从方程(21.155a)中消除$\varphi$,只要各自写出纵向分量和横向分量的等式就可以了. 其中第一个等式为

$$\operatorname{grad}\dot{\varphi} = 4\pi \boldsymbol{s}_{\parallel}, \tag{21.181}$$

如果φ满足方程(21.180)[1],此式总是成立的.

第二个等式与φ无关,而且它就是运动方程

$$\ddot{\boldsymbol{A}} - \Delta\boldsymbol{A} = 4\pi \boldsymbol{s}_{\perp}. \tag{21.182}$$

剩下的工作是从粒子的运动方程[方程(21.142)和(21.143)],即从每个粒子感受到的洛伦兹力的表达式中消除纵场.每一粒子的各种物理量用§17中的相同的符号来表示,

---

1) 为了使这等式成立,只要两边的散度相等就足够了: $\Delta\dot{\varphi} = 4\pi\operatorname{div}\boldsymbol{s}$; 此式可从方程(21.179)导出,作法是将(21.179)两边对时间取微分并利用连续方程.

用指标 1，2，$\cdots n$，$\cdots$来区分各个粒子。因此，第 n 个粒子对电荷密度的贡献是

$$s_n^0 = e_n\delta(r - R_n).$$

所以方程 (21.17a) 写为:

$$\Delta\varphi = -4\pi\sum_n e_n\delta(r - R_n), \qquad (21.183)$$

此式的解是库仑势:

$$\varphi = \sum_n \frac{e_n}{|r - R_n|}. \qquad (21.184)$$

令 F_i 是作用在第 i 个粒子上的洛伦兹力。我们能写出:

$$F_i = F_i^{tr} + F_i^{long}$$

$$F_i^{tr} = e_i(\mathscr{E}_\perp(i) + V_i \times \mathscr{H}(i))$$

$$= e_i\left(-\frac{\partial A(i)}{\partial t} + V_i \times \mathrm{curl}\, A(i)\right) \qquad (21.185)$$

$$F_i^{long} = e_i\mathscr{E}_\parallel(i) = -e_i\,\mathrm{grad}\,\varphi(i),$$

在这里，$\mathscr{E}_\perp(i)$，$\mathscr{H}(i)$ 代表 $\mathscr{E}_\perp$，$\mathscr{H}$ 在点 R_i 处的取值。将 (21.184) 式代入 F^{long} 中，就消除了纵场。

然而，这种代入不是一下就能实现的，因为势 φ 在点 R_i 处发散。这个困难的出现是由于我们作了点电荷假定而造成的。F^{long} 是全部电荷作用到第 i 个粒子上的静电力。用 F_i' 代表第 i 个粒子本身的电荷对 F^{long} 的贡献，用 F^{coul} 代表所有其他电荷对 F^{long} 的贡献。只要粒子之间足够好地分开，F^{coul} 的计算可在点电荷假定下进行，得到

$$F_i^{coul} = \sum_{n\neq i} e_i e_n \frac{(R_i - R_n)}{|R_i - R_n|^3}. \qquad (21.186)$$

但点电荷假设显然不适用 F_i' 的计算。在任何情况下，不论第 i 个粒子内部的电荷是怎样分布的，都得到

$$F_i' = 0.$$

因此，作用在每一个粒子上的力是横场的洛伦兹力[方程(21.185)]和所有**其他**电荷引起的静电力[方程(21.186)]之和:

$$\boldsymbol{F}_i = \boldsymbol{F}_i^{\mathrm{tr}} + \boldsymbol{F}_i^{\mathrm{coul}}. \tag{21.187}$$

23. 能量　动量　角动量

从运动方程中消除了纵场之后，现在我们再从能量、动量和角动量守恒定律中消除它.

在场的能量公式[方程(21.147a)]中，用 $\mathscr{E}_\perp$ 代替 $\mathscr{E}$，我们得到新的只与横向分量有关的表达式 U. 为了和上述的能量有所区别，我们称它为**辐射能**:

$$U = \frac{1}{8\pi}\int (\mathscr{E}_\perp^2 + \mathscr{H}^2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{21.188}$$

我们类似地定义**辐射动量** $\boldsymbol{X}$ [参看方程(21.147b)]和**辐射角动量** $\boldsymbol{G}$ [参看方程(21.151)]:

$$\boldsymbol{X} = \frac{1}{4\pi}\int (\mathscr{E}_\perp \times \mathscr{H})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{21.189}$$

$$\boldsymbol{G} = \frac{1}{4\pi}\int [\boldsymbol{r} \times (\mathscr{E}_\perp \times \mathscr{H})]\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{21.190}$$

U, $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{G}$ 分别是电荷不存在时这系统的能量、动量和角动量.

第一节中，已给出标量场的能量、动量和角动量的公式[参看 § 4, 6, 7]，现在的 U, $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{G}$ 也可写成类似的形式. 在公式(21.188—190)中，用 Curl $\boldsymbol{A}$ 代替 $\mathscr{H}$，作分部积分并利用 $\mathscr{E}_\perp$ 和 $\boldsymbol{A}$ 是在无限远处为零的横场这事实，得到

$$U = \frac{1}{8\pi}\int \sum_i (\mathscr{E}_{\perp i}^2 + (\nabla A_i)^2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \tag{21.188'}$$

$$\boldsymbol{X}=\frac{1}{4\pi}\int\sum_i \boldsymbol{\mathscr{E}}_{\perp i}(\nabla A_i)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \qquad (21.189')$$

以及

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{G}^{(0)}+\boldsymbol{G}^{(\delta)}. \qquad (21.190')$$

其中

$$\boldsymbol{G}^{(0)}=\frac{1}{4\pi}\int\sum_i \boldsymbol{\mathscr{E}}_{\perp i}(\boldsymbol{l}A_i)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \qquad (21.191a)$$

$$\boldsymbol{G}^{(\delta)}=\frac{1}{4\pi}\int(\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\perp}\times\boldsymbol{A})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \qquad (21.191b)$$

为了得到这些表示式，方便的作法是利用张量计算的技巧和符号，特别是利用三维欧几里得空间的反对称张量 ε_{ijk}（§13.2末的注给出的定义）和下面的恒等式：

$$\varepsilon_{iik}\varepsilon_{klm}=\delta_{il}\delta_{im}-\delta_{im}\delta_{il}.$$

因而，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mathscr{H}}^2=(\mathrm{curl}\,\boldsymbol{A})^2&=\varepsilon_{iik}\varepsilon_{klm}\frac{\partial A_l}{\partial x_i}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\\&=\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}-\frac{\partial A_l}{\partial x_m}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\\&=\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}-\frac{\partial}{\partial x_l}\left(A_m\frac{\partial A_l}{\partial x_m}\right)\\&\quad+A_m\frac{\partial^2 A_l}{\partial x_m\partial x_l},\end{aligned}$$

因为 $\boldsymbol{A}$ 是在无穷远处为零的横场，故

$$\int\boldsymbol{\mathscr{H}}^2\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int\sum_m(\nabla A_m)^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{r},$$

由此得到方程 (21.188′)．利用类似的技巧，求得

$$(\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\perp}\times\boldsymbol{\mathscr{H}})_i=\varepsilon_{iik}\varepsilon_{klm}\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\perp j}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}$$

$$= \mathscr{E}_{\perp m} \frac{\partial}{\partial x_i} A_m - \frac{\partial}{\partial x_l} (\mathscr{E}_{\perp l} A_i),$$

从这里得到方程 (21.189′). 类似地,我们有

$$[r \times (\mathscr{E}_\perp \times \mathscr{H})]_i = \mathscr{E}_{\perp m} \left(\varepsilon_{iik} x_i \frac{\partial A_m}{\partial x_k} \right)$$

$$- \frac{\partial}{\partial x_l} (\varepsilon_{iik} x_i \mathscr{E}_{\perp l} A_k) + \varepsilon_{iik} \mathscr{E}_{\perp j} A_k,$$

从这里并利用 $G^{(0)}$ 及 $G^{(s)}$ 的定义式 (21.191a, b), 可得到方程 (21.190′).

将这些表达式与标量场相应的表达式作比较是很有教益的. 例如,我们就场的能量来比较(21.30)和(21.188′)式,差别是存在的,因为:(i) A 是矢量场,(ii) 其质量为零($\mu=0$) (iii) 这里采用的场的单位制与第 I 节所用的差一个因子 $\sqrt{4\pi}$. 除此之外, 如果我们假定场 A 的正则共扼动量是 $(-\mathscr{E}_\perp)$, 则 (21.188′) 式是 (21.30) 式的一个简单推广. 这个假定是从方程 (21.178) 的第二式启示来的, 而且以后还可以得到证实. 对动量的表达式 [方程 (21.55) 以及 (21.189′)] 和角动量的表达式[方程 (21.190′)]也可以作同样的说明. 场的矢量特征特别地在角动量上显示出来; 除了对标量场的角动量的表达式作简单的推广就可得到的 $G^{(0)}$ 项外, 还存在这一项的一个补充项 $G^{(s)}$. $G^{(0)}$ 描写"轨道角动量", 而 $G^{(s)}$ 描写场[1]的"自旋".

在 § 18 中, 我们得到了系统 (由电磁场和与它有相互作用的带电粒子构成)的总能量、总动量和总角动量的表达式.

---

1) 在现在的情况下,由于横向条件而使事情复杂化. 尤其是, 它使得空间各点的 A 场振幅不构成独立的动力学变量集合. 由于同样的原因, 问题 21.5 给出的对易关系具有特别的形式. 也由于同样的原因, 矢量算符 $G^{(0)}$ 和 $G^{(s)}$ 不能单独地具备角动量特有的对易关系.

我们现在从这些式子中消除纵场。

首先考虑系统的总动量。按 § 18 给的定义，有

$$\boldsymbol{P}_{\text{tot}} = \sum_n \boldsymbol{\Pi}_n + \boldsymbol{W} = \sum_n \boldsymbol{\Pi}_n + \boldsymbol{X} + \boldsymbol{X}', \quad (21.192)$$

其中，

$$\boldsymbol{X}' = \frac{1}{4\pi}\int \boldsymbol{\mathscr{E}}_{\parallel} \times \boldsymbol{\mathscr{H}}\, \mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

$\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\parallel}$ 和 $\boldsymbol{\mathscr{H}}$ 用它们的定义式[方程 (21.177～178)]代替，得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\parallel} \times \boldsymbol{\mathscr{H}} &= -(\operatorname{grad}\varphi \times \boldsymbol{\mathscr{H}}) = \varphi \operatorname{curl}\boldsymbol{\mathscr{H}} - \operatorname{curl}(\varphi\boldsymbol{\mathscr{H}}) \\ &= -\varphi(\Delta\boldsymbol{A}) - \operatorname{curl}(\varphi\boldsymbol{\mathscr{H}}).\end{aligned}$$

作分部积分并注意到无穷远处 φ 和 $\boldsymbol{A}$ 都为零，得到

$$\boldsymbol{X}' = -\frac{1}{4\pi}\int \varphi(\Delta\boldsymbol{A})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = -\frac{1}{4\pi}\int \boldsymbol{A}(\Delta\varphi)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

按照方程 (21.183)，$\Delta\varphi$ 是若干个 δ 函数之和，上式的积分容易实现，得出

$$\boldsymbol{X}' = \sum_n e_n \boldsymbol{A}(n)$$

其中，按照上面所采用的约定，$\boldsymbol{A}(n) \equiv \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}_n)$。把求出的这个表达式代入方程 (21.192) 中，我们导出**第 n 个粒子的动量 $\boldsymbol{P}_n$ 的定义式**[1]：

$$\boldsymbol{P}_n = \boldsymbol{\Pi}_n + e_n\boldsymbol{A}(n). \quad (21.193)$$

于是，总动量写成

$$\boldsymbol{P}_{\text{tot}} = \sum_n \boldsymbol{P}_n + \boldsymbol{X}. \quad (21.194)$$

---

1) 记住，我们是在辐射规范和 $\boldsymbol{A}$ 是纯横向场的情况下作的。更一般而言，我们可得到一个与规范无关的定义：

$$\boldsymbol{P}_n \equiv \boldsymbol{\Pi}_n + e_n\boldsymbol{A}_{\perp}(n).$$

它是粒子动量与辐射场动量之和．这个和是一个运动常数．

我们用完全相似的方式讨论角动量．取下式来定义第 n 个粒子的角动量 $\boldsymbol{L}_n$：

$$\boldsymbol{L}_n = \boldsymbol{R}_n \times \boldsymbol{P}_n, \tag{21.195}$$

其中 $\boldsymbol{P}_n$ 是上面定义的动量．经计算，得到系统总角动量的下述表达式：

$$\boldsymbol{J}_{\text{tot}} = \sum_n \boldsymbol{L}_n + \boldsymbol{G}. \tag{21.196}$$

最后，我们考虑系统的总能量．按照 § 17 的定义，它写成下面的形式：

$$\sum_n M_n + U + U',$$

其中

$$U' = W^0 - U = \frac{1}{8\pi}\int \mathscr{E}_{\parallel}^2 \, \mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

$\mathscr{E}_{\parallel}$ 用其定义式代替，作分部积分，得到

$$U' = \frac{1}{8\pi}\int (\mathrm{gra}\, \mathrm{d}\varphi)^2 \, \mathrm{d}\boldsymbol{r} = -\frac{1}{8\pi}\int \varphi(\Delta\varphi) \, \mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

其中，φ 是由于电荷存在而产生的静电势．如果作点电荷假设（直至现在，我们都这样做），则得到

$$U' = \frac{1}{2}\sum_n \sum_p \frac{e_n e_p}{|\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_p|}.$$

在双重求和号中，“交叉项”（$n \neq p$）描写粒子之间的库仑能，即

$$H_{\text{coul}} = \sum_{n<p} \frac{e_n e_p}{|\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_p|}. \tag{21.197}$$

[符号 $\sum_{n<p}$ 代表对所有粒子对求和]．所有平方项都是无限

的．现在遇到的困难和§22末计算 $\boldsymbol{F}^{\text{long}}$ 时遇到的困难都出于同一个原因．第 i 个平方项描写处于自身电场中的第 i 个粒子的静电能．此能量，u_i'，与粒子内部的电荷分布方式有关，而且在粒子半径趋向0的极限时，它变成无穷大（参看§19）．为了得到自能的正确大小，我们必须对这一项附加一项，它来自§19已提及的内聚力的贡献．在现在的计算中并没有包含在内．在还没有关于粒子内部结构的自洽理论的情况下，我们将假定：如果在质量能量 M_i 的表达式中，对静止质量 m_i 作适当的修改，则每一自能项都可以略去．于是，我们得到如下的系统的总能量公式：

$$E_{tot} = \sum_n M_n + H_{con} + U. \tag{21.198}$$

它是粒子的质量、库仑能及辐射能三者之和．

24. 自由辐射的哈密顿量

§22中得到的运动方程能写成正则形式．我们先处理自由辐射，即无电荷的电磁场的情形．

在每一时刻，辐射的动力学态由横向场 $\boldsymbol{A}$ 及其速度 $\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}$ 决定．电场和磁场通过方程（21.178）同这两个矢量联系起来．$\boldsymbol{A}$ 和 $\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}$ 的时间演化由运动方程（21.182）决定．无电荷和电流时，这方程简化为

$$\Box \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A} - \Delta \boldsymbol{A} = 0 \tag{21.199}$$

$$(\mathrm{div} A = 0).$$

这样的方程类似于自由标量场的方程[参看方程(21.1)]．唯一的差别在于：现在的场是横向矢量场而不是标量场，而且质量项为零．除去这一点，正则形式可以采用在第1节中用于标量的完全相同的方式来建立．令 $\boldsymbol{T}^{(1)}, \boldsymbol{T}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{T}^{(r)}$，

…是正交横向场的完全集[参看方程 (21.170)]，它类似于§21 所定义的集。我们进一步假定它是**实的简正坐标**的基：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{T}^{(\tau)*} &= \boldsymbol{T}^{(\tau)} \\ (\Delta + k_\tau^2)\boldsymbol{T}^{(\tau)} &= 0. \end{aligned} \tag{21.200}$$

对应的简正坐标 q_τ 由下式确定[参看方程 (21.6)]：

$$q_\tau = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int (\boldsymbol{T}^{(\tau)} \cdot \boldsymbol{A})\, d\boldsymbol{r}. \tag{21.201}$$

这些坐标是时间的实函数，而且满足下面的运动方程：

$$\ddot{q}_\tau + k_\tau^2 q_\tau = 0, \tag{21.202}$$

这是频率为 k_τ 的谐振子的特征方程。这样的振荡运动由哈密顿量

$$h_\tau = \frac{1}{2}(p_\tau^2 + k_\tau^2 q_\tau^2), \tag{21.203}$$

决定。其中，p_τ 是 q_τ 的正则共轭动量；p_τ 等于 $\dot{q}_\tau$，而且可从场的“速度” $\dot{\boldsymbol{A}}$ 得到

$$p_\tau = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int (\boldsymbol{T}^{(\tau)} \cdot \dot{\boldsymbol{A}})\, d\boldsymbol{r}. \tag{21.204}$$

对各种本征振动的哈密顿量求和就得到自由辐射的总哈密顿量：

$$H_{\text{rad}} = \sum_\tau h_\tau. \tag{21.205}$$

定义式 (21.201) 和 (21.204) 中的因子 $1/\sqrt{4\pi}$ 是由于这里所选用的电磁场的单位制[1]造成的。

H_{rad} 是用正则变量表述的辐射能。这可以证明如下。我们有[参看方程 (21.178)]：

$$\boldsymbol{A} = \sqrt{4\pi} \sum_\tau q_\tau \boldsymbol{T}^{(\tau)} \tag{21.206}$$

1) 参看 §21.17 头一个的注释.

$$\mathcal{E}_{\perp} = -\sqrt{4\pi}\sum_{\tau} p_{\tau}\boldsymbol{T}^{(\tau)}. \tag{21.207}$$

从 $\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ 的实数性质和正交性质得到

$$\int \mathcal{E}_{\perp}^{2}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = 4\pi\sum_{\tau} p_{\tau}^{2}. \tag{21.208}$$

另一方面，由于 $\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ 是横矢量并满足方程(21.200)，作分部积分，我们得到

$$\int\sum_{i}(\nabla A_i)^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = -\int\sum_{i} A_i(\Delta A_i)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

$$= 4\pi\sum_{\tau} k_{\tau}^{2}q_{\tau}^{2}. \tag{21.209}$$

将(21.208)和(21.209)代入能量 U 的表达式中 [(21.188′)式]，得出

$$U = \frac{1}{2}\sum_{\tau}(p_{\tau}^{2} + k_{\tau}^{2}q_{\tau}^{2}) = H_{\mathrm{rad}}.$$

25. 和粒子系耦合的辐射的哈密顿量

在一般情况下，我们一方面可用上一小节引入的正则变量 q_{τ} 和 p_{τ} 来描写辐射的动力学态；另一方面，又可用确定每个粒子位置和动量的变量 $\boldsymbol{R}_n$ 和 $\boldsymbol{P}_n$ 来描写. $\boldsymbol{P}_n$ 通过公式(21.193)而与粒子的力学动量相联系.

从 § 22 的结果[给出 $\boldsymbol{A}$ 的运动的方程(21.182)，给出洛伦兹力方程(21.185—187)]，容易得出用这些新变量表达的运动方程. 具体说来，自由振子的方程(21.202)就被下面的方程所代替:

$$\ddot{q}_{\tau} + k_{\tau}^{2}q_{\tau} = \sqrt{4\pi}\sum_{n} e_n\boldsymbol{V}_n\cdot\boldsymbol{T}^{(\tau)}(n) \tag{21.210}$$

$$[\boldsymbol{V}_n = \dot{\boldsymbol{R}}_n;\ \boldsymbol{T}^{(\tau)}(n) = \boldsymbol{T}^{(\tau)}(\boldsymbol{R}_n)].$$

这些运动方程能写成正则哈密顿形式，其哈密顿量为

$$H = H(q_\tau, p_\tau; \boldsymbol{R}_n, \boldsymbol{P}_n) = H_{\text{rad}} + H_{\text{coul}} + \sum_n H_n. \tag{21.211}$$

其中，H_{rad} 是方程（21.205）定义的自由辐射的哈密顿量；H_{coul} 是方程（21.197）给定的库仑势；H_n 是用正则变量表达的第 n 个粒子的质量能量，即

$$H_n = \sqrt{m_n^2 + (\boldsymbol{P}_n - e_n \boldsymbol{A}(n))^2}, \tag{21.212}$$

其中

$$\boldsymbol{A}(n) = \sqrt{4\pi} \sum_\tau q_\tau \boldsymbol{T}^{(\tau)}(n). \tag{21.213}$$

验证这个重要性质并不困难．留给读者自己完成．

IV. 辐射的量子理论

26. 自由辐射的量子化　光子

就同曾经对标量场作过的那样，应用对应原理，便可从经典理论引出电磁辐射的量子理论．

为了作到这一点，我们从 §24 和 25 中发展起来的哈密顿形式出发．

先考虑自由辐射的情况．经典理论中的实动力学变量 q_τ 和 p_τ 对应着遵从下列对易关系[参看方程(21.11)]的可观测量：

$$[q_\tau, q_{\tau'}] = [p_\tau, p_{\tau'}] = 0$$
$$[q_\tau, p_{\tau'}] = i\delta_{\tau\tau'}.$$

支配系统演化的哈密顿量是方程(21.203)和(21.205)所确定的算符 H_{rad}．所以，按照普朗克定律，辐射是量子化振子的叠加．

§ 3 所作的全部讨论（特别是有关场粒子的部分）都可应用到这里．电磁辐射的微粒称作**光子**．一种振动模式 τ 伴随着一种类型的用“波函数” $T^{(\tau)}$ 表征的光子，它的能量是 k_τ．光子服从玻色-爱因斯坦统计． 这一点与辐射的热力学性质（黑体辐射等）的实验结果非常一致． § 3 末尾有关真空的能量和真空中的场涨落的结论不加改变就能应用到这里．

上述的量子化方法与基矢量场 $T^{(\tau)}$ 集合的选取无关．不过我们假定它们是实的．然而，可以重新作出叙述，使之对复数场 $T^{(\tau)}$ 也是适用的，而且 § 5 所作的论证（即用复数波进行量子化）在这里完全可以重复．普遍的公式容易写出，这里不再给出．我们要详尽地处理平面波场，也要对球面波场作简要的讨论． 在各种可能的展开方式中，平面波展开是最经常采用的．在吸收或发射问题中，球面波展开或多极展开也有用．

27. 平面波　辐射的动量

对于标量场，在 § 6 中已给出平面波展开的典型表述．我们现在要给出辐射的最重要的公式，并指出它与标量场的不同点．

考虑横向平面波场的一个完备集． 为了引入分立指标，将这些场封闭在边长为 L 的立方体中，并在立方体的边界上附加通常的周期性条件． 属于这种基的 $U^{(k\tilde{\omega})}$ 场由给定的波矢量 k 和标记它的极化的量子数 $\tilde{\omega}(\tilde{\omega}=1,2)$ 确定：

$$U^{(k\tilde{\omega})}=L^{-\frac{3}{2}}\varepsilon^{(\tilde{\omega})}e^{ik\cdot r}. \tag{21.214}$$

此式与 § 21 [方程 (21.173b)] 引入的 $T^{(k\tilde{\omega})}$ 的差别仅仅表现在归一化上，矢量 $\varepsilon^{(1)}$ 和 $\varepsilon^{(2)}$ 满足方程 (21.174)，此式在么正变换范围内可确定 $\varepsilon^{(1)}$ 和 $\varepsilon^{(2)}$．

每一个平面波 $U^{(k\tilde{\omega})}$ 与一个湮灭算符 $a_{(k\tilde{\omega})}$ 和一个产生算符 $a^{\dagger}_{(k\tilde{\omega})}$ 相联系．场 A 由下面的展开式表述［参看方程 (21.46)

和 (21.206)]:

$$\boldsymbol{A}=\sum_{k}\sum_{\tilde{\omega}}(2\pi/k)^{\frac{1}{2}}(a_{(k\tilde{\omega})}\boldsymbol{U}^{(k\tilde{\omega})}+a_{(k\tilde{\omega})}{}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{(k\tilde{\omega})*}),\quad(21.215)$$

场 $\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\perp}$ 由下式[参看方程 (21.47) 和 (21.209)] 表述:

$$\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\perp}=\sum_{k}\sum_{\tilde{\omega}}\mathrm{i}(2\pi k)^{\frac{1}{2}}(a_{(k\tilde{\omega})}\boldsymbol{U}^{(k\tilde{\omega})}-a_{(k\tilde{\omega})}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{(k\tilde{\omega})*}).\quad(21.216)$$

a 和 a^{+} 满足湮灭算符和产生算符所特有的对易关系:

$$[a_{(k\tilde{\omega})},a_{(k'\tilde{\omega})}]=[a_{(k\tilde{\omega})}^{\dagger},a_{(k'\tilde{\omega}')}^{\dagger}]=0\quad(21.217a)$$

$$[a_{(k\tilde{\omega})},a_{(k'\tilde{\omega}')}{}^{\dagger}=\delta_{kk'}\delta_{\tilde{\omega}\tilde{\omega}'}.\quad(21.217b)$$

算符

$$N_{(k\tilde{\omega})}=a_{(k\tilde{\omega})}^{\dagger}a_{(k\tilde{\omega})}\quad(21.218)$$

代表 $\boldsymbol{U}^{(k\tilde{\omega})}$ 态中的光子数.

辐射的哈密顿量在规定真空能量为零的情况下是

$$H_{\mathrm{rad}}=\sum_{k}\sum_{\tilde{\omega}}N_{(k\tilde{\omega})}k.\quad(21.219)$$

动量 $\boldsymbol{X}$ 用算符 $\boldsymbol{E}_{\perp}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 表述时,由 (21.189′) 式确定. 用展开式 (21.216) 和 (21.215) 代入此式,就得到(问题 21.6)

$$\boldsymbol{X}=\sum_{k}\sum_{\tilde{\omega}}N_{(k\tilde{\omega})}\boldsymbol{k}.\quad(21.220)$$

从 (21.219) 和 (21.220) 两式,我们得出结论: 状态 $\boldsymbol{U}^{(k\tilde{\omega})}$ 的光子是动量为 $\boldsymbol{k}$ 而能量为 k 的微粒, 即具有零质量和动量 $\boldsymbol{k}$ 的微粒.

光子动量在间隔 $(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}+\delta\boldsymbol{k})$ 内的状态数目等于 $2(L/2\pi)^{3}\delta\boldsymbol{k}$. 这里出现因子 2 的原因是由于给定动量之后还有两种线性独立的极化状态 ($\tilde{\omega}=1,2$). 能量为 k、动量方向为 Ω. 极化态为 $\tilde{\omega}$(§ 6 的定义)的能级密度 $\rho_{L}^{(k)}$ 是

$$\rho_{L}(k)=\frac{L^{3}k^{2}}{(2\pi)^{3}}\quad(21.221)$$

[参看方程(21.49)].

28. 极化

具有同样动量 $\boldsymbol{k}$ 的光子可以因它们的极化状态不一样而彼此不相同. 在经典理论中,极化就是横向电场振动的方向. 它是垂直于传播方向 $\boldsymbol{k}$ 的实数或复数单位矢量(相位未定). 这一定义可毫无困难地推广到现在的情况中. 对于每一个 $\boldsymbol{k}$, 相应有两个线性独立的极化 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)}$, 光子的任何其他可能的极化是这两个基本极化[1]的(幺正)线性组合.

可以取两个相互正交的**线极化**作为基本极化, 即两个实矢量 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)}$. 例如可以这样选择, 使 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}$, $\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 构成实矢量的右手笛卡儿三个轴,这样的基并不完全固定,还许可绕传播方向轴作转动:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(\sigma)*}=\boldsymbol{\varepsilon}^{(\sigma)} \qquad \boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}\times\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)}=\frac{\boldsymbol{k}}{k}.$$

也可以采用两个圆极化 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(+)}$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(-)}$ 作为基本极化:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}^{(+)}&=-\frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}+i\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)})\\ \boldsymbol{e}^{(-)}&=\frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}-i\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)}).\end{aligned}\tag{21.222}$$

注意,

$$\boldsymbol{e}^{(+)}=-\boldsymbol{e}^{(-)*}.$$

我们以后用符号"∧"表示选用这种基本极化而定义的物理量. 因此, 我们可定义圆极化光子的湮灭和产生算符 $\hat{a}_{(\boldsymbol{k}\eta)}$ 和 $\hat{a}^{\dagger}_{(\boldsymbol{k}\eta)}$, 它们对应的平面波是

---

1) 我们在这里只考虑纯态, 通常称作**完全极化**. **部分极化**态是一种统计混合,它可用二维极化态空间的密度算符描述.

$$U^{(k\eta)} = L^{-\frac{3}{2}}\varepsilon^{(\eta)}e^{ik\cdot r} \qquad (\eta = +\text{或}-).$$

我们对圆极化发生兴趣的基本原因是由于它有下述性质：

圆极化光子在其传播方向上有完全确定的角动量分量，右旋极化（$\eta = +$）和左旋极化（$\eta = -$）光子的角动量分量分别等于 $+1$ 或 -1.

为了证明这一点，假设辐射是如下定义的一个状态：

$$|\boldsymbol{k}\pm\rangle = \hat{a}^{\dagger}_{(\boldsymbol{k}\pm)}|0\rangle.$$

这个态描述动量为 $\boldsymbol{k}$ 并且是右旋(+)或者左旋(−)圆极化的光子. 可以证明[问题 (21.8)]:

$$(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{G}^{(0)})|\boldsymbol{k}\pm\rangle = 0 \qquad (21.223)$$

$$(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{G}^{(J)})|\boldsymbol{k}\pm\rangle = (\pm k)|\boldsymbol{k}\pm\rangle, \qquad (21.224)$$

其中，矢量算符 $\boldsymbol{G}^{(0)}$ 和 $\boldsymbol{G}^{(J)}$ 分别由方程(21.191a)和(21.191b)确定. 按照方程 (21.190′)，总角动量 $\boldsymbol{G}$ 是这两个矢量算符之和. 用 G_k 代表它在 $\boldsymbol{k}$ 方向的分量:

$$G_k = \frac{(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{G})}{k}.$$

从上面两个方程，得到所需要的结果:

$$G_k|\boldsymbol{k}\pm\rangle = (\pm 1)|\boldsymbol{k}\pm\rangle.$$

这个性质是自旋为 1 的粒子的一个特征. 更普遍而言，如果自旋为 1 的粒子有完全确定的动量 $\boldsymbol{k}$，则其轨道角动量在 $\boldsymbol{k}$ 上的分量为 0，而且其自旋在 $\boldsymbol{k}$ 方向的分量可取三个数值 $+1$, 0, -1 中的一个. 然而，对于光子这一特殊情况，纵向平面波(它对应的自旋分量为零)必须取消.

29. 多极展开　具有确定角动量和宇称的光子

不愿按平面波展开的话，我们就可以按球面波系列展开，其中每一个球面波对应的角动量和宇称是完全确定的. 在这

里我们只给出主要结果而不加证明．不过，证明并不困难．

矢量场 $\boldsymbol{B}(\mathbf{r})$ 可以看作是一个 3 分量的波函数，它表述自旋为 1 的粒子的动力学状态．在选定构成波函数的 $\boldsymbol{B}$ 的分量时，存在一定的任意性．例如，可以选择 B_x, B_y 和 B_z；但为了现在讨论的需要，我们更愿意选取标准形式的分量：

$$B_+ = -\frac{\sqrt{2}}{2}(B_x - \mathrm{i}B_y)$$

$$B_0 = B_z$$

$$B_- = \frac{\sqrt{2}}{2}(B_x + \mathrm{i}B_y).$$

波函数是 $\mathbf{r}$ 和指标 μ 的函数：

$$\Psi(\boldsymbol{r}, \mu) \equiv B_\mu(\boldsymbol{r}).$$

其中，μ 用来标记所涉及的分量，$\mu = +1, 0, -1$．在这一点上，自旋为 1 的粒子和自旋为 1/2 的粒子之间有很多类似之处(参看 § 13.20—21)．

自旋为 1 的粒子的可观测量是它的位置 $\boldsymbol{r}$，动量 $\boldsymbol{p}$ 和自旋 $\boldsymbol{s}$ 的函数．在这里规定的表象中，$\boldsymbol{p} = -i\nabla$；而表述自旋分量 s_+, s_0, s_- 的矩阵由方程(13.28)给定(取 $j = j' = 1$)．容易验证：$\boldsymbol{S}^2 = 2$．这是等于 1 的角动量的一个特征值．

我们可以定义单个粒子的轨道角动量为

$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

以及它的总角动量为

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}.$$

依照角动量算符的通常定义，$\boldsymbol{j}$ 的分量与矢量场的无穷小转动有关．

我们类似地定义宇称算符 P．它是一个算符，当它作用在场 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ 上就得到 $B(\boldsymbol{r})$ 在以原点为中心的反射中的变

换[1]:

$$PB_\mu(\boldsymbol{r}) = -B_\mu(-\boldsymbol{r}).$$

现在我们建立具有确定角动量（jm）并满足下述波动方程的矢量场的完全集:

$$(\Delta + k^2)\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = 0.$$

这等于寻找 $\boldsymbol{p}^2$, $\boldsymbol{j}^2$ 和 j_z 的共同本征函数集；对应的本征值分别为 k^2, $j(j+1)$ 和 m；k 取 0 至 $+\infty$ 的所有数值(将场禁闭在有限半径 R 的球内，k 的谱就变成分立的)；j 取 0 至 $+\infty$ 的所有整数；m 取 $-j$ 至 $+j$ 的所有整数.

从角动量相加的性质，我们可以断定 $\boldsymbol{p}^2$, $\boldsymbol{l}^2$, $\boldsymbol{j}^2$ 和 j_z 构成相互对易的可观测量的一个完全集，而且每一组（kjm）对应有:

(i) 如果 $j \neq 0$，就有三个线性独立的态，分别是

$$l = j+1, j, j-1;$$

(ii) 如果 $j = 0$ 则只有一个态，$l = 1$.

这些状态有完全确定的宇称，即

$$P = (-)^{l+1}.$$

如不是象上面那样按照 l 的可能取值对状态（kjm）分类，那末我们可按它们的横向或纵向特征以及它们的宇称来分类. 场的横向或纵向特征与算符 $(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})$ 的性质有关. 在这里所采用的表象中，我们有[方程 (8.93)]

$$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p}) \equiv \text{curl}$$

$$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2 - \boldsymbol{p}^2 \equiv \text{grad div} \qquad (\equiv \text{curl curl} + \Delta).$$

对于纵场，$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2 = 0$；对于横场，$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2 - \boldsymbol{p}^2 = 0$. 可

---

1) 我们假定 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ 是极矢量场，因此作空间反射时出现负号. 在不计宇称的正负号时，下面给出的全部性质几乎都可应用到轴矢量场或赝矢量场上(参看§ 20.11 末的注释).

以证明：$\boldsymbol{p}^2$，$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})$，$P$，$\boldsymbol{j}^2$ 和 j_z 形成相互对易的可观测量的完备集，而且每一组 (kjm) 对应有：

(i) 如果 $j\neq 0$，则有三个线性独立的状态，分别是

$$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2 = 0 \quad k^2 \quad k^2$$
$$P = (-)^j \quad (-)^j \quad (-)^{j+1}.$$

(ii) 如果 $j=0$，则只有一个状态，它是偶宇称的而且是纵场：

$$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2 = 0 \qquad P = +1$$

(这是上面已述及的 p 态)。

为了建立相应的基函数，我们回到 §7 中引入的、与标量场有关的函数 u_{kjm}。定义(21.60)中的常数是 k 的某种函数，假定我们对它作这样的选择：使 u_{kjm} 构成一个正交完备的标量函数集。每一组 (kjm) 仅仅对应一个纵向状态。相应的基函数是

$$\boldsymbol{\Lambda}_{kjm} = \operatorname{grad}\frac{u_{kjm}}{k}$$

(这是宇标为 $(-1)^j$ 的矢量场)。对于每一组 (kjm) [$j=m=0$ 的情况除外]，相应有两个宇称相反的横向状态。相应的基函数分别为[1]：

$$\boldsymbol{\Theta}^{(-)}_{kjm} = \frac{\boldsymbol{l}u_{kjm}}{\sqrt{j(j+1)}} \quad (P=(-)^{j+1}) \qquad (21.225a)$$

$$\boldsymbol{\Theta}^{(+)}_{kjm} = \frac{\nabla\times\boldsymbol{l}u_{jkm}}{k\sqrt{j(j+1)}} \quad (P=(-)^j). \qquad (21.225b)$$

还要注意到：

$$\boldsymbol{\Theta}^{(\pm)}_{kjm} = \operatorname{curl}\frac{\boldsymbol{\Theta}^{(\mp)}_{kjm}}{k}.$$

---

1) 这里所标出的宇称与大多数作者(例如上面已引用过的 Blatt 和 Weisskopf 的书)给出的反号，因为这里引入的是极矢量场，而那些作者考虑的是轴矢量场.

场 $\boldsymbol{\Theta}^{(\tilde{\omega})}_{kjm}$ 的集（其中 k 在 0 至 $+\infty$ 之间变化；$j=1,2,\cdots;m=-j,\cdots,+j;\tilde{\omega}=+$或$-$）构成横向场的一个完备正交集．算符 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\perp}$ 可按这个集展开：

$$\boldsymbol{A}=\sum_{kjm\tilde{\omega}}(2\pi/k)^{\frac{1}{2}}[a^{(\tilde{\omega})}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\tilde{\omega})}_{kjm}+a^{(\tilde{\omega})\dagger}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\tilde{\omega})*}_{kjm}] \quad (21.226)$$

$$\boldsymbol{\mathscr{E}}_{\perp}=\sum_{kjm\tilde{\omega}}(2\pi k)^{\frac{1}{2}}\mathrm{i}[a^{(\tilde{\omega})}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\tilde{\omega})}_{kjm}-a^{(\tilde{\omega})\dagger}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\tilde{\omega})*}_{kjm}]. \quad (21.227)$$

按照通常使用的术语，这些展开式中的 $\boldsymbol{\Theta}^{(+)}_{kjm}$ 项表述**电 2^L 极**的贡献；$\boldsymbol{\Theta}^{(-)}_{kjm}$ 项是磁 2^L 极的贡献．在 § 27 中所作的、与平面波展开有关的全部工作在这里都可以对多极展开重复进行．算符 $a^{(\tilde{\omega})}_{kjm}$ 和 $a^{(\tilde{\omega})\dagger}_{kjm}$ 可分别解释成能量为 k．角动量为 (jm)、宇称为 $(-1)^j\tilde{\omega}$ 的光子湮灭算符和产生算符．至于 k,j,m 和 $\tilde{\omega}$ 的谱已在上面讲过．观测表明：不存在零角动量的光子．

30. 辐射与原子系统的耦合

我们现在考虑辐射与粒子系统的耦合．处理方法和用于标量场的类似．我们在这里只限于指出基本要点．

除了一些很明显的修改外，系统的哈密顿量和经典理论中的相同[参看方程 (21.211)]．要作的修改与所考虑的粒子的动力学性质及自旋有关．我们在这里只讨论原子系统的情况，它包含 Z 个电子和一个电荷为 $-Ze$ 的核（e 是电子的电荷）．

我们先假定核不存在，并写出系统（Z 个电子＋辐射）的哈密顿量．于是，总哈密顿量由方程 (21.211) 给定，其中，H_{rad} 描写自由辐射的哈密顿量，H_{coul} 是电子的库仑相互作用，H_n 是当 $\boldsymbol{A}$ 场存在时第 n 个电子的狄拉克哈密顿量，即

$$H_n=\boldsymbol{\alpha}_n\cdot[\boldsymbol{P}_n-e\boldsymbol{A}(n)]+\beta_n m. \quad (21.228)$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_n$ 和 β_n 是第 n 个电子的狄拉克矩阵．

在非相对论近似下，除去静止质量之后，H_n 变为

$$(H_n)_{NR} = \frac{(\boldsymbol{P}_n - e\boldsymbol{A}(n))^2}{2m} - \frac{e}{2m}(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \mathscr{H}(n)). \tag{21.229}$$

我们注意，在 H_n 中[方程(21.228)]的电子-辐射耦合项可写成

$$H'_n = -e\int (\boldsymbol{j}_n(\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))d\boldsymbol{r}, \tag{21.230}$$

其中，$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ 代表 $\boldsymbol{r}$ 点的电子的狄拉克电流密度，即[参看方程(20.143)]

$$\boldsymbol{j}_n(\boldsymbol{r}) \equiv \boldsymbol{\alpha}_n \delta(\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{r}). \tag{21.231}$$

$e\boldsymbol{j}_n(\boldsymbol{r})$是第 n 个电子的电流密度. 将 $\boldsymbol{j}_n$ 的非相对论近似公式[方程(20.189—190)]代入(21.230)，我们就得到非相对论近似下的耦合项 $(H'_n)_{NR}$:

$$(H'_n)_{NR} \equiv H_n^{(\mathrm{I})} + H_n^{(\mathrm{II})} + H''_n \tag{21.232}$$

$$H_n^{(\mathrm{I})} = -\frac{e}{2m}(\boldsymbol{P}_n \cdot \boldsymbol{A}(n) + \boldsymbol{A}(n) \cdot \boldsymbol{P}_n) \tag{21.233a}$$

$$H_n^{(\mathrm{II})} = -\mathrm{i}\frac{e}{2m}[\boldsymbol{\sigma}_n \cdot ([\boldsymbol{P}_n \times \boldsymbol{A}(n)] + [\boldsymbol{A}(n) \times \boldsymbol{P}_n])] = -\frac{e}{2m}[\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \mathscr{H}(n)] \tag{21.233b}$$

$$H''_n = \frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}^2(n). \tag{21.233c}$$

这恰好是公式(21.22a)描述的电子-辐射的耦合.

为了把原子核存在的效应考虑在内，我们必须在哈密顿量中加上 Z 个电子与核的库仑相互作用项. 还要加上原子核在辐射中的哈密顿量，它包括动能项以及核与辐射的耦合

项[1]. 把原子核当作无限重来处理的情况下(实质上是非相对论近似),所附加的最后两项可以忽略.因此,可将核固定在原点上,我们只需附加Z库仑项$\left(-\frac{Ze^2}{R_n}\right)$. 于是,将原子简单地处理为Z个电子的集合,其中每一个都在外势$-\frac{Ze^2}{R}$中运动,而且与电磁场耦合. 相应的哈密顿量写成:

$$H = H_{\text{rad}} + H_{\text{at}} + H'. \tag{21.234}$$

其中,H_{rad}仍是自由辐射的哈密顿量;H_{at}是原子本身的哈密顿量(即包括核库仑场中的电子哈密顿量和它们彼此之间的库仑相互作用),它是库仑作用项H_{coul}和Z个电子的动能之和;H'是原子的电子与辐射的耦合项,它是方程(21.230)决定的Z个耦合项H'_n之和. 在下面,我们将采用非相对论近似来处理电子的运动. 所以,我们采用方程(21.232)和(21.233)给定的H'_n的近似形式,换言之

$$H' = H^{(I)} + H^{(II)} + H'', \tag{21.235}$$

其中

$$H^{(I)} = \sum_n H_n^{(I)}, \qquad H^{(II)} = \sum_n H_n^{(II)},$$

$$H'' = \sum_n H''_n. \tag{21.235'}$$

研究这样的体系时,通常用两种近似方法.

第一种是**经典地处理电磁辐射**. 当原子与辐射之间的能量传递比发射或吸收的光子能量大得多,以致能量传递的不连续特征可忽略时,这种处理在所有情况下都是合理的. 在高强度和低频率情况下(多光子参予),这是一个很好的近似.

---

1) 在这里我们假定核可当作点电荷处理. 当涉及的频率小于核的激发能时,这个近似是合理的.

它特别适合于用来研究原子在静电磁场或射电场中的行为。因此，电磁场被考虑为一个给定的可能与时间有关的外场。问题就约化为研究原子在外场中的行为。

第二种方法是**将耦合项 H' 当作小的微扰来处理**，正如对标量场所作的那样。

§ 10 的讨论略作改动就可以在这里重复进行。非微扰哈密顿量是

$$H_0 = H_{\mathrm{rad}} + H_{\mathrm{at}}.$$

为了应用微扰方法，我们必须采用 H_0 是对角的那种表象。对辐射场取 § 27 规定的平面波表象，我们来确定 H_0 的基矢，它是 H_{at} 和算符 $N_{(k\tilde{\omega})}$ 的共同本征矢量。其中 $N_{(k\tilde{\omega})}$ 表述给定动量和极化的光子数。

在此表象中，利用以 $a_{(k\tilde{\omega})}$ 和 $a^{\dagger}_{(k\tilde{\omega})}$ 表示的 H' 的表达式，我们就容易得到 H' 的矩阵元。把 $\boldsymbol{A}$ 的展开式代入 (21.233) 中，就有：

$$H_n^{(\mathrm{I})} = -\frac{e}{m}\sum_s\left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{\frac{1}{2}}(a_s(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{\epsilon})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} + \mathrm{h.c.}) \tag{21.236a}$$

$$H_n^{(\mathrm{II})} = -\frac{e}{2m}\sum_s\left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{\frac{1}{2}}(ia_s(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\epsilon})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} + \mathrm{h.c.}) \tag{21.236b}$$

$$H_n^H = \frac{e^2}{2m}\sum_s\sum_{s'}\frac{\pi}{\sqrt{kk'L^3}}([a_sa_{s'}(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\epsilon}')e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{R}} + \mathrm{h.c.}] + [a_s^{\dagger}a_{s'}(\boldsymbol{\epsilon}^*\cdot\boldsymbol{\epsilon}')e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{R}} + \mathrm{h.c.}]). \tag{21.237}$$

[为了简化书写，我们令 $s \equiv (k\tilde{\omega})$，$s' \equiv (k'\tilde{\omega}')$，而且分别用 $\boldsymbol{R}, \boldsymbol{P}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\epsilon}$ 和 $\boldsymbol{\epsilon}'$ 代表 $\boldsymbol{R}_n, \boldsymbol{P}_n, \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\epsilon}^{(\tilde{\omega})}$ 和 $\boldsymbol{\epsilon}^{(\tilde{\omega}')}$]。这些展开式代入 (21.235) 和 (21.235′) 中，就得到所要求的 H'

的表达式.

耦合项H'的出现使原子的所有能级发生移位，而且除基态以外(记住，光子的质量等于零)，它们全都变得不稳定. 这个效应完全可以在微扰方法的框架内处理. 显然，我们在这里遇到了标量场中的同样困难，尽管耦合常数e是很小的($e^2 = 1/137$). 具体说，存在一个"紫外灾难"，它与H'是一种定域相互作用这事实有关[参看方程(21.230)和(21.231)]. 引入适当的截断，这个灾难可以避免. 出于和前面一样的原因，这个截断通常取在量级为m的频率处. 我们已经讨论过有关这种截断方法的限制以及粒子质量、电荷必须重正化引起的困难. 第II节所作的有关能级移位和亚稳态性质(寿命、线宽、形成和衰变模式)的全部讨论都可不作重大的改变就推广到辐射的情况中[1]. 类似地，第二节所处理的几个碰撞问题，在辐射的情况下也可用同样的方法处理. 在这一章的结尾中，我们叙述辐射量子理论的两个简单应用，就是：计算原子发射辐射的几率和计算低频极限条件下的康普顿散射截面.

31. 原子发射光子　偶极发射

考虑一个处于能量为E_λ的激发态$|\lambda\rangle$的原子. 这样的原子可跃迁到能量$E_\alpha, E_\beta, \cdots$低于$E_\lambda$的状态$|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \cdots$中的任一态，并且发射一个光子，其能量等于始态和终态能量之差.

---

1) 由于光子是质量等于0而自旋为1的粒子，因而辐射的情况变得复杂. 除"紫外灾难"之外，零质量还导致一个"红外灾难"，即在微扰展开式中，存在某些低频发散项. "红外灾难"是方法本身的一个困难，改进方法之后是可以避免的. 另一方面，"紫外灾难"是理论固有的困难，这个问题目前没有满意的解答.

因此，我们考虑跃迁

$$\lambda \to \mu k\epsilon.$$

其中，μ 是原子的终态，k 和 ϵ 是发射的光子的动量和极化，并且

$$k = E_\lambda - E_\mu. \tag{21.238}$$

单位时间的跃迁几率 $w_{\lambda\to\mu k\epsilon}$ 由微扰计算中的第一级给定，如下式所示(参看 § 12)：

$$w_{\lambda\to\mu k\epsilon} = 2\pi|\langle\lambda|H'|\mu k\epsilon\rangle|^2\left(\frac{L^3k^2}{(2\pi)^3}\right). \tag{21.239}$$

从方程 (21.235) 看出：H' 由三项组成. 在上式中，第三项 H'' 对上式中的矩阵元的贡献为零[1]. 借助于展开式 (21.236)，容易得出前两项的贡献：

$$\langle\lambda|H^{(\mathrm{I})}|\mu k\epsilon\rangle = -\frac{e}{m}\left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{\frac{1}{2}}F^{(\mathrm{I})} \tag{21.240a}$$

$$\langle\lambda|H^{(\mathrm{II})}|\mu k\epsilon\rangle = \frac{ie}{m}\left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{\frac{1}{2}}F^{(\mathrm{II})}, \tag{21.240b}$$

其中

$$F^{(\mathrm{I})} \equiv \left\langle\lambda\left|\sum_n(\epsilon\cdot p_n)e^{ik\cdot R_n}\right|\mu\right\rangle \tag{21.241a}$$

$$F^{(\mathrm{II})} \equiv \left\langle\lambda\left|\frac{1}{2}\sum_n(\epsilon\cdot k\times\sigma_n)e^{ik\cdot R_n}\right|\mu\right\rangle. \tag{21.241b}$$

这些表达式代入 (21.239) 中，我们最终得到公式

$$w_{\lambda\to\mu k\epsilon} = \frac{e^2k}{2\pi m^2}|F^{(\mathrm{I})} - iF^{(\mathrm{II})}|^2, \tag{21.242}$$

其中，$F^{(\mathrm{I})}$ 和 $F^{(\mathrm{II})}$ 代表关系式 (21.241) 规定的矩阵元.

---

1) H'' 的作用是：或者使出现的光子数不变，或者使这光子数增加或减少 2 单位. 注意，H'' 是 e 的二级项. 所以，在 e 的一级微扰计算中，它可略去. 在计算能级移位(它是二级效应，参看 § 11) 时，H'' 的贡献不能忽略. 在光子散射问题中，它也是重要的.

在通常的原子跃迁过程中，跃迁几率的数量级与$|\lambda\rangle$,$|\mu\rangle$态的角动量(j_λ, j_μ)及宇称(Π_λ, Π_μ)密切相关.

若 $j_\lambda = j_\mu = 0$，则跃迁几率为零，因为 $F^{(1)}$ 和 $F^{(11)}$ 的矩阵元恒等于零(问题 21.10). **这是众所周知的 $0\to0$ 选择定则**. 它与不存在零角动量的光子这事实有关(参看 § 29).

如果 j_λ 或 j_μ 不为零，则跃迁几率可用长波近似来处理. 令 R 是量级为原子大小的长度，在通常的原子跃迁过程中，

$$k \lesssim \frac{e^2}{R} \simeq me^4,$$

所以

$$kR \lesssim e^2 \ll 1.$$

因此，表达式 (21.241) 可以如此估计：指数因子用它的泰勒展开式中的头一个非零贡献项代替. 这一项的量级主要取决于角动量和宇称的选择定则，不拟在这里讨论这问题[1]. 当其他因素相同的情况下，在所谓**电偶极**跃迁中，这种跃迁几率是最大的，此时

$$\Delta j \equiv |j_\lambda - j_\mu| \leqslant 1 \qquad \Delta\Pi \equiv \Pi_\lambda\Pi_\mu = -1 \qquad (21.243)$$
$$(j_\lambda + j_\mu = 0 \quad \text{除外}).$$

其次是磁偶级跃迁($\Delta j \leqslant 1, \Delta\Pi = 1, j_\lambda + j_\mu \neq 0$)和电四极跃迁 ($\Delta j \leqslant 2, \Delta\Pi = +1, j_\lambda + j_\mu \neq 0$ 或 1)，它们比电偶极跃迁小 $(kR)^{-2}$ 倍.

当满足电偶极发射的条件 (21.243) 时，我们可写出

---

1) 如果我们利用多极展开而不用平面波展开，则结果会以更自然的方式表现出来. 由于选择定则的限制，展开式中的大多数项的贡献等于零，其他的可如此处理：多极场 Θ 用它的 kr 幂展开式的第一项代替. 注意[参看方程 (21.225)]，当 $kr \ll 1$ 时，

$$\Theta^{(+)}_{kjm} \propto (kr)^{j-1} \qquad \Theta^{(-)}_{kjm} (kr)^j.$$

这方法的完整的讨论涉及到核辐射跃迁可以在 § 13.33 注释所引的 J. B. Blatt 和 V. Weiskopf 的书中(第十二章)找到.

$$F^{(\mathrm{I})} \simeq \left\langle \lambda \left| \sum_n (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{p}_n) \right| \mu \right\rangle$$

$$F^{(\mathrm{II})} \simeq \frac{1}{2} i \left\langle \lambda \left| \sum_n (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\sigma}_n)(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_n) \right| \mu \right\rangle.$$

所以，我们粗略地得到：$F^{(\mathrm{I})} \approx 1/R$，$F^{(\mathrm{II})} \approx k^2 R$，即

$$|F^{(\mathrm{II})}/F^{(\mathrm{I})}| \approx (kR)^2 \ll 1.$$

和 $F^{(\mathrm{I})}$ 比较起来，$F^{(\mathrm{II})}$ 的贡献可以忽略．为了计算 $F^{(\mathrm{I})}$，引入电子的电偶极矩

$$\boldsymbol{D} \equiv e \sum_n \boldsymbol{p}_n. \tag{21.244}$$

是合适的．[这是 § 13.33 和 § 17.3 中的 $\boldsymbol{Q}^{(l)}$ 所代表的矢量算符，参看方程 (17.35)]．

$\boldsymbol{D}$ 满足如下的关系式：

$$[\boldsymbol{D}, H_{\mathrm{at}}] = ie \sum_n \frac{\boldsymbol{p}_n}{m}.$$

所以

$$\frac{ie}{m} \left\langle \lambda \left| \sum_n \boldsymbol{p}_n \right| \mu \right\rangle = \langle \lambda | (\boldsymbol{D} H_{\mathrm{at}} - H_{\mathrm{at}} \boldsymbol{D}) | \mu \rangle$$

$$= (E_\mu - E_\lambda) \langle \lambda | \boldsymbol{D} | \mu \rangle = -k \langle \lambda | \boldsymbol{D} | \mu \rangle.$$

由此，

$$F^{(\mathrm{I})} = \frac{imk}{e} \langle \lambda | (\boldsymbol{D} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) | \mu \rangle,$$

以及

$$w_{\lambda \to \mu k\epsilon} = \frac{k^3}{2\pi} |\langle \lambda | (\boldsymbol{D} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) | \mu \rangle|^2. \tag{21.245}$$

在这里仔细讨论一下始态和终态的“磁量子数”m_λ 和 m_μ，以及按照定义 (13.125) 引入约化矩阵元 $\langle \lambda \| D \| \mu \rangle$ 是合适的．如果 D_q 代表矢量算符 $\boldsymbol{D}$ 的第 q 个标准分量，则维格纳-爱卡

特定律给出：

$$\langle \lambda j_\lambda m_\lambda | D_q | \mu j_\mu m_\mu \rangle = (2j_\lambda + 1)^{-\frac{1}{2}} \langle j_\mu 1 m_\mu q | j_\lambda m_\lambda \rangle \langle \lambda \| \boldsymbol{D} \| \mu \rangle .$$

由于 $\boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{D} = \sum_q \varepsilon_q D_q$，其中 $\varepsilon_q (q = +, 0, -)$ 代表极化矢量的标准分量[定义 (13.94)]，我们得到

$$w_{\lambda \to \mu \boldsymbol{k}\boldsymbol{e}} = \left[\frac{k^3 |\langle \lambda \| \boldsymbol{D} \| \mu \rangle|^2}{2\pi} \right] \times \left[\frac{\left| \sum_q \varepsilon_q \langle j_\mu 1 m_\mu q | j_\lambda m_\lambda \rangle \right|^2}{(2j_\lambda + 1)} \right]. \qquad (21.246)$$

如果始态原子是非极化的，而且不观测终态的极化，则我们必须对 m_μ 求和并对 m_λ 求平均，即

$$\langle w_{\lambda \to \mu \boldsymbol{k}\boldsymbol{e}} \rangle \equiv \frac{1}{2j_\lambda + 1} \sum_{m_\lambda m_\mu} w_{\lambda \to \mu \boldsymbol{k}\boldsymbol{e}} .$$

利用 C.—G. 系数的对称性和正交性[参看方程 (C.13c) 和 (C.14a)]，这种求和及求平均是容易完成的，得到

$$\langle w_{\lambda \to \mu \boldsymbol{k}\boldsymbol{e}} \rangle = \frac{k^3 |\langle \lambda \| \boldsymbol{D} \| \mu \rangle|^2}{6\pi (2j_\lambda + 1)} .$$

正象所期望的一样，得到的公式既与发射方向无关，又与发射出来的光子的极化无关。对两个极化态求和并对发射角积分，即上式乘 8π，就得到单位时间内 $\lambda \to \mu$ 的总跃迁几率：

$$w_{\lambda \to \mu}^{(\mathrm{tot})} = \frac{4k^3}{3(2j_\lambda + 1)} |\langle \lambda \| \boldsymbol{D} \| \mu \rangle|^2 . \qquad (21.247)$$

32. 低能康普顿散射　汤姆孙公式

作为碰撞问题的一个例子，我们不考虑第 II 节处理过的那些散射——这是可以用同样的方法解决的，而来考虑比较

简单的康普顿散射问题(光子被自由电子所散射)[1]

碰撞之前、系统的状态是：电子的动量为 $\boldsymbol{p}_i$ 而光子的动量和极化分别为 $\boldsymbol{k}_i$ 和 $\boldsymbol{\epsilon}_i$. 这个状态用某一刃矢 $|i\rangle$ 描写：

$$|i\rangle \equiv |\boldsymbol{p}_i \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{\epsilon}_i\rangle.$$

我们要计算从这样的始态变到某一终态的散射截面，终态电子的动量和光子的动量及极化分别为 $\boldsymbol{p}_f$, $\boldsymbol{K}_f$ 和 $\boldsymbol{\epsilon}_f$; 用 $|f\rangle$ 代表：

$$|f\rangle \equiv |\boldsymbol{p}_f \boldsymbol{k}_f \boldsymbol{\epsilon}_f\rangle.$$

在碰撞过程中，能量和动量是守恒的.

为了计算在各种能量下的截面，电子必须当作一个通过相互作用 $(-e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}))$ 而与辐射场耦合的狄拉克粒子来处理. 在这一小节，我们只限于处理低频极限[2]下的问题.

设开始时电子是静止的 $(\boldsymbol{p}_i = 0)$，入射光子是足够软的，以致传递给电子的能量远小于其静止质量：

$$k_f \ll m$$

(因此，$k_f \simeq k_i$, $P_f \approx k_f$). 电子用非相对论近似处理. 系统的哈密顿量为

$$H = H_0 + H',$$

其中，

$$H_0 = H_{\text{rad}} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}.$$

按照方程 (21.235)，H' 是 $H^{(\text{I})}$, $H^{(\text{II})}$ 和 H'' 这三项之和，它们分别由方程 (21.236a)，(21.236b) 和 (21.237) 确定.

为了计算碰撞截面，我们应用碰撞理论的公式. 显然，这

---

1) 在标量场的情况下，场粒子被自由粒子散射的截面等于零.

2) 普遍情况可用同样的方法处理(参看上面已提及的 Heitler 的书)，并且得到 Klein-Nishina 公式. 计算是沉长的但并不困难. 事实上，利用辐射量子理论的协变形式，计算可大为简化(参看上面提及的 Jauch 和 Rohrlich 的文章).

里也要注意到§14所考虑的那些事项. 我们在这里不再考虑这个问题,但要象在§14那样假定: 碰撞理论给出的公式是正确的,前提是其中的电子质量就是实验测定的质量.

然而,直接应用碰撞理论的形式遇到另外一个困难,即不可能确定并分离出质心变量. 这个困难只是表观上的. 实际上,在非相对论碰撞理论中,消除质心运动只占次要的地位. 由于碰撞过程中总动量守恒而使结果简化. 有可能重新陈述一种碰撞理论形式,使得无需作这种消除,但动量守恒又明显地表现出来.

在这里将利用这种新的陈述形式. 唯一要修改的是关于跃迁振幅 $T_{i\to f}$ 的定义. 我们对 T 采用同样的形式定义:

$$T = H' + H' \frac{1}{E - H + i\varepsilon} H'.$$

因为 T 对平移是不变的,所以矩阵元 $\langle f|T|i\rangle$ 包含一个保证总动量守恒的 δ 函数. $T_i \to f$ 由下式所定义:

$$\langle f|T|i\rangle = (2\pi)^3\delta(\boldsymbol{p}_f + \boldsymbol{k}_f - \boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{k}_i)T_{i\to f}. \quad (21.248)$$

这里出现因子 $(2\pi)^3$ 是由于对电子平面波采用了如下的归一化:

$$\langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}'\rangle = (2\pi)^3\delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}').$$

现在,碰撞截面仍由普遍公式(21.116)给定.

为了计算 $\langle f|T|i\rangle$,我们将 T 展开成 e 的幂级数,并且只保留最低级项,即只保留到 e^2 项:

$$\langle f|T|i\rangle = \langle f|H''|i\rangle + \langle f|(H^{(\mathrm{I})}+H^{(\mathrm{II})}) \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} (H^{(\mathrm{I})} + H^{(\mathrm{II})})|i\rangle + O(e^4). \quad (21.249)$$

从公式(21.236a; b)和(21.237)清楚地看出: 上式右边的每一项都包含如下的一个因子

$$\int e^{i(\boldsymbol{p}_i+\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{p}_f-\boldsymbol{k}_f)\cdot\boldsymbol{R}}d\boldsymbol{R}=(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{p}_f+\boldsymbol{k}_f-\boldsymbol{p}_i-\boldsymbol{k}_i).$$

这是上面已提及的动量守恒因子. 从表达式(21.237)得到

$$\langle f|H'|i\rangle=\frac{2\pi e^2}{mkL^3}(\boldsymbol{\epsilon}_f^*\cdot\boldsymbol{\epsilon}_i)\int e^{i(\boldsymbol{k}_i+\boldsymbol{p}_i-\boldsymbol{k}_f-\boldsymbol{p}_f)\boldsymbol{R}}d\boldsymbol{R}, \quad (21.250)$$

令 $k=(k_ik_f)^{1/2}$. 因为我们只考虑低频极限，所以我们忽略量级为 $\frac{k}{m}$ 的与 1 相比是不重要的项，而且就写成

$$k_i\simeq k_f\simeq k.$$

容易证明：方程(21.249)右边第二项贡献的量级为 k/m，它大于第一项的贡献. 所以第一项可以忽略. 在现在的近似下 ($e^2\ll 1, k\ll m$) 我们得到

$$T_{i\to f}=\frac{2\pi e^2}{mkL^3}(\boldsymbol{\epsilon}_f^*\cdot\boldsymbol{\epsilon}_i), \quad (21.251)$$

散射截面为[参看方程(21.116)]

$$\frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega}=2\pi L^3|T_{i\to f}|^2\left(\frac{L^3k^2}{(2\pi)^3}\right)$$

$$=\frac{e^4}{m^2}|\boldsymbol{\epsilon}_f^*\cdot\boldsymbol{\epsilon}_i|^2. \quad (21.252)$$

为了得到沿方向 $\boldsymbol{k}_f$ 传播的非极化光子的散射截面，我们必须对两个可能的初始极化状态求平均并对两个可能终态极化求和. 光子的散射角用 $\theta(\cos\theta=\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{k}_f/k^2)$ 代表，我们得到

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega}\bigg|_{\text{non pol}}=\frac{1}{2}\sum_{\epsilon_i\epsilon_f}\frac{\mathrm{d}\sigma_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega}$$

$$=\frac{1}{2}\frac{e^4}{m^2}(1+\cos^2\theta). \quad (21.253)$$

对光子发射角作积分，可得到光子的总散射截面 σ_{tot}. 我们求

出：

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{8\pi}{3}\frac{e^4}{m^2}. \tag{21.254}$$

这些结果都很好地和实验一致。

公式(21.252—254)与经典辐射理论[1]得到的结果相同。尤其是，我们得到了总截面的**经典汤姆孙公式**。两种理论所得结果相同这一点进一步证实了我们在§1.5中所说到的，即有关康普顿效应的经典理论的意义和限制。经典理论显然不能说明辐射的粒子特征，也不能说明辐射与电子之间所发生的能量和动量传递是分立量子化的，但它正确地预言了单位时间、单位入射通量的辐射传递给电子的平均动量大小[方程(21.254)]；也正确地预言了散射后辐射的角分布和极化[见方程(21.252)]；而且考虑多普勒效应后，也正确预言了散射辐射波长的移位[见方程(1.5)和(1.6)]。

两种理论的一致性只在低频极限下才是真实的。此时辐射的波长$(1/k)$是如此之大，使得散射过程实际上与电子的内部结构无关。由于电子是一种量子容体，所以，它的线度约为$\frac{1}{m}$，它的结构效应[2]的量级为$\frac{k}{m}$。在非相对论极限下这些效应由公式(21.24)的第二项给定。随着入射能量的增加，电子的量子性质越来越明显。观测结果与经典理论预言的偏离也就增加。

---

1) 常数$\hbar$不出现在这些公式中，两种理论的结果都正比于电子的经典半径$r_0 = \frac{e^2}{mc^2}$的平方。例如公式(21.252)也可以写成$r_0^2\cos^2\alpha$，其中α代表初态和终态极化之间的夹角(设它是线极化)。

2) 在经典理论中，结构效应的量级是$\frac{ke^2}{m}$，即电子经典半径与辐射波长之比。

练 习 和 问 题

1. $\Phi(x)$代表第 I 节所说的实标量场，我们需要度量这一可观测量在有限体积内的积分，更一般而言，我们要考虑积分

$$\hat{\Phi} \equiv \int \Phi(x)P(x)\,\mathrm{d}x,$$

其中，$P(x)$ 是给定的非负实函数，它对整个空间的积分等于 1．令

$$\chi(\kappa) \equiv \int \exp(i\kappa \cdot x)P(x)dx \qquad (\chi(0) = 1).$$

证明：在真空态上，$\hat{\Phi}$ 的统计分布是高斯型的，而且有

$$(\Delta\hat{\Phi})^2 = \int \frac{|\chi(\kappa)|^2}{16\pi^3(\mu^2 + \chi^2)^{1/2}}\,\mathrm{d}\kappa.$$

特别是，若权重函数 $P(x)$ 只在线度为 a 的区域内有显著的大小，而且 $\mu a \ll 1$，就得到：$\Delta\hat{\Phi} \approx \frac{1}{a}$.

对电磁场，请讨论同样的问题，并证明：在真空态中，有：$\Delta\mathscr{E}_i \approx \Delta\mathscr{H} \approx 1/a^2$.

2. 证明：§11 规定的修正量 δM（至第二级）由方程（21.76）右边的式子给定.

3. 考虑 §14 所规定的弹性散射问题．设靶是非极化的，而且 θ 代表散射角（$\cos\theta = k_i \cdot k_f/k^2$）.证明：在二级玻恩近似和长波极限下（$k\langle R\rangle \ll 1$），被弹性散射的场粒子的角分布是 $\cos^2\theta$ 型的，而且 $k\to 0$ 时，截面也趋于零（这一性质是标量耦合的特征）.

4. 我们考虑 §15 中的共振散射问题，而且沿用该处的符号．假定：原子系统的始态 $|\alpha\rangle$ 的角动量为 0，而共振态 $|\lambda\rangle$ 的角动量为 l，证明：如果忽略 $A^{(\mathrm{pot})}$ 的贡献，则弹性散射过程（$k_i \to k_f$）的跃迁振幅 T 由下式给定：

$$T = \frac{\Pi}{\omega L^3}\,\frac{2l+1}{k}\,P_l(\cos\theta)\,\frac{\Gamma_{\lambda\to\alpha}}{(E - E_\lambda - \delta E_\lambda) + \frac{1}{2}\,i\Gamma_\lambda}$$

其中，θ 是散射角，$\Gamma_\lambda\to\alpha$ 是辐射跃迁（$\lambda\to\alpha$）的几率［参看方程

(21.82)]. 由此得到弹性散射截面 $\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}$ 如下:

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}=\frac{(2l+1)^2}{k^2}P_l^2(\cos\theta)\frac{\Gamma_{\lambda\to\alpha}^2}{4(E-E_\lambda-\delta E_\lambda)^2+\Gamma_\lambda^2}.$$

再证明: 这两个公式是粒子在中心势中的共振散射公式的简单推广[见方程(10.64)和(10.65)],而且§10.15和§10.16中对共振和亚稳态意义的讨论和计算可应用到现在的情况中.

5. $A_j(r)$ 和 $\mathscr{E}_i(r)$ 分别代表矢量势 $\boldsymbol{A}$(采用辐射规范)和横向电场 $\mathscr{E}_\perp$ 的第 j 个和第 i 个分量,证明下面的对易关系:

$$[\mathscr{E}_i(r),A_j(r')]=4\pi i\theta_{ij}(r-r'),$$

其中,

$$\theta_{ij}(r-r')\equiv\delta_{ij}\delta(r-r')-\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j'}\left(\frac{1}{4\pi|r-r'|}\right)$$

[$\theta_{ij}(r-r')$ 是到横向矢量场的子空间上的投影算符].

6.证明自由辐射场的总动量公式(21.220).

7.证明辐射场角动量的内禀部分 $\boldsymbol{G}^{(s)}$ 满足下面的公式:

$$\boldsymbol{G}^{(s)}=-i\sum_{k\tilde{\omega}\tilde{\omega}'}a^\dagger_{(k\tilde{\omega})}a_{(k\tilde{\omega}')}(\boldsymbol{\varepsilon}^{(\tilde{\omega})*}\times\boldsymbol{\varepsilon}^{(\tilde{\omega})})$$

(采用§27的符号). 特别是,若 N_{k+} 和 N_{k-} 分别代表动量为 k 的右旋和左旋光子数[见定义(21.222)],则我们得到

$$\boldsymbol{G}^{(s)}=\sum_k(N_{k+}-N_{k-})\boldsymbol{k}/k.$$

8.证明关系式(21.223)和(21.224).

9. 1) 设 $u^{LM}(r)$ 是一标量场,它对转动的变换类似于球谐函数 $Y_M^L(\theta,\varphi)$;又设 $\boldsymbol{V}(r,p)$ 是由矢量 r 和 p 构成的矢量(极矢量或轴矢量). 证明:下面定义的矢量场描述角动量为 (LM) 的状态:

$$\boldsymbol{U}^{LM}\equiv\boldsymbol{V}(r,-i\nabla)u^{LM}(r),$$

其中,$\boldsymbol{V}$ 是作用在函数 u^{LM} 上的算符.

[这个定理的一个应用: §21.29 规定的矢量场 $\boldsymbol{\Lambda}_{kjm}$ 和 $\boldsymbol{\Theta}_{kjm}$ 描述角动量为 (jm) 的状态].

2）在上述方式中，正如自旋为 1 的粒子的波函数有 3 个分量（构成矢量场）那样，具有整数自旋 s 的粒子的波函数有 $(2s+1)$ 个分量（构成 S 阶不可约张量场）. 设 $X_\mu^{(s)}(r, p)$ 是矢量 r 和 p 构成的 s 阶不可约张量的第 μ 个分量. 证明：第 μ 分量为

$$U^{LM}(r) = X_\mu^{(s)}(r, -i\nabla)U^{LM}(r) \qquad (\mu = -s, \cdots, +s)$$

的张量场 $U^{LM}(r)$ 描述自旋为 S 而角动量为 (LM) 的粒子的状态.

10.应用矩阵元的显示公式［见方程 (21.241a, b)］证明：如果初态和终态自旋都为零，则发射一个光子的几率为零 ($0 \longrightarrow 0$ **选择定则**).

［注意，如果用多极展开而不用平面波展开，则这个性质是很显然的.］

11.计算氢原子在单位时间内发生的 $2p \to 1s$ 的辐射跃迁几率（结果为：$W_{2p\to 1s} = 6.25\times 10^8 \mathrm{sec}^{-1}$).

12.证明：在长波近似下. 磁偶极辐射跃迁 $\lambda \longrightarrow \mu k\sigma$ （采用 § 30 的符号）的几率由下式给出［参看方程、(21.245)］：

$$w_{\lambda\to\mu k\sigma} = \frac{k}{2\pi}\,|\langle\lambda|[\boldsymbol{M}\cdot(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{k})]|\mu\rangle|^2,$$

其中，$\boldsymbol{M}$ 是原子系统的总磁矩，即

$$\boldsymbol{M} = \frac{e}{2m}\sum_i (\boldsymbol{l}_i + 2\boldsymbol{s}_i).$$

［注意，当 $\Delta\Pi = +1$ 而且 $j_\lambda + j_\mu \leqslant 1$ 时，此公式正确地给出了辐射跃迁几率；如果 $j_\lambda + j_\mu \geqslant 2$，则电四极的贡献不为零，通常不能忽略.］

由此导出总磁偶极跃迁几率，如下式所示［参看方程 (21.247)］：

$$w_{\lambda\to\mu}^{(\mathrm{tot})} = \frac{4k^3}{3(2j_\lambda+1)}\,|\langle\lambda\|\boldsymbol{M}\|\mu\rangle|^2.$$

证明：对氢原子的 $2s \to 1s$ 跃迁，在非相对论近似下（即利用薛定谔理论的波函数），这个量（即 $\omega_{\lambda\to\mu}^{(tot)}$ ）为零.

13.计算氢原子基态的光电效应截面. 假定：$me^4 \ll k \ll m$ (m 是电子质量，k 是入射光子动量，$\hbar = c = 1$). 因此，传递给光电子的能量足够大，以致终态可当作平面波处理；但它的速度还足够小，以致可当

作非相对论粒子处理. 由于磁相互作用($H^{(11)}$项)的贡献可忽略，因此得到

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=4\sqrt{2}\,e^{8}\left(\frac{m}{k}\right)^{7/2}\times\frac{e^{4}}{m^{2}}\,\frac{\cos^{2}\varphi}{(1-v\cos\theta)^{4}},$$

φ和θ分别代表发射方向与极化方向(假定是线极化)的夹角以及发射方向与入射光子动量方向的夹角. 在此公式中，令 $v=0$，则得到光电效应的经典理论结果(参看问题17.2).

附录 C.[1] 矢量相加系数和转动矩阵

本附录的规划

I. 克累布施-戈登系数（C-G）和“3j”符号

1. 角动量．符号和约定
2. 定义和符号
3. 主要性质
4. 计算方法
5. 特殊的数值和表

II. 拉卡系数和“6j”符号

6. 定义和符号
7. 主要性质
8. 拉卡公式和表

III. “9j”符号

9. 定义和主要性质

IV. 转动矩阵

10. 转动．转动算符．$R^{(J)}$ 矩阵
11. $R^{(J)}$ 矩阵的一般性质
12. 矩阵元 $R^{(J)}_{MM'}$ 的计算
13. J 的整数值（$J = l$）．球谐函数的转动

---

1) 这一附录是与 J. Horowitz 合作编写的．有关这些问题的更完整的论述，可参考著名的 A. E. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton University Press, 1957)，此书还给出了本书所列举的主要图表．也可参考：U. Fano 和 G. Racah, *Irreducible Tensorial Sets* (Academic Press Inc., New York, 1959).

V. 不可约张量算符

14. 定义和主要性质

15. 不可约张量算符的张量积

1. 角动量　符号和约定

在整个附录中，我们采用如下的有关角动量的符号和约定.

单位：$\hbar = 1$.

角动量的分量：角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 的笛卡儿坐标为 J_x, J_y 和 J_z.

$$J_\pm = J_x \pm \mathrm{i}J_y. \tag{C.1}$$

对易关系：

$$[J_x, J_y] = \mathrm{i}J_z \quad [J_y, J_z] = \mathrm{i}J_x \quad [J_z, J_x] = \mathrm{i}J_y \tag{C.2}$$

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm \qquad [J_+, J_-] = 2J_z. \tag{C.3}$$

标准表象 $\{\boldsymbol{J}^2 J_z\}$ 的基矢：$|\tau JM\rangle$

$$\boldsymbol{J}^2|\tau JM\rangle = J(J+1)|\tau JM\rangle \tag{C.4}$$

$$J_z|\tau JM\rangle = M|\tau JM\rangle \tag{C.5}$$

$$J_\pm|\tau JM\rangle = \sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)}\,|\tau JM \pm 1\rangle \tag{C.6}$$

$$\langle \tau JM|\tau' J' M'\rangle = \delta_{\tau\tau'}\delta_{JJ'}\delta_{MM'}, \tag{C.7}$$

(J 是 $\geqslant 0$ 的整数或半整数，$M = -J, -J+1, \cdots +J$) τ 代表为了构成一完备集而必需添加于 J 和 M 的量子数，在本附录的其余部分中，当不需要它时，就予以省略.

I. 克累布施-戈登 (C-G) 系数和 "3j" 符号

2. 定义和符号

量子系统 1 和 2 的角动量分别为 $\boldsymbol{J}_1$, $\boldsymbol{J}_2$.

$\boldsymbol{J}$ 是系统 1 和 2 合成的总系统的角动量：

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2. \tag{C.8}$$

系统 1 的 $(2j_1 + 1)$ 个矢量

$$|j_1 m_1\rangle \quad (j_1 \text{ 固定}, m_1 = -j_1, \cdots, +j_1)$$

和系统 2 的 $(2j_2 + 1)$ 个矢量

$$|j_2 m_2\rangle \quad (j_2 \text{ 固定}, m_2 = -j_2, \cdots, +j_2)$$

的张量积给出 $\boldsymbol{j}_1^2, \boldsymbol{j}_2^2, j_{1z}, j_{2z}$ 的共同本征矢量，总共有 $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ 个，即矢量

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \tag{C.9}$$

利用么正变换，我们由此得到 $\boldsymbol{j}_1^2, \boldsymbol{j}_2^2, \boldsymbol{J}^2, J_z$ 的 $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ 个共同本征矢量，即矢量

$$|j_1 j_2 J M\rangle \tag{C.10}$$

$(J = |j_1 - j_2|, \cdots, j_1 + j_2;\ M = -J, \cdots, +J)$.

定义：克累布施-戈登系数或矢量相加系数[1] $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J M\rangle$ 是如下么正变换的系数：

$$|j_1 j_2 J M\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J M\rangle. \tag{C.11}$$

相位的约定[2]

通过如下方式使相对相位固定，

(i) $|j_1 m_1\rangle$, $|j_2 m_2\rangle$ 和 $|j_1 j_2 J M\rangle$ 遵从关系式 (C.6)；

---

1) 在文献中，使用多种符号来表示 C-G 系数. 我们特别注意到以下几种：
$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 J M\rangle$ [Condon and Shortly, *Theory of Atomic Spectra* (University Press, Cambridge, 4th ed., 1957)].
$C_{j_1 j_2}(JM; m_1 m_2)$ [Blatt and Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics* (Wiley, New York, 1952)].
$S^{j_1 j_2}_{J m_1 m_2}$ [E. P.Wigner, *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra* (English translation; Academic Press, New York, 1958)].

2) 这个约定为多数作者所采用，例如 Wigner, Condon and Shortly, Blatt and Weisskopf 的著作（参看前一注释）；还有 Racah, *Phys. Rev.* **62** (1942) 437.

(ii) $\langle j_1 j_2 j_1 (J - j_1) | JJ \rangle$ 是正实数，

于是我们完全决定了 (C.9) 和 (C.10) 中的矢量.

"3j"符号 (Wigner)[1]:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \equiv \frac{(-)^{j_1 - j_2 + M}}{\sqrt{2J+1}} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle. \qquad \text{(C.12)}$$

3. 主要性质

实数性 它们都是实数，即

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle^* = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle.$$

选择规则

(i) $m_1 + m_2 = M$;

(ii) $|j_1 - j_2| \leqslant J \leqslant j_1 + j_2$ ("三角不等式")

如果不满足这两个条件，则 $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = 0$.

对称性

$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ 有如下三个性质:

(i) 对三列作循环置换，它是不变的;

(ii) 对二个列作置换时，需乘一因子 $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$;

(iii) 同时改变 m_1, m_2 和 m_3 的符号时，需乘一个因子 $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$.

推论:

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = (-)^{j_1+j_2-J} \langle j_2 j_1 m_2 m_1 | JM \rangle \qquad \text{(C.13a)}$$

$$= (-)^{j_1 - J + m_2} \sqrt{\frac{2J+1}{2j_1+1}} \langle J j_2 M - m_2 | j_1 m_1 \rangle \qquad \text{(C.13b)}$$

---

1) 拉卡在前一注释提到的文章中用了这样的符号

$$V(abc, \alpha\beta\gamma) \equiv (-)^{a-b-c} \begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix} \equiv \frac{(-)^{c-\gamma}}{\sqrt{2c+1}} \langle ab\alpha\beta | c - \gamma \rangle.$$

$$= (-)^{j_2-J-m_1}\sqrt{\frac{2J+1}{2j_1+1}}\langle j_1 J - m_1 M | j_2 m_2\rangle \quad \text{(C.13c)}$$

$$= (-)^{j_1+j_2-J}\langle j_1 j_2 - m_1 - m_2 | J - M\rangle. \quad \text{(C.13d)}$$

正交关系

$$\sum_{m_1=-j_1}^{+j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{+j_2}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J'M'\rangle$$

$$= \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \quad \text{(C.14a)}$$

$$(|j_1 - j_2| \leqslant J \leqslant j_1 + j_2;\ -J \leqslant M \leqslant J)$$

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{M=-J}^{+J}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle\langle j_1 j_2 m_1' m_2' | JM\rangle$$

$$= \delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'} \quad \text{(C.14b)}$$

$$(-j_1 \leqslant m_1 \leqslant +j_1;\ -j_2 \leqslant m_2 \leqslant +j_2)$$

$$\sum_{m_1=-j_1}^{+j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{+j_2}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2j_3+1}\delta_{j_3 j'}\delta_{m_3 m'} \quad \text{(C.15a)}$$

$$\sum_{j_3=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m_3=-j}^{+j_3}(2j_3+1)\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

$$\times\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'}. \quad \text{(C.15b)}$$

球谐函数的合成关系

$$\int Y_{l_1}^{m_1}(\Omega)Y_{l_2}^{m_2}(\Omega)Y_{l_3}^{m_3}(\Omega)d\Omega$$

$$= \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\times\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}, \quad \text{(C.16)}$$

由此得出

$$Y_{l_1}^{m_1}(\Omega)Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) =$$

$$\sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}\sum_{M=-L}^{L}\left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2L+1)}\right]^{\frac{1}{2}}\langle l_1 l_2 00|L0\rangle \times\langle l_1 l_2 m_1 m_2|LM\rangle Y_L^M(\Omega) \tag{C.17a}$$

$$=\sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}\sum_{M=-L}^{L}(-)^M\left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2L+1)}{4\pi}\right]^{\frac{1}{2}} \times\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & M\end{pmatrix}Y_L^{-M}(\Omega). \tag{C.17b}$$

4. 计算方法

递推关系 不同变量的 C-G 系数之间的关系如下：

(i) $\Delta J = 0\quad \Delta M = +1$

$$\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle = \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)}\langle j_1 j_2 m_1+1 m_2|JM+1\rangle + \sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2+1|JM+1\rangle; \tag{C.18}$$

(ii) $\Delta J = 0\quad \Delta M = -1$

$$\sqrt{J(J+1)-M(M-1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle = \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}\langle j_1 j_2 m_1-1 m_2|JM-1\rangle + \sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2-1|JM-1\rangle; \tag{C.19}$$

(iii) $\Delta J = \pm 1\quad \Delta M = 0$

$$A_0\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle = A_+\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J+1M\rangle$$

$$+ A_-\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J-1M\rangle; \qquad \text{(C.20)}$$

其中，

$$A_0 = m_1 - m_2 + M\frac{j_2(j_2+1)-j_1(j_1+1)}{J(J+1)}$$

$$(M = m_1 + m_2)$$

$$A_+ = f(J+1)$$

$$A_- = f(J)$$

$$f(x) = \sqrt{x^2 - M^2}$$

$$\times\left[\frac{[(j_1+j_2+1)^2 - x^2][x^2-(j_1-j_2)^2]}{4x^2(2x-1)(2x+1)}\right]^{\frac{1}{2}}.$$

拉卡公式

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix} = (-)^{a-b-\gamma}\sqrt{\Delta(abc)}$$

$$\times\sqrt{(a+\alpha)!(a-\alpha)!(b+\beta)!(b-\beta)!(c+\gamma)!(c-\gamma)!}$$

$$\times\sum_t (-)^t[t!(c-b+t+\alpha)!(c-a+t-\beta)!$$

$$\times(a+b-c-t)!(a-t-\alpha)!(b-t+\beta)!]^{-1} \qquad \text{(C.21)}$$

$$(\alpha+\beta+\gamma=0,\ |a-b|\leqslant c\leqslant a+b)$$

其中

$$\Delta(abc) \equiv \frac{(a+b-c)!(b+c-a)!(c+a-b)!}{(a+b+c+1)!}, \qquad \text{(C.22)}$$

Σ_t 对全部使阶乘有意义的整数 t 求和，即阶乘内的变量是正的或0($0! = 1$)。这一求和的项数是 $\nu+1$，其中 ν 是下面九个数中最小的一个：

$$\begin{matrix} a\pm\alpha & b\pm\beta & c\pm\gamma \\ a+b-c & b+c-a & c+a-b. \end{matrix}$$

5. 特殊的数值和表

特殊的数值

(i) J 和 M 取其最大值:

$$\langle j_1 j_2 j_1 j_2 | j_1 + j_2 j_1 + j_2 \rangle = 1;$$

(ii) j 当中有一个为零: $\langle j0m0|jm\rangle = 1$ 或

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}};$$

(iii) $m_1 = m_2 = m_3 = 0$;

若 $l_1 + l_2 + l_3$ 是奇数,则

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0; \tag{C.23a}$$

若2 $p \equiv l_1 + l_2 + l_3$ 是偶数,则

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-)^p \sqrt{\Delta(l_1 l_2 l_3)} \times \frac{p!}{(p-l_1)!(p-l_2)!(p-l_3)!} \tag{C.23b}$$

(l_1, l_2, l_3 是$\geqslant 0$ 并满足"三角不等式"的整数).

拉卡公式的特殊情况

下列公式,或应用对称关系由它们得出的一些公式,给出特殊情况的 C-G 系数.

(i) $m_1 = \pm j_1$ 或 $m_2 = \pm j_2$ 或 $M = \pm J$:

$$\begin{aligned} j_1 j_2 m_1 m_2 | JJ\rangle &= \langle j_2 j_1 - m_2 - m_1 | J - J\rangle \\ &= (-)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{(2J+1)!(j_1 + j_2 - J)!}{(j_1 + j_2 + J + 1)!(J + j_1 - j_2)!(J + j_2 - j_1)!}} \\ &\quad \times \sqrt{\frac{(j_1 + m_1)!(j_2 + m_2)!}{(j_1 - m_1)!(j_2 - m_2)!}} \end{aligned} \tag{C.24}$$

$$(m_1 + m_2 = J);$$

(ii) j 当中有一个是其他两个之和:

若 $J = j_1 + j_2$，则

$$\text{if } J = j_1 + j_2$$

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = \sqrt{\frac{(2j_1)!(2j_2)!}{(2J)!}}$$

$$\times \sqrt{\frac{(J+M)!(J-M)!}{(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!}} \tag{C.25}$$

$$\langle J j_2 M - m_2 | j_1 m_1 \rangle$$

$$= (-)^{j_2 - m_2} \sqrt{\frac{2j_1+1}{2J+1}} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle. \tag{C.26}$$

"3j" 符号表

对于

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2,$$

$$0 \leqslant e \leqslant s, \quad 0 \leqslant \mu \leqslant s,$$

下面的表给出 "3j" 符号 $\begin{pmatrix} j & s & (j+e) \\ m & \mu & (-m-\mu) \end{pmatrix}$ 的公式，它是 j 和 m 的函数. 利用这些以及对称关系，则对 j 当中有一个为 0，1/2，1，3/2 或 2 的情况，我们很容易计算出任一个 C-G 系数.

表中的函数 $\Phi^s_{\mu e}(jm)$ 定义为

$$\begin{pmatrix} j & s & (j+e) \\ m & \mu & (-m-\mu) \end{pmatrix} = (-)^{j+m}$$

$$\times \sqrt{\frac{(2j+e-s)!}{(2j+e+s+1)!} \frac{(j+m+\mu+e)!}{(j+m)!}} \Phi^s_{\mu e} \tag{C.27}$$

$s=0$ $\quad \Phi^{0}_{00}=1$

$s=\frac{1}{2}$ $\quad \Phi^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=1$

$s=1$ $\quad \Phi^{1}_{\mu e}$ 表

	$e=0$	$e=1$
$\mu=0$	$-2m$	$-\sqrt{2(j-m+1)}$
$\mu=1$	$-\sqrt{2(j-m)}$	1

$s=3/2$ $\quad \Phi^{3/2}_{\mu e}$ 表

	$e=\frac{1}{2}$	$e=3/2$
$\mu=\frac{1}{2}$	$j-3m$	$-\sqrt{3(j-m+1)}$
$\mu=3/2$	$-\sqrt{3(j-m)}$	1

$s=2$ $\quad \Phi^{2}_{\mu e}$ 表

	$e=0$	$e=1$	$e=2$
$\mu=0$	$2[3m^2-j(j+1)]$	$2m\sqrt{6(j-m+1)}$	$\sqrt{6(j-m+2)(j-m+1)}$
$\mu=1$	$(2m+1)\sqrt{6(j-m)}$	$2(j-2m)$	$-2\sqrt{j-m+1}$
$\mu=2$	$\sqrt{6(j-m)(j-m-1)}$	$-2\sqrt{(j-m)}$	1

II. 拉卡系数和 "6j" 符号

6. 定义和符号

三个角动量的耦合

J 是由三个子系统（角动量分别为 j, j', j''）构成的系统的总角动，

$$J = j + j' + j''.$$

在矢量 $|mm'm''\rangle \equiv |jm\rangle|j'm'\rangle|j''m''\rangle$（$j, j', j''$ 给定；m, m', m'' 可变）所张成的 $(2j+1)(2j'+1)(2j''+1)$ 维空间中，角动量为 (JM) 的子空间通常是大于一维的。其中，$2J$ 和 $2M$ 是整数，它们的奇偶性与 $2(j+j'+j'')$ 相同；$\min|j \pm j' \pm j''| \leqslant J \leqslant j + j' + j''$；$-J \leqslant M \leqslant +J$.

对于这子空间[1]，**下述的两种耦合方式**都可构造出两种（通常是不相同的）基矢量系.

$a)$ $j' + j = g'$，$g' + j'' = J$（图 C.1a）

$$|(j'j)g', j''; JM\rangle$$

$$= \sum_{\substack{mm'm'' \\ \mu'}} |mm'm''\rangle\langle j'jm'm|g'\mu'\rangle\langle g'j''\mu'm''|JM\rangle,$$

$b)$ $j + j'' = g''$，$J' + g'' = J$（图 C.1b）

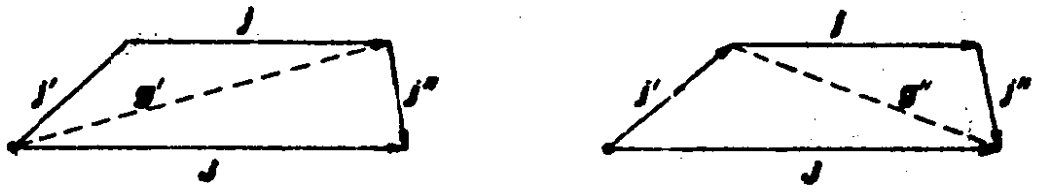
$$|j', (jj'')g''; JM\rangle$$

$$= \sum_{\substack{mm'm'' \\ \mu''}} |mm'm''\rangle\langle jj''mm''|g''\mu''\rangle\langle j'g''m'\mu''|JM\rangle.$$

利用某一么正变换，我们可从一种基矢量系过渡到另一种.

---

1) 各个矢量耦合的次序是很重要的. 改变其次序，例如在耦合图（a）中交换 j 和 j'' 的次序，则要改变所得矢量的符号.



a) $j' + j = g', g' + j'' = J$　　b) $j + j'' = g'', j' + g'' = J$

图 C.1　$J = j + j' + j''$ 的不同耦合图形

维格纳"6j"符号 $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}$ 的定义

通过关系式

$$\langle j', (jj'')g''; JM | (j'j)g', j''; J'M' \rangle$$
$$= \delta_{JJ'}\delta_{MM'}\sqrt{(2g'+1)(2g''+1)}$$
$$\times (-)^{j+j'+j''+J} \begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}, \qquad (C.28)$$

"6j"符号使上述的么正变换系数发生联系，即

$$|(j'j)g', j''; JM\rangle = \sum_{g''} |j', (jj'')g''; JM\rangle$$
$$\times\sqrt{(2g'+1)(2g''+1)}\,(-)^{j+j'+j''+J} \begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}. \qquad (C.29)$$

拉卡的 W 系数[1)]

拉卡使用 W 系数，它和"6j"符号差别一个符号因子：

---

1) 参看上面提到的拉卡的文章．当我们用 W 代替"6j"时，符号因子不出现在上两个关系中[即 (C.28) 和 (C.29)]．然而，"6j"符号有更简单的对称关系(参看 § 7).

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_4 & J_3 \end{Bmatrix} = (-)^{j_1+j_2+J_1+J_2} W(j_1 j_2 J_2 J_1; j_3 J_3). \quad \text{(C.30)}$$

缔合系数

在角分布的公式中，有时遇到系数 $Z(LJL'J'; j\lambda)$ 和 $F_\lambda(LL'J_1J_2)$，对于它们已有详尽的表，其定义分别为：

$$Z(LJL'J'; j\lambda) = (-)^{J+J'+\frac{1}{2}(L'-L+\lambda)} \times \sqrt{(2L+1)(2L'+1)(2J+1)(2J'+1)(2\lambda+1)} \times \begin{pmatrix} L & L' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} L & L' & \lambda \\ J' & J & j \end{Bmatrix}. \quad \text{(C.31a)}$$

$$F_\lambda(LL'J_1J_2) = (-)^{J_1+J_2-1} \times \sqrt{(2L+1)(2L'+1)(2J_2+1)(2\lambda+1)} \times \begin{pmatrix} L & L' & \lambda \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} L & L' & \lambda \\ J_2 & J_2 & J_1 \end{Bmatrix}. \quad \text{(C.31b)}$$

当反应产物含有自旋为 1 的粒子而且不观测极化时，角分布公式就会显含 $F_\lambda(LL'J_1J_2)$.

"6j" 的缔合四面体

为了在 W 系数和 "6j" 符号的运算中避免某些混乱，恰当的作法是对每一个

$$\begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}$$

都用一四面体与之联系起来. 这四面体的六个稜分别代表 "6j" 符号中的六个角动量(图 C.2). 在这表述中，相对的两个稜对应于 "6j" 中某一列的两个角动量，而且第一行的三个角动量也对应四面体中某一面的三个稜. 另外，每一面对应三个角动量，其中的一个由另二个的矢量相加得到，这和 "6j" 的定义所导出的一样.

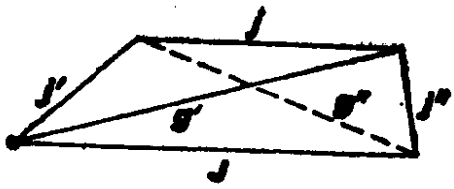


图 C.2 "6j" 符号 $\begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}$ 对应的四面体

7. 主要性质

实数性 "6j" 都是实数的.

选择规则

为了使 $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} \neq 0$，四面体的每一面所代表的三个角动量必须满足条件：其中的一个是另两个矢量之和．换言之，每三个角动量所组成的单元

$$(j_1 j_2 j_3),\ (j_1 J_2 J_3),\ (J_1 j_2 J_3),\ (J_1 J_2 j_3)$$

必须满足：

(i) 三角不等式

(ii) 和为整数

(注意，或者 6 个 j 是整数，或者同一面的三个 j 是整数，或者相对的棱的两个 j 是整数)

对称关系 "6j" 符号对如下的变换是不变的：

(i) 列之间的置换，

例如

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ J_2 & J_1 & J_3 \end{Bmatrix};$$

(ii) 第一行的两个元素与第二行相应的两个元素交换，

例如：

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ j_1 & j_2 & J_3 \end{Bmatrix}.$$

换言之，给定六个角动量以及它们在缔合四面体上的相对位置，就足以确定“6*j*”符号。

用 C-G 系数表述的基本关系

符号 $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}$ 通过下式和几个 C-G 系数相联系，而这些 C-G 系数是由缔合四面体的四个三角单元 $(j_1j_2j_3)$，$(j_1J_2J_3)$，$(J_1j_2J_3)$，$(J_1J_2j_3)$构成.

$$\sum_{\substack{M_1M_2M_3 \\ m_1m_2}} (-)^{J_1+J_2+J_3+M_1+M_2+M_3} \times \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ M_1 & -M_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_2 & J_3 & j_1 \\ M_2 & -M_3 & m_1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} J_3 & J_1 & j_2 \\ M_3 & -M_1 & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} = \delta_{j_3j_3'}\delta_{m_3m_3'} \frac{1}{2j_3+1} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}. \tag{C.32}$$

(注意，求和实际上只对两个指标进行，即 M 和 m)

$$\sum_{M_1M_2M} (-)^{J_1+J_2+J_3+M_1+M_2+M_3} \times \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ M_1 & -M_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_2 & J_3 & j_1 \\ M_2 & -M_3 & m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_3 & J_1 & j_2 \\ M_3 & -M_1 & m_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}. \tag{C.33}$$

(注意，求和实际上只对一个指标进行)

$$\sum_{gm_g} (-)^{g+m_g}(2g+1) \times \begin{Bmatrix} j_1 & J_1 & g \\ J_2 & j_2 & f \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & J_1 & g \\ m_1 & M_1 & -m_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & J_2 & g \\ m_2 & M_2 & m_g \end{pmatrix}$$

$$= (-)^{j_2+J_1+J+g} \sum_{m_f} (-)^{f+m_f}$$

$$\times \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & f \\ m_1 & m_2 & -M_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & f \\ M_1 & M_2 & m_f \end{pmatrix}. \tag{C.34}$$

(注意，对 m_g 和 m_f 的求和恰好各有一项)

拉卡-伊利奥特关系及正交关系

$$\sum_x (-)^{2x}(2x+1) \begin{Bmatrix} a & b & x \\ a & b & f \end{Bmatrix} = 1. \tag{C.35a}$$

$$\sum_x (-)^{a+b+x}(2x+1) \begin{Bmatrix} a & b & x \\ b & a & f \end{Bmatrix}$$

$$= \delta_{f0} \sqrt{(2a+1)(2b+1)}. \tag{C.35b}$$

$$\sum_x (2x+1) \begin{Bmatrix} a & b & x \\ c & d & f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} c & d & x \\ a & b & g \end{Bmatrix}$$

$$= \delta_{fg} \frac{1}{2f+1}. \tag{C.35c}$$

$$\sum_x (-)^{f+g+x}(2x+1) \begin{Bmatrix} a & b & x \\ c & d & f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} c & d & x \\ b & a & g \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{Bmatrix} a & d & f \\ b & c & g \end{Bmatrix}. \tag{C.35d}$$

$$\sum_x (-)^{a+b+c+d+e+f+g+h+x+j}(2x+1)$$

$$\times \begin{Bmatrix} a & b & x \\ c & d & g \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} c & d & x \\ e & f & h \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} e & f & x \\ b & a & j \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{Bmatrix} g & h & j \\ e & a & d \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} g & h & j \\ f & b & c \end{Bmatrix}. \tag{C.35e}$$

8. 拉卡公式和表

拉卡公式

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} = [\Delta(j_1 j_2 j_3)\Delta(j_1 J_2 J_3)\Delta(J_1 j_2 J_3)\Delta(J_1 J_2 j_3)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\times \sum_t \frac{(-)^t (t+1)!}{(t-j_1-j_2-j_3)!(t-j_1-J_2-J_3)!(t-J_1-j_2-J_3)!},$$
$$\times (t-J_1-J_2-j_3)!(j_1+j_2+J_1+J_2-t)!$$
$$\times (j_2+j_3+J_2+J_3-t)!(j_3+j_1+J_3+J_1-t)!$$

(C.36)

$\Delta(abc)$ 的定义以及求和号的约定都与 (C.22) 相同. 在 $\sum_t$ 中的项数等于 $1+\sigma$, 其中 σ 是下面十二个数中最小的一个:

$$\begin{array}{cccc} j_1+j_2-j_3 & j_1+J_2-J_3 & J_1+j_2-J_3 & J_1+J_2-j_3 \\ j_2+j_3-j_1 & J_2+J_3-j_1 & j_2+J_3-J_1 & J_2+j_3-J_1 \\ j_3+j_1-j_2 & J_3+j_1-J_2 & J_3+J_1-j_2 & j_3+J_1-J_2 \end{array}$$

特殊情况

(i) j 当中有一个为 0.

$$\begin{Bmatrix} j & j' & 0 \\ J & J' & g \end{Bmatrix} = (-)^{j+J+g} \frac{\delta_{jj'}\delta_{JJ'}}{\sqrt{(2j+1)(2J+1)}}$$

$$(|j-J| \leqslant g \leqslant j+J); \qquad \text{(C.37)}$$

(ii) j 当中有一个等于 1/2.

$$\begin{Bmatrix} j & j & +\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & J & +\frac{1}{2} & g+\frac{1}{2} \end{Bmatrix} = (-)^{j+g+j+J}$$

$$\times \left[\frac{(1+g+j-J)(1+g-j+J)}{(2j+1)(2j+2)(2J+1)(2J+2)}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{(C.38)}$$

$$(|j-J| \leqslant g \leqslant j+J).$$

$$\begin{Bmatrix} j & j+\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J+\frac{1}{2} & J & g \end{Bmatrix} = (-)^{1+g+j+J}$$

$$\times\left[\frac{(1-g+j+J)(2+g+j+J)}{(2j+1)(2j+2)(2J+1)(2J+2)}\right]^{\frac{1}{2}} \quad (C.39)$$

$$(|j-J| \leqslant g \leqslant j+J)$$

III. "9j" 符 号

9. 定义和主要性质

四个角动量的耦合和"9j"符号的定义

角动量分别为 j_1, j_2, j_3, j_4 的四个子系统构成一个系统，其总角动量 J 为

$$J = j_1 + j_2 + j_3 + j_4.$$

在诸矢量

$$|m_1m_2m_3m_4\rangle \equiv \prod_{i=1}^{4} |j_im_i\rangle \quad (j_i \text{ 给定}, m_i \text{ 变化})$$

张成的 $\prod_{i=1}^{4}(2j_i+1)$ 维空间中，对角动量为 (JM) 的子空间而言，下面两种耦合方式得出两种不同的基矢量系.

a) $j_1 + j_2 = J_{12}$ $j_3 + j_4 = J_{34}$ $J_{12} + J_{34} = J$

矢量 $|(j_1j_2)J_{12}, (j_3j_4)J_{34}; JM\rangle$;

b) $j_1 + j_3 = J_{13}$ $j_2 + j_4 = J_{24}$ $J_{13} + J_{24} = J$

矢量 $|(j_1j_3)J_{13}, (j_2j_4)J_{24}; JM\rangle$.

维格纳"9j"符号是一种么正变换的系数（乘一任意常数），此变换使我们能从一种基变到另一种基. 按定义，

$$\langle(j_1j_2)J_{12}, (j_3j_4)J_{34}; JM|(j_1j_3)J_{13}, (j_2j_4)J_{24}; J'M'\rangle$$
$$= \delta_{JJ'}\delta_{MM'}\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)}$$

$$\times\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}. \qquad \text{(C.40a)}$$

也可定义“9j”符号为

$$\langle (j_1 j_2) J_{12}, j_3] J'_{123} j_4; JM \mid [(j_4 j_2) J_{42}, j_3] J_{423} j_1; J'M' \rangle \qquad \text{(C.40b)}$$

$$= (-)^{J_{423}+j_1-J_{123}-j_4}\delta_{JJ'}\delta_{MM'}$$

$$\times\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{123}+1)(2J_{42}+1)(2J_{423}+1)}$$

$$\times\begin{Bmatrix} j_2 & J_{12} & j_1 \\ J_{42} & j_3 & J_{423} \\ j_4 & J_{123} & J \end{Bmatrix}.$$

有时也使用下面的符号：

$$\times\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{pmatrix} = \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}.$$

用“3j”符号表述的关系式

$$\begin{pmatrix} J_{13} & J_{24} & J \\ M_{13} & M_{24} & M \end{pmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} = \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 m \\ M_{12} M_2}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ m_1 & m_2 & M_{12} \end{pmatrix}$$

$$\times\begin{pmatrix} j_3 & j_4 & J_{34} \\ m_3 & m_4 & M_{34} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_3 & J_{13} \\ m_1 & m_3 & M_{13} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_2 & j_4 & J_{24} \\ m_2 & m_4 & M_{24} \end{pmatrix}$$

$$\times\begin{pmatrix} J_{12} & J_{34} & J \\ M_{12} & M_{34} & M \end{pmatrix}. \qquad \text{(C.40c)}$$

对称关系

$$\begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ J_4 & J_5 & J_6 \\ J_7 & J_8 & J_9 \end{Bmatrix}$$

有下列性质：

(i) 两行或两列交换时，乘一个因子$(-)^R$，其中 $R=\sum_{i=1}^{9} J_i$;

(ii) 以对角线为对称轴而作反射时，它是不变的。

正交关系

$$\sum_{J_{12}J_{24}}(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12}' \\ j_3 & j_4 & J_{34}' \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}$$

$$=\frac{\delta_{J_{12}J_{12}'}\delta_{J_{24}J_{24}'}}{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)}.$$

用"6j"符号表述的关系

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{44} & J \end{Bmatrix}=\sum_{g}(-)^{2g}(2g+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ J_{34} & J & g \end{Bmatrix}$$

$$\begin{Bmatrix} j_3 & j_4 & J_{34} \\ j_2 & g & J_{24} \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} J_{13} & J_{24} & J \\ g & j_1 & j_3 \end{Bmatrix}. \qquad (C.41)$$

j 当中有一个为零的情形

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & f \\ j_3 & j_4 & f' \\ g & g' & 0 \end{Bmatrix}=\delta_{ff'}\delta_{gg'}\frac{(-)^{j_2+j_2+j+g}}{\sqrt{(2f+1)(2g+1)}}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & f \\ j_4 & j_3 & g \end{Bmatrix}.$$

(C.42)

IV. 转动矩阵

10. 转动　转动算符　$R^{(J)}$ 矩阵

$\mathscr{R}_u(\varphi)\equiv$ 绕 u 轴转 φ 角。

$$\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)\equiv \text{作欧勒角}(\alpha,\beta,\gamma)\text{转动}. \qquad (C.43)$$
$$\equiv \mathscr{R}_Z(\gamma)\mathscr{R}_u(\beta)\mathscr{R}_z(\alpha)$$

右边的运算在次序上是**自右而左**进行(参看图 C.3).

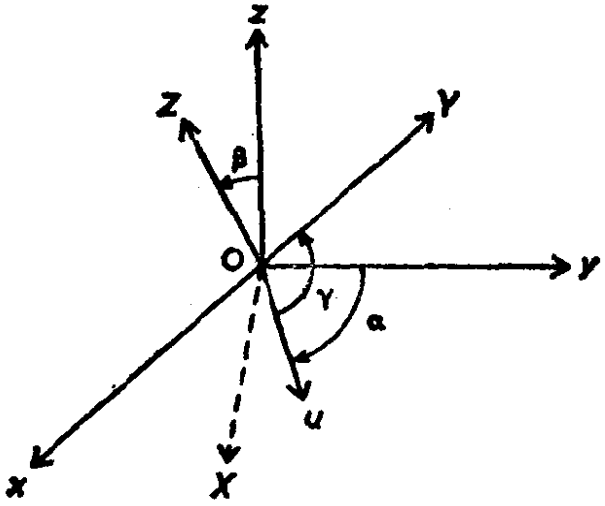


图 C.3 欧勒角

$$\alpha = (Oy,\ Ou),\quad \beta = (Oz,\ OZ),\quad \gamma = (Ou,\ OY).$$

相伴矩阵: 它是矢量的坐标变换矩阵(用同转动本身一样的字母 $\mathscr{R}$ 代表).

若 $\boldsymbol{V}(V_1, V_2, V_3)$ 是任意一矢量,而且它在转动 $\mathscr{R}$ 下变换成 $\boldsymbol{V}'(V_1', V_2', V_3')$, 则我们得到

$V_i' = \mathscr{R}_{ij}V_j$, $\mathscr{R}_{ij}$ 是相伴矩阵的矩阵元. [**推论:** 若 $\boldsymbol{A}_i$ 是第 i 轴 ($i = 1, 2, 3$) 上的单位矢量 $\boldsymbol{a}_i$ 的变换,则我们得出

$$\boldsymbol{A}_i \equiv \mathscr{R}[\boldsymbol{a}_i] = \boldsymbol{a}_i\mathscr{R}_{ij},\ \mathscr{R}_{ij} = \boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{A}_j]$$

$$\mathscr{R}^* = \mathscr{R}\quad \tilde{\mathscr{R}} = \mathscr{R}^{-1}\quad \det\mathscr{R} = 1 \qquad \text{(C.44)}$$

$$\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma) \equiv$$

$$\begin{pmatrix} \cos\gamma\cos\beta\cos\alpha - \sin\gamma\sin\alpha & -\sin\gamma\cos\beta\cos\alpha - \cos\gamma\sin\alpha & \sin\beta\cos\alpha \\ \cos\gamma\cos\beta\sin\alpha + \sin\gamma\cos\alpha & -\sin\gamma\cos\beta\sin\alpha + \cos\gamma\cos\alpha & \sin\beta\sin\alpha \\ -\cos\gamma\sin\beta & \sin\gamma\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix}. \qquad \text{(C.45)}$$

转动算符

么正算符 R 作用到刃矢$|\rangle$上就得出它在转动 $\mathscr{R}$ 下的变换:

$$\mathscr{R}[|\rangle] \equiv R|\rangle \quad R^{\dagger}R = RR^{\dagger} = 1. \tag{C.46}$$

若 Q 是量子系统的可观测量,则

$$\mathscr{R}[Q] \equiv RQR^{-1}. \tag{C.47}$$

若 $\boldsymbol{B} \equiv (B_x, B_y, B_z)$ 是这系统的某一矢量算符 $(B_i \equiv \boldsymbol{B}\cdot \boldsymbol{a}_i)$, 则

$$\mathscr{R}[B_i] \equiv RB_iR^{-1} = (\boldsymbol{B}\cdot \boldsymbol{A}_i) = \tilde{\mathscr{R}}_{ij}B_j. \tag{C.48}$$

注意,这里出现的 $\tilde{\mathscr{R}}$ 是 $\mathscr{R}$ 的逆矩阵,并不是 $\mathscr{R}$ 本身.

在转动 $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ 中, (C.48) 应用到角动量 $\boldsymbol{J}$ 的分量的变换上就得到

$$RJ_{\pm}R^{-1} = e^{\mp i\gamma}\left[\frac{1+\cos\beta}{2}e^{\mp i\alpha}J_{\pm} - \frac{1-\cos\beta}{2}e^{\pm i\alpha}J_{\mp} - \sin\beta J_z\right] \tag{C.49a}$$

$$RJ_zR^{-1} = \frac{1}{2}\sin\beta(e^{-i\alpha}J_+ + e^{i\alpha}J_-) + \cos\beta J_z. \tag{C.49b}$$

用总角动 J 表述的公式

无限小转动:

$$R_u(\varepsilon) = 1 - i\varepsilon(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u}) \qquad (\varepsilon \ll 1). \tag{C.50}$$

有限转动

$$R_u(\varphi) = e^{-i\varphi(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})} \tag{C.51}$$

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}e^{-i\gamma J_z}. \tag{C.52}$$

转动和转动算符之间的对应关系

无穷小转动和无限地接近于 1 的 R 算符之间有一一对应关系,但对有限转动并不如此.

对于任一个有限转动 $\mathscr{R}$, 通常对应两种转动 R' 和 R'',

它们由方程

$$R'' = DR'$$

联系起来. 此处，D 是如下定义的算符，

$$D = \begin{cases} +1, & \text{若 } J \text{ 是整数;} \\ -1, & \text{若 } J \text{ 是半整数.} \end{cases}$$

为了使 $R' = R''$，要求态矢量空间全都由 J 是整数的态组成.

$$R_u(2\pi) = D$$

$$R_u(4\pi) = 1.$$

令 $(\alpha\beta\gamma)$ 和 $(\alpha_1\beta_1\gamma_1)$ 是确定同一个转动的两组欧勒角 [方程 (13.42)]:

$$R(\alpha_1\beta_1\gamma_1) = D^{n_\alpha+n_\beta+n_\gamma}R(\alpha\beta\gamma). \tag{C.53}$$

转动矩阵 $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$

它是 $(2J+1)$ 维矩阵，其元为

$$R^{(J)}_{MM'}(\alpha\beta\gamma) \equiv \langle JM|R(\alpha\beta\gamma)|JM'\rangle$$

$$\equiv \langle JM|e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}e^{-i\gamma J_z}|JM'\rangle. \tag{C.54}$$

矢量 $|JM\rangle$ (J 固定 $M = -J, \cdots +J$) 是 J^2 和 J_z 的 $(2J+1)$ 个本征矢量，通过关系式 (C.6)，从它们中的一个可以得到另一个.

矩阵 $r^{(J)}(\beta)$

$$r^{(J)}(\beta) \equiv R^{(J)}(0, \beta, 0) \tag{C.55}$$

$$r^{(J)}_{MM'}(\beta) \equiv \langle JM|e^{-i\beta J_y}|JM'\rangle$$

$$R^{(J)}_{MM'}(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha M}r^{(J)}_{MM'}(\beta)e^{-i\gamma M'}. \tag{C.56}$$

11. 矩阵 $R^{(J)}$ 的一般性质

逆矩阵:

$$[R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)]^{-1} = R^{(J)}(-\gamma, -\beta, -\alpha). \tag{C.57}$$

行列式:

$$\det R^{(J)} = 1. \tag{C.58}$$

一致性 (Uniformity)

$$R_u^{(J)}(2\pi) = (-)^{2J}. \tag{C.59}$$

每一组欧勒角对应一个矩阵 $R^{(J)}$.

若 J 是整数,则每一个转动 $\mathscr{R}$ 对应一个矩阵 $R^{(J)}$; 若 J 是半整数,则它对应两个彼此反号的矩阵.

实数性: $r^{(J)}(\beta)$ 是实矩阵.

绕轴转动 π 角:

符号: $X, Y, Z \equiv$ 分别绕 Ox, Oy, Oz 轴转动 π 角的转动算符.

$$X^2 = Y^2 = Z^2 = XYZ = (-)^{2J}. \tag{C.60}$$

$X|JM\rangle = e^{-i\pi J}|J - M\rangle$, 因此 $X^{(J)}_{MM'} = e^{-i\pi J}\delta_{M-M'}$. (C.61)

$Y|JM\rangle = (-)^{J-M}|J - M\rangle$, 因此 $Y^{(J)}_{MM'} = (-)^{J+M}\delta_{M-M'}$. (C.62)

$Z|JM\rangle = e^{-i\pi M}|JM\rangle$,因此 $Z^{(J)}_{MM'} = e^{-i\pi M}\delta_{MM'}$. (C.63)

作转动 Y, 角动量算符的变换是

$$YJ_xY^\dagger = -J_x \quad YJ_yY^\dagger = J_y \quad YJ_zY^\dagger = -J_z$$
$$YJ_\pm Y^\dagger = -J_\mp,$$

因此

$$YR^{(J)}Y^\dagger = R^{(J)*}. \tag{C.64}$$

对称关系[从 (C.62) 和 (C.64)导出]

$$r^{(J)}_{MM'} = (-)^{M-M'}r^{(J)}_{-M,-M'}. \tag{C.65}$$

$$R^{(J)*}_{MM'} = (-)^{M-M'}R^{(J)}_{-M,-M'}. \tag{C.66}$$

么正性和正交关系

$R^{(J)+} = R^{(J)-1}$,因此么正关系为

$$\sum_M R^{(J)}_{MM'}R^{(J)*}_{MM''} = \delta_{M'M''}$$

$$\sum_M R^{(J)}_{M'M} R^{(J)*}_{M''M} = \delta_{M'M''}, \tag{C.67}$$

再考虑到对称关系，就得到正交关系，

$$\begin{aligned}
&\sum_M (-)^{J+M} R^{(J)}_{MM'} R^{(J)}_{-M-M''} = (-)^{J+M'} \delta_{M'M''} \\
&\sum_M (-)^{J+M} R^{(J)}_{M'M} R^{(J)}_{-M''-M} = (-)^{J+M'} \delta_{M'M''}.
\end{aligned} \tag{C.68}$$

合成和约化公式

在下面的公式中，矩阵 $R^{(j_1)}$，$R^{(j_2)}$，$R^{(J)}$ 对应同样的欧勒角。

张量积 $R^{(j_1)} \otimes R^{(j_2)}$ 的约化：

$$\begin{aligned}
R^{(j_1)}_{m_1m_1'} R^{(j_2)}_{m_2m_2'} = &\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M,M'=-J}^{+J} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle R^{(J)}_{MM'} \\
&\times \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | JM' \rangle.
\end{aligned} \tag{C.69}$$

合成公式：

$$\begin{aligned}
R^{(J)}_{MM'} = &\sum_{m_1,m_1'=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2,m_2'=-j_2}^{+j_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle R^{(j_1)}_{m_1m_1'} R^{(j_2)}_{m_2m_2'} \\
&\times \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | JM' \rangle.
\end{aligned} \tag{C.70}$$

特别是，若 $J = j_1 + j_2$，则

$$\begin{aligned}
R^{(J)}_{JJ} &= R^{(j_1)}_{j_1j_1} R^{(j_2)}_{j_2j_2} \\
R^{(J)}_{J,-J} &= R^{(j_1)}_{j_1,-j_1} R^{(j_2)}_{j_2,-j_2}.
\end{aligned} \tag{C.71}$$

12. 矩阵元 $R^{(J)}_{MM'}$ 的计算

主要的计算方法

当矩阵 $r^{(J)}(\beta)$ 已知时，我们很容易从（C.56）导出矩阵 $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$。

$r^{(J)}$ 是实的、么正的，而且有对称性质（C.65）：

$$r^{(J)}_{MM'}(\beta) = r^{(J)}_{M'M}(-\beta) = (-)^{M-M'} r^{(J)}_{-M-M'}(\beta).$$

于是，我们只需要知道对应于 $M \geqslant 0$ 和 $M \geqslant M'$ 的矩阵元，就能推导出所有矩阵元.

我们可以这样来推导:

a) 用下面的维格纳公式，直接计算出这些矩阵元;

b) 对于比较小的角动量的矩阵元 $r^{(j_1)}$ 和 $r^{(j_2)}$，应用合成公式 (C.70) 来得到所有的矩阵元. 具体地说全部 $r^{(J)}$ 可以从 $r^{(\frac{1}{2})}$ 开始一个接一个地得到.

c) 利用从方程 (C.49) 推出的递推关系，从他们中的一个得到另一个，这样就推出所有矩阵元.

维格纳公式

令

$$\xi \equiv \cos\frac{1}{2}\beta, \qquad \eta \equiv \sin\frac{1}{2}\beta.$$

得到

$$r^{(J)}_{MM'} = \sum_t (-)^t \times \frac{\sqrt{(J+M)!(J-M)!(J+M')!(J-M')!}}{(J+M-t)!(J-M'-t)!t!(t-M+M')!} \times \xi^{2J+M-M'-2t}\eta^{2t-M+M'}. \tag{C.72}$$

求和按 (C.21) 的约定，在 Σ_t 中的项数等于 $1+\tau$，其中 τ 是四个数 $J \pm M$，$J \pm M'$ 中最小的一个.

$r^{(J)}_{MM'}$ 是变数 ξ 和 η 的 $2J$ 次齐次多项式.

维格纳公式的特殊情况

$$r^{(J)}_{MJ} = (-)^{J-M} r^{(J)}_{JM} = r^{(J)}_{-J-M} = (-)^{J-M} r^{(J)}_{-M-J} = \sqrt{\frac{(2J)!}{(J+M)!(J-M)!}}\,\xi^{J+M}\eta^{J-M} \tag{C.73}$$

$$r^{(J)}_{JJ} = r^{(J)}_{-J-J} = \xi^{2J} \quad r^{(J)}_{J-J} = (-)^{2J} r^{(J)}_{J-J} = \eta^{2J}.$$

$J=\frac{1}{2}$ 的情况：

$$R^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma)=\begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha}\cos\frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha}\sin\frac{1}{2}\beta e^{+\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{+\frac{1}{2}i\alpha}\sin\frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & e^{+\frac{1}{2}i\alpha}\cos\frac{1}{2}\beta e^{+\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix}, \tag{C.74}$$

（在这公式中，上下两行各对应 $M=\frac{1}{2}$，$-\frac{1}{2}$；而列是按同样的顺序自左而右排列）.

13. $J(J=l)$ 的整数值和球谐函数的转动

$l=1$ 的情况：

$$r^{(1)}(\beta)=$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\beta) & -\frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta & \frac{1}{2}(1-\cos\beta) \\ \frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta & \cos\beta & -\frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta \\ \frac{1}{2}(1-\cos\beta) & \frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta & \frac{1}{2}(1+\cos\beta) \end{pmatrix}. \tag{C.75}$$

（在此式中，三行依次各对应 $M=+1$，0，-1；而列以同样的次序自左而右排列）.

球谐函数的转动

$\omega\equiv(\theta,\varphi)$ 是单位矢量 $\boldsymbol{v}$ 对于坐标系 $Oxyz$ 的极角（$v_1=\sin\theta\cos\varphi$，$v_2=\sin\theta\sin\varphi$，$v_3=\cos\theta$）；

$\Omega\equiv(\Theta,\Phi)$ 是同一矢量 $\boldsymbol{v}$ 对于坐标系 $OXYZ$ 的极角。

$(\alpha\beta\gamma)$ 是使 $Oxyz$ 转动成 $OXYZ$ 的欧勒角[1]. Θ 和 Φ 是 θ, φ 的完全确定的函数，在其中 α, β, γ 以参数的形式出现.

$\omega_1 \equiv (\theta_1, \varphi_1)$ 是矢量 $\boldsymbol{v}_1 \equiv \mathscr{R}^{-1}\boldsymbol{v}$ 对于 $Oxyz$ 的极角，它经转动 $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ 就变换为 $\boldsymbol{v}$. 我们得到 $\Omega = \omega_1$.

球谐函数 $Y_l^m(\Omega)$ 代表在表象 $\{\omega\}$ 中的某一刃矢 $|lm\rangle$:

$$Y_l^m(\omega) = \langle \omega | lm \rangle .$$

经转动 $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$，这刃矢变换为刃矢 $R(\alpha\beta\gamma)|lm\rangle$. 后者在方向 $\boldsymbol{v}$ 上的分量等于 $|lm\rangle$ 在方向 $\boldsymbol{v}_1$ 上的分量:

$$Y_l^m(\Omega) \equiv \langle \omega_1 | lm \rangle = \langle \omega | R | lm \rangle ,$$

因此得出球谐函数的移动公式是

$$Y_l^m(\Omega) = \sum_{m'=-l}^{+l} Y_l^{m'}(\omega) R^{(l)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma). \qquad (C.76)$$

标量积和相加定理

设 $\boldsymbol{v}$ 和 $\boldsymbol{v}'$ 是两个单位矢量，ω 和 ω' 分别是它们在 $Oxyz$ 中的极角，而 Ω 和 Ω' 是这两个矢量在 $OXYZ$ 中的极角. 关系式 (C.76) 和 $R^{(l)}$ 的么正关系给出

$$\sum_m Y_l^m(\Omega) Y_l^{m*}(\Omega') = \sum_m Y_l^m(\omega) Y_l^{m*}(\omega'). \qquad (C.77)$$

特别是，若 $\boldsymbol{v}'$ 的指向与 OZ 相同，我们就得到相加定理:

$$\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} Y_l^0(\Omega) \equiv \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\Theta)$$

$$= \sum_{m=-l}^{+l} Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^{m*}(\beta, \alpha). \qquad (C.78)$$

---

1) 为了在欧勒角的选定过程中去除任意性，我们附加一些补充条件:

$$0 \leqslant \alpha \leqslant 2\pi \qquad 0 \leqslant \beta \leqslant \pi \qquad -\pi \leqslant \gamma \leqslant +\pi$$

(按此选择，$OuzZ$ 是右手坐标系.)因此，

(i) OZ 对 $Oxyz$ 的极坐标是 (β, α);

(ii) Oz 对 $OXYZ$ 的极坐标是 $(\beta, \pi - \gamma)$.

用 $\cos\beta$ 和 $\sin\beta$ 表述 $r^{(l)}_{mm'}$

整数 l 的情况:

(i) 若 $(-)^{m+m'}=+1$，则 $r^{(l)}_{mm'}=\cos\beta$ 的 l 次多项式;

(ii) 若 $(-)^{m+m'}=-1$，则 $r^{(l)}_{mm'}=\sin\beta\times(\cos\beta$ 的 $(l-1)$次多项式).

特别是，

$$r^{(l)}_{ml}(\beta)=\sqrt{\frac{(2l)!}{(l+m)!(l-m)!}}\frac{1}{2^l}(1+\cos\beta)^m\sin^{l-m}\beta. \tag{C.79}$$

m 或 $m'=0$ 时的 $R^{(l)}_{mm'}$

$$R^{(l)}_{m0}(\alpha\beta\gamma)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y^{m*}_l(\beta\alpha). \tag{C.80a}$$

$$R^{(l)}_{0m}(\alpha\beta\gamma)=(-)^m\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y^{m*}_l(\beta\gamma). \tag{C.80b}$$

$$R^{(l)}_{00}(\alpha\beta\gamma)=P_l(\cos\beta). \tag{C.80c}$$

V. 不可约张量算符

14. 定义和主要性质

定义

张量算符≡某种算符的集合，这些算符在转动下线性地从其中的一个变换成另一个.

不可约张量算符:

如果作转动时，$(2k+1)$个算符 $T^{(k)}_q(q=-k,\cdots+k)$ 按下面公式变换，

$$RT^{(k)}_qR^{-1}=\sum_{q'=-k}^{+k}T^{(k)}_{q'}R^{(k)}_{q'q}. \tag{C.81}$$

则定义它们为 k 阶**不可约张量算符** $T^{(k)}$ 的**标准分量**.

矢量算符≡一阶不可约张量. 如果 V_x, V_y, V_z 是它在 $Oxyz$ 上的分量,则其标准分量为

$$V_+ = -\frac{1}{2}\sqrt{2}\,(V_x + \mathrm{i}V_y), \quad V_0 = V_z,$$

$$V_- = \frac{1}{2}\sqrt{2}\,(V_x - \mathrm{i}V_y).$$

标量算符≡零阶不可约张量.

不可约张量与 J 的对易关系

$$[J_\pm, T_q^{(k)}] = \sqrt{k(k+1) - q(q\pm 1)}\,T_{q\pm 1}^{(k)}. \quad \text{(C.82a)}$$

$$[J_z, T_q^{(k)}] = qT_q^{(k)}. \quad \text{(C.82b)}$$

厄密共轭[1]

$$S^{(k)} = T^{(k)\dagger} \text{ 若 } S_q^{(k)} = (-)^q T_{-q}^{(k)\dagger}. \quad \text{(C.83)}$$

基本性质(维格纳-爱卡特定理)

$$\langle \tau JM | T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle$$

$$= \frac{(-)^{2k}}{\sqrt{2J+1}} \langle \tau J \| \boldsymbol{T}^{(k)} \| \tau' J' \rangle \langle J' k M' q | JM \rangle$$

$$= (-)^{J-M} \langle \tau J \| \boldsymbol{T}^{(k)} \| \tau' J' \rangle \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}. \quad \text{(C.84)}$$

按定义, $\langle \tau J \| T(k) \| \tau' J' \rangle$ 是约化矩阵元[2].

---

1) 我们这里采用拉卡的定义(参看前面引文). 按此定义, l 阶的球谐函数 Y_l^m 构成一种厄密张量算符. 注意,相互对易的、不可约的、厄密的张量算符的张量积(按下面的定义)不总是厄密的. 为此, 我们必须修改厄密共轭的定义,即用 $(-)^{k+q}$ 代替 $(-)^q$. 按此新定义, 奇数阶的球谐函数是反厄密的.

注意,如果我们用 $(-)^q$ 表示 $e^{i\pi q}$, 则我们的厄密共轭定义也可以应用到半整数阶的张量算符上.

2) 这里采用拉卡的定义(参看前面的引文)

我们得到共轭关系（k 是整数）：

$$\langle \tau J \| \boldsymbol{T}^{(k)} \| \tau' J' \rangle^* = (-)^{J'-J} \langle \tau' J' \| \boldsymbol{T}^{(k)\dagger} \| \tau J \rangle. \qquad \text{(C.85)}$$

特殊张量算符

单位算符，

$$\langle \alpha J \| 1 \| \alpha' J' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{JJ'} \sqrt{2J+1},$$

总角动量，

$$\langle \alpha J \| \boldsymbol{J} \| \alpha' J' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{JJ'} \sqrt{J(J+1)(2J+1)}.$$

15. 不可约张量算符的张量积[1]

定义

设 $\boldsymbol{T}^{(k_1)}$ 和 $\boldsymbol{U}^{(k_2)}$ 是两个各为 k_1 阶和 k_2 阶的不可约张量算符。按定义，

$\boldsymbol{T}^{(k_1)} \otimes \boldsymbol{U}^{(k_2)} \equiv (2k_1+1)(2k_2+1)$ 个算符 $T^{(k_1)}_{q_1} T^{(k_2)}_{q_2}$ 的集合并不要求线性独立。它是一个(可约)张量算符。

$\boldsymbol{V}^{(K)} \equiv [\boldsymbol{T}^{(k_1)} \otimes U^{(k_2)}]_K$，即 K 阶张量积，它是 K 阶不可约张量算符，其分量为

$$V^{(K)}_Q = \sum_{q_1 q_2} \langle k_1 k_2 q_1 q_2 | K Q \rangle T^{(k_1)}_{q_1} U^{(k_2)}_{q_2} \qquad \text{(C.86)}$$

（要求 $|k_1 - k_2| \leqslant K \leqslant k_1 + k_2$）。

如果 $k_1 = k_2 = K$，我们定义标量积[2]为：

$$S \equiv (\boldsymbol{T}^{(k)} \cdot \boldsymbol{U}^{(k)}) = \sum_q (-)^q T^{(k)} U^{(k)}_{-q}, \qquad \text{(C.87)}$$

注意，

$$S = (-)^k \sqrt{2k+1}\, V^{(0)}_0.$$

---

1) 在以下的所有公式中，我们只限于讨论整数阶的张量算符。

2) 按此定义，两个矢量算符的标量积 $(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{W})$ 由 $V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z$ 给定，这和通常的定义一致。

约化矩阵元的公式

假定我们有一个量子系统，它由角动量分别为 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 的两个子系统 1 和 2 组成（$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$）.

$|\tau_1 J_1 M_1\rangle$ 是系统 1 的基矢，

$|\tau_2 J_2 M_2\rangle$ 是系统 2 的基矢.

$\boldsymbol{T}^{(k_1)}$ 和 $\boldsymbol{U}^{(k_2)}$ 是不可约张量算符，它们各自作用在系统 1 和系统 2 的变量上.

$\boldsymbol{V}^{(K)}$ 是按 (C.86) 定义的 K 阶张量积.

在标准表象 $\{\tau_1\tau_2\boldsymbol{J}_1^2\boldsymbol{J}_2^2\boldsymbol{J}^2 J_z\}$ 中，$\boldsymbol{V}^{(K)}$ 的约化矩阵元由合成公式给出，

$$\begin{aligned}&\langle\tau_1\tau_2 J_1 J_2 J\|\boldsymbol{V}^{(K)}\|\tau_1'\tau_2' J_1' J_2' J'\rangle\\&=\sqrt{(2J+1)(2K+1)(2J'+1)}\\&\times\begin{Bmatrix}J_1' & J_2' & J'\\ k_1 & k_2 & K\\ J_1 & J_2 & J\end{Bmatrix}\langle\tau_1 J_1\|T^{(k_1)}\|\tau_1' J_1'\rangle\langle\tau_2 J_2\|U^{(k_2)}\|\tau_2' J_2'\rangle.\end{aligned}\tag{C.88}$$

"9J" 符号能约化为 "6J" 符号的特别情况

$\boldsymbol{U}=1\quad K=k_1=k.$

$$\begin{aligned}&\langle\tau_1\tau_2 J_1 J_2 J\|\boldsymbol{T}^{(k)}\|\tau_1'\tau_2' J_1' J_2' J'\rangle=\delta_{\tau_2\tau_2'}\delta_{J_2 J_2'}\langle\tau_1 J_1\|\boldsymbol{T}^{(k)}\|\tau_1' J_1'\rangle\\&\times(-)^{J'+J_1+J_2+k}\sqrt{(2J+1)(2J'+1)}\begin{Bmatrix}J_1 & k & J_1'\\ J' & J_2 & J\end{Bmatrix}\end{aligned}\tag{C.89}$$

$\boldsymbol{T}=1\quad K=k_2=k.$

$$\begin{aligned}&\langle\tau_1\tau_2 J_1 J_2 J\|\boldsymbol{U}^{(k)}\|\tau_1'\tau_2' J_1' J_2' J'\rangle=\delta_{\tau_1\tau_1'}\delta_{J_1 J_1'}\langle\tau_2 J_2\|\boldsymbol{U}^{(k)}\|\tau_2' J_2'\rangle\\&\times(-)^{J+J_1+J_2'+k}\sqrt{(2J+1)(2J'+1)}\begin{Bmatrix}J_2 & k & J_2'\\ J' & J_1 & J\end{Bmatrix}\end{aligned}\tag{C.90}$$

$K=0\quad k_1=k_2=k.$

$$\langle \tau_1\tau_2 J_1 J_2 J M \,|\, (\boldsymbol{T}^{(k)} \cdot \boldsymbol{U}^{(k)}) \,|\, \tau_1'\tau_2' J_1' J_2' J' M' \rangle$$

$$= \delta_{JJ'}\delta_{MM'}(-)^{J+J_2+J_1'} \begin{Bmatrix} J_1 & k & J_1' \\ J_2' & J & J_2 \end{Bmatrix}$$

$$\times \langle \tau_1 J_1 \| \boldsymbol{T}^{(k)} \| \tau_1' J_1' \rangle \langle \tau_2 J_2 \| \boldsymbol{U}^{(k)} \| \tau_2' J_2' \rangle . \qquad \text{(C.91)}$$

尤其是，当 $\boldsymbol{T}^{(k)} = \boldsymbol{J}_1$ 时，由 (C.89) 得到：

$$\langle J_1 J_2 J+1 \| \boldsymbol{J}_1 \| J_1 J_2 J \rangle = \frac{1}{2}$$

$$\times \sqrt{\frac{[(S+1)^2-(J+1)^2]\,[(J+1)^2-d^2]}{J+1}} \qquad \text{(C.92)}$$

$$\langle J_1 J_2 J \| \boldsymbol{J}_1 \| J_1 J_2 J \rangle$$

$$= \frac{1}{2}\,[d(S+1)+J(J+1)] \sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}}$$

$$= \frac{1}{2}\,[J_1(J_1+1)+J(J+1)-J_2(J_2+1)]$$

$$\times \sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}} \qquad \text{(C.93)}$$

$$\langle J_1 J_2 J-1 \| \boldsymbol{J}_1 \| J_1 J_2 J \rangle = -\frac{1}{2}$$

$$\times \sqrt{\frac{[(S+1)^2-J^2]\,[J^2-d^2]}{J+1}} \qquad \text{(C.94)}$$

其中，$S = J_1 + J_2 \quad d = J_1 - J_2$ $(|d| \leqslant J \leqslant S)$。

附录 D. 群论基本知识

本附录的规划

1. 引言

I. 关于群的一般概念

2. 定义
3. 群的类
4. 群的子群
5. 同构. 同态

II. 群的线性表示

6. 定义
7. 表示空间上的运算. 可约性
8. 基本定理
9. 量子力学中的应用

III. 有限群

10. 概述
11. 表示
12. 表示的不可约分量
13. 不可约不变子空间的构成

IV. 置换群 $\mathscr{S}_n$

14. 概述. 循环. 类
15. 划分
16. 杨氏"对称化子". 不可约表示的构成
17. $\mathscr{S}_n$ 的不可约表示的主要性质

18. n 个自旋为 1 / 2 的费米子系统

1. 引言

量子力学研究的那些系统的运动方程常常对某些变换群是不变的，或者更一般地说，所研究的可观测量对这些群具有特别简单的变换性质. 群论的方法能使我们把由于对称性的存在而引出的结果加于分类和简化.

事实上，由于强有力的直觉和一定程度的熟练运用算符运算，我们常常无须求助于群论就能够直接利用这些对称性质. 不少卓越的物理学家宁愿就这样处理问题，即使这意味着要对每一个具体问题一次又一次地去重新求出众所周知的结果，这些结果从群论看来也是需要的. 然而，在某些物理领域中，如多原子分子或晶体的研究中，直觉和熟练的要求太高了，以致自觉地和明确地利用群论就是不可避免了. 没有复杂的对称性时，利用群论(尽管并不是一定要这样)常常使我们能更好地阐明问题，而且自动地提供了解决问题的某些要素.

这个附录的目的是使读者初步熟悉一下群论，并作为阅读更完整的著作[1]的一个导引.

本附录所讨论的内容包括量子力学中经常利用的主要概念和性质. 证明几乎都略去. 其中大多数(特别是整个第 I 第 II 节)的叙述都是很简单的.

---

1) 特别值得读者参考的是 §C. 2 引用过的 Wigner 的著作，或者 B. L. van de Waerden. *Die Gruppentheoretische Methode in der Quantenmechanik* (Edwards, Ann Arbor, Michigan, 1944). 关于连续群，可参考 G. Racah, *Princeton Lecture Notes on Group Theory and Spectroscopy* (1951).

I. 关于群的一般概念

2. 定义

群 操作(或元素——译者) $a, b, c, \cdots$ 组成的集合 $\mathcal{G}$ 形成一个群,只要:

(i) 其中任两个元素的乘积仍属于这个集合[1)2)],

若 $a \in \mathcal{G}$ 和 $b \in \mathcal{G}$, 则 $ab \in \mathcal{G}$;

(ii) 其中有一个单位元素 I, $I \in \mathcal{G}$, 使得: 对于任一 $a \in \mathcal{G}$, $Ia = aI = a$ 都成立;

(iii) 其中的每一个元素 a 都对应一个也属于这个集合的逆元素 a^{-1},

若 $a \in \mathcal{G}$, 则 $a^{-1} \in \mathcal{G}$, 而且 $a^{-1}a = aa^{-1} = I$;

(iv) 乘法是可结合的.

$$(ab)c = a(bc).$$

有限群 元素数目 N 是有限的群称为有限群, N 是它的阶.

例:空间反射群是 2 阶有限群.它的两个元素是单位元素 I 和经过原点的反射运算 s, $s^2 = I$. n 个对象的置换群 $\mathcal{S}_n$ 是 $n!$ 阶的有限群.

连续群 连续群包含无限多个依赖于一个或几个连续参数的元素.

例: 普通空间中的转动群 $\mathcal{R}_3$; 普通空间中的平移群.

阿贝尔群 全体元素彼此对易的群称为阿贝尔群, 即对任意的 $a, b \in \mathcal{G}$, 有 $ab = ba$.

例: 空间反射群;空间平移群;绕 Oz 轴的转动群.

---

1) 按约定, $a \in \mathcal{G}$ 表示元素 a 属于集合 $\mathcal{G}$.

2) ab 所代表的是先实行 b 然后实行 a 而得的元素. ab 和 ba 可能不相同.

3. 群的类

共轭元素 对于群 $\mathscr{G}$ 的两个元素 a 和 b，若 $\mathscr{G}$ 中存在某个元素 x，使

$$b = xax^{-1}.$$

则称 a 和 b 为互相共轭(注意，x 不是唯一的).

如果 b 共轭于 a，则 a 也共轭于 b，即共轭是互逆对应. 此外，假如两个元素 b，c 与第三个元素 a 共轭，则它们彼此共轭.

类 按定义，群 $\mathscr{G}$ 的某一个元素 a 的全体共轭元素的集合是 $\mathscr{G}$ 的一个类. 元素 a 本身也属于这个集合.

如果 b 共轭于 a，则共轭于 b 的全体元素所构成的类与共轭于 a 的全体元素所构成的类相同，否则就没有公共元素. $\mathscr{G}$ 的每一个元素都分别属于一个完全确定的类中. 整个群可以分解为若干类.

假如 $\mathscr{G}$ 的某一元素与所有其他的元素对易，则它本身就构成一类. 特别是，单位元素 I 本身构成一个类.

例: 转动角 φ 相同 而只是转动轴方向不同的那些转动 $\mathscr{R}(\varphi)$ 所构成的集合是群 $\mathscr{R}_3$ 的一个类. 每一个角 $\varphi(0 \leqslant \varphi < \pi)$ 对应这个群的一个类.

4. 群的子群

定义 $\mathscr{H}$ 是 $\mathscr{G}$ 的一个子群，如果它是一个群，而全体元素都属于群 $\mathscr{G}$.

例: 绕 Oz 所作的转动构成 $\mathscr{R}_3$ 的一个子群. 平行于 Oz 轴的平移构成空间平移群的一个子群.

陪集

若 x 是 $\mathscr{G}$ 的某个元素，我们可利用子群 $\mathscr{H}$ 的各个元素

h 构造出元素 xh。用 $x\mathscr{H}$ 代表由这些元素构成的集合。$\mathscr{H}$ 和 $x\mathscr{H}$ 的元素之间有一一对应的关系。

有两种情况需要考虑：

(a) 若 $x\in\mathscr{H}$，则 $x\mathscr{H}$ 就是子群 $\mathscr{H}$ 本身；

(b) 若 $x\notin\mathscr{H}$，则 $x\mathscr{H}$ 不是一个群，我们称它为子群 $\mathscr{H}$ 的左陪集。

类似地，定义 $\mathscr{H}x$ 为右陪集。在下面，我们仅考虑左陪集。显然，右陪集有相同的性质。

两个陪集 $x_1\mathscr{H}$ 和 $x_2\mathscr{H}$ 或者包含完全相同的元素，或者连一个相同的元素也没有，这依 $x_2^{-1}x_1$ 属于 $\mathscr{H}$ 或不属于 $\mathscr{H}$ 而定。

$\mathscr{G}$ 的任一个元素或者属于 $\mathscr{H}$，或者属于 $\mathscr{H}$ 的某一陪集。子群 $\mathscr{H}$ 和它的各个陪集构成整个群 $\mathscr{G}$。

$\mathscr{H}$ 的共轭子群

如果 $\mathscr{H}$ 是 $\mathscr{G}$ 的一个子群，而且 x 是 $\mathscr{G}$ 的一个元素，但不是 $\mathscr{H}$ 的元素，那末 $x\mathscr{H}x^{-1}$ 也是 $\mathscr{G}$ 的一个子群，称为 $\mathscr{H}$ 的**共轭子群**。

(注意，若 $x\in\mathscr{H}$，则 $x\mathscr{H}x^{-1}$ 就是子群 $\mathscr{H}$ 本身)

$\mathscr{H}$ 的共轭子群既可以和 $\mathscr{H}$ 相同，也可以彼此相同。

不变子群　商群

如果 $\mathscr{H}$ 和它的所有共轭子群都相同，即

$$\mathscr{H}=x\mathscr{H}x^{-1}\quad\text{对任一 } x\in\mathscr{G}.$$

则 $\mathscr{H}$ 是 $\mathscr{G}$ 的一个不变子群。

另一种等价的定义：如果 $\mathscr{G}$ 的一个子群的元素由 $\mathscr{G}$ 的一个或几个类的全体元素组成，则它是 $\mathscr{G}$ 的不变子群。

注意，当我们需要找到一个给定群的全体不变子群时，这第二种定义非常有用。

如果 $\mathscr{H}$ 是一个不变子群，$x\mathscr{H}$ 和 $y\mathscr{H}$ 是它的两个陪

集，那末，$x\mathscr{H}$ 的一个元素和 $y\mathscr{H}$ 的一个元素之积属于陪集 $yx\mathscr{H}$：

$$(y\mathscr{H})(x\mathscr{H}) = (yx\mathscr{H}).$$

(注意，若 $\mathscr{H}$ 是不变子群，则 $x\mathscr{H} = \mathscr{H}x$)

由不变子群及其陪集组成的集合构成一个群，它的单位元素就是 $\mathscr{H}$，称这群为**商群**，写成 $\mathscr{G}/\mathscr{H}$.

例： n 个对象的偶置换群 $\mathscr{A}_n$ 是 $\mathscr{S}_n$ 的一个不变子群. 它有且只有一个陪集，即奇置换集. 所以这商群有两个元素.

单(纯)群　半单(纯)群

一个群是单(纯)群，如果它仅有的一个不变子群是单位元素.

例：空间转动群.

一个群是半单(纯)群，如果它仅有的一个不变阿贝尔子群是单位元素.

例：$\mathscr{S}_n$ 群.

5. 同构　同态

同构

两个群 $\mathscr{G}$ 和 $\hat{\mathscr{G}}$ 是同构的，如果它们的元素之间存在着一一对应的关系，又保持乘法规律，即

(i) $\mathscr{G}$ 的每一个元素 g_i 唯一地对应 $\hat{\mathscr{G}}$ 的一个元素 $\hat{g}_i$，反之亦然；

(ii) 若 $g_ig_l = g_k$，则 $\hat{g}_i\hat{g}_l = \hat{g}_k$.

例：等边三角形的各种对称构成一个群，它同构于 $\mathscr{S}_3$；正四面体的各种对称构成一个群，它同构于 $\mathscr{S}_4$.

同态

如果 $\hat{\mathscr{G}}$ 和 $\mathscr{G}$ 的元素之间的对应不是一一对应的，则称这两个群同态.

更准确地说，如果：

(i) $\mathscr{G}$ 的每一个元素 g_i 对应 $\hat{\mathscr{G}}$ 的一个且只一个元素 $\hat{g}_i$，而 $\hat{\mathscr{G}}$ 的每一个元素至少对应 $\mathscr{G}$ 的一个（可能多于一个）元素；

(ii) 若 $g_ig_j = g_k$，则 $\hat{g}_i\hat{g}_j = \hat{g}_k$，

我们就称 $\mathscr{G}$ 同态于 $\hat{\mathscr{G}}$.

如果 $\mathscr{G}$ 有一个不变子群 $\mathscr{H}$，则它同态于商群 $\mathscr{G}/\mathscr{H}$.

如果 $\mathscr{G}$ 同态于 $\hat{\mathscr{G}}$，则在 $\mathscr{G}$ 中同态于单位元素 $\hat{I}$ 的那些元素组成的集合 $\mathscr{H}$ 是 $\mathscr{G}$ 的一个不变子群；$\mathscr{G}$ 中同态于 $\hat{\mathscr{G}}$ 的一个给定元素(不同于 $\hat{I}$) 的那些元素组成的集合构成这个不变子群的一个陪集，而且商群 $\mathscr{G}/\mathscr{H}$ 同构于 $\hat{g}$.

II. 群的线性表示

6. 定义

线性变换群

方阵的乘法是一种可结合的运算. 假如 $n \times n$ 矩阵的一个集合满足定义群的公理 (i)，(ii) 和 (iii)，则它构成一个群 $\boldsymbol{G}$.

每一个矩阵表述 n 维矢量空间 $\mathscr{E}_n$ 的一个线性算符 G. 所以，它确定这空间中矢量的一个线性变换. 如果 $|1\rangle$，$|2\rangle$，$\cdots|n\rangle$ 是 $\mathscr{E}_n$ 的 n 个基矢(这种基无需正交)，则它们当中的每一个基矢的变换由下述方程给定：

$$G|k\rangle = \sum_i |j\rangle G_{ik}.$$

这样定义的群(用黑体罗马字母代表)称为 (n 维) **线性变换群.**

群的表示

按定义，群 $\mathscr{G}$ 的一个(线性)表示是一个线性变换群，而且 $\mathscr{G}$ 同态于它.

设 G 就是这样的群，而且 $\mathscr{E}$ 是受 G 的矩阵作用的矢量空间. 按定义，$\mathscr{E}$ 是**表示空间**，它的维数 n 就是这**表示的维数.**

如果 $\mathscr{G}$ 同构于 G，就称这个表示是**忠实的**. 否则，$\mathscr{G}$ 中同态于矩阵 I 的那些元素构成一个不变子群 $\mathscr{H}$，而且 G 是商群 $\mathscr{G}/\mathscr{H}$ 的一个忠实表示.

一维表示

任何一个群至少有一个一维表示，即它的**恒等表示.** 在此表示中，群的每一个元素可用数 1 表述.

要是有更多的一维表示，这个群必须有不变子群，而其商群为阿贝尔群. 这个群的所有其它一维表示都是这些阿贝尔商群的表示(参看 $\mathscr{S}_n$ 的情况，§ 17).

么正表示

一个表示 G，如果它的所有矩阵都是么正的，则称它为么正表示.

等价表示

两个表示 G 和 G' 是等价的，如果它们有相同的维数，而且每一个矩阵 $G'(g)$ 可以通过群 $\mathscr{G}$ 的同一个元素的矩阵 $G(g)$ 的某一线性变换 T 来得到:

$$G'(g) = TG(g)T^{-1} \qquad (\text{对任意的 } g \in \mathscr{G}),$$

或者

$$G' = TGT^{-1}.$$

我们用符号写成

$$G' \simeq G.$$

如果我们认定 $\mathscr{E}$ 和 $\mathscr{E}'$ 是同一表示空间，则从 G 到等价表示 G' 的过渡相当于在这个空间中取一组新的基矢.

共轭表示

两个表示 $\boldsymbol{G}$ 和 $\boldsymbol{G}^*$，如果它们的矩阵 $G(g)$，$G^*(g)$ 互为复共轭，则定义它们为共轭表示.

一个表示 $\boldsymbol{G}$，如果它等价于其共轭表示:

$$\boldsymbol{G} \simeq \boldsymbol{G}^*,$$

则称它是自共轭的.

特征标

按定义，在 $\mathscr{G}$ 的表示 $\boldsymbol{G}$ 中，表述元素 $\mathscr{G}$ 的矩阵 $G(g)$ 的迹就是 g 在这个表示中的特征标 χ，

$$\chi(g) \equiv \mathrm{Tr}\, G(g).$$

从迹的性质得出: 属于同一类的两个元素有相同的特征标，即**特征标是类的函数.**

出于同样的理由，**两个等价表示有相同的特征标集合，**

$$\chi'(g) = \chi(g) \quad 若 \quad G'(g) = TG(g)T^{-1}.$$

我们用符号写成

$$\boldsymbol{\chi}' = \boldsymbol{\chi} \quad 若 \quad \boldsymbol{G}' \simeq \boldsymbol{G}.$$

注意，如果 $\boldsymbol{G}$ 是自共轭的，则它的特征标是实的.

7. 表示空间上的运算 可约性[1)]

直和

设 $\boldsymbol{G}^a$ 和 $\boldsymbol{G}^b$ 是同一个群 $\mathscr{G}$ 的两个表示，n_a 和 n_b 分别是它们的维数，$\mathscr{E}_a$ 和 $\mathscr{E}_b$ 分别是它们的表示空间.

如果 $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \cdots |a_{n_a}\rangle$ 是 $\mathscr{E}_a$ 的基矢; $|b_1\rangle, |b_2\rangle, \cdots |b_{n_b}\rangle$ 是 $\mathscr{E}_b$ 的基矢，那末在这两个表示中表述元素 g 的线性变换由基矢的变换规律确定:

---

1) 本小节所阐明的性质是一一对应矩阵集合的普遍性质，即使这些矩阵集合不构成一个群时，它们仍适用.

$$g[|a_\varkappa\rangle] = \sum_\lambda |a_\lambda\rangle G^a_{\lambda\varkappa}(g)$$

$$g[|b\mu\rangle] = \sum_\nu |b_\nu\rangle G^b_{\nu\mu}(g). \qquad \text{(D.1)}$$

按定义，空间 $\mathscr{E}_a$ 和 $\mathscr{E}_b$ 的直和 $\mathscr{E}_a + \mathscr{E}_b$ 是由 $n_a + n_b$ 个矢量 $|a_1\rangle, \cdots |a_{n_a}\rangle, \cdots, |b_{n_b}\rangle$ 张成的空间.

这个新空间中的矩阵可写成下面的形式:

$$M \equiv \begin{pmatrix} M_{aa} & M_{ab} \\ M_{ba} & M_{bb} \end{pmatrix}.$$

其中，M_{aa} 是 $n_a \times n_a$ 矩阵，它将空间 $\mathscr{E}_a$ 的矢量变换为 $\mathscr{E}_a$ 的矢量；M_{bb} 是 $n_b \times n_b$ 矩阵，它将 $\mathscr{E}_b$ 的矢量变换为 $\mathscr{E}_b$ 的矢量；M_{ab} 是 $n_a \times n_b$ 矩阵，它将 $\mathscr{E}_b$ 的矢量变换为 $\mathscr{E}_a$ 的矢量；M_{ba} 是 $n_b \times n_a$ 矩阵，它的性质与 M_{ab} 相反. 特别是，如果 A 是 $\mathscr{E}_a$ 的一个矩阵，B 是 $\mathscr{E}_b$ 的一个矩阵，那末我们通过直接相加可以构成如下的矩阵 $A + B$ (具有**分块对角**形式):

$$A + B = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}.$$

注意，

$$\begin{aligned} &\mathrm{Tr}\,(A + B) = \mathrm{Tr}\,A + \mathrm{Tr}\,B, \\ &\det(A + B) = \det A \det B. \end{aligned} \qquad \text{(D.2)}$$

矩阵的直接相加运算保持单位元和矩阵乘法规律不变:

$1_{(a+b)} = 1_{(a)} + 1_{(b)}$ $\quad (A_1 + B_1)(A_2 + B_2) = A_1A_2 + B_1B_2$.

由此得出: 矩阵 $G^a(g) + G^b(g)$ 的集合 $\boldsymbol{G}^{a+b}$ 是群 $\mathscr{G}$ 的一个表示. 其中元素 g 用线性变换来表述，此变换由 $\mathscr{E}_a + \mathscr{E}_b$ 的 $n_a + n_b$ 个基矢的变换规律 (D.1) 确定. 至于这表示的特征标，我们有: $\chi^{a+b}(g) = \chi^a(g) + \chi^b(g)$，换言之，

$$\boldsymbol{\chi}^{a+b} = \boldsymbol{\chi}^a + \boldsymbol{\chi}^b. \qquad \text{(D.3)}$$

张量积(克罗内克积或直积)

空间或矩阵作张量积的运算已经有过规定(第七章)。

作 $\mathscr{E}_a$ 对 $\mathscr{E}_b$ 的张量积，我们构造出 $n_a n_b$ 维空间 $\mathscr{E}_a \otimes \mathscr{E}_b$，其基矢是 $|abx\mu\rangle \equiv |a_x\rangle|b_\mu\rangle (x = 1, 2, \cdots n_a; \mu = 1, 2, \cdots n_b)$。矩阵 $G^a(g) \otimes G^b(g)$ 由 $\boldsymbol{G}^a$ 和 $\boldsymbol{G}^b$ 中表述 g 的矩阵之间的张量乘法得到，它构成群 $\mathscr{G}$ 的一个 $n_a n_b$ 维表示 $\boldsymbol{G}^{ab} \equiv \boldsymbol{G}^a \otimes \boldsymbol{G}^b$，在其中，群的运算由下述规则确定:

$$g[|ab_x\mu\rangle] = \sum_{\lambda\nu} |ab\lambda\nu\rangle G^a_{\lambda x}(g) G^b_{\nu\mu}(g). \qquad (D.4)$$

这个表示的特征标由下式给定:

$$\chi^{ab}(g) = \chi^a(g)\chi^b(g). \qquad (D.5)$$

可约性

表示 $\boldsymbol{G}$ 的空间 $\mathscr{E}$ 的一个不变子空间是 $\mathscr{E}$ 的某一个子空间，它的矢量在 $\boldsymbol{G}$ 的矩阵的作用下线性地从其中的一个变换为另一个。

我们称表示 $\boldsymbol{G}$ 是:

(i) **不可约的**，如果 $\mathscr{E}$ 不含有不变子空间(0 空间和它本身除外);

(ii) **可约的**，如果它不是不可约的，即

$\mathscr{E} = \mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2$ $(\mathscr{E}_1, \mathscr{E}_2 \neq 0)$，其中 $\mathscr{E}_1$ 是不变子空间。在第二种情况中，如果 $\mathscr{E}_2$ 也是不变子空间，就称 $\boldsymbol{G}$ **是可分解的**。利用一个适当的线性变换，我们能把 $\mathscr{E}$ 的基矢变换为不属于 $\mathscr{E}_1$ 就属于 $\mathscr{E}_2$ 的矢量。所得到的等价表示是 $\mathscr{E}_1$ 中的一个表示 $\boldsymbol{G}_1$ 和 $\mathscr{E}_2$ 中的一个表示 $\boldsymbol{G}_2$ 的直和:

$$\boldsymbol{G} \simeq \boldsymbol{G}_1 + \boldsymbol{G}_2.$$

我们称 $\boldsymbol{G}_1$ 和 $\boldsymbol{G}_2$ 是 $\boldsymbol{G}$ 的**分量**。

一个表示 $\boldsymbol{G}$ 是**完全可约的**，如果它能写成不可约分量的直和形式:

$$\boldsymbol{G} \simeq \boldsymbol{G}^{(1)} + \boldsymbol{G}^{(2)} + \cdots (\boldsymbol{G}^{(1)}, \boldsymbol{G}^{(2)}, \cdots \text{是不可约的}).$$

任何一个么正表示不是不可约的就是完全可约的.

对于一个给定的 j 值，转动矩阵 $R^{(j)}$（附录C，第4节）构成某个群的一个不可约么正表示 $\boldsymbol{D}^{(j)}$. 严格说，只有 j 是整数时，$\boldsymbol{D}^{(j)}$ 才表述转动群 $\mathscr{R}_3$.

对于任意的 j，$\boldsymbol{D}^{(j)}$ 是如此一个群的不可约表示：这个群的无穷小变换相同于 $\mathscr{R}_3$（$\mathscr{R}$ 的"覆盖群"）的，二维幺模幺正线性变换群 $\mathscr{U}_2$ 的，以 $\mathscr{R}_3$ 为其商群的那个群的无穷小变换. 当 j 为半整数时，$\boldsymbol{D}^{(j)}$ 是 $\mathscr{U}_2$ 的忠实表示，而且 $\mathscr{R}_3$ 的每一元素对应 $\boldsymbol{D}^{(j)}$ 的两个符号相反的矩阵.

阿贝尔群的所有不可约表示都是一维的.

从一个表示空间到另一个表示空间的同态映射

从 $\mathscr{E}_a$ 到 $\mathscr{E}_b$ 的**线性映射**是一种线性对应，在其中，$\mathscr{E}_a$ 的每一个矢量 $|a\rangle$ 对应 $\mathscr{E}_b$ 的一个且只一个矢量 $|b\rangle$. 我们称这种映射是**同态映射**，如果对群的各个运算，它保持矢量的变换性质，也就是，若存在对应

$$|a\rangle \to |b\rangle,$$

便有

$$g[|a\rangle] \to g[|b\rangle] \quad (\text{对任一 } g \in \mathscr{G}).$$

和 $\mathscr{E}_a$ 的每个基矢相对应的 $\mathscr{E}_b$ 的矢量由 $n_b \times n_a$ 矩阵决定，

$$|a_\kappa\rangle \to \sum_\mu |b_\mu\rangle S_{\mu\kappa}. \tag{D.6}$$

如果知道这矩阵，则 $\mathscr{E}_a$ 到 $\mathscr{E}_b$ 的映射就完全确定.

若映射是同态的，我们得出矩阵方程

$$SG^a(g) = G^b(g)S \text{ 对任意的 } g \in \mathscr{G},$$

即

$$S\boldsymbol{G}^a = \boldsymbol{G}^b S. \tag{D.7}$$

当和 $\mathscr{E}_a$ 的矢量相对应的全体矢量 $|b\rangle$ 张成整个 $\mathscr{E}_b$ 时

(这里假定 $n_a \geqslant n_b$)，我们就得出 $\mathscr{E}_a$ 到 $\mathscr{E}_b$(理解为整个 $\mathscr{E}_b$)的一个映射．在这种情况下，包含在 S 中的所有 $n_b \times n_b$ 行列式不为 0．

当对应又是一一对应时 ($n_a = n_b$)，矩阵 S 是非奇异的，$\det S \neq 0$．在这种情况下，称 $\mathscr{E}_a$ 到 $\mathscr{E}_b$ 的这个同态映射为**同构映射**．显然有

$$G^a \simeq G^b.$$

8. 基本定理

群论在量子力学中的应用主要基于下面几个定理：

舒尔　引理

如果 G^a 和 G^b 是同一个群的两个不可约表示，而且这两个表示空间之间存在一种同构映射，那末确定这映射的矩阵 S [它满足方程 (D.6) 和 (D.7)] 有下列性质：

a) **若 G^a 和 G^b 不等价，则要求 $S = 0$；**

b) **若 $G^a \simeq G^b$，则不是 $S = 0$，就是 $\det S \neq 0$；**

c) **若 $G^a \equiv G^b$，则 S 是单位矩阵的倍数：**

$$S = Cl \qquad (c \text{ 是常数}).$$

推论

如果方阵 S 与某个群的一个不可约表示 G 的全体矩阵对易，则 S 是单位矩阵的倍数：

若 $[S, G] = 0$，则必然有 $S = c1$．

完全可约表示　唯一性定理

假定一个完全可约表示 G 分解为不可约部分有两种方式：

$$G \simeq G_1 + G_2 + \cdots + G_p$$

$$G \simeq G'_1 + G'_2 + \cdots + G_{p'}.$$

可以证明：$p = p'$，而且第一种分解式中的每一项与第二种

分解式中等价的某一项之间有一一对应，换言之：

唯一性定理. 如果 G 是完全可约的，则在等价范围内，它分解为不可约部分的方式是唯一的.

以后除非另有说明，否则我们认为两个等价表示是等同的. 于是在表示 G 中，同一个不可约表示可以出现若干次. 用

$$G^{(1)}, G^{(2)}, \cdots, G^{(j)}, \cdots$$

代表群 $\mathcal{G}$ **的不可约表示的序列**. 依照唯一性定理，任一完全可约表示 G 满足等价规律

$$G \simeq \sum_j n_j G^{(j)}, \tag{D.8}$$

而且整数 (≥ 0) 序列 $n_1, n_2, \cdots, n_j, \cdots$ 是唯一确定的. 类似地，G 的特征标集合满足方程

$$\chi = \sum_j n_j \chi^{(j)}. \tag{D.9}$$

下面两个定理使唯一性定理变得完善.

定理 II. 如果 G 是完全可约的，则 G 的任一个分量 G_1 也是完全可约的，而且它分解成不可约部分就是 G 的若干个不可约分量之和.

于是，若 $G \simeq G_1 + G_2$，而且 G 能按照 (D.8) 式分解、则

$$G_1 \simeq \sum_j n_j' G^{(j)} \qquad \text{其中 } n_j' \leqslant n_j \quad (j = 1, 2, \cdots).$$

定理 III. 如果 G 是完全可约的，而且存在一种从它的表示空间 $\mathcal{S}$ 到同一群的另一个表示 G_1 的表示空间 $\mathcal{S}_1$ 上的同态映射，那末 G_1 是 G 的一个分量.

定理 III 尤其适用于这样的情形：我们能使 $\mathcal{S}$ 空间的每一个基矢 $|x\rangle$ 对应 $\mathcal{S}_1$ 空间的一个矢量 $|\hat{x}\rangle$，$|x\rangle$ 张成整个

$\mathscr{E}_1$ 空间，而且不一定线性无关，$|\hat{x}\rangle$ 按照 $|x\rangle$ 的同一矩阵公式线性地从其中的一个变换为另一个，即

$$g[|\hat{x}\rangle] = \sum_{\lambda} |\hat{\lambda}\rangle G_{\lambda x}(g).$$

在这种情况下，$|x\rangle \to |\hat{x}\rangle$ 的对应显然建立了从 $\mathscr{E}$ 到 $\mathscr{E}_1$ 的同态映射.

特别是:

推论 III. 如果矢量 $|a_x\rangle$(x 可变) 和 $|b_\mu\rangle$(μ 可变) 张成的空间分别与表示 G^a 和 G^b 相联系，又若这两个表示的张量积 G^{ab} 是完全可约的，那末，在矢量积 $|a_x\rangle|b_\mu\rangle$ 张成的空间中确定的表示 G' 是 G^{ab} 的一个分量.

注意，各个矢量 $|a_x\rangle|b_\mu\rangle$ 并不一定线性无关. 如果它们线性无关，则 $G' \simeq G^{ab}$.

9. 在量子力学中的应用

量子理论中遇到的群是态矢量空间中的变换群. 它们几乎都是么正线性变换群. 本节只限于讨论这种类型的变换.

用 $\mathscr{E}$ 代表态矢量空间；用 $\mathscr{G}$ 代表么正算符 $G_1, G_2, \cdots$ 的集合，它们构成一个群.

设 $|u\rangle$ 是 $\mathscr{E}$ 的矢量. $|u\rangle$ 以及群算符作用在 $|u\rangle$ 上而得到的矢量 $G_1|u\rangle, G_2|u\rangle, \cdots$ 所构成的集合无需张成整个 $\mathscr{E}$，而张成 $\mathscr{E}$ 的某个子空间 $\mathscr{E}_u$，它对群变换是一个不变子空间，而且与群 $\mathscr{G}$ 的某一么正(因而完全可约)表示 G_u 相联系.对此，我们说：矢量 $|u\rangle$ 按 G_u 变换.

类似地，如果 Q 是 $\mathscr{E}$ 的线性算符，则 Q 以及应用群变换所得的算符 $G_1QG_1^{-1}, G_2QG_2^{-1}, \cdots$ 的集合张成矢量空间 $\mathscr{E}_Q$ (此空间的矢量是算符)，它的元素在群运算下线性地从其中的一个变换为另一个. $\mathscr{E}_Q$ 与 $\mathscr{G}$ 的 G^Q 表示相联系. 在我们

所考虑的全部情况中，G^Q 或者完全可约，或者不可约。由定义，Q 按 G^Q 变换。

根据定义，如果算符 Q 按恒等表示变换，即 Q 与群的全体算符对易，则它对 $\mathcal{G}$ 是**不变的**。更一般而言，如果算符 Q 按照 $\mathcal{G}$ 的不可约表示 $G^{(i)}$ 变换，则它是**群 $\mathcal{G}$ 的不可约张量算符的一个分量**。

不可约子空间 $\mathcal{S}(\tau j)$。　群 $\mathcal{G}$ 的表示。

空间 $\mathcal{S}$ 是不可约不变子空间 $\mathcal{S}(\tau j)$ 的直和。其中每一个都与 $\mathcal{G}$ 的某一个不可约表示 $G^{(j)}$ 相联系。指标 τ 用来区分同一个不可约表示所联系的那些子空间。用 d_j 代表 $G^{(j)}$ 的维数。

设 $|\tau j\mu\rangle$ 是构成 $\mathcal{S}(\tau j)$ 的基矢的 d_j 个矢量（μ 可变）。由于 $G^{(j)}$ 只在等价的范围内是确定的，因而这种基的选取是完全任意的。下述作法较为方便：始终将 $\mathcal{S}(\tau j)$ 的标准基选择为基矢，在其中，群的每一个运算由完全确定的矩阵 $G^{(j)}_{\lambda\mu}$ 表述：

$$G|\tau j\mu\rangle = \sum_{\lambda=1}^{d_j} |\tau j\lambda\rangle G^{(j)}_{\lambda\mu}。 \tag{D.10}$$

下面我们假定总是作了这样的标准选择。

全体矢量 $|\tau j\mu\rangle$（τ，j，μ 可变）的集合构成空间 $\mathcal{S}$ 的一种基矢系，以后称这表象 $\{\tau j\mu\}$ 为**群 $\mathcal{G}$ 的标准表示**。在这里，表象一词是通常量子力学意义上说的。刃矢和算符在群 $\mathcal{G}$ 运算下的变换性质使它们在这表示中的分量具有特别简单的性质。这些性质归结为下面两个定理。

在 $\{\tau j\mu\}$ 表示中刃矢和算符的分量

定理 A.　如果 $|u_1\rangle, \cdots, |u_\nu\rangle$ 有如么正表示 G^a 的基矢那样线性地从其中的一个变换为另一个，即

$$G|uv\rangle = \sum_{\rho} |u\rho\rangle G^{a}_{\rho v},$$

那末，它们的分量 $\langle \tau j\mu | u_v \rangle$ 有如下性质：

1° 如果 $G^{(j)}$ 不出现在 G^a 分解为不可约部分的式中，

$$G^a \simeq \sum_k n_k G(k), \tag{D.11}$$

则必然有 $\langle \tau j\mu | u_v \rangle = 0$.

2° 假如 $G^{(j)}$ 出现在 (D.11) 中，而且 $\langle av | \sigma k\chi \rangle$ 是实现这种分解的矩阵，则

$$\langle \tau j\mu | uv \rangle = \sum_{\sigma=1}^{n_j} u^{j}_{\tau\sigma} \langle av | \sigma j\mu \rangle^*, \tag{D.12}$$

此处，$u_{\tau\sigma}$ 是 n_j 个与 μ，ν 无关的常数.

定理 B. 如果算符 $Q_1, Q_2, \cdots, Q_\nu, \cdots$ 象么正表示 G 的基矢那样线性地从其中的一个变换为另一个，即

$$GQ_\nu G^{-1} = \sum_{\rho} Q_\rho G^{a}_{\rho\nu};$$

那末，矩阵元 $\langle \tau_1 j_1 \mu_1 | Q_\nu | \tau_2 j_2 \mu_2 \rangle$ 有如下性质：

1° 如果 $G^{(j)}$ 不出现在张量积 $G^a \otimes G^{(j_2)}$ 分解为不可约部分的式中，

$$G^a \otimes G^{(j_2)} \simeq \sum_k n^{aj_2}_{k} G^{(k)}, \tag{D.13}$$

则必须有

$$\langle \tau_1 j_1 \mu_1 | Q_\nu | \tau_2 j_2 \mu_2 \rangle = 0.$$

2° 如果 $G^{(j_1)}$ 出现在其中，而且 $\langle aj_2\nu\mu_2 | \sigma k\chi \rangle$ 是实现这种分解的矩阵，则

$$\langle \tau_1 j_1 \mu_1 | Q_\nu | \tau_2 j_2 \mu_2 \rangle = \sum_{\sigma=1}^{n^{aj_2}_{j_1}} \langle \tau_1 j_1 \| Q \| \tau_2 j_2 \rangle_\sigma \langle aj_2\nu\mu_2 | \sigma j_1 \mu_1 \rangle^*, \tag{D.14}$$

其中，$\langle \tau_1 j_1 \| Q_\nu \| \tau_2 j_2 \rangle$ 是 $n_{j_1}^{\alpha j_2}$ 个与 μ_1，μ_2，ν 无关的常数。

重要的结论：

出现在这些定理中的么正矩阵的矩阵元 $\langle \alpha\nu | \sigma k \chi \rangle$，$\langle \alpha j_2 \nu \mu_2 | \sigma k \chi \rangle$ 满足方程

$$\sum_{\nu\nu'} \langle \alpha\nu | \sigma k \chi \rangle^* G^{\alpha}_{\nu\nu'} \langle \alpha\nu' | \sigma' k' \chi' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'} G^{(k)}_{\chi\chi'}, \quad \text{(D.15}a\text{)}$$

$$\sum_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}} \langle \alpha j \nu \mu | \sigma k \chi \rangle^* G^{\alpha}_{\nu\nu'} G^{(j)}_{\mu\mu'} \langle \alpha j \nu' \mu' | \sigma' k' \chi' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'} G^{(k)}_{\chi\chi'}. \quad \text{(D.15}b\text{)}$$

它们完全由给定的表示 $\boldsymbol{G}^{\alpha}$，$\boldsymbol{G}^{\alpha} \otimes \boldsymbol{G}^{(j)}$ 确定。所以它们仅仅与矢量 $|u_\nu\rangle$ 或算符 Q_ν 在群 $\mathcal{G}$ 运算下的变换方式有关。

定理 A 的证明

对基矢 $|u_1\rangle$，$|u_2\rangle$，$\cdots$ 作么正变换 $\langle \alpha\nu | \sigma k \chi \rangle$，我们对这些基矢所张成的空间得到一组新的基矢：

$$|u \sigma k \chi\rangle = \sum_{\nu} |u\nu\rangle \langle \alpha\nu | \sigma k \chi \rangle. \quad \text{(D.16)}$$

么正关系给出

$$|u\nu\rangle = \sum_{\sigma k \chi} |u \sigma k \chi\rangle \langle \alpha\nu | \sigma k \chi \rangle^*. \quad \text{(D.17)}$$

从这么正变换的定义本身就可得出：dk 个矢量 $|u\sigma k\chi\rangle$ (σ，k 固定；χ 可变)张成某一子空间 $\mathcal{S}_u(\sigma k)$，而且在这子空间中，它们构成表示 $\boldsymbol{G}^{(k)}$ 的一个标准基。如用 $\{\tau j \mu\}$ 的基矢表述它们，则有

$$|u \sigma k \chi\rangle = \sum_{\tau j \mu} |\tau j \mu\rangle \langle \tau j \mu | u \sigma k \chi \rangle.$$

d_j 行 d_k 列矩阵 $\langle \tau j \mu | u \sigma k \chi \rangle$ (μ 和 χ 可变，其余固定)将 $\mathcal{S}_u(\sigma k)$ 同态映射到 $\mathcal{S}(\tau j)$。由于这些子空间的表示不是不等价就是等价，因而，由舒尔引理得到

$$\langle \tau j\mu | u\sigma k\chi \rangle = \delta_{jk}\delta_{\mu\chi}u^{j}_{\tau\sigma}, \qquad (D.18)$$

其中，$u^{j}_{\tau\sigma}$ 是与 μ 无关的常数．利用这结果，并将方程 (D.17) 两边投影到 $|\tau j\mu\rangle$ 上，就得出

$$\langle \tau j\mu | u\nu \rangle = \sum_{k\chi} \delta_{jk}\delta_{\mu\chi}\left(\sum_{\sigma} u^{j}_{\tau\sigma}\langle a\nu | \sigma k\chi\rangle^{*}\right).$$

此方程已包括了定理 A 的两部分内容．证毕．

定理 B 的证明

考虑矢量 $Q_{\nu}|\tau_2 j_2\mu_2\rangle$ (ν 和 μ_2 可变，τ_2 和 j_2 固定)．它们象 $\boldsymbol{G}^{a}\otimes\boldsymbol{G}^{(j_2)}$ 表示的基矢那样线性地从其中的一个变换为另一个．并不要求它们张成的空间与这表示相联系，因为它们不一定线性无关．然而，按推论 III，所考虑的表示如果不是 $\boldsymbol{G}^{a}\otimes\boldsymbol{G}^{b}$ 本身，则在任何情况下都是它的一个分量．不管这些矢量之间有无线性相关，我们能精确地用定理 A 中处理 $|u_1\rangle$，$\cdots$，$|u_{\nu}\rangle$ 的方式来处理这些矢量．

定义下面的矢量：

$$|q\tau_2 j_2\sigma k\chi\rangle = \sum_{\nu\mu_2} Q_{\nu}|\tau_2 j_2\mu_2\rangle\langle a j_2\nu\mu_2 | \sigma k\chi\rangle. \qquad (D.16')$$

从矩阵 $\langle a j_2\nu\mu_2|\sigma k\chi\rangle$ 的么正关系，得到

$$Q_{\nu}|\tau_2 j_2\mu_2\rangle = \sum_{\sigma k\chi} |q\tau_2 j_2\sigma k\chi\rangle\langle a j_2\nu\mu_2|\sigma k\chi\rangle^{*}. \qquad (D.17')$$

d_k 个矢量 $|q\tau_2 j_2\sigma k\chi\rangle$ (χ 可变，其余的固定)或者全等于 0，或者构成表示 $\boldsymbol{G}^{(k)}$ 的一种标准基．对后一情况，可以应用定理 A．因此，对所有的情况，都有

$$\langle \tau j\mu | q\tau_2 j_2\sigma k\chi\rangle = \delta_{jk}\delta_{\mu\chi}\langle \tau j\|Q\|\tau_2 j_2\rangle_{\sigma},$$

其中，$\langle \tau j\|Q\|\tau_2 j_2\rangle_{\sigma}$ 是与 μ 无关的常数．(D.17') 两边投影到 $|\tau_1 j_1\mu_1\rangle$ 上，得出

$$\langle \tau_1 j_1\mu_1 | Q_{\nu}|\tau_2 j_2\mu_2\rangle = \sum_{k\chi}\delta_{j_1 k}\delta_{\mu_1\chi}\left(\sum_{\sigma}\langle \tau_1 j_1\|Q\|\tau_2 j_2\rangle_{\sigma}\langle a j_2\nu\mu_2|\sigma k\chi\rangle^{*}\right),$$

由此得到定理 B．证毕．

选择定则

若 $|u\rangle$，Q，$|v\rangle$ 分别像 G^u，G^Q，G^v 那样变换，又若在 $G^Q\otimes G^u$ 的分解中不出现 G^v 的不可约分量，那末，要求

$$\langle v|Q|u\rangle = 0.$$

这一规则有广泛的应用．当 G^u 和 G^v 是不可约表示时，这规则可直接地从定理 B 的 1° 导出．但 G^u，G^Q，G^v 不是不可约时，它也成立．为了证明这一点，我们需注意到 $Q|u\rangle$ 按表示 $G^Q\otimes G^u$ 或它的一个分量而变换（推论 III），而且定理 A 可应用到矢量 $Q|u\rangle$ 上．

特殊情况：转动群

定理 A 和 B 显然可应用于转动群．

两个角动量相加问题是定理 A 的一个具体应用．§ 13.25 引入的 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 个矢量 $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ 像表示 $D^{(j_1)}\otimes D^{(j_2)}$ 的基矢那样变换，后者是转动群[1]的两个不可约表示 $D^{(j_1)}$ 和 $D^{(j_2)}$ 的张量积．依照第十三章第 V 节的讨论，这个表示分解成不可约部分由下式给定：

$$D^{(j_1)}\otimes D^{(j_2)} \simeq \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(J)}, \qquad \text{(D.19)}$$

而且么正矩阵元是 C-G 系数 $\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle$，它使这样的分解得以实现．由于每一个不可约表示在（D.19）中最多出现一次，即

$(n^{j_1 j_2}=1$ 对 $J=j_1+j_2, j_1+j_2-1, \cdots, |j_1-j_2|)$，

此时，(D.12) 式右边的求和中只包含一项．所以，在每个子空间 $\mathscr{E}(\tau J)$ 中，$|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ 的分量是已知的（与 M 无关的常

1）这里说转动群 $\mathscr{R}_3$，在语言用词上并不确切．事实上，它是 $\mathscr{U}_2$ 群，即 $\mathscr{R}_3$ 的“覆盖群”．

数未定).

类似地，定理 B 应用到对转动是不可约的张量算符的各个分量 $T_q^{(k)}$ 上，即应用于 $(2k+1)$ 个像 $\boldsymbol{D}^{(k)}$ 表示的基矢那样变换的算符上，就得出 维格纳-爱卡特定理 (§13.32).

矩阵元 $\langle \tau_1 j_1 m_1 | T_q^{(k)} | \tau_2 j_2 m_2 \rangle$ 由公式 (D.14) 给定. 由于 $\boldsymbol{D}^{(k)} \otimes \boldsymbol{D}^{(j_2)}$ 的各个分量 $\boldsymbol{D}^{(J)}$ 在这表示分解成不可约部分的过程中 ($n_{kj_2}^{J}=1$，对 $J=k+j_2, \cdots |k-j_2|$) 只出现一次，所以在此情况下，(D.14) 右边的求和中只包含一项.

注意. 第十三章采用的约化矩阵元 $\langle \tau_1 j_1 \| \boldsymbol{T}^{(k)} \| \tau_2 j_2 \rangle$ 的定义与这里采用的差一个因子 $\sqrt{2j_1+1}$.

不变可观测量　$\mathscr{G}$ 简并

如果 Q 是一个**对 $\mathscr{G}$ 不变的可观测量**:

$$[Q, G]=0 \qquad \text{对任意的 } g \in \mathscr{G}$$

则 d_j 个矢量 $Q|\tau j\mu\rangle$ (τ, j 固定; μ 可变) 象 $\boldsymbol{G}^{(j)}$ 表示的基矢那样变换. 此时，定理 B (或者定理 A，舒尔引理) 给出

$$\langle \tau j\mu | Q | \tau' j' \mu' \rangle = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'} Q_{\tau\tau'}^{(j)}. \tag{D.20}$$

因此，在群 $\mathscr{G}$ 的标准表示中，Q 用特别简单的矩阵来表述.

在这样的表示中，Q 的本征值问题约化为厄密矩阵 $Q^{(j)}$ 的对角化问题，其中 $Q^{(j)}$ 的矩阵元 $Q_{\tau\tau'}^{(j)}$ 只与指标 τ 和 τ' 有关. 于是，对每一个 j 值，我们相应的有若干个 Q 的本征值，即矩阵 $Q^{(j)}$ 的本征值 $q_1^{(j)}, q_2^{(j)}, \cdots q_l^{(j)}, \cdots$; **这矩阵的每一个非简并本征值是 Q 的 d_j 重简并本征值**; $Q^{(j)}$ 的每一个 p 重简并本征值是 Q 的 pd_j 重简并本征值.

我们应特别注意下面两个性质:

1° 若 Q 对 $\mathscr{G}$ 是不变的，则它的各个本征值的子空间对 $\mathscr{G}$ 是不变的.

2° 若 Q 是一个对 $\mathscr{G}$ 不变的可观测量，其中 $\mathscr{G}$ 定义在有限空间中，它的矢量按 $\boldsymbol{G}$ 表示而从其中的一个变换成另一

个;又若 G 分解成不可约部分的公式为

$$G \simeq \sum_k n_k G^{(k)},$$

那末，Q 的不同本征值的数目至多等于 $\sum_k n_k$。

不可约张量算符

如果算符 Q 按照 G^Q 而变换，则它总可以写成求和的形式，其中每一项按 G^Q 的一个不可约分量而变换。我们对不可约张量算符给予特别的注意.

根据定义，k 阶不可约张量算符 $T^{(k)}$ 的各个分量按不可约表示 $G^{(k)}$ 而线性地从其中的一个变换成另一个，所以，此算符确定了 $G^{(k)}$ 的一个 d_k 维表示空间. 特别是，存在 d_k 个**标准分量** $T_\chi^{(k)}$(k 固定，χ 可变)，它们构成这表示空间的一种标准基. 按定义[参看关系式 (D.10)]，

$$GT_\chi^{(k)}G^{-1} = \sum_\rho T_\rho^{(k)} G_{\rho\chi}^{(k)}. \tag{D.21}$$

令

$$G^{(g)} \otimes G^{(h)} \simeq \sum_l n_l^{gh} G^{(l)} \tag{D.22}$$

是不可约表示 $G^{(g)}$ 和 $G^{(h)}$ 的张量积分解成不可约部分的公式，又令 $\langle gh\gamma\eta | \sigma l\lambda\rangle$($\sigma = 1, \cdots, n_l^{gh}$) 是作用在这分解式的么正矩阵元. 依照定理 B，分量 $T_\chi^{(k)}$ 的标准表示显然有下面的性质:

$$\langle \tau_1 j_1 \mu_1 | T_\chi^{(k)} | \tau_2 j_2 \mu_2 \rangle = \begin{cases} 0 & \text{若 } n_{j_1}^{kj_2} = 0 \\ \sum_{\sigma=1}^{n_{j_1}^{kj_2}} \langle \tau_1 j_1 \| T_\chi^{(k)} \| \tau_2 j_2 \rangle_\sigma \langle k j_2 \chi \mu_2 | \sigma j_1 \mu_1 \rangle^* & \text{若 } n_{j_1}^{kj_2} \neq 0. \end{cases} \tag{D.23}$$

结论

从上面的考虑得出：在群 $\mathscr{G}$ 的运算中，量子力学的算符和刃矢的变换性质完全可以被利用，只要我们知道下面两点：

(i) 写出这个群的所有不可约表示（等价的除外），而且针对这表示的基矢的标准选择，构造出这些不可约表示的矩阵；

(ii) 将这些表示的张量积分解成不可约部分，并决定作用在这些乘积的各个分解式上的矩阵（即决定方程 (D.22) 的系数 n_i^{gh} 和"C-G 系数"$\langle gh\gamma\eta|\sigma l\lambda\rangle$）.

III. 有 限 群

符号

$\mathscr{F}$，被研究的有限群.

f，群的元素.

I，单位元素.

f^a，类 $\mathscr{C}_a$ 的元素.

$k_a \equiv \sum_{i=1}^{l_a} f_i^a$，$\mathscr{C}_a$ 的元素总和.

χ_F，F 的特征标集合.

$K_a \equiv \sum_{i=1}^{l_a} F_i^a$.

N，群的阶.

L，类的数目（$L \leqslant N$）.

$\mathscr{C}$，群的类.

l_a，类 $\mathscr{C}_a$ 的元素数目.

$\mathbf{F}$，$\mathscr{F}$ 的表示.

F，在 $\mathbf{F}$ 中表述 f 的矩阵.

$\mathbf{F}^r$，正则表示.

$\chi^{(a)} \equiv \mathrm{Tr} F^a = \frac{1}{l_a} F_r K_a$.

$\mathbf{F}^{(j)}$，第 j 个不可约表示（在等价范围内）

d_j，$\mathbf{F}^{(j)}$ 的维数，$d_j \equiv \chi^{(j)}(I)$.

$F^{(j)}$，在 $\mathbf{F}^{(j)}$ 中表述 f 的幺正矩阵. 而这表示的基矢始终采用标准选择.

$F^{(j)}_{\alpha\beta} \equiv (f|j\alpha\beta)$，矩阵 $F^{(j)}$ 的第 α 行第 β 列的矩阵元。

$\chi^{j}(a) \equiv (a|j)$，在 $\mathbf{F}^{(j)}$ 表示中类 $\mathscr{C}_a$ 的特征标。

10. 概述

重排引理

如果 $f_1, f_2, \cdots, f_N$ 是按一定顺序书写的群元素，那么，群的每一个元素在序列 $f_1 f, f_2 f, \cdots, f_N f$ 中出现且只出现一次，这个序列是用群的某一个元素 f 乘它的所有元素所得到的，这只是群元素写成不同的顺序。

（这一节叙述的全部性质都可从这引理得出）

$\mathscr{F}$ 的子群

如果 $\mathscr{H}$ 是 $\mathscr{F}$ 的 N_h 阶子群，则 N 是 N_h 的某一倍数；

$$N = hN_h \qquad (h \text{ 是大于零的整数}),$$

我们称整数 h 为子群的**指数**.

如果 $\mathscr{H}$ 是不变子群，则它的指数 h 是商群 $\mathscr{G}/\mathscr{H}$ 的阶。

$\mathscr{F}$ 的类

N 是群的任一类中元素数目 l_a 的某一倍数；

$$N = p_a l_a \qquad (p_a \text{ 是大于零的整数}),$$

（群 $\mathscr{F}$ 中与类 $\mathscr{C}_a$ 的给定元素 f^a 对易的元素构成一个子群，它的指数为 l_a。）

群代数　类和

群元素的线性组合 $\sum_{j=1}^{N} x^j f_j$（其中，$x^1, x^2, \cdots, x^r$ 是任意的复数）形成一种超复数代数：群代数。由各类中的元素的求和得到

$$k_a \equiv \sum_{i=1}^{l_a} f_i^a \qquad (a = 1, 2, \cdots, L). \qquad (D.24)$$

我们称这 L 个超复数为类和.

此 L 个算符与群代数的全体元素对易，具有这种性质的任意其它超复数都是此 L 个算符的一个线性组合.

类代数

群代数是不对易的,除非这群是阿贝尔群. 然而，L 个算符 k_a 的线性组合形成一种可对易代数，称为类代数，或群代数的中心(如果是阿贝尔群，类代数与群代数恒同). 我们得到

$$k_a k_b = k_b k_a = \sum_{c=1}^{L} g_{ab}^{c} k_c. \qquad \text{(D.25)}$$

系数 g_{ab}^{c} 为大于或等于 0 的整数.

L 个类和虽然线性无关,但通过关系式 (D.25)，彼此联系起来,因而全都可以表述成它们中有限个的函数.

每个类和满足一个次数小于或等于 L 的代数方程.

11. 表示

正则表示 $\mathbf{F}^r$

这是一个 N 维表示，取群的 N 个元素本身作为基矢就得到它. 所以,这表示空间中的矢量是群代数的元素.

在 $\mathbf{F}^r$ 中,表述 f 的 $N \times N$ 矩阵的元素，除一个以外全为 0 ;非 0 元素等于 1 .

群表示的主要性质几乎都可以从重排引理，舒尔引理和正则表示的研究中得出.

表示的一般性质

有限群的任一表示与它的一个么正表示等价.

如果两个表示有相同的**特征标集**，则它们互相等价[1](逆

1) 这是不可约表示特征标的正交性以及按不可约部分分解具有唯一性的推论(见下面). 对无限群,若两个表示完全可约,则这性质仍成立.

命题显然成立).

如果 $F_1, F_2, \cdots, F_N$ 是线性算符的一个集合，并构成一个有限群 $\mathscr{G}$；又若 $|u\rangle$ 是刃矢空间中的一个矢量，则表示 $\mathbf{F}^u$（在群运算中，$|u\rangle$ 按此表示变换）是**正则表示 $\mathbf{F}^r$ 的一个分量**（若 $\mathbf{F}^u$ 是 N 维的，则 $\mathbf{F}^u \simeq \mathbf{F}^r$）.

在一个给定的表示 $\mathbf{F}$ 中，k_1，k_2，$\cdots$ k_L 由矩阵 K_1，K_2，$\cdots$，K_L 表述，它们可**同时对角化**，而且与任一个表述群元素的矩阵对易：

$$[K_a, F] = 0. \tag{D.26}$$

不可约表示

a）**数目**. 不等价不可约表示的数目等于类的数目（L）；

b）**维数**. 若 d_i 是第 i 个不可约表示 $\mathbf{F}^{(i)}$（$i = 1, 2, \cdots \cdots, L$）的维数，则

$$N/d_i = \text{整数} \tag{D.27}$$

$$\sum_{i=1}^{L} (d_i)^2 = N. \tag{D.28}$$

c）**正交关系**. 如果么正的不可约表示 $\mathbf{F}^{(j)}$ 和 $\mathbf{F}^{(k)}$ 或者不等价，或者相等[1]，则

$$\boxed{\frac{d_i}{N} \sum_{j=1}^{N} (f|j\alpha\beta)(f|k\gamma\delta)^* = \delta_{ik}\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}} \tag{D.29}$$

从（D.29）得到特征标的正交关系：

$$\boxed{\sum_{a=1}^{L} \frac{l_a}{N} (a|j)(a|k)^* = \delta_{jk}} \tag{D.30}$$

1）证明：若 S 是 $d_i \times d_i$ 矩阵，则对所有的 f，矩阵 $T \equiv \sum_{f=1}^{N} F^{(j)} S F^{(k)-1}$ 都满足关系式 $F^{(j)}T = TF^{(k)}$（重排引理）. 因此（舒尔引理），T 或者恒等于 0，或者是单位元的倍数，依 $\mathbf{F}^{(j)}$ 和 $\mathbf{F}^{(k)}$ 是不等价还是相等而定. 用适当的方式固定 S，就得到关系式（D.29）.

每个表示完全由其基矢的标准选择来确定，N^2 个量

$$\sqrt{\frac{d_j}{N}}\,F^{(j)}_{\alpha\beta}=\sqrt{\frac{d_i}{N}}\,(f|j\alpha\beta)$$

$(f=1,2,\cdots,N;\ j=1,2,\cdots,L;\ \alpha,\beta=1,2,\cdots,d_i)$ 是一个 $N\times N$ 幺正矩阵元. 类似地，L^2 个量 $\sqrt{l_a/N}\,\chi^{(j)}(a)\equiv\sqrt{l_a/N}\,(a|j)$ 是一个 $L\times L$ 幺正矩阵的元. 从两个幺正性关系式(D.29)和(D.30)分别地导出下列两式:

$$\sum_{j=1}^{L}\sum_{\alpha,\beta=1}^{d_j}\frac{d_i}{N}\,(f|j\alpha\beta)(g|j\alpha\beta)^*=\delta_{fg}\qquad\text{(D.31)}$$

$$\frac{l_a}{N}\sum_{i=1}^{L}(a|j)(b|j)^*=\delta_{ab}.\qquad\text{(D.32)}$$

d)**特殊情况** 若 $\mathbf{F}^{(k)}$ 是恒等表示 $(k=1)$，则(D.29)和(D.30)给出

$$\sum_{j=1}^{N}(f|j\alpha\beta)=N\delta_{f1}\qquad\sum_{a=1}^{L}l_a(a|j)=N\delta_{j1}.\qquad\text{(D.33a)}$$

若 g 是单位元 $(g=I)$，则(D.31)和(D.32)给出:

$$\sum_{j\alpha\beta}d_j(f|j\alpha\beta)=N\delta_{f1}\qquad\sum_{j}d_j(a|j)=N\delta_{a1}.\qquad\text{(D.33b)}$$

e)**类和与特征标的关系**. 表述 k_a 的矩阵 $K^{(j)}_a$ 是单位矩阵的倍数(舒尔引理):

$$K^{(j)}_a=k^{(j)}_a 1^{(j)}.\qquad\text{(D.34)}$$

$$k^{(j)}_a=\frac{1}{d_j}\,\mathrm{Tr}\,K^{(j)}_a=\frac{l_a}{d_j}\,(a|j).\qquad\text{(D.35)}$$

从(D.25)和(D.35)得到

$$l_a l_b(a|j)(b|j)=d_j\sum_{c=1}^{L}g^c_{ab}l_c(c|j),\qquad\text{(D.36)}$$

由此并考虑到正交关系(D.32)，得到

$$g_{ab}^{c}=\frac{l_a l_b}{N}\sum_{j=1}^{L}\frac{1}{d_j}(a|j)(b|j)(c|j)^{*}. \tag{D.37}$$

12. 表示的不可约分量

一般方法

为了得出表示 $\mathbf{F}$ 分解成不可约分量时的系数 n_j：

$$\mathbf{F}\simeq\sum_{j=1}^{L}n_j\mathbf{F}^{(j)} \tag{D.38}$$

我们只需知道它的特征标集 $\chi(a)$ 以及这个群的 L 个不可约表示的特征标集．根据方程(D.9)和关系式(D.30)，有

$$n_j=\frac{1}{N}\sum_{a=1}^{L}l_a(a|j)^{*}\chi(a). \tag{D.39}$$

注意，可得到

$$p=\frac{1}{N}\sum_{a=1}^{L}l_a|\chi(a)|^2=\sum_{j=1}^{L}n_j^2.$$

因此，$p=1$ 是 $\mathbf{F}$ 的不可约性的判据．

正则表示 ($\chi^r(a)=N\delta_{a1}$)

$$\mathbf{F}^{r}\simeq\sum_{j=1}^{L}d_j\mathbf{F}^{(j)}. \tag{D.40}$$

正则表示包含群的每一个不可约表示的次数等于该表示的维数[由关系式(D.28)导出]．

不可约表示的张量积

$$\mathbf{F}^{(g)}\otimes\mathbf{F}^{(h)}\simeq\sum_{j=1}^{L}n_j^{gh}\mathbf{F}^{(j)}. \tag{D.41}$$

对此情况，方程(D.9)给出

$$(a|g)(a|h)=\sum_{j=1}^{L} n_j^{gh}(a|j), \qquad (D.42)$$

(D.39) 给出

$$n_j^{gh}=\frac{1}{N}\sum_{a=1}^{L} l_a(a|g)(a|h)(a|j)^*. \qquad (D.43)$$

这两个关系式可以和 (D.36), (D.37) 相比较.

引理:

$\mathbf{F}^{(g)}\otimes\mathbf{F}^{(h)}$ 包含 $\mathbf{F}^{(j)}$ 的次数与 $\mathbf{F}^{(j)}\otimes\mathbf{F}^{(h)*}$ 包含 $\mathbf{F}^{(g)}$ 的次数相同.

(注意, 若不可约表示皆为自共轭的, 则 n_j^{gh} 对它的三个指标是对称的)

一维分量

两个不可约表示的张量积 $\mathbf{F}^{(g)}\otimes\mathbf{F}^{(h)}$ 最多包含一个一维分量. 这个张量积包含一维表示 $\mathbf{F}_1$ 的充分和必要条件是

$$\mathbf{F}^{(g)}\simeq\mathbf{F}_1\otimes\mathbf{F}^{(h)*}. \qquad (D.44)$$

特别是, 这个张量积的表示空间 $\mathscr{E}_g\otimes\mathscr{E}_h$ **最多**包含一个对群变换是不变的矢量. 当且仅当

$$\mathbf{F}^{(g)}\simeq\mathbf{F}^{(h)*}. \qquad (D.45)$$

时, 这个矢量是存在的.

13. 不可约不变子空间的构成

下面假定: 对每个不可约表示 $\mathbf{F}^{(j)}$ 已经作了基矢的标准选择. 我们称某个矢量是 $(j\mu)$ 型的, 如果它象 $\mathbf{F}^{(j)}$ 的标准基的第 μ 个矢量那样变换. 所以, 么正矩阵 $F^{(j)}$ 是完全确定的. 现在, 我们要在 § 12 开头引入的 $\mathbf{F}$ 表示空间 $\mathscr{E}$ 中构造出适合于群 $\mathscr{G}$ 的标准基的矢量. 我们只限于讨论 $\mathscr{E}$ 可通过群算符 $F_1, F_2, \cdots, F_N$ 作用在刃空间 ($n_i \leqslant d_i$) 的某一矢量上而得出的情况. 群论在量子力学的应用中, 我们总可以把问

题约化为这种特殊情况。

正则表示的基算符 $B^{(j)}_{\mu\nu}$

引入N个算符

$$B^{(j)}_{\mu\nu}=\frac{d_j}{N}\sum_{j=1}^{N}(f|j\mu\nu)^*F \tag{D.46}$$

$$(j=1,2,\cdots,L;\ \mu,\nu=1,2,\cdots,d_j).$$

由正交关系(D.31)得出： 群的N个算符是这些算符的线性组合，

$$F=\sum_{j=1}^{L}\sum_{\mu,\nu=1}^{d_j}(f|j\mu\nu)B^{(j)}_{\mu\nu}. \tag{D.47}$$

由F的么正性、重排引理和关系式(D.29)，我们得到下列基本性质：

$$B^{(j)\dagger}_{\mu\nu}=B^{(j)}_{\nu\mu} \tag{D.48}$$

$$FB^{(j)}_{\mu\nu}=\sum_{x}B^{(j)}_{x\nu}(f|j_x\mu) \tag{D.49}$$

$$B^{(j)}_{\mu\nu}B^{(k)}_{\rho\sigma}=\delta_{jk}\delta_{\nu\rho}B^{(j)}_{u\sigma}. \tag{D.50}$$

依照(D.49)，群代数的N个元素(用 $B^{(j)}_{\mu\nu}$ 表述)构成正则表示的一种标准基。

利用 $B^{(j)}_{\mu\nu}$ 构成一种标准基

如果已经知道怎样构成算符 $B^{(j)}_{\mu\nu}$，换言之，如果已经知道N个矩阵元$(f|j\mu\nu)$，则构造 $\mathscr{E}$ 空间的标准基的问题实际上已解决。

的确，

a) 若矩阵元不为0，则 $B^{(j)}_{\mu\nu}|\rangle$ 是 $(j\mu)$ 型矢量 [方程(D.49)]。

b)N个矢量 $B^{(j)}_{\mu\nu}|\rangle$张成整个 $\mathscr{E}$ 空间 [方程(D.47)]。

c) 对应同一个 j 值的 d_j^2 个矢量 $B^{(j)}_{\mu\nu}|\rangle$ 具有如下的性

质：

(i) 对应同一 ν 值的 d_j 个矢量 ($\mu = 1, 2, \cdots d_j$) 具有相同的模方，而且构成 $\mathbf{F}^{(j)}$ 表示的一种标准基(归一化除外)；

(ii) 对应同一 μ 值的 d_j 个矢量 ($\nu = 1, 2, \cdots d_j$) 张成 $(j\mu)$ 型矢量的 n_j 维空间 $\mathscr{E}_{j\mu}$. 通过 $(n_j - d_j)$ 个线性关系式，它们彼此相联系，线性式的系数与 μ 无关(特别是，若 $n_j = 1$，这 d_j 个矢量互相差一相乘因子，而且这些因子与 μ 无关).

因此，为了构成一种适合于这群的标准基，我们只需对每一个 j 值，选定 μ 的一个确定值 ($\bar{\mu}$)，而且在 $\mathscr{E}_{j\bar{\mu}}$ 空间中构造出 n_j 个基矢的集合(例如，采用施密特正交化方法)：

$$|\tau j\bar{\mu}\rangle = \sum_{\nu=1}^{d_j} c_\nu^{\tau j} B_{\bar{\mu}\nu}^{(j)} |\rangle \qquad (\tau = 1, 2, \cdots, n_j)$$

$$\langle \tau j\bar{\mu} | \tau' j\bar{\mu}\rangle = \delta_{\tau\tau'}.$$

于是，矢量

$$|\tau j\mu\rangle = \sum_{\nu=1}^{d_j} c_\nu^{\tau j} B_{\mu\nu}^{(j)} |\rangle$$

($j = 1, 2, \cdots, L$; $\mu = 1, 2, \cdots, d_j$; $\tau = 1, 2, \cdots, n_j$) 构成我们所要找的标准基，即 d_j 个矢量 $|\tau j\mu\rangle$ (τ 和 j 固定; $\mu = 1, \cdots, d_j$) 构成 $\mathbf{F}^{(j)}$ 表示的一种标准基.

$B_{\mu\nu}^{(j)}$ 的其它性质　到 $\mathscr{E}_{j\mu}$ 空间的投影子以及从一个空间到另一个空间的转移

令

$$\Pi_\mu^{(j)} \equiv B_{\mu\mu}^{(j)} \equiv \frac{d_j}{N} \sum_{f=1}^{N} (f|j\mu\mu)^* F. \qquad (D.51)$$

算符 $\Pi_\mu^{(j)}$ ($j = 1, 2, \cdots, L$; $\mu = 1, 2, \cdots, d_j$) 构成一个正交投影子集合，它的和为 1 [1]：

1) 不论什么样的 $\mathbf{F}$，甚至这表示不是 $\mathbf{F}^r$ 的分量，此式都是正确的.

$$\Pi_{\mu}^{(j)\dagger} = \Pi_{\mu}^{(j)} \tag{D.52}$$

$$\Pi_{\mu}^{(j)}\Pi_{\rho}^{(k)} = \delta_{jk}\delta_{\mu\rho}\Pi_{\mu}^{(j)} \tag{D.53}$$

$$\sum_{j=1}^{L}\sum_{\mu=1}^{d_j}\Pi_{\mu}^{(j)} = 1. \tag{D.54}$$

$\Pi_{\mu}^{(j)}$ 是到 $(j\mu)$ 型矢量空间 $\mathscr{E}_{j\mu}$ 的投影子[见方程(D.49)]。**单位元素的分解式**(D.54)允许我们将 $\mathscr{E}$ 的任一矢量表述成属于特定的 $\mathscr{E}_{j\mu}$ 空间的各个矢量之和:

$$|u\rangle = \sum_{j\mu}\Pi_{\mu}^{(j)}|u\rangle.$$

若 $\mu \neq \nu$，则算符 $B_{\mu\nu}^{(j)}$ 是从子空间 $\mathscr{E}_{j\nu}$ 到子空间 $\mathscr{E}_{j\mu}$ 的转移算符。取此名称的理由是显然的。由(D.50)和(D.48)，有

$$\Pi_{\gamma}^{(g)}B_{\mu\nu}^{(j)}\Pi_{\eta}^{(h)} = \delta_{gj}\delta_{jh}\delta_{\gamma\mu}\delta_{\nu\eta}B_{\mu\nu}^{(j)} \tag{D.55}$$

$$B_{\mu\nu}^{(j)\dagger}B_{\mu\nu}^{(j)} = \Pi_{\nu}^{(j)}. \tag{D.56}$$

因此，$B_{\mu\nu}^{(j)}$ 作用在任一个与 $\mathscr{E}_{j\nu}$ 正交的矢量上的结果为 0；作用在 $\mathscr{E}_{j\nu}$ 的任一个矢量上则变成 $\mathscr{E}_{j\mu}$ 的某一个矢量。所以，这两个空间之间建立了一一对应的关系，而且标量积保持不变。

如果 $|\sigma j\nu\rangle$ 是一个 $(j\nu)$ 型的矢量，则 d_j 个矢量

$$B_{\mu\nu}^{(j)}|\sigma j\nu\rangle \qquad (\mu = 1, 2, \cdots, d_j)$$

构成 $\mathbf{F}^{(j)}$ 表示的一种标准基。

类和 K_a 的应用　投影子 $P^{(j)}$

如果我们仅仅想找到不可约不变子空间 $\mathscr{E}$，则无需知道 N^2 个标准矩阵元 $F_{\mu\nu}^{(j)} = (f|j\mu\nu)$。

类和

$$K_a = \sum_{i=1}^{l_a}F_i^a \qquad (a = 1, 2, \cdots, L)$$

至少有一个共同的基矢量集，这个集的每一个矢量对应这些

算符的本征值的某一序列 $k = (k_1, k_2, \cdots, k_L)$. 总共有 L 个系列的可能本征值 $k^{(1)}, k^{(2)}, \cdots k^{(L)}$. 它们由方程(D.35)确定,而且每一个都对应群的一个确定的不可约表示. 所以,如果我们同时对角化 $K_1, K_2, \cdots, K_L$, 则每一系列的本征值 $k^{(j)}$ 有 $n_j d_j$ 重简并, 而且相应的子空间 $\mathscr{E}_j$ 确定了 $\mathbf{F}$ 的 $n_j\mathbf{F}^{(j)}$ 分量. 如果 n_j 全都等于 1, 则自动地实现了 $\mathscr{E}$ 分解为若干个不可约不变子空间;否则,对每一个子空间 $\mathscr{E}_j (n_j > 1)$, 仍需再作这种分解.

我们记得, L 个算符 K 都是它们中的有限个的函数,所以,我们只需将这些算符进行对角化,就实现了全体的对角化.

实际上, K 算符对角化的问题已被解决,如果我们知道了群的所有不可约表示的特征标集(物理上利用的大多群的特征标已有表可查,参看 § D.1 的注中所列文献). 事实上, 到空间 $\mathscr{E}_j$ 的投影子 $P^{(j)}$ 为

$$P^{(j)} = \sum_{\mu=1}^{d_j} \Pi_\mu^{(j)} = \frac{d_j}{N} \sum_{j=1}^{N} \chi^{(j)*}(f) F$$

$$= \frac{d_j}{N} \sum_{a=1}^{L} (a|j)^* K_a. \qquad \text{(D.57)}$$

IV. 置换[1] ($\mathscr{S}_n$ 群)

14. 概述 循环 类

定义

设有 n 个客体分布在 n 个"盒子"中(例如, n 个粒子分布

1) 参看 D. E. Rutherford, *Substitutional Analysis* (University Press, Edinburg, 1948), 此书对杨盘理论及其对置换群的应用作了简要而全面的讨论. $\mathscr{S}_n$ 群的基础理论已由 B. L. Van de Waerden 给出,参看 B. L. Van de Waerden, *Modern Algebra* (Ungar, Ed., New York, 1950) *Vol.* II, *p.* 190—193.

在 n 个量子态中)。 n 个客体的一种置换是它们在 n 个“盒子”中分布的一种变更。用 1 到 n 的整数来标记这些客体，而且用符号

$$p=\begin{pmatrix}\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n\\ \beta_1\beta_2\cdots\beta_n\end{pmatrix},$$

标记某一具体置换。其中，α_1，α_2，$\cdots$，α_n 是按任意顺序书写的 n 个整数；β_1，β_2，$\cdots$，β_n 是同样的 n 个整数，但书写顺序有改变： 在新分布中，客体 β_i 占据了旧分布中 α_i 占据的位置。例如在 5 个客体的置换中，

$$p_a=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5\\5&3&2&1&4\end{pmatrix}$$

表示客体 5 占据 1 的位置，客体 3 占据 2 的位置，如此等等。这符号的含意显然不因列的变动而改变。

两个置换 p_a，p_b 的相继作用等价于单个置换 $p_c=p_bp_a$ 的作用。如果符号 p_b 中的上一行完全与符号 p_a 的下一行相同，则很容易写出 p_c。例如，若 p_a 是上面规定的置换，而

$$p_b=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5\\4&3&5&1&2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}5&3&2&1&4\\2&5&3&4&1\end{pmatrix},$$

则

$$p_c=p_bp_a=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5\\2&5&3&4&1\end{pmatrix}.$$

特别是，p 的逆算符就是对调 p 的上下行而得到的置换：

$$p^{-1}=\begin{pmatrix}\beta_1&\beta_2\cdots\beta_n\\ \alpha_1&\alpha_2\cdots\alpha_n\end{pmatrix}.$$

n 个事物的置换构成一个群，阶为 $n!$。

循环置换　循环符号

在置换

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 \cdots \alpha_{k-1} & \alpha_k & \alpha_{k+1} \cdots \alpha_n \\ \alpha_2 & \alpha_3 \cdots \alpha_k & \alpha_1 & \alpha_{k+1} \cdots \alpha_n \end{pmatrix}$$

中，α_2 取代 α_1；α_3 取代 α_2；$\cdots$；α_k 取代 α_{k-1}；α_1 取代 α_k；其余 $(n-k)$ 个事物 $\alpha_{k+1}, \cdots, \alpha_n$ 保持原有的位置。按定义，这样的置换是 k 个客体 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_k$ 的**循环置换或循环，循环长度**为 k。这种类型的置换可用符号

$$p = (\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_k). \qquad \text{(D.58)}$$

表述。按约定，其中最前面的一个客体 α_1 取代最后面的 α_k，中间的每一个事物取代它左邻的。采用这样的符号，k 个元素的顺序只能确定到循环置换许可的程度。

没有共同元素的两个循环相互对易。

n 个客体的任一个置换是若干个可对易的循环（这些循环没有共同的元素）**之积，而且这种分解是唯一的**.

于是，上面规定的置换 p_a 是 (154) 和 (23) 之积，如用循环符号表述，就写成

$$p_a = (154)(23) = (23)(154).$$

类似地，

$$p_b = (14)(235) \quad p_c = (125)(3)(4).$$

长度为 1 的循环等价于恒等变换，而且可省略不写。我们就写成：$p_c = (125)$。如果不作这种省略，则一个置换的循环长度之和等于 n。

一个置换完全由下面两点决定：

(i) **它的循环结构**，即它的循环数目 $h(\leqslant n)$ 和它们各自的长度 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_h (\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_h = n)$；

(ii) 出现在各个循环中的数和它们在循环置换中的顺序。

若我们颠倒各循环中数的顺序，就得到逆置换。因此，

$$p_a^{-1} = (451)(32).$$

类

两个具有同样循环结构的置换属于同一类，反之亦然.

置换 x 作用在 p 的循环符号中 n 个数的序列上，就得出与 p 共轭的元素 $p'=xpx^{-1}$ 的循环符号. 例如:

$$p_a=\begin{pmatrix}1&5&4&2&3\\5&4&1&3&2\end{pmatrix}=(154)(23)$$

$$x=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5\\2&4&1&3&5\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}5&4&1&3&2\\5&3&2&1&4\end{pmatrix}$$

$$x^{-1}=\begin{pmatrix}2&5&3&4&1\\1&5&4&2&3\end{pmatrix}$$

$$p'=xp_ax^{-1}=\begin{pmatrix}2&5&3&4&1\\5&3&2&1&4\end{pmatrix}=(253)(41).$$

对换

对换是两个客体之间的一种置换（循环长度为 2），对换构成 $\mathscr{S}_n$ 的一个类.

任一个给定长度 k 的循环等于 $(k-1)$ 个对换的乘积:

$$(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_k)=(\alpha_1\alpha_2)(\alpha_2\alpha_3)\cdots(\alpha_{k-1}\alpha_k).$$

更一般而言，任一个置换 p 可以写成若干个对换的乘积. 这样的分解不是唯一的，但所包含的对换数目有确定的奇偶性，即或者是偶的，或者是奇的，以后用 $(-)^p$ 表示. 按定义，一个置换是偶的，或是奇的，依 $(-)^p=+1$ 或 -1 而定.

$\mathscr{S}_n$ 的子群 $\mathscr{A}_n$ 群

$\mathscr{S}_n$ 有且只有一个**不变子群**，即偶置换群 $\mathscr{A}_n$，它的指数等于 2；它的陪集是全体奇置换，而且商群 $\mathscr{S}_n/\mathscr{A}_n$ 是阿贝尔群.

$\mathscr{S}_n$ 的其它子群尚有 m 个客体（$m<n$）的置换群 $\mathscr{S}_m$，$\mathscr{A}_m(m<n)$，等等. $\mathscr{S}_m$ 的指数为 $(n!/m!)$；$\mathscr{A}_m$ 的指数

为 $2(n!/m!)$.

$\mathscr{S}_n$ 的对称化子和反对称化子

$\mathscr{S}_n$的元素的两个线性组合，即对称化算子 S 和反对称化算子 a 有特殊的作用:

$$s = \frac{1}{n!}\sum_p p \qquad a = \frac{1}{n!}\sum_p (-)^p p, \tag{D.59}$$

上式求和遍及群 $\mathscr{S}_n$ 的所有 $n!$ 个元素. S 和 a 是类和的特定线性组合. 它们与 $\mathscr{S}_n$ 的所有元素对易，而且还有如下的特殊性质:

$$qs = sq = s \quad qa = aq = (-)^q a \quad (q \in \mathscr{S}_n) \tag{D60}$$

$$s^2 = s \quad a^2 = a. \tag{D.61}$$

15. 划分

定义

整数 n 的一个划分 $\lambda = [\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_h]$ 是一个正整数序列，它们按 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_h$ 的顺序排列，其和等于 n:

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_h = n.$$

因为一个置换的循环结构由 n 的一个确定的划分所决定. 所以 n **的每一个划分决定了** $\mathscr{S}_n$ **的一个类.**

不等式

令 $\lambda = [\lambda_1\cdots\lambda_h]$, $\mu = [\mu_1\cdots\mu_k]$ 是 n 的两个划分. 按定义，

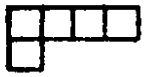
若 $h = k$, 而且 $\lambda_1 = \mu_1$, $\lambda_2 = \mu_2$, $\cdots$, $\lambda_k = \mu_k$, 则 $\lambda = \mu$;

若序列 $\lambda_1 - \mu_1$, $\lambda_2 - \mu_2$, $\cdots$ 的第一个非零项是正的，则 $\lambda > \mu$;

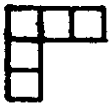
若序列 $\lambda_1 - \mu_1$, $\lambda_2 - \mu_2$, $\cdots$ 的第一个非零项是负的，则 $\lambda < \mu$.

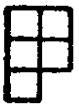
例：对 $n=5$，$[5]>[41]>[32]>[31^2]$，等等．（按约定，$[31^2]$ 是[311]的缩写符号）


[5]


[4 1]


[3 2]


[3 1^2]


[2^2 1]


[2 1^3]


[1^5]

图 D.1　整数 5 的划分和它们的杨图

杨图 Y_λ

一个给定的划分 $[\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_h]$ 可以用一个图(称为杨图)来表述，它是 n 个方块一个靠一个地排列于 h 行上，第一行有 λ_1 个方块，第二行有 λ_2 个方块，…，第 h 行有 λ_h 个方块 （参看图D.1）．**杨盘** Θ_λ^p

利用 1 至 n 的 n 个整数，我们可以用 $n!$ 方式来安排 Y_λ 图的 n 个方块．一种方式得到一个**杨盘**．

用 Θ_λ 代表一个“盘”(称为**正规盘**)，在其中，整数 1，2，… 按它们的正规次序排列： 序列 1，2，… λ_1 在第一行中；λ_1+1，λ_1+2，$\cdots\lambda_1+\lambda_2$，在第二行中；如此等等．置换 p 作用于 Θ_λ 的 n 个数上，就得到新的盘 $\Theta_\lambda^p\equiv p\Theta_\lambda$．注意，$q\Theta_\lambda^p\equiv\Theta^{qp}$，而且对每一个杨图，有 $n!$ 个不同的杨盘(参看图 D.2)．

连带划分

两个划分是彼此连带的，如果其中之一对应的杨图能通过另一个的列和行的对换来得到的话（对主对角线作反射）．在下面，我们用符号“～”代表这种类型的对应．于是，$\tilde\lambda\equiv[\tilde\lambda_1,\cdots,\tilde\lambda_k]$ 是 $\lambda\equiv[\lambda_1,\cdots,\lambda_k]$ 的连带划分．注意 $k=\lambda_1$，$h=\tilde\lambda_1$，而且 $\tilde\lambda_s$ 是等于或大于 S 的划分 λ 中的元素数目，反之亦然．

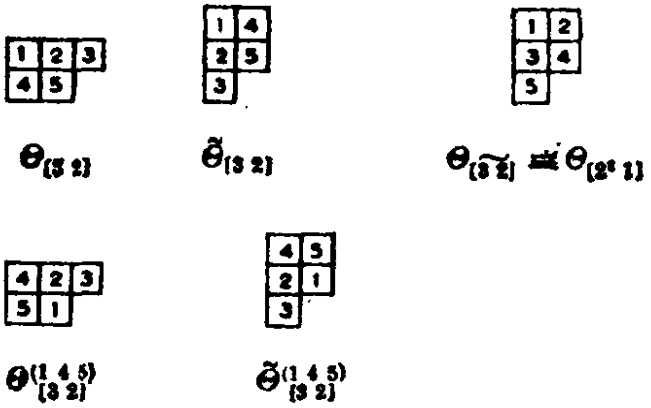


图 D.2　整数 5 的划分 $\lambda \equiv [32]$ 和 $\tilde{\lambda} \equiv [2^2 1]$ 所对应的几个杨盘.

类似地我们定义 Y_λ 的连带杨图 $\tilde{Y}_\lambda \equiv Y_{\tilde{\lambda}}$ 以及 Θ^p_λ 的连带盘 $\tilde{\Theta}^p_\lambda$. 注意(参看图 D.2),

$$\tilde{\Theta}^p_\lambda = p\tilde{\Theta}_\lambda,$$

但一般而言,

$$\tilde{\Theta}_\lambda \neq \Theta_{\tilde{\lambda}}.$$

16. 杨氏"对称化子"　不可约表示的构成

Θ_λ 的行和列的"对称化子" $S_\lambda, a_\lambda, \tilde{S}_\lambda, \tilde{a}_\lambda$

我们定义算符 S_λ(Θ_λ 的行对称化子)以及 a_λ(Θ_λ 的行反对称化子)如下:

$$s_\lambda \equiv \frac{1}{\lambda_1!\,\lambda_2!\cdots\lambda_h!}\sum_h h_\lambda \tag{D.62}$$

$$a_\lambda \equiv \frac{1}{\lambda_1!\,\lambda_2!\cdots\lambda_h!}\sum_h (-)^h h_\lambda, \tag{D.63}$$

求和遍及 $\lambda_1!\,\lambda_2!\cdots\lambda_h!$ 个置换 h_λ, 其中 h_λ 使 Θ_λ 的行保持不变, 即对于这些置换, 各个循环的元素都在 Θ_λ 的同一行内. h_λ 构成 $\mathscr{S}_n$ 的一个子群 $\mathscr{S}_{[\lambda]}$; $\mathscr{S}_{\lambda_i}$ 是 Θ_λ 的第 i 行内的 λ_i 个客体的置换群, $\mathscr{S}_{[\lambda]}$ 是 $\mathscr{S}_n$ 的各个子群

$$\mathscr{S}_{\lambda_1}, \mathscr{S}_{\lambda_2}, \cdots, \mathscr{S}_{\lambda_h}$$

的乘积。 S_λ 和 a_λ 分别为这 h 个子群的对称化算子和反对称算子的乘积。

类似地可以定义 Θ_λ 的列(即 $\tilde{\Theta}_\lambda$ 的行)对称化子 $\tilde{S}_\lambda$ 和反对称化子 $\tilde{a}_\lambda$，它们是如下的算符:

$$\tilde{s}_\lambda \equiv \frac{1}{\tilde{\lambda}_1! \cdots \tilde{\lambda}_k!} \sum_v v_\lambda \tag{D.64}$$

$$\tilde{a}_\lambda \equiv \frac{1}{\tilde{\lambda}_1! \cdots \tilde{\lambda}_k!} \sum_v (-)^v v_\lambda, \tag{D.65}$$

上式的求和遍及 $\tilde{\lambda}_1! \cdots \tilde{\lambda}_k$ 个置换 v_λ，其中 v_λ 使 Θ_λ 的列保持不变.

主要性质

a) 这些是对称化算子和反对称化算子的乘积，因此有:

$$s_\lambda^2 = s_\lambda \quad a_\lambda^2 = a_\lambda \quad \tilde{s}_\lambda^2 = \cdots \tag{D.66}$$

$$h_\lambda s_\lambda = s_\lambda h_\lambda = s_\lambda \quad h_\lambda a_\lambda = a_\lambda h_\lambda = (-)^h a_\lambda \quad v_\lambda \tilde{s}_\lambda = \cdots \tag{D.67}$$

b) 若 $\tilde{\omega} \equiv \sum_p x_p p$. 是 $\mathscr{S}_n$ 的元素的一个任意线性组合(群代数的一个元素)，而且[1]

$$\lambda > \mu \text{ 或 } \tilde{\lambda} < \tilde{\mu}, \tag{D.68}$$

则

$$\begin{aligned} \tilde{a}_\mu \tilde{\omega} s_\lambda &= s_\lambda \tilde{\omega} \tilde{a}_\mu = 0 \\ \tilde{s}_\mu \tilde{\omega} a_\lambda &= a_\lambda \tilde{\omega} \tilde{s}_\mu = 0. \end{aligned} \tag{D.69}$$

特别是，由条件(D.68)中的任一个可得出:

$$\tilde{a}_\mu s_\lambda = s_\lambda \tilde{a}_\mu = \tilde{s}_\mu a_\lambda = a_\lambda \tilde{s}_\mu = 0. \tag{D.70}$$

"不可约对称化子" i_λ 和 j_λ

---

1) 条件(D.68)中的一个成立并不意味着另一个也成立. 例如，若 $\lambda = [41^3]$ 和 $\mu = [33]$，则有 $\lambda > \mu$，然而 $\tilde{\lambda} = [31^3]$，$\tilde{\mu} = [2^3]$，因此 $\tilde{\lambda} > \tilde{\mu}$.

$$i_\lambda \equiv s_\lambda \tilde{a}_\lambda \equiv \sum_{hv} (-)^v h_\lambda v_\lambda \quad (i_\lambda \neq 0)$$
$$j_\lambda \equiv \tilde{a}_\lambda s_\lambda \equiv \sum_{hv} (-)^v v_\lambda h_\lambda \quad (j_\lambda \neq 0). \tag{D.71}$$

我们分别称 i_λ 和 j_λ 为 Θ_λ 的"不可约对称化算子"和"不可约反对称化算子". 类似地，我们定义 $\tilde{\Theta}_\lambda$ 的不可约对称化算子和反对称化算子:

$$\tilde{i}_\lambda \equiv \tilde{s}_\lambda a_\lambda \qquad \tilde{j}_\lambda = a_\lambda \tilde{s}_\lambda,$$

$\tilde{\omega}$ 的定义已在上面给出. 可以证明:

$$s_\lambda \tilde{\omega} \tilde{a}_\lambda = Cst.i_\lambda \quad \tilde{a}_\lambda \tilde{\omega} s_\lambda = Cst.j_\lambda. \tag{D.72}$$

从 (D.69) 和 (D.72)，容易导出:

$$i_\lambda i_\mu = i_\mu i_\lambda = Cst.\delta_{\lambda\mu} i_\lambda \quad j_\lambda j_\mu = j_\mu j_\lambda = Cst.\delta_{\lambda\mu} j_\lambda. \tag{D.73}$$

基本定理

(i) **在群 $\mathscr{S}_n$ 的规则表示空间中，矢量 $\tilde{\omega} i_\lambda$ 张成不可约不变子空间 $\mathscr{E}_\lambda$ (其中 $\tilde{\omega}$ 是 $\mathscr{S}_n$ 的代数的任意元素)，因而与 $\mathscr{S}_n$ 的某一不可约表示 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$ 相联系.**

(ii) **矢量 $\tilde{\omega} j_\lambda$ 张成同一个不变子空间 $\mathscr{E}_\lambda$.**

(iii) **若 $\lambda \neq \mu$，则不可约表示 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$ 和 $\mathbf{P}^{(\mu)}$ 互不等价.**

由于 $\mathscr{S}_n$ 的不可约表示的数目等于它的类数目，所以也等于 n 的划分数目. 这个定理允许我们构造出它的全体不可约表示. 结论是: $\mathscr{S}_n$ 的每一个不可约表示都可以用一个完全确定的杨图来表征.

连带杨盘和连带表示的对称化算子

对于群代数的每一个元素 $\tilde{\omega} = \sum_p x_p p$，有一个元素 $\tilde{\omega}' = \sum_p (-)^p x_p p$ 与之相联系，这种对应是线性的，一一的，而且有下列性质:

a) 若 $\eta = p\tilde{\omega}$，则 $\eta' = (-)^p p\tilde{\omega}'$;

b) 若 $\zeta = \tilde{\omega}\eta$，则 $\zeta' = \tilde{\omega}'\eta'$（保持相乘规律）。

注意，在这种方式中，连带杨盘 Θ_λ 和 $\tilde{\Theta}_\lambda$ 的"对称化算子"是一一对应的，即

$$a_\lambda = s'_\lambda \qquad \tilde{a}_\lambda = \tilde{s}'_\lambda$$

所以

$$\tilde{i}_\lambda \equiv \tilde{s}_\lambda a_\lambda = j'_\lambda \qquad \tilde{j}_\lambda \equiv a_\lambda \tilde{s}_\lambda = i'_\lambda. \tag{D.74}$$

设 $\tilde{\omega}_1 i_\lambda, \tilde{\omega}_1 i_\lambda, \cdots$ 是依照基本定理确定表示 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$ 的基矢集。从 (D.74) 得出对应的矢量为 $\tilde{\omega}'_1 j_\lambda, \tilde{\omega}'_2 j_\lambda, \cdots$。它们确定表示 $\mathbf{P}^{(\tilde{\lambda})}$。采用此种基矢选择，显然，在他们的每一种中，表述某个置换 P 的矩阵 $P^{(\lambda)}$ 和 $P^{(\tilde{\lambda})}$ 是互相联系的，

$$P^{(\tilde{\lambda})} = (-)^p P^{(\lambda)}. \tag{D.75}$$

Θ^p_λ 的"对称化子"

正如我们已对杨盘 Θ_λ 作过的一样，也可以借助 Θ^p_λ 来定义置换 h^p_λ，v^p_λ 和对称化子 $s^p_\lambda, \cdots i^p_\lambda, \cdots$。注意，

$$h^p_\lambda = p h_\lambda p^{-1} \qquad v^p_\lambda = p v_\lambda p^{-1},$$

因此

$$s^p_\lambda = p s_\lambda p^{-1}, \qquad a^p_\lambda = \cdots, \text{ 等等} \tag{D.76}$$

Θ^p_λ 的"对称化算子"具有和 Θ_λ 的"对称化算子"类似的性质。借助 (D.76) 式，前者可以从后者导出。

17. $\mathscr{S}_n$ 的不可约表示的主要性质

$\mathscr{S}_n$ 的不可约表示的大多数性质可以从上一小节给定的"对称化算子"的性质导出。

$\mathscr{S}_n$ 的各个不可约表示 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$ 用某个杨图来表征，而且利用不可约对称化算子 i_λ（或 j_λ）可以构造出 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$。

其中每一个都是自共轭的，即

$$\mathbf{P}^{(\lambda)*} \simeq \mathbf{P}^{(\lambda)}. \tag{D.77}$$

一维表示

一维表示**只有两个**:

(i) 恒等(或对称)表示**S**;

(ii) 反对称表示**A**,在其中,每一个置换用$(-)^p$表述.

它们分别由s和a生成[方程(D.59)].

S的杨图只有一行,描述划分$[n]$;**A**的杨图是单列的,描述划分$[1^n]$.

连带不可约表示

两个不可约表示$\mathbf{P}^{(\lambda)}$和$\mathbf{P}^{(\lambda)}$,如果它们的杨图彼此连带,则称它们彼此连带.由(D.75)得出:

$$\mathbf{P}^{(\tilde{\lambda})} \simeq \mathbf{A}\otimes\mathbf{P}^{(\lambda)}. \tag{D.78}$$

张量积$\mathbf{P}^{(\lambda)}\otimes\mathbf{P}^{(\mu)}$的一维分量

当且仅当我们有下列两个条件之一时,$\mathbf{P}^{(\lambda)}\otimes\mathbf{P}^{(\mu)}$才有且只有一个一维表示,这两个条件是:

(i) $\lambda = \mu$,在这情况下,分量是**S**;

(ii) $\lambda = \tilde{\mu}$,在这情况下,分量是**A**.

包含在$\mathbf{P}^{(\lambda)}$中的$\mathscr{S}_{n-1}$的不可约表示

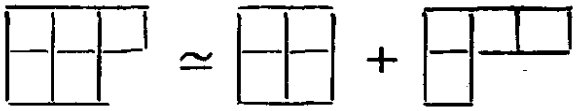
$\mathscr{S}_n$的任一不可约表示都是其子群$\mathscr{S}_{n-1}$的一个表示(未必是不可约的).

令符号$\mathbf{P}_t^{(\lambda)}$代表群$\mathscr{S}_t$的不可约表示,它与整数t的划分λ对应.可以证明:下式给出$\mathbf{P}_n^{(\lambda)}$分解成关于$\mathscr{S}_{n-1}$群的不可约部分,

$$\mathbf{P}_n^{(\lambda)} \simeq \sum_{\mu} \mathbf{P}_{n-1}^{(\mu)}, \tag{D.79}$$

上式求和遍及整数$(n-1)$的所有划分μ,它们的杨图可以从整数n的划分λ的杨图中去掉一个方块来得到.

例如,



方程(D.79)能用来建立 $\mathscr{S}_n$ 和 $\mathscr{S}_{n-1}$ 的特征标之间的联系. 特别是,利用它,可以从 $\mathscr{S}_{n-1}$ 的不可约表示的维数导出 $\mathscr{S}_n$ 的表示的维数.

一个给定表示 P 的不可约不变子空间的构成

在表示 **P** 中,上面引入的各个"对称化算子"可以用**线性厄密**算符(准确到一个常量,就是投影算子)表达,以后用相应的大写字母代表. 从 § 16 的基本定理可得到构造出 **P** 的不可约分量的方法. 如果 $|u\rangle$ 是表示 **P** 的空间 $\mathscr{E}$ 中的任一矢量,则 $I_\lambda|u\rangle$(若不为 0)的变换与 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$ 类似,而且它的表示空间包含非零矢量 $J_\lambda|u\rangle$. I_λ 作用在 $\mathscr{E}$ 的基矢上得到的矢量 $I_\lambda|\rangle$ 的集合张成一个子空间 $\mathscr{I}_\lambda$,它的维数等于包含在 **P** 中的分量 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$ 的数目 n_λ. 令 $|\sigma\rangle$ 是 $\mathscr{I}_\lambda$ 的正交基中一个矢量. 群算符作用在 $|\sigma\rangle$ 上得到的空间 $\mathscr{E}_{\sigma\lambda}$ 是 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$ 的一个表示空间. 这样的运算作用于 $\mathscr{I}_\lambda$ 的 n_λ 个基矢上,就得到 n_λ 个正交表示空间.

如果 Q 是 $\mathscr{E}$ 的一个算符,而 $\mathscr{E}$ 对 $\mathscr{S}_n$ 是不变的,则它将子空间 $\mathscr{I}_\lambda$ 的矢量线性地从其中的一个变换成另一个. 一旦我们在每个子空间 $\mathscr{I}_\lambda$ 中将 Q 对角化,那末,在 $\mathscr{E}$ 中将 Q 对角化的问题就完全被解决.

$\mathbf{P}^{(\lambda)}$ 的矢量的对称性质

通常刃矢没有完全确定的对称性质或反对称性质. 如果矢量 $|\rangle$ 属于投影算子 S_λ 的子空间,则称它具有完全确定的对称性 S_λ. 这样的矢量对 Θ_λ 的同一行元素的任意置换是对称的. 同样,如果一个矢量属于投影算子 A_λ 的子空间,则称它具有反对称性 A_λ.

从杨盘 $\tilde{\Theta}_\lambda$, Θ^p_λ 出发,可以类似地分别定义 $\tilde{S}_\lambda$, S^p_λ 型的对

称性以及 $\tilde{A}_\lambda, A^p_\lambda$ 型的反对称性[1].

按定义，具有完全确定的对称性 S^p_λ，S^q_μ 的两个矢量当中，**对称性较高**的矢量与 λ，μ 中较大的划分相对应；具有完全确定的反对称性 A^p_λ，A^q_μ 的两个矢量当中，**反对称性较高**的矢量与 λ，μ 中较大的划分相对应.

从 (D.69) 和基本定理可以导出：

不可约表示 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$ 的空间包含一个且只一个 S_λ 对称矢量（因此，有且只有一个 S^p_λ 对称矢量，p 是任意的置换），**而且没有对称性更高的矢量**[2].

它包含一个且只包含一个 $A_{\tilde{\lambda}}$ 反对称矢量，而且没有反对称性更高的矢量.

对换 K_T 的类和算符

对于每一个划分 μ，都相应有一个类和一个类和算符 K_μ. 这个算符的各种可能本征值 $k^{(\lambda)}_\mu$ 对应 $\mathscr{S}_n$ 的不同的不可约表示 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$. 它们是出现在 n 的 λ 划分中的整数 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_h$ 的函数.（注意，如果两个划分不相同，那末，某一特定的 K_μ 对应的本征值并不一定不相同：$\lambda \neq \lambda'$ 并不一定意味着 $k^{(\lambda)}_\mu \neq k^{(\lambda')}_\mu$.）对于对换

$$K_T \equiv K_{[2^{n-2}1^2]} \equiv \sum_{i<j} (ij),$$

我们具体地考虑一个类和算符 K_T. 如果注意到 K_T 与所有置

---

1) 置换 P 将任意的 S_λ 对称矢量变换为 S^p_λ 对称矢量；又将 A_λ 反对称矢量变换为 A^p_λ 反对称矢量[参看 (D.96) 式].

S_λ, A_λ 型对称性和 $\tilde{S}_\lambda, \tilde{A}_\lambda$ 型对称性之间不存在这样的对应关系. 后者分别与 S^q_λ, A^q_λ 型对称性等价，其中 q 是如下定义的特定置换，

$$\tilde{\theta}_\lambda = q\theta_{\tilde{\lambda}}.$$

2) 更一般地，对于任意划分 μ，不存在 S_μ 对称矢量，其中 μ 满足下列不等式之一：

$$\mu > \lambda, \quad \tilde{\mu} < \tilde{\lambda}.$$

换对易，因而

$$k_T^{(\lambda)} I_\lambda = K_T I_\lambda = S_\lambda K_T \tilde{A}_\lambda,$$

又若注意到(D.67)式，那末容易证明：$k_T^{(\lambda)}$ 等于 h_λ 型(对称偶)对换数目与 v_λ 型(反对称偶)对换数目之差：

$$k_T^{(\lambda)} = \sum_{i=1}^{h} \frac{\lambda_i(\lambda_i - 1)}{2} - \sum_{i=1}^{k} \frac{\tilde{\lambda}_j(\tilde{\lambda}_j - 1)}{2}. \qquad \text{(D.80)}$$

18. 自旋为 1/2 的n个费米子系统

n个全同的 $\frac{1}{2}$ 自旋粒子系统的状态的对称性

定理. 总自旋(SM)矢量由 n 个全同的 $\frac{1}{2}$ 自旋构成，它们所张的空间与 $\mathscr{S}_n$ 的一个不可约表示相联系，这表示的杨图与整数 n 的划分 $\left[\frac{1}{2}n + S, \frac{n}{2} - S\right]$ 对应（杨图至多有两行）.

推论 I.. 若 $n = 2$，则有一个反对称态（$S = 0$）和三个线性无关的态（$S = 1$）.

推论 II. 若 $n > 2$，则没有反对称态，一共有（$n + 1$）个线性无关的完全对称的状态，即有 $2S + 1 \equiv n + 1$ 个状态，它们的总自旋取最大值（$S = n/2$）.

证明：由 n 个 $\frac{1}{2}$ 自旋构成的空间 $\mathscr{E}^{(s)}$ 是 2^n 维的。用 u_i, v_i 代表第 i 个自旋的动力学状态，它们对应的 s_z 本征值分别为 $+\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$. $\mathscr{E}^{(s)}$ 的一种正交基可以从 n 个 u 和 v 矢量的一切可能乘积得到. 因此，矢量

$$\zeta_M \equiv u_1 u_2 \cdots u_\nu v_{\nu+1} \cdots v_n$$

是这种基的一个矢量. 它也是总自旋

$$\mathbf{S}=\sum_{i=1}^{n} s_i,$$

的 z 分量 S_z 的本征矢量，相应的本征值为 $M=\nu+\frac{n}{2}$. 所有可能的置换作用于 ζ_M 上，我们一共得到 $\binom{n}{\nu}$ 个不同的矢量，

$$\binom{n}{\nu}=\left[n!/\left(\frac{1}{2}n+M\right)!\left(\frac{1}{2}n-M\right)!\right],$$

它们张成本征值 M 的子空间. 这些矢量中的每一个都包含 $\left(\frac{n}{2}+M\right)$ 个 u 型矢量和 $\left(\frac{n}{2}-M\right)$ 个 v 型矢量.

这个子空间可以相继地再分成若干个正交子空间，它们与 $\mathbf{S}^2$ 的不同的可能本征值相应. 量子数 S 可以取 $\left(\frac{n}{2}-|M|+1\right)$ 个可能值：$|M|,|M|+1,\cdots,\frac{n}{2}$. 用 $\mathscr{E}^{(s)}(SM)$ 代表由总自旋 (SM) 的矢量构成的子空间. 由于 $\mathbf{S}^2$, S_z 与全体置换对易，所以每一个这样的子空间确定 $\mathscr{S}_n$ 的一个表示. 另外，由于 S_+, S_- 与全体置换对易，所以由 S 的同一值对应的两个子空间确定的表示是等价的.

现在证明推论 II（推论 I 是显然的）. 为此只需考虑 $\mathscr{E}^{(s)}$ 的正交基的矢量到对称态空间上和到反对称态空间上的投影. 采用上面规定的基矢，做到这一点是特别简单的. 由于 $n>2$，这种基的任一矢量 ζ 至少包含两个具有相同状态的单体自旋，即 u 或 v. 假定：ζ 包含着因子 u_iu_j. 由于 $A=A\frac{1}{2}(1-(ij))$ 和 $\frac{1}{2}(1-(ij))u_iu_j=0$，所以要求 $A\zeta=0$. 另一方面，有且只有一个全对称的基矢线性组合，这些基矢从属于

本征值 M 的子空间，即 $\binom{n}{v}$ 个这样的基矢总和. 由于对每一个可能的 M 值，这都正确，所以，这个全对称矢量必须对应总自旋的最大值 $S=\frac{n}{2}$. 这样就完全证明了推论 II.

对 A 所作的这种证明可以重复应用于反对称化算子 $\tilde{A}_\lambda$ 上. 如果杨图 Y_λ 包含的行数多于 2，就要求 $\tilde{A}_\lambda\zeta=0$，由此得出：对于定义在 $\mathscr{E}^{(v)}$ 中的 $\mathscr{S}_n$ 群表示的不可约分量，杨图最多有二行.

令 $\lambda=[\lambda_1\lambda_2]$ 是符合这条件的 n 的一个划分. 不可约分量 $\mathbf{P}^{(\lambda)}$ 的数目等于所能构成的 $I_\lambda|\rangle=S_\lambda\tilde{A}_\lambda|\rangle$ 型的线性无关的矢量数目. 为了列举这些，我们只需考虑 Θ_λ 杨盘：

1	2		λ_2	λ_2+1		λ_1
λ_1+1	λ_1+2		$\lambda_1+\lambda_2$			

n 个 $\frac{1}{2}$ 自旋可以分成两组：第一行的 $(\lambda_1-\lambda_2)$ 个元素 λ_2+1，λ_2+2，$\cdots\lambda_1$（不与第二行的配对）以及同一列中的 λ_2 对元素. 这两组的自旋分别用 $\mathbf{S}_1$ 和 $\mathbf{S}_2$ 代表，总自旋为

$$\mathbf{S}=\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2.$$

用 $S^{(\lambda_1-\lambda_2)}$ 代表到对称态（对第一组自旋的 $(\lambda_1-\lambda_2)!$ 个置换是对称的）上的投影子. 显然有

$$I_\lambda=S_\lambda S^{(\lambda_1-\lambda_2)}\tilde{A}_\lambda.$$

然而，从定义本身可知，$\tilde{A}_\lambda$ 是到第二组的每对的单态上的投影算子. 这一组只有一个矢量具有这种性质（推论 I），它对应的自旋 $S_2=0$. 至于 $S^{(\lambda_1-\lambda_2)}$，它将第一组的矢量投影到 $(2S+1)$ 维空间上，此空间对应 S_1 的最大可能值（推论 II），即

$\frac{1}{2}(\lambda_1-\lambda_2)$. 因此，$S^{(\lambda_1-\lambda_2)}\tilde{A}_\lambda$ 是投影到 $(2S+1)$ 维空间（对应的总自旋大小为 $S=\frac{1}{2}(\lambda_1-\lambda_2)$）上的算符. 由于投影子 S_λ 与 **S** 对易，因此，它作用在这空间的矢量上就或者全为0，或者变为总自旋仍相同的矢量. 第一种可能性被排除，否则在 $\mathscr{E}^{(s)}$ 中不可能找到总自旋为 $\frac{1}{2}(\lambda_1-\lambda_2)$ 的矢量. 从第二种可能性即可导出我们要证明的定理. 证毕.

完全反对称的矢量的构成

n 个 $\frac{1}{2}$ 自旋的费米子动力学态张成一个空间，它由上面规定的 $\mathscr{E}^{(s)}$ 空间和轨道变量的 $\mathscr{E}^{(0)}$ 空间的张量积 $\mathscr{E}^{(0)}\otimes\mathscr{E}^{(s)}$ 构成. $\mathscr{E}^{(0)}$ 还可以再分成若干个互相正交、而且对 $\mathscr{S}_n$ 群是不可约不变的子空间 $\mathscr{E}^{(0)}(\sigma\mu)$; $\mathscr{E}^{(0)}(\sigma\mu)$ 与某个不可约表示 $\mathbf{P}^{(\mu)}$ 相联系. 指标 σ 用来区分 $\mathscr{S}_n$ 群的同一个不可约表示所联系的那些空间. 为了构成一个正交的、全反对称矢量的完备集，我们只需在每一个子空间 $\mathscr{E}^{(0)}(\sigma\mu)\otimes\mathscr{E}^{(s)}$ 中这样做. 在这样的一个子空间中，线性无关且反对称的矢量数目等于 **A** 分量出现在这表示（定义在这子空间上）中的次数，所以(§17)，也等于和 $\mathbf{P}^{(\mu)}$ 相联系的不可约表示的数目，其中 $\mathbf{P}^{(\mu)}$ 是这表示（定义在 $\mathscr{E}^{(s)}$ 上）的分解中的分量. **如果 Y_μ 多于两列，则它不存在. 如果至多包含两列，而且令**

$$\mu=[2^{\frac{1}{2}n-s}1^{2s}], \tag{D.81}$$

则按照上面的定理，Y_μ 有 $(2S+1)$ 个，而且所能构成的反对称矢量是 $\mathbf{S}^2$ 的本征矢量，对应的总自旋为 $(SM)(M=-S, -S+1, \cdots, S)$.

与自旋无关的标量可观测量 LS 耦合

若 Q 是与自旋无关的标量可观测量，则它可以看成是

$\mathscr{S}^{(0)}$ 空间的一个可观测量，而且对转动和轨道变量的置换具有不变性：

$$[Q, L] = 0 \qquad [Q, P^{(0)}] = 0.$$

$\mathscr{S}^{(0)}$ 是 $(2L+1)d_\mu$ 维子空间 $\mathscr{S}^{(0)}(\tau L\mu)$ 的直和，其中 $\mathscr{S}^{(0)}(\tau L\mu)$ 对转动群和置换群是不可约的[1]：L 是角动量量子数；μ 是置换群的表示 $\mathbf{P}^{(\mu)}$ 所联系的划分；τ 是一个附加量子数，用来区分各个等价的子空间．特别是，我们可以这样选择 $\mathscr{S}^{(0)}(\tau L\mu)$，使 Q 在各个子空间中都等于某一常数 $q_\tau^{(L\mu)}$（参看 § D.9）．

Q 的与本征值 $q_\tau^{(L\mu)}$ 对应的本征矢量是子空间 $\mathscr{S}^{(0)}(\tau L\mu)\otimes\mathscr{S}^{(s)}$ 的反对称矢量．按照上面的证明，这些只有当 Y_μ 至多为两列时才能构成．因此，用量子数 S 可完全确定划分 μ［方程 (D.81)］．$\mathscr{S}^{(0)}(\tau L\mu)\otimes\mathscr{S}^{(s)}$ 的反对称矢量的子空间对应粒子系有完全确定的总自旋 S，此子空间是某个 $(2L+1)(2S+1)$ 维子空间 $\mathscr{S}(\tau LS)$，在其中，可以挑选出总轨道角动量和总自旋的本征矢量：

$|\tau LSM_LM_S\rangle$ $(M_L = -L, \cdots, +L;\ M_S = -S, \cdots, +S)$，

它们构成一种标准基 $\{L^2S^2L_zS_z\}$．

1) $\mathscr{S}^{(0)}(\tau L\mu)$ 单独地对转动群是可约的，它是 d_μ 个等价的不可约子空间之和（d_μ = 表示 $\mathbf{P}^{(\mu)}$ 的维数）．类似地，它对 $\mathscr{S}_n$ 群是可约的，而且是 $(2L+1)$ 个等价的不可约子空间之和．

第三部分 对称性和不变性

第十三章 量子力学中的角动量 1
1 引言
I 角动量的本征值和本征函数 2
2 角动量定义
3 特征代数关系
4 J^2和J_z的谱
5 J^2和J_z的本征矢量 不变子空间E^(J)的构成
6 标准表象{J^2J_z}
7 结论
II 轨道角动量和球谐函数 14
8 l^2和l_z的谱
9 球谐函数的定义和构成
111 角动量与转动 18
10 转动的定义 欧勒角
11 物理系统的转动 转动算符
12 可观测量的转动
13 角动量与无穷小转动.
14 算符R(αβγ)的构成
15 转动2π角和半整数角动量
16 不可约不变子空间 转动矩阵R^J
17 转动不变性和角动量守恒 转动简并
IV 自旋 35
18 电子自旋的假说
19 1/2自旋和泡利矩阵
20 1/2自旋粒子的可观测量和波函数 旋量场
21 矢量场和自旋粒子
22 在原子中依赖于自旋的相互作用
23 与自旋有关的核子一核子相互作用
V 角动量相加 51
24 相加问题
25 两个角动量的相加定理
26 应用及举例
27 总角动量的本征矢量 克雷布施一戈登系数
28 应用: 二核子系统
29 三个成多个角动量相加 拉卡系数"3Sj"符号
VI 不可约张量算符 67
30 标量算符的表示
31 不可约张量算符定义
32 不可约张量算符的表示 维格纳一爱卡特定理
33 应用

第十四章 全同粒子体系 泡利不相容原理 84
1 量子理论中的全同粒子
I 对称化假设 85
2 同类粒子和对称表象
3 置换算符
4 置换算特代数 对称化算子和反对称化算子
5 全同粒子和对称化假设
6 玻色子和玻色一爱因斯坦统计
7 费米子和费米一狄拉克统计 不相容瓜理

8 波函数总是必需对称化吗
II 应用 103
9 两个无自旋全同粒子的碰撞
10 两个质子的碰撞
11 原子核的统计
12 复杂原子 中心场近似
13 原子的托马斯一费米模型
14 核子系统和同位旋
15 同位旋的效用 电荷无关性

第十五章 不变性和守恒定律 时同反演 134
1 引言
I 数学补充 反线性算符 135
2 三个有用的定理
3 希尔伯特空间的反线性算符
4 反线性变换
5 反线性算符及其表象
II 变换和变换群 145
6 系绕的动力学变量和动力学态的变换
7 变换群
8 变换算特群
9 连续群和无穷小变换 平移 转动
10 有限群 反射
III 运动方程的不变性和守恒定律 150
11 不可观测
12 哈密顿量的对称性和守恒定律
13 动力学态的不变性和演化
14 斯塔克和塞曼效应的对称性
IV 时间反演和微观可逆性原理 167
15 时间平移和能量守恒
16 经典力学和量子力学中的时间反演
17 时间反演运算 无自旋粒于
18 时间反演的普遍定义
19 时间反演和复共扼
20 微观可逆性原理
21 推论：克喇末简并
22 实转动不变的哈密顿最

第四部分 近似方法
第十六章 定态徽扰 185
1 第四部分概述
I 非简并能级微扰 186
2 按微扰的幂展开
3 一级掀优
4 氦原子基态
5 原子核的库仑能
6 高级修正
7 刚性转子的斯塔克效应
II 简并能级微扰 195
8 基本理论
9 无自旋-轨道力时的原子能级
10 自旋-轨道力LS和jj耦合
11 LS耦合的原子 自旋一轨道藕合引起的分裂
12．塞曼效应和帕邢一巴克效应

13 H的对称性和简并的消除
14 准简并性
III 各级微扰展开的明显表达式 214
15 哈密顿量H及其预解式G(s)
16 把G(s)、P、HP展成V的幂级数
17 本征值和本征态的计算

第十七章 与时间有关的薛定谔方程的近似 225
I "表象"的改变和哈密顿量的一部分的徽扰处理
I 与时间有关的微扰理论 228
2 跃迁几率的定义和徽扰计算
3 核库仑徽发的半经典理论
4 v与时间无关的情形 未徽扰能量的守恒
5 应用于玻恩近似中的截面计算
6 周期性橄扰 共振
II 哈密顿量的突然改变和绝热改变 244
7 问题和结果
8 迅速变化和突然近似
9 磁场的突然倒向
10 绝热改变 一般原则 最简单情形
11 "转动轴表象"
12 绝热定理的证明
13 绝热近似
14 磁场的绝热倒向

第十八章 变分法及有关问题 269
1 里兹变分法
I 对束缚态的变分法 270
2 本征值间题的变分形式
3 分立能级的变分计算
4 一个简单的例子:氢原子
5 讨论 应用子激发能级的计算
6 氦原子基态
II 哈特里和福克一狄拉克原于 281
7 自洽场法
8 E[Φ]的计算
9 福克一狄拉克方程
10 讨论
11 哈特里方程
III 分子的结构 289
12 概论 电子运动和核运动的分离
13 在固定核场中的电子运动
14 绝热近似
15 绝热近似中核的哈密顿量
16 玻愚一奥本海默方法
17 关于双原子分子的一些概念

第十九章 碰撞理论 311
1 引言
I 自由波格林函数和玻恩近似 312
2 散射振福的积分表述
3 截面和T矩阵 微观可逆性
4 波恩近似
5 散射的积分方程

6 玻恩展开，.
7 玻愚近似适用性的判据
8 原子对电子的弹性散封
9 中心势 相移计算
10 格林函数作为一个算符 它和H_s的预解式的关系
II 普遍化为扭曲波近似 333
11 广义玻愚近似
12 玻愚展开的普遍化
13 扭曲波的格林函数
14 应用T的定义和形式性质
15 关于1/r势的注释
III 复杂的碰撞和玻恩近似 343
16 概述 截面
17 道
18 截面的计算 T矩阵
19 跃迁振幅的积分表述
20 玻恩近似及其普遍化
21 原子对快电子的散射
22 原子核的库仑激发
23 定态散射波的格林函数和积分方理
24 两个散射中心对粒子的散射
25 简单散射 干涉
26 多重散射
IV 跃迁振幅的变分法计算 369
27 相移的稳定表达式
28 相移的变分计算 讨论
29 推广到复杂的碰撞
V 跃迁矩阵的普遍性质 376
30 通量守恒 s矩阵的幺正性
31 玻耳一佩尔斯一普拉健克关系（光学定理）
32 微观可逆性
33 T矩阵的不变性

第五部分 相对论量子力学基础

第二十章 狄拉克方程 387
I 总导言
1 相对论量子力学
2 符号 各种约定和定义
3 洛伦兹群
4 经典的相对论动力学
II 狄拉克方程和克莱因一戈登方程 397
5 克莱因一戈登方程
6 狄拉克方程
7 空间E^(s)的构成 狄拉克表象
8 狄拉克方程的协交形式
9 伴随方程 流的定义
III 狄拉克方程的不变性质 408
10 狄拉克矩阵的性质
11 狄拉克方程的形式对参照系作正时交换的不交性
12 固有群的变换
13 空间反射和正时洛伦兹群
14 协变量的构成
15 形式不变性的第二种表述：态的变换

16 运动规律的不变性
17 变换算符 动量 角动量 宇称
18 守恒定律和运动常数
19 时间反演和电荷共轭
20 规范不变性
IV 算符的解释和简单解 433
21 狄拉克方程和对应原理
22 狄拉克粒子的动力学变量
23 自由电子平面波
24 用洛伦兹交换得出平面波的结构
25 中心势
26 自由球面波
27 氢原子
V 狄拉克方程的非相对论极限 449
28 大分量和小分量
29 泡利理论作为狄拉克理论的非相对论极限
30 应用：超精细结构和偏极一偶极耦合
31 级修正和福尔迪一沃思森变换
32 自由粒子的FW变换
33 场内粒子的FW变换
34 中心静电势中的电子
35 讨论和结论
VI 负能解和正电子理论 466
36 电荷共轭解的性质
37 负能解的不平常行为
38 负能态的重新新解释 “空穴”和正电子理论
39 “空穴”理论的困难

第二十一章 场的量子化 辐射理论 477
1 引言
I 实标量场的量子化 479
2 经典自由场 简正振动
3 自由场的量子化
4 场的拉格朗日函数 Φ(r)的共扼动量
5 复基函数
6 平面波 动量的定义
7 球面波 角动量的定义
8 空间和时间的反演
II 场与原于系统的藕合 499
9 场与粒子系统的藕合
10 弱藕合和微扰处理
11 能级移位
12 场粒子的发射
13 衰变态的量子理论 谱线宽度
14 弹性散射 色射公式
15 共振散射亚稳态的形成
16 场粒子的吸收（光电效应） 辐射俘获
III 电磁辐射的经典理论 531
17 经典麦克斯韦一洛伦兹理论的方程组
18 经典理论的对称性和守恒定律
I9 电子的自能和经典半径
20 电磁势规范选择
21 矢量场的纵向和横向部分
22 纵场的消除

23 能量 动量 角动量
24 自由辐射的哈密顿量
25 和粒子系耦合的辐射的哈密顿量
IV 辐射的量子理论 553
26 自由辐射的量子化光子
27 平面波辐射的动量
28 极化
29 多极展开 具有确定角动量和宇标的光于
30 辐射与原子系统的耦合
31 原子发射光子 偶极发射
32 低能康普顿散射 汤姆孙公式

附录 C 矢量相加系数和转动矩阵 578

附录 D 群论基本知识 611