# 目　　录

## 第一部分　关于历史的导言


第一章　从经典物理学到量子力学…… 1

§1.1　经典力学时期的原子论…… 1

§1.2　电量的单元性和电子的发现…… 3

§1.3　作用量子的发现…… 4

§1.4　光的粒子说的复活…… 11

§1.5　周期运动的量子条件…… 14

§1.6　原子结构和量子论…… 20

§1.7　量子力学的开端…… 26

§1.8　电子的波动性的发现…… 32

§1.9　量子力学的建立及其后的发展…… 36


## 第二部分　量子力学的构成


写在前面…… 39

第二章　波动力学的引入…… 40

§2.1　波粒二象性——得以形成量子力学基础的实验事实…… 40

§2.2　波动力学中的运动定律…… 49

a）第一定律——关于自由粒子的定律（50）　b）叠加原理（50）

c）第二定律——动力学的定律（54）d）第三定律——波函数的概率解释(57)　e）位置坐标的测定（63）　f）波函数，概率幅，态函数（66）

§2.3　定态和边界条件…… 68

a）定态和能量本征态（69）　b）平面波和自由粒子波包（74）

c）一维问题和边界条件——束缚态和散射态(81)

§2.4　简单的定态…… 91

a）阶梯势（91）　b）矩形势（95）　c）$\delta$ 函数势和刚性壁（104）

d）共振散射和亚稳态（108）　e）谐振子 I（114）

第三章　量子力学的形成…… 119

§3.1 动量表象…… 119
a) 概率解释规范化和力学量规范化 (120) b) 动量表象中的力学量算符(124) c) 量子条件和对易关系(129)
§3.2 力学量及其观测…… 132
a) 力学量算符的线性性质 (132) b) 力学量算符的厄米性和本征函数系的完备性 (135) c) 力学量的测量和期待值 (138) d) 不确定关系 (142)
§3.3 量子力学中的基本假定…… 146
a) 基本假定 I——态(146) b) 基本假定 II——力学量 (148) c) 基本假定 III——时间演变 (150)
§3.4 海森伯绘景和矩阵力学…… 152
a) 按能量本征函数系所作的展开 (152) b) 海森伯运动方程 (154)
c) 矩阵表示的量子力学——矩阵力学 (157)
§3.5 谐振子 II…… 164
a) 能量本征值问题 (164) b)波包的运动 (170)
§3.6 多粒子体系…… 176
§3.7 向经典理论的回归…… 180
第四章 量子力学的基础体系…… 188
§4.1 右矢空间和左矢空间…… 188
§4.2 线性算符…… 191
§4.3 本征值问题…… 193
a) 自共轭算符的本征值问题(194) b) 测量值的系综平均，概率解释 (196)
§4.4 正则变量…… 198
a) 一个自由度的力学系 (198) b) 多自由度体系(205) c) 狄拉克空间 (206)
§4.5 运动方程…… 206
a) 海森伯绘景 (206) b) 守恒定律，位力定理，总和定律 (209) c) 薛定谔绘景 (211) d)相互作用绘景 (212)
§4.6 物理解释…… 214
a) 纯态 (215) b) 混合状态 (217)

## 第三部分 量子力学的拓展

第五章 典型状态的结构…… 221

§5.1 对称性和守恒量…… 221
a）连续群的情况——平移与旋转（222） b）离散变换群，空间反演（226）
§5.2 角动量…… 227
a）$J^2$ 和 $J_z$ 的同时对角化（228） b）轨道角动量，球函数（233）
c）自旋（243） d）角动量的合成（249）
§5.3 时间反演…… 258
a）简单情况（259） b）有自旋的情况（261）
§5.4 中心力场中的运动…… 263
a）原点附近的边界条件（266） b）在远处的性质（266） c）束缚态（268） d）势阱（275） e）散射截面(283)
§5.5 库仑场情形…… 289
a）束缚态（292） b）散射态（296） c）波在远处的畸变(300)
§5.6 磁场中的运动…… 304
a）均匀磁场和轴对称电场（305） b）只有磁场的情形，朗道能级简并（309） c）轨道中心的局域化（310） d）规范变换（313）
§5.7 多粒子体系…… 315
a）配位空间（315） b）质心运动的分离（317） c）变分法（319）
d）位置相关（326） e）氢分子（329）
第六章 近似方法…… 333
§6.1 定态微扰论…… 333
a）无简并状态下的微扰（334） b）微扰展开式的收敛性．渐近级数（337） c）简并态的微扰(348)
§6.2 与时间有关的微扰论…… 356
a）逐次递推法（356） b）跃迁概率（361）
§6.3 绝热近似…… 366
a）绝热定理（366） b）玻恩-奥本海默近似（371）
第七章 量子力学和相对论…… 377
§7.1 洛伦兹变换…… 377
a）矢量，张量（377） b）场量的变换，克莱因-戈登方程(381)
§7.2 旋量…… 383
a）正常洛伦兹群的表示（383） b）范德瓦尔登旋量（386） c）韦耳方程（388）
§7.3 空间反演，时间反演…… 389

§7.4 狄拉克方程…… 391
a）狄拉克旋量（391） b）物理解释(393) c)自由粒子解，平面波(395)
§7.5 中心力场中的狄拉克粒子…… 400
a）部分波分解（401） b）径向方程（403） c）氢原子（405） d）库仑散射（413） e）散射截面，自旋极化(416)
§7.6 哈密顿形式…… 424
a）颤动（424） b）与电磁场的相互作用（430） c）谷-傅德-渥萨依森变换(432)
§7.7 空穴理论…… 437
a）负能态问题（437） b）空穴假说(442)
第八章 力学系的对称性…… 446
§8.1 群的定义及其结构…… 447
§8.2 李群和李代数…… 451
§8.3 连续群的射线表示…… 455
§8.4 动量和角动量…… 460
§8.5 轨道角动量和自旋…… 477
§8.6 角动量的合成与分解…… 485
§8.7 伽利略变换…… 492
§8.8 规范变换…… 496
§8.9 力学系内在的对称性…… 498
§8.10 置换对称性 …… 507

## 第四部分 多粒子体系与场

第九章 多粒子体系的量子力学…… 519
§9.1 全同粒子体系的态空间…… 519
a）全同粒子体系的波函数（519） b）泡利原理，统计（522） c）粒子占有数表象（524）
§9.2 二次量子化…… 527
a）多粒子体系中物理量的矩阵元（527） b）产生和湮没算符（531）
c）福克空间（538）
§9.3 多粒子体系的运动和状态 I ——基态…… 542
a）密度矩阵(542) b）哈特里方程（548） c）费米子体系的基态(555)
d）托马斯-费米法或局域费米动量法（557） e）玻色子体系的基

态 (559)
§9.4 多粒子体系的运动和状态 II——集体运动…… 565
a) 正则振动——谐振子之一例 (565) b) 正则振动——费米子体系之一例 (571)
第十章 场的量子论…… 578
§10.1 德布罗意波，量子化了的波场以及经典场 …… 578
a) 广义概率幅和德布罗意波 (579) b) 运动的时空描述和二次量子化场的作用 (580) c) 广义薛定谔函数和二次量子化场 (584) d) 相干态与经典波动 (587) e) 多粒子体系的量子力学和场的正则量子化(594)
§10.2 拉格朗日形式的场方程和诺芝定理 …… 601
a) 拉格朗日形式的场方程 (602) b) 诺芝定理——各种不变性和守恒量(604)
§10.3 场的正则量子化 …… 613
a) 正则变量和量子化 (613) b) 正则运动方程及其与经典理论的对应 (616) c) 量子化场的无限小变换及生成元 (617)
§10.4 自由场的量子论 …… 619
a) 标量场理论 (620) b) 复标量场 (629) c) 狄拉克场 (631)
§10.5 反演不变性及自旋与统计的关系 …… 635
a) 空间反演，正反粒子变换 (635) b) 时间反演 (636) c) *CPT* 变换 (637) d) 关于并行统计 (639)
§10.6 从不同时理论到超不同时理论 …… 641
a) 相对论电子多体系的不同时理论 (641) b) 辐射场的量子化和附加条件 (643) c) 场的超不同时理论(646)
§10.7 具有不定度规的场的量子论 …… 648
a) 发散困难和具有不定度规的混合场理论 (648) b) 不定度规的引入 (652) c) 多质量波动方程(653)
第十一章 约束系的正则理论…… 658
§11.1 广义狄拉克的一般正则理论 …… 658
a) 奇异拉氏量和约束 (658) b) 狄拉克括号和向量子论的过渡(664)
§11.2 在类光的超平面上场的正则理论 …… 666
a) 正则量子化面及其稳定群 (666) b) 中性标量场的光面正则形式 (671) c) 产生和湮没算符与福克空间 (679)
文献与参考书…… 684

# 第一部分　关于历史的导言

# 第一章　从经典物理学到量子力学

## §1.1　经典力学时期的原子论

本讲座第 I 卷和第 II 卷的《经典物理学》解释在现代物理学之前就已成立的理论体系及通过该体系能充分说明的物理现象的总体。与通常的处理方法不同，在那里，相对论亦纳入经典物理学之中，并规定现代物理学以量子力学为起点。如《经典物理学》序言所述，其最重要的理由在于上述意义下的经典物理学与量子力学之间存在某种**鸿沟**。这种鸿沟具有二重性，一方面是基于自然现象本身的不连续性，另一方面是人类认识自然的方法中，呈现出为经典物理学所不曾有的全新的性质.这两个方面之中，前者最先明确，即“自然界存在飞跃”. 当然这是从 1900 年普朗克 (Planck) 发现**作用量子**才开始的，以后则演变成量子力学这个独立的理论体系。与此同时，作为另一个侧面，对自然界认识的方法的变革，经历了近乎 30 个春秋。特别在其前半期，普朗克的量子假设像油滴一样矛盾地存在于以自然现象的连续性和个别的因果关系为必然前提的经典物理学的汪洋大海之中。它能够发展成量子力学那样相反又为经典物理学所依据的一种理论，并非容易。本章将对这个时期的情况稍加评述。

若广泛观察物质世界的连续性或非连续性问题，就会知道，它决不是什么新的课题。从古希腊开始，有关物质是连续还是非连续的争论长时间地延续下来.然而，只是到了近代，这场争论在作为经验科学的物理学和化学领域中才具有实际意义。本讲座中作

为经典物理学出发点的经典力学，按照惯例先处理**质点**的运动，并把质点定义为有**质量**却无大小的点。因此，物质的一种非连续结构似乎是理所当然的。如《经典物理学》第一部分第一和第二章所述，牛顿（Newton）本人假定物质由微小的但却是形状一定、大小有限的许多原子所组成的。这时，对物质仍然采用了非连续的观点.不管通常教科书中的提法和牛顿本人之间存在这样的差异，将物质实地细分，其终点到底是大小有限的原子还是不折不扣的质点，直至 19 世纪后半叶，也仍然是一个意义不曾完全明确的问题.例如，18 世纪发展起来的弹性体力学和流体力学，像《经典物理学》第一部第三章详细阐述的那样，可以把弹性体及流体当作连续物质来处理。但是到原子论确立之后再来重新考虑，由于原子相当小，所以它们只不过是近似地被看作连续体而已。

经典物理学中，原子及分子概念的有效性是在 19 世纪发展起来的气体分子运动论及其普遍化了的经典统计力学中才被明确的.据此，不仅能解释作为大量分子的集团所具有的平均性质的各种热力学现象，也能处理由于偏离平均值而造成的各种**起伏**。而且，把分子运动论用于典型起伏现象的布朗（Brown）运动，即可断定宏观物质中所含分子的数目，因而用分子数去除该物质的总质量，便能求出每个分子的质量.当然在此以前道尔顿 (Dalton)的原子说成功地解释了通用于各种化学变化的许多定律，对原子和分子概念已有所区别。综合这两方面的研究成果即可确认：物质由数目有限的分子所构成;各个分子又可进一步分割成数个原子;一摩尔物质中包含的分子总数$N$总是一个恒量，即

$$N \simeq 6 \times 10^{23} \tag{1.1.1}$$

其中，$N$叫做阿伏伽德罗（Avogadro）数。这样一来，就不得不承认物质的单元性，即空间不连续地分布着原子和分子。在这个阶段，不但必须承认由于化学元素种类不同而有区别的数十种原子的存在，而且其质量之比亦非准确的整数比，所以并不能说一切物质的质量是单一的通用单位的整数倍。实际上，甚至在今天基本粒子阶段，这个问题亦尚未解决。再者，在上述的 19 世纪原

子论阶段，并不确切知道原子本身的空间限度。后面将详细论述，由于量子力学的出现，原子的限度已具有完全不同于经典物理学的含义，同时必须重新考虑物质的连续性和非连续性问题。

## §1.2 电量的单元性和电子的发现

在物质所具有的各种属性之中，电与前节所述的质量一样同物质密切相关。特别地，1833 年法拉第所发现的电解定律，如果从原子论的立场出发，就可以把它解释成各种元素的一个原子或分子在电解质中运送某一定量的电荷或该电荷的整数倍。此后电荷的单元性更加明显，到 1909 年密立根（Millikan）著名的油滴实验确认了电荷存在着最小单位，即**单元电荷** $e$。它的值为

$$e \simeq 4.8 \times 10^{-10}(g^{1/2} \cdot cm^{3/2} \cdot s^{-1})^{*}. \qquad (1.2.1)$$

尽管以后又作了很多实验，直到今日仍未发现有比它更小的电荷。因此，对假定存在 $e/3$ 或 $2e/3$ 的带电粒子的简单夸克模型来说，尚无充分的实验依据。

至于另一个与电有关，也同物质密切相连的性质——磁，情况则大相径庭。如本讲座《经典物理学》第二部分所述，在经典电动力学的基本方程中引入了电荷密度和电流密度，与此相反，却没有出现其对应的磁荷密度和磁流密度。这就意味着，**磁偶极子**（magnetic dipole）归根结底是由带电粒子所形成的电流引起的，而**磁单极子**（magnetic monopole）并不存在。此后这种看法一直为人们所接受。但是，几乎在量子力学出现的同时，发生了一次大的变动，即 1924 年乌伦贝克（Uhlenbeck）和高茨密特（Goudsmit）引入了电子**自旋**的概念。按经典物理学的解释，它是由带电粒子的自旋所产生的，但后面将要详细谈到，自旋是量子化的，而且，即使电子是没有大小的点粒子，也必须承认其自旋的存在。伴随着这

---

* $e = 1.6 \times 10^{-19}$C. ——译者注

种自旋，电子也成了一种具有固有**磁矩**的磁偶极子。这是用经典物理学的观点难以理解的电子的性质之一。

量子力学出现后，狄拉克（Dirac）曾暗示过磁单极子存在的可能性，但时至今日在实验上尚未获得任何证据。

话锋逆转，再回过头来谈一谈.众所周知，1897 年 J.J. 汤姆孙(Thomson)的实验已经确定了电子的存在.通过把电子看作带有负单元电荷$-e$ 和极小质量的微粒，就能解释广泛的电磁现象.如《经典物理学》第二部分 § 5.10 所述，在这种情况下，除质量随其速度而增大外，洛伦兹(Lorentz)电子论把电子同普通的经典力学粒子一样来对待。然而，正如以下各节反复阐述的那样，只有电子才是本质上具备量子力学特性的客体。尽管如此，后面还要论述经典电子论在各种情况下呈现出有效性的理由。

作为物质的基本属性，质量和电量间的一个本质差别在于，前者只限于正值，而后者却能取正负两种值。19 世纪后半叶，伴随着真空放电研究工作的进展，逐渐明确了带正电的粒子和带负电的粒子在性质上截然不同。也就是说，阴极射线的实体是上述带负电的电子，与此相反，阳极射线的实体却是质量远远大于电子的各种带正电的离子。在这个层次，正负电间明显的不对称性照样反映在下节所述的原子内部结构上。然而，在量子力学中，相对于粒子引入了**反粒子**的新概念，并且在实际上业已确认正电子和反质子这些反粒子的存在，而正负电荷的不对称性问题也应该以新的观点重新评价。进一步到了基本粒子层次，除带正电或负电的基本粒子外，尚须承认中子、中微子、中介子等种类繁多的电中性基本粒子的存在。这些将放在本讲座第十卷《基本粒子论》中详细叙述。

## § 1.3　作用量子的发现

如上节所述，19 世纪末叶发现了带负电的电子，而且还知道

它是构成一切物质的共同要素。这一点广泛地影响着此后物理学的发展。特别是，电子在质量上虽远远小于构成物质的其它带正电的粒子，但所起的作用却很大。即使和质量最小的带正电荷的氢离子（即质子）相比，电子的质量也只不过是它的 1/1840 左右，而其电荷的绝对值却相同，因此，电子将会受到电场和磁场的极大加速。但是，根据经典电动力学，被加速的带电粒子发射的电磁场强度与加速度的平方成正比。这样一来，若从微观立场出发研究各种电磁现象，电子的行为就具有特别重要的意义。洛伦兹经典电子论取得了极大成功便证明了这一点。其中，电子也好，电磁场也好，都是在经典物理学的框架中处理的。

1900 年普朗克的量子假说竟在这种情况下脱颖而出，实为惊人之举。在此之前的数年间，普朗克本人持续奋战，企图通过经典物理学来解决热辐射问题，但终究未能以纯理论的方式推导出与实验相一致的结果。要简洁地描述内中情况，极为困难。其主要原因在于热辐射现象本身的复杂性。概括而言，热辐射指的是红外线、可见光和紫外线之类的电磁辐射从高温物体中放射出来的现象。众所周知，一般，温度越高，辐射强度越大，与此同时所发射出的电磁波的波长总的来说也就越短。但是，如果打算定量地研究热辐射现象，就要指出物体是由什么样的物质构成的，因此很难推导出普遍性的规律。所以，抛开各种实际物体的特性，而假想出像黑体那样的理想物体。所谓黑体指的是能将入射到其表面上的辐射全部吸收，而毫无任何反射、透射或散射的物体。也就是说，入射的辐射能既能贮存于黑体之中，就能以另外的方式——一般以波长不同的辐射——再发射出去。我们假想这样的黑体能够存在，并在对一切波长的辐射均予以反射的理想的壁所围成的空腔中，置入一个小体积的黑体。略去详细的讨论，结论就是，假如在该空腔中黑体和辐射在绝对温度 $T$ 时达到热平衡状态，则在其中得以实现与黑体辐射等同的空腔辐射。那么，该空腔中任意点附近的单位体积内所包含的辐射能，可由电磁场的能量密度给出，即

$$U = \frac{1}{8\pi}(\boldsymbol{E}^2 + \boldsymbol{H}^2). \tag{1.3.1}$$

其中$\boldsymbol{E}$和$\boldsymbol{H}$分别是表示该点电场强度及磁场强度的矢量.但是,另一方面,如果把辐射看成是各种频率的电磁波的集合,而假设频率在$(\nu,\nu+d\nu)$之间的辐射能密度为$u_\nu d\nu$,则

$$U = \int_0^\infty u_\nu d\nu. \tag{1.3.2}$$

根据热力学第二定律,基尔霍夫(Kirchhoff)指出,$u_\nu$只是频率$\nu$及绝对温度$T$的函数,而与构成腔壁及黑体的物质无关。接着又认识到辐射的总能量密度$U$应当与$T$的四次方成正比,即有斯特藩-玻耳兹曼(Stefan-Boltzmann)定律

$$U = \sigma T^4. \tag{1.3.3}$$

进而,根据热力学及分子运动论方面的研究,维恩(Wien)断言黑体辐射的能量分布函数$u_\nu$与$\nu$及$T$的关系为

$$u_\nu(\nu,T) = \nu^3 f(\nu/T). \tag{1.3.4}$$

该表达式中$f(\nu/T)$的函数形式不能唯一确定。但若把能量分布看作频率$\nu$的函数,则其极大值$\nu_m$与绝对温度$T$成正比,这个关系与函数$f(\nu/T)$的取法无关.该维恩位移定律与实验完全一致.维恩特地把(1.3.4)中的函数半经验地选为

$$f(\nu/T) = \frac{\alpha}{c^2}\exp(-\beta\nu/T). \tag{1.3.5}$$

其中$c$是光速,$\alpha$与$\beta$是由实验来确定的常数。但是,使用这个函数以后,除了$\nu/T$非常大的情况之外,分布公式(1.3.4)与实验并不一致。

另一方面,由经典电动力学的角度来看,空腔辐射可以分解成各种方向、各种频率的电磁驻波。它们由于使构成黑体的物体内的多数电子产生频率相同的强迫振动而被吸收,与此相反,振动的电子又各自发出相同频率的电磁波来。而在物体内部,以各种频率振动的电子之间又自始至终进行着能量的交换。如果按照这种复杂的机理,辐射和物体所组成的整个系统在某一温度$T$达到热平衡时,辐射能密度的分布函数为

$$u_\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT d\nu, \tag{1.3.6}$$

这是从经典电动力学和经典统计力学得出的必然结论。它被称之谓瑞利-金斯（Rayleigh-Jeans）辐射公式，相当于在（1.3.4）式中把函数 $f$ 取成

$$f(\nu/T) = \frac{8\pi}{c^3}(T/\nu). \tag{1.3.7}$$

（1.3.6）式中的 $k$ 为玻耳兹曼常数

$$k = R/N \simeq 1.38 \times 10^{-16}(\mathrm{erg \cdot K^{-1}})^*, \tag{1.3.8}$$

$N$是阿伏伽德罗数，$R$表示 1 摩尔的气体常数。瑞利-金斯公式（1.3.6）与维恩公式（1.3.5）相反，在频率 $\nu$ 高的情况下，不仅与实验完全不一致，而且（1.3.2）式的总能量密度会变成无穷大的这一内在困难亦必不可免。

到了 1900 年普朗克研究出了在频率 $\nu$ 的整个范围内与陆末（Lummer）等人极其精密的实验相符合的公式

$$u_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{\exp(h\nu/kT) - 1}. \tag{1.3.9}$$

这就是众所周知的**普朗克辐射公式**。其中 $h$ 是具有**作用量**量纲的常数，称为普朗克常数，其值为

$$h \simeq 6.6 \times 10^{-27} \quad (\mathrm{erg \cdot s}). \tag{1.3.10}$$

不难看出，在 $\nu$ 值小的极限上普朗克公式(1.3.9)与瑞利-金斯公式相一致，而在 $\nu$ 值大的极限上则与维恩公式相一致。另外，把（1.3.9）式代入（1.3.2）式即可得出（1.3.3）式的斯特藩-玻耳兹曼定律，其中常数 $\sigma$ 就成了 $\sigma = 8\pi^5k^4/15c^3h^3$。从理论上来推导(1.3.9)式便作为重要的课题而被遗留下来。普朗克于同年 12 月，又在该方面获得成功，这是从经典物理学向量子论乃至量子力学所迈出的决定性的第一步。普朗克指出，只有以某种方式假定一种与经典物理学完全不相容的、性质崭新的非连续性，才能得出公式(1.3.9)。下面叙述一个最简单的推导方法，同其原始论文稍有

---

* 1 erg = $10^{-7}$J.——译者注

差异.

经典统计力学认为能量均分定律在各种情况下都是成立的. 例如由大量的同类分子所组成的气体在绝对温度 $T$ 处于热平衡状态. 在气体足够稀薄，而分子彼此间除偶尔碰撞外可以看成是独立运动的情况下，设第 $j$ 个分子的速度分量为 $v_{jx}, v_{jy}, v_{jz}$，则其动能为

$$\varepsilon_j = \frac{1}{2} m(v_{jx}^2 + v_{jy}^2 + v_{jz}^2). \tag{1.3.11}$$

这里 $m$ 是分子的质量. 此外，假设该分子具有能量 $\varepsilon_j$ 的概率按玻耳兹曼统计是与下式成正比的，即

$$\exp(-\varepsilon_j/kT), \tag{1.3.12}$$

那么，$\varepsilon_j$ 的平均值为

$$\bar{\varepsilon}_j = \iiint \varepsilon_j \exp(-\varepsilon_j/kT) dv_{jx} dv_{jy} dv_{jz} \Big/ \iiint \exp(-\varepsilon_j/kT)$$

$$\times dv_{jx} dv_{jy} dv_{jz} = \frac{3}{2} kT. \tag{1.3.13}$$

这说明无论哪一个分子平均起来都均衡地分配着 $(3/2)kT$ 的能量. 若气体分子总数为 $N$，则总能量就是

$$E = \sum_{j=1}^{N} \bar{\varepsilon}_j = \frac{3}{2} NkT, \tag{1.3.14}$$

更细分的话，就可以从 $x, y, z$ 三个方向来考虑各个分子的动能，而其平均值都等于 $(1/2)kT$. 故(1.3.14)式亦可改写成

$$E = \frac{1}{2} fkT. \tag{1.3.15}$$

式中 $f = 3N$，是 $N$ 个分子组成的体系的自由度，确切地说，是只考虑分子质心运动时的自由度. 换言之，(1.3.15) 式表明各个自由度平均起来分别分配到了 $(1/2)kT$ 的能量. 因此可以得到理想气体在体积不变时的比热为

$$C_v = \frac{dE}{dT} = \frac{3}{2} Nk. \tag{1.3.16}$$

对 1 摩尔的气体，$N$ 为阿伏伽德罗数，$Nk$ 为气体常数，所以

$$C_v = \frac{3}{2} R \simeq 3 \quad (\mathrm{cal} \cdot \mathrm{K}^{-1})^*, \tag{1.3.17}$$

它与已知的结果相一致.

其次，当把宏观经典力学体系看成是由大量的微观**谐振子**组成时，就一个周期而言，各振子的动能和势能的时间平均值相等. 因此，假设和上述自由运动的情况一样玻耳兹曼统计是成立的，那么振子各个自由度的平均能量就为 $kT$. 因而，假若把 1 摩尔的固体看成是$N$个谐振子的集合，在温度为$T$时，处于热平衡状态的固体，其振动的总能量为

$$E = 3NkT = 3RT, \tag{1.3.18}$$

比热为

$$C_v = 3R \simeq 6 \quad (\mathrm{cal} \cdot \mathrm{K}^{-1}). \tag{1.3.19}$$

这正是杜隆-珀蒂 (Dulong-Petit) 定律.

对空腔辐射进行与此相同的分析又将如何呢？一方面，因为构成黑体的物质内大量电子在电磁场中作各种频率的振动，所以把它看作振子的集合. 另一方面，如后面 § 1.5 详细叙述的那样，空腔中的辐射场是各种频率的电磁驻波的集合，也可以看成是由无数个具有不同频率的振子所组成的经典力学体系. 但是，对固体的机械振动来说，分子——或者原子、离子——的数目是有限的，与此相应作为力学系的自由度的数目也是有限的，总能量也只能取(1.3.18)式那样的有限值. 反之，空腔辐射的电磁驻波振动，其频率无论多大都可以，因而作为力学系的自由度也将无穷大. 当经典统计力学的均分定律尚能对此适用时所得到的，正好就是上述由瑞利-金斯给出的能量密度的表达式 (1.3.6)，把它对所有频率积分，其最终必然是总能量密度$U$变成无穷大的一个不合理的结论.

可是无论在自由运动的情况，还是在振动的情况，所谓能量均分定律都是在承认能量连续变化的大前提下作为 (1.3.13) 式的积

---

* 1 cal = 4.18J.—— 译者注

分结果而得到的. 普朗克针对谐振子的情况,舍弃了这个前提,代之而用的是假定能量 $\varepsilon$ 只限于作用量子 $h$ 与频率 $\nu$ 之积的整数倍,即

$$\varepsilon = nh\nu \quad (n = 0,1,2,\cdots), \tag{1.3.20}$$

可以说,这就是承认能量也存在着有限的单位,即存在**能量子** $h\nu$. 这样一来,假如照样承认玻耳兹曼统计,那么,取代 (1.3.11) 式,频率为 $\nu$ 的振子的平均能量就是

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon} &= \sum_{n=0}^{\infty} nh\nu \exp(-nh\nu/kT) \Big/ \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nh\nu/kT) \\ &= \frac{h\nu}{\exp(h\nu/kT) - 1}.\end{aligned} \tag{1.3.21}$$

如果把它再乘以单位体积的空腔内频率在 $(\nu, \nu + d\nu)$ 之间的振子数 $(8\pi\nu^2/c^3)d\nu$, 就可得到(1.3.9)的普朗克公式. 在这种情况下,能量通过 (1.3.20) 式被量子化了,而只取不连续值的振子到底是辐射本身还是黑体中电子的振动, 尚有讨论的余地. 这个问题将放到 § 1.5 再来研究.

总之,整个经典物理学的理论体系是在"自然界没有飞跃",即运动也好波动也好一般都是连续过程的大前提下建立起来的. 也就是说,物质粒子的位置和速度,电磁场的强度和方向, 总是随时间连续变化的. 虽然对原子那样的不变的客体和电荷那样总是守恒的物理量,非连续性均予认可,但这并不意味着自然规律在时间流逝过程中的非连续性.而且当电子的速度特别大时,甚至质量也会增大, 这依然可以看成是一种连续的变化. 普朗克在这种情况下提出了能量子, 的确是彻底动摇经典物理学的一个壮举. 这是因为, 电磁场 (或电子振动) 的能量只能取 $h\nu$ 这个单位的整数倍,本身就和电磁场 (或电子运动) 随时间连续变化的大前提完全矛盾. 当时普朗克本人也对这件事的重要性感到震惊, 据说他曾对自己的孩子讲过"我的发现几乎可以和牛顿的发现相提并论". 向经典物理学的汪洋大海投下的这颗石子到底会掀起多大的波浪,这个问题我们将在以下各节陆续介绍.

## §1.4 光的粒子说的复活

如前节所述，频率为 $\nu$ 的辐射能是量子化的，只能取 $h\nu$ 的整数倍 $nh\nu(n=0,1,2,\cdots)$. 这和经典电动力学的基本观点，即认为电磁场能量是连续变化的观点完全矛盾. 为回避这个矛盾，普朗克认为电磁场能量本身本来能取各种连续值，而当与构成黑体的物质之间进行能量交换时，其大小就只限于 $h\nu$ 的整数倍.对此，爱因斯坦在 1905 年研究了能量的起伏以后，明确指出普朗克公式(1.3.9)本身就显示了辐射的粒子性，从而与普朗克相反朝着光的粒子说复苏的方向迈进了一步. 如本讲座《经典物理学》第二部分详细叙述的那样，十九世纪是光的波动说的全盛时期，光被麦克斯韦尔划归为电磁波. 但是，同样在 1905 年，爱因斯坦一方面提出狭义相对论，否定了以太的存在，把光解释为在真空中连续传播的电磁波；另一方面，他又提出假说，认为物质发出频率为 $\nu$ 的光，其过程可以分解为微粒即**光量子**或**光子**飞出去的元过程，该微粒具有的能量为

$$\varepsilon = h\nu, \tag{1.4.1}$$

而光的吸收过程则可分解为光子飞进物质并遭到湮灭的元过程. 在某种意义上这个假说也使牛顿的光的粒子说得以复苏. 爱因斯坦之所以能从比较棘手的辐射的能量起伏问题入手向光的粒子说靠近，其原因之一在于它非常适合解释当时正在进行的各种**光电效应**的实验. 根据勒纳(Lenard)等人的实验，用光(或紫外线)照射金属表面时，逸出的电子的速度分布与光强无关，仅由光的频率确定. 而且，频率如果低于某确定值，无论光多强，都不会释放出电子. 但是，倘若根据光的波动说，则金属内的电子受光波(即电磁波)振幅的周期性作用而改变运动状态，所以光越强，电子获得的动能越大，最终将会脱出金属. 因此，这时的决定性因素是光强而不是频率. 这一点显然与上述实验相矛盾. 反之，假如按照光量子说，则金属内的电子每吸收一个具有(1.4.1)式所给出的能

量的光子，就会获得 $h\nu$。这时若 $\nu$ 足够大，以至 $h\nu$ 大于把电子从金属中取出所要做的功 $W$，那么电子定会逸出，并具有动能

$$E = h\nu - W. \tag{1.4.2}$$

这与上述实验结果完全一致。另外，当光非常弱时，按照波动说，电子要逸出金属，就应该花费相当长的时间去贮备必要的能量.但事实却与此相反，只要光一照射就会立刻产生光电效应。而按光量子说，电子一次即可获得光子能量 $h\nu$，这种现象将很容易得到解释。

要使光量子说更为完备，自然还应附加一个假定，即光子具有动量，其大小为

$$p = h\nu/c = h/\lambda, \tag{1.4.3}$$

其方向与光的传播方向相一致。这里 $\lambda = c/\nu$，表示光的波长.与经典电动力学中由 (1.3.1) 式给出的电磁场能量密度 $U$ 相对应，动量密度应由坡印亭 (Poynting) 矢量给出，即

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{c}[\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}]. \tag{1.4.4}$$

对平面波来说，$\boldsymbol{S}$ 的大小等于 $U/c$，其方向与波的前进方向相一致。从光的粒子说角度再来考虑这一点，正好就是 (1.4.3) 式。很久以后，在 1923 年发现的**康普顿** (Compton) **效应**则是这个假说既直接而又明确的证据。康普顿发现，石墨那样的物质散射 X 射线，其波长 $\lambda'$ 比原来的波长 $\lambda$ 稍长，二者的关系是

$$\lambda' - \lambda = 0.024 \times 10^{-8} \times (1 - \cos\phi) \quad (\text{cm}). \tag{1.4.5}$$

如图 1.1 所示，$\phi$ 是被散射的X射线相对于入射的X射线的散射角。康普顿和德拜 (Debye) 认为，这是由于构成入射的X射线的光子与石墨中的电子弹性碰撞的结果。设入射的X射线的频率为 $\nu$，因石墨中电子的结合能远小于光子的能量 $h\nu$，故可将其看成自由电子，假设电子最初是静止的，则由相对论可知其能量为 $mc^2$。这里

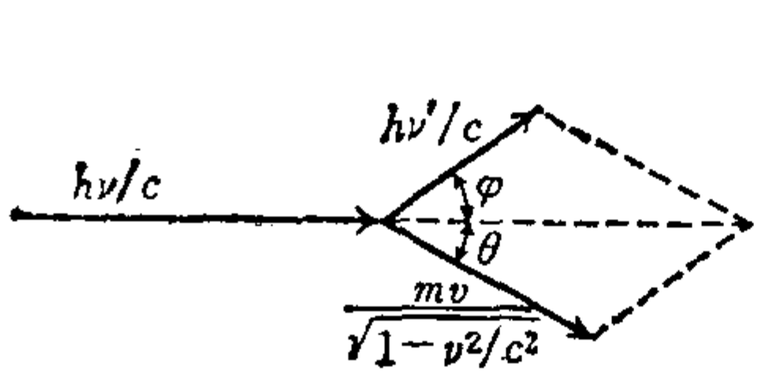



图 1.1　康普顿效应

$m$是电子的静止质量,其值

$$m = 0.91 \times 10^{-27} \quad (\mathrm{g}). \tag{1.4.6}$$

设散射出去的X射线的频率为 $\nu'$, $h\nu'$ 就构成该射线的光子的能量. 如果碰撞后跑出来的反冲电子的速度为 $v$, 则其相对论能量就是 $mc^2/\sqrt{1-v^2/c^2}$,所以,根据能量守恒定律,可以写成

$$h\nu + mc^2 = h\nu^1 + mc^2/\sqrt{1-v^2/c^2}. \tag{1.4.7}$$

其次,入射光子及散射光子动量的大小分别为 $h\nu/c$ 和 $h\nu'/c$, 根据相对论,反冲电子动量的大小就是 $mv\sqrt{1-v^2/c^2}$,因而如图1.1 所示,假设相对于入射方向光子以$\varphi$ 角出射,电子以$\theta$ 角出射,则动量守恒定律就可以用下列两式表达:

$$\left.\begin{aligned} h\nu/c &= (h\nu'/c)\cos\phi + (mv\sqrt{1-v^2/c^2})\cos\theta \\ (h\nu'/c)\sin\phi &= (mv/\sqrt{1-v^2/c^2})\sin\theta \end{aligned}\right\}. \tag{1.4.8}$$

从 (1.4.7) 式和 (1.4.8) 式中消去 $v$ 和$\theta$, 可以得到

$$\lambda' - \lambda = (c/\nu') - (c/\nu) = (h/mc)(1-\cos\varphi). \tag{1.4.9}$$

此式不仅与(1.4.5)式形式相同, 而且当代入实际的 $m,h,c$ 的值时, 甚至系数也完全一致.

这样, 根据光的量子说能够轻而易举地解释康普顿效应. 反之,用经典电动力学则完全不能理解. 因为,若认为入射的X射线是电磁波,那么电场强度矢量与入射方向垂直,电子也在该方向上振动. 但是,由于电子的振动频率与入射波的频率相同,故以振动电子为中心向四周扩展的散射波的频率也应该与 $\nu$ 相同. 这和上述实验结果完全矛盾.

此外, 玻瑟 (Bothe) 和盖革 (Geiger) 在其后的实验中证明散射光子和反冲电子是同时产生的;进而,康普顿和西蒙 (Simon) 又通过实验确认, 它们的出射方向与 (1.4.7) 式和 (1.4.8) 式所确定的方向完全一致. 这样,一方面光的粒子性已毋庸置疑;而另一方面光与X射线的干涉和衍射之类的现象又非常明确地表明它具有波动性. 这样光就兼有粒子和波动这两种相互矛盾的特性. 对经典物理学来讲,这是个难解之谜. 在那里,粒子是"物", 波是现

象，也就是“事”。光只能是其中之一。而 (1.4.1) 式和 (1.4.3) 式恰恰表明了二者的奇妙关系。

## § 1.5 周期运动的量子条件

鉴于上述情况，在 1911 年召开的国际介质会议上，普朗克提出了如下的看法：光作为电磁波在空间传播的过程，必须认为始终是连续的，否则无论如何都不能解释干涉和衍射现象。但当它被物质吸收或从物质中放出时，却可以认为光的能量只取 $h\nu$ 的整数倍那样的不连续值。于是，即使在空腔辐射的情况下，当空腔中的黑体和光相互作用时也只会发生不连续的变化。其原因可归结为黑体内电子振动能量的量子化。如果这样认为，则 § 1.3 中平均能量 $\varepsilon$ 的表达式 (1.3.21) 本身就意味着频率为 $\nu$ 的谐振电子的平均能量。然而，通过这样分析同样会导出普朗克公式(1.3.9)。这是因为与黑体同处于热平衡状态的辐射，作为频率为 $\nu$ 的驻波，平均而言理应具有相同的能量 $\varepsilon$。以上所谈，实际上忠实地再现了普朗克 1900 年所作的论述。

普朗克又研究了把谐振子看作经典体系时，对其运动加以何等限制方能得出 (1.3.20) 式所表示的能量条件。从经典力学的正则形式出发，一维谐振子的运动方程可以写成

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad \frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}. \tag{1.5.1}$$

式中 $H$ 是哈密顿 (Hamilton) 函数，其形式为

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + 2\pi^2 m\nu^2 q^2, \tag{1.5.2}$$

$q$ 和 $p$ 分别表示振子的位置坐标及其共轭动量，而 $m$ 为振子质量，$\nu$ 为频率，(1.5.1) 的通解是

$$\left.\begin{aligned} q &= a\sin[2\pi\nu(t-t_0)] \\ p &= b\cos[2\pi\nu(t-t_0)] \end{aligned}\right\}, \tag{1.5.3}$$

式中 $a, b, t_0$ 为积分常数，$a$ 与 $b$ 的关系是

$$b = 2\pi m\nu a. \tag{1.5.4}$$

如图 1.2 所示，若取 $q$ 为横轴，$p$ 为纵轴，而用 $(q,p)$平面上（即两维相空间内）的点来表示振子的运动状态。那么随着时间 $t$ 的推移，该点就描绘出以 $a$ 和 $b$ （若 $a>b$）为长轴和短轴——若 $a<b$，则为短轴和长轴——的椭圆形轨道。例如在 $t=t_0$ 时刻，该点是 $p$ 轴上的点 P，则此后按顺时针方向经 Q，R,S 又回到原来的 P 点，而且反复进行同样的运动。这时振子的能量为

$$E = H(p,q) = \frac{1}{2m} b^2\cos^2[2\pi\nu(t-t_0)] + 2\pi^2 m\nu^2 a^2\sin^2[2\pi\nu(t-t_0)]. \tag{1.5.5}$$

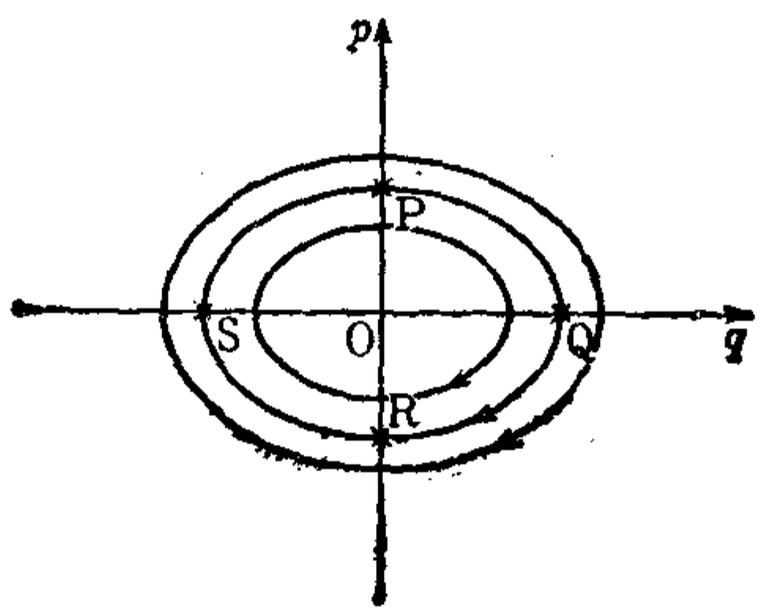



图 1.2　相空间中谐振子的运动

将 (1.5.4) 式代入后便得到

$$E = \pi ab\nu. \tag{1.5.6}$$

根据普朗克的假设，振子能量只能取不连续值

$$E = nh\nu \quad (n = 0,1,2,3\cdots), \tag{1.5.7}$$

把它与 (1.5.6) 式比较，则得

$$\pi ab = nh. \tag{1.5.8}$$

此式左边代表椭圆所围成的面积，因此如图1.2所示，当 $n=0$ 时，椭圆收缩为原点 $O$，这意味着完全没有振动。$n=1$ 时是里侧的第一个椭圆，其面积恰好为 $h$，依此类推，根据**量子条件** (1.5.8) 就会相继得出更大的椭圆。这个条件也可写成

$$\oint pdq = nh \quad (n = 0,1,2,\cdots). \tag{1.5.9}$$

式中左边的积分是按顺时针方向对椭圆一周所取的曲线积分。

这样一来，从经典力学所允许的一切轨道中，选出了为量子论所允许的一些不连续轨道。对其所满足的条件（1.5.9）亦可作如下的少许改动。即，在相平面上面积为

$$\oint\oint dpdq = h \tag{1.5.10}$$

的范围内，假定只能存在一个轨道。于是上述量子条件(1.5.9)就成了它的特殊情况。一般来说可以取成

$$\oint pdq = (n+\delta)h \quad (n = 0,1,2\cdots). \tag{1.5.11}$$

式中 $\delta$ 代表 0 与 1 之间的一个常数。实际上如下所述，量子力学中存在 $\delta = 1/2$ 的情况，把量子条件写成（1.5.10）的形式，就不难按统计力学的观点将其普遍化。其原因在于，按照经典力学的刘维尔（Liouville）定理，即使各点依照运动方程在运动着，无数点的集合在相空间所占的体积也不会随时间变化，因此就可以假定，自由度为 $f$ 的经典力学体系，在每个

$$\int\cdots\int_{2f} dq_1\cdots dq_f dp_1\cdots dp_f = h^f \tag{1.5.12}$$

的体积中，量子论所允许的运动状态只有一个。从经典统计力学过渡到下述的量子统计力学，这是其中间阶段的量子化方法。

下面略转话题，年代顺序暂不顾及。1910 年德拜把空腔辐射当作经典力学谐振子的集合，并使用适合于量子论的手法进行处理。为此，首先把真空中电磁场的麦克斯韦尔方程组

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{curl}\boldsymbol{H} - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = 0,\ \mathrm{div}\boldsymbol{E} = 0 \\ \mathrm{curl}\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial t} = 0,\ \mathrm{div}\boldsymbol{H} = 0 \end{aligned}\right\} \tag{1.5.13}$$

利用关系式

$$\boldsymbol{H} = \mathrm{curl}\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{E} = -\mathrm{grad}A_0 - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{1.5.14}$$

改写成有关电磁势 $A_0, \boldsymbol{A}$ 的方程，从而得到

$$\left.\begin{aligned}\left(\Delta-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)A_0=0\\ \left(\Delta-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)A=0\end{aligned}\right\}. \tag{1.5.15}$$

其中 $A_0$ 和 $\boldsymbol{A}$ 满足洛伦兹条件

$$\frac{1}{c}\frac{\partial A_0}{\partial t}+\mathrm{div}\boldsymbol{A}=0. \tag{1.5.16}$$

然而，即使给出 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$，$A_0$ 和$\boldsymbol{A}$也不能唯一确定．这是因为，若 $\Lambda(x,y,z,t)$ 是满足达朗贝尔（D'Alembert）方程

$$\left(\Delta-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\Lambda=0 \tag{1.5.17}$$

的任意函数，那么根据

$$A_0'=A_0-\frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t},\ \boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\frac{1}{c}\,\mathrm{grad}\Lambda \tag{1.5.18}$$

及关系式(1.5.14)，也能得出相同的 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$．因此适当选择 $\Lambda$，可使 $A_0'=0$．若把此时的 $\boldsymbol{A}'$ 改写为 $\boldsymbol{A}$，则(1.5.14)式变为

$$\boldsymbol{H}=\mathrm{curl}\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}. \tag{1.5.19}$$

考虑边长为 $L$ 的立方体内的空腔辐射，$\boldsymbol{A}$就可以展开为

$$\boldsymbol{A}=\sum_{\lambda}q_\lambda(t)\boldsymbol{A}_\lambda(\boldsymbol{r}). \tag{1.5.20}$$

其中 $\boldsymbol{A}_\lambda$ 满足

$$\Delta\boldsymbol{A}_\lambda+\frac{4\pi^2\nu_\lambda^2}{c^2}\boldsymbol{A}_\lambda=0,\quad \mathrm{div}\boldsymbol{A}_\lambda=0, \tag{1.5.21}$$

其分量是以 $L$ 为周期的 $x,y,z$ 的周期函数．把（1.5.20）式代入（1.5.15）式中的$\boldsymbol{A}$，则得

$$\frac{d^2q_\lambda}{dt^2}+4\pi^2\nu_\lambda^2q_\lambda=0, \tag{1.5.22}$$

因此，$\nu_\lambda$ 就该与频率相对应．在展开式(1.5.20)中包含有无穷多项（$\lambda=1,2,\cdots$），而作为 $\boldsymbol{A}_\lambda(\lambda=1,2,\cdots)$ 这样的函数系列，可以选成

$$\left.\begin{aligned}&\sqrt{8\pi c^2/L^3}\ \boldsymbol{e}_\lambda \cos(2\pi \boldsymbol{k}_\lambda \cdot \boldsymbol{r})\\&\sqrt{8\pi c^2/L^3}\ \boldsymbol{e}_\lambda \sin(2\pi \boldsymbol{k}_\lambda \cdot \boldsymbol{r})\end{aligned}\right\}\ (\lambda = 1,2,\cdots)。\quad (1.5.23)$$

此处波矢 $\boldsymbol{k}_\lambda$ 的绝对值 $k_\lambda$ 与 $\nu_\lambda$ 的关系是

$$k_\lambda = \nu_\lambda / c \quad (\lambda = 1,2,\cdots),\qquad (1.5.24)$$

$\boldsymbol{k}_\lambda$ 的分量只能取下列各值:

$$k_{\lambda x} = n_{\lambda x}/L, k_{\lambda y} = n_{\lambda y}/L, k_{\lambda z} = n_{\lambda z}/L。\qquad (1.5.25)$$

此处 $n_{\lambda x}, n_{\lambda y}, n_{\lambda z}$ 可以是 0 或任意的整数,不过 $(n_{\lambda x}, n_{\lambda y}, n_{\lambda z})$ 和 $(-n_{\lambda x}, -n_{\lambda y} - n_{\lambda z})$ 却给出相同的函数 $\boldsymbol{A}_\lambda$, 所以若取其中一个,另一个就必须省去。$\boldsymbol{e}_\lambda$ 是垂直于 $\boldsymbol{k}_\lambda$ 的单位矢量,而且要选得两两之间互相垂直。于是全部 $\boldsymbol{A}_\lambda(\lambda = 1,2,\cdots)$ 就形成本征振动的本征函数的完备系。若对整个空腔进行体积分,则有

$$\iiint \boldsymbol{A}_\lambda \boldsymbol{A}_\mu dxdydz = 4\pi c^2 \delta_{\lambda\mu}。\qquad (1.5.26)$$

其中当 $\lambda = \mu$ 时, $\delta_{\lambda\mu} = 1$; 当 $\lambda \neq \mu$ 时, $\delta_{\mu\lambda} = 0$。

(1.5.22)式是确定本征振动的振幅 $q_\lambda(t)$ 随时间变化的方程,但也可以把它看成是谐振子的运动方程。也就是说,如果取 $q_\lambda$ 的正则共轭动量为 $p_\lambda$, 哈密顿函数为

$$H = \frac{1}{2} p_i^2 + 2\pi^2 \nu_i^2 q_\lambda^2,\qquad (1.5.27)$$

那么, 从正则运动方程 (1.5.1) 就能直接得出 $dq_\lambda/dt = p_\lambda$ 及 (1.5.22) 式。若应用质点振动时的量子条件 (1.5.9), 则该振子的能量就变成 (1.5.7) 式。

这样, 空腔辐射可以看成是与无限多种本征振动中的每一个相对应的谐振子的集合。于是频率为 $\nu$ 的振子会具有能量 $nh\nu$ ($n = 0,1,2\cdots$)。也可以认为它是由 $n$ 个能量子 $h\nu$ 组成的。如果考虑一个边长为 $L$ 的立方体空腔, 则当 $\Delta\nu$ 远小于 $\nu$ 时, 其频率在 $\nu$ 和 $\nu + \Delta\nu$ 之间的本征振动的个数为

$$\frac{8\pi\nu^2 L^3}{c^3}\Delta\nu = 8\pi\left(\frac{L}{\lambda}\right)^3 \frac{\Delta\nu}{\nu}。\qquad (1.5.28)$$

此处 $\lambda = c/\nu$ 为波长。若 $\lambda$ 比 $L$ 小, 那么即使 $\Delta\nu$ 取得远小于

$\nu$,(1.5.28)也是一个相当大的数。因此,频率各自划分为在下列范围内的本征振动:

$$(\nu_1,\nu_1+\Delta\nu_1=\nu_2),(\nu_2,\nu_2+\Delta\nu_2=\nu_3),\cdots. \tag{1.5.29}$$

换句话说,能量可细分成下列范围内的振子的能量子:

$$(\varepsilon_1,\varepsilon_1+\Delta\varepsilon_1=\varepsilon_2),(\varepsilon_2,\varepsilon_2+\Delta\varepsilon_2=\varepsilon_3),\cdots. \tag{1.5.30}$$

此处

$$\varepsilon_j=h\nu_j \quad (j=1,2,\cdots). \tag{1.5.31}$$

于是,根据(1.5.28)式,第 $j$ 个能量范围内振子的个数为

$$N_j=\frac{8\pi\nu^2L^3}{c^3}\Delta\nu_j \quad (j=1,2,\cdots). \tag{1.5.32}$$

而在这些范围内实际存在的能量子的数目为 $n_j(j=1,2,\cdots)$,要实现这种分布的方式,其总数显然为

$$P=\prod_j\frac{(N_j+n_j-1)!}{n_j!(N_j-1)!}. \tag{1.5.33}$$

那么,在振子集合的总能量(可以证明,它正好就是空腔内量子化了的电磁场的总能量)

$$E=\sum_j\varepsilon_jn_j \tag{1.5.34}$$

为常数的条件下,我们来求 $P$ 或 $\log P$ 取最大值时的分布。令 $\beta$ 为待定系数,对 $n_j$ 的任意变分 $\delta n_j$,它必须满足

$$\delta(\log P)-\beta\delta_E=0, \tag{1.5.35}$$

即

$$\sum_j\delta n_j\left(\frac{\partial(\log P)}{\partial n_j}-\beta\varepsilon_j\right)=0. \tag{1.5.36}$$

当 $n$ 为足够大的整数时,下式近似成立:

$$\log(n!)=n\log n-n. \tag{1.5.37}$$

所以如果将此式代入(1.5.33)式,求出(1.5.36)式对任意变分 $\delta n_j$ 均成立的条件,则可得到

$$\log\{(N_j+n_j)/n_j\}-\beta\varepsilon_j=0, \tag{1.5.38}$$

或

$$n_i = \frac{N_i}{\exp(\beta E_i) - 1}. \tag{1.5.39}$$

于是，根据 (1.5.31) 式及 (1.5.32) 式，频率在 $(\nu, \nu + d\nu)$ 范围内的能量子个数为

$$\frac{8\pi\nu^2 L^3}{c^3} \frac{d\nu}{\exp(\beta h\nu) - 1}. \tag{1.5.40}$$

因为在 $\nu$ 小的极限上，它将重现经典的瑞利-金斯分布 (1.3.6)，故可得出 $\beta = kT$。 若表达式 (1.5.40) 乘以能量子 $h\nu$，则可再现 $L = 1$ 时空腔辐射能量密度分布的普朗克公式 (1.3.9)。

至此，可以说，按电磁波的观点对光所作的研究与前节所述的爱因斯坦流派的光量子说之间的差距已大大缩小。而且，若用行波代替上述驻波，并将其各自归结为光量子，则用同样的方法仍可推导出作为光量子集合的能量分布的普朗克公式。

## § 1.6 原子结构和量子论

前几节主要讨论了为明确解释黑体辐射问题而提出的自然现象的非连续性。它以作用量子 $h$、能量子 $h\nu$ 或光子为标志。这样一来，很多其它现象之中并不引人注目的非连续性也就一点一点地显露出来。例如，1905 年爱因斯坦假定固体的振动同普朗克谐振子一样是量子化的，并以此说明了在低温时固体的比热较杜隆-珀蒂定律 (1.3.19) 所给出的值要小。 此后，德拜、玻恩-卡尔曼 (Karmán) 等人考虑了固体各种形式的本征振动，求出比热的一般表达式，并取得了和实验完全一致的结果。

量子论的下一个重大进展，是由于玻尔 (Bohr) 原子结构理论所取得的成功引起的。直到 19 世纪末叶，人们一直采用经典物理学的观点对原子结构进行各种各样的研究。然而，以明确的形式提出原子模型还是进入 20 世纪以后的事。其中之一就是 J.J. 汤姆孙 1903 年所提出的原子模型。 按照这种模型，带负电的电子在正电荷均匀分布的球内转动。因为电子像三维谐振子那

样动作，所以不管振幅大小如何，其辐射出的谱线都应具有一定的频率。这一点虽能恰当解释原子具有特殊的明线光谱，但却不能说明氢及其它元素实际的光谱线系。另外，带正电的球体各部分之间有斥力作用，因而也难以说明如何维持稳定的问题。对此，长冈在同一年提出，在原子的中心有质量很大的带正电的粒子，电子排列在它的周围，作为一个整体能够形成稳定的体系。这个模型是下述卢瑟福（Rutherford）模型的先驱。众所周知，为了解释放射性元素发出的 $\alpha$ 射线由于各种不同原子的作用有时会以很大角度散射的现象，1911 年卢瑟福提出了一种原子模型。按照这个模型，原子中除包含 Z 个电子外，集中在中心的**原子核**具有 Z 个正电荷和几乎全部的原子质量。Z 为原子序数，取整数。因为可以断定原子核及电子比整个原子的大小要小得多，所以 Z 个电子相互间的平均距离远大于电子本身的半径。因此，如同太阳和行星那样，以原子核为中心，电子在某种程度上独立地连续作周期运动。其中电子之间的库仑斥力同原子核和电子之间的库仑引力之比为 $1/Z$，一般大于行星之间的引力同太阳和行星之间的引力之比 $m/M$。因此，电子的轨道是与椭圆差别相当大的复杂的轨道。只是对氢原子而言才可以认为是在作如下所述的那种简单的椭圆运动。研究该模型到底在什么意义上正确，在什么意义上不正确之前，先要说明这种原子模型中所出现的正负电荷与质量之间的关系是非对称的。直到已经发觉了存在着各种各样的基本粒子之后，该非对称性亦依然保留下来。但是，通过在量子力学中引入与粒子相反的反粒子的概念，就能够相对于普通的物质世界而设想出在其中正负电荷彼此替换了的反物质世界。因此，同时考虑物质和反物质，也可以说就是恢复了正负电荷的对称性。

卢瑟福原子模型虽与太阳系相似，但最大的差异在于它的不稳定性。如果经典电子论能适用于电子的运动，那么电子一定会向四周辐射出周期与运动周期——其倒数为频率——相同的电磁波，其结果，电子的能量逐渐减小，运动轨道亦随之向原子核收缩，从而电子的运动周期变短，辐射的光的频率将会增大。这一方面

说明，原子发出的光谱线范围应极宽，而和各元素发出的光分别形成具有特定波长的线光谱系的事实相矛盾；另一方面，由于电子越来越靠近原子核，势必难免落入核中，因而对原子非常稳定地存在着这一明显事实亦不能自圆其说。

在这些方面，虽然汤姆孙模型更为优越，但却和原子核的存在这一确切事实相矛盾，而且对说明下述有关原子光谱线系的经验定律亦完全无能为力。也就是说，1885 年巴耳末 (Balmer) 发现，当氢光谱线系的波长为 $\lambda_3,\lambda_4,\cdots$时，下列经验定律成立：

$$\frac{1}{\lambda_n} = R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (n = 3,4,\cdots). \tag{1.6.1}$$

其中 $R$ 叫做里德伯 (Rydberg) 常量，其值约为

$$R \simeq 1.1 \times 10^5 \quad (\mathrm{cm}^{-1}). \tag{1.6.2}$$

进而，里德伯提出，很多元素的光谱线系可近似表示为

$$\frac{1}{\lambda_n} = A - \frac{R}{(n+\alpha)^2}. \tag{1.6.3}$$

其中 $n$ 为正整数，$A$ 与 $\alpha$ 是因线系而异的常数。里兹 (Ritz) 提出更一般的关系是

$$\frac{1}{\lambda} = F_r(n_1) - F_s(n_2). \tag{1.6.4}$$

$n_1,n_2$ 为整数，而

$$F_r(n) = R/(n+d_r)^2. \tag{1.6.5}$$

(1.6.3)式或 (1.6.4) 式作为特例包含着巴尔末定律(1.6.1)。然而，原子谱线的频率 $\nu = c/n$ 却以 (1.6.4) 或 (1.6.5) 那样两项之差的形式来表示，这个普通事实用经典电子论无论如何都不能解释。其原因在于，按经典电子论，假设电子周期运动的频率为 $\nu_1$，那么，其座标作为时间函数进行傅里叶 (Fourier) 级数展开，所得高次谐波的频率仅限于 $\nu_n = n\nu_1$ $(n = 1,2,\cdots)$，它们所发出的光的频率也必须与之相同。其中并不包含 (1.6.4) 式所给出的频率。

为克服这些基本困难，1913 年玻尔按如下顺序开创了新的理论。首先，是把普朗克的量子条件 (1.5.9) 用于氢原子内的电子运

动。此时 $Z=1$，电子只有一个，所以它在原子核的库仑势 $(-e^2/r)$ 中一般应描绘一个椭圆轨道。这儿，$r$ 表示原子核与电子之间的距离。作为特殊情况，先来考虑最简单的圆周运动，假设轨道半径为 $a$，旋转角速度为 $\omega$，那么核引力和离心力平衡的条件就是

$$e^2/a^2 = ma\omega^2. \tag{1.6.6}$$

若旋转角为 $\theta$，轨道弧长为 $q$，动量为 $p$，则

$$q = a\theta, \quad p = ma\frac{d\theta}{dt} = ma\omega, \tag{1.6.7}$$

所以，沿着圆周对 (1.5.9) 积分，即可得出

$$2\pi ma^2\omega = nh \quad (n = 1,2,\cdots). \tag{1.6.8}$$

其中 $n=0$ 的情况与电子落入原子核的状态相对应，故不在此列。从式 (1.6.6) 和 (1.6.8) 得出圆周轨道的可能半径为

$$a_n = n^2/h^2/4\pi^2e^2m \quad (n = 1,2,\cdots), \tag{1.6.9}$$

与之对应的角速度是

$$\omega_n = 8\pi^3e^4m/n^3h^3 \quad (n = 1,2,\cdots). \tag{1.6.10}$$

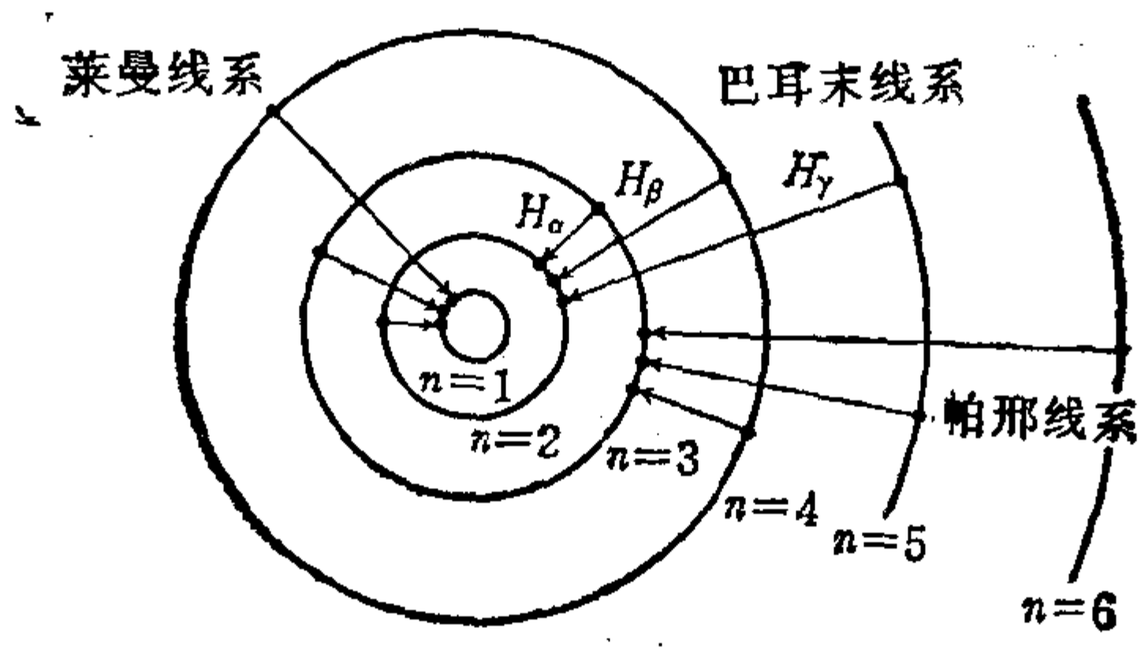



图 1.3 氢原子的圆周轨道和光谱线系

如图 1.3 所示，这意味着电子的运动是量子化的，电子在对应于 $n=1,2,\cdots$ 的某个不连续的圆周轨道上运动。这些圆的半径以 $1^2:2^2:3^2:\cdots$ 的比率增大，最内侧的圆周轨道半径为

$$a_1 = h^2/4\pi^2e^2m = 5.28\times10^{-9} \quad (\text{cm}). \tag{1.6.11}$$

根据 (1.6.9) 及 (1.6.10) 式，在这些轨道上电子的能量分别取离散值

$$W_n = \frac{1}{2} m(a_n\omega_n)^2 - \frac{e^2}{a_n} = -\frac{2\pi^2 e^4 m}{n^2 h^2} \quad (n = 1,2,\cdots). \tag{1.6.12}$$

然而，如反复谈到的那样，按照经典电子论，这些轨道上的电子发出其周期与运动周期相等的电磁波，能量理应连续损失，这是经典物理学原子模型共同的难点所在.因此，玻尔除量子条件外又进一步提出以下的新概念和新条件，从而克服了经典模型的困难，同时也解释了上述巴耳末、里德伯和里兹的经验规律. 也就是说，他首先认为，在不连续辐射电磁波的意义上，无论处于哪个量子化轨道上的电子均处于定态，只有在由某一定态向另一定态不连续地跃迁时，才吸收或放出辐射能量. 因此，若初态电子能量 $W_n$ 比末态能量 $W_f$ 大，则会发出频率为 $\nu$ 的光，其频率条件为

$$h\nu = W_n - W_f. \tag{1.6.13}$$

相反吸收该频率的光，电子就能从能量为 $W_f$ 的状态移到能量为 $W_n$ 的状态. 如果采用这种全新的假定，那么，氢原子发出的光确实是清晰的线光谱系. 但是，其周期却与电子运动的周期有所差别，用频率来表示，那就是

$$\nu = \frac{2\pi^2 e^4 m}{h^3}\left(\frac{1}{f^2} - \frac{1}{n^2}\right). \tag{1.6.14}$$

这里 $f = 1, 2, \cdots, n = f+1, f+2, \cdots$. 把此式与经验公式 (1.6.1) 相比较，假如取 $f = 2, n = 3, 4, \cdots$

$$R = \frac{2\pi^2 e^4 m}{h^3 c} \tag{1.6.15}$$

则可得出巴耳末线系. 实际上若把常数 $e, m, h$ 和 $c$ 的值代入 (1.6.15) 式，则里德伯常数的值就与 (1.6.2) 式完全一致. 巴耳末线系对应于可见光范围中的 $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma \cdots$ 等谱线. 而取 $f = 1$，可得紫外区的莱曼 (Lyman) 线系；取 $f = 3$，则得红外区的帕邢 (Paschen) 线系 (参看图 1.3).

这样，通过引入定态的概念，就使卢瑟福模型所欠缺的元素的稳定性得以复苏. 因为，当电子处于 $n = 1$ 的最低能态，即基

态时，业已无须担心由于辐射而引起能量损失。如果不从外界吸收能量，它就永远持续不断地进行圆周运动。这样，作为自然现象过程的非连续性象征的作用量子 $h$，显然又同时是防止原子毁灭，保证物质世界稳定的支柱。

到了 1914 年，弗兰克（Frank）和赫兹（Hertz）通过电子碰撞实验为量子条件和频率条件的合理性提供了直接的证据。在实验中，让电子与水银蒸气碰撞，当电子上所加的电压 $V$ 达到

$$eV = h\nu \tag{1.6.16}$$

时，水银原子便开始辐射频率为 $\nu$ 的谱线，这首先说明当碰撞的电子其能量 $eV$ 小于 $h\nu$ 时，水银原子的状态不会发生变化，换句话说，在基态和下一个最低的**激发态**之间存在一定的能量间隔。其次，它说明该能量差转变为满足频率条件 (1.6.13) 的光能。

此后，玻尔、索末菲（Sommerfeld）、威尔逊（Wilson）、石原等人试图将上述基本假定向不同的方面予以推广。首先，通过把量子条件推广到两个或两个以上自由度的力学系的周期运动，即所谓的**多重周期运动**中去，成功地进行了椭圆轨道的量子化。这时，除(1.6.12)式中出现的所谓**主量子数** $n$ 以外，又开始引进了**角量子数** $l$ 和**磁量子数** $m$。它们只能取整数值

$$l = 1,2,\cdots,n; m = -l,-l+1,\cdots,l-1,l. \tag{1.6.17}$$

把这种分析应用于氢以外的原子，就能解释各种元素发射的谱线的一般特征，并为里德伯和里兹的经验规律提供理论依据。另外，假设在原子序数为 $Z$ 的原子中，$Z$ 个电子从最低能级开始依次占据定态，则元素的各种物理、化学性质就会随 $Z$ 发生周期性的变化，从而成功地解释了元素的周期律。为此，有必要加进**自旋量子数**的概念及**不相容原理**，前者来自 § 1.2 所提到的电子自旋，后者则于 1925 年由泡利(Pauli)提出。不相容原理指出，在同一轨道，也就是在量子数 $(n,l,m)$ 相同而且自旋的方向也相同的状态中，只能容纳一个电子。

## §1.7 量子力学的开端

从经典力学到量子力学的第三个飞跃，而且也是最后一个大的飞跃，几乎同时在两个方面进行．一方面以德布罗意（de Broglie）和薛定谔（Schrödinger）为代表，另一方面以海森伯（Heisenberg）为代表．本节将首先论述与前节的玻尔理论密切关连的海森伯理论．按照经典电动力学，电子在力的中心附近以 $T$ 为周期作周期运动，为简单起见，只考虑 $x$ 方向的坐标，并假设为 $q(t)$，那么作为时间 $t$ 的函数，可以将它表示成傅里叶展开的形式

$$q(t)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}c_n\exp(2\pi invt)。\tag{1.7.1}$$

其中 $v=1/T$，$x$ 是实数，所以 $c_n$ 和 $c_{-n}$ 必须互为复共轭数．若对该电子单位时间内的辐射能就一个周期取平均，即可得出

$$\frac{2e^2}{3c^3}\overline{\left(\frac{d^2q}{dt^2}\right)^2}。\tag{1.7.2}$$

将 (1.7.1) 式代入，则在 (1.7.2) 式中频率为 $nv(n=1,2,\cdots)$ 的辐射能显然就是

$$\frac{4e^2}{3c^2}|c_n|^2(2\pi nv)^4。\tag{1.7.3}$$

但是，另一方面，量子论认为原子所辐射的光的频率由 (1.6.13) 式的条件来确定，所以一般来讲，它并非电子的运动频率 $v$ 或其整数倍．而且，就光的发射或吸收的机理而言，也采取了与经典电动力学完全不同的观点．量子论认为，伴随着电子从一个轨道向另一个轨道的跃迁，会产生或湮没大小有限的光能．用普朗克热辐射理论分析谐振子时，其频率与光的频率恰好一致，而且频率不随振幅而变化，因而量子论与经典理论的矛盾尚未明显暴露．也正是出于同样的理由，经典的汤姆孙原子模型和量子模型方得以具有某种相似性．

1916 年爱因斯坦摒弃了经典理论，而认为轨道间的量子跃迁

已经是不能再进一步分解的**元过程**. 于是，问题就不再是跃迁的细节，而是它的概率. 通过与放射性原子核的情况相类比，按以下分析可得出决定概率的定律. 也就是说，设在时刻 $t$，处于量子数为 $n$ 的定态的原子数为 $N_n(t)$，则根据频率条件 (1.6.14)，其中在 $dt$ 时间间隔内落入低能态 $f$ 并同时放出频率为 $\nu$ 的光的原子数与 $N_n$ 及 $dt$ 成正比，该形式假定为

$$A_f^n N_n dt \tag{1.7.4}$$

它与来自原子外部的影响无关，而是表示自发跃迁的过程，所以比例系数 $A_f^n$ 称之为**自发跃迁概率系数**.

其次，当频率为 $\nu$ 的光已经存在时，原子有可能把光吸收，反过来从 $f$ 态跃迁到 $n$ 态. 因此，假设频率在 $(\nu_1\nu + d\nu)$ 间隔内的辐射能密度为 $u_\nu d\nu$，时刻 $t$ 处于 $f$ 态的原子数为 $N_f$，则其中在 $dt$ 时间内从 $f$ 跃迁到 $n$ 的原子数就与 $N_f$、$u_\nu$ 及 $dt$ 成正比，故可写成

$$B_n^f N_f u_\nu dt. \tag{1.7.5}$$

这就是**受激吸收**. 然而，根据经典电子论，当外部辐射产生电子的受迫振动时，也会取决于振动的相位而引起相反地向外部发射能量的所谓**受激发射**过程. 与此相应，在量子论中，当已经存在满足频率条件的频率为 $\nu$ 的光子时，发射同样频率的光子而从状态 $n$ 跃迁到 $f$ 的原子数也可以写成

$$B_f^n N_n u_\nu dt. \tag{1.7.6}$$

系数 $B_f^n$ 和 $B_n^f$ 称之为**受激跃迁概率系数**.

特别当整个原子及辐射处于热平衡状态时，从 $n$ 跃迁到 $f$ 的原子数必须等于相反地从 $f$ 跃迁到 $n$ 的原子数，所以由 (1.7.4)、(1.7.5) 及 (1.7.6) 诸式可得

$$N_n(A_f^n + B_f^n u_\nu) = N_f B_n^f u_\nu. \tag{1.7.7}$$

因此，如果经典统计力学中有关原子数能量分布的玻尔兹曼统计成立，则有

$$N_n : N_f = \exp(-W_n/kT) : \exp(-W_f/kT), \tag{1.7.8}$$

由 (1.7.7) 式、(1.6.13) 式及上式直接可得

$$u_\nu = \frac{A_l^n / B_l^n}{(B_n^l / B_l^n)\exp(h\nu/kT) - 1}. \tag{1.7.9}$$

同前面一样，在频率 $\nu$ 小的极限（即量子能量 $h\nu$ 接近于 0 的极限）上，经典电动力学的瑞利-金斯公式（1.3.6）是成立的，故可得出关系式

$$A_l^n / B_l^n = 8\pi h\nu^3 / c^3, \quad B_n^l = B_l^n. \tag{1.7.10}$$

将其代入（1.7.9）式后，所得结果与普朗克公式（1.3.9）形式完全相同。但是不能因此就断言（1.7.9）式是黑体辐射公式原封不动的再现。其原因在于，作为原子集团不连续的能级差，由频率条件（1.6.13）所给出的光的频率一般来说是不连续的，所以就不能原封不动地与黑体辐射的情况相对应。

然而，这个问题的深入研究却就此作罢。原因在于，其中更为引人注目的是，仅仅泛泛地给出 $A_l^n, B_l^n, B_n^l$ 等跃迁概率系数，竟难以找出确定它们的具体方法。在这里量子论陷入僵局。此后通向量子力学的道路虽然迂迴曲折，但其中却有玻尔的**对应原理**作为先导。它并非一个成熟的理论体系，但却可以说它倒像一种指导思想，越能联系以前的理论，就越能稳妥地构筑起新的理论。因此，很难确切地把它表示出来，其梗概如下所述。

当进行周期运动的电子从量子数为 $n$ 的状态跃迁到 $n'$ 状态时，如果 $n$ 及 $n'$ 很大，而与之相比其差 $\Delta n = n - n'$ 却很小，那么，可以认为经典理论是近似成立的。为简单起见，在此就一个自由度的情况考虑沿着经典理论所确定的轨道绕其一周的积分

$$J = \oint p dq. \tag{1.7.11}$$

对各个轨道来说这个 $J$ 具有恒定值，在经典力学中称其为作用量。于是，在频率条件

$$\nu = (W_n - W_{n'})/h \tag{1.7.12}$$

之中被量子化了的能量 $W_n$ 与 $W_{n'}$，在上述经典理论的极限情况下是随 $J_n = nh$ 连续变化的。设能量 $W$ 为 $J$ 的函数，则(1.7.12)式也可写成

$$\nu_{\Delta n} \simeq \Delta n(dW_{(J)}/dJ). \tag{1.7.13}$$

如果认为在这样的极限条件下，量子论和经典理论对发出的辐射强度而言是一致的，那么，代替 (1.7.3) 式，就可以把单位时间内所发射的频率为 $\nu_{\Delta\nu}$ 的光的能量写成

$$\frac{4e^2}{3c^3}|c_{\Delta n}|^2(2\pi\nu_{\Delta n})^4. \tag{1.7.14}$$

这样代换以后，光的强度和偏振即可用经典理论来确定。取一维谐振子作为最简单的例子，其坐标可以写成 (1.5.3) 的形式，即

$$q(1/2i)\{\exp[2\pi i\nu(t-t_0)]-\exp[-2\pi i\nu(t-t_0)]\}. \tag{1.7.15}$$

把它与 (1.7.1) 式相比较，就会看出，只有当

$$\Delta n = n - n' = \pm 1 \tag{1.7.16}$$

时，系数 $c_{\Delta n}$ 才不为零，因而谐振子的辐射频率只能为 $\nu$，此时量子数 $n$ 的变化也仅限于 $\pm 1$。这个结果本来只在 $n$ 及 $n'$ 很大的情况下才成立，但在谐振子的特殊情况下，其频率与发射光的频率相同，**选择定则** (1.7.16) 却对一切量子数都成立。如下章所述，这个定则实际上是可以从量子力学推导出来的。

但是，一般来说，除谐振子以外，量子论中的跃迁总与前后两个不同的定态相关，所以，把它与经典力学的某一个轨道对应起来，是根本没有道理的。因此，为了建立正确的对应关系，就必须采取和现在大不相同的立场。1925 年，海森伯终于在这个问题上获得了成功。首先，他不再像以前的量子论那样，把经典力学的各种概念和方法与性质完全不同的量子条件和频率原封不动地联系在一起。他指出原子中电子的位置也好，绕轨道一周的时间也好，并不是具有物理意义的量。当时海森伯认为，靠直接观测来确定这些量是不可能的，所以包含这些量的理论结果在某种情况下与实验相附，无非是一种偶然现象。而且，他陈述了自己偏激的观点，指出我们能确切知道的有关原子的量只不过是从原子发出的光的频率、强度、偏振。但是此后，他自己又进行了更为恰当的分析，认为当时面临的问题是找出光的频率、强度及偏振之间的关系。为此，首先原封不动地采用了玻尔理论，把原子从量子数为 $n$

的状态跃迁到 $n-\alpha$ 的状态时所发出的光的频率写成

$$\nu(n,n-\alpha)=\frac{W(n)-W(n-\alpha)}{h}. \tag{1.7.17}$$

于是马上得出

$$\left.\begin{aligned}\nu(n,n-\alpha)+\nu(n-\alpha,n-\alpha-\beta)&=\nu(n,n-\alpha-\beta)\\ \nu(n,n-\beta)+\nu(n-\beta,n-\alpha-\beta)&=\nu(n,n-\alpha-\beta)\end{aligned}\right\}, \tag{1.7.18}$$

此即**里兹组合原则**. 它是表示同种原子所发射的各种谱线之间关系的经验定律. 然而,如上所述在经典理论中,原子内电子的位置坐标 $q(t)$ 可以象 (1.7.1) 式那样进行傅里叶展开,但在量子论中,却不允许把它照样写成

$$q(t)=\sum_{\alpha=-\infty}^{\infty}q_\alpha\exp[2\pi i\nu(n,n-\alpha)t]. \tag{1.7.19}$$

这是因为,若有任意一个其它物理量 $r$ 也展开成这种形式:

$$r(t)=\sum_{\alpha=-\infty}^{\infty}r_\alpha\exp[2\pi i\nu(n,n-\alpha)t], \tag{1.7.20}$$

则有

$$q(t)r(t)=\sum_{\alpha,\beta}q_\alpha r_\beta\exp[2\pi i\{\nu(n,n-\alpha)+\nu(n,n-\beta)\}t], \tag{1.7.21}$$

其中出现的频率与里兹组合原则所要求的 (1.7.18) 式完全不同;因而,无须考虑上述傅里叶展开,而用

$$q_\alpha\exp[2\pi i\nu(n,n-\alpha)t]\quad(-\infty\leqslant\alpha\leqslant+\infty) \tag{1.7.22}$$

的全体代替(1.7.19)式来表示$q(t)$. 由于量子数 $n$ 本身也与 $\alpha$ 一样可取任意整数值,所以取其全部,而用

$$q_{n,n-\alpha}\exp[2\pi i\nu(n,n-\alpha)t]\quad(-\infty\leqslant n,\alpha\leqslant+\infty) \tag{1.7.23}$$

的全体来表示 $q(t)$ 更为合适一些. 同样,(1.7.20) 式可以换成

$$r_{n,n-\alpha}\exp[2\pi i\nu(n,n-\alpha)t]. \tag{1.7.24}$$

对于 $q$ 与 $r$ 之积 $qr$, 如果代替 (1.7.21) 式而选为

$$\sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} q_{n,n-\alpha} r_{n-\alpha,n-\alpha-\beta} \exp[2\pi i\{\nu(n,n-\alpha) + \nu(n-\alpha,n-\alpha-\beta)\}t], \quad (1.7.25)$$

那么，就只会出现符合里兹组合原则 (1.7.18) 的频率，(1.7.25 )式又可写为

$$\sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} q_{n,n-\alpha} r_{n-\alpha,n-\alpha-\beta} \exp[2\pi i\{\nu(n,n-\alpha-\beta)\}t]. \quad (1.7.26)$$

这样的乘法规则，与代数中经常出现的**矩阵**乘法形式相同．也就是说，在 (1.7.23) 式中用 $\alpha$ 代替 $n$，用 $\beta$ 代替 $n-\alpha$，并把它们分别看作表示行和列序号的脚标，它们的全部所构成的矩阵就是

$$q = \{q_{\alpha,\beta}(t)\}. \quad (1.7.27)$$

其中，

$$q_{\alpha,\beta}(t) \equiv q^{(0)}_{\alpha,\beta} \exp[2\pi i \nu(\alpha,\beta)t], \quad (1.7.28)$$

而且 $q^{(0)}_{\alpha,\beta}$ 不包含时间．同样，如果把 $r$ 的矩阵写成

$$r = \{r_{\alpha,\beta}(t)\}, \quad (1.7.29)$$

则它们的积就是

$$q \cdot r = \left\{\sum_{\gamma} q_{\alpha,\gamma} r_{\gamma,\beta}\right\}. \quad (1.7.30)$$

这正好是矩阵的积．改变乘积的顺序而变成矩阵

$$r \cdot q = \left\{\sum_{\gamma} r_{\alpha,\gamma} q_{\gamma,\beta}\right\}, \quad (1.7.31)$$

一般来讲它与矩阵 $q \cdot r$ 不同．

因此，海森伯建议应以全新的假定为出发点，即在量子论中物理量不是用简单的数，而是用上述具有无穷多个行和列表示的矩阵．因此乘法交换律不复成立．这是在按照对应原理的精神向前发展的过程中对该原理的一个大的偏离．据说，玻尔在一次宴会之后，边洗盘子边说："用污水洗脏盘，盘会渐渐干净的．"而对应原理的确就是污水．也可以说，正是由于海森伯发现了清水，才把盘子完全洗干净了．此后不久，他就与玻恩、约当 (Jordan) 等

人通力合作，发展了**矩阵力学**，即狭义量子力学。另一方面，狄拉克在海森伯的观点的基础上，设想出不服从乘法交换律的那种数（即 $q$ 数），展开了同样的理论研究。但是，那些理论明显地是包含波动力学在内的广义量子力学的特殊表现形式，我们将改在下一节及以下各章再详细论述。

## §1.8 电子的波动性的发现

由经典力学到量子力学的第三个飞跃，也在与上述的海森伯矩阵力学完全不同的方向上同时进行着。那是在 1924 年，德布罗意发表了他的大胆设想，认为像电子那样的物质粒子也和光子一样具有波粒二象性。他首先假设，光子的能量和频率之间的爱因斯坦关系式 (1.4.1) 对电子那样的物质粒子依然成立。也就是说，根据狭义相对论，静止电子具有固有能量 $mc^2$，所以，它伴随着频率为 $\nu_0$ 的振动，其值由下式确定，

$$mc^2 = h\nu_0 \tag{1.8.1}$$

该波动的形式，比如说，可以写成

$$\phi = a \sin 2\pi\nu_0 t. \tag{1.8.2}$$

其中 $a$ 是表示振幅的常数。另外根据洛伦兹变换，如果在相对于坐标系 $(t, x)$ 以速度 $v$ 沿 $-x$ 方向运动的坐标系 $(t', x')$ 中移动，则下列关系式成立

$$t = (t' - vx'/c^2)/\sqrt{1 - v^2/c^2},$$
$$x = (x' - vt')/\sqrt{1 - v^2/c^2}. \tag{1.8.3}$$

若由这个新坐标系 $(x', t')$ 来观察，电子就应以速度 $v$ 沿 $x$ 方向运动。电子所伴随的振动 (1.8.2) 式也变为

$$\phi = a \sin [2\pi\nu_0(t' - vx'/c^2)/\sqrt{1 - v^2/c^2}], \tag{1.8.4}$$

这是在电子运动方向上行进的平面波。该波的频率 $\nu$ 和电子能量 $W$ 之间的关系为

$$W = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = hv, \tag{1.8.5}$$

它与光子的 (1.4.1) 式相对应,而电子的动量 $p$ 与波的波长 $\lambda$ 之间则有关系式

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{h}{\lambda}, \tag{1.8.6}$$

这由 (1.8.4) 式和 (1.8.1) 式也可直接得出. 它是与光子的(1.4.3)式相对应的关系式.

然而,该波的传播速度,即相速度是

$$u = \lambda v = c^2/v, \tag{1.8.7}$$

因为 $v$ 通常比 $c$ 小, 所以 $u$ 总比 $c$ 大. 这个波本身不代表任何实在的客体,而是导致作为粒子的电子的运动,因此, 德布罗意在这个意义上把它命名为**相位波**,每每也叫作**物质波**或**德布罗意波**.但是,众所周知,在经典力学中, 如果不仅把具有一定波长 $\lambda$ 的平面波,而且也把波长与之稍有不同的波叠加起来而形成波群, 那么, 其高峰部分作为一个整体的传播速度,即群速度,可由 $dv/d(1/\lambda)$ 给出. 从 (1.8.5) 和 (1.8.6) 两式计算德布罗意波的群速度,则有

$$dv/d(1/\lambda) = dW/dp = v, \tag{1.8.8}$$

这和电子作为粒子时的速度是一致的. 因此, 粒子本身和由相位波所构成的波群之间有着密切的关系. 这个关系的真正含义, 经薛定谔的波动力学直到玻恩的概率解释,都不是太容易理解的,有关这个问题在后面将要逐一论述.

德布罗意提出相位波这个概念的直接目的, 在于对原子内电子轨道的量子化赋予波动论的解释. 为简单起见, 假设电子在半径为 $a$ 的圆周轨道上运动, 那么一定会存在与之相随的德布罗意波,但是只有当其波长 $\lambda$ 的整数倍恰恰等于圆的周长时,才能形成驻波,其条件是

$$2\pi a = n\lambda \quad (n = 1,2,\cdots), \tag{1.8.9}$$

所以,若把动量 $p$ 与波长的关系式 (1.8.6) 代入,则可直接得出

$$\oint pdq = 2\pi ap = nh. \tag{1.8.10}$$

这正好就是量子条件(1.5.9)。只有这种情况才与玻尔的定态相对应，而量子化了的电子运动则可看成是由于与之相随的相位波的干涉而产生的驻波。但是，若用波动论的观点来分析，就必然要考虑向三维空间扩展的波。如上所述，电子在自由运动时对应的是平面波。那么，伴随着氢原子中电子的运动，是什么样的波在向空间扩展呢？这就是下面将要解决的问题。

在讨论这个问题之前，我们想简单描述一下电子波动性的实验证明。假设电子被电压 $V$ 加速，而且由此所得到的速度 $v$ 比光速 $c$ 小，那么，

$$\frac{1}{2}mv^2 = eV, \tag{1.8.11}$$

所以，由 (1.8.6) 式即可得出与之相随的德布罗意波的波长为

$$\lambda = h/mv = h/\sqrt{2meV}. \tag{1.8.12}$$

若电压以伏特为单位，则波长是

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{V}} \times 10^{-8} \quad (\text{cm}), \tag{1.8.13}$$

所以当电极间电位差达到几十乃至几百伏的量级时，阴极射线的德布罗意波波长就与短波的X射线相仿。因此可以预期阴极射线与X射线相类似也会被晶体所衍射。戴维孙（Davison）和革末(Germer)于 1927 年发现阴极射线在镍单晶上反射与X射线的布拉格（Bragg）反射相似。进而 G. P. 汤姆孙利用阴极射线穿过很薄的多晶金箔，得到了相当于X射线的德拜-谢勒（Scherrer）环的衍射像；菊池借助于薄的云母片成功地拍摄了与X射线的劳厄（Laue）斑相类似的照片。根据这些实验即可确认德布罗意波的波长与动量之间的关系式（1.8.13）是正确的，同时也说明电子的波动性已毋庸置疑。

那么，为什么以前只注意到电子的粒子性呢？这是因为，德布罗意波的波长远小于宏观的长度，甚至于也小于光的波长。进而，电子以外的物质粒子同样伴有德布罗意波，如（1.8.6）式所示，波长与质量成反比地缩短，所以它的波动性也就完全不被查觉。这

正好类似于光通路上的媒质，其折射率只要在光的波长范围内可以认为几乎是均匀的，就无须考虑光的波动性，而可以用几何光学来对光线进行处理．然而对光来说，用几何光学解决不了问题，一般就有必要向波动光学转移，与这种情况相同，现在的问题就是应该从经典力学转向所谓的**波动力学**．在自由粒子的情况下，设想它是（1.8.4）那样的平面波，而表示这种平面波的波函数 $\psi(x,y,z,t)$ 满足波动方程

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=0. \tag{1.8.14}$$

其中 $u$ 由（1.8.7）式确定，表示波传播的相速度．

更一般地说，当粒子上有外力作用时，速度 $v$ 依粒子所占据的位置而有所不同．特别是在外力具有势 $V(x,y,z)$ 的情况下，粒子的总能量就是一个恒量

$$W=\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}+V, \tag{1.8.15}$$

而动量的绝对值

$$p=\frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}=\frac{1}{c}\sqrt{(W-V)^2-(mc^2)^2} \tag{1.8.16}$$

将随位置而变．如果这时德布罗意关系式（1.8.5）及（1.8.6）仍旧成立，则物质波的传播速度为

$$u=\lambda\nu=W/p, \tag{1.8.17}$$

它亦随位置而变化，这就意味着，在有外力作用的情况下，伴随运动粒子的物质波可以看作是在折射率随力势而变化的不均匀媒质中传播的波．因为在这种情况总能量也是守恒的，所以物质波的频率 $\nu$ 不变．可以认为，与此相应，波函数 $\psi(x,y,z,t)$ 包含时间因子 $\sin(2\pi\nu t)$，$\cos(2\pi\nu t)$ 或

$$\exp(2\pi i\nu t),\quad \exp(-2\pi i\nu t), \tag{1.8.18}$$

而无论对哪一个来说，下式都是成立的：

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=-(2\pi\nu)^2\psi=-(2\pi W/h)^2\psi. \tag{1.8.19}$$

根据 (1.8.17) 式和 (1.8.16) 式也可将 (1.8.14) 式写为

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\left(\frac{2\pi}{nc}\right)^2\{(W-V)^2-(mc^2)^2\}\psi=0. \tag{1.8.20}$$

设 $\psi(x, y, z, t)$ 去掉时间因子后为 $\psi(x, y, z)$，则其同样满足 (1.8.20) 式.

在粒子速度总小于光速 $c$，而势的绝对值$|V|$到处都比 $mc^2$ 小的情况下，也就是在非相对论近似的情况下，由 (1.8.15) 式所给出的总能量$W$接近于 $mc^2$，所以，设

$$W=mc^2+E, \tag{1.8.21}$$

则$E$就对应于非相对论力学中的能量，因$E$的绝对值比 $mc^2$ 小，故近似地有

$$(W-V)^2-(mc^2)^2\simeq 2mc^2(E-V). \tag{1.8.22}$$

从而 (1.8.20) 式可以近似地写成

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2m}{h^2}(E-V)\psi=0. \tag{1.8.23}$$

这正是薛定谔于 1926 年建立的**薛定谔方程**. 为了导出这个方程，他首先从非相对论的情况入手，修正经典力学中的哈密顿-雅可比 (Jacobi) 偏微分方程，再改写成波动方程的形式. 总之，下一步决定性的问题在于，针对氢原子及其它重要的情况来实际求解薛定谔方程，关于这个问题将在下一章详细讨论.

## §1.9 量子力学的建立及其后的发展

如前两节所述，按海森伯等人的代数方法所得到的量子力学与德布罗意、薛定谔的解析方法所得到的波动力学几乎同时问世. 不久薛定谔等人证明，在数学上二者完全等价. 因此，作为广义的量子力学的数学形式，二者是统一的，但就其物理解释而言却有很大差距. 也就是说，海森伯重视作为量子论与经典理论相区别的重要特征之一而以自然现象的非连续性为基础的非直观要素，与

此相反，薛定谔却把物质现象理解为波函数在整个时空中的连续变化。1926 年，玻恩用波动力学分析了粒子的碰撞，指出在该情况下不能把波函数的变化原封不动地看作实际物质的变化。例如当粒子 A 碰撞粒子 B 时（设 B 的质量远大于 A 的质量），表示 A 的行为的波函数是入射波和散射波的叠加。散射波向四面八方到处扩散，但却不能认为它就是粒子（如电子）在空间的扩散。这是因为，如果测定电子的位置，就一定会发现它依然局限于空间的某个地方。为了克服这个难点，薛定谔提出了**波包**的设想。即，作为电子这种粒子局部存在的表现，认为波函数在空间某个小区域以外振动很小。但是，如下章所讨论的那样，即使在某一时刻产生了波包，其形状也会按薛定谔波动方程变化，从而或迟或早要扩展到整个空间。因此，为了克服这个根本性的困难，按照玻恩的观点，无非是认为波函数并不代表粒子本身，而是代表粒子存在的概率——更确切地说是代表**概率幅**。进而，根据海森伯 1927 年发现的**不确定原理**及玻尔提出的**互补性**的分析方法，建立了量子力学的正统解释。另一方面，狄拉克和约当开展了**变换理论**的研究，又由诺埃曼（Neumann）引入希尔伯特（Hilbert）空间而更为严密化，使量子力学在数学形式上亦已臻完备。关于这些问题，将在以下各章详细论述。

这一时期，量子力学在各个方面——不仅在物理学，而且在化学方面——得以广泛应用，而且无论在哪种情况均获得了意想不到的成功。例如原子光谱和分子光谱，化学键理论的建立等等．其中，代数的方法使用了经典物理学中不曾有过的群论，而发挥了有效功能。另外，量子力学在开发固体理论这个重大学科方面作用非浅。进而，它还为同经典统计力学有本质差别的**量子统计力学**奠基铺石．其中**玻色（Bose）-爱因斯坦统计**和**费米（Fermi）-狄拉克统计**分别对应于由全同粒子所构成的量子力学体系在多维空间中的波函数的对称性和反对称性。

另外，量子力学和相对论早有密切关系。在 § 1.4 中所述的对康普顿效应的解释，及 § 1.8 中所谈到的德布罗意物质波的理论

等，均是这种关系的明显体现．在其它方面（比如），索末菲由于考虑了狭义相对论对确定氢原子内电子轨道的影响而成功地解释了氢光谱的精细结构．进入量子力学阶段以后，1928 年狄拉克在相对论性电子论方面取得了很大进展．从非相对论性量子力学向相对论量子力学的过渡中，又一个引人注目的问题是**二次量子化**．如上所述，在薛定谔理论中，多粒子体系的状态是用多维空间中的波函数来表示的，但却不具备空间坐标和时间坐标之间的对称性，难以向相对论过渡．可是 1927 年狄拉克、约当、克莱因（Klein）、维格纳（Wigner）等人，在全同粒子组成的体系中，把单个粒子的三维波函数本身看作量子力学的算符，并赋予该算符适当的对易关系，进行了二次量子化．于是，可以证明，算符之间简单的对易关系或反对易关系分别对应玻色统计或费米统计，特别是能把光子看作玻色子，而这种情况也可以看成是 § 1.5 所述的德拜空腔辐射的量子化步骤向量子力学的过渡．到了 1929 年，海森伯和泡利就电磁场和电子之间存在相互作用的情况，把二者同时进行量子化，从而建立了相对论量子电动力学的体系。

这一时期，量子力学基本趋于成熟，从 1932 年起，中子、正电子和介子的发现及原子核人工裂变的成功，作为良好的契机使量子力学的应用范围进一步扩展到原子核、宇宙射线和基本粒子等领域中去．不过，其中尚有很多未曾解决的根本问题，而量子力学本身也处于必须进行某种变革的状态．所有这些都是本讲座第十卷《基本粒子论》中需要研究的课题。

# 第二部分　量子力学的构成

## 写　在　前　面

第一部追溯了经典物理学向量子力学的历史演变，继之，第二部则将真正地着手于量子力学的建设。第一章所述的大量量子现象的发现及与之相关的假说和推论，其过程迂回曲折，纵观这科学史上极为罕见的急剧进展，有时甚至令人惊叹不已，然而却未必是走向量子力学的捷径.第二章和第三章将不受历史发展的限制，对其加以整理，从而精选出对量子力学虽是最低限度必要但却是不可缺少的经验事实，并在此基础上试图归纳出量子力学的理论体系。如第一章所述，历史上有两条通向量子力学的途径，其一从波动力学引入，其二则来自矩阵力学。我们在这里选择了由波动力学向量子力学发展的道路。若循此途径查看，则矩阵力学理应是在量子力学形成之后的理论框架内作为量子力学的一种表现形式而推导出来的.

第四章准备进一步归纳对量子力学的建立所必要的逻辑基础及情况说明，从而展现出量子力学这一洗炼的理论体系。至于涉及数学方面的讨论则将放在《量子力学》(II) 第五部分。

# 第二章　波动力学的引入

## §2.1　波粒二象性——得以形成量子力学基础的实验事实

第一章所述的有关量子力学现象的重要发现或假说除矩阵力学之外可归纳为四个方面，即普朗克的量子假说、光的粒子性的发现、有关原子结构的玻尔经典量子论及德布罗意的物质波的假说．如第一章所指出的那样，明确解释量子现象的线索首先是由量子条件(1.5.9)给出的．假如有了(1.5.9)式的量子条件并以此为基础进一步推论，则几乎所有的量子现象——特别是上述前三个方面中的量子现象都可以大体上得到解释．事实上，只要在量子条件(1.5.9)中引进谐振子的特性，就不难得出表示谐振子能量的普朗克公式(1.3.20)，而从本质上明确解释空腔辐射及固体比热之类的现象．另外，该量子条件也可以看作光的粒子性的根源．电磁波与谐振子的集合是等价的，各振子的能量具有量子条件（因而也就是普朗克公式）所赋予的量子性，光的粒子说正是在这个基础上才成立的．另外，在玻尔的经典量子论中，该量子条件肩负遴选原子"定态"这一变革性的重要使命，对于明确解释氢原子之类的能级和原子光谱起着决定性的作用．在这个意义上可以说，量子条件（1.5.9）囊括了量子现象的本质．然而，给定量子条件，本身就很突然，直到德布罗意假设出现之前，也未曾搞清楚这个条件之所以必要的真正理由．正是德布罗意假说既从内容上阐述了量子条件的根源和由来，又推导出了量子条件本身．德布罗意假说认为物质粒子也具有光那样的波粒二象性，而电子之类的物质粒子所具有的波动性，不久——量子力学建立之后——便在实验上得以确认．因此，仅仅根据物质粒子和光具有波粒二象性这个"实

验事实”，就能明确解释一切量子现象，历史发展的顺序姑且不提，我们首先认为这个“实验事实”是存在的，从而以此为出发点来逐步建立量子力学。

——虽说经典量子论已获得成功，但它却只限于含有一个电子的原子体系，并不能解决多电子的问题．此外它对碰撞之类的非周期问题亦束手无策．原则上讲，玻尔假说与经典量子论借以作为出发点的经典物理学是相互矛盾的．这样，就务必铭记，经典量子论本身是极不完善的理论．而崭新的力学——量子力学则不能沿袭其不完全的方面．

如果要整理一下第一章有关德布罗意假说的内容，则构成量子力学基础的“实验事实”可作如下归纳：

“电子之类的物质粒子以及光都具有波粒二象性．粒子图像中的动量 $p$ 及能量 $E$ 与波动图像中的波数 $k$ 及角频率 $\omega$ 通过变换公式结合在一起”．即

$$k = \frac{1}{\hbar} P, \quad \omega = \frac{1}{\hbar} E. \tag{2.1.1}$$

其中 $\hbar = h/2\pi$，与 $h$ 相同，$\hbar$ 也叫做普朗克常量．也就是说，转换公式（2.1.1）给出了粒子图像中的力学变量和波动图像中的状态变量之间的关系，作为其通用的转换常数，普朗克常量 $\hbar$ 从一开始就被列入当作量子力学出发点的“实验事实”之中，其值为

$$\hbar = 6.582173 \times 10^{-22}(\mathrm{MeV \cdot s}) = 1.0545887 \times 10^{-27}(\mathrm{erg \cdot s}),$$

以宏观尺度来衡量，该值不用说是相当小的．

设波长为 $\lambda$，频率为 $\nu$，则波数 $k$ 和角频率 $\omega$ 的定义式为

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \ \omega = 2\pi\nu,$$

所以，转换公式（2.1.1）就把光（$p = h\nu/c$，$E = h\nu$）和物质粒子（$\lambda = h/p, \nu = E/h$）统一起来．对光来说，在(2.1.1)式中可以使用关系式 $\omega = ck$．该关系式表明，波动是以光速 $c$ 传播的，然而若按转换公式翻译成粒子图像，则变成 $E = cp$ 的形式，说明光子是质量为零的相对论粒子．一般来讲，$E$ 和 $p$（或 $\omega$ 和 $k$）的关系由粒子种类和运动状态而定．例如，对质量为 $m$ 的非相对论自由粒子来说 $E = p^2/2m$，而在相对论自由粒子的情况下就成了

$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$。当有外力，或与其它粒子相互作用时，这样简单的关系则不复成立。再者，

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{2.1.2}$$

称为**德布罗意波长**。在质量为$m$的非相对论自由粒子情况下，

$$\lambda = h/\sqrt{2mE}.$$

若能量$E$以 eV（电子伏特）为单位，则有

$$\text{电子} \qquad \lambda \simeq 1.23 \times 10^{-7}/\sqrt{E} \ \text{(cm)},$$

$$\text{质子或中子} \quad \lambda \simeq 2.86 \times 10^{-9}/\sqrt{E} \ \text{(cm)}.$$

1 keV(=1000eV) 量级的电子或 $10^{-1}$ eV 量级的热中子，其波长应为 $10^{-8}$ cm 的量级，此长度正是原子的大小或固体晶格间距的量级。

严格地讲，波长给定的波这个概念只适合于平面波。而像球面波之类具有简单几何结构的波，只能在限定的意义上定义波长。不过通常谈及波长时，多数情况下波向极大的空间范围扩展，而且存在着包含很多波数的局部范围，在该局部范围内波可以近似地看成平面波。平面波是在一定方向上传播的。因此，在上述“实验事实”中，当波数$k$（或波长 $\lambda = 2\pi/k$）一定的波和动量$p$一定的粒子相对应时，波动图像中平面波的传播方向就应该与粒子图像中的运动方向相一致。也就是说，必须暂且认为该“实验事实”指的是平面波对应于动量一定的自由粒子。因此，有必要把转换公式(2.1.1)改写成波矢$\boldsymbol{k}$和动量矢量$\boldsymbol{p}$之间的关系，即

$$\boldsymbol{k} = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{p}, \quad \omega = \frac{1}{\hbar}E. \tag{2.1.3}$$

当然，真正的平面波是在时间上和空间上均无限延伸的波，而这一点并未正确地表达物理现实。希望在进一步阅读时注意，平面波始终是简化了的理想图像。

——按此观点，对于德布罗意假说和量子条件(1.5.9)的关系来说有一点

值得注意．根据德布罗意假说来推导量子条件时，假定了圆周长等于波长的整数倍这一驻波条件，但是这样的讨论只有在圆周长远大于波长——即量子数相当大的情况下才近似成立．当圆周和波长同量级时——即量子数很小时，讨论显然是全无道理的．如果把德布罗意假说作为比量子条件(1.5.9)更基本的假说——我们现在采取的立场与之相近——那么，量子条件(1.5.9)不过是量子数很大时才能近似成立的量子化定则．而按玻尔对应原理，当量子数增大时，量子效应逐渐减弱，量子论则接近于经典理论．在这个意义上，量子条件（1.5.9）应该是新的力学，即量子力学的经典近似[1]．

至此，已大体确定了得以形成量子力学基础的“实验事实”．但是尚未清楚波粒二象性的实际含义．在(2.1.3)式中，我们看到的‘事实’是动量为 $p$、能量为 $E$ 的粒子是波数为 $k=p/\hbar$、角频率为 $\omega=E/\hbar$ 的波动，反之，波数为 $k$、角频率为 $\omega$ 的波动则是动量为 $p=\hbar k$、能量为 $E=\hbar\omega$ 的粒子．其历史背景，前者是德布罗意假说或电子波实验，后者则是光的粒子性的发现．然而，仅仅指出这一点仍没有掌握作为‘实验事实’的波粒二象性．在该情况下，无论是对粒子还是对波动来说，未必明瞭其实质所在．粒子这个术语本来就同经典的粒子图像联系在一起，使人想象成小球一样的‘物体’；另一方面波动这个术语则显现出经典的波动图像，水面上的波之类的‘现象’为其主要内容．显然，把这样的经典粒子图像和波动图像同时赋予一个客体是毫无道理的．只要执著于经典的描述，就不可能彻底理解波粒二象性．那么，量子力学中所谓的粒子和波动的本质又如何呢?

根据第一章所述，所谓‘粒子’是能够运送能量和动量的不可分割的‘某个物体’，另一方面，‘波动’的本质特点在于产生干涉现象．若深入分析就会看出，无论是‘粒子’还是‘波动’，上面提到的性质——如由经典图像推测出的各种性质——并无必要．这个事实需牢记于心．因此，电子等物质粒子和光具有波粒二象性这一‘实验事实’表明电子和光子之类的量子力学‘粒子’是运送动量和

1）一般来讲是如此，但应用(1.5.9)式所得到的氢原子的能级表达式(1.6.12)与量子力学所给出的正确表达式完全一致．其原因在于库仑场的特殊性．

能量的不可分割的、而且也是能够产生干涉现象的‘某个物体’.[1] 反过来说，量子力学的‘粒子’兼备不可分割意义上的粒子性和能以产生干涉现象的波动性，通过理想的干涉实验将会表达该‘实验事实’的具体内容.

干涉实验　借助于图 2.1 所示的理想化装置来进行干涉实验. 在图的下方有一个‘粒子’发射器，正中安放一个带有二个小孔 a、b 的屏幕 S，图的上方是墙面 D，装有荧光板或感光膜之类的检测器. 发射器向上方射出动量一定的‘粒子’，即平面波[2]. 屏幕 S 上的小孔 a,b 的尺寸远小于平面波的波长，而 a,b 的间距安排得与波长同量级[3]. 虽然这些尺寸均为微观长度，但发射器的开口大小、发射器与屏幕 S 的间距、屏幕 S 到墙面 D 的间距却是宏观长度，用微观尺度来衡量，是相当大的. 自下而上发射的平面波穿过小孔 a,b 到达屏幕 S 的上方，这样以小孔 a,b 为发射源的两个球面波，就向墙面 D 的方向扩展. 因为 S,D 之间的距离远大于波长，所以在靠近墙面 D 的宏观小范围内可以把该球面波近似地看成平面波. 这两个平面波相互之间具有确定的相位关系，从而能在墙面 D 上观察到清晰的干涉条纹. 图 2.1 中的 $P_{a,b}$ 是用高度表示该干涉条纹强弱或明暗的分布函数. 当小孔 a,b 之间的距离与波长相当，而 S,D 之间的距离非常大时，则 $P_{a,b}$ 之中峰值的幅度或

---

1）量子力学的‘粒子’不仅运送能量和动量，而且根据“粒子”种类和状态的不同也能运送电荷、角动量等各种物理量. 此外，不可分割这一术语，是在经典连续体那样不能自由分割的意义下使用的. 有时，量子力学的‘粒子’也具有结构，那就必须把‘粒子’分成结构单元来考虑. 使用不可分割这一术语并不排除这种情况. 但这是在量子力学建立以后的各阶段所讨论的内容.

2）发射器的开口即使再大，也总是有限的. 当然，不可能发射无限扩展的理想平面波. 但当波的扩展范围远大于波长及两个小孔的大小和间距时，大体上也能看作平面波. 在这种情况下，把发射器发射的波叫做平面波；只不过是假想的而已.

3）如例中之数值所见，在很多情况下微观粒子的德布罗意波长是微观长度. 因而带有这种小孔的屏幕实际上很难做. 但是采取戴维孙-革末及西川-菊池在电子波衍射实验中所用的晶体点阵来代替具有小孔的屏幕，便会使这一困难迎刃而解. 此时点阵间距与入射粒子的德布罗意波长同量级. 在图 2.1 的理想实验中；带有小孔 a,b 的屏幕 S 可象征性地看作是理想化的晶格点阵. 对讨论的本质并无改变.

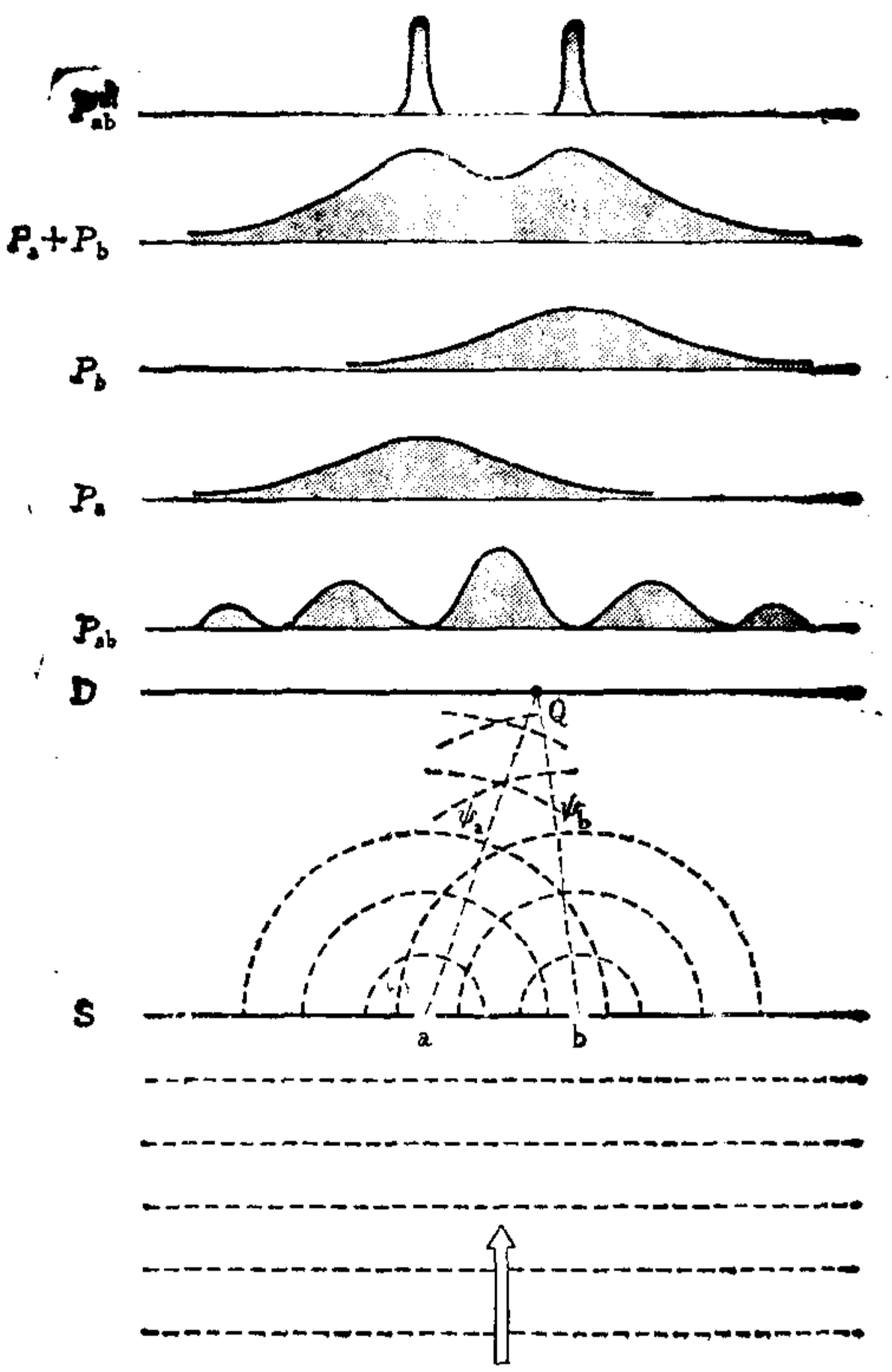



图 2.1　干涉实验

干涉条纹的粗细具有宏观的大小．这是必须谨记的重要事实．

若遮蔽其中任一小孔，例如 b（或 a），则该干涉条纹消失，分布呈 $P_a$（或 $P_b$）状．此时，在 $P_{ab} \neq P_a + P_b$ 的部分才是干涉现象的本质．当然，经典的波动也存在这样的干涉现象．一般来说，干涉现象通过以下机理来解释：（i）描述波动状态的波函数满足“叠加原理”，即假如 b（或 a）关闭时，屏幕 S 上方的波函数为 $\psi_a$（或 $\psi_b$），则 $a,b$ 一起打开时的波函数是 $\psi_{ab} = \psi_a +$

$\psi_b$。(ii) 分布函数与绝对值的平方成正比[1]。因此，

$$P_a \propto |\psi_a|^2,\ P_b \propto |\psi_b|^2,$$

$$P_{ab} \propto |\psi_a + \psi_b|^2 = |\psi_a|^2 + |\psi_b|^2 + 2\mathrm{Re}(\psi_a^* \psi_b),$$

$P_{ab}$ 与 $P_a + P_b$ 的不同点仅在于干涉项 $2\mathrm{Re}(\psi_a^* \psi_b)$。实验证明，量子力学'粒子'的干涉现象也能借助于这种机理来说明。该实验同时也是判断 (2.1.1) 式是否成立的手段。

的确，干涉现象揭示了量子力学'粒子'的波动性，但若限于前面讨论的内容，则可发现量子力学'粒子'引起的干涉现象与经典波动的干涉现象之间毫无本质差异。然而由于发现量子力学'粒子'的粒子性而使这种本质差异明显起来，当入射'粒子'束的强度极端微弱时，就会出现不同的现象，通常干涉实验是在入射束的强度达到某种程度时进行的。就量子力学'粒子'而言，$P_{ab}$ 是同时拍摄极多个'粒子'时在画面上呈现的干涉条纹的分布函数。而对经典波动来说，当入射束强度减弱时，干涉条纹的形状依然故我，只是其强度(或宽度)减弱而已。倘若是量子力学'粒子'又将如何呢？设法让入射束明显减弱，使得每秒钟只有一个'粒子'，进入屏幕 S，并在每秒内拍摄一张墙面 D 上所呈现的图形，也就是说，观察一个'粒子'引起的干涉现象。这时，表示干涉条纹的分布函数 $P_{ab}$，即使高度急剧降低，是否还呈现原有形状呢？实验结果，答案为"否"。在拍摄下来的画面上，干涉条纹无影无踪，仅在'粒子'到达的地方出现小的斑点。这个实验表明量子力学'粒子'的粒子性。反之，倘若'粒子'具有粒子性——不可分割性，则此实验结果完全在预料之中，又在完全理解之列。在此回想一下干涉条纹的粗细具有宏观的大小这一事实。假若单个'粒子'在画面上产生的干涉条纹具有宏观大小，那么单个微观'粒子'应该在宏观

---

1) 分布函数不等于波函数绝对值的平方。尚有与此相似的量，例如能流密度。对光来说，自然要采用能流密度。决定 D 上的分布函数，其机理正是'粒子'和墙面上检测器的相互作用。但是，详细的检测机理并未在本质上改变对干涉现象的讨论，即使用能流密度代替波函数绝对值的平方，这一讨论也可照样进行。特别是这个实验，在靠近墙面 D 的宏观小范围内，$\psi_a$ 及 $\psi_b$ 可以近似地看成平面波，而对平面波来说能流密度与波函数绝对值的平方成正比，这种代替并不会有多大问题。

范围内扩展，而且被分布在墙面D上各点的检测器分别吸收，这与不可分割性是有矛盾的。因此干涉条纹必须消失.也就是说.由强度达到一定程度的入射束所产生的干涉条纹，当其强度减弱时某些部分开始零乱，最终只剩下表示'粒子'所到之处的小斑点，以至完全消失。

——要真实地拍摄单个微观粒子，如一个电子的照片是相当困难的.但是，随着实验技术的进步，能够观测到的情况与之非常接近.

倘若轻率判断的话，单个'粒子'的画面中不会出现干涉条纹这一实验结果是否就表示波动性不是单个'粒子'而是大量'粒子'集团的属性。但实际并非如此。如果把很多单个'粒子'的画面重叠冲洗，就能完全再现起初的干涉条纹 $P_{ab}$。这个实验事实证明波动性是单个'粒子'的属性。虽然作为波动性直接证明的干涉条纹从单个粒子的画面上消失而只看到'粒子性'的一面，但'粒子'绝未丧失其波动性。它仍有一种潜在能力，通过重叠冲洗使干涉条纹得以恢复.这正是量子力学'粒子'和经典粒子显著不同之处.由包含大量'粒子'的强光束得到的干涉条纹的画面，实际上正是通过一次次摄影再将其重叠冲洗的结果[1]。所谓波粒二象性的'实验结果'可以通过这里所讲述的具体内容来掌握。

我们再来探求一下量子力学'粒子'与经典粒子的差异。在单个'粒子'的干涉实验中，'粒子'从发射器射出，并通过屏幕 S 上的小孔 a 和 b 到达墙面 D 上的某点 Q。若是经典粒子，这时就可以指出它是从小孔 a,b 中的哪一个通过的.从 a 通过就不会通过 b，反之亦然。因此在墙面 D 上的分布函数应该是图 2.1 中的

$$P_{ab}^{cl}(=P_a^{cl}+P_b^{cl})^{2)}.$$

但对量子力学'粒子'来说，就不能确定'粒子'是从小孔 a,b 之中

---

1) 但是，此时包含大量'粒子'的光束，密度不能太高.当浓度高到不能忽视'粒子'间相互作用时，所得的照片不同于单个'粒子'重叠冲洗的结果。但是，对于普通实验中所采用的光束来说，这一点是不必担心的。关于这个问题请参考本讲座第四卷《量子力学》(II) 第十二章.

2) 此处 $P_a^{cl}$（或 $P_b^{cl}$）是在小孔 b（或 a）关闭时经典粒子在墙面D上形成的分布函数。此外，量子力学'粒子'的波动性也出现在 $P_a^{cl}\neq P_a$，$P_b^{cl}\neq P_b$ 的地方.$P_a$,$P_b$ 分别比 $P_a^{cl}$,$P_b^{cl}$ 扩展得更宽些.

的哪一个通过的。如果借助于某种实验手段确定出是从其中的一个孔（如 a ）通过的，那么，由于‘粒子’的不可分割性，此时在小孔 b 的出口处‘粒子’已不复存在。这样，该实验手段等同于小孔 b 关闭，而在屏幕 S 的上方就只有从小孔 a 中发出的球面波，干涉的起因完全消失。因此，这时即使把单个‘粒子’产生的许多图象重叠冲洗，$P_{ab}$ 也绝不会再现，出现的仅仅是 $P_a$ 而已。也就是说，不管干涉条纹潜藏起来还是实际上已经产生（如强光束时），提出‘粒子’从 a 或 b 哪个小孔通过的问题均毫无意义。

截止目前，只是强调了量子力学‘粒子’和经典粒子的不同点。有时，即使是量子力学‘粒子’也具有与经典粒子相同的行为。在图 2.1 中装置的大小和配置原封不动，而让入射‘粒子’的动量 $p$ 增大。与此相应，波长 $\lambda = h/p$ 渐渐缩短，最后会比两孔 a,b 的直径小得多。当孔的大小远大于波长时，也就不会存在波的衍射引起的扩展问题。因此，从小孔 a,b 向上方泄漏的波，其宽度渐渐减小，最终如图 2.2 所示，$\phi_a$ 和 $\phi_b$ 不重叠地到达墙面 D。此时墙面 D 上的分布 $P_{ab}$ 与 $P_{ab}^{cl}$ 极为接近，它等于只存在一个孔时的分布 $P_a \simeq P_a^{cl}$ 与 $P_b \simeq P_b^{cl}$ 之和，干涉现象不会出现。因此，没有表现出量子力学‘粒子’所具有的波动性。此外，当小孔 a,b 的大小及 ab 之间的距离为宏观大小时，微观‘粒子’整个波动的扩展象图 2.1 或图 2.2 那样将不再增大，通常就变成了比 a,b 的孔径小得多的‘波包’。这样的波包在上述装置中当然不会产生干涉现象。‘粒子’由此直接表现出经典行为。这是因为，就宏观尺度而言‘波包’整体上可以看成点状粒子。

增加动量 $p$ 就会减小波长 $\lambda = h/p$，而减小普朗克常量 $h$ 也能得到同样的结果。当可以认为普朗克常量的作用不大时，这个事实就意味着‘粒子’具有经典行为。从而，由此建立的量子力学一开始就肩负着在普朗克常量 $h$ 趋于零的极限上应当过渡为经典力学的使命。量子力学的建立并不意味着完全否定或摒弃经典力学。量子力学既内含经典力学，又向经典力学可以适用的范围之外有所扩展。玻尔对应原理只认识了其中一个部分，物理学的发

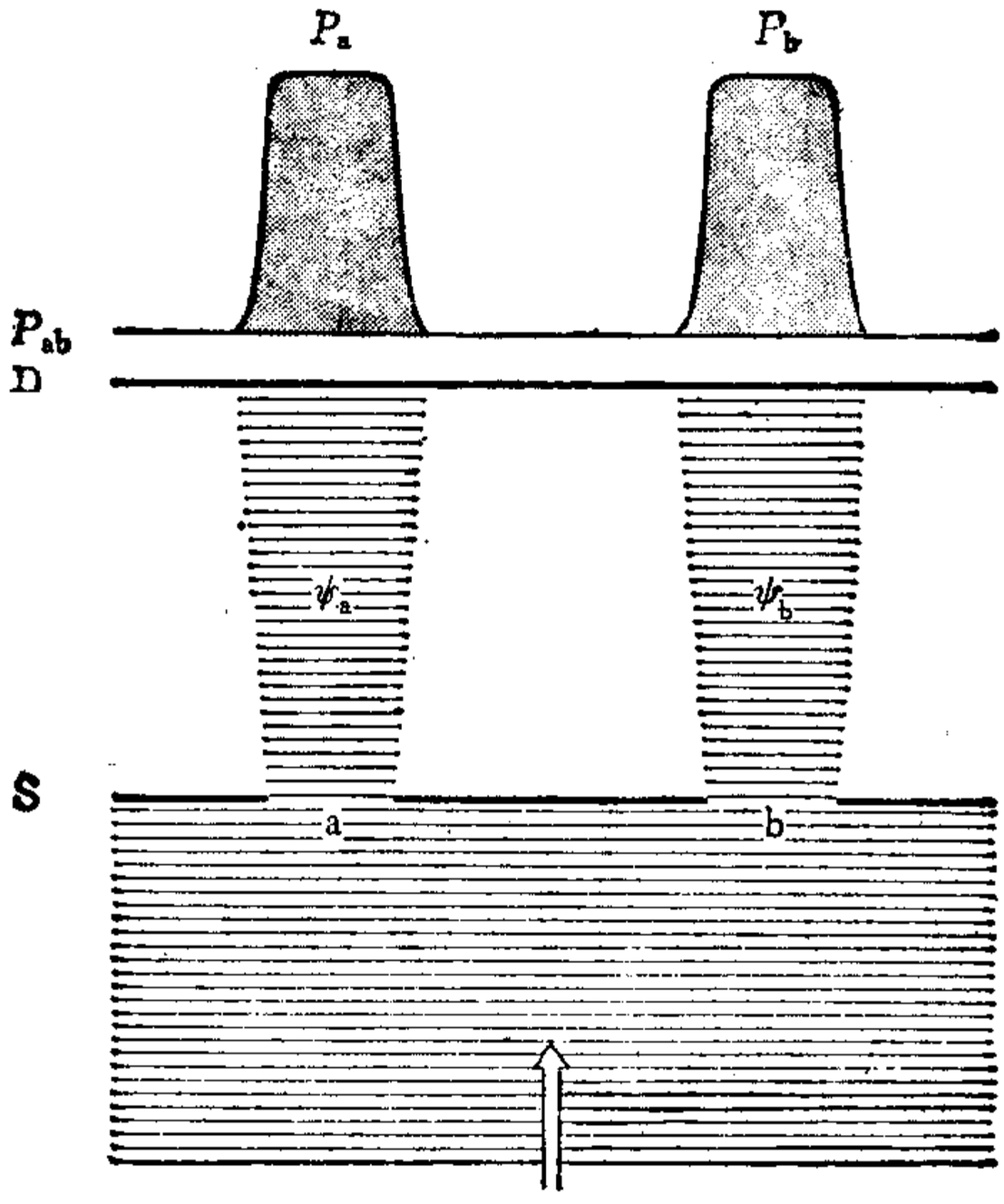



图 2.2　经典行为之例

展总是以这样的方式进行的。

## § 2.2　波动力学中的运动定律

如通过干涉实验所见，可以暂且说量子力学粒子的本质特征在于波动性.以波动性为重点来探求粒子行为的学科是**波动力学**.在此我们以上节所述的实验事实为基础建立波动力学的运动定律。目前先处理单粒子力学系.在 § 3.5 中将要说明多粒子体系的基本定律,但细节将留在第九章再谈。

在波动力学中，用**波函数**来描述一个量子力学粒子的运动状态,它是时间 $t$ 和空间坐标 $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ 的函数。因而波动力学的运动定律必须确定波函数在时间和空间上的变化。我们将对照着经典力学的运动定律来建立其运动定律。

### a) 第一定律——关于自由粒子的定律

经典力学第一定律指出，不受外力作用的物体在作匀速直线运动，我们把与之相对应的定律作为第一定律。匀速直线运动是动量一定的运动。另外，在不受外力作用的情况下，能量只是动量的函数，因而匀速直线运动也是能量一定的运动。根据上一节的讨论，处于该运动状态下不受外力作用的粒子（即，自由粒子）是用平面波表示的。因此，波动力学**第一定律**当然应该以下述形式来表述：

“当不受外力作用的粒子具有一定动量 $p$ 和一定能量 $E$ 时，其运动状态应由下述平面波来表示：

$$\psi_t(\boldsymbol{r},t) = C \ \exp\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et) \qquad (2.2.1)$$

此处 $C$ 是表示振幅的常数（一般为复数）。

在 (2.2.1) 式中采用取复数值的指数函数来表示平面波，对此有几点需要注意。仅就平面波而言，有可能使用实函数 $\sin[(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)/\hbar]$ 和 $\cos[(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)/\hbar]$（或其线性组合）。到底复数型的指数函数好，还是实数型的三角函数好，实际上应根据粒子的特性来确定，现在不能立即回答。但是，指数函数 (2.2.1) 的实部或虚部正是上述的三角函数，可以说，在这个意义上它包含着三角函数，而且指数函数较三角函数使用更为普遍。在 (2.2.1) 式中使用指数函数的问题，暂且先领会到这个程度，在本节后一部分还要继续讨论。

——需要注意，平面波 (2.2.1) 的相速度（$(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)$ = 常数的等相位面的移动速度）$v_{ph} = E/p$ 并不等于经典粒子的运动速度。如第 1 章已指出的那样，整个波包的移动速度，即群速度 $v_t = (\partial E/\partial p)$ 相当于经典粒子运动的速度。详细情况请参照 § 2.3 b)。

### b) 叠加原理

经典力学第二定律规定，受力 $\boldsymbol{f}$ 作用的物体，其动量变化遵守关系式 $(d\boldsymbol{p}/dt) = \boldsymbol{f}$。在力作用时，量子力学粒子的动量当然

并非保持不变，其运动状态不能再用（2.2.1）式的平面波来表示，波动力学第二定律则用来确定当力作用时波函数随时间空间的变化。

如果急于下结论的话，说不定会以为在有力作用时波函数仍具有（2.2.1）的形式，其中动量 $p$ 按经典运动定律 $(dp/dt)=f$ 变化，从而以此决定波动力学第二定律。这时，动量 $p$ 变成时间及空间变量的函数，所以波函数 $\psi_p(r,t)$ 即使以（2.2.1）的形式出现，也不是平面波。对这种波动来说，波与经典轨道相伴随的图像是成立的，确实将经典量子论和德布罗意假说融于一炉。但是，该方式并不能导出干涉实验中所谈到的基本实验结果——“叠加原理”，因而不能给出正确的第二定律[1]。正确的第二定律的得出是从引入叠加原理开始起步的。

量子力学的**叠加原理**是将干涉实验所得到的‘叠加原理’归纳发展而成的，能表示成如下形式：

在可能存在几个不同运动状态（用 $a,b,c\cdots$ 标记）时，波函数 $\psi_{abc\cdots}$ 可用各自运动状态下的波函数 $\psi_a,\psi_b,\cdots$ 之和来表示：

$$\psi_{abc\cdots}=\psi_a+\psi_b+\psi_c+\cdots \tag{2.2.2}$$

该‘叠加原理’必须首先适用因力作用而使动量不守恒的情况。

为简单起见，分析动量只能取 $p_a$ 和 $p_b$ 两个值的特殊力学系。动量为 $p_a$ 和 $p_b$ 的运动状态分别用下面的波函数表示：

$$\psi_a(r,t)=C_a\exp\frac{i}{\hbar}(p_a\cdot r-E_at),$$

$$\psi_b(r,t)=C_b\exp\frac{i}{\hbar}(p_b\cdot r-E_bt).$$

在自由粒子的情况下，粒子可能具有确定的动量。对应于该 $p_a$ 或 $p_b$ 的值，运动状态用 $\psi_a$ 或 $\psi_b$ 表示。如果有力作用，动量的值

---

1）可是，作为量子力学的经典近似，有时会出现形状与该方式十分相似的波函数，见§3.6.

就不确定，取$\boldsymbol{p}_a$ 的运动状态和取 $\boldsymbol{p}_b$ 的运动状态，二者均会出现．根据‘叠加原理’，这时波函数 $\psi_{ab}$ 必须是 $\psi_a$ 与 $\psi_b$ 之和．即

$$\psi_{ab}(\boldsymbol{r},t) = C_a \exp \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}_a \cdot \boldsymbol{r} - E_a t) + C_b \exp \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}_b \cdot \boldsymbol{r} - E_b t). \qquad (2.2.3)$$

与自由粒子的情况不同，(2.2.3) 式中的系数 $C_a, C_b$ 理应为时间 $t$ 的函数．比如说，在 $t = 0$ 之前粒子处于动量为 $\boldsymbol{p}_a$ 的自由粒子状态．在 $t = 0$时，显然是$C_a \neq 0$、$C_b = 0$． 假设力从 $t = 0$ 开始作用，就会出现动量值改变的可能性，此后，将不再有 $C_b = 0$ 的情况． 当然，$C_b$ 一旦开始具有非零的值， $C_a$ 也会相应地有所改变． 这样有力作用时的动力学变化就反映在系数 $C_a$、$C_b$ 随时间的变化上．按照这样的分析来描述动力学的变化，正是以叠加原理为基础的波动力学第二定律的模式．不言而喻，第二定律必须能给出系数 $C_a$ 和 $C_b$ 随时间的变化．稍后我们再来解答这个问题，在此之前尚有一些事情要做．

因为 (2.2.3) 式中的指数函数是根据第一定律引入的，所以其中动量和能量的关系均是就自由粒子而言的．因此，在受力情况下是否照样合适还存在疑问． 不过，能量 $E_a, E_b$ 只是分别出现在与时间有关的因子 $\exp(-iE_a t/\hbar)$ 及 $\exp(-iE_b t/\hbar)$ 之中，所以，假如把它们同依赖于时间的系数 $C_a$、$C_b$ 放在一起，就可以全部归纳到与时间有关的系数里．即

$$\psi_{ab}(\boldsymbol{r},t) = B_a(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\ \boldsymbol{p}_a \cdot \boldsymbol{r}\right) + B_b(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\ \boldsymbol{p}_b \cdot \boldsymbol{r}\right). \qquad (2.2.4)$$

显然，确定能量的问题也包含在求解系数 $B_a, B_b$ 的动力学问题之中．

(2.2.4) 式是动量只取两个值的特殊力学系的波函数． 一般力学系可能有无穷多个动量的值．假如在该情况下也采用推导

(2.2.4) 式的思路，则波函数必然是

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{\boldsymbol{p}'}B_{\boldsymbol{p}'}(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\ \boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right). \qquad (2.2.5)$$

求和号意味着对所有可能的动量值求和.当动量的值连续分布时，在（2.2.5）式中宜用积分表示

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3}\int A(\boldsymbol{p}',t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\ \boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{p}', \qquad (2.2.6)^{1)}$$

在数学上，它是傅里叶变换或傅里叶分解的表达式.

傅里叶变换 (2.2.6) 的逆变换是

$$A(\boldsymbol{p}',t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int\psi(\boldsymbol{r},t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\ \boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{r}, \qquad (2.2.7)$$

系数 $(2\pi\hbar)^{-3/2}$ 是为了二者形式上的对称而引入的。如果把傅里叶变换的手法用于 $A(\boldsymbol{p}',t)$ 这个 $t$ 的函数，则有

$$A(\boldsymbol{p}',t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')\times\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\ E't\right)dE', \qquad (2.2.8)$$

故 (2.2.6) 式可写成

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^4}}\iint\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')\times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\ (\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right]d^3p'dE', \qquad (2.2.9)$$

$\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')$ 是 $A(\boldsymbol{p}',t)$ 相对时间变量的傅里叶变换，$E'$ 仅是积

---

1) (2.2.6) 式是

$$\psi(x,y,z,t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}A(p'_x,p'_y,p'_z,t)\times\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p'_xx+p'_yy+p'_zz)\right]dp'_xdp'_ydp'_z$$

的简化形式，(2.2.7)式亦然. 此外 $d^3\boldsymbol{p}'=dp'_xdp'_ydp'_z$ 及 $d^3\boldsymbol{r}=dxdydz$ 分别为动量空间和坐标空间微小体积元的缩写. 当然，需要注意 $d^3\boldsymbol{p}'$ 与 $d^3\boldsymbol{r}$ 不是矢量而是标量，今后总将采用这种缩写法.

分变量，不能直接当作能量来看待．但是看一看(2.2.9)式就会明白，将 $E'$ 解释为能量也是很恰当的．为了将 $E'$ 解释为能量，有必要确定 $E'$ 和 $\boldsymbol{p}'$ 的关系．这是下一步要作的事情，与第二定律的建立直接有关．

### c） 第二定律——动力学的定律

在寻求以‘叠加原理’为基础的动力学变化的表现形式中，得到了(2.2.6)和(2.2.9)两式．下面就真正着手于第二定律本身的描述，具体的步骤是解决(2.2.9)式中 $E'$ 和 $\boldsymbol{p}'$ 的关系问题．目前只讨论质量为 $m$ 的非相对论粒子．我们首先分析不受外力作用的自由粒子，从自由粒子问题入手来建立决定力的作用的第二定律，看来或许有些奇妙，但尚有必要明确，第二定律给出的波函数与在力为零的极限情况下确定自由粒子行为的第一定律并不矛盾．这一点至关重要，而且这样作可以预见第二定律的一般形式．根据电子波的衍射干涉及光的康普顿散射之类的实验可知，量子力学自由粒子的能量动量的关系式与经典粒子的情况完全相同．因而，现在有必要把关系式 $E'=\boldsymbol{p}'^2/2m$ 纳入(2.2.9)式．其得以实现，在于 $\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')$ 的条件式为

$$\left(E'-\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m}\right)\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')=0. \tag{2.2.10}$$

从而，下列方程式成立：

$$\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^4}}\iint\left(E'-\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m}\right)\tilde{A}(\boldsymbol{p}'E') \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right]d^3\boldsymbol{p}'dE'=0, \tag{2.2.11}$$

假如利用[1]

---

1) 符号 $(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ 代表矢量微分算符，其 $x,y,z$ 分量分别为 $(\partial/\partial x)$，$(\partial/\partial y)$，$(\partial/\partial z)$．也就是矢量解析中经常使用的 $\nabla$（微分算符）．今后为了方便，一般采用 $(\partial/\partial\boldsymbol{r})$，有时采用惯用记号 $\nabla$．此外，记号 $(\partial/\partial\boldsymbol{p})$ 是以动量分量 $p_x$，$p_y$，$p_z$ 的偏微分为其分量的矢量微分算符．

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right] &= E'\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right] \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right] &= p'\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p'\cdot r-E't)\right] \end{aligned}\right\}, \tag{2.2.12}$$

则（2.1.11）式中的因子（$E'-\boldsymbol{p}'^2/2m$）总可以用微分算符

$$[i\hbar(\partial/\partial t)+(\hbar^2/2m)\nabla^2]$$

来代替. 其中 $\nabla^2=(\partial^2/\partial x^2)+(\partial^2/\partial y^2)+(\partial^2/\partial z^2)$. 以上算符与积分变量无关，因而可提到积分号以外. 剩下的积分恰是(2.2.9)式的右边，即波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 本身. 这样就得到了波函数的方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.2.13}$$

这是确定非相对论自由粒子行为的波动力学运动方程.

——此处，明显地表现出在第一定律中选择复数型指数函数的优越性. 在推导(2.2.13)式的过程中，能与 $E'=\boldsymbol{p}'^2/2m$ 对应的只有(2.2.1)式那样的指数函数，不可能是三角函数. 这完全在于关系式 $E'=\boldsymbol{p}'^2/2m$ 的特殊性. 虽然对相对论自由粒子来说，$E'^2=c^2\boldsymbol{p}'^2+m^2c^4$（$c$ 是光速），但实数型的三角函数亦可与之对应. 见本节 f).

下面首先证明，(2.2.13)式与第一定律并行不悖. 当 $E=\boldsymbol{p}^2/2m$ 时，(2.2.1)式显然满足(2.2.13)式. 反之，求解（2.2.13）式亦能得出（2.2.1）式. 可以实际作一下看看. 假如

$$\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')=\sqrt{2\pi\hbar}\,\delta\left(E'-\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m}\right)a(\boldsymbol{p}'), \tag{2.2.14}$$

则条件式(2.2.10)成立. $a(\boldsymbol{p}')$ 先可以为任意函数，具体形式以后再定. 另外，$\delta(\cdots)$ 是狄拉克 $\delta$ 函数.（因 $x\delta(x)=0$，故(2.2.10)式成立）把（2.2.14）式代入（2.2.9）式可得

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int a(\boldsymbol{p}')\times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m}t\right)\right]d^3\boldsymbol{p}'. \quad (2.2.15)$$

它是(2.2.13)式的通解,相当于(2.2.13)式。因为没有力在作用,所以系数 $a(\boldsymbol{p}')$ 并非时间的函数。因而,假设 $t=0$ 时动量为 $\boldsymbol{p}$,则此后任何时刻动量均取相同值 $\boldsymbol{p}$,波函数理应是(2.2.1)式给出的平面波。这在数学上可以表示为

$$a(\boldsymbol{p}')=\sqrt{(2\pi\hbar)^3}\,\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})C. \quad (2.2.16)$$

其中 $\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})$ 代表三维 $\delta$ 函数 $\delta(p_x'-p_x)\delta(p_y'-p_y)\delta(p_z'-p_z)$。把(2.2.16)式代入(2.2.15)式即可直接得出(2.2.1)式。

在自由粒子的运动方程(2.2.13)中,右边算符能写成 $\hat{H}_0=\hat{\boldsymbol{p}}^2/2m$。其中,假设了

$$\hat{\boldsymbol{p}}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}. \quad (2.2.17)$$

字母上的记号^代表算符。倘若以对平面波计算的结果(2.2.12)为基础,而把 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 看做与动量相当的算符,则 $\hat{H}_0$ 这个算符就恰好与自由粒子的哈密顿算符相对应。以该形式作为跳板,我们就可以向有力作用时的定律过渡。

力有多种多样,最简单的而且也是经常出现的力,就是保守力。保守力可以表示为势 $V(\boldsymbol{r})$ 的负梯度,后者是只与粒子的位置有关的实函数。这时经典的哈密顿算符为

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r}), \quad (2.2\ 18)$$

因而在保守力作用下,描述量子力学粒子运动状态的波函数自然应该满足运动方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi,\quad \hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r}). \quad (2.2.19)$$

若明显地写成偏微分方程的形式,则该运动方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)+V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t). \quad (2.2.20)$$

当 $V=0$ 时，它实际又回复到自由粒子的方程（2.2.13）。我们将把(2.2.20)式确定为波动力学中的基本运动方程。(2.2.20）式及(2.2.13)式叫做**薛定谔波动方程**或简称为**薛定谔方程**。一般把 $\hat{H}$ 及 $\hat{H}_0$ 叫做**哈密顿算符** (Hamiltonian)。在经典力学中哈密顿算符起着重要的作用，它就是所谓的时间演变的产生算符。该作用照样延伸到波动力学（即，量子力学），而且哈密顿算符通过薛定谔方程产生波函数的时间演变。

——哈密顿算符与粒子的种类、特性、力的性质等有关，但其雏形仍是经典的哈密顿算符。假如把经典哈密顿算符中的动量用算符 $\hat{p}=(\hbar/i)(\partial/\partial r)$ 代替，则可得出量子力学的哈密顿算符，但在该情况下还有几个必须注意的地方。第三章将详细说明其一般的构成方法。

现在，我们可按如下规定来叙述波动力学第二定律：

√ “受力的作用，粒子的运动是动量一定的平面波叠加而成的波动，其时间空间的变化服从薛定谔方程”。

可以看出，在建立第二定律的过程中，从（2.2.13）式向(2.2.19)式或(2.2.20)式的飞跃是极其自然的。但是，它终究是总结归纳的结论，并非逻辑推理的必然结果。薛定谔方程之正确与否，尚需将此后形成的波动力学或量子力学体系所得的全部理论结果与各种实验相对照来判断。实际上薛定谔方程在极其宽广的范围内经受了各种现象的检验，从而不断地显示出它的正确性。

### d） 第三定律——波函数的概率解释

经典力学中有个第三定律，那就是众所周知的作用反作用定律，但就其内容而言，则应纳入动量守恒定律之中。动量守恒定律是力学系平移不变性的归结。一般来讲，守恒定律与力学系的对称性或相对于变换的不变性有关。这些情况在量子力学中完全相同，打算以后再集中讨论。有关这方面的内容请参考第八章。因此，不打算再把作用反作用定律列为第三定律。定律的建立理应是波动力学的出发点，从这个观点来看，仅有第一定律和第二定律

尚不充分．其原因在于，没有解答描述粒子运动状态的波函数到底表示什么这样一个问题.在不明确波函数物理意义的情况下,就不清楚如何将理论体系与实际现象相结合，也不能给出求解薛定谔偏微分方程所必要的边界条件．波动力学中的第三定律应该给出波函数的物理意义．

在接触正文之前,先研究一下满足薛定谔方程（2.2.20）的波函数$\psi$的一般特性．

(i) 复数性　$\psi$本质上是复数,包含实部和虚部．这是因为，倘若$\psi$是纯实数（或纯虚数)，薛定谔方程左边就成了纯虚数(或纯实数)，然而右边却是纯实数（或纯虚数)，等式不复成立．根据经验,与观测直接有关的量取实数值．这样,与波函数$\psi$本身相比,直接赋予由$\psi$构成的实数量以明确的物理意义,要更为自然一些.现在,用干涉条纹的强度分布与波函数绝对值的平方成正比的机理已经解释了干涉实验．因此,我们来研究一下 $|\psi|^2$ 的性质．

(ii) 连续性方程　若从波函数$\psi$出发来定义实数量

$$\rho = (\boldsymbol{r},t) = |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \tag{2.2.21}$$

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left\{\psi^*(\boldsymbol{r},t)\ \frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial\boldsymbol{r}} - \frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r},t)\right\}, \tag{2.2.22}$$

则有连续性方程

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} + \mathrm{div}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = 0 \tag{2.2.23}$$

(* 表示复共轭).把(2.2.20)式乘以 $\psi^*(\boldsymbol{r},t)$，把(2.2.20)式的复共轭式乘以 $\psi(\boldsymbol{r},\ t)$，而后两式相减,因$V$是实数,故可直接得出上式.连续性方程的意义在于,以 $\rho(\boldsymbol{r},t)$ 为密度函数的'某物理量'是守恒的．也就是说,若把（2.2.23）式两边就封闭曲面S所包围的范围$\Omega$进行积分,那么,根据高斯（Gauss）定理,可以得到

$$\frac{d}{dt}\int_\Omega \rho(\boldsymbol{r},t)d^3\boldsymbol{r} = -\oint_S \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)\cdot d\boldsymbol{f} \tag{2.2.24}$$

上式表明,在$\Omega$内'某物理量'的总和 $\int_\Omega \rho d^3\boldsymbol{r}$ 随时间的增减率等于'某物理量'通过封闭曲面S(矢量$d\boldsymbol{f}$为其微小面元)流进或流出的

流量的总和$\oint_S \boldsymbol{J}\cdot d\boldsymbol{f}$. 假如把封闭曲面S无限扩大，使范围$\Omega$扩展到全部空间，那么在无限远处的波函数——从而流动密度$\boldsymbol{J}$——为零的边界条件下，(2.2.24)式就会给出'某物理量'守恒的定律[1)]. 即，

$$\int \rho(\boldsymbol{r},t)d^3\boldsymbol{r} = 常量. \tag{2.2.25}$$

这样一来，我们的问题在于明确所谓的'某物理量'是什么，即$\rho = |\psi|^2$是什么量的密度函数，进而$\boldsymbol{J}$又是什么量的流密度. 为此，尚需再描述波函数的另一个性质.

(iii) 扩散型时间演变　由薛定谔方程，特别是由自由粒子方程(2.2.13)式所决定的运动，其效果会使集中在狭小范围的波动向空间扩散. 根据(2.2.15)式的通解，单色平面波的相速度$v_{ph} = E'/p' = p'/2m$为$p'$的函数，所以，动量不同，平面波前进的相速度也不同，可以预料，波形将是零乱的. 这就是相速度为波数或频率的函数的波动，即离散性波动的一般特征(详见§2.3b). 特别当相速度正比于波数增大时，可以定性地预料波形具有扩散的趋势. 无需经过对离散性的繁琐讨论，波扩散的现象正是前节干涉现象中已经意料到的波动特有的性质. 这是因为波动只在屏幕S（参照图2.1）正上方小孔a,b的出口附近，但却随着行进而扩散，最终在墙面D上形成宏观分布. 倘若没有这种扩散，也就观测不到干涉现象.

在以上三个性质的基础上，我们来探讨波函数的物理意义. 在电磁学和流体力学中也有连续性方程，它体现电荷守恒或质量守恒. 因此，或许可以把$\rho = |\psi|^2$解释成表示量子力学粒子的电

---

1) 有必要对该边界条件加以补充说明. 例如像（2.2.1）式那样的波函数或散射问题中出现的定态波函数，即使在无穷远处其值也不会为零. 但那时$\rho$本身却不随时间变化，守恒定律依然成立. 而(2.2.24)式右边也确实为零. 严格地讲推导守恒定律要求的边界条件，并非$\psi$或$J$本身在边界面上为零，而是总和$\oint \boldsymbol{J}\cdot d\boldsymbol{f}$为零. 但是正如反复说明的那样，像平面波一样无限扩展的波函数应是极端理想化的数学模型. 从物理的角度来看扩展无论多大，终归是有限的. 因此可以认为，在无限远处$\psi$本身为零的边界条件总能成立.

荷分布或质量分布的一个量。但是，该解释显然与作为基础的实验事实相抵触。假如这种解释是正确的，那么根据上述性质(iii)，电子之类的微观粒子本身就会扩散到宏观范围去，但既未出现过这样的电子，也与不可分割性相矛盾。第二种可能性也许是把 $\rho = |\psi|^2$ 解释为多粒子集团的分布函数。对经典粒子集团来说，有时粒子分布的疏密不同会形成波动现象，而且在该情况下可用粒子间隔的增大来说明波函数的扩散，因而大体上看来解释得很自然。但是它也直接和作为基础的实验事实相矛盾。因为在干涉实验中已确认，波动绝非粒子集团的现象，而是单个粒子的属性。

M. 玻恩给出了与基础的实验事实相统一的合理解释.他规定 $\rho = |\psi|^2$ 是与粒子存在的概率密度成正比的量。根据这种解释，波函数的扩散只会引起概率分布的扩散，决不意味着粒子本身的扩大膨胀.也就是说，即使粒子最初确实局限于某一特定的狭小范围，但随着时间的流逝，粒子位于何处却不得而知.采用这种解释，也可以合理地来理解干涉实验.墙面D上 $\rho = |\psi|^2$ 的分布应与干涉条纹的强弱明暗形式相同。粒子在峰部的存在概率较谷部的存在概率为大。因此，如前节干涉实验的后半部分所述，假如多次拍摄单个粒子的照片，则于存在概率大的峰部摄到的粒子的照片要比存在概率小的谷部摄到粒子的照片数多。把大量的照片对齐叠加在一起冲洗，当然能得到其强度分布和 $\rho = |\psi|^2$ 的分布完全相同的干涉条纹。由强光束产生的干涉条纹的照片，与在重叠冲洗的情况下一样，其粒子分布同样可以按照 $\rho = |\psi|^2$ 再现出来.这样，波函数的概率解释毫无矛盾地说明了干涉实验。

这样一来，波函数绝对值的平方代表着粒子存在的概率密度，按照这个规定就能够得出粒子位置的信息。但是，有关动量的情况，尚一无所知。因为经典的力学量全都表示成位置坐标和动量的函数，所以对波动力学来说也必须确定给出动量信息的方式.在寻求第一定律、第二定律及波函数概率解释的过程中所发现的，正是这个问题的答案.在第一定律中规定动量一定的状态为平面波；而在第二定律前半部分则把动量的变化描述成平面波叠加时的系

数(或振幅)的变化。因此，在用波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 所描述的运动状态中，应该通过（2.2.6）式中的傅里叶分量 $A(\boldsymbol{p},t)$ 来给出有关动量的信息。此时，自然会联想到傅里叶变换（2.2.6）和逆变换（2.2.7）以及巴塞瓦（Parseval）等式

$$\int|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3\boldsymbol{r}=\int|A(\boldsymbol{p},t)|^2d^3\boldsymbol{p}. \tag{2.2.26}$$

以上三式表明在数学上 $\psi$ 和 $A$ 完全等价。若 $|\psi|^2$ 代表存在概率密度，则 $|A|^2$ 也应该具有同样的意义，即代表动量的概率分布。

在以上推论的基础上，我们就能把**第三定律**规定为：

“在时刻 $t$，于空间某点 $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$ 附近微小体积元 $d^3\boldsymbol{r}=dxdydz$ 中找到粒子的概率与 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3\boldsymbol{r}$ 成正比。”以及“在时刻 $t$，于动量空间某点 $\boldsymbol{p}=(p_x,p_y,p_z)$ 附近微小体积元 $d^3\boldsymbol{p}=dp_xdp_ydp_z$ 中找到粒子具有该动量的概率与 $|A(\boldsymbol{p},t)|^2d^3\boldsymbol{p}$ 成正比。”

定律中 $\psi$ 和 $A$ 的关系由(2.2.6)、(2.2.7)及(2.2.26)诸式给出。

——关于第三定律还有一点需要注意。绝不能认为，仅仅把绝对值的平方 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 解释成粒子存在的概率密度，对波函数物理意义的说明就算完结。因波函数为复数，故具有相当于两个实函数的自由度。而只给出绝对值的平方，这个实函数的物理意义尚不充分。剩下的信息则寓于取绝对值平方时已经消掉了的相位函数 $\arg\psi(\boldsymbol{r},t)$ 之中。如果观察一下表示动量一定的状态的平面波，这种情况就会一目了然。对平面波来说，与动量有关的信息只存在于相位函数之中，而在取绝对值平方时，却完全消掉了。$\psi(\boldsymbol{r},t)$ 的相位函数中所包含的信息一般通过傅里叶变换就会转移到 $A(\boldsymbol{p},t)$ 中去。因此，作为第三定律，还必须与 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 同时来确定 $|A(\boldsymbol{p},t)|^2$ 的物理意义。

现在，我们从第三定律的立场出发，重新评价连续性方程（2.2.23）及守恒定律（2.2.25）。不用说所谓守恒的‘某量’就是粒子的存在概率。$\rho=|\psi|^2$ 是存在概率密度，$\boldsymbol{J}$ 为概率流密度。因此，守恒定律或连续性方程表明，粒子既不能湮没也不能重新产生。需要注意，这些性质在数学上由势 $V$ 的实数性、或者同样由

算符 $\hat{H}$ 的厄米性[1]推导出来。 动量的概率分布也满足守恒定律 $\int |A|^2 d^3\boldsymbol{p} =$ 常数。通过巴塞瓦等式（2.2.26）能直接得到这个结果。

根据第三定律，在某一空间范围 $\Omega$ 内粒子出现的概率为

$$P(\Omega) = \int_{\Omega} |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3\boldsymbol{r} \left[\int |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3\boldsymbol{r}\right]^{-1}. \qquad (2.2.27)$$

当然分母的积分是就全部空间而言的。随着范围 $\Omega$ 的增大，$P(\Omega)$ 由 $P(0) = 0$ 到 $P(\infty) = 1$ 单调增加，完全具有概率函数的性质。根据守恒定律，(2.2.27) 式的分母为常数，因而可以把它归入波函数的常数因子之中，由于薛定谔方程是线性齐次方程，当 $\psi$ 为解时，$c\psi$（$c$ 为任意常数）也是它的解，所以如果 $c$ 选的恰当(即 $|c|^2 = \int |\psi|^2 d^3\boldsymbol{r}$)，则新的 $\psi$（原来 $\psi$ 的 $c$ 倍）总会满足

$$\int |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3\boldsymbol{r} = 1. \qquad (2.2.28)$$

这时，概率函数为

$$P(\Omega) = \int_{\Omega} |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3\boldsymbol{r}. \qquad (2.2.29)$$

这样来选择常数因子的过程叫做波函数的**归一化**，而(2.2.28)式则称为**归一化条件**. 归一化条件 (2.2.28) 只能适用于绝对值的平方可积的那种函数。 对于象平面波那样扩展到全部空间的波来说，(2.2.28) 式的左边发散，因而这种方式的归一化是不可能的。有

---

1) 所谓的厄米性，指的是如下的性质： 现在把两个函数 $u(\boldsymbol{r})$，$v(\boldsymbol{r})$ 的函数内积定义为 $(u,v) = \int u^* v d^3\boldsymbol{r}$. 对算符 $\hat{O}$ 来说，给出 $(\hat{O}u,v) = (u,\hat{O}^\dagger v)$的算符 $\hat{O}^\dagger$ 叫做 $\hat{O}$ 的**厄米共轭算符**. 假如 $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$，则 $\hat{O}$ 称为**厄米算符**. 就(2.2.19)中的哈密顿算符而言，

$$(\hat{H}u,v) - (u,\hat{H}v) = -\frac{\hbar^2}{2m}\oint_S \left(\frac{\partial u^*}{\partial r} v - u^* \frac{\partial v}{\partial r}\right) \cdot d\boldsymbol{f}$$

(S 为包含整个范围的无限远的封闭曲面)，所以，$\hat{H}$ 的厄米性对于满足上式右边为零的边界条件的函数集合是成立的. 用 (2.2.17) 式定义的动量算符，其厄米性在下式右边为零的边界条件下成立

$$(\hat{p}u,v) - (u,\hat{p}v) = i\hbar \oint_S u^* v d\boldsymbol{f}.$$

关平面波的归一化请参考下节内容及散射理论(《量子力学》(II))第十二章。另外,无论采用何种方式,归一化条件只会决定常数因子的绝对值,而常数相位依然是不确定的。未定的常数相位可以根据具体问题适当选择。此外,$\psi$的归一化应该通过巴塞瓦等式(2.2.26)自动给出$A$的归一化。

### e) 位置坐标的测定

下面,我们来阐明第三定律给出的波函数的含义与实验中的观测操作之间的关系。相应于观测仪器的结构,整个空间范围将分成互不重叠的$n$个区域$\Omega_1,\Omega_2,\cdots,\Omega_n$。现在有$N$个独立的力学系,它们各自只由一个全同粒子组成。其中假设各力学系的运动状态用完全相同的波函数$\psi$来描述。而且$N$必须相当大。在这许多力学系的每一个之中同时测定粒子位置的坐标,其结果在区域$\Omega_i$内发现粒子的力学系的数目为$N_i$。当然$\sum_{i=1}^{n} N_i = N$。在$N$为无穷大的极限上,$w_i = N_i/N$应该趋于由序号$i$来决定的恒定值。该值当然就是实验结果本身,也正是在$\Omega_i$中找到粒子的概率。第三定律认为,这个值等于在波动力学的框架中从理论上所求出的$P(\Omega_i) = \int_{\Omega_i} |\psi|^2 d^3r$。在图 2.3 中,当用一维变量$x$的区间表示范围$\Omega_i (i = 1,2,\cdots n)$时,$w_i = N_i/N$是用矩形图描绘的;在$N$、$n$相当大而$\Omega_i$相当小的极限上,该矩形图应趋近于和$|\psi(x,t)|^2$同样光滑的曲线。这是第三定律的内含,也是干涉实验中把单个粒子的照片重叠冲洗能够得出干涉条纹的这一事实的忠实写照。

我们由这个测定结果来求粒子位置的平均值。设$\Omega_i$中心点的$x$坐标为$x_i$,则平均位置的$x$坐标就是

$$\langle x \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i N_i/N = \sum_{i=1}^{n} x_i w_i.$$

在$n$很大而$\Omega_i$很小的极限情况下,求和变成积分,$x_i$可用$x$代

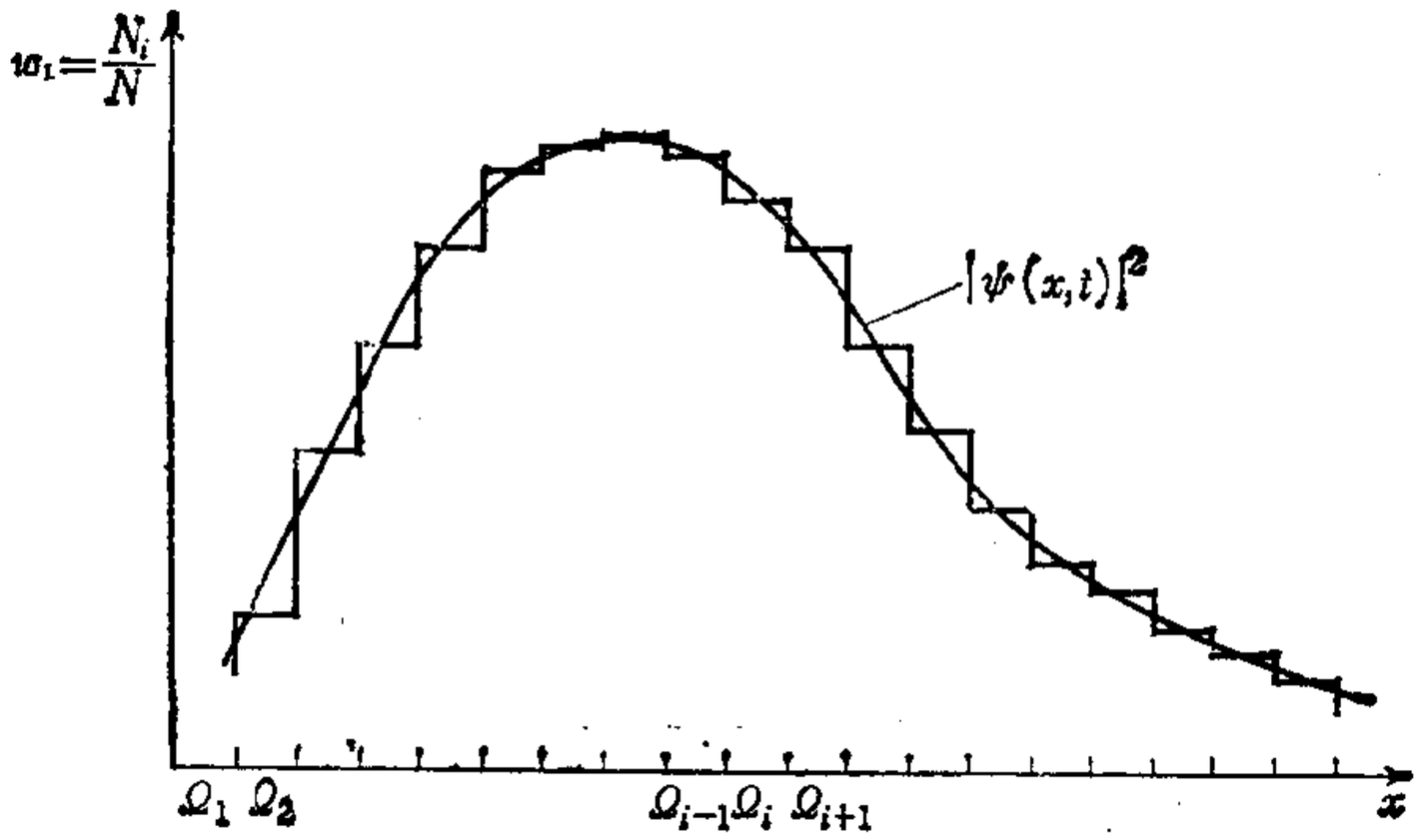



图 2.3　位置坐标的测定

替，$w_i$ 可用 $|\psi|^2$ 代替。因此，平均位置的 $x$ 坐标为

$$\langle x\rangle = \int x|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3\boldsymbol{r}. \tag{2.2.30}$$

$y$ 坐标和 $z$ 坐标可用同样方法求出。一般来说，作为位置坐标的函数，力学量 $F(r)$ 的平均值为

$$\langle F\rangle = \int F(\boldsymbol{r})|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3\boldsymbol{r}. \tag{2.2.31}$$

这叫做力学量 $F$ 在状态 $\psi$ 中的**期待值**. 其中，(2.2.30)及(2.2.31)两式的波函数 $\psi$ 是归一化的。

以上所说是关于位置坐标的测定，而对动量的观测方法亦可做完全同样的描述。因为这是不言而喻的，所以无需重新加以说明。动量的 $x$ 分量的期待值为

$$\langle p_x\rangle = \int p_x|A(\boldsymbol{p},t)|^2 d^3\boldsymbol{p}, \tag{2.2.32}$$

而作为动量的函数，力学量 $G(\boldsymbol{p})$ 的期待值为

$$\langle G\rangle = \int G(\boldsymbol{p})|A(\boldsymbol{p},t)|^2 d^3\boldsymbol{p}. \tag{2.2.33}$$

因为 $\psi$ 和 $A$ 可以通过(2.2.6)、(2.2.7)和(2.2.26)诸式联系起来，所以由(2.2.30)式和(2.2.32)式就能分别得出

$$\langle x\rangle = \int A^*(\boldsymbol{p},t) ih \frac{\partial A(\boldsymbol{p},t)}{\partial p_x} d^3\boldsymbol{p}, \tag{2.2.34}$$

$$\langle p_x\rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\,\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial x}\,d^3\boldsymbol{r}. \qquad (2.2.35)$$

以上两式读者可自行推导. 作为位置和动量的函数，力学量 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 的期待值通常可以借助于 $i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p})$ 或 $(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ 来代替 $\boldsymbol{r}$ 或 $\boldsymbol{p}$ 所得到的算符 $F(\boldsymbol{r},(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r}))$ 和 $F(i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p}),\boldsymbol{p})$ 而表示成

$$\langle F\rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)F\left(\boldsymbol{r},\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)\psi(\boldsymbol{r},t)d^3\boldsymbol{r} \qquad (2.2.36a)$$

$$= \int A^*(\boldsymbol{p},t)F\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}},\ \boldsymbol{p}\right)A(\boldsymbol{p},t)d^3\boldsymbol{p}. \qquad (2.2.36b)$$

有关 (2.2.34)、(2.2.35) 及 (2.2.36) 等力学量及其期待值的细节将留在第三章予以说明。

由第三定律所得到的波函数的含义导致的令人震惊的结果是，观测会使力学系的运动状态发生变化. 刚才，在用 $\psi$ 所描述的状态中测定粒子的位置时，是在特定区域 $\Omega_i$ 中找到粒子. 测定后的粒子，其波函数 $\phi_i$ 当然只分布在 $\Omega_i$ 之中，其余部分必须为零[1]. 一般来说 $\phi_i$ 和 $\psi$ 是完全不同的函数. 因此，由于测定所致，粒子的波函数会由 $\psi$ 剧变为 $\phi_i$. 这种变化往往叫作由于观测而引起的‘波的收缩’. 由于观测引起的收缩是一种非因果的、具有概率性的变化，其性质不是用薛定谔方程所能找到的。由于观测而产生的‘波的收缩’不仅表现在位置的测定上，也体现在动量及其它力学量的测定上. 该变化是作为微观力学系的观测对象与作为宏观力学系的测定装置之间复杂的相互作用的结果. 本来，应该把量子力学 (以及量子统计力学) 用于这两个力学系，而从整体上对观测过程进行分析. 但是，该问题明确的理论解释却相当困难，尽管进行了大量尝试，然而至今也不能说已确立的观测过程理

1) 在其它区域 $\Omega_j(i\neq j)$ 中出现粒子时，测定后的波函数 $\phi_j$ 当然只在 $\Omega_j$ 中不为零. 因此，$\phi_i$ 与 $\phi_j$ 之积到处为零，函数的内积 $(\phi_i,\phi_j)$ 也显然为零. 当 $(\phi_i,\phi_j)=0$ 时，称 $\phi_i$ 和 $\phi_j$ “正交”.

论足以为大多数人所采纳[1]. 建立以波函数的概率解释为基础的正统量子力学，主要是在 N. 玻尔领导下的哥本哈根研究所中进行的. 因此往往也叫做**哥本哈根解释**. 按照哥本哈根解释，量子力学在理论上正确地预言了相当多的微观现象，至少不曾导致与实验明显矛盾的结论。在这个意义上，哥本哈根解释具有可靠的实验依据，今天可以说，它是完全正确的。但是，由于在物理学的基本定律中引进了概率的概念，使有些物理学家对哥本哈根解释深怀疑意. 其中包括对量子现象的明确解释作出过重要贡献的A. 爱因斯坦。这一点意义极为深远。他和玻尔的激烈争论已载入史册，而且该争论对加深理解量子力学的理论结构亦颇有裨益。

——在经典物理学中，也往往使用概率的概念，但它却不在基本定律之列. 经典物理学的基本定律全都是确定性的。当我们对研究对象认识不确切或不充分之际，作为一种辅助手段使用概率，概率的概念是在寻求唯象论的定律时引入的. 因此，可能有人认为量子力学也是这种半唯象论阶段的理论体系，而绝非基本定律. 即使在目前，尚有一些持此种观点的物理学家试图从更为基础的决定论的'力学'中推导出量子力学。

### f) 波函数，概率幅，态函数

截止目前，描述波动随时空变化的函数一直叫作波函数。这个称呼极不明确，从常识上讲，它是针对空间点 $\boldsymbol{r}$ 及时间 $t$ 的函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 来使用的。然而根据上述第三定律，其绝对值平方与概率有关，往往为了强调这一点而称之为**概率幅**. $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 是位置的概率幅，$A(\boldsymbol{p},t)$是动量的概率幅. 此外，波函数尚能完整描述某一时刻的运动状态，在这个意义上往往又使用**态函数**这一术语。对于满足薛定谔方程的非相对论性粒子来说，波函数既是概率幅，也是态函数。但对进行相对论论性运动的粒子来说，往往波函数未必就是概率幅或态函数. 下面对这个问题予以简单说明。

即使对于相对论运动，(2.2.9) 式之前的推导亦照样适用。但是，能量和动量的关系就不再是 $E'=p'^2/2m$，而必须是$E'^2-p'^2c^2=$

1）请参照本讲座第四卷《量子力学》(II)第十九章 §19.5。

$m^2c^4$($c$ 是光速)。从该式出发，采用(2.2.12)式那样的步骤，则可派生出**克莱因-戈登**（Klein-Gordon）**方程**，

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}-\nabla^2\psi+\frac{m^2c^2}{\hbar}\psi=0。\tag{2.2.37}$$

此方程的性质与薛定谔方程大不相同。首先，(2.2.37) 式中只包含实数算符，显而易见该方程本身并不要求波函数 $\psi$ 有复数性，其解可以是实函数也可以是复函数。波函数是实数还是复数要由另外的必要条件来确定。其次，我们还想指出波函数 $\psi$ 不能是概率幅.下面来分析波函数是复数的情况，如果把 (2.2.37) 式乘以 $\psi^*$，把(2.2.37) 式的复数共轭乘以 $\psi$，所得两式各边相减，则可得出与 (2.2.23) 式形式完全相同的连续性方程。其中，对克莱因-戈登的情况，可有

$$\rho(\boldsymbol{r},t)=-i\varepsilon\left\{\frac{\partial^*\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)-\psi^*(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\right\},\tag{2.2.38a}$$

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)=-i\varepsilon c^2\left\{\psi^*(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial\boldsymbol{r}}-\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r},t)\right\}.\tag{2.2.38b}$$

式中，$-i$ 是为了使 $\rho$ 和 $\boldsymbol{J}$ 成为实数而附加的因子，$\varepsilon$ 现在可以是任意实数。总之，因为连续性方程成立，所以以 $\rho$ 为密度函数的'某物理量'是守恒的.但是，与薛定谔方程不同，$\rho$ 不是正定的量，取正负哪一种值均可，故不能代表粒子的存在概率密度。也就是说，克莱因-戈登方程的波函数不能是概率幅.进而，假如考虑到该方程是时间的二阶微分方程，则要充分描述某时刻的波动状态，显然不仅必须知道波函数 $\psi$，还必须知道其一阶导数 $(\partial\psi/\partial t)$。在这个意义上，绝不能把波函数 $\psi$ 本身就叫作态函数。通常称该 $\psi$ 为'场量'。

——作为相对论波动方程，除克莱因-戈登方程之外，还有狄拉克方程。它只包含时间和空间的一阶微分算符，因而情况大不相同。详见第七章。

对克莱因-戈登方程来说，$\rho$ 是表示粒子电荷密度的力学量，

$J$ 是表示其电流密度的力学量，这种解释极为自然[1]。后面将要详细讨论，在量子力学中力学量一般就是算符。因此，有必要把场量 $\psi$ 本身当作力学量，即当作算符来处理。结果必然导致场的量子论。在场的量子论中，作为概率解释对象的态函数 $\Psi$ 一般与场量 $\psi$ 不同。在薛定谔方程(2.2.19)中态函数 $\Psi$ 是 $r$ 的函数，与此相似，场的量子论中态函数 $\Psi$ 则能表示成场量 $\psi$ 的泛函。而且，作为态函数的基本性质，要求 $\Psi$ 应满足对时间的一阶微分方程，即

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \tag{2.2.39}$$

$\hat{H}$ 虽是依赖于 $\psi$ 的泛函的线性算符，但根据概率守恒定律和其它物理上的要求，却必须是表示场能的厄米算符。详细讨论将放在第十章，此处暂不深究。不过需要注意，(2.2.39) 与 (2.2.19) 两式具有完全相同的形式。(2.2.19)式只限于非相对论粒子的波函数，而(2.2.39)式则不管粒子种类和运动状态如何，是对一般态函数均普遍适用的基本方程。波函数方程与态函数方程形式相同只是在非相对论粒子的薛定谔方程情况下一个特殊的例外。既了解如上情况，也就往往把一般的态函数方程(2.2.39)叫作薛定谔方程。在今后一段时间，虽然只致力于建立单个的非相对论粒子的量子力学，但由于有上述巧合，该理论体系应当可以直接推广到包含场的量子论的一般情况。

——前面曾指出，量子力学的发展和推广必然会过渡到场的量子论。但是，原来使量子论得以形成的普朗克假说却直接导致了电磁场的量子化。光的粒子说正是电磁场量子化的直接产物。因此，说量子力学在历史上发端于场的量子论，亦未常不可。倘若如此，我们认为尚可由场的量子论开始来构筑量子力学的理论体系。请读者不妨一试！

## §2.3 定态和边界条件

玻尔经典量子论的基础在于假定原子系统存在着定态。但是

1) $\rho$ 和 $J$ 中所包含的常数 $s$ 是按本解释来确定的。另外，$\psi$ 若是实数，则(2.2.38)式右边为零。也就是说，在克莱因-戈登方程中，波函数是实数还是复数应取决于粒子是中性的还是带电的。

该假定与作为经典量子论出发点的经典物理学理论体系却有尖锐矛盾。在这个意义上，经典量子论并非一个协调的体系。因此，在波动力学的框架内能否合理地引入定态的概念，对我们来说是一个至关重要的课题。本节首先对定态作出一般定义，再通过给定边界条件等手续来分析其具体内容。

### a） 定态和能量本征态

薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{2.3.1}$$

虽然可给出力学系的时间演变，但却只限于哈密顿算符 $\hat{H}$ 与时间无关的情况，即 $(\partial \hat{H}/\partial t) = 0$ 的情况。此时 $\hat{H}$ 仅是空间变量 $r$ 的算符，所以 (2.3.1) 式对 $r$ 和 $t$ 是分离变量型的，并有特解

$$\psi(r,t) = u(r)\chi(t). \tag{2.3.2}$$

$u$ 和 $\chi$ 分别满足方程

$$\hat{H}u = Eu, \tag{2.3.3a}$$

$$i\hbar \frac{d\chi}{dt} = E\chi. \tag{2.3.3b}$$

式中 $E$ 为常数。直接求解 (2.3.3 b) 式得 $\chi \propto \exp(-iEt/\hbar)$，取决于 $E$ 是实数还是复数，该函数 $\chi$ 随时间的变化将会有很大差异。方程 (2.3.3 a) 式确定常数 $E$ 的特征。它不外乎就是哈密顿算符 $\hat{H}$ 的本征值方程。$E$ 为算符 $\hat{H}$ 的**本征值**，$u$ 为算符 $\hat{H}$ 属于本征值 $E$ 的**本征函数**。现在若将 (2.3.3a) 左乘以 $u^*$ ($u$ 的复共轭)，并对全部空间积分，则可把 $E$ 写为

$$E = \frac{(u,\hat{H}u)}{(u,u)}. \tag{2.3.4}$$

括号表示函数内积。分母 $(u,u)$ 显然是正实数。另一方面，$(u,\hat{H}u)^* = (\hat{H}u,u) = (u,\hat{H}^\dagger u)$ ($\hat{H}^\dagger$ 是 $\hat{H}$ 的厄米共轭算符，见 62 页的脚注)，若 $\hat{H}$ 是厄米算符，即 $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$，则分子 $(u,\hat{H}u)$ 就是实数。前已指出 (62 页脚注)，哈密顿算符的厄米性与加给波函

数的边界条件密切相关。关于边界条件的问题将在本节后半部详细说明。今后除非特别指出，$\hat{H}$ 总是在具有厄米性的情况下进行讨论的。因此，本征值 $E$ 为实数。

一般来说存在着若干个本征值，与之相应本征函数亦有所差异，所以加上脚标 $\nu$ 以示区别，因此，(2.3.3 a) 式可以写成

$$\hat{H}u_\nu = E_\nu u_\nu。 \tag{2.3.5}$$

当本征值取不连续值时，让 $\nu$ 为自然数或整数比较方便。但当本征值取连续值时，$\nu$ 也变成连续的参数。当一个本征值只有一个所属的本征函数时，本征值不会**简并**，而在多个本征函数属于一个本征值时，就说该本征值是简并的。一般来说，参数 $\nu$ 对应于运动的自由度而存在有多个值。随着量子力学的逐步展开，详情会渐次明了。假如应用 (2.2.19) 式中的 $\hat{H}$，把 (2.3.5) 式明显地写成偏微分方程的形式，就变成了(1.8.23)式那种样子。前面这个方程被称为薛定谔方程。对照着 (2.3.1) 式往往也把 (2.3.5) 式叫做定态薛定谔方程。

薛定谔方程 (2.3.1) 的特解 (2.3.2) 可写为

$$\psi_\nu(\boldsymbol{r},t) = u_\nu(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_\nu t\right)。 \tag{2.3.6}$$

这个波函数具有特殊的含义。由于 $E_\nu$ 为实数，所以

$$|\exp(-iE_\nu t/\hbar)| = 1$$

是成立的，粒子的存在概率密度 $|\psi_\nu(\boldsymbol{r},t)|^2 = |u_\nu(\boldsymbol{r})|^2$ 不随时间变化。存在概率密度对时间无依赖性，从这个意义上讲，(2.3.6) 式所代表的运动状态就叫做**定态**。对定态来说，动量在空间的概率分布亦不随时间变化。为了证明这一点，我们来求定态中的概率幅 $A_\nu(\boldsymbol{p},t)$。把 (2.3.6) 式代入 (2.2.7) 式，就可以立即得到

$$A_\nu(\boldsymbol{p},t) = a_\nu(\boldsymbol{p})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_\nu t\right) \tag{2.3.7a}$$

$$a_\nu(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int u_\nu(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{r}。 \tag{2.3.7b}$$

因此，$|A_\nu(\boldsymbol{p},t)|^2 = |a_\nu(\boldsymbol{p})|^2$，实际上动量的概率分布也与时间

无关。定态这种名称的确与其物理内含相符合。

值得注意的是，定态 (2.3.6) 成了与能量相对应的哈密顿算符的本征函数。 假如将 $\hat{H}$ 的本征函数 $u_\nu$ 描述成“表示能量具有特定值 $E_\nu$ 的状态的态函数”，则可以说能量具有本征值 $E_\nu$ 这一特定值的状态为定态。此结论颇似玻恩假说，与经典量子论中定态‘假说’的突出其来相比，该结论亦极其自然，波动力学理论框架的合理性遂可见一斑。对波动力学来说，现在的关键在于能否给本征值问题 (2.3.5) 以同样的物理解释。

截止目前，只就自由粒子的情况明确表示出能量具有确定值的状态的波函数——第一定律(2.2.1)。那么，我们来分析一下，波函数 (2.2.1) 到底满足什么样的本征值方程。显然

$$\psi_p(r,t) = u_p(r)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_p t\right), \quad E_p = \frac{p^2}{2m} \tag{2.3.8a}$$

$$u_p(r) = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}p\cdot r\right) \tag{2.3.8b}$$

具有 (2.3.6) 的形式(用 $p$ 代替 $\nu$)。在自由粒子的情况下，哈密顿算符是 $\hat{H}_0 = p^2/2m$，所以 $u_p$ 确实为下列本征值问题的解：

$$\hat{H}_0 u_p = E_p u_p, \tag{2.3.9}$$

也就是算符 $\hat{H}_0$ 属于本征值 $E_p = p^2/2m$ 的本征函数。 更有趣者， $u_p$ 也是属于(2.2.17)式所定义的动量算符 $\hat{p} = (\hbar/i)(\partial/\partial r)$ 的本征值 $p$ 的本征函数。即

$$\hat{p}u_p = pu_p. \tag{2.3.10}$$

这是与第一定律的规定，即波函数(2.2.1)描述动量为 $p$ 的运动状态这一规定相对应的本征值方程[1]。由此可见，对本征值问题 (2.3.5) 的解 $u_\nu$ 所作的上述规定，显然绝非无理。

因此，在波动力学的理论体系中应纳入以下规定：

“力学系能量所取的值仅限于该力学系哈密顿算符的本征值，能量取特定本征值的状态由哈密顿算符属于该本征值的本征函数

1) 对于平面波$u_p$组成的函数集合来说，$\hat{H}_0$和$p$具有厄米性，请参考下式及62页脚注

$$\oint_S u_{p'}^* u_p \cdot df = (2\pi\hbar)^3 |C|^2 (p-p')\delta^3(p-p') = 0.$$

来表示。”

在这个意义上，哈密顿算符的本征函数所表示的状态往往叫作能量**本征态**。现在的这个规定作为对第一定律、第二定律及第三定律的内容深入理解的必然结果，是容易接受的。事实上，能量值不弥散，期待值 $(u,\hat{H}u)$ 也总会给出 $E_v$，其态函数 $u$ 必须满足(2.3.5)式（详见§3.2）。对于前节给出的运动定律来说，这一规定并非独立的新定律。

有关能量的这个规定，可直接推广到广义的力学量。实际上，就动量而言，只是在第一定律和(2.3.10)式中看到了相同性质的规定。而向广义量的推广将放在第三章以后再谈。

在定态 (2.3.6) 中，概率密度和概率流密度为

$$\rho_v(\boldsymbol{r}) = |u_v(\boldsymbol{r})|^2 \tag{2.3.11}$$

$$J_v(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{2im}\left\{u_v^*(\boldsymbol{r})\frac{\partial u_v(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}} - \frac{\partial u_v^*(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}}u_v(\boldsymbol{r})\right\}, \tag{2.3.12}$$

它们仅用 $u_v(\boldsymbol{r})$ 表示，不随时间而变。因为这时 $\rho_v$ 的时间微分为零，所以连续性方程是

$$\mathrm{div}\boldsymbol{J} = 0 \text{ 或 } \oint_S \boldsymbol{J}\cdot d\boldsymbol{f} = 0. \tag{2.3.13}$$

S为包括某一范围的封闭曲面。(2.3.13) 式表明，定态的概率流应该是无源流，即连续流。假如 $u_v(\boldsymbol{r})$ 满足 (2.3.5) 式，而且

$$\text{“}u_v(\boldsymbol{r}) \text{ 和 } \frac{\partial u_v(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}} \text{ 是连续函数”} \tag{2.3.14}$$

则该连续条件可以实现。然而反过来却未必正确。也就是说，即使 $\boldsymbol{J}_v(\boldsymbol{r})$ 是连续流，$u_v(\boldsymbol{r})$ 和 $\partial u_v(\boldsymbol{r})/\partial \boldsymbol{r}$ 并不见得连续。（具体例证见下节.）由于定态条件要求 $\boldsymbol{J}_v$ 是连续的，因而 (2.3.14) 式的条件过于严格了一些。但是在很多情况下，可以利用 (2.3.14) 式来代替 $\boldsymbol{J}_v$ 的连续条件。当求解本征值方程 (2.3.5) 时，作为边界条件的一部分，连续条件 (2.3.14) 必须予以考虑。

——除常系数以外，当 $u(\boldsymbol{r})$ 为实数时，$J_v(\boldsymbol{r}) = 0$. 因 $\hat{H}$ 是一般的实数算符，所以在不要求复数的边界条件下，(2.3.5) 有实数解. 反之，假如要求 $J_v = 0$，则除常系数外，$u_v$ 必须是实数. 其证明很简单. 此外，在

大多数情况下束缚态具有实数的能量本征函数，而概率流密度为零．见本节 c)．

我们回过头来再看一下定态和能量本征函数的关系。在此之前，作为能量本征函数，薛定谔方程的特解（2.3.6）给出了与时间无关的存在概率密度，因而称之为定态。这种提法反过来是否可以呢？也就是说，

‘把定态定义或存在概率密度与时间无关的状态.’

以此出发，只用薛定谔方程，能否得出定态只是限于本征态(2.3.6)的结论呢？我们来研究一下这个问题。

一般来说，本征函数系 $\{u_\nu\}$ 构成完备系，所以薛定谔方程(2.3.1) 的通解可写为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum c_\nu u_\nu(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_\nu t\right). \qquad (2.3.15)^{1)}$$

把 (2.3.15) 式代入 (2.3.1) 式，再利用 (2.3.5) 式，就可直接证明上式右边是满足薛定谔方程的。此外，$c_\nu$ 为任意常数，由初始条件确定。那么波函数 (2.3.15) 给出的存在概率密度就是

$$\begin{aligned}|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=&\sum_{\nu'}|c_{\nu'}|^2|u_{\nu'}(\boldsymbol{r})|^2\\&+\sum_{\nu'\neq\nu''}\sum c^*_{\nu'}c_{\nu''}u^*_{\nu'}(\boldsymbol{r})u_{\nu''}(\boldsymbol{r})\exp\frac{i}{\hbar}(E_{\nu'}-E_{\nu''})t.\end{aligned} \qquad (2.3.16)$$

不用说，右边第二项是实数。把它改写成

$$\begin{aligned}&\sum_{\nu'\neq\nu''}\sum|c_{\nu'}u_{\nu'}(\boldsymbol{r})||c_{\nu''}u_{\nu''}(\boldsymbol{r})|\\&\times\cos\left\{\frac{1}{\hbar}(E_{\nu'}-E_{\nu''})t-\gamma_{\nu'}(\boldsymbol{r})+\gamma_{\nu''}(\boldsymbol{r})\right\},\end{aligned}$$

就可以明白这一点 ($\gamma_\nu(\boldsymbol{r})=\arg\{c_\nu u_\nu(\boldsymbol{r})\}$)。根据 (2.3.16) 式，存在概率密度对时间的依赖性显然纯粹由其右边的第二项来决

1) 虽然假定本征值$E_\nu$是不简并的，但即使有简并，问题的实质也不会改变．此外，本征函数系构成完备系，有关其物理内含及系数 $c_\nu$ 所具有的物理意义，请参考第三章.

定。 也就是说，存在概率密度 $|\psi|^2$ 对时间的依赖性，其根源在于(2.3.16)式右边具有不同能量本征值的许多能量本征函数是共存的。因此，为了消掉第二项而使 $|\psi|^2$ 不随时间变化，除保留特定的能量本征值（例如 $E_\nu$）之外，（2.3.16）式右边各项必须全部为零，这恰是$\psi$被局限于（2.3.6）式的结果。因此，定态正是能量本征态。‘定态’和能量本征态就物理内含而言是完全等价的。

下面我们大致看一下力学系不处于定态时的时间变化。量子力学的显著特性在于，概率密度的变化这些对力学系来说实质上的时间变化，其来源是具有不同能量本征值的许多能量本征态的‘叠加’，换言之，其来源是能量值的‘不确定’。（2.3.16）式右边第二项指数函数中时间变量 $t$ 的系数为 $\hbar^{-1}(E_{\nu'}-E_{\nu''})$，显然 $|\psi|^2$ 随时间的变化大约是在 $\hbar(\Delta E)^{-1}$ 这个时间范围内产生的。其中标准能量幅度是 $\Delta E$，它表示在（2.3.15）的展开式中，实质上起作用的能量本征值的范围。因此，若把时间范围写为 $\Delta t$，则

$$\Delta t \sim \hbar(\Delta E)^{-1}，\text{或}\ \Delta t\Delta E \sim \hbar。 \tag{2.3.17}$$

这个关系式是众所周知的时间和能量的**不确定关系**。由这一关系可知，只有当能量本征态具有范围极窄的能量本征值时，它才随时间缓慢变化，反之，当能量本征态具有范围相当宽的能量本征值时，它则随时间急剧变化。

### b） 平面波和自由粒子波包

平面波大概是最简单的定态了，在这一部分我们讨论自由粒子问题，并研究平面波及作为其叠加的自由粒子波包的性质。

业已指出，平面波 (2.3.8b)，即 $u_p(\boldsymbol{r})=C\exp(i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$，同时为自由粒子的哈密顿算符 $\hat{H}_0$ 及动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的本征函数。若只求 $\hat{H}_0$ 的本征函数，那么 $\sin(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$ 或 $\cos(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$ 就已经可以了，未必一定要求 $u_p$ 那样的指数函数。但是，这些三角函数却不是算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的本征函数。从波动现象来看，这样的三角函数表示驻波，而 $u_p$ 型的指数函数则代表行波。作为算符 $\hat{H}_0$ 本征值问题的解，到底取三角函数，还是取指数函数，要由所假设的边

界条件来决定. 我们选择本征函数 $u_p$ 满足 $\hat{p}u_p = pu_p$, 就是意味着预先选定沿矢量 $p$ 的方向传播的行波作为边界条件.这个边界条件宜于描述动量取确定值 $p$ 的发射器发出的粒子.下节通过具体事例来说明三角函数的边界条件所适合的物理状态.

现在我们来求平面波 $u_p$ 所产生的存在概率密度 $\rho_p$ 和概率流密度 $J_p$. 通过简单计算可得

$$\rho_p(r) = |C|^2, \quad J_p(r) = \frac{p}{m}|C|^2. \tag{2.3.18}$$

因为是处于定态,所以 $\rho_p$、$J_p$ 当然不随时间变化,而且空间分布也是不变的. 因 $J_p$ 是均匀的矢量场,故肯定是无源流,而且满足定态所要求的连续条件 (2.3.13). 另一方面 $\rho_p$ 不变, 反映了平面波在全部空间是均匀扩散的. 这虽然可以理解, 但却表明不能按 (2.2.28) 的方式归一化. 平面波的归一化必须采取其它方式. 普遍采用的方式是"箱式归一化"和"$\delta$ 函数归一化". 箱式归一化的方法是把粒子封闭在具有有限体积 $V$ 的箱中. 这样一来因为对全部空间的积分不会发散,故能照样使用归一化条件 (2.2.28), 得到 $|C| = V^{-\frac{1}{2}}$. 作为使空间范围有限的代价, 能量和动量的本征值不能取连续值, 而应该取某些特定的不连续值. 当箱非常大时, 几乎可以忽略范围有限所带来的影响. $\delta$ 函数归一化的方法抛开(2.2.28)式, 而像 $(u_p, u_{p'}) = \delta^3(p - p')$ 那样选择常数 $C$, 假如采用 $\delta$ 函数的傅里叶积分表达式[1],则这种方式的归一化就会给出 $|C| = (2\pi\hbar)^{-3/2}$. 两种方式各有千秋. 详细的讨论将留在散射理论部分 (本讲座第四卷《量子力学》(II)第十二章). 这里就另外的一种方式——"束强度归一化"作一简单说明.

前面已经谈到, 可以把平面波 $u_p$ 当作以一定动量从发射器发出的粒子的波函数. 当发射器发出的粒子束强度不太强时, 粒子束整体所产生的现象理应是一个一个粒子产生的现象的"重叠图象". 因此,在单个粒子波函数的归一化常数 $C$ 中似乎可以事先

---

1) $\delta^3(k - k') = (2\pi)^{-3}\int \exp[i(k - k')\cdot r]d^3r$.

就把这种情况考虑进去.具体来说,这个方法就是让概率流密度的大小 $|\boldsymbol{J}_p|$ 等于粒子束流强度 $N_0$(单位时间通过单位面积的粒子数). 从而确定出常数 $C$ 来. 该方法给出的 $|C|$ 是

$$|C| = (N_0/v)^{1/2}. \tag{2.3.19}$$

其中 $v=(p/m)$.这样一来,由单个粒子的波函数所确定的各种概率分布的计算结果,应自动给出粒子束整体单位时间单位面积所产生的累积结果. 从物理学角度来看,这个方法极为方便,但从数学运用方面来看,却未必合适. 在大多数情况下,先用箱式归一化和 $\delta$ 函数归一化进行理论计算,最后再换成这个方法. 此外,在(2.3.19) 式中令 $N_0 = 1$ 时的方法叫做"单位流归一化".

无限扩散的平面波应当看作理想的数学模型. 通过物理上可能实现的装置而产生的波,不管如何接近于平面波,也只有有限的扩展. 有限扩展的波统称为**波包**. 在此我们研究一下不受力作用时的波包,即自由粒子波包的行为. 描述自由粒子波包的波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 满足薛定谔方程(2.2.13),其通解已由(2.2.15)式给出. 在(2.2.15) 式的积分中各单色平面波的振幅 $a(\boldsymbol{p}')$ 由初始条件 $\psi(\boldsymbol{r},0) = \psi_0(\boldsymbol{r})$ 确定. 即

$$\psi_0(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int a(\boldsymbol{p}') \exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right) d^3\boldsymbol{p}', \tag{2.3.20a}$$

$$a(\boldsymbol{p}') = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int \psi_0(\boldsymbol{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right) d^3\boldsymbol{r}. \tag{2.3.20b}$$

我们先概括地研究一下波包的行为特征. 现在,假设初始波包 $\psi_0(\boldsymbol{r})$ 与平面波 $\exp(i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$ 极其相似. 这时 $|a(\boldsymbol{p}')|$ 在 $\boldsymbol{p}$ 的附近有一个十分窄的尖峰,并随着 $\boldsymbol{p}'$ 离开 $\boldsymbol{p}$ 而迅速趋近于零. 因此,(2.3.20a) 及 (2.2.15) 式的积分可以近似地用 $\boldsymbol{p}$ 周围的小范围 $\Delta\boldsymbol{p}$ 内的积分来代替. 积分范围加上如此限制后,在就 $\boldsymbol{q}=(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})$ 所做的展开 $\boldsymbol{p}'=\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}$ 及

$$E_{\boldsymbol{p}'} = E_{\boldsymbol{p}} + \left(\boldsymbol{q}\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}\right)E_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{2!}\left(\boldsymbol{q}\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}\right)^2 E_{\boldsymbol{p}} + \cdots$$

之中,暂时可以略去 $\boldsymbol{q}$ 的二次以上的项. (对于处理非相对论粒

子的（2.2.15）式来说 $E_{p'}=p'^2/2m$，但此处先考虑更一般的动量与能量的关系.）因此，(2.2.15) 式经过简单计算后，即可归纳为

$$\phi(\boldsymbol{r},t)\simeq\Phi\left(\boldsymbol{r}-\frac{\partial E_{\boldsymbol{p}}}{\partial\boldsymbol{p}}t\right)\exp\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E_{\boldsymbol{p}}t), \tag{2.3.21a}$$

其中

$$\Phi(\boldsymbol{R})=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int_{\Delta_{\boldsymbol{p}}}a(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})\exp\left(\frac{i}{h}\ \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}\right)d^3\boldsymbol{q}. \tag{2.3.21b}$$

因定义域 $\Delta\boldsymbol{p}$ 很窄，故积分变量 $\boldsymbol{q}$ 的绝对值只限于极小的值，因而 $\Phi$ 随 $\boldsymbol{R}$ 的变化是极其缓慢的. 显然，当 $|\boldsymbol{R}|\to\infty$ 时，$\Phi\to 0$ [这是数学上的黎曼-勒贝格（Riemann-Lebesgue）定理]，扩展的确是有限的. 因此，(2.3.21 a) 式所描述的波动是用包络函数 $\Phi(\boldsymbol{r}-(\partial E/\partial\boldsymbol{p})t)$ 将平面波 $\exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar]$ 包络而成的波包. 假如在 (2.3.21 b) 式中取 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{r}-(\partial E/\partial\boldsymbol{p})t$，则 $\boldsymbol{R}$ 不是 $\boldsymbol{q}$ 的函数，因此包络函数 $\Phi(\boldsymbol{r}-(\partial E/\partial\boldsymbol{p})t)$ 以始终保持一定形状的速度前进. 即

$$\boldsymbol{v}_g=\frac{\partial E}{\partial\boldsymbol{p}}. \tag{2.3.22}$$

在波动理论中 $\boldsymbol{v}_g$ 叫作群速度，它表示波包作为一个整体运动时的速度. 对非相对论运动来说，$\boldsymbol{v}_g=\boldsymbol{p}/m$；而对相对论运动来说，$\boldsymbol{v}_g=c^2\boldsymbol{p}/E_{\boldsymbol{p}}$，二者均与经典的粒子速度相一致. 虽然在上一节曾经指出，平面波的前进速度（相速度）不能给出经典的粒子速度，但在波动力学中却有群速度与经典的粒子速度相对应.

截止目前得到的结论，只是就 $E_{p'}$ 的展开取到 $\boldsymbol{q}$ 的一次而言的. 该近似的特点在于波包传播时无任何形变. 下面我们看一看对 $\boldsymbol{q}$ 取到二次的情况（当 $E_{p'}=p'^2/2m$ 时，$E_{p'}$ 展开中二次的项只有 $q^2/2m$）. 此时，函数 $\Phi$ 是通过在 (2.3.21 b) 式右边的积分中把 $\boldsymbol{R}$ 换成 $\{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}_g t-1/2(\boldsymbol{q}\cdot\partial/\partial\boldsymbol{p})(\partial E/\partial\boldsymbol{p})t]$ 而求出的. 因此，该积分内的单色平面波以相速度 $\boldsymbol{v}_t+1/2(\boldsymbol{q}\cdot\partial/\partial\boldsymbol{p})\boldsymbol{v}_t$ 前进，但因相速度与 $\boldsymbol{q}$ 无关，故 $\Phi$ 的形状会随着时间的推移而趋零乱. 特别是因为相速度的变化与 $\boldsymbol{q}$ 成正比，所以 $|\boldsymbol{q}|$

大的单色平面波比 $|q|$ 小的单色平面波前进的速度要快，作为一个整体，波包的扩展应具有增大的趋势。但是，假如积分范围 $\Delta p$ 非常窄，则扩展增大的效果不会太明显。实际上，当波包与通常的散射现象中所出现的平面波极为接近时，即使经过一段宏观距离之后，波包扩展的增大量也可以完全忽略不计。更详细的讨论请参考散射理论（本讲座第四卷《量子力学》(II)第十二章）的有关部分。

接下去，我们给出 $\psi_0(r)$ 具体的函数形式，来实际观察波包随时间的变化，假设函数形式是

$$\psi_0(z,r,\theta) = (2\pi)^{-1/4}(\Delta z)^{-1/2}(\Delta r)^{-1} \times \exp\left[-\frac{z^2}{4(\Delta z)^2} - \frac{r^2}{2(\Delta r)^2}\right]\exp\left(\frac{i}{\hbar}pz\right). \quad (2.3.23a)$$

此处应用了圆柱坐标 $(z, r=\sqrt{x^2+y^2}, \theta=\tan^{-1}(y/x))$，$p=(0,0,p)$ 的方向为 $z$ 轴。这个波是用高斯型的包络线将平面波 $\exp(ipz/\hbar)$ 包络而成的波包，并以波包的中心为原点，大约在 $z$ 轴方向 $(\Delta z)$ 的距离内，围绕 $z$ 轴半径 $(\Delta r)$ 的范围内扩展。其中，适当选择系数以满足归一化条件 (2.2.28)。当打算处理以 $r_0=(x_0,y_0,z_0)$ 为中心的波包时，可以进行变量代换 $x\to x-x_0$，$y\to y-y_0$，$z\to z-z_0$。若把 (2.3.23 a) 式代入 (2.3.20 b) 式再作积分[1]，则可得到

$$a(p_z',p_r',\theta') = (2\pi^3)^{-1/4}(\Delta p_z)^{-1/2}(\Delta p_r)^{-1} \times \exp\left[-\frac{(p_z'-p)^2}{4(\Delta p_z)^2} - \frac{p_r'^2}{2(\Delta p_r)^2}\right]. \quad (2.3.23\ b)$$

其中 $(\Delta p_z)$ 和 $(\Delta p_r)$ 分别通过下式与 $(\Delta z)$ 和 $(\Delta r)$ 相关，即

$$(\Delta z)(\Delta p_z) = \frac{\hbar}{2}.\quad (\Delta r)(\Delta p_r) = \hbar. \quad (2.3.24)$$

---

1）进行积分时，最好反复使用以下公式：

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-\alpha\xi^2 - i\beta\xi)d\xi = (\pi/\alpha)^{1/2}\exp(-\beta^2/4\alpha)\quad\left(|\arg\alpha|<\frac{\pi}{2}\right).$$

反之，把（2.3.23b）式代入（2.3.20a）式就会得出（2.3.23a）式. (2.3.23b) 式所代表的 $p'$ 的分布，是以 $p$ 为中心，沿 $p$ 方向在（$\Delta p_z$）范围内，绕 $p$ 附近半径（$\Delta p_r$）的范围内扩展. 位置坐标的扩展（即波包的扩展）与动量的扩展有关，且受不确定**关系** (2.3.24) 约束. 例如，假若想接近于平面波而让 $\Delta p_z$ 和 $\Delta p_r$ 减小，则 $\Delta z$ 和 $\Delta r$ 就会增大；反之假若试图构成局部集中的状态以强调粒子图像，而让 $\Delta z$ 和 $\Delta r$ 减小，则 $\Delta p_z$ 和 $\Delta p_r$ 就会增大，因为经典粒子可以具有确定的位置和动量，所以从原则上讲，应该把不确定的标志 $\Delta z$、$\Delta r$、$\Delta p_z$、$\Delta p_r$ 全选为零. 以波动性为基础的不确定关系 (2.3.24) 是经典力学不曾有的量子力学的显著特性. § 3.2 还将对它作进一步讨论.

下面我们来阐明波包的运动. 若把(2.3.23 b)式代入 (2.2.15) 式，并使用 (§ 2.2d) 末的脚注计算积分，则可得到

$$\psi(z,r,\theta,t) = (2\pi^3)^{-1/4}\left[(\Delta z)+\frac{i\hbar t}{2m(\Delta z)}\right]^{-1/2}$$
$$\times\left[(\Delta r)+\frac{i\hbar t}{m(\Delta r)}\right]^{-1}$$
$$\times\exp\left[-\frac{\left(z-\frac{p}{m}t\right)^2}{4(\Delta z)^2+i\frac{2\hbar t}{m}}-\frac{r^2}{2(\Delta r)^2+i\frac{2\hbar t}{m}}\right]$$
$$\times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(pz-\frac{p2}{2m}t\right)\right]. \qquad (2.3.25)$$

其中，利用 (2.3.24) 式按坐标增量 $\Delta z$ 和 $\Delta r$ 对全式进行了整理，存在概率密度为

$$|\psi(z,r,\theta,t)|^2 = (2\pi^3)^{-1/2}\left[(\Delta z)^2+\frac{(\Delta p_z)^2t^2}{m^2}\right]^{-1/2}$$
$$\times\left[(\Delta r)^2+\frac{(\Delta p_r)^2t^2}{m^2}\right]^{-1}$$

$$\times\exp\left[-\frac{\left(z-\frac{p}{m}t\right)^2}{2\left\{(\Delta z)^2+\frac{(\Delta p_z)^2t^2}{m^2}\right\}}-\frac{r^2}{(\Delta r)^2+\frac{(\Delta p_r)^2t^2}{m^2}}\right]. \tag{2.3.26}$$

这里又把一部分与时间有关的系数再次还原成 $\Delta p_z$ 和 $\Delta p_r$ 后进行了整理. 此式表明,波包中心以经典的粒子速度 $\boldsymbol{p}/m$ 前进,其扩大量为

$$\Delta z\to\sqrt{(\Delta z)^2+(\Delta p_z)^2t^2m^{-2}},\quad \Delta r\to\sqrt{(\Delta r)^2+(\Delta p_r)^2t^2m^{-2}}.$$

可以认为,扩展的速度是 $(\Delta p_z)/m$ 及 $(\Delta p_r)/m$. 中心像经典粒子一样作匀速直线运动,而且扩展尚有增大,这两点正是自由粒子波包的特征. 它证实了根据一般讨论所得到的结论.

另外,波包的一般表达式 (2.2.15) 是与前一小节给出的能量本征态共存的 (2.3.15) 式的特殊情况. 假如对自由粒子波包来说,近似地认为 $E_{p'}-E_p\simeq(\partial E_p/\partial\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{q}$, 则可以取 $\Delta E\sim v_g\Delta p_z$, 因此, 由 (2.3.17) 式求得的时间变化范围就是 $\Delta t\sim\hbar(\Delta E)^{-1}\sim(\Delta z)/v_g$, 它表示以群速度通过波包长度量级的距离所需的时间. 此结果自然在意料之中.但是,假如在以群速度移动的运动坐标系中来观察,则波包的中心在原点保持不动,所以不会产生由于波包的移动而带来的时间变化. 因为这时 $\partial E_p/\partial\boldsymbol{p}=0$, 所以 $\Delta E\sim(\Delta\boldsymbol{p})^2/m$. 时间变化范围 $\Delta t\sim\hbar(\Delta E)^{-1}$ 表示扩展增大的部分达到原来扩展的程度所需的时间. 这一点亦不言而喻.

下面我们分析动量大体上取一定值的波包.根据测不准关系,该波包向空间扩展会急剧增大,不管怎么说,这是从微观的角度得出的结果,所以若以宏观尺度重新观察,则一般可以认为波包的空间扩展依然很小. 也就是说,从宏观着眼,这种波包的行为犹如位置和动量均确定的经典的点状粒子. 从数量上看, 则是在能以忽略普朗克常数 $\hbar$ (及与 $\hbar$ 成比例的 $\hbar/\Delta p_z$ 等量) 的宏观尺度之上. 虽然这是自由粒子的情况,但是即使有力作用,当该力场在波

包长度量级的距离上无明显变化时，波包依然可以当作经典粒子看待。也就是说，若力场的分布和周围的环境为宏观大小，则表示量子力学粒子的波包就正好像经典粒子一样运动。请再次联想一下 § 2.1 结尾部分的讨论。

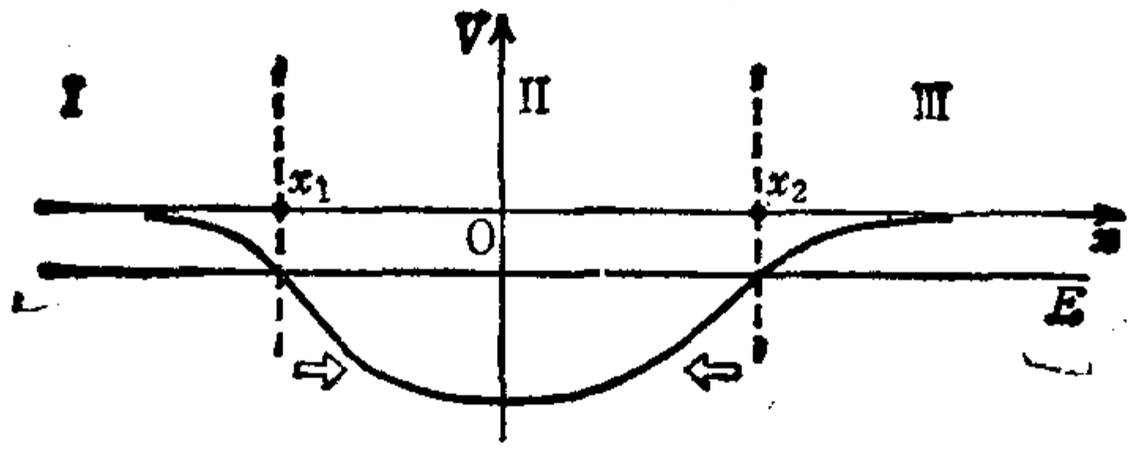
### c) 一维问题和边界条件——束缚态和散射态

我们提出简单的一维问题作为研究定态性质的起点。所谓一维问题并非虚构，而是在与某方向（例如 $x$ 轴方向）的变化相比，其它方向（$y$, $z$ 轴方向）的变化可以忽略不计时每每出现的现实问题。在这种情况下，对于 (2.2.19) 式的哈密顿算符来说，方程 (2.3.5) 变为

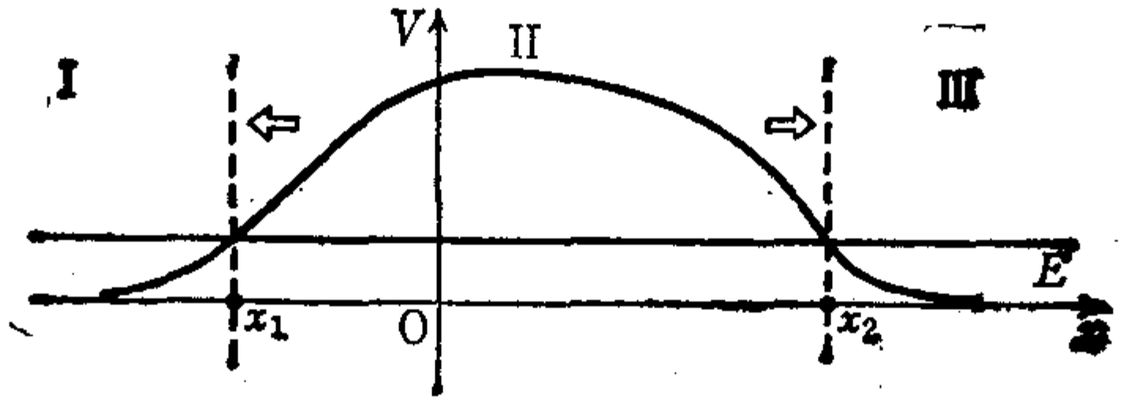
$$\frac{d^2u_v(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_v-V(x))u_v(x)=0, \qquad (2.3.27)$$

但是假如不给边界条件，则该方程的数学性质和物理内含均无法确定。下面我们对照着经典力学来进行讨论。

根据能量守恒定律所给出的关系式 $v=\pm\sqrt{2(E-V(x))/m}$，就可以了解到经典的一维运动的概貌。也就是说，只有 $E>V(x)$ 的地方才是可能运动的范围。粒子不能进入 $E<V(x)$ 的范围。$E=V(x)$ 的这个点叫作转折点。作为典型一例，我们来分析图 2.4 中的势所产生的运动。图 (a) 是给出内向力的引力型，而图 (b) 则是具有外向力的斥力型（箭头表示力的方向）。二者在无限远处均为零。$x_1$ 和 $x_2$ 表示与能量 $E$ 相对应的转折点。在图 (a) 的情况下与负能 $E$ 相对应的可能运动的范围局限于 $x_1$ 和 $x_2$ 之间（范围 II），粒子处于被势束缚的运动状态。这叫作**束缚态**。在 (b) 的情况下，与能量 $E$（虽为正值但却比 $V_{max}$ 小）对应的可能运动范围是 $x<x_1$（范围 I）及 $x>x_2$（范围 III）。从左方（或右方）进入的粒子在 $x_1$（或 $x_2$）处只能向左方（或右方）弹回，决不可能穿过势垒进入右方（或左方）。这种与势的碰撞现象，叫作**散射态**。当能量到处都比势大时，无论对(a)还是对(b)，从左方(或右方)进入的粒子，则向右方（或左方）穿行有去无回。




(a) 引力型




(b) 斥力型

图 2.4　一维势的例子

这些是经典运动的特征.

在波动力学中，$(E-V)$ 的正负不会对能量本征函数有太大影响. 在经典运动可能的范围 $E>V$ 中，$u$ 是振动型函数；而在经典运动不可能的范围 $E<V$ 中，$u$ 则变成指数型函数. 下面我们根据解析几何来分析这种情况. 首先，由 (2.3.27) 式可以得到

$$\frac{1}{u_n}\frac{d^2u_n}{dx^2}\lessgtr 0 \quad \text{对应} \quad E_n\gtrless V.$$

二阶微商给出 $u_n$-$x$ 平面上曲线 $u_n$ 的曲率，由此可知，(i) 当 $E_n>V$ 时，曲线呈振荡型，在 $x$ 轴的上方向上凸. 在 $x$ 轴的下方向下凸；(ii) 当 $E_n<V$ 时，曲线呈指数型，在 $x$ 轴的上方向上凹，在 $x$ 轴的下方向下凹. 经典的转折点是曲线 $u_n$ 的拐点. 在图 2.4 中，(a) 的 II 区及 (b) 的 I 区和 III 区具有振荡型本征函数，而 (a) 的 I 区和 III 区及 (b) 的 II 区则具有指数型本征函数. 在波动力学中，波函数及存在概率密度即使在不可能存在经典运动的范围内也不会为零，从而有发现粒子的可能性. 下面我们根据以上的数学知识来分析能量本征函数的边界条件.

束缚态　也就是图 2.4 (a) 的情况. (2.3.27)式中的 $E_n$ 为图

中的 $E$，当然是取负值的．在经典力学中，粒子被束缚在范围 II 内，自然，即使在波动力学中也会有类似的情况．在波动力学中，本征函数纵然在范围 II 以外也具有不为零的值，而且呈指数型变化．指数型分增大型和减小型两种．既是束缚态，就不允许存在几率密度 $|u_v|^2$ 以指数形式随着远离范围 II 而增大．这是建立边界条件的物理前提．因此，与束缚态相对应的边界条件最低限度必须是

$$|x| \to \infty \text{ 时 } \quad |u_v| \to 0. \tag{2.3.28}$$

更确切地说，(2.3.27) 式在 $|x| \to \infty$ 时渐近形为

$$\frac{d^2u_v}{dx^2} - \kappa_v^2 u_v = 0 \quad \kappa_v = \sqrt{\frac{2m|E_v|}{\hbar^2}}, \tag{2.3.29}$$

在它的解 $\exp(\pm\kappa_v|x|)$ 之中，应该选择连续解 $\exp(-\kappa_v|x|)$[1]．这就是在无限远处的边界条件．再加上连续条件 (2.3.14)，二者统称为‘束缚态的边界条件’．对满足该边界条件的函数集合来说，$\hat{H}$ 和 $\hat{p}$ 是厄米型的(见 62 页的脚注)．

满足该边界条件的能量 $E_v$，即使为负，亦并非允许任意的负值．为了理解这种情况，我们让能量 $E_v$ 接近于势底的值 $E_0'$．因为曲线 $u_v$ 的曲率与 $(d^2u_v/dx^2) = -(2m/\hbar^2)(E_v - V)u_v$ 成正比，所以与势底接近的值曲率不能太大，而与 $E_0'$ 对应的曲线则如图 2.5 的 $(E_0')$ 所示．此时，右方无限远处的边界条件虽可优先满足，但却因曲率变小，曲线不能充分弯曲，致使左边无限远处的边界条件无法满足．因此，我们把能量值稍微提高，使之成为 $E_0''(>E_0')$．此时，曲线为图 2.5 中的 $(E_0'')$．这次却因曲线过于弯曲而不满足左方无限远处的边界条件．因此，二者之间恰好有一个合适的能量值 $E_0(E_0'' > E_0 > E_0')$，如图 2.5 中的 $(E_0)$ 所示．能够满足左右两边无限远处的边界条件，这样一来，就决定了能量本征值$E_0$及属于它的本征函数$u_0$.需要注意，在目前的讨论中，连续条件 (2.3.14) 起着重要的作用．这是因为，假如没有连续条

1) 更严格地说还可以有多项式因子．尽管如此，在 $|x|\to\infty$ 的渐近意义下本征函数满足(2.3.29)式．

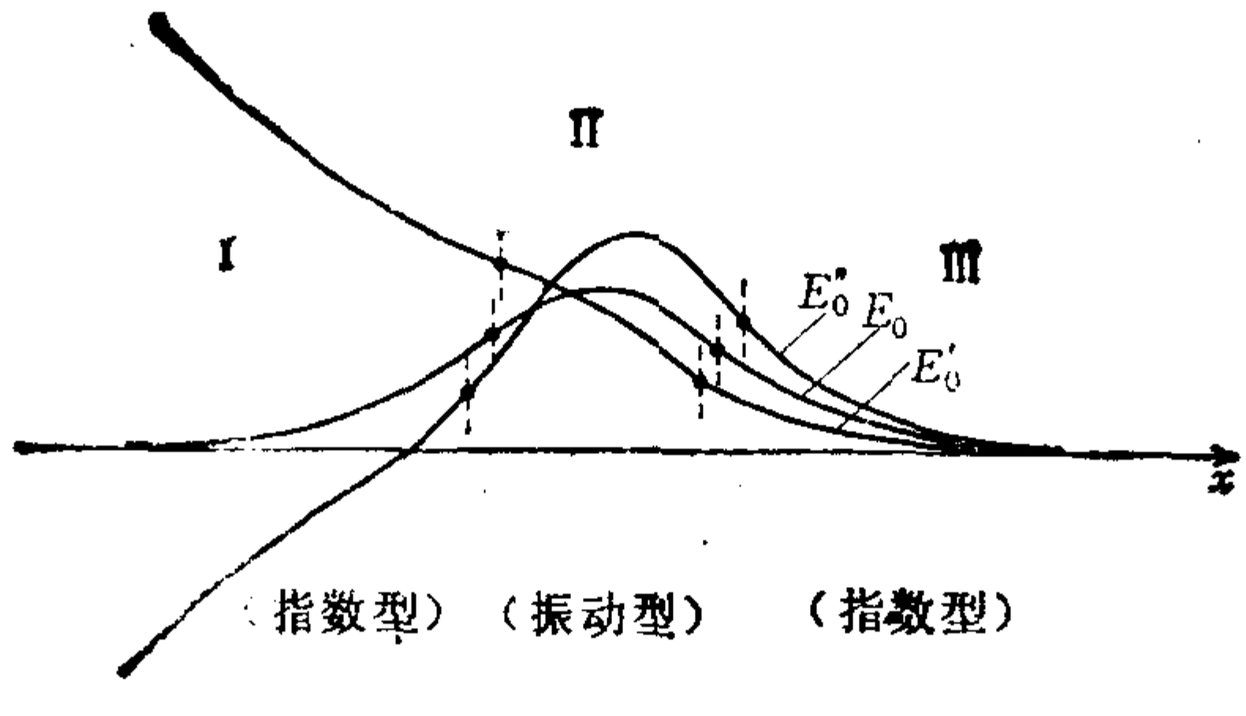



图 2.5　能量值和无限远处的情况．右方无限远处的边界条件优先满足．经典的转折点(用·表示)为曲线的拐点

件，则任何能量值都能满足(2.3.28)式．当以上的作法不可能时，束缚态这样的定态是不会存在的．

倘若势 $V$ 相当强，则能量本征值就不只限于一个，可能有多个存在．这时，能量本征函数对应于其本征值，如图 2.6 所示．当然，本征值的大小顺序 $E_0 < E_1 < E_2 < \cdots$ 也是本征函数 $u_0$、$u_1$、$u_2$、$\cdots$ 曲率的顺序．而且，该序号恰好是本征函数零点的个数，即节的个数，它是能用来区别本征态的**量子数**．这样一来，稳定的束缚态显然就是具有特定的能量本征值的定态．这是波动力学的理论体系所给出的必然“结果”．另一方面，经典量子论一开始就把这一事实唐突地作为“假说”．这一点务必铭记于心．

——图 2.4(a)的那种势不允许束缚态具有正能．这是因为，若到处都是 $E>V$，则全部范围内均变成振荡型，因而不能满足边界条件（2.3.28）．具有正能的定态是服从别的边界条件的散射态．而且，在到处都为 $E < V$ 的情况下，(2.3.27)式也不会有解．此时，整个范围均成为指数型，而无导致曲率反转的振荡型的范围存在，因此(2.3.28)式不复成立．

除常数因子外，束缚态本征函数一般是实数．由方程(2.3.27)和边界条件的实数性，这一点是不难理解的．因此，概率流密度到处为零．由束缚态的物理内含可以预料到这一点．在束缚态，经典粒子往返于转折点（$x_1$ 和 $x_2$）之间，而与此相应的波动力学运动状态却是用向右和向左的行波叠加而成的驻波来描述的．对驻

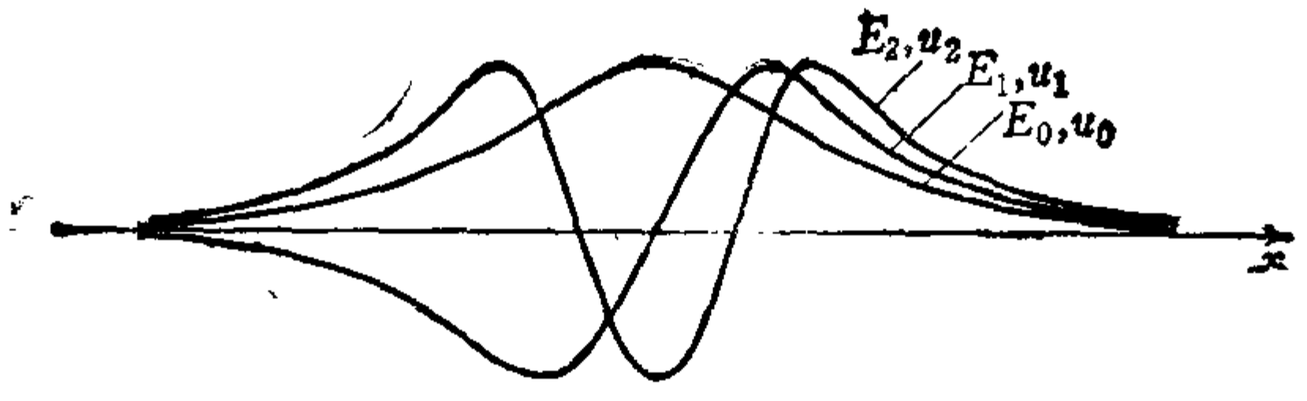



图 2.6　束缚态的能量本征函数

波来说，粒子的存在概率并非只向一个方向流动。

最后，我们分析一下在 $V(x) = V(-x)$ 时成立的空间反演的对称性，这时哈密顿算符对以 $-x$ 取代 $x$ 的**空间反演**来说是不变的。进而，束缚态的边界条件对该变换亦为不变。因此，假若 $u(x)$ 是(2.3.27)式束缚态的解，那么 $u(-x)$ 也是同一方程满足同样边界条件的解。如果本征值 $E_v$ 不简并——一维问题在多数情况下均不简并，则同一本征值 $E_v$ 不会有两个以上独立的本征函数，$u_v(-x) = \varepsilon u_v(x)$。其中 $\varepsilon$ 为常数。若将 $u_v(x) = u_v(-(-x)) = \varepsilon u_v(-x)$ 代入此式，则得 $\varepsilon^2 = 1$。因此常数 $\varepsilon$ 只能取 $+1$ 或 $-1$。这说明能量本征函数具有如下两个性质之中的一个性质。即

$$u_v^{(+)}(-x) = u_v^{(+)}(x), \tag{2.3.30a}$$

$$u_v^{(-)}(-x) = -u_v^{(-)}(x). \tag{2.3.30b}$$

这种性质叫作**宇称**或**奇偶性**。具有 (2.3.30a) 这种性质的 $u_v^{(+)}(x)$，其宇称定为(+)，具有 (2.3.30b) 这种性质的 $u_v^{(-)}(x)$，其宇称定为(−)。因为哈密顿算符对于空间反射是不变的，所以，某一时刻具有一定宇称的波函数在其后任何时刻仍然具有同样的宇称。也就是说，宇称是由空间反射不变性而产生的守恒量，可以看作是描述能量本征态特性的一个“量子数”。详细情况我们将在第五章中予以说明。

*散射态*　下面我们分析图 2.4 (b) 的碰撞问题。如上所述，经典粒子的运动显然是非周期运动，因而与作为周期运动的束缚态不同，不能当作定态来处理。但是，对波动力学来说，却能把它看作定态！我们记得，在波动力学中，波函数既描述单个粒子的运动状态，同时又给出集大量单个粒子测量结果的“重叠冲洗”的效果。

例如，平面波（2.3.8）描述稳恒流动的均匀粒子束．因此，若把该均匀粒子束注入到势垒上，就会产生一定比例的反射粒子流和透射粒子流，在整体上表现为稳恒流动．（在图 2.4（b）中，从经典的角度来看不存在透射粒子流．但是对波动力学来说，波函数即使在范围 II 也具有非零值，而且根据连续条件，在范围 III 能够有行波——即透射粒子流．）下面，我们就把这种稳恒流动作为定态，即作为方程（2.3.27）的解加以规范化．为此，有必要把上述情况用作边界条件，即

$$\left.\begin{aligned} u_p(x) &\xrightarrow[x\to-\infty]{} C\left\{\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)+R\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)\right\} \\ &\xrightarrow[x\to+\infty]{} CT\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right) \end{aligned}\right\}. \tag{2.3.31}$$

不言而喻，第一行第一项对应入射粒子流，第二项对应反射粒子流，而第二行则对应透射粒子流．其中 $C,R,T$ 为常数．这时，由粒子发射器的形状所决定，能量取连续的正实数值，它与初始动量 $p$ 的关系为 $E_p=(p^2/2m)$（已用 $p$ 代替脚标 $\nu$）．边界条件（2.3.31）与方程（2.3.27）无矛盾．这是因为，当 $|x|\to\infty$ 时 $V\to 0$，方程（2.3.27）趋近于

$$\frac{d^2u_p}{dx^2}+k^2u_p=0,\ k=\frac{p}{\hbar}=\sqrt{\frac{2mE_p}{\hbar^2}}, \tag{2.3.32}$$

从而具有（2.3.31）右边那样的解．方程（2.3.27）的解 $u_p$ 服从边界条件(2.3.31)，称为哈密顿算符 $\hat{H}$ 的“散射态本征函数”．它也是一个能量本征态．另外，对该边界条件来说，$\hat{H}$ 具有厄米性．

假设入射波、反射波和透射波分别为 $u_p^{(i)}(x)=C\exp(ipx/\hbar)$，$u_p^{(r)}(x)=CR\exp(-ipx/\hbar)$，$u_p^{(t)}=CT\exp(ipx/\hbar)$．常数 $C$ 取决于入射波的归一化．现在，若采用“束强度归一化” $C=\sqrt{N_0/v}$（见(2.3.19)式），则 $u_p^{(i)}$ 就代表每秒入射 $N_0$ 个粒子的粒子束．此时，将 $u_p^{(i)}$ 代入（2.3.12）的 $u_\nu$ 而得到的入射概率流密度 $J_p^{(i)}$ 就是入射粒子流强度 $N_0$．按同样方式所得到的反射概率流密度 $J_p^{(r)}$

及透射概率流密度 $J_p^{(t)}$ 应分别成为反射粒子流强度 $N^{(r)}$ 及透射粒子流强度 $N^{(t)}$。通过简单计算，可以得出 $J_p^{(i)}=v|C|^2=N_0$，$N^{(r)}=|J_p^{(r)}|=v|C|^2|R|^2=N_0|R|^2$，$N^{(t)}=J_p^{(t)}=v|C|^2|T|^2=N_0|T|^2$。（$J_p^{(r)}$ 取负值，可以理解或反射粒子流是沿 $x$ 轴的负方向前进的。）显然，由此可以得到“反射概率”及“透射概率”分别为[1]

$$P^{(r)}=\frac{N^{(r)}}{N_0}=|R|^2, \tag{2.3.33a}$$

$$P^{(t)}=\frac{N^{(t)}}{N_0}=|T|^2. \tag{2.3.33b}$$

由实验测量的量是 $N_0$、$N^{(r)}$、$N^{(t)}$，但（2.3.33）式表明这些测量值之比（$N^{(r)}/N_0$）及（$N^{(t)}/N_0$）分别等于应该能在理论上求得的量 $|R|^2$ 及 $|T|^2$。这是波动力学对图 2.4 (b) 的碰撞问题在理论上的预言。另外，由概率流的连续条件可直接得到概率守恒定律，即

$$P^{(r)}+P^{(t)}=1 \quad 或 \quad |R|^2+|T|^2=1, \tag{2.3.34}$$

其证明过程留给读者自己来作。$R$ 往往称为反射系数，$T$ 称为透射系数。

这样一来，图 2.4 (b) 的碰撞问题显然归结为求 $R$ 和 $T$ 的问题。$R$ 和 $T$ 应该是在边界条件(2.3.31)下求解方程 (2.3.27) 时与本征函数 $u_p$ 同时得到的量。下面我们把求解过程规范化。首先，在范围 I,II,III 中分别解方程(2.3.27)，求出独立的特解。因(2.3.27)式是二阶线性常微分方程，所以每个范围各有两个特解，通解则由其线性组合给出。于是，通解共包含六个任意常数，每个范围两个。因为边界条件指定范围 III 中只有向右的行波，所以该范围的解中所包含的常数就减少一个。另外，根据归一化条件已经确定入射波的振幅 $C$，这样只剩下四个待定常数与 $C$ 的比值。其比值在范围 I 中是 $R$，在范围 III 中是 $T$，另外两个则包含在范围 II 的解中。因此，假设在边界点 $x_1$ 和 $x_2$ 上的连续条件为 (2.3.14) 式，那么，就会产生对确定四个待定常数来说是充分而必要的四个非齐次线性代数方程。求解这些方程，即可得出 $R$ 和 $T$（及另外

1） 若采取“单位流归一化”，则 $P^{(r)}=|J_p^{(r)}|$，$P^{(t)}=J_p^{(t)}$。

两个常数和全部 $u_p$). 通过这个程序的数学验证，证明方程(2.3.27)对任意的正实数$E_p$和边界条件(2.3.31)是有解的. 更严密的证明必须详细讨论势的函数形式与特解的性质之间的关系，因而此处不再深究。有关简单的例题我们放在下节予以说明。

在图 2.4 (b) 中，非零的透射概率的出现是经典力学中所没有的纯量子效应. 需要注意，即使对图 2.4 (a) 的势来说，与 (b) 相似的碰撞问题也是由于量子效应引起的。从经典的角度来看，假如能量为正实数的粒子射入 (a) 型势，则会穿过而绝无弹回的可能。但若看作波动现象，则 (a) 型势意味着存在不同媒质层，因而即使发生反射，也不是不可思议的，事实上，具有 (a) 型势的方程(2.3.27)在任意正实数的能量和边界条件(2.3.31)之下是能够有解的。于是，会出现非零的反射概率，在 (a) 型的情况下，这纯粹是量子力学的效应。

上面分析了从左侧射入粒子的碰撞问题。下面我们来考虑从右侧射入粒子的情况，并分析其与左侧射入的关系。首先，为了明显地区别左和右，取消势的左右同水准的这个条件 ($\lim_{|x|\to\infty} V = 0$)，而令 $\lim_{x\to-\infty} V = V_1$, $\lim_{x\to+\infty} V = V_2 (\neq V_1)$，但若 $E_p > V_1$, $E_p > V_2$，则反射和透射会同时存在。这时，在左右无限远处的动量分别成为 $p_1 = \sqrt{2m(E_p - V_1)}$, $p_2 = \sqrt{2m(E_p - V_2)}$，现在把(2.3.31)式中第一行的 $p$ 用 $p_1$，第二行的 $p$ 用 $p_2$ 替换，则会得出从左侧对该势投入粒子时的散射态边界条件。为了明确是从左方投入的，本征函数及一切常数均加以序号 1。即归一化常数为 $C_1 = \sqrt{N_0/v_1}$ ($v_1 = p_1/m$)，反射系数为 $R_1$，透射系数为 $T_1$. 求解问题的方法本质上和左右同水准时的方法相同，但却必须根据 $p_1 \neq p_2$ 加以修正。即，$J_p^{(i)} = N_0$, $|J_p^{(r)}| = |R_1|^2 N_0$ 形式虽然相同，但在 $J_p^{(t)} = (v_2/v_1)|T_1|^2 N_0$ 中却会出现差异 ($v_2 = p_2/m$). 因此，反射概率与透射概率分别成为

$$p_1^{(r)} = |R_1|^2, \quad p_1^{(t)} = \frac{v_2}{v_1}|T_1|^2, \quad p_1^{(r)} + p_1^{(t)} = 1. \tag{2.3.35}$$

其次再讨论粒子从该势的右方投入的问题。显然，这在下列边界条件下是可能的：

$$\left.\begin{aligned} u_{p_2}(x) &\xrightarrow[x\to+\infty]{} C_2\left\{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_2x\right)+R_2\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_2x\right)\right\} \\ &\xrightarrow[x\to-\infty]{} C_2T_2\exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_1x\right) \end{aligned}\right\}, \tag{2.3.36}$$

采用和左侧投入时相同的步骤，得到的反射概率和透射概率为

$$p_2^{(r)}=|R_2|^2,\quad p_2^{(t)}=\frac{v_1}{v_2}|T_2|^2,\quad p_2^{(r)}+p_2^{(t)}=1. \tag{2.3.37}$$

左侧投入问题的解 $u_{p_1}$ 和右侧投入问题的解 $u_{p_2}$（无论哪一个）都是方程(2.3.27)的解。即

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{p_1}}{dx^2}+Vu_{p_1}=E_pu_{p_1},$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{p_2}}{dx^2}+Vu_{p_2}=E_pu_{p_2}.$$

第一式乘以 $u_{p_2}$，第二式乘以 $u_{p_1}$，两边分别相减即可得到

$$\frac{d}{dx}\left\{u_{p_2}\frac{du_{p_1}}{dx}-u_{p_1}\frac{du_{p_2}}{dx}\right\}=0.$$

因此，

$$\lim_{x\to-\infty}\left\{u_{p_2}\frac{du_{p_1}}{dx}-u_{p_1}\frac{du_{p_2}}{dx}\right\}=\lim_{x\to+\infty}\left\{u_{p_2}\frac{du_{p_1}}{dx}-u_{p_1}\frac{du_{p_2}}{dx}\right\}$$

若在此式中（由于左右不同水准，已进行过修正）代入(2.3.31)式和(2.3.36)式，则可直接得到

$$p_1T_1=p_2T_2. \tag{2.3.38}$$

利用上式，就会由(2.3.35)式和(2.3.37)式得出

$$p_1^{(t)}=P_2^{(t)},\quad P_1^{(r)}=P_2^{(r)}. \tag{2.3.39}$$

也就是说，无论是从左方投入还是从右方投入，反射概率和透射概率均具有相同值。这就叫作**倒易关系**。一般来说，从薛定谔方程对时间反演的不变性可以推导出这个性质(见本讲座第四卷《量子力学》(II)第十二章散射理论)。另外，由 $P_1^{(r)}=P_2^{(r)}$ 也可以得到

$$|R_1| = |R_2|. \tag{2.3.40}$$

而且，由薛定谔方程还能推导出 $\{u_{p_2}^*(du_{p_1}/dx) - u_{p_1}(du_{p_2}^*/dx)\} =$ 常数这个关系式，并由此给出

$$p_2 T_1 R_2^* = -p_1 T_2^* R_1. \tag{2.3.41}$$

下面，我们列举束缚态和散射态的几个不同点。第一个不同点在于能量本征值。在束缚态，能量本征值是求解本征值问题最先得到的解，取离散分布的特定值。另一方面，散射态的能量本征值却是根据实验装置等条件的不同而在求解本征值方程之前就预先给定好的，取连续的正实数值。第二个不同点在于，散射态的边界条件要求本征函数本质上是复数。因此，概率流密度绝非为零。由碰撞现象的物理内含来看，这一点是理所当然的。而另一方面，如上所述，束缚态的概率流密度通常却为零。第三个不同点是对空间反演的不变性在表现方式上有所差异。显然，散射态的边界条件即使在 $V(-x) = V(x)$ 时对空间反演也并非不变，所以，与束缚态不同，其本征函数没有一定的宇称。但是，哈密顿算符对空间反演的不变性却以其它形式反映在本征函数上。如果在边界条件(2.3.31)中把 $x$ 换为 $-x$，那么，正好得到从右方投入时的边界条件 (2.3.36)（此时 $p_1 = p_2$）。因此，空间反演的对称性保证了 $R_1 = R_2$，$T_1 = T_2$。

——当 $V(-x) \neq V(x)$ 时，对 $V(x)$ 从左（右）方投入粒子的反射系数和透射系数，等于对 $V(-x)$ 从右（左）方投入时的反射系数和透射系数。

散射态本征函数描述的波动是在整个空间扩展的波动。像平面波一样，该函数也是理想的数学模型，并未如实表现其物理状态。现实的实验装置所产生的波动，即使在关键之处与 $u_p(x)$ 近似，但也只是有限的扩展。既与 $u_p(x)$ 相近又具有有限的扩展的波动，依然能表现为波包。但是，波包的散射已不再是定态问题，而必须作为随时间变化的非稳定过程重新规范化。为描述非稳定现象，有必要仔细探明起初位于极远处的自由粒子波包与势相遇后开始紊乱并分为反射波包和透射波包而穿过势所在的范围的详细情况。当具体给定简单的势时，完成这项工作是相当有趣的。我

们将留给读者去作.此外,无论是当作定态处理还是当作非稳定现象来处理，对反射概率和透射概率等的理论预言未必有别。有关这些问题的详细说明是针对更一般的情况而言的，请参看散射理论（本讲座第四卷《量子力学》(II)第十二章）的有关内容。

本节只讨论了一维定态问题的边界条件。我们打算随着量子力学理论体系的深入描述及其推广应用而逐步阐明确立三维空间运动、多粒子体系及光的吸收发射等更复杂物理现象的边界条件的方法。

## §2.4 简单的定态

下面我们分析几个虽然简单但却基本的具体例子，来阐明一维势所产生的粒子的束缚态和散射态。这样作既是为了搞清上节所叙述的定态的具体内容，同时也是为了预见对于构筑量子力学理论体系所必要的一般方法。

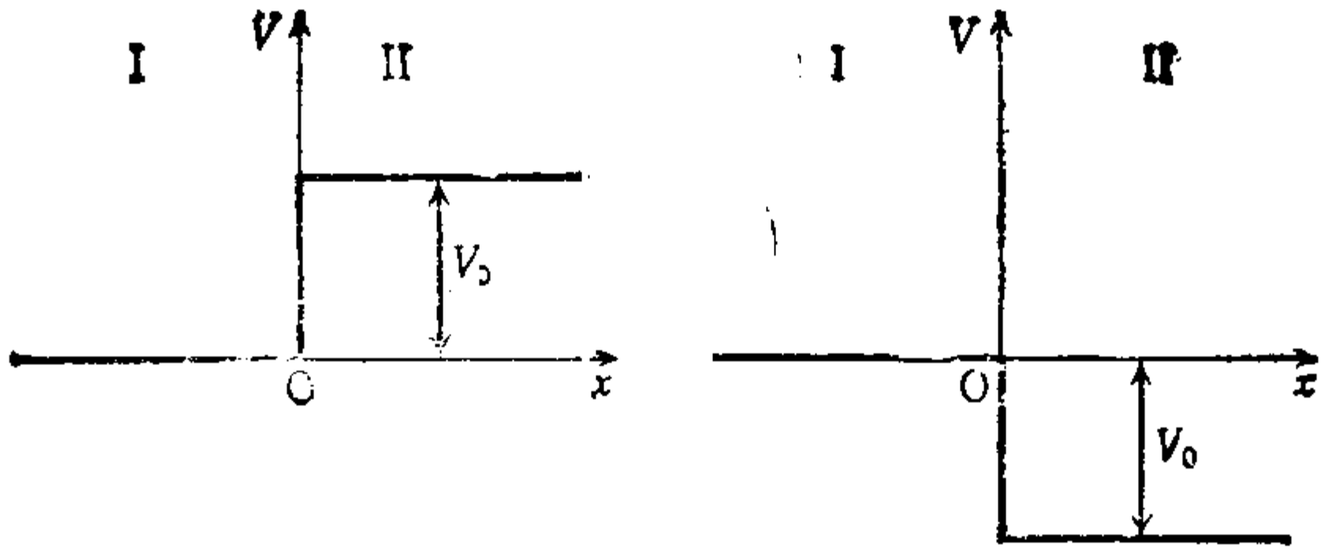
### a） 阶梯势

图 2.7 的函数形式,用式子来表示就是

$$V(x) = \pm V_0\theta(x), \tag{2.4.1}$$

我们来分析这种函数的势所产生的力的作用.其中 $\theta(x)$ 是 $x>0$ 时为 1，$x<0$ 时为零的单位阶梯函数。此外，假设 $V_0>0$。这时,只有在原点上力的值才是 $\mp V_0\delta(x)$[1]。除 $x=0$ 的点外,整个范围都是自由粒子运动。有这样的力作用,束缚态不会出现.在物理上所要探讨的，是从左侧入射的粒子和位于原点的势垒相碰撞的现象。至于从右方入射的情况以后再谈。如前节所述，动量一定的稳定流束所产生的碰撞及散射现象可作为定态问题处理。在图 2.7 a）中,入射粒子的能量 $E_p=(p^2/2m)$（$p$ 为初始动量）大于 $V_0$ 时和小于 $V_0$ 时的现象是大不相同的。因此这两种情况

1）单位阶梯函数的微商是 $\delta$ 函数：$d\theta(x)/dx=\delta(x)$.




(a) (b)

图 2.7 阶梯势

必须分别讨论. 为方便起见，称 $x<0$ 为范围 I. $x>0$ 为范围 II.

(i) 对 $V(x)=V_0\theta(x)$ 来说 $E_p<V_0$ 的情况. 方程(2.3.27)在范围 I 是 (2.3.32)式，而在范围 II 则成为

$$\frac{d^2u_p}{dx^2}-\bar{\kappa}u_p=0,\quad \bar{\kappa}=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E_p)}. \tag{2.4.2}$$

其中 $\kappa$ 是正实数. 该方程的解为 $\exp(\pm\bar{\kappa}x)$，但是对于粒子从左方入射的物理状态而言，却不允许在右方无限远处有无限增大的解 $\exp(+\kappa x)$. 此时满足物理状态的解是

$$\text{I}:\quad u_p(x)=C\{\exp(ikx)+R\ \exp(-ikx)\}, \tag{2.4.3a}$$

$$\text{II}:\quad u_p(x)=CD\ \exp(-\kappa x). \tag{2.4.3b}$$

其中 $k=p/\hbar=\sqrt{2mE_p/\hbar^2}$. 公因子 $C$ 可由‘束强度归一化’确定为 $C=\sqrt{N_0/v}$ $(v=\hbar k/m)$. 从 $x=0$ 处 $u_p$ 和 $(du_p/dx)$ 的连续条件 $1+R=D$ 及 $ik(1-R)=-\bar{\kappa}D$，能求出 $R$ 和 $D$. 它们是

$$R=\frac{k-i\bar{\kappa}}{k+i\bar{\kappa}},\ D=\frac{2k}{k+i\bar{\kappa}}. \tag{2.4.4}$$

反射粒子流强度 $N^{(r)}$ 及透射粒子流强度 $N^{(t)}$ 分别为 $N^{(r)}=|J_p^{(r)}|=v|C|^2|R|^2=N_0$ 及 $N^{(t)}=J_p^{(t)}=0$，故得反射概率和透射概率是

$$P^{(r)} = 1, \quad P^{(t)} = 0. \tag{2.4.5}$$

需要注意，此处 $|R| = 1$. 那么，(2.4.5)式就意味着入射的粒子100%被反射，没有一个流向右方的无限远处．这当然是由 (2.4.3b)式预期的结果．乍一看这似乎和经典力学的结果相同，但是在范围 II 却有可能找到粒子，就这一点而言，波动力学具有和经典力学完全不同的特征．不过，它和经典波动光学中的全反射现象在本质上是相同的．

由(2.4.5)可知，在范围 I 概率流密度为零，从(2.4.4)式及(2.4.3a) 式也能直接推算出这个结果． 假设 $C = (-i/2)(1 - ik\bar{\kappa}^{-1})\bar{C}$，则 (2.4.3a) 式变为

$$\mathrm{I}: u_p(x) = \bar{C}\left\{\sin kx - \frac{k}{\bar{\kappa}} \cos kx\right\},$$

除常数 $\bar{C}$ 外其余全是实数，所以，概率流密度显然为零．

现在我们取 $V_0 \to \infty$ 时的极限．这时，$(k/\bar{\kappa}) \to 0$，加之在范围 II 中 $\exp(-\bar{\kappa}x) \to 0$，故本征函数为

$$\left.\begin{aligned} &\mathrm{I}: \quad u_p(x) = \bar{C}\sin kx \\ &\mathrm{II}: \ u_p(x) = 0 \end{aligned}\right\}. \tag{2.4.6}$$

在这种情况下，(2.4.4) 式则是

$$R = -1, \quad D = 0. \tag{2.4.7}$$

而 (2.4.5) 式照样成立．这时在范围 II 到处都是 $u_p = 0$，全无发现粒子的可能，就这点而言，与 $V_0$ 有限的情况大相径庭．这种高度无限大的势垒称为**刚性壁**．即使在波动力学中，粒子也完全不可能贯穿刚性壁．

因此，刚性壁在数学上是用壁上及壁内的波函数为零这个边界条件来体现的．需要注意，在刚性壁的位置上（此处是 $x = 0$）即使波函数本身是连续的，其一阶导数也不会连续．但是，不言而喻，概率流密度却是连续的．前节 a）中已经涉及到，这种状况可能产生，而刚性壁附近的情况则提供了很好的一例．另外，前节 b）中业已预示，边界条件必须是三角函数 $\sin(px/\hbar)$，而这种情况正好如此，假若写成 $\sin kx = (1/2i)\{\exp(ipx/\hbar) - \exp(-ipx/\hbar)\}$，

则可知道能量本征函数（2.4.6）变成了动量为 $p$ 的右进波和动量为 $-p$ 的左进波叠加而成的驻波状态。它与右端固定的弦的振动同属一类波.

（ii）$E_p > V(x)$ 的情况. 在范围 I，情况完全同（i)。但在范围 II，方程却变为

$$\frac{d^2u_p}{dx^2} + \bar{k}^2u_p = 0 \quad \bar{k} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_p \mp V_0)}. \tag{2.4.8}$$

$V_0$ 前的∓号对应于（2.4.1）式的±号。$\bar{k}$ 当然还是正实数。粒子从左方入射时，其解为

$$\text{I:} \quad u_p(x) = C\{\exp(ikx) + R\ \exp(-ikx)\}, \tag{2.4.9a}$$

$$\text{II:} \quad u_p(x) = CT\ \exp(ikx), \tag{2.4.9b}$$

$R$ 和 $T$ 由 $x = 0$ 处的连续条件 $1 + R = T$ 和 $ik(-1 - R) = i\bar{k}T$ 求得：

$$R = \frac{k - \bar{k}}{k + \bar{k}}, \quad T = \frac{2k}{k + \bar{k}}. \tag{2.4.10}$$

粒子流强度分别为 $N^{(r)} = |J_p^{(r)}| = v|C|^2|R|^2 = N_0|R|^2$, $N^{(t)} = J_p^{(t)} = \bar{v}|C|^2|T|^2 = N_0(\bar{v}/v)|T|^2$（$\bar{v} = \hbar\bar{k}/m$ 是范围 II 中的粒子速度），故可直接得到反射概率和透射概率的表达式

$$P^{(r)} = \frac{(k - \bar{k})^2}{(k + \bar{k})^2}, \quad P^{(t)} = \frac{4k\bar{k}}{(k + \bar{k})^2}. \tag{2.4.11}$$

需要注意，因为势的左右不是同一水准，所以 $v \neq \bar{v}, k \neq \bar{k}$，因此，$P^{(t)} \neq |T|^2$. 在目前的条件下，不会有经典粒子那样因势的存在而弹回的可能，故 $P^{(r)} \neq 0$ 纯粹是量子力学的效应。

当粒子从阶梯势的右方入射时，其解显然为

$$\text{I:} \quad u'_p(x) = C'T'\exp(-ikx), \tag{2.4.12a}$$

$$\text{II:} \quad u'_p(x) = C'\{\exp(-i\bar{k}x) + R'\exp(i\bar{k}x)\}. \tag{2.4.12b}$$

归一化常数是 $C' = \sqrt{N_0/\bar{v}}$. 由 $x = 0$ 处的连续条件求得的 $R'$ 和 $T'$ 分别为

$$R' = \frac{\bar{k} - k}{\bar{k} + k}, \quad T' = \frac{2\bar{k}}{\bar{k} + k}. \tag{2.4.13}$$

粒子从左方入射时的解与从右方入射时的解，其关系与由前节 c）中的一般性讨论所预料的完全一致。

**b）矩形势**

图 2.8 中的矩形势可以用单位阶梯函数 $\theta(x)$ 表示成

$$V(x) = \mp V_0\left[\theta\left(x+\frac{a}{2}\right)-\theta\left(x-\frac{a}{2}\right)\right], \qquad (2.4.14)$$

它能被看作是阶梯势的组合。其中 $V_0>0$。重号的一代表引力势（图 2.8（a）），而＋则代表斥力势（图 2.8（b））。束缚态只是在引力势的情况下作为具有特定能量（$E_v<0$）的定态出现的。而散射态对两种情况来说都有存在的可能，只要是取连续的正能值（$E_p>0$）。为方便起见，称 $x<-a/2$ 为 I 区，$|x|<2/a$ 为 II 区，$x>a/2$ 为 III 区。

（i）*束缚态* 定态薛定谔方程（2.3.27）在 I 区及 III 区为(2.3.29)式，而在 II 区为(2.4.8)式，所以，服从束缚态边界条件的解就是

$$\text{I:}\quad u_v(x) = A\ \exp\left[\kappa_v\left(x+\frac{a}{2}\right)\right], \qquad (2.4.15a)$$

$$\text{II:}\quad u_v(x) = B_1\ \cos(\bar{k}_v x) + B_2 \sin(\bar{k}_v x), \qquad (2.4.15b)$$

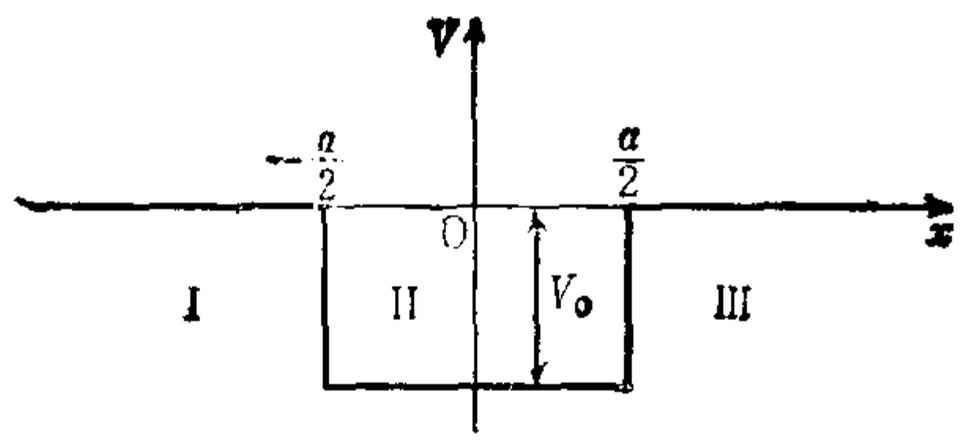
$$\text{III:}\quad u_v(x) = D\ \exp\left[-\kappa_v\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]. \qquad (2.4.15c)$$

其中 $\kappa_v = \sqrt{2m|E_v|/\hbar^2}$，$\bar{k}_v = \sqrt{2m(V_0-|E_v|)/\hbar^2}$。此外，若选如图所示的坐标原点，则 $V(-x)=V(x)$，空间反演的对称性是存在的，能量本征函数应具有一定宇称。因此我们将根据宇称来划分本征函数。

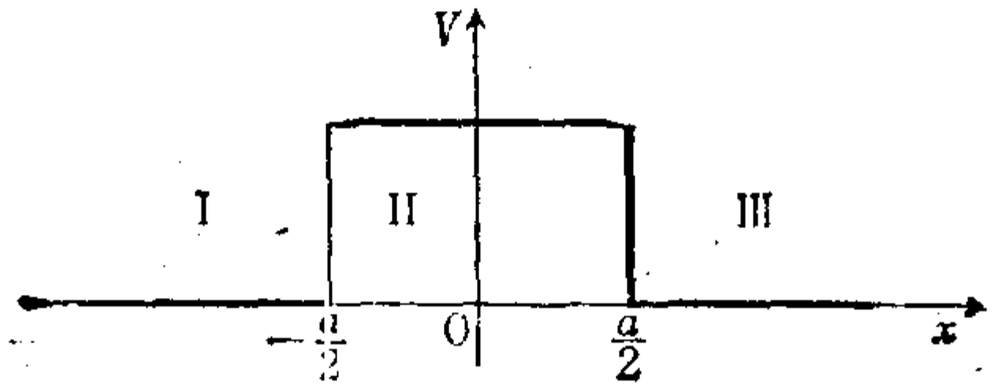
**正宇称的情况：** 因 $u_v^{(+)}(x)$ 必须是偶函数，故 $D=A$，$B_2=0$。其它常数则由 $x=\pm(a/2)$ 处的下列连续条件求出：

$$A-\beta B_1=0\quad \kappa_v A-\bar{k}_v\gamma B_1=0. \qquad (2.4.16)$$

其中 $\beta=\cos(\bar{k}_v a/2)$，$\gamma=\sin(\bar{k}_v a/2)$。(2.4.16) 式具有非零解的条件为




(a) 引力型




(b) 斥力型

图 2.8　矩形势

$$\bar{k}_\nu\gamma - \kappa_\nu\beta = 0 \text{ 或 } \tan\xi = \xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}. \qquad (2.4.17)$$

这是决定能量 $E_\nu$ 的方程.此处

$$\xi = (\bar{k}_\nu a/2) = \sqrt{ma^2(V_0 - |E|)/2\hbar^2},$$

$w = \sqrt{ma^2V_0/2\hbar^2}$ .另外 $(\kappa_\nu a/2) = \sqrt{ma^2|E_\nu|/2\hbar^2} = \sqrt{w^2-\xi^2}$.

因(2.4.17)式是超越方程，故必须用数值解法或图 2.9 的图解法求解。$\tan\xi$ 与 $\xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}$ 曲线的交点（图中的黑点所示）给出(2.4.17) 式的根。在图 2.9 中,因选取 $w = (7\pi/6)$，故有两个根 $\xi_0$ 和 $\xi_1$。对应于根 $\xi_\nu$（$\nu$ 为根的序号）的能量本征值为

$$E_\nu = -\left[V_0 - \frac{2\hbar^2\xi_\nu^2}{ma^2}\right]. \qquad (2.4.18)$$

$w$是代表势的强度的参数,若 $w < \pi$，则曲线 $\xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}$ 位于 $\xi = \pi$ 这个点的左侧，所以只有一个根。这时应当只有一个正宇称本征态。假若$w$的值较$\pi$有所增大，那么正宇称本征态的数目亦随之增加，$\pi < w < 2\pi$ 时出现两个，$2\pi < w < 3\pi$ 时出现三个……,依此类推,$w$每增加一个 $\pi$，就会产生一个新的本征态。

在(2.4.17)的条件下,(2.4.16)式给出$A = \beta B_1$,所以,本征函数

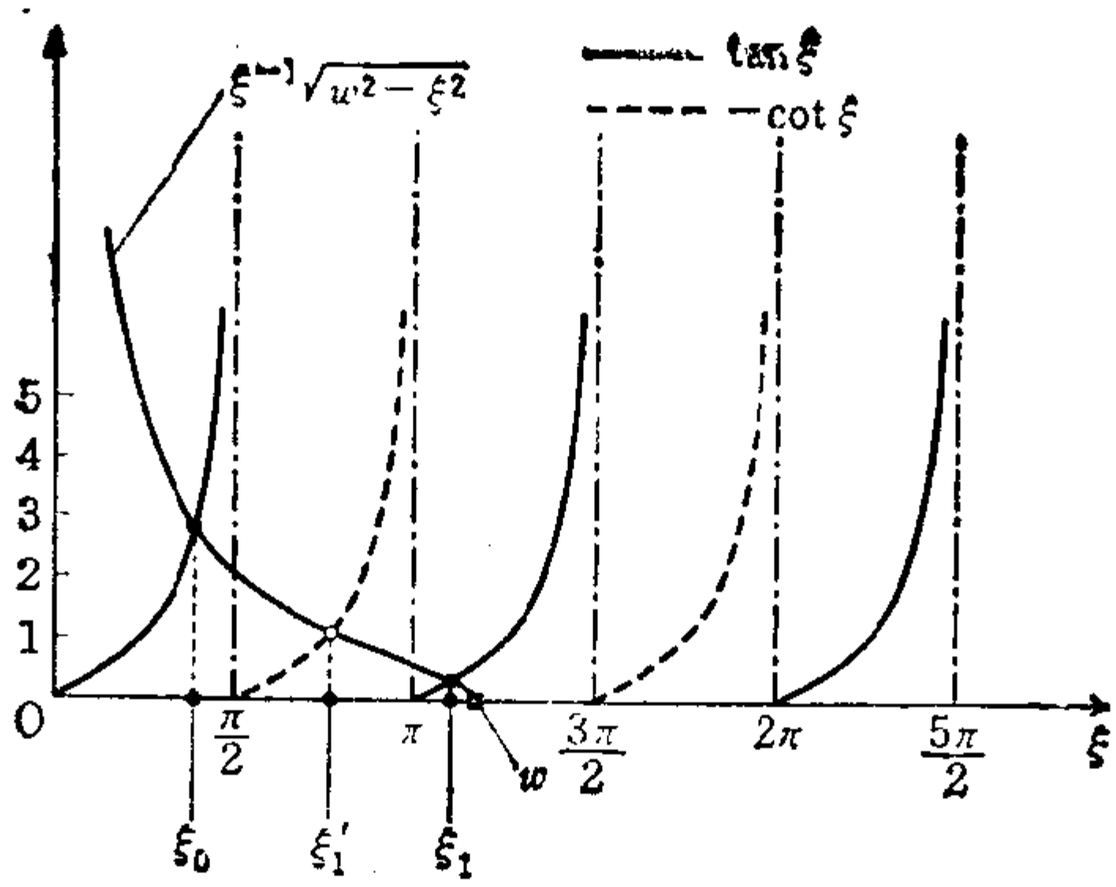



图 2.9　$\tan\xi = \xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}$ 和 $-\cot\xi = \xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}$ 的图解法. 图中选取 $w = (7\pi/6)$.

$u_\nu^{(+)}(x)$ 应具有公因子 $B_1$. 公因子 $B_1$ 由归一化条件 $(u_\nu^{(+)}, u_\nu^{(+)}) = 1$ 确定, 即

$$|B_1|^2\left\{\beta^2\int_{-\infty}^{-a/2}\exp\left[2\kappa_\nu\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]dx+\int_{-a/2}^{a/2}\cos^2(\bar{k}_\nu x)dx\right.$$

$$\left.+\beta^2\int_{2/2}^{\infty}\exp\left[-2\kappa_\nu\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]dx\right\}=1,$$

通过简单计算得出

$$|B_1| = \sqrt{\frac{a}{2}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}. \qquad (2.4.19)$$

其中已利用(2.4.17)式进行整理. 因此, 归一化的正宇称能量本征函数为

$$\text{I}: \quad u_\nu^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\times\cos\left(\frac{\bar{k}_\nu a}{2}\right)\exp\left[\kappa_\nu\left(x+\frac{a}{2}\right)\right], \qquad (2.4.20a)$$

$$\text{II}: \quad u_\nu^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\cos(\bar{k}_\nu x), \qquad (2.4.20b)$$

$$\text{III}: \quad u_\nu^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}$$

$$\times \cos\left(\frac{\bar{k}_v a}{2}\right)\exp\left[-\kappa_v\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]. \qquad (2.4.20c)$$

**负宇称的情况：** 因 $u_v^{(-)}(x)$ 是奇函数，故 $D=-A, B_1=0$. 与正宇称的情况相同，可以得到决定能量 $E_v$ 的方程

$$\bar{k}_v\beta+\kappa_v\gamma=0 \text{ 或 } -\mathrm{cct}\xi=\xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2} \qquad (2.4.21)$$

以及 $A=-\gamma B_2$. 求解超越方程 (2.4.21) 时，采用图解法依然方便.在图 2.9 中，$-\cot\xi$ 的曲线是用虚线表示的，它与 $\xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}$ 的交点（图中白圈）给出根 $\xi_v'$. 如果知道了根 $\xi_v'$，就能求出与 (2.4.18) 形式相同的能量本征值. 与正宇称的情况明显的不同在于，对 $w<(\pi/2)$ 来说不存在负宇称能量本征态. 这与负宇称本征函数是奇函数的性质有关. 奇函数在原点为零，但要从零出发而满足无穷远处的边界条件，力的作用距离 ($\simeq a$) 的范围必须有半个波长的量级. $w$ 是代表势的强度的参数，同时也是表示最低束缚态 ($E_v\simeq 0$) 中波数 ($w\simeq \pi a/\lambda$) 的大致标准.因此 $w>\pi/2$ 正好就是 $a>\lambda/2$，在力的作用范围内波大于半个波长，从而成为束缚态得以实现的条件. 在 $w$ 超过 ($\pi/2$) 之后，与正宇称的情况相同，$w$ 每增加一个 $\pi$，就会产生一个新的负宇称本征态. 假如不管宇称的正负，则 $w$ 的值每增加 ($\pi/2$)，就会有一个能量本征态出现，这时正宇称状态和负宇称状态交替产生，其状况如图 2.9 所示.

在负宇称时的公因子是 $B_2$ (因 $A=-\sqrt{B_2}$)，若根据与正宇称的情况一样的方法，用归一化条件来决定 $B_2$，则所得结果与 $B_1$ 的结果 (2.4.19) 相同. 于是能量本征函数为

$$\text{I:}\quad u_v^{(-)}(x)=-\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_v a}{\kappa_v a+2}}$$
$$\times \sin\left(\frac{\bar{k}_v a}{2}\right)\exp\left[\kappa_v\left(x+\frac{a}{2}\right)\right], \qquad (2.4.22a)$$

$$\text{II:}\quad u_v^{(-)}(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_v a}{\kappa_v a+2}}\sin(\bar{k}_v x), \qquad (2.4.22b)$$

$$\text{III}: \quad u_v^{(-)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_v a}{\kappa_v a + 2}} \times \sin\left(\frac{\bar{k}_v a}{2}\right)\exp\left[-\kappa_v\left(x - \frac{a}{2}\right)\right]. \quad (2.4.22c)$$

负宇称能量本征函数在原点全部为零，自动满足刚性壁位于原点时的边界条件。因此，图 2.10 的势具有（2.4.22）式右半部分（$x > 0$ 的部分)所表示的束缚态。当然，(2.4.20）式并非图 2.10 那种势的束缚态。由三维矩形势所产生的束缚态(特别是角动量为零的状态）与该势所产生的束缚态是等价的.因此,对三维矩形势来说,当 $w<(\pi/2)$ 时束缚态不复存在。

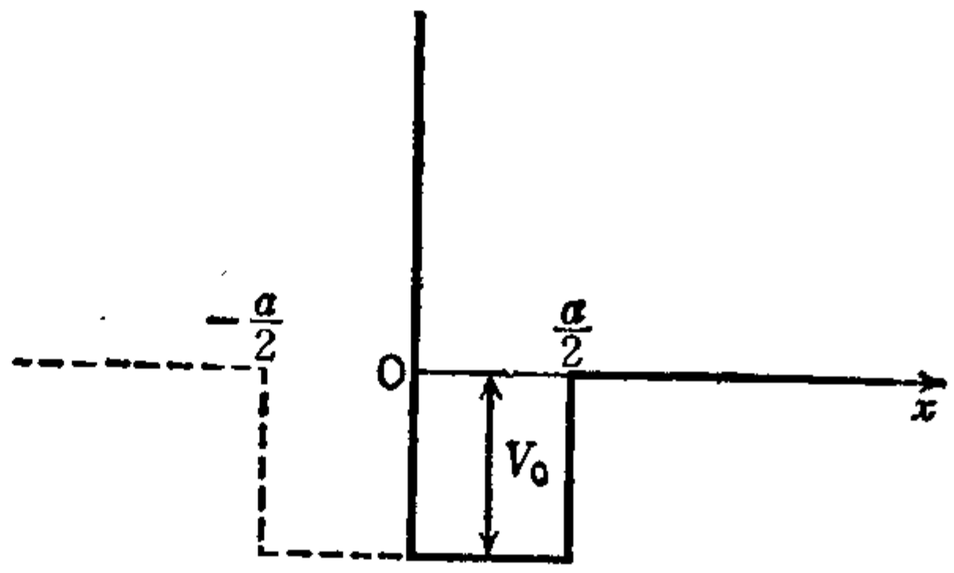


图 2.10　刚性壁位于原点时的矩形势

(ii) **散射态**　首先我们针对图 2.8 (b) 中的斥力势来分析 $E_p = (p^2/2m) < V_0$ 的情况，$p$ 是初始动量。在 I、III 区中，(2.3.32)式成立,而在 II 区中(2.4.2)式成立，因而服从散射态边界条件 (2.3.31) 的解为[1)]

$$\text{I}: \quad u_p(x) = C\left\{\exp\left[ik\left(x + \frac{a}{2}\right)\right] + R\exp\left[-ik\left(x + \frac{a}{2}\right)\right]\right\}, \quad (2.4.23a)$$

$$\text{II}: \quad u_p(x) = C\{B_1\cosh(\bar{\kappa}x) + B_2\sinh(\bar{\kappa}x)\}, \quad (2.4.23b)$$

$$\text{III}: \quad u_p(x) = CT\exp\left[ik\left(x - \frac{a}{2}\right)\right]. \quad (2.4.23c)$$

其中 $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E_p)/\hbar^2}$。公因子 $C$ 可以用 (2.3.19) 式来确定。决定其余常数的方程是在 $x = \pm(a/2)$ 时的连续条件,即

1) 若把 $C$ 换成 $C\exp(-ika/2)$，则 (2.4.23a，c) 式与 (2.3.31) 形式完全相同,但却必须把(2.4.23a,c)式中的 $R$ 和 $T$ 换成 $R\exp(ika)$ 和 $T\exp(ika)$. (2.3.31) 式和 (2.4.23) 式的差异与如何选择待定相位因子的问题有关,但无本质上的不同,

$$R-\beta' B_1+\gamma' B_2=-1,\quad ikR+\bar{\kappa}\gamma' B_1-\bar{\kappa}\beta' B_2=-ik,$$

$$\beta' B_1+\gamma' B_2-T=0,\qquad \bar{\kappa}\gamma' B_1+\bar{\kappa}\beta' B_2-ikT=0.$$

其中，$\beta'=\cosh(\bar{\kappa}a/2)$，$\gamma'=\sinh(\bar{\kappa}a/2)$。简单计算后可得

$$\left.\begin{aligned} R&=-\frac{\beta'\gamma'(\bar{\kappa}^2+k^2)}{(\bar{\kappa}\gamma'-ik\beta')(\bar{\kappa}\beta'-ik\gamma')}\\ T&=-\frac{ik\bar{\kappa}(\beta'^2-\gamma'^2)}{(\bar{\kappa}\gamma'-ik\beta')(\bar{\kappa}\beta'-ik\gamma')}\\ B_1&=-ik(\bar{\kappa}\gamma'-ik\beta')^{-1},\quad B_2=ik(\bar{\kappa}\beta'-ik\gamma')^{-1} \end{aligned}\right\}. \tag{2.4.24}$$

由此得出反射概率 $P^{(r)}=|R|^2$ 和透射概率 $P^{(t)}=|T|^2$ 为

$$P^{(r)}=\left[1+\frac{4E_p(V_0-E_p)}{V_0^2\sinh^2(\bar{\kappa}a)}\right]^{-1},$$

$$P^{(t)}=\left[1+\frac{V_0^2\sinh^2(\bar{\kappa}a)}{4E_p(V_0-E_p)}\right]^{-1}. \tag{2.4.25}$$

显然，守恒定律 $P^{(r)}+P^{(t)}=1$ 是成立的。当势垒相当高而且又相当厚时，$(E_p/V_0)\ll 1$，$\kappa a\gg 1$，故透射概率极小，能近似地表示成

$$P^{(t)}\simeq 16\left(\frac{E_p}{V_0}\right)\exp(-2\bar{\kappa}a). \tag{2.4.26}$$

$P^{(t)}\neq 0$ 的存在表明了量子力学的隧道效应。

其次，我们来同时分析 $E_t>V_0$ 的斥力势和 $E_p>0$ 的引力势这两种情况。显然，其解为

$$\text{I}:\quad u_p(x)=C\left\{\exp\left[ik\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]+R\exp\left[-ik\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]\right\}, \tag{2.4.27a}$$

$$\text{II}:\quad u_p(x)=C\{B\cos(\bar{k}x)+B_2\sin(\bar{k}x)\}, \tag{2.4.27b}$$

$$\text{III}:\quad u_p(x)=CT\exp\left[ik\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]. \tag{2.4.27c}$$

其中 $\bar{k}=\sqrt{2m(E_p\pm V_0)/\hbar^2}$；重号的＋代表引力型，－则代表斥力型。由 $x=\pm(a/2)$ 的连续条件可得

$$\left.\begin{aligned} R &= \frac{-\beta\gamma(\bar{k}^2-k^2)}{(\bar{k}\gamma+ik\beta)(\bar{k}\beta-ik\gamma)} \\ T &= \frac{ik\bar{k}(\beta^2+\gamma^2)}{(\bar{k}\gamma+ik\beta)(\bar{k}\beta-ik\gamma)} \\ B_1 &= ik(\bar{k}\gamma+ik\beta)^{-1} \\ B_2 &= ik(\bar{k}\beta-ik\gamma)^{-1} \end{aligned}\right\}. \tag{2.4.28}$$

其中，$\beta=\cos(\bar{k}a/2)$，$\gamma=\sin(\bar{k}a/2)$。在此取 $P_0=4k\bar{k}/(k+\bar{k})^2$，则可把 $R$ 和 $T$ 改写为

$$\left.\begin{aligned} R &= \pm i2P_0^{-1}\sqrt{1-P_0}\sin(\bar{k}a)T, \\ T &= P_0[1-(1-P_0)\exp(2i\bar{k}a)]^{-1}, \end{aligned}\right. \tag{2.4.29}$$

这样作是很有意义的。$R$ 中的重号在引力型时取＋，而在斥力型时取－，$P_0$ 不是别的，正是从左方及右方向阶梯势（图 2.7）入射时共同的透射概率。如果看一下势的形状，那么，即使在 $R$ 及 $T$ 的表达式中出现阶梯势的透射概率亦并非不可思议。实际上，把阶梯势的解组合起来，就能构成矩形势的解。在 d）中我们打算针对更一般的情况来说明这种方法。

这样，反射概率 $P^{(r)}=|R|^2$ 和透射概率 $P^{(t)}=|T|^2$ 就成为

$$\begin{aligned} P^{(r)} &= 4P_0^{-2}(1-P_0)\sin^2(\bar{k}a)|T|^2 \\ &= \left[1+\frac{4E_p(E_p\pm V_0)}{V_0^2\sin^2(\bar{k}a)}\right]^{-1}, \end{aligned} \tag{2.4.30a}$$

$$\begin{aligned} P^{(T)} &= [1+4P_0^{-2}(1-P_0)\sin(\bar{k}a)]^{-1} \\ &= \left[1+\frac{V_0^2\sin^2(\bar{k}a)}{4E_p(E_p\pm V_0)}\right]^{-1}. \end{aligned} \tag{2.4.30b}$$

重号对引力型来说取＋，而对斥力型来说则取－。显然，概率守恒定律 $P^{(T)}+P^{(T)}=1$ 是成立的。

这时，$P^{(r)}\neq 0$ 的存在表明了量子力学的效应，由（2.4.29）式或（2.4.30）式可知，该效应的根源在于，阶梯势所产生的反射

概率（$1-P_0$）不为零，在本质上可以作为波动现象来理解。反射概率 $P^{(r)}$ 是随着（$V_0/E_p$）的增大而增大的，作为波动现象来看，这个性质当然也在预料之中。但是，当特定的能量满足 $\sin(\bar{k}a)=0$ 时，$P^{(r)}=0$，$P^{(t)}=1$，透射达 100%。这是一种共振散射，是在位于 $x=\pm(a/2)$ 的两个壁上往复反射的右向波与左向波相位关系正好匹配，从而使透射波互相增强，反射波互相减弱时所产生的现象。该现象也可以通过波动理论来解释，详细情况将在 d）中进行讨论。

在共振散射中，只有当能量满足 $\sin(\bar{k}a)=0$ 时才无反射。与该现象有所不同的问题，就是要找出一种势对一切波数或能量来说会使反射系数为零。这叫作'无反射问题'。也就是说，要求出只有束缚态而无散射态的哈密顿算符的问题，它是所谓的**逆散射问题**的特例，该问题所决定的势给出 $R$ 和 $T$ 对波数或能量的依赖关系。一维逆散射问题可以较详细地求解，在某些条件下得到的势会给出需要的散射特性。尤其是作为一维薛定谔方程的无反射问题的解，其势显然是由考特威基·德·瑞思（Korteweg de Vries）方程的孤立波解给出的，该方程是描述浅水波的非线性偏微分方程，逆散射问题和非线性波动的关系直到最近才得以明确，其意义极为深远。我们认为，今后这个领域的研究必将飞速发展，也会对量子力学作出重大贡献。有关内容请参考本讲座第一卷《经典物理学》第三章。

（iii）*从散射态到束缚态的解析开拓*　最后，我们想要指出，在散射态本征函数和束缚态本征函数之间存在着意义深远的数学联系。散射态的能量为正实数，而束缚态的能量却取特定的负实数值 $E_v$，那么，我们来研究一下，在引力势的情况下，当散射态的能量 $E_p$ 从任意正实数值连续过渡到负实数值 $E_v$ 时，通过解析开拓，函数(2.4.27)是否会过渡到(2.4.20)或(2.4.22)式。散射态函数一般来说是波数 $k=\sqrt{2mE_p/\hbar^2}$ 的函数，因而当 $E_p$ 从正实数值过渡到负实数值时，会在 $E_p=0$ 处遇到 $k$ 的分枝点。当我们进行解析开拓时，必须在 $E_p$ 的复数平面上绕过该分枝点，而取 $k$

$=\pm i\kappa(\kappa=\sqrt{2m|E_p|/\hbar^2})$的任一分枝。在向束缚态函数过渡的过程中，为了满足边界条件，就必须选择 $k=i\kappa$ 这一分枝。这样，连 $R$ 和 $T$ 的公分母为零的值都可以进行解析开拓。这时，倘若公因子 $C$ 选得与 $R$ 和 $T$ 的公分母成比例，则入射波消失，只剩下 $CR\ \exp(\kappa x)(x<-a/2)$ 和 $CT\exp(-\kappa x)(x>a/2)$，成为所需要的形状。根据(2.4.28)式，使 $R$ 和 $T$ 为公分母为零的 $E_p$ 值 $E_\nu$，显然满足方程

$$[\bar{k}\gamma+i(i\kappa)\beta][\bar{k}\beta-i(i\kappa)\gamma]|_{E_p=E_\nu}=0,$$

这正是决定束缚态能量本征值 $E_\nu$ 的方程(2.4.17)和(2.4.21)的组合。$[\bar{k}\gamma+i(i\kappa)\beta]=0$ 的解应该对应于正宇称状态，而

$$[\bar{k}\gamma-i(i\kappa)\gamma]=0$$

的解应该对应于负宇称状态。为了过渡到正宇称束缚态，如果选择

$$C=-\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa a}{\kappa a+2}}$$
$$\times\left(\frac{\gamma}{\kappa^2}\right)[\bar{k}\gamma+i(i\kappa)\beta][\bar{k}\beta-i(i\kappa)\gamma],\qquad(2.4.31a)$$

并将满足 $\bar{k}=\kappa(\beta/\gamma)$ 的值 $E_p=E_\nu$ 代入，则可得到

$$\left.\begin{aligned}C&=0,\quad CB_2=0,\quad CB_1=\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\\ CR&=CT=\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\beta_\nu\end{aligned}\right\},\qquad(2.4.31b)$$

而且(2.4.27)式与(2.4.20)式完全一致，另一方面，为了过渡到负宇称束缚态，可以选择

$$C=\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa a}{\kappa a+2}}$$
$$\times\left(\frac{\beta}{\kappa^2}\right)[\bar{k}\gamma+i(i\kappa)\beta][\bar{k}\beta-i(i\kappa)\gamma],\qquad(2.4.32a)$$

当 $E_p=E_\nu$ 满足 $\bar{k}=-\kappa(\gamma/\beta)$ 时，可以得到

$$\left.\begin{aligned} C = 0,\ CB_1 = 0,\ CB_2 &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_p a}{\kappa_p a + 2}} \\ -CR = CT &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa a}{\kappa a + 2}}\,\gamma_p \end{aligned}\right\}, \tag{2.4.32b}$$

而且(2.4.27)式与(2.4.22)式完全一致。

海森伯注意到束缚态与散射态之间存在的这种关系，认为在散射问题的解之中包含了一切必要的物理内容，并于1943年提出了不依赖于薛定谔方程而来求解散射问题的 $S$ 矩阵法（一维问题为求 $R$ 和 $T$——详见本讲座第四卷《量子力学》(II)第十二章散射理论）。当时，场的量子论正苦于发散困难不能解决，而他却推测，其原因在于运动定律是微分方程，并试图从理论体系中将薛定谔方程一笔勾消。他的思想以如下推测为基础，即认为自然界存在着未被发现的**普适长度**，在小于其量级的时空范围内力学定律与当时已知的力学定律（即薛定谔方程）本质上应有所差异。海森伯的提议一时间驱使很多物理学家致力于 $S$ 矩阵的研究，但并没有达到预期的目的。然而，这些人的研究却明确了散射幅的解析性质，对色散理论的形成等基本粒子物理学的发展作出了不小的贡献（参看《量子力学》(II)第十二章散射理论，第十五章散射幅的解析性质）。

### c） $\delta$ 函数势和刚性壁

下面我们分析 $\delta$ 函数势和刚性壁。前者是矩形势取极限时的特殊情况。

(i) $\delta$ 函数势　如果既保持 $V_0 a = g$ 不变，又取 $V_0 \to \infty$ 和 $a \to 0$ 的极限，则矩形势就会过渡到所谓的 $\delta$ 函数势，即

$$V(x) = \pm g\delta(x)\ \ (g > 0). \tag{2.4.33}$$

束缚态只有在引力型的情况下才能存在，因为

$$w = \sqrt{a}\sqrt{mg/2\hbar^2} \to 0$$

较 $(\pi/2)$ 为小，所以只存在着一个正宇称状态。在这个意义上，

力并不是多强的。若用 $\sqrt{w^2-\xi^2}=a\sqrt{m|E_0|/2\hbar^2}$，

$$\xi\to\sqrt{a}\sqrt{mg/2\hbar^2},\ \tan\xi\to\xi,$$

则可马上求出能量 $E_0$ 和本征函数 $u_0$：

$$E_0=-\frac{mg^2}{2\hbar^2}, \tag{2.4.34}$$

$$u_0(x)=\sqrt{\kappa_0}\exp(-\kappa_0|x|)\quad(\kappa_0=mg/\hbar^2). \tag{2.4.35}$$

下面来谈散射态。因 $\bar{\kappa}$ 和 $\bar{k}$ 趋近于同一极限 $2\sqrt{mg/2\hbar^2}/\sqrt{a}$，$\beta$和 $\beta'$ 趋近于同一极限1，而 $\gamma$ 和 $\gamma'$ 亦趋近于同一极限，故可得到

$$R=\frac{-i(\pm mg/\hbar^2)}{k+i(\pm mg/\hbar^2)},\qquad T=\frac{k}{k+i(\pm mg/\hbar^2)}, \tag{2.4.36}$$

$$P^{(r)}=\frac{(mg/\hbar^2)^2}{k^2+(mg/\hbar^2)^2},\qquad P^{(T)}=\frac{k^2}{k^2+(mg/\hbar^2)^2}. \tag{2.4.37}$$

其中，重号在斥力势时取+，而在引力势时取−，求 $u_p(x)$ 的表达式请读者自己完成。无论是束缚态还是散射态，其本征函数在 $x=0$ 处是连续的，但一阶导数却不连续。然而，概率流密度是连续的。

(ii) 刚性壁　在讨论引力型（图 2.8 (a)）束缚态时，我们把 $E_\nu+V_0$ 用新的 $E_\nu$ 来代替，然后取 $V_0\to\infty$ 的极限。这样，能量原点移到了势底，其壁则作为刚体看待，新的 $E_\nu$ 为正实数。这时 $\xi=(\bar{k}_\nu a/2)=\sqrt{2mE_\nu/\hbar^2}$ 虽然有限，但

$$\kappa_\nu=\sqrt{2m(V_0-E_\nu)/\hbar^2}\quad\text{和}\quad\sqrt{w^2-\xi^2}=(\kappa_\nu a/2)$$

却趋于无限大。因此，决定能量 $E_\nu$ 的方程(2.4.17)和(2.4.21)就成了

$$\text{正宇称}\quad\cos(\bar{k}_\nu a/2)=0, \tag{2.4.38a}$$

$$\text{负宇称}\quad\sin(\bar{k}_\nu a/2)=0, \tag{2.4.38b}$$

或归纳为

$$\sin(\bar{k}_\nu a)=0, \tag{2.4.39}$$

所以，波数和能量本征值是

正宇称　$k_\nu = \frac{\pi}{a}(\nu+1)$ $(\nu = 0,2,4,\cdots)$, (2.4.40a)

负宇称　$k_\nu = \frac{\pi}{a}(\nu+1)$ $(\nu = 1,2,3,\cdots)$, (2.4.40b)

$$E_\nu = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(\nu+1)^2 \quad (\nu = 0,1,2,\cdots). \tag{2.4.41}$$

能量本征函数在 I 区和 III 区中到处为零，而在 II 区中却是

正宇称　$$u_\nu^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left[\frac{\pi(\nu+1)x}{a}\right]$$

$$(\nu = 0,2,4,\cdots), \tag{2.4.42a}$$

负宇称　$$u_\nu^{(-)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left[\frac{\pi(\nu+1)x}{a}\right]$$

$$(\nu = 1,3,5,\cdots), \tag{2.4.42b}$$

或归纳为

$$u_\nu(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left[\frac{\pi(\nu+1)}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)\right](\nu = 0,1,2,3,\cdots). \tag{2.4.43}$$[1)]

该本征函数描述刚性壁所包围的范围$|x| < (a/2)$中的束缚态，它是和两端固定的琴弦的振动形式相同的驻波，为具有动量$[\hbar\pi(\nu+1)/a]$及$-[\hbar\pi(\nu+1)/a]$的两个动量本征态的'叠加'．因为封闭在有限范围之内，所以动量和能量均取不连续值．特别值得注意的是，在能量最低的状态——叫作**基态**——能量（或动量）也不为零．最低能量往往称为**零点能**．非零的零点能的存在，源于上一节介绍的不确定关系．在现在的情况下，波函数扩展到$|x| < (a/2)$的整个范围，所以位置的不确定范围是$\Delta x \sim a$．因此，由测不准关系产生的动量的不确定范围是$\Delta p \sim (h/a)$，可以预计能量的不确定范围至少是$(\Delta p)^2/2m \sim (h^2/2ma^2)$．事实上，在基态$u_0$之中动量的不确定范围为$\Delta p = (\hbar\pi/a) - (-\hbar\pi/a) =$

1) 当$\nu$是奇数时，这个函数和(2.4.42)只差$(-1)^{(\nu+1)/2} = \exp[i\pi(\nu+1)/2]$，而当$\nu$为偶数时，则差$(-1)^{\nu/2} = \exp[i\pi\nu/2]$．但是，这些因子本来就可以包含在待定相位因子之中，所以去掉它们亦未尝不可．

$(h/a)$，而零点能则是 $E_0=(\hbar^2\pi^2/2ma^2)$，大体与预算的相一致，以不确定关系为基础的零点振动是一切量子力学束缚态的共同的特性。

(iii) 本征函数系的数学性质　下面我们来阐述本征函数(2.4.43)的数学性质——同时预见其一般形式。通过简单的证明可知

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\sin\left[\frac{\pi(\nu+1)}{a}(x+a)\right]\times\sin\left[\frac{\pi(\nu'+1)}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]dx=\frac{a}{2}\delta_{\nu\nu'}.$$

其中克朗内克（Kronecker）符号 $\delta_{\nu\nu'}$ 当 $\nu=\nu'$ 时为 1，而当 $\nu\neq\nu'$ 时为 0。对本征函数(2.4.43)来说，该公式给出

$$(u_\nu,u_{\nu'})=\delta_{\nu\nu'}. \tag{2.4.44}$$

括号代表函数内积[1]。当函数内积为零时，有关的两个函数相互**正交**。(2.4.44)式表明，属于不同本征值 $E_\nu$ 和 $E_{\nu'}$ 的本征函数 $u_\nu$ 和 $u_{\nu'}$ 是正交的。一般来说，厄米算符属于不同本征值的本征函数彼此正交.我们以哈密顿算符为例予以证明.首先，$\hat{H}u_\nu=E_\nu u_\nu$，$\hat{H}u_{\nu'}=E_{\nu'}u_{\nu'}$，假如第一式的复共轭乘以 $u_{\nu'}$ 后积分，第二式乘以 $u_\nu^*$ 后积分，所得两式相减。那么，根据 $\hat{H}$ 的厄米性 $\hat{H}^\dagger=\hat{H}$，可以得出

$$(E_\nu-E_{\nu'})(u_\nu,u_{\nu'})=(u_\nu,\hat{H}^\dagger u_{\nu'})-(u_\nu,\hat{H}u_{\nu'})=0.$$

因此，若 $E_\nu\neq E_{\nu'}$，就必然有 $(u_\nu,u_{\nu'})=0$。当本征值简并时，有必要进行更详细的讨论。这一点放在后面再说。

这样一来，(2.4.43) 式所组成的函数系$\{u_\nu\}$显然构成**正交系**，为了强调它是归一化的，往往又叫作**归一正交系**或**正交归一系**，该函数系能将与$u_\nu$具有同样边界条件(在刚性壁的情况下，就是在$|x|\geqslant(a/2)$时为零的条件）的任意函数 $\psi(x)$ 展成如下级数：

---

1）函数内积的积分范围最好取 $(-a/2,a/2)$. 本来的范围为 $(-\infty,\infty)$，但因 $|x|>(a/2)$ 时 $u_\nu=0$，所以结果是相同的. 不过，在该情况下，为了数学上的讨论简单起见，所以把整个范围局限在 $(-a/2,a/2)$之内.

$$\psi(x)=\sum_{\nu'=0}^{\infty}c_{\nu'}u_{\nu'}(x),\quad c_{\nu}=(u_{\nu},\psi).\tag{2.4.45}$$

在级数展开式两边乘以 $u_{\nu}^{*}$ 后再积分，利用 (2.4.44) 式就可以马上得到求系数的公式。这样一来，当任意函数能展成 (2.4.45) 型的级数时，函数系就构成**完备系**。显然，(2.4.43)式构成**完备正交归一系**。假如将 $c_{\nu'}=(u_{\nu'},\psi)$代入展开式(2.4.45)，并交换求和与积分的顺序，则

$$\psi(x)=\int\left\{\sum_{\nu'=0}^{\infty}u_{\nu'}(x)u_{\nu'}^{*}(x')\right\}\psi(x')dx'.$$

为了使上式对任意函数$\psi$均可成立，必须有

$$\sum_{\nu'=0}^{\infty}u_{\nu'}(x)u_{\nu'}^{*}(x')=\delta(x-x').\tag{2.4.46}$$

这就是完备性条件。至于正交性和完备性的物理内含，我们将放在第三章讨论。

### d）共振散射和亚稳态

我们再来讨论透射概率 (2.4.30b)。业已指出，当能量 $E_p$ 与满足

$$\sin(\bar{k}_n a)=0\ \text{或}\ \bar{k}_n=\frac{\pi}{a}n\quad(n=\text{正整数})\tag{2.4.47}$$

的值 $E_n=(\hbar^2\bar{k}_n^2/2m)\mp V_0$ 相等时，$P^{(t)}=1$，$P^{(r)}=0$[1]。这是一种**共振散射**。有时也称为**透射共振**。现在，如果以 $E_p$ 为横轴作(2.4.30b)式给出的 $P^{(t)}$ 的曲线，则在**共振能级** $E_n$ 处就会正规地出现一个极大值为 1 的峰。对引力型 (图 2.8 (a)) 来说，当 $V_0\gg E_p$ 时，峰的形状特别明显，峰顶极尖，一偏离共振点则急剧下降。下面我们重点讨论这种情况。若限于一个峰 $E_n$ 的附近，则近似式 $\bar{k}\simeq\bar{k}_n+(d\bar{k}/dE_p)_n(E_p-E_n)$ 成立，脚标 $n$ 表示 $E_p=E_n$。如果代入群速度公式 $(d\bar{k}/dE_p)=(\hbar\bar{v})^{-1}$ 及在势的范

---

1）对引力型来说，因 $k_n\geqslant\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$，故 $n$ 相当大。

围往返的时间 $\bar{\tau}=(2a/\bar{v})$，那么该近似式就变为 $\bar{k}a\simeq\bar{k}_n a+(\bar{\tau}_n/2\hbar)(E_p-E_n)$. 将其代入（2.4.30b）式，并略去 $p_0$ 和 $(E_p-E_n)$ 的高阶项，则可得到

$$F^{(t)}\simeq\left[1+\left(\frac{E_p-E_n}{\Delta E_n}\right)^2\right]^{-1}. \tag{2.4.48}$$

其中，

$$\Delta E_n=\frac{\hbar P_0}{\bar{\tau}_n}. \tag{2.4.49}$$

(2.4.48)式是典型的共振公式，$\Delta E_n$的两倍称为**半宽度**. 当$V_0\gg E_p$时，$P_0\simeq 4(E_p/V_0)^{1/2}\ll 1$，故 $\Delta E_n$ 确实很小.

可以认为，共振散射是由于途经**亚稳态**或**虚态**而引起的. 作为波动的粒子，当其具有共振点附近的能量时，在矩形势特有的陡壁两端多次往复反射，形成了在某个一定长的时间内被势所束缚的状态. 这样的束缚态叫作亚稳态或虚态，其能级即共振能级由（2.4.47）式给出. 它与决定束缚态能量的公式（2.4.39）形式相同，后者是由深度无限的势所产生的. 但是，与原来的束缚态不同，亚稳态或虚态不能持续太久，粒子在势中滞留的时间（即亚稳态的寿命）是有限的. 如果回想一下（2.3.17）式的有关讨论，就可以预期，有限寿命为 $\Delta t$ 的状态，其能量不确定度为 $\Delta E\sim(\hbar/\Delta t)$ 的量级. 作为透射概率对能量的依赖性而观测到的共振峰的宽度 $\Delta E_n$，正是在该意义上给出的能量不确定性. 因此，对应于(2.4.49)式，亚稳态的寿命约为

$$(\Delta t)_n\sim(\hbar/\Delta E_n)\sim(\bar{\tau}_n/P_0). \tag{2.4.50}$$

上式也可根据如下的定性推论来理解. 因 $P_0$ 是穿越阶梯势垒的概率，所以平均碰撞 $(1/P_0)$次就会透射一次. 而且，在势的范围往返所需的时间 $\bar{\tau}_n$ 内应该碰撞一次，因此透射所需的时间（即寿命）大约为 $(\bar{\tau}_n/P_0)$. 它恰好是(2.4.50)式. 这样(2.4.48)式和(2.4.49)式暗示透射共振是经由亚稳态而引起的. 但现在的问题是由持续无限长时间的确定能量的波所引起的定态的散射现象，而绝非处理亚稳态随时间的衰变过程. 为了处理亚稳态随时间的衰变，从

而直接证明有限寿命（2.4.50）的存在，有必要观测由短到一定程度的波包所引起的散射现象。只有当寿命远大于波包通过的时间时，才能直接观测到衰变过程。在相反的情况下则无此结果。通过透射概率对能量依赖关系的共振峰，只会了解到亚稳态的存在。有关波包的散射参看本讲座第四卷《量子力学》(II) 第十二章、第十三章散射理论。

刚才讨论的透射共振和亚稳态的存在，对两端为陡壁的矩形势的特性有着很大的作用，但是，该特性本身决非主观臆想，本质上与其极为相似的现象在现实中业已观测到了。例如，在电子与原子的低能碰撞中，有着电子几乎无散射而穿过的现象——冉邵尔-汤森德（Ramsauer-Townsend）效应，这也是一种透射共振。此外，在中子和质子的一次散射中出现了有名的虚态。可以认为，矩形势是此类现象的简化模型，但通常在该现象中作为模型而出现的矩形势，提供的寿命并不太长。这时用虚态这个术语要比用亚稳态更为贴切。亚稳态这个提法比较适合于在原子、原子核及基本粒子之类的碰撞现象中已充分观测到的具有尖峰的共振能级。若把这种共振散射产生的机理用一维势的模型加以简化，则如图 2.11 所示。为简单起见，取 $V(-x)=V(x)$。设两侧的峰高及中间的谷深远大于能量 $E_p$。中间的谷之所以呈矩形，只不过是为了简单而已。由于隧道效应，从左方入射的粒子，应能越过两个峰，向右方前进，一般来讲，峰越高越宽，透射概率越小。尽管如此也要分析一下，实现矩形势中的相位匹配，能否产生共振散射。

我们结合图 2.11 来予以说明。首先，我们认为在只有 A 部分而无 B 部分的势 $V_A$ 时，从左右两方射入的问题业已解决。也就是说，已给出了从左方射入的反射系数 $R_1$ 和透射系数 $T_1$，以及从右方射入的反射系数 $R_2$ 和透射系数 $T_2$。因 $\lim_{x\to-\infty} V_A=0$，$\lim_{x\to\infty} V_A=-V_0$，所以假设 $V_1=0$，$V_2=-V_0$，$\hbar^{-1}p_1=k$，$\hbar^{+}p_2=\bar{k}$，则上一节的定理 (2.3.38)—(2.3.41) 均可成立。另一方面，因为从射入只有 B 部分的势 $V_B$ 时的解等于从右方射入 $V_A$ 时的解的空

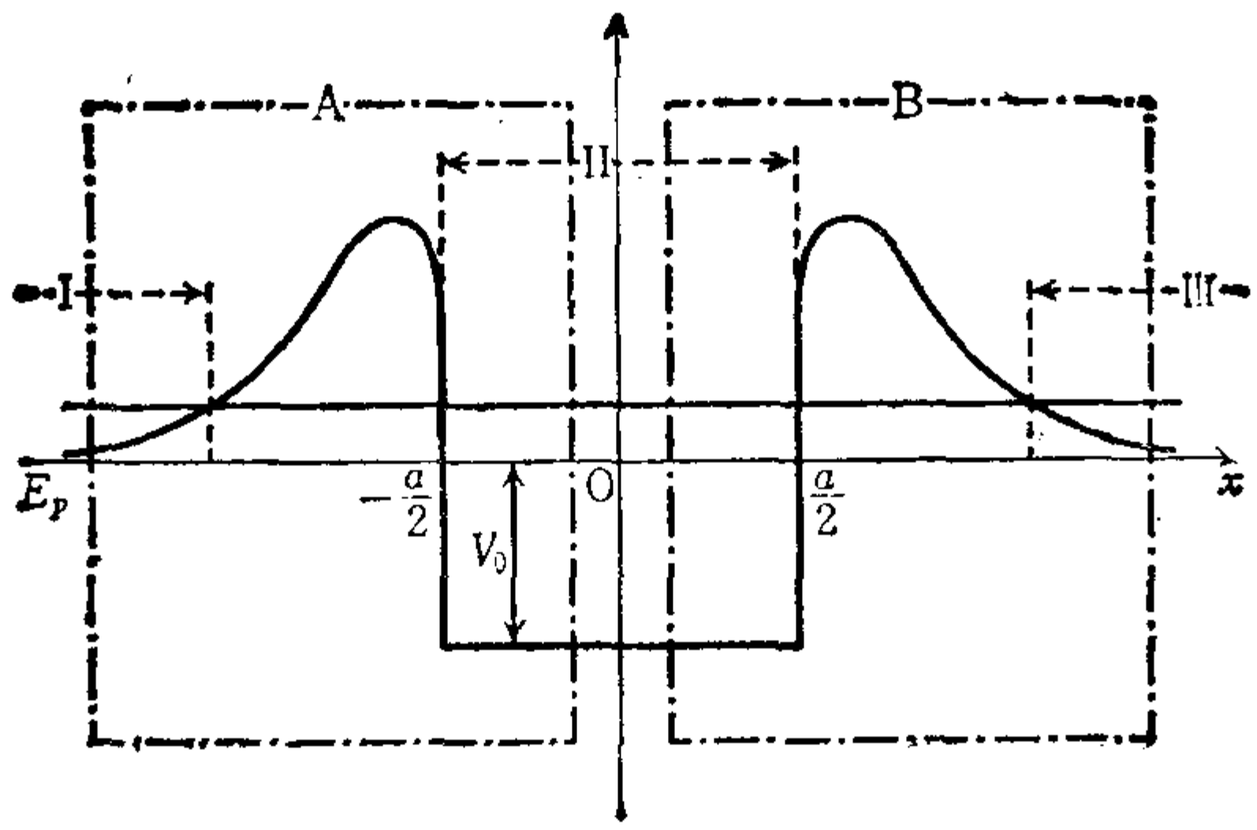



图 2.11　共振散射和亚稳态

间反演 ($x \to -x$)，故反射系数仍为 $R_2$，透射系数仍为 $T_2$. 现在的关键是把这些结果组合起来，解决从左方射入整个势 $V$ 的问题从而求出反射系数 $R$ 和透射系数 $T$. 在 I 区中的波是从左方射入和从右方射入 $V_A$ 时的解的'叠加'，所以可以写成

$$\text{I}:\quad u_p(x) \xrightarrow[x\to\infty]{} C_1\{\exp[ik(x+\alpha)] + \left(R_1 + \frac{C_2}{C_1}T_2\right) \times \exp[-ik(x+\alpha)]\}. \qquad (2.4.51\,\text{a})$$

其中 $C_1$ 和 $C_2$ 分别为从左方和右方射入时的解的振幅，$\alpha$ 是适当选择的相位常数[1]. 与此相对，II 区的波为

$$\begin{aligned}\text{II}:\ u_p(x) &= C_1\left\{\left(T_1 + \frac{C_2}{C_1}R_2\right)\exp\left[i\bar{k}\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]\right.\\ &\qquad \left.+\frac{C_2}{C_1}\exp\left[-i\bar{k}\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]\right\}\\ &= C_1\left(T_1+\frac{C_2}{C_1}R_2\right)\exp(i\bar{k}a)\left\{\exp\left[i\bar{k}\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]\right.\\ &\qquad +\frac{C_2}{C_1}\left(T_1+\frac{C_2}{C_1}R_2\right)^{-1}\\ &\qquad \left.\times\exp(-2i\bar{k}a)\exp\left[-i\bar{k}\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]\right\}. \qquad (2.4.51\text{b})\end{aligned}$$

为了把第二项看成是从左方射入 $V_B$ 时的解，必须要求

1) 不论相位常数如何选择，定理 (2.3.38)—(2.4.41) 形式不变.

$$R_2 = \frac{C_2}{C_1}\left(T_1 + \frac{C_2}{C_1}R_2\right)^{-1}\exp(-2i\bar{k}a). \qquad (2.4.52)$$

在该条件下，与 (2.4.51b) 式第二项相对应，III 区中的波为

$$\text{III}:\ u_p(x) \xrightarrow[x\to\infty]{} C_1\left(T_1 + \frac{C_2}{C_1}R_2\right)\exp(i\bar{k}a)T_2\exp[ik(x-\alpha)], \qquad (2.4.51c)$$

只存在着向右的行波。因此可以满足从左方射入整个势 $V$ 时的边界条件：

$$\left.\begin{aligned}&\text{I}:\ u_p(x) \xrightarrow[x\to-\infty]{} C_1\{\exp[ik(x+\alpha)] + R\exp[-ik(x+\alpha)]\}\\ &\text{III}:\ u_p(x) \xrightarrow[x\to\infty]{} C_1 T\exp[ik(x-\alpha)]\end{aligned}\right\}. \qquad (2.4.53)^{1)}$$

把 (2.4.51a,c) 与 (2.4.53) 式比较，即可得到

$$T = \left(T_1 + \frac{C_2}{C_1}R_2\right)T_2\exp(i\bar{k}a),\ R = R_1 + \frac{C_2}{C_1}T_2. \qquad (2.4.54)$$

(2.4.52) 式是确定 $(C_2/C_1)$ 的方程，把解得的 $(C_2/C_1)$ 代入 (2.4.54)式，则有

$$T = \frac{T_1T_2\exp(i\bar{k}a)}{1 - R_2^2\exp(2i\bar{k}a)}, \qquad (2.4.55a)$$

$$R = \frac{R_1 + R_2(T_1T_2 - R_1R_2)\exp(2i\bar{k}a)}{1 - R_2^2\exp(2i\bar{k}a)}. \qquad (2.4.55b)$$

这就是所要求的解[2)]。我们把它用于矩形势 (图 2.8 (a)) 来看一看，其时 $V_A$ 是图 2.7 (b) 中的阶梯势，所以 $P_0 = T_1T_2 = 4k\bar{k}/(k+\bar{k})^2$，$R_2 = -R_1 = \sqrt{1-P_0}$，而(2.4.55)式可直接给出(2.4.29)式。

我们再回到一般情况。假如势 $V_A$ 的透射概率为 $P_A$，则由 (2.3.38) 式可知 $P_A^2 = |T_1|^2|T_2|^2$、$|R_2|^2 = 1 - P_A$，于是总透射

1) 表面上(2.4.53)式和(2.3.31)式入射波相位选择的方式不同。在 (2.4.53) 式中假设 $C_1 = C\exp(-ik\alpha)$ 则会得到 (2.3.31) 式，但那时 (2.4.53) 式中的 $R\exp(-2ik\alpha)$ 必须看成是(2.3.31)式中的 $R$。对 $T$ 来说情况亦然。

2) 不难证明守恒定律 $|R|^2 + |T|^2 = 1$，为此可利用一般关系式(2.3.41)。

概率 $P^{(t)}=|T|^2$ 为

$$P^{(t)}=[1+4P_A^{-2}(1-P_A)\sin^2(\bar{k}a+\arg R_2)]^{-1}. \quad (2.4.56)$$

因此当能量 $E_p$ 满足

$$\sin(\bar{k}a+\arg R_2)=0 \quad (2.4.57)$$

的值为 $E_n$ 时，在该 $E_n$ 的附近，的确会出现透射共振。

若势垒非常高，则从右方向 $V_A$ 入射就将与刚性壁的碰撞相似，所以 $R_2$ 接近于$-1$，$\arg R_2$ 可忽略不计（参照（2.4.7）式）. 这时，(2.4.57) 式与矩形势的表达式(2.4.47)一致，在共振峰附近，$P^{(t)}$ 用共振公式 (2.4.48) 来表示. 不过，(2.4.49) 式中的 $P_0$ 必须换成 $P_A$. 倘若势的峰较高，$P_A$ 就相当小，会出现非常尖的共振峰. 这意味着亚稳态的寿命相当长. 在经典理论中，II 区中的粒子不会向外逸出. 也就是说，正是量子力学的隧道效应，才使经典理论中无限长的滞留时间减到了有限值. 另一方面，在矩形势的情况下量子力学的反射效应却把经典理论中极为短暂的滞留时间(仅指通过时间)拖得相当长. 表面上相同的共振现象，其内含竟如此不同.

亚稳态虽可看成是共振散射的中间过程，但也能象束缚态那样，就单一的能量本征值问题（本征值为 $E_v$，本征函数为 $u_v$）公式化. 为了反映物理状态，此时亚稳态的边界条件必须是

$$u_v(x)\xrightarrow[|x|\to\infty]{}(\text{常数})\exp[ik|x|]. \quad (2.4.58)$$

它所代表的事实是，随着亚稳态的破坏，粒子被送到左右无限远处. 在该边界条件下，哈密顿算符 $\hat{H}=-(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2)+V(x)$ 丧失了厄米性，而本征值 $E_v$ 则成为复数. (望读者参照 62 页脚注对此加以证明.)假如在 (2.4.51) 式中，取 $C_1=0$，就恰好可以实现这一边界条件. 但此时条件 (2.4.52) 则变为

$$R_2^2\exp(2i\bar{k}a)=1, \quad (2.4.59)$$

这正是确定本征值 $E_v$ 的方程! 一般来说，(2.4.59) 式具有复数根. 当势垒相当高，而 $\arg R_2$ 可以忽略不计时，近似求解(2.4.59)式，即能得出

$$E_\nu \simeq \frac{\hbar^2\pi^2(\nu+1)^2}{2ma^2} - V_0 - i\frac{\hbar P_A}{\bar{\tau}_\nu}. \qquad (2.4.60)^{1)}$$

其中 $\bar{\tau}_\nu = (2a/\bar{v}_\nu) = [2a^2m/\hbar\pi(\nu+1)]$. 另外，$\nu$ 是使 $\mathrm{Re}E_\nu \geqslant 0$ 的正整数. 把 (2.4.60) 式与刚性壁所产生的束缚态能级 (2.4.41) 式相比较，其意义深远. 式中 $-V_0$ 为能量原点不同所形成的差，而虚部则密切关联着亚稳态所具有的有限寿命. 若把 (2.4.60) 式代入能量本征态的时间因子 $\exp(-iE_\nu t/\hbar)$ 之中，则

$$|\exp(-iE_\nu t/\hbar)| = \exp[-(P_A/\bar{\tau}_\nu)t],$$

所以该状态显然只有在 $(\Delta t)_\nu \sim (\bar{\tau}_\nu/P_A)$ 的范围内才是有效的. 这恰是 (2.4.50) 式所推导的结果.

——为使讨论简化，设 II 区为矩形，而让谷为一般形状，若能区别左行波和右行波，并能定义反射、透射系数，则结论不会改变. 当谷部包含波数甚多时，该状况显而易见. 那时可应用经典近似 (WKB 法)，其讨论方式与矩形势大体相同. 此处无暇涉及经典近似，故只给出结论，则矩形势中的 $2\bar{k}a$ 可以用 $\hbar^{-1}\oint\sqrt{2m(E_\nu - V(x))}dx$ 来代替 (在往复于内部转折点之间的轨道上进行积分). 因此，确定共振级的公式与经典量子论中的量子条件形式相同.

### e) 谐振子 I

最后我们讨论谐振子问题. 质量为 $m$，角频率为 $\omega$ 的谐振子，其哈密顿算符是

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q^2. \qquad (2.4.61)$$

$q$ 表示到力心的距离，$p$ 表示 $q$ 的正则共轭动量. 随着远离力心，其势会无限增大，因而只有束缚态存在. 之所以要把谐振子问题放在后面讨论，就是由于这种特殊性造成的. 本来，量子论是从谐振子能量的量子性起步的，因此，波动力学从发端之始就处理这个问题，并作为其'结果'提出普朗克假说，似乎应当认为波动力学正确地承袭了经典量子论的成果. 当 $q$ 表示现实空间中的距离时，谐

1) 在 $\mathrm{Re}\,E_\nu$ 中尚可附加一个与 $\arg R_2$ 成比例的微量修正项，给出共振能级的偏移. 但它却与寿命无直接关系，故略去.

振子势只是近似地表现了稳定平衡点附近的微小振动[1]，决不能把这种形式原封不动地推广到无限远处。此外，在哈密顿算符为(2.4.61)式的情况下，能量原点位于势底，所以即使处于束缚态，能量也为正值。这一点与刚性壁所包围的范围内的束缚态问题情况相同（见(2.4.41)式）。

与哈密顿算符(2.4.61)相对应的定态薛定谔方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_v(q)}{dq^2}+\frac{1}{2}m\omega^2q^2u_v(q)=E_vu_v(q). \qquad (2.4.62)$$

与在无穷远处势成为零的情况(2.3.29)不同，当 $|q|\to\infty$ 时，(2.4.62)式的渐近形为

$$\frac{d^2u_v}{dq^2}-\left(\frac{m\omega}{\hbar}q\right)^2u_v=0,$$

所以 $u_v$ 应渐次趋近于 $q^n\exp[\pm(m\omega/2\hbar)q^2]$（$n$ 为常数）。显然，重号之中只有负号才能满足束缚态边界条件。因此我们假设

$$u_v(q)=C_vH_v(\xi)\exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2\right]. \qquad (2.4.63)$$

其中 $\xi=(m\omega/\hbar)^{1/2}q$ 为无量纲变量。由渐近式可以预料，$H_v(\xi)$为多项式。把(2.4.63)式代入(2.4.62)式，并设

$$\varepsilon_v=\frac{2E_v}{\hbar\omega}, \qquad (2.4.64)$$

再求出 $H_v(\xi)$ 的方程，则可得到

$$\frac{d^2H_v}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH_v}{d\xi}+(\varepsilon_v-1)H_v=0. \qquad (2.4.65)$$

可以确定出 $\varepsilon_v$（即 $E_v$），以便解此方程，而使 $H_v(\xi)$ 为多项式。因 $\xi=0$ 并非方程的奇点，所以在 $\xi=0$ 的周围，解是正则的，能够表示成 $\xi$ 的幂级数。在此我们联想一下空间反射的不变性。因谐振子势是 $q$ 的偶函数，故能量本征函数 $u_v$ 应具有一定宇称。

---

1）当势 $V(x)$ 有稳定平衡点 $x_0$ 时，$V'(x_0)=0$，$V''(x_0)>0$。因此，对 $x_0$ 附近的微小振动来说可近似地写成 $V(x)\simeq V(x_0)+(1/2)V''(x_0)(x-x_0)^2$。所以，假设 $V''(x_0)=m\omega^2$，$(x-x_0)=q$，并将 $H-V(x_0)$ 写作 $H$，则哈密顿算符 $H=(p^2/2m)+V(x)$ 就会变成(2.4.61)式。

根据 (2.4.63) 式，函数 $H_\nu(\xi)$ 的奇偶性必然会反映出宇称的正负，这样一来，显然可以取

$$\text{正宇称} \quad + \quad H_\nu(\xi) = a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \cdots$$

$$\text{负宇称} \quad - \quad H_\nu(\xi) = a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \cdots$$

把这个级数代入 (2.4.65) 式的左边，并令 $\xi$ 的各级系数均为零，则可得出同时适用于正负宇称的递推公式

$$(j+2)(j+1)a_{j+2} = (2j+1-\varepsilon_\nu)a_j. \qquad (2.4.66)$$

因此，若 $a_0$ 已知，则可依次求得 $a_2$、$a_4$、$\cdots$，若 $a_1$ 已知，则可依次求得 $a_3$、$a_5$、$\cdots$. 解中所包含的两个任意常数是 $a_0$ 和 $a_1$. 这一点理所当然，因 (2.4.65) 式是二阶常微分方程. 当允许 $\varepsilon_\nu$ 取任意值时，$H_\nu(\xi)$ 只能是无穷级数，而绝非多项式. 下面我们先求一下该无穷级数的渐近式，当 $j \to \infty$ 时上述递推公式给出 $(a_{j+2}/a_j) \to (2/j)$，这说明对于 $|\xi| \to \infty$ 来说，$H_\nu(\xi)$ 的渐近形为 $\xi^n \exp[+\xi^2]$ ($n$ 是常数)[1]. 把此渐近式代入 (2.4.63) 式，可立刻看出这样的解不能满足束缚态边界条件. 为使 $u_\nu(q)$ 满足束缚态边界条件，$H_\nu(\xi)$ 无论如何都必须是多项式. 若对大于某一特定正整数 $\nu$ 的所有序号 $j$ 来说，系数 $a_j$ 为零，即 $a_j = 0$ ($j \geqslant \nu+2$)，则 $H_\nu(\xi)$ 就会成为 $\nu$ 次多项式. 根据递推公式 (2.4.66)，这时 $\varepsilon_\nu$ (因而 $E_\nu$) 只能取特定值.

$$\varepsilon_\nu = 2\nu + 1 \text{ 或 } E_\nu = \hbar\omega\left(\nu + \frac{1}{2}\right). \qquad (2.4.67)$$

其中 $\nu = 0, 1, 2, \cdots$. 这正是谐振子能量的普朗克假说. 这样一来，波动力学作为一个'结果'给出普朗克公式.

——在原来的普朗克假说中，并无零点能 $E_0 = \hbar\omega/2$. 如在刚性壁所产生的束缚态中所描述过的那样，零点能的存在与粒子的波动性(同样也与以波动性为基础的不确定关系 $\Delta q \Delta p \sim \hbar$) 密切相关. 假设 $E_0 = 0$，则粒子应处于 $p = 0$ 及 $q = 0$ 的运动状态，就会与波动性或不确定关系相抵触. 关于这一点，后面还将进一步讨论.

与(2.4.67)式相对应，(2.4.65)式变为

---

1) 将 $\xi^n \exp[\xi^2]$ 展成幂级数，取彼此相邻的系数之比进行比较，即可证明.

$$\frac{d_2H_\nu}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_\nu}{d\xi} - 2\nu H_\nu = 0, \qquad (2.4.68)$$

这就是众所周知的厄米微分方程. 利用 (2.4.66) 式及 (2.4.67) 式可以求出其解,但有不少人习惯上使用下式所定义的厄米多项式:

$$H_\nu(\xi) = (-1)^\nu \exp(\xi^2)\frac{d^\nu}{d\xi^\nu}\exp(-\xi^2). \qquad (2.4.69)$$

显然, (2.4.69) 式的右边是 $\nu$ 次多项式. 若仔细进行右边的微商,则可得到系数 $a_i$ 的具体表达式,不言而喻,它是递推公式 (2.4.66) 的解. 在 (2.4.69) 式中,最高次 $\xi^\nu$ 的系数是 $2^\nu$,这样就可以确定出 $a_0$ 或 $a_1$. 详细的计算请读者来作. 对 $\nu = 0,1,2,3$ 来说,厄米多项式的具体形式如下所示,即

$$H_0(\xi) = 1,\ H_1(\xi) = 2\xi,\ H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,\ H_3(\xi) = 8\xi^3 - 4\xi.$$

最后要作的是用归一化条件来决定常数 $C_\nu$. 为此可以使用公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_\nu(\xi)H_{\nu'}(\xi)\exp(-\xi^2)d\xi$$

$$= 2^\nu\nu|\sqrt{\pi}\ \delta_{\nu\nu'}. \qquad (2.4.70)^{1)}$$

由于 $\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2}q$, 故可直接得到

$$|C_\nu| = \sqrt{\frac{1}{2^\nu\nu!}}\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}. \qquad (2.4.71)$$

这样一来,把 (2.4.69) 式和 (2.4.71) 式代入 (2.4.63) 式,就可求出谐振子能量本征函数. 此外由 (2.7.40) 式可知,函数系具有正交

---

1) 证明: 当 $\nu \neq \nu'$ 时, 取 $\nu > \nu'$ 而不会丧失普遍性 (若 $\nu < \nu'$, 可交换 $\nu$ 和 $\nu'$ 的位置). 这时, 利用 (2.4.69) 式对 $H_\nu(\xi)$ 反复作 $\mu$ 次分部积分, 则 (2.4.70) 式的左边 (其中 $\nu > \mu$) 就成了

$$(-1)^{\mu+\nu}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^\mu H_{\nu'}(\xi)}{d\xi^\mu}\ \frac{d^{\nu-\mu}}{d\xi^{\nu-\mu}}\ \exp\ (-\xi^2)d\xi.$$

倘若 $\mu > \nu'$, 则 $H_{\nu'}$ 是 $\nu'$ 次多项式,故 $(d^\mu H_{\nu'}/d\xi^\mu) = 0$,积分值也必然为零. 当 $\nu = \nu'$ 时,令 $\mu = \nu$, 则 $(d^\nu H_\nu/d\xi^\nu) = 2^\nu\nu!$, 所以积分等于 $2^\nu\nu!\sqrt{\pi}$, 其原因在于,$\xi^\nu$ 的系数是 $2^\nu$,而且

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-\xi^2)d\xi = \sqrt{\pi}.$$

证毕.

性。因此 $\{u_v, u_{v'}\} = \delta_{vv'}$。

基态本征函数是

$$u_0(q) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2\right], \tag{2.4.72a}$$

由 $u_0$ 所给出的存在概率密度 $|u_0(q)|^2$ 是具有标准偏差 $\Delta q = (\hbar/2m\omega)^{1/2}$ 的高斯分布。显然，它描述了以原点为中心，扩展宽度约为 $\Delta q$ 的零点振动，另一方面，以动量为自变量的态函数为

$$\begin{aligned} a_0(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} u_0(q) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} pq\right] dq \\ &= (\hbar\pi m\omega)^{-1/4} \exp[-(p^2/2\hbar m\omega)]. \end{aligned} \tag{2.4.72b}$$

其概率分布 $|a_0(p)|^2$ 依然为高斯型，它以 $p = 0$ 为中心，以标准偏差 $\Delta p = (\hbar m\omega/2)^{1/2}$ 左右对称地扩展开去。而作为衡量位置和动量的不确定度的标准偏差 $\Delta q$ 和 $\Delta p$ 则满足不确定关系

$$\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \tag{2.4.73}$$

这个关系式我们还要在第三章中详细讨论。假若位置和动量具有某种程度的不确定度，基态能量就不会为零。对应于 $\Delta q$ 和 $\Delta p$，至少应有 $(1/2m)(\Delta p)^2 + (1/2)m\omega^2(\Delta q)^2$ 这样的能量值，如果代入 $\Delta q = (\hbar/2m\omega)^{1/2}$ 及 $\Delta p = (\hbar m\omega/2)^{1/2}$，那么它恰好等于 (2.4.67) 式给出的零点能 $E_0 = \hbar\omega/2$。

因谐振子本身只是近似地表示稳定平衡点附近的微小振动，因而可以预料，谐振子能量本征函数往往被用来近似地处理强的束缚态。另一方面，如第一章所述，电磁波等价于无数个谐振子的集合，而电磁波或辐射场的量子论则是通过对谐振子进行量子力学的处理才建立起来的。那时，(2.4.67) 式中的量子数 $\nu$ 表示光量子的个数，辐射场能量的量子性亦为光的粒子性提供了直接依据。脱离谐振子来讨论场的量子论是绝对不可能的（见第十章），在第三章我们还将再次研究谐振子问题。

# 第三章　量子力学的形成

第二章确立了波动力学的运动规律，在将其用于定态问题的同时，也研究了波动力学的具体内容，下面我们把这些经验归纳起来，进而构成量子力学理论体系。

## §3.1　动量表象

波动力学是我们所选择的通向量子力学的先导。波动力学中起主要作用的是作为时空点 $(\boldsymbol{r}, t)$ 的函数而表达出来的波函数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$。由定态的讨论可知，这种表现手法是借助于波动这种直观的图像才得以广泛应用的。但是，作为一种理论体系，仅用时空表象的波函数既感不便又不完全者不乏其例。就是在波动力学中确立第三定律时我们也不得不引入波函数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 的傅里叶变换 $A(\boldsymbol{p}, t)$。第三定律规定，由 $|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$ 给出存在概率密度，并通过 $|A(\boldsymbol{p}, t)|^2$ 确定动量概率分布。也就是说，作为出发点，波动力学既需要时空表象的波函数，也需要其傅里叶变换。当然，$\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 和 $A(\boldsymbol{p}, t)$ 并非无关，而是由傅里叶变换(2.2.6)及(2.2.7)相互连接在一起的。给出 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$，就可确定 $A(\boldsymbol{p}, t)$，反之，给出 $A(\boldsymbol{p}, t)$，亦能确定 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$。虽说 $A(\boldsymbol{p}, t)$ 通过 $|A(\boldsymbol{p}, t)|^2$ 给出动量的情况，也只是在 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 中本来就包含的内容。如 §2.2 所述，$\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 和 $A(\boldsymbol{p}, t)$ 在数学上是完全等价的，必须看作是同一事物的不同表示而已。到底用哪一种表示，要视方便与否来定，主要还是取决于物理上的需要。讨论粒子的位置时，用 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 比较方便；而要了解动量，则用 $A(\boldsymbol{p}, t)$ 比较合适。在这个意义上，$A(\boldsymbol{p}, t)$ 叫作**动量表象**的波函数或态函数。有时也简称 $\boldsymbol{p}$ 表象。与此相应，$\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 往往叫做坐标表象或简称 $\boldsymbol{x}$ 表象或 $q$

表象。这样，我们就可以用显而易见的表象来描述所着眼的力学量，因此，我们面临的问题在于如何构成一种表象以易于观察位置坐标及动量以外的力学量。另外，倘若对应于各种力学量可能会出现各种各样的表象，那么，我们就深感有必要使构成的理论体系不依赖于表象的具体选择方式。我们准备首先研究动量表象和坐标表象的关系，同时逐渐解决这些问题。根据这种情况，我们将跨越波动力学这个具有历史意义的直观的理论阶段，从而构成量子力学这一更加广泛的理论体系。

### a） 概率解释规范化和力学量规范化

首先，我们把波动力学第三定律改写成一般形式。为此，需重新研究用 $\phi(\boldsymbol{r}, t)$ 来表示 $A(\boldsymbol{p}, t)$ 的公式(2.2.7)。若采用函数内积的符号，则(2.2.7)式可写成

$$A(\boldsymbol{p}', t) = (\phi_{\boldsymbol{p}'}, \phi);\ \ \phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\, \boldsymbol{p}' \cdot \boldsymbol{r}\right). \tag{3.1.1}$$

同样，$\phi(\boldsymbol{r}', t)$ 本身也可写成

$$\phi(\boldsymbol{r}', t) = (\chi_{\boldsymbol{r}'}, \phi);\ \ \chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r}) = \delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'). \tag{3,1.2}$$

因此，第三定律规定，$|(\chi_{\boldsymbol{r}'}, \phi)|^2$ 给出存在概率密度，而 $|(\phi_{\boldsymbol{p}'}, \phi)|^2$ 则给出动量概率分布。显然该形式暗示出一种方式，使确立概率解释的第三定律一般化。也就是说，依据这种暗示，关于概率解释的新定律将采用如下规定：

“在状态 $\phi$ 中找到状态 $\varphi$ 的概率与 $|(\varphi, \phi)|^2$ 成正比.”

此处状态 $\phi$ 或状态 $\varphi$ 是一种简称，确切地说，它们表明力学系处于函数 $\phi$ 或函数 $\varphi$ 所描述的状态之中（此后将每每采用这种简称）。因为这个定律对 $\varphi = \chi_{\boldsymbol{r}'}$ 给出了存在概率密度 $|\phi(\boldsymbol{r}', t)|^2$，而对 $\phi = \phi_{\boldsymbol{p}'}$ 则给出了动量概率分布 $|A(\boldsymbol{p}', t)|^2$，所以在内含第三定律的基础上又有所扩充。在新定律中，当然已无必要同时确定位置和动量概率的规定，因此若认为新定律是确定态函数的概率解释，则可以说，其普遍性大体上应当满足。但是，第三定律以

不脱离具体表象——坐标表象和动量表象——的方式而体现出位置坐标和动量，其所取之值的有关情况业已从表面上消失净尽.为了以适合新定律的形式重新描述其有关信息，就必须引入新的规定——采用一般形式——而从其它途径给出 $\chi_{r'}$ 和 $\phi_{p'}$ 的物理解释。换言之，有必要对力学量所取的值和态函数之间的关系作出普遍性的规定。目前，我们要把第三定律分成态函数的概率解释规定和力学量规定这样两个部分，并把二者一般化。

在讨论力学量规定的问题之前，我们把上述新定律变成不依赖于具体表象的形式。根据(2.2.7)式，设 $\varphi(\boldsymbol{r})$ 的傅里叶变换为 $\tilde{\varphi}(\boldsymbol{p})$，即

$$\tilde{\varphi}(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int \varphi(\boldsymbol{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right) d^3\boldsymbol{r}. \qquad (3.1.3)$$

若统一采用该符号，将 $\phi(\boldsymbol{r})$ 的傅里叶变换 $A(\boldsymbol{p})$ 写成 $\tilde{\phi}(\boldsymbol{p})$，则根据傅里叶变换的性质，可得

$$(\varphi, \phi) = \int \varphi^*(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r}) d^3\boldsymbol{r}$$

$$= \int \tilde{\varphi}^*(\boldsymbol{p})\tilde{\phi}(\boldsymbol{p}) d^3\boldsymbol{p} = (\tilde{\varphi}, \tilde{\phi}). \qquad (3.1.4)$$

此关系式表明，用 $x$ 表象所构成的内积 $(\varphi, \phi)$ 等于用 $p$ 表象所构成的内积 $(\tilde{\varphi}, \tilde{\phi})$. 因此，概率幅 $(\varphi, \phi)$——从而概率 $|(\varphi, \phi)|^2$——就与表象的选择无关。这一证明只限于动量表象和坐标表象，而在构成易于观察其它力学量的表象时，尚须设法使作为态函数内积的概率幅保持不变。

有关概率解释的新定律内含着**跃迁概率**的定义。现在我们假设力学系在时刻 $t = 0$ 处于状态 $\varphi_I(\boldsymbol{r})$。若满足该初始条件的薛定谔方程的解是 $\phi_I(\boldsymbol{r}, t)$ (即 $\phi_I(\boldsymbol{r}, 0) = \varphi_I(\boldsymbol{r})$)，那么在以后的时刻 $(t > 0)$ 力学系处于状态 $\varphi_F(\boldsymbol{r})$ 的概率——即产生跃迁 $\mathrm{I} \to \mathrm{F}$ 的概率，按上述新定律，就是

$$W_{FI}(t) = \left| \int \varphi_F^*(\boldsymbol{r})\phi_I(\boldsymbol{r}, t) d^3\boldsymbol{r} \right|^2. \qquad (3.1.5)$$

这个跃迁概率在量子力学中起着重要的作用。

现在我们来进一步探讨力学量规定的问题。截止目前，对力学量所取的值和态函数之间的关系给予明确解释的只限于动量和能量。关于动量的情况业已明了。作为波动力学的出发点而建立的第一定律，规定动量为 $\boldsymbol{p}'$ 的状态是用平面波 $\phi_{\boldsymbol{p}'}$ 来描述的。与状态的这种定义相配合虽已引入动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}} = (\hbar/i)(\partial/\partial \boldsymbol{r})$（参看从(2.2.9)式到(2.2.13)式的来龙去脉及(2.2.17)式前后的讨论），但它却是把平面波 $\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})$ 定义为本征函数的算符，即满足下式的算符，

$$\hat{\boldsymbol{p}}\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{p}'\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r}). \tag{3.1.6}$$

而对能量来说顺序则恰好相反。最初从经典理论所注目的哈密顿算符开始，通过把其中的动量换为算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 而构成了量子力学的哈密顿算符 $\hat{H}$，再将求解本征值问题 $\hat{H}u_\nu = E_\nu u_\nu$ 而得到的本征值 $E_\nu$ 作为能量所取的值，规定本征函数 $u_\nu$ 就是能量为 $E_\nu$ 的状态。但是，只限于有关本征值方程的物理作用，即有关本征值和本征函数的物理解释，则能量也好，动量也好，给出的公式具有完全相同的形式。而位置坐标又如何呢？在哈密顿算符 (2.2.19) 式中势 $V(\boldsymbol{r})$ 是位置坐标 $\boldsymbol{r}$ 的函数，但我们却把它当作对波函数进行乘法运算的算符来处理。因此，位置坐标算符 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 业已默许被作为对任意波函数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 乘以坐标变量 $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ 的算符 $\hat{\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{r}\ \psi(\boldsymbol{r}, t)$ 来定义。于是，本征值问题

$$\hat{\boldsymbol{r}}\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{r}'\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r}) \tag{3.1.7}$$

的解正是在 (3.1.2) 式中出现的函数 $\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r}) = \delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$。由 $\boldsymbol{r}\delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = \boldsymbol{r}'\delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$ 来看，这一点是明确的。如果对位置坐标算符的本征值问题的解也给出与动量和能量的情况同样的物理解释的话，则 $\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})$ 就应该描述粒子在点 $\boldsymbol{r}'$ 的状态。$\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 的函数形式恰好与这种说法相符合。

若赋予 $\chi_{\boldsymbol{r}'}$ 和 $\phi_{\boldsymbol{p}'}$ 这样的含义，则上述有关概率解释的新定义就会立即给出“位于状态 $\psi$ 的粒子在点 $\boldsymbol{r}'$ 上被发现”的概率为 $|(\chi_{\boldsymbol{r}'}, \psi)|^2$，而“位于状态 $\psi$ 的粒子具有动量 $\boldsymbol{p}'$”的概率为 $|(\phi_{\boldsymbol{p}'}, \psi)|^2$。这的确是第三定律的再现。

——另外，概率幅 $(\chi_{r'}, \psi) = \psi(r', t)$ 及 $(\phi_{p'}, \psi) = A(p', t)$ 分别是把 $\psi$ 按函数系 $\{\chi_{r'}\}$ 及 $\{\phi_{p'}\}$ 展开时的系数. 即

$$\psi(r, t) = \int \chi_{r'}(r)(\chi_{r'}, \psi)d^3r' \tag{3.1.8a}$$

$$= \int \phi_{p'}(r)(\phi_{p'}, \psi)d^3p'. \tag{3.1.8b}$$

这是函数系 $\{\chi_{r'}\}$ 及 $\{\phi_{p'}\}$ 作为完备正交归一系的直接结果，该系所具有的性质是

$$(\chi_{r'}, \chi_{r''}) = \delta^3(r' - r''), \quad \int \chi_{r'}(r)\chi^*_{r''}(r'')d^3r' = \delta^3(r - r''), \tag{3.1.9a}$$

$$(\phi_{p'}, \phi_{p''}) = \delta^3(p' - p''), \quad \int \phi_{p'}(r)\phi^*_{p''}(r'')d^3p' = \delta^3(r - r''). \tag{3.1.9b}$$

对表示完备性的第二式每一个都乘上 $\psi(r'', t)$，再就 $r''$ 进行积分，即可得出(3.1.8)式. (3.1.9)式中的第一式每一个都表示正交性和 $\delta$ 函数式的归一化条件[1]. 而(3.1.8b)式正是(2.2.6)式.

至此可以说，力学量定义的一般形式已见端倪. 也就是说，量子力学的力学量应该表现为作用于波函数的算符，且必须认为该本征值问题是有解的. 于是，我们就可以采用如下的‘力学量规定’.

“力学量所取的值仅限于表示该力学量算符的本征值，力学量取其中某一个值的状态是用属于该本征值的本征函数来表示的”. 这个规定对已讨论过的动量、能量和位置坐标作了一般化的表示. 但是，还有表示其它力学量的算符的问题未曾解决. 在大多数情况下，应当求出对应于经典的力学量的量子力学的力学量，而经典理论所注目的力学量则是作为正则力学变量的位置坐标及动量的函数. 在 §2.2 中已从经典的哈密顿算符出发构成了量子力学的哈密顿算符，进而如法炮制，把 $p$ 用算符 $\hat{p} = (\hbar/i)(\partial/\partial r)$ 代替，由经典的力学量 $F(r, p)$ 就可以得出算符 $\hat{F} = F(r, (\hbar/i)(\partial/$

1) 可以参考

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(p' - p'')\cdot r\right]d^3r = \delta^3(p' - p'').$$

$\partial r$))，并将其定义为与 $F$ 相对应的量子力学的力学量算符[1]。例如，轨道角动量算符是

$$\hat{L} = r \times \hat{p} = -i\hbar(y(\partial/\partial z) - z(\partial/\partial y),$$

$$z(\partial/\partial x) - x(\partial/\partial z), x(\partial/\partial y) - y(\partial/\partial x)).$$

但是，对于像自旋角动量那样在经典理论中无直接对应量的量子力学的力学量来说，这个方法不复适用。随着量子力学的发展，各种力学量的详细情况将会逐渐明了。

### b) 动量表象中的力学量算符

这样一来，虽然得到了力学量的一般定义，但是从物理学的立场来看，在对力学量算符应当赋予怎样的数学性质这个问题上，尚未给出相当明确的答复。这个问题我们将放到下一节再谈，在此先稍微深入地探讨一下坐标表象和动量表象的关系。

截止目前，力学量全部表示成作用于坐标表象的波函数上的算符。只要认为坐标表象和动量表象是等价的，就必须证明用动量表象确定的力学量与坐标表象的力学量作用完全相同。而且，有必要以与表象的具体选择无关的方式定义力学量。首先我们把 $p$ 的本征值方程（3.1.6）过渡到动量表象之中。对（3.1.6）乘以 $(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(-ip\cdot r/\hbar)$ 再就 $r$ 进行积分，即可得出

$$p\tilde{\phi}_{p'}(p) = p'\tilde{\phi}_{p'}(p). \qquad (3.1.10a)$$

其中假设

$$\tilde{\phi}_{p'}(p) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int \phi_{p'}(r)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}p\cdot r\right)d^3r$$

$$= \delta^3(p - p'). \qquad (3.1.10b)$$

这是动量表象中属于动量算符本征值 $p'$ 的本征函数。这时，如(3.1.10a)式所示，动量算符成了以动量变量 $p$ 相乘的算符。习惯

1) $\hat{F}$ 是作为算符 $\hat{p}$ 的函数定义的，这一点可以理解成把 $F(r, p)$ 对 $p$ 作泰勒(Taylor) 展开，再用 $(\hbar/i)(\partial/\partial r)$ 代替 $p$ 即可。具体作法见§ 3.2 b)。

上往往称普通的数为 **c 数**[1]. 也就是说,在动量表象中动量算符成了 c 数算符 $\boldsymbol{p}$(意为乘以 c 数 $\boldsymbol{p}$ 的算符). 同样,由 $\boldsymbol{r}$ 的本征值方程(3.1.7)可得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p})=\boldsymbol{r}'\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p}), \tag{3.1.11a}$$

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p})&=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{r}\\&=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}'\right).\end{aligned} \tag{3.1.11b}$$

这说明动量表象中的位置坐标成了微分算符 $\hat{\boldsymbol{r}}=i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p})$, 而属于本征值 $\boldsymbol{r}'$ 的本征函数则成了(3.1.11b).

本征函数虽然中 $\chi_{\boldsymbol{r}'}$, $\phi_{\boldsymbol{p}'}$ 过渡到了 $\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}$, $\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}$, 但这只不过是表象的变换,所以,各自的物理解释并无变化,事实上,本征值方程(3.1.10a) 及 (3.1.11a) 保留了与坐标表象完全相同的形式,从而说明 $\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}$ 代表粒子位于点 $\boldsymbol{r}'$ 的状态, $\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}$ 表示粒子动量为 $\boldsymbol{p}'$ 的状态. 因此,存在概率密度必然是 $|(\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'},\tilde{\psi})|^2$, 而动量概率分布则是 $|(\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'},\tilde{\psi})|^2$, 根据(3.1.4)式, $(\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'},\tilde{\psi})=(\chi_{\boldsymbol{r}'},\psi)$, $(\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'},\psi)=(\phi_{\boldsymbol{p}'},\psi)$, 因此,毫无疑问, 它们与坐标表象所给出的完全一致.

——此外,函数系 $\{\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}\}$ 及 $\{\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}\}$ 具有如下性质:

$$(\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'},\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}''})=\delta^3(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}''),\ \int\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p})\tilde{\chi}^*_{\boldsymbol{r}''}(\boldsymbol{p}'')d^3\boldsymbol{r}'=\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}''), \tag{3.1.12a}$$

$$(\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'},\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}''})=\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}''),\ \int\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{p})\tilde{\phi}^*_{\boldsymbol{p}''}(\boldsymbol{p}'')d^3\boldsymbol{p}'=\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}''). \tag{3.1.12b}$$

这正是(3.1.9)式的傅里叶变换. 因此, 作为(3.1.8)式的傅里叶变换,当然会有

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)=\int\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p})(\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'},\tilde{\psi})d^3\boldsymbol{r}' \tag{3.1.13a}$$

---

1) 与此相应, 有时把表示量子力学的力学量的算符称为 $q$ 数,现已不再使用.

$$= \int \tilde{\phi}_{p'}(\boldsymbol{p})(\tilde{\phi}_{p'}, \tilde{\psi}) d^3\boldsymbol{p}'. \qquad (3.1.13b)$$

概率幅 $(\tilde{\chi}_{r'}, \tilde{\psi}) = \psi(\boldsymbol{r}', t)$ 及 $(\tilde{\phi}_{p'}, \tilde{\psi}) = A(\boldsymbol{p}', t)$ 可分别看作是将 $\tilde{\psi}$ 按 $\{\tilde{\chi}_{r'}\}$ 及 $\{\tilde{\phi}_{p'}\}$ 展开时的系数. 而(3.1.13a)式就是(2.2.7)式.

下面，我们来推导在动量表象中表示一般力学量 $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ 的算符. 为此，可以对 $F(\boldsymbol{r}, (\hbar/i)(\partial/\partial \boldsymbol{r}))\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 进行傅里叶变换，并将作用在 $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)$ 上的算符归纳在一起. 具体来作就是

$$\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right) F\left(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right)\psi(\boldsymbol{r}, t) d^3\boldsymbol{r}$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\iint F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}') \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}\right]\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}', t) d^3\boldsymbol{r} d^3\boldsymbol{p}'$$

$$= \int F\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}'\right)\delta^3(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p})\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}', t) d^3\boldsymbol{p}'$$

$$= F\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\right)\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t),$$

所以，即可求出 $\hat{F} = F(i\hbar(\partial/\partial \boldsymbol{p}), \boldsymbol{p})$[1]. 其中利用了关系式 $\boldsymbol{r}\exp(-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar) = i\hbar(\partial/\partial \boldsymbol{p})\exp(-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$. 与哈密顿算符 $H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ 相对应的量子力学的哈密顿算符是 $H(i\hbar(\partial/\partial \boldsymbol{p}), \boldsymbol{p})$，所以，可以得出动量表象的薛定谔方程[2]

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t) = H\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\right)\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t). \qquad (3.1.14)$$

这样一来，动量表象显然在描述量子力学时具有和坐标表象完全对等的地位和能力. 事实上，两种表象的描述，如表 3.1的对照表所示，显现出近乎完美的对称性. 我们可以根据情况，选用任一种表象，作为理论上对物理效果的预言，存在概率密度和动量

---

1) 在此，算符 $F(i\hbar(\partial/\partial \boldsymbol{p}), \boldsymbol{p})$ 是把$F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ 对 $\boldsymbol{r}$ 进行泰勒展开，再把 $\boldsymbol{r}$ 换成 $i\hbar(\partial/\partial \boldsymbol{p})$ 而得到的算符. 详见 §3.2b).

2) 动量表象的哈密顿算符，与其采用微分算符 $H(i\hbar(\partial/\partial \boldsymbol{p}), \boldsymbol{p})\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)$ 的形式，例不如使用积分算符的形式 $\int\langle \boldsymbol{p}|\hat{H}|\boldsymbol{p}'\rangle\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}', t)d^3\boldsymbol{p}'$. 其中

$$\langle \boldsymbol{p}|\hat{H}|\boldsymbol{p}'\rangle = (2\pi\hbar)^{-3}\int \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right) H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}')\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right) d^3\boldsymbol{r}.$$

概率分布之类的量，无论用哪一个表象计算，答案都是相同的。在§2.3和§2.4中定态问题是用坐标表象处理的，不言而喻，该问题用动量表象也能处理。但是，虽然如此，边界条件的表现形式却随表象的不同而有所差异。此处限于篇幅不再涉及动量表象的边界条件，在本讲座第四卷《量子力学》(II) 第十二、第十三章散射理论部分详细说明了有关散射的问题，可以作为参考。

**表 3.1　坐标表象和动量表象**

| | 坐　标　表　象 | 动　量　表　象 |
|---|---|---|
| 波 函 数 | $\psi(r, t)$ | $\tilde{\psi}(p, t)(=A(p, t))$ |
| 位置坐标 | $r$ | $i\hbar \dfrac{\partial}{\partial p}$ |
| 坐标本征函数 | $\chi_{r'}(r) = \delta^3(r - r')$ | $\tilde{\chi}_{r'}(p)=(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp\left(-\dfrac{i}{\hbar}p \cdot r'\right)$ |
| 动　量 | $\dfrac{\hbar}{i} \dfrac{\partial}{\partial r}$ | $p$ |
| 动量本征函数 | $\phi_{p'}(r)=(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp\left(\dfrac{i}{\hbar}p \cdot r\right)$ | $\tilde{\varphi}_{p'}(p) = \delta^3(p - p')$ |
| 力学量 $F(r, p)$ | $F\left(r, \dfrac{\hbar}{i} \dfrac{\partial}{\partial r}\right)$ | $F\left(i\hbar \dfrac{\partial}{\partial p}, p\right)$ |
| 存在概率密度 $\lvert\psi(r', t)\rvert^2$ | $\lvert(\chi_{r'}, \psi)\rvert^2 =$ | $\lvert(\tilde{\chi}_{r'}, \tilde{\psi})\rvert^2$ |
| 动量概率分布 $\lvert A(p', t)\rvert^2$ | $\lvert(\phi_{p'}, \psi)\rvert^2 =$ | $\lvert(\tilde{\varphi}_{p'}, \tilde{\psi})\rvert^2$ |

我们再从数学的角度重新评价一下坐标表象和动量表象。不用说，把位置坐标作为 c 数算符的表象是坐标表象，而把动量作为 c 数算符的表象则是动量表象。换言之，所谓坐标表象是把 $\hat{r}$ 的本征函数系 $\{\chi_{r'}\}$ 或 $\{\tilde{\chi}_{r'}\}$ 选作基本函数系的表象，而所谓动量表象则是把 $\hat{p}$ 的本征函数系 $\{\phi_{p'}\}$ 或 $\{\tilde{\phi}_{p'}\}$ 选作基本函数系的表象。前面曾提出过使力学量易于观察的表象这样一些模棱两可的说明，而现在则能给出明确的定义。所谓使某个力学量易于观察的表象，是把该力学量作为 c 数算符的表象，也就是以该力学量算符的本征函数系为基准系的表象。此外，'使某力学量**对角化**的表象'，这个术语比'使某力学量易于观察的表象'用得更为广泛。

到量子力学采用矩阵形式时，自然而然会清楚'对角化'这个术语的由来。

截止目前，我们已多次把坐标表象变换为动量表象。坐标表象和动量表象之间的变换是以下列变换函数为积分核的傅里叶变换，即

$$(\chi_{\boldsymbol{r}'},\ \phi_{\boldsymbol{p}'}) = (\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'},\ \tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'\right), \tag{3.1.15a}$$

$$(\phi_{\boldsymbol{p}'},\ \chi_{\boldsymbol{r}'}) = (\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'},\ \tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'\right). \tag{3.1.15b}$$

如果把(2.2.6)式和(2.2.7)式重新写出，则有

$$\psi(\boldsymbol{r}',\ t) = \int (\chi_{\boldsymbol{r}'},\ \phi_{\boldsymbol{p}'})\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}',\ t)d^3\boldsymbol{p}', \tag{3.1.16a}$$

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}',\ t) = \int (\phi_{\boldsymbol{p}'},\ \chi_{\boldsymbol{r}'})\psi(\boldsymbol{r}',\ t)d^3\boldsymbol{r}'. \tag{3.1.16b}$$

所以 $(\chi_{\boldsymbol{r}'},\ \phi_{\boldsymbol{p}'})$ 给出从动量表象到坐标表象的变换，而 $(\phi_{\boldsymbol{p}'},\chi_{\boldsymbol{r}'})$ 给出从坐标表象向动量表象的变换[1]。(3.1.16)式在数学上是傅里叶变换公式，在物理上是波动力学第二定律所要求的平面波"叠加"。现在脱离这样的立场，来建立量子力学中与此有关的更为广泛的理论体系。这样一来，就必须把(3.1.16)式在表象确定的框架内确定下来，即确定出从 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的本征值问题导出的方式。(3.1.9)式或(3.1.12)式对此已有所准备。这是因为把(3.1.9b)的第二式乘以 $\chi^*_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}'',t)$ 并对 $\boldsymbol{r}'$ 和 $\boldsymbol{r}''$ 积分，若令 $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}',\ t) = (\phi_{\boldsymbol{p}'},\ \psi)$，则可马上得出(3.1.16a)式。对(3.1.16b)式如法炮制。这种方式即能一般化。例如，当有两个力学量时，使一个力学量对角化的表象和使另一个力学量对角化的表象的变换函数是由各自力学量本征函数的内积给出的。对这种关系推广成一般公式则属于变换理论的范畴，请参看第四章。

---

1）注意，此时有 $(\chi_{\boldsymbol{r}'},\ \phi_{\boldsymbol{p}'})^* = (\phi_{\boldsymbol{p}'},\ \chi_{\boldsymbol{r}'})$。

### c) 量子条件和对易关系

最后，我们来考虑不依赖于表象的力学量的公式．请回过头去看一下表 3.1．在坐标表象中，位置坐标为 c 数 $\boldsymbol{r}$，动量是对于 $\boldsymbol{r}$ 的微分算符 $(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r})$．而在动量表象中，动量是 c 数 $\boldsymbol{p}$，位置坐标是对于 $\boldsymbol{p}$ 的微分算符 $i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p})$．看来，这种严谨的功能变换和各算符的简化形式，暗示存在着极简单的数学关系．事实上，存在着反映 $(\partial x/\partial x)=1$，$(\partial x/\partial y)=0\cdots$这样一些微分算符特性的恒等式

$$\left\{x\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}x\right\}\psi(\boldsymbol{r},t)=-\psi(\boldsymbol{r},t),$$

$$\left\{x\frac{\partial}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial y}x\right\}\psi(\boldsymbol{r},t)=0,$$

……

而且它对任意波函数均成立，因而可得算符关系式

$$x\hat{p}_x-\hat{p}_x x=i\hbar,\quad x\hat{p}_y-\hat{p}_y x=0,\cdots. \tag{3.1.17}$$

不用说，其中 $\hat{p}_x=(\hbar/i)(\partial/\partial x),\cdots$．如果把以上恒等式变换成动量表象，则有

$$\left\{\frac{\partial}{\partial p_x}p_x-p_x\frac{\partial}{\partial p_x}\right\}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)=\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t),$$

$$\left\{\frac{\partial}{\partial p_x}p_y-p_y\frac{\partial}{\partial p_x}\right\}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)=0,$$

……

而且下列算符关系式成立：

$$\hat{x}p_x-p_x\hat{x}=i\hbar,\quad \hat{x}p_y-p_y\hat{x}=0,\cdots \tag{3.1.18}$$

其中 $\hat{x}=i\hbar\,(\partial/\partial p_x),\cdots$．(3.1.17) 式是坐标表象的关系式，(3.1.18) 式是动量表象的关系式，只是各算符的具体形式不同而已，关系式本身的形式完全相同．因此，可以认为，力学量关系式

$$\hat{x}_\alpha\hat{p}_\beta-\hat{p}_\beta\hat{x}_\alpha=i\hbar\delta_{\alpha\beta}\quad(\alpha,\beta=1,2,3) \tag{3.1.19a}$$

本来就与表象的具体选择无关．此外，我们再附加上不言自明的

关系式

$$\left.\begin{aligned}\hat{x}_\alpha\hat{x}_\beta-\hat{x}_\beta\hat{x}_\alpha&=0\\ \hat{p}_\alpha\hat{p}_\beta-\hat{p}_\beta\hat{p}_\alpha&=0\end{aligned}\right\}\quad(\alpha,\beta=1,2,3).\qquad(3.1.19b)$$

我们从具体的坐标表象和动量表象出发，找出了与表象无关的抽象的力学量关系式(3.1.19).现在反其而道行之,首先假设,已经有了(3.1.19)式.即最初就规定‘作为量子力学的力学量,位置坐标 $\boldsymbol{r}$ 和动量 $\boldsymbol{p}$ 必须满足关系式 (3.1.19)’. 假如在下一阶段采用坐标表象的话,则位置坐标全部成为 $c$ 数 $x_\alpha(\alpha=1,2,3)$, 所以(3.1.19)式成了决定动量算符具体形式的条件方程,并给出 $\hat{p}_\beta=(\hbar/i)(\partial/\partial x_\beta)$ $(\beta=1,2,3)$[1]. 因此, 动量本征函数 $\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})=(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(i\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$ 可以直接求出,这不外乎就是回到了用平面波来表示动量一定的状态的第一定律. 进而函数系 $\{\phi_{\boldsymbol{p}'}\}$ 的完备正交归一性导出了(3.1.16)式, 并给出第二定律的框架. 同样,若采用动量表象,则动量就是 c 数, 所以,(3.1.19)式指出,位置坐标应当成为微分算符 $\hat{x}_\alpha=i\hbar(\partial/\partial p_\alpha)$ $(\alpha=1,2,3)$. 通过这个途径也能得出(3.1.16)式. 的确,以德布罗意假说和干涉实验为基础建立起第一定律和第二定律, 是一条以归纳方式孜孜不倦地攀登的道路,而以(3.1.19)为出发点,通过数学推理亦可一气呵成.仔细分析一下这种情况,就会知道,作为量子力学出发点的波粒二象性, 其实验事实与给定关系式 (3.1.19) 是完全等价的. 在这个意义上,往往把关系式(3.1.19)称为**量子条件**. 我们寻求不依赖于表象的力学量的公式体系, 而得到了应该称作量子力学本源的量子条件(3.1.19).

量子条件(3.1.19)表明, 算符 $\hat{x}_\alpha$ 和 $\hat{p}_\alpha$ 不能交换. 从此, 经常出现不可能交换的算符,所以,为了方便起见, 就引入了这样的符号:

$$[\hat{a},\hat{b}]=\hat{a}\hat{b}-\hat{b}\hat{a}.\qquad(3.1.20)$$

---

1) 严格地说,所给出的是在它上面加上了 $r$ 的实函数. 但是, 通过对波函数进行相位调整,该函数是会消失的, 从而经常可以把坐标表象中的动量只写作微分算符. 对动量表象中的位置坐标来说,情况相同.

这叫做算符 $\hat{a}, \hat{b}$ 的**对易子**. 另外, 给定对易子的值并包含对易子的那种关系式叫作**对易关系**. 也就是说, 位置坐标和动量应满足对易关系

$$\left.\begin{aligned} &[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta} \\ &[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta] = 0, \quad [\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0 \end{aligned}\right\} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3). \tag{3.1.21}$$

可是,该对易关系极其类似于经典的正则力学变量组 $(x_\alpha, p_\alpha)$ 的关系式

$$\left.\begin{aligned} &\{x_\alpha, p_\beta\} = \delta_{\alpha\beta} \\ &\{x_\alpha, x_\beta\} = 0, \ \{p_\alpha, p_\beta\} = 0 \end{aligned}\right\} \ (\alpha, \beta = 1, 2, 3). \tag{3.1.22}$$

其中, $\{a, b\}$ 是对于力学量 $a, b$ 的泊松 (Poisson) 括号. 因此, 这一相似性向我们暗示,通过'代换'

$$\{a, b\} \to \frac{1}{i\hbar}[\hat{a}, \hat{b}], \tag{3.1.23}$$

经典力学就会摇身一变而成为量子力学. 此外, 对易子满足以下恒等式:

$$[\hat{a}, \hat{b}] = -[\hat{b}, \hat{a}],$$
$$[\hat{a}, C] = 0, \ [C\hat{a}, \hat{b}] = C[\hat{a}, \hat{b}] \ (C \text{ 是常数}),$$
$$[\hat{a} + \hat{b}, \hat{c}] = [\hat{a}, \hat{c}] + [\hat{b}, \hat{c}],$$
$$[\hat{a}\hat{b}, \hat{c}] = \hat{a}[\hat{b}, \hat{c}] + [\hat{a}, \hat{c}]\hat{b},$$
$$[\hat{a}, [\hat{b}, \hat{c}]] + [\hat{b}, [\hat{c}, \hat{a}]] + [\hat{c}, [\hat{a}, \hat{b}]] = 0$$
(雅可比恒等式).

假如把对易子换成泊松括号,则它们照样也是泊松括号的恒等式. (此时, 算符 $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$ 当然应换成经典的力学量 $a, b, c$.) 因此, '代换'式(3.1.23)决不会导致数学上的矛盾, 从这个观点出发,可以把代换式(3.1.23)式看作**量子化**定则.

经典关系式(3.1.22)应该重新看作是力学变量 $x_\alpha, p_\alpha$ 互为正则共轭的条件式. 与此相应,可以称(3.1.21)式为量子力学中的正则共轭条件. 在坐标表象和动量表象中坐标和动量的简单形式及

严谨的功能交换，则是它们正则共轭的直接结果。

## §3.2 力学量及其观测

在上一节我们引入了一般的力学量定义。它把在波动力学阶段已经熟悉了的动量、位置坐标及能量等力学量的物理功能进行了概括。在数学上，从定义或构成方式显见，表示这些力学量的算符均为线性厄米算符，而本征函数系则构成完备系。即使对广义力学量算符来说，我们也要求它们具有同样的数学性质。首先需要说明的，就是必须具备这些数学性质——(i) 线性，(ii)厄米性，(iii) 本征函数系的完备性——的物理背景。

### a) 力学量算符的线性性质

波动力学阶段的力学量算符，从一开始就是作为微分算符，或 c 数算符，或其组合而引入的，因而线性性质不言自明。在这里，我们打算以不依赖于表象的具体形式的角度来说明线性性质之所以必要的基本理由。线性性质是'叠加'原理所要求的。首先，我们就哈密顿算符 $\hat{H}$ 分析这个问题。$\hat{H}$ 出现在薛定谔方程中，即

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi, \tag{3.2.1}$$

它是支配力学系随时间变化的重要算符。假设描述运动状态 $a$ 及 $b$ 的波函数分别为 $\psi_a$ 及 $\psi_b$，那么，根据叠加原理，允许 $a$ 及 $b$ 同时存在的波函数就是 $\psi_{ab}=\psi_a+\psi_b$，而 $\psi_a$, $\psi_b$, $\psi_{ab}$ 均应满足薛定谔方程(3.2.1)。因此，

$$\hat{H}(\psi_a+\psi_b)=\hat{H}\psi_a+\hat{H}\psi_b.$$

也就是说，$\hat{H}$ 必须是线性的。显然其证明与表象的具体形式无关。

——虽说与线性性质的问题无直接关系，但我们还是来看一下(3.2.1)式的形式解

$$\psi(t)=\hat{U}(t)\psi_0;\quad \hat{U}(t)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right). \tag{3.2.2}$$

$\psi_0$ 表示 $t = 0$ 时的初始状态. (3.2.2) 的证明很简单. 首先, 算符 $\hat{A}$ 的指数函数的定义是

$$\exp(\hat{A}) = 1 + \frac{1}{1!}\hat{A} + \frac{1}{2!}\hat{A}^2 + \frac{1}{3!}\hat{A}^3 + \cdots. \qquad (3.2.3)$$

假设 $\hat{A} = -(i\hat{H}t/\hbar)$, 则可得到(3.2.2)中的 $\hat{U}(t)$ (因 $\hat{H}$ 是线性的, 故 $\hat{U}(t)$ 也是线性的), 而且从定义(3.2.3)能够导出初始条件 $\hat{U}(0) = 1$ 及算符型薛定谔方程

$$i\hbar\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \hat{H}\hat{U}(t). \qquad (3.2.4)$$

因此, (3.2.2)式确实是(3.2.1)式的满定给定初始条件的解. 进而, 若利用当算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 能对易时的恒等式 $\exp(\hat{A})\exp(\hat{B}) = \exp(\hat{A} + \hat{B})$ (当 $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ 时, 该恒等式不复成立), 则可证明 $\hat{U}(t + t') = \hat{U}(t')\hat{U}(t)$ 或 $\psi(t + t') = \hat{U}(t')\psi(t)$. 因此, 令 $t'$ 等于微小量 $\delta t$ 并略去 $(\delta t)^2$ 以上的项, 就能得到

$$\hat{U}(\delta t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t \quad 及 \quad \psi(t + \delta t) = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t\right)\psi(t). \qquad (3.2.5)$$

这意味着 $\hat{H}$ 是给出力学系在无限小时间 $(t \to t + \delta t)$ 内演变的产生算符. 另外, 根据 $\hat{H}$ 的厄米性 ($\hat{H}^\dagger = \hat{H}$, 其中 $\hat{H}^\dagger$ 是 $\hat{H}$ 的厄米共轭算符)可以证明 $\hat{U}(t)$ 的幺正性

$$\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t) = \hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t) = 1. \qquad (3.2.6)$$

因此, $(\psi(t), \psi(t)) = (\psi_0, \hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)\psi_0) = (\psi_0, \psi_0)$, 这正是概率守恒定律.

其次我们来讨论动量算符的线性性质. 我们先引入算符

$$\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{r}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{p}}\right), \qquad (3.2.7)$$

并让它作用在波函数 $\psi$ 上, 从而得出

$$\psi_{\boldsymbol{r}_0} = \hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)\psi, \qquad (3.2.8)$$

再研究一下它的作用. 假如在坐标表象中把此式写出来, 利用算符和函数的泰勒展开式, 加以整理后, 则有

$$\psi_{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{r}, t) = \exp\left(\boldsymbol{r}_0 \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right)\psi(\boldsymbol{r}, t)$$

$$= \left[1 + \frac{1}{1!}\left(\boldsymbol{r}_0 \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right)\right.$$

$$+\frac{1}{2!}\left(\boldsymbol{r}_0\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)^2+\cdots\Big]\psi(\boldsymbol{r},t)$$

$$=\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}_0,t). \tag{3.2.9}$$

因此，$\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ 是使整个力学系从原来的位置仅仅‘位移’了 $\boldsymbol{r}_0$ 的算符。(3.2.9)式自身是坐标表象中的关系式，但赋予算符 $\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ 的含义本身却不随表象的变化而变化。现在，若特地取无限小位移 $\boldsymbol{r}_0=\delta\boldsymbol{r}$，则(3.2.8)式变成

$$\psi_{\delta r}=\left[1+\frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right]\psi. \tag{3.2.10}$$

在这个意义上，动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 起着使力学系产生无限小位移的产生算符的作用。考虑到运动状态 $a$、$b$ 和使之仅仅‘错开’$\boldsymbol{r}_0$ 的运动状态 $a'$，$b'$，则各自的波函数应该满足 $\psi_{a'}=\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)\psi_a$，$\psi_{b'}=\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)\psi_b$ 这样的关系。进而，$a$，$b$ 两方同时允许的运动状态的波函数 $\psi_{ab}$ 及使之仅仅‘错开’了 $\boldsymbol{r}_0$ 的运动状态的波函数 $\psi_{a'b'}$ 依然必须满足 $\psi_{a'b'}=\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)\psi_{ab}$。另一方面叠加原理要求，$\psi_{ab}=\psi_a+\psi_b$、$\psi_{a'b'}=\psi_{a'}+\psi_{b'}$。因此，$\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ 必须是线性的。同样，对无限小位移 $\boldsymbol{r}_0=\delta\boldsymbol{r}$ 来说，也要求 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 满足线性条件 $\hat{\boldsymbol{p}}(\psi_a+\psi_b)=\hat{\boldsymbol{p}}\psi_a+\hat{\boldsymbol{p}}\psi_b$，也就是说，为了不与叠加原理相抵触，动量算符必须是线性的算符。

——因为 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 是厄米的，所以 $\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ 为幺正算符，并具有形如(3.2.6)式的性质。因此，$\hat{U}_p^{\dagger}(\boldsymbol{r}_0)=\hat{U}_p^{-1}(\boldsymbol{r}_0)=\exp(-i\boldsymbol{r}_0\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar)$。另外，若计算由位置算符 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 的 $\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ 而产生的幺正变换，则可得到如下结果：

$$\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)\hat{\boldsymbol{r}}\hat{U}_p^{\dagger}(\boldsymbol{r}_0)=\hat{\boldsymbol{r}}+\boldsymbol{r}_0. \tag{3.2.11}$$

证明留给读者来作，若用一般算符的展开式

$$\exp(\hat{A})\hat{B}\exp(-\hat{A})=\hat{B}+\frac{1}{1!}[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+\cdots \tag{3.2.12}$$

及对易关系(3.1.21)，证明会简单一些。从(3.2.11)式也可知道，$\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ 是使力学系仅仅‘位移’了 $\boldsymbol{r}_0$ 的算符。而且也说明它与表象无关。位移算符的功能来自对易关系(3.1.21)。

按照同样的步骤可以说明，为了不与‘叠加’原理相抵触，位置

坐标必须是线性的。此时，可以利用使动量值只增加 $\boldsymbol{p}_0$（或微小量 $\delta\boldsymbol{p}$）的幺正算符

$$\hat{U}_r(\boldsymbol{p}_0)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_0\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\right)\quad 或\quad \hat{U}_r(\delta\boldsymbol{p})=1-\frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{p}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}。\tag{3.2.13}$$

这一次，位置坐标 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 成了使力学系的动量增加无限小量的产生算符。根据经典力学的常识，能量和时间、动量和位置坐标均处于相互正则共轭的关系之中。$\hat{H}$，$\hat{\boldsymbol{p}}$，$\hat{\boldsymbol{r}}$ 等力学量是使各自的正则共轭量增加无限小量的产生算符，为了让这种功能与‘叠加’原理不相抵触，必须要求具有刚才看到的线性性质。这决不是仅仅局限于 $\hat{H}$，$\hat{\boldsymbol{p}}$，$\hat{\boldsymbol{r}}$ 的特殊问题。从原理上讲，同样的结论对任意力学量均应成立。例如，轨道角动量 $\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 的各个坐标分量是绕其坐标轴产生无限小转动的产生算符，就线性性质而言，与 $\hat{H}$，$\hat{\boldsymbol{p}}$，$\hat{\boldsymbol{r}}$ 的情况是一样的。但是，假如对所有力学量来说，各自的正则共轭量尚未以明确的形式规范化，则论及线性性质并非易事。值得庆幸的是，在大多数情况下力学量只是作为 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的函数来表示的。因此，若 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 是线性的，则作为其函数的力学量也必然是线性算符。

### b） 力学量算符的厄米性和本征函数系的完备性

厄米算符的特点在于本征值为实数，而且属于不同本征值的本征函数是正交的。要求力学量算符有厄米性，其依据必然与要求具备这两个性质的物理背景有关。对本征值的实数性来说，恐怕无需特殊说明。因为很多经典的力学量通常都是实数，所以要求与之相应的量子力学的力学量所取的值为实数，似乎是不言自明的。在此，我们打算分析一下要求本征函数具有正交性的物理依据。现在，考虑某力学量算符 $\hat{F}$ 的本征值问题

$$\hat{F}u_\nu=\lambda_\nu u_\nu。\tag{3.2.14}$$

$\lambda_\nu$ 是 $\hat{F}$ 的本征值，$u_\nu$ 是属于 $\lambda_\nu$ 的 $\hat{F}$ 的本征函数。如同在哈密顿算符的情况下业已证明的那样，若算符 $\hat{F}$ 是厄米的，即，$\hat{F}^\dagger=\hat{F}$，

则本征值 $\lambda_v$ 取实数，本征函数 $u_v$ 具有正交性[1]

$$(u_v, u_{v'}) = 0 \quad (\lambda_v \neq \lambda_{v'}). \tag{3.2.15}$$

本征函数必须具有正交性(3.2.15)，这个要求实际上是前节 a) 中给定的有关概率解释及力学量一般定义的逻辑归宿。根据力学量的定义，当力学系处于用算符 $\hat{F}$ 的本征函数 $u_v$ 所描述的状态时，由算符 $\hat{F}$ 表示的力学量(简称力学量 $\hat{F}$)取确定值 $\lambda_v$. 因此，这个定义同时也否定了在状态 $u_v$ 中测定力学量 $\hat{F}$ 会给出其它值 $\lambda_{v'}(\neq \lambda_v)$ 的可能性。也就是说，要求在状态 $u_v$ 中力学量 $\hat{F}$ 取值为 $\lambda_v(\neq \lambda_v)$ 的事件的概率——同样，也可以说——在状态 $u_v$ 中发现状态 $u_{v'}(\lambda_{v'} \neq \lambda_v)$ 的事件的概率为零。按照概率解释的规定，该概率与 $|(u_{v'}, u_v)|^2 = |(u_v, u_{v'})|^2$ 成正比。因此，正交性(3.2.15)必不可少。这就是要求力学量算符具有厄米性的理由。

厄米算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 之和 $\hat{A} + \hat{B}$ 是厄米的，但若 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 不对易，则其积 $\hat{A}\hat{B}$ 就不具有厄米性——$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A} \neq (\hat{A}\hat{B})$。因此，当给出经典的力学量，而去构成与之对应的量子力学的力学量算符时，务必仔细小心。例如，即使把经典的力学量 $xp_x$ 原封不动地算符化而取为 $\hat{x}\hat{p}_x$ 或 $\hat{p}_x\hat{x}$，也会因为 $\hat{x}\hat{p}_x \neq \hat{p}_x\hat{x}$ 而不能得到厄米算符。所以如果采取对称化的形式 $(1/2)(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x})$，并把它用作与 $xp_x$ 相对应的量子力学的力学量算符，则厄米性就能得到保证。下面我们说明一下使这种对应广义化的韦耳(Weyl) 方法。首先，根据傅里叶变换

$$F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) = \iint \tilde{F}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) \exp[i(\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{r} + \boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p})] d^3\boldsymbol{\xi} d^3\boldsymbol{\eta}, \tag{3.2.16a}$$

$$\tilde{F}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \frac{1}{(2\pi)^6} \iint F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) \exp[-i(\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{r} + \boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p})] d^3\boldsymbol{r} d^3\boldsymbol{p}, \tag{3.2.16b}$$

---

1) 为慎重起见，我们来证明一下. 根据(3.2.14)式，$\lambda_v(u_v, \hat{F}u_v)/(u_v, u_v)$，但从 $(u_v, u_v)^* = (u_v, u_v)$及 $(u_v, \hat{F}u_v)^* = (\hat{F}u_v, u_v) = (u_v, \hat{F}^\dagger u_v) = (u_v, \hat{F}u_v)$ 可知 $\lambda_v^* = \lambda$，即 $\lambda_v$ 具有实数性. 另外，根据 $(\lambda_v - \lambda_{v'})(u_v, u_{v'}) = (\hat{F}u_v, u_{v'}) - (u_v, \hat{F}u_{v'}) = (u_v, (\hat{F}^\dagger - \hat{F})u_{v'}) = 0$，当 $\lambda_v \neq \lambda_{v'}$ 时，$(u_v, u_{v'}) = 0$. 总之，这两个性质均源于厄米性 $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$.

(3.2.16b)

由经典的力学量 $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ 求出 $\tilde{F}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta})$，再利用它把对应于 $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ 的量子力学的力学量算符 $F(\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}})$ 定义为

$$F(\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}}) = \iint \tilde{F}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) \exp[i(\boldsymbol{\xi} \cdot \hat{\boldsymbol{r}} + \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})] d^3\boldsymbol{\xi} d^3\boldsymbol{\eta}. \tag{3.2.17}$$

此处 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 是满足对易关系（3.1.21）的位置坐标算符及动量算符，而指数函数则由幂级数展开式(3.2.3)给出。即使单纯经过对易关系(3.1.21)，也会带进量子力学的特征.经典的力学量 $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ 的实数性反映在 $\tilde{F}^*(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \tilde{F}(-\boldsymbol{\xi}, -\boldsymbol{\eta})$ 上，应用此式就不难证明算符 $F(\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}})$ 厄米．线性性质是不言自明的。当 $F = xp_x$ 时，$\tilde{F} = -(\partial/\partial\xi_x)(\partial/\partial\eta_x)\delta^3(\boldsymbol{\xi})\delta^3(\boldsymbol{\eta})$，(3.2.17) 式自动给出上述的对称化形式．有关数学方面的问题在第四章及本讲座第四卷《量子力学 II》第十六章中尚有机会仔细探讨。

下面，我们考虑力学系处于一般状态 $\psi$ 时对力学量 $\hat{F}$ 的测量问题。若除去 $\psi$ 等于 $\hat{F}$ 的特定的本征函数这一特殊情况，则状态 $\psi$ 就不会是力学量 $\hat{F}$ 取确定值的那种运动状态。因此，假如在该状态测量力学量 $\hat{F}$，就未必总是给出相同的结果。但是，若存在真实的物理测量过程，则一定能得到某个值。按照力学量的定义，该值应当限于算符 $\hat{F}$ 的本征值中的某一个——原则上，无论哪个本征值都可能出现。因此，一般的状态 $\psi$ 必然允许 $\hat{F}$ 的一切本征态为运动状态。根据'叠加'原理，这样的状态 $\psi$ 应该写成

$$\psi = \sum_{\nu'} C_{\nu'} u_{\nu'}. \tag{3.2.18}$$

也就是说，为了使力学量 $\hat{F}$ 的测量过程成为现实，算符 $\hat{F}$ 的本征函数系 $\{u_\nu\}$ 必须具有完备性。对完备性的要求就是从这样的物理背景来理解的。

由于力学量算符 $\hat{F}$ 是线性的，所以本征值方程 (3.2.14) 是线性齐次方程，这说明本征函数 $u_\nu$ 通常只有常系数是待定的。根据归一化条件 $(u_\nu, u_\nu) = 1$ 能够决定该常系数.也就是说，若 $u_\nu$ 是

解，则对它乘以常数 $C_\nu$ 而得到的 $C_\nu u_\nu$ 也是解，所以，如果特意选择 $|C_\nu| = (u_\nu, u_\nu)^{-1/2}$，而变 $C_\nu u_\nu$ 为 $u_\nu$，那么新的本征函数 $u_\nu$ 就满足归一化条件。此外，我们已经不止一次地说过，根据归一化条件不能决定常数相位，要留下来待定。那么按照归一化条件，正交性和完备性就可写成[1)]

$$(u_\nu, u_{\nu'}) = \delta_{\nu\nu'}, \tag{3.2.19a}$$

$$\sum_\nu u_\nu(\boldsymbol{r}) u_\nu^*(_{\nu'}) = \delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'). \tag{3.2.19b}$$

$\delta_{\nu\nu'}$ 是克朗内克 (Kronecker) $\delta$ 符号。

因为截止目前尚无必要使用具体的表象，所以有意识不写明变量，而在(3.2.19b)式中，为了叙述清楚起见，采用了坐标表象. 若想用动量表象 $\tilde{u}_\nu(\boldsymbol{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int u_\nu(\boldsymbol{r})\exp(-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)d^3\boldsymbol{r}$，则可以进行‘代换’ $u_\nu \to \tilde{u}_\nu$ 及 $\delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \to \delta^3(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')$，从而使关系式具有完全相同的形式. 当然，$(u_\nu, u_{\nu'}) = (\tilde{u}_\nu, \tilde{u}_{\nu'})$。另外，(3.2.19) 式针对的是本征值 $\lambda_\nu$ 取不连续值的情况，在连续分布的情况下有必要把克朗内克符号 $\delta_{\nu\nu'}$ 换成 $\delta$ 函数(如 $\delta(\lambda - \lambda')$)，而把求和记号 $\sum_\nu$ 换成积分 (如 $\int d\lambda$)。在有关动量和位置坐标的本征函数问题中已遇到过这些问题 (参看前节 a) (3.1.9) 式或 (3.1.12) 式)，我们认为没有详细说明的必要。以后的叙述也都是针对本征值 $\lambda_\nu$ 取不连续值的情况而言的。

——有时本征值既取不连续值也取连续值。同时兼有束缚态和散射态的哈密顿算符即为其一例。在这种情况下，既要同时使用克朗内克符号和 $\delta$ 函数，又要使求和与积分同时并存，从形式上来看倒没有什么疑难。至于具体的处理方法留待以后再说.

### c) 力学量的测量和期待值

我们再回到对一般状态 $\psi$ 中的力学量 $\hat{F}$ 的测量问题. 一般来

---

1) 关于完备性条件(3.2.19b)，请参考导出一维完备性条件(2.4.46)的论述.

说，在测量前不能预先百分之百地知道力学量 $\hat{F}$ 取哪个值。量子力学只不过说明，对状态 $\psi$ 中的力学量 $\hat{F}$ 进行测量给出值 $\lambda_\nu$ 的概率，即在状态 $\psi$ 中发现状态 $u_\nu$ 的概率与 $|(u_\nu, \psi)|^2$ 成正比。但是，众所周知，一旦通过测量明确了力学量 $\hat{F}$ 所取的值为 $\lambda_\nu$，那么——根据力学量的定义——测量之后的态函数就成了 $u_\nu$。因此，由于测量的结果，态函数发生了 $\psi \to u_\nu$ 的飞跃，对位置坐标的测量来说，这种情况正是 §2.2 中谈到过的由于测量而引起的'波的收缩'。在此我们把一般的力学量 $\hat{F}$ 作为对象，来重新探讨量子力学的测量问题。

在讨论之前，我们先研究一下展开式(3.2.18)中系数 $c_\nu$ 的物理功能及数学功能。对满足(3.2.19)式的本征函数系 $\{u_\nu\}$，可以马上得到

$$c_\nu = (u_\nu, \psi). \tag{3.2.20}$$

因此，系数 $c_\nu$ 正是在状态 $\psi$ 中力学量 $\hat{F}$ 取 $\lambda_\nu$ 值的概率幅。也就是说，发生该事件的概率是

$$w_\nu = \frac{|c_\nu|^2}{\sum_\nu |c_\nu|^2}. \tag{3.2.21}$$

分母的选择是为了满足归一化条件 $\sum_\nu w_\nu = 1$。但是，因为

$$(\psi, \psi) = \sum_\nu \sum_{\nu'} c_\nu^* c_{\nu'} (u_\nu, u_{\nu'}) = \sum_\nu |c_\nu|^2, \tag{3.2.22}$$

所以 $\psi$ 的归一化条件 $(\psi, \psi) = 1$ 同时也给出了 $\sum_\nu |c_\nu|^2 = 1$，而 $|c_\nu|^2$ 本身则成了归一化的概率 $w_\nu$。倘若回想一下，根据(3.1.8)式或(3.1.13)式，坐标表象及动量表象的波函数被认为是各力学量算符按本征函数系展开时的系数，于是，作为展开式(3.2.18)的系数，概率幅 $c_\nu = (u_\nu, \psi)$ 不妨称为'$F$ 表象中的波函数'。这时，(3.2.22)式正好可以看作是与(在坐标表象和动量表象之间成立的)巴塞瓦等式(2.2.26)相当的坐标表象和 $F$ 表象之间的

关系式。此外，$u_\nu(\boldsymbol{r})=(\chi_r, u_\nu)$ 则能解释成是从 $F$ 表象到 $x$ 表象的变换函数，而 $\tilde{u}_\nu(\boldsymbol{p})=(\phi_p, u_\nu)$ 也就解释成是从 $F$ 表象到 $p$ 表象的变换函数。

进而，我们要阐明，作为理论上的预言，概率 $w_\nu=|(u_\nu,\phi)|^2/(\phi,\phi)$ 与测量实验的结果之间的关系。现在，取为数不少的 $N$ 个处于全同状态 $\phi$ 的相同力学系。在各力学系中对力学量 $\hat{F}$ 同时进行测量，结果有 $N_\nu$ 个力学系得到了值 $\lambda_\nu$。在 $N$ 为无穷大的极限上，比值 $(N_\nu/N)$ 必然趋近于由序号 $\nu$ 决定的确定值。当然，因 $\sum_\nu N_\nu=N$，故 $\sum_\nu (N_\nu/N)=1$。量子力学的概率解释认为，作为实验结果，该确定值 $\lim_{N\to\infty}(N_\nu/N)$ 等于理论上的预言值 $w_\nu=|(u_\nu,\phi)|^2/(\phi,\phi)$。这是针对本征值取不连续值的情况，当本征值密集而成连续分布时，可以如同位置测量时(§2.2)的作法，把全部区域分成有限个子区来进行测量实验。无论哪一种情况，都不过是把围绕干涉实验和波动力学第三定律所反复描述过的内容加以如实推广，故无进一步详细说明的必要。

假如把上面得到的实验结果总结起来而对力学量 $\hat{F}$ 所取的值求其平均，那就是 $\left(\sum_\nu \lambda_\nu N_\nu/N\right)$，它在 $N$ 为无穷大的极限上趋近于一个确定值。令该值为 $\bar{F}$，则

$$\bar{F}=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_\nu \lambda_\nu N_\nu. \tag{3.2.23}$$

若在其中把 $\lim_{N\to\infty}(N_\nu/N)$ 换成理论上的预言值 $w_\nu$，则 $\bar{F}$ 就会一变而成为给出概率 $w_\nu$ 时的随机性平均值

$$\langle\hat{F}\rangle=\sum_\nu \lambda_\nu w_\nu=\frac{\sum_\nu \lambda_\nu|c_\nu|^2}{\sum_\nu \lambda|c_\nu|^2}. \tag{3.2.24}$$

虽然 $\bar{F}$ 是实验结果，$\langle\hat{F}\rangle$ 是理论上的预言值，但是概率解释却理应认为 $\bar{F}=\langle\hat{F}\rangle$。$\langle\hat{F}\rangle$ 叫作力学量 $\hat{F}$ 在状态 $\phi$ 中的**期待值**。为

了强调'状态 $\psi$' 往往也写成 $\langle\hat{F}\rangle_\psi$。期待值所取的值并非本征值本身。为了理解这一点，我们考虑只有两个本征值 $\lambda_1$ 和 $\lambda_2$ 的简单情况。这时，$\langle\hat{F}\rangle = \lambda_1 w_1 + \lambda_2(1 - w_1)$，所以对应于 $w_1$ 从 0 到 1 的变化，$\langle\hat{F}\rangle$ 能连续地从 $\lambda_2$ 变到 $\lambda_1$，而取和本征值不同的值。如果使用(3.2.19)式和(3.2.14)式，就会把 (3.2.24) 式右边的分子变为

$$\begin{aligned}\sum_\nu \lambda_\nu |c_\nu|^2 &= \iint \psi^*(\boldsymbol{r}, t) \sum_\nu \lambda_\nu u_\nu(\boldsymbol{r}) u_\nu^*(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}', t)d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r}' \\ &= \iint \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\hat{F}\left(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right)\left\{\sum_\nu u_\nu(\boldsymbol{r})u_\nu^*(\boldsymbol{r}')\right\} \\ &\quad \times \psi(\boldsymbol{r}', t)d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r}' \\ &= \int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\hat{F}\left(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3\boldsymbol{r} \\ &= (\psi, \hat{F}\psi).\end{aligned}$$

另一方面，因分母是 $\sum_\nu |c_\nu|^2 = (\psi, \psi)$，故可把期待值(3.2.24)写成

$$\langle\hat{F}\rangle = \frac{(\psi, \hat{F}\psi)}{(\psi, \psi)}. \tag{3.2.25}$$

这是在坐标表象中的期待值表达式。不言而喻，若把 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 和 $\hat{F}(\boldsymbol{r})(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ 换成 $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)$ 和 $\hat{F}(i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p}), \boldsymbol{p})$，就可得到动量表象中的期待值表达式。此外，(3.2.24)式本身是在 $F$ 表象中的期待值表达式。显然，期待值不随表象而变，无论用哪一种表象进行计算都会得到同样的值。

在期待值 $\langle F\rangle$ 的附近随机性方差为

$$(\Delta F)^2 = \langle(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)^2\rangle = \langle\hat{F}^2\rangle - \langle\hat{F}\rangle^2, \tag{3.2.26}$$

而**偏差** $\Delta F = \sqrt{\langle(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)^2\rangle}$ 则可以看成是力学量 $\hat{F}$ 在状态 $\psi$ 中所取的值有所'波动'的大致标准，进而，根据需要尚可引入高阶因子 $\langle(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)^m\rangle$。显然，若 $\psi = u_\nu$，则 $\langle\hat{F}\rangle = \lambda_\nu$，$\Delta F =$

0。 反之，$\Delta F=0$ 表明 $\langle(\hat{F}-\langle\hat{F}\rangle)^2\rangle=\int|(\hat{F}-\langle\hat{F}\rangle)\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3\boldsymbol{r}=0$，所以只有当 $\psi$ 满足 $\hat{F}\psi=\langle\hat{F}\rangle\psi$ 时，偏差才为零。因此偏差为零的状态正是该力学量算符的本征态。此时，期待值就是本征值。

### d） 不确定关系

下面，我们研究一下对状态 $\psi$ 中的两个力学量 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 进行测量的问题。设 $\hat{F}$ 的的本征值问题与前面的相同，而 $\hat{G}$ 的本征值为 $\mu_\rho$，本征函数为 $v_\rho$——即 $\hat{G}v_\rho=\mu_\rho v_\rho$。当然，本征函数系 $\{v_\rho\}$ 与（3.2.19）形式相同，是完备归一正交系。不用说，在状态 $\psi$ 中力学量 $\hat{G}$ 取 $\mu_\rho$ 值的概率为 $w_\rho=|(v_\rho,\psi)|^2/(\psi,\psi)$。下面，我们取很多处于相同状态 $\psi$ 的全同力学系，在该力学系的一半之中测量 $\hat{F}$，而在力学系的另一半之中测量 $\hat{G}$。若把实验结果按一般规律总结整理而求出平均值和偏差，它们就应该等于理论上的预言值 $\langle\hat{F}\rangle$、$\langle\hat{G}\rangle$、$\Delta F$ 及 $\Delta G$。我们先来求偏差 $\Delta F=\sqrt{\langle\hat{F}'^2\rangle}$ 和 $\Delta G=\sqrt{\langle\hat{G}'^2\rangle}$ 应满足的一般关系。其中，假设了 $\hat{F}'=\hat{F}-\langle\hat{F}\rangle$，$\hat{G}'=\hat{G}-\langle\hat{G}\rangle$。现在，若令 $\xi$ 为实数并定义函数

$$\psi'=(\xi\hat{F}'+i\hat{G}')\psi,$$

则常有的不等式 $(\psi',\psi')\geqslant 0$ 就可以写成

$$\xi^2(\Delta F)^2+\xi\langle i[\hat{F},\hat{G}]\rangle+(\Delta G)^2\geqslant 0.$$

其中使用了关系式 $[\hat{F}',\hat{G}']=[\hat{F},\hat{G}]$。另外，根据 $[\hat{F},\hat{G}]^\dagger=[\hat{G},\hat{F}]=-[\hat{F},\hat{G}]$，$\langle i[\hat{F},\hat{G}]\rangle$ 显然为实数。由于这个不等式对实数 $\xi$ 的任何值都是成立的，因此，必须有

$$\langle i[\hat{F},\hat{G}]\rangle^2-4(\Delta F)^2(\Delta G)^2\leqslant 0.$$

这样一来就可以得出关系式

$$\Delta F\Delta G\geqslant\frac{1}{2}|\langle i[\hat{F}、\hat{G}]\rangle|。\tag{3.2.27}$$

以此关系式为中心，我们来分析对状态 $\psi$ 中的两个力学量 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的测量问题。（3.2.27）式中的等号仅仅对应于 $(\psi',\psi')=0$ 的情

况，即满足如下条件的状态 $\psi_0$：

$$\left.\begin{aligned}&(\xi_0\hat{F}' + i\hat{G}')\psi_0 = 0\\ &\text{其中 } \xi_0 = -\langle i[\hat{F}, \hat{G}]\rangle/2(\Delta F)^2\end{aligned}\right\}. \tag{3.2.28}$$

首先，我们分析算符 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 可以对易的情况，即 $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$ 的情况. 这时，(3.2.27)式成为 $\Delta F\Delta G \geqslant 0$，$\Delta F$ 和 $\Delta G$ 之间不受任何约束. 因此，就有可能存在着某一态函数，同时给出 $\Delta F = 0$ 及 $\Delta G = 0$. 该态函数——如果回想一下偏差为零的状态仅限于其力学量算符的本征态这一事实——必须是 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的共同本征函数. 这一点表明，若 $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$，则在数学上就存在着 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的共同本征值问题

$$\hat{F}u_{v\rho} = \lambda_v u_{v\rho},\ \hat{G}u_{v\rho} = \mu_\rho u_{v\rho}. \tag{3.2.29}$$

实际上，由 $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$ 可以直接证明共同本征函数的存在. 反之，由共同本征函数的存在亦可证明 $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$. 不言而喻，在状态 $\psi = u_{v\rho}$ 中进行测量会同时给出 $\Delta F = \Delta G = 0$. 而且，在该状态中对 $\hat{F}$ 的测量必然给出值 $\lambda_v$，紧接着立刻测量 $G$ 就必然得出值 $\mu_\rho$. 反之亦然. 从原则上讲，力学量 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 能同时精密测量的必要而充分的条件是 $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$.

当 $[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$ 时，(3.2.27)式为**不确定关系**，对 $\Delta F$ 和 $\Delta G$ 的相互关系给以制约. 例如，若设法使态函数 $\psi$ 实现 $\Delta F \to 0$，那么，根据(3.2.27)式必然会使 $\Delta G \to \infty$. 反之亦然. 因此，不可能同时实现 $\Delta F \to 0$ 和 $\Delta G \to 0$，而且在原则上不能同时精密测量由不可对易的算符 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 所代表的力学量. 需要注意，这是原则上的不可能性，并非与人为的实验装置相关的测量误差. 即便制造出多么精密的装置，也不能排除由不确定关系所决定的同时精密测量的不可能性. 当 $[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$ 时，自然不会存在共同本征函数，力学量 $\hat{G}$ 在 $\hat{F}$ 的本征态 $u_v$ 中的测量值，及力学量 $\hat{F}$ 在 $\hat{G}$ 的本征态 $v_\rho$ 中的测量值，已完全弥散. 当具体体现于波包时，类似这样的情况，对位置坐标和动量这对力学量则为经验之谈（见 §2.3b）. 若选 $\hat{F}$ 为 $\hat{x}_1 = \hat{x}$，$\hat{x}_2 = \hat{y}$，$\hat{x}_3 = \hat{z}$，并与之分别对应，令 $\hat{G}$ 为 $\hat{p}_1 = \hat{p}_x$，$\hat{p}_2 = \hat{p}_y$，$\hat{p}_3 = \hat{p}_z$，则 $[\hat{F}, \hat{G}] = i\hbar$，故(3.2.27)式变为

$$\Delta x_\alpha \Delta p_\alpha \geqslant \frac{\hbar}{2} \quad (\alpha = 1, 2, 3). \tag{3.2.30}$$

因 $x_\alpha$ 和 $p_\alpha$ 是正则共轭的力学变量，故不确定关系反映正则对易关系(3.1.21),而变成这样单一的形式。根据(3.2.28)式,当态函数满足下列方程时,等号成立,不确定性极小:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{i}{\hbar}\langle p_\alpha\rangle + \frac{1}{2(\Delta x_\alpha)^2}(x_\alpha - \langle x_\alpha\rangle)\right]\psi_0(\boldsymbol{r}) = 0.$$

具体地写出来,解就是

$$\psi_0(\boldsymbol{r}) = \left[(2\pi)^3 \prod_\alpha (\Delta x_\alpha)^2\right]^{-1/4} \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}\langle \boldsymbol{p}\rangle \cdot \boldsymbol{r} - \sum_\alpha \frac{(x_\alpha - \langle x_\alpha\rangle)^2}{4(\Delta x_\alpha)^2}\right]. \tag{3.2.31}$$

式中系数是根据归一化条件 $(\psi_0, \psi_0) = 1$ 决定的. 在不确定性极小这个意义上，$\psi_0(\boldsymbol{r})$ 叫作**极小波包**.如果在(3.2.31)式中选 $\langle \boldsymbol{p}\rangle$ 方向为 $z$ 轴，即设 $\langle \boldsymbol{p}\rangle = (0, 0, p)$，再引人轴对称性 $(\Delta x)^2 = (\Delta y)^2 = (1/2)(\Delta r)^2$，并用圆柱坐标 $\boldsymbol{r} = (r, \theta, z)$ 来表示，则可得到(2.3.23)式,因(2.3.23)是极小波包,故应有极小的不确定关系(2.3.24)．其中，$(\Delta p_x)^2 = (\Delta p_y)^2 = (1/2)(\Delta p_r)^2$．此外,在一维的情况下,谐振子的基态本征函数(2.4.72)显然是极小波包。其中 $\langle p\rangle = 0$，$(\Delta q)^2 = (\hbar/2m\omega)$.

通过具体的波包(2.3.23)已经理解了不确定关系(3.2.30)是与波动性密切相关的，在此我们打算从一般波动论的立场审视一下这个事实．为简单起见,只对一维波动进行讨论．令波函数 $\psi(x)$ 的平面波展开式为

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} A(k)\exp(ikx)dk. \tag{3.2.32}$$

假定 $|A(k)|$ 以 $k = k_0$ 为中心，扩展宽度的量级仅仅是 $\Delta k$．即，当 $|k| \gtrsim * \Delta k$ 时 $|A(k)|$ 几乎可以看作零(*号表示允许加上一个量级为 1 的数值系数)．这时,(3.2.32)式能够写成

$$\psi(x) \simeq \exp(ik_0x)\Phi(x),$$

其中

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-*\Delta\kappa}^{*\Delta\kappa} A(k_0+\xi)\exp(i\xi x)d\xi.$$

因此，按照 $\Phi(x)$ 的积分表达式，对 $|x| \ll *(\Delta\kappa)^{-1}$ 来说，可以近似地认为 $\exp(i\xi x) \simeq 1$，故当 $\Phi(x) \simeq$ 常数、$|x| \gg *(\Delta\kappa)^{-1}$) 时，鉴于 $\exp(i\xi x)$ 振荡激烈，显然 $\Phi(x) \simeq 0$。这一点表明，$\psi(x)$ 取非零值时其 $x$ 范围的幅度 $\Delta x$ 遵从不确定关系

$$\Delta x\Delta k \simeq 1. \tag{3.2.33}$$

也就是说，在这个意义上不确定关系不仅体现了量子力学而且也体现了波动现象的一般特性。因为在量子力学中 $k = (p/\hbar)$，故(3.2.33)式直接给出 $\Delta x\Delta p \simeq \hbar$。另外，假如在(3.2.32)式中把空间变量 $x$ 换成时间变量 $t$，把波数 $\kappa$ 换成角频率 $\omega$，那么(3.2.33)式就会一变而成为对时间变化量 $\Delta t$ 和角频率变化量 $\Delta\omega$ 的不确定关系

$$\Delta t\Delta\omega \sim 1. \tag{3.2.34}$$

在量子力学中 $\omega = (E/\hbar)$，故 $\Delta t\Delta E \sim \hbar$，这正是在 §2.3a) 中已经详细讨论过的(2.3.17)式。

最后，因为假想实验可以从波动现象的立场明确表达不确定关系的内含，所以我们打算介绍一下。请看图 3.1。在屏幕 $S$ 上以

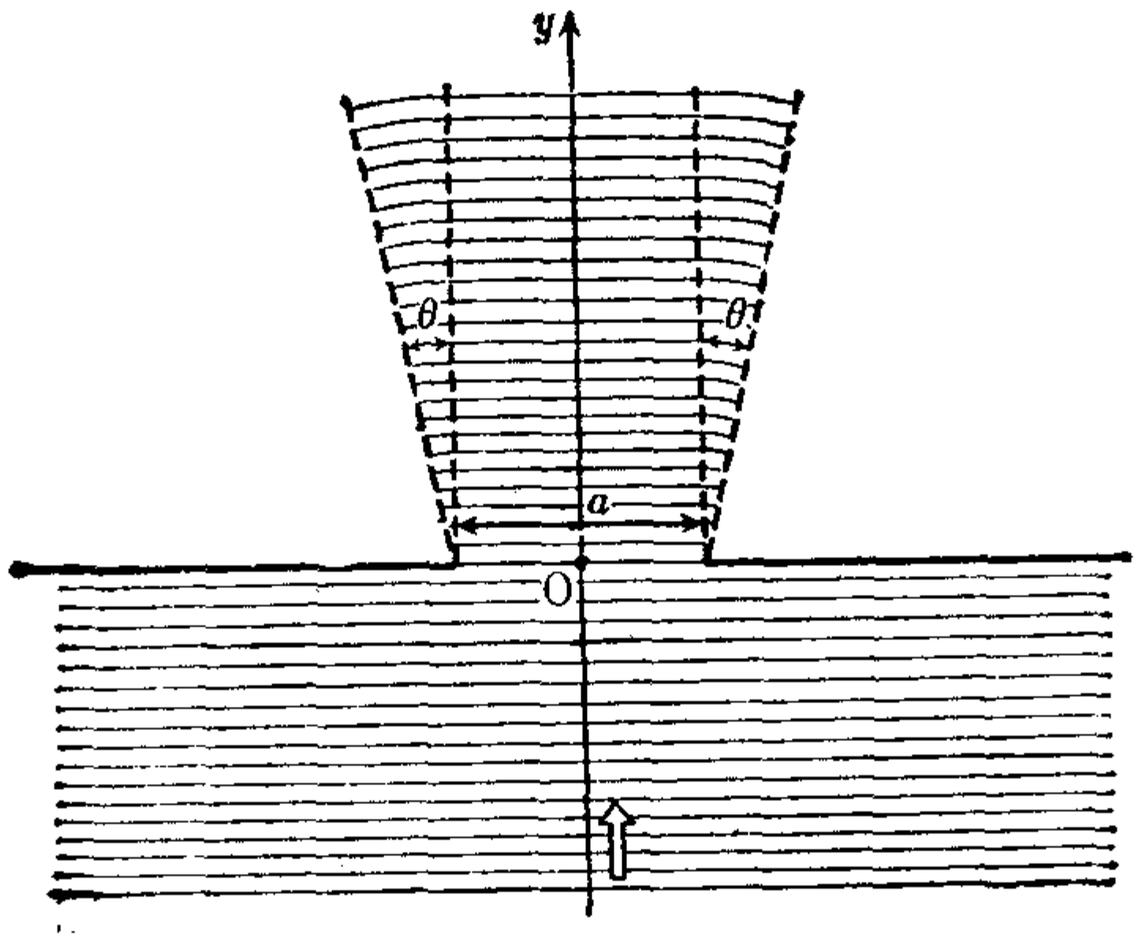



图 3.1　位置测量的假想实验

原点为中心开一个直径为 $a$ 的孔. 坐标轴的取法是令包含屏面的方向为 $x$ 轴，与屏面垂直的自下而上的方向为 $y$ 轴. 若粒子通过这个孔，就会实现位置测量 $\langle x\rangle \simeq 0$ 及 $\Delta x \simeq a$. 另外，为了测量 $x$ 坐标，从屏幕 $S$ 的下方沿着 $y$ 轴方向注入动量为 $p$ 的粒子束. 动量为 $p$ 的粒子束是波长为 $\lambda = (h/p)$ 的平面波，当其通过孔进入上部空间时，由于波动性所致应该产生如图所示的衍射现象. 在波长 $\lambda$ 小于孔的直径 $a$ 时，衍射角大约为 $\sin\theta \simeq (\lambda/a)$. 因此，在屏幕 $S$ 的上方动量的 $x$ 分量具有非零值，其分布以 $\langle p_x\rangle \simeq 0$ 为中心，宽度的量级为 $\Delta p_x \simeq *p\sin\theta \simeq *(h/a)$. 联想 $\Delta x \simeq a$，就会立刻得出不确定关系 $\Delta x\Delta p_x \sim h$. 假如减小孔的尺寸使位置测量的精度提高——波动性效应登时出现，衍射角度大——则动量的不确定性就会增加，这样的机理正是由于上述的假想实验才被巧妙地描述出来.

## §3.3 量子力学中的基本假定

我们最初承认波粒两象性是量子力学基础的实验事实，直接引伸建立了波动力学的运动定律——第 1、第 2、第 3 定律. 前两节避开了以时空表象的波函数为依据的波动力学框架，引入了动量表象及其它表象，扩大了表现手法，与此相关引进了概率解释规定和力学量的定义. 这些都为建立更广泛的理论体系做好了准备. 与波动力学运动定律同时起步出现了以上的归纳提高和数学上的准备，下面我们打算完全以此为基础，作为一个大体完成的体系，提出量子力学的理论框架.

量子力学是由下述基本假定 I、II、III 构成的理论体系.

### a) 基本假定 I——态

(Ia) 量子数的存在“存在着个数一定的一组实数——$a = (a_1, a_2, \cdots a_n)$，它们恰好能完全确定力学系的状态.”

这组实数叫做**量子数**. 个数 $n$ 表示力学系的自由度，量子数

未必只有一组，原则上可以存在很多组。例如，除 $a$ 之外还有 $b=(b_1, b_2, \cdots, b_n)$、$c=(c_1, c_2, \cdots, c_n)$ 等等，$a$、$b$、$c\cdots$分别是 $n$ 维欧几里德 (Euclid) 空间 $R_a$, $R_b$, $R_c$, $\cdots$内的点。

只要能确定状态，量子数怎样选都可以。但是，假如事先已经知道结果，则力学量所取的值本身(或分辨它们的数)就应该作为量子数来使用。例如，对于由 $N$ 个粒子组成的力学系来说，既可以选择各粒子的位置坐标所取的值 $a=(\boldsymbol{r}(1), \boldsymbol{r}(2), \cdots, \boldsymbol{r}(N))$ 为量子数，也可以取动量的值 $b=(\boldsymbol{p}(1), \boldsymbol{p}(2), \cdots, \boldsymbol{p}(N))$ 为量子数。这时 $n=3N$。在一维谐振子的情况下(§2.4e))，可以令 $a=q$ 或 $b=p$，但也能取能量本征值 $E_\nu=\hbar\omega(\nu+1/2)$ 的序号而选择 $c=\nu$。$q$ 和 $p$ 一般是连续变量，但 $\nu$ 却取不连续值 0、1, 2, $\cdots$。这样一来，便于确定状态的力学量，其所取的值就被当作量子数来使用，实际上，除此以外别无它法。倘若有宜于确定状态的好量子数，则以该量子数为本征值的算符必然代表特定的力学量。但是，在这里尚未引入力学量的定义。根据基本假定 II，才开始有可能把力学量的值与确定状态联系起来，使状态确定的形式和内容臻于完备。对量子力学这一理论体系的物理结构来说，应该认为量子数的存在是比力学量的定义更基本的假定。

(Ib) 态函数和概率解释规定“在概率解释规定的意义上，力学系的运动状态通过在量子数空间 (例如 $\mathbf{R}_a$) 中定义的线性函数空间(例如 $\mathbf{H}_a$) 之内的复值函数(例如 $\psi(a)\in\mathbf{H}_a$) 来描述。”所谓概率解释的规定，指的是“在状态 $\psi_1$ (用函数 $\psi_1(a)$ 表示的状态) 中发现状态 $\psi_2$ (用函数 $\psi_2(a)$ 表示的状态)的概率与 $|(\psi_2, \psi_1)|^2$ 成正比”。其中

$$(\psi_2, \psi_1)=\int \psi_2^*(a)\psi_1(a)\rho(a)da. \tag{3.3.1}$$

这里 $\rho(a)$ 是根据 $\mathbf{R}_a$ 的性质选择的权函数。若 $a$ 是连续变量，$\rho(a)$ 通常就是 $a$ 的连续函数，若 $a$ 取不连续的值，$\rho(a)$ 比如说就变成 $\sum_\nu \delta(a-a_\nu)$($\delta$ 是 $n$ 维 $\delta$ 函数)，积分则变成求和。

态函数构成的空间 (例如 $\mathbf{H}_a$) 是线性的，其理由是为了使‘叠

加'原理在数学上规范化，后者指出许多态函数的线性组合依然是态函数。内积必须在该线性空间中定义。在(3.3.1)式中，为了表示内积 $(\psi_2,\psi_1)$ 使用了 $\mathbf{H}_a$ 的函数 $\psi_1(a)$ 和 $\psi_2(a)$，它们叫作 $a$ 表象的函数。因为表象的选择原则上是完全任意的，所以也可以用另外的表象，比如 $b$ 表象 $\tilde{\psi}_1(b)$ 和 $\tilde{\psi}_2(b)$。但是，与物理效果直接相关的内积的值却不会因表象的变换而改变。也就是说，

$$(\psi_2,\psi_1)=(\tilde{\psi}_2,\tilde{\psi}_1). \tag{3.3.2}$$

因此，表象的变换是不改变内积的变换，即，它必须是幺正变换。而且，叠加原理显然要求该变换是线性变换。

刚才写出 $\psi_1$ 或 $\psi_2$ 时，是用序号来标明状态，但是这种表示方式过于含糊不清。根据 (Ia)，对状态的正确表示是量子数的职能。因此，往往像 $\psi_{a'}(a)$, $\psi_b(a)$, $\cdots$那样用两组量子数给出态函数的特征。所以，$|(\psi_c,\psi_b)|^2$ 是在量子数 $b$ 所确定的状态中发现量子数 $c$ 所确定的状态的概率。现在，设 $a$ 和 $a'$ 为同一量子数的不同取值，那么 $\psi_{a'}(a)\propto\delta(a-a')$ (或 $\delta_{aa'}$) 是无可非议的。实际上，当量子数 $a$ 为某个力学量的值时，这种关系确保成立。其时，$|(\psi_{a'},\psi_b)|^2\propto|\psi_b(a')|^2$，所以，态函数 $\psi_b(a')$ 正是在量子数 $b$ 所确定的状态中发现量子数为 $a'$ 的状态的概率幅。

### b) 基本假定 II——力学量

(IIa) 力学量规定“在如下的意义上力学量是由具有完备本征函数系的线性厄米算符表示的：力学量所取的值只限于作为其数学表示的算符的本征值中的某一个。当力学量取确定值时，力学系处于由本征值的本征函数所表示的状态。”

从这一规定的立场出发，力学量算符的本征值会自然而然地被用来作为确定状态的量子数。反之，倘若注重 (Ia)，则当能以确定状态的量子数为 $a$, $b$, $c$, $\cdots$时，就应该承认，以该量子数作为各自的本征值的力学量算符 $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$, $\cdots$是存在的。总之，量子数为 $a$ 的状态就是力学量 $\hat{A}$ 取确定值 $a$ 的状态。而且，所谓 $a$ 表象则是按力学量算符 $\hat{A}$ 的本征函数系展开的表象。

现在，设各算符的本征值方程为 $\hat{A}u_a = au_a$、$\hat{B}v_b = bv_b$、$\cdots$。这时状态 $v_b$ 的 $a$ 表象就是 $\psi_b(a) = (u_a, v_b)$，按照 (IIa) 和 (Ib)，它给出‘在力学量 $\hat{B}$ 所取的值为 $b$ 的状态中测量力学量 $\hat{A}$ 时发现值 $a'$ 的概率幅。而且，根据力学量算符的厄米性，显然，$\psi_{a'}(a) = (u_a, u_{a'}) \propto \delta(a - a')$（或 $\delta_{aa'}$）。用说明 (Ib) 时所出现的两组量子数表征的态函数，就是以这样的形式构成的。再者，从数学上讲 $\psi_b(a)$ 是从 $b$ 表象到 $a$ 表象的变换函数，而 $\psi_b^*(a) = \psi_a(b)$ 是从 $a$ 表象到 $b$ 表象的变换函数。这些请读者自行证明。

IIb) 从经典理论向量子理论过渡的规定“与经典的正则力学变量 $x_\alpha, p_\alpha (\alpha = 1, 2, \cdots, n)$ 相当的量子力学的力学量是用满足下列正则对易关系的线性厄米算符 $\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha (\alpha = 1, 2, \cdots, n)$ 表示的。”即

$$\left.\begin{aligned} &[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta} \\ &[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta] = 0, \ [\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0 \end{aligned}\right\}. \quad (\alpha, \beta = 1, 2, \cdots, n) \quad (3.3.3)$$

这一规定可作如下推广：“假如把泊松括号换成于易子：

$$\{F, G\} \to \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{G}], \quad (3.3.4)$$

则经典的力学量 $F$，$G$ 的关系式就会过渡到量子力学的力学量算符 $\hat{F}, \hat{G}$ 的关系式。”在这里普朗克常数 $\hbar$ 是首次引入的。

通常，力学量都表示成正则力学变量的函数，因此，只要正则力学变量算符 $\hat{x}_\alpha$ 和 $\hat{p}_\alpha$ 的算符特性确定以后，该函数的算符特性自然是确定的。所以，关于过渡的规定仅仅有(3.3.4)式就可以了。不过，在构成算符函数时，有必要运用韦耳法 (3.2.7) 那样的技巧。

当研究微观客体时，往往先按经典理论的模式构成拉格朗日量 $L(x, \dot{x})$，其中 $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$。由此定义正则动量 $P_\alpha = (\partial L/\partial \dot{x}_\alpha)$ $(\alpha = 1, 2, \cdots, n)$，再提供哈密顿量 $H(x_\alpha, p_\alpha) = \sum_\alpha \dot{x}_\alpha p_\alpha - L$ 及其它力学量作为正则力学变量 $x_\alpha$、$p_\alpha$ $(\alpha = 1, 2, \cdots, n)$ 的函数。当正则力学变量通过(3.3.3) 式被量子化而成为算符时，哈密顿量以及各种力学量也就作为正则力学变量的算符函数确定下来。(IIb) 是从经典理论向量子理论过渡的基本假定。

除直角坐标分量外，(3.3.3)式或(3.3.4)式还是以不直接使用为好．而对曲线坐标分量则要仔细注意．

### c） 基本假定 III——时间演变

(IIIa) 薛定谔绘景中的动力学定律“力学系的时间演变是通过服从薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \tag{3.3.5}$$

的态函数$\psi$的时间变化来描述的．”

有关这一规定无需特别说明．态函数应当反映力学系时间演变的全过程，这样的描述方式称为**薛定谔绘景**．在薛定谔绘景中正则力学变量算符 $\hat{x}_\alpha$、$\hat{p}_\alpha(\alpha=1,2,\cdots,n)$ 不随时间而变．一般来说，力学量的期待值 $\langle\hat{F}\rangle=(\psi,\hat{F}\psi)/(\psi,\psi)$ 由于$\psi$随时间变化而与时间有关．

现在，我们从$\psi$中把随时间变化的因素分离出去．为此，可以利用随时间变化的幺正算符 $\hat{U}(t)$ 和初始态函数 $\psi_0$ 而取 $\psi(t)=\hat{U}(t)\psi_0$——参看(3.2.2)式．因而，期待值就能够写成

$$\langle\hat{F}\rangle=\frac{(\psi_0,\hat{F}(t)\psi_0)}{(\psi_0,\psi_0)}. \tag{3.3.6}$$

其中，$\hat{F}(t)$ 这个算符的定义是

$$\hat{F}(t)=\hat{U}^\dagger(t)\hat{F}\hat{U}(t). \tag{3.3.7}$$

按照这种方式，一切时间变化都是通过力学量算符带进来的，而态函数总保持初始值不变．这种方式称为**海森伯绘景**．在海森伯绘景中，动力学定律的建立，必然制约着算符 $\hat{F}(t)$ 的时间变化．若把(3.3.7)式对时间变量 $t$ 微商，利用(3.2.4)式及其厄米共轭式，以及$\hat{H}$与$\hat{U}$(或$\hat{U}^\dagger$)的对易性，就可以得到 $\hat{F}(t)$ 的方程

$$\frac{d\hat{F}(t)}{dt}=\frac{\partial\hat{F}(t)}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t),\hat{H}]. \tag{3.3.8}$$

右边第一项是 $\hat{F}(t)$ 的显含时间的微分．(3.3.8)式叫作**海森伯运动方程**．作为动力学定律的表现方式，海森伯绘景和薛定谔绘景

完全等价。因此，基本假定（IIIa）可用下面的（IIIb）代换。

（IIIb） 海森伯绘景中的动力学定律“力学系的时间演变通过满足森伯运动方程的力学量算符的时间变化来描述。”

我们从（IIIa）出发过渡到了（IIIb），反之，从（IIIb）开始也能得到（IIIa）。作为基本假定，可以取（IIIa）和（IIIb）之中的任一个。

现在，我们来考虑和经典理论的对应关系。在初等力学中，力学系的时间演变通常是用力学量的时间变化描述的。用量子力学的术语来说，也就是采用了与‘海森伯绘景’相当的描述方式，因此，用泊松括号表示的运动方程

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+\{F,H\} \tag{3.3.9}$$

对应于海森伯运动方程(3.3.8)式。(3.3.9)式与(3.3.8)式的对应决非新鲜，实际上这不过是根据基本假定（IIb）引入的广义量子化规则(3.3.4)之一例。因此可以说，在基本假定（IIb）的阶段就已经引进了海森伯运动方程——进而薛定谔方程。按照这个观点洞察量子力学的理论结构，基本假定 III 的提出也就大可不必。但是，如果暂且不提由经典理论过渡到量子理论时的规定，而从量子力学自身理论体系的全新结构出发，则基本假定III当然是必要的。

——此外，在经典力学中也存在着与薛定谔绘景相当的用来描述动力学定律的方式。按照这种方式，先引入相空间分布函数 $f(x,p,t)$，再根据刘维尔（Liouville）方程

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\{f,H\}=0 \tag{3.3.10}$$

来建立运动定律。这时，正则力学变量 $x$、$p$ 被看作与时间无关的独立变量，而力学量 $F(q,p)$ 的平均值 $\langle F\rangle=\iint F(x,p)f(x,p,t)\,dxdp$ 的时间变化则由相空间分布函数 $f$ 给出。

上述基本假定是量子力学理论体系的出发点。这些基本假定对前几节所述的递进内容进行了逻辑性的整理，决没有把量子力

学作为数学意义上的公理体系的意图. 若从数学角度来看，则可以进一步分析基本假定彼此之间的关系及相互的依赖性，从而归纳成更加有条理的形式. 实际上，我们预定在第四章和第十六章程度不同地对此予以说明. 这里所给出的基本假定始终是按物理的观点加以整理的. 除上述基本假定外，尚须引入处理全同多粒子体系的定律，这一部分将放在 §3.5 再谈.

## §3.4 海森伯绘景和矩阵力学

截止上一节，我们几乎一直根据薛定谔绘景来阐述量子力学. 如基本假定 III 所述，海森伯绘景和薛定谔绘景对描述量子力学动力学定律是完全等价的. 特别在场的量子论中，海森伯绘景成为重要的描述方式. 本节简单说明海森伯绘景中的量子力学，与此同时，试图表明第一章所述的海森伯矩阵力学是在量子力学的框架内导出的.

### a) 按能量本征函数系所作的展开

无论在海森伯绘景，还是在薛定谔绘景，与观测直接有关的是期待值 (3.3.6) 或 (3.2.25). 原则上讲，期待值——假设哈密顿算符 $\hat{H}$ 的本征值问题业已解决——可以用 $\hat{H}$ 的本征值 $E_v$ 和本征函数 $u_v$ 来表示，实际上，若按函数系 $\{u_v\}$ 将 $\psi_0$ 及 $\psi$ 展开，则

$$\psi_0 = \sum_v c_v u_v, \quad \psi = \sum_v c_v u_v \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_v t\right),$$

因而，期待值可以写成

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_v \sum_{v'} c_v^* c_{v'} (F)_{vv'} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_v - E_{v'})t\right\}, \tag{3.4.1}$$

其中，

$$(F)_{vv'} = (u_{v'}, \hat{F} u_{v'}). \tag{3.4.2}$$

设态函数已按 $(\psi, \psi) = (\psi_0, \psi_0) = 1$ 归一化，有时也把 $(F)_{vv'}$

写为 $\langle u_v|\hat{F}|u_{v'}\rangle$ 或 $\langle v|\hat{F}|v'\rangle$. 于是,全部 $(F)_{vv'}$ 所构成的矩阵 $(F)$ 就是力学量 $\hat{F}$ 的表现形式之一——矩阵表示. 在这个意义上 $(F)_{vv'}$ 叫作力学量 $\hat{F}$ 的**矩阵元**. 严格地讲,应该叫作在使哈密顿算符 $\hat{H}$ 对角化的表象 (即$H$表象) 中 $\hat{F}$ 的矩阵元 (见本节 c)). 算符 $\hat{F}$ 的性质完全反映在矩阵 $(F)$ 上. 例如, $\hat{F}$ 的厄米性为 $(F)_{v'v}=(u_{v'},\hat{F}u_v)=(\hat{F}u_v,u_{v'})^*=(u_v,\hat{F}u_{v'})^*=(F)^*_{vv'}$, 从而给出矩阵 $(F)$ 的厄米性——因此保证 (3.4.1) 是实数. 矩阵表示也能适用于态函数,如 §3.2c) 所述,全部系数 $c_v=(u_v,\phi_0)$ 是$H$表象的态函数,所以我们引入以 $c_v$ 为分量的一列矢量

$$(\Psi_0)=\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{3.4.3}$$

称之谓态矢. 按照矩阵表示, (3.4.1) 式就可以写成

$$\langle\hat{F}\rangle=(\Psi_0)^\dagger(F(t))(\Psi_0) \tag{3.4.4a}$$

$$=(\Psi(t))^\dagger(F)(\Psi(t)), \tag{3.4.4b}$$

其中, $(F(t))$ 是一个矩阵,其元素为

$$(F(t))_{vv'}=(u_v,\hat{F}(t)u_{v'})=(F)_{vv'}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_v-E_{v'})t\right\}, \tag{3.4.5}$$

而 $(\Psi(t))$ 则是一列矢量,其分量为

$$(\Psi(t))_v=(u_v,\hat{U}(t)\phi_0)=c_v\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_vt\right). \tag{3.4.6}$$

$(\Psi_0)^\dagger$ 及 $(\Psi(t))^\dagger$ 表示一行矢量, 分别是 $(\Psi_0)$ 及 $(\Psi(t))$ 的厄密共轭矩阵. 不用说, (3.4.4a) 式是海森伯绘景的表达式,而 (3.3.4b) 式则是薛定谔绘景的表达式. 若采用$H$表象, 则海森伯绘景中算符的矩阵元 (3.4.5) 及薛定谔绘景中态矢的分量 (3.4.6) 总会随时间简谐地变化. 这一事实与第一章所述的通向矩阵力学的途径密切相关,务必牢记.

### b) 海森伯运动方程

即使尚未求解哈密顿算符的本征值问题，只要明白海森伯绘景中算符 $\hat{F}(t)$ 与时间的关系是已知算符的简单函数，就能求出期待值 $\langle\hat{F}\rangle$. 但是,要了解 $\hat{F}(t)$ 与时间的关系，就必须求解海森伯运动方程 (3.3.8). 这个方程是算符方程，解起来相当麻烦. 海森伯运动方程的具体内容只能通过量子力学的推广应用才会逐渐明了. 这里,我们只讨论它的一般性质.

首先,我们想要指出,算符之积的幺正变换等于各算符幺正变换之积. 设算符为 $\hat{A}$、$\hat{B}$、$\cdots$，再通过幺正算符 $\hat{U}$ 进行变换，则有

$$\hat{U}^{\dagger}\hat{A}\hat{B}\cdots\hat{U}=(U^{\dagger}\hat{A}U)(U^{\dagger}\hat{B}U)\cdots.$$

根据 $\hat{U}$ 的幺正性 $\hat{U}U^{\dagger}=1$，这是显而易见的. 因为算符函数 $F(\hat{A},\hat{B},\cdots)$ 通常用 $\hat{A}$、$\hat{B}$、$\cdots$ 的幂级数展开来定义,所以

$$\hat{U}^{\dagger}F(\hat{A},\hat{B},\cdots)\hat{U}=F(\hat{U}^{\dagger}\hat{A}U,\hat{U}^{\dagger}\hat{B}U,\cdots). \tag{3.4.7}$$

若令 $\hat{U}=\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$，则通过该变换就会由薛定谔绘景过渡到海森伯绘景. 因此,作为正则力学变量 $x_\alpha$、$p_\alpha(\alpha=1,2,\cdots,n)$ 的函数,满足关系式

$$\hat{U}^{\dagger}(t)F(\hat{x},\hat{p})\hat{U}(t)=F(\hat{x}(t),\hat{p}(t)). \tag{3.4.8}$$

其中,

$$\hat{x}_\alpha(t)=\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{x}_\alpha\hat{U}(t),\quad \hat{p}_\alpha=\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{p}_\alpha\hat{U}(t)\ (\alpha=1,2,\cdots,n) \tag{3.4.9}$$

是海森伯绘景中的正则力学变量算符.若把 (3.4.8) 式用于正则对易关系 (3.3.3),即可得出海森伯绘景中算符 $\hat{x}_\alpha(t)$ 和 $\hat{p}_\alpha(t)$ 的对易关系

$$\left.\begin{aligned}&[\hat{x}_\alpha(t),\hat{p}_\beta(t)]=i\hbar\delta_{\alpha\beta}\\&[\hat{x}_\alpha(t),\hat{x}_\beta(t)]=0,\ [\hat{p}_\alpha(t),\hat{p}_\beta(t)]=0\end{aligned}\right\}$$
$$(\alpha,\beta=1,2,\cdots,n). \tag{3.4.10}$$

需要注意,进行幺正变换时,算符关系式的形式不变,一方面,因为哈密顿算符 $\hat{H}$ 和作为 $\hat{H}$ 的函数的 $\hat{U}(t)$ 对易，故 $\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{H}\hat{U}(t)=$

$\hat{H}$，从而

$$\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) = H(\hat{x}(t), \hat{p}(t)). \tag{3.4.11}$$

另一方面，可与 $\hat{H}$ 对易的算符 $\hat{F}$ 亦可与 $\hat{U}(t)$ 对易。因此，像(3.4.11)式那样的关系式 $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) = F(\hat{x}(t), \hat{p}(t))$ 一般来说对于可以和 $\hat{H}$ 对易的力学量算符应该是成立的。这一点由 $\hat{F}(t) = \hat{U}^{+}(t)\hat{F}\hat{U}(t) = F(\hat{x}(t), \hat{p}(t))$ 的运动方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{F}(t) = [\hat{F}(t), \hat{H}] = \hat{U}^{+}(t)[\hat{F}, \hat{H}]\hat{U}(t) = 0 \tag{3.4.12}$$

亦可得到证明。其中假定，$\hat{F}$ 中除含正则力学变量外，不显含时间。这时，(3.4.12)式表明，与哈密顿算符 $\hat{H}$ 可对易的算符，其所代表的力学量是运动的恒量。

我们再回到一般力学量的情况。为了把海森伯运动方程(3.3.8)写成具体的算符方程，必须计算右边的对易关系，如果 $\hat{F}$ 和 $\hat{H}$ 表示成正则力学变量 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 的函数，就能利用 (3.4.10) 式和(3.4.11)式进行这项计算。作为简单的例子，我们取只由一个粒子构成的力学系，其哈密顿算符为

$$H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) = \frac{1}{2m} \boldsymbol{p}^2 + V(\boldsymbol{r}). \tag{3.4.13}$$

假设在运动方程 (3.3.8) 中 $\hat{F}(t) = \hat{x}_\alpha(t)$ 或 $\hat{F}(t) = \hat{p}_\alpha(t)$，则

$$\frac{d}{dt} \hat{x}_\alpha(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}_\alpha(t), H(\hat{\boldsymbol{r}}(t), \hat{\boldsymbol{p}}(t)],$$

$$\frac{d}{dt} \hat{p}_\alpha(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_\alpha(t), H(\hat{\boldsymbol{r}}(t), \hat{\boldsymbol{p}}(t)].$$

通过 (3.4.10) 式，不难计算右边的对易关系，第一式的右边为

$$\frac{1}{i\hbar} \left[ \hat{x}_\alpha(t), \frac{1}{2m} \sum_{\beta=1}^{3} \hat{p}_\beta^2(t) \right]$$

$$= -\frac{1}{2i\hbar m} \sum_{\beta=1}^{3} \{[\hat{x}_\alpha(t), \hat{p}_\beta(t)]\hat{p}_\beta(t) + \hat{p}_\beta(t)[\hat{x}_\alpha(t), \hat{p}_\beta(t)]\}$$

$$= \frac{1}{m}\hat{p}_\alpha(t).$$

另一方面，第二式的右边等于 $(i\hbar)^{-1}[\hat{p}_\alpha(t), V(\hat{\boldsymbol{r}}(t))]$，显然，如果利用关系式

$$[\hat{p}_\alpha, (\hat{x}_\beta(t))^n] = -i\hbar n(\hat{x}_\alpha(t))^{n-1}\delta_{\alpha\beta}, \tag{3.4.14}$$

即可得到

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_\alpha(t), V(\hat{\boldsymbol{r}}(t))] = -\left[\frac{\partial V(\boldsymbol{r})}{\partial x_\alpha}\right]_{\boldsymbol{r}=\hat{\boldsymbol{r}}(t)}.$$

这样一来，运动方程就给出了 $\hat{\boldsymbol{r}}(t)$ 和 $\hat{\boldsymbol{p}}(t)$ 的算符方程

$$\left.\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{r}}(t) &= \frac{1}{m}\hat{\boldsymbol{p}}(t)\\ \frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{p}}(t) &= -\left[\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\right]_{\boldsymbol{r}=\hat{\boldsymbol{r}}(t)}\end{aligned}\right\}. \tag{3.4.15}$$

这正是经典力学中的牛顿方程．虽然从表面上看会使人陷入一种错觉，似乎量子力学已消失殆尽，但是，对易关系 (3.4.10) 所给出的算符特性却坚持了量子论的特征．一般来讲，当存在着力学系的经典模式时，与之对应的量子论的力学量算符所满足的运动方程和经典方程形式完全相同．

幺正变换 (3.4.9)（或一般情况下的 (3.3.7)）本身已为求解算符方程 (3.4.15)（或一般情况下的 (3.3.8)）提供了所需的初始条件

$$\hat{x}_\alpha(0) = \hat{x}_{\alpha 0},\ \hat{p}_\alpha(0) = \hat{p}_{\alpha 0}\ (\alpha = 1, 2, \cdots, n), \tag{3.4.16}$$

当然，右边的 $\hat{x}_{\alpha 0}$，$\hat{p}_{\alpha 0}$ 是薛定谔绘景中的算符．

方程 (3.4.15) 的期待值为

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\boldsymbol{r}}\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{\boldsymbol{p}}\rangle,\ \frac{d}{dt}\langle\hat{\boldsymbol{p}}\rangle = -\left\langle\frac{\widehat{\partial V}}{\partial \boldsymbol{r}}\right\rangle, \tag{3.4.17}$$

上式往往叫作厄任费斯托（Ehrenfest）定理．该定理在量子力学建立不久，由于显示出与经典力学的对应关系而引人注目，具有一定的历史意义．

对于哈密顿算符 (2.4.61) 所描述的一维谐振子来说，其运动

方程为

$$\frac{d}{dt}\hat{q}(t)=\frac{1}{m}\hat{p}(t),\quad \frac{d}{dt}\hat{p}(t)=-m\omega^2\hat{q}(t). \tag{3.4.18}$$

在初始条件 $\hat{q}(0)=\hat{q}$，$\hat{p}(0)=\hat{p}$ 下求解，可以得到

$$\left.\begin{aligned}\hat{q}(t)&=\hat{q}\cos\omega t+\hat{p}\frac{1}{m\omega}\sin\omega t\\ \hat{p}(t)&=\hat{p}\cos\omega t-\hat{q}m\omega\sin\omega t\end{aligned}\right\}. \tag{3.4.19}$$

因此，$\hat{q}(t)$ 和 $\hat{p}(t)$ 或期待值 $\langle\hat{q}(t)\rangle$ 和 $\langle\hat{p}(t)\rangle$ 表现出和经典的情况完全相同的时间依赖性，谐振子的运动方程是线性的，所以从表面上显示不出量子力学和经典力学的差异[1]。在算符方程的解中能直接体现量子论效应的，是非简谐力作用的情况。即使对谐振子来说，量子论效应亦未消失净尽，而是通过位置坐标分布和动量分布之中的测不准关系体现出来。

### c） 矩阵表示的量子力学——矩阵力学

最后，我们研究一下与海森伯绘景密切相关的矩阵表示。现在，假定给出完备正交归一系 $\{v_\rho\}$。具体写出 $v_\rho$ 时，采用任何表象均可，为方便起见，我们使用 $a$ 表象。当然，函数系 $\{v_\rho(a)\}$ 具有如下性质：

$$(v_\rho, v_{\rho'})=\delta_{\rho\rho'},\quad \sum_{\rho'}v_{\rho'}(a)v^*_{\rho'}(a')=\frac{1}{\rho(a)}\delta(a-a'). \tag{3.4.20}$$

其中，$\delta_{\rho\rho'}$ 是对应于 $n$ 个指标 $\rho$ 和 $\rho'$ 的 $n$ 维克朗内克符号，$\sum_{\rho'}$ 是 $n$ 重求和，$\delta(a-a')$ 是 $n$ 维 $\delta$ 函数，$\rho(a)$ 是在 $R_a$ 空间中点 $a$ 附近的微小体积 $da$ 所具有的权，内积是由（3.3.1）式定义的。取该函数系为基准系，就会形成态函数及力学量算符的矩阵表示。对态函数来说，这一点是清楚的：若把展开式

---

1）对于没有外力作用的自由粒子来说，情况相同，请读者自行思考。

$$\psi = \sum_{\rho} c_\rho v_\rho; \quad c_\rho = (v_\rho, \psi) \tag{3.4.21}$$

的系数 $c_\rho$ 集合起来，构成 (3.4.3) 式那样的一列矢量 $(\Psi)$，则它就是态函数的矩阵表示。由于 $\{v_\rho\}$ 构成完备系，所以，为了建立力学量算符 $\hat{F}$ 的矩阵表示，只要了解它对元素 $v_\rho$ 的作用就足够了。也就是说，如果把 (3.4.20) 第二式乘以 $\rho(a')\hat{F}v_\rho(a')$，并对 $a'$ 积分而得到 $\hat{F}v_\rho$ 的展开式

$$\hat{F}v_\rho = \sum_{\rho'} v_{\rho'}(F)_{\rho'\rho}; \ (F)_{\rho'\rho} = (v_{\rho'}, \hat{F}v_\rho), \tag{3.4.22}$$

因而确实可以说，以展开系数 $(F)_{\rho'\rho}$ 为元素的矩阵 $(F)$ 就是算符 $\hat{F}$ 的矩阵表示。由于 $\hat{F}$ 对一般态函数的作用是

$$\hat{F}\psi = \sum_{\rho'} v_{\rho'} \left\{ \sum_{\rho} (F)_{\rho'\rho} c_\rho \right\}, \tag{3.4.23}$$

所以它就可以表示成矩阵 $(F)$ 与一列矢量 $(\Psi)$ 的积 $(F)(\Psi)$。因为表示算符 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 之和、差及 $c$ 数倍的算符 $\alpha\hat{F} + \beta\hat{G}$ ($\alpha$ 和 $\beta$ 是任意常数) 对 $v_\rho$ 的作用为

$$(\alpha\hat{F} + \beta\hat{G})v_\rho = \sum_{\rho'} v_{\rho'} \{\alpha(F)_{\rho'\rho} + \beta(G)_{\rho'\rho}\}, \tag{3.4.24}$$

所以，以右边的展开系数为元素的矩阵 $\alpha(F) + \beta(G)$ 就是它的矩阵表示。另外，对乘积 $\hat{F}\hat{G}$ 来说，

$$\hat{F}\hat{G}v_\rho = \sum_{\rho''} \hat{F}v_{\rho''}(G)_{\rho''\rho} = \sum_{\rho'} v_{\rho'} \left\{ \sum_{\rho''} (F)_{\rho'\rho}(G)_{\rho''\rho} \right\}$$

$$= \sum_{\rho'} v_{\rho'}((F)(G))_{\rho'\rho}, \tag{3.4.25}$$

因而矩阵积 $(F)(G)$ 是 $\hat{F}\hat{G}$ 的矩阵表示。此外，算符的厄米性及幺正性反映在表示矩阵的厄米性及幺正性上，而逆算符则用逆矩阵表示。归纳起来，应有如下的对应关系：

$$\psi \longleftrightarrow (\Psi), \ \hat{F} \longleftrightarrow (F), \ \hat{F}\psi \longleftrightarrow (F)(\Psi),$$
$$\alpha\hat{F} + \beta\hat{G} \longleftrightarrow \alpha(F) + \beta(G),$$
$$\hat{F}\hat{G} \longleftrightarrow (F)(G), \ \hat{F}^{-1} \longleftrightarrow (F)^{-1}, \cdots$$

这样一来，一切关系式都用矩阵表示来表现。

我们想再加上两三点补充说明。截止目前，作为基准系而选择的函数系 $\{v_\rho\}$ 完全是任意的，现在我们设想 $\{v_\rho\}$ 是力学量算符 $\hat{F}$ 的本征函数，即

$$\hat{F}v_\rho = \lambda_\rho v_\rho. \tag{3.4.26}$$

这时，算符 $\hat{F}$ 的矩阵元为

$$(F)_{\rho'\rho} = (v_{\rho'}, \hat{F}v_\rho) = \lambda_\rho \delta_{\rho'\rho}, \tag{3.4.27}$$

而力学量 $\hat{F}$ 则用对角矩阵 $(\lambda_\rho v_{\rho'\rho})$ 表示。正是这些性质所致，由 $\hat{F}$ 的本征函数系构成的表象，即 $F$ 表象才被称之谓‘力学量 $\hat{F}$ 的对角化表象’。

到现在为止，为了使矩阵表示显而易见，函数 $v_\rho$ 的指标 $\rho$ 取不连续值。即使在 $\rho$ 取连续值的情况下，矩阵的形式本身也完全相同。但是，需要设法将 (3.4.20) 式中的克朗内克符号 $\delta_{\rho\rho'}$ 换成 $n$ 维 $\delta$ 函数 $\delta(\rho - \rho')$，求和 $\sum_{\rho'}$ 换成积分 $\int d\rho'$。这时，矩阵积 $(F)(G)$ 的 $(\rho'\rho)$ 元素应该是

$$(F)(G)_{\rho'\rho} = \int d\rho''(F)_{\rho'\rho''}(G)_{\rho''\rho}. \tag{3.4.28}$$

作为一个具体的例子，我们考虑由一个粒子构成的力学系。在以力学量 $\boldsymbol{r}$ 的本征函数系 $\{\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})\}$ 为基准系的 $\boldsymbol{r}$ 表象中，矩阵元是

$$\left.\begin{aligned}
&(\boldsymbol{r})_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''} = (\chi_{\boldsymbol{r}'}, \hat{\boldsymbol{r}}(\chi_{\boldsymbol{r}''}) = \boldsymbol{r}'\delta^3(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}'') \\
&(\boldsymbol{p})_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''} = (\chi_{\boldsymbol{r}'}, \hat{\boldsymbol{p}}\chi_{\boldsymbol{r}''}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}'}\delta^3(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}'') \\
&(H)_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''} = (\chi_{\boldsymbol{r}'}, \hat{H}\chi_{\boldsymbol{r}''}) = H\left(\boldsymbol{r}', \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}'}\right)\delta^3(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}'') \\
&\cdots\cdots
\end{aligned}\right\}. \tag{3.4.29}$$

因此，若把 $\psi(\boldsymbol{r}') = (\Psi)_{\boldsymbol{r}'}$ 看成列矢量 $(\Psi)$ 的第 $\boldsymbol{r}'$ 个分量，则有

$$\left.\begin{aligned}
((\boldsymbol{r})\,(\Psi))_{\boldsymbol{r}'} &= \int d^3\boldsymbol{r}''(\boldsymbol{r})_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''}(\Psi)_{\boldsymbol{r}''} = \boldsymbol{r}'\phi(\boldsymbol{r}') \\
((\boldsymbol{p})\,(\Psi))_{\boldsymbol{r}'} &= \int d^3\boldsymbol{r}''(\boldsymbol{p})_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''}(\Psi)_{\boldsymbol{r}''} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\phi(\boldsymbol{r}')}{\partial\boldsymbol{r}'} \\
((H)\,(\Psi))_{\boldsymbol{r}'} &= \int d^3\boldsymbol{r}''(H)_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''}(\Psi)_{\boldsymbol{r}''} = H\left(\boldsymbol{r}', \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}'}\right)\phi(\boldsymbol{r}')
\end{aligned}\right\}.$$

……

(3.4.30)

也就是说，甚至普通乘法及微分运算都能表示成矩阵形式.对 $\boldsymbol{p}$ 表象来说，同样有

$$\left.\begin{aligned}
(\boldsymbol{r})_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}''} &= (\phi_{\boldsymbol{p}'}, \hat{\boldsymbol{r}}\phi_{\boldsymbol{p}''}) = i\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}'}\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'') \\
(\boldsymbol{p})_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}''} &= (\phi_{\boldsymbol{p}'}, \hat{\boldsymbol{p}}\phi_{\boldsymbol{p}''}) = \boldsymbol{p}'\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'') \\
&\cdots\cdots
\end{aligned}\right\}. \quad (3.4.31)$$

这样一来，量子力学的整个理论体系显然都可以利用矩阵表示来描述. 实际上，薛定谔方程 (3.3.5) 就能写成

$$i\hbar\frac{d}{dt}(\Psi) = (H)(\Psi). \quad (3.4.32)$$

若用 $\{v_\rho\}$ 为基准系，则 $(\Psi)$ 是以 $c_\rho = (v_\rho, \psi)$ 为分量的一列矢量，而 $(H)$ 这个矩阵的元素是

$$(H)_{\rho'\rho} = (v_{\rho'}, \hat{H}v_\rho). \quad (3.4.33)$$

此外，正则对易关系 (3.3.3) 照样过渡成矩阵积的对易关系，即

$$\left.\begin{aligned}
(x_\alpha)\,(p_\beta) - (p_\beta)\,(x_\alpha) &= i\hbar\,\delta_{\alpha\beta} \\
(x_\alpha)\,(x_\beta) - (x_\beta)\,(x_\alpha) &= 0 \\
(p_\alpha)\,(p_\beta) - (p_\beta)\,(p_\alpha) &= 0
\end{aligned}\right\}. \quad (\alpha, \beta = 1, 2, \cdots, n)$$

(3.4.34)

而海森伯运动方程 (3.3.8) 也能换成同样形式的矩阵方程

$$i\hbar\frac{d}{dt}(F) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(F) + (F)(H) - (H)(F).$$

(3.4.35)

采用矩阵表示，反映力学系时间演变的，在薛定谔绘景中是态矢

$(\psi)$，而在海森伯绘景中则是力学量矩阵 （例如 $(F)$）随时间的变化。

这样，当用矩阵表示来描述全部理论时，若选用海森伯绘景，就能在表面上放弃态矢 $(\psi)$，而只用力学量矩阵来构成量子力学。下面我们看一下这个事实。首先，在期待值 (3.3.6) 中选择 $\phi_0 = v_\rho$。这样作决不会丧失一般性。其原因在于，函数系 $\{v_\rho\}$ 的取法是完全任意的，必然能构成以初始态函数为元素的函数系。这时，期待值 (3.3.6) 为

$$(\hat{F}) = (F(t))_{\rho\rho}, \tag{3.4.36}$$

它等于海森伯绘景中力学量矩阵 $(F(t))$ 的第 $\rho$ 个对角元素。因此，知道了矩阵 $(F(t))$ 随时间的变化，问题就会迎刃而解。于是，全部问题则归结为求解海森伯运动方程 (3.4.35)（或原来的 (3.3.8)）。

另一方面，根据概率解释的规定，‘在状态 $\phi$ 中发现状态 $\varphi$’的概率等于 $|(\varphi, \phi)|^2/(\varphi, \varphi)(\phi, \phi)$，实际上，该式也能写成期待值的形式。首先，对状态 $\varphi$ 的**投影算符** $\hat{P}_\varphi$ 是按照任意函数 $\phi$ 的下列算符式定义的：

$$\hat{P}_\varphi \phi = \frac{(\varphi, \phi)}{(\varphi, \varphi)} \varphi. \tag{3.4.37}$$

对单粒子来说，在 $r$ 表象中矩阵元是

$$(P_\varphi)_{r'r''} = (\chi_{r'}, \hat{P}_\varphi \chi_{r''}) = \frac{\varphi(r')\varphi^*(r'')}{(\varphi, \varphi)}. \tag{3.4.38}$$

在一般情况下为

$$(P_\varphi)_{\rho'\rho''} = (v_{\rho'}, \hat{P}_\varphi v_{\rho''}) = \frac{c_{\rho'} c^*_{\rho''}}{(\varphi, \varphi)}, \tag{3.4.39}$$

而 $c_\rho = (v_\rho, \varphi)$ 正是用 $\{v_\rho\}$ 把 $\varphi$ 展开时的系数。根据定义，

$$\hat{P}_\varphi \varphi = \varphi, \tag{3.4.40}$$

所以，

$$\hat{P}^2_\varphi \phi = \hat{P}_\varphi \phi \text{ 或 } \hat{P}^2_\varphi = \hat{P}_\varphi, \tag{3.4.41}$$

显然 $\hat{P}_\varphi$ 确实具有投影算符的特性，若使用 $\hat{P}_\varphi$，则‘在状态 $\phi$ 中发

现态 $\varphi'$ 的概率就可以写成

$$\langle \hat{P}_\varphi \rangle = \frac{(\psi, \hat{P}_\varphi \psi)}{(\psi, \psi)}. \tag{3.4.42}$$

这正是期待值的形式。当然，按照这个观点，可以设法构成公理论，从而以期待值公式为出发点，使概率解释和力学量的规定统一起来。

进而，在(3.4.42)式中我们考虑力学系的时间演变，令 $\psi = \hat{U}(t)\psi_0$，则

$$\langle \hat{P}_\varphi \rangle = \frac{(\psi_0, \hat{P}_\varphi(t)\psi_0)}{(\psi_0, \psi_0)}, \tag{3.4.43}$$

它给出了 $\psi_0 \to \varphi$ 这一跃迁的跃迁概率——请参看(3.1.5)式.不用说，$\hat{P}_\varphi(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{P}_\varphi\hat{U}(t)$. 若在其中选择 $\psi_0 = v_\rho$，则

$$\langle \hat{P}_\varphi \rangle = (P_\varphi(t))_{\rho\rho}, \tag{3.4.44}$$

从而跃迁概率也由矩阵 $(P_\varphi(t))$ 的第 $\rho$ 个对角元素给出. 以上事实表明，仅仅用力学量矩阵就可以构成量子力学. 这样的公式化体系特地称为**矩阵力学**，我们以波动力学为线索得到了量子力学，并在其框架内引出了矩阵力学. 另一方面，海森伯依照第一章所述的思路独辟蹊径，与波动力学并行不悖地开创了矩阵力学，进而建立起量子力学[1]. 从表面上看，波动力学和矩阵力学截然不同，现在却统一于量子力学这个更广泛的理论体系之中。

——我们用力学量术语重新描述一下投影算符 $\hat{P}_\varphi$. 设状态 $\varphi$ 为力学量 $\hat{F}$ 的第 $\rho'$ 个本征态，写成 $\hat{P}_\varphi = \hat{P}_{\rho'}$，则 $\langle \hat{P}_{\rho'} \rangle$ 就是‘在状态 $\psi$ 中测量力学量 $\hat{F}$ 时得到第 $\rho'$ 个本征值 $\lambda_{\rho'}$’ 的概率. 设 $\hat{F}$ 某一部分本征值的集合为 $\Delta_F$，则

$$\hat{P}(\hat{F}; \Delta_F) = \sum_{\lambda_\rho \in \Delta_F} \hat{P}_\rho \tag{3.4.45}$$

再次成为投影算符，而 $\langle \hat{P}(\hat{F}; \Delta_F) \rangle$ 给出了‘在状态 $\psi$ 中测量时，力学量 $\hat{F}$ 取 $\Delta_F$ 以内的值’的概率. 不难证明，由于

$$\hat{P}_\rho \hat{P}_{\rho'} = \hat{P}_\rho \delta_{\rho\rho'}, \tag{3.4.46}$$

---

1) 在历史上，海森伯的矩阵力学并未合理地推导出跃迁概率.

从而保证了（3.4.45）式的投影算符性 $\hat{P}^2 = \hat{P}$. 不言而喻，上述结论也可推广到本征值取连续值的情况.

在矩阵力学中，作为理论的起点给出了正则力学变量的矩阵 $(x_\alpha)$、$(p_\alpha)$ $(\alpha = 1, 2, \cdots, n)$. 不用说，各矩阵元 $(x_\alpha)_{\nu\nu'}$、$(p_\alpha)_{\nu\nu'}(\alpha = 1, 2, \cdots, n)$ 的选择必须满足正则对易关系(3.4.34). 一旦给出正则力学变量的矩阵，就能根据 $(F) = F((x), (p))$ 求出一般力学量 $F(\hat{x}, \hat{p})$ 的矩阵. 但是，这样所得到的矩阵元到底是在使哪个力学量对角化的表象，一般来讲并不清楚. 为了利用矩阵元来讲述物理，有必要确定表象. 因此，我们考虑采用 $F$ 表象，也就是使特定的力学量 $F(\hat{x}, \hat{p})$ 对角化的表象，若选择 $\hat{F}$ 为哈密顿算符，也就同时解决了时间演变的问题. 因为矩阵 $(F) = F((x), (p))$ 是厄米矩阵，所以借助于采用适当的幺正矩阵 $(Q)$ 的幺正变换

$$(\bar{F}) = (Q)^\dagger (F)\ (Q), \tag{3.4.47}$$

就能构成对角矩阵 $(\bar{F})$. $(\bar{F})$ 的对角元素是力学量算符 $\hat{F}$ 的本征值 $\lambda_\rho$. 因此，可以写成

$$(\bar{F}) = \lambda_\rho \delta_{\rho\rho'}, \tag{3.4.48a}$$

$$(F)_{\nu\nu'} = \sum_\rho (Q)_{\nu\rho} \lambda_\rho (Q)^\dagger_{\rho\nu'}. \tag{3.4.48b}$$

为了找出幺正矩阵 $(Q)$，如代数学所讲，可以通过求解矩阵 $(F)$ 的本征值问题，得到归一化的本征矢 $(v_\rho)$，再将其分量排列而构成 $(Q)_{\nu\rho} = (v_\rho)_\nu$[1]. 若已知矩阵 $(Q)$，则可求出 $F$ 表象中正则力学变量的矩阵元为

$$\left.\begin{aligned} (\bar{x}_\alpha)_{\rho\rho'} &= \sum_\nu \sum_{\nu'} (Q)^\dagger_{\rho\nu} (x_\alpha)_{\nu\nu'} (Q)_{\nu'\rho'} \\ (\bar{p}_\alpha)_{\rho\rho'} &= \sum_\nu \sum_{\nu'} (Q)^\dagger_{\rho\nu} (p_\alpha)_{\nu\nu'} (Q)_{\nu'\rho'} \end{aligned}\right\}. \tag{3.4.49}$$

---

1）对单粒子来说，如用坐标表象，则 (3.4.48b) 成为

$$F\left(r, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}\right)\delta^3(r - r') = \sum_\rho v_\rho(r)\lambda_\rho v^*_\rho(r').$$

此式值得一记. 其中 $v_\rho(r)$ 是算符 $F(r, (\hbar/i)(\partial/\partial r))$ 的本征函数.

但是用代数的方法来求解本征值问题一般是相当困难的。仅限于解决为数极少的几个问题。在下一节，作为它的一个重要例子，我们打算处理谐振子的能量本征值问题。角动量的本征值问题亦可求解，准备放在 §5.2 中予以说明。

## § 3.5 谐振子 II

一维谐振子的能量本征值问题已在 §2.4e) 中求解过了，在此我们将用代数的方法来处理它。当然，哈密顿算符是按 (2.4.61) 式给出的。

该问题中的时间演变业已解出，其解为 (3.4.19)式。现在，假如把这个解的三角函数以指数函数表示出来，则会得到关系式

$$\hat{p}(t)\pm im\omega\hat{q}(t)=(\hat{p}\pm im\omega\hat{q})\exp(\pm i\omega t).$$

另外，如果适当选择系数来定义算符

$$\hat{A}=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{p}-im\omega\hat{q}), \tag{3.5.1}$$

则海森伯绘景中算符 $\hat{A}(t)=\exp(i\hat{H}t/\hbar)\,\hat{A}\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ 随时间的变化应当是

$$\hat{A}(t)=\hat{A}\exp(-i\omega t). \tag{3.5.2}$$

不言而喻，对 $\hat{A}$ 的厄米共轭算符 $\hat{A}^{\dagger}=(2m\hbar\omega)^{-1/2}\quad(\hat{p}+im\omega\hat{q})$ 来说，$\hat{A}^{\dagger}(t)=\exp(i\hat{H}t/\hbar)\,\hat{A}^{\dagger}\exp(-i\hat{H}t/\hbar)=\hat{A}^{\dagger}\exp(i\omega t)$。如果反过来用 $\hat{A}$ 表示正则力学变量，则有

$$\hat{q}=i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{A}-\hat{A}^{\dagger}),\quad \hat{p}=\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{A}+\hat{A}^{\dagger}). \tag{3.5.3}$$

### a) 能量本征值问题

算符 $\hat{A}$ 在谐振子的能量本征值问题中起着极其重要的作用。首先，我们把正则对易关系所给出的算符关系式

$$(\hat{p}\pm im\omega\hat{q})(\hat{p}\mp im\omega\hat{q})=\hat{p}^2+m^2\omega^2\hat{q}^2\pm im\omega[\hat{q},\hat{p}]$$

$$= \hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{q}^2 \mp m\hbar\omega$$

加以整理而归纳成

$$\hat{A}^\dagger\hat{A} = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2}, \tag{3.5.4a}$$

$$\hat{A}\hat{A}^\dagger = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2}. \tag{3.5.4b}$$

由此可以直接得到

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{A}^\dagger\hat{A} + \frac{1}{2}\right) \tag{3.5.5}$$

及对易关系

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 1. \tag{3.5.6}$$

进而，使用 (3.5.5) 式和 (3.5.6) 式可以证明对易关系[1)]

$$[\hat{A}, \hat{H}] = \hbar\omega\hat{A}, \tag{3.5.7a}$$

$$[\hat{A}^\dagger, \hat{H}] = -\hbar\omega\hat{A}^\dagger. \tag{3.5.7b}$$

显然，(3.5.7a) 式和 (3.5.7b) 式互为厄米共轭的关系。

我们应当求解的本征值方程是

$$\hat{H}u = Eu. \tag{3.5.8}$$

$u$ 是 $\hat{H}$ 属于本征值 $E$ 的本征函数，我们让 (3.5.7) 式的两边作用到这个 $u$ 上。利用 (3.5.8) 式可将结果归纳成

$$\hat{H}(\hat{A}u) = (E - \hbar\omega)(\hat{A}u), \tag{3.5.9a}$$

$$\hat{H}(\hat{A}^\dagger u) = (E + \hbar\omega)(\hat{A}^\dagger u). \tag{3.5.9b}$$

因此，$\hat{A}u$ 和 $\hat{A}^\dagger u$ 分别是 $\hat{H}$ 属于本征值 $(E - \hbar\omega)$ 及 $(E + \hbar\omega)$ 的本征函数。让 $\hat{A}$ 或 $\hat{A}^\dagger$ 对 $u$ 作用 $n$ 次，得到 $\hat{A}^n u$ 或 $\hat{A}^{\dagger n}u$，它们则是属于本征值 $(E \mp n\hbar\omega)$ 的本征函数，从而，假如 $E$ 是本征值，则 $E + n\hbar\omega(n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$ 也是本征值。但是，本征值存在着下限，如果对 (3.5.4a) 式两边作出与本征函数 $u$ 相应的

---

1) 使用这个对易关系，$\hat{A}(t)$ 的海森伯运动方程变为

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = -i\omega\hat{A}(t).$$

由此可直接求出 (3.5.2) 式，对 $\hat{A}^\dagger(t)$ 亦然。

期待值，则 $\|\hat{A}u\|^2 = (\hat{A}u, \hat{A}u) = (u, \hat{A}^\dagger \hat{A}u)$ 不会为负，这一数学结论将给出不等式

$$\left(E - \frac{1}{2}\hbar\omega\right) = \hbar\omega(u, \hat{A}^\dagger \hat{A}u) = \hbar\omega\|\hat{A}u\|^2 \geqslant 0. \tag{3.5.10}$$

其中，假设已经象 $(u, u) = 1$ 那样归一化了，（因 (3.5.4b) 式给出的条件不如 (3.5.10) 式严格，故可暂不提及.）该不等式表明，最低本征值为

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, \tag{3.5.11}$$

而且最低本征态——基态是由下式给出的：

$$\hat{A}u_0 = 0. \tag{3.5.12}$$

因此，能量本征值必须是

$$E_\nu = \hbar\omega\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \quad (\nu = 0, 1, 2, \cdots). \tag{3.5.13}$$

在以上讨论中，(3.5.12) 式的作用极为重要. 这是因为，不管 $\hat{A}$ 怎样作用在 $u_0$ 上，由于有 (3.5.12) 式，就不会产生能量比 (3.5.11) 还低的本征函数. 它说明 (3.5.13) 是唯一的解，倘若除 (3.5.13) 以外还有能量本征值 $E'$，那么利用 (3.5.9) 式进行讨论，$E' + n\hbar\omega$ $(n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$ 也是本征值，但是，因为属于它们的本征函数均不满足 (3.5.12) 式，所以，应当存在比 $E_0 = (1/2)\hbar\omega$ 还低的能量本征态，从而与不等式 (3.5.10) 矛盾. 因此，除(3.5.13) 以外不会有本征值，当然，这是 §2.4e) 中求出的(2.4.67)式的再现.

其次，我们来求属于本征值 $E_\nu$ 的本征函数 $u_\nu$ 的一般形式. 根据 (3.5.9) 式可以设

$$u_{\nu-1} = C\hat{A}u_\nu,$$

$$u_{\nu+1} = C\hat{A}^\dagger u_\nu.$$

系数 $C$、$C'$ 是由归一化条件 $(u_{\nu\mp1}, u_{\nu\mp1}) = (u_\nu, u_\nu) = 1$ 决定的，为此，可以使用 (3.5.4) 式、(3.5.8) 式及 (3.5.13) 式. 也就是

说，因为

$$(u_{v-1},\ u_{v-1}) = |C|^2(u_v,\ \hat{A}^\dagger\hat{A}u_v) = |C|^2 v,$$

$$(u_{v+1},\ u_{v+1}) = |C'|^2(u_v,\ \hat{A}\hat{A}^\dagger u_v) = |C'|^2(v+1),$$

所以，最好是假设

$$|C| = \frac{1}{\sqrt{v}},$$

$$|C'| = \frac{1}{\sqrt{v+1}}.$$

(归一化条件只决定绝对值，常数相位待定)。这样一来，就会得到递推公式

$$\hat{A}u_v = \sqrt{v}\,u_{v-1},\quad \hat{A}^\dagger u_v = \sqrt{v+1}\,u_{v+1}. \tag{3.5.14}$$

若把第二式改写一下，则有

$$u_v = \frac{1}{\sqrt{v}}\hat{A}^\dagger u_{v-1} = \frac{1}{\sqrt{v!}}\hat{A}^{\dagger v}u_0. \tag{3.5.15}$$

这是由最低本征态 $u_0$ 求第 $v$ 个本征态的公式。给出最低本征态 $u_0$ 的公式是 (3.5.12)，在坐标表象中它可以写成

$$\frac{du_0(q)}{dq} + \frac{m\omega}{\hbar}qu_0(q) = 0. \tag{3.5.16}$$

这是一个简单的微分方程，所以，直接求解就能得到 (2.4.72a) 式。除去应由归一化条件决定的常数因子外，$u_0(q)$ 是唯一确定的。因此，(3.5.15) 给出的 $u_v$ 也是唯一确定的，对指定的序号 $v$ 来说，只存在一个 $u_v$。这说明能量本征值 $E_v$ 不会简并。如果把第 $v$ 个本征函数在坐标表象中表示出来，则有

$$u_v(q) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\frac{1}{\sqrt{v!}}\left(\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right)^v \times (\hat{p} + im\omega q)^v \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right). \tag{3.5.17a}$$

其中，$\hat{p} = (\hbar/i)(d/dq)$。需要指出，除常数相位外上式与(2.4.63)式是一致的。为此，可以使用算符恒等式 (3.2.12)，如果在 (3.2.12)

式中令 $\hat{A}=\eta q^2, \hat{B}=\hat{p}$，则 $[\hat{A},\hat{B}]=2i\hbar\eta q$，$[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]=0$，…，所以

$$\exp(\eta q^2)\hat{p}\exp(-\eta q^2)=\hat{p}+2i\hbar\eta q.$$

因此，假设 $\eta=-(m\omega/2\hbar)$，则可得到

$$\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)(\hat{p}+im\omega q)^v\exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)=\hat{p}^v.$$

这样，(3.5.17a) 式变为

$$\begin{aligned}u_v(q)=&\sqrt{\frac{1}{2^v v!}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\frac{1}{\sqrt{(m\hbar\omega)^v}}\exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)\\&\times\left\{\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)(\hat{p}+im\omega q)^v\exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)\right\}\\&\times\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}q^2\right)\\=&i^v\sqrt{\frac{1}{2^v v!}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)\left[(-1)^v\exp(\xi^2)\frac{d^v}{d\xi^v}\right.\\&\left.\times\exp(-\xi^2)\right]_{\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q}.\end{aligned}\tag{3.5.17b}$$

除常数相位因子 $i^v=\exp(iv\pi/2)$ 外，(3.5.17b) 式确实就是 (2.4.63) 式。由于 $|i^v|=1$，所以该常数相位因子对期待值和跃迁概率等具有物理效果的量没有任何影响，不过对非对角矩阵元来说却呈现出 $(F)_{vv'}=i^{v'-v}(F)_{vv'}$ 的形式。$(F)_{vv'}$ 是由(2.4.63)式的本征函数系构成的矩阵元。

然而，假如所求的只是 $H$ 表象中力学量算符的矩阵元，就没有特殊必要使用本征函数的具体形式 (3.5.17)。以 (3.5.14) 式为前提，可以简单地求出正则力学变量的矩阵元。首先，根据 (3.5.14) 式算出算符 $\hat{A}$ 及 $\hat{A}^\dagger$ 的矩阵元是

$$\left.\begin{aligned}(\hat{A})_{vv'}&=(u_v,\hat{A}u_{v'})=\sqrt{v'}\,(u_v,u_{v'-1})=\sqrt{v+1}\,\delta_{v,v'-1}\\(\hat{A}^\dagger)_{vv'}&=(u_v,\hat{A}^\dagger u_{v'})=\sqrt{v'+1}\,(u_v,u_{v'+1})\\&=\sqrt{v}\,\delta_{v,v+1}\end{aligned}\right\},$$

(3.5.18)

所以，根据(3.5.3)式能够得到

$$\left.\begin{aligned}(q)_{vv'} &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\sqrt{v+1}\,\delta_{v,v'-1}-\sqrt{v}\,\delta_{v,v'+1}\right\}\\ (p)_{vv'} &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left\{\sqrt{v+1}\,\delta_{v,v'-1}+\sqrt{v}\,\delta_{v,v'+1}\right\}\end{aligned}\right\}. \tag{3.5.19}$$

在这个基础上就可以计算其它力学量算符的矩阵元来。当然，哈密顿算符 $\hat{H}$ 的矩阵元只有对角分量

$$(H)_{vv'} = \hbar\omega\left(v+\frac{1}{2}\right)\delta_{vv'}. \tag{3.5.20}$$

假如在这里算符或矩阵的定义是

$$\hat{N} = \hat{A}^{\dagger}\hat{A} \quad 或 \quad (N)_{vv'} = v\delta_{vv'}, \tag{3.5.21}$$

则 $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N}+1/2)$，所以 $\hat{H}$ 的对角化问题实际上就是 $\hat{N}$ 的对角化问题。而 $\hat{N}$ 恰好是与激发态的序号相对应的算符。如第一章所述，电磁波(及自由场)与无限多个谐振子的集合是等价的，使其量子化之后，各谐振子就代表具有特定运动方式的‘场量子’(对电磁场来说，也就是光子)。那时，算符 $\hat{N}$ 表示处于特定运动方式之中的‘场量子’的个数。因此，$\hat{A}$ 就是使一个场量子湮没的算符，而 $\hat{A}^{\dagger}$ 则是使一个场量子产生的算符。详细的讨论将放在第十章“场的量子论”。这种采用算符 $\hat{A}$ 及 $\hat{A}^{\dagger}$ 的方法，对于处理基本粒子理论及物性论之类的多粒子体系是必不可少的手段。线性谐振子的能量本征值问题，即定态问题，到此告一段落，最后我们具体写出 $N$ 的对角化表象中各算符的矩阵

$$(A) = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix},$$

$$(A)^{\dagger}=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0 & \cdots\\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots\\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix},$$

$$(q)=i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{bmatrix}0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots\\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots\\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix},$$

$$(p)=\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\begin{bmatrix}0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots\\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots\\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix},$$

$$(N)=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0 & \cdots\\ 0 & 1 & 0 & \cdots\\ 0 & 0 & 2 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix}.$$

至于由此来讨论矩阵元 $(q^2)_{\nu\nu'}$ 及 $(p^2)_{\nu\nu'}$，我们想请读者自己完成.对角元素 $(q^2)_{\nu\nu}=(\hbar/2m\omega)(2\nu+1)$ 及 $(p^2)_{\nu\nu}=(m\hbar\omega/2)(2\nu+1)$ 将分别给出第 $\nu$ 个本征态中位置和动量的偏差的平方.

### b) 波包的运动

下面我们来研究波包的运动. 业已指出，在任意的波包状态 $\psi_0(q)$ 中位置和动量的期待值，即平均位置和平均动量 $\langle\hat{q}(t)\rangle$、$\langle\hat{p}(t)\rangle$，其变化和经典谐振子完全相同. 那时，初始平均位置 $\langle\hat{q}\rangle$ 及初始平均动量 $\langle\hat{p}\rangle$ 起着初始条件的作用. 现在我们设想 $\langle\hat{q}\rangle=Q$、$\langle\hat{p}\rangle=0$ 的情况，即初速度为零、初始波包的中心位于 $Q$

处的情况，此时 (3.4.19) 式给出

$$\langle \hat{q}(t) \rangle = Q \cos \omega t, \quad \langle \hat{p}(t) \rangle = -m\omega Q \sin \omega t, \qquad (3.5.22)$$

这说明波包的平均位置以原点为中心进行谐振，其振幅为 $Q$，频率为 $(\omega/2\pi)$. 截止目前经常出现的都是这种情况. 我们打算研究一下，不仅是中心而且波包作为一个整体也在进行同样谐振的情况是否存在. 这类波包宛如经典粒子那样来运动. 也就是说，只有中心位置按 (3.5.22) 式进行振动，而波形并不零乱，因为衡量波形的一个标准是下列偏差：

$$(\Delta q)_t^2 = \langle (\hat{q}(t))^2 \rangle - \langle \hat{q}(t) \rangle^2,$$

$$(\Delta p)_t^2 = \langle (\hat{p}(t))^2 \rangle - \langle \hat{p}(t) \rangle^2,$$

所以要首先求出它们的时间变化. 根据 (3.3.8) 式和 (3.4.19) 式，

$$\frac{d}{dt} (\hat{q}(t))^2 = \frac{1}{i\hbar} \left[ (\hat{q}(t))^2, \ \frac{1}{2m} (\hat{p}(t))^2 \right]$$

$$= \frac{1}{m} \{ \hat{q}(t)\hat{p}(t) + \hat{p}(t)\hat{q}(t) \}$$

$$= \frac{1}{m} \left\{ (\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}) \cos 2\omega t \right.$$

$$\left. + \frac{1}{m\omega} (\hat{p}^2 - m^2\omega^2\hat{q}^2) \sin 2\omega t \right\},$$

$$\frac{d}{dt} (\hat{p}(t))^2 = \frac{1}{i\hbar} \left[ (\hat{p}(t))^2, \ \frac{1}{2} m\omega^2 (\hat{q}(t))^2 \right]$$

$$= -m^2\omega^2 \frac{d}{dt} (\hat{q}(t))^2,$$

因此偏差的时间微分可以写成

$$\frac{d}{dt} (\Delta q)_t^2 = \frac{1}{m} \langle \hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q} \rangle \cos 2\omega t$$

$$+ \frac{1}{m^2\omega} \{ (\Delta p)^2 - m^2\omega^2 (\Delta q)^2 \} \cdot \sin 2\omega t.$$

右边第一项的期待值因 $\langle p \rangle = 0$ 而等于 $\langle (\hat{q} - Q)\hat{p} + \hat{p}(\hat{q} - Q) \rangle$，如果进而应用 $\psi_0 = |\psi_0| \exp(i \arg \psi_0)$，则有

$$\langle \hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q} \rangle = 2\hbar \int_{-\infty}^{\infty} (q - Q) |\psi_0(q)|^2 \frac{d}{dq} (\arg \psi_0(q)) dq.$$

此处所谈，仅限于 $|\psi_0(q)|^2$ 和 $(d/dq)\arg\psi_0(q)$ 同为 $(q - Q)$ 的偶函数的情况。若考虑的是 $q$ 空间中的波包，则该限制就不会那么严格。在这种情况下，因 $\langle \hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q} \rangle = 0$，故可得出

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\Delta q)_t^2 &= -m^2\omega^2 \frac{d}{dt} (\Delta p)_t^2 \\ &= \frac{1}{m^2\omega} \{(\Delta p)^2 - m^2\omega^2 (\Delta q)^2\} \sin 2\omega t. \end{aligned} \tag{3.5.23}$$

所以，$(\Delta q)_t^2$ 在初始值 $(\Delta q)^2$ 和 $(m\omega)^{-2}(\Delta p)^2$ 之间振荡，假若初始偏差满足

$$(\Delta p)^2 = m^2\omega^2 (\Delta q)^2, \tag{3.5.24}$$

那么，随着时间的流逝，偏差 $(\Delta q)_t^2$ 及 $(\Delta p)_t^2$ 依然保持初始值不变。(3.5.24) 式相当严格地限制了 $\psi_0(q)$ 的函数形式。但是，一般来说，只给出平均值和偏差并不能完全确定函数形式。为了具体地进行讨论，有必要把函数形式选择的范围缩得更小一些。现在，我们所求的是象经典粒子那样运动的波包，而用不确定关系来衡量，最接近于经典粒子的波包是在 §3.2d) 中所描述的极小波包。因此，我们选 $\psi_0(q)$ 为一维极小波包。确定了平均值和偏差，就能完全确定极小波包。由于对极小波包来说 $\Delta p \Delta q = (\hbar/2)$，因而条件 (3.5.24) 要求偏差是 $(\Delta q)^2 = (\hbar/2m\omega)$，$(\Delta p)^2 = (m\hbar\omega/2)$。这说明 $\psi_0$ 应与基态本征函数 $u_0$ 具有相同的函数形式。因此，以

$$\psi_0(q) = u_0(q - Q) = \exp(-iQ\hat{p}/\hbar) u_0(q) \tag{3.5.25}$$

为初始状态的波包与经典谐振子的运动相同(其中 $\exp(-iQ\hat{p}/\hbar) = \exp[-Q(d/dq)]$ 是将 $q$ 换为 $q - Q$ 的位移算符——参看 (3.2.9))。这一结论也能从 (3.5.25) 式中直接看出。也就是说，

$$\psi(q, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) u_0(q - Q)$$

$$= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Q\hat{p}\right)$$

$$\times \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)u_0(q)$$

$$= \exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}Q\hat{p}(-t)\right]u_0(q)$$

$$= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar\omega}{2}t - \frac{1}{4}m\omega Q^2\sin 2\omega t\right.\right.$$

$$\left.\left. + m\omega qQ\sin\omega t\right)\right]\cdot u_0(q - Q\cos\omega t).$$

(3.5.26)

其中，对 $\hat{p}(-t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)\hat{p}\exp(i\hat{H}t) = \hat{p}\cos\omega t + m\omega\hat{q}\sin\omega t$ 使用了 (3.4.19) 式，并且援引了 $[\hat{B}, \hat{A}] = c$ 数时的公式

$$\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp\left(\frac{1}{2}[\hat{B}, \hat{A}]\right)\exp(\hat{A})\exp(\hat{B}).$$

(3.5.27)[1)]

显然，$|\psi(q, t)|^2 = |u_0(q - Q\cos\omega t)^2$ 表示经典运动.

——我们再对进行经典运动的波包（3.5.25）稍加说明. 因为基态本征函数满足条件 $\hat{A}u_0(q) = 0$（参看(3.5.12)式），所以波包函数 $u_0(q - Q) = \exp(-iQ\hat{p}/\hbar)u_0(q)$ 一定满足

---

1）证明如下：假设 $\exp[\lambda(\hat{A} + \hat{B})] = \hat{U}(\lambda)\exp(\lambda\hat{B})$，则 $\hat{U}(\lambda) = \exp[\lambda(\hat{A} + \hat{B})]\exp(-\lambda\hat{B})$，而且 $\hat{U}(\lambda)$ 满足方程

$$\frac{d\hat{U}(\lambda)}{d\lambda} = \hat{U}(\lambda)\hat{A}(\lambda).$$

其中

$$\hat{A}(\lambda) = \exp(\lambda\hat{B})\hat{A}\exp(-\lambda\hat{B}) = \hat{A} + \lambda[\hat{B}, \hat{A}] + \frac{\lambda^2}{2!}[\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \cdots,$$

因为解是 $\hat{U}(\lambda) = \exp\left[\int_0^\lambda \hat{A}(\lambda')d\lambda'\right]$，故可得出公式

$$\exp[\lambda(\hat{A} + \hat{B})] = \exp\left(\lambda\hat{A} + \frac{\lambda^2}{2!}[\hat{B}, \hat{A}] + \frac{\lambda^3}{3!}[\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \cdots\right)$$

$$\times \exp(\lambda\hat{B})$$

当 $[\hat{B}, \hat{A}] = c$ 数时，取 $\lambda = 1$ 该式变成 (3.5.27) 式.

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Q\hat{p}\right)\hat{A}\exp\left(\frac{i}{\hbar}Q\hat{p}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Q\hat{p}\right)u_0(q)$$

$$=\left[\hat{A}+i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}Q\right]u_0(q-Q)=0.$$

也就是说,波包函数 $u_0(q-Q)$ 是算符 $\hat{A}$ 的本征函数. 需要指出,这是极小波包 (3.2.31) 本身的一般性质. 如果在 (3.2.28) 式中令 $\hat{F}=\hat{x}_a$, $\hat{G}=\hat{p}_a$, 进而定义出算符

$$\hat{a}_a=\frac{\hat{p}_a}{2(\Delta p_a)}-i\frac{\hat{x}_a}{2(\Delta x_a)}, \tag{3.5.28}$$

再使用极小的不确定关系 $(\Delta x_a)(\Delta p_a)=(\hbar/2)$, 则 (3.2.28) 式就能改写成

$$\hat{a}_a\psi_0=\zeta_a\psi_0;\quad \zeta_a=\langle\hat{a}_a\rangle=\frac{\langle\hat{p}_a\rangle}{2(\Delta p_a)}-i\frac{\langle\hat{x}_a\rangle}{2(\Delta x_a)}. \tag{3.5.29}$$

因为算符 $\hat{a}_a$ 满足对易关系 $[\hat{a}_\alpha,\hat{a}_\beta^\dagger]=\delta_{\alpha\beta}$, 而且对 $\hat{N}=\sum_\beta\hat{a}_\beta^\dagger\hat{a}_\beta$ 来说, $[\hat{a}_\alpha,\hat{N}]=\hat{a}_\alpha$, $[\hat{a}_\alpha^\dagger,\hat{N}]=-\hat{a}_\alpha^\dagger$, 所以,可以称 $\hat{N}$ 为**粒子数算符**, $\hat{a}_\alpha$ 为**湮没算符**, $\hat{a}_\alpha^\dagger$ 为**产生算符**. 因此, (3.5.29) 式说明极小波包是湮没算符 $\hat{a}_\alpha$ 属于本征值 $\zeta_\alpha$ 的本征函数[1]. 因为算符 $\hat{a}_\alpha$ 不具有厄米性, 所以一般来说本征值 $\zeta_\alpha$ 取复数值.

最后,我们来求在坐标表象中时间演变算符的矩阵元 $(t>t')$

$$\langle q,t|q',t'\rangle=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t')\right]\delta(q-q'), \tag{3.5.30}$$

因为它是与初始条件 $\langle q,t'|q',t'\rangle=\delta(q-q')$ 对应的波函数,所以也就是时刻 $t'$ 位于 $q'$ 的粒子在以后的时刻 $t$ 在 $q$ 处被发现的概率幅. 因此, 根据 '叠加原理', 初始分布为 $\psi_0(q)$ 的波函数 $\psi(q,t)$ 可以写成

$$\psi(q,t)=\int\langle q,t|q',t'\rangle\psi_0(q')\,dq', \tag{3.5.31}$$

这在数学上亦显而易见, 因此, $\langle q,t|q',t'\rangle$ 是根据时刻 $t'$ 的状态确定时刻 $t$ 的状态的时间演变的变换函数. 按照 $\hat{H}$ 的归一化本

---

1) 往往把湮没算符的本征态称为**相干态**, 它是振子的极小波包. 在场的量子论和量子光学中相干态起着重要的作用.

征函数系 $\{u_\nu\}$，该变换函数能够展开成

$$\langle q, t|q', t'\rangle = \sum_\nu u_\nu(q)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_\nu(t-t')\right]u_\nu^*(q'). \tag{3.5.32}$$

以上的结论对一般情况也是适用的。在一维谐振子的情况下，对 $E_\nu$ 来说，可以使用(3.5.13)式，而对 $u_\nu$ 来说，可以使用(3.5.17b)式。即

$$\begin{aligned}\langle q,t|q',t'\rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\exp\left[-\frac{i}{2}\omega\Delta t+\frac{\xi^2+\xi'^2}{2}\right]\\ &\quad\times\left\{\sum_\nu\frac{1}{\nu!}\left[\exp(-i\omega\Delta t)\frac{\hat{D}\hat{D}'}{2}\right]^\nu\right\}\\ &\quad\times\exp[-(\xi^2+\xi'^2)]\\ &= \sqrt{\frac{m\omega\tau}{\hbar\pi}}\exp\left[\frac{1}{2}(\xi^2+\xi'^2)\right]\\ &\quad\times\left\{\exp\left(\frac{\tau}{2}\hat{D}\hat{D}'\right)\exp[-(\xi^2+\xi'^2)]\right\}.\end{aligned}$$

其中，$\Delta t = t-t'$，$\tau = \exp(-i\omega\Delta t)$，$\xi = \sqrt{(m\omega/\hbar)}q$，$\xi = \sqrt{(m\omega/\hbar)}q'$，$\hat{D} = (d/d\xi)$，$\hat{D}' = (d/d\xi')$。假如充分发挥位移算符 $\exp(a\hat{D})$的作用 $\xi\to\xi+a$，就不难进行$\{\cdots\}$内的计算：

$$\begin{aligned}\{\cdots\} &= \exp\left[-\left(\xi'+\frac{\tau}{2}\hat{D}\right)^2\right]\exp(-\xi^2)\\ &= \exp(-\xi'^2)\exp\left(-\frac{\tau^2}{4}\hat{D}\right)^2\exp[-(\xi-\tau\xi')^2]\\ &= \exp(-\xi'^2)\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{\tau^2}{4}R^2\right)\\ &\quad\times\exp\left[ik(\xi-\tau\xi')-\frac{1}{4}k^2\right]dk\\ &= \frac{1}{\sqrt{1-\tau^2}}\exp(-\xi'^2)\exp\left[-\frac{(\xi-\tau\xi')^2}{(1-\tau^2)}\right].\end{aligned}$$

这样一来，可以得到

$$\langle q, t | q', t' \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega\Delta t)}} \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega\Delta t)}\right.$$
$$\left.\times [(q^2 + q'^2)\cos(\omega\Delta t) - 2qq']\right\}. \tag{3.5.33}$$

将此式用于(3.5.31)式就能求出对应于任意初始条件的波函数．例如，对于 $\psi_0(q') = u_0(q' - Q)$ 来说，(3.5.31)式和(3.5.33)式会使(3.5.26)式再现，具体的计算请读者自己完成。

## §3.6 多粒子体系

在§3.3中建立的量子力学基本理论体系当然也能适用于多粒子体系。由$N$个粒子构成的力学系，其状态在坐标表象中可以用波函数$\psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(N)}, t)$来描述，它是在 $\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(N)}$ 处发现各个粒子的概率幅。也就是说，$|\psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(N)}, t)|^2 d^3\boldsymbol{r}_{(1)} d^3\boldsymbol{r}_{(2)} \cdots d^3\boldsymbol{r}_{(N)}$ 给出了于时刻 $t$ 在 $\boldsymbol{r}_{(1)}$附近的微小区域 $d^3\boldsymbol{r}_{(1)}$ 中发现第1个粒子、在 $\boldsymbol{r}_{(2)}$ 附近的微小区域 $d^3\boldsymbol{r}_{(2)}$ 中发现第2个粒子……在 $\boldsymbol{r}_{(N)}$ 附近的微小区域 $d^3\boldsymbol{r}_{(N)}$ 中发现第$N$个粒子的概率。一般来说，可以归一化为

$$\int \cdots \int |\psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(N)}, t)|^2 d^3\boldsymbol{r}_{(1)} d^3\boldsymbol{r}_{(2)} \cdots d^3\boldsymbol{r}_{(N)} = 1. \tag{3.6.1}$$

当然，傅里叶变换

$$A(\boldsymbol{p}_{(1)}, \boldsymbol{p}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{p}_{(N)}, t)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^{3N}}} \int \cdots \int \psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(N)}, t)$$
$$\times \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{p}_{(i)} \cdot \boldsymbol{r}_{(i)}\right] d^3\boldsymbol{r}_{(1)} d^3\boldsymbol{r}_{(2)} \cdots d^3\boldsymbol{r}_{(N)}$$

是各个粒子动量为 $\boldsymbol{p}_{(1)}, \boldsymbol{p}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{p}_{(N)}$ 的概率幅。对哈密顿算

符为 $H(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(N)}, \boldsymbol{p}_{(1)}, \boldsymbol{p}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{p}_{(N)})$ 的力学系来说，将其函数中的 $\boldsymbol{p}_{(i)}$ 用 $\hat{\boldsymbol{p}}_{(i)} = (\hbar/i)(\partial/\partial \boldsymbol{r}_{(i)})$ 代替而得出算符$\hat{H}$，则该力学系的时间演变就能通过算符 $\hat{H}$ 的薛定谔方程来描述。这时显然用的是薛定谔绘景和坐标表象。为了变换到海森伯绘景及其它表象，可以按照既定的程序来作。

以上所述，只是把‘基本假定’应用于多粒子体系，并非多粒子体系特有的规律。多粒子体系特有的新规律体现在全同粒子构成的力学系之中。为了简单起见，我们从两个全同粒子构成的力学系入手来探求这些新规律。如果该力学系的状态是用波函数 $\phi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, t)$ 描述的，则第 1 个粒子处于状态 $u_{\nu_1}$，第 2 个粒子处于 $u_{\nu_2}$ 的概率幅为

$$C(\nu_1, \nu_2, t) = \iint u^*_{\nu_1}(\boldsymbol{r}) u^*_{\nu_2}(\boldsymbol{r}') \phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) d^3\boldsymbol{r} d^3\boldsymbol{r}'. \quad (3.6.2)$$

其中 $\{u_\nu(\boldsymbol{r})\}$ 是完备正交归一系。因此，$C(\nu_1, \nu_2, t)$ 不外乎是将 $\phi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, t)$ 用函数系 $\{u_{\nu_1}(\boldsymbol{r}_{(1)}) u_{\nu_2}(\boldsymbol{r}_{(2)})\}$展开时的系数。当以微观全同粒子为研究对象时，不可能标上第 1 个或第 2 个这样的序号来加以区别，只要承认这是‘事实’，就能产生全同粒子体系的新定律。根据这一‘事实’——假如暂时标上了序号——则‘第 1 个粒子处于状态 $u_{\nu_1}$，第 2 个粒子处于状态 $u_{\nu_2}$’的情况同‘第 1 个粒子处于状态 $u_{\nu_2}$，第 2 个粒子处于状态 $u_{\nu_1}$’的情况在原则上是不能加以区别的。因此，$C(\nu_1, \nu_2, t)$ 和 $C(\nu_2, \nu_1 t)$在本质上是发现相同状态的概率幅，所以除绝对值为 1 的常数因子外二者并无差别。也就是说，$C(\nu_1, \nu_2, t) = \varepsilon C(\nu_2, \nu_1, t)$（其中 $|\varepsilon| = 1$）。因为状态序号 $\nu_1, \nu_2$ 的确定是任意的，所以 $C(\nu_2, \nu_1, t) = \varepsilon C(\nu_1, \nu_2, t)$ 也必须成立。因此可以得出 $\varepsilon^2 = 1$，即 $\varepsilon = \pm 1$。这样一来显然下式应该成立：

$$C(\nu_1, \nu_2, t) = \pm C(\nu_2, \nu_1, t). \quad (3.6.3a)$$

利用函数系 $\{u_\nu\}$ 的完备性条件，就能由（3.6.3a）式直接导出

$$\phi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, t) = \pm \phi(\boldsymbol{r}_{(2)}, \boldsymbol{r}_{(1)}, t). \quad (3.6.3b)$$

因为坐标表象的波函数也是一种概率幅，所以这是一个理所当然

的结论。(3.6.3)式是全同粒子体系的新定律。即:

"全同粒子体系的波函数(或概率幅)对于粒子坐标(或确定各粒子状态的量子数)必须是对称的,或反对称的。"

波函数的对称或反对称性,作为粒子的固有性质总是一定的,决不会随着时间的推移而互换。为了了解这一情况,我们引入互换算符 $\hat{P}_{12}$,其定义为

$$\hat{P}_{12}\psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, t) = \psi(\boldsymbol{r}_{(2)}, \boldsymbol{r}_{(1)}, t). \tag{3.6.4}$$

该算符是具有性质 $\hat{P}_{12}^2 = 1$ 的线性厄米算符。因此,其本征值为 $\pm 1$,对称函数全部是 $\hat{P}_{12}$ 属于 $+1$ 的本征函数,而反对称函数全部是 $\hat{P}_{12}$ 属于 $-1$ 的本征函数。此外,显然存在着逆算符,并且 $\hat{P}_{12}^{-1} = \hat{P}_{12}$。而 $\hat{P}_{12}\hat{H}\psi$ 则是将 $\hat{H}\psi$ 中第 1 个粒子变量与第 2 个粒子变量进行交换所得到的函数。另一方面,在 $\hat{P}_{12}\hat{H}\psi = (\hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}^{-1})\cdot(\hat{P}_{12}\psi)$ 中,$\hat{P}_{12}\psi$ 是把 $\psi$ 中的粒子变量交换后得到的函数,所以 $\hat{H}' = \hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}^{-1}$ 是在 $\hat{H}$ 中使粒子变量交换的算符。可是,全同粒子体系的哈密顿算符对于粒子序号应该是对称的——若不对称,则全同粒子就能区别开。因此,$\hat{H} = \hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}^{-1}$ 或 $\hat{P}_{12}\hat{H} = \hat{H}\hat{P}_{12}$ 是成立的,$\hat{H}$ 和 $\hat{P}_{12}$ 可以对易。所以对时间演变 $\psi = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)\psi_0$ 来说,

$$\hat{P}_{12}\psi = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{P}_{12}\psi_0,$$

并且初始时刻波函数的对称性或反对称性 $(\hat{P}_{12}\psi_0 = \pm\psi_0)$ 此后将永远保持不变。这样一来,显然波函数的对称性和反对称性是与粒子种类有关的固有性质。

我们再来研究一下波函数的对称性和反对称性的物理含义。首先考虑反对称的情况。若在概率幅 $C(\nu_1, \nu_2, t)$ 中令 $\nu_1 = \nu_2$,则由反对称性可以立即得到 $C(\nu_1, \nu_1, t) = 0$。因此,反对称波函数所描述的两个全同粒子处于同一个状态 $\nu_1$ 的概率为零。坐标表象中的波函数本身也具有同样的性质 $\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t) = 0$,不能允许两个粒子占有同一位置。另一方面,对于对称波函数所描述的全同粒子来说这种情况不会发生,两个粒子能够同时处于同一状态

或占有同一位置.

为简单起见，我们分析只有两个粒子状态（$a$ 和 $b$）的情况. 因为当反对称时，$C(a, a, t) = C(b, b, t) = 0$，$C(a, b, t) = -C(b, a, t) \neq 0$，所以只能允许有一种状态，即两个粒子之中一个处于状态 $a$，而另一个处于状态 $b$. 因为当对称时，$C(a, b, t) = C(b, a, t) \neq 0$，$C(a, a, t) \neq 0$，$C(b, b, t) \neq 0$，所以可能有三种状态，即两个粒子之中一个处于状态 $a$ 而另一个处于状态 $b$，两个同时处于状态 $a$ 以及两个同时处于状态 $b$. 具有反对称性的粒子和具有对称性的粒子，其总体状况存在着这样明显的差别. 但是，无论哪一种粒子，与可区分的经典粒子相比，总体状况却是截然不同的. 当粒子可区分时，两个粒子之中的一个处于状态 $a$ 而另一个处于状态 $b$ 的状态和把两个粒子交换后的状态必须作为不同的状态区别开来，所以，加上同处于状态 $a$ 的状态及同处于状态 $b$ 的状态，共计会有四种不同的状态出现. 微观粒子的所谓不可区分性反映在波函数的对称性和反对称性上，而且产生经典理论中不可想象的特殊的总体状况.

上述内容，当然不只是两个粒子的特殊性质. 这种独特的总体状况是在许多全同粒子体系中可以见到的一般性质. 全同粒子体系可以分成两类：对于其波函数 $\psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(N)}, t)$ 来说，当交换任意两个粒子坐标 $\boldsymbol{r}_{(i)}$ 和 $\boldsymbol{r}_{(j)}$ 时，一类要改变符号 $\psi(\cdots, \boldsymbol{r}_{(i)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(j)}, \cdots) = -\psi(\cdots, \boldsymbol{r}_{(j)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(i)}, \cdots)$，而另一类却不改变符号 $\psi(\cdots, \boldsymbol{r}_{(i)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(j)}, \cdots) = \psi(\cdots, \boldsymbol{r}_{(j)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(i)}, \cdots)$. 这是与粒子种类有关的固有性质，具有前一种性质的粒子叫**费米粒子**或**费米子**，具有后一种性质的粒子叫**玻色粒子或玻色子**. 对费米子来说，一个状态只能容纳一个粒子，而对玻色子来说，一个状态却可容纳多个粒子. 因此，费米子服从费米-狄拉克统计，玻色子服从玻色-爱因斯坦统计. 电子、质子、中子、$\mu$ 介子、中微子之类的基本粒子以及质量数为奇数的原子核等都是费米子. 这些粒子的自旋角动量所取的值总是普朗克常量 $h$ 的半奇数倍. 作为玻色子的例子，已知的有光子、$\pi$ 介子之类的基本

粒子和质量数为偶数的原子核等。它们的自旋角动量等于 $\hbar$ 的整数倍(关于自旋角动量，请见第五章)。自旋和统计的这种关系只是借助于相对论的场的量子论才首次赋予了合理的解释。在第九章及其它卷中我们将对多粒子体系给予详细的说明。

## §3.7 向经典理论的回归

截止目前，一有机会我们就强调，量子力学是在囊括了经典力学的基础上发展起来的，而且，在可以把普朗克常数 $\hbar$ 看成零的情况下，量子力学则会归结为经典力学。在这个阶段，量子力学的理论体系已粗具规模，有必要把量子力学接近于经典力学的情况以明确的形式规范化。

根据 §3.3 中的基本假定 (IIb) (3.3.4)，我们已经确定了从经典力学向量子力学过渡的方式。也就是把经典力学中的力学量 $F$ 和 $G$ 的泊松括号 $\{F, G\}$ 换成量子力学中的力学量算符的对易子 $(i\hbar)^{-1}[\hat{F}, \hat{G}]$。因此，作为这个过渡的逆过程，如果证明

$$\lim_{\hbar\to 0} \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{G}] = \{F, G\}, \tag{3.7.1}$$

那么，就会从量子力学回归到经典力学。我们先来说明这一点。

为方便起见，我们使用坐标表象。作为位置坐标 $x_1 = x_{(1)}$, $x_2 = y_{(1)}, x_3 = z_{(1)}, \cdots, x_{n-2} = x_{(N)}, x_{n-1} = y_{(N)}, x_n = z_{(N)} (n=3N)$ 及时间 $t$ 的函数，设波函数 $\psi(x_1, x_2, \cdots, x_n, t)$ 为

$$\psi = |\psi| \exp\left(\frac{i}{\hbar} W\right), \tag{3.7.2}$$

而且有必要研究动量算符 $\hat{p}_j = (\hbar/i)(\partial/\partial x_j)$ $(j = 1, 2, \cdots, n)$ 的作用。相位函数 $W$ 当然是实数。如第一章中所见，薛定谔在推导波动方程时，是使经典力学中的作用函数与波动力学中的波函数相位相对应的，联想到这一点，则可预料，根据

$$p_j = \frac{\partial W}{\partial x_j} \quad (j = 1, 2, \cdots, n) \tag{3.7.3}$$

定义的量在 $\hbar \to 0$ 的极限情况下会过渡成经典力学的动量。若考虑 $|\psi|$ 的边界条件，量子力学的动量期待值就是

$$\langle \hat{p}_i \rangle = (\psi, \hat{p}_i, \psi) = \int \cdots \int \left\{ \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial}{\partial x_i} |\psi|^2 + p_i |\psi|^2 \right\} dx_1 \cdots dx_n$$

$$= \int \cdots \int p_i |\psi|^2 dx_1 \cdots dx_n, \quad (j = 1, 2, \cdots n)$$

这是以 $|\psi|^2$ 为权的函数 $p_i$ (3.7.3) 式的平均值。现在，我们考虑量子力学波包进行 §2.1 或 §2.3b) 中所述的 '经典运动' 的情况。这时，以宏观尺度衡量，振幅函数 $|\psi|$ 几乎可以认为是点状分布的，所以上式的右边就能用函数 $p_i$ 在波包中心点上的值近似地表示，该值理应是作为'经典运动'的动量来观测的，另一方面，就微观尺度而论，振幅函数 $|\psi|$ 在远大于德布罗意波长的范围内扩展，而且必须是变化极为缓慢的函数。因此，当进行'经典运动'时，$|\psi|$ 的空间微分应该取极小的值。

根据这种情况，我们来求算符 $\hat{p}_i$ 对波函数 $\psi$ 的作用。通过简单计算，首先可以得出

$$\left.\begin{aligned} (\hat{p}_i - p_i)\psi &= \left(\frac{\hbar}{i}\right) w_i^{(1)} \psi \\ w_i^{(1)} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \log |\psi| \end{aligned}\right\}, \tag{3.7.4a}$$

进而不难推导出

$$\left.\begin{aligned} (\hat{p}_i - p_i)\,(\hat{p}_l - p_l)\psi &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 w_{il}^{(2)} \psi \\ w_{il}^{(2)} &= \frac{\partial w_l^{(1)}}{\partial x_i} + w_i^{(1)} w_l^{(1)} \end{aligned}\right\}. \tag{3.7.4b}$$

一般来说，$n$ 个 $(\hat{p}_i - p_i)$ 型的算符之积为

$$\left.\begin{aligned} (\hat{p}_i - p_i)\,(\hat{p}_l - p_l) \cdots (\hat{p}_r - p_r)\psi &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n w_{il\cdots r}^{(n)} \psi \\ w_{il\cdots r}^{n} &= \frac{\partial w_{l\cdots r}^{(n-1)}}{\partial x_i} + w_i^{1)} w_{l\cdots r}^{(n-1)} \end{aligned}\right\}. \tag{3.7.4c}$$

因为在实现上述‘经典运动’的情况下，$w_j^{(1)}$、$w_{j1}^{(2)}$、$\cdots$ 取极小的值，所以 (3.7.4) 诸式的右边可以忽略不计，这与 $\hbar \to 0$ 时把右边忽略不计是完全等价的，确实给出了回归到经典理论的条件。这时，量子力学的力学量算符 $\hat{p}_i (i = 1, 2, \cdots, n)$ 对波函数的作用，只是乘上 c 数函数 $p_i$ 的运算而已。因此，对动量算符的任意函数来说，

$$F(\hat{p}_1, \hat{p}_2, \cdots)\psi = F(p_1, p_2, \cdots)\psi + O(\hbar). \quad (3.7.5)$$

的确，可以认为 $p_i$ 就是经典动量。

经典的力学量与量子力学的力学量算符的对应是通过韦耳法（见 §3.2 的 (3.2.17)）公式化的。也就是说，如果根据经典的力学量 $F$ 和 $G$ 的傅里叶展开：

$$\left.\begin{aligned} &F(x_1, x_2, \cdots, x_n, p_1, \cdots, p_n) \\ &= \int\cdots\int \tilde{F}(\xi_1, \cdots, \xi_n, \eta_1, \cdots, \eta_n) \\ &\quad \times \exp\left[ i \sum_{l=1}^{n} (\xi_l x_l + \eta_l p_l) \right] d\xi_1 \cdots d\xi_n d\eta_1 \cdots d\eta_n \\ &G(x_1, \cdots, x_n, p_1, \cdots, p_n) \\ &= \int\cdots\int \tilde{G}(\xi'_1, \cdots, \xi'_n, \eta'_1, \cdots, \eta'_n) \\ &\quad \times \exp\left[ i \sum_{l=1}^{n} (\xi'_l x_l + \eta'_l p_l) \right] d\xi'_1 \cdots d\xi'_n d\eta'_1 \cdots d\eta'_n \end{aligned}\right\}, \quad (3.7.6)$$

得到傅里叶分量 $\tilde{F}$ 和 $\tilde{G}$，那么与 $F$ 和 $G$ 相对应的量子力学的力学量算符 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 就定义为

$$\left.\begin{aligned} &\hat{F}(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_n, \hat{p}_1, \cdots, \hat{p}_n) \\ &= \int\cdots\int \tilde{F}(\xi_1, \cdots, \xi_n, \eta_1, \cdots, \eta_n) \\ &\quad \times \exp\left[ i \sum_{l=1}^{n} (\xi_l \hat{x}_l + \eta_l \hat{p}_l) \right] d\xi_1 \cdots d\xi_n d\eta_1 \cdots d\eta_n \\ &\hat{G}(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_n, \hat{p}_1, \cdots, \hat{p}_n) \end{aligned}\right\}. \quad (3.7.7)$$

$$- \int \cdots \int \tilde{G}(\xi'_1, \cdots, \xi'_n, \eta'_1, \cdots, \eta'_n)$$

$$\times \exp\left[ i \sum_{l=1}^{n} (\xi'_l \hat{x}_l + \eta'_l \hat{p}_l) \right] d\xi'_1 \cdots d\xi'_n d\eta'_1 \cdots d\eta'_n \Bigg|$$

因此，我们首先利用（3.7.6）式对经典的泊松括号进行傅里叶展开：

$$\{F, G\} = \sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{\partial F}{\partial x_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial x_i} \right\}$$

$$= \int \cdots \int \tilde{F}(\xi_1, \cdots, \eta_1, \cdots) \tilde{G}(\xi'_1, \cdots, \eta'_1 \cdots)$$

$$\times \sum_{j=1}^{n} (\eta_j \xi'_j - \xi_j \eta'_j)$$

$$\times \exp\left[ i \sum_{l=1}^{n} (\xi_l x_l + \eta_l p_l) \right]$$

$$\times \exp\left[ i \sum_{l=1}^{n} (\xi'_l x_l + \eta'_l p_l) \right]$$

$$\times d\xi_1 \cdots d\eta_1 \cdots d\xi'_1 \cdots d\eta'_1 \cdots . \qquad (3.7.8)$$

其次，再用坐标表象来计算 $(i\hbar)^{-1}[\hat{F}, \hat{G}]\psi$。根据 (3.7.7) 式，

$$\frac{i}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{G}]\psi$$

$$= \int \cdots \int \tilde{F}(\xi_1, \cdots, \eta_1, \cdots) \tilde{G}(\xi'_1, \cdots, \eta'_1, \cdots)$$

$$\times \frac{1}{i\hbar} \left[ \exp\left[ i \sum_{l=1}^{n} (\xi_l x_l + \eta_l \hat{p}_l), \exp\left[ i \sum_{l=1}^{n} (\xi'_l x_l + \eta'_l \hat{p}'_l) \right] \right] \right] \psi$$

$$\times d\xi_1 \cdots d\eta_1 \cdots d\xi'_1 \cdots d\eta'_1 \cdots ,$$

如果利用

$$X_j = \exp\left[ i \sum_{l=1}^{n} (\xi_l x_l + \eta_l \hat{p}_l) \right] x_j$$

$$\times \exp\left[ -i \sum_{l=1}^{n} (\xi_l x_l + \eta_l \hat{p}_l) \right]$$

$$= x_i + \hbar\eta_i,$$

$$\hat{p}_i = \exp\left[\, i \sum_{l=1}^{n} (\xi_l x_l + \eta_l \hat{p}_l) \,\right] \hat{p}_i$$

$$\times \exp\left[-i \sum_{l=1}^{n} (\xi_l x_l + \eta_l \hat{p}_l)\right]$$

$$= \hat{p}_i - \hbar\xi_i,$$

则积分号内指数函数算符的对易子就可以整理成

$$\left\{1 - \exp\left[\, i \sum_{l=1}^{n} (\xi'_l x_l + \eta'_l \hat{p}_l) \,\right]\right.$$

$$\left.\times \exp\left[-i \sum_{l=1}^{n} (\xi'_l X_l + \eta'_l \hat{P}_l)\right]\right\}$$

$$\times \exp\left[\, i \sum_{l=1}^{n} (\xi_l x_l + \eta_l \hat{p}_l) \,\right]$$

$$\times \exp\left[\, i \sum_{l=1}^{n} (\xi'_l x_l + \eta'_l \hat{p}_l) \,\right]$$

$$= \left\{1 - \exp\left[-i\hbar \sum_{l=1}^{n} (\eta_l \xi_l - \xi_l \eta'_l)\right]\right\}$$

$$\times \exp\left[\, i \sum_{l=1}^{n} (\xi_l x_l + \eta_l \hat{p}_l) \,\right]$$

$$\times \exp\left[\, i \sum_{l=1}^{n} (\xi'_l x_l + \eta'_l \hat{p}_l) \,\right].$$

至此并未作任何近似。下面我们把设想中的‘经典运动’过渡到 $\hbar \to 0$ 的极限，这时，

$$\left\{1 - \exp\left[-i\hbar \sum_{l=1}^{n} (\eta_l \xi'_l - \xi_l \eta'_l)\right]\right\}$$

$$= i\hbar \sum_{l=1}^{n} (\eta_l \xi'_l - \xi_l \eta'_l) + O(\hbar^2),$$

因为对描述‘经典运动’的波函数来说，指数函数内的算符 $\hat{p}_l$ 能换

(3.7.5)式那样的 c 数 $p_i$，所以上式的积分的确过渡到 (3.7.8) 式. 即

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{G}]\psi = \{F, G\}\psi + O(\hbar). \tag{3.7.9}$$

这样一来，(3.7.1) 式已被证明.

向经典力学的回归已由 (3.7.1) 式的证明而告结束,但是为了更详细地研究量子力学和经典力学的关系，我们来看一下量子力学的经典描述. 为简单起见,只限于讨论哈密顿算符为

$$H = \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2m_j} p_j^2 + V(x_1, x_2, \cdots, x_n) \tag{3.7.10}$$

的情况. 其中 $m_1 = m_2 = m_3$, $m_4 = m_5 = m_6$, $\cdots$, $m_{n-2} = m_{n-1} = m_n$, 而 $V$ 仅通过位置坐标与时间有关. 那么，由于有 (3.7.2) 式,于是可把薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\sum_{j=1}^{n} \frac{-\hbar^2}{2m_j} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + V\right]\psi \tag{3.7.11}$$

改写成两个实函数 $|\psi|$ 和 $W$ 的方程. 通过简单的计算,(3.7.11) 式能分解成

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{m_j}|\psi|^2 \frac{\partial W}{\partial x_j}\right) = 0, \tag{3.7.12a}$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2m_j}\left(\frac{\partial W}{\partial x_j}\right)^2 + V + \sum_{i=1}^{n} \frac{-\hbar^2}{2m_j} \frac{1}{|\psi|} \frac{\partial^2 |\psi|}{\partial x_j^2} = 0. \tag{3.7.12b}$$

我们来分析此式的内容. 由 $W = (\hbar/2i)\log(\psi/\psi^*)$ 可直接得到

$$\frac{1}{m_j}|\psi|^2 \frac{\partial W}{\partial x_j} = \frac{\hbar}{2im_j}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_j} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x_j}\psi\right) = J_j,$$

因为 $J_j$ 是配位空间（由 $x_1$、$x_2$、$\cdots$、$x_n$ 构成的空间）中的概率流密度,所以（3.7.12a）式正是给出概率守恒定律的连续性方程.

另一方面，(3.7.12b) 式正好表现为经典哈密顿-雅可比偏微分方程的形式

$$\frac{\partial W}{\partial t}+H_Q\left(x_1,\cdots,x_n,\frac{\partial W}{\partial x_1},\cdots,\frac{\partial W}{\partial x_n},t\right)=0. \tag{3.7.13}$$

其中‘哈密顿算符’ $H_Q$ 并非 (3.7.10) 式中的 $H$，而应给它再加上‘量子力学的势’

$$V_Q=\sum_{j=1}^{n}\frac{-\hbar^2}{2m_j}\frac{1}{|\psi|}\frac{\partial^2|\psi|}{\partial x_j^2}. \tag{3.7.14}$$

截止 (3.7.13) 式，‘量子力学’ 只存在于 $V_Q$ 之中，从而几乎以完全类似的形式使经典力学得以复现。在这个意义上也可以把 (3.7.12) 式或 (3.7.13) 式称为量子力学的经典描述.即便如此，量子力学的实质却无任何变化[1)]。

我们再稍微进一步讨论一下经典描述。如果把速度定义为 $dx_j/dt=(p_j/m)$，那么根据 $H_Q$ 的定义，显然将是

$$\frac{dx_j}{dt}=\left(\frac{\partial H_Q}{\partial p_j}\right)\quad(j=1,2,\cdots,n). \tag{3.7.15a}$$

其中，右边的括号是位置坐标、$p_j$ 以外的动量及显含的时间都固定不变时的偏微分。其次，由上述 $p_j$ 的定义 (即 (3.7.3) 式) 和 (3.7.13) 式可以推导出

$$\frac{\partial p_j}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial W}{\partial t}=-\frac{\partial H_Q}{\partial x_j}$$

$$=-\left(\frac{\partial H_Q}{\partial x_j}\right)-\sum_{l=1}^{n}\left(\frac{\partial H_Q}{\partial p_l}\right)\frac{\partial p_l}{\partial x_j}$$

$$=-\left(\frac{\partial H_Q}{\partial x_j}\right)-\sum_{l=1}^{n}\left(\frac{\partial H_Q}{\partial p_l}\right)\frac{\partial p_j}{\partial x_l}.$$

1) 但是，D. 玻姆 (D. Bohm) 以这种描述针锋相对地向本来就是正统的哥本哈根解释提出挑战，从而掀起了场有意义的辩论，遗憾的是，限于篇幅，这个辩论不再涉及。

右边第一项是让动量、$x_i$ 以外的位置坐标及显含的时间都固定下来时的偏微分。利用上式及（3.7.15a）式，可以得到

$$\frac{dp_j}{dt}=\frac{\partial p_j}{\partial t}+\sum_{l=1}^{n}\frac{dx_l}{dt}\frac{\partial p_j}{\partial x_l}=-\left(\frac{\partial H_Q}{\partial x_j}\right)$$

$$(j=1,2,\cdots,n)。\qquad(3.7.15b)$$

(3.7.15)式正是以 $H_Q$ 为哈密顿算符的哈密顿正则方程。此外，把(3.7.15)式改写一下，很容易得出牛顿型的方程

$$m_i\frac{d^2r_{(i)}}{dt^2}=-\frac{\partial}{\partial r_{(i)}}(V+V_Q)\ (i=1,2,\cdots,N)。$$

(3.7.16)

在经典描述中，定态的作用颇具特色。对定态来说，$\partial|\psi|/\partial t=0$，只有在这种情况下‘能量守恒定律’$H_Q=$常量才是成立的。这包含着根据 §2.3a）有关能量和时间的不确定关系应该能够理解的内容。

不用说，‘量子力学’集中地体现在 $V_Q$ 上，但是对进行‘经典运动’的波包来说，$V_Q$ 却可以忽略不计，所以(3.7.13)、(3.7.15)和(3.7.16)各式会退回到经典力学。到此为止，向经典力学的回归已确认无疑。

以向经典力学的回归为基础，就可以进一步推广量子力学的经典近似。也就是说，若把经典哈密顿-雅可比方程的解作为(3.7.2)式中的 $W$，则 $W=\sum_{j=1}^{n}\int p_j dx_j-Et+$常数，故可近似地表示成

$$\psi\propto\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\sum_{j=1}^{n}\int p_j dx_j-Et\right)\right].$$

其中 $p_j$ 是按照(3.7.3)式由哈密顿-雅可比方程的解构成的 $x_1$、$x_2$、$\cdots$、$x_n$ 的函数。这个近似解在 §2.2 中已有所预料。对定态来说经典近似已被详细地研究出来，并冠以 WKB 法而得到广泛应用。在此限于篇幅就不再对以上这些经典近似作更深入的讨论了。

# 第四章　量子力学的基础体系

我们打算从前几章所构成的量子力学的体系之中单单提出大纲来进行分析。在量子力学世界中，状态也好，观测量也好，均被看成是坐标表象或动量表象中的事物，这里所注目的却是各种各样不同表象背后“被表示的事物本身”，所以叙述起来势必要抽象一些。

## § 4.1　右矢空间和左矢空间

我们从复数域 **C** 上的线性空间 **K** 谈起。**K** 中的元素记成 $|\varphi\rangle$、$|\phi\rangle$ 等，并称之谓右矢，而左矢以后会逐渐清楚，这些记号的采用是为了以数学术语来描述量子力学体系的状态。

但是，所谓复数域 **C** 上的线性空间 **K** 到底是什么呢？按照 H. 韦耳的说法，它就是这样的集合 **K**，即对于任意两个元素 $|\varphi\rangle$、$|\phi\rangle \in \mathbf{K}$ 来说，包含着称之为和的第三个元素 $|\varphi\rangle + |\phi\rangle$，而对于任意的复数 $\alpha \in \mathbf{C}$ 和任意的 $|\varphi\rangle \in \mathbf{K}$ 来说，则包含着称之为 c 数倍的 $\alpha|\varphi\rangle$，并且就和与 c 数倍而言，服从以下运算规则。当然，和的存在及该运算规则表达了量子力学中重要的叠加原理。

关于和　当 $|\varphi\rangle, |\phi\rangle, \cdots \in \mathbf{K}$ 时

1. $|\varphi\rangle + |\phi\rangle = |\phi\rangle + |\varphi\rangle$.（交换律）
2. $\{|\varphi\rangle + |\phi\rangle\} + |\chi\rangle = |\varphi\rangle + \{|\phi\rangle + |\chi\rangle\}$.（结合律）
3. 对任意的 $|\varphi\rangle, |\phi\rangle$ 来说，有一个满足 $|\phi\rangle + |\chi\rangle = |\varphi\rangle$ 的元素 $|\chi\rangle$，而且只有一个。（可能相减）

关于 c 数倍　设 $\alpha, \beta, \cdots \in \mathbf{C}$，则

4. $(\alpha + \beta)|\phi\rangle = \alpha|\phi\rangle + \beta|\phi\rangle$.（第一分配律）

5. $\alpha\{\beta|\phi\rangle\} = (\alpha\beta)|\phi\rangle$. （结合律）

6. $1|\phi\rangle = |\phi\rangle$.

7. $\alpha\{|\varphi\rangle + |\psi\rangle\} = \alpha|\varphi\rangle + \alpha|\psi\rangle$. （第二分配律）

根据上面的规则3，可以说对任意的$\psi$存在着使 $|\psi\rangle + \mathbf{0} = |\psi\rangle$ 成立的零元素 $\mathbf{0} \in \mathbf{K}$，如果取$\mathbf{C}$的零元素0，并在规则4中设$\beta = 0$，则可知道$0|\psi\rangle = \mathbf{0}$. 因此，即使用相同的字母0表示$\mathbf{K}$的零元素和$\mathbf{C}$的零元素也不会发生混乱. 假如进一步在规则4中令$\alpha = -\beta = 1$，则 $|\psi\rangle + (-1)(\psi\rangle = 0$. 我们把这个 $(-1)|\psi\rangle$ 记成 $-|\psi\rangle$. 于是，规则3中所说的 $|\chi\rangle$ 就可以写成 $|\chi\rangle = |\varphi\rangle - |\psi\rangle$.

考虑一个使该线性空间$\mathbf{K}$的各个元素 $|\chi\rangle$ 与复数相对应的函数$f$，特别当

$$f(\alpha|\chi\rangle + \beta|\chi'\rangle) = \alpha f(|\chi\rangle) + \beta f(|\chi'\rangle)$$

对任意的 $|\chi\rangle, |\chi'\rangle \in \mathbf{K}$

$\alpha, \beta \in \mathbf{C}$

成立时，$f$就叫作$\mathbf{K}$上的线性泛函.

对于$\mathbf{K}$上的线性泛函 $f$、$g$ 及复数$\alpha$来说，和的定义是

$$\{f + g\}(|\chi\rangle) = f(|\chi\rangle) + g(|\chi\rangle), \qquad (4.1.1)$$

c 数倍的定义是

$$\{\alpha f\}(|\chi\rangle) = \alpha\{f(|\chi\rangle)\}. \qquad (4.1.2)$$

它们同时也是线性泛函，因此，在上述意义上，$\mathbf{K}$上的全部线性泛函构成$\mathbf{C}$上的线性空间. 这一点请读者加以证明. 习惯上把该$\mathbf{K}$上的全部线性泛函所构成的线性空间称为$\mathbf{K}$的共轭空间，并记成$\mathbf{K}^*$.

在此，我们按照狄拉克的作法提出一个假定：

假定1 假定$\mathbf{K}$的元素和$\mathbf{K}^*$的元素之间是一一对应的，该对应指的是，若$|\psi\rangle$与$f_\psi$对应，$|\varphi\rangle$与$f_\varphi$对应，则$\alpha|\psi\rangle = \beta|\varphi\rangle$就与$\alpha^* f_\psi = \beta^* f_\varphi$对应. 因此，$\mathbf{K}^*$也是$\mathbf{C}$上的线性空间，所以$f_\psi$叫作$|\psi\rangle$的共轭矢量.

当空间$\mathbf{K}$具体给定后，就能够在数学上来确定这个假定是否

成立．例如，若 **K** 满足希尔伯特空间的公理——仅限于具有某种连续性的线性泛函——则可证明该假定成立(里斯(Riesz)表示定理)．但是，假如空间 **K** 是在实数轴上可以无限多次微分、并在无限远处比 $x$ 的任何逆幂衰减得都快的函数的整体，那么当仍然要求具有某种连续性时，**K*** 作为超函数的整体显然包含远远多于 **K** 的元素．因此，在这种情况下上述假定不复成立．

狄拉克原来的假定把 $|\psi\rangle$ 的共轭 $f_\psi$ 写成 $\langle\psi|$，而且

$$f_\psi(|\chi\rangle) \equiv \langle\psi|\chi\rangle, \tag{4.1.3}$$

这就比较方便一些．难怪要把 **K*** 的元素写成$\langle\psi|$、$\langle\varphi|$、$\cdots$等等，它们叫作左矢，或左矢．狄拉克恢谐地把左矢$\langle\psi|$和右矢$|\chi\rangle$所决定的 c 数 $\langle\psi|\chi\rangle$ 称为方括号[1]．因为左矢本来是泛函，所以，假如对 $K$ 上的一切 $|\chi\rangle$ 都能确定各自的 $\langle\psi|\chi\rangle$ 值，则 $\langle\psi|$ 就被唯一确定．根据假定 1 和 (4.1.2) 式，$f_{\alpha|\psi\rangle} = \alpha^* f_{|\psi\rangle}$（其中为慎重起见把 $f_\psi$ 写成 $f_{|\psi\rangle}$)．若采用左矢符号此式写起来就不太容易，但是如把 $\alpha|\psi\rangle$ 的共轭写成 $\{\langle\psi|\alpha\}$，则 $\{\langle\psi|\alpha\} = \alpha^*\langle\psi|$．于是

$$\{\langle\psi|\alpha + \langle\varphi|\beta\}|\chi\rangle = \alpha^*\langle\psi|\chi\rangle + \beta^*\langle\varphi|\chi\rangle, \tag{4.1.4}$$

这种情况表明，“当看成 $|\psi\rangle$ 的函数时，(4.1.3) 式是**反线性**的”．需要注意，如果为了慎重起见，把泛函 $\langle\psi|$ 在 $\alpha|\chi\rangle$ 上所取的值写成 $\langle\psi|\{\alpha|\chi\rangle\}$，则 $\langle\psi|\{\alpha|\chi\rangle\} = \{\langle\psi|\alpha^*\}|\chi\rangle$．

狄拉克进而又提出如下假定．

假定 2　$\langle\psi|x\rangle = \langle x|\psi\rangle^*$．　(4.1.5)

假定 3　$\langle\psi|\psi\rangle \geqslant 0$，等号对应 $\psi = 0$．　(4.1.6)

假定 2 与假定 1 是一致的．实际上根据假定 1，与 $|\eta\rangle = \alpha|\psi\rangle + \beta|\varphi\rangle$ 相对应的是 $\langle\eta| = \alpha^*\langle\psi| + \beta^*\langle\varphi|$，而且

$$\langle\eta|\chi\rangle = \alpha^*\langle\psi|\chi\rangle + \beta^*\langle\varphi|\chi\rangle,$$

它正是 $\langle\chi|\eta\rangle$ 的复共轭，与假定 2 相吻合．假定 3 之所以能提出，正是因为由假定 2 得出 $\langle\psi|\psi\rangle =$ 实数．通常写成 $\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} =$

1）木庭二郎曾指出，把左矢和右矢连结在一起的 c，在俄语中有 with 的含义．它也可以看成是与 with 相当的拉丁语 cum 的 c．有时也将 $|\psi\rangle$，$\langle\psi|$ 写成 $\psi\rangle$，$\langle\psi$．

$\|\phi\|$，并称其为 $|\phi\rangle$ 及 $\langle\phi|$ 的**模方**．有时为了更详细一些也写成 $\||\phi\rangle\|$ 等．$\|\phi\| = 1$ 的右矢或左矢都是**归一化的**．

根据以上假定，可以证明

$$|\langle\phi|\varphi\rangle| \leqslant \|\phi\| \cdot \|\varphi\| \quad \text{（许瓦茨（Schwarz）不等式）．} \tag{4.1.7}$$

实际上如果把假定 3 用于 $|\eta\rangle = \alpha|\phi\rangle + |\varphi\rangle$，而设

$$|\alpha|^2\|\phi\|^2 + 2\mathrm{Re}\ \alpha\langle\varphi|\phi\rangle + \|\varphi\|^2 \geqslant 0,$$

再取 $\arg\langle\varphi|\phi\rangle = \gamma$ 及实数 $\rho$，并令 $\alpha = \rho e^{-i\gamma}$，则有

$$\rho^2\|\phi\|^2 + 2\rho|\langle\varphi|\phi\rangle| + \|\varphi\|^2 \geqslant 0.$$

这个对 $-\infty < \rho < \infty$ 成立的二次不等式的判别式正是(4.1.7)式．

特别是当非零的 $|\phi\rangle$、$|\varphi\rangle$ 满足关系 $\langle\phi|\varphi\rangle = 0$ 时，则称其为**正交**．对于右矢 $|\chi\rangle$ 来说，由归一化的 $|\phi\rangle$ 所决定的 $|\phi\rangle\langle\phi|\chi\rangle$，叫作$|\chi\rangle$在$|\phi\rangle$方向上的**投影**，显然 $|\chi\rangle - |\phi\rangle\langle\phi|\chi\rangle$ 与 $|\phi\rangle$ 正交．$\langle\phi|\chi\rangle$ 叫作 $|\chi\rangle$ 在 $|\phi\rangle$ 方向上的**分量**．

## §4.2 线性算符

在量子力学中用数学术语来表示力学变量的，是 $\mathbf{K}$ 上的线性算符．

所谓算符是使 $\mathbf{K}$ 的元素与 $\mathbf{K}$ 的元素相对应的函数运算，通过算符 $\hat{A}$ 使 $|\eta\rangle$ 与 $|\chi\rangle$ 相对应，写为 $\hat{A}:|\chi\rangle \longmapsto |\eta\rangle$，或 $\hat{A}|\chi\rangle = |\eta\rangle$．如果两个算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 无论对哪一种 $|\chi\rangle \in \mathbf{K}$ 都同样有对应关系 $\hat{A}|\chi\rangle = \hat{B}|\chi\rangle$，则说它们是相等的，即 $\hat{A} = \hat{B}$，所谓算符 $\hat{A}$ 为线性，指的是对任意的 $|\chi\rangle$，$|\chi'\rangle \in \mathbf{K}$ 和任意的 $\alpha$、$\beta \in \mathbf{C}$ 来说，有

$$\hat{A}\{\alpha|\chi\rangle + \beta|\chi'\rangle\} = \alpha\{\hat{A}|\chi\rangle\} + \beta\{\hat{A}|\chi'\rangle\}.$$

最简单的线性算符是**恒等算符**．它使任意的 $|\chi\rangle \in \mathbf{K}$ 与其自身相对应．通常将它写为 $\hat{1}|\chi\rangle = |\chi\rangle$．其次简单的要算**投影算符** $\hat{P}_\phi$，对归一化的某个给定的右矢 $|\phi\rangle$ 来说，它使 $|\phi\rangle\langle\phi|\chi\rangle$ 与任意的 $|\chi\rangle$ 相对应．若把 $P_\phi$ 写成 $|\phi\rangle\langle\phi|$，则乘以 $|\chi\rangle$ 会

自然得到 $|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle$，这样，这种写法就广为流行。在同样的记法下，$Q_{\varphi\psi} \equiv |\varphi\rangle\langle\psi|$ 也是线性算符。

若把算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 与复数 $\alpha$、$\beta$ 的线性组合定义成

$$\{\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}\}|\chi\rangle = \alpha\{\hat{A}|\chi\rangle\} + \beta\{\hat{B}|\chi\rangle\}, \tag{4.2.1}$$

则该线性组合也是线性算符。若乘积 $\hat{B}\hat{A}$ 的定义是

$$\{\hat{B}\hat{A}\}|\chi\rangle = \hat{B}\{\hat{A}|\chi\rangle\}, \tag{4.2.2}$$

则该乘积 $\hat{B}\hat{A}$ 也是线性算符。但是，对这个乘积来说不能确保交换律成立，而 $\hat{A}$ 也未必具有逆 $\hat{A}^{-1}$，今后会逐渐清楚，通常 $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$。对投影算符 $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$，$P_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ 来说，

$$P_\varphi P_\psi = |\varphi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle\langle\psi| \text{ 和 } P_\psi P_\varphi = |\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle\langle\varphi|$$

已不再相等。特别是

$$P_\psi^2 = P_\psi. \tag{4.2.3}$$

满足 $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ 的两个算符是**可交换**的。有时也称之为对易。

因为 $\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\}$—— 或 $\langle\psi|\hat{A}\chi\rangle$—— 可以看成是使复数 $\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\}$ 与 $|\chi\rangle$ 对应的线性泛函，所以，根据狄拉克假定 1，选取适当的 $\langle\varphi| \in \mathbf{K}^*$，就一定可以写成

$$\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\} = \langle\varphi|\chi\rangle. \tag{4.2.4}$$

由于对任意的 $|\psi\rangle$ 来说，$|\varphi\rangle$ 是唯一确定的，故能以此定义一算符。它称为 $\hat{A}$ 的**共轭算符**，并记作 $\hat{A}^\dagger$。$\hat{A}^\dagger : |\psi\rangle \longmapsto |\varphi\rangle$。该算符是线性的。实际上，当 $|\psi\rangle \longmapsto |\varphi\rangle$，$|\psi'\rangle \longmapsto |\varphi'\rangle$ 时，由

$$\begin{aligned}
&\{\alpha^*\langle\psi| + \beta^*\langle\psi'|\}\{\hat{A}|\chi\rangle\} \\
&= \alpha^*\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\} + \beta^*\langle\psi'|\{\hat{A}|\chi\rangle\} \\
&= \alpha^*\langle\varphi|\chi\rangle + \beta^*\langle\varphi'|\chi\rangle \\
&= \{\alpha^*\langle\varphi| + \beta^*\langle\varphi'|\}|\chi\rangle
\end{aligned}$$

这样的计算可知，与 $\alpha|\psi\rangle + \beta|\psi'\rangle$ 相对应的是 $\alpha|\varphi\rangle + \beta|\varphi'\rangle$。

例如，$Q_{\xi\eta} = |\xi\rangle\langle\eta|$ 的共轭 $Q_{\xi\eta}^\dagger$ 是 $|\eta\rangle\langle\xi|$。实际上，若写出与 (4.2.4) 式相当的公式，则有

$$\langle\psi|\{|\xi\rangle\langle\eta|\chi\rangle\} = \langle\psi|\xi\rangle\langle\eta|\chi\rangle,$$

因而确定了对应关系 $|\psi\rangle \longmapsto \langle\psi|\xi\rangle^*|\eta\rangle$。由于右边等于 $|\eta\rangle\langle\xi|\psi\rangle$，所以该对应关系 $|\psi\rangle \longmapsto |\eta\rangle\langle\xi|\psi\rangle$ 无非是由算符 $|\eta\rangle\langle\xi|$ 引起

的，特别是投影算符 $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ 的共轭就等于其本身。即

$$P_\psi^\dagger = P_\psi \tag{4.2.5}$$

共轭与自身相等的这类线性算符称为**自共轭**，或说成是厄米的[1]。

若把与右矢 $\hat{A}^\dagger|\psi\rangle$ 共轭的左矢写成 $\{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}$ 或 $\langle A^\dagger\psi$，则 (4.2.4) 式就可以写为

$$\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\} = \{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}|\chi\rangle = (\langle\chi|\{\hat{A}^\dagger|\psi\rangle\})^*, \tag{4.2.6}$$

或者 $\langle\psi|\hat{A}\,\psi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\chi\rangle = \langle\chi|\hat{A}^\dagger\psi\rangle^*$。

那么，线性算符 $\alpha\hat{A}$ 的共轭是怎样的呢？采用 (4.2.6) 式中的记法，写出与 (4.2.4) 式相当的表达式，则有

$$\begin{aligned}\langle\psi|\{\alpha\hat{A}|\chi\rangle\} &= \alpha\{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}|\chi\rangle \\ &= \{\langle\psi|(\hat{A}^\dagger\alpha^*)\}|\chi\rangle。\end{aligned}$$

在后一等式中利用了左矢 $\alpha\langle\psi|$ 是右矢 $\alpha^*|\psi\rangle$ 的共轭这样一个关系。根据该结果可知

$$(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger。 \tag{4.2.7}$$

同样，

$$(\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger。 \tag{4.2.8}$$

$$(\hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger。 \tag{4.2.9}$$

由此可知 $\hat{A}^\dagger\hat{A}$ 是自共轭的。而对任意的 $\psi\in\mathbf{K}$ 来说，$\langle\psi|\{\hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi\rangle\} = \{\langle\psi|\hat{A}\}\{\hat{A}|\psi\rangle\} = \|\hat{A}|\psi\rangle\|^2 \geqslant 0$。一般，对任意的 $\psi\in K$ 来说，满足 $\langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle \geqslant 0$ 的算符 $\hat{B}$ 叫作**正定**算符。

## §4.3 本征值问题

在此我们只考虑自共轭算符。在量子力学中表示力学变量的都是自共轭算符[2]。若算符 $\hat{A}$ 是自共轭的，$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$，则 (4.2.6) 式简单地写成 $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ 并不会产生误解。这个 $\hat{A}$ 既可以看成是对右矢的作用，也可以看成是对左矢的作用。狄拉克符号正是在这个时候才发挥出巨大的效力。

---

1) 严格地讲，二者必须有所区别。见本讲座第四卷《量子力学》(II) §16.3.

2) 反之则不复成立。参照 §4.6 中所述的超选择定则。

### a) 自共轭算符的本征值问题

一般来说，当算符 $\hat{A}$ 给定时，本征值问题就是求解方程

$$\hat{A}|\chi\rangle = a'|\chi\rangle,\ a' \in \mathbf{C}.$$

众所周知，$\hat{A}$ 是方阵，而 $|\chi\rangle$ 为列矢量. 以此类推，由于 $a'$ 是任意复数，该形式的方程只会有 $|\chi\rangle = 0$ 这样的平凡解. 允许有非平凡解的 $a'$ 的值叫做 $\hat{A}$ 的**本征值**. 其时解 $|\chi\rangle$ 称为 $\hat{A}$ 的属于本征值 $a'$ 的**本征矢**，往往也以本征值为标号而写成 $|a'\rangle$. 求解本征值问题 $\hat{A}|\chi\rangle = a'|\chi\rangle$，会同时求出本征值 $a'$ 和本征矢 $|\chi\rangle$. 本征值及本征矢不只限于一个. 有时，多个线性独立的本征矢属于同一个本征值，这样的本征值被称为是**简并**的. 当存在简并时，可以引入附加的标号而把本征矢写为 $|a', v\rangle$

$$\hat{A}|a', v\rangle = a'|a', v\rangle. \tag{4.3.1}$$

自共轭算符的本征值问题具有明显的特征. 首先，本征值 $a'$ 是实数. 其原因在于，根据 (4.3.1) 式，有

$$a'\langle a', v|a', v\rangle = \langle a', v|\hat{A}|a', v\rangle,$$

但因 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$，故由 (4.2.6) 式可知上式右边是实数. 而且，因左边 $\langle a', v|a', v\rangle$ 也是不等于零的实数，故本征值 $a'$ 必须为实数. 其次，属于不同本征值的本征矢相互正交. 也就是说，无论 $v$ 和 $v'$ 是否相同，都有

$$\langle a'', v'|a', v\rangle = 0 \quad \text{当 } a' \neq a'' \text{ 时.} \tag{4.3.2}$$

由于自共轭算符 $\hat{A}$ 既可作用在右矢一侧，又可作用在左矢一侧，因而得到

$$\begin{aligned}\langle a'', v'|\hat{A}|a', v\rangle &= a'\langle a'', v'|a', v\rangle \\ &= a''\langle a'', v'|a', v\rangle,\end{aligned}$$

右边两式相减，正交性即可证明.

投影算符 $\hat{P}$ 是自共轭的. 根据 (4.2.3) 式，当 $\hat{P}$ 有本征矢 $|a', v\rangle$ 时，$\hat{P}^2|a', v\rangle = \hat{P}|a', v\rangle$，故 $a'^2 = a'$. 因此 $a'$ 等于 1 或 0，实际上，如果取任意的右矢 $|\phi\rangle$ 来构成 $\hat{P}|\phi\rangle$ 和 $(1-\hat{P})|\phi\rangle$，则它们——虽然不等于零，但却——分别是属于本征值 1 和 0 的

本征矢。这种不连续的本征值被称之为是**离散的**。也有的算符具有布满实轴某个区间的连续的本征值。算符 $\hat{A}$ 的全部本征值称为 $\hat{A}$ 的**谱**。

自共轭算符的全部本征矢 $\{|a', \nu\rangle\}_{a',\nu}$ 构成**完备系**。这说明仅用 $|a', \nu\rangle$ 足以将 **K** 中任意右矢 $|\psi\rangle$ 展成

$$|\psi\rangle = \int |a', \nu\rangle \alpha(a', \nu) da' d\nu. \tag{4.3.3}$$

其中 $\alpha$ 是展开系数。

现在，为了简单起见，设算符的本征值全部取分立值，而且无论哪一个都不简并，这时展开式 (4.3.3) 就能具体地表示出来。我们将这样的算符记为 $\hat{A}$，本征值记为 $a^{(n)}$，本征矢记为 $|a^{(n)}\rangle$ $(n = 0, 1, \cdots)$。通过适当选取常数而让各个 $|a^n\rangle$ 归一化，就能使

$$\langle a^{(n')} | a^{(n)} \rangle = \delta_{n,n'} \tag{4.3.4}$$

$\delta_{n,n'}$ 是克朗内克 $\delta$ 符号。这种矢量集合 $\{|a^{(n)}\rangle\}_{n=0,1,2,\cdots}$ 构成正交归一系。如果它还是完备的，则构成**完备正交归一系**。展开式 (4.3.3) 可以选成

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n |a^{(n)}\rangle. \tag{4.3.5}$$

假设能做这样的展开，那么在两边乘以 $\langle a^{(m)}|$，并注意到 (4.3.4) 式，则必然有

$$\alpha_m = \langle a^{(m)} | \psi \rangle. \tag{4.3.6}$$

将上式代入 (4.3.5) 式，则

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |a^{(n)}\rangle\langle a^{(n)}|\psi\rangle. \tag{4.3.7}$$

由此可知，

$$\sum_{n=0}^{\infty} |a^{(n)}\rangle\langle a^{(n)}| = 1 \tag{4.3.8}$$

是使正交归一系 $\{|a^{(n)}\rangle\}_{n=0,1,2,\cdots}$ 成为完备的充分而必要的条件。

顺便提一下，算符 $\hat{A}$ 可以表示成

$$\hat{A}=\sum_{n=0}^{\infty}|a^{(n)}\rangle a^{(n)}\langle a^{(n)}|. \tag{4.3.9}$$

这叫做 $\hat{A}$ 的**谱表象**.

当不限于本征矢的集合时，(4.3.8) 式成立，则 $\{|a^{(n)}\rangle\}_{n=0,1,2,\cdots}$ 是完备的. 如果它不是正交系，那么就称之为**超完备系**. 对正交归一系来讲，任意的 $|\psi\rangle\in\mathbf{K}$ 满足

$$\sum_{n=0}^{\infty}|\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2=\langle\psi|\psi\rangle \quad (\text{巴塞瓦等式}),$$

它与 (4.3.8) 式是等价的.

在本征值问题中，有时所要求的不只是对一个自共轭算符，而是对多个自共轭算符 $\hat{A}_1$、$\hat{A}_2$、$\cdots$ 的共同本征矢. 也就是说求

$$\hat{A}_s|a'_1,\ a'_2,\ \cdots,\ a'_h\rangle=a'_s|a'_1,\ a'_2,\ \cdots,\ a'_h\rangle$$
$$(s=1,2,\cdots,h) \tag{4.3.10}$$

中的本征值 $\{a'_s\}_{s=1,2,\cdots,h}$ 和本征矢 $|a'_1,\ a'_2,\ \cdots,\ a'_h\rangle$. 不难证明，假如全部共同本征矢构成完备系，则在所考虑的算符中任何两个都是可对易的:

$$[\hat{A}_r,\ \hat{A}_s]=0 \quad (r,s=1,2,\cdots,h). \tag{4.3.11}$$

这应该是共同本征矢存在的必要条件，但是否是充分条件呢? 当 $\mathbf{K}$ 为有限维空间时可以证明的确如此，这是一个再好不过的练习题. 当 $\mathbf{K}$ 为无限维空间时，在某种意义上回答是肯定的，但是，在本章这种形式的讨论中，我们不打算用“做做看”以外的方法具体地证明所谓“…可能”的命题. 所以准备在本讲座第四卷《量子力学》(II) 中详细介绍数学定义之后再给以正确回答.

### b) 测量值的系综平均，概率解释

上面，已经提供了表达量子力学状态和力学变量的数学术语. 但是，所谓“表达”到底是怎么一回事呢? 其详细解释与观测有关，将放在后面的 §4.6 中再谈. 简而言之，也就是对每个力学变量 $\hat{A}$

存在着测量它的所谓观测程序 $O_A$。对某个处于给定状态 $|\psi\rangle$ 的体系来说，通过 $O_A$ 所得的测量值未必是唯一的，但对处于相同状态的大量体系来说分别通过 $O_A$ 而得到的测量值的平均值（系综平均）却是确定的，而且与 $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ 一致。其中 $|\psi\rangle$ 按 $\langle\psi|\psi\rangle=1$ 归一化。

特别当体系处于 $\hat{A}$ 的某一本征态 $|a'\rangle$（$\langle a'|a'\rangle=1$）时，若进行 $O_A$，则可得到测量值 $a'$，其概率为 1。这是因为，不仅测量值的

平均值为 $\langle a'|\hat{A}|a'\rangle=a'$，　　(4.3.12)

而且在该平均值附近的

起伏为 $\langle a'|(\hat{A}-a')^2|a'\rangle=0$。　　(4.3.13)

对于一般状态 $|\psi\rangle$（$\langle\psi|\psi\rangle=1$）来说，使用 $\hat{A}$ 的本征函数所作的展开式（4.3.8），则会给出测量值的系综平均为

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}|\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2a^{(n)}。\qquad(4.3.14)$$

由此可以看出，“在一个一个的观测操作 $O_A$ 中，测量值通常可取 $\hat{A}$ 的任意一个本征值，在大量体系之中给出 $a^{(n)}$ 的体系的数目，其比例是 $|\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2$.” 前面已经谈过，即使对同一状态进行同一观测 $O_A$，所得的测量值也不会是唯一的，但是，因为

$$\sum_n|\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2=\langle\psi|\psi\rangle=1,$$

所以 $|\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2$ 是在状态 $\psi$ 中得到测量值 $a^{(n)}$ 的概率。

即使选择任意实数 $r$，并用 $e^{ir}|\psi\rangle$ 来代替 $|\psi\rangle$，测量值的系综平均 $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ 也好，测量值的概率 $|\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2$ 也好，都不会发生变化。这说明，除了相位不同外，右矢 $|\psi\rangle$ 与 $e^{ir}|\psi\rangle$ 表示同一状态。把这样的右矢全部同等看待，并称之为**射线**。因此，正确地说，表示物理状态的不是一个个右矢，而必须是射线（参看第八章）。

## §4.4 正则变量

### a) 一个自由度的力学系

为了简单起见，没一个质点沿 $x$ 轴做一维运动，则该体系的力学变量由正则共轭坐标 $\hat{x}$ 和动量 $\hat{p}$ 构成。它们是自共轭算符，满足**正则对易关系**

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar. \tag{4.4.1}$$

其中 $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

根据该对易关系，可以说 $\hat{p}$ 及 $\hat{x}$ 在整个实轴上具有连续谱.为了证明这一点，首先由

$$[\hat{p}^n, \hat{x}] = \hat{p}^{n-1}[\hat{p}, \hat{x}] + \hat{p}^{n-2}[\hat{p}, \hat{x}]\hat{p} + \cdots + [\hat{p}, \hat{x}]p^{n-1}$$

导出

$$[\hat{p}^n, \hat{x}] = -ni\hbar\hat{p}^{(n-1)} \quad (n = 0, 1, 2, \cdots).$$

如果取任意实数 $a$，在上式两边乘以 $(ia/\hbar)^n/n!$ 并从 $n = 0$ 到 $n = \infty$ 求和，则把算符的指数函数定义成

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{i\hat{p}a}{\hbar}\right)^n \equiv e^{i\hat{p}a/\hbar}, \tag{4.4.2}$$

就会得到

$$e^{i\hat{p}a/\hbar}\hat{x} - \hat{x}e^{i\hat{p}a/\hbar} = e^{i\hat{p}a/\hbar}a, \tag{4.4.3}$$

所以

$$e^{i\hat{p}a/\hbar}\hat{x}e^{-i\hat{p}a/\hbar} = \hat{x} + a. \tag{4.4.4}$$

同样，对任意实数 $k$ 来说，

$$e^{ik\hat{x}}\hat{p}e^{-ik\hat{x}} = \hat{p} - \hbar k. \tag{4.4.5}$$

现在我们假设坐标算符 $\hat{x}$ 已有一个本征值 $x'$，

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle,$$

如果考虑到本征矢 $|x'\rangle$ 乘以 $e^{-i\hat{p}a/\hbar}$ 所得的矢量 $|x'\rangle_a \equiv e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle$，则

$$\hat{x}|x'\rangle_a = \hat{x}e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle = e^{-i\hat{p}a/\hbar}(e^{i\hat{p}a/\hbar}\hat{x}e^{-i\hat{p}a/\hbar})|x'\rangle,$$

但根据(4.4.4)式可以把最右边简化成

$$\hat{x}|x'\rangle_a = e^{-i\hat{p}a/\hbar}(x'+a)|x'\rangle$$
$$= (x'+a)|x'\rangle_a.$$

因此，$|x'\rangle_a$ 是 $\hat{x}$ 属于本征值 $x'+a$ 的本征矢：

$$|x'\rangle_a \equiv e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle = |x'+a\rangle. \tag{4.4.6}$$

因这个 $a$ 是任意实数，故算符 $\hat{x}$ 的本征值显然遍及整个实轴[1]。

为推导以上结论，有必要明确 $|x'+a\rangle$ 不是0矢量。把(4.2.7—9)诸式用于(4.4.2)式，可知 $U_a \equiv e^{-i\hat{p}a/\hbar}$ 的共轭算符是 $U_a^* = e^{+i\hat{p}a/\hbar}$，因此 $|x'+a\rangle = e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle$ 的共轭右矢为 $\langle x'+a| = \langle x'|e^{+i\hat{p}a/\hbar}$，所以

$$\langle x''+a|x'+a\rangle = \langle x''|e^{+i\hat{p}a/\hbar}e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle = \langle x''|x'\rangle. \tag{4.4.7}$$

因而 $|x'+a\rangle$ 不是0矢量。不久将会明白特意有区别地写成 $x''$ 和 $x'$ 的理由。此外，像 $U_a$ 那样与其共轭算符之积为 $U_a^*U_a = U_aU_a^* = \hat{1}$ 的算符，称为**幺正算符**。

同样，根据(4.4.5)式可知，动量算符 $\hat{p}$ 的本征值也遍及整个实轴。实际上，假设有一个本征值 $p'$，而将本征矢写成 $|p'\rangle$，则与(4.4.6)式对应，可以得到

$$|p'\rangle_k \equiv e^{ikx'}|p'\rangle = |p'+\hbar k\rangle. \tag{4.4.8}$$

与(4.4.7)式相对应的是

$$\langle p''+\hbar k|p'+\hbar k\rangle = \langle p''|p'\rangle.$$

截止目前，假设 $\hat{x}$ 也好，$\hat{p}$ 也好，本征值都是不简并的，大可不必对本征矢写上节所说的附加角标 $\nu$。这样做是否可以呢？

我们来分析坐标算符 $\hat{x}$，假定它的本征值 $x'$ 有简并，而把本征矢写为 $|x',\nu\rangle$，则根据(4.4.6)式的计算可知，该简并对所有 $-\infty < x' < \infty$ 是共同的。所以如果考虑把 $\nu$ 值相互交换的函数 $\eta(\nu)$，从而构成算符 $\hat{B}_\eta$，使 $|x',\nu\rangle$ 变为 $|x',\eta(\nu)\rangle$，$\eta(\nu) \neq \nu$，那么它虽然不是恒等算符，但却能与算符 $\hat{x}$ 或 $\hat{p}$ 对易。实际上，

$$\hat{x}\hat{B}_\eta|x',\nu\rangle = \hat{x}|x',\eta(\nu)\rangle = x'|x',\eta(\nu)\rangle$$

---

1) 请考虑可否把 $a$ 取为复数？

$$= \hat{B}_\eta \hat{x} | x', \nu\rangle.$$

$$e^{-i\hat{p}a/\hbar}\hat{B}_\eta | x', \nu\rangle = e^{-i\hat{p}a/\hbar} | x', \eta(\nu)\rangle = | x' + a, \eta(\nu)\rangle$$

$$= \hat{B}_\eta e^{-i\hat{p}a/\hbar} | x', \nu\rangle,$$

它们对任意的 $x'$, $\nu$ 来说，用任意的 $a$ 都是成立的，但是，现在所考虑的体系其自由度为 1，这说明，该体系的任何力学变量均可表示为一对正则变量 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 的函数。这样，不可能引入一个既能与 $\hat{x}$, $\hat{p}$ 对易，同时又非恒等算符的算符。于是，显然不会存在标号 $\nu$。

这样一来，$\{|x'\rangle\}_{-\infty<x'<\infty}$ 必然构成完备系。也就是说，存在某些权函数 $\rho(x')$，而且应该有

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle\rho(x')dx'\langle x'| = \hat{1}. \tag{4.4.9}$$

如果对上式左乘以 $U_a = e^{-i\hat{p}a/\hbar}$，右乘以 $U_a^\dagger$，那么

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x' + a\rangle\rho(x')dx'\langle x' + a| = U_a U_a^\dagger = \hat{1},$$

改变积分变量，将 $x' + a$ 换成 $x'$，则

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle\rho(x' - a)dx'\langle x'| = \hat{1}.$$

把它与 (4.4.9) 式相比，可知 $\rho(x') \equiv$ 常数 $\equiv\rho$，并插入任意的 $\langle a|$, $|a\rangle$，就会知道 $\rho > 0$，所以，把全部 $|x'\rangle$ 共同除以 $\sqrt{\rho}$ ((4.4.6) 式不变)，再写成 $|x'\rangle$，则

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle dx'\langle x'| = \hat{1}. \tag{4.4.10}$$

这就是坐标算符 $\hat{x}$ 的本征矢的完备性关系式。对此式左乘 $\langle x''|$，就可以知道‘正交归一性’为

$$\langle x''|x'\rangle = \delta(x'' - x'). \tag{4.4.11}$$

这是典型的连续本征值的本征矢的归一化，从而也就明白了在前边的 (4.4.7) 式中有区别地写作 $x'$ 和 $x''$ 的缘故。请将(4.4.10)式及 (4.4.11) 式与离散本征值的 (4.3.8) 式及 (4.3.4) 式作一比较。

动量算符 $\hat{p}$ 的本征矢也有完备性

$$\int_{-\infty}^{\infty}|p'\rangle dp'\langle p'| = \hat{1}, \tag{4.4.12}$$

及正交归一性

$$\langle p''|p'\rangle = \delta(p''-p'). \tag{4.4.13}$$

那么，$\hat{x}$ 的本征矢与 $\hat{p}$ 的本征矢有何关系呢。对（4.4.6）式乘以 $\langle p'|$，则 $\langle p'|\hat{p} = \langle p'|p'$，故

$$e^{-ip'a/\hbar}\langle p'|x'\rangle = \langle p'|x'+a\rangle.$$

在此令

$$\langle p'|x'\rangle \equiv c(x';\ p')e^{-ip'x/\hbar}, \tag{4.4.14}$$

显然 $c$ 仅仅是 $p'$ 的函数：

$$c(x';\ p') = c(x'+a;\ p') \equiv c(p'). \tag{4.4.15}$$

其次，若把 (4.4.14) 式代入由 (4.4.8) 式乘以 $\langle x'|$ 所得到的关系式

$$e^{ikx'}\langle x'|p'\rangle = \langle x'|p'+\hbar k\rangle,$$

那么，考虑到 (4.4.15) 式，就有

$$c(p')^* = c(p'+\hbar k)^*.$$

即，$c$ 也是与 $p'$ 无关的常数。因此，

$$\langle p'|x'\rangle = ce^{ip'x'/\hbar}.$$

常数 $c$ 是由归一化条件 (4.4.11) 确定的。根据 (4.4.12) 式，

$$\begin{aligned}\langle x''|x'\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\langle x''|p'\rangle dp'\langle p'|x'\rangle \\ &= |c|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{ip'(x''-x')/\hbar}dp' \\ &= |c|^2\cdot 2\pi\hbar\delta(x''-x').\end{aligned}$$

因而 $c = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$。它乘以常数相位也可以成为复数，但这只会迭床架屋而有害无益。因此，

$$\langle p'|x'\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}e^{-ip'x'/\hbar}. \tag{4.4.16}$$

不难证明，这个结论也适用于在刚才的计算中尚未顾及的条件 (4.4.10) 和 (4.4.13)。

动量算符的全部本征函数 $\{|p'\rangle\}_{-\infty<p'<\infty}$，在目前所讨论的

力学系的态矢空间 **K** 中构成完备正交归一系，故可作为 **K** 的**基矢**来使用。上面的 $\langle p'|x'\rangle$ 就是与该基底有关的矢量 $|x'\rangle$ 的分量，该基底叫作使动量对角化的基底。另一方面，$\{|x'\rangle\}_{-\infty<x'<\infty}$ 是使坐标对角化的基底。这两个基底是通过(4.4.12)式连系在一起的，即

$$|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |p'\rangle dp' \langle p'|x'\rangle, \tag{4.4.17}$$

所以 $\langle p'|x'\rangle$ 也称为基底的变换函数。

给出基底（比如说 $\{|x'\rangle\}_{-\infty<x'<\infty}$）的分量 $\{\langle x'|\psi\rangle\}_{-\infty<x'<\infty}$，就可完全确定态空间 **K** 中的任意矢量 $|\psi\rangle$。这样的表示方式称为矢量的**坐标表象**。同样也可以定义**动量表象**。不久将要说明，$|\psi\rangle$ 的坐标表象 $\langle x'|\psi\rangle$ 正是前几章中所提到的波函数 $\psi(x')$。

算符 $\hat{A}$ 也可用与基底有关的矩阵元 $\{\langle x''|\hat{A}|x'\rangle\}_{-\infty<x',x''<\infty}$ 表示成坐标表象。实际上，这是因为，$\hat{A}|\psi\rangle$ 的坐标表象可以确定为

$$\langle x''|\hat{A}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x''|\hat{A}|x'\rangle dx' \langle x'|\psi\rangle. \tag{4.4.18}$$

需要注意，如果利用(4.4.10)式，则算符 $\hat{A}$, $\hat{B}$ 之积的坐标表象就可以根据‘矩阵乘法规则’，由各自的坐标表象表示成

$$\langle x''|\hat{A}\hat{B}|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x''|\hat{A}|x'''\rangle\langle x'''|\hat{B}|x'\rangle dx'''.$$

对于**动量表象**来说，情况完全相同。

当变更表象时，$\langle x'|\psi\rangle$ 变为

$$\langle p'|\psi\rangle - \int_{-\infty}^{\infty} \langle p'|x'\rangle dx' \langle x'|\psi\rangle. \tag{4.4.19}$$

与此相应，$\langle x''|\hat{A}|x'\rangle$ 变为

$$\langle p''|\hat{A}|p'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle p''|x''\rangle dx'' \langle x''|\hat{A}|x'\rangle dx' \langle x'|p'\rangle.$$

(4.4.20)

这样一来，$\langle p'|x'\rangle$ 也是表象的**变换函数**。若把(4.4.19)式看成是变换矩阵 $\langle p'|x'\rangle$ 所引起的矢量分量的变换，则可说(4.4.20)式

是二阶张量变换.

下面我们确定算符 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 的坐标表象。对 $\hat{x}$ 来说，

$$\langle x''|\hat{x}|x'\rangle = x'\langle x''|x'\rangle = x''\delta(x''-x'). \tag{4.4.21}$$

而对于 $\hat{p}$ 来说，给 (4.4.6) 式乘以 $\langle x''|$，将所得结果再对 $a$ 微分，设 $a=0$，则有

$$\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial a}\langle x''|x'+a\rangle\right]_{a=0} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x''-x'),$$

或者

$$\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x'). \tag{4.4.22}$$

我们对上两式乘以 $\psi(x')=\langle x'|\psi\rangle$ 来看一看，根据 (4.4.18) 式，

$$\langle x''|\hat{x}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x''\delta(x''-x')dx'\langle x'|\psi\rangle = x'\langle x''|\psi\rangle. \tag{4.4.23}$$

以对 $|\psi\rangle$ 的坐标表象 $\langle x''|\psi\rangle$ 的作用而言，坐标算符 $\hat{x}$ 确实是前几章一直使用的乘法算符。另外，根据

$$\begin{aligned}\langle x''|\hat{p}|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} -i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')dx'\langle x'|\psi\rangle \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\langle x''|\psi\rangle,\end{aligned} \tag{4.4.24}$$

动量算符 $\hat{p}$ 再现了以前在坐标表象中一直使用的微分算符。而且，无论哪一个 $\langle x''|\psi\rangle$ 都起着波函数的作用。以前，我们曾多次把作用于波函数并使得 $\langle x''|\psi\rangle \longmapsto \langle x''|\hat{x}|\psi\rangle$ 的算符记为 $\hat{x}$，有关 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 的动量表象，似乎已无演示其计算过程的必要。

下面我们根据 (4.4.22) 式来计算 $\hat{p}^2$ 的坐标表象。

$$\begin{aligned}\langle x'''|\hat{p}^2|x'\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\langle x'''|\hat{p}|x''\rangle dx''\langle x''|\hat{p}|x'\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'''}\delta(x'''-x'')\right]dx'' \\ &\quad\times\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')\right],\end{aligned} \tag{4.4.25}$$

即

$$\langle x''|\hat{p}^2|x'\rangle = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\right)^2\delta(x''-x').$$

对此予以重复即可构成 $\hat{p}$ 的代数式的坐标表象。若用代数式近似处理 $\hat{p}$ 的任意函数 $F(\hat{p})$，则

$$\langle x''|F(\hat{p})|x'\rangle = F\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\right)\delta(x''-x'), \quad (4.4.26)$$

同样，对 $\hat{x}$ 的任意函数 $G(\hat{x})$ 来说，

$$\langle x''|G(\hat{x})|x'\rangle = G(x'')\delta(x''-x'). \quad (4.4.27)$$

因此，诸如哈密顿算符 $\hat{H}=(2\mu)^{-1}\hat{p}+V(\hat{x})$ 的坐标表象就是

$$\langle x''|\hat{H}|x'\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x''^2}+V(x'')\right]\delta(x''-x'), \quad (4.4.28)$$

而本征值问题 $\hat{H}|E'\rangle = E'|E'\rangle$ 则给出薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{\partial\mu}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+V(x')-E'\right]\langle x'|E'\rangle = 0. \quad (4.4.29)$$

能量本征函数 $u_{E'}(x')\equiv\langle x'|E'\rangle$ 作为 $E'$ 的坐标表象的同时，也是使坐标表象变成能量表象的变换函数。

通过与 (4.4.25) 式相同的计算也可以验证 (4.4.21) 式、(4.4.22) 式满足正则对易关系 (4.4.1)。这个请读者自己来作。

然而，只要满足正则对易关系 (4.4.1)，动量算符亦可不与 (4.4.22) 式雷同。以前曾提到过这一点。在本节的推导中，(4.4.22) 式的得出似乎势在必然，这是为什么呢？其原因在于 (4.4.6) 式相位的任意性。当取 $\sigma(x':a)$ 为任意实函数时，可以认为 $e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle$ 就等于 $e^{i\sigma(x':a)}|x'+a\rangle$（其中 $\sigma(x':0)=0$）。这样，(4.4.22) 式的计算应当是

$$\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial a}e^{ia(x':a)}\langle x''|x'+a\rangle\right]_{a=0},$$

从而，

$$\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = \left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''} - \hbar\gamma(x'')\right]\delta(x''-x'),$$

其中，$\gamma(x'') \equiv \partial\sigma(x'':0)/\partial a$.

### b) 多自由度体系

对于在三维空间运动的一个质点的力学系来说，用直角坐标系表示，坐标和动量算符 $\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f$; $\hat{p}_1, \cdots, \hat{p}_f$ 必须分别取 $f = 3$. 若有 $N$ 个质点，则 $f = 3N$. 在自由度为 $f$ 的力学系中，一般来说正则对易关系为

$$\left.\begin{aligned}[\hat{p}_r, \hat{x}_s] &= -i\hbar\delta_{r,s}\\ [\hat{p}_r, \hat{p}_s] &= 0,\ [\hat{x}_r, \hat{x}_s] = 0,\end{aligned}\right\} \tag{4.4.30}$$

其中 $r, s = 1, 2, \cdots, f$. 在这种情况下，不难对前一项中的讨论加以推广，例如，从动量表象到坐标表象的变换函数为

$$\langle p'_1, p'_2, \cdots, p'_f|x'_1, x'_2, \cdots, x'_f\rangle$$

$$= \prod_{s=1}^{f}(2\pi\hbar)^{-1/2}e^{-ip'_sx'_s/\hbar}, \tag{4.4.31}$$

而坐标算符的坐标表象为

$$\langle x''_1, x''_2, \cdots, x''_f|\hat{x}_s|x'_1, x'_2, \cdots, x'_f\rangle$$

$$= x''_s\prod_{r=1}^{f}\delta(x''_r - x'_r), \tag{4.4.32}$$

动量算符的坐标表象为

$$\langle x''_1, x''_2, \cdots, x''_f|\hat{p}_s|x'_1, x'_2, \cdots, x'_f\rangle$$

$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x''_s}\prod_{r=1}^{f}\delta(x''_r - x'_r). \tag{4.4.33}$$

如果所研究的粒子具有自旋等内部自由度，就有必要附加前面提到过的标号 $\nu$. 那时，在讨论变换函数的过程中，与前面的 (4.4.14) 式相当的表达式里的 $c$ 内包含着 $\nu$. 如果与内部自由度有关的表象也同时发生变化，那么，$c$ 不再是常数，变换函数就成了 (4.4.31) 式和与内部自由度有关的变换函数之积。

一般来说，当有一组相互对易的观测量 $\{\hat{A}_i\}_{i=1,2,\cdots,k}$ 而且与其任意一组本征值 $\{\lambda_i\}_{i=1,\cdots,k}$ 对应的共同本征矢只限于一个时，就说该组算符是**完备**的。详细地讲，叫作完备对易观测量组，也叫**完整可观测量组。**

完整可观测量的全部共同本征矢可以用作态空间的基底，并由它们来确定表象。

### c） 狄拉克空间

在 §4.1 中，相对于右矢空间引入左矢空间时，左矢被认为是右矢空间 **K** 上的线性泛函。它意味着左矢 $\langle\psi|$ 会使任意的右矢 $|x\rangle$ 与复数相对应。我们把该复数写成 $\langle\psi|x\rangle$。

但是，(4.4.11) 式中的 $\langle x''|x'\rangle$ 是否为复数呢？(4.4.13) 式中的 $\langle p''|p'\rangle$ 呢？进而，(4.4.22) 式等等是否也是复数呢？

随着理论的发展，漏洞会时有出现。因为作为 $\langle x''|x'\rangle$ 的明显体现，$\delta(x''-x')$ 并非普通的函数，所以，即使让 $x''$ 固定也无法确定 $x'$ 的数值。但是，尽管如此，对截止目前所作的那种形式的运算却没有产生什么影响。注意到 $\langle x''|x'\rangle=\delta(x''-x')$ 之类的可能性，再回过头去看一下本章的讨论，我们就会理解这种情况。虽然难以在数学上作出规定，但我们暂时先承认截止目前所出现的那种形式的左矢空间和右矢空间，并称之为狄拉克空间。

当然 §4.1 中所谈到的狄拉克假定是否妥帖，关键在于应当正确给出并在数学上审视右矢和左矢的定义，而且时止今日，其中仍有尚未彻底解决的遗留问题。这些问题我们将在本讲座第四卷《量子力学》(II) 中再来讨论。

## §4.5 运 动 方 程

### a） 海森伯绘景

上一节所讨论的力学变量的构成以正则对易关系 (4.4.1)、(4.4.30) 为基础。如 (3.1.21) 式和 (3.3.3) 式中所描述的那样，可

以认为该正则对易关系是使经典力学的泊松括号 $\{,\}$ 向算符关系 $(i\hbar)^{-1}[,]$ 转换的一种手段. 因为经典力学中的运动方程也是用泊松括号表示的，所以可以采用相同的转换规则过渡到量子力学中去. 其结果就是海森伯运动方程 (3.3.8)

$$\frac{d}{dt}\hat{F}(t)=\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t),\hat{H}], \tag{4.5.1}$$

其中，$F$ 不显含时间. 这意味着 $\hat{F}$ 是正则变量 $\{\hat{x}_s(t),\hat{p}_s(t)\}_{s=1,2,\cdots,f}$ 的函数

$$\hat{F}=\hat{F}(\hat{x}_1(t),\cdots,\hat{x}_f(t),\hat{p}_1(t),\cdots,\hat{p}_f(t)), \tag{4.5.2}$$

它对时间的依赖仅来自正则变量随时间的变化. 此外，还表明它不会以 $\hat{F}(\hat{x}_1(t),\cdots\hat{p}_f(t);t)$ 的形式活脱脱地——明显——包含时间变量 (即 $\partial\hat{F}/\partial t=0$). 我们认为 (4.5.1) 式中的 $\hat{F}(t)$ 是 (4.5.2) 式的省略写法.

现在，设哈密顿算符为

$$\hat{H}=\sum_{s=1}^{f}\frac{1}{2\mu_s}\hat{p}_s^2+V(\hat{x}_1,\cdots,\hat{x}_f), \tag{4.5.3}$$

来写出正则变量的海森伯运动方程 (4.5.1). 为此，多少要作些准备.

首先，我们注意到，满足 (4.5.1) 式的解，其形式是

$$\hat{F}(t)=e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}(0)e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \tag{4.5.4}$$

在这个意义上，哈密顿算符叫做**时移生成算符**. 特别是当 $\hat{F}(0)=\hat{H}$ 时

$$\hat{H}(t)=\hat{H}. \tag{4.5.5}$$

也就是说，哈密顿算符显然不随时间变化 (**时移不变性**). 因此，在 0 时刻 $\hat{H}$ 的本征矢 $|E'\rangle$，应当是任意时刻 $t$ $\hat{H}(t)$ 的同一本征值的本征矢，所以可以认为 (4.5.5) 式是**能量守恒定律**的表述.

另外，设 $\hat{p}_r(0)=\hat{p}_r$ 等等，根据

$$e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{p}_r\hat{x}_s e^{-i\hat{H}t/\hbar}=e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{p}_r e^{-i\hat{H}t/\hbar}\cdot e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{x}_s e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$$=\hat{p}_r(t)\hat{x}_s(t)$$

这样的计算可知，正则对易关系 (4.4.30) 式也是时移不变的：

$$\left.\begin{aligned}&[\hat{p}_r(t), \hat{x}_s(t)] = -i\hbar\delta_{r,s}\\&[\hat{p}_r(t), \hat{p}_s(t)] = 0,\ [\hat{x}_r(t), \hat{x}_s(t)] = 0\end{aligned}\right\}. \tag{4.5.6}$$

往往用**同时刻的对易关系**这种提法来强调，对易子的一对算符的时刻是相等的。似乎同时刻的正则对易关系等于 0 时刻的正则对易关系。不过，即使不考虑这一点也可以解决问题，

根据 (4.5.5) 式，(4.5.1) 式可以这样来计算：

$$\frac{d}{dt}\hat{F}(t) = \frac{1}{i\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}[\hat{F}, \hat{H}]e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \tag{4.5.7}$$

其中 $\hat{F}(0) \equiv \hat{F}$。这一点今后就不再说明了，根据 (4.5.3) 式不难得出

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_s(t) = \frac{1}{i\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}[\hat{x}_s, \hat{H}]e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{i\hat{H}t/\hbar}\frac{\hat{p}_s}{\mu}e^{-i\hat{H}t/\hbar},$$

即

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_s(t) = \frac{1}{\mu}\hat{p}_s(t) \quad (s = 1, \cdots, f). \tag{4.5.8}$$

其次，为了求出 $d\hat{p}_s(t)/dt$，必须计算 $[\hat{p}_s, V(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f)]$。若 $V$ 为 $\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f$ 的多项式，则该计算就不是太难的。否则，可以取坐标表象进行计算：

$$\begin{aligned}&\langle x_1''', \cdots, x_f'''|\hat{p}_s V(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f)|x_1', \cdots, x_f'\rangle\\&= \int\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_s'''}\prod_r \delta(x_r''' - x_r'')\right]dx_1''\cdots dx_f''\\&\times\left[V(x_1''', \cdots, x_f''')\prod_u \delta(x_u'' - x_u')\right]\\&= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_s'''}\left[V(x_1''', \cdots, x_f''')\prod_u \delta(x_u''' - x_u')\right].\end{aligned}$$

对 $V\hat{p}_s$ 来讲，计算是同样的，若作减法运算则有

$$\begin{aligned}&\langle x_1''', \cdots, x'''|[\hat{p}_s, V]|x_1', \cdots, x_f'\rangle\\&= -i\hbar\frac{\partial V}{\partial x_s'''}\prod_{u=1}^{f}\delta(x_u''' - x_u').\end{aligned}$$

这表明

$$[\hat{p}_s, V(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f)] = -i\hbar \frac{\partial V(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f)}{\partial \hat{x}_s}. \quad (4.5.9)$$

右边$V$的变量是算符，把它看作c数来进行微分，这样一来，

$$\frac{d}{dt}\hat{p}_s(t) = -\left.\frac{\partial V(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f)}{\partial \hat{x}_s}\right|_{\hat{x}_1=\hat{x}_1(t),\cdots,\hat{x}_f=\hat{x}_f(t)}$$

$$(s = 1, \cdots, f). \quad (4.5.10)$$

(4.5.8)式和(4.5.9)式是量子力学中的**正则运动方程**。在形式上它与经典力学中的正则运动方程毫无两样。

该运动方程的解，对谐振子而言，(3.4.19)式即为一例。

### b) 守恒定律，位力定理，总和定律

需要注意，在(4.5.5)式中哈密顿算符是守恒量，不过，一般来说，只要不显含时间的观测量与哈密顿算符是对易的，则为守恒量。实际上，若 $\partial\hat{B}/\partial t$ 中 $[\hat{B}, \hat{H}] = 0$ 则 $\hat{B}(t) = \hat{B} =$ 常量。假如有几个这样的量 $\hat{B}, \hat{C}, \cdots$，则它们的对易子 $[\hat{B}, \hat{C}], \cdots$ 也是守恒量。实际上，就对易子而言，雅可比恒等式通常是成立的：

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] = 0, \quad (4.5.11)$$

所以，在目前的情况下若取 $\hat{A} = \hat{H}$，则

$$[[\hat{B}, \hat{C}], \hat{H}] = 0. \quad (4.5.12)$$

显含时间的观测量 $\hat{G}(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f, \hat{p}_1, \cdots, \hat{p}_f; t)$ 往往也是守恒的。将其简写成 $\hat{G}(\cdot; t)$，则运动方程为

$$\frac{d}{dt}\hat{G}(\cdot;t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{G}(\cdot;t), H] + \frac{\partial \hat{G}(\cdot;t)}{\partial t}. \quad (4.5.13)$$

作为例证，若哈密顿算符是

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{p}^2 + \mu g\hat{x}, \quad (4.5.14)$$

则

$$G_1 = \hat{p}(t) - \mu g t, \quad G_2 = \hat{x}(t) - \frac{t}{\mu}\hat{p}(t) - \frac{1}{2}gt^2$$

满足 $dG_j/dt = 0$ $(j = 1, 2)$，是守恒量。读者能说说这些量的物理意义吗？

下面我们来叙述根据守恒量与哈密顿算符的对易关系所得到的重要结论，对 (4.5.3) 式的哈密顿算符来说，若把

$$\frac{d}{dt}\sum_s \hat{p}_s\hat{x}_s = \frac{1}{i\hbar}\left[\sum_s \hat{p}_s\hat{x}_s, \hat{H}\right]$$
$$= 2\sum_s \frac{1}{2\mu_s}\hat{p}_s - \sum_s \hat{x}_s\frac{\partial V}{\partial \hat{x}_s}$$

的两边插入 $\hat{H}$ 的本征矢 $|E', \nu\rangle$，并注意到 $\langle E', \nu|[\cdot, \hat{H}]|E', \nu\rangle = 0$，则可得出

$$2\left\langle E', \nu\left|\sum_s \frac{1}{2\mu_s}\hat{p}_s^2\right|E', \nu\right\rangle = \left\langle E', \nu\left|\sum_s \hat{x}_s\frac{\partial V}{\partial \hat{x}_s}\right|E'\nu\right\rangle. \tag{4.5.15}$$

这叫做**位力定理**[1]。不过，当 $|E', \nu\rangle$ 中的期待值为无限大时（例如散射态），此式无意义。当 $V$ 是 $\hat{x}_s$ 的齐次式时读者可具体做一下 (4.5.15) 式。谐振子势和库仑 (Coulomb) 势均属此例。

不限于能量本征态，对一般状态 $|\psi\rangle$ 的期待值而言，若 $\left\langle\psi\left|\sum_s \hat{p}_s(t)\hat{x}_s(t)\right|\psi\right\rangle$ 对时间 $t$ 是均匀而有界的，那么，当用

$$\langle A\rangle \equiv \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T dt\ \langle\psi|\hat{A}(t)|\psi\rangle \tag{4.5.16}$$

来定义长时间的平均值时，则有

$$\left\langle\frac{d}{dt}\sum_s \hat{p}_s(t)\hat{x}_s(t)\right\rangle = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\langle\psi|\sum_s\{\hat{p}_s(T)\hat{x}_s(T)$$
$$-\hat{p}_s(0)\hat{x}_s(0)\}|\psi\rangle = 0,$$

从而可以说

$$2\left\langle\sum_s \frac{1}{2\mu_s}\hat{p}_s^2\right\rangle = \left\langle\sum_s \hat{x}_s\frac{\partial V}{\partial \hat{x}_s}\right\rangle. \tag{4.5.17}$$

---

1) 位力定理的 virial，在拉丁语中源于表示力或强度的 vires，确切地说，(4.5.15) 式的右边是(力)×(距离)。

上式也叫做位力定理.

另外,对(4.5.3)式的哈密顿算符来说,可以这样来计算:

$$\hat{x}_r\hat{H}\hat{x}_r - \frac{1}{2}\{\hat{x}_r^2\hat{H} + \hat{H}\hat{x}_r^2\} = \frac{1}{2}[[\hat{x}_r, \hat{H}], \hat{x}_r] = \frac{\hbar^2}{2\mu_r},$$

所以,当用归一化的 $|E', \nu'\rangle$ 作用于两边时,则有

$$\sum_{E'',\nu''}(E'' - E')|\langle E', \nu'|\hat{x}_r|E'', \nu''\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu_r}$$
$$(r = 1, \cdots, f). \qquad (4.5.18)$$

其中,在 $E''$、$\nu''$ 连续变化的范围,可以把 $\sum$ 理解为积分.此式称为**托马斯-雷奇-库恩**(Thomas-Reiche-Kuhn)**总和定律.**

### c) 薛定谔绘景

对处于状态 $|\psi\rangle$ 的力学系来说,虽不能唯一地预言在时刻 $t$ 测得的观测量 $\hat{F}$ 的值,但却如§4.3b)所述,可知期待值为 $\langle\psi|\hat{F}(t)|\psi\rangle$. (3.2.25)式业已说明了这一点.其中设 $|\psi\rangle$ 是归一化的.

若 $\hat{F}(t)$ 不显含时间 $t$,则(4.5.4)式成立,故期待值 $t$ 可以写成

$$\langle\psi|\hat{F}(t)|\psi\rangle = \langle\psi(t)|\hat{F}|\psi(t)\rangle. \qquad (4.5.19)$$

其中,

$$|\psi(t)\rangle \equiv e^{i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle. \qquad (4.5.20)$$

(4.5.19)式表明,用态矢也可以等价地描述力学系的时间演变.这种描述称为**薛定谔绘景.**而以前那种按照观测量的时间演变所进行的描述则叫做**海森伯绘景.**

因为在薛定谔绘景中,$e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ 与§4.4a)中所用的 $e^{-i\hat{p}a/\hbar}$ 同样是幺正算符,所以

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi|\psi\rangle. \qquad (4.5.21)$$

根据(4.5.20)式,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle. \qquad (4.5.22)$$

如果取上式的坐标表象，则当哈密顿算符为 (4.5.3) 时，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x_1', \cdots, x_f'|\psi(t)\rangle$$

$$=\left[-\sum_{s=1}^{f}\frac{\hbar^2}{2\mu_s}\frac{\partial^2}{\partial x_s'^2}+V(x_1', \cdots, x_f')\right]$$

$$\times\langle x_1', \cdots, x_f'|\psi(t)\rangle. \tag{4.5.23}$$

这就是薛定谔波动方程，而 $|\psi(t)\rangle$ 的坐标表象 $\langle x_1, \cdots, x_f|\psi(t)\rangle$ 则为所谓的波函数 $\psi(x_1, \cdots, x_f; t)$.

方程 (4.5.22) 或 (4.5.23) 是在给出 $t=0$ 时的初始值 $|\psi(0)\rangle$ 或 $\langle x_1', \cdots, x_f'|\psi(0)\rangle$ $(-\infty < x_1', \cdots, x_f' < \infty)$ 的情况下来求解的. 一般来讲，这样的作法并非容易. 但若预先知道哈密顿算符的本征函数的完备正交归一系 $\{|E_k, \nu_n\rangle\}_{k,n=0,1,\cdots}$ 则立刻可得

$$|\psi(t)\rangle=\sum_{k,n}e^{-iE_kt/\hbar}|E_k, \nu_n\rangle\langle E_k, \nu_n|\psi(0)\rangle. \tag{4.5.24}$$

上式中本征值 $E_k$ 和附加标号 $\nu_n$ 假定为离散型的，若有取连续值的区间，则在该区间内求和换成积分. 若用坐标表象来表示 (4.5.24)，则它就是波函数的表达式.

### d) 相互作用绘景

相互作用绘景处于海森伯绘景和薛定谔绘景之间，可以通过适当方式把哈密顿算符分成

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}',$$

由 $H_0$ 确定力学变量的时间变化，其余的时间变化则由态矢来承担. 特别是当 $H'=0$ 时，态矢并无变化. 相隔无限远的两个体系彼此靠近，只相互作用一定时间，又在无限远处分开，这时，若取 $H'$ 代表相互作用，那么，通过比较过去和将来的态矢，就可以使相互作用的效果分离出来. 这个绘景是朝永为了把场的量子论以相对论协变的形式公式化而利用过的，故亦称**朝永绘景.**

在这个绘景中，仿照 (4.5.4) 式，规定力学变量的时间变化是

$$\hat{F}_I(t)=e^{i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{F}\ e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}, \tag{4.5.25}$$

所以，根据期待值等于海森伯和薛定谔绘景中的表达式(4.5.19)这个条件，态矢 $\psi_1(t)$ 的时间变化为

$$|\psi_1(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle. \tag{4.5.26}$$

若对时间微分，则有

$$\frac{d}{dt} e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\ e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}(\hat{H}_0 - \hat{H}) e^{-i\hat{H}t/\hbar},$$

故

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi_1(t)\rangle = \hat{H}'(t)|\psi_2(t)\rangle \tag{4.5.27}$$

就是相互作用绘景中的态矢运动方程。其中

$$\hat{H}'(t) \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\ \hat{H}' e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \tag{4.5.28}$$

$t$ 不同的 $\hat{H}'(t)$，一般来说是不可对易的，因而(4.5.27)式的解不能取为

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'(s)ds\right]|\psi\rangle.$$

假如勉强地写出来，则

$$|\psi_1(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle, \tag{4.5.29}$$

其中

$$\hat{U}(t) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}'(t_a)\,dt_a + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_b \int_0^{t_b} dt_a \hat{H}'(t_b)\hat{H}'(t_a) + \cdots. \tag{4.5.30}$$

现在，若把给定的 $t_1, t_2, \cdots, t_n$ 按时刻先后排列，并在 $t_1 \geqslant \cdots \geqslant t_b \geqslant$ 。时定义符号 $P$ 为

$$P[\hat{H}'(t_1), \hat{H}'(t_2), \cdots, \hat{H}'(t_n)] = \hat{H}'(t_1)\cdots\hat{H}'(t_b)\hat{H}'(t_a). \tag{4.5.31}$$

则以上 $\hat{U}(t)$ 就能以类似于指数函数展开式的形式写为

$$\hat{U}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_0^t dt_n \cdots \int_0^{t_2} dt_1\, P\,[\hat{H}'(t_n), \cdots, \hat{H}'(t_1)].$$

这叫做**编时指数函数**，往往也写成

$$\hat{U}(t) = P\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}'(s)ds\right]. \tag{4.5.32}$$

如(4.5.26)式所示，本来 $U(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$，所以 $\hat{U}(t)$ 是幺正的，即

$$\hat{U}(t)^*\hat{U}(t) = \hat{U}(t)\hat{U}(t)^* = \hat{1}. \tag{4.5.33}$$

请读者利用(4.5.30)式来证明该式是成立的。

## §4.6 物 理 解 释

对前面几节的数学形式给出物理解释的是观测公理。它的内容为：

对任何观测量 $\hat{A}$，存在着相应的物理上的观测手段 $O_A$；进行这种观测时，所得到的观测值必然是 $\hat{A}$ 的本征值 $a'$，$a''$，$\cdots$之中的某一个；比如，假设观测值为 $a'$，那么，在观测之后不久再对同一观测量 $\hat{A}$ 进行观测，必定会得到同一观测值 $a'$。这个公理的前提是观测的**可重复性**。

设本征值 $a'$ 没有简并，则观测之后所面临的体系将处于 $\hat{A}$ 的本征态 $|a'\rangle$ 之中[1]。通过观测，状态 $|\psi\rangle$ 现在 $\hat{A}$ 的一个本征态上，到底映射在哪个本征态上，只是随机确定的非因果过程，这叫做**波包的收缩**。

但是，在观测中往往存在破坏性。例如，电子使盖革(Geiger)计数管产生蜂鸣，可以说在该时刻电子已射入计数管内，所以这与位置的观测相当，但是，在那一瞬间计数管中发生电子雪崩，故打算用作观测对象的电子已经消失殆尽。观测公理等于假定了非破坏性的观测手段是存在的。

如果观测之后不再对同一观测量进行观测，则观测公理就没有多大意义，其前提在于，观测是**瞬间**地，即在任意短的时间内进

---

1) 对本征值 $a'$ 有简并的情况，我们将在后面(4.6.11)式那儿予以说明。

行。波包的收缩也发生在瞬间，在这个意义上，它也是非因果的。本来，所谓量子力学状态，是有关瞬间的一个概念。这种情况在讨论场的量子论时似乎一定会出现问题。

场的量子论允许粒子产生或湮灭，那时显然不能说，对任意的自共轭算符都存在着观测手段。之所以用观测量的术语来叙述观测公理而不提自共轭算符，就是为的这个原因。实际上，在场的量子论的态空间中，电子存在着某一个状态 $|e^-\rangle$，而正电子也存在着某一个状态 $|e^+\rangle$，但决不能观测到与它们的叠加 $\alpha|e^-\rangle+\beta|e^+\rangle$ 相应的状态，这种矢量的投影算符是自共轭的，但必须认为其观测手段不会存在。否则，根据对它的观测，将可能得出 $\alpha|e^-\rangle+\beta|e^+\rangle$ 这样的状态。

读者不禁要问，即使不能观测到这样的状态，也不能说它在原则上是不存在的。的确，要说电荷的本征态——严格遵守电荷守恒定律——无论如何都应该是本征态。不过，正因为这是事实，所以才容许在理论上有这样的命题，即“在自然界中存在的状态及通过观测而得出的状态只限于电荷的本征态（有关电荷的**超选择定则**）”。这样一来，它就是经验事实，而且该命题尚未被推翻。不知是什么原因，似乎是我们这个宇宙在起源之初就创造了电荷的本征态。

超选择定律就是这样来制约叠加原理的，除了电荷以外，还有重粒子数和轻粒子数守恒，如此看来，即使在非相对论量子力学的范畴内，角动量的大小为整数的状态和半整数的状态也不会叠加，可以说这是超选择定律的一个例证。

### a） 纯态

即使对观测量存在着上述观测手段，但一般来讲只通过一个观测量的观测并不能确定客体的状态。而必须同时观测在（§4.4b）中所定义的全部完整可观测量（完整的一组可对易的观测量）。

我们设完整可观测量为 $\{\hat{A}_i\}_{i=1,\cdots,k}$，而且在 $t=0$ 时刻同时对其全体进行观测，获得一组观测值 $\{\lambda_i\}_{i=1,\cdots,k}$。从而以此**制备**

了客体的状态为

$$|\psi(0)\rangle = |\lambda_1, \cdots, \lambda_h\rangle. \qquad (4.6.1)$$

按照狄拉克的说法,'制备'就是 prepare 一词，这个术语含有'制作'的意义。我们假定其态矢是归一化的。

观测之后,客体的状态遵从薛定谔方程由 (4.6.1) 式开始时间演变。根据 (4.5.20) 式,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle. \qquad (4.6.2)$$

那么，当 $t > 0$ 时,对某一观测量 $\hat{B}_1$ 进行观测，其结果如何呢? 所获得的观测值是 $\hat{B}_1$ 的本征值 $\xi_1^{(k)}(k = 1, 2\cdots)$ 之中的某一个，而到底得出哪些值只能以一定的概率加以预测。在此假定本征值是离散的。

现在,设本征值均不简并,而 $\hat{B}_1$ 的本征矢与各本征值相对应，写作 $|\xi_1^{(k)}\rangle$。令它也是归一化的。这时，根据对 $\hat{B}_1$ 的观测，获得特定观测值 $\xi_1^{(k)}$ 的概率——换言之，通过观测状态 $|\psi(t)\rangle$ 引起波包向 $|\xi_1^{(k)}\rangle$ 收缩的概率由下式给出

$$\mathrm{Prob}(\xi_1^{(k)}) = |\langle\xi_1^{(k)}|\psi(t)\rangle|^2. \qquad (4.6.3)$$

这是矢量 $|\psi(t)\rangle$ 在 $|\xi_1^{(k)}\rangle$ 方向上的分量的绝对值平方。$\langle\xi_1^{(k)}|\psi(t)\rangle$ 叫做在状态 $|\psi(t)\rangle$ 中包含状态 $|\xi_1^{(k)}\rangle$ 的**概率幅**.如 §3.4b) 所述,它也是下列展开式的展开系数

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k |\xi_1^{(k)}\rangle\langle\xi_1^{(k)}|\psi(t)\rangle. \qquad (4.6.4)$$

假如 $\hat{B}$ 的本征值有简并，一般来说，设本征值 $\xi_1^{(k)}$ 对本征空间的投影算符为 $\hat{P}_{\xi_1^{(k)}}$，则

$$\mathrm{Prob}(\xi_1^{(k_1)}) = \|P\,\xi_1^{(k)}|\psi(t)\rangle\|^2. \qquad (4.6.5)$$

不言而喻，(4.6.3) 式是上式的一个特例。如果利用附加标号构成 $\hat{B}_1$ 的本征矢的完备正交归一系 $\{|\xi_1^{(k)}, \nu_1^{(n)}\rangle\}$，则相应于 (4.6.4) 式可作如下展开:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{k=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{N(k)} |\xi_1^{(k)}, \nu_1^{(n)}\rangle\langle\xi_1^{(k)}, \nu^{(n)}|\psi(t)\rangle, \qquad (4.6.6)$$

而 (4.6.5) 式就变成了

$$\mathrm{Prob}(\xi_1^{(k)}) = \sum_{n=1}^{N(k)} |\langle \xi_1^{(k)}, v^{(n)} | \psi(t) \rangle|^2. \tag{4.6.7}$$

使用投影算符 $\{\hat{P}_{\xi_1^{(k)}}\}$ 可以把算符 $\hat{B}_1$ 写成

$$\hat{B}_1 = \sum \xi_1^{(k)} \hat{P}_{\xi_1^{(k)}}, \tag{4.6.8}$$

因而，观测 $\hat{B}_1$ 所得到的观测值的期待值为

$$\langle \hat{B}_1 \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \xi_1^{(k)} \| \hat{P}_{\xi_1^{(k)}} | \psi(t) \rangle \|^2 = \langle \psi(t) | \hat{B}_1 | \psi(t) \rangle. \tag{4.6.9}$$

在这里利用了投影算符的性质 (4.2.3)。

若除 $\hat{B}_1$ 以外，还存在着与之对易的观测量 $\hat{B}_2$，则可对它们同时进行观测。令 $\hat{B}_2$ 的本征值为 $\xi_2^{(l)}(l = 1, 2, \cdots)$，投影到此本征空间的算符为 $\hat{P}_{\xi_2^{(l)}}$，那么，通过同时观测，获得一组观测值 $\xi_1^{(k)}, \xi_1^{(l)}$ 的概率就是

$$\mathrm{Prob}\,(\xi_1^{(k)}, \xi_2^{(l)}) = \| \hat{P}_{\xi_1^{(k)}} \hat{P}_{\xi_2^{(l)}} | \psi(t) \rangle \|^2. \tag{4.6.10}$$

因为两个投影算符是对易的，所以写出 (4.6.10) 式时按哪种顺序都可以。这个公式也可以推广到同时观测更多个对易的观测量的情况。而且，只要同时观测相当多的构成完整可观测量组的所有可观测量 $\{\hat{B}_r\}_{r=1,\cdots,h}$，$\hat{P}_{\xi_1^{(k)}} \cdots \hat{P}_{\xi_h^{(m)}} | \psi(t) \rangle$ 就会确定为一个矢量，它应该是体系在观测之后的状态(波包收缩！)。根据下面将要阐明的理由，矢量所表示的状态，称为**纯态**。

### b） 混合状态

假如为了得出完整可观测量组，却只能同时观测为数不充分的几个观测量，那么观测之后的状态又将如何呢?

例如，当观测 $\hat{B}_1$ 而得到观测值 $\xi_1^{(k)}$ 时，假若它是简并的，则不能用态矢来表示观测之后的状态。这是因为，没有理由指出它是简并了的 $|\xi_1^{(k)}, v_1^{(n)}\rangle$ $(n = 1, 2, \cdots, N(k))$ 之中的哪一个。

现在，令 $\hat{B}_2$ 与 $\hat{B}_1$ 对易。观测 $\hat{B}_1$ 得到观测值 $\xi_1^{(k)}$，之后马上观测 $\hat{B}_2$ 得到观测值 $\xi_2^{(l)}$，其概率恰好等于同时观测时得到一组观

测值 $\xi_1^{(k)}$, $\xi_2^{(l)}$ 的概率 (4.6.10). 这样一来，假设最初观测 $\hat{B}_1$ 时得到 $\xi_1^{(k)}$，则此后马上观测 $\hat{B}_2$ 得到 $\xi_2^{(l)}$ 的概率为

$$\mathrm{Prob}(\xi_2^{(l)}|\hat{B}_1=\xi_1^{(k)})=\|\hat{P}_{\xi_2^{(l)}}\hat{P}_{\xi_1^{(k)}}|\phi(t)\rangle\|^2/\|\hat{P}_{\xi_1^{(k)}}|\phi(t)\rangle\|^2. \tag{4.6.11}$$

当得知 $\hat{B}_1$ 最初的观测值 $\xi_1^{(k)}$ 时，再马上观测 $\hat{B}_2$，其期待值为

$$\langle\hat{B}_2\rangle\hat{B}_{1=\xi_1^{(k)}}=\langle\phi(t)|\hat{P}_{\xi_1^{(k)}}\hat{B}_2\hat{P}_{\xi_1^{(k)}}|\phi(t)\rangle/\|\hat{P}_{\xi_1^{(k)}}|\phi(t)\rangle\|^2. \tag{4.6.12}$$

特别当 $\hat{B}_2=\hat{B}_1$ 时，这两个公式正确地表达了观测的可重复性.

因此，在 $\hat{B}_1$ 观测之后的状态中，对于与 $\hat{B}_1$ 对易的任意的 $\hat{B}_2$ 来说，必须是 (4.6.11) 式及 (4.6.12) 式所表示的状态. 该状态可用被称之为**密度矩阵**的算符 $\hat{\rho}_{\xi_1^{(k)}}$ 描述，

$$\hat{\rho}\xi_1^{(k)}=C^{-1}\sum_{n,n'}|\xi_1^{(k)},\nu_1^{(n)}\rangle\langle\xi_1^{(k)},\nu_1^{(n)}|\phi(t)\rangle \times\langle\phi(t)|\xi_1^{(k)},\nu_1^{(n')}\rangle\langle\xi_1^{(k)},\nu_1^{(n')}|. \tag{4.6.13}$$

它根据

$$C\equiv\sum_{n=1}^{N(k)}|\langle\xi_1^{(k)},\nu_1^{(n)}|\phi(t)\rangle|^2=\|\hat{P}_{\xi_1^{(k)}}|\phi(t)\rangle\|^2 \tag{4.6.14}$$

而归一化为

$$\mathrm{tr}\rho_{\xi_1^{(k)}}=1. \tag{4.6.15}$$

在用该密度矩阵所描述的状态中，作为例子，测量 $\hat{B}_2$ 时所得的测量值的期待值为 $\mathrm{tr}[\hat{\rho}_{\xi_1^{(k)}}\hat{B}_2]$. 通过计算得出

$$\mathrm{tr}[\hat{\rho}_{\xi_1^{(k)}}\hat{B}_2]=C^{-1}\sum_{n,n'}\langle\phi(t)|\xi_1^{(k)},\nu_1^{(n')}\rangle\langle\xi_1^{(k)},\nu_1^{(n')}|\hat{B}_2|\xi_1^{(k)},\nu_1^{(n)}\rangle \times\langle\xi_1^{(k)},\nu_1^{(n)}|\phi(t)\rangle,$$

这个结果与 (4.6.12) 式完全符合. 若用 $\hat{P}_{\xi_2^{(l)}}$ 来代替 $\hat{B}_2$，则 $\mathrm{tr}[\hat{\rho}_{\xi_1^{(k)}}\hat{P}_{\xi_2^{(l)}}]$ 与 (4.6.11) 式符合. 密度矩阵所表示的状态叫做**混合状态.**

若本征值 $\xi_1^{(k)}$ 的状态不简并，则 $|\xi_1^{(k)},\nu_1^{(n)}\rangle$ 中无需附加标号 $\nu_1^{(n)}$，(4.6.13) 式变为 $\hat{\rho}_{\xi_1^{(k)}}=|\xi_1^{(k)}\rangle\langle\xi_1^{(k)}|$. 这样‘一行一列，

的密度矩阵就特地表示纯态。

还有一种情况，就是在观测之后体系处于混合状态。在这种情况下，制备许多($N$个)作为观测对象的力学系，并分别观测完整可观测量 $\{\hat{B}_r\}_{r=1,\cdots,h}$。观测之后，该系综的各个力学系为纯态，但到底是哪一个纯态只能说是随机的，而且对每个力学系来说似乎也不相同。它们之中有 $\mathrm{Prob}(\xi_1^{(k)}, \cdots, \xi_n^{(m)}) \cdot N$ 个力学系为纯态 $|\xi_1^{(k)}, \cdots, \xi_n^{(m)}\rangle$，有 $\mathrm{Prob}(\xi_1^{(k')}, \cdots, \xi_n^{(m')}) \cdot N$ 个是…。如果把这种系综的状态用密度矩阵表示

$$\hat{\rho}_{\text{系综}} = \sum_{k,\cdots,m} |\xi_1^{(k)}, \cdots, \xi_k^{(m)}\rangle|\langle\xi_1^{(k)}, \cdots, \xi_k^{(m)}|\psi(t)\rangle|^2 \times \langle\xi_1^{(k)}, \cdots, \xi_k^{(m)}|, \tag{4.6.16}$$

则 $\mathrm{tr}\hat{\rho}_{\text{系综}} = 1$，而观测 $\{\hat{B}_r\}_{r=1,\cdots,h}$ 之后不久再对系综的各个体系进行观测量 $\hat{x}$ 的观测，所得到的观测值的系综平均可以写成

$$[\hat{x}]_{\text{系综}} = \mathrm{tr}[\hat{\rho}_{\text{系综}}\hat{x}] \tag{4.6.17}$$

(4.6.16) 式是对角的，在这个意义上把它看作是 (4.6.13) 式的特例。

混合状态 (4.6.13) 是根据 $t$ 时刻的观测得到的，所以，若把它写为 $\hat{\rho}_{\xi_1^{(k)}}(t)$，则经过 $t'-t$ 时间间隔后，就变成了

$$\hat{\rho}\xi_1^{(k)}(t') = e^{-i\hat{H}(t'-t)/\hbar}\hat{\rho}\xi_1^{(k)}e^{i\hat{H}(t'-t)/\hbar}. \tag{4.6.18}$$

对 (4.6.16) 式来说，结果相同。对这种新的状态进行新的观测，会得到怎样的结果呢？我们想留给读者自己去考虑。

在量子力学体系的观测方面，除本节开头所提出的问题外，尚有不少问题。我们将在本讲座第四卷《量子力学》(II) 中进一步详细论述。

# 第三部分　量子力学的拓展

## 第五章　典型状态的结构

本章的目的在于，把上一章叙述的量子力学形式用于简单的力学系，并通过对其典型状态的研究来引入几个重要的物理概念.

当力学系给定时，本章的考虑的状态可以用一个完整可观测量组的本征矢来表示. 该本征矢的全体给出了体系的希尔伯特空间的正交归一化基底，任意状态均可用它们的叠加表示.

我们取包含要研究体系的哈密顿量在内的 $\{A_1, A_2, \cdots, H\}$ 为完整可观测量组. 这样一来，本征矢全都表示定态. 这些可观测量都是守恒量，其本征值称为**好量子数.**

另外，本章之后，只要没有特殊必要，就把算符记号 ^ 去掉，我们认为，这样并不会带来混乱.

### § 5.1　对称性和守恒量

当一个力学系给定时，如何找出与其哈密顿量一起构成完整可观测量组的其他可观测量呢？如果只限于讨论不显含时间的量，那么，它们必然是守恒量，即

$$[H, A_i] = 0.$$

因此，寻找守恒量问题的关键在于研究体系的对称性

所谓力学系具有**对称性**，指的是该体系的哈密顿量在力学变量做某种变换时保持不变. 为观察对称性而做的变换叫对称操作. 如果把力学变量 $F$ 的变换写成 $F \to F' = UFU^{-1}$ 的形式，那么，哈密顿量的不变性为

$$UHU^{-1} = H,$$

两边右乘$U$，显然会给出

$$[H, U] = 0, \tag{5.1.1}$$

从而表明$U$是守恒量.

如果通过自共轭算符$A$和在实轴上变化的参数$\alpha$把变换写成

$$F \to F_\alpha = e^{i\alpha A/\hbar} F e^{-i\alpha A/\hbar}, \tag{5.1.2}$$

那么，该变换就构成连续群．$A$称为其生成算符，这和在(4.5.4)式中把哈密顿算符叫做时移算符是一样的．其详细说明，将放到第八章．如果把(5.1.2)式两边对$\alpha$微商,则有

$$\frac{d}{d\alpha} F_\alpha = -\frac{i}{\hbar}[F_\alpha, A]. \tag{5.1.3}$$

哈密顿算符在连续变换(5.1.2)下不变

$$e^{i\alpha A/\hbar} H e^{-i\alpha A/\hbar} = H,$$

按照(5.1.3)式,它等价于

$$[H, A] = 0. \tag{5.1.4}$$

(5.1.1)式表明，连续变换(5.12)的生成算符是守恒的.

总之,可以从两方面来看(5.1.4)式．一方面，若把$A$看成是对称操作的生成算符,则(5.1.4)式表示哈密顿算符在该对称操作下不变（对称性)；另一方面，若把$H$看成是时移生成算符，则(5.1.4)式说明$A$不随时间变化(守恒)．二者当然是等价的.

因为通过观察就能发现一些对称操作使哈密顿算符保持不变,所以以此来寻找守恒量就成了构成完整可观测量组的良策了.

我们来举例说明一下．除了事先特殊声明之外，下面专门讨论三维空间中单质点的运动问题，并设其动量算符为$\boldsymbol{p}$，坐标算符为$\boldsymbol{r}$.

**a） 连续群的情况——平移与旋转**

坐标轴平行于自身的移动称为平移.坐标系平移$-\boldsymbol{a}$以后,坐标为$\boldsymbol{r}$的点将具有坐标$\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}$，而动量不变．即

$$\boldsymbol{r}_a = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}, \quad \boldsymbol{p}_a = \boldsymbol{p}. \tag{5.1.5}$$

平移的生成算符是动量．这个结论亦可由与（5.1.3）式对应的下

列诸式得知：

$$\frac{d}{da_x}x_a = 1 = -\frac{i}{\hbar}[x_a, p_x],$$

$$\frac{d}{da_x}p_{ax} = 0 = -\frac{i}{\hbar}[p_{ax}, p_x],$$

而根据(4.4.4)式，可以得到

$$e^{ip_xa_x/\hbar}xe^{-ip_xa_x/\hbar} = x + a_x. \tag{5.1.6}$$

这是沿着 $x$ 轴方向的平移，一般来说，$a$表示为 $(a_x, a_y, a_z)$，平移可以连续地沿着各个方向，说到平移，其方向可以不同，大小也各异，总共有连续的无限多个，但其生成算符却可以考虑 $p_x$, $p_y$, $p_z$ 这样三个。这都是根据平移对称操作的群论结构而得来的(参看第八章)。

由于动量各分量互相对易，有

$$\exp(ip\cdot a/\hbar) = \exp(ip_xa_x/\hbar)\exp(ip_ya_y/\hbar)\exp(ip_za_z/\hbar), \tag{5.1.7}$$

由此可以得到

$$\left.\begin{aligned} T_arT_a^* &= r + a \\ T_apT_a^* &= p \end{aligned}\right\} \quad (T_a \equiv \exp(ip\cdot a/\hbar)). \tag{5.1.8}$$

应用这个结果于作为 $p$ 和 $r$ 函数的哈密顿算符，有

$$\exp(ip\cdot a/\hbar)H(p, r)\exp(ip\cdot a/\hbar) = H(p, r + a).$$

就任意函数而言，有完全相同形式的公式。

如果给定的力学系是平移对称的，那么，作为平移的生成算符，动量 $p$ 与$H$对易，反之亦然。

$$H(p, r + a) = H(p, r) \Leftrightarrow [p, H] = 0. \tag{5.1.9}$$

研究一下给定的力学系，立刻就会知道，是否有平移对称，并且进而可以判断 $p$ 与$H$是否对易。若对易，则 $p$ 是守恒量，从而给出好量子数。若哈密顿算符的形式为

$$H(p, r) = \frac{1}{2m}p^2 + V(r),$$

则其平移对称性等价于 $V(r) =$ 常数，故动量守恒可以说成是量

子力学中的惯性定律. 假设在$N$个粒子组成的体系中，各粒子的坐标和动量分别为$r_i$和$p_i$ $(i=1,2,\cdots,N)$，这时，粒子间的势仅仅是坐标差的函数，即

$$H=\sum_i \frac{1}{2m_i}p_i^2+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V_{ij}(r_i-r_j),$$

那么，总动量

$$P=\sum_i p_i$$

是守恒的. 这个结论，读者可以根据上述推理方法予以说明.

下面，我们来考虑坐标系的**旋转**.

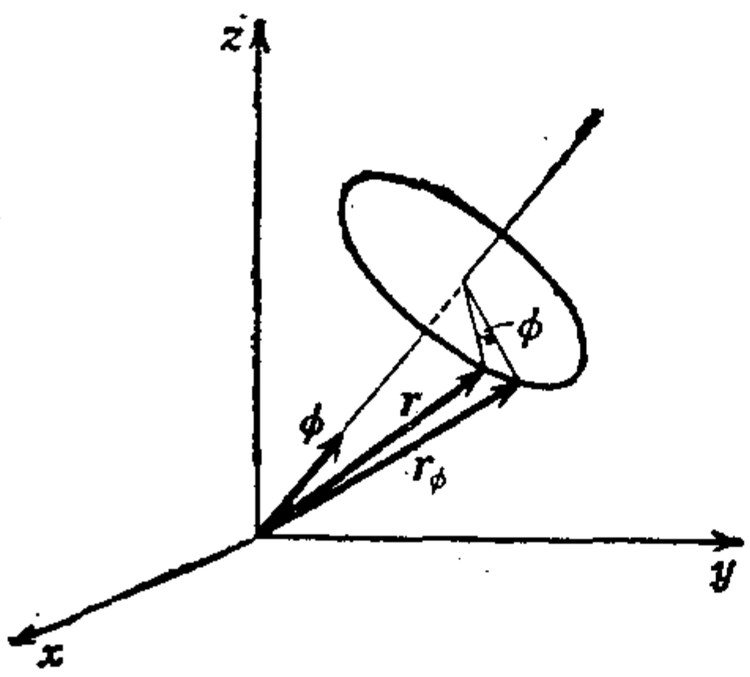



图 5.1 坐标系旋转一个角度$-\boldsymbol{\phi}$与所有矢量旋转一个角度$\boldsymbol{\phi}$是等效的

如果让坐标系绕通过原点的轴旋转一个微小角度$\phi$，则矢量的分量就会改变，坐标和动量分别表示为(见图 5.1)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_\phi&=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\phi}\times\boldsymbol{r}+O(\phi^2),\\ \boldsymbol{p}_\phi&=\boldsymbol{p}+\boldsymbol{\phi}\times\boldsymbol{p}+O(\phi^2),\end{aligned}\tag{5.1.10}$$

其中，$-\boldsymbol{\phi}$是这样的矢量，其方向沿着旋转轴指向按旋转方向转动的右手螺旋前进的方向，其大小等于以弧度为单位测量的旋转角$\phi$.

旋转的生成算符是角动量$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$. 实际上，设$\boldsymbol{\phi}$为无限小，取$\boldsymbol{\eta}=\boldsymbol{\phi}/\hbar$，再按指数函数的定义 (4.4.2) 计算 $\exp(i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L})\times\boldsymbol{r}\exp(-i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L})$，则

$$\begin{aligned}(1+i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L})\boldsymbol{r}(1-i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L})&=\boldsymbol{r}+i[\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L},\boldsymbol{r}]+O(\phi^2)\\ &=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\phi}\times\boldsymbol{r}+O(\phi^2),\end{aligned}\tag{5.1.11}$$

与(5.1.10)式一致，并且对于$\boldsymbol{p}$，也有同样的结果. 出现标量积$\boldsymbol{\phi}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar$的道理与 (5.1.8) 式中存在$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar$的道理是一样的.

为了弄清(5.1.11)式，可以用 $\alpha$、$\beta$、$\gamma$ 等表示各个量 $x$、$y$、$z$ 分量的角标，而把矢积简写成

$$L_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} x_\beta p_\gamma, \tag{5.1.12}$$

其中 $x_x \equiv x$，$x_y \equiv y$，$x_z \equiv z$，当 $(\alpha, \beta, \gamma)$ 是 $(x, y, z)$ 的偶置换时，$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = 1$，是奇置换时，$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = -1$，在其他情况下 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = 0$，重复出现的角标意味着对 $x$，$y$，$z$ 求和。采用这种表示法，就有

$$\begin{aligned}[L_\alpha, x_\lambda] &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}[x_\beta p_\gamma, x_\lambda] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} x_\beta(-i\hbar\delta_{\gamma\lambda}) \\ &= -i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\lambda} x_\beta = i\hbar\varepsilon_{\alpha\lambda\beta} x_\beta,\end{aligned} \tag{5.1.13}$$

再由 $\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{L} = \eta_\alpha L_\alpha$，得

$$i[\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{L}, x_\lambda] = \hbar\varepsilon_{\alpha\beta\lambda}\eta_\alpha x_\beta = \varepsilon_{\lambda\gamma\beta}\phi_\alpha x_\beta,$$

这就是 $\boldsymbol{\phi} \times \boldsymbol{r}$ 的 $\lambda$ 分量，从而得到(5.1.11)式。请读者自己计算动量变换情形。

因此，角动量就是旋转的生成算符，与(5.1.9)式相当，有

$$H(\boldsymbol{p}_\phi, \boldsymbol{r}_\phi) = H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) \Longleftrightarrow (\boldsymbol{L}, H) = 0. \tag{5.1.14}$$

也就是说，在具有旋转对称性的力学系中，角动量是守恒量。

但是，在这种情况下，角动量的三个分量并非全部是好量子数。这一点与动量有所不同，其原因是，动量的分量互相对易，而角动量的分量却互相不对易，因此，在完整可观测量组中不可能包含角动量的所有三个分量。顺便说一下，由于这种不可对易性，角动量的与(5.1.7)式相当的关系式不复成立。

考察一下就会明白，这种不可对易性是理所当然的。对易关系 $[L_\alpha, L_\beta]$ 表示绕 $x$ 轴旋转无限小量时 $L_\beta$ 的变化。因为角动量是矢量，所以当坐标轴旋转时（除非 $\alpha = \beta$）其 $\beta$ 分量会发生变化，从而导致 $[L_\alpha, L_\beta] \neq 0$。进一步来说，旋转时，一般矢量分量的变换均取(5.1.10)的形式，故对易关系应与(5.1.13)类似，即有

$$[L_\alpha, L_\beta] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\lambda} L_\lambda. \tag{5.1.15}$$

这个结论，请读者自行证明。

对角动量来说，完整可观测量组中不可能包含所有三个分量，

那么，应该怎么办呢？我们把这个问题留到下一节去考虑。

### b） 离散变换群，空间反演

将所有坐标轴反向，右手系就变成了左手系。无论是坐标还是动量，符号都要改变：

$$\boldsymbol{r}_{\pi}=-\boldsymbol{r},\quad \boldsymbol{p}_{\pi}=-\boldsymbol{p}, \tag{5.1.16}$$

而角动量却不改变：

$$\boldsymbol{L}_{\pi}=\boldsymbol{r}_{\pi}\times\boldsymbol{p}_{\pi}=(-\boldsymbol{r})\times(-\boldsymbol{p})=\boldsymbol{L}.$$

对称操作（5.1.16）称为空间反演[1)]，进行空间反演和不进行空间反演作为两个元素就可以构成离散变换群。

进行空间反演后，波函数 $\psi$ 在原坐标为 $\boldsymbol{r}$ 的点上所取的值将变成在坐标为 $\boldsymbol{r}_{\pi}$ 的点上取的值。这是一个新的函数，如果写成 $\psi_{\pi}$，则我们有 $\psi_{\pi}(\boldsymbol{r}_{\pi})=\psi(\boldsymbol{r})$。即

$$\psi_{\pi}(\boldsymbol{r})=\psi(-\boldsymbol{r})$$

由函数 $\psi$ 到函数 $\psi_{\pi}$ 的变换是一一对应的，所以，可以用它来定义一个算符 $\mathscr{P}$，即空间反演算符：

$$(\mathscr{P}\psi)(\boldsymbol{r})=\psi(-\boldsymbol{r}), \tag{5.1.17}$$

该算符具有 $\mathscr{P}^2=1$ 这样的性质。而且，对于任意 $\varphi$ 和 $\psi$，有

$$\langle\mathscr{P}\varphi,\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\int_{-\infty}^{\infty}dz\varphi^{*}(-x,-y,-z)\times\psi(x,y,z),$$

做 $x_{\pi}=-x$ 等变数变换，可得

$$\langle\mathscr{P}\varphi,\psi\rangle=\langle\varphi,\mathscr{P}\psi\rangle,$$

于是 $\mathscr{P}^{\dagger}=\mathscr{P}$，是厄密的，因此，它也是幺正的：

$$\mathscr{P}^{\dagger}\mathscr{P}=\mathscr{P}\mathscr{P}^{\dagger}=\mathscr{P}^2=1.$$

（5.1.17）式考虑了波函数的变换，可以说，它类似于薛定谔绘景。若现在要过渡到类似于海森伯绘景的表达式，则把（5.1.16）式写成

---

1）在§2.3我们已经引入了这个概念。

$$\mathscr{P}^{-1}\boldsymbol{r}\mathscr{P}=-\boldsymbol{r},\quad \mathscr{P}^{-1}\boldsymbol{p}\mathscr{P}=-\boldsymbol{p}. \tag{5.1.18}$$

对于 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 的函数(例如哈密顿量),有

$$\mathscr{P}^{-1}H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r})\mathscr{P}=H(-\boldsymbol{p},-\boldsymbol{r}).$$

因此

$$H(-\boldsymbol{p},-\boldsymbol{r})=H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r})\Longleftrightarrow[\mathscr{P},H]=0. \tag{5.1.19}$$

这样,我们再次发现,对称性和对易性是等价的.

空间反演算符 $\mathscr{P}$ 的本征值就是 §2.3 所说的宇称. 若哈密顿量是空间反演不变的,则宇称守恒. 要使宇称成为好量子数,所采用的完整可测量组之中不能包含像动量那样非空间反演不变的量.

离散对称操作的另一个例子是全同多粒子体系中粒子序号的置换(置换群). 关于这个问题,我们放到 §8.10 去叙述. 而在 §5.3 讨论类似的离散变换——时间反演.

## § 5.2 角 动 量

角动量在量子力学的各个分支中都起着极其重要的作用. 不言而喻,它是空间各向同性的反映.

这里先用 $\boldsymbol{J}$ 来表示角动量算符,其理由不久就会明白. 把上节得到的对易关系 (5.1.15) 写出来,有

$$\left.\begin{aligned}&[J_x,J_y]=i\hbar J_z\\&[J_y,J_z]=i\hbar J_x,\quad [J_z,J_x]=i\hbar J_y\end{aligned}\right\}. \tag{5.2.1}$$

这些关系可以通过 $x,y,z$ 的循环置换而由其中任何一个得到其它几个.

由于角动量的分量像上面那样是互不对易的,所以不可能将其中任何两个分量同时对角化. 角动量是旋转的生成算符,它应该与旋转不变的观测量对易. 例如,其本身的标积

$$J^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2 \tag{5.2.2}$$

就与任何分量均对易,应用 (5.1.15) 式,便容易证明这一点. 实际上

$$[J_\alpha, J_\beta J_\beta] = [J_\alpha, J_\beta]J_\beta + J_\beta[J_\alpha, J_\beta]$$
$$= i\hbar[\varepsilon_{\alpha\beta\lambda}J_\lambda J_\beta + \varepsilon_{\alpha\beta\lambda}J_\beta J_\lambda]$$

在最右边第二项中交换 $\beta$ 和 $\lambda$，抽出 $J_\lambda J_\beta$ 之后，$\varepsilon_{\alpha\lambda\beta} = -\varepsilon_{\alpha\beta\lambda}$ 与第一项之 $\varepsilon_{\alpha\beta\lambda}$ 对消，确实给出

$$[J_\alpha, J^2] = 0. \tag{5.2.3}$$

因此，可以先把 $J^2$ 和 $J_z$ 同时对角化。选择 $J_z$ 的理由是，当采用极坐标时，只有 $z$ 轴是特殊的。

### a) $J^2$ 与 $J_z$ 的同时对角化

在本小节 a) 中，丢掉与 $J$ 相联系的 $\hbar$ 而只写 $J$（到 (5.2.12) 式以后再恢复 $\hbar$）. 在对角化的计算中，可以把 $J$ 的各分量写成

$$\left.\begin{aligned} J_{+1} &\equiv -\frac{1}{\sqrt{2}}(J_x + iJ_y) \\ J_{-1} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(J_x - iJ_y) \end{aligned}\right\} \tag{5.2.4}$$

及 $J_z$。常将 $J_{\pm1}$ 简写成 $J_\pm$[1]。有时把 $J_z$ 写成 $J_0$，由 (5.2.1) 式，这些算符的对易关系是

$$\left.\begin{aligned} [J_z, J_q] &= qJ_q \quad (q = \pm 1) \\ [J_{+1}, J_{-1}] &= -J_z \end{aligned}\right\}. \tag{5.2.5}$$

另外，需注意，由 $J$ 的自共轭性，可知

$$J_{+1}^\dagger = -J_{-1}, \quad J_z^\dagger = J_z. \tag{5.2.6}$$

采用 (5.2.4) 式中的记法，(5.2.2) 式变成

$$J^2 = -2J_+J_- + J_z(J_z - 1) = -2J_-J_+ + J_z(J_z + 1). \tag{5.2.7}$$

我们来使它与 $J_z$ 同时对角化。由 (5.2.3) 式可知，这样做是可能的，所以，把它们的共同本征矢用狄拉克记法写成 $|\lambda, m\rangle$：

$$J^2|\lambda, m\rangle = \lambda|\lambda, m\rangle, \quad J_z|\lambda, m\rangle = m|\lambda, m\rangle. \tag{5.2.8}$$

---

1) 往往令 $J_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(J_x \pm iJ_y)$，

不过，关于本征值 $\lambda$，$m$ 倘一无所知。

现在，对应于 $|\lambda, m\rangle$，让我们来考虑 $J_q|\lambda, m\rangle$ $(q = \pm 1)$。根据 (5.2.3) 式，它也是 $J^2$ 的本征矢：

$$J^2(J_q|\lambda, m\rangle) = J_q(J^2|\lambda, m\rangle) = \lambda(J_q|\lambda, m\rangle).$$

另一方面，对于 $J_z$ 来说，有

$$J_z(J_q|\lambda, m\rangle) = J_qJ_z|\lambda, m\rangle + [J_z, J_q]|\lambda, m\rangle,$$

考虑到 (5.2.5) 式，上式变成

$$J_z(J_q|\lambda, m\rangle) = (m + q)(J_q|\lambda, m\rangle).$$

所以，$J_q|\lambda, m\rangle$ 也是 $J_z$ 的本征矢。其本征值与 $|\lambda, m\rangle$ 的仅差 $q = \pm 1$。$J_+, J_-$ 能使 $J_z$ 的本征值增加 1 或减少 1，因此，被称为**升降算符**。

这样，由一个本征矢 $|\lambda, m\rangle$，经过 $J_-$ 反复作用，就可以得到一系列 $J_z$ 本征值递减 1 的本征矢（见图 5.2）。这个系列可否向下无限延伸？另外，用 $J_+$ 反复作用，也可以得到一系列 $J_z$ 本征值递增 1 的本征矢，这个操作能否无休止地进行下去呢？

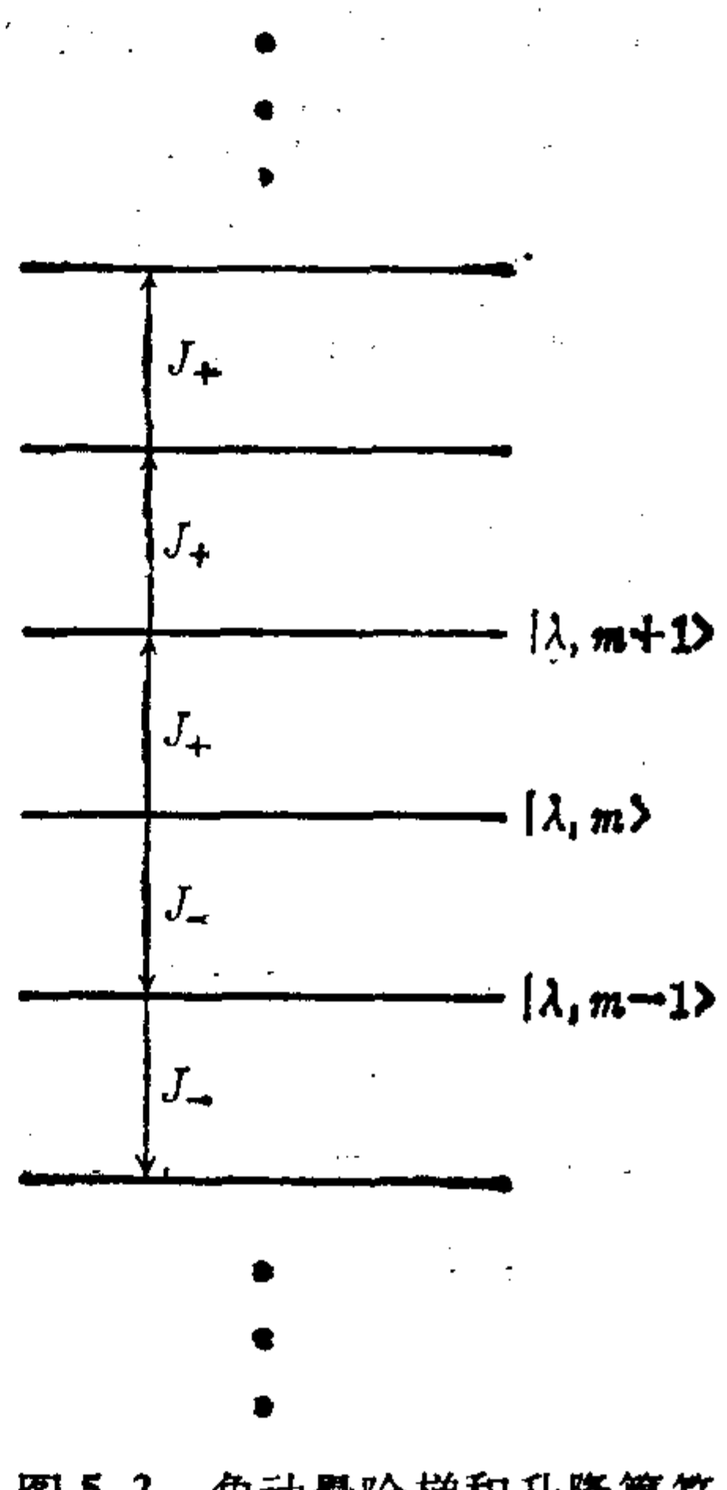



图 5.2　角动量阶梯和升降算符

答案是否定的，只要算出 $J_q|\lambda, m\rangle$ 的模方，就会明白这一点。当用 $J_q$ 作用得到零矢量时，本征矢系列便终止了。实际上，根据 (5.2.6) 式，有

$$\|J_q|\lambda, m\rangle\|^2 = -\langle\lambda, m|J_{-q}J_q|\lambda, m\rangle,$$

而由 (5.2.7) 式，可知

$$-J_{-q}J_q = \frac{1}{2}[J^2 - J_z(J_z + q)],$$

应用 (5.2.8) 式，就会得到

$$\|J_q|\lambda, m\rangle\|^2 = \frac{1}{2}[\lambda - m(m+q)]\langle\lambda, m|\lambda, m\rangle. \tag{5.2.9}$$

由于模方不能是负值，故

$$\lambda - m(m\pm 1) \geqslant 0$$

这表明，$m$ 有最大值和最小值。若将它们分别记为 $m''$ 和 $m'$，则有

$$\left.\begin{aligned}\lambda - m''(m''+1) &= 0\\ \lambda - m'(m'-1) &= 0\end{aligned}\right\}. \tag{5.2.10}$$

其原因在于，一旦第一式不成立，$J_+$ 作用于 $|\lambda, m''\rangle$ 就会制造出 $|\lambda, m''+1\rangle$。第二式与之类似。这样，本征矢系列显然构成 $m$ 由最小值 $m'$ 到最大值 $m''$ 间隔为 1 的阶梯。

由上面第二式两边分别减去第一式，得

$$(m''+m')(m''-m'+1) = 0.$$

但是 $m'' \geqslant m'$，故此式第一个因子必须为零。于是，可以令

$$m'' = -m' \equiv j, \tag{5.2.11}$$

由 (5.2.10) 式，得 $\lambda = j(j+1)$。这个 $j$ 必须是零或正的整数、半整数。其原因在于，$m$ 的值形成间隔为 1 的阶梯，(5.2.11) 式表明

$$2j = m'' - m' = \text{正整数或零}.$$

下面，我们用 $j$ 代替 $\lambda$ 作为本征矢的标记。

这样，对于一个 $j$，显然有 $(2j+1)$ 个本征矢系列：

$$\left.\begin{aligned}&J^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle\\ &J_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle \quad (m = -j, -j+1, \cdots, j)\end{aligned}\right\}. \tag{5.2.12}$$

由此可见，$j$ 能取的值为

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots. \tag{5.2.13}$$

不过，本小节开头时简略了的 $\hbar$，现在复原了。所以 (5.2.12) 式中出现了 $\hbar$。

本征矢系列是由 $J_\pm$ 生成的。 根据 (5.2.9) 式， $J_\pm|j, m\rangle$ 的归一化形式为

$$\left.\begin{aligned}|j, m+1\rangle &= -\left[\frac{2}{(j-m)(j+m+1)}\right]^{1/2}\hbar^{-1}J_+|j, m\rangle \\ |j, m-1\rangle &= \left[\frac{2}{(j+m)(j-m+1)}\right]^{\frac{1}{2}}\hbar^{-1}J_-|j, m\rangle\end{aligned}\right\}. \tag{5.2.14}$$

实际上，仅由 (5.2.9) 式并不能决定归一化因子的相位。只是为了方便，才用 (5.2.14) 式来定义它即使这样，也只能确定 $j$ 相同而 $m$ 不同的 $|j, m\rangle$ 彼此间的相位关系。 至于不同 $j$ 的本征矢的相位关系，将在后面的 d) 小节中处理角动量的合成时再确定。 当然，(5.2.14) 中两个表达式的相位定义并非独立。 把第一式的右矢换成左矢，右边就会出现 $\langle j, m|J_+^\dagger$， 应用 (5.2.6) 式，可得

$$\langle j, m+1| = \left[\frac{2}{(j-m)(j+m+1)}\right]^{1/2}\hbar^{-1}J_-|j, m+1\rangle.$$

把其中的 $m$ 换成 $m-1$， 就得到了 (5.2.14) 的第二式。

本征矢 $|j, m\rangle$ 表示角动量 $\boldsymbol{J}$ 的大小为 $\sqrt{j(j+1)}\,\hbar$， $z$ 分量为 $m\hbar$ 的状态。

当 $m$ 取最大值 $j$ 时， 角动量最接近于 $z$ 轴， 但是， 即使在这种情况下， $z$ 分量也不会等于矢量的大小 $\sqrt{j(j+1)}\,\hbar$。这是因为，对易关系 (5.2.1) 使 $x$、$y$ 分量不能取确定值，总是不断地起伏(见图 5.3)。只有 $j=0$ 的情况是例外，对状态 $|0, 0\rangle$ 来说，角动量的所有分量均取 0 这个确定值。

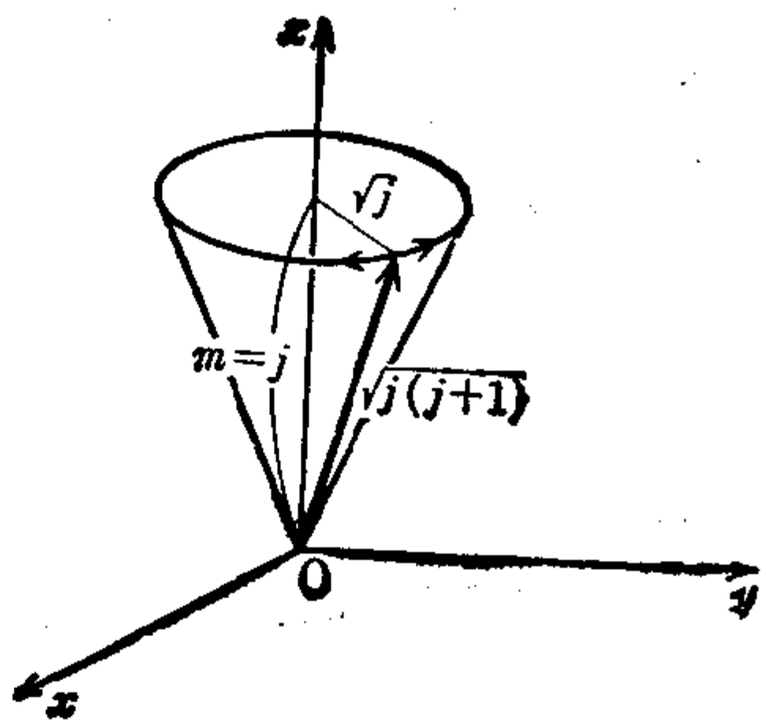



图 5.3 $m=j$ 的状态中角动量的摆动、角动量矢量的大小，以 $\hbar$ 为单位表示. 图中所示为 $j=4$ 的情形

$m$ 的值只能取间隔为 1 的 $(2j+1)$ 个不连续的值。 这意味着， 角动量矢量的方向被限制在张角如图 5.4 所示的不连续圆锥

面上，称之为**空间量子化**。由于 $x$、$y$ 分量起伏，角动量在圆锥面上的所有方向上概率均等。往往将其喻为彗形进动，但角动量的方向却是不定的。

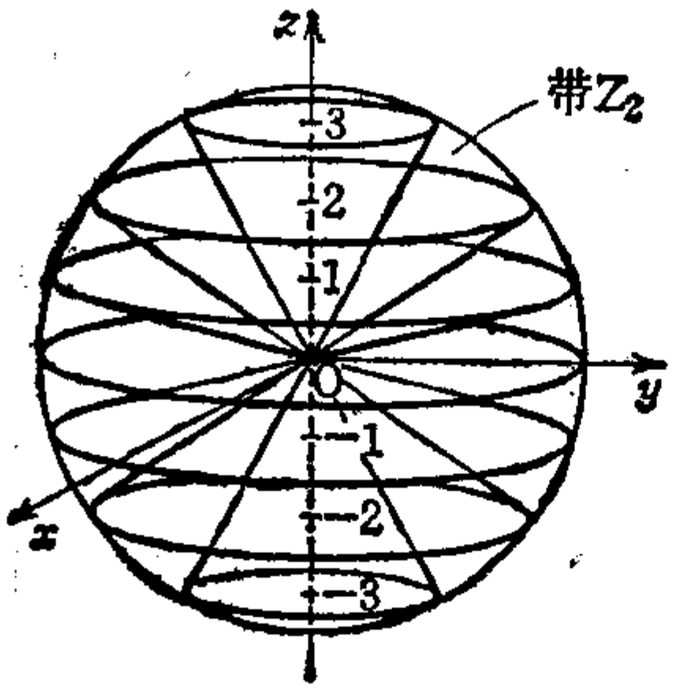



图 5.4　空间量子化、角动量在进动，从球面切取的环状带依次给定 $m$ 的各种值，每个带 $Z_m$ 的面积彼此相等。按统计观点，这表示每个 $m$ 具有相等的概率。特别，在考虑到经典统计力学的极限时，这是一个重要的事实。图中所示为 $j=3$ 的情况

在目前这种只研究角动量的情况下，没有理由该把 $z$ 轴取在空间的哪一个方向上，以此看来，似乎方向量子化颇有扑朔迷离之感。

如果把 $z$ 轴选在另一方向上重新进行上述计算，那就会围绕新的 $z^0$ 轴确立空间量子化。本征函数也不一样了，可以把它写成原基底 $\{|j, m'\rangle\}_{-j\leqslant m'\leqslant j}$ 的线性组合。实际上，若用图5.5所示的欧拉(Euler)角 $\alpha$、$\beta$、$\gamma$ 来表示从原坐标系 $xyz$ 向新坐标系 $x^\circ y^\circ z^\circ$ 的旋转，则如后面就要证明的那样，可以得到

$$|j, m\rangle^\circ = \exp(-i\alpha J_z/\hbar)\exp(-i\beta J_y/\hbar) \times \exp(-i\gamma J_z/\hbar)|j, m\rangle. \tag{5.2.15}$$

因为 $J$ 的任一分量作用于 $|j, m\rangle$ 时，$j$ 的值都不会改变，只有 $m$ 发生变化，所以 $|j, m\rangle^\circ$ 是同一个 $j$ 的基底的线性组合。

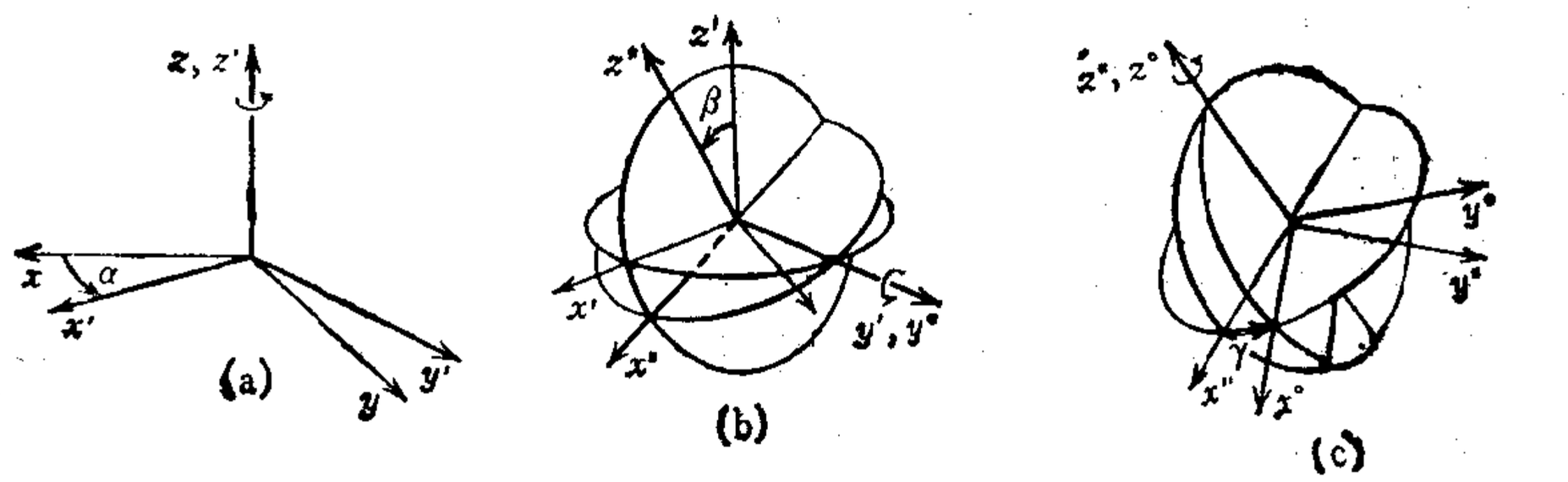



图 5.5　欧勒角．(a) 使坐标系 $xyz$ 绕 $z$ 轴旋转 $\alpha$ 角得到 $x'y'z'$；(b) 将其再绕 $y'$ 轴旋转 $\beta$ 角得到 $x''y''z''$；(c) 将其再绕 $z''$ 轴旋转 $\gamma$ 角就得到了坐标系 $x^\circ y^\circ z^\circ$

现在来证明变换式 (5.2.15)。图 5.5 中的变换可以写成

$$U = \exp(-i\gamma J_{z''}/\hbar)\exp(-i\beta J_{y'}/\hbar)\exp(-i\alpha J_z/\hbar),$$

其中 $J_{y'}$ 和 $J_{z''}$ 是绕变化了的轴旋转的角动量，有的要用原来的 $J_x$、$J_y$、$J_z$ 来表示它们。由于 $y'$ 轴是 $y$ 轴绕 $z$ 轴旋转 $\alpha$ 角后形成的。因此可写

$$J_{y'} = \exp(-i\alpha J_z/\hbar)J_y\exp(i\alpha J_z/\hbar).$$

同样，有

$$J_{z''} = \exp(-i\beta J_{y'}/\hbar)J_{z'}\exp(i\beta J_{y'}/\hbar).$$

注意到 $J_{z'} = J_z$，并在上式中将 $J_{y'}$ 换成 $J_y$，有

$$J_{z''} = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\alpha J_z\right)\exp\left(\frac{-i}{\hbar}\beta J_y\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\alpha J_z\right)$$

$$\times J_z\exp\left(\frac{-i}{\hbar}\alpha J_z\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\beta J_y\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\alpha J_z\right),$$

进而得到

$$\exp(-i\gamma J_{z''}/\hbar) = \exp(i\alpha J_z/\hbar)\exp(-i\beta J_y/\hbar)\exp(-i\gamma J_z/\hbar)$$
$$\times \exp(i\beta J_y/\hbar)\exp(i\alpha J_z/\hbar).$$

将它和由上面 $J_{y'}$ 的表达式得到的 $\exp(-i\beta J_{y'}/\hbar)$ 代入前面的 $U$ 的表示式，就可以证明 (5.2.15) 式。以后推导 (5.2.43) 式时还要用到变换 (5.2.15)。

空间量子化与 $J^2$ 和 $J_z$ 对角化所形成的基底有关，无需先验地限定角动量在某个特殊方向上。

### b) 轨道角动量，球函数

我们把轨道角动量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ 算符写成极坐标形式来求其本征函数。这样一来，伴随着空间量子化，存在概率密度就会明显地变成各向异性的了。

极坐标 $(r, \theta, \varphi)$ 与直角坐标 $(x, y, z)$ 之间的关系是

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2},$$

$$\tan\theta = \sqrt{x^2 + y^2}/z, \quad \tan\varphi = y/x.$$

动量的 $x$ 分量用极坐标表示，是

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\left[\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right],$$

进而，

$$p_x = -i\hbar\left(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right.$$

$$\left. - \frac{\sin\varphi}{r\cos\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

同样计算出其它分量，再与 $r$ 构成矢积，便得到轨道角动量

$$L_x = -i\hbar\left[-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right],$$

$$L_y = -i\hbar\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right],$$

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

注意这些算符的顺序，求其平方和，有

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \quad (5.2.16)$$

与 (5.2.4) 式相当的算符是(重号同序)

$$L_\pm = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}}e^{\pm i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]. \quad (5.2.17)$$

于是，在上一小节 (5.2.13) 式的本征矢中，可以先求出 $m = 0$ 的本征矢。求出它之后，利用 (5.2.14) 式就可以直接得到 $m \neq 0$ 的本征矢了。

$L^2$ 和 $L_z$ 的本征函数，一般来说，是 $\theta$ 和 $\varphi$ 的函数，而根据微分算符 $L_z$ 的形式可知，$m = 0$ 的本征函数是与 $\varphi$ 无关的。将其写为 $P(\cos\theta)$，设 $L^2$ 的本征值为 $\lambda$，则 $L^2$ 的本征方程为

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}P(\cos\theta) = \lambda P(\cos\theta).$$

若把变量换成 $\cos\theta = z$，那么，它就变成勒让德 (Legendre) 方程了：

$$\left[(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}-2z\frac{d}{dz}+\lambda\right]P(z)=0. \qquad (5.2.18)$$

$z$ 的定义域是 $[-1, 1]$.

在复 $z$ 平面上,该方程的极点为 $z=\pm 1, \infty$. 一般来说,对于 $u=u(z)$ 的二阶线性微分方程:

$$\frac{d^2u}{dz^2}+A(z)\frac{du}{dz}+B(z)u=0,$$

其系数 $A(z)$、$B(z)$ 中的一个或二个在 $z=c$ 处奇异,而在该点 $A_1(z)\equiv(z-c)A(z)$、 $B_1(z)=(z-c)^2B(z)$ 正则时, 就把 $z=c$ 叫做**极点**,在正则奇点附近,由

$$\rho(\rho-1)+\rho A_1(c)+B_1(c)=0$$

的两个根 $\rho=\rho_1$、$\rho_2$ 构成微分方程的两个独立解

$$u(z)=(z-c)^\rho[1+a_1(z-c)+a_2(z-c)^2+\cdots].$$

不过,两根之差 $\rho_1-\rho_2$ 为正整数或零的情况是个例外,这时,独立解是 $\rho=\rho_1$ 的 $u$ 和下式的 $v$:

$$v(z)=k(z-c)^{\rho_1}[1+a_1(z-c)+\cdots]\ln(z-c)$$
$$+(z-c)^{\rho_2}[1+b_1(z-c)+\cdots],$$

其中的 $k$ 也可能等于零.

(5.2.18) 式的正则奇点 $z=1$, 其指数方程是 $\rho^2=0$, 所以,根据上述一般理论,解在 $z=1$ 附近既有类似于 $(1-z)^0$ 的性质,又有类似于 $\ln(1-z)$ 的性质.

当变数回复到 $\theta$ 时, 后者正比于 $\ln\theta$. 由于这种解本身是平方可积的,因此不能一概排除,但当用 (5.2.17)式的 $L_\pm$ 作用时,该性质便消失殆尽,按照上一小节的一般理论,这种情况最终必须排除. 关于 $z=-1$ 附近的情形,也可以做同样的讨论.

因此, 所要求的本征函数, 显然应该在 $z=\pm 1$ 之间选择 (5.2.18) 式的上则解. 我们已知,这样的解,仅当

$$\lambda=l(l+1), \quad l=0, 1, 2, \cdots \qquad (5.2.19)$$

时,才是存在的,并由下述勒让德多项式给出:

$$P_l(z)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l. \qquad (5.2.20)$$

将其乘以 $\sqrt{(2l+1)/4\pi}$，就可以在单位球面上归一化（见稍后的(5.2.23)式），而成为上一节用 $|l,0\rangle$ 表示的 $\langle\cos\theta,\varphi|l,0\rangle$，由于是用 $d\cos\theta d\varphi$ 的积分归一化的，因此不能写成 $\langle\theta,\varphi|l,0\rangle$。

将 $L_\pm$ 反复作用于 $|l,0\rangle$，可以构成 $m\neq 0$ 的本征矢 $|l,m\rangle$。我们用归纳法证明，其表示 $\langle\cos\theta,\varphi|l,m\rangle$ 就是所谓球函数

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\times P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}。\tag{5.2.21}$$

其中

$$P_l^m(z)=(1-z^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}}P_l(z)\tag{5.2.22}$$

叫做综合勒让德函数。(5.2.21)式在单位球面上具有正交归一性：

$$\int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\delta_{ll'}\delta_{mm'}。\tag{5.2.23}$$

若代替(5.2.22)式，定义

$$\mathscr{P}_l^m(z)=(1-z^2)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}}\frac{1}{2^l l!}(z^2-1)^l,$$

则有

$$\mathscr{P}_l^{-m}=(-1)^m\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\mathscr{P}_l^m,$$

从而可把 $Y_{lm}$ 写成

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\mathscr{P}_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi},$$

这样就避免了(5.2.21)式中出现的绝对值记号。

现在用归纳法来证明(5.2.21)式。首先，当 $m=0$ 时，(5.2.21)的定义确实是

$$Y_{l0}(\theta,\varphi)=\langle\cos\theta,\varphi|l,0\rangle,$$

而与(5.2.14)式相当，在重号同序时，有

$$\mp\sqrt{\frac{2}{(l-|m|)(l+|m|+1)}}\hbar^{-1}L_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$=Y_{l,m\pm1}(\theta,\varphi)。\tag{5.2.24}$$

不过，当 $m\geqslant 0$ 时仅用 $L_+$ 作用，当 $m\leqslant 0$ 时仅用 $L_-$ 作用，使$m$的值增减．这样，就把

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\langle\cos\theta,\varphi|l,m\rangle\tag{5.2.25}$$

(对于 $m=0,1,2,\cdots$ 和 $m=0,-1,-2,\cdots$) 依次弄清楚了．为了明了(5.2.24)式，以 $\cos\theta=z$ 为变量时，可以用(5.2.17)式中的 $L_\pm$ 写成

$$L_{\pm}u(z)e^{\pm i|m|\varphi}=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{\pm i(|m|+1)\varphi}(1-z^2)^{(|m|+1)/2}$$

$$\times\frac{\partial}{\partial z}(1-z^2)^{-|m|/2}u(z)。$$

其中 $u$ 是任意函数．证明完毕。

以上计算的出发点是 $m=0$ 时的本征函数，但若代之以$m=1/2$的本征函数，却是行不通的．(什么地方有问题呢？)因此，轨道角动量 $L^2$ 和 $L_z$ 只有(5.2.25)形式的共同本征函数，它们的本征值分别是 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$．按照一般理论结果(5.2.12)，$m$限于取$-l,-l+1,\cdots,l$ 这样 $2l+1$ 个值，而 $l$ 的值限于取正整数或零．由历史上原因所致，人们把 $l=0,1,2,\cdots$ 的状态依次叫做 s，p，d，f，$\cdots$ 状态。

球函数的下列诸性质有助于求解各种各样的量子力学问题。

首先，对于坐标轴反射(图5.6)，由(5.2.21)式，有

$$Y_{lm}(\pi-\theta,\pi+\varphi)=(-1)^lY_{lm}(\theta,\varphi)。$$

这表明，轨道角动量本征态具有的宇称为$(-1)^l$。

再由定义(5.2.21)，可得

$$\left.\begin{aligned}\cos\theta Y_{lm}=&\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1,m}\\&+\sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1,m}\end{aligned}\right|$$

$$\pm \sin\theta e^{i\varphi} Y_{lm} = -\sqrt{\frac{(l\pm m+1)(l\pm m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}\, Y_{l+1,m\pm1} \Bigg\}\cdot$$
$$+\sqrt{\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}\, Y_{l-1,m\pm1} \Bigg| \tag{5.2.26}$$

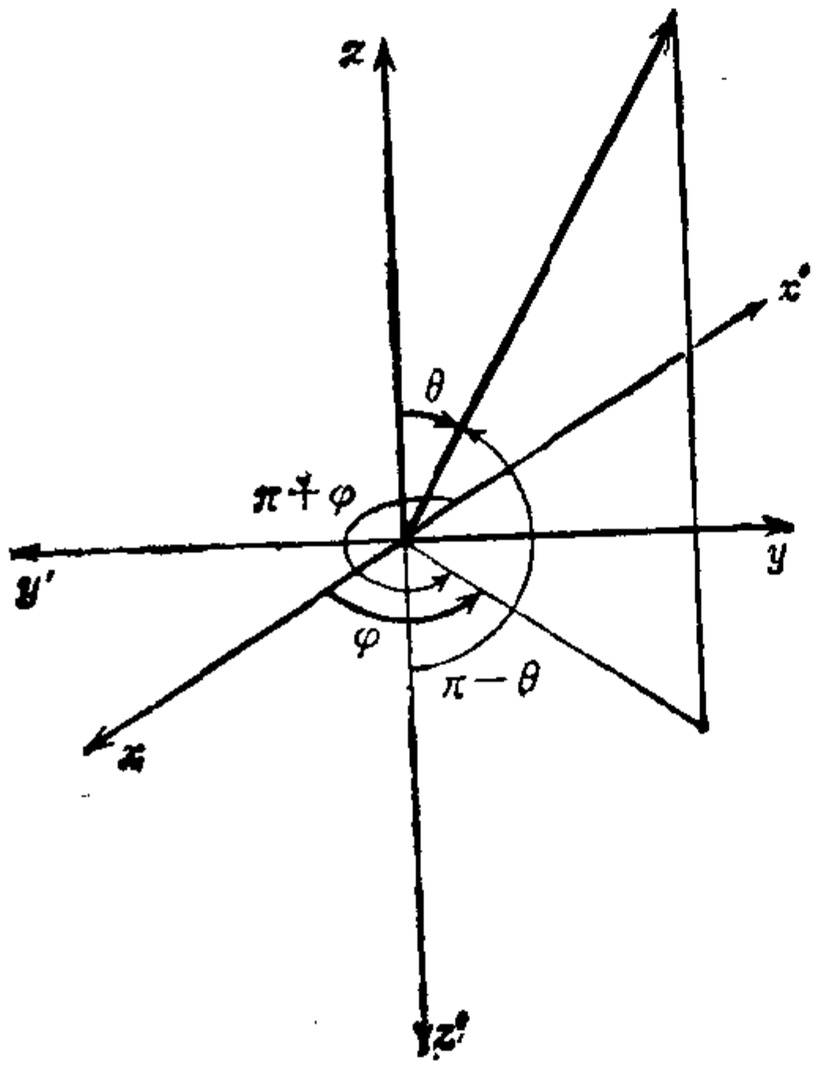



图 5.6　坐标系反射

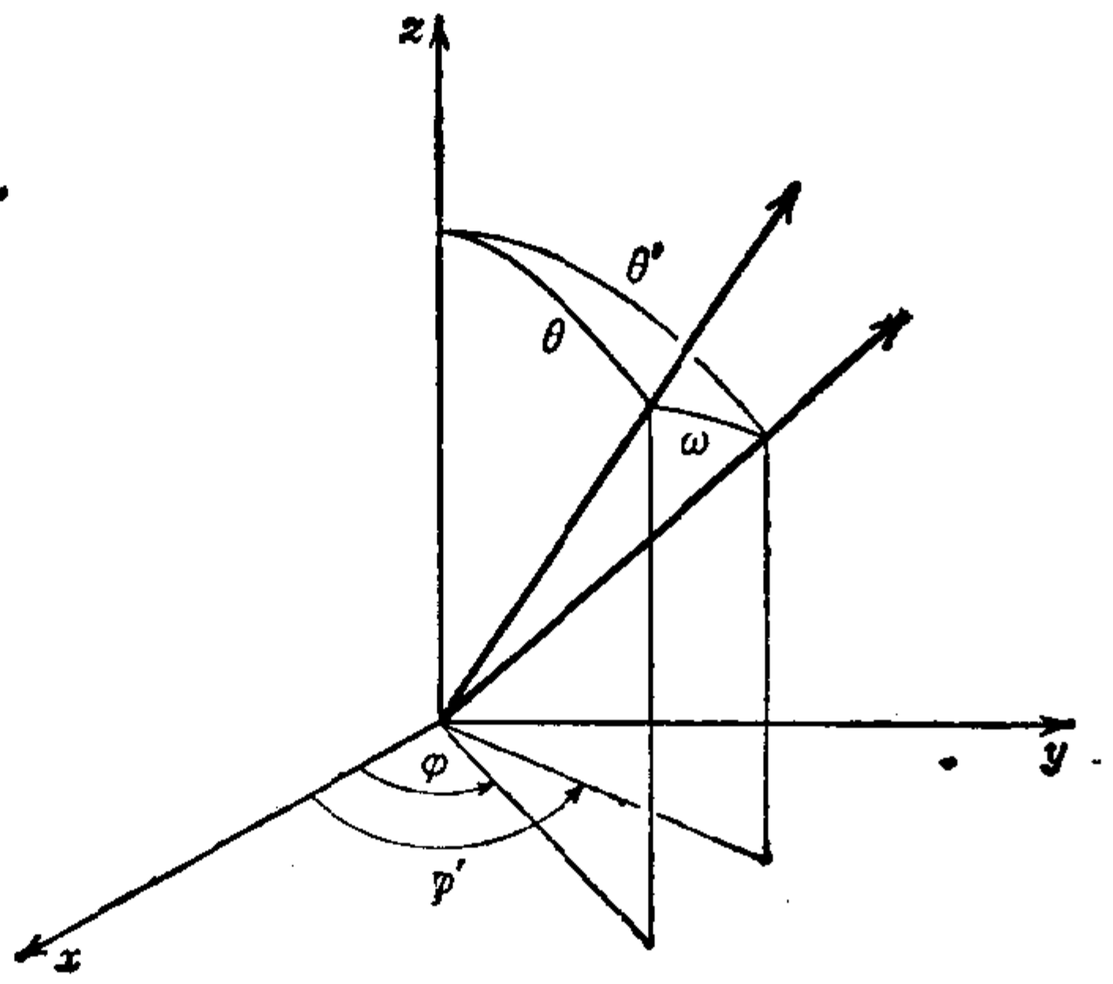



图 5.7　两个矢量间的夹角 $\omega$

应用(5.2.24)式，有

$$\frac{\partial}{\partial\theta} Y_{lm} = \frac{1}{2}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\, Y_{l,m+1} e^{-i\varphi}$$
$$-\frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\, Y_{l,m-1} e^{i\varphi},$$

$$m\cot\theta Y_{lm} = -\frac{1}{2}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\, Y_{l,m+1} e^{-i\varphi}$$
$$-\frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\, Y_{l,m-1} e^{i\varphi}.$$

可以证明，这些表达式两边都具有相同的宇称.

球函数的正交归一性已由 (5.2.23) 式给出了. 与 (4.3.8) 式相应的完备性是

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\theta,\varphi)Y_{lm}^{*}(\theta',\varphi')$$

$$=\delta(\cos\theta-\cos\theta')\delta(\varphi-\varphi').$$

右边之所以变成为 $\cos\theta$ 的 $\delta$ 函数，原因在于 $Y_{lm}$ 是用 $d\cos\theta d\varphi$ 归一化的(两边乘以 $Y_{lm}^{*}(\theta,\varphi)$ 再积分)，这也正好与 $\sum_{lm}\langle\cos\theta,\varphi|l,m\rangle\langle l,m|\cos\theta',\varphi'\rangle=\langle\cos\theta,\varphi|\cos\theta',\varphi'\rangle$ 的记法对应.

若在上面完备性的表达式中不对 $l$ 求和，则会得到加法定理

$$\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\theta,\varphi)\,Y_{lm}^{*}(\theta',\varphi')=\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\cos\omega)$$

$$=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,Y_{l0}(\omega,0), \qquad (5.2.27)$$

其中 $\omega$ 是 $(\theta',\varphi')$ 方向与 $(\theta,\varphi)$ 方向之间的夹角(图 5.7)，下面我们来证明这个公式. 首先，取 $(\theta',\varphi')$ 方向为 $z'$ 轴时，左边是角动量在该方向上分量

$$L_{z'}=\boldsymbol{n}'\cdot\boldsymbol{L},\quad n'=(\sin\theta'\cos\varphi',\ \sin\theta'\sin\varphi',\ \cos\theta')$$

的本征值为零的本征函数. 还须借助于(5.2.24)和(5.2.26)式，再注意(5.2.27)式两边可同除以常数，接着取 $\theta=\varphi=0$，便有

$$Y_{lm}(0,0)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\delta_{m0},$$

再来比较两边的值，即可得证.

若将上述完备性的表达式从 0 到 $2\pi$ 对 $\varphi$ 积分，也可得到勒让德函数系的完备性

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)P_l(\cos\theta')$$

$$=2\delta(\cos\theta-\cos\theta'). \qquad (5.2.28)$$

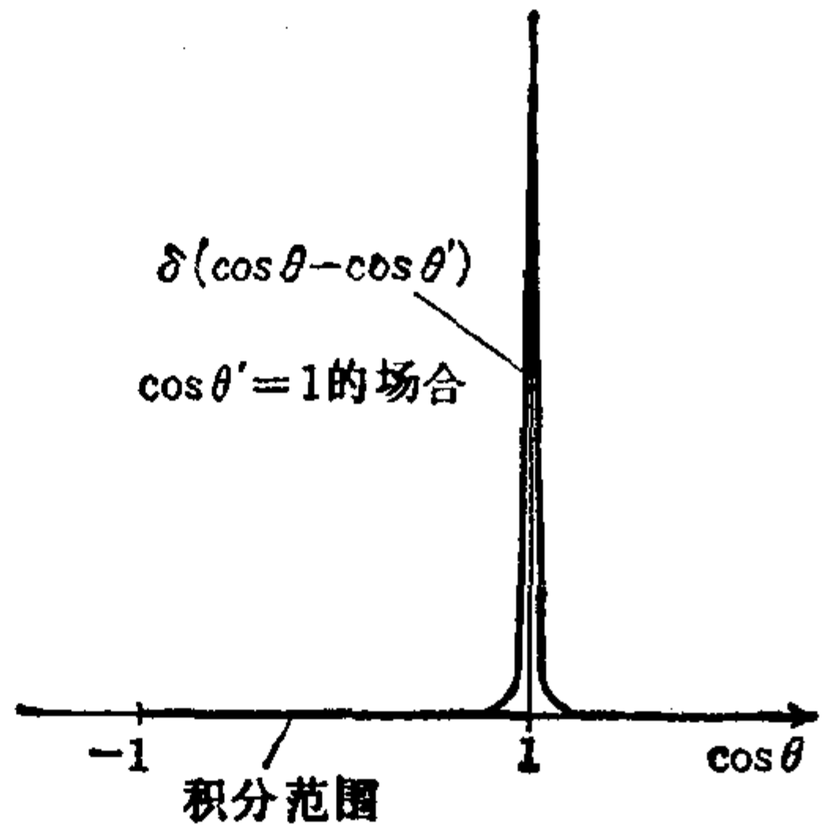



图 5.8 在 $\cos\theta'=1,-1$ 的情况下，(5.2.28)式右边的因子必须为 $\psi$.

这里有一个练习题：我们在上式中取 $\theta'=0$，两边乘以 $P_{l'}(\cos\theta)$，再从 0 到 $\pi$ 积分 $(\sin\theta d\theta)$.

$\delta(\cos\theta-1)$ 是以 $\cos\theta-1=0$ 为中心、横跨两边的一个尖峰，现在积分范围只覆盖了它的一半（图 5.8），那么应如何处理？

最后，再给出一个广泛应用的公式

$$\sum_{l=0}^{\infty} s^l P_l(\cos\theta)=(1-2s\cos\theta+s^2)^{-1/2} \quad (|s|<1). \tag{5.2.29}$$

此式表明，当把右边写成 $s$ 的幂级数时，$s^l$ 的系数是 $P_l(\cos\theta)$，因此把它叫做勒让德多项式的母函数。应用(5.2.20)式也可以证明这个结论。现在，应用上述结果，我们考虑

$$\Phi(r,\theta)=\Theta(r-a)\sum_{l=0}^{\infty}\frac{a^l}{r^{l+1}}P_l(\cos\theta)+\Theta(a-r)$$

$$\times\sum_{l=0}^{\infty}\frac{r^l}{a^{l+1}}P_l(\cos\theta), \tag{5.2.30}$$

其中，当 $a>0$时，$\Theta$ 通常用小写字母 $\theta$ 表示。

$$\Theta(x)=\begin{cases}1 & x>0\\ 0 & x<0\end{cases},$$

称为阶梯函数。注意到，其微商为

$$\frac{\partial}{\partial r}\Theta(r-a)=-\frac{\partial}{\partial a}\Theta(r-a)=\delta(r-a),$$

利用(5.2.28)式，可以得到

$$\Delta\Phi(r,\theta)=-4r^{-2}\delta(r-a)\delta(\cos\theta-1).$$

如解答上面那个练习时已知道的那样，(5.2.28) 式右边的系数 2 在 $\theta=0$ 时应为 4。现在再来看看 $\Delta\Phi$ 等号的右边，若将其乘以任意连续函数 $F(r,\cos\theta,\varphi)$ 再积分，则它与三维 $\delta$ 函数的作用相同，即

$$\Delta\Phi(r,\theta)=-4\pi\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}),$$

其中，$\boldsymbol{a}$ 是极轴方向上长度为 $a$ 的矢量。也就是说，(5.2.30) 式中的 $\Phi$ 满足在 $\boldsymbol{a}$ 点存在单位正电荷时的静电势方程。由于它还满足 $r\to\infty$ 时趋近于零的边界条件，因此 $\Phi$ 与该库仑势一致。即 $\Phi=$

$1/|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}|$. 在其中,当 $a<r$ 时,令 $s=a/r$, 便可得到(5.2.29)式.

读者可以仿照 (5.2.29) 式来计算(5.2.22)式,以便求出 $P_l^m(\cos\theta)$ 的母函数.

我们列举球函数的几个例子

$$Y_{00}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}},$$

$$Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,$$

$$Y_{1,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{20}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1),$$

$$Y_{2,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\, e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm2}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm i2\varphi}.$$

特别当 $m=\pm l$ 时,球函数的一般表达式很简单:

$$Y_{l,\pm l}=(-1)^{(l\pm l)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2}}\sin^l\theta e^{il\varphi}. \tag{5.2.31}$$

另外,当 $l\gg|m|$ 时,有近似式

$$Y_{lm}\simeq(-1)^{(m-|m|)/2}\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{1}{\sin\theta}}\cos\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta+\frac{|m|}{2}\pi-\frac{\pi}{4}\right]e^{im\varphi}. \tag{5.2.32}$$

研究一下这些函数的形式,就会发现它们具有与 $l$ 和 $m$ 的物理意义相符合的特征(见图 5.9).

下面我们来说明电子处于角动量为 $l$、$m$ 状态时的情况. 在 $m=\pm l$ 的状态中,"角动量矢量沿着 $z$ 轴方向",按照经典力学,电子就是在赤道面上运动. 与此相应,在有关方向 $\theta=\pi/2$, 电

子的存在概率密度 $|Y_{l,\pm l}(\theta,\varphi)|^2$ 最大，离开赤道面越远它越小，到

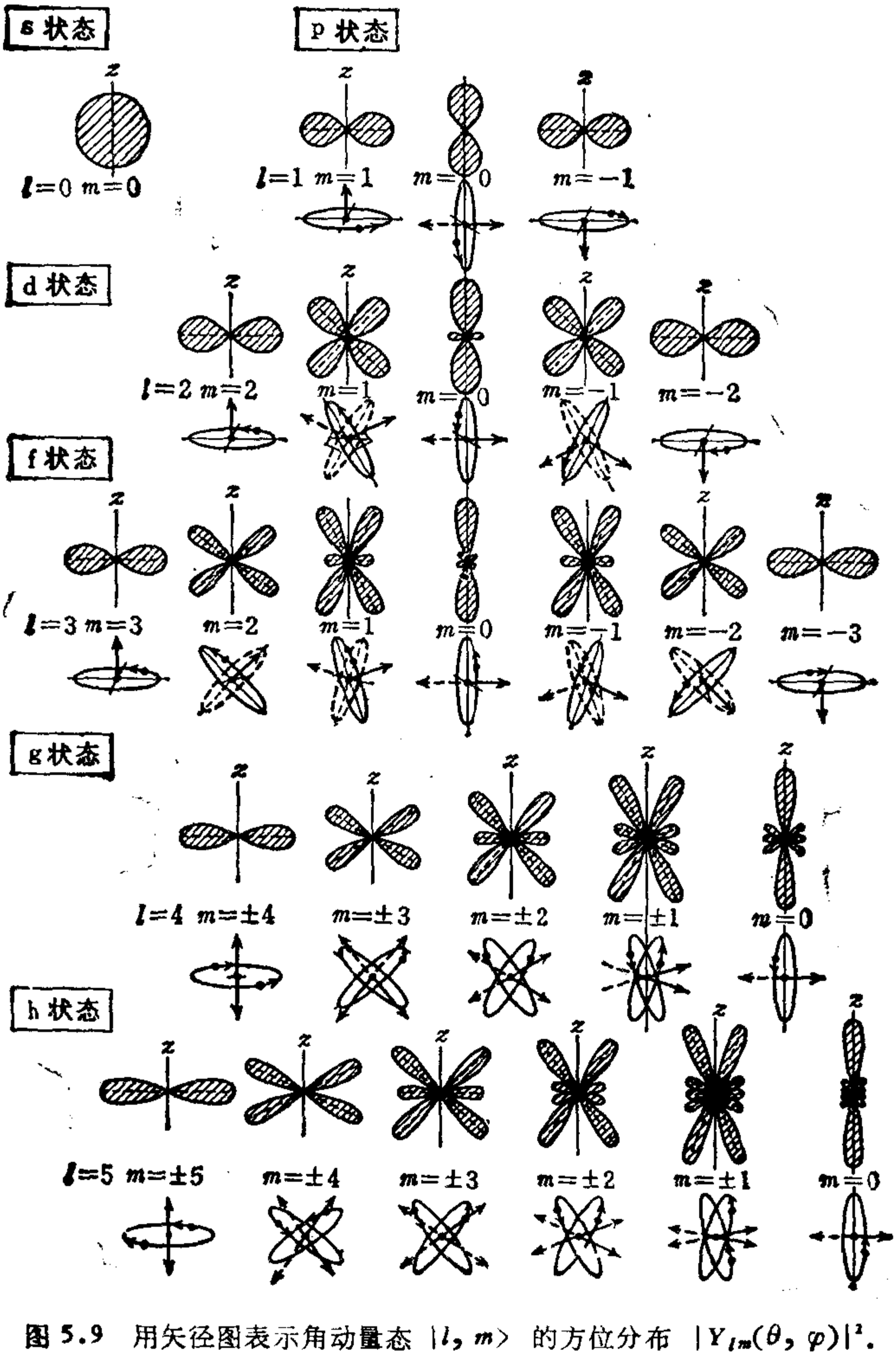



图 5.9 用矢径图表示角动量态 $|l, m\rangle$ 的方位分布 $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$. 实际分布要用这个图绕 $z$ 轴转一圈才能得到. $m = 0$ 状态的图大约扩大 $l + 1$ 倍，就会与 $l$ 相同的其它图大小相同了. 图上还画出了对应的经典轨道(根据 White, H. E., *Phys. Rev.* **37**,1416 (1931))

$\theta = 0$ 时变为零. 由 (5.2.31) 式可知，$l$ 越大，存在概率密度向赤道面集中的程度越大，在 $l \to \infty$ 的经典极限，就完全集中在

赤道面上了。另外，在所考虑的状态 $|l, m = \pm l\rangle$ 中，有

$$[(L_x^2 + L_y^2) \text{ 的本征值}] / [L^2 \text{ 的本征值}] = 1/l,$$

由此，也可以预料（图5.3）到上述结果。就电子的存在概率密度而言，最好是计算 $\cos^2\theta$ 的期待值。应用（5.2.26）式，可以得到

$$\int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cos^2\theta |Y_{l,\pm l}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{1}{2l+3}.$$

而在角动量的 $z$ 分量很小的情况下，电子的“轨道几乎穿过南北两极”，因此，电子的存在概率密度也应该在两极方向最高。看看 $|Y_{lm}(0, \varphi)|^2$，可知情况确实如此。特别是在经典极限，由（5.2.32）式，有

$$|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \sim \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{\sin\theta}$$

$$(l \gg |m|), \qquad (5.2.33)$$

这与由两极上轨道密集情况计算出的概率密度是一致的（图 5.10）. 其中，已把（5.2.32）式中剧烈振荡项 $\cos^2\left[\left(l + \frac{1}{2}\right)\theta + \cdots\right]$ 对所有的 $\theta$ 进行了局位平均，并用 1/2 来代替了。这种剧烈振荡表明，由于角动量增加，动量也将变大。在半径为 $r$ 的大圆上来观察这个振荡，其波长为 $\frac{2\pi r}{l + \frac{1}{2}}$. 若把它看成是德布罗意波长，则动量就是 $\left(l + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{r} \simeq \sqrt{l(l+1)}\ \frac{\hbar}{r}$，确实与角动量大小相同。

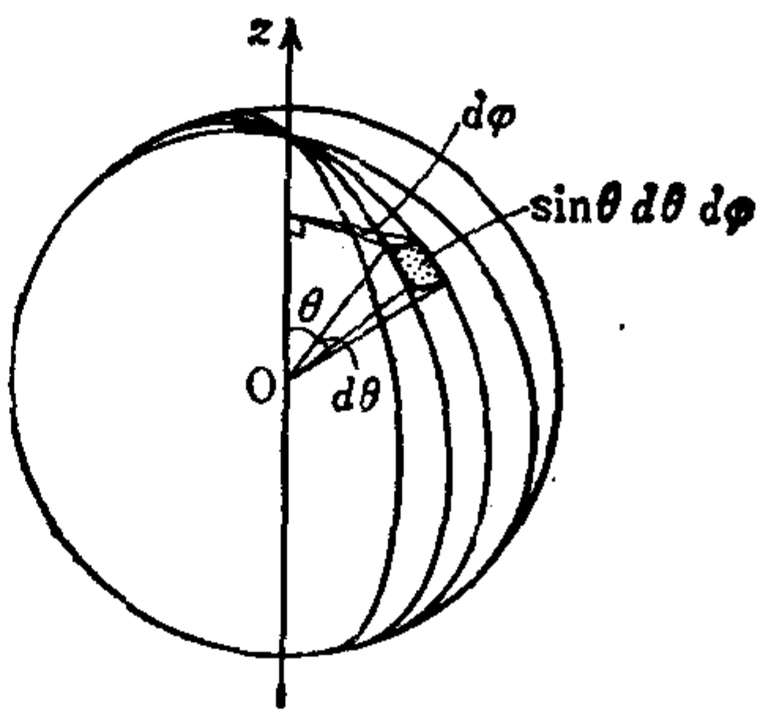



图 5.10　若电子沿着通过两极的大圆匀速运动，则在 $\theta$ 的定义域 $[0, \pi]$ 内，它停留在张角 $d\theta$ 的弧上的比为 $\frac{d\theta}{\pi}$，该轨道面处于 $d\theta$ 内的比为 $\frac{d\varphi}{2\pi}$. 用二者之积除以 $d\theta\, d\varphi$ 所张成的立体角，就会得到有关方向上电子的存在概率密度 $1/(2\pi^2\sin\theta)$

### c) 自旋

（5.2.13）式表明，角动量的大小 $j$ 也可以是半奇数，而轨道角

动量的大小 $l$ 却只能取整数值 (5.2.19)。但是，自然界并未遗忘利用半奇数角动量的可能性。例如，电子除轨道角动量外还具有本征角动量，其大小为 1/2。一般称粒子阶具有的本征角动量为**自旋**。自旋并不限于半奇数。$\pi$ 介子的自旋为零，氮原子核的自旋为 1[1]。

自旋角动量算符不能像轨道角动量算符 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 那样用正则变量来表示。在某种意义上，只能用矩阵表示。用角动量的一般公式 (5.2.14) 与 $\langle j, m+1|$，$\langle j, m-1|$ 做标积。它们都是已归一化的，于是，(设重量同序)得到

$$\left.\begin{aligned}\langle j, m\pm 1|J_x\pm iJ_y|j, m\rangle &= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\\ \langle j, m|J_z|j, m\rangle &= m\hbar\end{aligned}\right\}. \tag{5.2.34}$$

除此之外的矩阵元均为零。

当代表自旋算符时，特别用 $\boldsymbol{S}$ 来表示，而且用 $\boldsymbol{S}$ 来表示自旋的大小。根据上式，在 $s=\frac{1}{2}$ 时，有

$$\begin{aligned}S_x &= \begin{bmatrix}\left\langle\frac{1}{2}\middle|S_x\middle|\frac{1}{2}\right\rangle & \left\langle\frac{1}{2}\middle|S_x\middle|-\frac{1}{2}\right\rangle\\ \left\langle-\frac{1}{2}\middle|S_x\middle|\frac{1}{2}\right\rangle & \left\langle-\frac{1}{2}\middle|S_x\middle|-\frac{1}{2}\right\rangle\end{bmatrix}\\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\end{aligned}$$

其中，在左矢和右矢内省略了 $s=\frac{1}{2}$。用同样记法，可以写出

$$S_y=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix},\qquad S_z=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}.$$

为了方便起见，经常把它们写成

$$\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}, \tag{5.2.35}$$

---

1) 有关自旋的历史状况，请参看朝永的书(见书末)。

其中，$\sigma$ 是泡利矩阵，它们满足下述关系：

$$\sigma_x^2 = 1,\ \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0,\ \sigma_x\sigma_y = i\sigma_z, \tag{5.2.36}$$

其中的 $x, y, z$ 可以循环置换。

上述矩阵 $\boldsymbol{S}$ 用的是自旋子分量对角化的表象，并且约定把自旋态 $|\chi\rangle$ 的分量 $\langle m|\chi\rangle$ 像下面那样排在一起

$$\begin{bmatrix} \left\langle \frac{1}{2} \right| \chi \rangle \\ \left\langle -\frac{1}{2} \right| \chi \rangle \end{bmatrix} \tag{5.2.37}$$

并以此来规定矩阵中行和列的顺序。做为例子，我们可计算 $\langle m|S_x|\chi\rangle$。这时 $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 和 $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ 分别是 $S_x$ 的本征矢，习惯上常用 $\alpha$ 和 $\beta$ 来代表它们。

对于具有自旋的粒子来说，譬如，可以把自旋 $z$ 分量与位置坐标合起来构成完整可观测量组，于是，状态可详细表示为 $\langle \boldsymbol{r}, m|\phi\rangle$。(5.2.37) 式中的 $\langle m|\chi\rangle$ 当然也是 $r$ 的函数，与 $m=\frac{1}{2}$、$-\frac{1}{2}$ 相应，把它写成 $\phi_\uparrow(r)$，$\phi_\downarrow(r)$（读作 $\phi_{上}$、$\phi_{下}$），即

$$\begin{bmatrix} \left\langle \boldsymbol{r}, \frac{1}{2} \right| \phi \rangle \\ \left\langle \boldsymbol{r}, -\frac{1}{2} \right| \phi \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_\uparrow(r) \\ \phi_\downarrow(r) \end{bmatrix}. \tag{5.2.38}$$

在该状态中，粒子处于 $\boldsymbol{r}$ 附近体积元 $d^3\boldsymbol{r}$ 内自旋“向上”($m = 1/2$) 的概率为 $|\phi_\uparrow(\boldsymbol{r})|^2 d^3r$，而自旋“向下” $\left(m = -\frac{1}{2}\right)$ 的概率为 $|\phi_\downarrow(r)|^2 d^3\boldsymbol{r}$。“两分量”波函数归一化为

$$\int \{|\phi_\uparrow(\boldsymbol{r})|^2 + |\phi_\downarrow(\boldsymbol{r})|^2\} d^3\boldsymbol{r} = 1. \tag{5.2.39}$$

自旋的(例如) $x$ 分量的期待值 $\langle S_x\rangle$ 为

$$\frac{\hbar}{2}\int (\phi_\uparrow^*(\boldsymbol{r})\phi_\downarrow^*(r)) \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_\uparrow(\boldsymbol{r}) \\ \phi_\downarrow(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix} d^3\boldsymbol{r}$$

$$= \hbar \int \mathrm{Re}\{\psi_{\uparrow}^{*}(r)\psi_{\downarrow}(r)\}d^{3}r. \qquad (5.2.40)$$

一般，自旋在极角为 $(\theta, \varphi)$ 的单位矢量 $n$（图 5.11）方向上的分量 $S_n$ 的矩阵表示是

$$S_n = n \cdot S = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix}, \qquad (5.2.41)$$

如同物理上可以预料的那样，它也具有本征值为 $\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$ 的本征态 $|\chi_{\pm n}\rangle$：

$$\begin{bmatrix} \left\langle \frac{1}{2} \middle| \chi_n \right\rangle \\ \left\langle -\frac{1}{2} \middle| \chi_n \right\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \left\langle \frac{1}{2} \middle| \chi_{-n} \right\rangle \\ \left\langle -\frac{1}{2} \middle| \chi_{-n} \right\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \cos\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{bmatrix}. \qquad (5.2.42)$$

即使让角 $\varphi$ 从 0 变到 $2\pi$，使 $n$ 绕 $z$ 轴转一圈，该本征函数也不会回复到原来的值。另外，仿照 (5.2.15) 式，对 $S_z$ 的本征矢 $\alpha = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 和 $\beta = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ 乘上

$$U(\theta, \varphi) = \exp(-iS_z\varphi/\hbar)\exp(-iS_y\theta/\hbar), \qquad (5.2.43)$$

亦可得到 (5.2.42) 式。在图 5.5 中让变换后的坐标系的 $z$ 轴取 $n$ 的方向，于是其欧勒角 $\beta = \theta, \alpha = \varphi$。

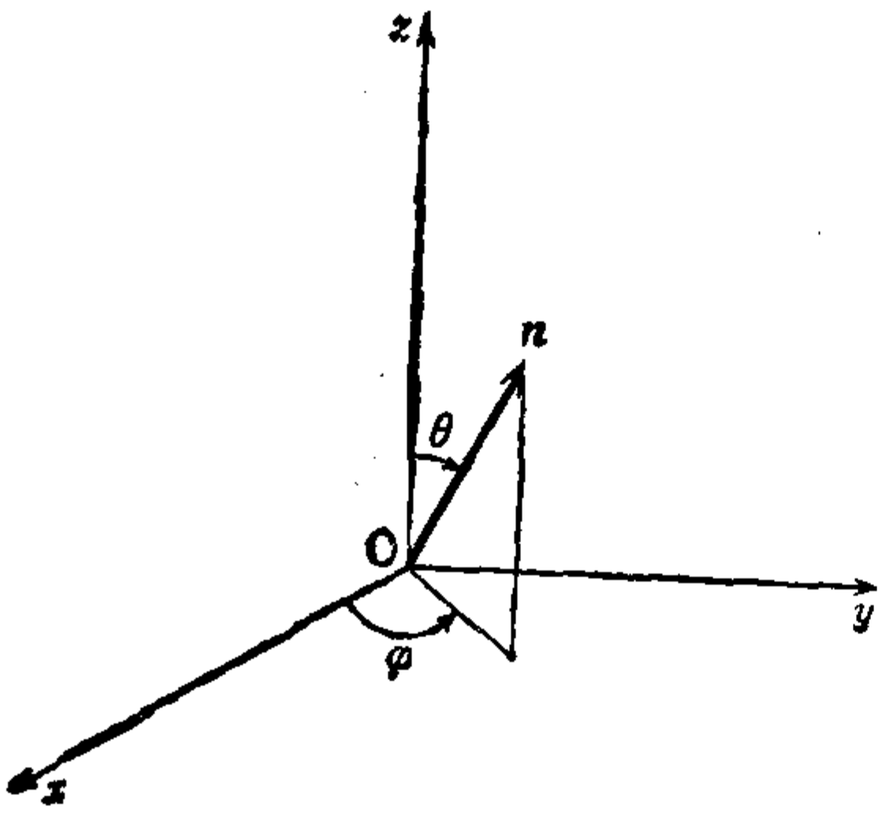



图 5.11　单位矢量 $n$

可以把 (5.2.41) 式写成

$$S_n = U(\theta, \varphi)S_zU^{\dagger}(\theta, \varphi). \qquad (5.2.44)$$

下面来计算 (5.2.43) 式。根据 (5.2.36) 的第一式，可以得到

$$\sigma_y^{2k} = 1,\ \sigma_y^{2k+1} = \sigma_y,\ k = 0, 1, \cdots,$$

从而有

$$\exp(-iS_y\theta/\hbar) = \exp(-i\sigma_y\theta/2)$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\left(i\frac{\theta}{2}\right)^k \sigma_y^k = \cos\frac{\theta}{2} - i\sigma_y \sin\frac{\theta}{2}. \quad (5.2.45)$$

由于 $S_z$ 是对角型的，因此 $\exp(-iS_z\varphi/\hbar)$ 计算起来不难，写成矩阵形式，则有

$$\exp(-iS_y\theta/\hbar) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix},$$

$$\exp(-iS_z\varphi/\hbar) = \begin{bmatrix} e^{-i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi/2} \end{bmatrix}.$$

读者可以证明，只要构成（5.2.43）式中的 $U$，它就会给出（5.2.42）式。

从坐标轴旋转的生成算符的角度来看，我们弄清了(5.2.35)式中自旋角动量的运动学性质。下面，我们以磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的电子自旋为例，来讨论自旋角动量的动力学性质。

电子的电荷为 $-e = -4.8 \times 10^{-10}$(e.s.u)*，质量为 $m = 9.1 \times 10^{-28}$(g)，它仅在其自旋 $\boldsymbol{S}$ 方向上具有磁矩

$$\boldsymbol{\mu}_S = g\frac{-e}{2mc}\boldsymbol{S}, \quad (5.2.46)$$

$\frac{e\hbar}{2mc} = \beta = 5.8 \times 10^{-9}$eV**/gauss***，$g = 2.002319114$，而在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中具有的能量是

$$H_s = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = g\frac{e}{2mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} = \frac{1}{2}g\beta\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}. \quad (5.2.47)$$

---

* 1e.s.u $= \frac{1}{3} \times 10^{-9}$C.——译者注

** 1eV $= 1.6 \times 10^{-19}$J.——译者注

*** 1gauss $= 10^{-4}$T.——译者注

后面的（5.6.5）式将表明，电子的轨道角动量具有磁矩 $\boldsymbol{\mu}_L = (-e/2mc)\boldsymbol{L}$. 而(5.2.46)式比它多一个因子 $g$. 后面在 §7.6 中将会看到，$g$ 的整数部分 2 是电子的颤动效应，其余部分完全可以用量子电动力学给予解释.

下面我们研究自旋的动态性质. 采用海森伯绘景，运动方程为

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{S} = \frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{S}, H_s] = g\frac{-e}{2mc}\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\mu}_s\times\boldsymbol{B}. \tag{5.2.48}$$

最右边确实是磁场加到磁矩上的力矩. 该方程的解是

$$\boldsymbol{S}(t) = \exp(iH_s t/\hbar)\boldsymbol{S}(0)\exp(-iH_S t/\hbar). \tag{5.2.49}$$

若特地取 $z$ 轴沿 $B$ 的方向，那么，应用 $\omega_c \equiv \dfrac{eB}{mc} = 1.76 \times 10^7 \times B(\mathrm{G})\mathrm{s}^{-1}$，可以得到 $H_S = (g\omega_c/2)S_z$，所以，令 $\boldsymbol{S}(0) = \boldsymbol{S}$，则有

$$\boldsymbol{S}(t) = \exp(ig\omega_c t S_z/2\hbar)\boldsymbol{S}\exp(-ig\omega_c + S_z/2\hbar).$$

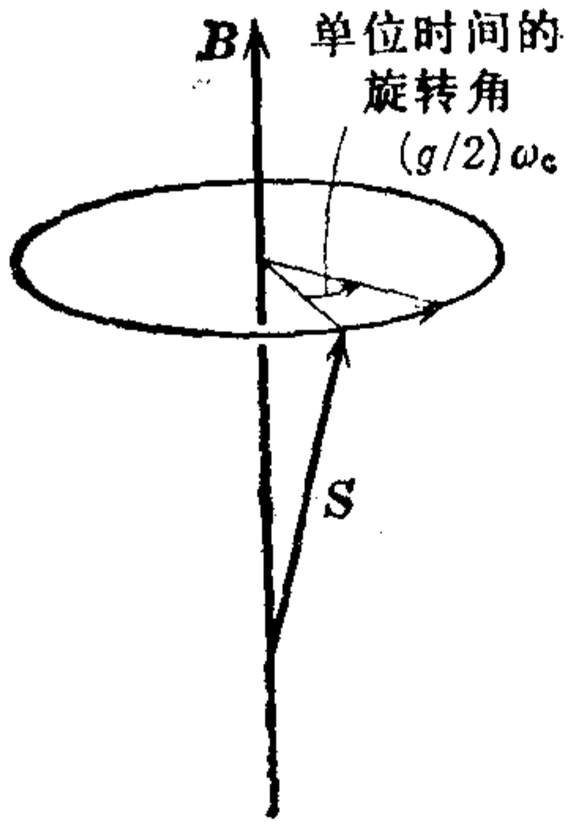



图 5.12　磁场 $\boldsymbol{B}$ 中电子自旋的进动. 其角速度为 $\dfrac{g}{2}\omega_c = 1.76 \times B(\mathrm{G})\mathrm{s}^{-1}$ 做电子的**回旋频率**.

与 (5.2.44) 式比较一下就会明白，上式表明，自旋像图 5.12 那样进动. 现在，由于磁矩 $\boldsymbol{\mu}_S$ 与 $\boldsymbol{S}$ 反向，所以它与力矩 $\boldsymbol{\mu}_S \times \boldsymbol{B}$ 所产生的经典力学进动毫无差别.

$$\text{进动周期} = \frac{2}{g}\frac{2\pi}{\omega_c}, \tag{5.2.50}$$

如果 $g$ 精确地等于 2，那么，就与电子在均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中作圆周运动的周期相同，电子绕圆周轨道一周，自旋又回到原方向上. 利用这一点可以精确测定 $g-2$ 的值. $\omega_c = 1.76 \times 10^7 \times B(\mathrm{G})\mathrm{s}^{-1}$ 叫

如果在恒定磁场 $B$ 中，再加上一与之垂直的旋转磁场 $B'(t)$，那么，当旋转周期等于 (5.2.50) 时就会发生共振。这就是所谓**顺磁共振**。在物质中，电子的轨道运动与环境有关，共振频率会随内部磁场变化，因此，测定共振频率反过来可以获得有关物质内部的信息。

### d) 角动量的合成

电子在原子中运动，其哈密顿量包含有称为自旋-轨道相互作用的项

$$H_{LS}=\frac{g}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}, \tag{5.2.51}$$

其中，$\boldsymbol{L}$ 是轨道角动量，$\boldsymbol{S}$ 是自旋，$V(r)$ 是电子所受到的静电势 $-e\phi(r)$。

一般来说，在相对于电场 $E$ 以速度 $v$ 运动的坐标系中，通过洛伦兹变换会出现磁场 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{E}\times(\boldsymbol{v}/c)$ $(v/c\ll 1)$。由于电子相对于电场 $\boldsymbol{E}=-(\boldsymbol{r}/r)d\phi/dr$ 以速度 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}/m$ 运动，因此，会受到磁场 $\boldsymbol{B}=-(mcr)^{-1}(d\phi/dr)\boldsymbol{L}$ 的作用，结果是自旋具有 (5.2.47) 式所表示的能量 $-g(e/2m^2c^2)(r^{-1}d\phi/dr)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$，正如已说过的那样，它与 (5.2.51) 式只差 1/2 这个因子。这是由于对有加速度的电子圆周运动采用了匀速运动的洛伦兹变换带来的错误。托马斯正确说明了这个变换的因子 1/2，采用他的名字，该因子叫做托马斯因子。

把自旋-轨道相互作用 (5.2.51) 中 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 的系数写成 $\xi(r)$，正因为有了它，$\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 都将受到一个互相使自己反平行于对方的扭矩。从 $\boldsymbol{S}$ 的角度来看，$\boldsymbol{L}$ 的作用类似于 (5.2.47) 式中的磁场。因此，$\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{L}$ 均不守恒

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{S}=\frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{S},H_{LS}]=\xi(r)[\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}],$$

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{L}=\frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{L},H_{LS}]=-\xi(r)[\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}].$$

但是，$\boldsymbol{J} \equiv \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$ 却显然守恒：

$$[\boldsymbol{J}, H_{Ls}] = 0. \tag{5.2.52}$$

同时，$L^2$ 和 $S^2$ 也是守恒的。例如

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{S}^2 = \xi(r)\{\boldsymbol{S}\cdot[\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}] + [\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}]\cdot\boldsymbol{S}\} = 0.$$

因此，就自旋和轨道角动量来说，如果选择 $\boldsymbol{L}^2$，$\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$, $\boldsymbol{J}_z$ 为完整可观测量组，则它们可以与哈密顿量同时对角化，并给出好量子数。

另外，让我们来求使目前所采用的 $L^2$, $L_z$, $S^2$, $S_z$ 对角化基 $|lm_s sm_s\rangle$ 过渡到 $L^2$, $S^2$, $J^2$, $J_z$ 对角化基的变换函数 $(lm_l sm_s|lsjm_j\rangle$。其中，为避免混乱，已把凡涉及 $|lm_l sm_s\rangle$ 的量改用圆括号书写。省略左右矢中的 $l$ 和 $s$，考虑到全体 $|jm\rangle$ 要写成下述形式：

$$|jm\rangle = \sum_{m_l=-l}^{l}\sum_{m_s=-s}^{s}|m_l m_s)(m_l m_s|jm\rangle \quad (m = -j, \cdots j), \tag{5.2.53}$$

问题在于确定右边的展开系数 —— 克累布施-郭尔丹 (Clebsch-Gordan) 系数，常简称之为 **C.G 系数**。设$|jm\rangle$是归一化的。

首先，将 (5.2.53) 式两边乘以 $J_z = L_z + S_z$，再进行整理，得到

$$\sum_{m_l=-l}^{l}\sum_{m_s=-s}^{s}(m_l + m_s - m)\,(m_l m_s)\,(m_l m_s|jm\rangle = 0.$$

由于 $\{|m_l m_s\rangle\}$ 是线性独立的，所以，除非

$$m = m_l + m_s, \tag{5.2.54}$$

否则 $(m_l m_s|jm\rangle = 0$。即 $J_z$ 不会具有 (5.2.54) 式以外的本征值，这是理所当然的(见图 5.13)。由此可知

$$-(l+s) \leqslant m \leqslant l + s \tag{5.2.55}$$

就 (5.2.55) 式右边而言，$m$ 的最大值是 $l + s$，而从(5.2.54)式来看，这只限于 $m_l$ 和 $m_s$ 都取最大值 $l$ 和 $s$ 的$|l, s)$ 态(图 5.14)。尽量大地说，有 $j \geqslant l + s$。但是，若 $j > l + s$，则$m$ 就可能超过

(5.2.55)式的上限，于是，$j=l+s$。这是 $j$ 在(5.2.53)式中出现的最大值

$$j_{\max}=l+s.$$

这时，(5.2.53) 式变成

$$|l+s,l+s\rangle=|ls)(ls|l+sl+s\rangle.$$

因为该式左边是归一化的，所以右边 C G 系数的绝对值为1。而本征矢的相位本来就没有确定，于是我们约定

$$(ls|j_{\max}j_{\max}\rangle=1. \tag{5.2.56}$$

由于已知(5.2.53)式中包含了矢量 $|j_{\max}j_{\max}\rangle$，因此

$$\{|j_{\max}m\rangle\}_{m=-j_{\max},-j_{\max}+1,\cdots,j_{\max}} \tag{5.2.57}$$

这样 $(2j_{\max}+1)$ 个矢量显然都包括在(5.2.53)式之中了。

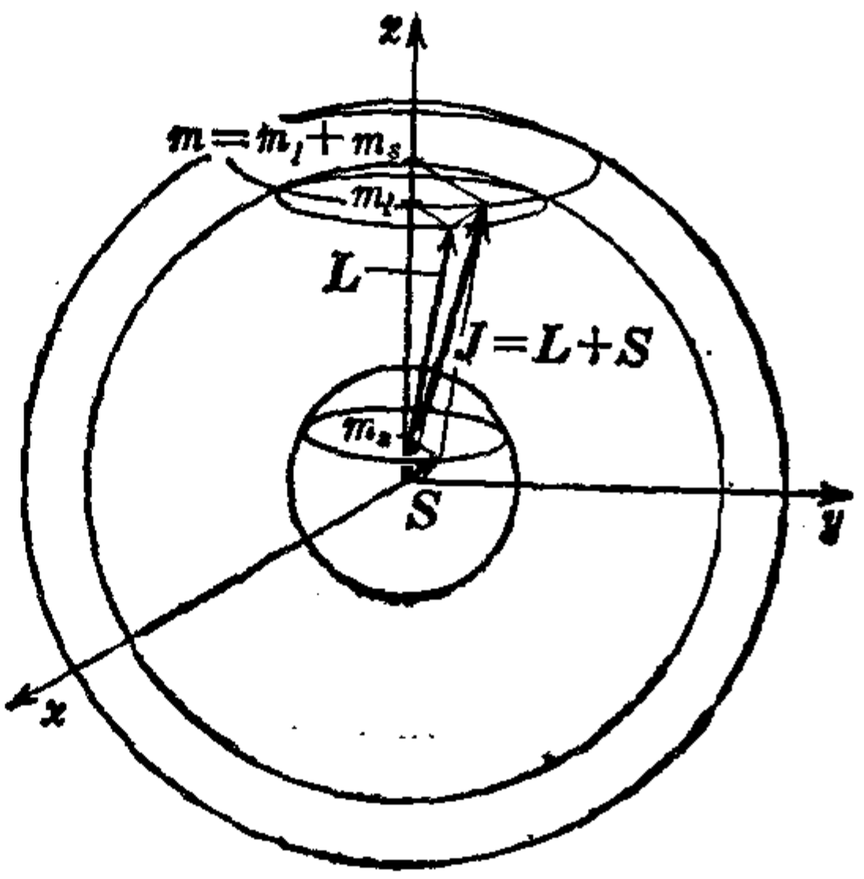



图 5.13　角动量合成，因为角动量的 $x$、$y$ 分量摆动，所以，$L^2$，$S^2$，$J^2$，$J_z$ 不变时，$L_z$ 和 $S_z$ 也会摆动，但 $J_z=L_z+S_z$ 却保持不变

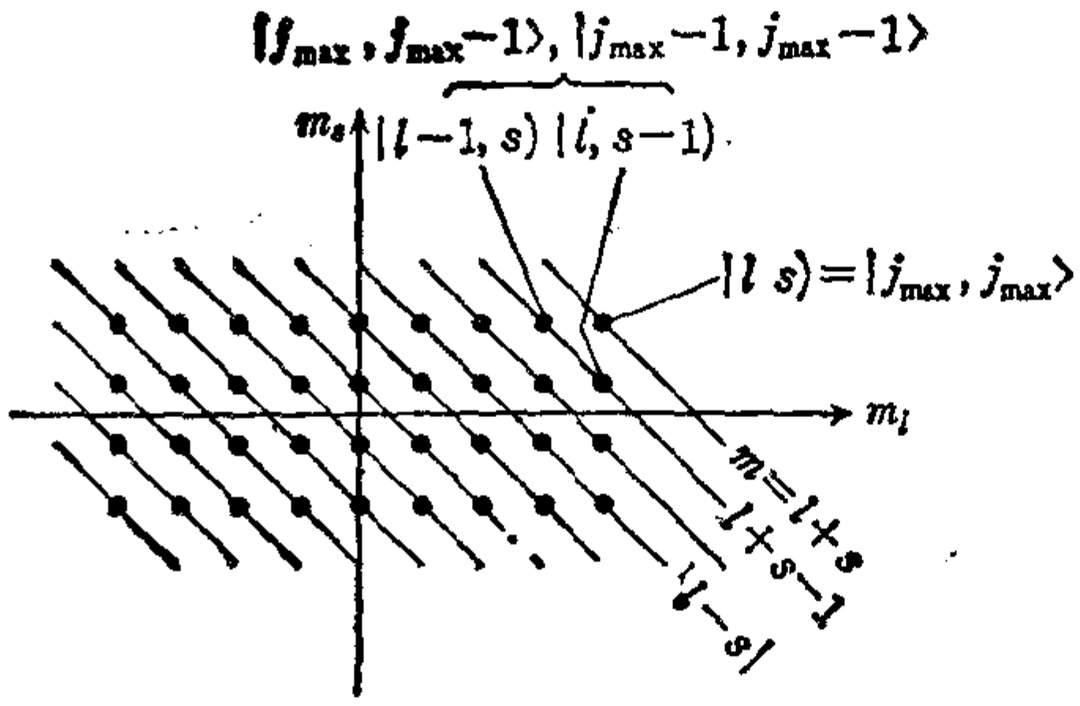



图 5.14　大小为 $l$，$s$ 的两个角动量合成，可能产生哪些合成角动量呢？黑点表示合成前的状态 $|m_lm_s\rangle$

其次，我们来讨论 $m=l+s-1$ 的情况。(5.2.53) 式右边变成两个矢量 $|ls-1)$ 和 $|l-1\,s)$ 的线性组合(图5.14)。在它们所张成的二维空间中，一维已在(5.2.57) 式的 $|j_{\max}j_{\max}-1\rangle$ 中用过了，通过与上面相同的讨论，剩下的一维显然应该是 $|j_{\max}-1j_{\max}-1\rangle$。(5.2.53)式中包含它的同时，必然还包含着

$$\{|j_{\max}-1,m\rangle\}_{m=-(j_{\max}-1),-(j_{\max}-1)+1,\cdots,(j_{\max}-1)} \tag{5.2.58}$$

共 $2(j_{\max}-1)+1$ 个矢量。

依次进行同样的讨论，一直延续到 $m = l + s - 2\min(l,s) = |l - s|$。会得到像 (5.2.57) 式、(5.2.58) 式、等一系列矢量 $\{|j,m\rangle\}(m = -j, \cdots j)$，其中 $j$ 取

$$|l - s| \leqslant j \leqslant l + s \tag{5.2.59}$$

范围内的一个值。新基底 $|j,m\rangle$ 的总数为

$$\sum_{j=|l-s|}^{l+s} (2j + 1) = (2l + 1)(2s + 1),$$

的确等于构成 (5.2.53) 式右边的基底 $\{|m_l m_s)\}(-l \leqslant m_l \leqslant l, -s \leqslant m_s \leqslant s)$ 的总数。

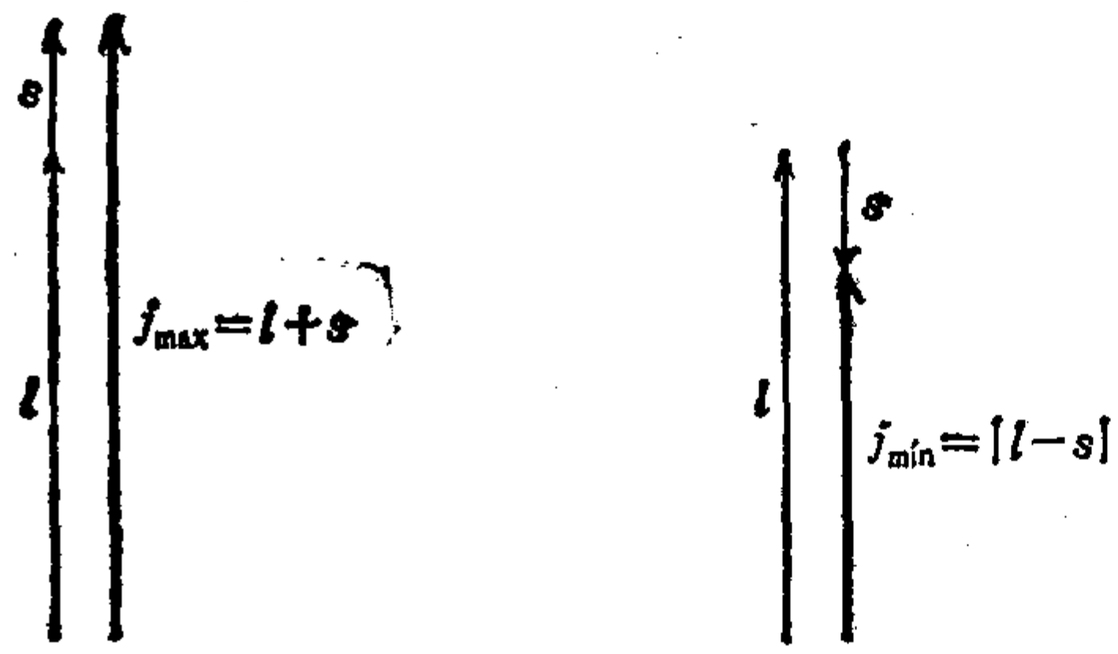



图 5.15 合成角动量的最大值和最小值，这时其 $x, y$ 分量本应在摆动

以上讨论的结论可以归纳为，当大小为 $l$ 和 $s$ 的两个角动量合成时，合成角动量为 $j$，状态为 $\{|jm\rangle\}$ $(m = -j, \cdots, j)$，$j$ 的取值范围是 $|l - s| \leqslant j \leqslant l + s$，这就是在 (5.2.53) 式中出现的 $j$ 值。从物理上讲，这不正是可以理解的结论吗？

下面，必须确定 (5.2.53) 式中的 CG 系数。

首先确定 $(m_l m_s | jj\rangle$ 型的系数。其中，根据 (5.2.54) 式，有 $m_l + m_s = j$。今后，往往无需事先说明，假设这种条件总是成立的。我们用两种方法来计算矩阵元 $(m_l m_s | J_+ | jm\rangle$。一是让 $J_+$ 作用于右矢；二是让 $J_+ = L_+ + S_+$ 作用于左矢。根据普遍公式 (5.2.14) 和 (4.2.6)，可以得到递推公式

$$A(j,m+1)(m_l m_s | jm+1\rangle = A(j, m_l)(m_l - 1 m_s | jm\rangle + A(s, m_s)(m_l m_s - 1 | jm\rangle, \tag{5.2.60}$$

其中，$A$ 定义为

$$A(j, m) \equiv \sqrt{(j + m)(j - m + 1)},$$

它等于 $A(j, -m+1)$.

在递推公式(5.2.60)中，设 $m=j$，则左边为零，故

$$(m_l-1m_s|jj\rangle=-\sqrt{\frac{(s+j-m_l+1)(s-j+m_l)}{(l+m_l)(l-m_l+1)}}\times(m_lm_s-1|jj\rangle. \tag{5.2.61}$$

在上式中，让 $m_l$ 从 $l$ 开始依次递减，得到

$$(m_lm_s|jj\rangle=(-1)^{l-m_l}\sqrt{\frac{(j+s-m_l)!(l+s-j)!(l+m_l)!}{(2l)!(j-l+s)!(s-j+m_l)!(l-m_l)!}}\times(lj-l|jj\rangle, \tag{5.2.62}$$

其中，左边的 $m_s$ 是 $j-m_l$. 而右边的 $(lj-l|jj\rangle$ 的绝对值由 $|jj\rangle$ 的归一化条件

$$\sum_{m_l=-l}^{l}|(m_lj-m_l|jj\rangle|^2=1$$

确定. 稍后将要证明，对于(5.2.59)式中所有的 $j$，可以得出

$$(lj-l|jj\rangle>0 \tag{5.2.63}$$

于是

$$(lj-l|jj\rangle=\sqrt{\frac{(2l)!(2j+1)!}{(l+s+j+1)!(l-s+j)!}}. \tag{5.2.64}$$

将其代入(5.2.62)式，即可得到 $(m_lm_s|jj\rangle$.

若由这个结果能得到 $(m_lm_s|jm\rangle$，则可求出全部 C G 系数. 为此，像(5.2.60)式那样，利用以两种方法计算 $(m_lm_s|J_-|jm\rangle$ 而得到的递推公式

$$A(j, m)(m_lm_s|jm-1\rangle=A(l, m_l+1)(m_l+1m_s|jm\rangle+A(s, m_s+1)(m_lm_s+1|jm\rangle. \tag{5.2.65}$$

我们来证明，(5.2.63)式可以用下面两个约定推导出来：

1°约定 $(ls|l+sl+s\rangle=1$.

2°约定 $\langle j-1-(j-1)|L_+|j-j\rangle\geqslant 0$，$|l-s|\leqslant j\leqslant l+s$.

实际上，约定1°在(5.2.56)式中已经用过了. 约定2°决定了 $j$

不同时 $|j-j\rangle$ 的相对相位. 前面在(5.2.14)式中规定了 $j$ 相同而 $m$ 不同时 $|jm\rangle$ 之间的相位。所以,加上约定 1° 和 2° 以后,就完全确定了 $\{|jm\rangle\}(-j\leqslant m\leqslant j,\ |l-s|\leqslant j\leqslant l+s)$ 的相位。需要证明,这个结果满足(5.2.63)式。为此,最好采取如下步骤:

3° $\langle j'm'|L_z|jm\rangle\neq 0 \Rightarrow m'=m$。

证明 取 $[J_z, L_z]=0$ 的矩阵元 $\langle j'm'|\cdots|jm\rangle$。

4° $\langle j'm'|L_\pm|jm\rangle\neq 0 \Rightarrow m'=m\pm 1$(重号同序)。

证明 取 $[J_z, L_\pm]=\pm\hbar L_\pm$ 的矩阵元。

5° $\langle j'm'|L_z|jm\rangle\neq 0 \Rightarrow |j'-j|\leqslant 1$。

证明 取 $[J_+, L_+]=0$ 的矩阵元 $\langle j'm'|\cdots|jm\rangle$,则

$$\langle j'm'|J_+|j'm'-1\rangle\langle j'm'-1|L_+|jm\rangle$$
$$-\langle j'm'|L_+|jm+1\rangle\langle jm+1|J_+|jm\rangle=0。\quad(5.2.66)$$

现在,若 $j'>j+1$,则可以取 $m'>j+1$,所以,根据 4°,对于任意 $m$,都有

$$\langle j'm'|L_+|jm+1\rangle=0,\ m'>j+1。$$

因此,根据(5.2.66)式,有

$$\langle j'm'-1|L_+|jm\rangle=0,\ m'>j+1。$$

在(5.2.66)式中用 $m'-1$ 代替 $m'$,再反复应用上面步骤,$m'$ 值可进一步降低。如此可得

$$\langle j'm'|L_+|jm\rangle=0,\ j'>j+1;\ m'、m\ 任意。$$

然后,由 $[J_-,L_-]=0$,得

$$\langle j'm'|J_-|j'm'+1\rangle\langle j'm'+1|L_-|jm\rangle$$
$$-\langle j'm'|L_-|j'm'-1\rangle\langle j'm'-1|J_-|jm\rangle=0。$$

同上面一样设 $j'>j+1$,不过这次却从 $m'<-j+1$ 开始使 $m'$ 逐步增加,由此可得

$$\langle j'm'|L_-|jm\rangle=0,\ j'>j+1;\ m'、m\ 任意。$$

根据 $L_+$ 和 $L_-$ 的结果,可得到关于 $L_x$ 和 $L_y$ 的相同结论. 因为它们是自共轭的,所以,考虑转置矩阵,便可以得到 $j'<j-1$ 情况的证明。于是 5° 得以证明。

6° $\mathrm{ph}\langle j'm'|L_+|jm\rangle$ 与 $m'$ 和 $m$ 无关。对 $L_z$ 来说，也有同样结果。其中 ph$z$ 表示复数 $z=|z|e^{i\varphi}$ 中的 $e^{i\varphi}$。关于这种类型的命题，尽管事先没有特殊声明，我们也约定不包括 $z=0$ 的情形。

证明　就 $L_+$ 而言，直接由 (5.2.66) 式和 (5.2.14) 式对相位的约定便可清楚。

这是因为，根据 4°，问题中的 $\langle j'm'|L_+|jm\rangle$ (除 $m'=m+1$ 之外) 均为零。

7° $\mathrm{ph}\langle j-i|L_z|j+1-i\rangle=\mathrm{ph}\langle j-i|L_+|j+1-i-1\rangle$.

证明　取 $[J_+, L_z]=-\hbar L_+$ 的矩阵元 $\langle jm+1|\cdots|j+1, m\rangle$，便有

$$\begin{aligned}&\langle jm+1|J_+|jm\rangle\langle jm|L_z|j+1m\rangle-\langle jm+1|L_z|j\\&\quad+1m+1\rangle\langle j+1m+1|J_+|j+1m\rangle\\&=-\hbar\langle jm+1|L_+|j+1m\rangle.\end{aligned}\tag{5.2.67}$$

令 $m=-j-1$，左边第一项为零.再考虑 (5.2.14) 式的约定，便可以完成证明.

8° $\langle j'm'|L_z|jm\rangle\geqslant 0$，$\langle j'm'|S_z|jm\rangle\leqslant 0$ ($j'\neq j$，$m'$，$m$ 任意).

证明　根据命题 7° 改写约定 2°，再应用 6°.

9° $\mathrm{ph}(m_lm_s|jj\rangle=(-1)^{l-m_l}\mathrm{ph}(lj-l|jj\rangle$.

证明　在递推公式 (5.2.60) 中令 $m=j$，则左边为零，于是得到

$$\mathrm{ph}(m_l-1\,m_s|jj\rangle=-\mathrm{ph}(m_lm_s-1|jj\rangle.$$

10° $(lj-l|jj\rangle>0$.

这就是想要证明的 (5.2.63) 式.

证明　$[J_+, L_z]=-\hbar L_+$ 的矩阵元 $\langle j+1\,j+1|\cdots|jj\rangle$ 是

$$\begin{aligned}&\langle j+1\,j+1|J_+|j+1j\rangle\langle j+1j|L_z|jj\rangle\\&=-\hbar\langle j+1j+1|L_+|jj\rangle.\end{aligned}$$

根据 (5.2.14) 式的相位约定和 8°，上式左边不大于零，因此，对于所有可能的 $j$，有

$$\sum_{m_l}\langle j+1\,j+1|m_l\,j-m_l+1)\,(m_t|L_+|m_l-1)$$

$$\times(m_l-1\,j-m_l+1|jj\rangle\geqslant 0.$$

根据 9°，将上式重写为

$$\mathrm{ph}\langle j+1\,j+1|l\,j+1-l)\mathrm{ph}(lj$$

$$-l|\,jj\rangle\sum_{m_l}(-1)^{l-m_l}(-1)^{l-m_l+1}$$

$$\times|\langle j+1\,j+1|m_l\,j-m_l+1\rangle\langle m_l-1\,j-m_l$$

$$+1|jj\rangle|(m_l|L_+|m_l-1)\geqslant 0.$$

而按照 (5.2.14) 式的相位约定，$(m_l|L_+|m_l-1)<0$，故

$$\mathrm{ph}\langle j+1\,j+1|l\,j+1-l)\mathrm{ph}(lj-l|jj\rangle>0.$$

根据约定 1°，第二个因子是 1，因此得到

$$\mathrm{ph}\langle j+1j+1|lj+1-l)>0,\quad |l-s|\leqslant j+1\leqslant l+s.$$

证明完毕.

下面，我们给出几个简单情况下的 C G 系数表. 圆括号回复为方括号，用 $j_1$ 和 $j_2$ 代替目前使用的 $l$ 和 $s$.

表 5.1 $\langle j_1\,m_1\,\frac{1}{2}\,m_2|j_1\,\frac{1}{2}\,j\,m\rangle$

| $j$ \ $m_2$ | 1/2 | −1/2 |
|---|---|---|
| $j_1+\frac{1}{2}$ | $\sqrt{\frac{j_1+m+1/2}{2j_1+1}}$ | $\sqrt{\frac{j_1-m+1/2}{2j_1+1}}$ |
| $j_1-\frac{1}{2}$ | $-\sqrt{\frac{j_1-m+1/2}{2j_1+1}}$ | $\sqrt{\frac{j_1+m+1/2}{2j_1+1}}$ |

表 5.2 $\langle j_1\,m_1\,1\,m_2|j_1\,1\,j\,m\rangle$

| $j$ \ $m_2$ | 1 | 0 | −1 |
|---|---|---|---|
| $j_1+1$ | $\sqrt{\frac{(j_1+m)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}}$ | $\sqrt{\frac{(j_1-m+1)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(j_1+1)}}$ | $\sqrt{\frac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}}$ |
| $j_1$ | $-\sqrt{\frac{(j_1+m)(j_1-m+1)}{2j_1(j_1+1)}}$ | $\frac{m}{\sqrt{j_1(j_1+1)}}$ | $\sqrt{\frac{(j_1-m)(j_1+m+1)}{2j_1(j_1+1)}}$ |
| $j_1-1$ | $\sqrt{\frac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{2j_1(2j_1+1)}}$ | $-\sqrt{\frac{(j_1-m)(j_1+m)}{j_1(2j_1+1)}}$ | $\sqrt{\frac{(j_1+m+1)(j_1+m)}{2j_1(2j_1+1)}}$ |

例如，在表 5.1 中，当 $j_1 = j_2 = 1/2$ 时，求得 $j = 1$、$m = 0$ 的状态，为

$$|10\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\left[\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\right]; \tag{5.2.68}$$

而 $j = 0$，$m = 0$ 的状态是

$$|00\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\left[-\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\right]. \tag{5.2.69}$$

上面两式中，右边把 $|j_1m_1j_2m_2\rangle$ 写成了 $|j_1m_1\rangle\,|j_2m_2\rangle$．而在左边把应写为 $|j_1j_2jm\rangle$ 的写成了 $|jm\rangle$．请读者自己考虑，$j = 1$，$m = \pm 1$ 的状态应怎样表示？

已知 C G 系数具有多种对称性．按照命题 5°，上面命题 8° 中所出现的 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 的不对称性首先会给出

$$\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle = (-1)^{j_1+j_2-j}\langle j_2m_2j_1m_1|j_2j_1jm\rangle. \tag{5.2.70}$$

根据下节关于时间反演的讨论，可以证明

$$\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j_3m_3\rangle = (\quad)^{j_2+m_2}\sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_1+1}}\langle j_2 - m_2j_3m_3|j_2j_3j_1m_1\rangle. \tag{5.2.71}$$

综合上面两式，可得

$$\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j_3m_3\rangle = (-1)^{j_1-m_1}\sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_2+1}}\langle j_3m_3j_1 - m_1|j_3j_1j_2m_2\rangle. \tag{5.2.72}$$

或者，反复应用 (5.2.68) 式三次，就会得到

$$\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle = (-1)^{j_1+j_2-j}\langle j_1 - m_1\, j_2 - m_2|j_1j_2j - m\rangle. \tag{5.2.73}$$

可以复核一下，表 5.3 所给出的 C G 系数确实具有这些对称性．

表 5.3 $\langle j_1 m_1 \frac{3}{2} m_2 | j_1 \frac{3}{2} j m \rangle$

| $j$ \ $m_2$ | 3/2 | 1/2 |
|---|---|---|
| $j_1+\frac{3}{2}$ | $\sqrt{\frac{(j_1+m-1/2)(j_1+m+1/2)(j_1+m+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}}$ | $\sqrt{\frac{3(j_1+m+1/2)(j_1+m+3/2)(j_1-m+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}}$ |
| $j_1+\frac{1}{2}$ | $-\sqrt{\frac{3(j_1+m-1/2)(j_1+m+1/2)(j_1-m+3/2)}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}}$ | $-\left(j_1-3m+\frac{3}{2}\right)\sqrt{\frac{j_1+m+1/2}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}}$ |
| $j_1-\frac{1}{2}$ | $\sqrt{\frac{3(j_1+m-1/2)(j_1-m+1/2)(j_1-m+3/2)}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}}$ | $-\left(j_1+3m-\frac{1}{2}\right)\sqrt{\frac{j_1-m+1/2}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}}$ |
| $j_1-\frac{3}{2}$ | $-\sqrt{\frac{(j_1-m-1/2)(j_1-m+1/2)(j_1-m+3/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}}$ | $\sqrt{\frac{3(j_1+m-1/2)(j_1-m-1/2)(j_1-m+1/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}}$ |

| $j$ \ $m_2$ | −1/2 | −3/2 |
|---|---|---|
| $j_1+\frac{3}{2}$ | $\sqrt{\frac{3(j_1+m+3/2)(j_1-m+1/2)(j_1-m+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}}$ | $\sqrt{\frac{(j_1-m-1/2)(j_1-m+1/2)(j_1-m+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}}$ |
| $j_1+\frac{1}{2}$ | $\left(j_1+3m+\frac{3}{2}\right)\sqrt{\frac{j_1-m+1/2}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}}$ | $\sqrt{\frac{3(j_1+m+3/2)(j_1-m-1/2)(j_1-m+1/2)}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}}$ |
| $j_1-\frac{1}{2}$ | $-\left(j_1-3m-\frac{1}{2}\right)\sqrt{\frac{j_1+m+1/2}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}}$ | $\sqrt{\frac{3(j_1+m+1/2)(j_1+m+3/2)(j_1-m-1/2)}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}}$ |
| $j_1-\frac{3}{2}$ | $-\sqrt{\frac{3(j_1+m-1/2)(j_1+m+1/2)(j_1-m-1/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}}$ | $\sqrt{\frac{(j_1+m-1/2)(j_1+m+1/2)(j_1+m+3/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}}$ |

## §5.3 时间反演

对于某特定的规律 L 来说，把一个遵守此规律的运动M拍成立体影片，再倒着放映，所看到的运动 $M^R$ 是否也遵守这个规律 L?

从现在起，我们将考虑这种类型的问题。$M^R$ 叫做M的时间反演。如果遵守规律 L 的任意运动M的时间反演 $M^R$ 也遵守同一规律 L，则说此规律关于时间反演是对称的。或者简而言之，它是时间反演不变的。

### a) 简单情况

作为量子力学运动规律的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r},t) \qquad (5.3.1)$$

是时间反演不变的吗？

首先，考虑 $V=0$ 的简单情况。例如，具有一定动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 $E=\boldsymbol{p}^2/2\mu$ 粒子运动的波函数可表示为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar]. \qquad (5.3.2)$$

按照上面的定义，该运动的时间反演成了具有动量 $-\boldsymbol{p}$ 和能量 $E$ 的运动，将其表示成

$$\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)=\exp[i(-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar]. \qquad (5.3.3)$$

它也满足 $V=0$ 的薛定谔方程 (5.3.1)。将同样的讨论推广到任意解，就可以说 $V=0$ 的薛定谔方程是时间反演不变的。但是，对于任意解 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 来说，其时间反演 $\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)$ 是什么样的呢？用上面经典力学的定义，无法解答这个问题。

比较 (5.3.2) 与 (5.3.3) 两式，有下述关系：

$$\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)=\psi(\boldsymbol{r},-t). \qquad (5.3.4)$$

让我们来普遍地证明，上式具有与 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 的时间反演态相称的性质。

首先，粒子的存在概率密度变成

$$|\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)|^2=|\psi(\boldsymbol{r},-t)|^2, \qquad (5.3.5)$$

与原来的 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 所给出的密度相比，在 $t=0$ 时是一致的。此后，它将逆时而动。如果 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=f(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t)$，则 (5.3.5) 式应当为 $|\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)|^2=f(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{v}t)$，因此，它确实与时间反演相称。

其次，用 $\psi^{R}$ 构造动量的期待值，有

$$\left\langle \psi^{*}(r,-t),\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial r}\psi(r,-t)\right\rangle$$

$$=\int\psi(r,-t)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}\psi^{*}(r,-t)\right]dr$$

$$=-\left(\int\psi^{*}(r,-t)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}\psi(r,-t)\right]dr\right)^{*}$$

因期待值是实数，故

$$\langle\psi^{R}(r,t),\ p\psi^{R}(r,t)\rangle=-\langle\psi(r,-t),\ p\psi(r,-t)\rangle,\tag{5.3.6}$$

也就是说，$t$ 时刻动量在 $\psi^{R}$ 中的期待值 $\langle p\rangle_t^{R}$ 与原来 $\psi$ 所确定的期待值 $\langle p\rangle_t$ 的关系是

$$\langle p\rangle_t^{R}=-\langle p\rangle_{-t}.\tag{5.3.7}$$

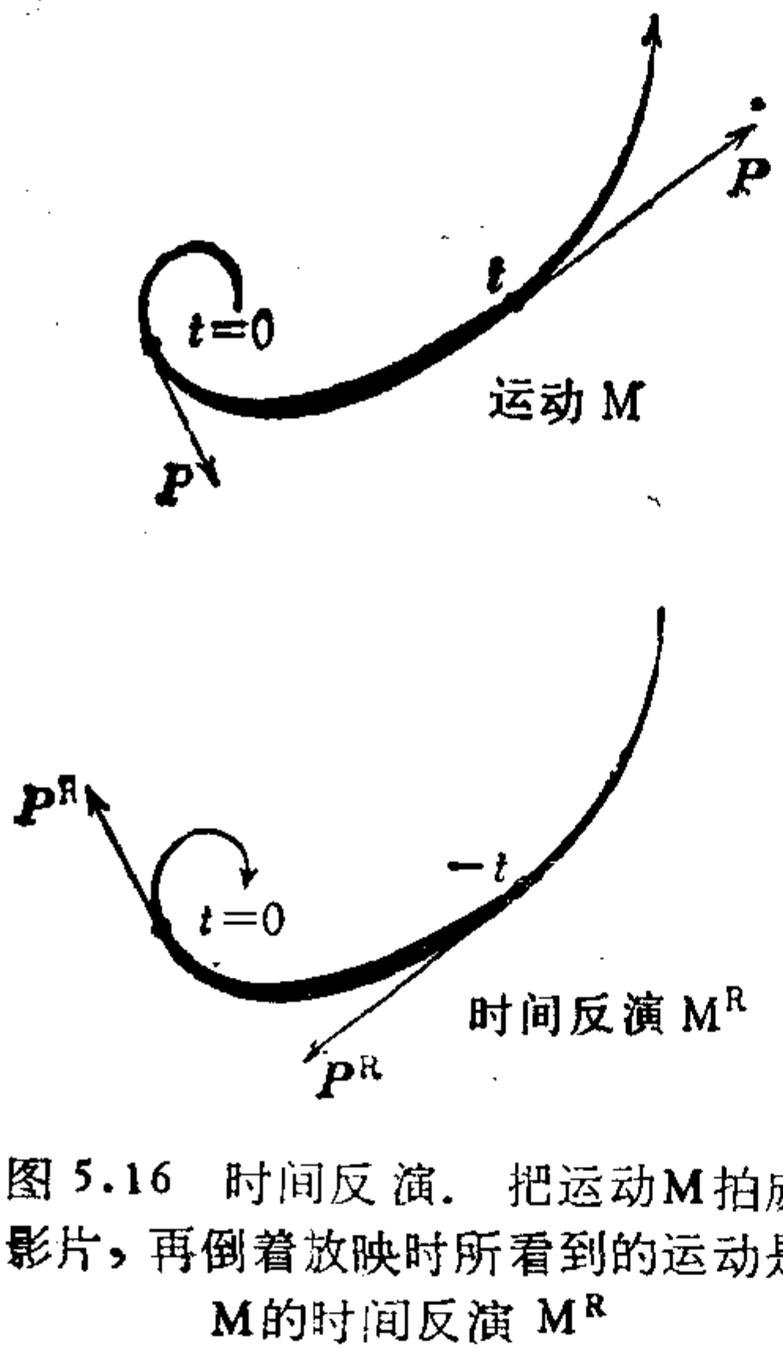



图 5.16　时间反演．把运动M拍成影片，再倒着放映时所看到的运动是M的时间反演 $M^{R}$

这也确实与时间反演相称（见图 5.16）．关于角动量，也有同样关系式成立．一般，对于由正则变量构成的任意可观测量，可以从 (5.3.4) 式得到与时间反演相称的期待值．

因此，可以把 (5.3.4) 式中的 $\psi^{R}(r,t)$ 看成是量子力学中 $\psi(r,t)$ 的时间反演表达式．它满足薛定谔方程 (5.3.1) 吗？满足！当然，只要原来的 $\psi(r,t)$ 满足．这点可以不限于 $V=0$ 的情形．(5.3.4) 式以后始终成立．$V(r)$ 作为势能，当然是实函数．实际上，设 $\psi(r,t)$ 满足 (5.3.1) 式，取其复共轭，有

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^{*}(r,t)=\left[-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}}+V(r)\right]\psi^{*}(r,t),$$

令其中 $t=-t'$，有 $-\partial/\partial t=\partial/\partial t'$，于是

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi^*(\boldsymbol{r},-t')=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+V(\boldsymbol{r})\right]\psi^*(\boldsymbol{r},-t').$$

此式表明，(5.3.4) 式中的 $\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)$ 满足薛定谔方程 (5.3.1)，正如所期望的那样。于是，该方程是时间反演不变的。

### b) 有自旋的情况

但是，还不能够说 (5.3.4) 式足以成为量子力学中时间反演的普适定义。这是因为，尚须处理像自旋那样不能用正则变量表示的可观测量。

例如，假设所研究的粒子具有自旋 $\frac{1}{2}$。对于其波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)=\begin{bmatrix}\psi_{\uparrow}(\boldsymbol{r},t)\\ \psi_{\downarrow}(\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}$ 来说，时间反演不能用 (5.3.4) 式，而必须定义成

$$\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)=\sigma_y\psi^*(\boldsymbol{r},-t). \tag{5.3.8}$$

这样，自旋 $S=\frac{\hbar}{2}\sigma$ 的期待值才会与时间反演相称。实际上，我们有

$$\langle\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t),\boldsymbol{\sigma}\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)\rangle=\langle\psi(\boldsymbol{r},-t),\sigma_y\boldsymbol{\sigma}\sigma_y\psi^*(\boldsymbol{r},-t)\rangle,$$

而对于泡利矩阵来说，有

$$\sigma_y\boldsymbol{\sigma}\sigma_y=-\bar{\sigma}\quad(\bar{}\text{表示复共轭}), \tag{5.3.9}$$

所以，

$$\langle\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t),\boldsymbol{\sigma}\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)\rangle=-\langle\psi(\boldsymbol{r},-t),\boldsymbol{\sigma}\psi(\boldsymbol{r},-t)\rangle^*.$$

因期待值是实数，故就自旋的期待值而言，与 (5.3.7) 式相应的关系式是

$$\langle\boldsymbol{S}\rangle_t^{\mathrm{R}}=-\langle\boldsymbol{S}\rangle_{-t}. \tag{5.3.10}$$

倘若在 (5.3.8) 式中不加入 $\sigma_y$，就不会如此。

即使采用新的定义 (5.3.8)，以前与正则变量有关的 (5.3.5) 和 (5.3.7) 式仍然成立。

那么，当 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 满足薛定谔方程时，(5.3.8) 式的 $\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)$ 也会满足吗？由于现在粒子具有自旋，所以，我们在哈密顿量

(5.3.1) 中加上 (5.2.47) 式中的 $H_S$ 和 (5.2.51) 式中的 $H_{LS}$。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}+V(r)+g\frac{e}{2\mu c}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}\right.$$

$$\left.+\xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\right]\psi(\boldsymbol{r},t). \tag{5.3.11}$$

首先，取复共轭，注意 $\boldsymbol{L}=-i\hbar\boldsymbol{r}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}$，上式变成

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}+V(r)\right.$$

$$\left.+g\frac{e}{2\mu c}\bar{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}-\xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\bar{\boldsymbol{S}}\right]\psi^*(\boldsymbol{r},t).$$

其次，在两边左乘 $\sigma_y$，根据 (5.3.9) 式，$\sigma_y\bar{\boldsymbol{S}}\sigma_y=-\boldsymbol{S}$。最后，将 $t$ 换成 $-t$，得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}+V(r)\right.$$

$$\left.-g\frac{e}{2\mu c}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}+\xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\right]\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t). \tag{5.3.12}$$

这个结果与 (5.3.11) 式相比，差别无非是磁场 $\boldsymbol{B}$ 变成了 $-\boldsymbol{B}$。

实际上，当 $\psi$ 由于时间反演 (5.3.8) 而过渡到 $\psi^{\mathrm{R}}$ 时，$\boldsymbol{B}$ 也应同时变为

$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)=-\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},-t). \tag{5.3.13}$$

这是因为，当影片倒放时，形成磁场的电流也会反向。

因此，在包含电磁环境时间反演时，薛定谔方程是时间反演不变的。

有电场 $\boldsymbol{E}$ 时，应当有

$$\boldsymbol{E}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},-t), \tag{5.3.14}$$

所以，假如要求薛定谔方程是时间反演不变的，则哈密顿量就不能包含与 $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{E}$ 成正比的项。实际上，检测电子电偶极矩的实验所得到的结果正是这样的。

对自然规律来说，时间反演不变性一般都是成立的，而且精度

极高，读者可以证明，关于电荷密度的 $\rho^{R}(\boldsymbol{r}, t)=\rho(\boldsymbol{r},-t)$ 和关于电流的 $j^{R}(\boldsymbol{r}, t)=-j^{R}(\boldsymbol{r},-t)$ 以及(5.3.13)与(5.3.14)式一起并不会改变麦克斯韦方程.

若把取复共轭的变换记做 $K$，则时间反演变换的(5.3.8)式就可以写成 $\phi^{R}(\boldsymbol{r}, t)=\sigma_{y} K \phi(\boldsymbol{r},-t)$. 于是，可以把可观测量 $F$ 的时间反演定义为

$$F^{R}(\cdot ; t)=K \sigma_{y} F(\cdot ;-t) \sigma_{y} K. \tag{5.3.15}$$

其中，在 $F$ 里分号之后所写的 $t$ 表示显含时间. 薛定谔方程的时间反演不变性，也可以说成是，对于变换(5.3.15)，哈密顿量是不变的.

## §5.4 中心力场中的运动

所谓中心力场，是指其势仅仅是离空间某定点 $O$ 的矩离的 $r$ 的函数 $V(r)$. 我们来研究质量为 $\mu$ 的粒子在其中的运动. 定态薛定谔方程为

$$\left[-\frac{\hbar^{2}}{2 \mu} \Delta+V(\boldsymbol{r})\right] u(\boldsymbol{r})=E u(\boldsymbol{r}). \tag{5.4.1}$$

为了利用势的球对称性，最好采用以力心 $O$ 为原点的极坐标 $(r, \theta, \varphi)$. 若注意到轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 的平方用极坐标表示为(5.2.16)，则当 $r>0$ 时，(5.4.1)式左边的哈密顿量就可以写成

$$H=-\frac{\hbar^{2}}{2 \mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} r+\frac{L^{2}}{2 \mu r^{2}}+V(r). \tag{5.4.2}$$

由于它与 $L^{2}$、$L_{z}$ 对易，所以我们用 $l$、$m$ 标记角动量，用 $\nu$ 标记矢径方向上的运动状态(到后面就会明白 $\nu$ 的含义)，可以把本征函数写成

$$u_{\nu l m}(\boldsymbol{r})=R_{\nu l}(\boldsymbol{r}) Y_{l m}(\theta, \varphi). \tag{5.4.3}$$

这是因为，即使只限于寻找这种形式的解，也会得到本征函数的完备系. 实际上，与(5.4.1)式相应的本征值方程为

$$H u_{\nu l m}=E_{\nu l} u_{\nu l m},$$

按照 (5.2.25) 式，矢径函数 $R_{vl}$ 的微分方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}+V(r)\right]R_{vl}(r)$$

$$=E_{vl}R_{vl}(r), \tag{5.4.4}$$

由它的全部解构成了 $r$ 的函数空间的完备系，再加上 $\theta,\varphi$ 空间中球函数系的完备性，就证明了，(5.4.3) 形式的本征函数集合构成完备系。关于这个问题的更精细的讨论将放在第六部分，在这儿只是阐明，为求解微分方程 (5.4.3) 所需的边界条件，以及应当包含下述意义的归一化可能性：

$$\int_0^\infty R_{v'l'}^*(r)R_{vl}(r)r^2dr=\delta_{ll'}\delta_{vv'}\ \text{或}\ \delta_{ll'}\delta(v-v').$$

其中，克朗内克 $\delta$ 符号 $\delta_{vv'}$ 适用于量子数 $v$、$v'$ 至少有一个是离散值的情况，而 $\delta$ 函数则适用于 $v$ 和 $v'$ 都是连续参数的情况。

另外，问题的球对称性 $[H,L_\pm]=0$ 使 (5.4.4) 式中的 $R_{vl}$ 和 $E_{vl}$ 与磁量子数 $m$ 无关。(5.4.4) 式中的 $\hbar^2l(l+1)/2\mu r^2$ 叫做离心势。它加上 $V(r)$ 形成径向运动的等效势，这与经典力学毫无差别。

现在，我们来讨论 (5.4.4) 式的解，并研究一下中心力场中粒子量子力学运动的一般特征。为使讨论简化，要求势 $V(r)$ 是分段连续的，而且满足下表的条件 I 或稍严格一些的条件 II：

**表 5.4　势应满足的条件**

| | 条 件 I | 条 件 II |
|---|---|---|
| 当 $r\to\infty$ 时 | $r^{1+\delta}V(r)\to 0$ | $r^{2+\delta}V(r)\to 0$ |
| 当 $r\to 0$ 时 | $r^2V(r)\to 0$ | |

这个表中的 $\delta$，例如以条件 I 中与 $r\to\infty$ 有关的部分来说，可以理解为，对于给定的势 $V(r)$，有适当的 $\delta>0$ 使得 $r^{1+\delta}V(r)\to 0$ ($r\to\infty$ 时)。满足这个条件的 $V(r)$ 称为**短程力势**。库仑势与 $1/r$ 成正比，不满足这个条件，它是典型的**长程力**。我们到 §5.5 再来处理它。物理上知道的短程力满足比条件

II 强得多的条件，其典型例子就是具有汤川势 $\propto e^{-\kappa r}/r$ 的核力.

现在令

$$\left.\begin{aligned} &\frac{2\mu}{\hbar^2}E_{vl}\equiv\varepsilon,\quad \frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\equiv U(r)\\ &R_{vl}(r)=\chi(r)/r \end{aligned}\right\}. \tag{5.4.6}$$

其中略去了 $\chi$ 的下角标 $v$、$l$。(5.4.4) 式变成

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\varepsilon-U(r)\right]\chi(r)=0. \tag{5.4.7}$$

使用这个 $\chi$ 就可以给出在径向区间 $[r, r+dr]$ 中找到粒子的概率 $|\chi(r)|^2 dr$。(5.4.7) 式与一维运动的薛定谔方程形式相同.特别是在 $l=0$ 的情况下,由于不存在离心势,故在第二章处理过的一些例子，几乎可以原封不动地搬到现在的问题中来.对于三维运动的径向函数来说，只要注意在 $r=0$ 时加上下一小节叙述的特殊边界条件就可以了。

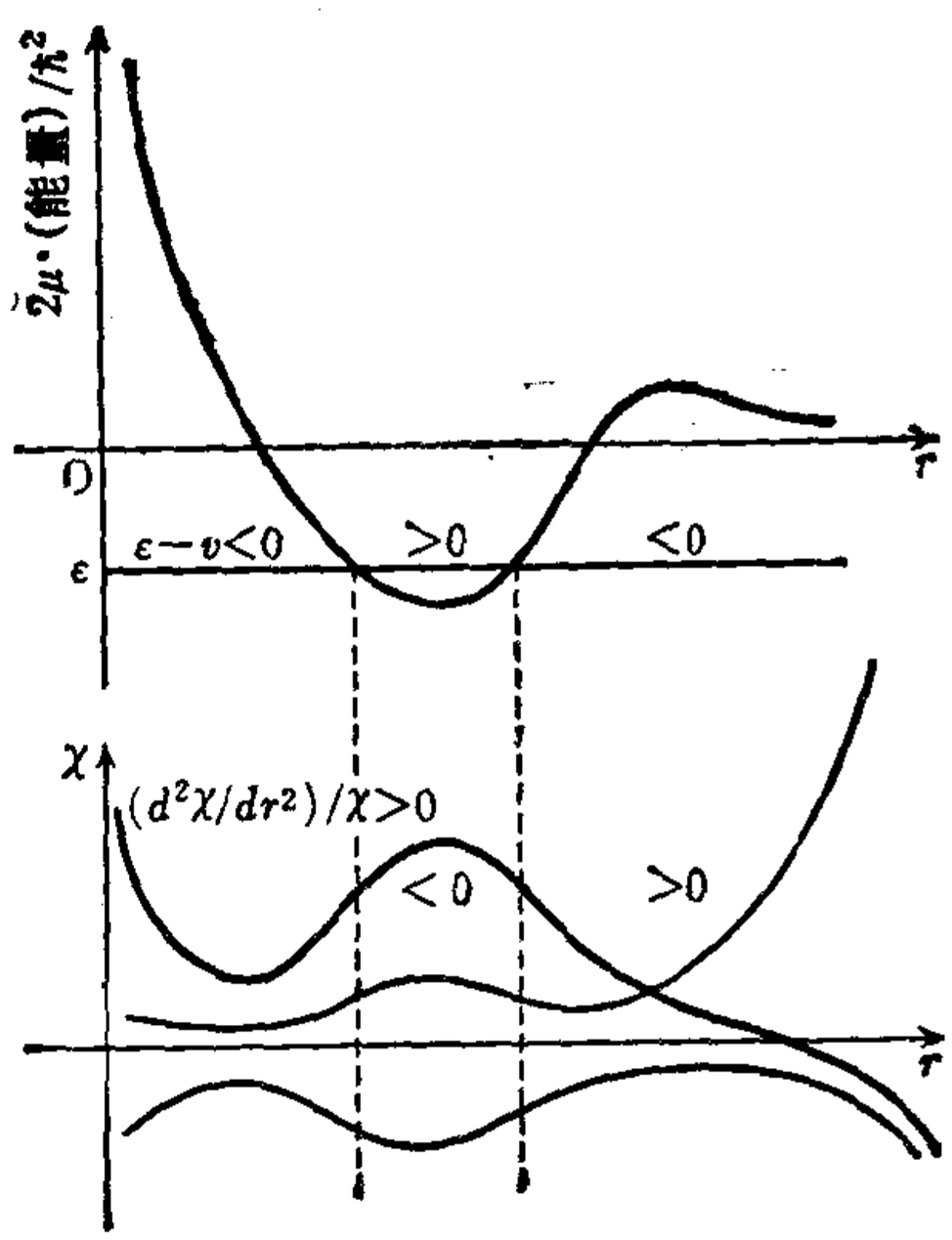


图 5.17 (5.4.7) 式的解 $\chi(r)$. 曲线在 $\varepsilon-U(r)<0$ 的范围内离开 $r$ 轴,而在 $\varepsilon-U(r)>0$ 的范围内靠拢 $r$ 轴

由 (5.4.7) 式导出的一个重要结论是

$$\varepsilon\geqslant \min U(r) \tag{5.4.8}$$

我们对此略加以说明。由 (5.4.7) 式可知，在 $\varepsilon-U(r)<0$ 的 $r$ 区间内，$\chi(r)$ 曲线相对于 $r$ 轴凸起 (图 5.17)。因此，在势 $U(r)$ 有底的情况下，对于 $\varepsilon<\min U(r)$ 的 $\varepsilon$ 来说，$\chi(r)$ 无非是单调地持续增大或减小，不会满足可能的归一化条件 (5.4.5). 能量低于势能底的量子力学状态是不能存在的。这种情况与经典

力学时的不同，量子力学能谱下端达不到势能的底，残存着零点振动。

### a) 原点附近的边界条件

假设，在原点 $r=0$ 附近 $\chi(r)\sim r^{\lambda}$，我们来决定 $\lambda$。

首先讨论 $l\neq 0$ 的情况。在原点附近，由于有表 5.4 中的条件，(5.4.7) 式中的离心势很大，根据 $\lambda(\lambda-1)-l(l+1)=0$，可得

$$\chi(r)\sim r^{l+1} \text{ 或 } r^{-l} \text{ (当 } r\to 0 \text{ 时)}.$$

若在 $l=0$ 时 $r\sim 0$ 处有 $U(r)\sim \alpha r^{\beta-2}$ $(\beta>0)$，则 $\chi(r)\sim \sqrt{r}\,Z_{1/\beta}(2\alpha^{\frac{1}{2}}r^{\beta/2}/\beta)$ 的结论不变，其中 $z$ 表示柱函数。

当 $r=0$ 为微分方程 (5.4.7) 的正则奇点时，在性质如 $r^{-l}$ 那样的解之外，还有 $r^{l+1}\ln r$。但是，这一项却无关紧要。

$r^{-l}$ 型解在 $l\geqslant 1$ 时违背了可能的归一化条件 (5.4.5)，故不能采用。当 $l=0$ 时，不存在这个问题。这个解 $R_{nl}\sim 1/r$ 在原来的 (5.4.1) 式中给出 $\delta$ 函数(在原点有单位点电荷时的泊松方程!)。

$$\Delta\frac{1}{r}=-4\pi\delta(r).$$

因此，$\chi(r)\sim r^{-l}$ 并没有给出微分方程的解(参看后面的 §16.4)。于是，一般必须有

$$\chi(r)\underset{r\to 0}{\sim} r^{l+1}. \tag{5.4.9}$$

### b) 在远处的性质

$\chi(r)$ 在远处 $r\to\infty$ 的性质依 $\varepsilon$ 的正负而异。在 (5.4.7) 式中当 $r\to\infty$ 时 $U(r)\to 0$，因此大致有

$$\chi(r)\underset{r\to\infty}{\sim}\begin{cases}A\sin(\sqrt{\varepsilon}\,r+\beta) & \varepsilon>0\\ Ae^{-\sqrt{-\varepsilon}r}+Be^{\sqrt{-\varepsilon}r} & \varepsilon<0\\ Ar^{-l}+Br^{l+1} & \varepsilon=0.\end{cases} \tag{5.4.10}$$

其中，$A$、$B$、$\beta$ 为常数。当 $\varepsilon=0$ 时，设势满足强条件 II。但

是，(5.4.10) 式的性质应当与 $r \to \infty$ 时 $U(r)$ 趋于零的速度有关。

为了看到这种情况，我们以 $\varepsilon > 0$ 的情形为例采用不定常数法来继续讨论。把 (5.4.10) 式中的 $A$ 和 $\beta$ 看成 $r$ 的函数，再确定它们，以使

$$\chi(r) = A(r)\sin\varphi(r),\ \varphi(r) \equiv \sqrt{\varepsilon}\, r + \beta(r)$$

满足 (5.4.7) 式。但是，有两个未知函数，而只有一个方程。所以，用撇表示对 $r$ 的微商，

$$\chi' = \sqrt{\varepsilon}\, A\cos\varphi + A'\sin\varphi + \beta'\cos\varphi.$$

再加一个要求，使上式后半部分为零，即

$$A'\sin\varphi + \beta'\cos\varphi = 0.$$

这样一来，(5.4.7) 式给出

$$A'\cos\varphi - \beta' A\sin\varphi = (U/\sqrt{\varepsilon})A\sin\varphi,$$

联立解这两个方程，得

$$A' = (U/\sqrt{\varepsilon})\sin\varphi\cos\varphi,\quad \beta' = -(U/\sqrt{\varepsilon})\sin^2\varphi.$$

因此

$$A(r) = \exp\left\{\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}}\int^r U(s)\sin 2[\sqrt{\varepsilon}\, s + \beta(s)]ds\right\},$$

$$\beta(s) = -\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\int^r U(s)\sin^2[\sqrt{\varepsilon}\, s + \beta(s)]ds.$$

由于正弦函数的绝对值不会超过 1，因此，若势满足条件 I，则在 $r \to \infty$ 时积分绝对收敛，$A(r)$ 和 $\beta(r)$ 也趋向于定值。确实，$\chi(r)$ 有 (5.4.10) 式中第一行那样的性质。

但是，如果与条件 I 相反，V 包含库仑势，那么，在上述积分表示中把 $\sin^2\varphi$ 写成 $\frac{1}{2}(1 - \cos\varphi)$，就会明白，$\beta(r)$ 将包含 $\ln r$，在 $r \to \infty$ 时，它不趋向于确定值。这表明，不能说 (5.4.10) 式只取决于 "$r \to \infty$ 时 $U(r) \to 0$"。在 $\beta(r)$ 中，把 $\ln r$ 加到 $\sqrt{\varepsilon}\, r$

上，不过是当 $r \to \infty$ 时一个小的修正，但对散射理论却有所影响（参看下一节）。

读者请思考 (5.4.10) 式中 $\varepsilon \leqslant 0$ 的情形。

在 (5.4.10) 式中，当 $\varepsilon < 0$ 时，若 $B \neq 0$，那么，在远处会违背可能的归一化条件 (5.4.5)，因此，这样的 $\chi(r)$不可能表示量子力学的状态。若 $B = 0$，则不会有这个问题，粒子的存在概率密度 $|\chi(r)|^2$ 在远处迅速消失。如果 (5.4.9) 式同时成立，则

$$\int_0^\infty |\chi(r)|^2 dr < \infty \tag{5.4.11}$$

这样的 $\chi(r)$ 表示粒子被束缚在力心附近而不能向远处逸去的状态。也就是**束缚态**。当 (5.4.10) 式中 $\varepsilon = 0$ 时，情形相同。但是，对于任意的 $\varepsilon$，$B = 0$ 和 (5.4.9) 式不能同时成立。其条件我们将在下一小节详细研究。

当 (5.4.10) 式中 $\varepsilon > 0$ 时，$\chi(r)$ 给出趋于远处 $(r \to \infty)$ 的存在概率密度，表示粒子由远处接近力心又向远处逸去的所谓**散射态**。实际上，给这个 $\chi(r)$ 添上时间因子 $e^{-i\omega t}(\omega \equiv E_{nl}/\hbar)$ 而写成

$$\chi(r) \underset{r\to\infty}{\sim} \left(\frac{iA}{2} e^{-i\beta}\right)\left[e^{-i(\sqrt{\varepsilon}r+\omega t)} - e^{2i\beta} e^{i(\sqrt{\varepsilon}r-\omega t)}\right], \tag{5.4.12}$$

第一项表示向着力心的“入射波”，第二项表示被相移 $2\beta$ 之后背向力心的“出射波”。在 d) 小节，我们将介绍量子力学散射问题的一系列公式。

### c) 束缚态[1)]

如果 $\chi(r)$ 的性质在原点附近由 (5.4.9) 式所示，而在远处取 (5.4.10) 式的第二行或第三行的 $B = 0$ 的那种形式，那么，它就表示束缚态。但是，对任意 $\varepsilon$ 来说，不能使二者同时成立，我们已经看到，(5.4.8) 式是必需的。但是，从 $r \sim 0$ 的 (5.4.9) 式开始，在

1) 这一小节的分析也适用于势在 $r \to \infty$ 时趋向于正无限大的情形。

$r \to \infty$ 时用数值法求解微分方程 (5.4.7)，则可以看出，(5.4.8) 式并非充分根据 (5.4.7) 式，$\chi(r)$ 相对 $r$ 的曲线斜率的变化率 $d^2\chi/dr^2$ 在各点 $r$ 处由 $[\varepsilon - U(r)]\chi(r)$决定，也就受 $\varepsilon$ 值的控制 (图 5.18)．假如控制得好，从而使 (5.4.9) 式的由 $\chi(r) \sim r^{l+1}$ 开始的曲线在 $r \to \infty$ 时顺利地趋近 $r$ 轴，那么，这时的 $\varepsilon$ 就会给出束缚态的能量．让我们来详细地讨论一下这种情况，取$\varepsilon < 0$．

设 $r > 0$ 时微分方程 (5.4.7)的解之中，$r \downarrow 0$ 时性质如 $r^{-l}$ 的解为 $v_1(r)$，性质如 $r^{l+1}$ 的解为 $v_2(r)$．即

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \varepsilon - U(r)\right] v_1 = 0,$$

$$v_1 \underset{r \downarrow 0}{\sim} r^{-l}/\sqrt{2l+1},$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \varepsilon - U(r)\right] v_2 = 0,$$

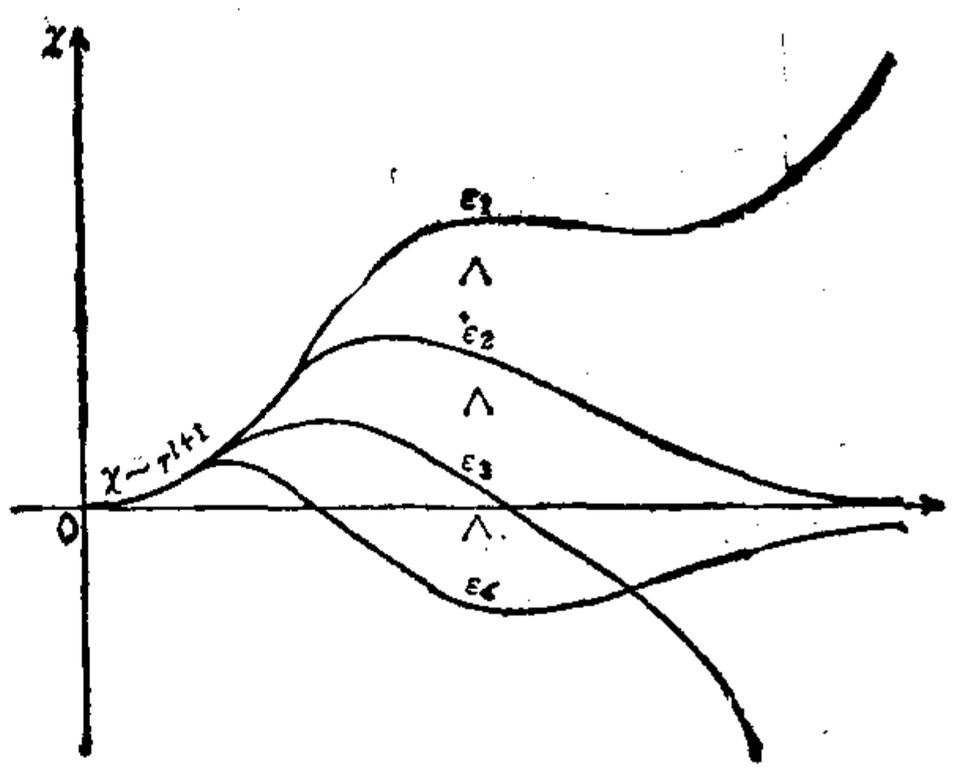



图 5.18　寻求本征值

$$v_2 \underset{r \downarrow 0}{\sim} r^{l+1}/\sqrt{2l+1}.$$

$r \downarrow 0$ 的渐近式中乘以 $1/\sqrt{2l+1}$是为了下面计算朗斯基行列式时方便．若从这些渐近式出发用数值法把微分方程的解延拓到 $r$ 大的区域，则 $v_1(r)$ 和 $v_2(r)$ 显然都是实函数．

现在，让上面 $v_2$ 的微分方程乘以 $v_1$，$v_1$ 的微分方程乘以 $v_2$，两边再分别相减，则可得到

$$0 = v_1\frac{d^2v_2}{dr^2} - v_2\frac{d^2v_1}{dr^2} = \frac{d}{dr}\left[v_1\frac{dv_2}{dr} - v_2\frac{dv_1}{dr}\right].$$

显然，有

$$v_1\frac{dv_2}{dr} - v_2\frac{dv_1}{dr} = \text{常数} = 1.$$

其中的常数值是由 $v_1$ 和 $v_2$ 在 $r \downarrow 0$ 时的渐近式求得的．上式左边叫做函数 $v_1$ 和 $v_2$ 的朗斯基行列式，记为 $W(v_1, v_2)$．在其值

不等于零的点附近，两个函数是线性独立的，反之亦然(图 5.19)。

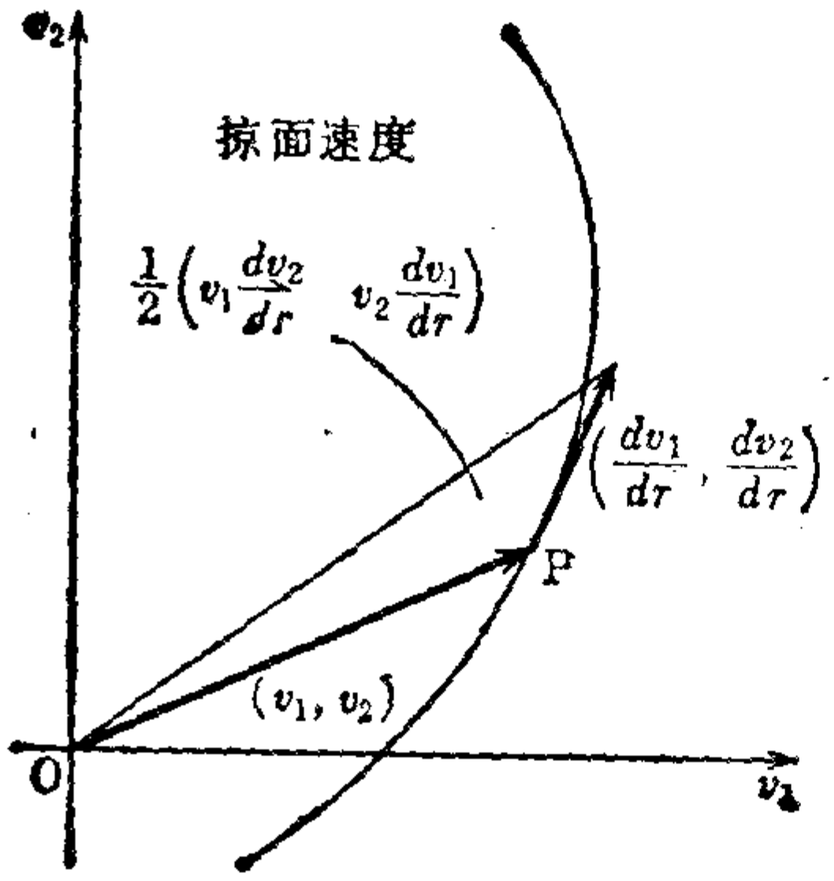



图 5.19　若把 $r$ 看成为时间，考虑 $v_1$、$v_2$ 平面上点 $P(v_1(r), v_2(r))$ 的运动，则朗斯基行列式 $W(v_1, v_2)$ 是掠面速度的两倍。两个函数 $v_1$ 和 $v_2$ 线性相关时，点 P 就在通过原点的直线上运动，这时不会同时得到掠面速度≠0。若 $v_1$ 和 $v_2$ 的微分方程用点 P 在中心力场中的运动表示，则掠面速度恒定

为了方便，在以后的讨论中，由上述两个实函数定义一个复函数

$$z(r;\varepsilon) = v_1(r) + iv_2(r).$$

因 $W(v_1, v_2) \neq 0$，故 $z$ 不会为零。$z(r;\varepsilon)$ 及其共轭复量 $z^*(r;\varepsilon)$ 是 (5.4.7) 式线性独立的解，即

$$W(z^*, z) \equiv z^*\frac{\partial z}{\partial r}$$

$$- z\frac{\partial z^*}{\partial r} = 2i,$$

若用 $z$ 的极型

$$z(r;\varepsilon) = w(r;\varepsilon) \times \exp[i\theta(r;\varepsilon)]$$

($w$ 和 $\theta$ 是实函数)来进行计算，则由图 5.19 所示的掠面速度恒定便有 $\partial\theta/\partial r = 1/w^2$，再考虑到在 $r \downarrow 0$ 时 $\theta \to 0$，从而

$$\theta(r;\varepsilon) = \int_0^r \frac{dr'}{w^2(r';\varepsilon)}. \tag{5.4.13}$$

这样，构造 $z$ 和 $z^*$ 的线性组合，便可以把微分方程 (5.4.7) 的通解(归一化常数未定)写成

$$\chi(r;\varepsilon) = w(r;\varepsilon)\sin[\theta(r;\varepsilon) - \alpha]. \tag{5.4.14}$$

其中 $\alpha$ 是任意实常数。

把条件 (5.4.9) 加于 (5.4.14) 式，即要求

$$\chi(r;\varepsilon) \underset{r\downarrow 0}{\sim} r^{l+1}, \tag{5.4.15}$$

则有

$$\alpha = 0.$$

这样 $\chi(r)$ 就完全确定下来了。在 $\alpha$ 上可以加 $\pi$ 的整数倍，但充

其量不过改变 $\chi(r)$ 的符号，所以不会发生问题，那么，$r \to \infty$ 时，$\chi(r)$ 会怎样变化呢？当改变 $\varepsilon$ 时，又会如何？这些就是我们要研究的问题。

由于构成 $w^2 = |z|^2$ 的 $v_1$ 和 $v_2$ 是微分方程(5.4.7)的线性独立的解，因此，在 $r \to \infty$ 时，它们至少有一个要像 $e^{\sqrt{-\varepsilon}r}$ 那样发散。这样 (5.4.14) 式也将发散，不过，还不能这样说，因为，也许会有 $\sin\theta(r;\varepsilon) \to 0$。实际上，当

$$N(\varepsilon) \equiv \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{dr'}{w^2(r';\varepsilon)} \tag{5.4.16}$$

为正整数时，而且也只有在这时，才会有

$$\chi(r;\varepsilon) \underset{r\to\infty}{\sim} Ae^{-\sqrt{-\varepsilon}r}, \tag{5.4.17}$$

也就是说，在满足

$$N(\varepsilon) = n + 1 \quad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{5.4.18}$$

的 $\varepsilon$ 值 ($\equiv \varepsilon_n$) 处，而且也只有在此值处，(变形的) 薛定谔方程 (5.4.7) 才具有满足束缚态必要条件 (5.4.9) 和 (5.4.11) 的解。这时可以用 (5.4.18) 式中的 $n$ 代替确定径向运动的量子数 $\nu$，即 $\chi(r;\varepsilon_n) \equiv \chi_{nl}(r)$。

这个 $n$ 具有简单的意义，在 $\chi$ 的表达式 (5.4.14) 中，正弦函数的自变量 $\theta(r;\varepsilon)$ 从 $r \downarrow 0$ 时的值 0 开始，与 $r$ 一起单调递增，在 $r \to \infty$ 时达到 $N(\varepsilon)\pi$。由于在这个区间 $w = |z|$ 决不会为零，因此，$\chi$ 在 $r \in (0, \infty)$ 中的零点(又叫节点)数为 $n = N(\varepsilon) - 1$ 个，在 $\varepsilon \neq \varepsilon_n$ 的情况下，同样可以知道，$\chi$ 的节点数等于 $N(\varepsilon)$ 的整数部分。

下面会证明，$N(\varepsilon)$ 是 $\varepsilon$ 的单调增加函数。当 $\varepsilon$ 非常小时，根据在 (5.4.8) 处说明的理由，$\chi(r;\varepsilon)$ 没有节点，于是 $N(\varepsilon) < 1$。此后 $\varepsilon$ 开始增加，若找到了使 $N(\varepsilon_0) = 1$ 的 $\varepsilon_0$，则它给出基态能量。然后 $N(\varepsilon)$ 随着 $\varepsilon$ 的增加而增加，如果找到使 $N(\varepsilon_1) = 2$ 的 $\varepsilon_1$，它就是第一激发态的能量，…因为现在所考虑的是 (5.4.3) 那种形式的波函数，所以，即使是基态、第一激发态、…，其角动量也在 $l$ 的子空间之中，因为 $N(\varepsilon)$ 确实随 $\varepsilon$ 增大而增

大，所以，在角动量确定的子空间中，径向运动的能量简并消除了。

当然，对于有些势，会出现没有使 $N(\varepsilon)$ 取整数的 $\varepsilon$。这类势不具有角动量 $l$ 的束缚态。

现在，我们来证明，$N(\varepsilon)$ 单调增大。取 (5.4.13) 式对 $\varepsilon$ 的微商，有

$$\frac{\partial\theta(r;\varepsilon)}{\partial\varepsilon} = -\int_0^r \left[\frac{\partial z}{\partial\varepsilon} z^* + z\frac{\partial z^*}{\partial\varepsilon}\right]\frac{dr'}{w^4}. \qquad (5.4.19)$$

要计算右边的积分，可以用不定常数法解由 $\left[\frac{d^2}{dr^2} + \varepsilon - U\right] z = 0$ 对 $\varepsilon$ 微商后得到的方程

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \varepsilon - U\right]\frac{\partial z(r;\varepsilon)}{\partial\varepsilon} = -z(r;\varepsilon).$$

也就是说，与在 b) 小节所做的一样，令

$$\frac{\partial z(r;\varepsilon)}{\partial\varepsilon} = A(r)z(r) + B(r)z^*(r),$$

再定出其系数 $A(r)$ 和 $B(r)$。上式右边的 $z(r)$ 是 $z(r;\varepsilon)$ 的简写法。因 $v_1$ 和 $v_2$ 的边界条件与 $\varepsilon$ 无关，故 $\lim_{r\downarrow 0}\frac{\partial z}{\partial\varepsilon} = 0$。考虑到这点便有

$$\frac{\partial z(r;\varepsilon)}{\partial\varepsilon} = \frac{i}{2}\left[z(r)\int_0^r |z(r'')|^2 dr'' - z^*(r)\int_0^r z(r'')^2 dr''\right].$$

将其代入 (5.4.19) 式，换成 $z$ 的极型，便有

$$\frac{\partial\theta(r;\varepsilon)}{\partial\varepsilon} = \int_0^r dr'\frac{1}{w^2(r')}\int_0^{r'} dr'' w(r'')^2 \sin 2[\theta(r') - \theta(r'')].$$

改变积分的次序：

$$\frac{\partial\theta(r;\varepsilon)}{\partial\varepsilon} = \int_0^r dr'' w^2(r'')\int_{r''}^r \frac{dr'}{w^2(r')} \sin 2[\theta(r') - \theta(r'')],$$

利用 (5.4.13) 式中的微分形式 $d\vartheta(r') = dr'/w^2(r')$，可以完成对

$r'$ 的积分，得到

$$\frac{\partial\theta(r;\varepsilon)}{\partial\varepsilon}=\int_0^r dr''W^2(r'')\sin^2[\theta(r)-\theta(r'')],$$

可见 $\theta(r;\varepsilon)$ 随 $\varepsilon$ 单调增大。结论是，当 $r\to\infty$ 时，$N(\varepsilon)$ 单调增大。(确实增大！)证毕。

上面已经看到，第 $n$ 个激发态的径向函数有 $n$ 个节点，根据这一事实，可以导出势 $V(r)$ 的**巴格曼**（Bargmann）**判别式**，它给出具有角动量 $l$ 的束缚态个数 $b_l$ 的上限：

$$b_l\leqslant\frac{1}{2l+1}\int_0^\infty r|U_0(r)|dr\quad(U_0(r)\equiv\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)).$$

(5.4.20)

其中，势满足条件 II。这时右边的积分是有限的。在这里我们不讨论零点能束缚态。即使包括零能束缚态，(5.4.20) 式也会成立。

若势在某些地方稍许深一些，则束缚态的能量就必然低一些(参看 §5.7 的变分法)，因此，势 $V(r)$ 所具有的束缚态的数目 $b_l$ 不会超过 $-|V(r)|$ 所具有的束缚态的数目 $b_{l'}$。于是，这个 $b_{l'}$ 只比最高能量束缚态径向函数所具有的节点数大 1，(根据假定，该状态的能量小于零，因此，)等于 $\varepsilon=0$ 时的薛定谔方程

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\phi(r)=-|U_0(r)|\phi(r)\quad(5.4.21)$$

的解所具有的节点数(参看图 5.18)。其中，$r\downarrow 0$ 时，取 $\phi\sim r^{l+1}$。

方程 (5.4.21) 在右边为零时有独立的解 $r^{l+1}$ 和 $r^{-l}$。把右边当成非齐次项那样，用不定常数法求解，有

$$\phi(r)=r^{l+1}-\frac{1}{2l+1}\int_0^r H(r,s)|U_0(s)|\phi(s)ds.\quad(5.4.22)$$

其中

$$H(r,s)=r(r/s)^l-s(s/r)^l.\quad(5.4.23)$$

设这个 $\phi$ 的节点为 $r_1<r_2<\cdots<r_{b_l}$，让 $r_0\equiv 0$，我们来证明

$$2l+1<\int_{r_{k-1}}^{r_k} r|U_0(r)|dr\ (k=1,2,\cdots,b_l)。\quad(5.4.24)$$

将上式两边分别从 $k=1$ 加到 $b_l$，即可得到(5.4.20)式。

首先，看 $b_l=1$ 的情况。根据在 $r$ 轴上的开区间 $I_1=(0,r_1)$ 内 $\phi>0$，再注意到当 $r>s$ 时 $H(r,s)>0$，就有 $\phi\leqslant r^{l+1}$。这样，在(5.4.22)式中，令 $r=r_1$，有

$$r_1^{l+1}\leqslant\frac{1}{2l+1}\int_0^{r_1}H(r_1,s)|U_0(s)|s^{l+1}ds。$$

两边同除以 $r_1^{l+1}/(2l+1)$，注意到在该积分域 $I_1$ 上，有

$$(s^l/r_1^{l+1})H(r_1,s)=1-(s/r_1)^{2l+1}\leqslant 1,$$

便可得出 $k_1=1$ 时的(5.4.24)式。

再看 $b_l=2$ 的情况。与上面一样，可以证明 $k=1$ 时，(5.4.24)式是成立的。而在 $k=2$ 的积分域 $I_2$ 中，用微商 $\phi'(r_1)\neq 0$ 来除 $\phi$，并考虑

$$\Phi(r)\equiv\phi(r)/\phi'(r_1),$$

便有 $\Phi(r_1)=0$，$\Phi'(r_1)=1$。并且在 $I_2$ 上 $\Phi(r)\geqslant 0$。于是，再次用不定常数法就会得到

$$\Phi(r)=\frac{1}{2l+1}H(r,r_1)-\frac{1}{2l+1}\int_{r_1}^{r}H(r,s)|U_0(s)|\Phi(s)ds。\quad(5.4.25)$$

在 $I_2$ 上，$\Phi(r)\geqslant 0$，积分就大于零，从而 $\Phi(r)\leqslant H(r,r_1)/(2l+1)$。因此，在(5.4.25)式中，令 $r=r_2$，便有

$$(2l+1)H(r_2,r_1)\leqslant\int_{r_1}^{r_2}H(r_2,s)H(s,r_1)|U_0(s)|ds。$$

由定义(5.4.23)直接可证

$$H(r_2,s)H(s,r_1)\leqslant s[H(r_2,r_1)-Y(r_2,r_1)]<sH(r_2,r_1),$$

其中

$$Y(r_2,r_1)\equiv 2(r_1r_2)^{\frac{1}{2}}[1-(r_1/r_2)^{l+\frac{1}{2}}]>0。$$

于是，得到了 $k=2$ 时的(5.4.24)式。这样，$b_l=2$ 的情形证明完毕。

对 $b_l=3,4,\cdots$ 的情形亦可完全进行同样处理，(5.4.20)

式的证明就此完结。

对于势 $U_0(r) = -(2l+1)\delta(r-a)/r$ 来说，(5.4.20) 式中的等号成立。在这种情形下，束缚态有一个零点能。但是，即使(5.4.20)式右边的势为无限大，也不可能有无限多个束缚态。在后面图 5.23 中将就势阱情况下实际的束缚态数与巴格曼判别式进行比较。

**d) 势阱**

势阱(图 5.20)虽不能说是现实的，却是对短程势进行解析处

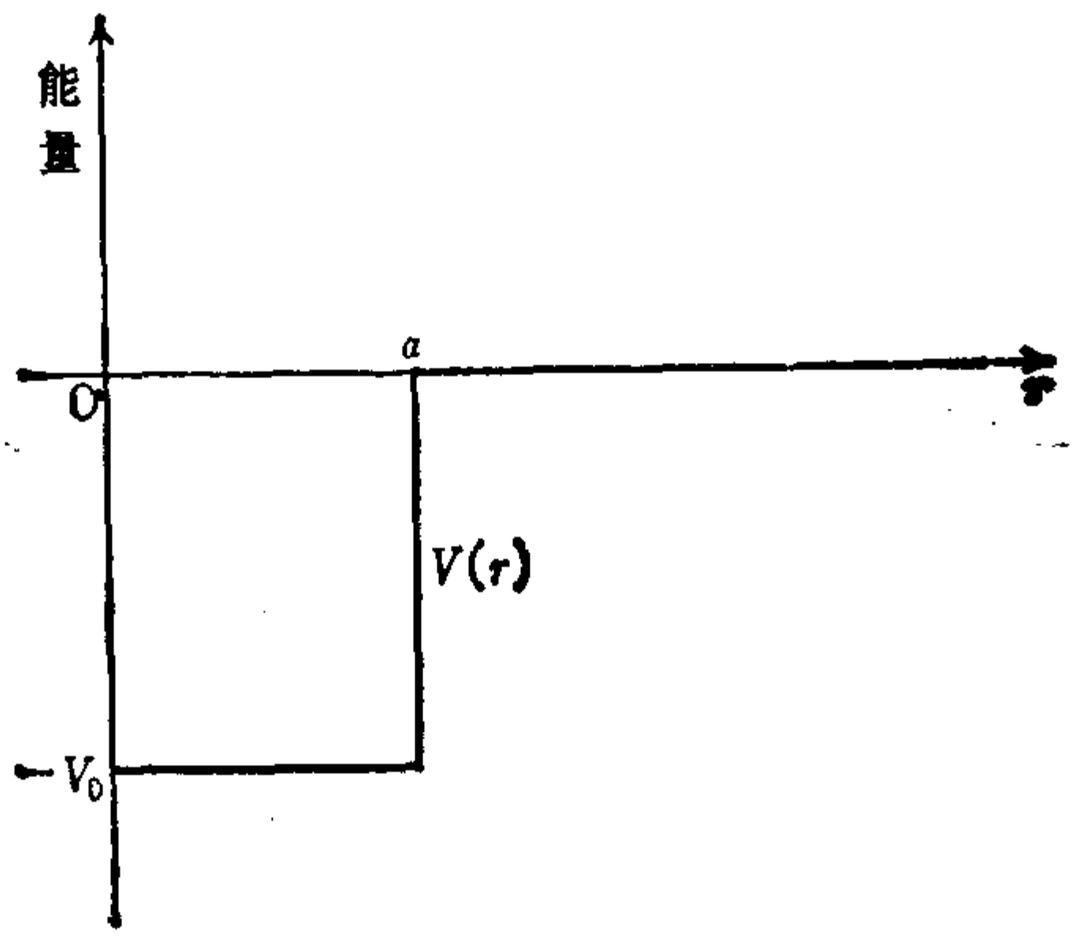



图 5.20 势阱 $V_0<0$ 时为斥力型

理的一个典型，采用这个势，径向函数 $R_l$ 的方程 (5.4.4) 便写成

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}+1-\frac{l(l+1)}{\rho}\right]R_l=0. \qquad (5.4.26)$$

其中，在势的

$$\left.\begin{aligned} &\text{内部}\ (r<a)\ \rho\equiv\alpha r,\ \alpha=\left[\frac{2\mu(E+V_0)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} \\ &\text{外部}\ (r>a)\ \rho\equiv i\beta r,\ \beta=\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2 e^{\pi i}}\right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned}\right\}, \qquad (5.4.27)$$

上两式中省略了 $R_{vl}$ 和 $E_{vl}$ 的角标[1]。

1) 把 $\beta=\beta(E)$ 当作是在正实轴处切开的复平面上的函数。$E<0$ 时，令 $E=|E|e^{i\pi}$。

方程(5.4.26)的通解用复 $s$ 平面上的积分给出:

$$R_l(\rho) = \rho^l \int_C e^{i\rho s}(1 - s^2)^l ds.$$

积分路径C两端值之差用 $|_C$ 表示,把 $R_l$ 代入(5.4.26)式,再进行必要的分部积分,为确使 $R_l$ 满足方程,C要由下式决定:

$$e^{i\rho s}(1 - s^2)^{l+1}|_C = 0.$$

对应于不同的C,会得到球贝塞耳函数

$$j_l(\rho) = \frac{1}{2}\frac{\rho^l}{2^l l!}\int_{-1}^{1} e^{i\rho s}(1 - s^2)^l ds, \qquad (5.4.28)$$

或球汉克尔函数

$$h_l^{(1)}(\rho) = -\frac{\rho^l}{2^l l!}\int_1^{i\infty} e^{i\rho s}(1 - s^2)^l ds,$$

$$h_l^{(2)}(\rho) = \frac{\rho^l}{2^l l!}\int_{-1}^{i\infty} e^{i\rho s}(1 - s^2)^l ds. \qquad (5.4.29)$$

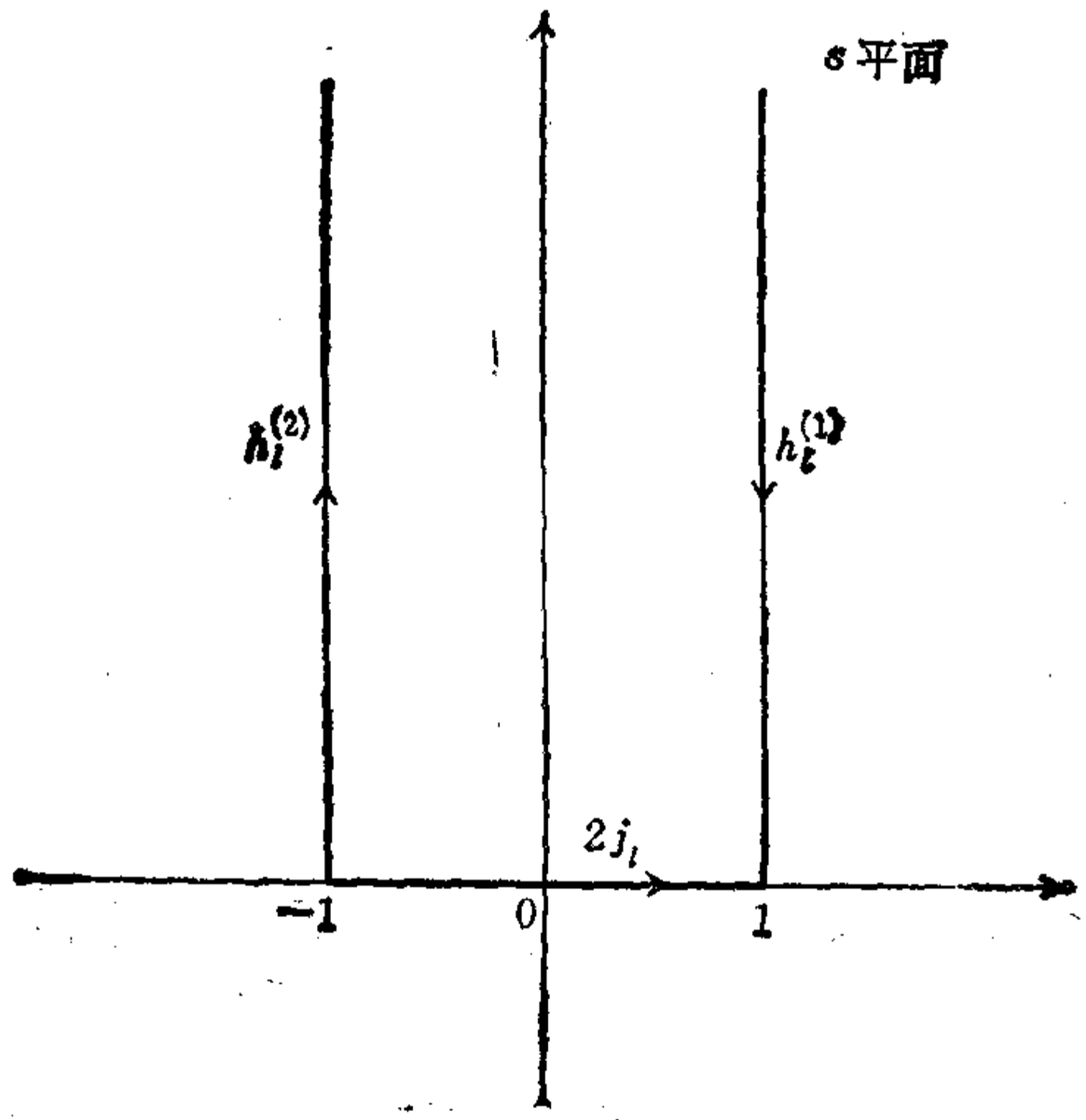



图 5.21 球贝塞耳函数之间的关系. $h_l^{(1)}$ 的积分路径从上往下,跟 $2j_l$ 的路径反向, $h_l^{(2)}$ 的路径从下向上,在无限远处形成闭合曲线. 从而 (5.4.30) 式得证

参看图 5.21. 其中,后两个表达式内 $\mathrm{Re}\rho > 0$. 在 $\rho$ 复平面

上其它区域解析。

因为二阶微分方程 (5.4.26) 只有两个独立的解，所以，从上述三种函数中适当选用两种就行了。实际上，如果把它们的积分路径像图 5.21 那样连接起来，就会有

$$j_l(\rho) = \frac{1}{2}\left[h_l^{(1)}(\rho) + h_l^{(2)}(\rho)\right]. \tag{5.4.30}$$

$\rho$ 为实数时，$h_l^{(1)}$ 和 $h_l^{(2)}$ 互为复共轭，$j_l$ 是它们的实部，汉克尔函数的虚部常用 $n_l$ 表示，叫做诺埃曼函数。

由 (5.4.28) 和 (5.4.29) 两式，我们可以写出几个具体表达式 (图 5.22)

$$j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad h_0^{(1)}(\rho) = -i\,\frac{e^{i\rho}}{\rho},$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho},$$

$$h_1^{(1)}(\rho) = -\left(\frac{1}{\rho} + \frac{i}{\rho^2}\right)e^{i\rho},$$

$$j_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\sin\rho - \frac{3}{\rho^2}\cos\rho,$$

$$h_2^{(1)}(\rho) = \left(\frac{i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2} - \frac{3i}{\rho^3}\right)e^{i\rho}.$$

上述解中，只有 (5.4.28) 式满足径向函数在原点处的边界条件 $R_l \sim r^l$ ($R_l = \chi/r$，参看 (5.4.9) 式)。实际上

$$j_l(\rho) \underset{\rho\downarrow 0}{\sim} \frac{1}{2}\,\frac{\rho^l}{2^l l!}\int_{-1}^{1}(1-s^2)^l ds = \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}, \tag{5.4.31}$$

与此相反，在 (5.2.29) 式中积分里，当 $\rho$ 小时，来自大 $s$ 的部分有决定性的贡献，即

$$h_l^{(1)}(\rho) \underset{\rho\downarrow 0}{\sim} -\frac{\rho^l}{2^l l!}\int_1^{i\infty} e^{i\rho s}(-s^2)^l ds \sim -i\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}. \tag{5.4.32}$$

因此，把归一化常数写成 $A_l$，则有

$$R_l(r) = A_l j_l(\alpha r) \quad (r < a). \tag{5.4.33}$$

依照是束缚态还是散射态，在远处的边界条件(5.4.10)有所不同.

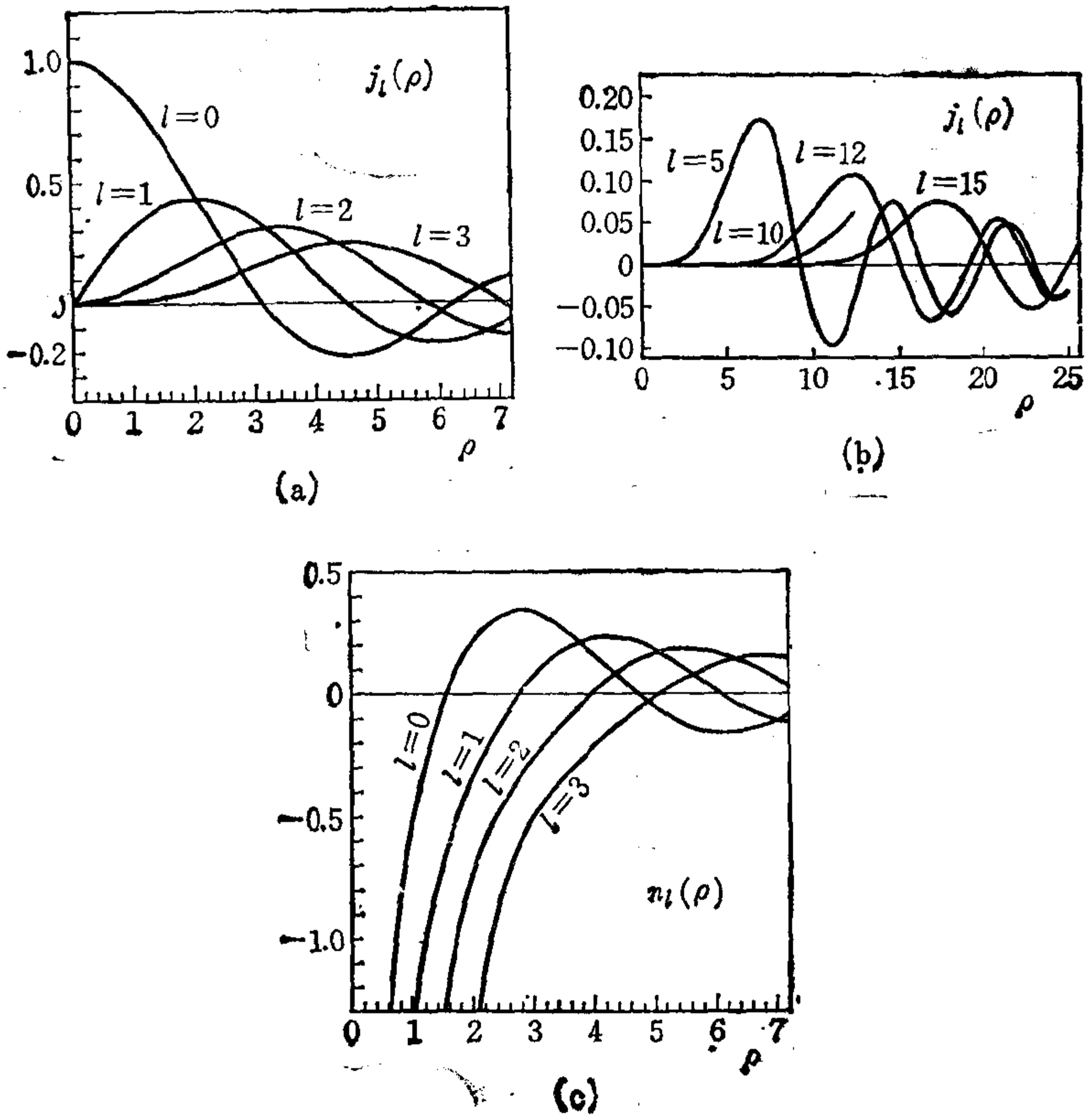



图 5.22 球贝塞耳函数 $j_l(\rho)$ 及球诺埃曼函数 $n_l(\rho)$. 对于实 $\rho$，后者是由 $h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho)$ 来定义的

我们首先考虑束缚态 ($E \leqslant 0$). 设势为引力型. 因 $E \leqslant 0$，故(5.4.27)式中的 $\rho$ 是实数，因此，(5.4.29)式中的 $h_l^{(1)}$ 在远处不会增大，从而

$$R_l(r) = B_l h_l^{(1)}(i\beta r) \quad (r > a). \tag{5.4.34}$$

要求径向函数在边界 $r = a$ 处平滑衔接，要求波函数是归一化

的，上面的常数 $A_l$ 和 $B_l$ 就是由这两个要求来确定的(差共同的常数相位因子)。关于第一个要求，换句话说，是要求在 $r=a$ 处内外的对数微商 $(adR/dr)/R$ 相等：

$$\alpha a j_l'(\alpha a)/j_l(\alpha a) = i\beta a h_l^{(1)'}(i\beta a)/h_l^{(1)}(i\beta a),$$

它也是决定能量本征值 $E$ 的条件。其中，撇表示微商。对于 $l=0$，写下这个条件，则

$$\xi\cot\xi = -\eta,$$

其中 $\xi \equiv \alpha a$，$\eta \equiv \beta a$。按照 (5.4.27) 式，对于 $\xi$ 和 $\eta$，应当有

$$\xi^2 + \eta^2 = 2\mu V_0 a^2/\hbar^2.$$

这样，就得到了关于 $\xi$ 和 $\eta$ 的联立方程组。这与前面在一维运动情形时所得到的 (2.4.21)式类似，可根据图 2.9 求解。当 $2\mu V_0 a^2/\hbar^2 < \left(\frac{\pi}{2}\right)^2$ 时，没有束缚态，当 $\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \leqslant 2\mu V_0 a^2/\hbar^2 < \left(\frac{3\pi}{2}\right)^2$ 时，有一个束缚态，…。

对于 $l=1$，决定能量本征值 $E$ 的条件是

$$\frac{\cot\xi}{\xi} - \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^i},\ \xi^2 + \eta^2 = \frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2}.$$

让 $V_0 a^2$ 从零开始增加，当在 $\eta=0$ 处满足上式时，即 $\cot\xi=\infty$ 时，就会出现新的本征值。这也是 $2\mu V_0 a^2/\hbar^2$ 越过 $\pi^2, (2\pi)^2, \cdots$ 的时候。

与这些结果相比，巴格曼判别式 (5.4.20) 只是一个相当笼统的判据，对于 $|V|$，图 5.23 显示了线性判据的界限。

在散射态 ($E>0$)，(5.4.27) 式中的 $\beta$ 变为虚数，所以在势的外部区域 ($r>a$) 应当令

$$\rho = kr, \quad k = \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}, \tag{5.4.35}$$

与束缚态的情形不同了，没有理由把 $r>a$ 时的解局限于 $h_l^{(1)}$。因此

$$R_l(r) = C_l h_l^{(1)}(kr) + D_l h_l^{(2)}(kr), \quad (r>a). \tag{5.4.36}$$

它和势内部区域的 (5.4.33) 式在边界 $r=a$ 处是平滑衔接的，而

作为一个整体波函数在(5.4.5)式的意义下被归一化为 $\delta_{ll'}\delta_{(k-k')}$，根据这两个要求，便可确定常数 $A_l$，$C_l$ 和 $D_l$。应该确定的常数

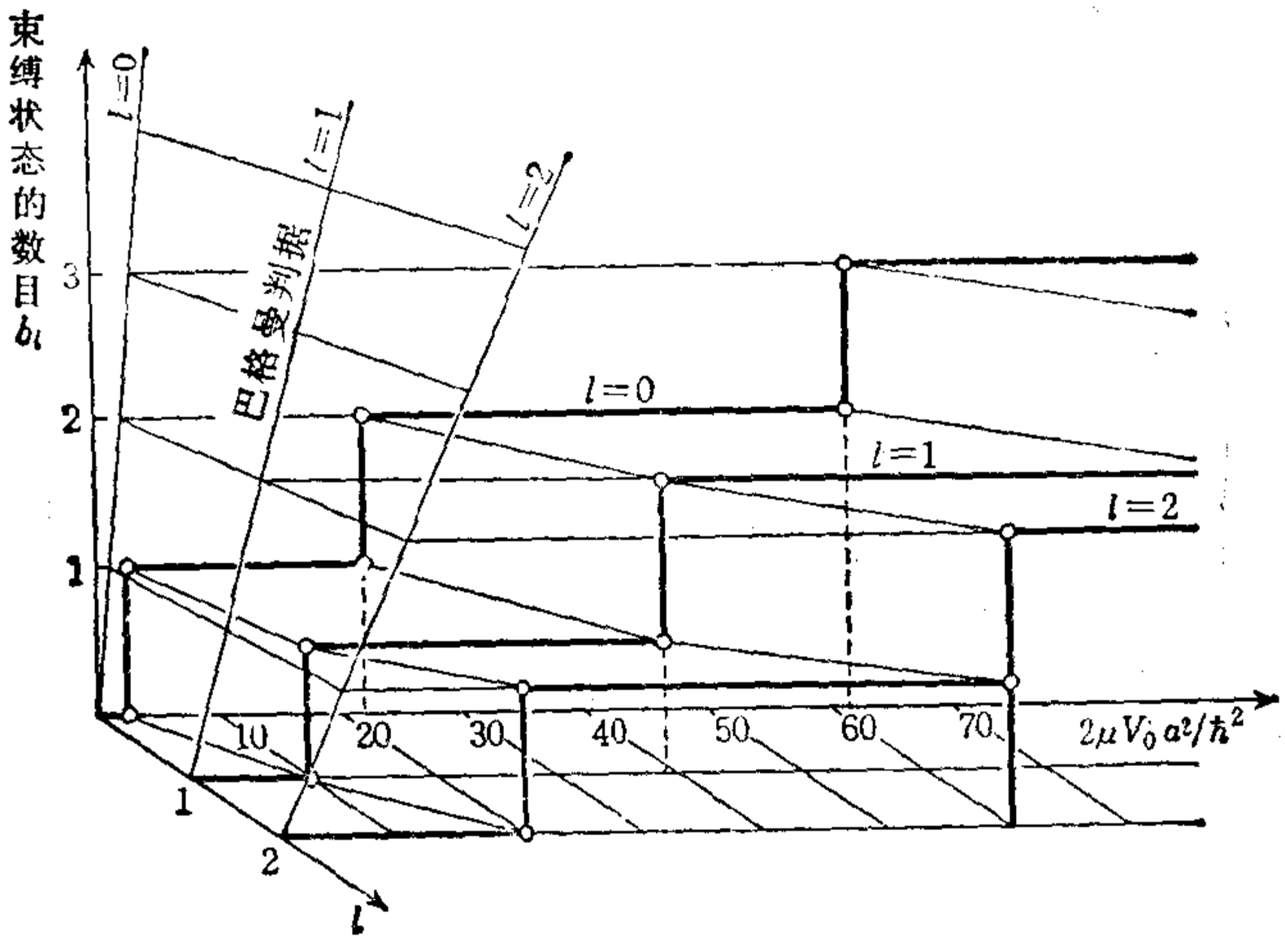



图 5.23　势阱中束缚态的数目与巴格曼判据(5.4.20)比较

比束缚态时多了一个，因此，这次可以取任意 $E>0$ 的值，散射态的能量构成连续谱。

现在，我们把势内侧的对数微商写成

$$\gamma_l \equiv [(adR_l/dr)/R_l]_{r=a}, \tag{5.4.37}$$

注意到，根据(5.4.31)式，$\gamma_l$ 是实数，由于势是实函数，所以可以说，上述结果是普遍的。由势外部区域的解(5.4.36)，有

$$\gamma_l = ka\frac{C_l h_l^{(1)\prime}(ka) + D_l h_l^{(2)\prime}(ka)}{C_l h_l^{(1)}(ka) + D_l h_l^{(2)}(ka)},$$

径向函数的衔接条件给出

$$\frac{C_l}{D_l} = \frac{i[kah_l^{(2)\prime}(ka) - \gamma_l h_l^{(2)}(ka)]}{-i[kah_l^{(1)\prime}(ka) - \gamma_l h_l^{(1)}(ka)]}. \tag{5.4.38}$$

因为 $\gamma_l$ 为实量，所以上式的分子和分母互为共轭复量，若取 $|C_l| = |D_l| = \frac{1}{2}$(这也确定了 $R_l$ 的归一化)，则可以有

$$C_l = \frac{1}{2} e^{i\delta_l}, \quad D_l = \frac{1}{2} e^{-i\delta_l} \tag{5.4.39}$$

(共同的相位没有量子力学意义),其中,

$$\delta_l = \arg i[ka h_l^{(2)\prime}(ka) - \gamma_l h_l^{(2)}(ka)].$$

或者,对于实自变量,$h_l^{(2)}$ 的实部是 $j_l$,虚部是 $-n_l$,因而也可以写

$$\delta_l = \tan^{-1} \frac{ka j_{l'}(ka) - \gamma_l j_l(ka)}{ka n_{l'}(ka) - \gamma_l n_l(ka)}. \tag{5.4.40}$$

显然,采用这种形式,当没有散射势时 $\delta_l = 0$.不过,根据(5.4.36)、(5.4.39)和(5.4.30)诸式,这一点业已明确了.加上弱的引力势时,径向函数在 $r$ 轴方向上产生的结果 $\gamma_l$ 比自由粒子时有所减少,$\delta_l$ 变成正的.加上斥力势时,$\delta_l$ 为负.$\delta_l$ 称为**相移**(图5.24).

散射波是在远离散射中心的地方进行观测的.当 $\rho = kr \to \infty$ 时,$h_l^{(1)}(\rho)$ 和 $h_l^{(2)}(\rho)$ 有什么样的性质呢?因为 $l = 0$ 的情况是平凡的,故不予考虑,把(5.4.29)式改写为

$$h_l^{(1)}(\rho) = -\frac{\rho^l}{2^l l!} \left(\frac{1}{i\rho}\right)^l \int_1^{i\infty} \left(\frac{d^l}{ds^l} e^{i\rho s}\right)(1 - s^2)^l ds,$$

反复进行分部积分,得到

$$h_l^{(1)}(\rho) = -\left(\frac{1}{2i}\right)^l \int_1^{i\infty} e^{i\rho s}[(1 + s)^l - l^2(1 - s)(1 + s)^{l-} + \cdots] ds. \tag{5.4.41}$$

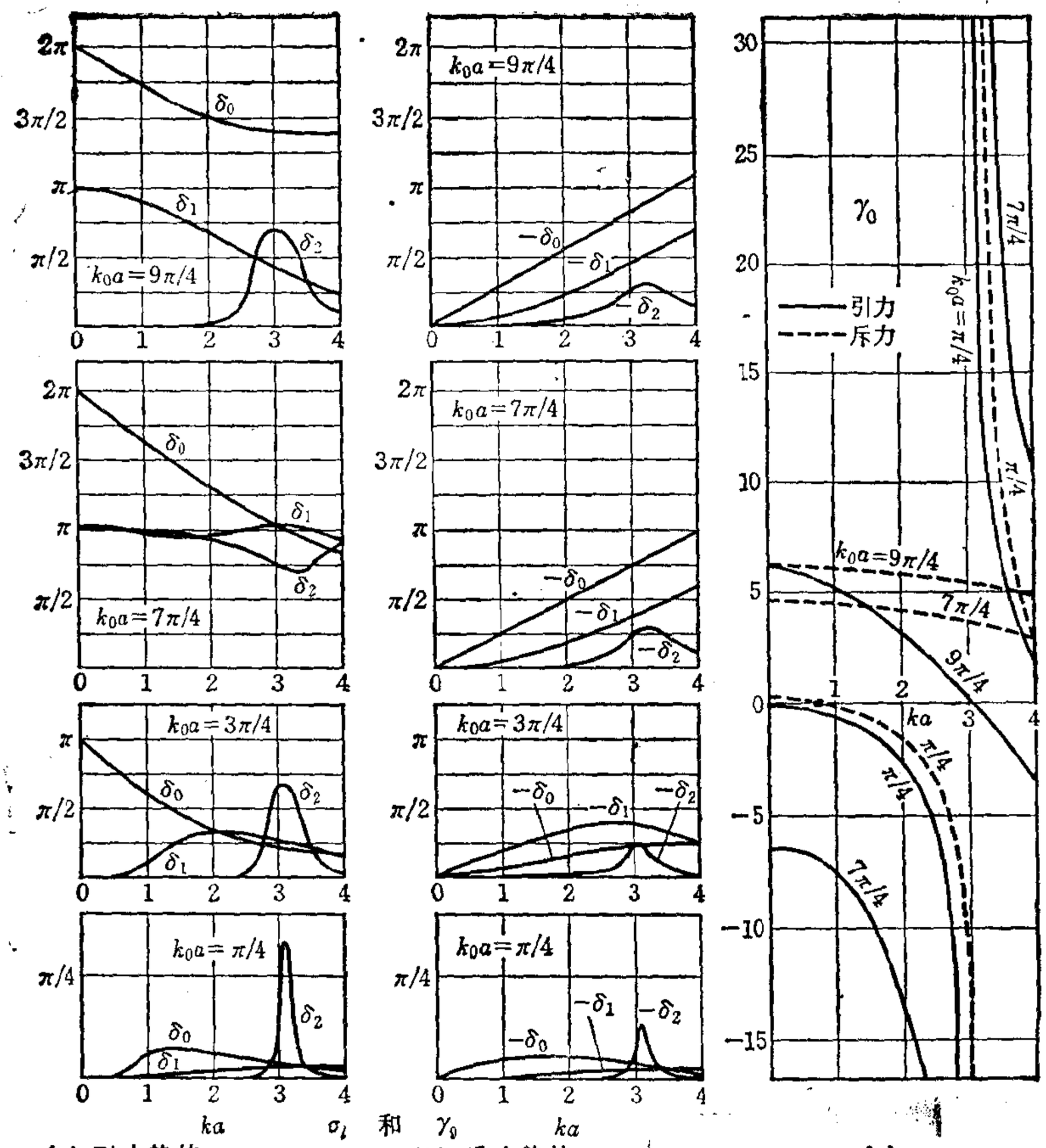
被积函数的方括号中第一项的贡献是

$$\frac{1}{i\rho} \int_1^{i\infty} \left(\frac{d}{ds} e^{i\rho s}\right)(1 + s)^l ds$$

$$= \frac{1}{i\rho} [e^{i\rho s}(1 + s)^l]^{i\infty} - \frac{1}{i\rho} \int_1^{i\infty} e^{i\rho s}(1 + s)^{l-1} ds,$$

当 $\rho \to \infty$ 时,右边第一项是主要部分,第二项是它的 $1/\rho$ 倍.回到(5.4.41)式,请读者自行证实,方括号中第二项以后的贡献较小,从而可得渐近式

$$h_l^{(1)}(\rho) \underset{\rho \to \infty}{\sim} \frac{1}{\rho} e^{i[\rho - \frac{1}{2}(l+1)\pi]}. \tag{5.4.42}$$




(a) 引力势的 $\sigma_l$ $(V_0<0)$　　(b) 斥力势的 $\sigma_l$ $(V_0>0)$　　(c) $\gamma_0$

图 5.24　由球对称势阱所产生的相移 $\delta_l$ 和 $l=0$ 时的对数微商 $\gamma_0$. 按照 $|V_0|\equiv\hbar^2k_0^2/2\mu$, 势的大小是用 $k_0$ 表示的. 当 $k_0\to0$ 时, $\delta_l\to n\pi$ $(n=0,1,2,\cdots)$, 这并不局限于势阱而是普遍成立的, 称为列文松 (Levinson) 定理. 不过, 当势具有零点能束缚态时, $\delta_l\to\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$

取其复共轭, 便得到 $h_l^{(2)}(\rho)$ 的渐近式.

于是, 考虑到 (5.4.39) 式之后, (5.4.36) 的渐近式就是

$$R_l(r)\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{1}{2ikr}\left[-i^le^{-i(kr+\delta_l)}+i^{-l}e^{i(kr+\delta_l)}\right]. \qquad (5.4.43)$$

即

$$R_l(r) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi + \delta_l\right),$$

正是前面在(5.4.10)式中所预料到的形式。把它与从(5.4.30)和(5.4.42)式所得到的

$$j_l(kr) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi\right) \tag{5.4.44}$$

比较，便可以更好地理解 $\delta_l$ 之所以叫相移的原因. 若没有散射势，即 $V = 0$，则（自由粒子的！）径向函数在空间处处都应当是 $j_l(kr)$。

### e) 散射截面

在散射实验中，让粒子从远处射向靶，并在远处观测被散射后飞出的粒子。在量子力学中粒子是用波包来表示的。但是，正如按制备方案所能想象的那样，波包的大小是宏观的。而德布罗意波长却是微观的，因此，该波包不妨用无限扩展的平面波来代替

$$\psi_{\text{入射}}(r) = e^{ik\cdot r}。 \tag{5.4.45}$$

$\hbar k$ 是入射粒子的动量，能量为 $E = \hbar^2k^2/2\mu$。

该平面波也可以用角动量一定的球面波的叠加来表示，取 $k$ 的方向为极轴，则有

$$\psi_{\text{入射}}(r) = e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta)。 \tag{5.4.46}$$

如此就把波函数分解成角动量一定的组分了。这种做法叫做**部分波分解**。这样，可以与上一小节以前所做的分析很好地联系起来. 为了证明这个表达式，可以把它看成是用勒让德函数做的展开，再计算展开系数

$$c_l(r) = \frac{2l+1}{2}\int_0^{\pi} e^{ikr\cos\theta}P_l(\cos\theta)d(\cos\theta)。$$

其中的 $P_l$ 用(5.2.20)式代，再令 $kr = \rho$，$\cos\theta = s$，则

$$c_l(\rho)=\frac{2l+1}{2}\frac{(-1)^l}{2^l l!}\int_{-1}^{1}e^{i\rho s}\frac{d^l}{ds^l}(1-s^2)^l ds.$$

通过分部积分把被积函数中的微商挪到指数函数上，一直到可以应用(5.4.28)式为止。于是，便得到 $c_l(r)=(2l+1)i^l j_l(kr)$. 从而(5.4.46)式得证。

根据(5.4 44)式，在远处可以把入射波(5.4.46)写成

$$\psi_{入射}(r)\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[-i^{2l}e^{-ikr}+e^{ikr}]P_l(\cos\theta). \tag{5.4.47}$$

虽然名义上仍叫入射波，但是，它不仅包含进来的波 $e^{-ikr}$，还包含出去的波 $e^{ikr}$。因为平面波要充满整个空间，所以，这是必然的。不过，从远处朝着散射中心运动的，自然是进来的波那一部分，这个已知部分并不受散射波的影响，把它的正确表示(5.4.43)与所谓球面波部分(5.4.3)叠加起来，就是散射实验条件下的波函数

$$\psi(r)=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}a_{lm}R_l(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}. \tag{5.4.48}$$

换句话说，进入(仪器)的波不仅有入射波，还应有出去的波，这就是散射态的边界条件

$$\psi(r)\underset{r\to\infty}{\sim}e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}, \tag{5.4.49}$$

其中，$f(\theta)$ 称为**散射概率幅**。

通过与(5.4.43)式以及(5.4 47)式中进来波部分比较，上述展开系数 $a_{lm}$ 为

$$a_{lm}=(2l+1)i^l e^{i\delta_l}\delta_{m,0}.$$

$\delta_{m,0}$ 表明，其中只含角动量 $z$ 分量为零的部分波。这个事实是显然的，因为入射粒子沿着 $z$ 轴前进，在 $z$ 方向上不会有角动量。把这个系数 $a_{lm}$ 和(5.4.43)代入，就会得到(5.4.48)式的渐进式

$$\psi(r)\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[-i^{2l}e^{-ikr}+e^{2i\delta_l}e^{ikr}]P_l(\cos\vartheta).$$

为了构成(5.4.49)那种形式，可以在上式的方括号中加上 $e^{ikr}-e^{ikr}=0$，于是可得

$$\psi(\boldsymbol{r}) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{ikz}+\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)\,e^{ikr}P_l(\cos\theta).$$

这样，散射概率幅就确实只与$\theta$有关与$\varphi$无关，由下式给出：

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}(2l+1)\,(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta)\quad(5.4.50)$$

如果任何部分波都没有相移(自由粒子！)，则当然有 $f(\theta)=0$.

(5.4.49)式中第一项为入射平面波，基本上就是原来的入射波束。入射波束集中在$z$轴附近，其它区域没有，自然不会飞入置于离开$z$轴一定距离处的散射粒子检测器中，因此，计算被测量的散射粒子流$J_r$时，应该只取(5.4.49)式中的第二项，以散射势为中心，在半径为$r$的球面上，单位时间内注入立体角$d\Omega$的概率为

$$J_r^2r^2d\Omega=\frac{\hbar k}{2\mu}|f(\theta)|^2d\Omega.$$

另一方面，根据(5.4.49)式中的第一项，垂直于$z$轴平面内单位面积入射粒子概率该是

$$J_z=\hbar k/2\mu.$$

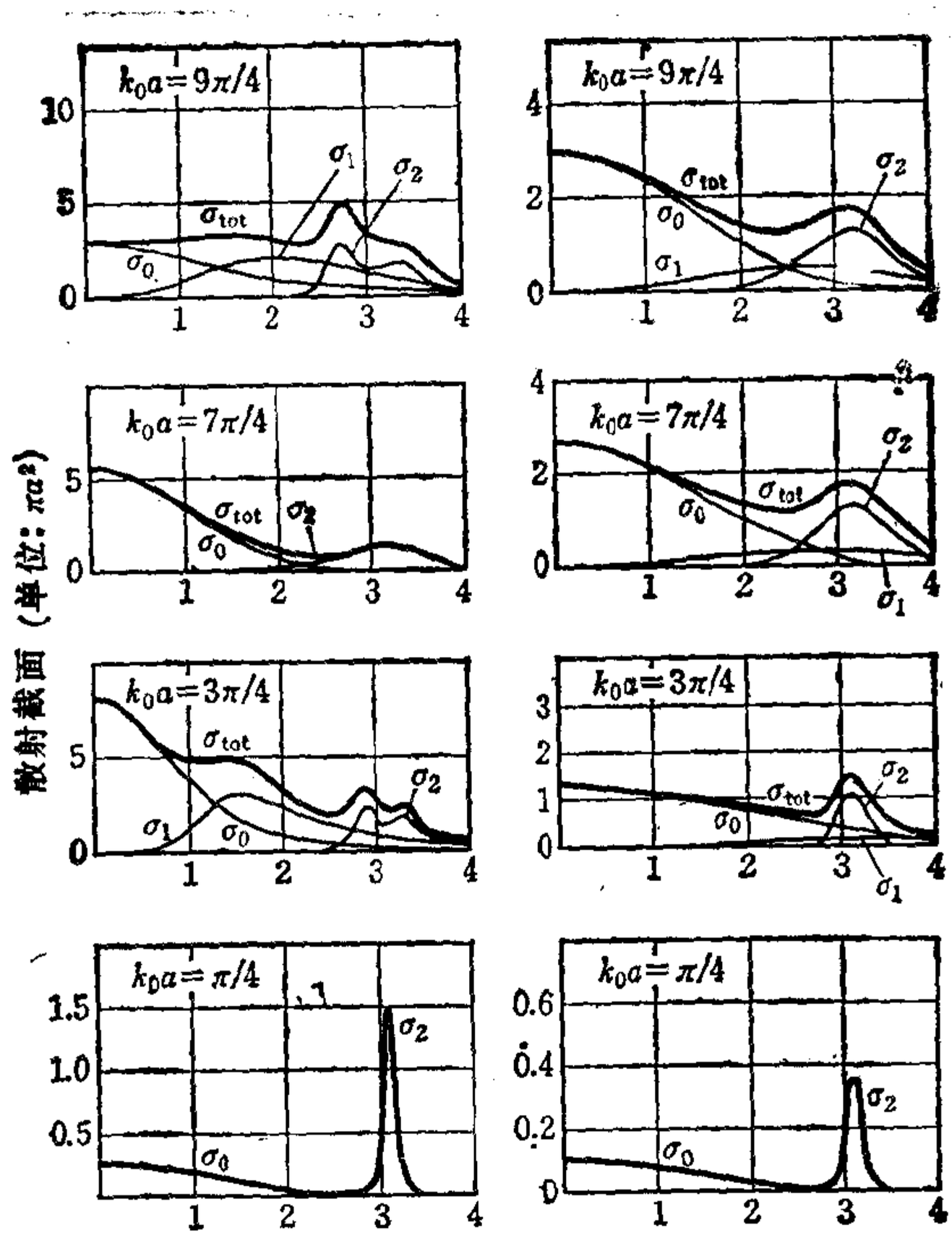
为了表示发生散射的难易程度，可以说，概率$J_r r^2d\Omega$是入射流中命中某个面积的那一部分。把该面积$d\sigma=J_r r^2d\Omega/J_z$在单位立体角内的值写成

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}=\frac{J_r r^2}{J_z}=|f(\theta)|^2,\qquad(5.4.51)$$

称之为微分散射截面。

在实际实验中，设单位时间内在垂直于$z$轴的单位面积中入射$I$个粒子，那么，对散射势中心所张立体角为$d\Omega$的检测器中，单位时间内接收到的散射粒子是$I(d\sigma/d\Omega)\cdot d\Omega$个，即$I|f(\theta)|^2/d\Omega$个。

如果在全部立体角上均配置检测器，那么，单位时间内，它们共接收到的粒子数为




(a) 引力势情形 ($V_0>0$)　　(b) 斥力势情形 ($V_0<0$)

图 5.25　由势阱引起的总散射截面 $\sigma_{tot}$ 与 $k$ 的关系。根据 $|V_0|=\hbar^2k_0^2/2\mu$，势的大小用 $k_0$ 表示。$\sigma_l\equiv(4\pi/k^2)(2l+1)\sin^2\delta_l$ 是 $l$ 分波截面。其峰值是 $\delta_l$ 越过 $\frac{\pi}{2}$ $\left(\text{或 } \frac{\pi}{2}+n\pi,\ n \text{ 为整数}\right)$ 时的值，这叫 $l$ 分波共振。$l\neq0$ 时，$k_0\lesssim l$ 的低能 $\sigma_l$ 几乎是零

$$\sigma_{tot}=\int_\Omega\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}d\Omega=2\pi\int_0^\pi|f(\theta)|^2\sin\theta d\theta \qquad (5.4.52)$$

的 $I$ 倍。该 $\sigma_{tot}$ 称为总散射截面(参看图 5.25)。将(5.4.50)式代入，得

$$\sigma_{tot}=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \qquad (5.4.53)$$

我们试用经典力学来解释这个式子. 远处入射粒子的直线轨道(延长线)与散射中心的距离叫瞄准距离(或碰撞参数), 用 $b$ 表示. 由于这个 $b$ 与粒子动量 $\hbar k$ 之积就是角动量, 因此有 $(kb)^2=l(l+1)$. 这样,可以认为,穿过图 5.26 所示圆环的入射粒子具有角动量 $l$. 圆环的面积为 $2\pi b\Delta b=(\pi/k^2)(2l+1)$. 将其乘以 $4\sin^2\delta_l$, 就变成总截面 (5.4.53) 中的第 $l$ 项. 然后, 可以把 $0\leqslant\sin^2\delta_l\leqslant 1$ 解释为穿过圆环的粒子被散射的概率. 剩下的因子 4, 无非是所谓的量子效应.

为了了解散射截面与散射势几何大小之间的关系, 让我们来讨论**刚体球散射**. 所谓刚体球,用势来表示,就是

$$V(r)=\begin{cases}\infty & r<a\\ 0 & r>a,\end{cases}$$

因为波函数不可能渗入其中, 所以, 经向波函数的边界条件是 $R_l(a)=0$. 如果 $[dR_l/dr]_{r=a}=0$, 那么, 恒有 $R_l(r)=0$, 所以, $r=a$ 处的对数微商 $\gamma_l$ 必然为$\infty$. 这时,应用(5.4.40)式,有

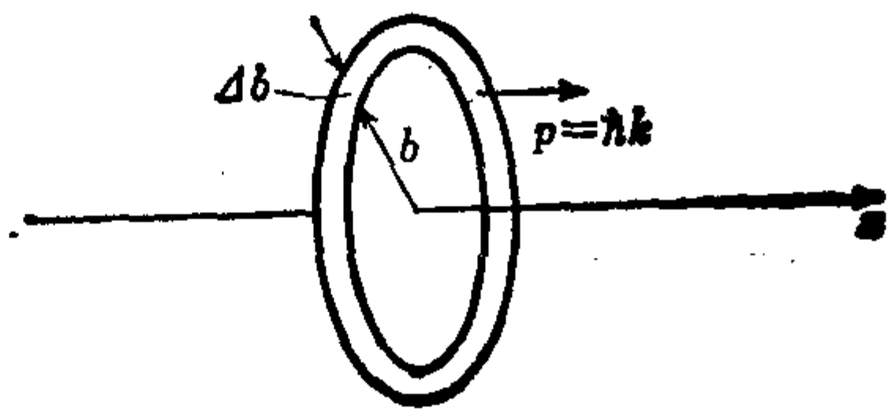



图 5.26 部分波散射截面的经典解释.碰撞参数 $b(l)$ 定义为 $\hbar kb(l)=\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$,角动量为 $l$ 的分波占据半径为 $b=b(l)$ 宽度为 $\Delta b=b(l+1)-b(l)$ 的圆环. 该圆环的面积乘以散射概率是否是 $l$ 分波的散射截面?

$$\tan\delta_l=j_l(ka)/n_l(ka).$$

于是,总散射截面 (5.4.53) 变为

$$\sigma_{tot}=2\pi a^2\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2(2l+1)}{x^2}\frac{j_l^2(x)}{j_l^2(x)+n_l^2(x)}\qquad (x=ka). \qquad (5.4.54)$$

右边级数截止在 $l=l_{max}$ 处的部分和 $\sigma_{tot}'$ 自然是 $l_{max}$ 的函数, 图 5.27 中画出了对应于各个 $ka$ 值的这种函数关系. 正如图中所

见，即使 $l_{max}$ 超过 $ka$，$\sigma_{tot}$ 也几乎不再增加。故可以说，碰撞参数 $b = \sqrt{l(l+1)}/k$ 超过刚体球半径 $a$ 的分波不会被散射。

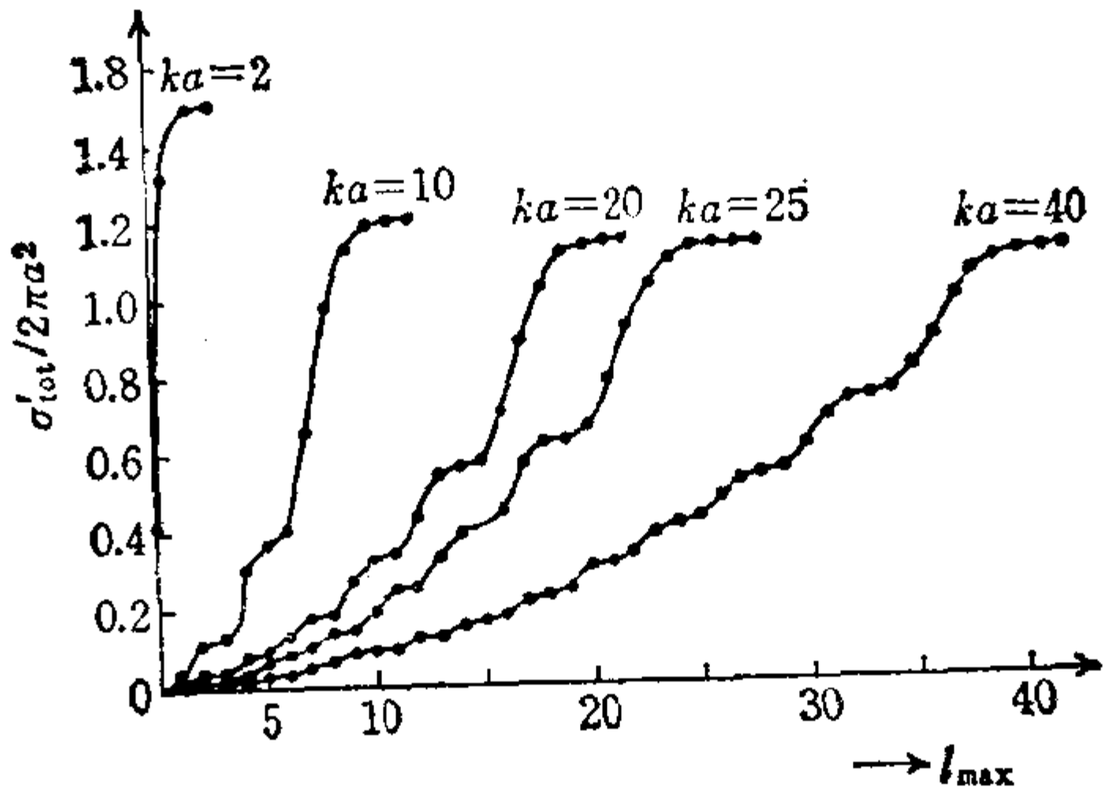



图 5.27　分波截面对总截面的贡献．以截止到 $l = l_{max}$ 的部分和 $\sigma_{tot}$ 与 $l_{max}$ 的函数关系来表示 (5.4.54) 式中的和．$\sigma'_{tot}$ 并不是光滑地增加，这在物理上应做何解释?

于是，把(5.4.54)式中的和截止到 $l = ka$，考虑到 $ka \gg 1$ 的高能散射，使用由(5.4.42)式得到的 $j_l(x)$ 和 $n_l(x)$ 的渐近式(5.4.44)，则有

$$\sigma_{tot} \simeq 2\pi a^2 \sum_{l=0}^{x} \frac{2(2l+1)}{x^2} \sin^2\left(x - \frac{l}{2}\pi\right)$$

$$= 2\pi a^2 + O(x^{-1}) \quad (x \equiv ka \to \infty).$$

该结果大体与图 5.27 相符．不过，因为，即使当 $l \sim x$ 以及 $x$ 较大时，$j_l(x)$ 等函数的(5.4.44)之类的渐近式也不适用，所以，确实必须进行更为细致的计算。

在高能极限，总散射截面不是散射球的截面积 $\pi a^2$，而是它的二倍．这可以理解为，实际撞到球上的散射波，还要加上由于这个散射而在球后形成影子周围的波迂回进入量子的结果（影散射）。

在低能极限，由(5.4.31)和(5.4.32)两式可知，只有 $l = 0$ 的分波对总散射截面有贡献，这时有 $\sigma_{tot} = 4\pi a^2 (ka \to 0)$。

## §5.5 库仑场情形

电荷分别为 $Ze$ 和 $Z'e$ 的两个粒子相互间的距离为 $r$，它们所具有的势能 $V$ 是与 $r$ 成反比的库仑势

$$V = ZZ'e^2/r,$$

其中，$e = 4.8 \times 10^{-10}\text{esu} = 1.6 \times 10^{-19}\text{C}$ 是电子电量的绝对值. 这是在前面曾提到过的长程力的情形. 我们来详细研究一下，它在量子力学中会起什么样的作用. 两个粒子的相对坐标为 $(r,\theta,\varphi)$，把相对运动的定态波函数写成 (5.4.3) 那种形式，其径向函数的方程 (5.4.4) 变为[1)]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{ZZ'e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - E\right]R = 0. \tag{5.5.1}$$

例如，氢原子是由质子 ($Z' = 1$，质量 $M = 1.67 \times 10^{-24}\text{g}$) 和电子 ($Z = -1$，质量 $m = 9.1 \times 10^{-28}\text{g}$) 组成的体系，因此，对于它们的相对运动来说，这种形式的方程是成立的. $\mu$ 为折合质量 $mM/(m+M)$. 质子与质子散射时，在两个粒子尚未接近到核力起作用的低能 ($\lesssim 1\text{MeV}$) 区，也可以使用这个方程，不过，这时折合质量 $\mu = \frac{M}{2}$. 其中，有关全同粒子所遵从的统计规律，请参看 §5.7.

把自变量 $r$ 换成无量纲的 $\rho$[2)]

$$\rho \equiv \kappa r, \quad \kappa \equiv \left(\frac{8\mu E}{\hbar^2 e^{\pi i}}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad \lambda \equiv -ZZ'\frac{2\mu e^2}{\hbar^2\kappa}, \tag{5.5.2}$$

现在，暂时把 $\mu$ 取为电子质量 $m$，而 $Z = Z' = 1$. $\lambda$ 也是无量纲的，将其写成 $-ZZ'((me^4/2\hbar^2)\ (e^{\pi i}/E))^{\frac{1}{2}}$ 时，把

---

1) 质心运动分离步骤将在 §5.7 说明.

2) $\kappa = \kappa(E)$ 和 (5.4.27) 式中的 $\beta(E)$ 一样，是作为正实轴部切开的复 $E$ 平面上的函数来处理的.

$$\frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6\ (\mathrm{eV})$$

叫做 1 Ry（里德伯），是值得记住的原子系统的标准能量值。当 $E = -1\mathrm{Ry}$ 时，根据定义，$\kappa = \frac{2}{a_B}$。

其中

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.53 \times 10^{-8}(\mathrm{cm})$$

正是玻尔半径。采用 $\hbar = e = m = 1$ 的**原子单位制**时，$a_B$ 就是长度的单位，而 2Ry 则是能量的单位。

应用 (5.5.2) 式，方程 (5.5.1) 变成

$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}\rho - \frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0.$$

库仑势在 $\rho = 0$ 处具有奇异性，它比离心力势的奇异性弱，按照 §5.4 的一般性讨论，在 $\rho \sim 0$ 时，$R \sim \rho^l$。这种形式好在对 $l = 0$ 也适用。而当 $\rho \to \infty$ 时，由上述微分方程，有 $R \sim e^{\pm\rho/2}$。于是，令

$$R \equiv \rho^l e^{-\rho/2} F, \tag{5.5.3}$$

则有

$$\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + (2l+2-\rho)\frac{d}{d\rho} - (l+1-\lambda)\right]F = 0. \tag{5.5.4}$$

众所周知，这是合流超几何方程，在 $\rho = 0$ 处，正则解为库默尔 (Kummer) 合流超几何函数

$$F = F(l+1-\lambda, 2l+2; \rho). \tag{5.5.5}$$

这个函数定义为复子平面上处处绝对收敛的级数

$$F(\alpha, \gamma; z) \equiv 1 + \frac{\alpha}{1!\gamma}z + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!\gamma(\gamma+1)}z^2 + \cdots, \tag{5.5.6}$$

为了研究其性质，它的积分表达式

$$F(\alpha, \gamma; z) = A\int_C t^{\alpha-1}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}e^{zt}\,dt\ , \tag{5.5.7}$$

$$A \equiv \Gamma(\gamma)/(1-e^{-2\pi i\alpha})\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha) \qquad (5.5.8)$$

用起来，往往是很方便的。这儿所列举的，是 $\gamma$ 只限于取正整数时才成立的表达式，积分回路 C 是在复 $t$ 平面上围绕割线 [0,1] 逆时针旋转的闭曲线(图 5.28)。只要 $\alpha$ 和 $\gamma$ 不同时为整数，被积函数就是多值的，因此可以包括割线在内。而且，为了确定多值函数的分枝，在割线的下沿把 $t$ 和 $1-t$ 的辐角定为零。

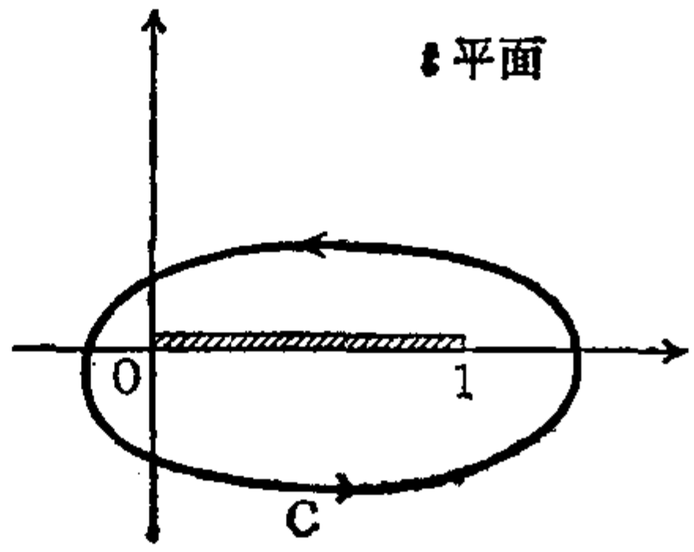


图 5.28 (5.5.7) 式的积分回路

通过逐项微商可知，级数 (5.5.6) 满足微分方程 (5.5.4)。为了确认积分表达式 (5.5.7) 与 (5.5.6) 式一致，可以将该被积函数中的 $e^{\nu t}$ 展开成幂级数，再逐项积分。这时会出现积分

$$\int_C t^{\alpha-1+\nu}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}\,dt$$
$$= (1-e^{-2\pi i\alpha})\int_0^1 t^{\alpha-1+\nu}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}\,dt\ .$$

先暂且假定 $\alpha+\nu>0$、$\gamma-\alpha>0$，就可以进行计算了。这个假定的理由是，积分回路 C 可以压缩成循割线 [0,1] 的上沿和下沿而行的一条道路（图 5.29)。右边的积分是 $\beta$ 函数，它等于

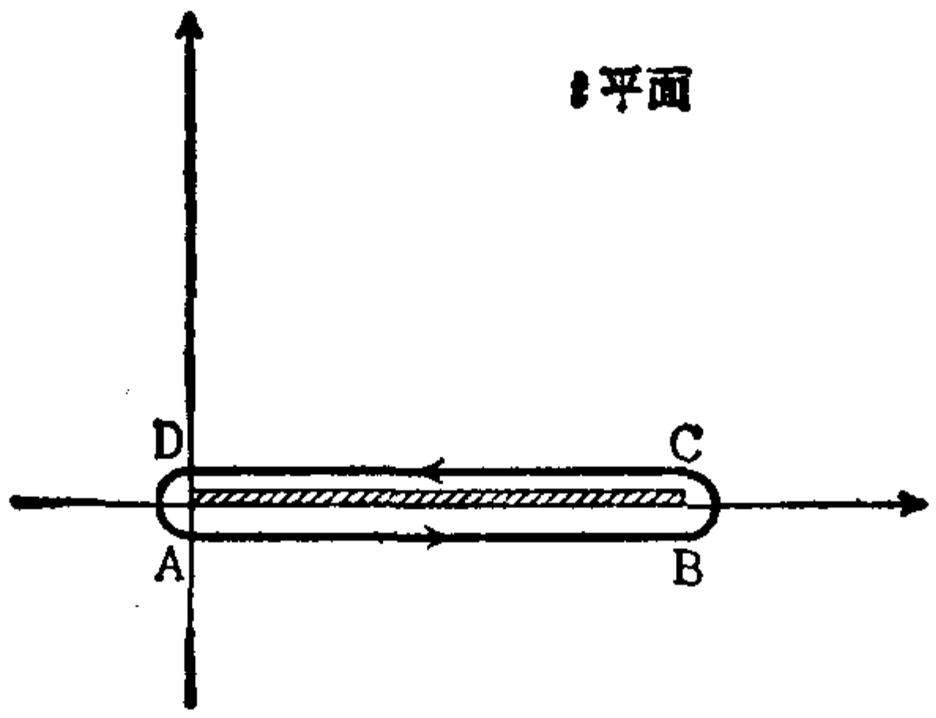


图 5.29 压缩了的积分回路。当 $t$ 矢量表示的箭头循积分回路绕过切割端 BC 时，被积函数的幅角由下表决定。当绕过 DA 时，亦同

$$B(\alpha+\nu,\gamma-\alpha)=\frac{\Gamma(\alpha+\nu)\,\Gamma(\gamma-\alpha)}{\Gamma(\gamma+\nu)}.$$

根据解析开拓原理，对于一般的复数 $\alpha,\nu,\gamma$，上述结果亦成立，从而由(5.5.7)式推导出了级数表达式(5.5.6)。

| | 在 AB 上（定义） | 在 CD 上 |
|---|---|---|
| $\arg t$ | 0 | 0 |
| $\arg(1-t)$ | 0 | $2\pi$ |
| $\arg[t^{\alpha-1+\nu}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}]$ | 0 | $-2\pi\alpha$ |

**a） 束缚态**

现在设 $ZZ'<0$。这时，库仑势是引力型的。因为当 $r\to\infty$ 时，该势为零。所以在束缚态时，$E<0$。事先说明这点的原因是要在正实轴切割的复平面上来分析 $E$，因而在(5.5.2)式中的 $\kappa>0$，$\lambda>0$。这时，在 $r\to\infty$ 处径向函数(5.5.3)有什么性质呢？根据这个性质应该决定能量本征值。

在(5.5.7)式中，当 $z=\kappa\ r\to\infty$ 时，对积分的贡献主要来自割线右端 $t=1$ 附近。用 $1-t=s/z$ 把积分变量换成 $s$，再令 $1+t$ 等于 2（参看图 5.30），就有

$$F(\alpha,\gamma;z)\underset{z\to\infty}{\sim}Ae^{z}z^{\alpha-\gamma}\int_{C'}s^{\gamma-\alpha-1}e^{-s}ds.$$

右边的积分恰是 $\Gamma(\gamma-\alpha)$，故得到

$$F(\alpha,\gamma;z)\underset{z\to\infty}{\sim}\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}z^{\alpha-\gamma}e^{z}. \tag{5.5.9}$$

尽管径向函数(5.5.3)中含有 $e^{-\rho/2}$，但是，当 $\rho\to\infty$ 时，$F$ 像(5.5.9)式那样随 $e^{\rho}$ 增加。因而不可能用来表示束缚态。为了能表示束缚态，必须要 $1/\Gamma(\alpha)=0$，即

$$\alpha\equiv l+1-\lambda=-n',\ (n'=0,1,2,\cdots). \tag{5.5.10}$$

这一点也是充分的，其原因是，这时级数(5.5.6)截止到有限项，从而成了 $n'$ 次多项式。这种特殊情况下的 $F$，为归一化而稍做改变

之后，叫做拉盖尔多项式：

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = -\frac{[(n+l)!]^2}{(2l+1)!(n-l-1)!} \times F(l+1-n, 2l+2; \rho)。 \quad (5.5.11)$$

其中，使用了与 $\lambda$ 相应的 $n = n' + l + 1$ 来代替 $n'$。根据(5.5.2)式，能量 $E$ 的值显然应限制为

$$E_n = -(ZZ')^2 \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (n = l+1, l+2, \cdots)。 \quad (5.5.12)$$

这就是能量本征值。称 $n$ 为主量子数，在(5.4.3)式中引入的状态标记是 $\nu$，对于现在的束缚态来说，可以选用主量子数 $n$ 来代替 $\nu$。用 $(n, l, m)$ 来标记状态时，完整可观测量组就是 $\{H_0, L^2, L_z\}$。

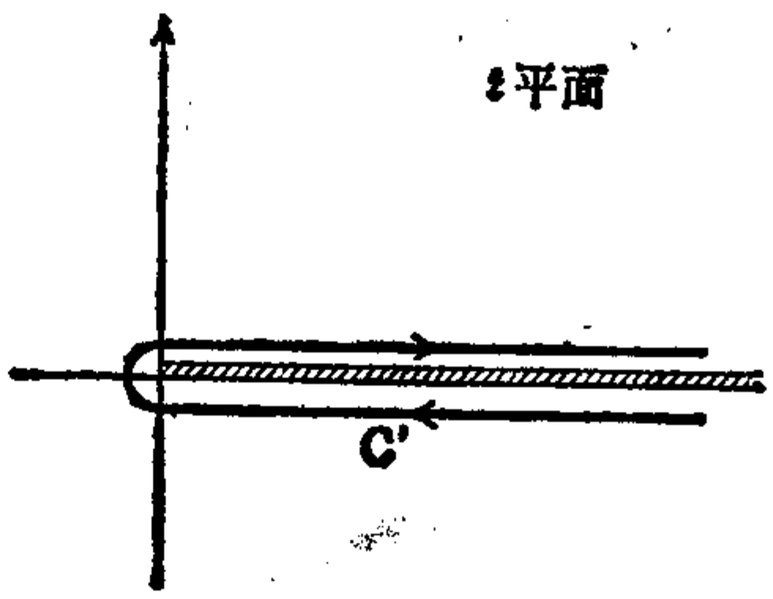


图 5.30

为了写出本征函数，我们来确定径向函数

$$R_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (\rho = \kappa' r)$$

中的归一化因子 $N_{nl}$。为此，可以从积分表示(5.5.7)中提出所谓拉盖尔多项式的母函数

$$(-s)^p e^{-\rho s/(1-s)} (1-s)^{-p-1} = \sum_{q=p}^{\infty} \frac{s^q}{q!} L_q^p(\rho)。 \quad (5.5.13)$$

首先注意到，若用 $\Gamma(\alpha)\sin\pi\alpha = \pi/\Gamma(1-\alpha)$ 改写(5.5.8)式，则在 $\alpha$ 为负整数时该式亦可使用，从而借助于由(5.5.7)到(5.5.11)的诸式，就会得到

$$\sum_{q=p}^{\infty} \frac{s^q}{q!} L_q^p(\rho) = \sum_{q=p}^{\infty} \frac{(-s)^q}{2\pi i} \int_C t^{p-q-1}(1-t)^q e^{\rho t}\, dt 。$$

因右边的被积函数构成公比为 $-s(1-t)/t$ 的等比级数，故 $|s|$ 取得充分小就会在保证一致收敛的基础上先来求和，于是积分就可以用简单的留数计算求出，从而得到(5.5.13)式。

为了计算径向函数 $R_{nl}$ 的归一化积分，先把母函数 (5.5.13) 两边平方，乘以适当因子而后积分，再将两边 $s$ 的幂相等的项进行比较。

设归一化本征函数为

$$u_{nlm}(r) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \qquad (5.5.14)$$

若取 $\rho = (2/na'_B)r$， $a'_B = (m/\mu|ZZ'|)a_B$ （该 $m$ 是电子质量），则

$$R_{nl}(r) = -\left\{\left(\frac{2}{na'_B}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{\frac{1}{2}} e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho).$$

下边，我们写出几个具体表达式（参看图 5.31）

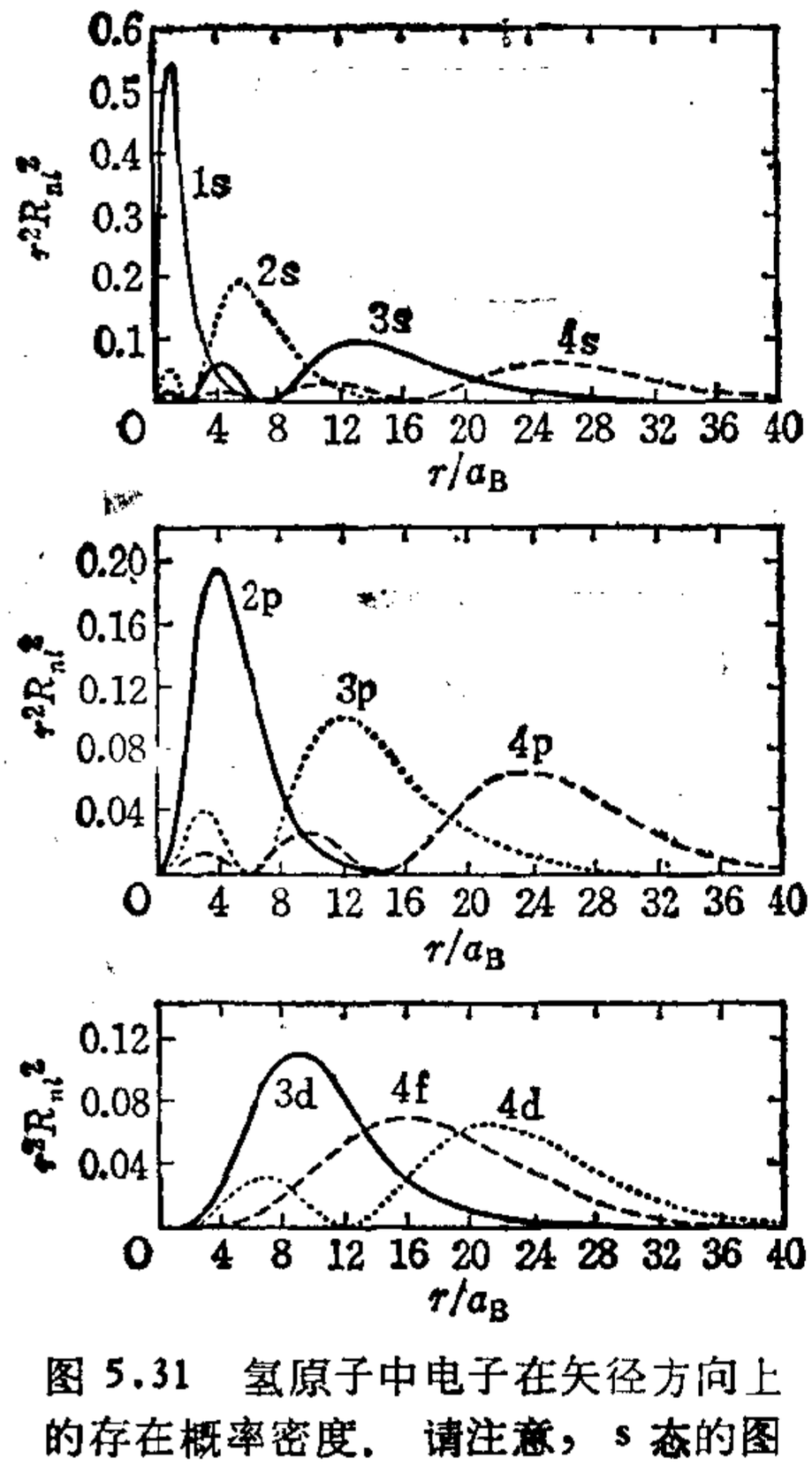



图 5.31 氢原子中电子在矢径方向上的存在概率密度. 请注意，s 态的图在纵轴方向上压缩了 2/5

$\rho = \dfrac{2}{a'_B} r$：

$$R_{10} = \left(\frac{1}{a'_B}\right)^{3/2} 2e^{-\rho/2},$$

$\rho = \dfrac{1}{a'_B} r$：

$$R_{20} = \left(\frac{1}{2a'_B}\right)^{3/2} (2-\rho)e^{-\rho/2},$$

$$R_{21} = \left(\frac{1}{a'_B}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{2\sqrt{6}} \rho e^{-\rho/2}.$$

这样，被束缚于库仑场中的电子运动的本征态用 $n$、$l$、$m$ 三个量子数就可以确定. 对于给定的主量子数 $n$，角量子数 $l$ 可以取 $l = n-1, n-2, \cdots, 0$ 共 $n$ 个值；而对于每一个 $l$ 值，磁量子数 $m$ 可以取 $m = -l, -l+1, \cdots, l$ 共 $(2l+1)$ 个值.

由于势是球对称的，能量本征值自然与 $m$ 无关，目前情况下，能量关于 $l$ 也是简并的. 这是仅仅对库仑场才有的特殊情况. 其

深刻含义留到第八章再来说明。因此，能级 $E_n$ 的简并为

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2(\text{度}).$$

到了高能区，各能级的简并骤增，能级本身分布很密。这就是长程力所显示的一般特征。它们均在物理上有许多应用.例如，对于氢原子中的电子来说，如何计算统计力学中的所谓配分函数?电子在一系列能级(5.5.12)上的热分布又将如何?

从本征函数(5.5.14)出发，也能得到有关库仑场中量子力学运动的许多物理内容。这里，我们要指出，粒子到力心的距离 $r$ 在量子力学中有平均值，它与相应的经典椭圆轨道上的时间平均值相当好地符合。所谓"相应"，其含义是，按照玻尔-索末菲量子条件将经典力学轨道量子化，使之与量子数相同的量子力学本征态对应。用〈…〉表示平均，为了方便，用 $a'_B=a_B/|ZZ'|$ 做为 $r$ 的单位。

**表 5.5　$r^k$ 的期待值**

| | 量子力学期待值 | 经典力学时间平均值 |
|---|---|---|
| $\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle$ | $\frac{1}{n^2}$ | $\frac{1}{n^2}$ |
| $\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle$ | $\left[n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)\right]^{-1}$ | $(n^3l)^{-1}$ |
| $\langle r\rangle$ | $\frac{1}{2}[3n^2-l(l+1)]$ | $\frac{1}{2}(3n^2-l^2)$ |
| $\langle r^2\rangle$ | $\frac{1}{2}n^2[5n^2+1-3l(l+1)]$ | $\frac{1}{2}n^2(5n^2-3l^2)$ |

在表中，关于 $\frac{1}{r}$ 的平均值，量子力学的与经典力学的完全一致，其原因是，在两种情况下维里定理均成立，故而这个结果并非出人意料。请注意，只要在经典力学的结果中把 $l$ 换成 $l+\frac{1}{2}$，其它期待值便会与相应的量子力学结果相当好地一致。这就是所

谓 WKB 近似中众所周知的朗格方法. 另外，关于经典力学的椭圆轨道，其各个参数可以通过量子数表示如下：

$$\text{长半轴}/a'_B = n^2,\quad \text{短半轴}/a'_B = nl,\quad \text{离心率} = \sqrt{1-\frac{l^2}{n^2}}.$$

如上表所列， $r$ 的幂的平均值是相当好地一致的，由此看来，这样的经典轨道图像在量子力学中也具有某种意义. 这里有一个问题： $l$ 越小，经典轨道的离心率越高，而在量子力学中， $l$ 越小，位置概率分布却越“圆”. 这是怎么回事儿呢？上面 $r^k$ 的经典力学平均值取自 M. 玻恩的《原子力学》(土井不昙等译，岩波书店 1935). 量子力学期待值可以用 (5.5.12) 式计算.

### b) 散射态

现在 $Z$ 和 $Z'$ 可正可负.

$E>0$ 的定态表示散射. 这时，(5.5.2) 式中的 $\kappa$ 和 $\lambda$ 成了虚量，故代之以由

$$\kappa = -2ik,\quad \lambda = -in,\quad (-i = e^{-\pi i/2})$$

确定的 $k$ 和 $n$，把 $\rho = \kappa r$ 明显写成 $\rho = -2ikr$. 于是

$$k = \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} > 0,\quad n = \frac{ZZ'e^2}{\hbar v}. \tag{5.5.15}$$

这个 $k$ 是无限远处的波数，对应的粒子相对速度为 $v = \hbar k/\mu$. 径向函数由 (5.5.3) 和 (5.5.5) 两式给出

$$R = (-2ikr)^l e^{ikr} F(l+1+in, 2l+2; -2ikr). \tag{5.5.16}$$

目前面临的问题是，研究这个函数在 $r\to\infty$ 时的渐近式，再用各种 $l$ 分波叠加的方法构造具有 (5.4.49) 那样渐近式的波函数.

为了得到库默尔函数 $F$ 在 $z = 2kre^{-\pi i/2},\ r\to\infty$ 时的渐近式，可以把积分表达式 (5.5.7) 的积分回路 C 换成图 5.32 所示的 $C_1 + C_2$，从而索性分成 $C_1$ 和 $C_2$ 的贡献

$$F = \frac{1}{2}[G_1 + G_2]. \tag{5.5.17}$$

也就是说，令

$$\frac{1}{2}G_i(\alpha,\gamma;z)\equiv A\int_{C_i}t^{\alpha-1}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}e^{zt}\,dt\ .$$

我们先来看$G_1$. 若把积分变量换成 $s=e^{i\pi}zt$，则积分回路 $C_1$ 就变成图 33 所示的 $C_1'$，从而

$$\frac{1}{2}G_1(\alpha,\gamma;z)$$

$$=A(e^{i\pi}z)^{-\alpha}\int_{C_1'}s^{\alpha-1}$$

$$\times\left(1+\frac{s}{z}\right)^{\gamma-\alpha-1}e^{-s}ds.$$

可以像以前在图 5.29 中那样，在割线 [0，1] 的下沿把 $t$，$1-t$ 的幅角定为零。而在积分回路 $C_1'$ 上，$s$ 的幅角如图 5.33 所示。因此，$z=2kre^{-\pi i/2}$，$r\to\infty$时的渐近式为

$$\frac{1}{2}G_1(\alpha,\gamma;z)=\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}(e^{i\pi}z)^{-\alpha}\left[1+O\left(\frac{1}{z}\right)\right].$$

同样，若通过变量变换 $z(1-t)=s$ 使积分回路 $C_2$ 变成 $C_2'$，则有

$$\frac{1}{2}G_2(\alpha,\gamma;z)=\frac{T(\gamma)}{T(\alpha)}e^{z}z^{\alpha-\gamma}\left[1+O\left(\frac{1}{z}\right)\right].$$

显然，一般来说，当 $e^{\pi i/2}z$ 不等于负实数，而 $|z|\to\infty$ 时，这些渐近式是成立的。这也包括 (5.5.9) 式；其中之所以没有与 $G_1$ 相应的项，是因为，当 $z\to\infty$ 时，含有 $e^z$ 的 $G_2$ 要比 $G_1$ 大得多。

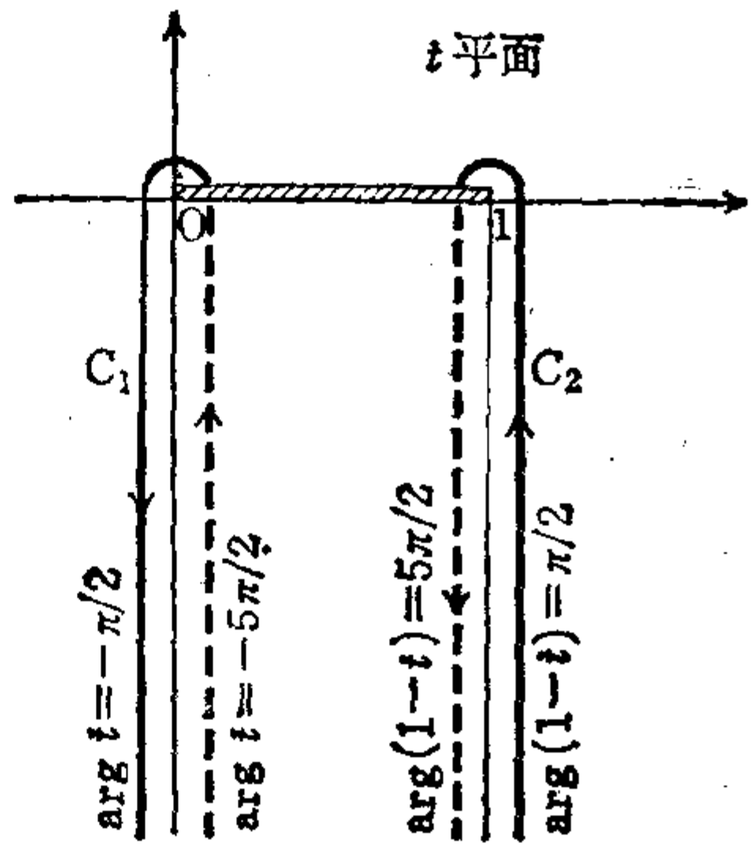



图 5.32 (5.5.16)式的积分回路.选择 $C_1$ 和 $C_2$，使得当 $\arg zt=-\pi/2$ 时，$e^{zt}$ 在远处消失，虚线是穿过割线而在第二黎曼面上无需考虑的那一部分

根据上述结果，径向函数 (5.5.17) 的渐近式为

$$R_l\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{1}{2ikr}\left[e^{i(l+1)\pi}e^{-i(kr-n\ln 2kr)}+\frac{\Gamma(l+1+in)}{\Gamma(l+1-in)}e^{i(kr-n\ln 2kr)}\right]. \qquad (5.5.18)$$

其中，舍掉了常系数 $A \equiv -e^{-il\pi/2}e^{\pi n/2}\Gamma(2l+2)/\Gamma(l+1+in)$，并给 $R$ 加上了下角标 $l$. 该 $R_l$ 的第一项表示进入波，第二项表示出去波，为了肯定这个结论，得解决指数函数上方出现的 $\ln 2kr$. 关于其意义，后面 c) 小节还要讨论。当 $r$ 增大时，$\ln kr$ 增加比 $kr$ 要慢得多. 当 $r\to\infty$时，相对 $kr$ 来说，$\ln kr$ 变成无限小，故可暂时忽略它. 这样，将 $R_l(r)P_l(\cos\theta)$ 进行叠加时，可以把进入波部分并到入射平面波当中，如 §5.4 e) 中说明的那样，问题就变成把出去波与这种入射平面波比较而求出散射波. 按照 (5.4.50) 式，散射概率幅为

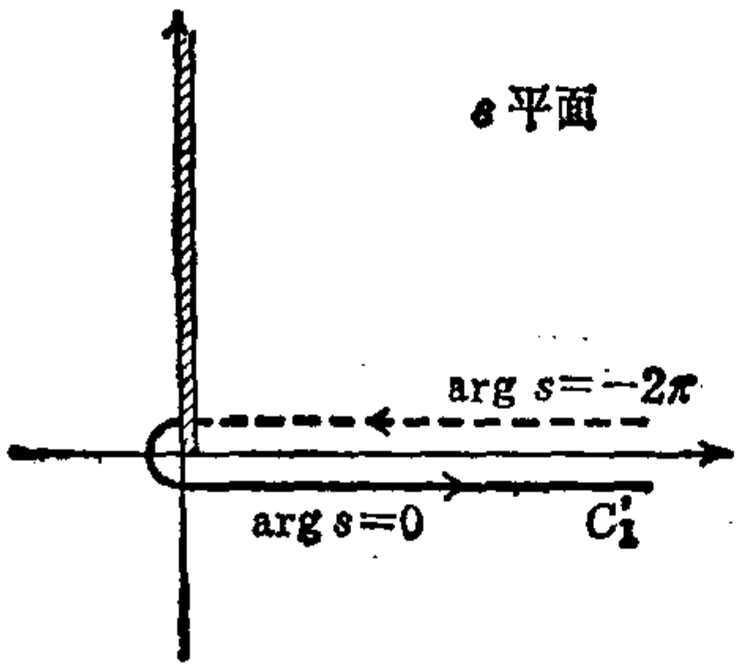


图 5.33 (5.5.17)式的积分回路

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\Gamma(l+1+in)}{\Gamma(l+1-in)}P_l(\cos\theta)$$
$$(\theta\neq 0). \qquad (5.5.19)$$

散射矩阵 $S_l$ 或相移 $\delta_l$ 是

$$S_l(\lambda)=e^{2i\delta_l(\lambda)}=\frac{\Gamma(l+1-\lambda)}{\Gamma(l+1+\lambda)}\qquad(\lambda\equiv -in). \qquad (5.5.20)$$

在散射概率幅 (5.5.19) 中本应是 $(e^{2i\delta_l}-1)$，现在省去了 $-1$，其原因是，按照 (5.5.28) 式，其贡献在 $\theta\neq 0$ 处消失。当 $\theta=0$ 时，(5.5.19) 式发散。

若就 $\lambda$ 进行解析开拓，则散射矩阵 (5.5.20) 在

$$\lambda=l+1+n'\quad(n'=0,1,2,\cdots) \qquad (5.5.21)$$

处有极值。这个条件式与确定束缚态能量的 (5.5.10) 式是等价的。按照 (5.5.2) 式中的

$$\lambda=-ZZ'\left(\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{e^{\pi i}}{E}\right)^{\frac{1}{2}},$$

如果与在正实轴部分切割的复 $E$ 平面相对应，则 $\arg(e^{\pi i}/E)^{\frac{1}{2}}$ 在

$-\frac{\pi}{2}$ 和 $\frac{\pi}{2}$ 之间变化，因此，在 $ZZ'<0$ 的情况下，而且也只有

在这种情况下，$\lambda$ 才是正实数．这是引力型库仑势的情况．而由(5.5.21)式确定的 $S_l$ 的极值位置，确实与束缚态的能量值(5.5.12)一致．

由(5.5.18)式也不难理解，散射矩阵 $S_l$ 在束缚态能量处有极值．当 $S_l$ 有极值时，(5.5.18)式中第一项相对而言略去不计，第二项成为束缚态波函数，根据 $-2ik=\kappa>0$，它在远处有 $e^{-\kappa r/2}$ 一样的性质．

那么，(5.5.19) 式给出什么样的散射角分布呢？为了找到它，假定的负实数部分不大，利用 $\beta$ 函数的积分表示得到

$$\frac{\Gamma(l+1+in)}{\Gamma(l+1-in)}=\frac{1}{\Gamma(-2in)}\int_0^1 s^{l+in}(1-s)^{-2in-1}ds.$$

再利用勒让德函数的母函数 (5.2.29)，则有

$$2ikf(\theta)=\frac{1}{\Gamma(-2in)}\int_0^1(1-s^2)(s^2-2s\cos\theta+1)^{-3/2}\times s^{in}(1-s)^{-2in-1}\alpha s. \tag{5.5.22}$$

确实，为了使积分与求和的次序可以交换，应该先把 (5.5.19) 式的第 $l$ 项乘以 $\eta^l$（适当取 $|\eta|<1$），得到 $f_\eta(\theta)$，而当全部计算结束之后，再取 $\eta\to 1$ 的极限．

通过 $s=e^{i\phi}$，$\sin\frac{\varphi}{2}/\sin\frac{\theta}{2}=y$，$1-y^2=1/x$ 这样一系列变量变换，(5.5.22) 式变成

$$2ikf(\theta)=\frac{\left(2\sin\frac{\theta}{2}\right)^{-(2in+2)}}{\Gamma(-2in)}\int_0^1 x^{in}(1-x)^{-in-1/2}dx.$$

其右边的积分是 $\beta$ 函数

$$B\left(1+in,\ \frac{1}{2}-in\right)$$

$$=\Gamma(1+in)\Gamma\left(\frac{1}{2}-in\right)\Big/\Gamma\left(\frac{3}{2}\right),$$

故得到 ($\theta \neq 0$)

$$f(\theta) = -\frac{ZZ'e^2}{2\mu v^2}\sin^{-2}\frac{\theta}{2}\exp\left[-2in\ln\sin\frac{\theta}{2}\right]$$

$$\times \Gamma(1+in)/\Gamma(1-in). \tag{5.5.23}$$

微分散射截面(5.4.51)成为著名的卢瑟福公式

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \left(\frac{ZZ'e^2}{2\mu v^2}\right)^2 \sin^{-4}\frac{\theta}{2}.$$

### c) 波在远处的畸变

在(5.5.18)式中已经看到，库仑场中径向波函数 $R_l(r)$ 在 $r\to\infty$处与自由波也不一样.把入射波混入平面波，再与(5.4.46)式做适当叠加,有

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{-n\pi/2}\frac{\Gamma(l+1+jn)}{\Gamma(2l+2)}(2ikr)^l e^{ikr}$$

$$\times F(l+1+in, 2l+2, -2ikr)P_l(\cos\theta), \tag{5.5.24}$$

不用说,将等同于波在远处具有畸变. 计算方法留待后面说明,若把远处的渐近式像 $\psi_{r\to\infty}\psi_{入射}+\psi_{散射}$ 那样分成入射波和散射波来写,取入射粒子的前进方向为 $z$ 轴,就有

$$\psi_{入射} = \exp\{i[kz + n\ln k(r-z)]\}\left[1+\frac{n^2}{ik(r-z)}\right] \tag{5.5.25}$$

和

$$\psi_{散射} = f(\theta)r^{-1}\exp\{i[kr - n\ln 2kr]\}. \tag{5.5.26}$$

入射波的波阵面是

$$kz + n\ln k(r-z) = 常数, \tag{5.5.27}$$

它在远处也不会变成平面，这一点可以像下面那样以半经典的方式来理解(图 5.34). 一粒子的总能量为 $E$，碰撞参数为 $b$，它从极远处 $z = z_\infty \ll 0$ 出发. 在 $r = \sqrt{z^2+b^2}$ 仍充分大的情况下,它到达某一 $z<0$ 时所具有的动量可以取为

$$p = \sqrt{2\mu\left(E - \frac{ZZ'e^2}{r}\right)} \cong p_\infty\left(1 - \frac{a}{r}\right).$$

其中 $p_\infty \equiv \sqrt{2\mu E}$， $a \equiv ZZ'e^2/2E$. 因为粒子的运动仍是直线的，所以从 $z_\infty$ 出发以来，德布罗意波的相位变化是

$$\Phi(z) = \int_{z_\infty}^{z} \frac{p\,dz}{2\pi\hbar} \simeq \frac{p_\infty}{2\pi\hbar}\int_{z_\infty}^{z}\left(1 - \frac{a}{\sqrt{z^2 + b^2}}\right)dz$$

$$= \frac{p_\infty}{2\pi\hbar}\left[z - z_\infty - a\ln\frac{2|z_\infty|}{\sqrt{z^2 + b^2} - z}\right],$$

其中，在最后一步时，与 $|z_\infty|$ 相比已忽略了 $b$. 由此式所确定的波阵面 $\Phi(z) =$ 常数确实与 (5.5.27) 式一致.

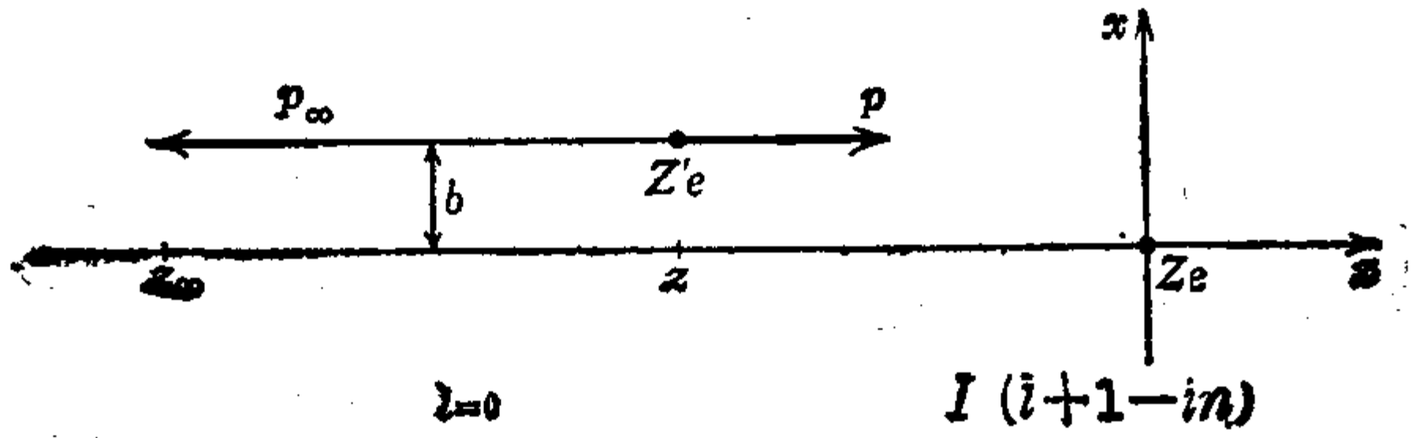



图 5.34 库仑场中波阵面畸变的半经典解释

对于散射波，当然可以做同样的讨论. 为了正规地按照经典力学的方式来讨论，可以使用哈密顿-雅可比方程. 请参看伏见康治所著《经典力学——现代物理学入门》(岩波书店 1969).

由以上讨论可以推断，一般来说，在 $r \to \infty$ 时只是像 $V(r) = O(1/r^\alpha)$ $(0 < \alpha \leqslant 1)$ 那样减小的势场中，在远处常留有畸变的波. 以前在 §5.4b) 中曾讨论过这个问题. 在这种长程力势的情况下，把相移与散射矩阵联系起来写成 (5.5.20) 式那样. 其含义与在短程力情况下由 §5.4d)，所定义的内容稍有不同.

推导波函数渐近式 (5.5.25) 和 (5.5.26) 的大意如下. 把积分表示 (5.5.7) 用于 (5.5.24) 式中的 $F$， 将其中积分变量换成 $\xi \equiv 1 - 2t$ (图 5.35)，则有

$$\psi = -\frac{1}{2}\cdot\frac{e^{-n\pi/2}}{1 - e^{2n\pi}}\int_C\left(\frac{1-\xi}{1+\xi}\right)^{in} e^{ikr\xi}\phi_n$$

$$\times \left[\frac{ikr}{2}(1-\xi^2)\right] d\xi. \qquad (5.5.28)$$

其中

$$\phi_n(x) \equiv \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \frac{x^l}{\Gamma(l+1-in)},$$

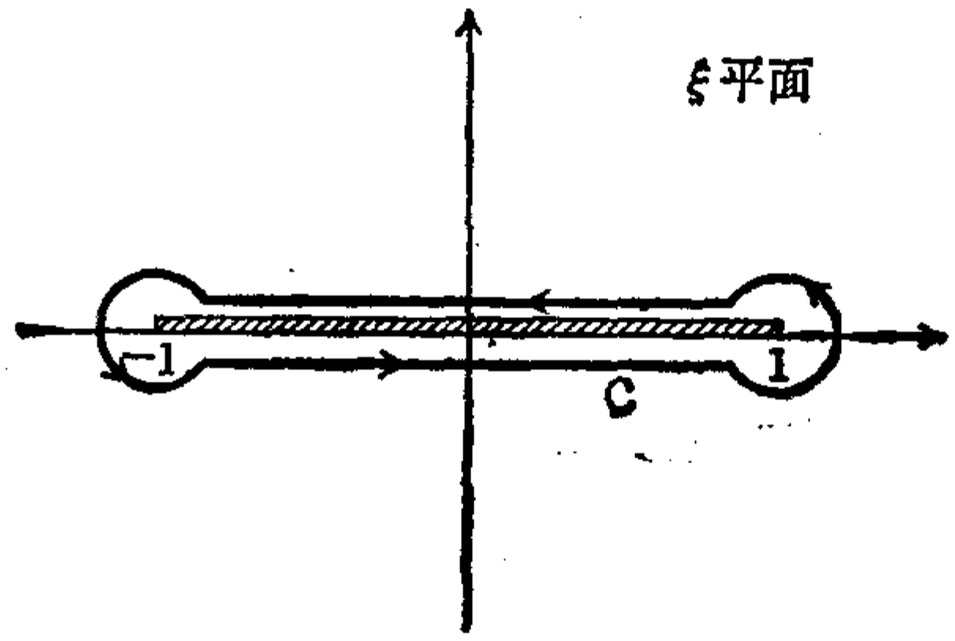



图 5.35 (5.5.28) 式的积分回路

而 $\Gamma$ 函数的汉克尔积分表示是

$$\frac{x^l}{\Gamma(l+1-in)} = \frac{1}{2\pi i}\int_D (x\zeta)^{in}\zeta^{-(l+1)}e^{x\zeta}d\zeta,$$

若选择其积分回路，使得在其上有 $|\zeta|>1$，则利用勒让德函数的母函数 (5.2.29) 就可以写出(参看图 5.36)

$$\phi_n(x) = -\frac{1}{2\pi i}\int_D \frac{1-\zeta^2}{(\zeta^2-2\zeta\cos\theta+1)^{3/2}}(x\zeta)^{in}e^{x\zeta}d\zeta. \qquad (5.5.29)$$

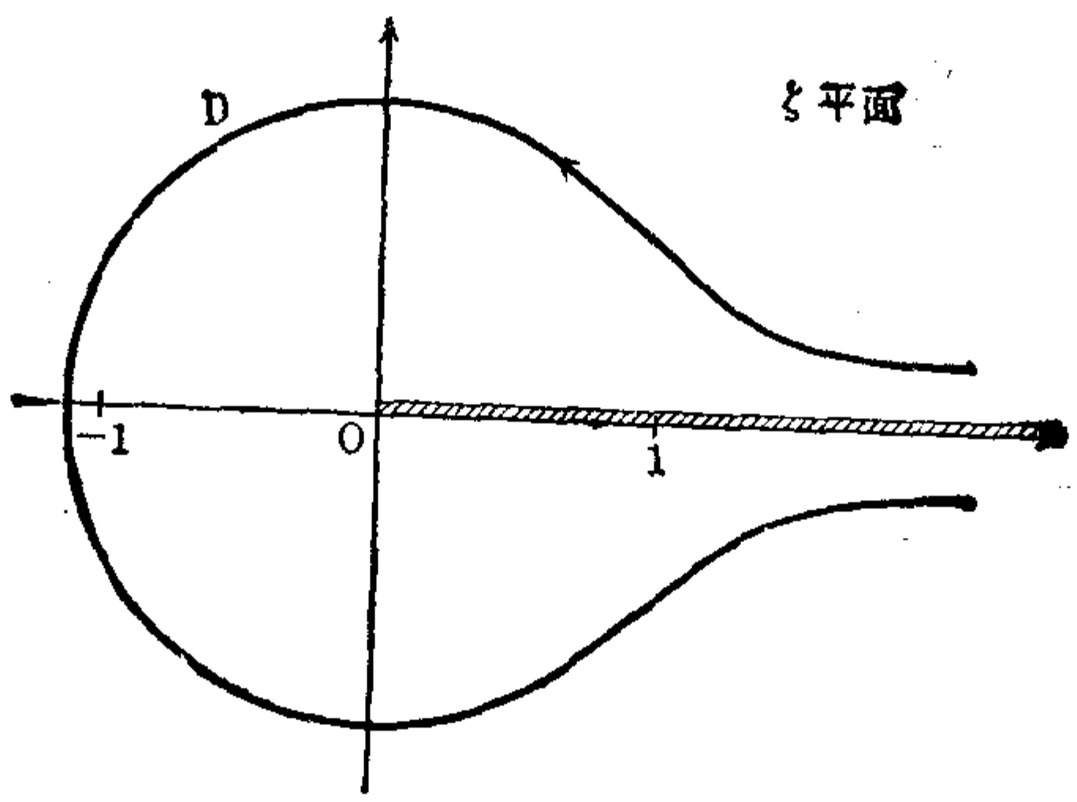



图 5.36 (5.5.29)式的积分回路. Re$x$<0 情形

请注意，如果这里 $n=0$，则有

$$\psi_{n=0}=\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\frac{1}{l!}\int_{-1}^{1}e^{ikr\xi}\times\left[\frac{ikr}{2}(1-\xi^2)\right]^l d\xi,$$

根据 (5.4.28) 和 (5.4.46) 两式，可以看出

$$\psi_{n=0}=\exp(ikr\cos\theta). \tag{5.5.30}$$

首先，在 (5.5.28) 式的积分回路中，考虑

$$x\equiv\frac{ikr}{2}(1-\xi^2) \tag{5.5.31}$$

的虚部为正的那一部分 $C_I$. 这在图 5.35 中相当于割线 $[-1,1]$ 的上沿和下沿. 当 $\xi$ 积分限于 $C_I$ 时，把 $\psi$ 记为 $\psi_I$.

对于有正虚部的 $x$，我们将用鞍点法计算 $kr\to\infty$ 时(5.5.29)式中的 $\zeta$ 积分，鞍点位置由

$$\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[x\zeta+in\ln x\zeta+\ln(1-\zeta^2)-\frac{3}{2}\ln(\zeta-e^{-i\theta})(\zeta-e^{i\theta})\right]=0$$

确定，其数不止一个，但因被积函数包含因子 $e^{x\zeta}$，而且 $\mathrm{Im}x>0$，故对积分贡献大的是 $\mathrm{Im}\zeta$ 最小的那个鞍点. 实际上可以取它为 $\zeta=e^{-i\theta}$. 因此，把 $\zeta=e^{-i\theta}$ 代入 (5.5.29) 式中与 $n$ 有关的部分，可以有

$$\phi_n(x)\sim(xe^{-i\theta})^{in}\phi_0(x).$$

如果完成鞍点法，则可得到下述形式的结果：

$$\phi_n(x)\sim S(x)\exp[xe^{-i\theta}].$$

其中 $S$ 为 $x$ 的某函数，它不含指数函数.

将以上结果代入 (5.5.28) 式，并把积分限制在图 5.35 中割线 $[-1,1]$ 的上沿，就可以得到

$$\psi_{I上}\sim\frac{1}{2}\frac{e^{-n\pi/2}}{1-e^{2n\pi}}\int_{-1}^{1}\left(\frac{1-\xi}{1+\xi}xe^{-i\theta}\right)^{in}e^{ikr\xi}\phi_0(x)d\xi.$$

其中 $x$ 仍由 (5.5.31) 式定义. 加上割线下沿的贡献，上式中的 $(1-e^{2\pi n})^{-1}$ 就会消掉，或者说

$$\psi_{\mathrm{I}} \sim \frac{1}{2} e^{-n\pi/2} \int_{-1}^{1} \left(\frac{1-\xi}{1+\xi}\right)^{in} S(x) \times \exp\left\{ikr\left[\xi + \frac{1}{2}(1-\xi^2)e^{-i\theta}\right]\right\} d\xi.$$

在第二种形式中，对 $\xi$ 积分再应用鞍点法. 当 $kr \to \infty$ 时，鞍点的位置实质上由

$$\frac{\partial}{\partial \xi}\left[\xi + \frac{1}{2}(1-\xi^2)e^{-i\theta}\right] = 0$$

来确定，从而 $\xi = e^{i\theta}$. 因此，回到第一种形式，在与 $n$ 有关的项中令 $\xi = e^{i\theta}$，会得到

$$\psi_{\mathrm{I}} \sim \left(2kr\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{in} \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} e^{ikr\xi} \phi_0\left(\frac{ikr}{2}(1-\xi^2)\right) d\xi.$$

这样，由 (5.5.30) 式，有

$$\psi_{\mathrm{I}} \sim \exp\{i[kz + n\ln k(r-z)]\}.$$

它与 (5.5.25) 式中主要部分是一致的. 要得到 (5.5.25) 式中第二项，尚需进行更为详细的计算.

下一步是计算图 5.35 的积分回路中包围 $\xi = \pm 1$ 的圆周对 (5.5.28) 式的贡献 $\psi_{\mathrm{II}}$，如果先完成 $\xi$ 积分，再对 $l$ 求和，就能利用前面 b) 小节的结果，其说明容不赘述. 结果自然与 (5.5.26) 式一致.

## § 5.6 磁场中的运动[1)]

质量为 $\mu$ 电荷为 $e$ 的粒子运动于以矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ 和标势 $\Phi(\boldsymbol{r}, t)$ 描述的电磁场之中，其哈密顿量是

$$H = \frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\Phi. \tag{5.6.1}$$

1) 本节内容多受朝永振一郎先生的启发.

实际上，若要建立海森伯运动方程 (4.5.1)，用点表示对时间的微商，采用在 (5.1.12) 式处已确定的关于角标的约定，则会得到

$$\left.\begin{aligned}\dot{x}_\alpha &= \frac{1}{\mu}\left(p_\alpha - \frac{e}{c}A_\alpha\right)\\ \dot{p}_\alpha &= \frac{e}{2c}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\dot{x}_\beta B_\gamma + B_\gamma \dot{x}_\beta)\\ &\quad + \frac{e}{2c}\left(\dot{x}_\beta\frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta}\dot{x}_\beta\right) - e\frac{\partial \Phi}{\partial x_\alpha}\end{aligned}\right\}. \tag{5.6.2}$$

其中 $\boldsymbol{B} = \mathrm{curl}\boldsymbol{A}$ 是磁场．因此，与牛顿运动方程相当的是

$$\mu\ddot{x}_\alpha = \frac{e}{2c}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\dot{x}_\beta B_\gamma + B_\gamma\dot{x}_\beta) - e\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{c}\frac{\partial A_\alpha}{\partial t}\right), \tag{5.6.3}$$

右边确实出现了洛伦兹力和源于电场 $\boldsymbol{E} = -\mathrm{grad}\Phi - c^{-1}\partial\boldsymbol{A}/\partial t$ 的力，$\partial A_\alpha/\partial t$ 是按照 (3.3.8) 式计算 $\dot{A}_\alpha$ 时 $(i\hbar)^{-1}[A_\alpha, H]$ 的那一部分与上面 $\dot{p}_\alpha$ 的右边第二项抵消后所剩余的项。

### a) 均匀磁场和轴对称电场

这一节讨论的是磁场中的运动，但在开始时，也加上电场，考虑

$$\boldsymbol{A} = \left(-\frac{B}{2}y, \frac{B}{2}x, 0\right), \Phi = \frac{\mu\varepsilon^2}{2e}(x^2 + y^2). \tag{5.6.4}$$

这时有一个沿着 $z$ 轴方向的均匀静磁场，再加上一个轴对称的静电场，其方向平行于 $xy$ 平面并且在任何点上都指向 $z$ 轴，其强度与到 $z$ 轴的距离成正比。哈密顿量 (5.6.1) 变成

$$H = \frac{1}{2\mu}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{\mu\omega^2}{2}(x^2 + y^2) - \frac{\omega_c}{2}(xp_y - yp_x), \tag{5.6.5}$$

其中

$$\omega = \sqrt{(\omega_c/2)^2 + \varepsilon^2}.$$

在 §5.2 也曾遇到过回旋频率 $\omega_c = eB/\mu c$。(5.6.5) 式中已略去

了 $(2\mu)^{-1}p_z^2$. 因为 $z$ 轴方向的运动是独立的. 以后将一直假定 $eB>0$. 当 $eB<0$ 时,只要改变坐标轴方向就可以了. (5.6.5) 式中最后一项表明,电荷为 $e$ 的粒子在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中具有与轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 成正比的能量 $-(e/2\mu c)\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}$. 对于电子来说, $e\hbar/2\mu c = 5.8\times10^{-4}(\mathrm{eV/T})$.

把 (5.6.5) 式的变量换成

$$\left.\begin{aligned} P_1 &= (2\mu\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}(p_x+\mu\omega y),\ P_2 = (2\mu\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}(p_x-\mu\omega y)\\ Q_1 &= -(2\mu\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}(p_y-\mu\omega x),\ Q_2 = (2\mu\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}(p_y+\mu\omega x)\end{aligned}\right\},\tag{5.6.6}$$

则有

$$\left.\begin{aligned}[P_k, Q_l] &= -i\delta_{kl}\\ [P_k, P_l] &= [Q_k, Q_l] = 0\end{aligned}\right\}(k, l=1, 2).$$

反过来解 (5.6.6), 得到

$$\left.\begin{aligned} p_x &= (\mu\hbar\omega/2)^{\frac{1}{2}}(P_1+P_2)\\ p_y &= -(\mu\hbar\omega/2)^{\frac{1}{2}}(Q_1-Q_2)\\ x &= (\hbar/2\mu\omega)^{\frac{1}{2}}(Q_1+Q_2)\\ y &= (\hbar/2\mu\omega)^{\frac{1}{2}}(P_1-P_2)\end{aligned}\right\}.\tag{5.6.7}$$

通过这个变换,哈密顿量 (5.6.5) 可以分解成

$$H=\sum_{k=1}^{2}\frac{\hbar\omega_k}{2}(P_k^2+Q_k^2)\tag{5.6.8}$$

这样具有 $k=1$、2 两个正则模谐振子的哈密顿量,其中

$$\left.\begin{matrix}\omega_1\\ \omega_2\end{matrix}\right\}=\sqrt{\left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2+\varepsilon^2}\pm\frac{\omega_c}{2}.\tag{5.6.9}$$

计算出角动量,为

$$L_z=\frac{\hbar}{2}[(P_2^2+Q_2^2)-(P_1^2+Q_1^2)].\tag{5.6.10}$$

哈密顿量 (5.6.8) 所代表的运动的性质,不难由下列海森伯绘景看出:

$$Q_k(t)=e^{iHt/\hbar}Q_ke^{-iHt/\hbar}\ \text{等}.$$

显然

$$Q_k(t) = Q_k \cos\omega_k t + P_k \sin\omega_k t,$$
$$P_k(t) = -Q_k \sin\omega_k t + P_k \cos\omega_k t.$$

所以，按照 (5.6.7) 式，有

$$\begin{bmatrix} x(t) \\ y(t) \end{bmatrix} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} \begin{bmatrix} \cos\omega_1 t \sin\omega_1 t \\ -\sin\omega_1 t \cos\omega_1 t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1 \\ P_1 \end{bmatrix} + \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} \begin{bmatrix} \sin\omega_2 t \cos\omega_2 t \\ -\cos\omega_2 t \sin\omega_2 t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_2 \\ Q_2 \end{bmatrix}. \tag{5.6.11}$$

如果要描绘该式的经典图像，那么，由于模 1 给出顺时针旋转的圆周运动，而模 2 给出反时针旋转的圆周运动，所以，粒子的运动 $(x(t), y(t))$ 用旋转圆表示 (图 5.37)，各圆半径取决于各个模是由什么来激发的。

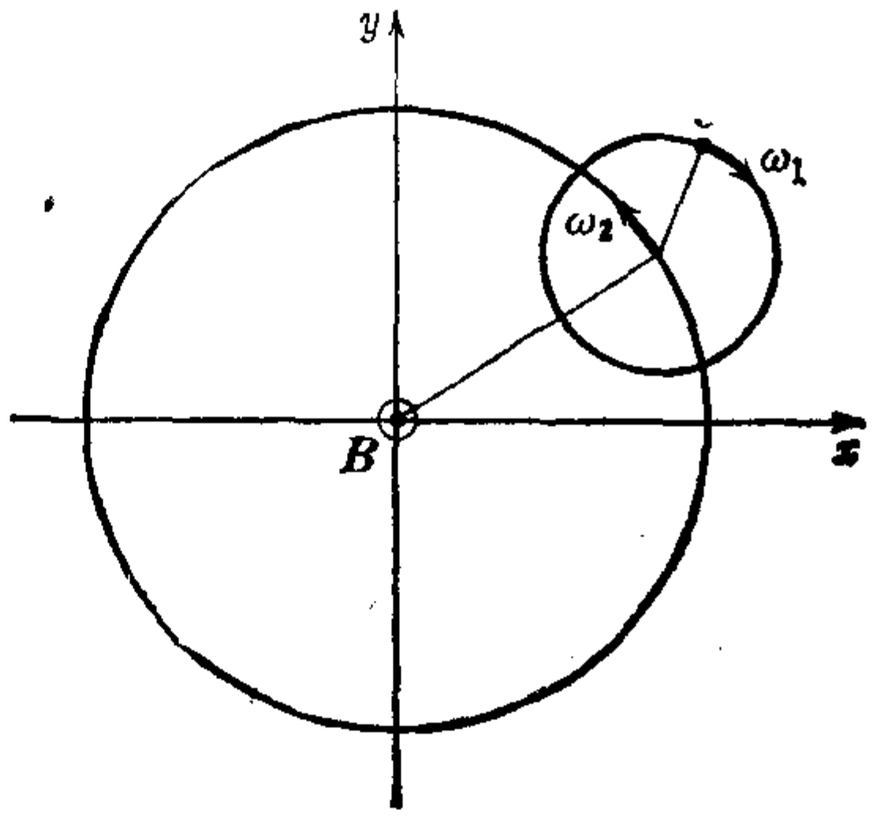



图 5.37　置于电磁势(5.6.4)之中的带电粒子的运动。粒子电荷为 $e$，$eB>0$

在量子力学中，每种模分别被激发 $n$ 个和 $m$ 个的状态 $|n,m\rangle$ 具有能量

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1 + \left(m + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2 \tag{5.6.12}$$

和角动量

$$\lambda_{n,m} = (m - n)\hbar, \tag{5.6.13}$$

采用左右矢记号，其波函数为

$$\langle Q_1, Q_2 | n, m\rangle = \cdot(\pi 2^{n+m} n!m!)^{-\frac{1}{2}} H_n(Q_1) H_m(Q_2) e^{-\frac{1}{2}(Q_1^2+Q_2^2)}. \tag{5.6.14}$$

其中 $H_n$ 是厄米多项式，$n, m = 0, 1, 2, \cdots$。

这种状态用原来的坐标变量表示，会是什么样呢？根据 (5.6.7)式，使 $Q_1$ 和 $Q_2$ 对角化的表象也就是使 $x$ 和 $p_y$ 对角化的表象。考虑了变换的雅可比行列式，有

$$\langle x, p_y | n, m\rangle = \hbar^{-1/2}\langle Q_1, Q_2 | n, m\rangle.$$

为了把动量表象换成坐标表象，可以使用变换函数 $\langle y|p_y\rangle=e^{ip_yy}/\sqrt{2\pi\hbar}$. 这是傅里叶变换

$$\langle r|n,m\rangle\equiv\langle x,y|n,m\rangle$$
$$=(2\pi)^{-1/2}\hbar^{-1}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{ip_yy}{\hbar}\right)\langle Q_1,Q_2|n,m\rangle dp_y.$$

右边的积分容易用厄米多项式的母函数来计算。现在，用平面极坐标 $r=(r,\varphi)$ 来代替直角坐标，有

$$\langle r|n,m\rangle=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\sum_{v=0}^{\min[n,m]}\frac{(-1)^v(n!m!)^{1/2}}{(n-v)!(m-v)!v!}$$
$$\times(\alpha r)^{n+m-2v}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2r^2}e^{i(m-n)\varphi},\qquad(5.6.15)$$

其中 $\alpha\equiv\sqrt{\mu\omega/\hbar}$. 因子 $e^{i(m-n)\varphi}$ 对应于角动量本征值(5.6.13). 另外，上式可用勒让德多项式写出来：

$$\langle r|n,m\rangle=(-1)^{n_>}\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{n_<!}{(n_>!)^3}\right]^{1/2}$$
$$\times(\alpha r)^{|m-n|}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2r^2}L_{n_<}^{|m-n|}(\alpha^2r^2)e^{i(m-n)\varphi}.$$

其中，$n_>$ 表示 $n$ 和 $m$ 之中大的一个，$n_<$ 表示小的一个。特别是，当 $n=0$ 时，它简化为

$$\langle r|0,m\rangle=\frac{\alpha}{\sqrt{m!\pi}}(\alpha r)^me^{-\frac{1}{2}\alpha^2r^2}e^{im\varphi}.\qquad(5.6.16)$$

若进而取 $m=0$，则会得到基态。

当然，求解原来的哈密顿量 (5.6.5) 的本征值问题，也可以直接得到 (5.6.15) 式。但是，那样做，又能在什么地方发现上述旋转圆的图呢？

基态波函数 $\langle x,y|0,0\rangle$ 给出粒子存在的概率密度是以原点为中心的高斯分布。其展宽是 $r$ 的方均根 $\alpha^{-1}=\sqrt{\hbar/\mu\omega}$. 由 (5.6.7) 式，可得

$$r^2=x^2+y^2=\frac{\hbar}{2\mu\omega}\left[\sum_{k=1}^{2}(P_k^2+Q_k^2)+2(Q_1Q_2-P_1P_2)\right],$$

(5.6.17)

就激发态而言，若利用 (5.6.14) 式计算 $\boldsymbol{r}^2$ 的期待值，则有

$$\langle n,m|\boldsymbol{r}^2|n,m\rangle = \frac{\hbar}{\mu\omega}(n+m+1), \qquad (5.6.18)$$

这是分别与 $\left(n+\frac{1}{2}\right)$ 及 $\left(m+\frac{1}{2}\right)$ 成正比的项之和，它们便反映了旋转圆规道。

**b) 只有磁场的情形，朗道能级简并**

在上一小节中令 $\varepsilon \to 0$，就可以知道均匀静磁场中带电粒子的运动。在此极限，由 (5.6.9) 式知，$\omega_2 = 0$，故 (5.6.11) 式中的旋转圆已不再旋转了。模 2 终止运动，它只是给出模 1 圆运动的静止中心，即使如此，因为 (5.6.18) 式仍然成立，所以这个中心的摆动依旧很大，不过，关于这点，我们将有所解释。

这时，由于 $\omega_2 = 0$，故能级 (5.6.12) 与 $m$ 无关，有无限简并

$$E_{n,m} \equiv E_n = (n+1)\hbar\omega_0 \quad (\omega_c \equiv eB/\mu_c), \qquad (5.6.19)$$

$(n, m = 0, 1, 2, \cdots)$，那么，适当地叠加简并态，能否制止圆周运动中心的摆动呢？这个问题留待下一小节考虑。

另外，已终止运动的模 2 对角动量 (5.6.13) 仍有贡献，这可是够奇怪的了。但是，由于磁场中正则动量不是 $\mu\dot{x}$，而是 (5.6.2) 式中的 $p_\alpha$，故亦并非不可思议的。

能级 (5.6.19) 被称为朗道能级。现在取 $\mu$ 为电子质量，$B = 10^4$(G)*，则回旋频率是 $\omega_c = 1.8 \times 10^{11}(s^{-1})$，朗道能级的间隔是 $\hbar\omega_c = 1.2 \times 10^{-4}$(eV)。

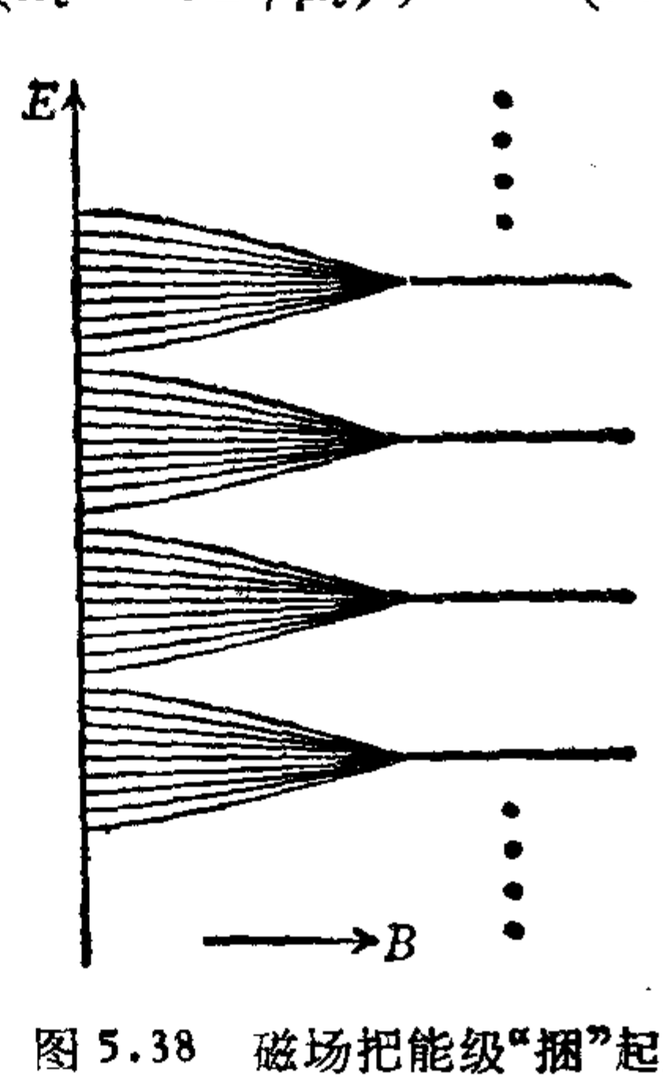



图 5.38 磁场把能级“捆”起来。若封闭带电粒子的箱子大小有限，则朗道能级是慢慢“捆”成的

* 1G = $10^{-4}$T. ——译者注

若把粒子封闭在“箱子”中，则朗道能级简并是有限的。设封闭在一个半径为 $R$ 的圆盘状“箱子”里，而且 $R$ 满足：$r^2$ 的均方 $(5.6.18) \leqslant R^2$，则能级 $E_n$ 的简并为

$$\nu(n) = (R/a_L)^2 - E_n/\hbar\omega_c + 1 \text{（重）}, \qquad (5.6.20)$$

其中

$$a_L = \sqrt{2\hbar/\mu\omega_c} = \sqrt{2c\hbar/eB}$$

叫做朗道半径，由于在 $B = 10^4$(G) 时，它才等于 $3.6 \times 10^{-6}$(cm)，是一个不大的值，因此，只要不涉及太小的 $R$，或过高的能级，一般都可以有

$$\nu(n) = (R/a_L)^2 = (\mu R^2/2\hbar^2) \cdot \hbar\omega_c.$$

最右边第一个因子是在半径为 $R$ 的箱子中运动的自由粒子的态密度，此式可以解释为，“无磁场时处于 $E_n$ 上下 $\hbar\omega_c/2$ 之间的自由粒子的能级在磁场作用下集中于朗道能级 $E_n$。”

### c) 轨道中心的局域化

尽管磁场在 $xy$ 平面上是处处相等的（平移不变！），而不可思议的却是，属于各朗道能级的本征函数 (5.6.15) 却都以坐标原点为中心，也就是容许原点有特殊地位。与 (5.6.15) 式的 $\langle \boldsymbol{r}|n,m\rangle$ 资格相同，把中心移到 $\boldsymbol{r}_0 = (x_0, y_0)$ 后的 $\langle \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0|n, m\rangle$，也应该是本征函数，难道不是吗？

不过，$\langle \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0|n, m\rangle$ 只是连同 (5.6.4) 式的矢势中心也一起平移的哈密顿量

$$H^{r_0} = \frac{1}{2\mu}\left\{\left[p_x + \frac{eB}{2c}(y - y_0)\right]^2 + \left[p_y - \frac{eB}{2c}(x - x_0)\right]^2\right\}$$

的本征函数，而不是原 $H = H^0$ 的本征函数。磁场虽平移不变，$H$ 却不是，这就令人感到奇怪了。

可是，让我们考虑

$$\Gamma_{r_0} \equiv e^{i\alpha^2(y_0x - x_0y)}, \ (\alpha^2 \equiv eB/2\hbar c > 0), \qquad (5.6.21)$$

由于有 $\Gamma^*_{r_0}=\Gamma^{-1}_{r_0}$，所以它是幺正算符，它会使动量变换

$$\Gamma^*_{r_0}p_x\Gamma_{r_0}=p_x+\hbar\alpha^2y_0,\quad \Gamma^*_{r_0}p_y\Gamma_{r_0}=p_y-\hbar\alpha^2x_0. \tag{5.6.22}$$

坐标不变。因此，有

$$\Gamma^*_{r_0}H^{r_0}\Gamma_{r_0}=H^0.$$

把 $H^{r_0}$ 的本征函数 $\langle r-r_0|n,m\rangle$ 简写成 $u^{r_0}_{n,m}$，有

$$H^0\Gamma^*_{r_0}u^{r_0}_{n,m}=\Gamma^*_{r_0}H^{r_0}u^{r_0}_{n,m}=E_n\Gamma^*_{r_0}u^{r_0}_{n,m},$$

故

$$\Gamma^{*2}_{r_0}u^{r_0}_{n,m}=e^{-i\alpha^2(y_0x-x_0y)}\langle r-r_0|n,m\rangle\equiv\langle r|n,m;r_0\rangle \tag{5.6.23}$$

是原哈密顿量 $H=H^0$ 的本征函数。这样一来，就得到了以 $(xy)$ 平面上任意一点 $r_0(x_0,y_0)$ 为中心的本征函数。当然，本小节开始所提到的坐标变换也不再是不可思议的了。

上面所得到的 $\langle r|n,m;r_0\rangle$ 是 $H$ 的属于同一本征值 $E_n$ 的本征函数，其中 $n=0,1,2,\cdots$，而任意的 $r_0\in R^2$（$R^2$ 是 $xy$ 平面上所有点的集合）。这（可数无限）×（连续无限）$^2$ 个函数并不全都独立。就属于能量本征值 $E_n$ 的本征空间 $H_n$ 而言，仅用 $r_0=0$ 及 $m=0,1,2,\cdots$ 的函数就可构成完备系。

限制 $m=0$，固定 $r_0$ 的大小 $r_0$ 和方向角 $\varphi_0$（至多转 $2\pi$），这样得到集合

$$V_{n,r_0}=\{\langle r|n,0;(r_0,\varphi_0)\rangle:\ 0\leqslant\varphi_0\leqslant2\pi\},$$

它在能量本征值 $E_n$ 的子空间 $H_n$ 中构成完备系。固定值 $r_0$ 可以任意地小。因此，其中所列的本征函数应该都给出小的 $r^2$ 的期待值。这正是源于上一小节的悬案。

首先，考虑 $n=0$ 的子空间。这时，(5.6.16) 式中 $m=0,1,2\cdots$ 的可数集合构成完备系。因此，根据 (5.6.16) 和 (5.6.22) 两式，可得到

$$\langle r|0,0;(r_0\varphi_0)\rangle=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2r_0^2}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2r^2}\exp[\alpha^2r_0re^{i(\varphi-\varphi_0)}].$$

取上式（$0\leqslant\varphi_0\leqslant2\pi$）的适当的线性组合可以再现 (5.6.16) 式，

这表明 $V_{0,r_0}$ 是完备的. 这样,容易得到

$$C_{m,r_0}^{-1}\int_0^{2\pi} d\varphi_0 e^{im\varphi_0}\langle \boldsymbol{r}|0,0;(r_0,\varphi_0)\rangle$$

$$=\frac{\alpha}{\sqrt{m!\pi}}(\alpha r)^m e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}e^{im\varphi}=\langle \boldsymbol{r}|0,m\rangle, \qquad (5.6.24)$$

其中 $C_{m,r_0}\equiv 2\pi(\alpha r_0)^m e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r_0^2}/\sqrt{m!}$. 从这个计算也能清楚看出, $r_0$ 可以任意地小.

一般来说,为了在 $n\geqslant 1$ 的子空间 $H_n$ 中证明 $V_{n,r_0}$ 的完备性,首先应该注意,当回到(5.6.14)式考虑时,(5.6.15)式中的 $\langle \boldsymbol{r}|n,m\rangle$ 是由与模 1 有关的产生算符

$$b^*=2^{-1/2}(Q_1-iP_1)$$

$$=(2\mu\hbar\omega_c)^{-1/2}[-i(p_x-ip_y+\hbar\alpha^2(x-iy)]$$

$n$ 次反复作用于 $\langle \boldsymbol{r}|0,m\rangle$ 而得到的. 同样,中心移到 $\boldsymbol{r}_0$ 的 $\langle \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|n,m\rangle$ 是由

$$b_{r_0}^*=(2\mu\hbar\omega_c)^{-1/2}[-i(p_x-ip_y)$$

$$+\hbar\alpha^2(x-iy)-\hbar\alpha^2(x_0-iy_0)]$$

反复作用于 $\langle \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|0,m\rangle$ 而得到的. 而根据(5.6.22)式以及前面的(5.1.8)式,有

$$b_{r_0}^*=\Gamma_{r_0}b^*\Gamma_{r_0}^*=\Gamma_{r_0}^*b^*\Gamma_{r_0}.$$

因此,还有

$$b^*\Gamma_{r_0}^*\Gamma_{r_0}^*=\Gamma_{r_0}^*\Gamma_{r_0}^*b^*. \qquad (5.6.25)$$

再根据(5.6.23)式,可以把(5.6.24)式写成

$$\langle \boldsymbol{r}|0,m\rangle=C_{m,r_0}^{-1}\int_0^{2\pi} d\varphi_0 e^{im\varphi_0}\Gamma_{r_0}^*\Gamma_{r_0}^*\langle \boldsymbol{r}|0,0\rangle,$$

两边乘以 $b^*$,当在右边乘时,注意到(5.6.25)式,则得到

$$b^*\langle \boldsymbol{r}|0,m\rangle=C_{m,r_0}^{-1}\int_0^{2\pi} d\varphi_0 e^{im\varphi_0}\Gamma_{r_0}^*\Gamma_{r_0}^*b^*\langle \boldsymbol{r}|0,0\rangle,$$

即

$$\langle \boldsymbol{r}|1,m\rangle=C_{m,r_0}^{-1}\int_0^{2\pi} d\varphi_0 e^{im\varphi_0}\langle \boldsymbol{r}|1,0;(r_0,\varphi_0)\rangle.$$

(5.6.26)

这样乘 $b^*n$ 次，便可以把有任意$m$的$\langle r|n,m\rangle$表示成 $V_{n,r_0}$ 元素的线性组合. 于是，就证明了 $V_{n,r_0}$ 在能量本征值 $E_n$ 的子空间 $H_n$ 中的完备性.

不言而喻，$V_{r_0}\equiv\{V_{n,r_0}:\ n=0,1,2,\cdots\}$ 构成整个希耳伯空间中的完备系（$r_0$ 可以任意小!）. 但是，该完备系并非正交系，故而，它实际上是超完备系.

可以这样来解释 $V_{r_0}$ 的各个元素，它表示带电粒子在磁场中描绘出圆周轨道的一种定态，这些轨道的中心在围绕坐标原点半径为 $r_0$ 的圆周C上. 圆周轨道中心在C上的位置$\varphi^0$和粒子的能量 $E_n$ 决定着每个元素. 确实，$r^2$ 对各元素的平均正是

$$|N|^{-2}\langle n,0;(r_0,\varphi_0)|r^2|n,0;(r_0,\varphi_0)\rangle=(n+1)a_L^2+r_0^2,$$

其中$N$为归一化因子. 可以看出，能量为 $E_n$ 的圆周轨道的半径是朗道半径 $a_L$ 的 $\sqrt{n+1}$ 倍. 为了计算这个平均值，可以利用(5.6.18)式，再用倒过来求解(5.6.26)那样式子所得到的

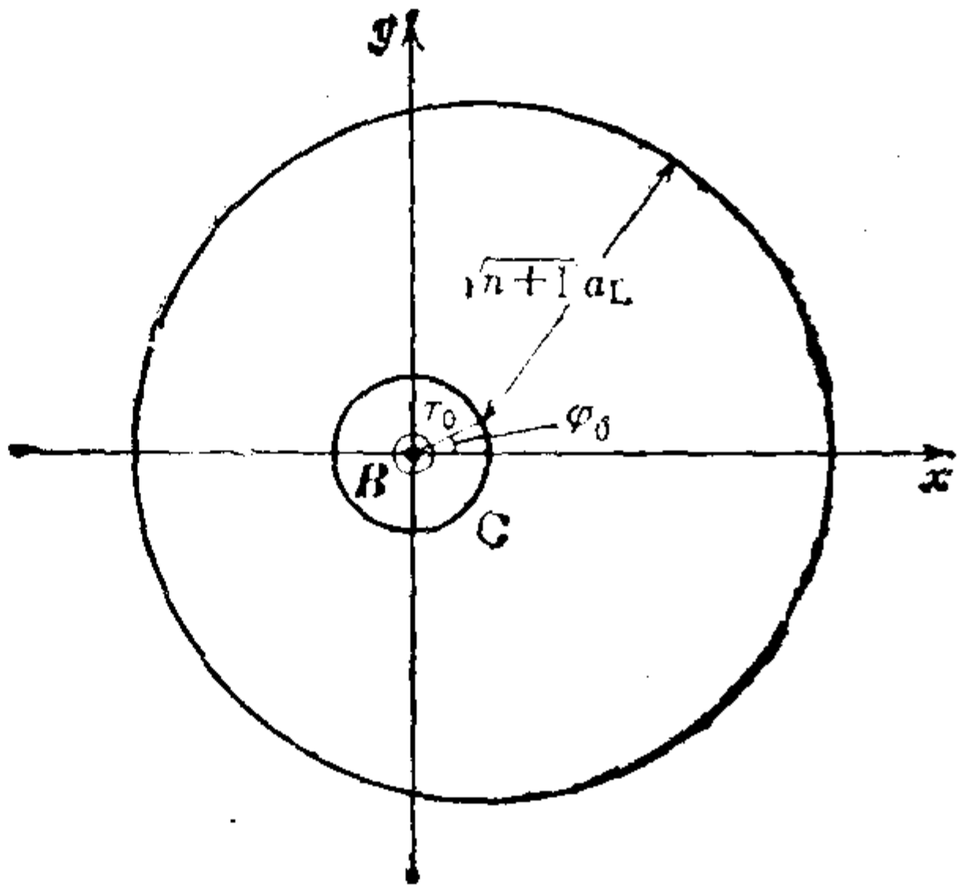



图 5.39　其中心在任意小的圆周C上的全部圆周轨道构成完备系

$$\langle r|n,0;(r_0,\varphi_0)\rangle=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(\alpha r_0)^m}{\sqrt{m!}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2r^2}e^{-im\varphi_0}\langle r|n,m\rangle. \tag{5.6.27}$$

### d)　规范变换

(5.6.21)式在前一小节起着重要的作用，它是称之为规范变换的一个例子.

在电动力学中，用任意函数 $\Lambda=\Lambda(r,t)$ 使势发生下述变化：

$$\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A}' \equiv \boldsymbol{A} + \mathrm{grad}\Lambda, \ \Phi \to \Phi' \equiv \Phi - c^{-1}\partial\Lambda/\partial t, \tag{5.6.28}$$

这种变换叫做规范变换. 由势给出的电场和磁场在这种变换下不变. (5.6.1) 那种形式的哈密顿量变为

$$H \to H' = \frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A} - \frac{e}{c}\mathrm{grad}\Lambda\right)^2 + e\left(\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right),$$

若取幺正变换

$$\Gamma_\Lambda = e^{i(e/\hbar c)\Lambda}, \tag{5.6.29}$$

则有

$$\Gamma_\Lambda^*\left(H' - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\Gamma_\Lambda = H - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}.$$

因此, 如果 $\psi(r, t)$ 满足与哈密顿量 $H$ 对应的薛定谔方程 $H\psi = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi$, 那么, $\psi' = \Gamma_\Lambda\psi$ 就满足与规范变换后的哈密顿量 $H'$ 对应的薛定谔方程.

在量子力学中, 电磁势的变换 (5.6.28) 与波函数的幺正变换 (5.6.28) 合在一起叫做**规范变换**. 上述结果可以归纳为, "薛定谔方程在规范变换下不变".

前一小节中所考虑的 (5.6.21) 式是

$$\Lambda = \frac{B}{2}(y_0 x - x_0 y)$$

的情形. 现在, 取任意实常数构成

$$\Lambda = \frac{\lambda B}{2}(x^2 + y^2),$$

对 (5.6.4) 式中的势进行规范变换, 即有

$$\boldsymbol{A}' = \left(\left(-\frac{1}{2} + \lambda\right)By, \left(\frac{1}{2} + \lambda\right)Bx, 0\right).$$

特别是当 $\lambda = \dfrac{1}{2}$ 时, $A'$ 的 $x$ 分量消失, 哈密顿量变成

$$H' = \frac{1}{2\mu} p_x^2 + \frac{1}{2\mu}\left(p_y - \frac{e}{c} Bx\right)^2,$$

$p_y$ 成了运动常数. 设它等于大 $k_y$, 则 $H'$ 的本征函数所取的形式为

$$\langle r | n, k_y \rangle = u_n(x) e^{ik_y y},$$

其中, $u_n$ 是下面本征值问题的解:

$$\left[\frac{1}{2\mu} p_x^2 + \frac{1}{2\mu}\left(\hbar k_y - \frac{e}{c} Bx\right)^2\right] u_n = E_n u_n.$$

由于它与力心偏移到 $x_0 = c\hbar k_y / eB$ 的谐振子问题形式相同, 因此不难求解. 请读者证明,这样定出的能级与在 b) 小节看到的有相同的简并.

## §5.7 多粒子体系

如果体系的粒子数增加到两个以上, 就需要引进种种新的概念, 以便对其进行量子力学处理. 当粒子数只有几个时与实际上当作 $\infty$ 时处理方法不同. 这一节我们来处理前者,而把后者放在第九章.

本节主要以氦原子为例. 最后还打算简单地提一下氢分子.

### a) 配位空间

若体系由 $N$ 个粒子组成, 则其波函数是诸粒子的空间坐标 $x_i = (x_i, y_i, z_i)$ 和自旋坐标 $m_{si} = \nu_i$ 的函数 $\psi(x_1, \nu_1, \cdots, x_N, \nu_N; t)$. 当只考虑定态时,代替 $\psi$ 而写 $u$.

虽说是波动, 却并非通常三维空间中的波. 当知道必然要用复波函数时, 就清楚, 量子力学与经典物理学的波动概念完全不同,可以认为, 这第二次分别更有决定性. 直角坐标空间 ($x_1, y_1, z_1, \cdots, x_N, y_N, z_N$) 叫做**配位空间**. 除自旋外, 波函数是配位空间中的波.

如果在 $N$ 个粒子之中粒子 $i$ 和粒子 $j$ 是全同的,那么,就其坐

标交换而言，波函数必须是反对称的。这就是**泡利原理**

$$u(\cdots, x_j, \nu_j, \cdots, x_i, \nu_i, \cdots) = -u(\cdots, x_i, \nu_i, \cdots, x_j, \nu_j, \cdots)。 \tag{5.7.1}$$

因此，粒子 $i$，$j$ 取相同坐标值 $r_i = r_j$，$\nu_i = \nu_j$ 的概率为零。也就是说，全同粒子不能同处于一个态。

氦原子是两个电子和原子核结合的体系。电子具有自旋 $\frac{1}{2}$ 及[1)]

质量 $m_e = (9.109534 \pm 0.000047) \times 10^{-28}$ (g)，

电荷 $-e = -(4.803242 \pm 0.000014) \times 10^{-10}$ (esu)。

氦原子核是 $^4$He 或 $^3$He，前者自旋是零，后者是 $\frac{1}{2}$，质量分别是

$$M(^4\mathrm{He}) = 6.64604 \times 10^{-24}(\mathrm{g}),$$
$$M(^3\mathrm{He}) = 5.00791 \times 10^{-24}(\mathrm{g}).$$

电荷均为 $+2e$，原子序数是 $Z = 2$。

特殊地把原子核的空间坐标记为 $\boldsymbol{X}$，薛定谔方程写为

$$(H - E)u_{\mathrm{He}} = 0, \tag{5.7.2}$$

其中

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{X}^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{x}_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{x}_2^2}\right) - \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{X}|} - \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{X}|} + \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|}。 \tag{5.7.3}$$

现在，全同粒子是两个电子，显然，方程 (5.7.2) 与泡利原理

$$u_{\mathrm{He}}(\boldsymbol{x}_2, \nu_2, \boldsymbol{x}_1, \nu_1, \boldsymbol{R}, \nu_N) = -u_{\mathrm{He}}(\boldsymbol{x}_1, \nu_1, \boldsymbol{x}_2, \nu_2, \boldsymbol{R}, \nu_N) \tag{5.7.4}$$

同时成立。即，若上式右边是解，则左边也是。一般来说，由哈密

---

1) 1926 年的值，见书末 (Particle Data Group 1976)。

顿量对于交换全同粒子的坐标（空间加自旋）是对称的(粒子不全同便不会如此)，就能推出薛定谔方程与泡利原理不矛盾。对依赖于时间的波函数，亦可证明，它若在某个时刻满足泡利原理，则任意时刻均满足。读者不妨试证之。

### b） 质心运动的分离

从哈密顿量 (5.7.3) 可见，势能项仅与电子和核的位置矢量之差有关。如果把原子的质心坐标和电子 $i$ 对核的相对坐标定义为

$$\boldsymbol{R} = (M\boldsymbol{X} + m_e\boldsymbol{x}_1 + m_e\boldsymbol{x}_2)/M_{tot},\quad M_{tot} = M + 2m_e,$$

$$\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{X},\ (i = 1, 2),$$

则该势就可以只用相对坐标来表示。另一方面，因为

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{M}{M_{tot}}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_1} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_2},$$

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_i} = \frac{m_e}{M_{tot}}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i},$$

所以，其动能部分可以改写为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_{tot}}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{R}^2} + H_{rel} + H', \tag{5.7.5}$$

其中

$$H_{rel} \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}_2^2}\right) - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}, \tag{5.7.6}$$

$$H' \equiv -\frac{\hbar^2}{M_{tot}}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}_1 \partial \boldsymbol{r}_2}. \tag{5.7.7}$$

注意其中仅包含相对坐标 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$。在这里

$$r_{12} \equiv |\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2| = |\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|$$

是电子之间的距离，而

$$\mu \equiv m_e M/(m_e + M)$$

是电子（一个!）的折合质量。这样一来，(5.7.2) 式的解显然具有质心运动分离的形式。进而，因为与相对运动有关的 $H_{rel} + H'$ 不

包含自旋算符，所以该解的形式可以是

$$u_{\mathrm{He}} = e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}} w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\chi(\nu_1, \nu_2)\phi(\nu_N)。 \tag{5.7.8}$$

只要全部求出这种形式的解，则 (5.7.2) 式的任何一个解都应该能写成这些解的线性组合。不言而喻，$e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}}$ 是动量为 $\hbar\boldsymbol{K}$ 的质心运动的波函数。相对运动波函数 $w$ 由本征值问题

$$(H_{\mathrm{rel}} + H')w = E_{\mathrm{rel}}w, \quad E = \hbar^2K^2/2M_{\mathrm{tot}} + E_{\mathrm{rel}} \tag{5.7.9}$$

来确定。边界条件则根据单体问题的情况适当类推。

对于 (5.7.8) 式中的相对运动，泡利原理 (5.7.4) 归结为

$$\frac{w(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1)}{w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)} = -\frac{\chi(\nu_1, \nu_2)}{\chi(\nu_2, \nu_1)}。$$

其左边是空间坐标的函数，右边是自旋坐标的函数，因此结果只能是一个常量。若用 $\sigma$ 表示它，则

$$w(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) = \sigma w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2), \quad \chi(\nu_2, \nu_1) = -\sigma\chi(\nu_1, \nu_2)。$$

由于交换一次 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 就会有

$$w(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) = \sigma w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \sigma^2 w(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1),$$

因此必然有 $\sigma = \pm 1$。所以，函数 $wx$ 只能是 $\sigma = 1$ 时的 $w_{\text{对称}}\chi_{\text{反对称}}$ 和 $\sigma = -1$ 时 $w_{\text{反对称}}\chi_{\text{对称}}$ 这样两种形式。

两个自旋合成的本征态 (5.2.68) 和 (5.2.69) 正好具有上述对称性，所以，可恰当地把 $w\chi$ 选为

平行状态(仲氦)：$w_{\text{对称}}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2}$，

反平行状态(正氦)：$w_{\text{反对称}}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\begin{cases}\alpha(1)\alpha(2)\\ [\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2}\\ \beta(1)\beta(2).\end{cases}$

(5.7.10)

其中已把 $\nu_1$ 和 $\nu_2$ 简写为 1 和 2。平行、反平行是量子力学以前就沿用的通称，我们知道，氦光谱大致分为单重线系和三重线系。按照现在的观点，在 (5.7 10) 式中可以看出，它们与总自旋 $S = 0, 1$ 的多重度 $2S + 1$ 相对应，所以，常称其为单态和三重态。在三重态中，两个电子不能处于相同的位置，$w_{\text{反对称}}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|_{\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{r}_2}$

$\approx 0$.

这样，确定氦原子的定态 $u_{\mathrm{He}}$，不仅要求方程(5.7.9)的解，这解还必须是电子与核的相对坐标 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 的对称或反对称函数.

现在，考虑下面解法，暂且忽略 $H'$. 其原因是，如(5.7.7)式中所见，$H'$ 以核质量为分母，它比以电子质量为分母的 $H_{\mathrm{rel}}$ 小得多. 如果过渡到动量表象，这种情形将一目了然. 因为现在原子的总动量 $\hbar\boldsymbol{K}$ 一定，所以核运动不过是受到电子运动的反冲，二者具有相同大小的动量. 这样，质量格外大的核的动能要比电子小得多. 近似地忽略 $H'$，应求解的方程是

$$H_{\mathrm{rel}}w = E_{\mathrm{rel}}w. \tag{5.7.11}$$

$H_{\mathrm{rel}}$ 是在(5.7.6)式中定义的，若电子之间没有库仑势 $e^2/r_{12}$，则方程(5.7.11)可以分离变量. 但是，因为毫无理由认为该项特别小（$z \gg 1$ 时另当别论），所以问题并不那么简单. 我们还是先由说明解法开始吧.

### c) 变分法

一般地，设给定的哈密顿量 $H$ 的本征值为 $E_0 < E_1 \leqslant \cdots$，对应的本征函数的完备正交归一系为 $u_0, u_1, \cdots$. $E_1$ 以上的本征值可以是连续的，还可以有简并，但是，$E_0$ 却只是离散本征值，并且没有简并.

可以用这个本征函数系展开任意函数 $\varphi$

$$\varphi = c_0u_0 + \sum_{k=1} c_ku_k, \qquad |c_0|^2 + \sum_{k=1} |c_k|^2 = 1, \tag{5.7.12}$$

必要时，上式中的求和可以相应地换成积分. 计算哈密顿量的期待值

$$\begin{aligned}\langle\varphi, H\varphi\rangle &= |c_0|^2E_0 + \sum_{k=1} |c_k|^2E_k \\ &= E_0 + \sum_{k=1} (E_k - E_0)|c_k|^2, \end{aligned} \tag{5.7.13}$$

因 $E_k - E_0 > 0$，故

$$\langle \varphi, H\varphi \rangle \geqslant E_0. \tag{5.7.14}$$

(5.7.12) 式能够展开的条件和(5.7.6)式中的哈密顿量 $H_{rel}$ 能够运算的条件是

$$\langle \varphi, \varphi \rangle = 1, \quad \left\langle \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{r}_i}, \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{r}_i} \right\rangle < \infty, \tag{5.7.15}$$

其中，$\langle \partial\varphi/\partial \boldsymbol{r}_i, \partial\varphi/\partial \boldsymbol{r}_i \rangle$ 可理解为 $\langle \varphi, (-\partial^2/\partial \boldsymbol{r}_i^2)\varphi \rangle$.

这样，对于满足条件 (5.7.15) 的任意 $\varphi$，$H$ 的期待值不会小于$H$的最低本征值 $E_0$. 也就是给出了 $E_0$ 的上限.只有当 (5.7.12) 式中 $c_k = 0(\forall k \neq 0)$ 时，即 $\varphi$ 与最低本征值的本征函数一致时，它才等于 $E_0$，这叫**变分原理.**

如果$E_1$ 也是离散本征值，而且$H$能直接对 $\varphi$ 运算，那么，可以写出

$$\langle (H - E_0)\varphi, (H - E_1)\varphi \rangle = \sum_{k=2} (E_k - E_0) \times (E_k - E_1)|c_k|^2 \geqslant 0,$$

进而

$$(\langle \varphi, H\varphi \rangle - E_1)E_0 \leqslant \langle H\varphi, H\varphi \rangle - E_1\langle \varphi, H\varphi \rangle.$$

因此，当 (5.7.14) 式十分接近于等式时，有

$$\langle \varphi, H\varphi \rangle < E_1,$$

于是

$$E_0 \geqslant \langle \varphi, H\varphi \rangle - \frac{\langle H\varphi, H\varphi \rangle - \langle \varphi, H\varphi \rangle^2}{E_1 - \langle \varphi, H\varphi \rangle}. \tag{5.7.16}$$

其右边叫做最低本征值的**坦普勒** (Temple) **下限.** 不过，因$E_1$ 是未知的，故只能用某估计值代替.

如果找到了函数 $\varphi$ 使 (5.7.14) 式或 (5.7.16) 式中等号成立，那么该 $\varphi$ 就是$H$的最低本征值的本征函数 $u_0$. 即使没有能使等号成立，但只要找到了使上限和下限十分相近的 $\varphi$，它也就非常接近 $u_0$ 了. 这是一种无需处理微分方程而求解本征值问题的方法. 称 $\varphi$ 为**试探函数.**

可以将该方法应用于氦原子问题(5.7.11). 选择与(5.7.10)式

中的$w$相当的试探函数为

$$\varphi(r_1, r_2) = v_0(r_1; \alpha)v_0(r_2; \alpha), \qquad (5.7.17)$$

其中

$$v_0(r,\alpha)\equiv[(\alpha Z/a_B)^3/\pi]^{1/2}\exp(-\alpha Zr/a_B)\ (a_B\equiv\hbar^2/\mu e^2)$$

是核电荷为 $\alpha ze$ 的类氢原子基态中的电子波函数。 调整$\alpha$，使

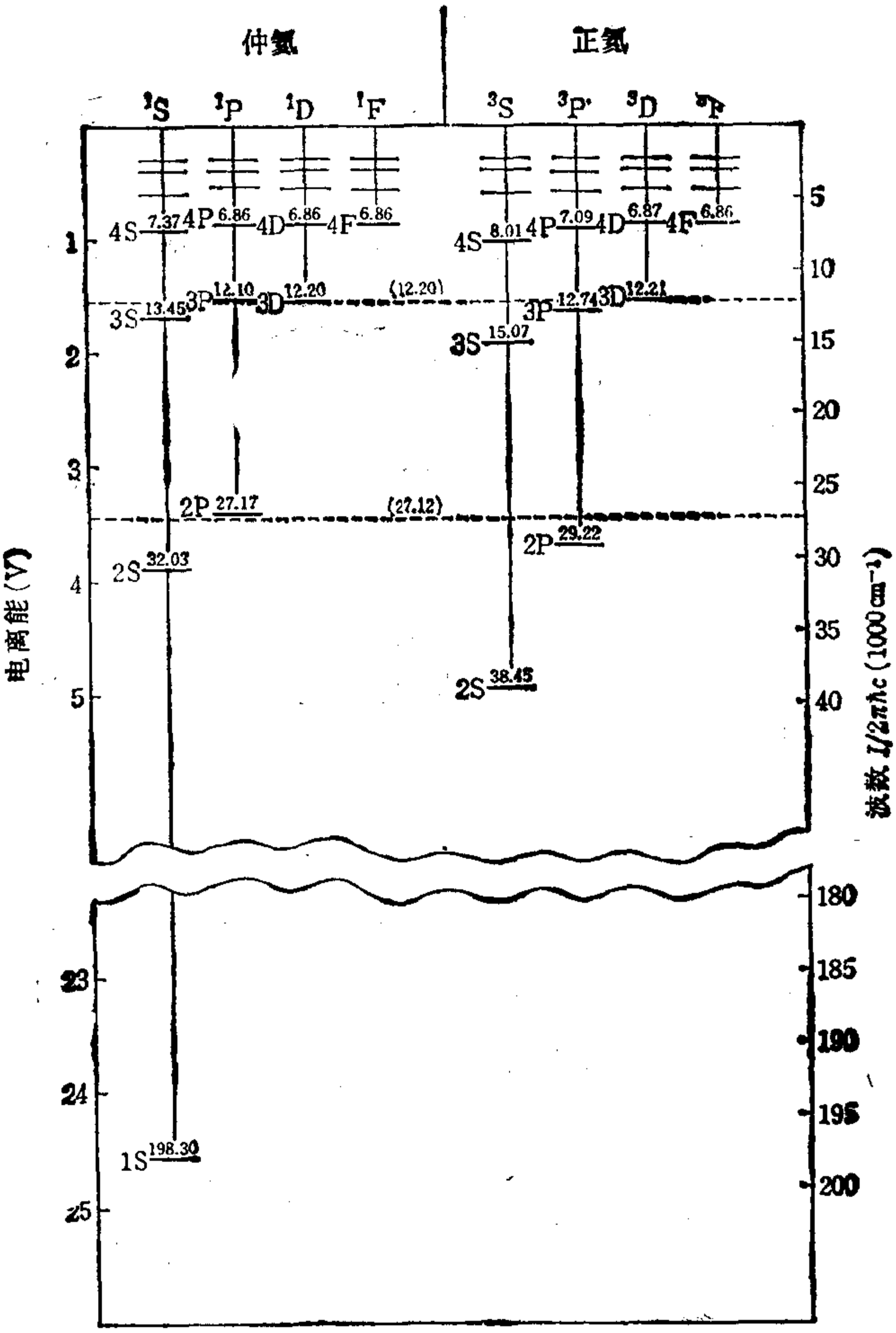



图 5.40　氦原子的能级.图中表示电离电压的实验值.以其波数记在各能级上右侧是标度，虚线是氦原子的电离能.图上只画出了$n=2,3$的值

$\varphi$ 尽可能近似于 $u_0$。公式中包含 $\alpha$，原因是氢原子中一个电子会屏蔽另一个电子的核库仑场。因此，合适的 $\alpha$ 应当小于 1。

像这样固定试探函数的形式，而仅仅调整参数来找出最优值的方法就是**瑞利-里兹法**。参数的数目有限，无论怎么调整它们，也不能指望会真的得到本征函数。总之，只能是尽可能地接近它。好在本征值对本征函数的偏差反应迟钝。实际上，从 (5.7.13) 式可以看出，本征值的误差 $\langle\varphi, H\varphi\rangle - E_0$ 是表示本征函数误差 $c_k$ 的平方量级。这一点反过来也正好说明，难以用变分法来确定本征函数。

因为试探函数 (5.7.17) 对于交换 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 是对称的，所以它就是 (5.7.10) 式中的平行态，又由于它还是旋转不变的，因此总角动量为零。实验证实了这一点。氦原子的基态是 $^1S$ (图5.40)。

现在计算 $\langle\varphi, H_{rel}\varphi\rangle$。首先

$$\left\langle v_0, -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2} v_0\right\rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{Z}{a_B}\right)^2\alpha^2 = \frac{1}{2}\frac{Z^2e^2}{a_B}\alpha^2, \quad (5.7.18)$$

$$\left\langle v_0, -\frac{Ze^2}{r} v_0\right\rangle = -\frac{Z^2e^2}{a_B}\alpha. \quad (5.7.19)$$

其次，为了计算 $e^2/r_{12}$ 的期待值，可以利用由勒让德多项式的母函数 (5.2.29) 得到的展开式

$$\frac{1}{r_{12}} = (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\theta)^{-1/2} = \frac{1}{r_>}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_<}{r_>}\right)^l P_l(\cos\theta).$$

其中，$\theta$ 是 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 之间的夹角，$r_>$ 表示 $r_1$ 和 $r_2$ 中之大者，$r_<$ 表示小者。因此，可以得到

$$\left\langle\varphi, \frac{e^2}{r_{12}}\varphi\right\rangle = \frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a_B}\alpha.$$

这样，对于试探函数 (5.7.16) 来说，有

$$\langle\varphi, H_{rel}\varphi\rangle = \left\langle\alpha^2 - \frac{16Z-5}{8Z}\alpha\right\rangle\frac{Z^2e^2}{a_B}.$$

使其最小的 $\alpha$ 是

$$\alpha_0 = 1 - \frac{5}{16Z},$$

不出所料，它比 1 小。由 (5.7.13) 式计算得到的最小能量值为

$$E_0^{rel} \leqslant -\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 \frac{e^2}{a_B}. \tag{5.7.20}$$

将氦的 $Z = 2$ 代入，得

$$\alpha_0 = 0.84, \quad E_0 \leqslant -2.8e^2/a_B = -77(\text{ev})$$

实验值常用 $He \rightarrow He^+ + e$ 的电离能表示，对于氦原子的基态[1]，有

$$I(1^1S) = 198310.8 \pm 0.15(\text{cm}^{-1}) \quad (^4\text{He 实验}). \tag{5.7.21}$$

除以 $^4$He 原子中折合质量为 $\mu$ 的里德伯常数[2]

$$R_{^4\text{He}} = (e^2/2a_B)/2\pi\hbar c = 109722.267 \pm 0.012(\text{cm}^{-1}),$$

再将所得到的数值除以 2，就是以 $e^2/a_B$ 为单位的电离能 $I_0'$：

$$I(1^1S) = 0.903694e^2/a_B \equiv I_0'e^2/a_B.$$

因为它是离子的能量 $-Z^2e^2/2a_B$ 和中性原子的 $E_0$ 之差，故有

$$E_0 = -\left(\frac{Z^2}{2} + I_0'\right)\frac{e^2}{a_B}. \tag{5.7.22}$$

于是

$$E_0 = -2.903693e^2/a_B \quad (^4\text{He 实验}). \tag{5.7.23}$$

它与上面的理论值相当接近，而且满足预期的不等式，对于其他原子，(5.7.21) 式也给出了不错的近似值(表 5.6)。

下面考虑氦原子的激发态。

在变分法中，如已知最低本征值的准确本征函数 $u_0$，那么，在条件 (5.7.15) 之外再加上

$$\langle u_0, \varphi\rangle = 0, \tag{5.7.24}$$

再根据类似于 (5.7.13) 式那样的讨论，就会得到

$$\langle \varphi, H\varphi\rangle \geqslant E_1. \tag{5.7.25}$$

若本征值 $E_1$ 是离散的，结果就是这样。于是，对氦原子来说，相应于 (5.7.10) 式中的 $w$，可以取

---

1) Herzberg, G.: *Proc. Roy. Soc.* (London), **A248**, 309(1958).

2) 根据 (Cohen-Du Mond 1957) 中 1955 年的值，参照书末的参考书目.

$$\psi_{\pm}(r_1, r_2) = [v_0(r_1, \alpha)v_1(r_2, \beta) \pm v_0(r_2, \alpha)v_0(r_1, \beta)]/\sqrt{2}. \tag{5.7.26}$$

**表 5.6　用变分法得到的电离能**

| | | $H^-$ | He | $Li^+$ | $Be^{++}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 基　态 $1^1S$ | 理论值 | −0.028 | 0.848 | 2.723 | 5.598 |
| | 实验值 | +0.028 | 0.904 | 2.780 | 5.656 |
| | 差 | 0.056 | 0.056 | 0.057 | 0.058 |
| | % | 200 | 6.60 | 2.09 | 1.04 |
| 第一激发态 $2^3S$ | 理论值 | | 0.167 | 0.605 | |
| | 实验值 | | 0.175 | 0.610 | |
| | 差 | | 0.008 | 0.005 | |
| | % | | 4.79 | 0.83 | |

把在 (5.7.20) 和 (5.7.30) 两式中取等号而得到的电离能与实验值比较. 单位是 $e^2/a_B$, 其中, $a_B = \hbar^2/\mu e^2$ 是用各原子中电子的折合质量计算得到的值. 另外, 实际上, $H^-$ 的理论值在实验值的误差范围之内.

同前, $v_0$ 是核电荷为 $\alpha Ze$ 的类氢原子的基态波函数, 而 $v_1$ 则可以看成是核电荷为 $\beta Ze$ 的第一激发态 $2S$ 的波函数

$$v_1(r, \beta) = \left[\frac{1}{8\pi}\left(\frac{\beta Z}{a_B}\right)^3\right]^{1/2}\left(1 - \frac{\beta Z}{2a_B}r\right)e^{-\beta Zr/2a_B}. \tag{5.7.27}$$

若取重号之中下面的负号, 则该试探波函数对于交换电子的空间坐标来说, 它是反对称的, 与自旋三重态合起来构成正氦状态 $^3S$. 它自动与作为平行状态的基态 $u_0$ 正交, 满足条件(5.7.21).

即使保留重号, 计算的手续也仍然是一样的, 可得出

$$\langle\varphi_{\pm}, H_{rel}\varphi_{\pm}\rangle = (1 \pm A^2)^{-1}\left[\frac{Z^2e^2}{2a_B}\left\{[\alpha - 2(1 \pm \eta_1)]\alpha + [\beta - 2(1 \pm \eta_2)]\frac{\beta}{4}\right\} + K \pm J\right]. \tag{5.7.28}$$

略去 $\alpha$ 和 $\beta$, 其中

$$K^- \equiv e^2\int\frac{[v_0(r_1)v_1(r_2)]^2}{r_{12}}d^3r_1d^3r_2,$$

$$J \equiv e^2 \int \frac{v_0(r_1)v_1(r_2)v_0(r_2)v_1(r_1)}{r_{12}}\, d^3r_1 d^3r_2$$

分别称为**直接积分**和**交换积分**，而

$$A \equiv \int v_0(r)v_1(r)d^3r$$

则称为**重叠积分**. 于是

$$\eta_1 \equiv \frac{(1-\beta)\alpha}{\alpha-\beta}A^2, \quad \eta_2 \equiv \frac{(1-\alpha)\beta}{\beta-\alpha}A^2.$$

在正氦 $\varphi_-$ 的情况下，使(5.7.25)式最小的 $\alpha$ 和 $\beta$ 值分别为

$$\alpha_0 = 1.01, \ \beta_0 = 0.77. \tag{5.7.29}$$

$\alpha_0$ 比 1 还大，也许是由于在外侧旋转的 2s 电子迫使 1s 电子的核靠近. 根据(5.7.28)式的最小值. 有

$$E_1^{\mathrm{rel}} \leqslant -2.167e^2/a_B. \tag{5.7.30}$$

取其中之等号，再根据(5.7.22)式求出电离能，与图 5.40 所示的 $I(2^3S) = 38.45 \times 10^3(\mathrm{cm}^{-1})$ 大致符合. 关于 $Li^+$ 所得到的结果也不错(参看表 5.6).

对于氦来说，当 $\alpha$ 和 $\beta$ 取(5.7.29)式中的值时，重叠积分是

$$A^2 = 0.0149,$$

它远比 1 小. 若在(5.7.28)式中忽略它，则会得到一个便于分析的表达式

$$\langle \varphi_\pm, H_{\mathrm{rel}}\varphi_\pm \rangle = \left[\alpha(\alpha-2) + \frac{1}{4}\beta(\beta-2)\right]\frac{Z^2e^2}{2a_B} + (K \pm J), \tag{5.7.31}$$

第一项的含义可以根据(5.7.18)和(5.7.19)两式推测出来. 第二项是 $e^2/r_{12}$ 的期待值. 交换积分前面的符号反映了交换电子时波函数空间部分的对称性. $\pm J$（必要时得除以 $1 \pm A^2$）称为**交换能**. 现在考虑的三重态中它之所以取负号，是由于两个电子具有平行自旋，按泡利原理它们不能互相靠近，而不是电子间库仑排斥势作用的结果.

如果取试探函数 (5.7.26) 重号之中上面的一个，那么，对于交换电子坐标，它是对称的。它能给出仲氦的激发态 $2^1S$ 吗？由于它是对称函数，因此，不能保证与基态 $u_0$ 的正交性 (5.7.24)。若 $u_0$ 用 $\alpha = 1 - 5/16Z$ 时的近似函数 (5.7.17) 代替，并在(5.7.26)式中令 $\beta = 1 - 5/16Z$，则正交条件会得到满足。但是，电离能的计算值比实验值 $I(2^1S)$ 小得多。看来，(5.7.26) 式中的 $\varphi_+$ 不适于做试探函数。关于其它尝试，请看书末所列的参考书 [Bethe. Salpeter]。

### d) 位置相关

我们再回到氦原子的基态。前面用的试探函数 (5.7.17) 中，两个电子的位置统计无关。这样行吗？

实际上，(5.7.17) 式给出的电子存在概率密度 $|v_0(r_1, \alpha)|^2 |v_0(r_2, \alpha)|^2$ 是各个电子存在概率密度之积，其内容统计无关，完全没有两个电子互相避开对方的所谓位置相关。

对于激发态来说，(5.7.26) 式中的试探函数 $\varphi_-(r_1, r_2)$ 中有位置相关，这是按照泡利原理得来的。在基态，两个电子的自旋是反平行的，泡利原理不会造成位置相关，但由于诸电子彼此以库仑力相排斥，因此必然出现位置相关。相对于泡利原理的相关而言，可以说，它是动力学的相关。试探函数 (5.7.17) 没有反映出这点，是不够充分的。

可以用

$$\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2, \quad \boldsymbol{\xi} = (\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2)/2 \tag{5.7.32}$$

来改写 (5.7.6) 式中的 $H_{\mathrm{rel}}$，于是，微分方程 (5.7.11) 变为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\rho}^2} + \frac{e^2}{\rho}\right)w = \left(\frac{\hbar^2}{4\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\xi}^2} + \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\rho}/2|} + \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\rho}/2|} + E^{\mathrm{rel}}\right)w. \tag{5.7.33}$$

现在，在配位空间中，问题出在 $\rho \simeq 0$ 附近。若将 $\xi \simeq 0$ 附近 ($\rho \simeq 0$ 和 $\xi \simeq 0$ 是在核附近)除外，则可以认为(5.7.33) 式右边的

(…) 与 $\boldsymbol{\rho}$ 无关，即

$$\left(-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\rho}^2}+\frac{e^2}{\rho}\right)w=\left(\frac{\hbar^2}{4\mu}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\xi}^2}+\frac{2Ze^2}{\xi}+E^{\mathrm{rel}}\right)w.$$

分离变量，把分离常数叫做 $\lambda$. 如果用 $\hat{\boldsymbol{\rho}}$ 表示 $\boldsymbol{\rho}$ 的方向，并考虑下述形式的解：

$$w(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)=\phi_l(\rho)Y_{lm}(\boldsymbol{\rho})w(\boldsymbol{\xi}),\qquad(5.7.34)$$

便有

$$\left(-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}\rho+\frac{e^2}{\rho}+\frac{\hbar^2l(l+1)}{\mu\rho^2}-\lambda\right)\phi(\rho)=0.$$

若把 $\phi$ 展成 $\phi(\rho)=\rho^s+a_1\rho^{s+1}+\cdots$，则会有 $s=l$ 或 $s=-l-1$. 根据 §5.4a) 中的讨论，不能采用后者，于是

$$\phi(\rho)=\rho^l\left(1+\frac{1}{2(l+1)}\frac{\rho}{a_{\mathrm{B}}}+\cdots\right),\qquad(5.7.35)$$

其中…部分与 $\lambda$ 有关，因此随 $\omega(\boldsymbol{\xi})$ 而变化. 尽管如此，这个 $\phi(\rho)$ 还是清楚地表明，由于库仑斥力的作用，电子是互相避开的. 进行变分计算时，试探函数必须包含这一事实.

因为交换电子坐标时 $\boldsymbol{\rho}$ 会反向，所以 (5.7.34) 式具有性质

$$w(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)=(-1)^lw(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2).$$

因此，在平行状态中，$l$ 为偶数，而在反平行状态中，$l$ 为奇数.

对于氦的基态，木下东一郎考虑到电子的位置相关之后，进行了细致的变分计算，给出精度非常高的能量计算值，自不待言，这一点在证实上述 (5.7.35) 式方面意义深远. 下面我们简单说明之.

氦基态 $^1S$ 的总角动量为零. 这意味着，波函数的空间部分 $w_0(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)$ 对于空间旋转是不变的. 因此，$w_0$ 应表示为 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 所构成的标量函数. 这时的标量取 $r_1^2$, $r_2^2$, $\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2$，或与之等价的

$$s\equiv(r_1+r_2)/a_{\mathrm{B}},\quad t\equiv(-r_1+r_2)/a_{\mathrm{B}},\quad u\equiv|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|/a_{\mathrm{B}}\qquad(5.7.36)$$

就足够了. 由图 5.41 的三角形可以看到，它们变化的区域有限制

$$|t| \leqslant u \leqslant s. \tag{5.7.37}$$

木下用过的试探函数是

$$\varphi(s,t,u) = e^{-ks/2} \sum_{l,m,n\geqslant 0} c_{lmn}(ks)^l \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{u}\right)^n, \tag{5.7.38}$$

其中

$$c_{lon} = 0, \quad (n \neq 0). \tag{5.7.39}$$

这是一个有 39 项的级数. 之所以有 (5.7.39) 式,是为了满足条件 (5.7.15).以 $k$ 和 $c_{lmn}$ 为变分参数,进行变分,就可以得到 (5.7.11) 式的最低本征值,它满足

$$-2.9038737e^2/a_B \leqslant E_0^{rel} \leqslant -2.9037225e^2/a_B. \tag{5.7.40}$$

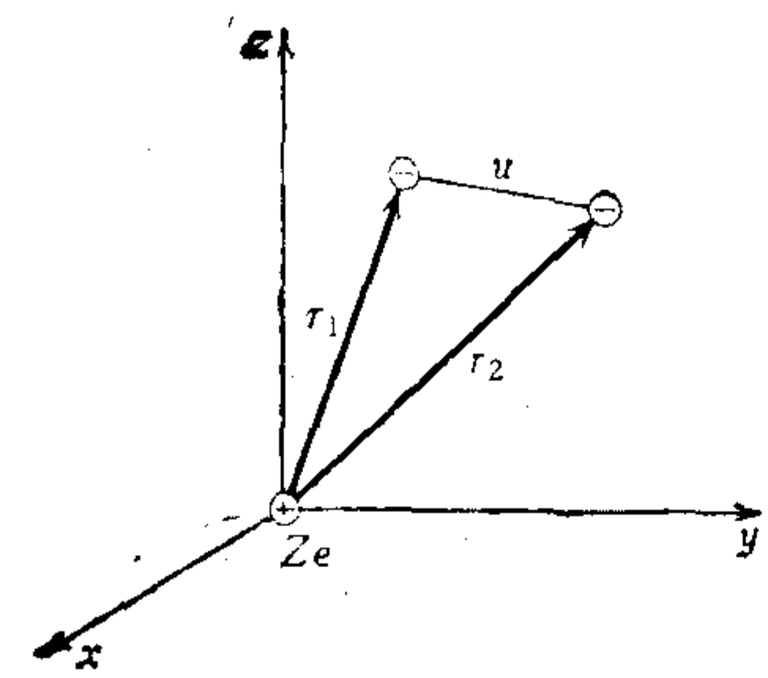



图 5.41 氦原子. 变量 $u$ 是为了便于看出两个电子的位置相关而引入的

左边是用最优的 $\varphi$ 计算出的坦普勒下限 (5.7.16), 其中的 $E_1$ 是用实验值 $-2.146e^2/a_B$ 代入的. 读者可曾注意到, 实验值 (5.7.23) 并不在上面不等式 (5.7.40) 的范围之内, 这是因为,到了这个精度,核的运动就会起作用. 用最优 $\varphi$ 求出(5.7.7)式的期待值(参看后面的(6.1.10)式), 是

$$E_0^{核} = 4.78(\mathrm{cm}^{-1}) = 0.0000218e^2/a_B.$$

再加上相对论修正:

$$E_0^{相对论} = -0.0001092e^2/a_B,$$

$$E_0^{相对论}(\mathrm{He}^+) = -0.0001066e^2/a_B = -2.00(e^2/\hbar c)^2 e^2/a_B.$$

之所以写下 $\mathrm{He}^+$ 的值,是为了求电离能,由 (5.7.22) 式,得到

$$I = \left[-\frac{2e^2}{a_B} + E_0^{相对论}(\mathrm{He}^+)\right] - [E_0^{rel} + E_0^{核} + E_0^{相对论}]$$

$$= 198311.61(\mathrm{cm}^{-1}).$$

实际上，其中还必须加上被称之为兰姆（Lamb）移位的量子电动力学效应 $-1.23(\mathrm{cm}^{-1})$。结果为

$$I = 198310.38(\mathrm{cm}^{-1}).\ (木下,1957)$$

与实验值 (5.7.21) 符合得极好!

另外，目前最为精确的计算值是

$$I = 198310.67(\mathrm{cm}^{-1}),\ (\mathrm{Pekeris},1958).$$

这是用其它试探函数找到的。

为了表示木下的最优函数 $\varphi$ 中的电子相关，我们仿照书末的 [Slater] 来讨论特殊情形。着眼于电子存在概率高的地方，令 $s=1$，$t=0$，就是说，两个电子与核等距离，这时有

$$\varphi(1,0,u) = 1+0.49799u - 0.190868u^2 + \cdots -0.000980u^6.$$

而当两个电子处于同一矢径上时，有

$$\varphi(1,u,u) = 1+0.501508u+0.059339u^2 -\cdots - 0.000871u^6.$$

它们都与 $l=0$ 时的 (5.7.35) 式符合。

### e) 氢分子

双电子体系的另一个典型例子是氢分子，如果选用一种模型，其中，两个氢原子核相距 $R$，处于静止状态(绝热近似，参看 §6.3)，那么，采用图 5.42 所示的记号，电子的哈密顿量是

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_2^2}\right)-\frac{e^2}{r_{1a}}-\frac{e^2}{r_{1b}}$$
$$-\frac{e^2}{r_{2a}}-\frac{e^2}{r_{2b}}+\frac{e^2}{r_{12}}+\frac{e^2}{R}. \qquad (5.7.41)$$

这次，为决定氢分子的基态，不妨再用变分法试试。采用 (5.7.10)型试探函数[1]代替 $w$，设

$$\varphi_{\pm}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = [v_a(\mathbf{r}_1)v_b(\mathbf{r}_2)\pm v_a(\mathbf{r}_2)v_b(\mathbf{r}_1)]/2, \qquad (5.7.42)$$

其中，$v_a(\mathbf{r})$ 是以核 $a$ 为中心的波函数，最早对氢分子进行这种计算的是海特勒（Heitler）和伦敦（London）(1927)，他们简

1) 其中平行和反平行的说法是就氢分子的核自旋而言的.

单地选择氢原子的基态波函数为

$$v_a(r_k) = (1/\pi a_B^3)^{1/2}\exp(-r_{ka}/a_B)\quad (k = 1,2)。$$

(5.7.43)

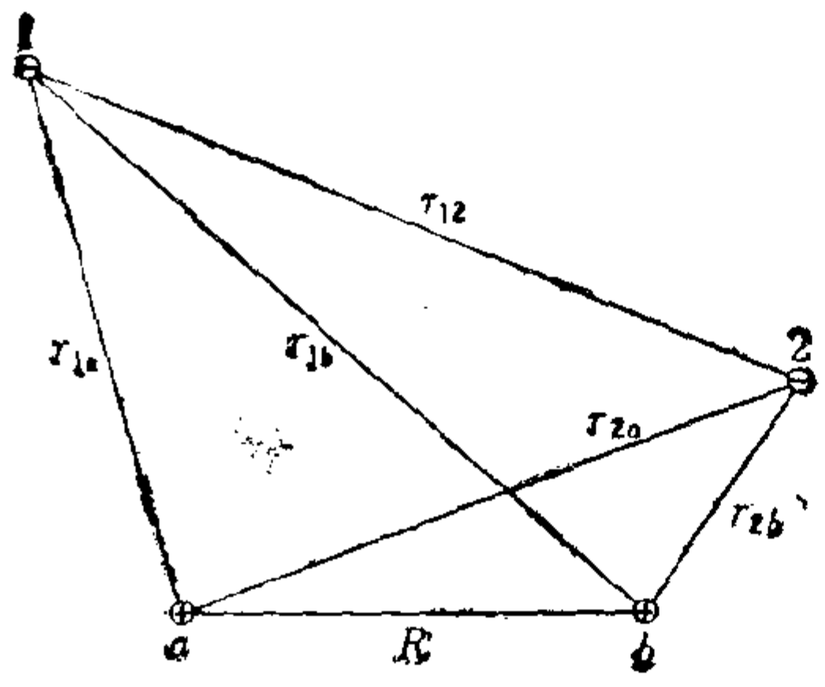



图 5.42　氢分子

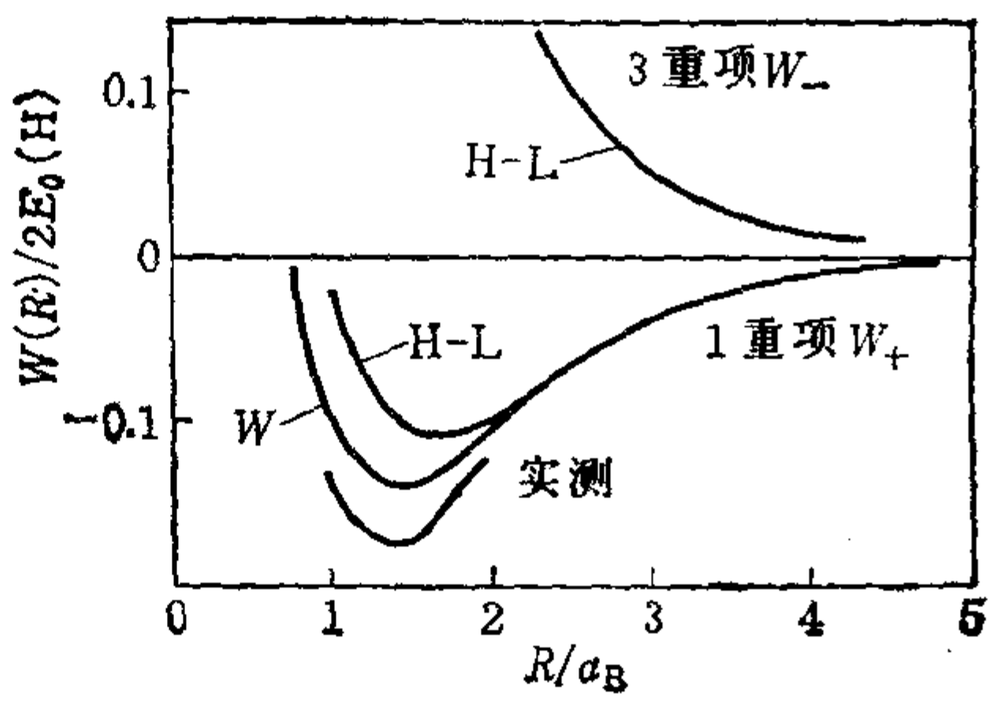



图 5.43　氢分子的能量曲线．两个原子核在空间固定，电子体系的能量 $W_\pm$ 被表示成核间距 $R$ 的函数．以分子分解为两个氢原子时的能量为基准．在分子振动或原子碰撞时，它起着势的作用(参看 §6.3)

$v_b$ 也如此，它们不含一个变分参数，而

$$\langle\varphi_\pm, H\varphi_\pm\rangle = 2E_0(H) + \frac{K \pm J}{1 \pm A^2} \qquad (5.7.44)$$

似乎就大约是氢分子的能量 $E_0(H_2)$．其中，$E_0(H)$ 是氢原子的基态能，而

$$K = -2e^2\int\frac{[v_a(\boldsymbol{r}_2)]^2}{r_{2a}}\,d^3\boldsymbol{r}_2 + e^2\int r_{12}^{-1}[v_a(\boldsymbol{r}_1)v_b(\boldsymbol{r}_2)]^2 d^3\boldsymbol{r}_1 d^3\boldsymbol{r}_2$$

$$J = e^2\int v_a(\boldsymbol{r}_1)v_b(\boldsymbol{r}_2)\left(-\frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{1b}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R}\right)$$

$$\times\, v_a(\boldsymbol{r}_2)v_b(\boldsymbol{r}_1)d^3\boldsymbol{r}_1 d^3\boldsymbol{r}_2$$

分别是直接积分(或库仑积分)和交换积分，

$$A = \int v_a(\boldsymbol{r})v_b(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}$$

是重叠积分，这些积分是核间距 $R$ 的函数，若 $R$ 在实际氢分子的值上下变化，则 $J$ 和 $K$ 均为负值．与氦原子的 (5.7.26) 式中情况

相反，这时，对于交换电子坐标来说，对称的 $\varphi_+$ 的能量 (5.7.44) 比反对称的 $\varphi_-$ 的能量低。因此，基态是自旋单态。

根据 (5.7.44) 式，取

$$W_\pm(R) = \langle \varphi_\pm, H\varphi_\pm \rangle - 2E_0(H) = \frac{K \pm J}{1 \pm A^2},$$

此式表明当相距无限远的两个氢原子接近到核间距 $R$ 时，会释放出能量。在图 5.43 中，H-L 表示海特勒-伦敦的计算结果。$W_+(R)$ 在 $R = 1.7a_B = 0.89(\text{Å})$ 处具有负的极小值 $-3.14(\text{eV})$。这样，就可以说明，氢分子是以单态形式构成的。量子力学出现之前，确实不曾弄清楚非离子性化学结合的机理。$W_-(R)$ 恒正，没有极小。这就正确地说明，当氢分子被激发到三重态时，将是不稳定的，从而会分解。当然，$W_+(R)$ 和 $W_-(R)$ 之差取决于交换能。

因为变分法给出了能量上限，故确实可以形成分子，不过，一般来说，尚留有关于不稳定性的疑问。

通过实验测量，氢分子的核间距是 0.7417(Å)，离解能是 4.74(eV)，因此，海特勒-伦敦理论在定量方面尚有不足。由于该理论连一个变分参数都没有，故有这个缺欠是理所当然的。

眼下可以考虑改善试探函数，把 (5.7.43) 式换成

$$v_0(r_k) = (\alpha'/\pi a_B^3)^{1/2} \exp(-\alpha r_{ka}/a_B), \qquad (5.7.45)$$

其中，$\alpha$ 是变分参数。对于不同的核间距离 $R$，所求得的 $\alpha$ 的最优值不同。当 $R \to \infty$ 时，氢分子变成两个孤立的氢原子，因此，该极限下当然有 $\alpha \to 1$。当 $R \to 0$ 时，可能生成 He 原子。这时，最优值为 $\alpha = 1.625$，大体上与前一小节中推导 (5.7.20) 式时所得到的等效核电荷 $2\alpha_0 = 0.844 \times 2$ 相符。

在图 5.43 中，这样求得的 $W_+(R)$ 是用曾对它进行计算的王 (Wang, 1928) 的字头表示的。

更精确的变分计算是詹姆斯 (James) 和库利吉 (Coolidge, 1933) 完成的。得到的核间距是 0.74(Å)，离解能量 4.73(eV)，与实验值基本一致。其试探函数的特点是其中包含了电子间距

$r_{12}$。实际上，变分计算的结果体现了前面 (5.7.35) 式所表示的电子相关的状况。

海特勒-伦敦的试探函数 (5.7.42) 也并不是没有包含电子的位置相关。只是，作为电子体系的单体波函数 (5.7.43)，只特殊地选择了以电子属于各个原子核形式(原子轨道函数)所构成的中性原子，从而排除了两个电子偏于某一个原子核而形成 $H^-$ 离子的情形。

如果特地以电子在分子的总势场中运动(分子轨道函数)的形式，近似地选取电子的单体波函数为 $v(r_i) = u(r_{ia}) + u(r_{ib})$ ($i = 1,2$; $u$ 是氢原子波函数)，则在 (5.7.42) 式中就可以包含与 $H^-$ 离子相应的 $u(r_{1a})u(r_{2a})$ 诸项。

读者可以根据书末的 [Slater] 等文献深入地研究一下电子相关的表示方法。

一般来说，双原子分子的哈密顿量(不考虑自旋)对于电子体系绕两个原子核连线 ($\zeta$ 轴) 的旋转是不变的。因此，电子体系的总角动量的 $\zeta$ 分量 $L_\zeta$ 是好量子数。$L_\zeta/\hbar = 0, 1, 2, \cdots$ 的状态取名为 $\Sigma, \Pi, \Delta, \cdots$。把所有电子对 $\zeta$ 轴的方位角 $\varphi_i$ 变为 $-\varphi_i$. 变换的字称写在右上角。左上角写电子体系的总自旋大小 $S$ 所表示的多重度 $2S + 1$.

特别是在两个原子核相同的分子(等极分子)中，关于核连结线中点反射的字称也是好量子数，因此，将其+、−用字母g、u[源于德语的 gerade (偶)，ungerade (奇)]表示，写在 $\Sigma, \Pi, \Delta, \cdots$ 的右下角。根据 (5.7.42) 式以后的讨论，氢分子的基态是 $^1\Sigma_g^+$。而氧分子的基态是 $^3\Sigma_g^-$。

当把分子轨道函数取为电子的单体波函数时，各电子的状态同样可以用上述方法描述.这时，轨道角动量的 $\zeta$ 分量用小写字母 $\sigma, \pi, \delta, \cdots$ 表示。前面的函数 $v(r_i) = u(r_{ia}) + u(r_{ib})$ 中，上面的正号对应的状态用 $\sigma_g$ 表示，下面的用 $\sigma_u$ 表示，上角不再加量子数。

# 第六章　近似方法

在上一章所处理的例子中，对于势阱问题和氢原子来说，用比较简单的方法就能正确决定定态的完备系。但是，却不能写出氦分子和氦原子问题的正确解。物理上碰到的力学系中，有很多问题不能用普通方法解决。近似方法实属必要。

就物理研究来说，近似方法还有一个重要作用。就是说，借助于近似，可以从复杂的力学系那种乍一看是复杂的形态之中抽出主要的方面，面对非主要方面进行相应的二次处理。这样，往往会使细微效应显现出来。

本章所考虑的方法是，给定力学系的哈密顿量之后，再近似地确定该力学系的定态及其随时间的变化。

一般，哈密顿量完全知道的情形是极为少见的，往往在开始研究时，必须先选择近似的哈密顿量。也就是要构造模型。即使在哈密顿量完全已知的情况下，为了找出力学系的主要方面（如主要运动形态），要做近似，这也可以看成是构造模型。模型有适用范围。模型恰当与否必须根据力学系所处的状况及所研究的现象来判断。

## §6.1　定态微扰论

给定力学系的哈密顿量能分成可解部分 $H_0$ 与比它小得多的 $H'$ 之和

$$H = H_0 + H', \tag{6.1.1}$$

再把问题展开成 $H'$ 的级数形式来求解，这种方法就是微扰论。$H'$ 称为微扰，$H_0$ 称为无微扰哈密顿量。所谓 $H_0$ “可解”，是指其本征值问题

$$H_0 v_n = \varepsilon_n v_n \tag{6.1.2}$$

可解。从而知道本征值 $\varepsilon_n$ 和本征函数 $v_n$ 的完备系。至于微扰 $H'$ 比$H_0$"小",因为它们都是算符,所以并不像 c 数的大小那样简单。例如,可把 $H'$ 定义为:对于任意态矢 $\psi$,有使

$$|\langle\psi, H'\psi\rangle| \leqslant a\langle\psi,\psi\rangle + b\langle\psi, H_0\psi\rangle \tag{6.1.3}$$

成立的小常数 $a$、$b \geqslant 0$ 存在。当然,这是一种说法。这样,对 $H'$ 所做的级数展开有意义。这点也还是需要证明的。严格地说,由于 $H_0$ 和 $H'$ 不一定对各种 $\psi$ 都能进行运算,因此,有必要做某些附加说明.在本讲座第四卷《量子力学》(II)第十六章中还有机会碰到这个问题。这里,我们不做一般性讨论,仅用例题阐述微扰级数中出现的几个"数学"现象,同时说明它们与物理的联系。

首先,在这一节我们介绍一种近似方法,它能决定(6.1.1)形式哈密顿量$H$属于离散本征值的本征态。详细地说,就是要研究,无微扰哈密顿量 $H_0$ 的已知本征态之中,离散本征值及属于它的本征矢受到微扰影响后将如何变化。微扰 $H'$ 也可能造成严重后果,致使 $H_0$ 的离散本征值变为连续本征值。实际上,设 $V(x)$ 为具有束缚态的势,而 $H_0 = -(h^2/2\mu)\partial^2/\partial x^2 \pm V(x)$, $H' = -V(x)$ 就是一例。在进行微扰计算时,必须首先考虑这种可能性。

另外,研究微扰对 $H_0$ 属于连续本征值的本征态的影响,是本讲座第四卷《量子力学》(II)第五部分散射理论的议题

### a) 无简并状态下的微扰

解无微扰哈密顿量 $H_0$ 的本征值问题 (6.1.2),就可以知道本征函数 $v_n$ 的完备正交归一系和各个本征值 $\varepsilon_n$。虽然可能有连续本征值或简并本征态,但是这里只注意其中无简并的离散本征值,讨论这种本征值 $\varepsilon_i$ 受到微扰 $H'$ 时会怎样移动,其相应的本征矢 $v_i$ 又会发生什么变化。

为此,让问题稍许普遍些,取实参数 $0 \leqslant \lambda \leqslant 1$,本征值问题

$$(H_0 + \lambda H')u_j = E_j u_j \tag{6.1.4}$$

的解 $E_j$ 和 $u_j$ 在 $\lambda \to 0$ 时收敛于 $\varepsilon_i$ 和 $v_i$。$\lambda = 1$ 时,$E_j$ 和

$u_i$ 分别就是(6.1.1)式中待求的本征值和本征矢。本征值的偏移是 $E_i - \varepsilon_i$。实际上，往往宁可留下 $\lambda$，以此来表示微扰的“微弱程度”。

微扰论就是用幂级数展开的形式来寻找(6.1.4)式的解：

$$u_i = v_i + \lambda u_i^{(1)} + \lambda^2 u_i^{(2)} + \cdots, \tag{6.1.5}$$

$$E_i = \varepsilon_i + \lambda E_i^{(1)} + \lambda^2 E_i^{(2)} + \cdots. \tag{6.1.6}$$

即，确定未知的 $u_i^{(s)}$ 和 $E_i^{(s)}(s = 1, 2, \cdots)$以使(6.1.4)式成立。但是，仅此还不足以得到确定的答案。实际上，由于(6.1.4)式是 $u_i$的线性方程，因此 $u_i$可以差一个复常数倍。所以，可附加 2 条件

$$\langle v_i, u_i \rangle = \langle v_i, v_i \rangle = 1. \tag{6.1.7}$$

按照(6,.1.5)式，有

$$\langle v_i, u_i^{(s)} \rangle = 0 \ (s = 1, 2, \cdots). \tag{6.1 8}$$

不过，根据这个条件确定的 $u_i$ 一般并不是归一化的。

现在，把幂级数展开式 (6.1.5) 和 (6.1.6) 代入本征值方程(6.1.4)，为方便，令 $v_i = u_i^{(0)}, \varepsilon_i = E_i^{(0)}$，则有

$$(H_0 + \lambda H')(u_i^{(0)} + \lambda u_i^{(1)} + \lambda^2 u_i^{(2)} + \cdots) = (E_i^{(0)} + \lambda E_i^{(1)} + \lambda^2 E_i^{(2)} + \cdots)(u_i^{(0)} + \lambda u_i^{(1)} + \lambda^2 u_i^{(2)} + \cdots).$$

由于要求它对于 $0 \leqslant \lambda \leqslant 1$ 是恒等式，因此把两边按 $\lambda$ 的幂来整理时，同幂的项彼此必须相等。于是，得到

$$H_0 u_i^{(s)} + H' u_i^{(s-1)} = \sum_{r=0}^{s} E_i^{(r)} u_i^{(s-r)} \ (s = 1, 2, \cdots). \tag{6.1.9}$$

因 $s = 0$ 的表达式当然与(6.1.2)式一致，故没有包含在其中。

取(6.1.9)式与 $v_i$ 的内积。根据 $H_0$ 的厄米性，即 $\langle v_i, H_0 u_i^{(s)} \rangle = \langle H_0 v_i, u_i^{(s)} \rangle$，再考虑(6.1.2)和(6.1.8)两式，就有

$$E_i^{(s)} = \langle v_i, H' u_i^{(s-1)} \rangle. \tag{6.1.10}$$

根据此式，若知道了 $u_i^{(s-1)}$，就可以求出 $E_i^{(s)}$。另一方面，取(6.1.9)式与 $v_n(n \neq i)$ 的内积，再利用 $H_0$ 的厄米性，则有

$$(\varepsilon_n - \varepsilon_i)\langle v_n, u_i^{(s)} \rangle = -\langle v_n, H' u_i^{(s-1)} \rangle + \sum_{r=1}^{s-1} E_i^{(r)} \langle v_n, u_i^{(s-r)} \rangle. \tag{6.1.11}$$

因为右边 $r = 0$ 的项已经移到左边，所以在右边只出现从$E_i^{(1)}$、$u_i^{(1)}$到 $E_i^{(s-1)}$、$u_i^{(s-1)}$ 的项.若能知道这些量，就可从此式求出$\langle v_n, u_i^{(s)}\rangle$.由于$\{v_n\}$是完备正交归一系，因此，考虑到(6.1.8)式后，就可以求出 $u_i^{(s)}$：

$$u_i^{(s)} = \sum_{n \neq i} v_n \langle v_n, u_i^{(s)}\rangle .$$

即

$$u_i^{(s)} = \sum_{n \neq i} \frac{v_n}{\varepsilon_i - \varepsilon_n} \left[\langle v_n, H' u_i^{(s-1)}\rangle - \sum_{r=1}^{s-1} E_i^{(r)} \langle v_n, u_i^{(s-r)}\rangle\right],$$

或简写为

$$u_i^{(s)} = \frac{1}{\varepsilon_i - H_0} Q_i \left[H' u_i^{(s-1)} - \sum_{r=1}^{s-1} E_i^{(r)} u_i^{(s-r)}\right], \quad (6.1.12)$$

其中

$$Q = 1 - |v_i\rangle\langle v_i|$$

是投影到与$v_i$正交的子空间的算符。这样，根据所得到的(6.1.10)和(6.1.12)两式，就可以依次定出 $E_i^{(s)}$ 和 $u_i^{(s)}(s = 1, 2, \cdots)$.

首先，在(6.1.10)式中令 $s = 1$，则

$$E_i^{(1)} = \langle v_i, H' v_i\rangle . \quad (6.1.13)$$

在(6.1.11)式中令 $s = 1$，得到

$$\langle v_n, u_i^{(1)}\rangle = \frac{\langle v_n, H' v_i\rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_n} \quad (n \neq i). \quad (6.1.14)$$

像(6.1.12)式那样求出$u_i^{(1)}$，再回到(6.1.10)式，令 $s = 2$，便有

$$E_i^{(2)} = \sum_{n \neq i} \frac{\langle v_i, H' v_n\rangle\langle v_n, H' v_i\rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_n} . \quad (6.1.15)$$

再由 $s = 2$ 时的(6.1.11)式 $(n \neq i)$，可以得到

$$\langle v_n, u_i^{(2)}\rangle = \sum_{m \neq i} \frac{\langle v_n, H' v_m\rangle\langle v_m, H' v_i\rangle}{(\varepsilon_i - \varepsilon_n)(\varepsilon_i - \varepsilon_m)}$$

$$-\frac{\langle v_j, H'v_j\rangle\langle v_n, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)^2}. \tag{6.1.16}$$

由此可定出 $u_j^{(2)}$.

再回到(6.1.10)式,令 $s=3$,可得

$$E_j^{(3)}=\sum_{n\neq j}\sum_{m\neq j}\frac{\langle v_j, H'v_n\rangle\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)(\varepsilon_j-\varepsilon_m)}$$

$$-\sum_{n\neq j}\frac{\langle v_j, H'v_j\rangle\langle v_j, H'v_n\rangle\langle v_n, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)^2}. \tag{6.1.17}$$

如此循环,可以延续多次. 这种方式特别适合于电子计算机.

$\lambda^s E_j^{(s)}$ 称为 $s$ 级微扰能. 在上述(6.1.15)、(6.1.17)、…表达式中,求和的那些状态叫做**中间态**,例如,常把(6.1.15)式描述为,最初处于 $v_i$的体系受微扰$\lambda_{H'}$作用而跃迁到中间态$v_n$,再经微扰$\lambda H'$回到 $v_i$. 因为跃迁到中间态的过程中能量是不守恒的,所以称之为**虚跃迁**. 由于受微扰的状态是以上述(6.1.14),(6.1.16),…为系数的无微扰状态的叠加

$$u_j=v_j+\sum_{n\neq j}v_n\left\{\lambda\frac{\langle v_n, H'v_i\rangle}{\varepsilon_j-\varepsilon_n}+\lambda^2\right.$$

$$\times\left(\sum_{m\neq j}\frac{\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)(\varepsilon_j-\varepsilon_m)}\right.$$

$$\left.\left.-\frac{\langle v_j, H'v_j\rangle\langle v_n, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)^2}\right)+\cdots\right\}, \tag{6.1.18}$$

因此,全用无微扰状态的描述确实是成立的,根本用不着中间态之类的解释. 费曼另有见地地解释了微扰论,使物理图像与数学形式一致.

**b) 微扰展开式的收敛性. 渐近级数**

我们来把上述公式应用于**非谐振子**. 其哈密顿量是

$$H=\frac{1}{2\mu}p^2+\frac{\mu\omega^2}{2}x^2+\lambda x^4.$$

当然,$x$ 是振子坐标,其共轭动量是 $p$. 为计算简单,引入无量纲

变量 $\bar{p}$ 和 $\bar{x}$：

$$\bar{p} = \sqrt{1/\mu\hbar\omega}\, p,\ \ \bar{x} = \sqrt{\mu\omega/\hbar}\, x;\ \ [\bar{p},\bar{x}] = -i.$$

于是，有

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(\bar{H}_0 + \lambda\bar{H}'), \tag{6.1.19}$$

其中

$$\bar{H}_0 = \bar{p}^2 + \bar{x}^2,\ \ \bar{H}' = \bar{x}^4,\ \ \lambda = 2\lambda\hbar/\mu^2\omega^3.$$

可以把这个 $\bar{H}_0$ 看作无微扰哈密顿量，把 $\bar{H}'$ 看作微扰.

为避免麻烦，在下面的计算中均略去符号上的一横. 也就是说，用满足 $[p,x] = -i$ 的变量构成

$$H_0 = p^2 + x^2, H' = x^4. \tag{6.1.20}$$

再考虑 $H = H_0 + \lambda H'$. 该$H$的 $\frac{\hbar w}{2}$ 倍才是上面的原哈密顿算符.

因为 $H_0$ 是谐振子哈密顿量，本征函数和本征值完全掌握，所以符合微扰论的要求. 用 §3.5 的粒子数表象，产生和湮没算符为

$$a^\dagger = (x - ip)/\sqrt{2}, a = (x + ip)/\sqrt{2}; [a,a^\dagger] = 1.$$

于是，$H = 2a^\dagger a + 1$，本征函数和本征值为

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle, \varepsilon_n = 2n + 1 (n = 0,1,2,\cdots),$$

其中，原先写成 $v_n$ 的本征函数，现在用右矢符号写为 $|n\rangle$. 联想起公式(3.5.14)，有

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle,\ \ a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle.$$

微扰 $H'$ 变成

$$H' = \left(\frac{a^\dagger + a}{\sqrt{2}}\right)^4 = \frac{1}{4}(a^\dagger + 4a^{\dagger 3}a + 6a^{\dagger 2}a^2 + 4a^\dagger a^3 + a^4 + 6a^{\dagger 2} + 6a^2 + 12a^\dagger a + 3). \tag{6.1.21}$$

为了便于进行微扰计算，将上式乘以 $|n\rangle$，再求出结果

$$H'|n\rangle = \frac{1}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}$$

$$\times |n+4\rangle + \frac{1}{2}(2n+3)\sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle$$

$$+ \frac{3}{4}(2n^2+2n+1)|n\rangle + \frac{1}{2}(2n-1)$$

$$\times \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle + \frac{1}{4}\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}$$

$$\times |n-4\rangle. \qquad (6.1.22)$$

现在，我们用微扰论公式来求无微扰状态$|j\rangle$中的能量移动。该状态没有简并，根据(6.1.13)式，有

$$E_j^{(1)} = \langle j|H'|j\rangle = \frac{3}{4}(2j^2+2j+1).$$

这个计算利用了(6.1.22)式($n=j$)。然后，根据(6.1.15)式，再次利用(6.1.22)式，则有

$$E_j^{(2)} = \sum_{n\neq j} \frac{|\langle n|H'|j\rangle|^2}{2(j-n)} = -\frac{1}{16}(34j^3+51j^2+59j+21).$$

由(6.1.17)式求 $E_j^{(3)}$ 的计算比较复杂，这儿从略。我们注意到，其结果是以下式所示的那些项为代表的许多项之和：

$$E_j^{(3)} = (\varepsilon_{j+4}-\varepsilon_j)^{-2}\langle j|H'|j+4\rangle\langle j+4|H'|j$$

$$+4\rangle\langle j+4|H'|j\rangle + \cdots$$

$$= \frac{(j+4)!}{4^2 j!(\varepsilon_{j+4}-\varepsilon_j)^2}\frac{3}{4}[2(j+4)^2$$

$$+2(j+4)+1] + \cdots.$$

其中，$(\varepsilon_{j+4}-\varepsilon_j) = 2^2\cdot 4^2$。一般地，$s=2r+1$ 次项是

$$E_j^{(2r+1)} = \frac{(j+4r)!}{4^{2r}j!\,2^{6r}(r!)^2}\frac{3}{4}[2(j+4r)^2$$

$$+2(j+4r)+1] + \cdots$$

那样许多项之和，其值随着 $s=2r+1$ 急剧增大，偶数次 $E_j^{(2r)}$ 同样如此。若真是这样，则无论 $\lambda$ 多么小，微扰级数(6.1.6)也只能发

散。

为了看到这点，特别地取 $j=0$，按照上述迭代法用电子计算机来计算 $E_0^{(s)}$。结果[1]如表 6.1 所示。

**表 6.1　用微扰论计算非谐振子基态能**

| $s$ | $E_0^{(s)}=A\times 10^B$ | | $E_0=\sum_{r=0}^{s}\lambda^r E_0^{(r)}$ |
|---|---|---|---|
| | $A$ | $B$ | $\lambda=0.1$ • |
| 0 | | | 1. |
| 1 | 0.75 | 0 | 1.075 |
| 2 | −0.131 250 | 1 | 1.061 875 |
| 3 | 0.520 312 5 | 1 | 1.067 078 125 |
| 4 | −0.301 611 328 125 | 2 | 1.064 062 011 718 |
| 5 | 0.223 811 279 297 | 3 | 1.066 300 124 512 |
| 6 | −0.199 946 292 114 | 4 | 1.064 300 661 591 |
| 7 | 0.207 770 894 852 | 5 | 1.066 378 370 539 |
| 8 | −0.245 689 177 287 | 6 | 1.063 921 478 767 |
| 9 | 0.325 602 188 775 | 7 | 1.067 177 500 654 |
| 10 | −0.478 104 310 601 | 8 | 1.062 396 457 548 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| 15 | 0.116 016 674 658 | 15 | 1.145 532 250 948 |
| 16 | −0.271 975 761 525 | 16 | 0.873 556 489 424 |
| 17 | 0.677 879 469 298 | 17 | 1.551 435 958 721 |
| 18 | −0.179 021 019 502 | 19 | −0.238 774 236 294 |
| 19 | 0.499 401 192 112 | 20 | 4.755 237 684 825 |
| 20 | −0.146 751 401 020 | 22 | −9.919 902 417 219 |
| 21 | 0.453 113 629 668 | 23 | 35.391 460 549 630 |
| 22 | −0.146 665 237 004 | 25 | −111.273 776 454 102 |
| 23 | 0.496 628 306 946 | 26 | 385.354 530 492 165 |
| | | | 准确值<br>1.065 285 509 544 |

由该表可知，基态能量 $E_0$ 的微扰展开式系数 $E_0^{(s)}$ 的绝对值确实随着次数 $s$ 急剧增大。但是，$s$ 每增加 1，$E_0^{(s)}$ 的正负就交错一次，这一事实，以后将有重要意义。

给出 $E_0$ 的级数(6.1.6)是发散的。但是，该级数并非毫无意义。将其截止到 $N$ 次项，得到

1）根据斋藤慎氏。

$$E_0^{[N]} \equiv \sum_{s=0}^{N} \lambda^s E_0^{(s)}, \tag{6.1.23}$$

再把它与用数值积分之类方法另外求得的本征值方程

$$(p^2 + x^2 + \lambda x^4)u_0(x) = E_0 u_0(x),\ p \equiv -id/dx$$

的"真" $E_0$ 值比较。

看看表 6.1，这是 $\lambda = 0.1$ 的情形。微扰的$N$次近似值 $E_0^{[N]}$在 $N = 4$ 时特别接近于真值，误差小到 0.09%。由于没有用微扰论进行修正的 $E_0^{[0]} = 1$，误差为 6%，所以，修正的确是有意义的！不过，不能进一步取更高级的近似。

对于更大的 $\lambda = 0.2$，当 $N = 4$ 时，$E_0^{[N]}$ 也特别接近于真值 $E_0 = 1.11829265436$，而误差有 1.9% 之多。对于小一些的 $\lambda = 0.001$，$N = 5$ 时 $E_0^{[N]}$ 与真值 $E_0 = 1.00074869267$ 一致，纵然近似到 $N = 41$，$E_0^{[N]}$ 的这些位数上的数毫无变动。当然，次数进一步升高的话，级数迟早都会"开始发散"。

这种情形下的能量微扰级数(6.1.6)在数学上属于所谓**渐近级数**。一般像(6.1.6)那样的表达式本身是发散级数，当 $\lambda \downarrow 0$，真值 $E_0(\lambda)$ 与$N$次部分和 $E_0^{[N]}(\lambda)$ 之差为

$$E_0(\lambda) - E_0^{[N]}(\lambda) = 0(\lambda^N)(N = 1, 2, \cdots, M),$$

这时，该表达式叫做$M$次渐近级数或 $E_0(\lambda)$ 的渐近展开。其中，右边的 $0(\lambda^N)$ 表示当 $\lambda \downarrow 0$ 时像 $\lambda^N$一样趋近于零的量。所以，实际应用中，若 $\lambda$ 很小，则可以使用部分和逼近真值的发散级数。

非谐振子(6.1.20)是$M = \infty$的情况。这时微扰级数(6.1.6)发散，确实是在预料之中的。这是因为，如果(6.1.6) 式收敛于某个 $\lambda = \lambda_0$，由于它是幂级数，因此，在 $|\lambda| \leqslant \lambda_0$ 的复数 $\lambda$ 范围内应该定义一致收敛的 $\lambda$ 的解析函数；另一方面，以势能 $x^2 + \lambda x^4$ 可以预料，$\lambda < 0$ 时，$H = H_0 + \lambda H^1$ 没有离散本征值。

在微扰展开式(6.1.6)只是渐近级数的情况下，为了通过它求出接近真值 $E_i(\lambda)$ 的近似值，**帕戴** (Padé) **近例**是有用的([Baker])。应用(6.1.6)式确定 $\lambda$ 的$M$次和$N$次多项式 $P_M$ 和 $Q_N$，使

得

$$(E_i^{(0)} + \lambda E_i^{(1)} + \lambda^2 E_i^{(2)} + \cdots)Q_N(\lambda) - P_M(\lambda) = O(\lambda^{N+M+1})$$

成立。于是有

$$E_i^{[N,M]}(\lambda) \equiv P_M(\lambda)/Q_N(\lambda).$$

称之为 $E_i(\lambda)$ 的 $[N,M]$ 帕戴近似。对于非谐振子(6.1.20),已经证明([Simon]),其 $[N,N\pm J]$ 帕戴近似 $(J=0,1,2,\cdots)$ 当 $N\to\infty$ 时单调收敛于真值 $E_i(\lambda)$。证明的关键之一是，在前面表 6.1 中所注意到的“符号交错”。我们再来看看基态能量的收敛状况(参看表 6.2)。令人惊奇的是,$\lambda = 10$ 时就可以收敛。

**表 6.2　非谐振子的基态能**

$[N,M]$ 帕戴近似(齋藤慎氏计算)

| $N$ | $\lambda=0.1$ | $\lambda=0.2$ | $\lambda=1$ | $\lambda=10$ |
|---|---|---|---|---|
| 0 | 1. | 1. | 1. | 1. |
| 1 | 1.063 829 787 234 | 1.111 111 111 111 | 1.272 727 272 727 | 1.405 405 405 405 |
| 2 | 1.065 217 852 491 | 1.117 540 578 276 | 1.348 289 096 708 | 1.647 997 235 311 |
| 5 | 1.065 285 455 329 | 1.118 288 405 207 | 1.388 075 603 390 | 2.024 376 176 003 |
| 10 | 1.065 285 509 535 | 1.118 292 646 574 | 1.392 102 495 142 | 2.262 066 864 483 |
| 15 | 1.065 285 509 544 | 1.118 292 654 314 | 1.392 325 237 409 | 2.353 761 618 494 |
| 19 | 1.065 285 509 544 | 1.118 292 654 364 | 1.392 342 893 100 | 2.379 900 476 274 |
| 20 | 1.065 285 509 544 | 1.118 292 654 365 | 1.392 343 886 385 | 2.405 475 148 908 |

帕戴近似对本征函数也是有效的,用帕戴近似先求出本征值，再求本征函数,使求解微分方程变得简单一些。

下面讨论**斯塔克**(Stark)**效应**。

所谓斯塔克效应是,当由外部对原子加一均匀静电场 $F$ 时,原子的能级将发生偏移，因而原子发出的光的频率也发生偏移。作为微扰论的好题材,它常出现在教科书中。但是,正如稍后将要说明的那样,在这种情况下,加上微扰的哈密顿量没有离散本征值。问题在于,微扰级数(6.1.6)或(6.1.23)究竟取了什么近似。

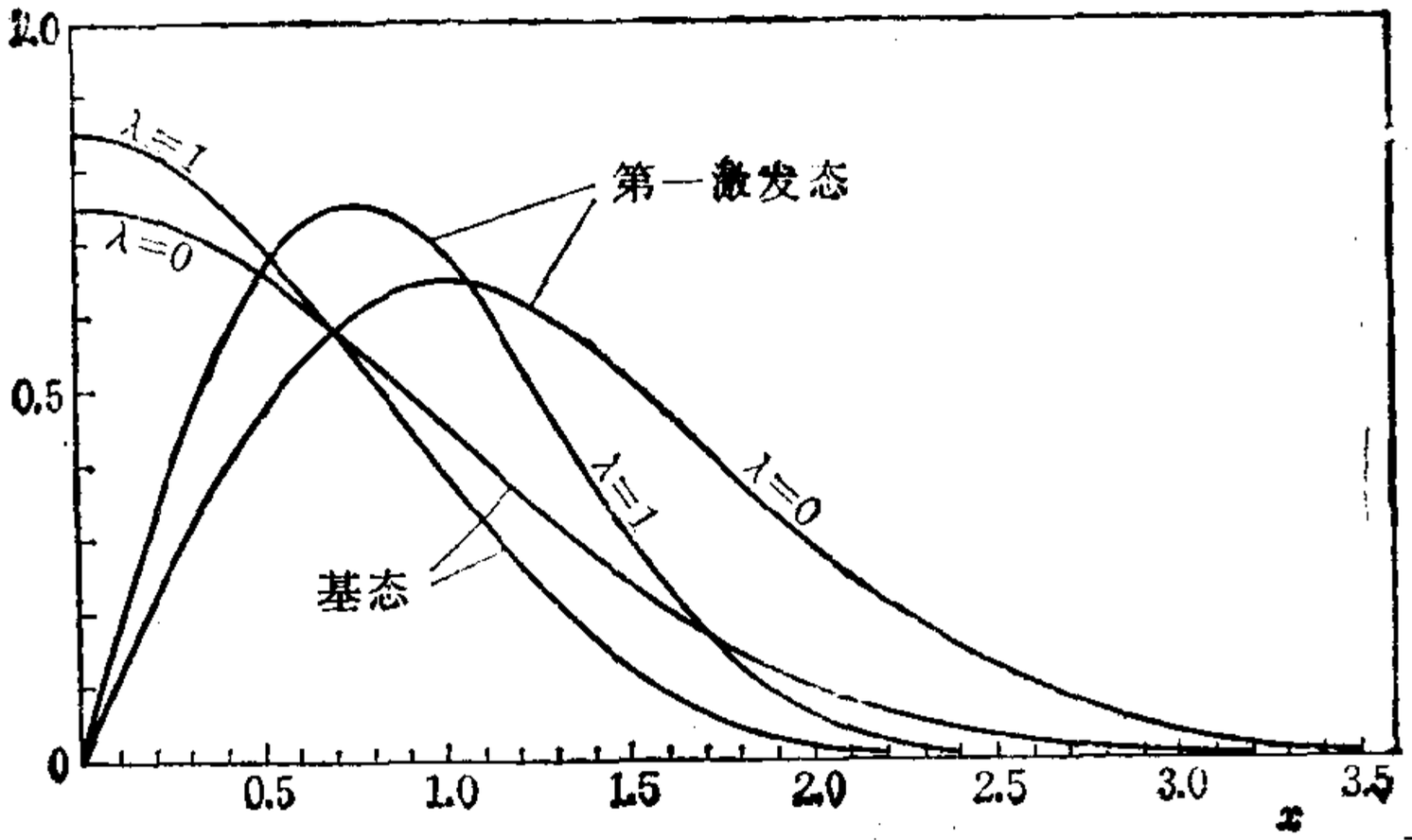



图 6.1 $H = p^2 + x^2 + \lambda x^4$ 的本征函数. 已归一化. 因为 $\lambda > 0$, 所以微扰 $H' = x^4$ 迫使波函数向原点方向偏移,在第一激发态, 该效应更明显. 原因是,这时无微扰波函数扩展到大微扰区较多

为了简单,只讨论氢原子的情形,用 §5.5 中的记号,哈密顿量 $H = H_0 + \lambda H'$ 变成

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{e^2}{r}, \quad \lambda H' = eF_z. \tag{6.1.24}$$

其中,取外场 $\boldsymbol{F}$ 的方向为 $z$ 轴. 为了把 $\lambda H'$ 分成 $\lambda$ 和 $H'$,可以利用玻尔半径 $a_B$ 和 $H_0$ 特有的能量 $e^2/a_B$而使其无量纲化,即

$$H' = \left(\frac{e^2}{a_B}\right)\left(\frac{z}{a_B}\right), \quad \lambda \equiv \frac{F}{\frac{e}{a_B^2}}.$$

$\lambda$ 是外场 $\boldsymbol{F}$ 与在玻尔轨道上原子核所形成的电场 $e/a_B^2 = 5.14 \times 10^9$(V/cm) 之比. 若 $F = 10^6$(V/cm), 则 $\lambda = 1.94 \times 10^{-4}$.

由于(6.1.24)式中的 $H_0$ 是氢原子的哈密顿量, 因此具有离散本征值. 由势能项 $-e^2/r + eF_z$ 可见,加了微扰 $\lambda H'$ 之后离散本征值就会消失(参见图 6.2). 在外场的作用下,一直被原子核束缚着的电子由隧道效应而跑到无限远处,因此,电子的能量已经不是离散的了, 应该呈现出连续谱. 但是,按照微扰论的公式,有限次

$E_{\bullet}^{[N]}$ 应该多少给出业已偏移的离散值. 这样，作为它们的差而计算出的光能正好反映了外场 $F$ 的效应，应与实验结果吻合.

微扰的数学理论([Kato]，第八章 §5) 用所谓**谱线密度集中**的概念解决了这个矛盾. 就是说，原子加上外场之后，电子能量确实变成连续谱，但是，已经证明，这时的态密度明显集中于离散值 $E_i(\lambda)$ 之上，于是，微扰级数 $\sum\lambda^i E_j^{(i)}$ 便给出该 $E_i(\lambda)$ 的渐近展开.

从物理上讲，隧道效应使电子的束缚态具有有限的寿命 $\tau$，于是，其能量有 $\hbar/\tau$ 大小的不确定性. 这就是上述态密度峰的幅度. 我们来讨论一下 $\hbar/\tau$.

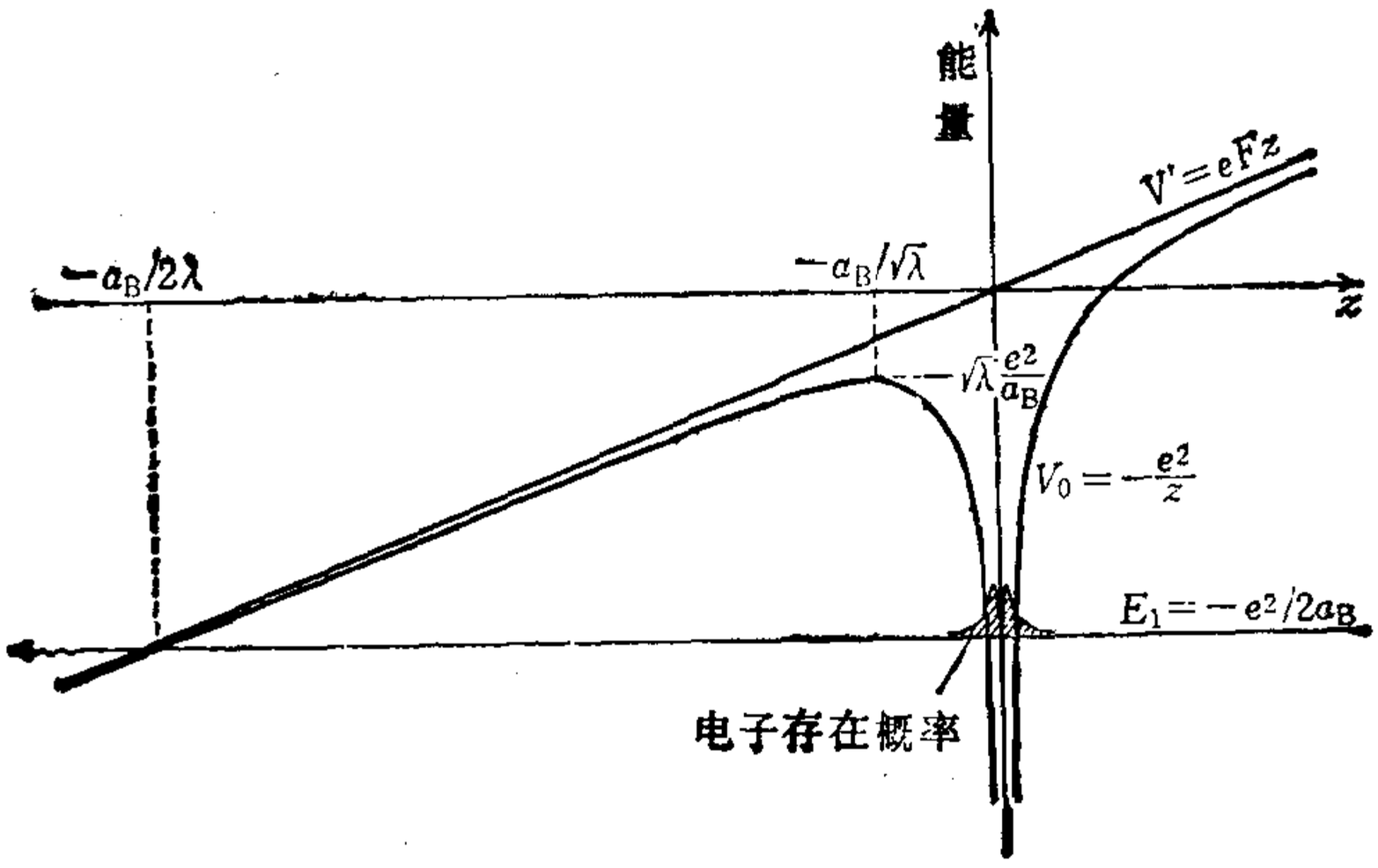



图 6.2 伴随斯塔克效应的隧道效应. $\lambda\equiv F/(e/a_B^2)$ 是外场与原子核作用于电子的电场之比

根据图 6.2，电子隧道处的势垒应该厚 $a_B/2\lambda$，高 $e^2/2a_B$，因此，用 WKB 近似来估计，电子碰撞势垒时发生隧道效应的概率 $P$ 约为

$$P\sim\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\frac{a_B}{2\lambda}\sqrt{\frac{2\mu e^2}{2a_B}}\right]=\exp\left(-\frac{1}{2}\lambda\right).$$

势垒是三角形的，考虑电子不一定沿 $z$ 轴方向发生隧道效应，于是指数函数的指数绝对值稍有减小. 另外，从束缚电子的速度 $v\sim$

$\sqrt{e^2/\mu a_B}$ 来看，电子与势垒碰撞的频率大约是 $v/a_B \sim (e^2/a_B)\hbar$。它乘以 $P$ 就是单位时间内发生隧道效应的次数 $1/\tau$，故

$$\hbar/\tau = e^2/a_B \exp\left(-\frac{1}{2}\lambda\right). \tag{6.1.25}$$

对于前面所考虑的 $F = 10^6(\mathrm{V/cm})$ 来说，它的大小为 $e^{-\frac{1}{2}\lambda} \sim 10^{-1000}$！

那么，态密度的峰值 $E_j(\lambda)$ 会从无微扰本征值 $\varepsilon_j$ 偏移多少呢？ 偏移会大于峰的幅度吗？ 根据给出 $E_j(\lambda)$ 渐近展开式的(6.1.6)式，让我们就氢原子的基态来计算一下。如§5.5 中所见，无微扰哈密顿量(6.1.24)的本征态用 3 个一组的量子数 $j = (\nu, l, m)$ 标记，这儿明确写成 $|\nu, l, m\rangle$。在属于离散谱的状态 (5.5.14)式中，$\nu = n$，而在连续谱的状态 (5.5.16) 式中，$\nu = k$。基态是 $|1,0,0\rangle$。

(6.1.24)式中的微扰项是 $H' = (e^2/a_B)(r/a_B)\cos\theta$。由此出发，再借助于 $Y_{lM}$ 的正交归一性质和(5.2.26)式，便可以得到

$$\langle \nu', l', m'|H'|\nu, l, m\rangle \neq 0 \Rightarrow |l' - l| = 1 \text{且} m' = m. \tag{6.1.26}$$

像这样，为使两个态的微扰矩阵元不等于零，量子数应满足的必要条件称为**选择定则**。根据选择定则可以知道，一级微扰能(6.1.13)消失：

$$E^{(1)}_{100} = \langle 1,0,0|H'|1,0,0\rangle = 0.$$

因为此时中间态数目很多，所以不容易计算二级微扰能(6.1.15)。有了上述选择定则，中间态便只限于 $(l, m) = (1, 0)$，从而由(5.2.26)式可得

$$\langle \nu, 1, 0|H'|1,0,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} I_\nu \frac{e^2}{a_B}. \tag{6.1.27}$$

其中，把(5.5.14)和(5.5.16)两式中的径向函数一并写为 $R_{\nu l}$ 后，有

$$I_\nu \equiv \int_0^\infty R_{\nu 1}(r)\frac{r}{a_B}R_{10}(r)r^2 dr.$$

对属于离散谱的 $\nu = n$，可以利用(5.5.13)式来计算，得到

$$I_n = (2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}(n+1)^{-2n-5})^{\frac{1}{2}}. \qquad (6^-.1.28)$$

因此，$n = 2,3,\cdots$的所有状态作为中间态均对 (6.1.15) 式有贡献。再加上连续谱时 $\nu = k, \varepsilon_k = \hbar^2 k^2/2\mu \equiv \bar{\varepsilon}_k(e^2/2a_B)$ 的贡献，便有

$$E^{(2)}_{100} = -\frac{2e^2}{3a_B}\left[\sum_{n=2}^{\infty}\frac{|I_n|^2}{1-1/n^2} + \sum_k \frac{|I_k|^2}{1+\bar{\varepsilon}_k}\right]. \qquad (6.1.29)$$

表6.3给出了离散谱的 $I^2_n$ 值。借助于它和求和定则，有

$$\sum_\nu |I_\nu|^2 = \frac{3}{a_B^2}\sum_{\nu lm}|\langle \nu,l,m|z|1,0,0\rangle|^2$$

$$= \frac{3}{a_B^2}\langle 1,0,0|z^2|1,0,0\rangle = 3,$$

连续谱贡献之和为 $\sum_k |I_k|^2 = 0.85$，因为 $\varepsilon_k \geqslant 0$，所以可由(6.1.29)式粗略估计出

$$-(2e^2/3a_B)\left[D + \sum_k |I_k|^2\right] < E^{(2)}_{100} < -(2e^2/3a_B)D,$$

其中

$$D = \sum_{n=2}^{\infty} |I_n|^2/(1-n^{-2}) = 2.740.$$

因此得到

$$-2.39(e^2/a_B) < E^{(2)}_{100} < -1.83(e^2/a_B).$$

在 (6.1.29) 式的 $\sum_k |I_k|^2/(1+\varepsilon_k)$ 中，与基态束缚电子动能相当的 $k$ 附近的贡献也许会大一些。这样，它变为 $\sum_k |I_k|^2/(1+\langle\varepsilon\rangle)$，取 $\langle\bar{\varepsilon}\rangle \sim 1$，则 $E^{(2)}_{100} \sim -2.11(e^2/a_B)$。

用其它计算方法([梅沢]，$p$253)准确求得

$$E^{(2)}_{100} = -2.25(e^2/a_B).$$

取这个值，近似到 $\lambda^2$，有

表 6.3 $\left(\int_0^\infty R_{nl}(r)\,(r/a_B)\,R_{n'l'}(r)\,r^2dr\right)^2$ 值

请把最后一行的合计与表 5.5 的$\langle r^2\rangle$比较

| $(n', l')$ | 1s | 2s | 2p | |
|---|---|---|---|---|
| $(n, l)$ | $n$p | $n$p | $n$s | $n$d |
| $n=1$ | — | — | 1.67 | — |
| 2 | 1.665 | 27.00 | 27.00 | — |
| 3 | 0.267 | 9.18 | 0.88 | 22.52' |
| 4 | 0.093 | 1.64 | 0.15 | 2.92 |
| 5 | 0.044 | 0.60 | 0.052 | 0.95 |
| 6 | 0.024 | 0.29 | 0.025 | 0.41 |
| 7 | 0.015 | 0.17 | 0.014 | 0.24 |
| 8 | 0.010 | 0.10 | 0.009 | 0.15 |
| $n=9\sim\infty$ 的总积 | 0.032 | 0.31 | 0.025 | 0.42 |
| 渐近公式 | $4.7n^{-3}$ | $44.0n^{-3}$ | $3.7n^{-3}$ | $58.6n^{-3}$ |
| 离散谱之和 | 2.150 | 39.30 | 29.820 | 27.62 |
| 连续谱之和 | 0.850 | 2.70 | 0.180 | 2.38 |
| 合计 | 3.000 | 42.00 | 30.00 | 30.00 |

[Bethe], p. 350 表之一部

$$E_{100}(\lambda) - \varepsilon_{100} = -2.25\lambda^2(e^2/a_B) = -2.25a_B^3F^2. \quad (6.1.30)$$

附带提一下，利用基态原子的**极化率** $\alpha$，电场 $F$ 所引起的这一能量变化应该表示为 $\alpha F^2/2$。因此，$\alpha = 4.5a_B^3$。实际上，根据 (6.1.5) 式求出受到微扰的基态波函数 $u_{100}$，再计算偶极矩，得

$$-e\langle u_{100}, zu_{100}\rangle = \alpha F.$$

在该近似中，可认为 $u_{100}$ 是归一化的，左边不必再除以 $\langle u_{100}, u_{100}\rangle$。

这样一来就清楚了，由电场而引起的氢原子基态解的偏移 (6.1.30)，远大于其幅度(6.1.25)。这是因为，在 $F = 10^6$(V/cm)的电场中 $\lambda = 1.94 \times 10^{-4}$。

正常处理斯塔克效应的哈密顿量，只能是连续谱。但是，由于态密度集中，使该谱似乎呈离散状。抓住其本质，就可进行简单的计算。所以，应该说，这时用微扰论是符合本章开始所叙述的近似方法的精神的。

概言之，能量本征值和本征函数的微扰级数在条件 (6.1.3)之

下的收敛半径一般是有限的.这样的微扰称为**正则微扰**. 但是,现实中微扰级数发散的居多. 尽管如此,只要系数 $E_j^{(s)}$, $u_j^{(s)}$ 不成为发散积分,它就是次数确定的渐近级数. 详见 [Kato].

请读者针对下列各 $H = H_0 + \lambda H'$, 先求出准确的本征值和本征函数, 再看能否把它们按 $\lambda$ 的幂展开, 如果能展开成微扰级数, 则讨论其性质:

$$\text{(i)}\ H_0 = -d^2/dx^2 + x^2, \quad H' = x;$$

$$\text{(ii)}\ H_0 = -d^2/dx^2 + x^2, \quad H' = x^2;$$

$$\text{(iii)}\ H_0 = -d^2/dx^2, \quad H' = x^2;$$

$$\text{(iv)}\ H_0 = \Delta, \quad H' = \frac{1}{r};$$

其中 $-\infty < x < \infty$,而 (iv) 是三维问题. $\Delta$是拉普拉斯算符. $r$ 是到原点的距离. 对于(iii)和(iv)来说, 把 $x$ 和 $r$ 限制在有限范围$[0, L]$内,求出 $H_0$ 的本征函数,再实地进行微扰计算, 是很有趣的. 如在其结果中令 $L \to \infty$,又将如何?

### c) 简并态的微扰

在微扰论中, 我们还要讨论一种无微扰状态受到微扰时如何变化,这种状态的能级是简并的. 于是, a) 小节的计算不再适用了. 所谓能级 $\varepsilon_j$ 简并是指,有两个以上线性独立的状态 $v_{j\alpha}(\alpha = 1,2,\cdots,A)$ 属于它 ($H_0 v_{j\alpha} = \varepsilon_j v_{j\alpha}$; $A$ 是简并度), 从而会导致(6.1.14)式或(6.1.15)式的分母为零. 以后均假设 $\{v_{j\alpha}\}_{\alpha=1,\cdots,A}$ 都是正交归一化的.

虽然微扰公式中的分母为零,但是,就拿(6.1.14)和(6.1.15)两式来说,即使在所讨论的能级 $\varepsilon_j$ 出现简并, 它的某些状态之间微扰 $H'$ 的非对角矩阵元也不为零,不会出问题. 换句话说,可以有这种情况,在 $\varepsilon_j$ 的简并态所张成的 $A$ 维子空间 $H_j$ 中,以$\{v_{j\alpha}\}$为基,微扰 $H'$ 是对角的. 那么,在一般情况下, 是否可以重新选择 $H_j$ 的基而使 $H'$ 对角化,然后再进行微扰论的计算? 实际并非那么简单. 这是因为,即使让 $H'$ 在 $H_j$ 中对角化了, (6.1.18)式的

分母也可能为零.

问题在于,一开始就必须选好无微扰状态.当无微扰时,$v_{j\alpha}$ 的任意线性组合也是哈密顿量的本征矢,而当加上微扰时,如果 $H=H_0+\lambda H'$ 的本征矢照例能像(6.1.5)式那样展成 $\lambda$ 的幂,那么,在 $\lambda\to 0$ 时,它就会趋于特定的线性组合 $\sum_{\alpha=1}^{A} c_\alpha v_{j\alpha}$. 这意味着,开始进行微扰论计算时,就必须选取无微扰状态的这种特定组合 $\sum_{\alpha=1}^{A} c_\alpha v_{j\alpha}$.

所以,代替(6.1.5)式,我们假定

$$u_j=\sum_{\alpha=1}^{A} c_\alpha v_{j\alpha}+\lambda u_j^{(1)}+\lambda^2 u_j^{(2)}+\cdots, \qquad (6.1.31)$$

重新进行 a) 小节的计算. 上式中 $c_\alpha$ 是未知数,(6.1.6) 式可原封不动地使用.

把(6.1.31)和(6.1.6)两式代入本征值方程(6.1.4),要求左右两边 $\lambda$ 相同幂的项分别相等,$\lambda^0$ 的等式是显然的,从$\lambda^1$ 的项得到

$$H_0u_j^{(1)}+\sum_\alpha c_\alpha H'v_{j\alpha}=E_j^{(1)}\sum_\alpha \alpha v_{j\alpha}+\varepsilon_j u_j^{(1)}. \qquad (6.1.32)$$

取其与 $v_{j\beta}$ 的内积,根据 $H_0$ 的厄米性,由两边消掉$\langle v_{j\beta},H_0u_j^{(1)}\rangle=\langle H_0v_{j\beta},u_j^{(1)}\rangle$, 便可得到 $c_\alpha$ 的联立线性方程组

$$\sum_\alpha[\langle v_{j\beta},H'v_{j\alpha}\rangle-E_j^{(1)}\delta_{\beta\alpha}]c_\alpha=0. \qquad (6.1.33)$$

因为这是齐次方程组,所以它具有不全为零的 $c_\alpha$ 的条件是,其系数行列式必须等于零:

$$\begin{vmatrix}\langle v_{j1},H'v_{j1}\rangle-E_j^{(1)} & \langle v_{j1},H'v_{j2}\rangle & \cdots\langle v_{j1},H'v_{jA}\rangle\\ \langle v_{j2},H'v_{j1}\rangle & \langle v_{j2},H'v_{j2}\rangle-E_j^{(1)} & \cdots\langle v_{j2},H'v_{jA}\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots\ \vdots\\ \langle v_{jA},H'v_{j1}\rangle & \langle v_{jA},H'v_{j2}\rangle & \cdots\langle v_{jA},H'v_{jA}\rangle-E_j^{(1)}\end{vmatrix}=0, \qquad (6.1.34)$$

这样就得到了决定一级微扰能 $E_j^{(1)}$ 的方程(**称为久期方程**)。由于它是 $A$ 阶代数方程,因此,一般有 $A$ 个根 $E_{j\gamma}^{(1)}(\gamma = 1, 2, \cdots, A)$。

现在,假设没有重根, $E_{j\gamma}^{(1)} \neq E_{j\gamma'}^{(1)}(\gamma = \gamma')$。这样,对应于各个 $E_{j\gamma}^{(1)}$, 从(6.1.33) 式就可以得到 $A$ 组解 $(c_{\alpha\gamma}) = (c_{1\gamma}, c_{2\gamma}, \cdots, c_{A\gamma})(\gamma = 1, 2, \cdots, A)$。由于$(\langle v_{j\beta}, H' v_{j\alpha}\rangle)$是厄米矩阵,因此,它们是相互正交的矢量.若就势将其归一化,则有 $\sum_\alpha c_{\alpha\beta}^* c_{\alpha\gamma} = \delta_{\beta\gamma}$,

而

$$u_{j\gamma}^{(0)} = \sum_\alpha c_{\alpha\gamma} v_{j\alpha} \quad (\gamma = 1, 2, \cdots, A) \tag{6.1.35}$$

就成了 $H_j$ 的正交基,而且,像开始考虑的那样,$H'$ 是对角化的:

$$\langle u_{j\beta}^{(0)}, H' u_{j\gamma}^{(0)}\rangle = E_{j\gamma}^{(1)} \delta_{\beta\gamma}. \tag{6.1.36}$$

这意味着

$$H' u_{j\gamma}^{(0)} = E_{j\gamma}^{(1)} u_{j\gamma}^{(0)} + \tilde{u}(\tilde{u} \in H_j^2),$$

$\tilde{u}$ 是属于与 $H_j$ 垂直的子空间的矢量. 记为 $\tilde{u} \in H_j^2$.

微扰论是从一种无微扰状态出发,研究有微扰时它如何变化.这种无微扰状态今后记为 $u_{j\beta}^{(0)}$。假设有微扰作用时,它变成

$$u_{j\beta} = u_{j\beta}^{(0)} + \lambda u_{j\beta}^{(1)} + \lambda^2 u_{j\beta}^{(2)} + \cdots. \tag{6.1.37}$$

把(6.1.31)式中的 $c_\alpha$记为$c_{\alpha\beta}$,下面要做的是,从(6.1.31)和(6.1.6)两式出发继续进行分析。必须在(6.1.6)式中添上脚标 $\beta$

$$E_{j\beta} = \varepsilon_j + \lambda E_{j\beta}^{(1)} + \lambda^2 E_{j\beta}^{(2)} + \cdots. \tag{6.1.38}$$

(6.1.37)和(6.1.38) 两式分别定出的 $u_{j\beta}^{(s)}$ 和$E_{j\beta}^{(s)}$ 满足本征值方程(6.1.4),比(6.1.8)式更进一步,这时要求

$$\langle u_{j\beta}^{(0)}, u_{j\beta}^{(s)}\rangle = 0, \ (s = 1, 2, \cdots). \tag{6.1.39}$$

与(6.1.9)式相应,有

$$H_0 u_{j\beta}^{(s)} + H' u_{j\beta}^{(s-1)} = \sum_{r=0}^{s} E_{j\beta}^{(r)} u_{j\beta}^{(s-r)} \quad (s = 1, 2, \cdots). \tag{6.1.40}$$

$s=0$ 的表达式显然成立，没有放在其中。

构造(6.1.40)式与 $u_{j\beta}^{(0)}$ 的内积，因有(6.1.39)式，故有

$$E_{j\beta}^{(s)}=\langle u_{j\beta}^{(0)},H'u_{j\beta}^{(s-1)}\rangle. \tag{6.1.41}$$

构造(6.1.40)式与 $u_{j\gamma}^{(0)}(\gamma\neq\beta)$ 的内积

$$\langle u_{j\gamma}^{(0)},\ H'u_{j\beta}^{(s-1)}\rangle=E_{j\beta}^{(1)}\langle u_{j\gamma}^{(0)},\ u_{j\beta}^{(s-1)}\rangle+\sum_{r=1}^{s-1}E_{j\beta}^{(r)}\langle u_{j\gamma}^{(0)},u_{j\beta}^{(s-r)}\rangle.$$

由完备性质可知 $\sum_{\alpha}|u_{j\alpha}^{(0)}\rangle\langle u_{j\alpha}^{(0)}|+\sum_{n\neq j}|v_n\rangle\langle v_n|=1$，将其插到上式 $H'$ 的后面，再利用(6.1.36)式，就可以得到

$$(E_{j\gamma}^{(1)}-E_{j\beta}^{(1)})\langle u_{j\gamma}^{(0)},u_{j\beta}^{(s-1)}\rangle=-\sum_{n\neq j}\langle u_{j\gamma}^{(0)},H'v_n\rangle\langle v_n,v_{j\beta}^{(s-1)}\rangle$$

$$+\sum_{r=2}^{s-1}E_{j\beta}^{(r)}\langle u_{j\gamma}^{(0)},\ u_{j\beta}^{(s-r)}\rangle. \tag{6.1.42}$$

在 $a_1$ 小节的计算中没有与此对应的表达式。

最后，构造(6.1.40)式与 $v_n(n\neq j)$ 的内积，得到与(6.1.11)式对应的表达式：

$$(\varepsilon_n-\varepsilon_j)\langle u_n,u_{j\beta}^{(s)}\rangle=-\langle v_n,H'u_{j\beta}^{(s-1)}\rangle+\sum_{r=1}^{s-1}E_{j\beta}^{(r)}\langle v_n,u_{j\beta}^{(s-r)}\rangle. \tag{6.1.43}$$

利用这样得到的(6.1.41—43)诸式，就可以由小的 $s$ 开始依次定出 $E_{j\beta}^{(s)}$ 和 $u_{j\beta}^{(s)}$。首先，$s=1$ 时，(6.1.42)式变成 $0=0$，(6.1.41)式变成已知的(6.1.36)式。(6.1.43)式给出

$$\langle v_n,u_{j\beta}^{(1)}\rangle=\frac{\langle v_n,H'u_{j\beta}^{(0)}\rangle}{\varepsilon_j-\varepsilon_n}.$$

把它与由 $s=2$ 时的(6.1.42)式得到的

$$\langle u_{j\gamma}^{(0)},\ u_{j\beta}^{(1)}\rangle=\frac{1}{E_{j\beta}^{(1)}-E_{j\gamma}^{(1)}}\sum_{n\neq j}\langle u_{j\gamma}^{(0)},H'v_n\rangle\langle v_n,\ u_{j\beta}^{(1)}\rangle$$

合在一起，则有

$$u_{j\beta}^{(1)}=\sum_{n\neq j}\frac{1}{\varepsilon_j-\varepsilon_n}\left[\sum_{\gamma\neq\beta}\frac{u_{j\gamma}^{(0)}\langle u_{j\gamma}^{(0)},H'v_n\rangle}{E_{j\beta}^{(1)}-E_{j\gamma}^{(1)}}+v_n\right]$$

$$\times \langle v_n, H' u_{j\beta}^{(0)} \rangle . \qquad (6.1.44)$$

于是，在(6.1.41)式中令 $s = 2$，再注意到(6.1.36)式，得到

$$E_{j\beta}^{(2)} = \sum_{n \neq j} \frac{1}{\varepsilon_j - \varepsilon_n} \langle u_{j\beta}^{(0)}, H' v_n \rangle \langle v_n, H' u_{j\beta}^{(0)} \rangle . \qquad (6.1.45)$$

它与 a）小节的(6.1.15)式形式相同，这是本小节开始时预料到了的。

此后，计算只是机械的重复，请读者考虑。我们只把与 a）小节不同的 $E_{j\beta}^{(3)}$ 的结果写在下面：

$$\begin{aligned} E_{j\beta}^{(3)} = & \sum_{m \neq j} \sum_{n \neq j} (\varepsilon_j - \varepsilon_m)^{-1} (\varepsilon_j - \varepsilon_n)^{-1} \langle u_{j\beta}^{(0)}, H' v_m \rangle \\ & \times \langle v_m, H' v_n \rangle \langle v_n, H' u_{j\beta}^{(0)} \rangle + \sum_{m \neq j} \sum_{n \neq j} \sum_{\gamma \neq \beta} \\ & \times \frac{\langle u_{j\beta}^{(0)}, H' v_m \rangle \langle v_m, H' u_{j\gamma}^{(0)} \rangle \langle u_{j\gamma}^{(0)}, H' v_n \rangle \langle v_n, H' u_{j\beta}^{(0)} \rangle}{(\varepsilon_j - \varepsilon_m)(E_{j\beta}^{(0)} - E_{j\gamma}^{(0)})(\varepsilon_j - \varepsilon_n)} \\ & - \sum_{n \neq j} (\varepsilon_j - \varepsilon_n)^{-2} E_{j\beta}^{(1)} \langle u_{j\beta}^{(0)}, H' v_n \rangle \langle v_n, H' u_{j\beta}^{(0)} \rangle . \end{aligned} \qquad (6.1.46)$$

读者能否从 a）小节的(6.1.17)式推导出上式？

上面的计算是在久期方程(6.1.34) 没有重根的情况下做出来的。这时，用一级微扰就能完全消除无微扰本征态的简并。如果有重根，讨论到(6.1.44)式或(6.1.46) 式时，分母都会出现零。这时，必须在重根为 $E_{j\gamma} = E_{j\beta} = \cdots$ 的 $u_{j\gamma}^{(0)}, u_{j\beta}^{(0)}, \cdots$ 之间进行幺正变换，从而使

$$W_{\gamma\beta} = \sum_{n \neq j} (\varepsilon_j - \varepsilon_n)^{-1} \langle u_{j\gamma}^{(0)}, H' v_n \rangle \langle v_n, H' u_{j\beta}^{(0)} \rangle$$

对角化。详细的计算，请读者当作练习。

在 a）小节已经注意到了无简并时微扰级数的渐近性，有简并时也应注意这点。

另外，可以说，(6.1.34)式是以无微扰本征态$\{v_1, v_2, \cdots, v_{j1}, \cdots v_{jA}, v_{j+1}, v_{j+2}, \cdots\}$ 为基的哈密顿量 $H = H_0 + \lambda H'$ 的矩阵表示，简并态有关的子矩阵首先对角化。即使没有消除简并，所注意的

状态处有非常接近的能级时，这也是有效的近似方法.

**斯塔克效应**也是这种情形下的一个合适例题. 就前面所例举的氢原子而言，除基态外，无微扰状态全都是 $n^2$ 重简并的. 第一激发态($n=2$)的 2S 态和 2p 态合起来共有 4 重简并. 但是，如果取(6.1.24)为哈密顿量，那么，根据选择定则(6.1.26)，久期方程(6.1.34)的矩阵就会变成一个 $2\times 2$的矩阵和两个 $1\times 1$的矩阵. 把无微扰本征态写成 $|n,l,m\rangle$有

$$\begin{array}{c} \\ \langle 2,0,0| \\ \langle 2,1,0| \\ \langle 2,1,1| \\ \langle 2,1,-1| \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} |2,0,0\rangle & |2,1,0\rangle & |2,1,1\rangle & |2,1,-1\rangle \end{array} \\ \begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & H'_{01} & 0 & 0 \\ H'_{10} & -E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} \end{array} = 0,$$

其中

$$H'_{01}=H'_{10}=\langle 2,0,0|H'|2,1,0\rangle=-3eFa_B.$$

这种计算或许不用无量纲化. 把久期方程的根和对应的状态写下来

$$E_{21}^{(1)}=3eFa_B:\ u_{21}^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[|2,1,0\rangle-|2,0,0\rangle],$$

$$E_{22}^{(1)}=-3eFa_B:\ u_{22}^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[|2,1,0\rangle+|2,0,0\rangle],$$

$$E_{23}^{(1)}=0:\ u_{23}^{(0)}=|2,1,1\rangle,$$

$$E_{24}^{(1)}=0:\ u_{24}^{(0)}=|2,1,-1\rangle.$$

第一激发态的简并只是部分地消除了. 电子在能量高的 $u_{21}^{(0)}$ 态时偏向电场方向，在能量低的 $u_{22}^{(0)}$ 时偏向电场的反方向(图 6.3). 如果把电场下加在处于简并能级的原子上，再缓慢地使电场趋于零，就可能会出现永久电偶极子状态. 这与 $F\to 0$ 时消失的基态感应极化不同.

久期方程一般都有庞大的行列式，计算起来相当麻烦，如能像上面的例子那样，把微扰$H'$的矩阵分成小块，或像那样预先选择好基底，则会大大减少计算量. 研究以体系的对称性为对象的群论，

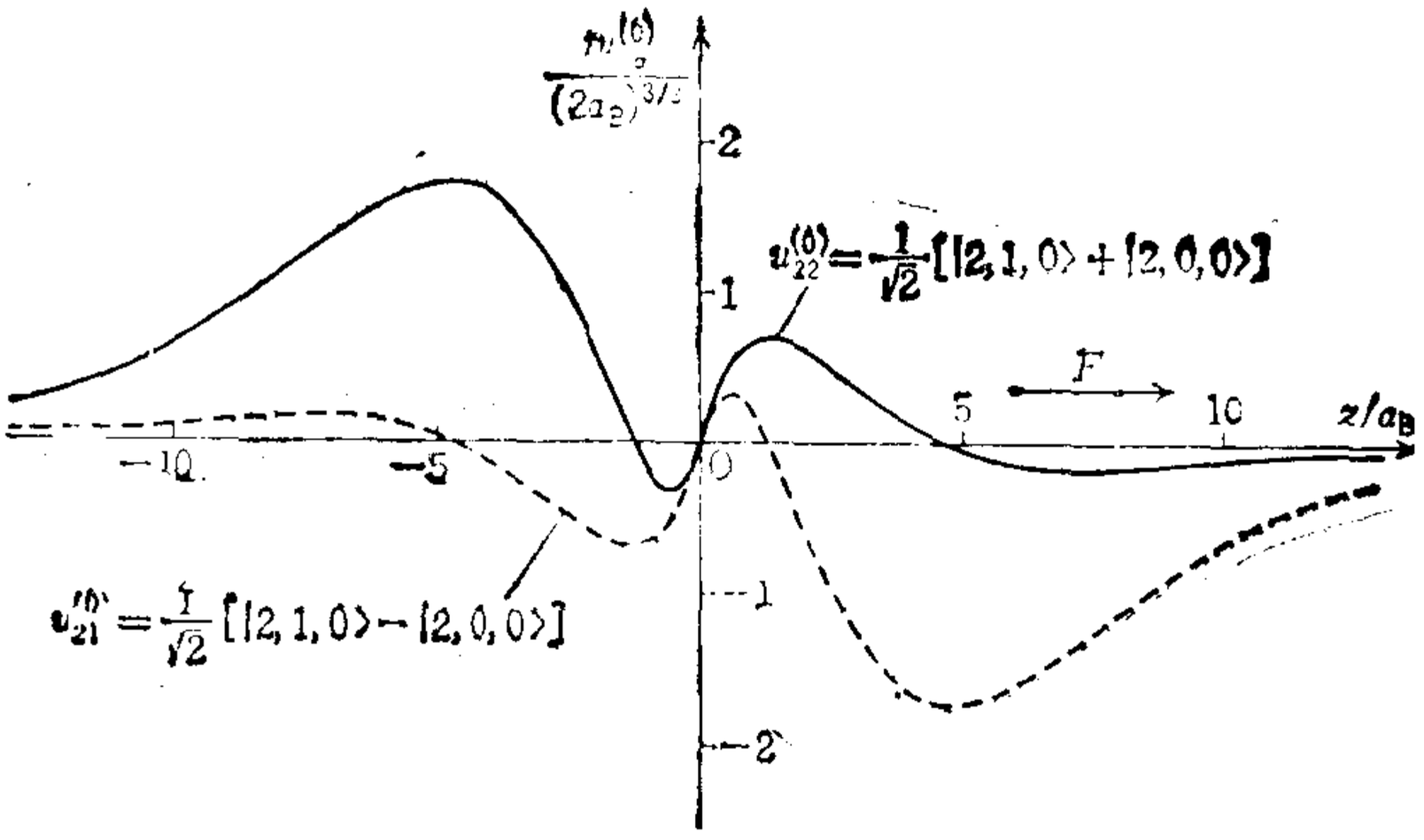



图 6.3　极化了的氢原子波函数．$u_{21}^{(0)}(\alpha=1,2)$乘以 $r$，再平方就是电子的存在概率/$drd\Omega$，用 $z$ 轴上的值表示

对进行这一工作颇有裨益．在上面的例子中，由于微扰$H'$围绕 $z$ 轴是旋转对称的，因此，应该选择这个对称变换的本征态为基底，这样，微扰矩阵便对每一个本征值$m$约化了．

如果把这种分析应用于氢原子的第二激发态（$n=3$），那么，微扰 $H'$ 的矩阵显然会分成$m=0$的$\{|3,0,0\rangle,|3,1,0\rangle,|3,2,0\rangle\}$块，$m=1$ 的$\{|3,1,1\rangle,|3,2,1\rangle\}$块，$m=2$ 的 $\{|3,2,2\rangle\}$ 块等．

进而再分析一下选择定则(6.1.26)，我们会知道，$H'$ 矩阵中 $m=0$ 的那一块有零迹，从而行列式为零，因此，本征值 $E_3^{(1)}$ 是 0、$\pm A$ 那样正负配置的．$m=1$ 的那一块的本征值为 $\pm B$ 形式．借助于时间反演或空间反射可知，$m=-1$ 的那一块仍以 $\pm B$ 为本征值．不用说，$m=2$ 的那一块本征值为零．这样，氢原子 $n=3$的能级被电场分裂为如图 6.4(a)所示的五条能级．可以说，至此并没有计算$H'$的矩阵元．计算矩阵元之后可以知道，能级分裂是等间隔的，其间隔为 $n=2$ 时的 3/2 倍．

图 6.4 还描绘了 $n=2$ 能级的劈裂．连结能级的竖线表示电子的可能跃迁．伴随着跃迁而发出的光频率从左向右依次增大．

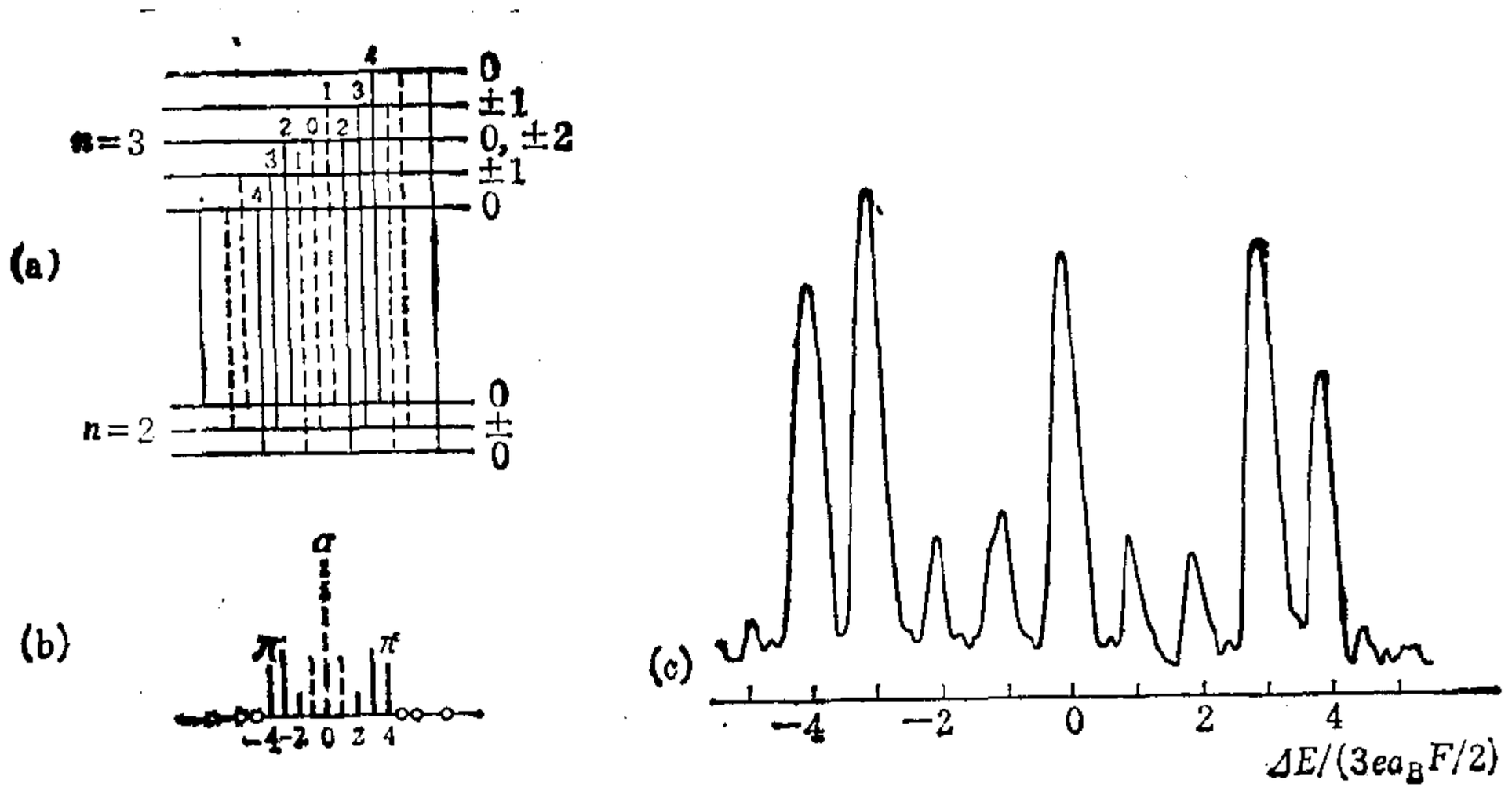



图 6.4　氢原子 $H_\alpha$线的斯塔克效应. (a) $n=2,3$ 的能级被电场 $F$分裂. 竖实线表示$m$变化为 $\Delta m=0$ 的跃迁,虚线为 $\Delta m=\pm 1$ 的跃迁. 前者构成谱的$\pi$分量,后者则构成$\sigma$分量. (b)谱线的能量偏移$\Delta E$(横轴)与强度(纵轴). ○表示极弱线. (c)光度计测得的强度曲线 (Mark,H,& Wierl, R;*Zs. f. Phys.*, **55**, 156(1929))

这在图 6.4(b) 中表示出来了. 竖线长度与强度的理论值成正比, 下面标记的数字是以 $(3/2)ea_BF$ 为单位的能量偏移,它与实验所

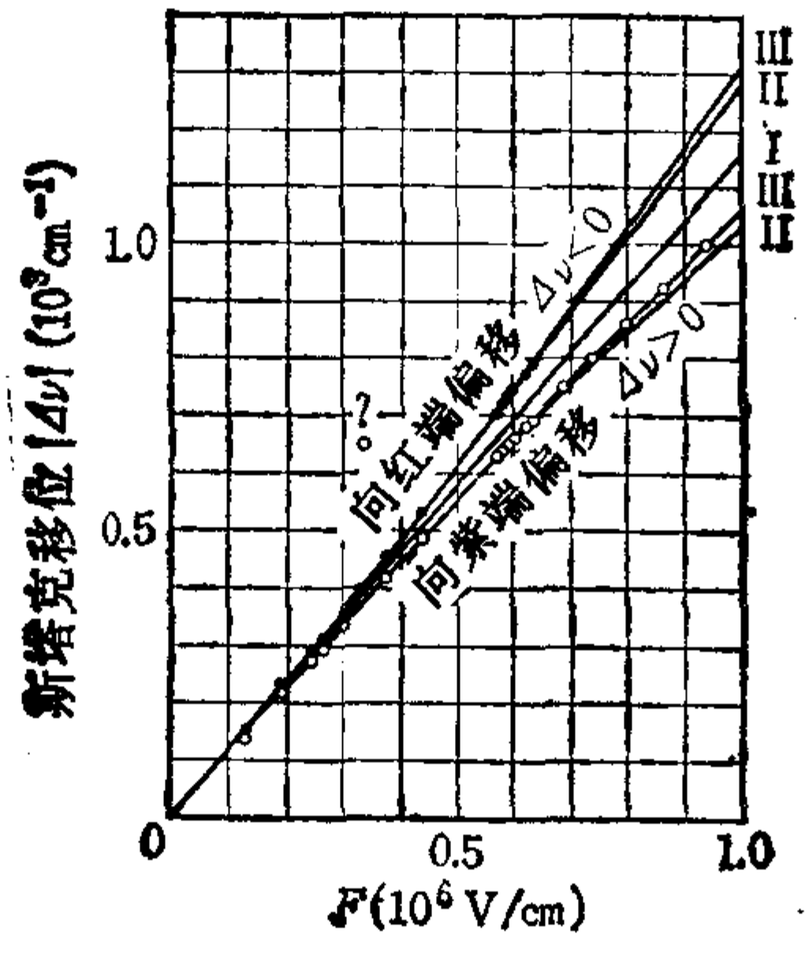



图 6.5　高级斯塔克效应. 对于氢 $H_\gamma$线的一支($\pi$18),电场$F$的一、二、三级微扰计算结果分别用曲线 I,II,III 表示 (Ishida, Y.& Hiyama, S.; *Sci. Pap. IPCR*, Nr. 152 (1928)). 当 $F<0.63\times10^6$ (V/cm)时,实验结果取自 Gebauer, *R.* & *Rausch von Traubenberg. H.*; *Zs. f. Phys.* **71**, 291(1931);而当$F$更大时,取自 Bethe, H.: *Hdb. d. Phys.*, Bd. XXV, Springer, 1930,p. 410.另外,还参考了 Gebauer et al. *Zs. f. Phys.*, **56**, 254(1929)

给出的强度曲线(图 6.4(c))一致。

当加在原子上的电场 $F$ 增强时，高级微扰项就不能忽略了.图 6.5 就氢原子的$H_\gamma$线(由 $n=5$ 到 $n=2$ 的跃迁所产生的) 的一支表示了这种情况。曲线 I,II,III 分别是一、二、三级微扰计算的结果，实验值用。表示，没有落在 I,II 线上，而是落在 III 线上了。

## §6.2 与时间有关的微扰论

在薛定谔绘景中，表现体系运动的是态矢$\psi_t$随时间的变化.此后的问题在于求解其运动方程

$$i\hbar\frac{d\psi_t}{dt}=(H_0+H')\psi_t, \tag{6.2.1}$$

初始条件为

$$\psi_{t=0}=v_i, \tag{6.2.2}$$

其中，$v_i$是无微扰哈密顿量$H_0$的一个本征矢。虽然仍沿用上一节的记号，但在本节去假设微扰$H'$对于$H_0$的本征矢无对角元

$$\langle v_n,H'v_n\rangle=0\ (\text{全部 } n)。 \tag{6.2.3}$$

这样假设并未失去一般性。当上式不成立时，在矩阵表象中，可以另选 $\langle v_n,H'v_m\rangle-\langle v_n,H'v_n\rangle\delta_{nm}$ 作为微扰，与此相应，把与 $\langle v_n,H_0v_m\rangle+\langle v_n,H'v_n\rangle\delta_{nm}$ 的算符取为 $H_0$，再把 $\varepsilon_n+\langle v_n,H'v_n\rangle$ 叫做 $\varepsilon_n$。

初始条件(6.2.2)的形式比较特殊。在后面计算跃迁概率时也往往使用这种形式，因任意初始条件可以写为$v_n$的叠加，而薛定谔方程又是线性的，所以，任意初始条件下的解就是与各个$v_n$相应解的叠加，即(6.2.2)亦未丧失一般性。

### a) 逐次递推法

为求解有微扰的方程(6.2.1)，加进一个参数 $\lambda$

$$i\hbar\frac{d\psi_t}{dt}=(H_0+\lambda H')\psi_t, \tag{6.2.4}$$

让我们来求无微扰本征态展开形式的解

$$\psi_t = \sum_m v_m c_m(t)\exp(-iE_m t/\hbar)。 \tag{6.2.5}$$

$c_m(t)$及$E_m$均为未知。有些读者或许会怀疑，似乎并不能分别确定 $c_m(t)$ 和 $E_m$。我们过一会再来回答这个问题。(6.2.5) 式中的 $\sum_m$ 必要时也包含对连续本征值的积分。将这个$\psi_t$代入薛定谔方程，再取其与$v_n$的内积，就可以得到有关$c_n(t)$的联立微分方程组

$$i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt} = \sum_m \{\lambda\langle v_n, H'v_m\rangle - \Delta E_n\delta_{nm}\}c_m(t)$$

$$\times \exp[-i(E_m - E_n)t/\hbar], \tag{6.2.6}$$

其中 $\Delta E_n = E_n - \varepsilon_n$。由初始条件(6.2.2)得到

$$c_m(0) = \delta_{mi}。 \tag{6.2.7}$$

为求解该联立方程，假定微扰展开式为

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \cdots, \tag{6.2.8}$$

$$\Delta E_n = E_n - \varepsilon_n = \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots。 \tag{6.2.9}$$

根据假定(6.2.3)，$\Delta E_n$中没有 $\lambda$ 的一次项。将它们代入(6.2.6)式(指数上的 $E_m$、$E_n$ 不展开)，比较两边 $\lambda$ 幂相同的项。初始条件(6.2.7)变成 $c_m^{(0)}(0) = \delta_{mi}$，$c_m^{(s)}(0) = 0(s \neq 0)$。这样，$c_n^{(s)}(t)$ 和 $E_n^{(s)}$ 就可以由 $s$ 小的一头开始依次确定下来。首先，根据两边 $\lambda^0$ 的项彼此相等，有

$$i\hbar\frac{dc_n^{(0)}(t)}{dt} = 0。$$

再考虑到初始条件，即可得到

$$c_n^{(0)}(t) = 常数 = \delta_{ni}。 \tag{6.2.10}$$

然后，再比较(6.2.6)式两边 $\lambda^1$ 的项，参考(6.2.10)式，就有

$$i\hbar\frac{dc_n^{(1)}(t)}{dt} = \langle v_n, H'v_i\rangle\exp[-i(E_i - E_n)t/\hbar]。$$

根据初始条件 $c_n^{(1)}(0) = 0$，考虑到(6.2.3)式，便有

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{\langle v_n, H'v_i\rangle}{E_i - E_n}(\exp[-i(E_i - E_n)t/\hbar] - 1) \quad (n \neq i),$$

(6.2.11)

$$c_j^{(1)}(t) = 0. \tag{6.2.12}$$

递推到 $\lambda^2$ 的项，有

$$i\hbar \frac{dc_n^{(2)}(t)}{dt} = \sum_m \{\langle v_n, H' v_m\rangle c_m^{(1)}(t) - E_n^{(2)} \delta_{nm} c_m^{(0)}(t)\}$$

$$\times \exp[-i(E_m - E_n)t/\hbar].$$

根据(6.2.3)式，当 $m = n$ 时，上式右边花括号内第一项为零．将(6.2.11)和(6.2.12)两式中的 $c_n^{(1)}(t)$ 代入上式，整理后得到

$$i\hbar \frac{dc_n^{(2)}(t)}{dt} = \sum_{m \neq j, n} \frac{\langle v_n, H' v_m\rangle\langle v_m, H' v_j\rangle}{E_j - E_m}$$

$$\times (\exp[-i(E_j - E_n)t/\hbar]$$

$$- \exp[-i(E_m - E_n)t/\hbar]) - E_n^{(2)} \delta_{nj}.$$

对于 $n \neq j$，有

$$c_n^{(2)}(t) = \sum_{m \neq j, n} \frac{\langle v_n, H' v_m\rangle\langle v_m, H' v_j\rangle}{(E_j - E_n)(E_j - E_m)}$$

$$\times (\exp[-i(E_j - E_m)t/\hbar] - 1)$$

$$- \sum_{m \neq j, n} \frac{\langle v_n, H' v_m\rangle\langle v_m, H' v_j\rangle}{(E_j - E_m)(E_m - E_n)}$$

$$\times (\exp[-i(E_m - E_n)t/\hbar] - 1). \tag{6.1.13}$$

而对于 $n = j$，有

$$i\hbar \frac{dc_j^{(2)}(t)}{dt} = \sum_{m \neq j} (E_j - E_m)^{-1} \langle v_j, H' v_m\rangle\langle v_m, H' v_j\rangle$$

$$\times (1 - \exp[-i(E_m - E_j)t/\hbar]) - E_j^{(2)}.$$

直接做时间积分，将会出现与 $t$ 成正比的项．这种项称为**长期项**，但正确的解(4.5.24)中没有这一项，因此，为了消灭它，我们取

$$E_j^{(2)} = \sum_{m \neq j} (E_j - E_m)^{-1} |\langle v_m, H' v_j\rangle|^2. \tag{6.2.14}$$

这样，便有

$$c_j^{(2)}(t) = \sum_{m \neq j} \left| \frac{\langle v_m, H' v_j\rangle}{E_j - E_m} \right|^2 (\exp(-i(E_m - E_j)t/\hbar) - 1). \tag{6.2.15}$$

这种计算可以一直继续下去，依次定出微扰展开式(6.2.8) 和(6.2.9)的系数。而 $E_{(s)}^{n}$ 则通过消去每次出现的长期项来确定。

现在，我们把业已得到的结果代入(6.2.8)和(6.2.9)两式，以构成 $E_j$ 和(6.2.5)式的 $\psi_t$。首先有

$$E_j = \varepsilon_j + \lambda^2 \sum_{m \neq j} \frac{|\langle v_m, H' v_j \rangle|^2}{E_j - E_m} + \cdots。 \qquad (6.2.16)$$

它与上节用定态微扰论得到的$E_j$有同样的形式。只不过其中缺少 $\lambda$ 的一次项$\langle v_j, H' v_j \rangle$，而这正是初始时对$\varepsilon_j$所加的约定。与上节的(6.1.15)式相比，分母上的能量有所不同。在(6.1.15)式中，分母上的能量是无微扰能量。现在，为了确定 $E_j$，必须为其它 $E_n$ 写出与(6.2.16)式相当的表达式来求解联立方程组。不过，取到$\lambda^2$近似的结果与现在没有变化。(6.2.16)式与其它$E_n$的表达式合在一起，是确定总哈密顿量 $H = H_0 + \lambda H'$ 本征值的方程。因推导它的人而得名为**布里渊-维格纳** (Billouim-Wigner) **微扰公式** [Kramers]。而上节的公式则以薛定谔命名。

如果根据(6.2.5)式写出态矢随时间的变化，就会更好地理解，(6.2.16)式所确定的 $Z_j$ 是$H$的本征值。经过简单计算，可以写出

$$\psi_t = \sum_n a_n u_n \exp(iE_n t/\hbar)。 \qquad (6.2.17)$$

由以上计算所能知道的，只是乘积 $a_n u_n$，为了便于理解其含义，可以将它分写成 $a_n$ 和 $u_n$。首先，对 $u_n$ 来说，当 $n = j$ 时，可以取

$$u_j = \left\{1 - \frac{\lambda^2}{2} \sum_{m \neq j} \left| \frac{\langle v_m, H' v_j \rangle}{E_j - E_m} \right|^2 \right\} v_j + \lambda \sum_{m \neq j} v_m \frac{\langle v_m, H' v_j \rangle}{E_j - E_m}$$

$$+ \lambda^2 \sum_{m \neq j} \sum_{l \neq j} v_m \frac{\langle v_m, H' v_l \rangle \langle v_l, H' v_j \rangle}{(E_j - E_m)(E_j - E_l)} + \cdots。 \qquad (6.2.18)$$

而当$n \neq j$时，有

$$u_n = v_n + \lambda \sum_{m \neq n} v_m \frac{\langle v_m, H' v_n \rangle}{E_n - E_m} + \cdots。 \qquad (6.2.19)$$

根据以上计算，均未得到…的那些项。如果提高近似级次并作相应计算，则$u_n$和$u_j$的形式将会相同。它们无非是上节的(6.1.18)式，即

总哈密顿量 $H = H_0 + \lambda H'$ 的本征态! 分母上的能量有所不同，但却与能量本征值的情况相同.该式就变成了布里渊-维格纳微扰公式.在目前 $\lambda$ 的二次近似中，公式的形式并无差异.只是在 $u_i$ 表达式的第一项中 $u_i$ 的系数卓尔不群. 它是归一化因子. 本来，归一化应该涉及整个 $u_i$ 的表达式，但是，在 $\lambda$ 的二次近似中，这样就可以了.上节计算中，未对 $u_i$ 归一化，而要求它满足(6.1.7)式. 这样就明白了，(6.2.17) 式是总哈密顿量 $H = H_0 + \lambda H'$ 的定态 $u_n \exp(-iE_n t/\hbar)$ 的线性组合!

那么，系数 $a_n$ 如何呢? 若 $u_n$ 选得与上面的一样，则在 $n = j$ 时，有

$$a_j = 1 - \frac{1}{2}\lambda^2 \sum_{m \neq j} \left| \frac{\langle v_m, H' v_j \rangle}{E_j - E_m} \right|^2 + \cdots, \qquad (6.2.20)$$

而在 $n \neq j$ 时，有

$$a_n = \lambda \frac{\langle v_n, H' v_j \rangle}{E_n - E_j} + \lambda^2 \sum_{l \neq m} \frac{\langle v_n, H' v_l \rangle \langle v_l, H' v_j \rangle}{(E_n - E_j)(E_n - E_l)} + \cdots. \qquad (6.2.21)$$

由(6.2.18)和(6.2.19)两式可知，它们分别等于 $\langle u_j, v_j \rangle$ 和 $\langle u_n, v_j \rangle$. 与用(6.2.17)式从初始条件 $v_j = \sum_n a_n u_n$ 所确定的 $a_j$ 和 $a_n (n \neq j)$ 相同! 由此可知 $\|\psi_t\|^2 = 1$.

在(6.2.17)式中，由布里渊-维格纳微扰公式已知总哈密顿量 $H = H_0 + \lambda H'$ 的本征值 $E_n$ 和本征函数 $u_n$，而应用(4.5.24)式的一般方法得到的结果应当和与时间有关的微扰计算相同.由于 $E_n$ 和 $u_n$ 亦能从上节的薛定谔微扰公式求出，因此，可以在这个意义上说，本节的计算没有必要.

为了用微扰论来确定随时间的变化，通常不是用(6.2.5)式，而是把无微扰哈密顿量 $H_0$ 所产生的时间变化以 $\exp(-i\varepsilon_m t/\hbar)$ 的形式抽出来，令

$$\psi_t = \sum_m v_m b_m(t) \exp(-i\varepsilon_m t/\hbar), \qquad (6.2.22)$$

再用微扰论定出 $b_m(t)$. 这时，不易消除长期项，但是，如果把长期

项算到高次，则每个 $b_m(t)$ 来说，它仍将统一于 $\exp(-i\Delta E_m t/\hbar)$ 的形式，结果当然与（6.2.17）式一致。态矢随时间的变化可以用 $\{b_m(t)\}$ 表示。如果按照(4.5.26)式，以 $\exp(iH_0t/\hbar)$ 乘(6.2.22)式，则其右边的 $\exp(i\varepsilon_m t/\hbar)$ 消失，遂成相互作用绘景的(4.5.29)式。

本节的（6.2.6）式与相互作用绘景中的运动方程没有什么不同。只不过，把 $H = H_0 + \lambda H'$ 分成无微扰哈密顿量和微扰，用 $\{v_n\}$的矩阵分别表示为

$$\langle v_n, \tilde{H}_0 v_m\rangle = \langle v_n, H_0 v_m\rangle + \Delta E_n \delta_{nm},$$
$$\langle v_n, \tilde{H}' v_m\rangle = \langle v_n, H' v_m\rangle - \Delta E_n \delta_{nm}.$$

该无微扰哈密顿量的本征值是加上微扰之后的能级 $E_n$。由微扰引起的各能级的能量偏移$\Delta E_n$逐次加到无微扰哈密顿量上。这正是逐次递推理论的概念，也是数学上以庞加莱-莱希尔-库(Poincaré-Lighthill-Kuo）命名的近似方法的一种特殊情形。

### b） 跃迁概率

(6.2.5)式展开系数绝对值的平方为

$$P_{n\leftarrow i}(t) = |c_n(t)|^2, \tag{6.2.23}$$

所注意的体系在零时刻处于状态 $v_i$，受到微扰后，$t$ 时刻观测时该系统处于状态 $v_n$ 的概率就是 $P_{n\leftarrow i}(t)$。这里所说的状态都是无微扰哈密顿量 $H_0$ 的本征态。其中，哪个是可以实现的观测，要以零时刻注意到的状态在 $t$ 时刻也能同样确定为前题。应该就每种情况检查该前提的现实性。称 $v_i$ 为**初态**，$v_n$ 为**终态**。在(6.2.21)式下面已经注意到，做完高次微扰计算后，确实会得到 $|\psi_t|^2 = 1$，于是 $\sum |c_n(t)|^2 = 1$，也就是说，应当有(概率守恒)

$$\sum_n P_{n\leftarrow i}(t) = 1. \tag{6.2.24}$$

现在，来看 $n \neq j$ 的终态，应用前面已经求得的 $c_n(t)$ 的二级近似。由(6.2.11)和(6.2.13)两式，有

$$c_n(t) = \left[\lambda\langle v_n, H'v_j\rangle + \lambda^2 \sum_{m\neq j} \frac{\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{E_j - E_m}\right]$$

$$\times (E_j - E_n)(\exp[-i(E_j - E_n)t/\hbar] - 1)$$

$$- \lambda^2 \sum_{m\neq j} (E_j - E_m)^{-1}(E_m - E_n)^{-1}\langle v_n, H'v_m\rangle$$

$$\times \langle v_m, H'v_j\rangle(\exp[-i(E_m - E_n)t/\hbar] - 1)。 \quad (6.2.25)$$

在量子力学的应用中，下面的情形是重要的。终态 $n$ 属于 $H$ 的连续谱，或者，虽然不连续，但能级却极其密集，由于测不准原理，在有限时间内进行的观测无法区分一个个能级，很自然，只能求跃迁到量子数某个范围 $\Delta$ 内所包含状态的概率之和：

$$P_{\Delta\leftarrow j}(t) = \sum_{n\in\Delta} |c_n(t)|^2, \quad (6.2.26)$$

而且，观察终态的时间相当长。若把 $\Delta$ 的能量幅度用相同字母表示，终态能级间隔为 $D_1$，表示 $H'$ 矩阵元显著变化的能量幅度为

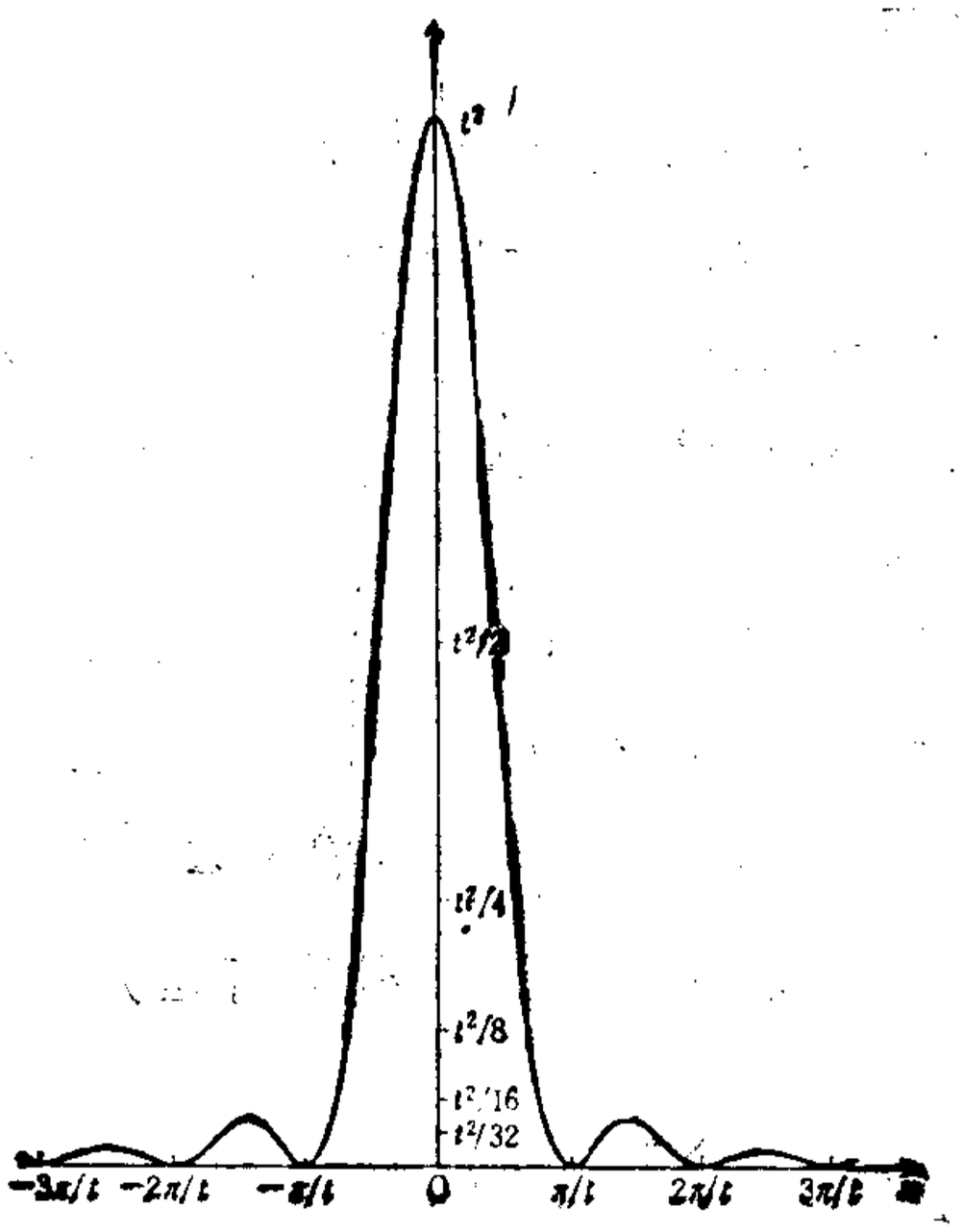



图 6.6　$\sin^2 xt/x^2$ 的曲线图. 以 $x = 0$ 为中心主峰可以看成是高 $t^2$ 底边长 $2\pi/t$ 的三角形，其面积正好等于 $\int_{-\infty}^{\infty} (\sin^2 xt/x^2)dx = \pi t$

$D_2$，则

$$\hbar/\Delta,\hbar/D_2 \ll t \ll T,\ D_1 \ll \Delta, \tag{6.2.27}$$

其中，关于 $t$ 的条件所考虑的理由，以及 $T$ 的含义，不久都会明白。

现在，着手计算 $P_{\Delta\leftarrow i}(t)$，先只取一级微扰

$$P_{\Delta\leftarrow i}(t) = \sum_{n\in\Delta} \lambda^2 |\langle v_n, H' v_i\rangle|^2 4(E_n - E_i)^{-2}\sin^2 \frac{E_n - E_i}{2\hbar} t .$$

对于大的 $t$ 值，由于 $\sin^2 xt/x^2$ 这个函数以 $x = 0$ 为中心具有幅宽 $\pi/t$，高 $t^2$ 的尖峰(图 6.6)，所以，根据 $\hbar/t \ll D_2$ 就可以取

$$P_{\Delta\leftarrow i}(t) = \left\{\sum_{n\in\Delta} \lambda^2 |\langle v_n, H' v_i\rangle|^2 \delta(E_n - E_i)\right\} \times \int_{-\infty}^{\infty} (E_n - E_i)^{-2} 4\sin^2 \frac{E_n - E_i}{2\hbar} t dE_n . \tag{6.2.28}$$

根据假定 $D_1 \ll \Delta$，关于能量的求和变成了积分，又根据假定 $\hbar/t \ll \Delta$，积分范围就扩大为从 $-\infty$ 到 $\infty$，因积分值为 $2\pi t/\hbar$，故有

$$P_{\Delta\leftarrow i}(t) = t \sum_{n\in\Delta} \frac{2\pi}{\hbar} |\lambda\langle v_n, H' v_i\rangle|^2 \delta(E_n - E_i). \tag{6.2.29}$$

注意，该结果正比于 $t$。虽然概率不应超过 1，但此答案却随着 $t$ 一起增加，这一点反映了微扰论的局限性。(6.2.25) 式中的 $t \ll T$ 正是考虑到这种情况才作的限制，$T$ 可以根据 $P_{\Delta\leftarrow i}(T) = 1$ 来选取。

取二级微扰时，(6.2.25)式中有 $\lambda^2$ 的两项(依次叫 I 和 II)，它仍需要做稍微不同的处理。由于项 I 包含与上面给出的 $\delta(E_n - E_i)$ 相同的因子，因此似乎可以立刻纳入(6.2.29)式。但是，问题并不是这么简单。问题在于，或许一个能量分母 $E_i - E_m$ 会变成零。的确，按照假定(6.2.3)，$m = i$ 从中间态 $m$ 的求和中扣除掉了。然而，在存在简并和连续谱的情况下就会出现问题。

(6.2.25)式的项II 中，$|E_m - E_n| < 2\pi\hbar/t$ 的中间态 $m$ 之外的项没有什么大的贡献。因此，若不是 $E_n - E_i \simeq 0$，而且另一个能量分母也不是 $E_i - E_m \simeq 0$，则求和时，像(6.2.26)式那样缓慢变

化的因子就可以从求和中提出去。这样

$$\int_{|E_m-E_n|<D}(E_m-E_n)^{-1}(\exp[-i(E_m-E_n)t/\hbar]-1)dE_m \xrightarrow[t\to\infty]{} -i\pi,$$

不会与 $t$ 成正比，没有(6.2.29)式那样大的贡献。

同样重要的是 $E_n-E_i\simeq 0$ 的情况。限于这种情况，我们从新考虑(6.2.25)式中的求和。取小的 $\varepsilon>0$，$|E_i-E_m|>\varepsilon$的项 II 没有多大贡献。简写 $\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_i\rangle = Q_{nmi}$，项 I 的贡献为

$$\left[\lambda^2\sum_{m\neq i}Q_{nmi}\frac{\mathscr{P}}{E_i-E_m}\right](E_i-E_n)^{-1}$$

$$\times(\exp[-i(E_i-E_n)t/\hbar]-1), \qquad (6.2.30)$$

其中，已把 $|E_i-E_m|>\varepsilon$ 时的和取为 $\varepsilon\downarrow 0$ 时科希(Cauchy)主值意义下的积分。$\mathscr{P}$是其记号。

当 $|E_i-E_m|<\varepsilon$ 时，把项 I 和 II 一起考虑，为

$$\lambda^2\sum_{m\sim i}Q_{nmi}\delta(E_i-E_m)\int_{E_i-\varepsilon}^{E_i+\varepsilon}\frac{dE_m}{E_i-E_m}$$

$$\times\left(\frac{\exp[-i(E_i-E_n)t/\hbar]-1}{E_i-E_n}\right.$$

$$\left.-\frac{\exp[-i(E_m-E_n)t/\hbar]-1}{E_m-E_n}\right). \qquad (6.2.31)$$

把 $E_m$ 看成是复变量，由于被积函数在$E_m=E_i$处是正则的，因此积分回路可以变成以$E_i+\varepsilon$和$E_i-\varepsilon$为端点的下半平面上的半圆。至于为何不到上半平面去，稍后即可明白。做变量变换

$$(E_m-E_i)t/\hbar\equiv z,\ (E_n-E_i)t/\hbar\equiv x.$$

这个积分不难计算：

$$\frac{t}{\hbar}\int_{C_l}\frac{1}{z}\left(\frac{e^{ix}-1}{x}-\frac{e^{i(x-z)}-1}{x-z}\right)dz\xrightarrow[t\to\infty]{}\frac{i\pi t}{\hbar}\frac{e^{ix}-1}{x}.$$

$C_l$是图6.7所示的积分回路，由于半径随着$t\to\infty$而增大，因此被积函数中的第二项可以忽略。

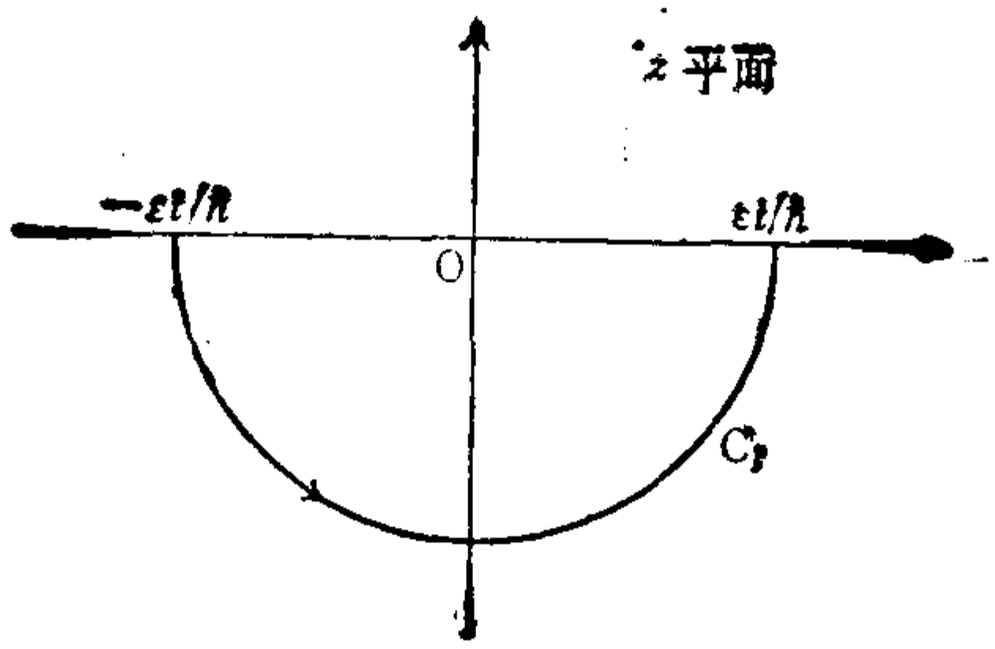



图 6.7

这样，由(6.2.25)式，(6.2.23)式变为

$$c_n(t) = \left[\lambda\langle v_n, H' v_j\rangle + \lambda^2 \sum_{m\neq j} \langle v_n, H' v_m\rangle\langle v_m, H' v_j\rangle \times \left\{\frac{\mathscr{P}}{E_j - E_m} + i\pi\delta(E_j - E_m)\right\}\right] \times \frac{\exp[-i(E_j - E_n)t/\hbar] - 1}{E_j - E_n}. \quad (6.2.32)$$

与此相应，(6.2.29)式的二级近似会如何？似乎无需写出有关的表达式。

即使到了这一级近似，也并未改变$P_{\Delta\leftarrow j}(t)$与 $t$ 成正比的关系。由于初始处于 $j$ 态的体系于 $t$ 时刻在状态群 $\Delta$ 之中被发现的概率与 $t$ 成正比，因此可以说，$j\to\Delta$ 的跃迁是以一定速度发生的。习惯上该速度 $dP_{\Delta\leftarrow j}(t)/dt = w_{\Delta\leftarrow j}$ 叫做**跃迁概率**。其实，与其这么叫，还不如叫做跃迁概率速度更为恰当一些。把上述结果用公式写出来，即是

$$w_{\Delta\leftarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{n\in\Delta}\left|\lambda\langle v_n, H' v_j\rangle + \lambda^2 \sum_{m\neq j}\frac{\langle v_n, H\, v_m\rangle\langle v_m, H' v_j\rangle}{E_j - E_m - i\varepsilon}\right|^2 \delta(E_n - E_j), \quad (6.2.33)$$

其中，按照习惯，有

$$\frac{\mathscr{P}}{E_j - E_m} + i\pi\delta(E_j - E_m) = (E_j - E_m - i\varepsilon)^{-1} \quad (\varepsilon \downarrow 0). \tag{6.2.34}$$

严格地说，这个 $\delta$ 函数有宽度 $2\pi\hbar/t$（参看图 6.6）。(6.2.33)式表明，在此数量级的不确定的范围内，量子力学跃迁 $i \to \Delta$ 过程中能量守恒。

在（6.2.33）式中绝对值符号内，从第二项右端读起，可以建立下述图像：体系最初处于状态 $v_j$，受微扰 $\lambda H'$ 作用后跃迁到 $V_m$ 态，之后又跃迁到 $v_n$ 态。称这种 $V_m$ 为**中间态**。虽然在定态微扰论中也使用同样术语。但是，它似乎源于跃迁的微扰论。

如在(6.2.34)式中所见，跃迁到那些中间态时，有的能量守恒，有的能量不守恒。称后者为**虚跃迁**，与此对应，前者叫**实跃迁**。

## §6.3 绝 热 近 似

例如给原子加电场和磁场的情形，用原子的时间标度来衡量，均从零开始到达预期值的过程似乎是极其缓慢的。纵然用经典力学来描述，氢原子的电子沿玻尔轨道绕行一周的时间也不过大约 $10^{-16}$(s)。在这一节，我们将考虑变化如此缓慢的微扰作用情形下的近似方法。

当然这种方法也可以应用于分子与核力问题。对分子来说，重原子核只是缓慢地动，其位置移动所引起相互作用的差异就可以看成是上述意义下的微扰。零级近似则应是固定原子核位置后电子的运动。这样得到的电子动能本征值 $\varepsilon$ 就要与原子核所固定的位置有关。对双原子分子来说，则与核间距 $R$ 有关。用下面近似处理原子核的运动时，这种 $\varepsilon = \varepsilon(R)$ 不是能反映加上了核电荷库仑势的核力势吗。

### a） 绝热定理

现在，有以 $t/T$ 形式明显依赖于时间 $t$ 的哈密顿量 $H(t/T)$，

其本征值问题

$$H(\tau)u_n(\tau) = E_n(\tau)u_n(\tau)\ (\tau = t/T) \qquad (6.3.1)$$

完全可解，本征值全部是离散的，$\{u_n\}$构成完备正交归一系。

[假定 1]

$$\left|(E_n(\tau)-E_m(\tau))^{-1}\langle u_n(\tau),\ \frac{\partial H}{\partial \tau}\ u_m(\tau)\rangle\right| \leqslant M_{nm} \qquad (6.3.2)$$

如果存在常数矩阵$M$，对于全部 $0 \leqslant \tau \leqslant 1, n, m$，均保证上式成立，那么，零时刻处于状态 $u_j(0)$ 的体系在 $t$ 时刻跃迁到 $u_n(t/T)$ 态的概率幅(对于任意的 $0 \leqslant t \leqslant T$) 为

$$c_{nj} = \delta_{nj} + O\left(\frac{1}{T}\right)\ (T \to \infty)。 \qquad (6.3.3)$$

这叫**绝热定理**。

使$T$增大，就是减缓哈密顿量$H(t/T)$随时间的变化。这时体系确实渐近地变到$u_n(t/T)$态。这正是绝热定理的内容。实际上，还需要一些附加的假定，我们将在证明的过程中叙述它们。

为了证明绝热定理，就要求解运动方程

$$i\hbar\frac{\partial \psi_t}{\partial t} = H(t/T)\psi_t, \quad \psi_{t=0} = u_j(0)。$$

仿照(6.2.5)式，令

$$\psi_t = \sum_n u_m(\tau)c_m(\tau, T)\exp\left[-i\int_0^t \omega_m(t'/T)dt'\right](\tau = t/T)。$$

(6.3.4)

再来确定系数$c_m(\tau;T)$。$c_m$不仅依赖于$\tau$，而且也依赖于$T$。要证明(6.3.3)式，这是重要之点。此外，有

$$\hbar\omega_m(\tau) = E_m(\tau) - i\hbar\langle u_m(\tau), du_m(\tau)/dt\rangle。 \qquad (6.3.5)$$

让$d/dt = T^{-1}d/d\tau$作用于$\langle u_m(\tau), u_m(\tau)\rangle = 1$，便可得知，上式右边第二项是一个$O(1/T)$的实数。将(6.3.4)式代入运动方程，再构造与$u_m(\tau)$的内积，便有

$$\frac{dc_n(\tau;T)}{\partial \tau} = -\sum_{m\neq n}\left\langle u_n(\tau), \frac{du_m(\tau)}{d\tau}\right\rangle c_m(\tau;T)$$

$$\times \exp\left\{-iT\int_0^T[\omega_m(\sigma)-\omega_n(\sigma)]d\sigma\right\}. \quad (6.3.6)$$

$T$在这个方程中是显现的，由此可知，$c_m$ 确实与$T$有关。当 $T\to\infty$时，方程右边会剧烈振荡。注意到(6.3.5)式右边还有第二项，(6.3.6) 式右边就不存在对角项$m=n$了，取某常数 $\Omega>0$，再加上

[假定 2] 当 $m\neq n$时，有$|E_m(\tau)-E_n(\tau)|\rangle\hbar\Omega$，就会保证上述振荡。$\omega_m$与$E_m$仅差(6.3.5)式右边第二项，当$T$充分大时，$|\omega_m-\omega_n|>\Omega$。另外，在(6.3.6)式中，

$$-\left\langle u_n,\frac{\partial u_m}{\partial\tau}\right\rangle=(E_n-E_m)^{-1}\left\langle u_n,\frac{\partial H}{\partial\tau}u_m\right\rangle(n\neq m)$$

成立。将(6.3.1)式对 $\tau$ 微商，即可得到上式。因此，当把(6.3.6)式写成

$$\frac{dc_n(\tau;T)}{d\tau}=\sum_m P_{nm}(\tau;T)c_m(\tau;T) \quad (6.3.7)$$

时，矩阵$P$的对角元为

$$P_{nn}(\tau;T)=0,$$

非对角元为

$$P_{nm}(\tau;T)=\frac{\left\langle u_n(\tau),\dfrac{\partial H(\tau)}{\partial\tau}u_m(\tau)\right\rangle}{E_n(\tau)-E_m(\tau)}\times\exp\left(-iT\int_0^T[\omega_m(\sigma)-\omega_n(\sigma)]d\sigma\right).$$

例如将其写为$F_{nm}(\tau)\exp[iT\varphi(\tau)]$，则由[假定1]可知

$$|F_{nm}(\tau)|=|P_{nm}(\tau;T)|\leqslant M_{nm}. \quad (6.3.8)$$

[假定 3] $F_{nm}(\tau)/\dot\varphi(\tau)$在区间[0,1] 中分段单调。

单调子区间的个数为 $N_1$，其中 $\dot\varphi\equiv d\varphi/d\tau$。加上这一假定之后，根据这种子区间之一 $[a,b]$ 中的积分第二中值定理，会存在 $a<\xi<b$ 的$\xi$，使

$$\mathrm{Re}\int_0^\tau P_{nm}(\tau';T)d\tau'=\frac{F_{nm}(0)}{\dot\varphi(0)}\int_0^\xi\dot\varphi(\tau')\cos\{T\varphi(\tau')\}d\tau'$$

$$+\frac{F_{nm}(\tau)}{\dot{\varphi}(\tau)}\int_{\xi}^{\tau}\dot{\varphi}(\tau')\cos\{T\varphi(\tau')\}d\tau',$$

由于 $|\dot{\varphi}(\tau)|>\Omega$,所以

$$\left|\mathrm{Re}\int_0^{\tau}P_{nm}(\tau';T)d\tau'\right|\leqslant\frac{2M_{nm}}{\Omega}\frac{1}{T}.$$

对虚部也可进行同样的讨论,由于这样的区间有$N_1$个,因此有

$$\left|\int_0^{\tau}P_{nm}(\tau';T)d\tau'\right|\leqslant\frac{4N_1M_{nm}}{\Omega}\frac{1}{T}. \tag{6.3.9}$$

我们利用(6.3.8)和(6.3.9)两式来讨论微分方程(6.3.7)的解。初始条件是 $c_n(0;T)=\delta_{ni}$。根据逐次逼近法,该方程的解类似于(4.5.30)式的形式:

$$c_n(\tau;T)=\delta_{ni}+\sum_{s=0}^{\infty}\int_0^{\tau}d\tau_s\int_0^{\tau_s}d\tau_{s-1}\cdots\int_0^{\tau_2}d\tau_1$$

$$\times[P(\tau_s)P(\tau_{s-1})\cdots P(\tau_1)]_{ni}.$$

将其代入(6.3.7)式,不难确定,它就是解。其中,省略了矩阵$P$的参量$T$,而$[\cdots)_{ni}$ 表示矩阵之积的$(n,i)$元。

在这个多重积分中,用(6.3.9)式来估算与$\tau_1$有关的积分,用(6.3.8)式来估算剩余的积分,有

$$|c_n(\tau;T)-\delta_{ni}|\leqslant\frac{1}{T}\frac{4N_1}{\Omega}\sum_{s=1}^{\infty}\frac{\tau^{s-1}}{(s-1)!}[M^s]_{ni},$$

即

$$|c_n(\tau;T)-\delta_{ni}|<\frac{1}{T}\frac{4N_1}{\Omega}[Me^{M\tau}]_{ni}. \tag{6.3.10}$$

所期望的(6.3.3)式由此得证。

但是,[假定 2]似乎过强。可以用下面假定代替它,证明过程大致相同(参看[梅泽] $p.254$)。

[假定 2′] 对于(6.3.5) 式中 $\omega_n(\tau),\omega_m(\tau)-\omega_n(\tau)$ 在 $0\leqslant\tau\leqslant1$ 区间内有$N_2$个零点$\tau_\rho$。它们充其量是 $l$ 位,在各自附近,有

$$|\omega_m(\tau)-\omega_n(\tau)|>|\tau-\tau_\rho|^lA.$$

若用这个假定，则结果要比(6.3.10)式弱些

$$|c_n(\tau;T)-\delta_{ni}|<\left(\frac{4\Delta}{T}\right)^{1/(l+1)}4(N_1+N_2)[Me^{M\tau}]_{ni}. \tag{6.3.11}$$

尽管如此，能级一致，仍不会发生跃迁.

若 $t=T$ 时哈密顿量停止变化，则此后(6.3.5)式变成 $\hbar\omega_m(\tau)=E_m(\tau)$，将(6.3.3)式用于(6.3.4)式，就有

$$\psi_t=u_j(1)\exp[-iE_j(1)t'/\hbar-i\alpha(T)]+O\left(\frac{1}{T}\right)(T\to\infty), \tag{6.3.12}$$

其中，$u_j(1)$ 和 $E_j(1)$ 是 $t=T$ 时($t/T=1$) 的值，$t'=t-T$，而

$$\alpha(T)\equiv T\int_0^1\omega_j(\tau)d\tau=\frac{T}{\hbar}\int_0^1E_j(\tau)d\tau$$

$$-i\int_0^1\left\langle u_j(\tau),\frac{du_j(\tau)}{d\tau}\right\rangle d\tau.$$

例如，哈密顿量的形式为

$$H=H_1+f(t/T)H', \tag{6.3.13}$$

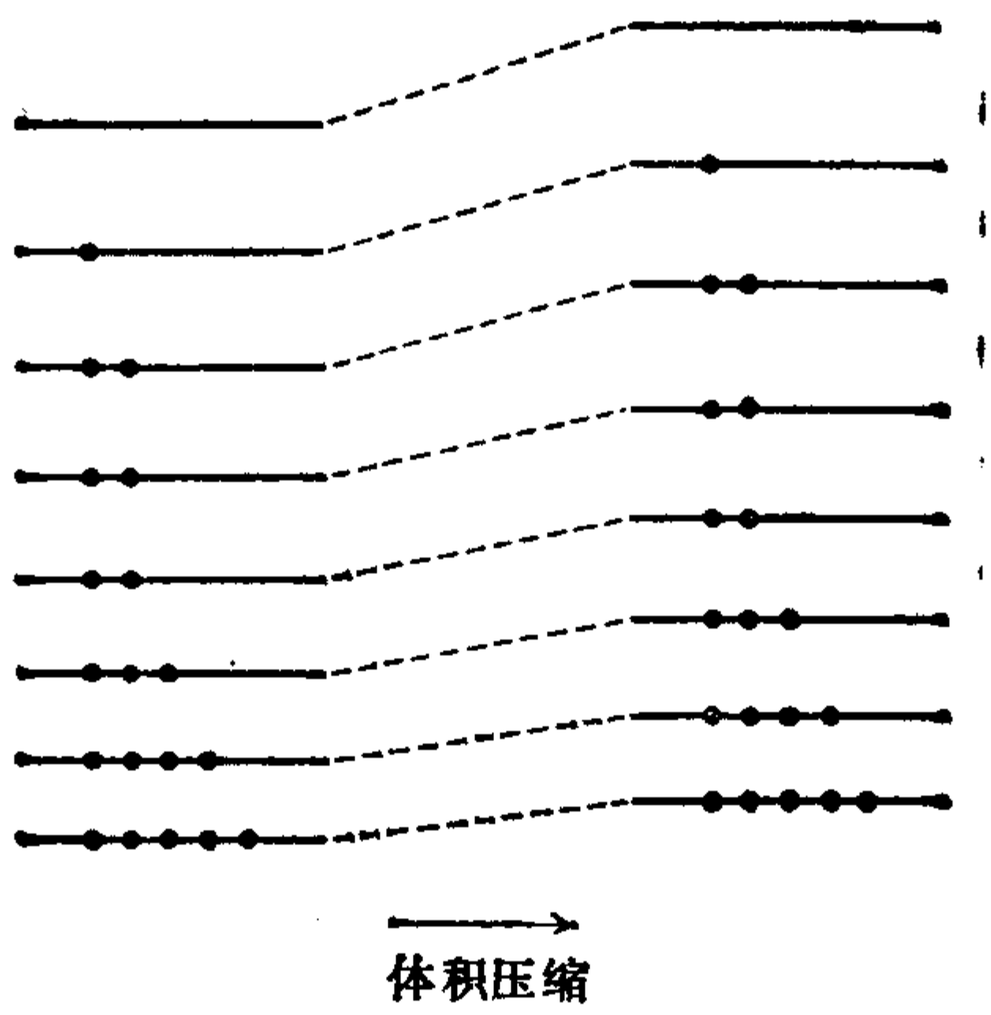



图 6.8　气体的绝热压缩. 各个能级带着一定数目的气体粒子原封不动地升降

若$\lambda(0)=0,\lambda(1)=1$,则在$t=0$时由无微扰哈密顿量$H_0$的一个本征态$u_i(0)=v_i$出发,"缓慢"地加上微扰$H'$，最后会变到总哈密顿量$H=H_0+H'$的本征态 $u_i(T)$.

这个定理叫绝热定理是有历史原因的，它对应于早期量子论中起过重大作用的同名定理。实质上，在相互作用弱的多粒子体系的统计力学情形中,把状态取为所谓单粒子能级的粒子分布时，体系的参量(例如容器的体积)缓慢变化会移动各个能级，而根据这个定理,诸粒子应该原封不动地留在各自的能级上(参看图 6.8)。这个过程中体系的熵不变，在热力学的意义上，它确实是绝热过程。

### b) 玻恩-奥本海默（Born-Oppenheimer）近似

最初，这是为了推导分子结合势而设想的。分子由$N$个原子核(质量为$M_\alpha$,原子序数为$Z_\alpha$,位置矢量为$\boldsymbol{R}_\alpha$;$\alpha=1,2,\cdots,N$)和 $n$ 个电子(质量为$m$,电荷为$-e$,位置矢量为 $\boldsymbol{r}_a$; $a=1,2,\cdots,n$)组成。其哈密顿量为

$$H=-\sum_\alpha\frac{\hbar^2}{2M_\alpha}\Delta_\alpha-\sum_a\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_a-\sum_\alpha\sum_a\frac{Z_\alpha e^2}{|\boldsymbol{r}_a-\boldsymbol{R}_\alpha|}$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\sum\frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|\boldsymbol{R}_\alpha-\boldsymbol{R}_\beta|}+\frac{1}{2}\sum_{a\neq b}\sum\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_a-\boldsymbol{r}_b|}. \tag{6.3.14}$$

若把电子与原子核的相互作用看作微扰，则无微扰体系只含斥力势,与分子似像非像。

原子核比电子重数千倍。即使电子旋转,原子核也几乎不动。因此,可以近似地认为原子核是静止的。这相当于在(6.3.14)式中让$M_\alpha\to\infty$,从而去掉了 $\Sigma(\hbar^2/2M_\alpha)\Delta_\alpha$ 一项。在这样得到的哈密顿量 $H_0$ 中,原子核的位置矢量 $\boldsymbol{R}_\alpha$ 变成了给定的参量，$H_0$ 既包含了引力势，变量又只是电子坐标。这种哈密顿量处理起来应该比较简单。称之为**静近似**.

静近似 $H_0$ 的本征值 $\varepsilon$ 依赖于所假定的原子核的位置:

$$\varepsilon = \varepsilon(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_1, \cdots, \boldsymbol{R}_N). \tag{6.3.15}$$

原子核的位置变，ε 的值就跟着变。分子谱线中，有的表现了原子核的振动，有的表现了原子核作为一个整体的转动。若诸电子紧随着原子核运动，对应于原子核每一时刻的位置都描绘出$H_0$的本征态，则(6.3.15)式就会给出每一时刻分子的能量。这意味着，由(6.3.15)式可以计算与原子核位置变化相应的能量变化，也就是说，对于原子核的运动，$\varepsilon(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots, \boldsymbol{R}_N)$ 起着势的作用。要是再把前面取作零的原子核动能 $-\Sigma(\hbar^2/2M_\alpha)\Delta_\alpha$ 加上，就可以讨论原子核的振动谱之类的问题。读者或许已经感到，这一设想正在扭转上一小节绝热定理的思路。

但是，求解哈密顿量的本征值问题着眼的是定态，而前一小节所处理的与时间有关，它们显然不同。

玻恩-奥本海默绝热近似给出了有关定态绝热定理的公式。要说明其本质，哈密顿量(6.3.14)过于复杂。倒不如考虑沿 $X$ 轴的一维运动，取

$$H = H_e + H_K, \tag{6.3.16}$$

其中

$$H_e = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, X),\ H_K = -\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2}. \tag{6.3.17}$$

前者是“电子”的哈密顿量，后者算是“核”的动能。即使电子与核都有许多个，以下的讨论也没有变化。另外，适当地选择单位，将会使核质量$M$以外的多余系数消失。这样，$V$中不再有过大或过小的系数。取 $X$ 固定的静近似来求解$H_e$的本征值问题，设 $V(x, X)$ 对于适当的 $X$ 值会使$H_e$具有束缚态$\varphi_n(x; X)$。于是，能量本征值 $\varepsilon_n(X)$和波函数$\varphi_n(x; X)$的扩展均取为 1 的量级。

但是，由于原子核很重，因此它在平衡位置附近的振动幅度比 1 小得多。为了看到有多么小，假定上面说明的设想是正确的，将核运动的哈密顿量写为

$$H_{\text{nucl}} = -\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{1}{2}\varepsilon''(X_0)(X - X_0)^2,$$

其中，撇表示对 $X$ 微商，$X_0$是平衡位置，于是，$\varepsilon'(X_0)=0$．根据以上假定，$\varepsilon''(X_0)$是 1 的量级，这样就可以令

$$X = X_0 + \kappa\xi,\quad \kappa = (1/M)^{\frac{1}{2}}, \tag{6.3.18}$$

$\xi$ 与 1 同一量级．若回到通常的单位制，则 $\kappa=(m/M)^{1/4}$，即电子与核质量比的 4 次方根． 玻恩-奥本海默近似利用这个小参量来做展开．

进入讨论之前，先准备几个辅助公式．对于某范围的 $X$，本征值问题

$$H_e\varphi_n(x;X) = \varepsilon_n(X)\varphi_n(x;X) \tag{6.3.19}$$

具有束缚态的解，与其它解一起可构成完备正交归一系．借助于(6.3.18)式用 $\kappa$ 把(6.3.19)式展开，先写出

$$H_e^{(0)} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,X_0),$$

从 $\kappa$ 的 0 次、1 次、2 次项分别得到

$$[H_e^{(0)} - \varepsilon_n(X_0)]\varphi_n(x;X_0) = 0, \tag{6.3.20}$$

$$[H_e^{(0)} - \varepsilon_n(X_0)]\varphi_n'(x;X_0) + [V(x,X_0) - \varepsilon_n'(X_0)]\varphi_n(x;X_0) = 0, \tag{6.3.21}$$

$$[H_e^{(0)} - \varepsilon_n(X_0)]\varphi_n''(x;X_0) + 2[V'(x,X_0) - \varepsilon_n'(X_0)]\varphi_n'(x;X_0) + [V''(x,X_0) - \varepsilon_n''(X_0)]\varphi_n(x;X_0) = 0. \tag{6.3.22}$$

下面$\varepsilon_n$、$\varphi_n$之类的写法意味着$X = X_0$时的 $\varepsilon_n(X_0)$、$\varphi_n(x;\ X_0)$ 等等．

构造(6.3.21)式与 $\varphi_m$ 的内积，只对电子坐标积分，可以得到

$$(\varepsilon_m - \varepsilon_n)\langle\varphi_m,\varphi_n'\rangle + \langle\varphi_m,V'\varphi_n\rangle - \varepsilon_n'\delta_{mn} = 0. \tag{6.3.23}$$

特别当 $m=n$ 时，有

$$\varepsilon_n' = \langle\varphi_n,V\varphi_n\rangle. \tag{6.3.24}$$

这是费曼定理的特殊情况，该定理指出，哈密顿量的参数微商关于本征函数的期待值等于期待值的微商．

然后，我们来做(6.3.22)式与 $\varphi_m$ 的内积．当 $m\neq n$ 时，有

$$(\varepsilon_m - \varepsilon_n)\langle\varphi_m,\varphi_n''\rangle + 2\langle\varphi_m,(V' - \varepsilon_n')\varphi_n'\rangle + \langle\varphi_m,V''\varphi_n\rangle = 0. \tag{6.3.25}$$

而当 $n=m$ 时，有

$$2\langle\varphi_n,(V'-\varepsilon'_n)\varphi'_n\rangle+\langle\varphi_n,V''\varphi_n\rangle-\varepsilon''_n=0. \quad (6.3.26)$$

现在，我们考虑包括核运动在内的总哈密顿量的本征值问题

$$(H_e+H_K-E_\alpha)u_\alpha(x,\xi)=0, \quad (6.3.27)$$

其中简记$(n,\nu)=\alpha$.由于这时采用(6.3.18)式中的变量 $\xi$，故$H_K=-(\kappa^2/2)(\partial^2/\partial\xi^2)$. 取

$$u_\alpha=u_\alpha^{(0)}+\kappa u_\alpha^{(1)}+\cdots,$$

$$E_\alpha=E_\alpha^{(0)}+\kappa E_\alpha^{(1)}+\cdots,$$

则由(6.3.27)式对 $\kappa$ 的幂级数展开式的各项可知

$$[H_e^{(0)}-E_\alpha^{(0)}]u_\alpha^{(0)}(x,\xi)=0, \quad (6.3.28)$$

$$[H^{(0)}-E_\alpha^{(0)}]u_\alpha^{(1)}(x,\xi)+[\xi V'(x,X_0)-E_\alpha^{(1)}]u_\alpha^{(0)}=0, \quad (6.3.29)$$

$$[H_e^{(0)}-E_\alpha^{(0)}]u_\alpha^{(2)}(x,\xi)+[\xi V'(x,X_0)-E_\alpha^{(1)}]u_\alpha^{(2)}+\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{1}{2}\xi^2V''(x,X_0)-E_\alpha^{(2)}\right]u_\alpha^{(0)}=0. \quad (6.3.30)$$

注意，核动能是在二级近似中勉强得到的.在零级近似(6.3.28)中，根据(6.3.20)，可以令

$$u_\alpha^{(0)}(x,\xi)=\varphi_n(x;X_0)\chi_\nu^{(0)}(\xi),\ E_\alpha^{(0)}=\varepsilon_n(X_0), \quad (6.3.31)$$

其中，$\chi_\nu^{(0)}$ 未定，量子数 $\nu$ 亦属未知.

构造(6.3.29)式与$\varphi_m$的内积，得到

$$(\varepsilon_m-\varepsilon_n)\langle\varphi_m,u_\alpha^{(1)}(\cdot,\xi)\rangle+\langle\varphi_m,[\xi V'-E_n^{(1)}]\varphi_n\rangle\chi_\nu^{(0)}(\xi)=0. \quad (6.3.32)$$

因取内积时$u_\alpha^{(1)}$的变量 $x$ 已经被积分掉了，故变成符号“·”. 为使此式在$m=n$时成立，因为 $\xi$ 是变量，所以必须有

$$\langle\varphi_n,V'(\cdot,X_0)\varphi_n\rangle=0,\ E_\alpha^{(1)}=0.$$

根据(6.3.24)式，这还意味着

$$\varepsilon'_n=[\partial\varepsilon_n(X)/\partial X]_{X=X_0}=0. \quad (6.3.33)$$

这样就可以得到确定$X_0$的条件(平衡条件).将$m\neq n$时的(6.3.32)式与(6.3.23)式比较，可知

$$u_\alpha(x,\xi) = \xi\varphi'_n(x;X_0)\chi_\nu^{(0)}(\xi) + \varphi_n(x;X_0)\chi_\nu^{(1)}(\xi), \tag{6.3.34}$$

其中，$\chi_\nu^{(1)}$ 和$\chi_\nu^{(0)}$均未定.

再构造(6.3.30)式与$\varphi_m$的内积. $m = n$时有

$$\langle\varphi_n,\xi V' u_\alpha^{(1)}(\cdot,\xi)\rangle + \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2\langle\varphi_n,V''\varphi_n\rangle - E_\alpha^{(2)}\right]\chi_\nu^{(0)}(\xi) = 0.$$

考虑到(6.3.26)和(6.3.34)两式，把上式中与$V'$和$V''$有关的项归并为$\varepsilon''_n$，从而有

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\varepsilon_n}{\partial X_0^2}\xi^2 - E_\alpha^{(2)}\right]\chi_\nu^{(0)}(\xi) = 0. \tag{6.3.35}$$

这表明，核位移 $\xi$ 在进行谐振. 当然，应假定

$$\frac{\partial^2\varepsilon_n}{\partial X_0^2} > 0, \tag{6.3.36}$$

这里 $\partial^2\varepsilon_n/\partial X_0^2$ 指的是 $[\partial^2\varepsilon_n/\partial X^2]_{X=X_0}$. 当 $\varepsilon_n(X)$ 不具有满足(6.3.33)和(6.3.36)两式的极小值时，目前的近似方法不复适用. 其原因是，这时按(6.3.18)式中的 $\xi$ 所做的展开已失去意义. 在有极小值的情况下，由(6.3.35)式的结果可见，在静近似(6.3.19)中，可以说电子的能量本征值 $\varepsilon_n(X)$和预想的一样，起着核运动势的 作用. 目前计算的二级近似中

$$\varepsilon_n(X) = \varepsilon_n(X_0) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\varepsilon_n}{\partial X_0^2}\xi^2, \quad \frac{\partial\varepsilon_n}{\partial X_0} = 0 \tag{6.3.37}$$

确实起着势的作用. 若再取进一步近似，则振动中将出现非调合性. 于是，就会偏离绝热运动的图像.

如果求出本征函数 $u_\alpha$，则将更符合绝热定理的预料. 把(6.3.30)式和$\varphi_m$的内积($m \neq n$)与(6.3.25)式比较，可以有

$$u_m^{(2)}(x,\xi) = \frac{1}{2}\xi^2\varphi''_n(x;X_0)\chi_\nu^{(0)}(\xi) + \xi\varphi'_n(x;X_0)\chi_\nu^{(1)}(\xi) + \varphi_n(x;X_0)\chi_\nu^{(2)}(\xi), \tag{6.3.38}$$

其中的 $\chi_\nu^{(1)}$ 是未定的。把零级近似 (6.3.31) 式与一级近似修正 (6.3.37)式合在一起，核与电子整个体系的波函数是

$$u_\alpha(x;X) = \varphi_n(x;X_0 + \kappa\xi)\chi_\nu(\xi) + O(\kappa^3), \quad (6.3.39)$$

其中

$$\chi_\nu(\xi) = \chi_\nu^{(0)}(\xi) + \kappa\chi_\nu^{(1)}(\xi). \quad (6.3.40)$$

请注意，电子波函数与把静近似 $\varphi_n(x;X_0)$中的$X_0$换为运动着的核的真实坐标$X = X_0 + \kappa\xi$而得到的形式一致。这一点表明，它实际地描绘出对应于核每一时刻位置的本征态。如果有的读者提出，(6.3.39)式中并不包含那种时间变化，则可考虑电子的存在概率。按照(6.3.39)式，电子在 $x$ 点附近 $dx$ 中、核在 $X = X_0 + \kappa\xi$附近 $dX$ 中被发现的概率，不正是核的$|\chi_\nu(\xi)|^2dx$ 与“核在$X$点静止时”电子在 $x$ 点的概率$|\varphi_n(x;X_0 + \kappa\xi)|^2dx$ 之积吗？

到 $\kappa$ 的几次幂，这种绝热运动描绘才不复适用了呢？

玻恩和奥本海默表明，以分子为例，包括分子的振动和旋转，近似到 $\kappa$ 的四次幂，电子仍能很好地符合绝热近似。在上述计算中，振动尚未到 $\kappa$ 的二级近似，而分子旋转却已开始进入四级近似了。

# 第七章　量子力学和相对论

直到现在，我们所用的薛定谔波动方程并不符合相对性原理．例如，质量为 $m$ 的粒子以动量 $p$ 运动，该方程给出动能为 $p^2/2m$，而在相对论中，应该是 $\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}-mc^2$。

能否变更波动方程以便适合于相对性原理？为此，有无必要变动量子力学？第一章特意在非相对论近似之后采用了相对论形式的(1.8.20)式，其原因何在？这些就是本章要回答的问题。

## §7.1　洛伦兹变换

### a)　矢量，张量

在本讲座第二卷《经典物理学》(II)中叙述过，相对性原理要求，对于洛伦兹变换，物理基本方程必须是协变的。其详细内容如下[1]。

首先，所谓洛伦兹变换是时空坐标系 $x^\mu(x^0\equiv ct, x^1\equiv x, x^2\equiv y, x^3\equiv z)$ 的实线性变换：

$$x^\mu \to x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu。 \tag{7.1.1}$$

任何 $x^\mu$ 均需满足

$$g_{\mu\nu}x'^\mu x'^\nu = g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu, \tag{7.1.2}$$

如果以 $\mu$ 为行的序号以 $\nu$ 为列的序号把上式中的 $g_{\mu\nu}$ 写成矩阵，则有

---

1）本章中，希腊字母角标在 0,1,2,3 内变化，而罗马字母角标在1,2,3内变化，只要不事先特地声明，当某一项中相同角标出现两次时，就在这些角标变化范围内求和．把应写为 $\{x^\mu\}_{\mu=0,\cdots,3}$ 的地方均简写为 $x^\mu$．并且，到 §7.3 之前，复共轭用字上的一横表示。

$$[g_{\mu\nu}]=\begin{array}{c}\mu\backslash\nu\\0\\1\\2\\3\end{array}\begin{array}{c}\begin{array}{cccc}0&1&2&3\end{array}\\\left[\begin{array}{cccc}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{array}\right]\end{array}. \tag{7.1.3}$$

条件(7.1.2)表明，线性变换(7.1.1)不会改变二次型 $g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu$。也称 $g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu$ 为**不变量**。用 $x_\mu=g_{\mu\nu}x^\nu$，$x^\mu=g^{\mu\nu}x_\nu$ 来定义角标的上下移动，于是可把 $g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu$ 写成 $x_\mu x^\mu$。作为矩阵，有 $[g^{\mu\nu}]=[g_{\mu\nu}]$，而若把克朗内克符号 $\delta$ 写成 $g^\mu_\nu$，则有

$$g^{\mu\nu}g_{\nu\lambda}=g^\mu_\lambda. \tag{7.1.4}$$

作为洛伦兹变换的典型例子，从固定坐标系到沿 $x^3$ 轴正向以速度 $v$ 运动坐标系的变换(图 7.1)是

$$[\Lambda^\mu_\nu(v)]=\begin{array}{c}\mu\backslash\nu\\0\\1\\2\\3\end{array}\begin{array}{c}\begin{array}{cccc}0&1&2&3\end{array}\\\left[\begin{array}{cccc}\cosh\chi&0&0&-\sinh\chi\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\-\sinh\chi&0&0&\cosh\chi\end{array}\right]\end{array}$$

$$\left(\tanh\chi=\frac{v}{c}\right). \tag{7.1.5}$$

与此相仿，单纯的坐标系旋转也包含在洛伦兹变换之中。绕 $x^2$ 轴旋转 $\beta$ 角和绕 $x^3$ 轴旋转 $\gamma$ 角(图 7.2)的变换矩阵分别是

$$[\Lambda^\mu_\nu(\beta)]=\left[\begin{array}{cccc}1&0&0&0\\0&\cos\beta&0&-\sin\beta\\0&0&1&0\\0&\sin\beta&0&\cos\beta\end{array}\right],$$

$$[\Lambda^\mu_\nu(\gamma)]=\left[\begin{array}{cccc}1&0&0&0\\0&\cos\gamma&\sin\gamma&0\\0&-\sin\gamma&\cos\gamma&0\\0&0&0&1\end{array}\right]. \tag{7.1.6}$$

进而，空间坐标轴的反射、时间坐标轴的反演也是洛伦兹变换，分别用 $P_s^u$ 和 $T_s^u$ 来表示它们，有

$$[P_s^u]=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{bmatrix},$$

$$[T_s^u]=\begin{bmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}. \tag{7.1.7}$$

注意，空间反演和时间反演矩阵的行列式值是 $-1$，而其它矩阵的行列式值是$+1$。一般地，把 $\det[\Lambda_v^u]=1$ 不改变时间方向（$\Lambda_0^0>0$，实际可证 $\Lambda_0^0\geqslant 1$）的洛伦兹变换叫做**正常洛伦兹变换**。任何正常洛伦兹变换都可以用(7.1.5)和(7.1.6)两式适当的积表示。

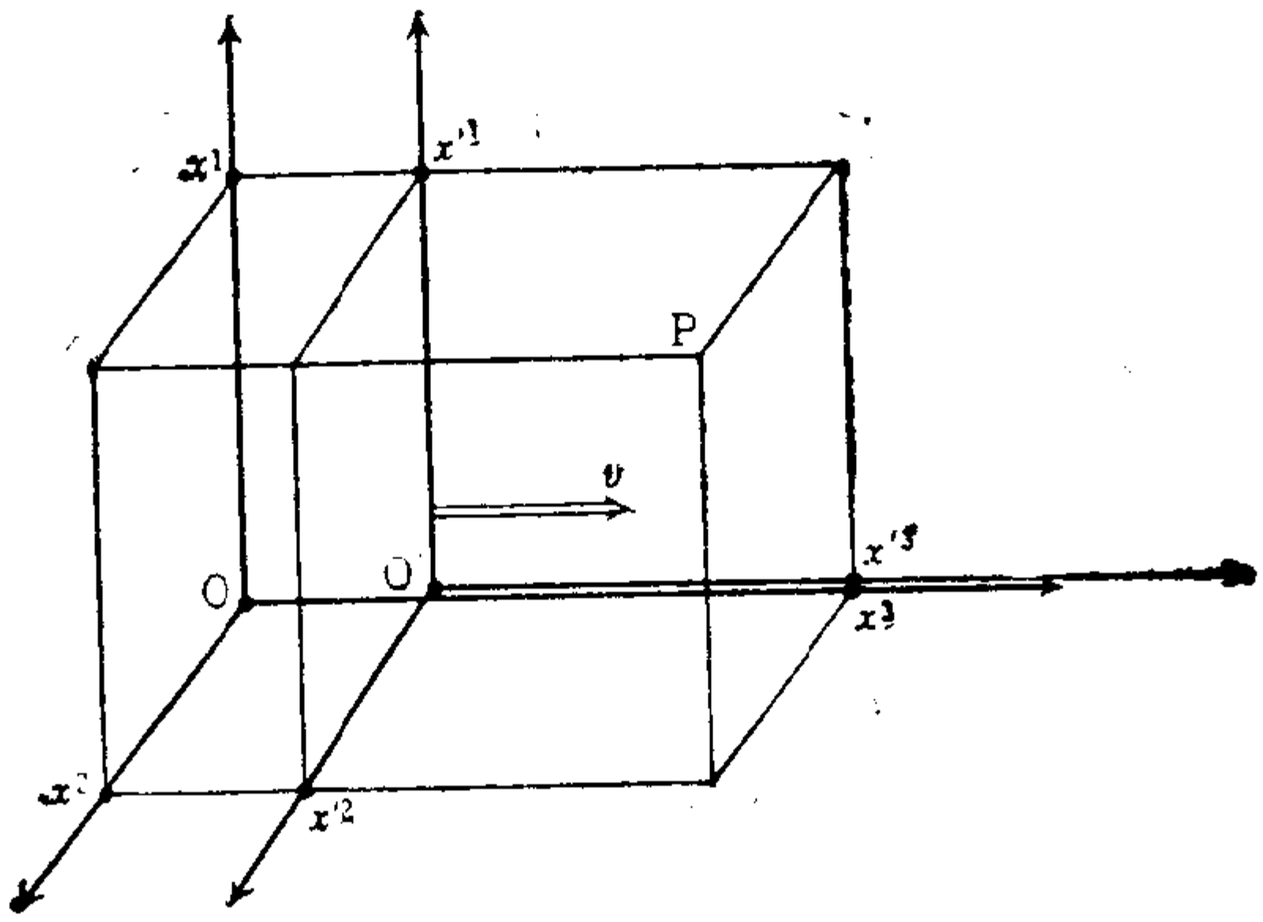



图 7:1　到运动坐标系的变换

洛伦兹变换的全体 $G$ 构成群。其中，正常洛伦兹变换的全体 $G_\uparrow^+$ 构成不变子群(正常洛伦兹群)。而不管 $\det[\Lambda_v^u]$ 的符号如何，只要 $\Lambda_0^0\geqslant 1$ 的变换全体 $G_\uparrow$ 也构成不变子群(顺时洛伦兹群)。

洛伦兹变换的条件(7.1.2)等价于

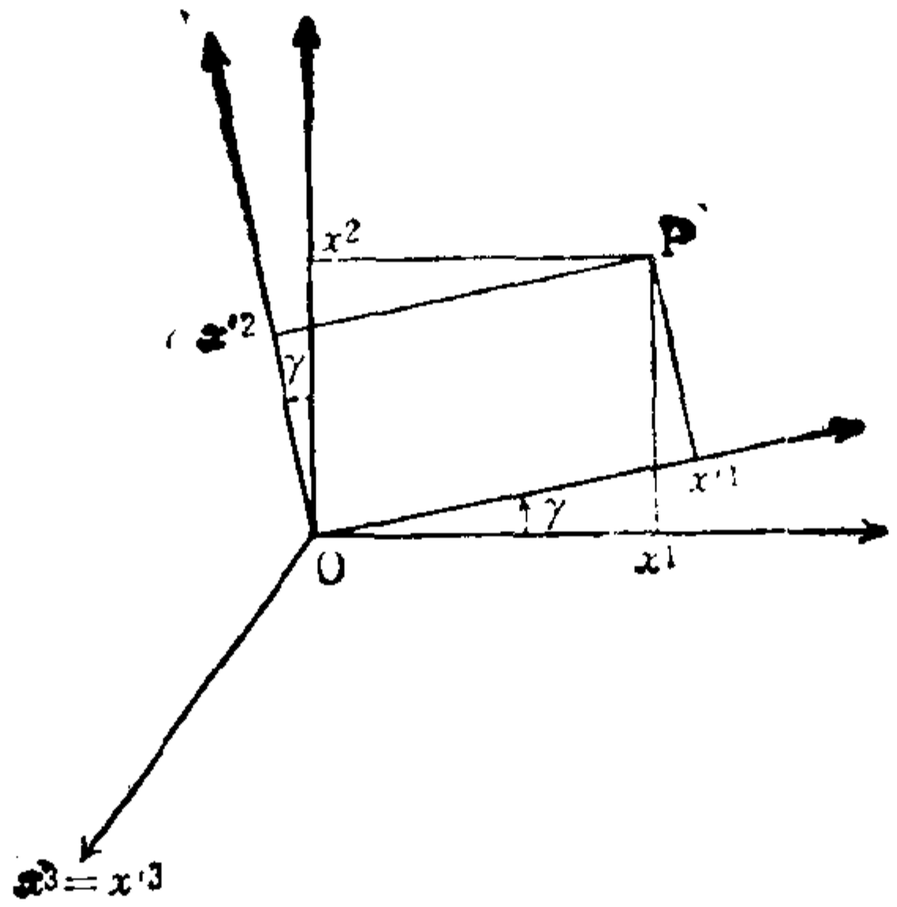



图 7.2　坐标系绕$x^3$轴的旋转．不难看出，图中画的是 $P$ 点在$x^1x^2$ 平面上的情况

$$\Lambda^{\mu}_{\rho}g_{\mu\nu}\Lambda^{\nu}_{\sigma} = g_{\rho\sigma}. \tag{7.1.8}$$

作为矩阵关系，上式可以写成 $'\Lambda g\Lambda = g$（角标 t 表示转置矩阵），于是有$(\det\Lambda)^2 = 1$．不过，由于矩阵元随上下角标不同而变，因此只写成 $\Lambda$ 并不保险，仍然像上面对 $g$ 一样，写为 $[\Lambda^{\mu}_{\nu}]$ 较好．实际上，(7.1.8)式可以改写为 $\Lambda^{\mu}_{\rho}\Lambda_{\mu\sigma} = g_{\rho\sigma}$，再乘以 $g^{\sigma\lambda}$ 就会变成

$$\Lambda^{\mu}_{\rho}\Lambda^{\lambda}_{\mu} = g^{\lambda}_{\rho}. \tag{7.1.9}$$

在 $\lambda$ 和 $\mu$ 之中有一个等于零时，$\Lambda^{\lambda}_{\mu} = -\Lambda^{\mu}_{\lambda}$，而在其它情况下，$\Lambda^{\lambda}_{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\lambda}$．

因 $\det\Lambda \neq 0$，故可以反过来求解(7.1.1)式，结果是

$$x^{\nu} = (\Lambda^{-1})^{\nu}_{\rho}x'^{\rho}. \tag{7.1.10}$$

这个变换的矩阵是 $[\Lambda^{\mu}_{\nu}]$ 的逆矩阵

$$\Lambda^{\mu}_{\nu}(\Lambda^{-1})^{\nu}_{\rho} = g^{\mu}_{\rho}. \tag{7.1.11}$$

在上式两边乘以 $\Lambda^{\sigma}_{\mu}$，再应用(7.1.9)式，可得

$$(\Lambda^{-1})^{\sigma}_{\rho} = \Lambda^{\sigma}_{\rho}. \tag{7.1.12}$$

而将(7.1.10)式写成

$$x^{\nu} = \Lambda^{\nu}_{\rho}x'^{\rho}. \tag{7.1.13}$$

与(7.1.11)式相仿，$(\Lambda^{-1})^{\nu}_{\rho}\Lambda^{\rho}_{\sigma} = g^{\nu}_{\sigma}$ 同样成立．

变换(7.1.1)把微商算符 $\partial_{\mu} \equiv \partial/\partial x^{\mu}$ 变为

$$\partial'_\rho = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\rho}\frac{\partial}{\partial x^\nu} = \Lambda^\nu_\rho \partial_\nu. \tag{7.1.14}$$

由此式可知 $\partial_\mu$ 的角标放在下面的理由.

一般地,在变换(7.1.1)之下, 像 $B'_\mu = \Lambda^\lambda_\mu B_\lambda$ 那样变化的量叫做**协变矢量**. 从(7.1.9)式可知 $A'^\mu B'_\mu = A^\lambda B_\lambda$. 像这样在坐标变换时不变的量叫做**标量**.

如果在坐标变换(7.1.1)时,带有两个角标的量 $T^{\mu\nu}$ 变换为

$$T'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\lambda T^{\rho\lambda},$$

则称之为**逆变张量**. 似乎无需再一一列举更高阶逆变张量和协变张量的定义. 像 $T^\mu_\nu$ 这种形式的称为混合张量. 可以把矢量和标量分别看成是一阶张量和零阶张量.

$g_{\mu\nu}$ 在任何坐标系中均用(7.1.3)式定义,按照(7.1.8)式,可以把 $g_{\mu\nu}$ 叫做二阶协变张量. 把(7.1.9)式写成 $\Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma g_{\mu\nu} = g_{\rho\sigma}$, 于是可以把克朗内克 $\delta$ 符号叫做二阶混合张量.

### b) 场量的变换,克莱因-戈登方程

$\Psi^{\mu\nu}(\mathrm{P})$ 是时空点 P 的某个函数,若坐标变换 (7.1.1) 将其变为

$$\Psi'^{\mu\nu}(\mathrm{P}) = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\lambda \Psi^{\rho\lambda}(\mathrm{P}), \tag{7.1.15}$$

则称其为二阶**逆变张量场**. 由于变换(7.1.1)表明, 同一个时空点 P 的坐标,在某一坐标系中是 $x^\nu$, 而在另一个坐标系中是 $x'^\mu$, 因此,上述定义表明

$$\Psi'^{\mu\nu}(x') = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma \Psi^{\rho\sigma}(\Lambda^{-1}x'). \tag{7.1.16}$$

当用 $x'^\lambda$ 表示 $x'$ 的分量时, $\Lambda^{-1}x'$ 的分量坐标为$(\Lambda^{-1})^\lambda_\nu x'^\nu$. 一般张量场亦按同样方式定义.

包含任意个数的标量 $a,\cdots$,矢量 $f^\mu,\cdots$,张量 $h^{\rho\sigma},\cdots$的方程 $F(a,\cdots,f^\mu,\cdots,h^{\rho\sigma},\cdots)=0$ 是**协变**的,这就是说,在洛伦兹变换 (7.1.1) 之下仍有同样形式的 $F(a',\cdots,f'^\mu,\cdots,h'^{\rho\sigma},\cdots)=0$ 成立.

协变方程的例子之一是标量场 $\Phi$ 的**克莱因-戈登方程**

$$\left[\partial_\mu\partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\Phi = 0, \qquad (7.1.17)$$

其中 $m$ 是具有质量量纲的常标量。把此方程详细写出来，是

$$\left[\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\Phi = 0.$$

对于满足

$$E^2 = \boldsymbol{p}^2c^2 + m^2c^4 \qquad (7.1.18)$$

的任意实常量 $E$ 和 $\boldsymbol{p} = (p_x, p_y, p_z)$，方程的解是

$$\Phi = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\right] \quad \boldsymbol{r} = (x, y, z).$$

因(7.1.18)式是能量 $E$ 与动量 $\boldsymbol{p}$ 的相对论关系式，故可以认为，上式表示自由粒子的状态。

但是，不能用(7.1.17)式来代替薛定谔方程。首先，(7.1.17)式允许负能情况 $E = -\sqrt{\boldsymbol{p}^2c^2 + m^2c^4}$，但与之对应的解在物理上却无法解释。尽管如此，正像加上随时间变化的微扰时所知道的那样，一般不可能排除负能解。即使假定关于负能解有了某种解释，也无法维持以 $|\Phi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 为粒子存在概率密度的量子力学解释。这是因为，对于包含负能解的波包

$$\Phi(\boldsymbol{r},t) = \int d^3\boldsymbol{p}\left(a_+(\boldsymbol{p})\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E_pt - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\right]\right.$$

$$\left. + a_-(\boldsymbol{p})\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(-E_pt - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\right]\right)$$

$$(E_p = \sqrt{\boldsymbol{p}^2c^2 + m^2c^4})$$

来说，总概率守恒

$$\int_{\text{全空间}}|\Phi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3\boldsymbol{r} = \text{与 } t \text{ 无关的量} \qquad (7.1.19)$$

已经不再成立了。

即不变更量子力学，又能取代薛定谔方程，应该寻找另一个相

对论协变方程。这是在本世纪 20 年代后期狄拉克为自己提出的课题。不过，我们的推演途径与之略有不同。

## §7.2 旋　　量

### a) 正常洛伦兹群的表示

现在，取一个两行两列的矩阵 $A$，使其满足 $X' = A^{\dagger}XA$，即

$$\begin{bmatrix} ct' + z' & x' - iy' \\ x' + iy' & ct' - z' \end{bmatrix} = A^{\dagger}\begin{bmatrix} ct + z & x - iy \\ x + iy & ct - z \end{bmatrix}A, \quad (7.2.1)$$

其中，符号“†”表示厄米共轭，$A$ 使坐标发生了实线性变换。由坐标构成的矩阵 $X$ 的厄米性依然保留，可见该变换是实变换。再注意到

$$\det\begin{bmatrix} ct + z & x - iy \\ x + iy & ct - z \end{bmatrix} = g_{\mu\nu}x^{\mu}x^{\nu},$$

取(7.2.1)式两边的行列式，便有

$$\det A = 1. \quad (7.2.2)$$

于是，坐标变换(7.2.1)成为满足条件(7.1.2)的洛伦兹变换。满足(7.2.2)式的矩阵称为单模矩阵。由单模矩阵引起的变换(7.2.1)显然构成群，称之为 $SL(2,C)$。把 $A$ 的矩阵元限于实数而得到的子群叫做 $SL(2,R)$。

若特地取 $A$ 为

$$A(v) = \pm\begin{bmatrix} \exp\left(-\frac{\chi}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{\chi}{2}\right) \end{bmatrix}$$

$$\left(\tanh\chi = \frac{v}{c}\right), \quad (7.2.3)$$

则会得到从固定坐标系到沿 $x^1$ 轴正向以速度 $v$ 运动坐标系的洛伦兹变换(7.1.5)。另外，若取

$$A(\beta) = \pm \begin{bmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix},$$

$$A(\gamma) = \pm \begin{bmatrix} \exp\left(-\frac{i\gamma}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{i\gamma}{2}\right) \end{bmatrix}, \qquad (7.2.4)$$

则分别得到(7.1.6)式中的坐标系旋转$[\Lambda^{\mu}_{\nu}(\beta)]$和$[\Lambda^{\mu}_{\nu}(\gamma)]$. 为了确认这一点，方便的做法是采用单位矩阵 $\sigma_0$ 和泡利矩阵 $\sigma$ 的组合

$$\sigma_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

把(7.2.1)式中的矩阵 $X$ 写成

$$X = x^{\mu}\sigma_{\mu}. \qquad (7.2.5)$$

先计算 $A^{\dagger}\sigma_{\mu}A$. 计算结果用上述各种情形中对应于各个 $A$ 的矩阵 $\Lambda$ 表示为

$$A^{\dagger}\sigma_{\mu}A = \Lambda^{\nu}_{\mu}\sigma_{\nu}, \qquad (7.2.6)$$

即 (7.2.1) 式在 $\sigma_{\mu}$ 的世界中引起了协变矢量的变换，故它通过(7.2.5)式与 $x^{\mu}$ 连系便造成了显然是所期望的逆变矢量的变换.

由于任何正常洛伦兹变换均可用(7.1.5)和(7.1.6)两式的适当的积来表示，因此，变换(7.2.1)完全覆盖了正常洛伦兹群. 那么，不包含更多的吗?

开头已经叙述过，(7.2.1)式引起洛伦兹变换. 注意(7.2.5)式，并取 $X' = A^{\dagger}[x^{\mu}\sigma_{\mu}]A$ 两边之迹[1]，得

$$2x'^{0} = x^{0}\mathrm{tr}[A^{\dagger}A] + x^{k}\mathrm{tr}[A^{\dagger}\sigma_{k}A]. \qquad (7.2.7)$$

根据(7.2.2)式，$\mathrm{tr}[A^{\dagger}A]$为正，于是

$$\Lambda^{0}_{0} > 0. \qquad (7.2.8)$$

而如果

---

1) 按本章开头的约定，罗马字母角标只在1、2、3之间变动.

$$\det[\Lambda^{\nu}_{\mu}] = 1, \tag{7.2.9}$$

那么可以说(7.2.1)式引起的变换只限于正常洛伦兹变换。

为了证明(7.2.9)式，可以把任意正则矩阵 $A$ 分解成 $A = UP$ 形式(极表示)，其中 $U$ 是幺正矩阵，$P$ 是正值厄米矩阵。为对 $U$ 和 $P$ 应用(7.2.6)式，设

$$U^{\dagger}\sigma_{\mu}U = \Lambda(U)^{\nu}_{\mu}\sigma_{\nu}, P^{\dagger}\sigma_{\nu}P = \Lambda(P)^{\rho}_{\nu}\sigma_{\rho},$$

则有

$$P^{\dagger}U^{\dagger}\sigma_{\mu}UP = \Lambda(U)^{\nu}_{\mu}\Lambda(P)^{\rho}_{\nu}\sigma_{\rho},$$

于是

$$\Lambda(UP)^{\rho}_{\mu} = \Lambda(U)^{\nu}_{\mu}\Lambda(P)^{\rho}_{\nu}. \tag{7.2.10}$$

因此，只需证明 $\det[\Lambda(U)^{\nu}_{\mu}]$ 和 $\det[\Lambda(P)^{\rho}_{\nu}]$ 均等于 1。

可以把 $\Lambda(U)^{\nu}_{\mu}$ 看成是单模幺正矩阵 $U$ 按照(7.2.1)式引起的变换，我们将表明，它是坐标系空间部分的旋转。由此可以直接得到 $\det[\Lambda(U)^{\nu}_{\mu}] = 1$。在(7.2.7)式中，设 $A = U$，由 $U$ 的幺正性，有

$$\mathrm{tr}(U^{\dagger}\sigma_{k}U) = \mathrm{tr}(UU^{\dagger}\sigma_{k}) = \mathrm{tr}\sigma_{k} = 0,$$

故 $x'^{0} = x^{0}$，即 $\Lambda^{\mu}_{\nu}(U)$ 不改变时间。$\Lambda^{0}_{i}(U) = 0$，$\Lambda^{0}_{0}(U) = 1$。这时，若特地考虑 $x^{\mu} = (ct, 0, 0, 0)$ 的变换，则根据洛伦兹变换条件(7.1.2)，显然有 $\Lambda^{k}_{0}(U) = 0$。因此，矩阵 $[\Lambda^{\mu}_{\nu}(U)]$ 的形式为

$$[\Lambda^{\mu}_{\nu}(U)] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \Lambda^{k}_{l} \end{bmatrix}. \tag{7.2.11}$$

若能证明 $\det[\Lambda^{k}_{l}] = 1$，则可以说，它就是空间旋转。果然，根据(7.2.6)式，再考虑到 $U$ 的幺正性，有

$$U^{\dagger}\sigma_{1}\sigma_{2}\sigma_{3}U = \Lambda^{l}_{1}\Lambda^{m}_{2}\Lambda^{n}_{3}\sigma_{l}\sigma_{m}\sigma_{n}.$$

在其两边右乘 $\sigma_3\sigma_2\sigma_1$ 再取迹，因 $\sigma_1\sigma_2\sigma_3 = -\sigma_3\sigma_2\sigma_1 = i$，故左边给出 $i_r(U^{\dagger}U) = 2$。另一方面，在右边反复应用反对易关系 $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$，得到

$$\mathrm{tr}[\sigma_l\sigma_m\sigma_n\sigma_3\sigma_2\sigma_1] = 2\varepsilon_{lmn},$$

于是，左边给出 $2\det[\Lambda^{l}_{k}]$。这样得到了 $\det[\Lambda^{l}_{k}] = 1$。上式中的 $\varepsilon_{lmn}$ 是列维-齐维他(Levi-Civita)记号，当 $(l, m, n)$ 为(1, 2, 3)的偶置换时，$\varepsilon_{lmn} = 1$，奇置换时，$\varepsilon_{lmn} = -1$，其他情形下，$\varepsilon_{lmn} = 0$。

再来看 $\Lambda(P)^{\mu}_{\nu}$. 因 $P$ 是正值厄米矩阵，故可用某一幺正变换 $V$ 将其对角化。其对角形式亦为正值，应该能用 (7.2.3) 式写成 $P = V^{\dagger}A(v)V$. 若按照(7.2.10)式将 $\Lambda(V^{\dagger}A(v)V)^{\mu}_{\nu}$ 分解，那么，由 $V$ 的幺正性，再应用上述结果，便可得到 $\det[\Lambda(P)^{\mu}_{\nu}] = \det[\Lambda(A(v))^{\mu}_{\nu}]$. 而根据(7.1.5)式，左边等于 1。

这样，(7.2.9)式得证。证明过程再次表明，任意正常洛伦兹变换均可表示成从固定坐标系到运动坐标系的变换(7.1.5)与空间旋转之积。

以上证明结果表明，按照 (7.2.1)式，正常洛伦兹群 $G^{\uparrow}_{+}$ 的变换对应于满足(7.2.2)式的 $SL(2,C)$ 矩阵。这种对应可以“保积”.也就是说，如果 $\Lambda(A),\Lambda(B)\in G^{\uparrow}_{+}$ 分别对应于 $A,B\in SL(2,C)$ (略去了 $\Lambda$ 的角标)，那么，$G^{\uparrow}_{+}$ 中的积 $\Lambda(A)\Lambda(B)$ 就对应于 $SL(2,C)$ 中的积 $AB$。实际上，像得到(7.2.10)式一样，也能得到

$$\Lambda(AB) = \Lambda(A)\Lambda(B). \tag{7.2.12}$$

上述两个事实归纳起来表明，“$G^{\uparrow}_{+}$ 是 $SL(2,C)$ 的表示”(参看第八章)。但是，由 (7.2.3) 和 (7.2.4) 两式业已明确，因为从 $G^{\uparrow}_{+}$ 到 $SL(2,C)$ 的对应是多值的，所以并不能说“$SL(2,C)$ 是 $G^{\uparrow}_{+}$ 的表示”。下面将要表明，由于这个方向的对应是双值的，因此可以说“$SL(2,C)$ 是正常洛伦兹群的双值表示”。实际上，让 $A_1$、$A_2\in SL(2,C)$ 对应于同一个 $\Lambda\in G^{\uparrow}_{+}$，根据(7.2.12)式，$\Lambda(A_1A_2^{-1})$ 为恒等变换，又根据(7.2.1)式，$A_1A_2^{-1}$ 必然与任意厄米矩阵 $X$ 对易。由于它与泡利矩阵 $\sigma_k$ 也对易，$A_1A_2^{-1}$ 是单位矩阵 $I$ 的常数倍。因此，由单模性得到 $A_1A_2^{-1} = \pm I$，$A_1 = \pm A_2$。反之亦可证明，这样的 $A_1,A_2$ 给出同一个洛伦兹变换。

### b) 范德瓦尔登 (Van der Waerden) 旋量

借助于矩阵 $A^{\uparrow}\in SL(2,C)$，像

$$\begin{bmatrix}\xi_1'\\ \xi_2'\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix},\quad A^{\uparrow} = \begin{bmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{bmatrix}, \tag{7.2.13}$$

一样变换的二维复矢量称为范德瓦尔登**协变旋量**. 因 $A^{\uparrow}$的复共

轭 $\bar{A}^{\dagger}$是单模的，故上述协变旋量的复共轭$\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}$ 也是旋量，在与之进行同样变换的量中，在角标上加一点“·”以表明与前者的特殊关系：

$$\begin{bmatrix}\eta_1'\\ \eta_2'\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\bar{\alpha} & \bar{\beta}\\ \bar{\gamma} & \bar{\delta}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\eta_1\\ \eta_2\end{bmatrix}, \tag{7.2.14}$$

与它们分别对应，有

$$\begin{bmatrix}\xi^1\\ \xi^2\end{bmatrix}=i\sigma_2\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}\eta^1\\ \eta^2\end{bmatrix}=i\sigma_2\begin{bmatrix}\eta_1\\ \eta_2\end{bmatrix}, \tag{7.2.15}$$

称之为**逆变旋量**。根据$A^{\dagger}$的单模性，$'Ai\sigma_2A=i\sigma_2$，故

$$\xi_1\eta^1+\xi_2\eta^2=\text{恒量},\ \xi_1\eta^1+\xi_2\eta^2=\text{恒量}。 \tag{7.2.16}$$

从上面的$'Ai\sigma_2A=i\sigma_2$，还可以得到一个重要结果

$$\sigma_2\bar{A}^{\dagger}\sigma_2=A^{\dagger}\ (A\text{么正})。$$

当对协变旋量进行(7.2.13)式的变换时，(7.2.15)式中带点的逆变旋量所进行的变换是

$$\begin{bmatrix}\eta'^1\\ \eta'^2\end{bmatrix}=B\begin{bmatrix}\eta^1\\ \eta^2\end{bmatrix},\ B=(i\sigma_2)\bar{A}^{\dagger}(i\sigma_2)^{-1}。 \tag{7.2.17}$$

故上述$\sigma_2\bar{A}^{\dagger}\sigma_2=A^{\dagger}$意味着，这些旋量在坐标系旋转 ($A^{\dagger}=A$)时进行着同样变换。顺便再计算到运动坐标系的变换，有

$$B=\begin{cases}A^{\dagger} & A=A(\beta),A(\gamma)\text{ 时}\\ A^{\dagger}(-v) & A=A(v)\text{ 时},\end{cases} \tag{7.2.18}$$

其中$A(\beta),A(\gamma),A(v)$分别在(7.2.4)和(7.2.3)式中给出了。

现在，取协变旋量$\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}$，以及在其角标上加点的协变旋量。它们共有四个实数分量，所以，若令

$$\begin{bmatrix}x^0+x^3 & x^1-ix^2\\ x^1+ix^2 & x^0-x^3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\xi_1 & \xi_2\end{bmatrix}, \tag{7.2.19}$$

则右边根据(7.2.13)和(7.2.14)两式的变换就会引起左边的正常洛伦兹变换(7.2.1)，这样，从某种意义上说，四维矢量$x^{\mu}$应该开平方，

若取(7.2.19)式的复共轭，并左乘$i\sigma_2$，右乘$(i\sigma_2)^\dagger$，则左边直接计算右边应用(7.2.15)式之后，可以得到

$$\begin{bmatrix} x^0 - x^3 & -x^1 + ix^2 \\ -x^1 - ix^2 & x^1 + x^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{bmatrix} [\xi^1 \xi^2]. \tag{7.2.20}$$

根据$x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu$，上式左边就是协变矢量。

$$\begin{bmatrix} x_0 + x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & x_0 - x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{bmatrix} [\xi^1 \xi^2]. \tag{7.2.21}$$

### c） 韦耳方程

若把(7.2.19)式左边用泡利自旋矩阵写成(7.2.5)式那样，则将$x^\mu$用变换性质相同的$\partial^\mu$替换而得到的$\sigma_\mu\partial^\mu$显然具有与(7.2.19)式右边同样的变换性质．右乘以带点的逆变旋量，并注意到(7.2.16)式，就知道方程

$$\sigma_\mu\partial^\mu\begin{bmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{bmatrix} = \kappa\begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \quad (\kappa = \text{常数}) \tag{7.2.22}$$

是洛伦兹协变的。

其中，特地取$\kappa = 0$的方程叫韦耳方程。详细写出来，其形式为

$$\left(\sigma_0 \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \sigma_1 \frac{\partial}{\partial x} - \sigma_2 \frac{\partial}{\partial y} - \sigma_3 \frac{\partial}{\partial z}\right)\begin{bmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{bmatrix} = 0. \tag{7.2.23}$$

现在，设$\begin{bmatrix} u^1 \\ u^2 \end{bmatrix}$是与$x^\mu$无关的常旋量，并考虑平面波解

$$\begin{bmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u^1 \\ u^2 \end{bmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(Et - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\right], \tag{7.2.24}$$

将其代入(7.2.23)式，得

$$\left(\frac{E}{c}\sigma_0 + \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\begin{bmatrix} u^1 \\ u^2 \end{bmatrix} = 0. \tag{7.2.25}$$

为使它有解，充分必要条件是

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{E}{c}\right)+p^3 & p^1-ip^2 \\ p^1+ip^2 & \left(\frac{E}{c}\right)-p^3 \end{vmatrix}=0,$$

而这正是相对论粒子的能量和动量应该满足的关系

$$E^2=c^2\boldsymbol{p}^2.$$

不过，该粒子质量为零。

(7.2.22)式也允许负能解，这与前面克莱因-戈登方程的情形一样，不过，这次却有概率守恒。实际上，若定义四维流矢量

$$J_\mu(\boldsymbol{r},t)=[\bar{\varphi}^1(\boldsymbol{r},t)\bar{\varphi}^2(\boldsymbol{r},t)]\sigma_\mu\begin{bmatrix}\varphi^1(\boldsymbol{r},t)\\ \varphi^2(\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix},\quad(7.2.26)$$

则由(7.2.23)式及其厄米共轭即可得到连续性方程

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}J_0+\frac{\partial}{\partial x_k}J_k=0.\quad(7.2.27)$$

这里请注意，(7.2.26)式的流完全按相对论协变矢量那样变换。事实上，若乘(7.2.20)式以 $\sigma_\mu$ 再求迹，则 $[\xi^1\xi^2]\sigma_\mu\begin{bmatrix}\xi^1\\ \xi^2\end{bmatrix}$ 显然具有与 $x_\mu$ 一样的变换性质。因此，可以把(7.2.27)式写成协变形式 $\partial^\mu J_\mu=0$.

## §7.3 空间反演，时间反演

到目前，在两分量的旋量空间中仅讨论了正常洛伦兹变换。现在，比较(7.2.19)和(7.2.20)两式，就会发现，借助于变换

$$\xi_\alpha\rightleftharpoons\xi^\alpha,\ \xi_{\dot\alpha}\rightleftharpoons\xi^{\dot a}(a=1,2),\quad(7.3.1)$$

就可以讨论(7.1.7)式中的空间反演 $P$ .

对于空间反演(7.3.1)，韦耳方程不是协变的。这是因为，已经取作(7.2.24)形式的正能解具有“左手自旋”，而决不会具有右手自旋。所谓左手自旋是指其自旋方向与动量方向相反。实际上，按照(7.2.25)式，(7.2.24)成了 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}/|\boldsymbol{p}|$ 的本征值为 $-E/|\boldsymbol{p}c|$ 的本征态，当 $E>0$ 时，自旋和动量反向。空间反演时，因为动量方

向改变而角动量方向不变，所以左手自旋映照成右手自旋，因此说方程不是协变的。

本讲座第十卷《基本粒子理论》中，将要叙述的实验表明，中微子的自旋是左手的。韦耳方程就是中微子方程。

对于空间反演来说，协变方程的例子是下面 $\kappa' = \kappa$ 的联立方程：

$$\left.\begin{aligned}(\sigma_0\partial^0 + \sigma_k\partial^k)\begin{bmatrix}\varphi^1\\ \varphi^2\end{bmatrix} &= \kappa\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}\\ (\sigma_0\partial^0 + \sigma_k\partial^k)\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix} &= \kappa'\begin{bmatrix}\varphi^1\\ \varphi^2\end{bmatrix}\end{aligned}\right\}, \tag{7.3.2}$$

其中，第一个方程与(7.2.22)式相同，从(7.2.19)式就可以得出它。同同样的方法可以从(7.2.20)式得到第二个方程。在(7.3.2)中，取

$$\begin{matrix}\text{空间反演}\\ (x^k \to -x^k\\ x^0 \to x^0)\end{matrix}\begin{bmatrix}\varphi^1\\ \varphi^2\end{bmatrix} \rightleftharpoons \begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}, \tag{7.3.3}$$

两个方程互换，而协变性要求 $\kappa = \kappa'$。

从(7.3.2)式中消去 $\varphi^a$，得到

$$(\sigma_0\partial^0 + \sigma_k\partial^k)(\sigma_0\partial^0 - \sigma_k\partial^k)\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix} = \kappa^2\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix},$$

当

$$\kappa^2 = -(mc/\hbar)^2 \tag{7.3.4}$$

时，它变成克莱因-戈登方程

$$[\partial_\mu\partial^\mu + (mc/\hbar)^2]\chi_a = 0, (a = 1, 2). \tag{7.3.5}$$

这时，平面波解的能量和动量满足质量为 $m$ 的粒子的相对论关系(7.1.18)。

为了在旋量所产生的洛伦兹群的表示中包含空间反演，应该考虑两组旋量。截止到目前，讨论的变换还只限于顺时的 $\Lambda_0^0 \geqslant 1$，为了再包含逆时的 $\Lambda_0^0 \leqslant -1$ 变换，一个办法是像在（7.2.19）和（7.2.20）两式中所看到的那样，取

$$\begin{matrix}\text{时空反演}\\ (x^\mu \to -x^\mu)\end{matrix}\begin{bmatrix}\varphi^1\\ \varphi^2\end{bmatrix} \to \begin{bmatrix}\varphi^1\\ \varphi^2\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix} \to -\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}. \tag{7.3.6}$$

即使进行这种变换，方程(7.3.2)的形式也不改变.或者与(7.3.3)式组合，得

$$\text{时间反演}\begin{pmatrix} x^0 \to -x^0 \\ x^k \to x^k \end{pmatrix}\begin{bmatrix}\varphi^1\\ \varphi^2\end{bmatrix}\to -\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}\to\begin{bmatrix}\varphi^1\\ \varphi^2\end{bmatrix}. \tag{7.3.7}$$

这样，在正常洛伦兹群中加进了空间反演和时间反演，便形成了不改变(7.1.2)条件所定义的完全洛伦兹群。

## §7.4 狄拉克方程

1928 年，狄拉克为电子所写的方程是

$$\left[\gamma^\mu\partial_\mu + i\frac{mc}{\hbar}\right]\psi = 0, \tag{7.4.1}$$

其中，$\psi$具有四个分量，$\gamma^\mu$是四行四列的矩阵，用泡利矩阵 $\sigma_k$ 写出来，是

$$\gamma^0 = \begin{bmatrix} I & 0\\ 0 & -I\end{bmatrix},\ \gamma^k = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_k\\ -\sigma_k & 0\end{bmatrix}. \tag{7.4.2}$$

以往写作$\sigma_0$的两行两列单位矩阵，这里写成 $I$。

### a) 狄拉克旋量

狄拉克方程(7.4.1)与上节的(7.3.2)式相同。其中，波函数的分量可以写成

$$\psi = \begin{bmatrix}\psi^1\\ \psi^2\\ \psi^3\\ \psi^4\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\chi_1 + \varphi^1\\ \chi_2 + \varphi^2\\ \chi_1 - \varphi^1\\ \chi_2 - \varphi^2\end{bmatrix}.$$

实际上，注意$\partial^k = -\partial_k$，把(7.3.2)式的两个方程两边分别相加，再分别相减就可以得到(7.4.1)式。这个 $\psi$ 叫做狄拉克旋量。

当进行正常洛伦兹变换时，狄拉克旋量变为

$$\psi'(x') = L\psi(x),(x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu), \tag{7.4.3}$$

其中，$L$ 由(7.2.13)和(7.2.17)两式求出，为

$$L = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} A^{\dagger} + B & A^{\dagger} - B \\ A^{\dagger} - B & A^{\dagger} + B \end{bmatrix}.$$

若用(7.2.3)、(7.2.4)或(7.2.18)诸式具体地写，则对于坐标系的旋转(7.1.6)，有

$$L(\beta) = \pm\begin{bmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} & 0 & 0 \\ -\sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} \\ 0 & 0 & -\sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix},$$

$$L(\gamma) = \pm\begin{bmatrix} \exp\left(\frac{i\gamma}{2}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{i\gamma}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp\left(\frac{i\gamma}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(-i\frac{\gamma}{2}\right) \end{bmatrix}. \tag{7.4.4}$$

对于从固定坐标系到沿 $z$ 轴正向以速度 $V$ 运动的坐标系的变换(7.1.5)，有

$$L(v) = \pm\begin{bmatrix} \cosh\frac{\chi}{2} & 0 & -\sinh\frac{\chi}{2} & 0 \\ 0 & \cosh\frac{\chi}{2} & 0 & \sinh\frac{\chi}{2} \\ -\sinh\frac{\chi}{2} & 0 & \cosh\frac{\chi}{2} & 0 \\ 0 & \sinh\frac{\chi}{2} & 0 & \cosh\frac{\chi}{2} \end{bmatrix}$$

$$\times\left(\tanh\chi = \frac{v}{c}\right). \tag{7.4.5}$$

这样，根据(7.3.3)式，(7.1.7)式的空间反演为

$$P = \gamma^0 \tag{7.4.6}$$

在上述变换矩阵中，对应于旋转和空间反演的矩阵是幺正的，而向运动坐标系变换的矩阵却不是幺正的

$$L(v)^{-1} = \gamma^0 L(v)\gamma^0.$$

好在旋转和空间反演与 $\gamma^0$ 是对易的，故可统一地取为

$$L^{-1} = \gamma^0 L^{\dagger}\gamma^0. \tag{7.4.7}$$

应用(7.2.6)诸式，或通过直接计算，不难确认

$$L^{-1}\gamma^{\mu}L = \Lambda^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu}, \tag{7.4.8}$$

因此，对于包含空间反演的变换，狄拉克方程也是协变的。至于时间反演，到后面 §7.6b) 再来考虑。另外请注意，(7.4.2) 式中的 $\gamma$ 矩阵满足

$$\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu} = 2g^{\mu\nu}. \tag{7.4.9}$$

根据(7.1.8)式，此关系式是协变的。我们知道，一般地，满足该关系的四行四列矩阵组，除了可能差一个幺正变换之外，都与(7.4.2)式等价。

### b) 物理解释

对包含空间反射的变换也协变的方程可通过增加波函数分量的办法得到。那么，这种四分量波函数应该有什么物理解释呢？

首先，看看粒子的存在概率密度如何变化。取(7.4.1)式的厄米共轭，根据(7.4.2)式，有

$$\psi^{\dagger}\left(\gamma^0\overleftarrow{\partial}_0 - \gamma^k\overleftarrow{\partial}_k - i\frac{mc}{\hbar}\right) = 0.$$

式中微商算符上的箭头指明了应该作用的对象。将上式右乘以$\gamma^0$，根据(7.4.9)式，$\gamma^0$ 与 $\gamma^k$ 反对易，于是

$$\psi\left[\gamma^{\mu}\overrightarrow{\partial}_{\mu} - i\frac{mc}{\hbar}\right] = 0, \tag{7.4.10}$$

其中，$\psi$ 上的一横具有特别的含义[1]：

$$\psi \equiv \psi^{\dagger}\gamma^{0}. \tag{7.4.11}$$

由基本方程(7.4.1)和(7.4.10)可知，流矢量

$$j^{\mu} \equiv \psi\gamma^{\mu}\psi \tag{7.4.12}$$

满足连续性方程

$$\partial_{\mu}j^{\mu} = 0. \tag{7.4.13}$$

因此，若把粒子存在概率密度取为

$$j^{0}(x) = \psi^{\dagger}(x)\psi(x) = |\psi^{1}(x)|^{2} + |\psi^{2}(x)|^{2} + |\psi^{3}(x)|^{2} + |\psi^{4}(x)|^{2}, \tag{7.4.14}$$

则它不仅恒正，而且在粒子局域存在的范围内总概率确实守恒：

$$\int_{\text{全空间}} j^{0}(\boldsymbol{r}, t)d\boldsymbol{r} = \text{恒量}. \tag{7.4.15}$$

此外，因 $j^{\mu}$ 是矢量，故存在概率密度具有相对论协变的意义。实际上，由于伴随着(7.4.3)式的 $\psi(x) \to L\psi(x)$，有 $\psi^{\dagger} \to \psi^{\dagger}L^{\dagger}$，因此，按照(7.4.7)式，有

$$\psi(x) \to \psi^{\dagger}(x)L^{\dagger}\gamma_{0} = \psi\gamma_{0}L^{\dagger}\gamma_{0} = \psi(x)L^{-1}.$$

于是，根据(7.4.8)式，得到

$$j^{\mu}(x) \to \psi(x)L^{-1}\gamma^{\mu}L\psi(x) = \Lambda^{\mu}_{\nu}j^{\nu}(x).$$

该式的含义是

$$j'^{\nu}(x') = \Lambda^{\mu}_{\nu}j^{\nu}(x)(x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu}x^{\nu}), \tag{7.4.16}$$

确实是矢量场的变换。

其次我们要说明，波函数分量增多是粒子自旋自由度的反映. 前面韦耳方程已经涉及到这一点。为了找到属于给定波函数 $\psi$ 的角动量，可以看看伴随着坐标系旋转，该 $\psi$ 如何变换，我们假定量子力学的这个原则在现在的情况下依然适用。首先，取绕 $x^{3}$ 轴的旋转(7.1.6)、(7.4.4)，于是

$$\psi'(x') = L(\gamma)\psi(\Lambda^{-1}(\gamma)^{\mu}_{\nu}x'^{\nu}),$$

令其中的 $\gamma$ 为无限小(当 $\gamma = 0$ 时，$L$ 变成 1)，有

---

1) 以后，复共轭用*表示。

$$\psi'(x') = \left[1 + \frac{i\gamma}{2}\begin{pmatrix}\sigma_3 & 0\\ 0 & \sigma_3\end{pmatrix}\right]\left[1 + \gamma\left(x' \frac{\partial}{\partial x^2} - x^2 \frac{\partial}{\partial x'}\right)\right]\psi(x),$$

即

$$\psi'(x') = \left[1 + \frac{i}{\hbar}\gamma(L_3 + S_3)\right]\psi(x), \qquad (7.4.17)$$

其中，已经知道 $L_3$ 是轨道角动量算符的第三分量，而 $S_3$ 的形式为

$$S_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\sigma_3 & 0\\ 0 & \sigma_3\end{pmatrix}. \qquad (7.4.18)$$

应该把它看成是狄拉克粒子自旋算符的第三分量. 同样，考虑绕 $x^2$ 轴的旋转还可得到 $s_2$，绕 $x^1$ 轴的旋转可以由绕 $x^2$ 轴和绕 $x^3$ 轴的旋转来合成. 这样得到的自旋算符是(7.4.18)式的推广形式：

$$S^{\mu\nu} = \frac{\hbar}{2}\sum^{\mu\nu}, \sum^{\mu\nu} = \frac{i}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu), \qquad (7.4.19)$$

再定义 $\boldsymbol{S} = (S^{23}, S^{31}, S^{12})$，容易找出其变换性质，当 $v$ 无限小时，(7.4.5)式变成 $L(v) = 1 + (iv/c\hbar)S^{03}$，这指明了 $S^{0k}$ 的含义，而 $S^{00} = 0$.

这样，$\psi$ 的分量与自旋自由度的关系就很清楚了. 从韦耳方程的经验来看，可以认为，自旋自由度和能量正负的“自由度”加起来，要求 $\psi$ 有四个分量.

### c) 自由粒子解，平面波

为了深入研究上述问题，我们来求解方程(7.4.1)，开始时，设 $\psi$ 与空间坐标无关，令

$$\psi(x) = u\exp(-iEt/\hbar), \qquad (7.4.20)$$

它表示动量为零的静止粒子，其中的 $E$ 应解释为粒子能量，从(7.4.1)式可以得到四个系数旋量：

$$u_+^\uparrow = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}, u_+^\downarrow = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}, u_-^\uparrow = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}, u_-^\downarrow = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}. \qquad (7.4.21)$$

与其中下标±对应的$E$分别为 $\pm mc^2$，其绝对值确实等于静止能量。按照(7.4.18)式，$u$的上标↑和↓表示它所具有的自旋$x^3$分量分别等于$\hbar/2$和$-\hbar/2$.因$x^3$分量的其它值均不出现，故狄拉克粒子的自旋是 $\frac{1}{2}$ (以$\hbar$为单位)。

对(7.4.21)式加上空间反演(7.4.6)，得到

$$P u_{+}^{\uparrow,\downarrow} = u_{+}^{\uparrow,\downarrow}, P u_{-}^{\uparrow,\downarrow} = -u_{-}^{\uparrow,\downarrow}. \tag{7.4.22}$$

这表明，静止的狄拉克粒子的正负能态具有相反的宇称。

若在$x^3$轴负向上以速度$v$运动的坐标系中来看上述解，则可得[1]

$$\begin{aligned}\psi'(x') &= L(-v)\psi(\Lambda^{-1}(-v)x') \\ &= L(-v)u\exp\left[-\frac{i}{\hbar}p_0\Lambda^{-1}(-v)^0_\nu x'^\nu\right].\end{aligned}$$

从狄拉克方程(7.4.1)的协变性可知，这是它的解，并且，它应该表示沿$x'^3$轴正向运动的粒子。因此，粒子的动量$p'^3$应该大于零.于是，得到的波的相位是

$$-\frac{i}{\hbar}(p_0\cosh\chi\cdot ct' - p_0\sinh\chi\cdot x'^3) = -\frac{i}{\hbar}p'_\mu x'^\mu,$$

($\tanh\chi = v/c$)，在$x'^\mu$系中看到的粒子能量和动量分别为

$$\frac{E'}{c} = p_0\cosh x, p'^3 = -p'_3 = p_0\sinh x,$$

静止系中能量 $p_0c = \pm mc^2$的正负不仅使运动系中的能量有正有负，而且会引起动量与速度反向。

把系数旋量$L(-v)u \equiv u(p)$分别用属于它们的能量动量来描述，现在$p = (0,0,p)$，于是

$$u_{+}^{\uparrow}(0,0,p) = N(p)\begin{bmatrix} E+mc^2 \\ 0 \\ pc \\ 0 \end{bmatrix},$$

1) $p^\mu \equiv [E/c, p]$，现在$p^\mu = [mc, 0]$。

$$u_+^{\downarrow}(0,0,p)=N(p)\begin{bmatrix}0\\E+mc^2\\0\\-pc\end{bmatrix},\tag{7.4.23}$$

其中

$$E=mc^2\left(1-\left(\frac{v}{c}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}},\ p=mv\left(1-\left(\frac{v}{c}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}}.$$

负能分量是

$$u_-^{\uparrow}(0,0,p)=N(p)\begin{bmatrix}-pc\\0\\|E|+mc^2\\0\end{bmatrix},$$

$$u_-^{\downarrow}(0,0,p)=N(p)\begin{bmatrix}0\\pc\\0\\|E|+mc^2\end{bmatrix},\tag{7.4.24}$$

其中

$$E=-mc^2\left(1-\left(\frac{v}{c}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}},\ p=-mv\left(1-\left(\frac{v}{c}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}},$$

而

$$N(p)=(2mc^2(|E|+mc^2))^{-\frac{1}{2}}.$$

我们把这些解记成 $u_\varepsilon^{(h)}(p)$. 其中 $h=\uparrow,\downarrow$; 而 $\varepsilon=+,-$ 区别能量的正负. 不难证明,动量 $p$ 相同的旋量的内积为

$$u_{\varepsilon'}^{(h')}(p)^{\dagger}u_\varepsilon^{(h)}(p)=\frac{E}{mc^2}\,\delta_{\varepsilon,\varepsilon'}\delta_{h,h'}.\tag{7.4.25}$$

按能量来归一化是很妙的，这样就不必再考虑过渡到运动坐标系时体积的洛伦兹收缩了，而且规定的"箱"内存在概率也是洛伦兹不变的.之所以特意说成"箱"而不说成范围,是因为有一个同时性问题. 图 7.3 在空间中只画出了 $x^1$ 轴方向,画出了箱两端的世界

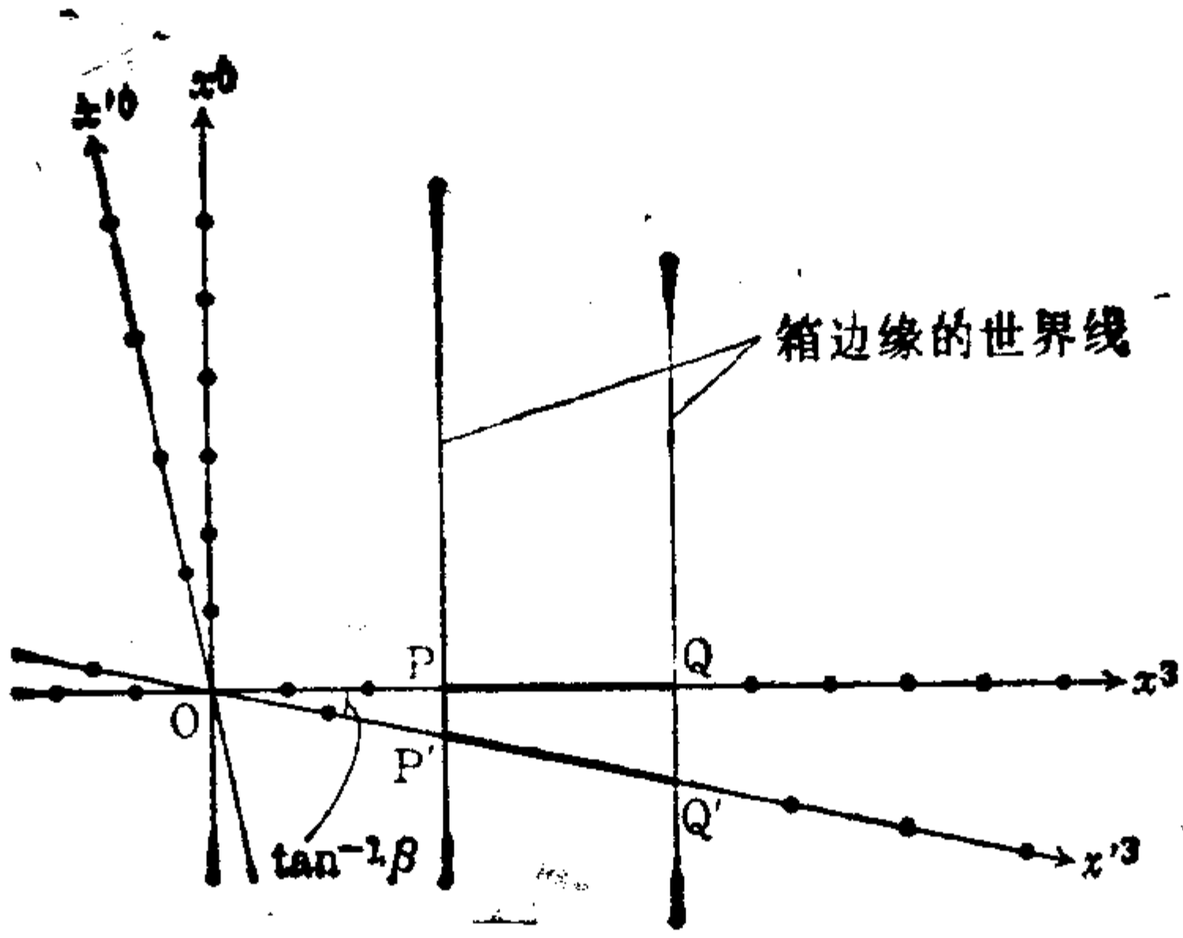



图 7.3　从$x^3$轴的负方向上运动的$x'$系来观察在$x$系中静止的箱的边缘．$x^3$轴上的世界点在$x'$系中都是同时的，它与箱边缘的世界线的交点取为P′和Q′，P′Q′在$x'$系中给出箱的长度．不过，$x'^3$轴的刻度比$x^3$轴的大 $\sqrt{(1+\beta^2)/(1-\beta^2)}$倍($\beta = v/c$)

线，在静止系 $(x^0, x^3)$ 中于 PQ 之间发现粒子的概率应该与在运动坐标系 $(x'^0, x'^3)$ 中于 P′Q′ 之间发现它的概率相等． PQ 和 P′Q′ 在各自的坐标系中是同时的，而 P′Q′ 的长度与 PQ 的相比，则有洛伦兹收缩．(7.4.25)式正与这一事实相符．

换句话说，(7.4.25)式左边相当于流矢量 (7.4.12) 的第 0 分量，因此它的变化应当与能量动量矢量的第 0 分量(即能量)成正比．索性来计算一下流矢量，事实上

$$\bar{u}_\varepsilon^{(h)}(\boldsymbol{p})\gamma^\mu u_\varepsilon^{(h)}(\boldsymbol{p}) = \pm p^\mu/mc^2. \qquad (7.4.26)$$

一般地，当动量处于极角$(\theta, \varphi)$的方向时，上式也成立．为此，注意 $u^{(s)}(\boldsymbol{p})$ 是由(7.4.23)式再旋转坐标系而得到的．也就是说，把(7.4.4)式中的 $L(\beta)$ 和 $L(\gamma)$ 分别写成 $L_{31}(\beta)$ 和 $L_{12}(\gamma)$，就有

$$u_\uparrow^\uparrow(p) = L_{12}(-\varphi)L_{31}(-\theta)u_\uparrow^\uparrow(0,0,p)$$

$$= N\begin{bmatrix} (E+mc^2)\exp(-i\varphi/2)\cos(\theta/2) \\ (E+mc^2)\exp(i\varphi/2)\sin(\theta/2) \\ pc\exp(-i\varphi/2)\cos(\theta/2) \\ pc\exp(i\varphi/2)\sin(\theta/2) \end{bmatrix},$$

$$u_{\uparrow}^{\downarrow}(p) = L_{12}(-\varphi)L_{31}(-\theta)u_{\uparrow}^{\downarrow}(0,0,p)$$

$$= N\begin{bmatrix} -(E+mc^2)\exp\left(-\frac{i\varphi}{2}\right)\sin\frac{\theta}{2} \\ (E+mc^2)\exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right)\cos\frac{\theta}{2} \\ pc\exp\left(-\frac{i\varphi}{2}\right)\sin\frac{\theta}{2} \\ -pc\exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right)\cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}.$$

它们分别是将自旋和动量平行或反平行的状态旋转而得到的。自旋(7.4.19)在平行于动量方向上的分量叫**螺旋性**。$u_{\uparrow}^{\downarrow}(p)$和$u_{\downarrow}^{\downarrow}(p)$是螺旋性的本征态，而上角标 ↑ 和 ↓ 正好分别对应于本征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$。

而它们的线性组合

$$u^{(1)}(p) = \left[u_{\uparrow}^{\downarrow}(p)\cos\frac{\theta}{2} - u_{\downarrow}^{\downarrow}(p)\sin\frac{\theta}{2}\right]\exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right),$$

$$u^{(2)}(p) = \left[u_{\uparrow}^{\downarrow}(p)\sin\frac{\theta}{2} + u_{\downarrow}^{\downarrow}(p)\cos\frac{\theta}{2}\right]\exp\left(-\frac{i\varphi}{2}\right)$$

的形式较为简化，根据情形更便于使用。实际上

$$u^{(s)}(p) = N(p)\begin{bmatrix}(E+mc^2)\chi_s \\ \sigma\cdot pc\,\chi_s\end{bmatrix}. \qquad (7.4.27)$$

这是狄拉克方程$E>0$时的解（$s=1,2$），而对于$E<0$时的解($s=3,4$)，同样有

$$u^{(s)}(p) = N(p)\begin{bmatrix}-\sigma\cdot pc\,\chi_s \\ (|E|+mc^2)\chi_s\end{bmatrix}, \qquad (7.4.28)$$

其中，根据 $s$ 的奇偶，将分别取 $\chi_{s_3}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\ \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$.

使用以上结果，一般在正能态的旋量之间会得到

$$\bar{u}^{(s')}(\boldsymbol{p}')\gamma^{\mu}u^{(s)}(\boldsymbol{p})=\chi^{(s')\dagger}M^{\mu}_{+,+}\chi^{(s)},(s,s'=1,2),\tag{7.4.29}$$

其中，

$$\begin{aligned}M^{0}_{+,+}&=N(\boldsymbol{p}')N(\boldsymbol{p})[(E'+mc^2)(E+mc^2)\\&\quad+c^2(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{p})+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}'\times\boldsymbol{p})],\\M^{k}_{+,+}&=N(\boldsymbol{p}')N(\boldsymbol{p})\{(E'+mc^2)\\&\quad\times c[p^k+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{n}^k\times\boldsymbol{p})]+(E+mc^2)\\&\quad\times c[p'^k-i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{n}^k\times\boldsymbol{p}')]\},\end{aligned}$$

而$\boldsymbol{n}^k$是第 $k$ 轴方向上的单位矢量. 当$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}'$时，可以证明(7.4.26)式成立. 计算时要用到公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}).\tag{7.4.30}$$

对于与$\boldsymbol{\sigma}$对易的任意三维矢量$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$，上式均成立. 而在

$$\sigma_k\sigma_l A_k B_l=\left[\frac{1}{2}(\sigma_k\sigma_l+\sigma_l\sigma_k)+\frac{1}{2}(\sigma_k\sigma_l-\sigma_l\sigma_k)\right]A_kB_l$$

中再应用 $\sigma$ 的对易关系和反对易关系，(5.2.36)即可完成证明.

## §7.5 中心力场中的狄拉克粒子

暂时抛开负能问题，通过研究相对性原理而明确自旋自由度在量子力学中的位置，这正是狄拉克方程成功之所在. 在此基础上，该方程在说明原子光谱的精细结构方面亦获得成功.

(7.4.1)是自由粒子方程. 加进力场时，它应有什么变化呢？我们用势 $V(x)$来表示力场，请注意，即使在该势中加上常数，力场也不会改变，而只不过需要移动测量能量的原点而已. 如果保持这种“对称性”，则似乎可以把(7.4.1)式改写成

$$[\gamma^0(i\hbar c\partial_0-V)+i\hbar c\gamma^k\partial_k-mc^2]\psi=0.\tag{7.5.1}$$

在 $V$ 为中心力场的情况下，我们来解这个方程.

### a) 部分波分解

让坐标的空间部分采用球坐标$(r,\theta,\varphi)$，设 $V=V(r)$。用两分量旋量$u^A$和$u^B$把波函数写为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\begin{bmatrix}u^A(\boldsymbol{r})\\u^B(\boldsymbol{r})\end{bmatrix}\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \tag{7.5.2}$$

于是(7.5.1)式变为

$$\left.\begin{aligned}i\hbar c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla})u^A&=-(E-V+mc^2)u^B\\i\hbar c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla})u^B&=-(E-V-mc^2)u^A\end{aligned}\right\}. \tag{7.5.3}$$

伴随着坐标系的旋转，狄拉克旋量$\psi(\boldsymbol{r},t)$进行(7.4.17)式中的变换，这时，自由粒子方程是协变的。由于现在所加的势在坐标系旋转时并无变化，因此，若把$\psi$选为总角动量$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$的本征态，则(7.5.1)式应当给出变量分离后的径向函数方程。由(7.4.18)式推广的自旋算符 $\boldsymbol{s}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 分别作用于 $u^A$ 和 $u^B$，它们都是具有同一本征值的 $\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{s}}$ 的本征态。其中 $\hat{\boldsymbol{L}}\equiv\boldsymbol{L}/\hbar$，$\hat{\boldsymbol{s}}\equiv\boldsymbol{\sigma}/2$。

根据表 5.1，$\hat{\boldsymbol{J}}$的大小为$j$、其$x^3$分量为$j_3$的本征矢由轨道角动量的本征矢和自旋本征矢这样两部分构成，一个当 $l=j-\frac{1}{2}$ 时，是

$$\begin{aligned}\mathscr{Y}^{(+)}_{j,j_3}(\theta,\varphi)=&\sqrt{\frac{l+j_3+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,Y_{l,j_3-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\\&+\sqrt{\frac{l-j_3+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,Y_{j,j_3+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix},\end{aligned} \tag{7.5.4}$$

另一个当 $l=j+\frac{1}{2}$ 时，是

$$\mathscr{Y}^{(-)}_{j,j_3}(\theta,\varphi)=-\sqrt{\frac{l-j_3+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,Y_{l,j_3-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

$$+\sqrt{\frac{l+i_3+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,Y_{l,i_3+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}. \tag{7.5.5}$$

由于现在考虑的是它们有同一个$j$,故其 $l$ 仅仅差 1,因此它们的宇称相反.

我们来考虑$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla})$对这些矢量的作用. 注意从公式(7.4.30)得到$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})^2=r^2$,而应用该公式,可以得到

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla})=\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla})$$

$$=\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}-2(\boldsymbol{L}\cdot\hat{\boldsymbol{s}})]. \tag{7.5.6}$$

借助于 $2(\boldsymbol{L}\cdot\hat{\boldsymbol{s}})=\hat{\boldsymbol{J}}^2-\boldsymbol{L}^2-\hat{\boldsymbol{s}}^2$,可以有

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla})\mathscr{Y}^{(\pm)}_{j,i_3}=\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}\mathscr{Y}^{(\pm)}_{j,i_3}\left[r\,\frac{\partial}{\partial r}\mp\left(j+\frac{1}{2}\right)+1\right]. \tag{7.5.7}$$

而$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})/r$与$\hat{\boldsymbol{J}}$对易,不会改变 $j$ 和$i_3$的值. 根据(5.2.26)式, $l$ 的值仅改变 1. 为此,只要把$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})/r$ 作用于(7.5.4)式和(7.5.5)式就会明白. 因它与$J_\pm$对易,故矩阵元 $\langle\mathscr{Y}^{(\pm)}_{j,i_3}|(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})/r|\mathscr{Y}^{(\pm)}_{j,i_3}\rangle$ 与 $i_3$ 无关. 所以,我们可以计算 $i_3=l+\frac{1}{2}$ 的情况. 根据 (7.5.4)和(7.5.5)两式,有

$$\mathscr{Y}^{(+)}_{j,j}(\theta,\varphi)=Y_{j-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},$$

$$\mathscr{Y}^{(-)}_{j,j}(\theta,\varphi)=-\sqrt{\frac{1}{2j+2}}Y_{j+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

$$+\sqrt{\frac{2j+1}{2j+2}}Y_{j+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}.$$

另外,使用(5.2.4)式定义的$\sigma_\pm$,有

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})}{r}=(-\sigma_+e^{-i\varphi}+\sigma_-e^{i\varphi})\sin\theta+\sigma_3\cos\theta.$$

于是,利用(5.2.26)式,所要计算的矩阵元等于 $-1$. 因此

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})}{r}\mathscr{Y}^{(\pm)}_{j,l_z}=-\mathscr{Y}^{(\pm)}_{j,l_z}. \tag{7.5.8}$$

现在，借助于(7.5.7)和(7.5.8)两式来看看方程 (7.5.3)，要使 $u^A$和$u^B$的宇称相反，显然应该令[1)]

$$u^A(r)=\frac{G^{(\pm)}_j(r)}{r}\mathscr{Y}^{(\pm)}_{j,l_z}(\theta,\varphi),\ u^B(r)=i\frac{F^{(\pm)}_j(r)}{r}\mathscr{Y}^{(\mp)}_{j,l_z}(\theta,\varphi). \tag{7.5.9}$$

其中，重号同序，“+”号是 $j=l+\frac{1}{2}$ 情形，“—”号是 $j=l-\frac{1}{2}$ 情形。 把(7.5.9)式代入(7.5.2)式就得到了用 $\psi^{(\pm)}_{jl_z}$ 表示 $\psi$ 的式子. 要是把该(±)用 ($\pi$) 来表示，会方便一些 (见表 7.1，$\kappa$ 的含义后面再给出)。

表 7.1

| $\pi$ | 当 $j$ 给定时 | | 当 $l$ 给定时 | |
|---|---|---|---|---|
| | $l$ | $\kappa$ | $j$ | $\kappa$ |
| + | $j-\frac{1}{2}$ | $-\left(j+\frac{1}{2}\right)$ | $l+\frac{1}{2}$ | $-(l+1)$ |
| − | $j+\frac{1}{2}$ | $j+\frac{1}{2}$ | $l-\frac{1}{2}$ | $l$ |

### b) 径向方程

按照(7.5.9)式分离变量，(7.5.3)式会给出

$$\left.\begin{aligned}\hbar c\left(\frac{dG}{dr}+\frac{\kappa}{r}G\right)&=(mc^2+E-V)F\\ \hbar c\left(\frac{dF}{dr}-\frac{\kappa}{r}F\right)&=(mc^2-E+V)G\end{aligned}\right\},\tag{7.5.10}$$

其中，省略了 $F$ 和 $G$ 的角标，对应于(7.5.9)式中(±)号的顺序，设

1) 类似情形在(7.4.22)式中已经见到过.

$$\kappa = \mp\left(j + \frac{1}{2}\right). \tag{7.5.11}$$

由(7.5.6)式可知，$\kappa$ 为 $-2(\hat{L}\cdot\hat{s})-1$的本征值。

我们先来看看方程(7.5.10)的解在远处有什么性质。当 $r\to\infty$时，若势如 $O\left(\frac{1}{r}\right)$，则

$$\frac{d}{dr}\begin{bmatrix}G\\F\end{bmatrix} = \frac{1}{\hbar c}\begin{bmatrix}0 & mc^2+E\\ mc^2-E & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}G\\F\end{bmatrix}.$$

若令

$$a^{-1} \equiv 2[(mc^2)^2 - E^2]^{1/2}/\hbar c. \tag{7.5.12}$$

则有两组解：

$$\begin{bmatrix}G(r)\\F(r)\end{bmatrix}\underset{r\to\infty}{\sim}\sqrt{\frac{1}{2mc^2}}\begin{bmatrix}(mc^2+E)^{\frac{1}{2}}\\ -(mc^2-E)^{\frac{1}{2}}\end{bmatrix}e^{-r/2a}, \tag{7.5.13}$$

或

$$\begin{bmatrix}G(r)\\F(r)\end{bmatrix}\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{1}{\sqrt{2mc^2}}\begin{bmatrix}(mc^2+E)^{\frac{1}{2}}\\ (mc^2-E)^{\frac{1}{2}}\end{bmatrix}e^{r/2a}. \tag{7.5.14}$$

当 $a>0$ 时，必须舍去第二组解。这样，势在远处如$O\left(\frac{1}{r}\right)$ 时，对应于 $a$ 为实数或虚数，显然有

$$\left.\begin{array}{ll}\text{束缚态} & |E|\leqslant mc^2\\ \text{散射态} & |E|\geqslant mc^2\end{array}\right\}. \tag{7.5.15}$$

旋量$\psi$的上分量$u^A$大，还是下分量$u^B$大，将取决于 $E$的正负。若 $E$接近于$mc^2$，则它们的大小相差很多。电子的$mc^2$大约是 0.5MeV，若取$|mc^2-|E||=10\text{eV}$，则$|mc^2-|E||^{\frac{1}{2}}/(mc^2+|E|)^{1/2}=3\times10^{-3}$。把$|E|$和$mc^2$之差看成动能，并记为 $mv^2/2$，这个比就是$v/2c$。

我们把(7.5.10)式改写成未知函数的一个方程。在(7.5.13)式中令$\rho=r/a$，寻找至少在远处上分量较“大”的旋量$\psi$，设

$$\left.\begin{aligned}G(r) &\equiv [1+(E/mc^2)]^{1/2}[f(\rho)+g(\rho)]e^{-\rho/2}\\ F(r) &\equiv [1-(E/mc^2)]^{1/2}[f(\rho)-g(\rho)]e^{-\rho/2}\end{aligned}\right\}. \tag{7.5.16}$$

$g$ 在远处占优势，但也不过按 $\rho$ 的幂增加。将其代入 (7.5.16)式，有

$$\left.\begin{aligned}\frac{df}{d\rho} &= (1+\varepsilon V)f-\left(\frac{\kappa}{\rho}-\mu V\right)g\\ \frac{dg}{d\rho} &= -\varepsilon V\, g-\left(\frac{\kappa}{\rho}+\mu V\right)f\end{aligned}\right\}, \tag{7.5.17}$$

其中

$$\mu \equiv \frac{1}{2}\frac{mc^2}{(mc^2)^2-E^2},\quad \varepsilon \equiv \frac{1}{2}\frac{E}{(mc^2)^2-E^2} \tag{7.5.18}$$

如果 $\kappa\rho^{-1}+\mu V \neq 0$，通过(7.5.17)的第二式，$f$ 可以用 $g$ 表示，将它和微商后的 $df/d\rho$ 一起代入第一式，便得到了只含 $g$ 的方程

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+a(\rho)\frac{d}{d\rho}+b(\rho)\right]g(\rho)=0, \tag{7.5.19}$$

其中

$$\left.\begin{aligned}a(\rho) &\equiv -\frac{d}{d\rho}\ln\left|\frac{\kappa}{\rho}+\mu V\right|-1\\ b(\rho) &\equiv \frac{\kappa\varepsilon}{\kappa+\mu\rho V}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}(\rho V)-\varepsilon V-\frac{\kappa^2}{\rho^2}+\left(\frac{a}{\hbar c}\right)^2V^2\end{aligned}\right\}. \tag{7.5.20}$$

### c) 氢原子

现在所要讨论的狄拉克粒子是电子。在库仑势

$$V=-Z\frac{e^2}{r}\quad (Z>0)$$

的情况下，上面的 $a$ 和 $b$ 会极其简单，(7.5.19)式变成

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}-\left(1-\frac{1}{\rho}\right)\frac{d}{d\rho}+\left(\frac{\alpha_1\varepsilon_1}{\rho}+\frac{\alpha_1^2-\kappa^2}{\rho^2}\right)\right]g=0, \tag{7.5.21}$$

其中

$$\varepsilon_1 \equiv E((mc^2)^2-E^2)^{-1/2},\alpha_1 \equiv Z\alpha. \tag{7.5.22}$$

$\alpha \equiv e^2/\hbar c$ 是精细结构常数 1/137.036。本小节考虑的是束缚态，

$0<E<mc^2$. 在原点附近,取$g\sim\rho^\gamma$,代入(7.5.21)式,得

$$\gamma(\gamma-1)+\gamma+\alpha_1^2-\kappa^2=0,$$

于是 $\gamma=\pm\sqrt{\kappa^2-\alpha_1^2}$. 根据(7.5.11)式,这个$\kappa^2$不小于1,而$\alpha_1^2\cong(Z/137)^2$, 所以,对于小的Z来说, $|r|$是一个比 1 小不多少的实数. 从(7.5.17)式可以看出, $f$ 在原点也与 $g\sim\rho^\gamma$ 性质相同,而由于要求波函数平方可积,因此. 必须有 $2\gamma>-1$.这样,在小Z库仑场的情况下,负号的 $\gamma=-\sqrt{\kappa^2-\alpha_1^2}$ 被排除了. 于是,

$$\gamma=\sqrt{\kappa^2-\alpha_1^2}. \tag{7.5.23}$$

上述讨论的适用范围是 $Z<119$. 当$119\leqslant Z\leqslant 137$时,也只对$\kappa^2=1$的情况, 才允许 $\gamma=-\sqrt{\kappa^2-\alpha_1^2}$.

下面考虑Z很大的超重元素的原子电子. 目前 $Z=105$ 或 106 的"超铀元素"均可人工合成. 而且, 有报道说, 通过质子照射,从含有天然云母的物质中获得了相当于 $Z=116,124,126$ 的特征X射线[1].

但是,上述问题中,当 $r=0$ 时, 库仑势能否正确成立是有问题的. 然而,由于原子核有一定大小,因此, 在 $r=0$ 处库仑势的奇异性似乎不会出现. 这样, $Z=0$ 时, $r=0$ 的边界条件就可以取为$f,g\sim\rho^\kappa$,在原子核之外,按照(7.5.23)式, 波函数大致应该有$\rho^\gamma$那样的性质. 这是因为,如果在原子核内波函数$\sim\rho^\kappa$, 则由于它在表面上的值不会太大,所以,值大的$\rho^{-\gamma}$的成分即使混合进来,也肯定是极少的.根据这样的物理基础,即使Z较大,只要比137小得多,就应该考虑采用(7.5.23)式.但是,当Z接近137而 $\kappa=1$ 时,核表面上$\rho^{-\gamma}$和$\rho^\gamma$的值之差变小,当Z超过137而$\kappa$很小时, $\gamma$ 开始变成虚数,需要另外进行研究. 关于$Z>137$ 时的情形,请参看书末所列的诸如 K.M.Case 的论文(1950).

在这里,设 $z$ 远小于137,采用(7.5.23)式,令

---

1) Hodgson, P.:*Nature*, 261,627(1976). 另外,关于这个问题的综合评述,请参看,竹腰英子: 超重元素を探る,日本物理学会誌, 1977 年 1 月号.

$$g(\rho) = \rho^{\gamma} w(\rho). \tag{7.5.24}$$

因微分方程(7.5.21) 以 $\rho = 0$ 为正则奇点，故这里的 $w$ 应该有形如 $1 + a_1\rho + \cdots$ 的级数解。实际上，根据(7.5.21)式，$w$ 所满足的微分方程是

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2\gamma + 1 - \rho) \frac{d}{d\rho} - (\gamma - \alpha_1\varepsilon_1)\right] w = 0. \tag{7.5.25}$$

它与(5.5.4)式形式相同，也就是合流超几何方程。不过，与(5.5.4)式不同，这里的 $2\gamma + 1$ 不限于整数。这样，原点处正则解为

$$g(\rho) = \rho^{\gamma} F(\gamma - \alpha_1\varepsilon_1, 2\gamma + 1; \rho). \tag{7.5.26}$$

这个 $g(\rho)$ 决定了(7.5.16)式中电子波函数在远处的性质，因而不应该消除 $\exp(-\rho/2)$。为此，必须有与(5.5.10)式同样的条件

$$\gamma - \alpha_1\varepsilon_1 = -n' (n' = 0, 1, 2, \cdots).$$

现在，参照(7.5.22)式，确定出能量本征值，为

$$E = mc^2 \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n' + \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}}\right)^2\right]^{-1/2}. \tag{7.5.27}$$

其中，$\kappa$ 是由(7.5.11)式定义的。

必须及时注意到，由于 $n' = 0$ 时，$\sqrt{1 - (E/mc^2)^2} = \alpha_1/|\kappa|$，所以，当 $\kappa > 0$ 时，根据(7.5.12) 和 (7.5.18) 两式来计算，会有 $\kappa\rho^{-1} + \mu V = 0$。也就是说，推导(7.5.19)式时所做的假定遭到了破坏。这时，(7.5.17)的第二式变成 $dg/d\rho = (\alpha\varepsilon/\rho)g$，与(7.5.26)式类似，给出 $g = \rho^{\gamma}$，将其代入(7.5.17)的第一式，得到

$$\frac{df}{d\rho} = \left(1 - \frac{\gamma}{\rho}\right) f - 2\kappa\rho^{\gamma - 1}.$$

因现在 $\gamma > 0$，故 $\rho \sim 0$ 时 $df/d\rho \sim -\gamma f/\rho$。因此 $f \sim \rho^{-\gamma}$。这是必须舍去的解。$\kappa > 0$ 时，这是仅有的解，于是，只能允许

$$n' = 0 \text{ 时}, \kappa = -\left(j + \frac{1}{2}\right). \tag{7.5.28}$$

这时，(7.5.17)中第一式 $g$ 的系数变成零，解是 $f \equiv 0$。

去掉这种情形，按照(7.5.11)式由 $g$ 来求 $f$。归纳一下，结果是

$$\left.\begin{aligned} f(\rho) &= -N_0\frac{n'}{N_1}\rho^{\gamma}F(-n'+1,2\gamma+1;\rho)\\ g(\rho) &= N_0N_1\rho^{\gamma}F(-n',2\gamma+1;\rho)\end{aligned}\right\}. \quad (7.5.29)$$

其中

$$\left.\begin{aligned} N_0 &= \frac{[\Gamma(2\gamma+n'+1)]^{1/2}}{\Gamma(2\gamma+1)\sqrt{n'!}}\left[\frac{a^{-1}}{4Z\alpha}\sqrt{1-\left(\frac{E}{mc^2}\right)^2}\,\right]^{1/2}\\ N_1 &= \left[-\kappa+Z\alpha\left(1-\left(\frac{E}{mc^2}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}}\right]^{\frac{1}{2}}\end{aligned}\right\}. \quad (7.5.30)$$

将(7.5.2)诸式归一化，得到

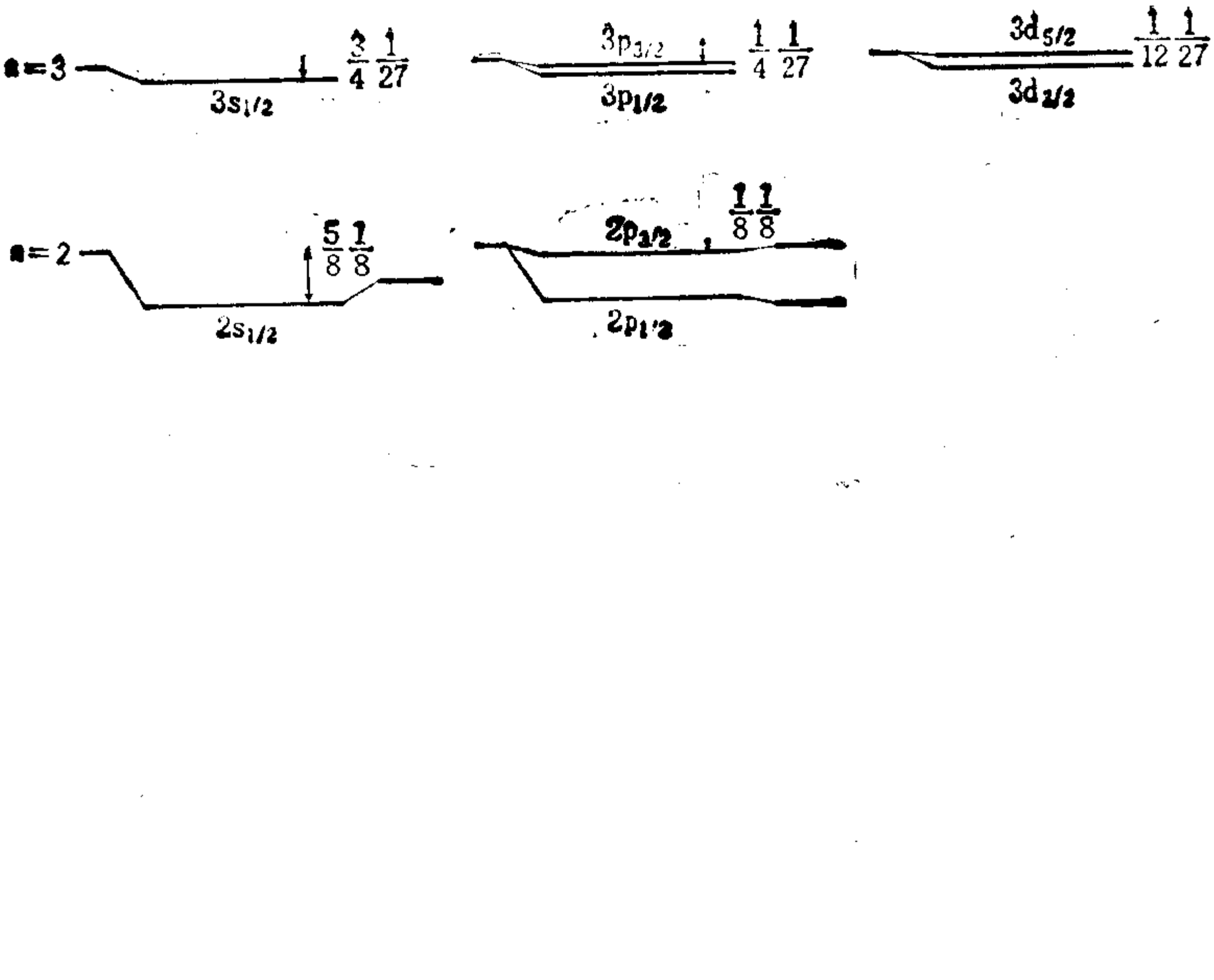
$$\begin{aligned}\int\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r} &= \int[u^{A\dagger}(\boldsymbol{r})u^{A}(\boldsymbol{r})+u^{B\dagger}(\boldsymbol{r})u^{B}(\boldsymbol{r})]d^3\boldsymbol{r}\\ &= \int[|G(\boldsymbol{r})|^2+|F(\boldsymbol{r})|^2]d^3\boldsymbol{r}=1.\end{aligned}$$

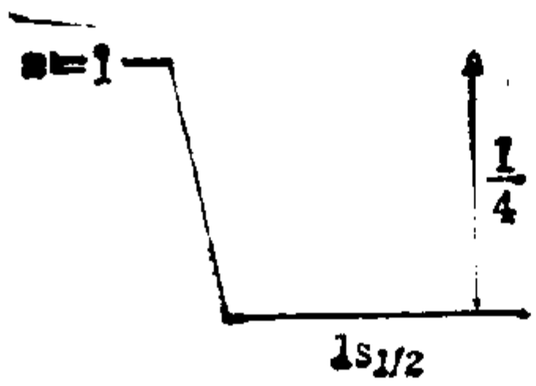
引入主量子数 $n=n'+j+\frac{1}{2}$，把能量本征值(7.5.27)写成(精细结构公式)

$$E_{nj}=mc^2\left\{1+Z^2\alpha^2\left(n-\left(j+\frac{1}{2}\right)+\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-(Z\alpha)^2\right]^{\frac{1}{2}}\right)^{-2}\right\}^{1/2}. \quad (7.5.31)$$

表 7.2

| | $n$ | $l$ | $j$ | $\kappa$ | $E_{nj}/mc^2$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $1s_{1/2}$ | 1 | 0 | 1/2 | $-1$ | $\sqrt{1-(Z\alpha)^2}$ |
| $2s_{1/2}$ | 2 | 0 | 1/2 | $-1$ | $\sqrt{\frac{1}{2}(1+\sqrt{1-(Z\alpha)^2})}$ |
| $2p_{1/2}$ | 2 | 1 | 1/2 | 1 | |
| $2p_{3/2}$ | 2 | 1 | 3/2 | $-2$ | $\sqrt{1-(Z\alpha/2)^2}$ |
| $3p_{1/2}$ | 3 | 1 | 1/2 | 1 | $\frac{2+\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}{\sqrt{5+4\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}}$ |




$l=0$ $l=1$ $l=2$

图 7.4 库仑场中的能级.对于各个$l$,左边的短线是非相对论能级,中间的长线是用狄拉克理论得到的能级. 它们之差(精细结构)以 $\alpha^2$Ry 为单位用分数表示. $1\text{Ry}\equiv mc^4/2\hbar^2$. 其量子电动力学兰姆移位是 $\alpha^3$Ry 量级,例如,把 $n=2$ 的能级变成了右边的粗短线,消除了狄拉克理论中 $2s_{1/2}$ 和 $2p_{1/2}$ 的简并. 由于电子与原子核自旋的相互作用,各个能级按 $\alpha^2(m/M)$ 量级一分为二(超精细结构). 其中$M$是原子核质量

如果场弱,用 $Z\alpha$ 展开,就可以知道,这个 $n$ 正是非相对论情况下的主量子数(见后面的 (7.5.32) 式). 本征态由 $(n,l,j,m)$ 标志.

当然，轨道角动量并非守恒量，但这个 $l$ 却是旋量的“大”分量[(7.5.9)式中的$\kappa^A$]所具有的轨道角动量的大小。而 $j$ 和 $m$ 是总角动量及 $z$ 分量，它们是守恒量。表7.2 所示为几个低能状态。能量本征值关于 $l$ 和 $m$ 是简并的。

图7.4 是能级图，其中包括 $2s_{1/2}$和$2p_{1/2}$简并被兰姆移位消除的情形，而后者是量子电动力学的效应。狄拉克在提出方程（7.4.1）时，就用微扰论计算了图 7.4 的能级精细结构。之后不久，达尔文(Darwin)得到了严格解。无论如何，它与实验完全一致，给予狄拉克方程以强有力的支持，这是 1928 年的事。

我们来详细讨论一下非相对论极限。由于 $(Z\alpha)^2 \ll 1$，将(7.5.31)式展开，有

$$\frac{E_{nj}-mc^2}{mc^2}=-\frac{(Z\alpha)^2}{2}\frac{1}{n^2}+(Z\alpha)^4\left[\frac{3}{8n^4}-\frac{1}{2j+1}\frac{1}{n^3}\right]+\cdots. \tag{7.5.32}$$

像前面曾看到的那样，最低一级近似与非相对论的（5.5.12）式一致。在这一级近似，由(7.5.12)式得到的$\rho=r/a$ 也与(5.5.2)式的 $\rho$ 相等。而且(7.5.30)式中的$N_1$变成 $\sqrt{-R+n}$，于是

$$\kappa=j+\frac{1}{2}\ \text{或}\ j=l-\frac{1}{2}, \tag{7.5.33}$$

对于这样的状态 $\psi^{(-)}_{j,j_z}$，有

$$N_1\approx\sqrt{n'}.$$

将(7.5.29)式代入(7.5.16)式，容易得到

$$G^{(-)}(r)\propto\rho^{\gamma}[F(-n'+1,2\gamma+1;\rho)-F(-n',2\gamma+1;\rho)]e^{-\rho/2}.$$

与它相比，另一个$F^{(-)}(r)$有因子 $\sqrt{1-(E/mc^2)}$，小到可以忽略不计的程度。根据合流超几何函数的递推公式（将(5.5.7)式推广到 $\gamma\neq$ 正整数的情形，再用 $ze^{zt}=de^{zt}/dt$ 做分部积分，…，通过此类运算即可得到），则有

$$G^{(-)}(r)\propto(2\gamma+1)^{-1}\rho^{\gamma+1}F(-n'+1,2\gamma+2;\rho)e^{-\rho/2}.$$

在目前的近似中，$\gamma \approx |\kappa|$，再应用(7.5.33)式，就会从(7.5.9)式得到

$$u^A(r) \propto \rho^l F(l+1-n, 2l+2; \rho) e^{-\rho/2} \mathcal{Y}^{(-)}_{j,j_3}. \quad (7.5.34)$$

该径向函数与(5.5.11)式所给出的非相对论的 $R_{nl}(r)$完全一致。因$F^{(-)}(r)$忽略不计，故$\psi$的小分量$u^B(r)$为零.

在非相对论近似的情形，并不只有(7.5.33)式中的 $\psi^{(-)}_{j,j_3}$。可以说，同时还有

$$\kappa = -\left(j + \frac{1}{2}\right) \text{ 即 } j = l + \frac{1}{2}$$

的状态 $\psi^{(+)}_{j,j_3}$。由于现在有 $N_0 N_1 \approx (N_0/N_1)(n' + 2\gamma)$，因此，渐近式表现为(7.5.34)式，并给出 $G^{(+)} \propto \rho^\gamma F(-n', 2\gamma; \rho)$。

波函数形式如何呢？我们来看一看 $n' = 0$ 的极端情况. 如果不做近似地写出波函数，那么，对于总角动量 $j$ 和 $z$ 分量 $j_3$ 来说，$n = j + \frac{1}{2}$、$l = j - \frac{1}{2}$的状态 $\psi^{(+)}_{n,l,j,j_3}$ 是

$$\begin{bmatrix} u^A(r) \\ u^B(r) \end{bmatrix} = (2|\kappa|\Gamma(2\gamma+1)a^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a}\right)^{\gamma-1} e^{-r/2a} \times \begin{bmatrix} \sqrt{|\kappa| + \gamma}\, \mathcal{Y}^{(+)}_{j,j_3} \\ -i\sqrt{|\kappa| - \gamma}\, \mathcal{Y}^{(-)}_{j,j_3} \end{bmatrix},$$

其中

$$\kappa = -\left(j + \frac{1}{2}\right), \quad \gamma = \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}, \quad a = (|\kappa|/2Z) a_B,$$

$a_B$是玻尔半径。

若进一步取 $l = 0$，则为基态 $1s_{1/2}$，值得注意的是，这时波函数在 $r = 0$ 处像 $r^{\sqrt{1-(Z\alpha)^2}-1}$那样弱发散。请见图 7.5 中它乘以 $r$ 之后与非相对论情况所做的比较。

在该基态中，或说在 $j_3 = \frac{1}{2}$ 的状态中，有

$$\mathcal{Y}^{(l=0)}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{Y}^{(l=1)}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = -\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{bmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta e^{i\varphi} \end{bmatrix},$$

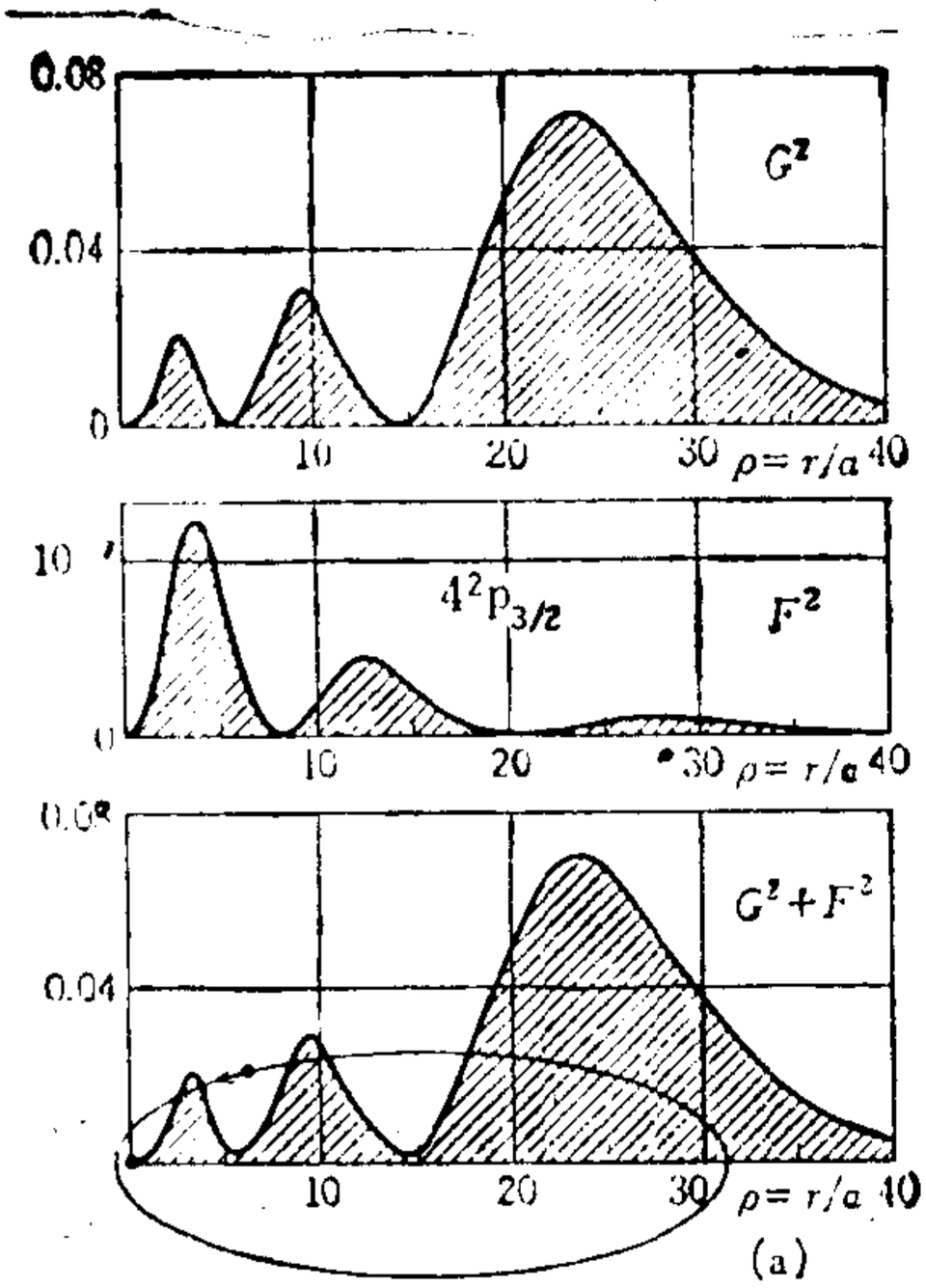



图 7.5　氢原子中狄拉克电子位置的概率密度 $r^2\psi^+\psi(r)$ 是径向部分(a)和方位角部分 (b)之积.径向部分的形状由大体上与非相对论情况(图5.31)相近的 $G^2$加上$F^2$再少许修正而成.图中所示为 $4^2p_{3/2}$ 状态.椭圆表示经典轨道的大小.方位角部分大致可理解为，轨道角动量 $l$ 绕总角动量 $j=l+s$ 进动，$j$ 又绕$x^3$轴进动，而考虑这时轨道面的变动．请与非相对论的图5.9比较(根据 White, H.E.: *Phys, Rev.*, **38**, 513(1931))

旋量大分量的自旋经常向上，而小分量的自旋则在摆动。 $j_3=-\frac{1}{2}$ 的状态亦有同样摆动。

狄拉克方程建立的基础之一是洛伦兹协变性，然而，该原理能否用于原子核与电子的相对运动？如果认为只有电子运动可以进行洛伦兹变换，那么，方程(7.5.1)能否成立？若不包括原子核的变量，就不可能写出相对论方程．针对在说明光谱的精细结构方面业已取得成功的狄拉克理论，爱丁顿(Eddington) 提出了这一系列问题．狄拉克、佩尔斯(Peierls)和波瑞斯 (Pryce) 回答了这些问题，并且表明，在根据相对论协变性而建立的自由电子方程中加进势能项时，已经加上了这样的“假设”，即，电子的运动受到电子所

在位置附近"场"的影响，至于该场如何产生，则无关紧要.当然，若原子核的质量是有限的，则会出现(7.5.1)式中所没有包括的各种附加效应.

### d) 库仑散射

我们来考虑由库仑场引起的散射.与束缚态的情形不同，这时的场并未限于引力型，因此，要把上一小节中的$-Z$换成$ZZ'$，而其符号是任意的.当然，$\alpha_1 = -ZZ'\alpha$，此处，负能态不予考虑，在散射态中$E > mc^2$. 其波函数由束缚态的(7.5.29)式解析延拓而获得.

首先，采用变量$\rho = r/a$，而$a$是(7.5.12)式定义过了的. 这样，若考虑像图7.6那样割断了的复$E$平面，则在$0<E<mc^2$的A点，$(mc^2)^2 - E^2 = (mc^2 - E)(mc^2 + E)$的幅角应该是零. 如果取割线上沿的B点为散射态$E > mc^2$，那么，其幅角为$-\pi$，因此有

$$[(mc^2)^2 - E^2]^{1/2} = \exp\left(-\frac{\pi i}{2}\right)\sqrt{E^2 - (mc^2)^2}.$$

顺便说一下，$[mc^2 - E]^{1/2}$情况一样. 当把$E < mc^2$的波函数解析延拓至$E > mc^2$时，(7.5.12)式应换成

$$a^{-1} = -2i\sqrt{E^2 - (mc^2)^2}/\hbar c = 2ik. \qquad (7.5.35)$$

这个$k$是散射粒子在无限远处的波数. 而$\rho = -2ikr$也与非相对论的(5.5.11)式相同.

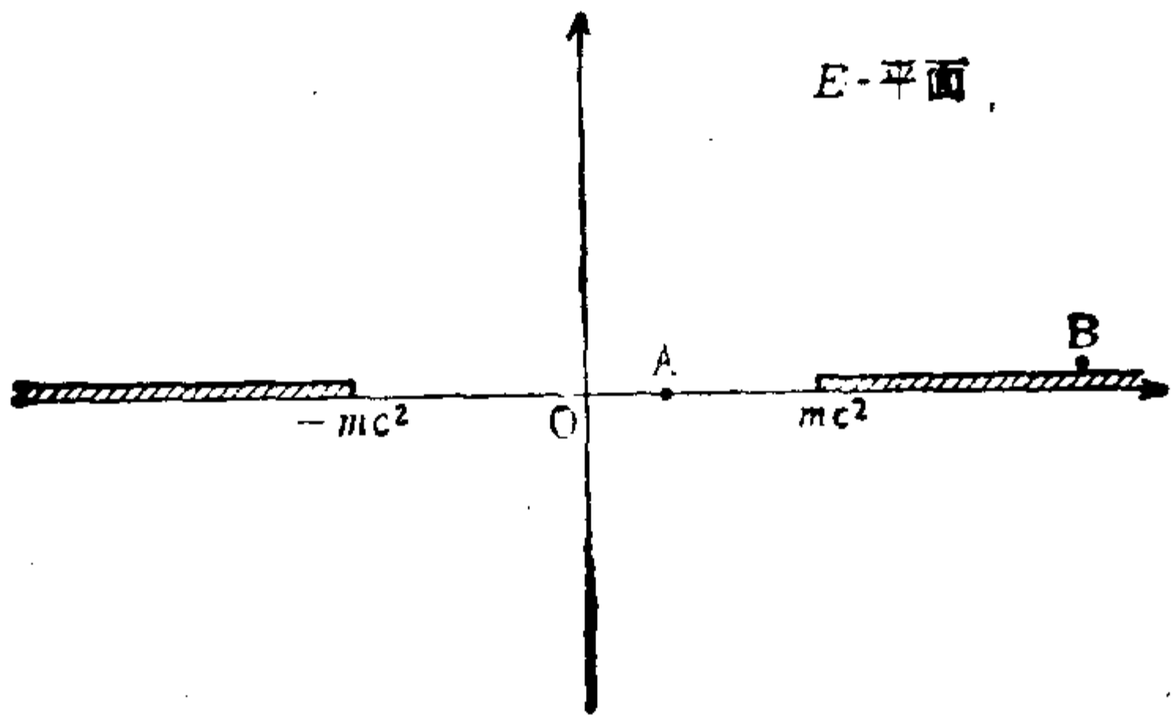



图 7.6

因(7.5.29)式的$-n'$本来就是(7.5.26)式中的$\gamma-\alpha_1\varepsilon_1$，故把(7.5.22)式中的$\varepsilon_1$像(7.5.35)式那样写为

$$\alpha_1\varepsilon_1 = i\alpha_1 E(E^2-(mc^2))^{-\frac{1}{2}} \equiv in,\ \alpha_1 \equiv -ZZ'\alpha.$$

这个$n$在非相对论极限变成(4.5.15)。切勿与主量子数混淆。这样一来，在(7.5.29)式中，有

$$n' = \gamma + in, N_1 = \left[-\kappa + i\alpha_1\left(\left(\frac{E}{mc^2}\right)^2 - 1\right)^{-\frac{1}{2}}\right]^{\frac{1}{2}},$$

因$|-n'/N_1^2| = 1$显然成立，故设

$$\frac{-n'}{N_1^2}\frac{\gamma-in}{\gamma+in} = \frac{\gamma-in}{N_1^2} \equiv e^{-2i\eta}. \tag{7.5.36}$$

之所以在左边加上了第二个因子，是为了使$\eta$的定义合乎习惯.于是，我们来计算(7.5.16)式中的$G(r)$和$F(r)$，首先，如果在

$$f(\rho)\pm g(\rho) = N_0\frac{N_1e^{-i\eta}}{\gamma-in}(-2ikr)[(\gamma+in)e^{-i\eta}F(\gamma + 1 + in, 2\gamma+1; -2ikr) \pm (\gamma-in)e^{i\eta}F(\gamma + in, 2\gamma+1; -2ikr)]$$

中应用库默尔第一定理(在(4.5.6)式中把积分变量由$t$换成$1-t$)，即可直接得到

$$F(\alpha,\gamma;z) = e^zF(\gamma-\alpha,\gamma-z), \tag{7.5.37}$$

则(7.5.16)式变成

$$\left.\begin{matrix}G(r)\\ iF(r)\end{matrix}\right\} = \sqrt{(E/mc^2)\pm 1}\,[f(\rho)\pm g(\rho)]e^{-\rho/2}$$

$$= N\sqrt{\frac{E}{mc^2}\pm 1}\,(2kr)^\gamma[(\gamma+in)e^{-i\eta}e^{ikr}F(\gamma + 1 + in, 2\gamma+1; -2ikr) \pm \text{c.c.}], \tag{7.5.38}$$

其中

$$N \equiv N_0N_1e^{-i\eta}(-i)^\gamma/(\gamma-in), \tag{7.5.39}$$

c.c. 表示复共轭，(±)的"+"对应$G$，"−"对应$F$，使用$G$和$F$，就可以通过(7.5.9)式给出波函数.

散射实验中，制备状态和观测结果都是在离散射中心相当远

的地方进行的。现在的波函数(7.5.38) 在 $r \to \infty$ 时的性质可以由合流超几何函数的渐近公式(§5.5b))得知。 为了标明状态而附加了角标 $\pi = +$、$-$和 $j$ 之后，有

$$\left.\begin{matrix} G_j^{(\pi)}(r) \\ iF_j^{(\pi)}(r) \end{matrix}\right\} \underset{r\to\infty}{\sim} C' \frac{\sqrt{2\pi}}{ik} \sqrt{2l_\pi + 1} \begin{Bmatrix} \sqrt{\dfrac{E}{mc^2} + 1} \\ \sqrt{\dfrac{E}{mc^2} - 1} \end{Bmatrix}$$

$$\times \left[\exp(i(l_\pi + 1)\pi - i(kr - n\ln 2kr))\right.$$

$$\left. \pm \exp(2i\delta_j^{(\pi)} + i(kr - n\ln 2kr))\right], \qquad (7.5.40)$$

其中

$$\exp(2i\delta_j^{(\pi)}) = \frac{\Gamma(\gamma_\pi + 1 + in)}{\Gamma(\gamma_\pi + 1 - in)} \frac{\gamma_\pi - i\pi}{\gamma_\pi + in}$$

$$\times \exp(i(2\eta_\pi + \pi) - i(\gamma_\pi - l_\pi)\pi). \qquad (7.5.41)$$

此处略去$C'$的表达式。 以后应用时将归一化为 $C' = 1$. 与 $\pi$ 相应的$l_\pi$，可根据表 7.1 由 $j$ 求得. 由同样求得的$\kappa_\pi$可以定出 $\gamma_\pi$。

同样

$$\left.\begin{matrix} G_j^{(\pi)}(r) \\ F_j^{(\pi)}(r) \end{matrix}\right\} \underset{r\to\infty}{\sim} C \begin{Bmatrix} \sqrt{\dfrac{E}{mc^2} + 1}\cos \\ -i\sqrt{\dfrac{E}{mc^2} - 1}\sin \end{Bmatrix} (kr - n\ln 2kr + \beta_j^{(\pi)}),$$

(7.5.42)

其中

$$\beta_j^{(\pi)} = \arg\Gamma(\gamma_\pi + in) - \frac{\pi}{2}\gamma_\pi + \eta_\pi. \qquad (7.5.43)$$

按照(7.5.38)式归一化，有

$$C = \frac{2N\Gamma(2\gamma_\pi + 1)e^{\frac{n\pi}{2}}}{|\Gamma(\gamma_\pi + in)|}. \qquad (7.5.44)$$

其中之$\eta_\pi$和$N$分别由(7.5.36)和(7.5.39)两式定义。根据(7.5.42)

式，如果由它们构成的波函数 $\psi^{(\pm)}_{k,j,i_3}$归一化为

$$\int \psi^{(s')\dagger}_{k',j',j_3'}(\boldsymbol{r})\psi^{(s)}_{k,j,i_3}(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r} = \delta_{j,j'}\delta_{i_3,i_3'}\delta_{s,s'}\frac{1}{k^2}\delta(k-k'),$$

(7.5.45)

那么，(7.5.38) 式显然应该乘以$\sqrt{mc^2/\pi k^2 E}/|C|$. 若 (7.5.45)式中的 $\frac{1}{k^2}\delta(k-k')$ 换成 $\delta(E-E')$，则应乘以 $\sqrt{mc^2/\pi k}/|C|$.

与束缚态的情形一样，(7.5.40) 式的大分量 $G^{(-)}_j$ 在 $\alpha_1 \to 0$ 时趋向于非相对论的(5.5.18)式.

要想从(7.5.40)式得知散射的信息，必须研究和比较无势的自由波在远处的性质.

### e) 散射截面，自旋极化

我们以沿 $z$ 轴正向运动的正能平面波(7.4.23) 入射的情况为例. 求出方程 (7.5.1) 的解 (7.5.2) 在$r \to \infty$时的渐近式

$$\begin{bmatrix} u^A(\boldsymbol{r}) \\ u^B(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix}_{k,s_3} \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} \sqrt{\dfrac{E}{mc^2}+1}\quad \chi_{s_3} \\ \sqrt{\dfrac{E}{mc^2}-1}\quad \sigma_3\chi_{s_3} \end{bmatrix} e^{ikz} + f_{k,s_3}(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r},$$

(7.5.46)

$f_{k,s_3}$ 是散射幅. 当然，它有四个分量. 在此，入射粒子自旋的 $z$ 分量为 $s_3$，对于 $s_3 = \frac{1}{2}$、$-\frac{1}{2}$，有 $\chi_{s_3} = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$、$\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$. 若能量为正，则入射粒子的状态便由波数 $k$ 和自旋子分量$s_3$决定.

在库仑散射的情形中，远处的波函数不只是 (7.5.46) 式中的 $\exp(ikz)$和 $\exp(ikr)/r$，尚残留势的影响. 我们来把原先求得的球面波解 (7.5.16) 和 (7.5.9) 叠加起来，以便构成与 (7.5.46) 式相当的形式. 不过，以下讨论在一般的(短程)中心力场中亦照样成立.

就此目的而言，可以只注意大分量$u^A$. 这是因为，在中心力场

中，小分量$u^B$完全可以根据(7.5 3)的第一式而由$u^A$确定。

首先，把(7.5.46)式的入射波部分进行部分波分解。为要分解成含有自旋的总角动量的本征态，可以将(5.4.46)式中的$P_l(\cos\theta)$改写，便有

$$e^{ikz}\chi_{s_3}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)\sum_{\pi}\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\mathscr{Y}^{(\pi)}_{j_\pi s_3}\times\left\langle l\frac{1}{2}j_\pi s_3\middle| l\ \frac{1}{2}\ 0s_3\right\rangle,$$

其中，$^{(\pi)}$是$\mathscr{Y}$的上角标$^{(\pm)}$，并对其求和。与$\pi$相应的$j$的值$j_\pi$由给定的$l$根据表7.1定出。参照图7.7，可以把对$l$的和变为对$j$的和。$l_\pi$由给定的$j$根据表7.1定出，于是有

$$e^{ikz}\chi_{s_3}=\sqrt{4\pi}\sum_j\sum_\pi\sqrt{2l_\pi+1}\exp\left(\frac{i}{2}l_\pi\pi\right)j_{l_\pi}(kr)\mathscr{Y}^{(\pi)}_{j,s_3}\times\left\langle l_\pi\frac{1}{2}js_3\middle| l_\pi\ \frac{1}{2}\ 0s_3\right\rangle. \tag{7.5.47}$$

因此，从(5.4.30)和(5.4.42)两式可得（7.5.46）式中入射波部分在$r\to\infty$时的渐近式

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\left(\frac{E}{mc^2}\right)^2+1}re^{ikz}\chi_{s_3}\widetilde{\underset{r\to\infty}{}}\sqrt{\left(\frac{E}{mc^2}\right)^2+1}\times\frac{\sqrt{2\pi}}{ik}\sum_j\sum_\pi\sqrt{2l_\pi+1}(e^{i(l_\pi+1)\pi}e^{-ikr}+e^{ikr})\mathscr{Y}^{(\pi)}_{j,s_3}\times\left\langle l_\pi\frac{1}{2}js_3\middle| l_\pi\ \frac{1}{2}\ 0s_3\right\rangle. \tag{7.5.48}$$

该入射波像进来波的项那样与库仑场球面波解(7.5.40)叠加，就会得到所要求的散射态的解，即(7.5.46)式中的$u^A(r)$。若把(7.5.40)式中的比例常数$C'$取为1而定义$G_j^{(\pi)}$，则有

$$u^A(r)=\sqrt{\frac{E}{mc^2}+1}\sum_j\sum_\pi r^{-1}G_j^{(\pi)}(r)\mathscr{Y}^{(\pi)}_{j,s_3}\times\left\langle l_\pi\frac{1}{2}js_3\middle| l_\pi\ \frac{1}{2}\ 0s_3)\right\rangle. \tag{7.5.49}$$

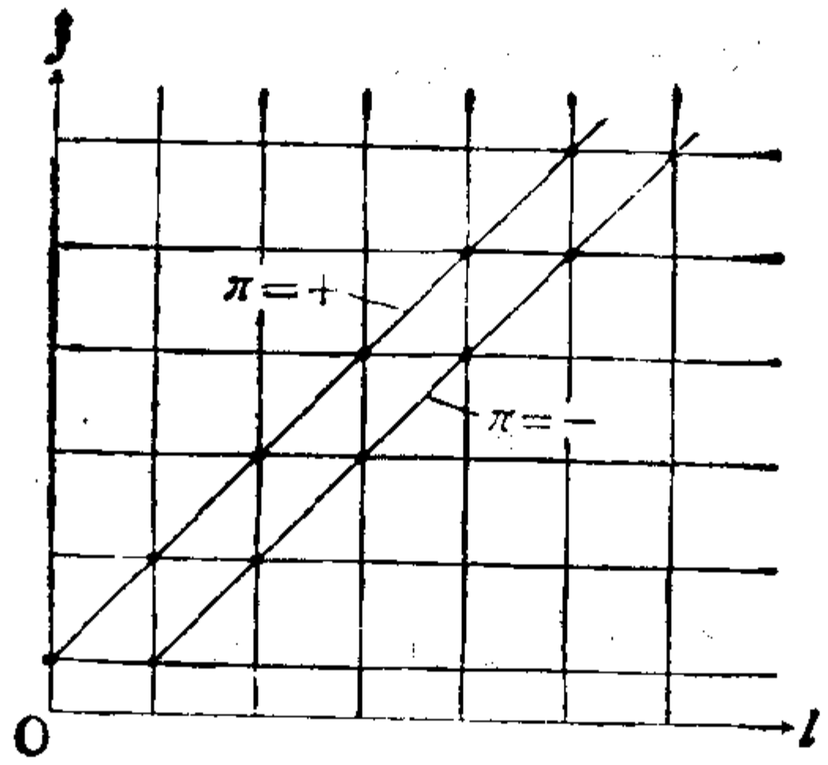



图 7.7　$l_{,j}$ 的值和 $\pi$ 的+、−

把该解的出射波的项与(7.5.48)式中相应项比较，便知散射幅为

$$f_{k,s_3}(\theta,\varphi)=\frac{\sqrt{2\pi}}{ik}\sqrt{\frac{E}{mc^2}+1}\sum_j\sum_\pi\sqrt{2l_\pi+1}\left[\exp(2i\delta_j^{(\pi)})-1\right]$$
$$\left\langle l_\pi\ \frac{1}{2}\ js_3\middle|l_\pi\ \frac{1}{2}\ 0s_3\right\rangle\mathscr{Y}_{j,s_3}^{(\pi)}(\theta,\varphi)。\qquad(7.5.50)$$

此形式通用于一般的中心力场。

为了与散射观测联系起来，可以使它再回到轨道角动量和自旋均为对角化的表象中去。如果把(7.5.50)式中的 $\mathscr{Y}_{j,s_3}^{(\pi)}$ 用 $Y_{l_\pi,s_3-s_3'}\chi_{s_3'}$ 的叠加代替，并参照图 7.7 把对 $j$ 的和还原成对 $l$ 的和，则所得到的形式是

$$f_{k,s_3}(\theta,\varphi)=\sum_{s_3'}T_{s_3',s_3}(\theta,\varphi)\chi_{s_3'},$$

其中

$$T_{s_3',s_3}(\theta,\varphi)=\frac{\sqrt{2\pi}}{ik}\sqrt{\frac{E}{mc^2}+1}\sum_l\sum_\pi\sqrt{2l+1}$$
$$\times\left[\exp(2i\delta_{j\pi}^{(\pi)})-1\right]\left\langle l\frac{1}{2}s_3-s_3's_3'\middle|l\ \frac{1}{2}\ j_\pi s_3\right\rangle$$
$$\times\left\langle l\frac{1}{2}j_\pi s_3\middle|l\ \frac{1}{2}\ 0s_3\right\rangle Y_{l,s_3-s_3'}(\theta,\varphi)\qquad(7.5.51)$$

是粒子的自旋由于散射而从 $s_3$ 变为 $s_3'$ 的散射幅。把它们列成矩阵

而写成

$$f = \begin{bmatrix} T_{\uparrow\uparrow} & T_{\uparrow\downarrow} \\ T_{\downarrow\uparrow} & T_{\downarrow\downarrow} \end{bmatrix} = \mathrm{f} + \mathrm{g}\boldsymbol{n}' \cdot \boldsymbol{\sigma}, \tag{7.5.52}$$

就不难看出这一点，上式中，把角标 $s_3 = \pm 1/2$ 换成了箭头。$\boldsymbol{n}'$ 是某一实单位矢量。可以发现，此式是把四个复量 $T_{s_3', s_3}$ 用四个复量 f 和 $\mathrm{g}_k = \mathrm{g}n_k'(k = 1,2,3)$ 来表示的。需要指出，它们比(7.5.51)式具有更为简单的表达式。

首先，在(7.5.52)式两边取迹，有

$$\mathrm{f} = \frac{1}{2}(T_{\uparrow\uparrow} + T_{\downarrow\downarrow}).$$

然而，由(7.5.51)式中给定 $l$ 的项看到，$T_{\uparrow\uparrow}$ 和 $T_{\downarrow\downarrow}$ 均与 $Y_{l0}$ 成正比，其 CG 系数与 $s_3$ 无关

$$|\langle l\frac{1}{2}\ 0s_3 | l\frac{1}{2}\ j_\pi s_3\rangle|^2 = \begin{cases} \dfrac{l+1}{2l+1} & (\pi = +) \\ \dfrac{l}{2l+1} & (\pi = -), \end{cases} \tag{7.5.53}$$

故

$$\mathrm{f} = \frac{1}{2ik}\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{E}{mc^2}+1\right)}\sum_l \{(l+1)[\exp(2i\delta_{l+}^{(+)}) - 1] + l[\exp(2i\delta_{l-}^{(-)}) - 1]\}P_l(\cos\theta). \tag{7.5.54}$$

请与非相对论的(5.4.50)式比较。

由于(7.5.53)式与 $s_3$ 无关，因此有

$$\mathrm{g}_3 = \frac{1}{2}(T_{\uparrow\uparrow} - T_{\downarrow\downarrow}) = 0 \ \text{故}\ n_3' = 0. \tag{7.5.55}$$

其次，有

$$\frac{n_1' + in_2'}{n_1' - in_2'} = \frac{T_{\downarrow\uparrow}}{T_{\uparrow\downarrow}} = -e^{2i\varphi} \tag{7.5.56}$$

成立。这是因为，由(7.5.51)式中给定的 $l$、$\pi$ 的项来看，与 $s_3$、$s_3'$ 有关部分 (CG 系数乘以 $Y_{l s_3 - s_3'}(\theta,\varphi)$) 中相当于 $T_{\downarrow\uparrow}/T'_{\uparrow\downarrow}$ 的比确实与 $l$、$\pi$ 无关，总是等于 $-\exp(2i\varphi)$。这取决于

$$\langle lsm_lm_s | lsjm_j\rangle = (-1)^{l+s-j}\langle ls - m_l - m_s | lsj - m_j\rangle$$

以及从(5.2.21)式推出的恒等式

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m e^{2im\varphi} Y_{l,-m}(\theta,\varphi).$$

前者曾出现于(7.5.53)式与 $s_3 = \pm 1/2$ 无关的那些地方.(7.5.55)和(7.5.56)两式表明(参看图 7.8)

$$\boldsymbol{n}' = \frac{\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}'}{|\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}'|}, \tag{7.5.57}$$

其中,$\boldsymbol{k}'$ 是散射后的波矢. 也就是说,$\boldsymbol{n}'$ 是散射平面的法线. 当然,亦可令其反向,但通常却是这样选择的.

由(7.5.55)和(7.5.56)两式,有 $n_1' + in_2' = e^{i(\varphi+\pi/2)}$,故

$$\mathrm{g} = T_{\cdot i}\exp\left[-i\left(\varphi + \frac{\pi}{2}\right)\right].$$

应用 CG 系数来计算右边,得

$$\mathrm{g} = \frac{1}{2ik}\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{E}{mc^2}+1\right)}\sum_l 2i[\exp(2i\delta_l^{(+)}) - \exp(2i\delta_l^{(-)})]P_l'(\cos\theta). \tag{7.5.58}$$

这样一来,通过(7.5.44)和(7.5.58)两式,就可以把与自旋有关的散射矩阵(7.5.52)完全用相移 $\delta_l^{(\pm)}$ 来表示.

应用流的公式(7.4.26),可以从(7.5.46)式计算出散射截面,虽然散射波是用球面波描绘的,但在远处来观察,波面的一小部分与平面无异,故可使用(7.4.26)式,于是,初态自旋为 $s_3$ 的粒子散射到 $(\theta,\varphi)$ 方向自旋变为 $s_3'$ 的微分截面是

$$\frac{d\sigma_{s_3's_3}(\theta,\varphi)}{d\Omega} = |T_{s_3's_3}(\theta,\varphi)|^2.$$

但是,在很多情况下,散射的初态并非自旋确定的"纯态",而是只有不完全信息的"混合态",其中自旋 $z$ 分量 $s_3 = 1/2$ 的概率是 $(1+\mathscr{P})/2$,$s_3 = -1/2$ 的概率是 $(1-\mathscr{P})/2$. 观测散射终态时,也往往不涉及自旋的取向. 在这种情况下,所观察到的散射截面是对初态自旋取平均,对终态自旋求和的值.

在上述情况下,**密度矩阵方法**便于讨论散射问题,如果根据

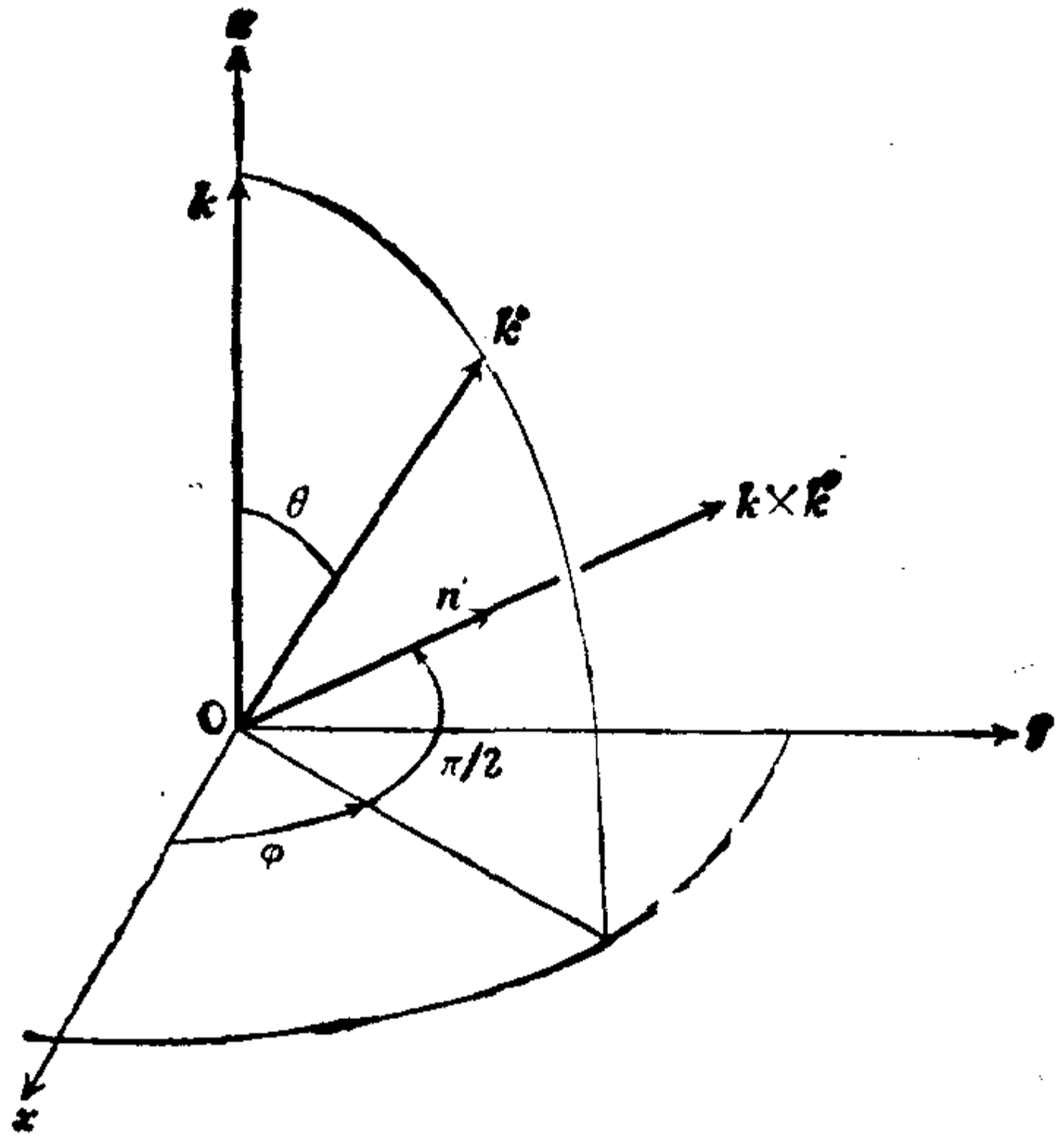



图 7.8　散射平面的单位法线矢量 $n'$. 散射前后的波矢 $k$ 和 $k'$ 由(7.5.57)式定义

(7.5.52)式再进一步定义矩阵

$$Q = T\rho_0 T^{\dagger}, \tag{7.5.59}$$

则其中将凝聚着散射过程中所发生的有关信息. $\rho_0$ 表示与自旋有关的散射初态的密度矩阵. 若初态是上述的那种混合态，则为对角矩阵 $\rho_0 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1+\mathscr{P} & 0 \\ 0 & 1-\mathscr{P} \end{bmatrix}$. 更一般地，如果给定矢量 $\mathscr{P}$($0 \leqslant \mathscr{P} \leqslant 1$)，自旋与 $\mathscr{P}$ 平行的概率是 $(1+\mathscr{P})/2$，反平行的概率是 $(1-\mathscr{P})/2$，那么，便有

$$\rho_0 = \frac{1}{2}(1 + \mathscr{P}\cdot\sigma). \tag{7.5.60}$$

$\mathscr{P}\cdot\sigma/\mathscr{P}$ 是 $\sigma$ 在 $\mathscr{P}$ 方向上的分量，这是因为，在其对角化的表象中，$\rho_0$ 也是对角的，本征值是 $(1+\mathscr{P})/2$ 和 $(1-\mathscr{P})/2$.

运用 (7.5.59) 式，自旋初态由密度矩阵 (7.5.60) 给定时，不管终态自旋如何的观测所获得的微分截面是

$$\frac{d\sigma(\theta,\varphi)}{d\Omega} = \mathrm{tr}(T\rho_0 T^\dagger)\,. \tag{7.5.61}$$

实际上，若 $\rho_0$ 是对角的，则上式左边是

$$\frac{d\sigma(\theta,\varphi)}{d\Omega} = \frac{1}{2}\sum_{s_3'}[(1+\mathscr{P})|T_{s_3'\uparrow}|^2 + (1-\mathscr{P})|T_{s_3'\downarrow}|^2],$$

计算一下 (7.5.61) 式的右边，就知道确实等于它。在 $\rho_0$ 不是对角的情况下，将其变换到对角表象，$T$ 必将受到相同的幺正变换，故 (7.5.61) 式依然成立。

$\boldsymbol{n}$ 是给定的实单位矢量，$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ 的平均就叫做 $n$ 方向上的**极化度**。对散射的终态来说，欲知此量，可以计算

$$\langle \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\rangle = \mathrm{tr}[(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})T\rho_0 T^\dagger]/\mathrm{tr}[T\rho_0 T^\dagger]. \tag{7.5.62}$$

特别在初态自旋均匀分布 $\rho_0 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$. 的情况下，根据 (7.5.52) 和 (7.5.54) 两式，有

$$\frac{d\sigma(\theta\varphi)}{d\Omega} = |\mathrm{f}(\theta)|^2 + |\mathrm{g}(\theta)|^2. \tag{7.5.63}$$

正如根据对称性所预料的那样，它只取决于 $\theta$，而与 $\varphi$ 无关。另外，由于

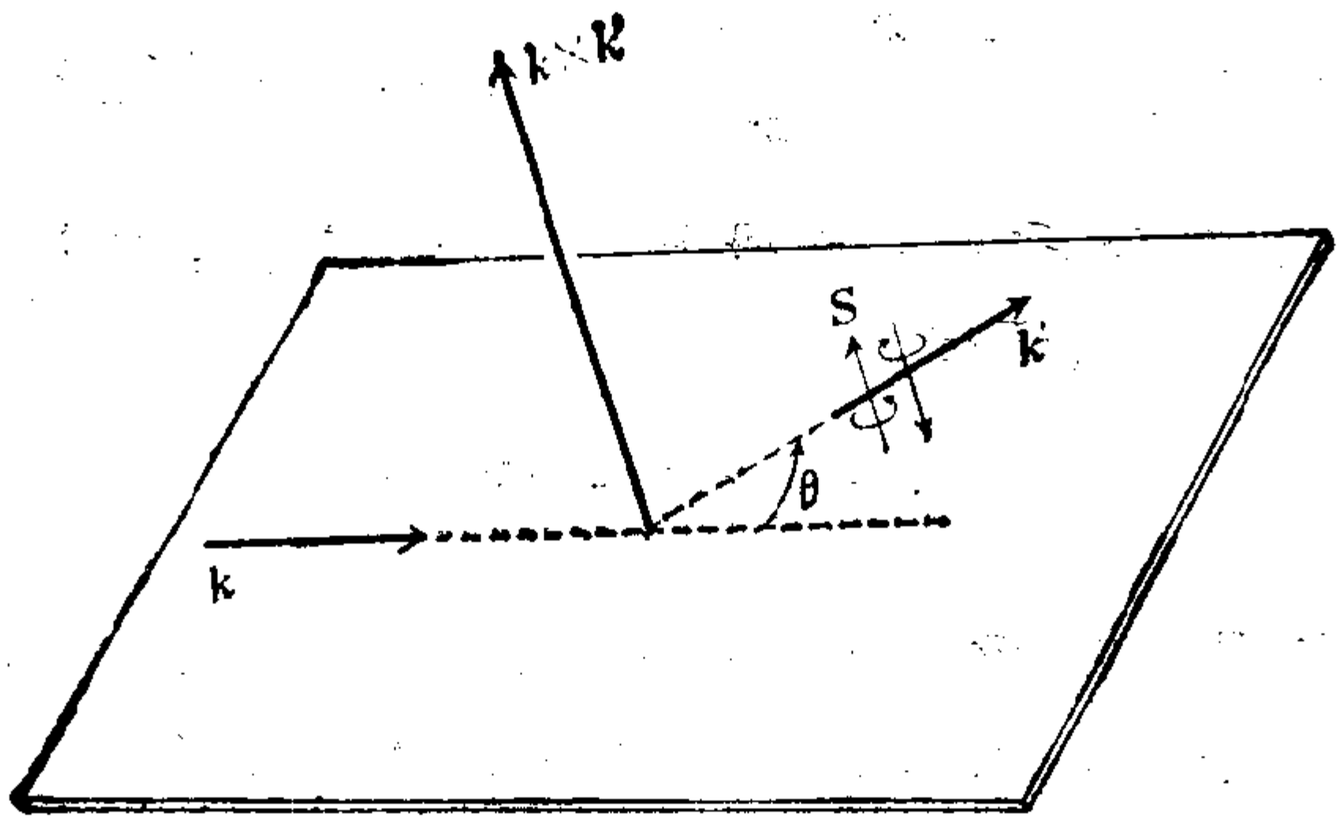



图 7.9　由于散射而引起的自旋极化。将该配置映现于镜，会观察到什么？

$$\langle \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\rangle = \frac{2\mathrm{Re}\{f(\theta)g(\theta)^*\}}{|f(\theta)|^2+|g(\theta)|^2}\,\boldsymbol{n}\cdot\frac{\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}'}{|\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}'|}. \quad (7.5.64)$$

因此，当 $n$ 垂直于散射平面时极化度最大（图 7.9）. 这就意味着，在该方向上的自旋分量为对角的表象中，终态自旋密度矩阵是对角的，因而可以说，终态自旋垂直于散射平面极化，极化度是 $2\mathrm{Re}\{f(\theta)g(\theta)^*\}/\{|f(\theta)|^2+|g(\theta)|^2\}=\mathscr{P}$. 这一有关极化方向的结果可以通过空间反射对称性来理解（图 7.9）. 当然，对于由球对称势而引起的有自旋的粒子散射，它是普遍成立的.

在库仑散射的情况下，不能把微分散射截面 (7.5.63) 写成完全解析的形式，于是便出现了各式各样的近似式和数值结果. 在此我们写出麦肯利-费希巴赫 (Mckinley-Feshbach) 公式，这是一个关于 $\alpha_1=ZZ'e^2/\hbar c$ 和 $\beta=v/c$ 的级数展开式:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R\left[1-\beta^2\sin^2\frac{\theta}{2}-\pi\alpha_1\beta\sin\frac{\theta}{2}\left(1-\sin\frac{\theta}{2}\right)\right], \quad (7.5.65)$$

其中

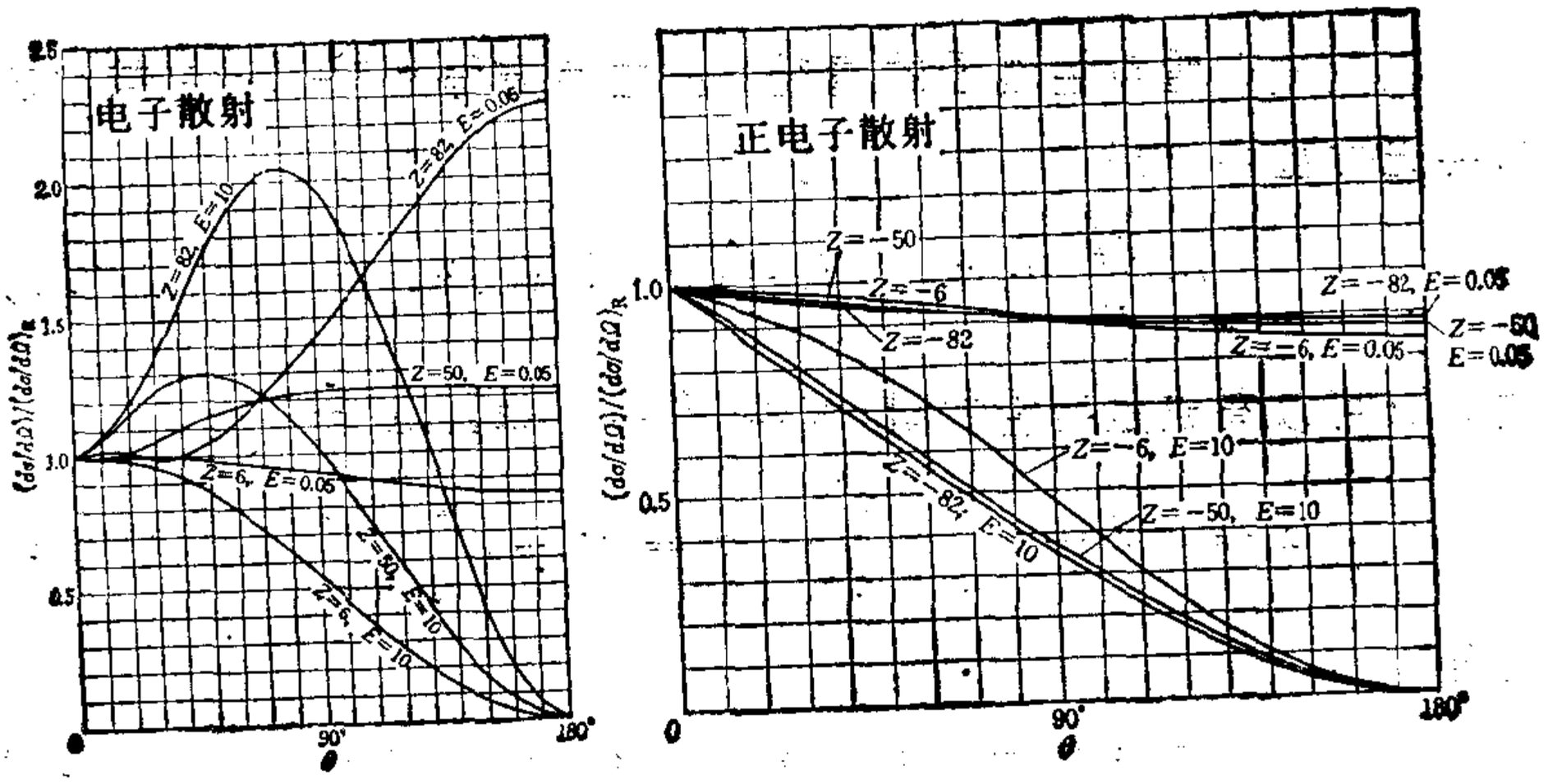



图 7.10　在各种能量值 $E$(MeV)和 $Z$ 值情况下，狄拉克粒子的库仑微分散射截面 $(d\sigma/d\Omega)$ 与卢瑟福微分截面(7.5.66)之比. 取 $Z'=-1$，$Z>0$ 时是电子散射，$Z<0$ 时是正电子散射. 根据 J.A.Doggett 和 L.V.Spencer 的数值计算结果(*Phys.Rev.*, 103 1597(1956))作图

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R = \left(\frac{ZZ'e}{2mc^{22}}\right)^2 \frac{(1-\beta^2)}{\beta^4} \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}} \tag{7.5.66}$$

是卢瑟福微分截面．只要 $\alpha_1$ 甚小，(7.5.65)式对任何 $\beta$ 值均可使用．图 7.10 所示包含了 $Z$ 与 $\beta$ 均大时对 $(d\sigma/d\Omega)$ 和 $(d\sigma/d\Omega)_R$ 之比进行数值计算的结果．

有关散射幅和自旋极化的其它结果，请参看书末文献[Bethe]和[Bose]所引用的论文．

## §7.6 哈密顿形式

我们把至此所处理的狄拉克方程 (7.5.1) 还原为量子力学中标准的薛定谔方程 $ih\partial\psi/\partial t = H\psi$ 的形式．这样做，不仅拓宽了用海森伯绘景重新讨论狄拉克理论的道路，而且也易于寻求非相对论极限．

### a) 颤动

我们先来看自由粒子的情况．狄拉克方程 (7.4.2) 左乘$\gamma^0$之后再进行整理，得到

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi,\quad H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \beta mc^2. \tag{7.6.1}$$

这个$H$可以看成是哈密顿量，其中，$\hat{\boldsymbol{p}} = -ih\mathrm{grad}$，而

$$\boldsymbol{\alpha} \equiv \gamma^0\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix},\quad \beta \equiv \gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \tag{7.6.2}$$

且有

$$\alpha_k\alpha_l + \alpha_l\alpha_k = 2\delta_{kl},\quad \alpha_k\beta + \beta\alpha_k = 0,\quad \beta^2 = 1. \tag{7.6.3}$$

我们来了解一下海森伯绘景中的守恒量．由于考虑的是自由粒子，故动量 $\hat{\boldsymbol{p}} = -ih\mathrm{grad}$ 与哈密顿量$H$对易，是守恒量．狄拉克粒子的自旋 $\boldsymbol{S}$ 是 (7.4.19) 式的空间分量，用$\boldsymbol{\alpha}$矩阵来写，为

$$S=\frac{\hbar}{2}\Sigma,\Sigma_k=\begin{pmatrix}\sigma_k & 0\\ 0 & \sigma_k\end{pmatrix}=-\frac{i}{2}\varepsilon_{klm}\alpha_l\alpha_m, \tag{7.6.4}$$

因

$$[H,\ S_k]=ic\hbar\varepsilon_{klm}\alpha_l\hat{p}_m,\text{即}\ \dot{S}=c\hat{p}\times\alpha, \tag{7.6.5}$$

故自旋只有动量方向上的分量 $S\cdot\hat{p}/|\hat{p}|$（螺旋性)守恒. 其中，$|\hat{p}|=\sqrt{\hat{p}^2}$. 不难证明,总角动量 $\hat{J}=r\times\hat{p}+S$ 是守恒的.

矩阵 $\alpha$ 包含有物理意义. 实际上,狄拉克粒子的速度为

$$\dot{r}=(i\hbar)^{-1}[r,H]=c\alpha. \tag{7.6.6}$$

它与流(7.4.12)的空间部分 $\psi^\dagger\alpha_k\psi$ 符合. 但是,不能不看到,速度与动量分离开了. 因 $\alpha$ 的分量互不对易，故不能同时对角化. 这一点表明即使是自由狄拉克粒子,速度也有起伏,从而不可能做直线运动. 将 $\alpha$ 的任何一个分量对角化所得到的本征值都是 $\pm1$，于是,若观测自由狄拉克粒子在任意选定方向上的速度分量,就应该得到 $+c$ 或 $-c$ 这样的值，构造速度的大小 $\sqrt{\dot{r}^2}$，它恒等于 $\sqrt{3}\,c$. 虽然它是厄米的,但却因某种理由而并非可观测量.

我们来深入研究一下狄拉克粒子的运动,

$$r(t)=\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)r(0)\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right). \tag{7.6.7}$$

按照(7.6.3)式,有 $H^2=c^2p^2+m^2c^4$，它是正定的，若将其平方根写成 $|H|$,则有

$$\exp(-iHt/\hbar)=\cos\frac{|H|}{\hbar}t-i\frac{H}{|H|}\sin\frac{|H|}{\hbar}t.$$

注意,它可以写成另两种形式:

$$\begin{aligned}\exp\left(-i\frac{Ht}{\hbar}\right)&=\exp\left(-i\frac{|H|t}{\hbar}\right)+i\left(1-\frac{H}{|H|}\right)\sin\frac{|H|}{\hbar}t\\&=\exp\left(i\frac{|H|}{\hbar}t\right)-i\left(1+\frac{H}{|H|}\right)\sin\frac{|H|}{\hbar}t.\end{aligned} \tag{7.6.8}$$

根据正则对易关系,有

$$\exp\left(\frac{i|H|t}{\hbar}\right)r(0)\exp\left(-\frac{i|H|t}{\hbar}\right)=\frac{P}{|H|}t+r(0)\ (\equiv r_0(t)), \tag{7.6.9}$$

$|H|$ 所产生的运动 $\boldsymbol{r}_0(t)$ 在相对论力学中是常见的。将 (7.6.8) 式中后一式里的 $|H|$ 全都换成 $-|H|$，就应该看成是负能粒子的运动，但上式中的 $\boldsymbol{p}t/|H|$ 却变成 $-\boldsymbol{p}t/|H|$，成了反向动量。其解释留在后面进行。

(7.6.8) 式表明，(7.6.9) 式的 $\boldsymbol{r}_0(t)$ 并不全是狄拉克自由粒子的运动。考虑正能粒子，应用(7.6.8)中前一式，有

$$\boldsymbol{r}(t) \equiv \exp(iHt)\boldsymbol{r}(0)\exp(-iHt) = \boldsymbol{r}_0(t) + \boldsymbol{r}_Z(t), \tag{7.6.10}$$

其中，若把负能态的投影算子的 2 倍 $1 - H/|H|$ 记为 $P$[1]，则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_Z(t) \equiv & -iP\sin\left(\frac{|H|t}{\hbar}\right)\boldsymbol{r}(0)\exp\left(-\frac{i|H|t}{\hbar}\right) \\ & + i\exp\left(\frac{i|H|t}{\hbar}\right)\boldsymbol{r}(0)\sin\frac{|H|t}{\hbar}\,P \\ & + P\sin\frac{|H|t}{\hbar}\boldsymbol{r}(0)\sin\frac{|H|t}{\hbar}P.\end{aligned} \tag{7.6.11}$$

因各项均乘以 $P$，故该异常的附加成分 $\boldsymbol{r}_Z(t)$ 在狄拉克方程的正能解(7.4.27)之间不会有矩阵元。于是，它在只用正能解叠加而成的波包 $\psi_+$ 中的期待值为 $\langle\psi_+, \boldsymbol{r}_Z(t)\psi_+\rangle \equiv \langle\boldsymbol{r}_Z(t)\rangle_+ = 0$，以该波包表示的粒子的平均位置完全进行着普通的运动：

$$\langle\boldsymbol{r}(t)\rangle_+ = \langle\boldsymbol{r}_0(t)\rangle_+ = \langle\boldsymbol{p}/|H|\rangle_+ t + \langle\boldsymbol{r}(0)\rangle_+. \tag{7.6.12}$$

那么，位置的起伏有多大？所谓起伏，指的是 $\langle[\boldsymbol{r}(t) - \langle\boldsymbol{r}(t)\rangle_+]^2\rangle_+$，它等于

$$\boldsymbol{r}(t)^2 = \boldsymbol{r}_0(t)^2 + \boldsymbol{r}_0(t)\cdot\boldsymbol{r}_Z(t) + \boldsymbol{r}_Z(t)\cdot\boldsymbol{r}_0(t) + \boldsymbol{r}_Z(t)^2$$

的期待值 $\langle\boldsymbol{r}(t)^2\rangle_+$ 与 $\langle\boldsymbol{r}(t)\rangle_+^2$ 之差。于是，可以将

$$\Delta_0(t) \equiv \langle\boldsymbol{r}_0(t)^2\rangle_+ - \langle\boldsymbol{r}(t)\rangle_+^2 = \langle\boldsymbol{r}_0(t)^2\rangle_+ - \langle\boldsymbol{r}_0(t)\rangle_+^2 \tag{7.6.13}$$

解释为波包的一般展宽。显然，

---

1) 即使移动坐标原点 $\boldsymbol{r}(0)\to\boldsymbol{r}(0) + \boldsymbol{a}$ ($\boldsymbol{a}$为 c 数矢量)，$\boldsymbol{r}_Z(t)$ 也是不变的。

$$\Delta_Z(t) \equiv \langle r_Z(t)^2 \rangle_+ = 0. \tag{7.6.14}$$

剩下的与 $r_0(t)$ 和 $r_Z(t)$ 之积有关的项为

$$\Delta_{corr}(t) = \langle r_0(t) \cdot r_Z(t) + r_Z(t) \cdot r_0(t) \rangle_+.$$

该期待值之所以不为零，是因为在 $r_0(t) \cdot r_Z(t)$ 中，有

$$r_0(t)P = Pr_0(t) + [r_0(t), P],$$

其右边第二项中的 $P$ 不会使矩阵元消失，实际上，有

$$[r_0(t),\ P] = \exp\left(\frac{i|H|t}{\hbar}\right)[r(0), P]\exp\left(-\frac{i|H|t}{\hbar}\right)$$

$$= i\frac{c\hbar}{|H|}\left(-\alpha + \frac{cpH}{|H|^2}\right) = [r(0),\ P]. \tag{7.6.15}$$

于是，可以写出

$$\langle r_0(t) \cdot r_Z(t) \rangle_+ = -i\left\langle [r_k(0), P]\sin\frac{|H|t}{\hbar}\right.$$

$$\left. \times r_k(0)\exp\left(-\frac{i|H|t}{\hbar}\right)_+\right\rangle,$$

其中，$r_k$ 是矢量 $r$ 的第 $k$ 个分量，右边要对 $k = 1、2、3$ 求和. 因(7.6.15)与$|H|$对易，故可在上式中把 $\sin(|H|t/\hbar)$ 移到$[r_k(0)P]$的左边，之后，由于 $P$ 仍可换到 $\sin(|H|t/\hbar)$ 的左边，因此 $[r_k(0),\ P] = r_k(0)Pr_k(0) - Pr_k(0)r_k(0)$ 的后一项对期待值没有贡献. 于是

$$\langle r_0(t) \cdot r_Z(t) \rangle_+ = -i\left\langle \sin\frac{|H|t}{\hbar} r_k(0)Pr_k(0)\exp\right.$$

$$\left. \times\left(-\frac{i|H|t}{\hbar}\right)\right\rangle_+. \tag{7.6.16}$$

为进一步计算，请注意，把 $r_k(0)Pr_k(0)$ 换成 $\frac{1}{2}[[r_k(0), P], r_k(0)]$

不会改变期待值. 由(7.6.15)不难算出这个二重对易子，为

$$\frac{1}{2}\ [[r_k(0), P], r_k(0)] = \frac{c^2\hbar^2}{|H|^2}\left[\frac{c\alpha \cdot p}{|H|} + \frac{3}{2}\frac{(mc^2)^2H}{|H|^3}\right].$$

(7.6.17)

利用(7.4.26)式就可以得到该算符在正能自由粒子解之间的矩阵元.因这个算符与$|H|$对易,故可把(7.6.16)式中的$\sin(|H|t/\hbar)$和$\exp(-i|H|t/\hbar)$集中到一边,因为$\langle r_Z(t)\cdot r_O(t)\rangle_+$是其复共轭,所以加起来可以得到

$$\Delta_{corr}(t)=-\left\langle \sin\frac{|H|t}{\hbar}r_k(0)Pr_k(0)\sin\frac{|H|t}{\hbar}\right\rangle_+ . \tag{7.6.18}$$

它显然是负的. $r_O(t)$ 和 $r_Z(t)$ 之间出现这种负相关,其含义深刻. 就粒子位置的起伏而言,结论是: 在狄拉克粒子情况下,该相关部分小于波包的一般展宽(7.6.13).

相关部分$\Delta_{corr}$随时间的变化取决于$r_Z(t)$的振动. 就狄拉克粒子的运动而言,该振动附加成分 $r_Z(t)$ 称为**颤动**.其颤动角频率至少是 $2mc^2/\hbar$,对于电子,它是 $1/(2\times10^{-22}\text{s})$. 若是低能 $p^2/2m\ll mc^2$ 波包,则可以忽略(7.6.17)式中第一项,于是,颤动的振幅估计为康普顿波长 $\hbar/mc$ 量级,电子的是 $\hbar/mc=3.9\times10^{-11}(\text{cm})$.

这种颤动过于迅速,用通常的观测手段是捕获不住的. 除非采用极其特殊的观测方法,否则,狄拉克粒子的运动也只能看成是通常的(7.6.12)式那样.

因此,颤动不能忽略不计. 我们知道,狄拉克粒子的角动量的轨道部分不守恒,这正是颤动造成的. 另外,尚可证明, 电子等粒子之所以具有自旋磁矩,其本源也就是点电荷颤动.

以上讨论中的平均值$\langle\rangle_+$涉及的是只由自由粒子正能解叠加而成的波包. 若波包含有负能部分, 则 $r_Z(t)$ 的平均值就不会消失. 事实上,当狄拉克粒子在势场中运动时,用自由粒子解展开波函数的式子里或多或少都会含有负能部分. 读者可以就§7.5 研究过的库仑场中电子的能量本征态来证实这一点.

因此,我们选择与正能部分 $\psi_+$ 相加而稍含负能部分 $\psi_-$ 的低能波包 $\psi=\psi_++\psi_-$,来计算(7.6.11)式的期待值. 其中,$\langle\psi_-r_Z\psi_-\rangle$甚小;忽略不计,剩下的是$\langle\psi_-$,(第一项)$\psi_+\rangle$ 和$\langle\psi_+$,(第二项)$\psi_-\rangle$. 注意到

$$(\text{第一项}) = -\frac{i}{2}\sin\frac{|H|t}{\hbar}\left(\boldsymbol{r}, \frac{H}{|H|}\right)\exp\left(-\frac{i|H|t}{\hbar}\right),$$

即可计算前一个矩阵元，进而

$$\left[\boldsymbol{r}, \frac{H}{|H|}\right] = [\boldsymbol{r}, H]/|H| + H[\boldsymbol{r}, |H|^{-1}],$$

由 $|H| = (c^2p^2 + m^2c^4)^{\frac{1}{2}}$，便可根据 $\boldsymbol{r} = i\hbar\partial/\partial\boldsymbol{p}$ 求出上述对易关系，有

$$[\boldsymbol{r}, H|H|^{-1}] = i\hbar(c\boldsymbol{\alpha}|H|^{-1} - c^2\boldsymbol{p}H|H|^{-3}).$$

于是

$$\left\langle\langle\psi_-, (\text{第一项})\,\psi_+\rangle = \frac{\hbar}{2i}\,\psi_-, \frac{c\boldsymbol{\alpha}}{|H|}\left(1 - \exp\left(-\frac{2i|H|t}{\hbar}\right)\right)\psi_+\right\rangle.$$

当把 $\psi_+$ 和 $\psi_-$ 用 (7.4.27) 与(7.4.28)两式中的自由粒子解 $u^{(s)}$ 和 $u^{(s')}$ 展开时 ($s = 1,2$; $s' = 3,4$)，上式右边起作用的只有无动量变化的矩阵元

$$\langle u^{(s')}(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{\alpha}u^{(s)}(\boldsymbol{p})\rangle = \frac{|E|}{mc^2}\langle\chi_{s'_3}, \boldsymbol{\sigma}\chi_{s_3}\rangle$$

$$-\frac{\boldsymbol{p}}{m}(|E| + mc^2)^{-1}\langle\chi_{s'_3}, \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\chi_{s_3}\rangle. \quad (7.6.19)$$

于是，上面第二项在低能波包时可以忽略不计。式中 $s_3$ 和 $s'_3$ 分别是 $\psi_+$ 和 $\psi_-$ 的自由粒子部分波的自旋 $z$ 轴分量。这样，就算出了 $\langle\psi_-, (\text{第一项})\,\psi_+\rangle$。因 $\langle\psi_+, (\text{第二项})\,\psi_-\rangle$ 是其共轭复量，故有

$$\langle\psi, \boldsymbol{r}_Z(t)\psi\rangle \simeq \frac{\hbar}{mc}\,\mathrm{Im}\left\langle\psi_-, \boldsymbol{\Sigma}\left(1 - \exp\left(-\frac{2i|H|t}{\hbar}\right)\right)\psi_+\right\rangle, \quad (7.6.20)$$

其中，$\boldsymbol{\Sigma}$ 是 (7.6.4) 式中的自旋算符。对于低能波包，可以取 $|H| \simeq mc^2$，令 $\langle\psi_-, \boldsymbol{\Sigma}\psi_+\rangle = \alpha e^{ib}$ ($\alpha$ 和 $b$ 是实数)，便有

$$\langle\psi, \boldsymbol{r}_Z(t)\psi\rangle = \frac{\hbar}{mc}\alpha\left[\sin b - \sin\left(\frac{2mc^2}{\hbar}t - b\right)\right]. \quad (7.6.21)$$

这又是振幅约为康普顿波长、角频率为 $2mc^2/\hbar$ 的剧烈振动。其中，可根据 $\psi_+$ 和 $\psi_-$ 的相位关系决定某些常数。请读者就氢原子

的能量本征函数来定出 $a$ 和 $b$，作为练习题。

在狄拉克粒子速度 (7.6.6) 的本征态中，不可避免地要混入自由粒子的负能态。这就是速度本征值等于光速的原因。

还有一种方法，如后面 c)小节所述，使用谷-傅德 (Foldy)-渥萨依森(Wouthuysen)变换 $U$ 把狄拉克粒子的位置坐标定义为

$$\boldsymbol{R} = U\boldsymbol{r}U^{-1}.$$

它在时间变化时不包含颤动，但像仍采用 $\boldsymbol{r}$ 时那样，它也有大约为康普顿波长的展宽。 T.D. 牛顿和 E.P. 维格纳对相对论粒子的位置概念进行了公理性分析，得出了与该 $\boldsymbol{R}$ 相同的表达式(1949)。

### b) 与电磁场的相互作用

为了在自由狄拉克粒子的哈密顿量(7.6.1)中加上与电磁场的相互作用，可以像在非相对论情况下对(4.6.1)式所做的那样，用替换 $c\hat{\boldsymbol{p}} \to c\hat{\boldsymbol{p}} - e\boldsymbol{A}$, $H \to H - e\Phi$ 来引入电磁势$(\boldsymbol{A}, \Phi)$.其结果是

$$H = \boldsymbol{\alpha} \cdot (c\hat{\boldsymbol{p}} - e\boldsymbol{A}) + e\Phi + \beta mc^2. \qquad (7.6.22)$$

这个方法所依据的原理是，自由粒子的哈密顿量(7.6.1)是由拉格朗日量得到的，而后者在变化时要保持洛伦兹变换和规范变换下的不变性.(7.6.22) 式中的相互作用项往往又叫最小相互作用，这是因为，按照上述原理，尚有余地附加一个称之为泡利项的 $S^{kl}F_{k}^{\ l}$ $(F_{kl} \equiv \partial A_l/\partial x^k - \partial A_k/\partial x^l)$。为处理库仑场中运动而采用过的(7.5.1)式是在哈密顿量(7.6.22)中取 $\boldsymbol{A} = 0$ 的特殊情形。

我们用海森伯绘景来讨论电磁场中的运动。与 (7.6.6) 式相同，坐标随时间的变化(即速度)为

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{i}{\hbar}[H, \boldsymbol{r}] = c\boldsymbol{\alpha}. \qquad (7.6.23)$$

对于动量，或所谓力学动量 $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} - (e/c)\boldsymbol{A}$，有

$$\dot{\boldsymbol{\pi}} = \frac{i}{\hbar}[H, \boldsymbol{\pi}] + \frac{\partial \boldsymbol{\pi}}{\partial t} = e(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{B}). \qquad (7.6.24)$$

其中 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别是以 $(\boldsymbol{A}, \Phi)$ 导出的电场和磁场。若把 $c\boldsymbol{\alpha}$ 看成速度，则上式最右边是洛伦兹力，按照相对论经典力学，力并非

等于 $\dot{\pi}$ 而应该等于正则动量的变化率 $\dot{p}$，这儿，把 $c\alpha$ 看成速度又呈现出异常。

前面在(7.3.7)式中，已经叙述了旋量对时间反演的变换问题。应该注意的是，上述讨论并不适用于有电磁场的情况。回到薛定谔绘景，方程为[1]

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=[\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})+e\Phi+\beta mc^2]\psi(t), \tag{7.6.25}$$

当取 $t'=-t$ 时，若有适当的变换 $T$ 使 $\psi'(t')=T\psi(t)$ 满足同样形式的方程，则说该力学系具有时间反演对称性。其中，像在§5.3 中那样，电磁场亦同时变换为

$$\boldsymbol{A}'(x')=-\boldsymbol{A}(x),\Phi'(x')=\Phi(x). \tag{7.6.26}$$

这样一来，正好可以得到电荷密度不变而电流反向时的场 $\boldsymbol{E}'(x')=\boldsymbol{E}(x),\boldsymbol{B}'(x')=-\boldsymbol{B}(x)$.

为以后方便起见，把 $T$ 写成 $T_0$。对(7.6.25)式施行这一变换，有

$$i\hbar\frac{\partial}{-\partial t'}\psi'(t')=T_0(\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A}')+e\Phi'$$

$$+\beta mc^2]T_0^{-1}\psi'(t'). \tag{7.6.27}$$

$T_0$ 要选得使上式变成与(7.6.25)形式相同的方程。这样一来，从物理上看，这个 $T_0$ 可以给出状态 $\psi(t)$ 的时间反演态 $\psi'(t')$.

前面的(7.3.7)式意味着，对于狄拉克旋量，变换

$$T_0=\begin{bmatrix}0 & -I\\ I & 0\end{bmatrix}\quad T_0^{-1}=\begin{bmatrix}0 & I\\ -I & 0\end{bmatrix} \tag{7.6.28}$$

亦可写成 $T_0=-i\alpha_1\alpha_2\alpha_3\beta$。这样，便有

$$T_0\boldsymbol{\alpha}T_0^{-1}=-\boldsymbol{\alpha},\ T_0\beta T_0^{-1}=-\beta,$$

因此，没有与电磁场的相互作用时，(7.6.27)式确实与(7.6.25)形式相同；在有电磁场时，(7.6.27)式就是把(7.6.25)式中的 $e$ 换成

1）这里没有明确表示 $\psi$ 对 $r$ 的依赖关系.

$-e$ 后的形式.

在有电磁场的情况下,可以把时间反演变换取为(**维格纳时间反演**)

$$T = i\alpha_1\alpha_3(\text{复共轭}) \quad (i\alpha_1\alpha_3 = \Sigma_2). \tag{7.6.29}$$

这样，波函数变为 $T\psi = i\alpha_1\alpha_3\psi^*$，可观测量 $A$ 变为 $TAT^{-1} = (-i\alpha_1\alpha_3)A^*(i\alpha_3\alpha_1)$[1]. 实际上,取 (7.6.25) 式的复共轭,得到

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(t) = [\boldsymbol{\alpha}\cdot(-c\hat{\boldsymbol{p}} - e\boldsymbol{A}) + e\Phi + \beta mc^2)\psi^*. \tag{7.6.30}$$

根据 (7.6.2) 式,当取 $\boldsymbol{\alpha}$ 的复共轭时,仅 $\alpha_2$ 改变符号，而 $i\alpha_1\alpha_3$ 却改变其它分量的符号,即

$$T\boldsymbol{\alpha}^*T^{-1} = -\boldsymbol{\alpha}, T\beta T^{-1} = -\beta. \tag{7.6.31}$$

所以，若 (7.6 .30) 式乘上 $i\alpha_1\alpha_3$ 而且完成 $T$ 变换，则根据 $-i\frac{\partial}{\partial t} = i\hbar\partial/\partial t'$ 和电磁场的变换 (7.6.26)，(7.6.30) 式确实与前面的 (7.6.25) 形式相同. 因 $i\alpha_1\alpha_3 = \Sigma_2$，故 (7.6.29) 式与 (5.3.8) 式一致. 根据(7.6.31)式，$T$ 变换(7.6.29)使狄拉克粒子的速度反向,动量 $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\,\mathrm{grad}$ 亦反向. 进而,(7.6.4)式中的自旋显然也反向. 另一方面,坐标 $\boldsymbol{r}$ 却无变化,这确实是名符其实的时间反演变换,请读者研究一下 $T$ 对自由狄拉克粒子解(7.4.27)和(7.4.28)的作用. 如对洛伦兹变换时(7.4.4)和(7.4.5) 诸式进行 $T$ 变换,将会如何?

### c) 谷-傅德-澀萨依森变换

狄拉克粒子的波函数具有四个分量，对应于自旋为$\frac{1}{2}$的自由度和能量为正负的自由度. 这样，在能量的正负业已确定的状态里,这四个分量应该只有一半是独立的. 实际上,自由粒子能量本

1) 星号"*"意味着取复共轭.

征函数(7.4.27)中，在形式上，由上面两个分量能定出下面两个分量．可以说，即使在中心力场的问题中，由(7.5.10)式也会有同样结果．而且无论在哪种情况下，对于正低能来说，上面两个分量均占压倒优势．而对于负的“低能”来说，下面两个分量占压倒优势，因此，也可以象征性地把上面两个分量叫“正能分量”，而把下面两个分量叫做“负能分量”．

因此，我们来考虑，把狄拉克理论变换成只需处理两个正能分量的形式．如果，这是可行的，那么，自旋自由度与能量上负自由度就可以分离了，而把狄拉克理论用接近经典的图象来解释不是变得更容易了吗．

自由粒子的情况并不麻烦，其哈密顿量是

$$H = \beta mc^2 + c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}, \tag{7.6.32}$$

把其中连系波函数的正能分量和负能分量的算符叫做奇算符，按照(7.6.2)式，就是 $\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$，设法除去它之后，就只剩下不连系两种分量的算符，称之为偶算符．为此，只要注意到变换

$$U(\theta) = \exp(\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\theta)$$

将引起如下“旋转”．也就是说，把 $\theta$ 当作 $c$ 数来处理，根据(7.6.3)式，有

$$\frac{d}{d\theta}U\beta U^{-1} = U[\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}},\beta]U^{-1} = -2U\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}U^{-1},$$

$$\frac{d}{d\theta}U\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}U^{-1} = U[\beta\alpha_k p_k,\alpha_l p_l]U^{-1} = U2\hat{\boldsymbol{p}}^2\beta U^{-1},$$

令 $\sqrt{\hat{\boldsymbol{p}}^2} = |\hat{\boldsymbol{p}}|$，$U$ 就会引起 $[|\hat{\boldsymbol{p}}|\beta,\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}]$ 范围内的旋转

$$U\begin{bmatrix}|\boldsymbol{p}|\beta\\ \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}\end{bmatrix}U^{-1} = \begin{bmatrix}\cos 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta & -\sin 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta\\ \sin 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta & \cos 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}|\boldsymbol{p}|\beta\\ \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}\end{bmatrix}. \tag{7.6.33}$$

因此，

$$UHU^{-1} = \beta mc^2\left(\cos 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta + \frac{|\hat{\boldsymbol{p}}|}{mc}\sin 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta\right)$$

$$+ c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\left(\cos 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta - \frac{mc}{|\hat{\boldsymbol{p}}|}\sin 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta\right).$$

为了消除奇算符 $\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}$，可以选择 $\theta$，使

$$\tan 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta = \frac{|\hat{\boldsymbol{p}}|}{mc}. \tag{7.6.34}$$

由于该 $\theta$ 是 $|\hat{\boldsymbol{p}}|$ 的函数，与 $\alpha$，$\beta$ 对易，因此，在上述计算中把它当成 c 数处理不会有问题。对于这个 $\theta$，有

$$H' = UHU^{-1} = \beta\sqrt{(mc^2)^2 + c^2\hat{\boldsymbol{p}}^2}. \tag{7.6.35}$$

借助于变换 $U$，上下分量分离了，根据 $\beta$ 的形式(7.6.2)，上式就是正负能量分量分离的形式。因 $(\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\theta)^\dagger = -\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\theta$，故 $U$ 是幺正变换。

我们准备将其推广到包括与电磁场相互作用的(7.6.22)式。因精确计算无从着手，故只限于 $\varepsilon \equiv$ (动能)$/mc^2 \ll 1$ 的情形，取 $\varepsilon$ 的逐级近似。下面，先考虑由电磁场所引起的粒子附加能量与动能是同一量级的情形(位力定理!)

把所讨论的哈密顿量(7.6.22)改写为

$$H = \beta mc^2 + \mathscr{E} + \mathscr{O}, \mathscr{E} \equiv e\Phi, \mathscr{O} \equiv \boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}} - e\boldsymbol{A}). \tag{7.6.36}$$

其中，$\mathscr{O}$ 是应该消除的奇算符，$\mathscr{O}/mc^2 = O(\varepsilon^{\frac{1}{2}})$。而 $\mathscr{E}$ 是偶算符。当 $|\hat{\boldsymbol{p}}| \ll mc$ 时，(7.6.34)式给出 $\theta = 1/2cm$，仿照上面的例子，不妨用

$$U = e^S, \quad S \equiv \beta\mathscr{O}/2mc^2. \tag{7.6.37}$$

试试。因为这个 $S$ 一般与时间有关，所以，在进行变换 $\psi' = e^S\psi$ 时，有

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = i\hbar\left[\frac{\partial e^S}{\partial t}\psi + e^S\frac{\partial\psi}{\partial t}\right]$$

$$= \left[i\hbar\frac{\partial e^S}{\partial t}e^{-S} + e^S H e^{-S}\right]\psi'.$$

这样，决定 $\psi'$ 运动的哈密顿量为

$$H' = i\hbar \frac{\partial e^S}{\partial t} e^{-S} + e^S H e^{-S}. \tag{7.6.38}$$

前面所说的关于 $\varepsilon$ 的幂级数展开，现在变成了关于$\mathcal{O}$ 的展开，接着又变成关于 $S$ 的展开. 于是，应用(3.2.12)诸公式，有

$$e^S H e^{-S} = H + [S,H] + \frac{1}{2!}[S,[S,H]] + \cdots,$$

$$\frac{\partial e^S}{\partial t} e^{-S} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2!}\left[S, \frac{\partial S}{\partial t}\right] + \cdots.$$

注意到 $\beta$ 与偶算符对易而与奇算符反对易，即可进行计算. 与[$S$, $H$] 中的 $[S,\beta mc^2] = -\mathcal{O}$ 相比，可以去掉$H$中的 $\mathcal{O}$.把$H$中的 $\beta mc^2$、$\mathscr{E}$、$\mathcal{O}$ 分别计算到 $S$ 的 4 阶、2 阶、3 阶，会得到

$$H' = \beta mc^2 + \mathscr{E}' + \mathcal{O}'. \tag{7.6.39}$$

其中，新的偶、奇算符为

$$\begin{aligned}\mathscr{E}' = {} & \beta\left[\frac{\mathcal{O}^2}{2mc^2} - \frac{\mathcal{O}^4}{8(mc^2)^3}\right] + e\Phi - \frac{1}{8(mc^2)^2} \\ & \times \left[\mathcal{O},[\mathcal{O},e\Phi] + i\hbar \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial t}\right] + O(\varepsilon^3),\end{aligned}$$

$$\mathcal{O}' = \frac{\beta}{2mc^2}[\mathcal{O},e\Phi] - \frac{\mathcal{O}^3}{3(mc^2)^2} + \frac{i\hbar}{2mc^2}\beta \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial t} + O(\varepsilon^{\frac{5}{2}}). \tag{7.6.40}$$

显然，奇算符的奇次幂为奇，偶次幂为偶，而偶算符的任何次幂均为偶.可以认为时间微商只是使 $\varepsilon$ 增加 1 次方，因该$\mathcal{O}'$是 $O(\varepsilon^{3/2})$，故确实比(7.6.36)式中的 $\mathcal{O}$ 的阶高.

现在，必须从(7.6.39)式中除掉 $\mathcal{O}'$. 再次仿效前面的例子，令

$$U' = e^{S'}, S' = \beta\mathcal{O}'/2mc^2,$$

进行与(7.6.38) 式类似的变换，因偶算符之中只有 $O(\varepsilon^3)$ 的项变化，故有

$$H'' = \beta mc^2 + \mathscr{E}' + \mathcal{O}'', \tag{7.6.41}$$

其中，

$$\mathcal{O}'' = \frac{\beta}{2mc^2}[\mathcal{O}', \mathcal{E}'] + \frac{i\hbar}{2mc^2}\beta \frac{\partial \mathcal{O}'}{\partial t} + O(\varepsilon^3)$$

成了$O(\varepsilon^{5/2})$的项. 再进行一次变换,令

$$U'' = e^{S''}, S'' = \beta\mathcal{O}''/2mc^2,$$

除掉 $\mathcal{O}''$ 的同时使 $\mathcal{E}'$ 仍然看不到变化,奇算符甚至降到 $O(\varepsilon^3)$ 以下.最后有

$$H''' = \beta mc^2 + \mathcal{E}'. \tag{7.6.42}$$

变成计算最初的 $\mathcal{O}$ 和(7.6.40) 式中的 $\mathcal{E}'$ 的问题,而 $\mathcal{O}'$ 和 $\mathcal{O}''$ 都完全除掉了.

用(7.6.36)式中的 $\mathcal{O}$ 来计算(7.6.40)式中的 $\mathcal{E}'$,得

$$\begin{aligned} H''' = \beta \Bigg[ & mc^2 + \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{1}{2mc^2} \\ & \times \left(\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}\Bigg] + e\Phi \\ & - \frac{e}{8}\left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2\left[\mathrm{div}\boldsymbol{E} + i\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathrm{curl}\boldsymbol{E} + \frac{2}{\hbar}\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\boldsymbol{E}\times\hat{\boldsymbol{p}})\right] \\ & + O(\varepsilon^3). \end{aligned} \tag{7.6.43}$$

历史上的原因使上次被称为泡利近似. 虚数单位 $i$ 并不直观, 把最后两项合在一起,就成了对称和的形式:

$$\begin{aligned} & i\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathrm{curl}\boldsymbol{E} + \frac{2}{\hbar}\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\boldsymbol{E}\times\hat{\boldsymbol{p}}) \\ & = i\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{E} - \boldsymbol{E}\times\nabla), \end{aligned} \tag{7.6.44}$$

它显然是厄米的. 特别是, 当场仅由球对称的静电势 $\Phi(r)$ 产生时,$\mathrm{curl}\boldsymbol{E} = 0, E = -(d\Phi/dr)\boldsymbol{r}/r$,因而(7.6.44)式变成

$$H_{\text{自旋轨道}} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\Phi}{dr}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}\ (\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}). \tag{7.6.45}$$

这是所谓自旋轨道相互作用项.若粒子在电场 $E$ 中以速度 $v$ 运动,则会受到磁场 $-(v/c)\times E$ 作用.后者在 $H'''$ 中间一项 $-(eh/2mc)\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}$ 里与粒子自旋相互作用,能量应该有(7.6.45)式中能量的两倍.它的减半是由自旋的托马斯进动造成的. (7.6.43)式中的

div$\boldsymbol{E}$项称为达尔文项;可以用颤动来解释. 而其余各项的物理意义似乎无需说明.

## §7.7 空穴理论

### a) 负能态问题

截止到目前,一直避免深入讨论狄拉克方程的负能解. 当然,这是需要分析才能解决的问题. 首先,它与物质的稳定性有关.就拿氢原子来说, 如果含有库仑场$V$的狄拉克方程(7.5.1)的负能解(它当然是对应哈密顿量的本征态)被承认是物理世界中所允许的状态,那么,怎样才能禁止构成氢原子而处于正能态的电子放出光而跃迁到负能态去呢? 负能连续谱一直延伸到$-\infty$, 电子可以跃迁到其中任何状态,因此,跃迁概率恐怕是无限大. 这意味着, 氢原子连一瞬间也不会稳定存在.

容易知道, 以麦克斯韦电动力学和牛顿力学为基础的经典物理学不可能容许原子稳定存在. 无论什么样的静电场都不可能使电子稳定地静止.若让电子运动,则在有限区域内无法避免加速运动, 而带电粒子的加速运动就意味着不可避免的电磁辐射和损失能量.玻尔轨道上旋转的电子必然会放出一系列光,而在约 $1.6\times10^{-11}$(s)的时间内堕入核中.

正是量子力学消除了这一危机. 现在, 当试图使量子力学与相对论融合之际,物质的稳定性再次出现危机.

那么, 可否宣称负能解并非物理上的实际存在? 实际上, 在(7.4.23)式之前已经注意到了,负能解具有使粒子的动量和速度反向之类的奇妙性质. 能量是$-\sqrt{c^2p^2+m^2c^4}$, 若沿速度的方向加力而做功,粒子的能量应增加,而按上式,动量的大小却只好减少! 为了使动量在力做功时增加,原来的动量只有与速度反向,这是一个拉而欲退的笨电子,因为根本不曾发现过这种粒子,所以, 它不是物理实在,以此为公理而纳入相对论量子力学会如何呢?

但是, 这却与量子力学的变换理论相抵触. 当把氢原子的正

能本征函数用自由粒子解展开时，不是包含着负能成分吗？

还有这样的情况(O.克莱因佯谬(1929)，参看图 7.11)，在空间由$x < 0$的区域向$x = 0$行进的完全正能解的波进入$x > 0$的区域，就会变成具有负动能的负能解。当然，在边界上有一部分波要被反射，对于能量为$E$的粒子，在$x < 0$和$x > 0$的区域内，若分别令$\sin\gamma$和$\sin\gamma'$表示$mc^2/|E - V|$$(0 \leqslant \gamma, \gamma' \leqslant \frac{\pi}{2})$，则束流的反射率为

$$R = \frac{1 - \cos(\gamma+\gamma')}{1 + \cos(\gamma+\gamma')}.$$

如果让$E$和$V$在两个区域内均以$|E - V| \to \infty$的方式增加，则$R = 0$，几乎完全透射！如果势的变化较为平缓(参看图7.12)，那么，通过禁带的隧道效应，透射率 $1-R$ 急骤减少，对应于势的变化，电子变为"笨"电子的概率不令为零，所以，不可能把"笨"(电子)逐出量子力学。

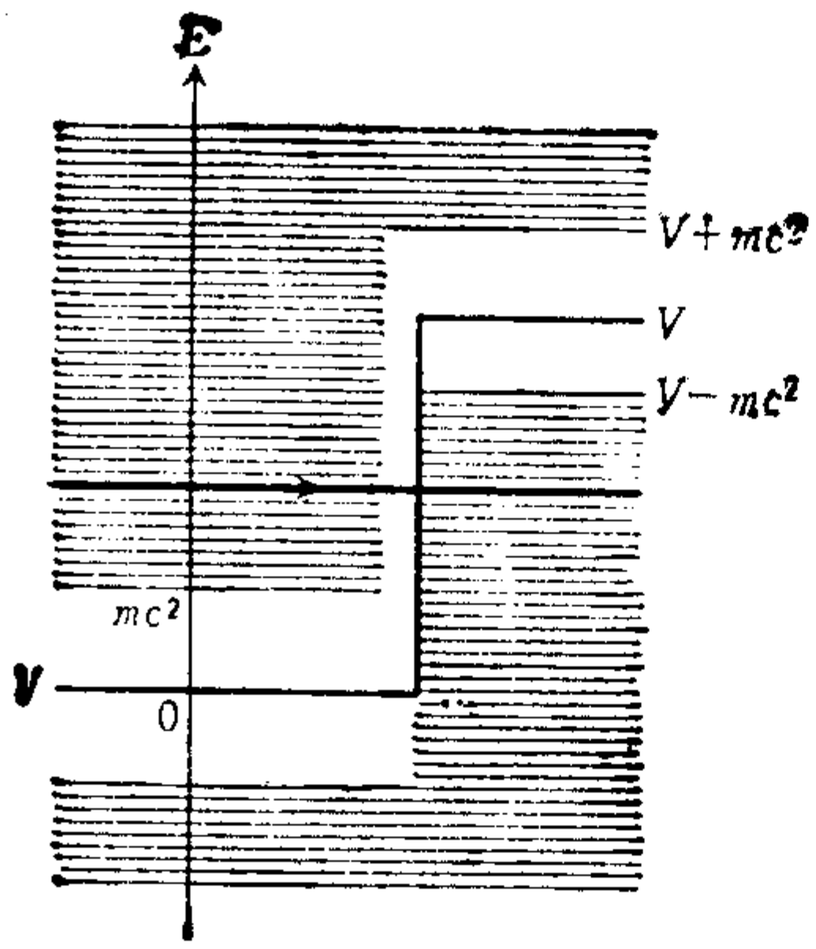



图 7.11 克莱因佯谬

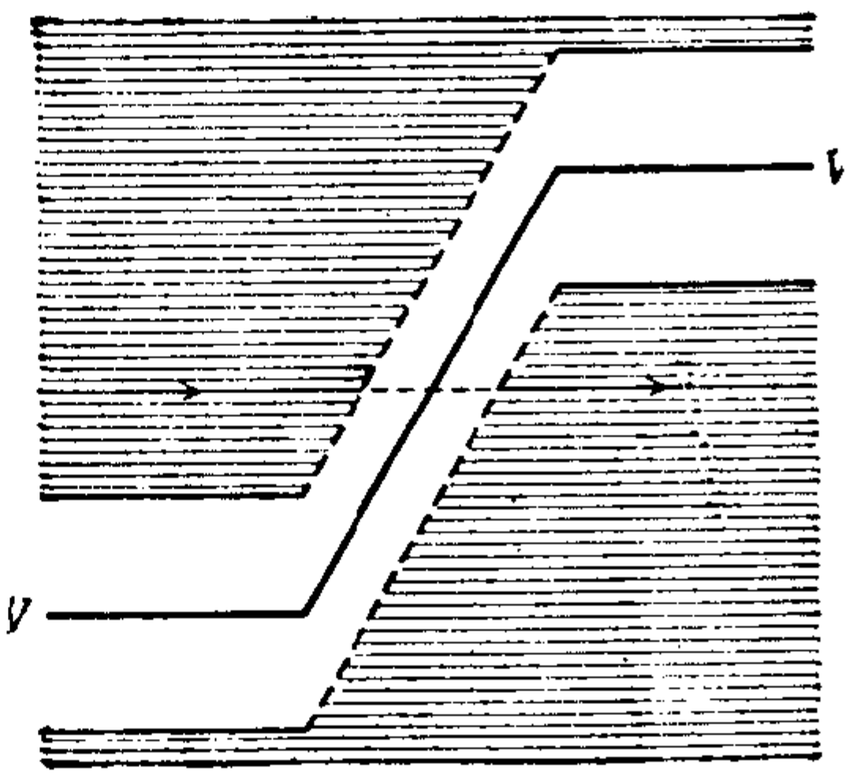



图 7.12

另外，若去掉负能态，则电子与光的散射截面$\sigma$几乎是零（I.沃勒(Waller)佯谬，1929）.在哈密顿量(7.6.22)中，与光的相互作

用由 $-e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}$ 这一项给出，特别在静止的自由电子（$\boldsymbol{p}=0$）与低能光子(动量 $\hbar\boldsymbol{k}\to 0$) 散射的所谓汤姆孙散射极限，当 $\boldsymbol{p}=0$，$\boldsymbol{p}'=\boldsymbol{p}+\hbar\boldsymbol{k}\to 0$ 时，与正能态有关的 $\boldsymbol{\alpha}$ 的矩阵元(7.4.29)趋近于零，因此，散射截面 $\sigma$ 也趋近于零，这与汤姆孙公式

$$\sigma \underset{k\to 0}{\sim} \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \tag{7.7.1}$$

发生了矛盾．而汤姆孙公式既可从经典理论，又可以作相对论量子力学推导出来，更重要的是，它还得到了实验证实．但是，只要承认了负能态，便可以解决这一矛盾．

为了看到这一点，我们用微扰公式(6.2.33)来计算电子与光的散射过程的跃迁概率．

狄拉克理论中的微扰是 $-e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}$，它在一级近似中不发生光散射，从二级近似开始发生图 7.13 所示的过程．由矢势 $\boldsymbol{A}=\mathscr{A}\boldsymbol{\epsilon}\times\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]+\text{c.c.}$ 所表示的光被散射后，其极化和波矢分别变成 $\boldsymbol{\epsilon}'$ 和 $\boldsymbol{k}'$．图 7.13(a) 所表示的过程是，处于(7.4.27)式中状态$(\boldsymbol{p},s)$的自由电子吸收入射光子 $(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon})$ 后跃迁到状态$(\boldsymbol{p}'',s'')$，接着又放出光子 $(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{\epsilon}')$ 而跃迁到状态 $(\boldsymbol{p}',s')$．图 7.13(b) 将光的吸收和发射顺序颠倒过来了．按照公式(6.2.33)，该过程所产生的光散射跃迁概率为

$$w=\frac{2\pi}{\hbar}|M|^2\rho_{\omega',d\Omega},\ \rho_{\omega',d\Omega}=\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{\omega^2}{\hbar c^3}d\Omega, \tag{7.7.2}$$

这里

$$M=\sum_{p'',s''}e^2|\mathscr{A}|^2\left\{\frac{\langle \boldsymbol{p}',s'|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}'|\boldsymbol{p}'',s''\rangle\langle \boldsymbol{p}'',s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}|\boldsymbol{p},s\rangle}{E''-E-\hbar\omega}\right.$$
$$\left.+\frac{\langle \boldsymbol{p}',s'|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}|\boldsymbol{p}'',s''\rangle\langle \boldsymbol{p}'',s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}'|\boldsymbol{p},s\rangle}{E''+\hbar\omega'-E}\right\}. \tag{7.7.3}$$

其中引进归一化体积 $V$，使

$$\langle \boldsymbol{p}'',s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}'|\boldsymbol{p},s\rangle=\int_V\left[\sqrt{\frac{1}{V}}u^{(s'')}(\boldsymbol{p}'')\exp\left(\frac{i\boldsymbol{p}''\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}\right)\right]^\dagger$$
$$\times\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}'\exp(\pm i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$$

$$\times\left[\sqrt{\frac{1}{V}}u^{(s)}(\boldsymbol{p})\exp\left(\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}\right)\right]d^3\boldsymbol{r}.$$

式中“±”号的上边对应于吸收过程，下面对应于发射过程。

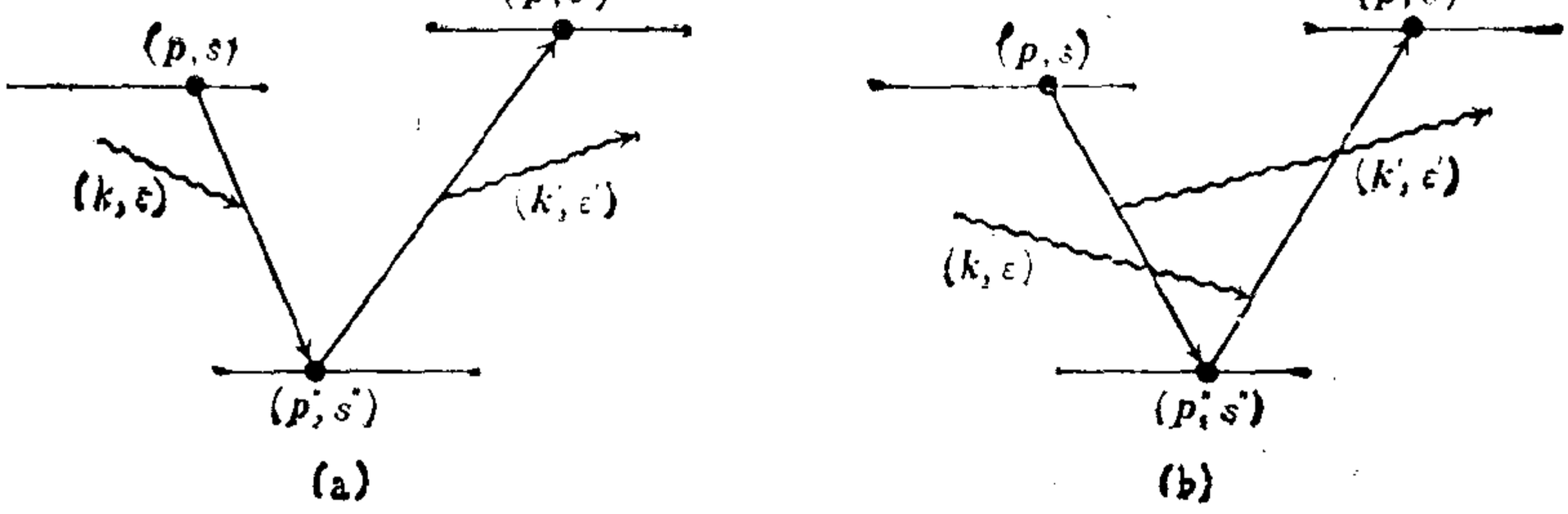



图 7.13

下面考虑$\boldsymbol{p}=0,\boldsymbol{k}\to 0$的汤姆孙散射极限。

这时，如果把电子的中间态$(\boldsymbol{p}'',s'')$局限于正能，那么，按照(7.4.29)式，$M=O(kk'/\omega)\to 0$，同刚才所叙述的一样。

但是，若$(\boldsymbol{p}'',s'')$能取为负能态，则根据(7.6.19)式，有

$$\langle\boldsymbol{p}'',s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'|\boldsymbol{p},s\rangle\underset{\substack{\boldsymbol{p}=0\\ \boldsymbol{k}=0}}{\sim}\langle\chi_{s_3'},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'\chi_{s_3}\rangle\delta_{\boldsymbol{p}'',0}. \tag{7.7.4}$$

将其代入(7.7.3)式，现在，由于$-E''\sim E=mc^2\gg\hbar\omega,\ \hbar\omega'$，因此有

$$M=-|\mathscr{A}|^2\frac{e^2}{mc^2}\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'\delta_{s_3,s_3'}, \tag{7.7.5}$$

也就是说，得到了不为零的跃迁概率幅！其中曾利用(7.4.30)式来计算

$$\sum_{s_3''}\langle\chi_{s_3'},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\chi_{s_3''}\rangle\langle\chi_{s_3''},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'\chi_{s_3}\rangle=\langle\chi_{s_3'},(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\varepsilon})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}')\chi_{s_3}\rangle$$

等等，而对$\boldsymbol{p}''$的求和是用(7.7.4)式中的$\delta_{\boldsymbol{p}'',0}$处理的。

现在，假设归一化体积$V$内有一个入射光子。根据能量密度之比$\omega^2|\mathscr{A}|^2/2\pi c^2=\hbar\omega/V$求出$|\mathscr{A}|^2$，再把(7.7.5)式代入(7.7.2)式，有

$$w = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\right)^2\left(\frac{e^2}{mc^2}\varepsilon\cdot\varepsilon'\right)^2\frac{V}{(2\pi)^3\hbar c^3}\omega^2\,d\Omega.$$

光的散射截面 $d\sigma$ 乘以光通量 $c/V$ 就应该是跃迁概率 $w$，所以有

$$d\sigma_{\varepsilon,\varepsilon'} = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}')^2 d\Omega. \tag{7.7.6}$$

由此可知入射光和散射光极化之间的关系.若入射光不是偏振光，则上述截面应对 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的方向取平均。$(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}')^2$ 的平均值是 $\boldsymbol{\varepsilon}'$ 在入射波面上投影的平方之半(参看图 7.14)。进而，若观测时不区别散射光的极化，则应对 $\boldsymbol{\varepsilon}'$ 的两个独立方向求和，令 $\theta$ 为散射角，便有

$$d\sigma = \sum_{\varepsilon'}\frac{1}{2}\sum_{\varepsilon} d\sigma_{\varepsilon,\varepsilon'} = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2\frac{1+\cos^2\theta}{2}d\Omega. \tag{7.7.7}$$

将其遍及整个立体角积分，确实得到了汤姆孙公式 (7.7.1)。即使不像上面那样局限于$\boldsymbol{k}\to 0$的情况，当然也能计算光与自由电子的散射截面，这样就得到所谓克莱因-仁释公式(1929)。因此，显然不能一概忽视负能态。

但是，另一方面，承认负能态就会招致物质无法稳定存在的境遇，和前面叙述过的一样，这正是狄拉克理论左右为难之处!

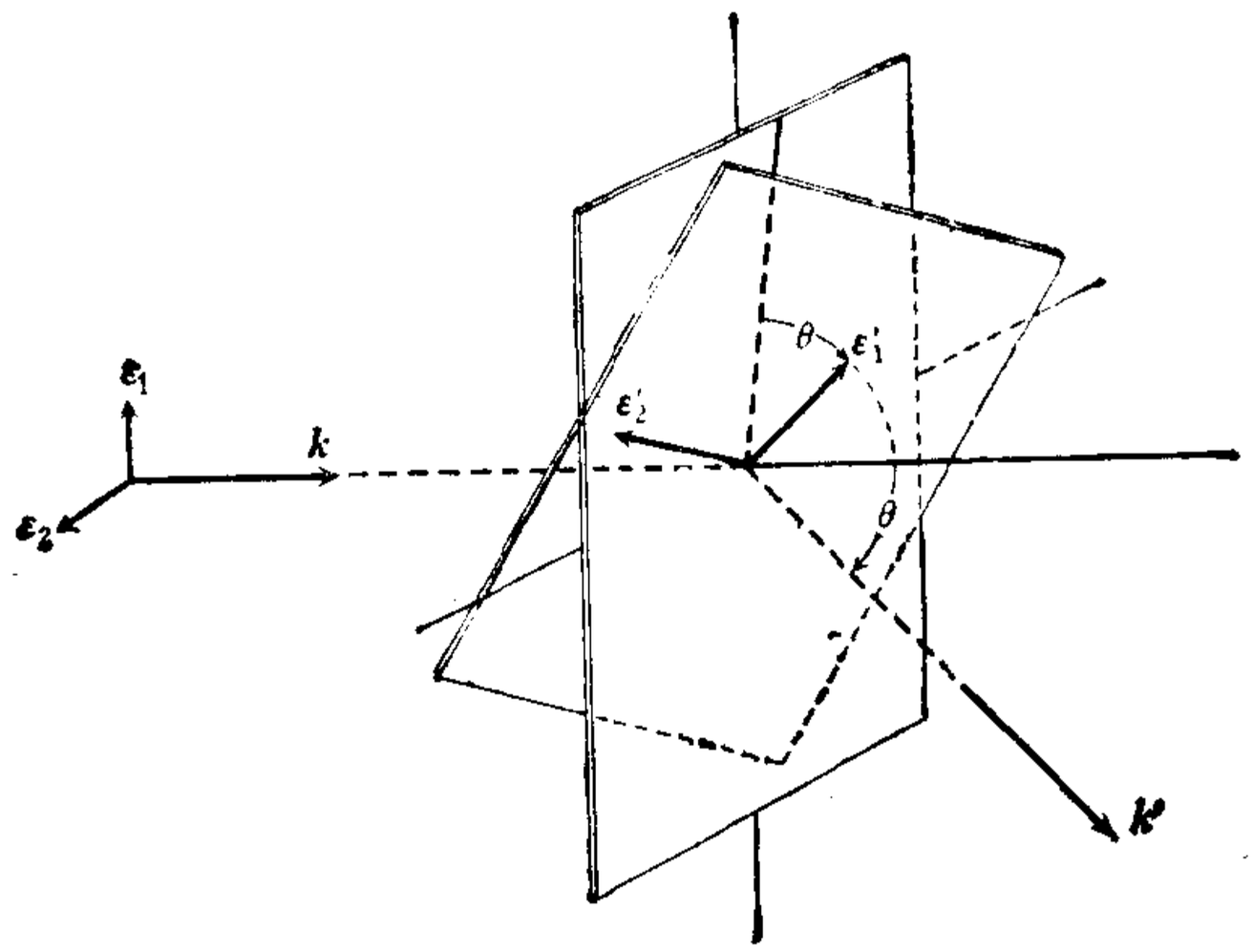



图 7.14　对 $\varepsilon_i$ 方向取平均后 $(\varepsilon_j,\varepsilon_i'^2) = \frac{1}{2}[(\varepsilon_j,\varepsilon_i')^2 + (\varepsilon_i - \varepsilon_i')^2]$. 计算时，可以把$\varepsilon_i'$取在垂直于 $R$ 的平面和垂直于$\boldsymbol{k}'$的平面的交线方向上

### b) 空穴假说

1930 年,狄拉克提出假说，认为通常在负能态中完全填满了电子,形成负能电子海！ 由于电子遵守泡利不相容原理,因此，若负能态中不出现空位,就不可能向负能态跃迁。这样一来,物质的稳定性便得到了保证。

按照这个假说,所谓的真空成了有无数个电子存在的状态,那么为什么观测不到这些电子呢?

我们设想有一带电粒子(正能量)在真空中运动，该粒子会不会与其中充满了的负能电子散射？ 如果发生散射,那么,负能电子或者跃迁到另一负能态,或者跃迁到正能态.前者为泡利原理所不容;要是发生后一种情况,设正能带电粒子的动量为 $p$，负能电子的动量为 $q$，散射后分别变为 $p'$ 和 $q'$，根据能量动量守恒定律,就有

$$p + q = p' + q'. \tag{7.7 8}$$

现在，即使令 $p$ 的空间部分 $\boldsymbol{p} = 0$，亦不失其一般性。这样，将(7.7.8)式平方,就会得到

$$p_0 q_0 = p'_0 q'_0 - \boldsymbol{p}' \cdot \boldsymbol{q}'.$$

然而,根据假定，左边的 $p_0 q_0 < 0$，可是，$p'_0 q'_0 > 0$（否则违反泡利原理),并且 $p'_0 q'_0 > |\boldsymbol{p}' \cdot \boldsymbol{q}'|$（因 $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$)，所以,上式右边不会为负值。因此，不可能发生这样的散射。即使假设运动的带电粒子同时把几个负能电子散射到正能态，也仍然会导致矛盾。所以,对于真空中运动的带电粒子来说,惯性定律依然成立。

对于光在真空中运动，也可以进行同样的讨论。无论是借助于带电粒子,还是借助于光,都不可能观测到充满于真空的所谓负能电子,因此,这与没有电子毫无差别。

但是,倘若另有吸收动量或能量的第三者存在,则该第三者当然要与带电粒子或光子发生散射,其中应体现负能电子海的影响。在这种情况下，因(7.7.8)式已不再成立，故可能发生电子从负能态向正能态的跃迁。这样一来,负能电子海中就产 生了空位(参看

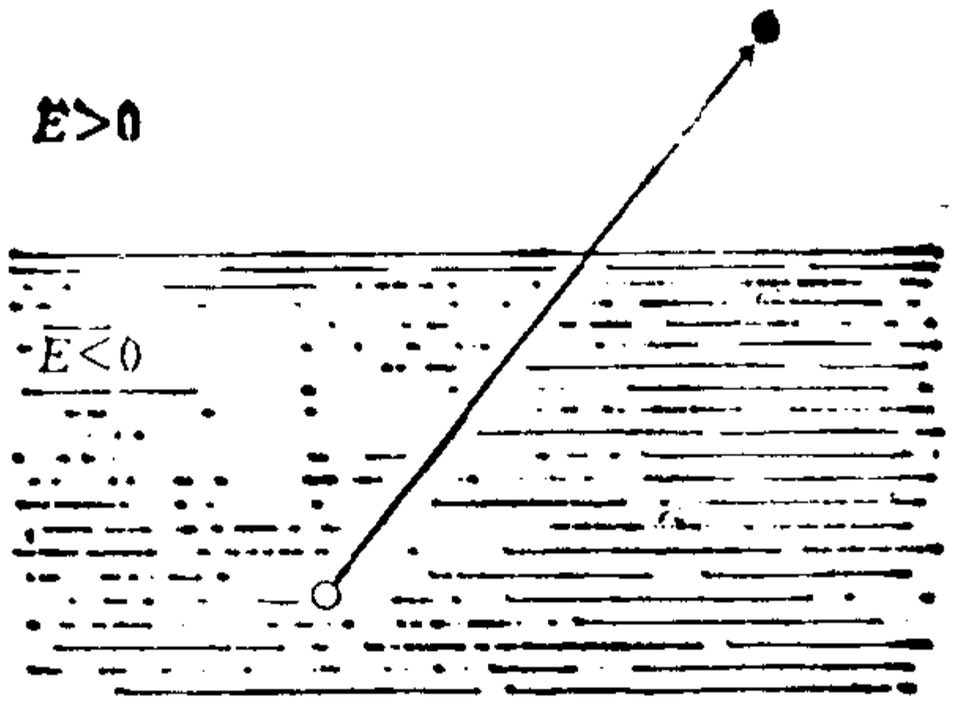



图 7.15　电子正电子对的生成

图 7.15)。

该空位叫做空穴，因它缺少负能和负电荷，故可视其为具有正能和正电荷的粒子。当带电粒子被作为第三者的物质散射时，就可能产生具有正能量负电荷的电子和正能量正电荷的粒子。当然，要使这种电子正电子对产生，带电粒子必须以十分高的能量与物质碰撞。光子能量十分高时，与物质碰撞也能产生电子正电子对。这是从狄拉克假说推出的可以验证的预言。

显然，设想了空穴，就可以从理论中消除负能电子奇怪的物理性质，从而得到有条理的合乎物理常识的图像。负能电子逆着电场所施力的方向被加速，而沿着电场方向加速却正是空穴的正电荷所应该有的性质。另外，负能电子所具有的动量$p$与其速度反向，而$-p$才与速度同向。

H.韦耳(1929年)曾设想把负能电子解释为当时所知的唯一一种带正电的粒子——质子。狄拉克联想到这点，建议把负能电子海中出现的空穴解释成质子。狄拉克希望，电子的质量与质子的虽然相差极大，但与周围所充满的电子相互作用或许会使空穴的质量发生变化。

1930年，J.R.奥本海默指出，若质子是电子海中的空穴，则氢原子中的电子很快就会掉进作为核的空穴中去，原子发出光后即行湮没。1931年，韦耳说明，空穴所具有的质量与电子的准确相

等。

狄拉克撤消了空穴是质子的提法，而把它作为未知粒子而命名为**反电子**。作为反对意见，W.泡利在《波动力学的一般原理》一书中写道："按照狄拉克的说法，$\gamma$ 射线能转化为电子和反电子对，因此，不值得认真研究这个说法。"而在这本书出版（1933）前不久，C.D. 安德森(Anderson)发表了反电子轨迹的云室照片。这个带正电的电子，即**正电子**的存在之所以得到普遍承认，很大程度是由于P.M.S.布拉凯特(Blackett)和G.P.S.奥查里尼(Occhialini) 的精确观测（1933）.狄拉克假说就这样正确地预言了未知粒子的存在。

如果承认狄拉克的空穴假说，那么，到目前为止我们没有考虑负能电子海之类因素而从狄拉克方程推导出的结论就必须放弃了吗？

首先，我们重新考虑上一小节所述的汤姆孙散射理论.从空穴假说的角度来看，其过程有二(图 7.16)。在图 7.16(b)中，入射光$(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon})$把负能海里的电子$(\boldsymbol{p}'',s'')$撞到正能态$(\boldsymbol{p}',s')$，入射电子$(\boldsymbol{p},s)$则正好落入刚才形成的空穴中而发出光子$(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{\epsilon}')$，这就是散射光。在图 7.16(a)中光的吸收和发射的次序与(b)中的相反。把微扰公式(6.2.33)用于这些过程而得到的跃迁概率幅是

$$M_{\text{空穴理论}}=\sum_{\boldsymbol{p}'',s''}e^2|\mathscr{A}|^2\left\{\frac{\langle \boldsymbol{p}'',s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}|\boldsymbol{p},s\rangle\langle \boldsymbol{p}',s'|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}'|\boldsymbol{p}'',s''\rangle}{|E''|+E'+\hbar\omega'}\right.$$

$$\left.+\frac{\langle \boldsymbol{p}'',s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}'|\boldsymbol{p},s\rangle\langle \boldsymbol{p}',s'|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}'|\boldsymbol{p}'',s''\rangle}{|E''|+E'-\hbar\omega}\right\}. \tag{7.7.9}$$

虽然乍一看，它与(7.7.3)式有所不同，但是，根据能量守恒，有

$$E+\hbar\omega=E'+\hbar\omega',$$

于是

$$M_{\text{空穴理论}}=-M.$$

因为符号的不同并不影响截面，所以，按照空穴理论，至少近似到二级微扰论，汤姆孙公式还不用修改。

氢原子的情形又如何呢？必须认为负能级完全被电子充满，

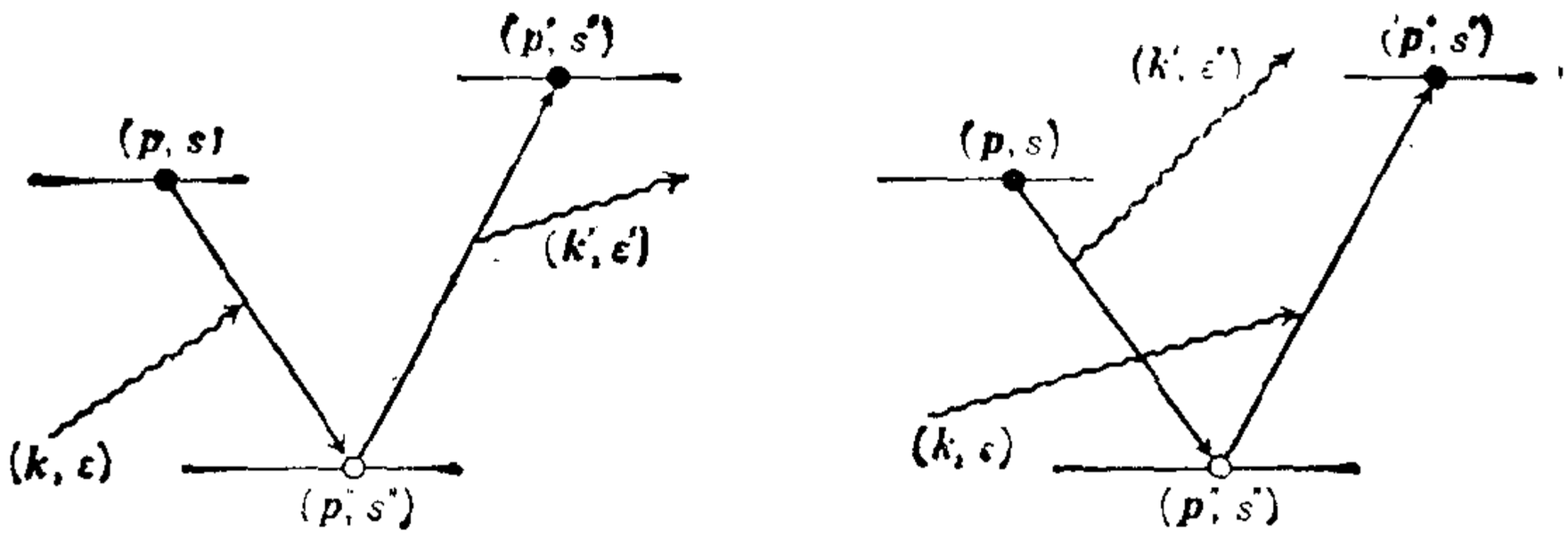



图 7.16

因为，在核库仑场中，这些电子的波函数比起自由电子的波函数来会有畸变，所以，作为整体，负能电子分布应该是不均匀的。畸变的电荷分布会产生电场，势必使原来的核库仑场多少有所变化。充满真空的负能电子海像电介质一样极化，从而屏蔽核电荷。换句话说，电子正电子对产生后，正电子受核排斥，而电子受核吸引，其结果就叫做真空极化。这样一来，氢原子的能级和波函数都要改变，如想重新求解方程，问题可不再是只涉及到一个电子，即使假定原子核不动，也应该求解牵扯到无数个电子的多体问题。

对于光散射问题，要想计算高级微扰，也会面临同样的情况。这是因为，存在于中间态的电子正电子对的数目是无限多的。

狄拉克理论成了量子力学的转折点。产生和湮没被认为是相对论量子力学中粒子的本质。正是在这种情况下，作为描述不断产生湮没而总数又不定的多粒子体系的一种形式，量子化场的理论发展起来了。看来是最简单体系的氢原子，已被处理为具有无限自由度的电子场和具有无限自由度的辐射场相互作用的问题。光散射问题同样，其细节将留待本书第十章和《基本粒子理论》那一卷。这里先把结论叙述一下，对于电子，在势弱而电子动量又不大的情况下，直到泡利近似(7.6.43)的精度，直到目前作为单体问题处理而得到的结果都是正确的。

# 第八章　力学系的对称性

前面已经学过，当力学系的哈密顿量在空间坐标反演下不变时，该体系的状态具有宇称不变的性质，而对于粒子序号的置换来说，由多个全同粒子组成体系状态的性质不变。这里所说的不变的意思是不随时间变化。显然，运用这种性质，可以避免复杂的计算，例如，实际计算跃迁矩阵，而仅通过观察就可以得知某跃迁过程被禁戒的所谓选择定则等等。

我们还学过，作为量子力学的基本可观测量，动量和角动量分别是坐标系平行移动和转动的无穷小算符，于是，当力学系的哈密顿量相对于空间坐标的平行移动或转动不变时，该体系的动量或角动量的本征值就是好量子数。

我们首先选定坐标系，然后用坐标来描述力学系。因此，当坐标系变换时，与力学系有关的物理定律必须是协变的，也就是说，必须能写成相同的形式。本章中坐标系的变换限制在非相对论的范围之内，将考虑广义伽利略变换。之所以称为广义，是由于它总括地处理包含三维欧几里德空间中平行移动、旋转、匀速相对运动等在内的牛顿力学的基本坐标变换。这样做并不只是为了形式上齐整，而是有其深刻的物理本质根源。其含义将在§8.4和§8.7中予以说明。

在经典物理学中，上述变换就是各种各样的操作，并没有应该被观测到的量。而在量子力学中，为表现这些操作，就可以使之转化为作为观测对象的物理量。

因为这些变换都会构成数学上所谓的群所以我们首先要在必要的范围内介绍有关群的基本知识(§ 8.1)，其次，为了了解量子力学中基本的物理量——动量和角动量，还要讨论称之为李(Lie)群的连续群，而且，为了弄清其局域性质，尚需了解其李代数的构造

(§ 8.2).

本章中最花功夫叙述的是李代数在量子力学中的表示，在以前的章节中，把量子力学中的表示直接取为希尔伯特空间的矢量表示，而本章却是从本质的量子力学表示——射线表示出发的(§ 8.3)、这样讨论的结果表明，根据物理空间的各向同性，动量和角动量不妨一起取作矢量表示(§ 8.4)。然后，作为射线表示与矢量表示并不等价的重要例子，将讨论伽利略变换，从而推导出量子力学的基本对易关系(§ 8.7)。

在运用量子力学求解具体问题时，或者说，在讨论多粒子体系的对称性所必须涉及角动量合成以及有关置换粒子坐标的对称性分类时，将尽可能用平行的方式，即用表示的不可约分解来予以说明(§8.6, §8.10)。

为了便于读者理解，有关轨道角动量与自旋的关系(§ 8.5)，以及不直接与时空对称性相连系的力学系中的内在对称性(§8.9)，都分别占有一定篇幅。

本来，力学系的对称性有美观的含义，而作为发现跃迁过程的选择定则的强有力手段却具有重要的意义。但是，关于这一点，将放在各章去分别讨论，本章只好忍痛割爱了。

最后，本章多次出现的有关群和代数的数学专门词汇，均将分别予以说明，完全不以群论和李代数的有关知识为前提，只要有简单的矩阵运算技巧和高等学校程度的代数知识就可以充分理解本章的内容。不过，我们将不加证明地引用了有关希耳伯空间的二、三个重要性质，其证明留待本讲座第四卷《量子力学》(II)第六部分第十六章进行。这主要是希望读者了解，为了理解量子力学的基本结构，第六部以后乍一看相当数学化的说明有多么重要。

## §8.1 群的定义及其结构

我们在物理学中碰到过许多量的集合，相对于它们之间的运算而言，它们具有被称为**群**的性质。例如，全部实数的集合，全部

复数的集合，不论相对于加法还是相对于乘法，均构成群。以几个实数或几个复数为分量的全部矢量的集合相对于加法也构成群。矩阵元为复数的 $n$ 阶方阵之中，行列式不等于零的全体的集合相对于矩阵乘法构成群，最后一个特殊的例子是，矩阵元为实数的三维方阵之中，行列式等于1，并且其逆矩阵(与原矩阵之积为 1 的矩阵)等于其转置矩阵(行与列互换后形成的矩阵) 的全体的集合表示三维欧几里德空间的全部旋转操作，因此，上述"量"中可以包含操作，这时，"运算"可以理解为两个操作相继进行。

为了叙述普遍的性质，采用抽象的术语和记号是方便的。于是，群的定义抽象地叙述为："$G$是用 $s,t,u$ 等字母表示的**元素**的集合，在任何两个元素$s,t$之间都定义了运算.如果$G$满足以下四个条件：

(G1) 若 $s,t\in G$，则 $t\circ s\in G$，且 $t\circ s$唯一存在。

(G2) 若 $s、t、u\in G$，则 $(s\circ t)\circ u = s\circ(t\circ u)$ 成立。

(G3) 对于$G$中任一元素 $s$，都有满足 $s\circ e = e\circ s = s$ 的元素 $e\in G$存在。称 $e$ 为**单位元素**。

(G4) 对于$G$中任一元素 $s$，都有满足 $s\circ s^{-1} = s^{-1}\circ s = e$的元素 $s^{-1}$ 存在，称 $s^{-1}$ 为 $s$ 的逆元素，则把 $G$叫做群$G$."

开头所举的几个例子中，群的元素和运算都是一清二楚的.作为强有力的工具来使用的群论，不必一个个具体地指明运算，只从上述抽象性质(往往叫做群的公理体系)就可以得到许多结论。在本章后半部分以及第九章中所使用的子群、剩余类群等即属此列.因此，为了简单，我们将省略运算记号$\circ$，而把 $s\circ t$ 写成$st$。

当群$G$的非空子集$H$满足 (i) $H\ni s,t\Rightarrow st\in H$，(ii)$H\ni s\Rightarrow s^{-1}\in H$ 时，就把$H$叫做 $G$的**子群**。其中 $\Longrightarrow$ 是"导致"的记号，满足下面条件的子群在物理上是特别重要的。即，$H$是$G$的子群，并且对于$G$的任一元素 $s$，有 $sHs^{-1} = H$。这时，称$H$为$G$的**正规子群或不变子群**.在三维欧几里德空间的旋转群中，以正多面体的中心为原点，并在以其为中心的旋转中取出使该正多面体与自身重合的那一部分，例如在正四面体的情况下，就会得到由12个元素构

成的不变子群.任何群都至少有两个不变子群.原来的群 $G$ 本身就是一个,单位元素 $e$ 自己构成的群也是一个,它们都明显地满足上述条件. 除了这些平凡子群之外,一般当群 $G$ 具有不变子群 $H$ 时,都可以用 $H$ 将 $G$ **"分割"**. 为了明白其含义, 首先定义由群 $G$ 的子集 $S$ 和 $T$ 构成集合: $ST = \{st : s \in S, t \in T\}$. 若 $S$ 是子群, 则显然有 $SS = S$. 特别当 $S$ 只是一个元素 $s$ 的集合时,就把 $\{s\}T$ 写成 $sT$.当 $H$ 是 $G$ 的子群,且 $G$ 的元素 $s,t$ 满足 $s^{-1}t \in H$ 时,就写成 $s \sim t$,不难证明,$\sim$ 是满足下面三个性质的**等价关系**.(E1)$s \sim s$, (E2) $s \sim t \Rightarrow t \sim s$, (E3) $s \sim t, t \sim u \Rightarrow s \sim u$. 因此可以说,集合 $sH$ 的所有元素均与 $s$ 等价. 等价元素的集合称为**等价类**. 若 $H$ 是 $G$ 的不变子群,则由 $H$ 所构成的等价类的集合 $\{sH : s \in G\}$ 对于 $sHtH = stHt^{-1}tH = stHH = stH$ 这样的运算显然构成群. 通常将其记为 $G/H$, 并叫做 $G$ 的从 $H$ 得到的**剩余类群**或**商群**,有时也叫**因子群**.

抽象群的性质大致如此, 下面让我们来研究一下具体群的性质. 首先考虑元素数目有限或者是可数的群, 分别称之为有限群和无限离散群. 这时,可以把群的元素加上角标编号记为 $g_i$.而运算则可写成

$$g_i g_j = g_{\varphi(i,j)} \in G, \tag{8.1.1}$$

其中 $\varphi(i,j)$ 为一自然数,它由自然数 $i$ 和 $j$ 以及其次序唯一确定. 把(8.1.1)式列成表,称之为群 $G$ 的**乘法表**或**群表**,群 $G$ 的性质全部包含在该表之中.

**表8.1 群的乘法表**

| | $g_1 \cdots g_j \cdots$ |
|---|---|
| $g_1$ <br> $\vdots$ <br> $g_i$ <br> $\vdots$ | $\vdots$ <br> $\cdots g_{\varphi(i,j)}$ |

当群 $G$ 的元素为连续无限多时,称 $G$ 为**连续群**. 虽然会想到,用一组 $n$ 个实数来标记连续群的各个元素, 但一般却未必可能这

样做．关于这一点，我们不久还将要详细说明．这儿，为了与上述有限群或无限离散群对照，考虑各个元素以 $n$ 个独立实参数来表示的连续群 $G$．也就是说，把 $s,t,u\in G$ 分别表示为

$$s=g(\alpha_1,\cdots,\alpha_n)$$
$$t=g(\beta_1,\cdots,\beta_n)$$
$$u=g(\gamma_1,\cdots,\gamma_n)$$
$$\alpha_i,\ \beta_i,\ \gamma_i\in \mathbf{D}\subset\mathbf{R}\quad (i=1,\cdots,n).$$

若 $st=u$，则相应于(8.1.1)式中的 $\varphi(i,j)$，可以得到

$$\gamma_i=f_i(\alpha_1,\cdots,\alpha_n;\beta_1,\cdots,\beta_n)\ (i=1,\cdots,n).\quad (8.1.2)$$

虽然这时列不出表来，但群 $G$ 的全部性质都包含在

$$\{f_i(\alpha_1,\cdots,\alpha_n;\beta_1,\cdots,\beta_n):\alpha_i,\beta_i\in D(i=1,\cdots,n)\}$$

之中，这一点与前面的乘法表相同。

对有限群和无限离散群来说，乘法表一旦给出，就能知道这些群的具体结构．在连续群的情况下，即使在上面特殊的例子中，仅仅给出函数 $f_i(i=1,\cdots,n)$ 的具体形式，也难以掌握群构造．但是，在连续群中，称作李群的一类是易于讨论的．下一节将说明李群的结构，在此之前，让我们适当选择参数，以使上述连续群例子中的单位元素 $e\in G$ 的 $n$ 个参数都等于零．这时会有

$$f_i(\alpha_1,\cdots,\alpha_n;0,\cdots,0)=\alpha_i \quad (8.1.3)$$
$$f_i(0,\cdots,0;\beta_1,\cdots,\beta_n)=\beta_i \quad (i=1,\cdots,n).\quad (8.1.4)$$

如果 $f_i(\alpha_1,\cdots,\alpha_n;\beta_1,\cdots,\beta_n)$ 对 $\alpha_1,\cdots,\beta_n$ 连续可微，那么，从(8.1.3)和(8.1.4)两式可以得到

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial\alpha_j}\right)_{\substack{\alpha_k=0\\ \beta_k=0}}=\delta_{ij},\quad \left(\frac{\partial f_i}{\partial\beta_j}\right)_{\substack{\alpha_k=0\\ \beta_k=0}}=\delta_{ij},\quad (8.1.5)$$

其中 $\delta_{ij}$ 是克朗内克符号．在原点 $(\alpha_i=0,\beta_i=0,i=1,\cdots,n)$ 附近，根据(8.1.3)和(8.1.4)两式，有

$$f_i(\alpha_1,\cdots,\alpha_n;\beta_1,\cdots,\beta_n)=\alpha_i+\beta_i,(i=1,\cdots,n).\quad (8.1.6)$$

这表明，原来的群 $G$ 在单位元素(即原点)附近有 $n$ 个单参数子群 $\{g(0,\cdots,0,\alpha_i,0,\cdots,0):\alpha_i\in D\}$。

## §8.2 李群和李代数

连续群之中，任何元素附近都像上节末所举出的例子那样可以用 $n$ 个参数来表示的群就是李群。（在本章中，把参数取为实数，但也有以复数为参数的李群。第七章讨论洛伦兹群时曾使用过的 $SL(2,\mathbf{C})$ 就含复参数。因此，严格地说，必须分别叫做实李群和复李群，然而由于本章处理的全是实李群，故除有特殊需要之外，一般我们只称李群.实李群和复李群的关系将放在 §8.5 叙述.）也就是说，对于 $G$ 的任意元素 $s$，都可以通过把 $G$ 的全部元素都乘以 $s^{-1}$ 而使 $s$ 本身变成单位元素，再以该点为原点像上节那样加进参数。用曲面来类比，这相当于，在曲面上任意一点附近，用平面来近似地代替原曲面。因此，李群的局域性质比较易于讨论，本节就以李群的局域性质为讨论重点。这是因为，在量子力学中，有用的正是那些性质。

第四章已经学过，量子力学力学系的状态可以用希耳伯空间中的矢量来表示(更严格地说，纯状态是用射线来表示的。这一点将在下节说明)。这样一来就可以知道，可观测量必须用在希尔伯特空间中作用的自共轭线性算符来表示。因此，让我们首先考虑：把李群 $G$ 的各个元素都用作用于希尔伯特空间中矢量 $\psi$ 上的幺正算符来表示。即

$$G \ni s \to \hat{U}(s),$$
$$G \ni s、t \Rightarrow \hat{U}(st) = \hat{U}(s)\hat{U}(t),$$
$$\|\hat{U}\psi\| = \|\psi\| = 1.$$

根据上节末的讨论，李群 $G$ 在任意元素的附近都具有几个单参数子群，所以我们借用下面关于具有单参数 $\tau$ 的幺正算符的基本定理。

[斯托恩(Stone)定理] 若希尔伯特空间的幺正变换 $\hat{U}(\tau)$ 满足

$$\hat{U}(\tau')\hat{U}(\tau') = \hat{U}(\tau+\tau'),\ \hat{U}(0) = I,$$
$$\lim_{\tau\to\tau_0}\|(\hat{U}(\tau) - \hat{U}(\tau_0))\psi\| = 0,$$

则可以定义自共轭算符 $\hat{A}$

$$\lim_{\tau\to 0}\tau^{-1}\|(\hat{U}(\tau)-I)\psi\|=\hat{A}\psi, \tag{8.2.1}$$

并把 $\hat{U}(\tau)$ 表示为 ([Stone] 1932 年)

$$\hat{U}(\tau)=\exp(i\tau\hat{A})\equiv\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\tau A)^n}{n!}. \tag{8.2.2}$$

重要的是,即使对更广义的复巴拿赫(Banach)空间,该定理亦然成立([吉田-希勒(Hille)定理]1948年)[1]。幸亏有这个定理,才可以把给出李群 $G$ 的局域性质的 $n$ 个单参数子群分别表示为

$$g(0,\cdots,\alpha_j,\cdots,0)\longmapsto\hat{U}(\alpha_j)=\exp(i\alpha_j\hat{A}_j)(j=1,\cdots,n). \tag{8.2.3}$$

不同子群之间的关系可以从(8.1.2)式推导出来。也就是说,因为对应于

$$\left.\begin{aligned}&g(0,\cdots,\alpha_j,\cdots,0)g(0,\cdots,\beta_k,\cdots,0)=g(f_1,\cdots,f_n)\\&f_m=f_m(0,\cdots,\alpha_j,\cdots,0;0,\cdots,\beta_k,\cdots,0)(m=1,\cdots,n)\end{aligned}\right\}, \tag{8.2.4}$$

有

$$\exp(i\alpha_j\hat{A}_j)\exp(i\beta_k\hat{A}_k)=\hat{U}(f_1,\cdots,f_n), \tag{8.2.5}$$

所以,将上式两边对$\alpha_j$和$\beta_k$微商,再取 $\alpha_j=0$ 和 $\beta_k=0$ 就可以得到

$$-\hat{A}_j\hat{A}_k=\frac{\partial^2\hat{U}}{\partial f_k\,\partial f_j}+\sum_{m=1}^{n}\frac{\partial\hat{U}}{\partial f_m}\frac{\partial f_m}{\partial\beta_k\,\partial\alpha_j}. \tag{8.2.6}$$

在此计算中曾用过(8.1.5)式。然后,在(8.2.5)式左边把 $j$ 和 $k$ 交换,再进行同样计算,便有

$$-\hat{A}_k\hat{A}_j=\frac{\partial^2\hat{U}}{\partial f_j\,\partial f_k}+\sum_{m=1}^{n}\frac{\partial\hat{U}}{\partial f_m}\frac{\partial^2 f_m}{\partial\beta_j\,\partial\alpha_k}. \tag{8.2.7}$$

---

1) 关于其证明,请参看日文书[吉田,河田,岩村]的pp. 208—222,关于斯托恩定理的简洁证明,请参看[吉田]p.76,或 [Van der Waerden] p. 84. 另外,吉田-希勒定理在布朗运动的理论中也起着重要作用(参看本讲座第二卷«经典物理学»(11)§16.2).

将(8.2.6)和(8.2.7)式两边相减，即可得到

$$-[\hat{A}_j,\hat{A}_k]=\sum_{m=1}^{n}\left(\frac{\partial^2 f_m}{\partial\beta_k\partial\alpha_j}-\frac{\partial^2 f_m}{\partial\beta_j\partial\alpha_k}\right)\frac{\partial\hat{U}}{\partial f_m},\qquad(8.2.8)$$

其中，记号 $[\hat{A}_j,\hat{A}_k]\equiv\hat{A}_j\hat{A}_k-\hat{A}_k\hat{A}_j$ 称为李积因为在目前所研究的点附近有

$$\frac{\partial\hat{U}}{\partial f_m}=i\hat{A}_m,\qquad(8.2.9)$$

所以，若令

$$\left(\frac{\partial^2 f_m}{\partial\beta_k\partial\alpha_j}-\frac{\partial^2 f_m}{\partial\beta_j\partial\alpha_k}\right)_{\substack{\alpha_l=0\\ \beta_l\ 0}}\equiv C_{jk}^m,\qquad(8.2.10)$$

则(8.2.8)式将简化为

$$i[\hat{A}_j,\hat{A}_k]=\sum_{m=1}^{n}C_{jk}^m\hat{A}_m.\qquad(8.2.11)$$

通过解方程(8.2.11)，就可以完全求出李群 $G$ 的局域性质。也就是说，因为，根据 $G$ 的“乘法表”(8.1.2)，从(8.2.10)式就可导出 $n^3$ 个实系数 $C_{jk}^m(j,k,m=1,\cdots,n)$。所以，把 $\hat{A}_1,\cdots,\hat{A}_n$ 当作“未知数”就可以用代数方法来求解(8.2.11)式。一般地，对于集合 $\mathscr{U}$

$$x\in\mathscr{U},y\in\mathscr{U}\Rightarrow\alpha x+\beta y\in\mathscr{U},(\alpha,\beta\in K),x\cdot y\in\mathscr{U},$$

所定义的运算＋及·满足

$$(x_1+x_2)\cdot y=x_1\cdot y+x_2\cdot y,(x_1,x_2,y\in\mathscr{U})$$

$$x\cdot(y_1+y_2)=x\cdot y_1+x\cdot y_2,(x,y_1,y_2\in\mathscr{U})$$

$$\alpha(x\cdot y)=(\alpha x)\cdot y=x\cdot(\alpha y),(\alpha\in K)$$

时，就称 $\mathscr{U}$ 为数域 $K$ 上的**代数**.再来看(8.2.11)式，若用李积[，]定义运算·的话，则 $\hat{A}_1,\cdots,\hat{A}_n$ 所张成的矢量空间构成代数.这时的系数乍一看似乎是复数，实际上，从在量子力学中的应用来考虑，$\hat{A}_j$ 是希尔伯特空间中自共轭算符的表示，$i$ 出现在(8.2.9)式右边，在(8.2.11)式左边也出现一个 $i$。具有实参数 $\alpha_1,\cdots,\alpha_n$ 的李群原来局域地表示为 $\exp[\alpha_1x_1+\cdots+\alpha_nx_n]$。我们只不过在形式上可取 $\alpha_1x_1=-i\alpha_1(ix_1)$。因此，上述代数是实数域上的代数。该代数称**为实李群的实李代数**，并用 $\mathfrak{G}$ 表示，往往还把 $\mathfrak{G}$ 叫做**李环**.今后只

要不特别地事先声明，实李代数就简单地写成李代数。因为李代数 $\mathfrak{G}$ 的结构由 $n^3$ 个实系数 $C_{jk}^m$ 决定，所以把$\{C_{jk}^m : j,k,m = 1,\cdots,n\}$叫做李代数 $\mathfrak{G}$ 的**结构常数**。然而，必须注意，它们的值取决于原先李群参数的用法，即取决于李代数 $\mathfrak{G}$ 基底的选法。但是，下述两个关系式与基底的选法无关。首先，显然有

$$C_{jk}^m = -C_{kj}^m, \tag{8.2.12}$$

其次，根据雅可比恒等式和(8.2.11)式，可以得到

$$\sum_{m=1}^{n}(C_{ij}^m C_{mk}^l + C_{jk}^m C_{mi}^l + C_{ki}^m C_{mj}^l) = 0 \tag{8.2.13}$$

于是，为了研究李群 $G$ 的局域性质，显然有必要搞清其李代数 $\mathfrak{G}$的结构，不过，其中需引起注意之点是，集合 $\{\hat{A}_1,\cdots,\hat{A}_n\}$并不构成群。根据定义(8.2.11) 或 (8.2.2)，$\hat{A}_i$ 是李群 $G$ 的表示的**无限小算符**，这样容易引起错觉，似乎 $\hat{A}_i$ 本身也是群的元素。量子力学中常用的并非李群本身，而是由它导出来的李代数 $\mathfrak{G}$。关于这一点，我们以后将详细地举例说明。

当李群给定时，其李代数$\mathfrak{G}$便唯一确定，反之却不然。这一点可以由下述事实看出来，$\mathfrak{G}$ 的结构常数只是给出了 $G$ 的乘法表的导数。但是，当我们探索力学系的对称性时，倒底用什么样的李群来求解，除了像平行移动或旋转那样直观选择之外，一般来说，是相当困难的。另一方面，如果能统一地分类整理各种李代数的结构，则会有益于研究基本粒子对称性之类问题。幸而在一定的限制内，李代数的分类和结构是完全明了的。为了说明这个限制，先来叙述几个定义。

(i) 李代数$\mathfrak{L}$的子集合 $\mathfrak{M}$ 满足

$$a、b \in \mathfrak{M} \Rightarrow [a,b] \in \mathfrak{M}$$

时，称$\mathfrak{M}$为$\mathfrak{L}$的**子代数**。

(ii) 当满足

$$a \in \mathfrak{M}, b \in \mathfrak{L} \Rightarrow [a,b] \in \mathfrak{M}$$

时，就把 $\mathfrak{M}$ 叫做 $\mathfrak{L}$ 的**不变子代数**或**理想**。

(iii) 当 $\mathfrak{L}$ 不具有 0 和 $\mathfrak{L}$ 以外的不变子代数时，就说 $\mathfrak{L}$ **是半单**

的。

值得惊奇的是，仅仅假定了半单性，就可以决定李代数的分类和结构(例如，请参看[Jacobson])。

## §8.3 连续群的射线表示

以前，我们一直是以下述方式去运用群表示的，即，把李群$G$的元素$s$与希尔伯特空间$H$的归一化矢量$\psi$上作用的幺正算符$\hat{U}(s)$对应起来。也就是说，用

$$s \to \hat{U}(s), (\forall s \in G) \tag{8.3.1}$$

$$\hat{U}(st) = \hat{U}(s)\hat{U}(t) \tag{8.3.2}$$

来定义表示。这叫做矢量表示。但是，准确地说，力学系的量子力学纯态并非希尔伯特空间中的一个矢量，而是用被称为**射线**的矢量集$\{e^{i\alpha}\psi : \alpha \in R\}$来表示的。因此，最好是把量子力学状态与射线一一对应来公式化。当然，这种基本问题早就有人注意到了(韦耳(1928)，维格纳(1931))，数学上也使用了有限群的作用于射线的算符表示，早在1904年舒尔(Schur)就已经详细研究过这个问题[Schur]。但是，关于连续群，不久以前才完成公式化[Bargmann, 1952]。

以往处理量子力学问题时，射线是矢量集的“代表”，选择任何一个矢量来进行各种运算都不曾出现过问题，其中许多任意常数相位都可以适当选取。不过问题在于，它是否适合于目前的讨论，看来，有必要研究一下矢量处理的适用范围。

首先，定义几个射线所必须的运算。此后，对应于$f_0、g_0 \in \mathbf{H}$，应把射线表示为$\boldsymbol{f} = \{e^{i\alpha}f_0 : \alpha \in \mathbf{R}\}$，$\boldsymbol{g} = \{e^{i\beta}g_0 : \beta \in \mathbf{R}\}$。射线的内积定义为

$$\boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{g} \equiv |(f, g)|, f \in \boldsymbol{f}, g \in \boldsymbol{g}, \tag{8.3.3}$$

其中，$(f, g)$是本书一直通用的。然后再把两个射线$\boldsymbol{f}$和$\boldsymbol{g}$之间的距离定义为

$$d(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{g}) \equiv [2(1 - \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{g})]^{1/2}. \tag{8.3.4}$$

它给出由 $\boldsymbol{f}$ 和 $\boldsymbol{g}$ 中各自任选的矢量 $f$ 和 $g$ 之间距离 $\|f-g\|$ 的最小值。实际上，取 $f=e^{i\alpha}f_0\in\boldsymbol{f}$，$g=e^{i\beta}g_0\in\boldsymbol{g}$，$(f_0,g_0)=e^{i\lambda}|(f_0,g_0)|$，有

$$\|f-g'\|^2=2(1-\mathrm{Re}(f,g))=2(1-\mathrm{Re}(e^{-i\alpha}e^{i\beta}e^{i\lambda}\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g}))\geqslant 2(1-\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g}),\quad(8.3.5)$$

其中Re意味着取实部。根据(8.3.4)式，若

$$d(\boldsymbol{f},\boldsymbol{g})=0,$$

则 $\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g}=1$。再根据(8.3.3)式，有

$$|(f,g)|=1.$$

关于矢量$f_0$和$g_0$尚有许瓦兹不等式

$$|(f_0,g_0)|\leqslant\|f_0\|\|g_0\|=1,$$

显然，只有当 $f_0=g_0$ 时，等号才成立。因此，这时必须是 $\boldsymbol{f}=\boldsymbol{g}$。

作用于射线的幺正算符$\hat{\boldsymbol{U}}$定义如下，设作用于 $\mathbf{H}$ 的矢量的一个幺正算符为 $\hat{\boldsymbol{U}}$，这时称集合

$$\acute{\boldsymbol{U}}=\{\omega\hat{U}:|\omega|=1,\omega\in C\}\quad(8.3.6)$$

为幺正**射线算符**。而且，这个算符 $\acute{\boldsymbol{U}}$ 作用于射线 $\boldsymbol{f}$ 所得到的射线定义为

$$\acute{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{f}=\{\hat{U}f:\hat{U}\in\acute{\boldsymbol{U}},f\in\boldsymbol{f}\}.\quad(8.3.7)$$

另外，两个射线算符 $\acute{\boldsymbol{U}}$ 与 $\acute{\boldsymbol{V}}$ 之积以及 $\acute{\boldsymbol{U}}$ 的逆算符分别定义为

$$\acute{\boldsymbol{U}}\acute{\boldsymbol{V}}=\{\hat{U}\hat{V}:\hat{U}\in\acute{\boldsymbol{U}},\hat{V}\in\acute{\boldsymbol{V}}\},\quad(8.3.8)$$

$$\acute{\boldsymbol{U}}^{-1}=\{\hat{U}^{-1}:\hat{U}\in\acute{\boldsymbol{U}}\}.\quad(8.3.9)$$

显然，根据这些定义便有

$$\acute{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{f}\cdot\acute{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{g}=\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g},\quad(8.3.10)$$

于是，又有 $d(\acute{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{f},\acute{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{g})=d(\boldsymbol{f},\boldsymbol{g})$。

这样，就可以用幺正射线算符来做连续群$G$的表示了。所谓表示，就是说，$s\in G$与 $\acute{\boldsymbol{U}}(s)$ 之间的对应关系满足

$$\acute{\boldsymbol{U}}(s)\acute{\boldsymbol{U}}(t)=\acute{\boldsymbol{U}}(st).\quad(8.3.11)$$

这叫做**幺正射线表示**。因为在有限群情况下与映射变换矩阵相同，所以往往又称之为**映射表示**。

如果由各个射线算符中选择一个元素的(称之为“代表”)，用

它们之间的关系来表示(8.3.11)式，那么，一般地，有

$$\hat{U}(s)\hat{U}(t) = \omega(s,t)\hat{U}(st), \tag{8.3.12}$$

其中，$\omega$ 是群 $G$ 元素 $s$ 和 $t$ 的复函数，其绝对值等于 1. 显然，由于 $\omega$ 取决于“代表”的选法，故具有相当大的任意性. 但是，因为幺正算符 $\hat{U}$ 必须满足乘积的结合律，所以 $\omega$ 应满足

$$\omega(s,t)\omega(st,\omega) = \omega(t,u)\omega(s,tu). \tag{8.3.13}$$

把(8.3.12)式代入 $(\hat{U}(s)\hat{U}(t))\hat{U}(u) = \hat{U}(s)(\hat{U}(t)\hat{U}(u))$，马上就可导出这个关系式. 为了保证表示(8.3.11)的唯一性，有必要定义出与条件(8.3.13)并行不悖的 $\omega(s,t)$的等价关系. 做法如下，取群 $G$ 的元素 $s$ 的绝对值为 1 的任意复函数 $\phi(s)$，使

$$\hat{U}'(s) = \phi(s)\hat{U}(s),$$
$$\hat{U}'(t) = \phi(t)\hat{U}(t),$$
$$\hat{U}(st) = \phi(st)\hat{U}(st),$$

写出

$$\hat{U}'(s)\hat{U}'(t) = \omega'(s,t)\hat{U}'(st),$$

将(8.3.12)式代入，可以得到

$$\omega'(s,t) = \omega(s,t)\frac{\phi(s)\phi(t)}{\phi(st)}. \tag{8.3.14}$$

若把上式定义为 $\omega$ 和$\omega'$的等价关系，就不难确认

$\omega \sim \omega;\omega \sim \omega' \Rightarrow \omega' \sim \omega;\omega \sim \omega'$且 $\omega' \sim \omega'' \Rightarrow \omega \sim \omega''$. 另外，显然(8.3.14)与(8.3.13)两式同时成立. 函数 $\omega$ 称为给定射线表示的**局域因子**. 局域因子等价于 1 的射线表示就是矢量表示. 在这种意义上，射线表示就是矢量表示的**扩张**. 实际上，若把原来的群 $G$ 扩张，再求出其矢量表示，则能得到与射线表示相同的结果(关于群的扩张，请参看有关文献，例如[浅野，永尾]，pp. 179—191).

因此，下面的问题就是要研究，在什么情况下射线表示才与矢量表示等价. 为此，下面的定理是有用的.

[定理] 连续群 $G$ 的有限维连续射线表示的所有局域因子 $\omega$ 均等于 1.

为了证明这个定理，有必要先研究一下 $\omega$ 的连续性. 要搞清

群空间中任意一点 $\alpha$ 附近的性质，就得用 $\alpha^{-1}$ 去乘所有元素，把原来的点移到原点 $e$. 当 $\hat{U}(e)=1$ 时使用(8.3.12)式，得到

$$\omega(s,e)=\omega(e,s)=1,\quad \forall s\in G. \tag{8.3.15}$$

对于原点附近 $\mathfrak{N}$的内部点 $s,t,s',t'$，应用(8.3.12)式，便有

$$\begin{aligned}(\omega(s',t')-\omega(s,t))\hat{U}(s't')f=&(\hat{U}(s')-\hat{U}(s))\hat{U}(t)f\\&+\omega(s,t)(\hat{U}(st)-\hat{U}(s't')f\\&+\hat{U}(s')(\hat{U}(t')-\hat{U}(t))f.\end{aligned} \tag{8.3.16}$$

以下均设 $\|f\|=1$. 取上式两边的模，再应用闵可夫斯基(Minkowski)不等式，可得

$$\begin{aligned}\|\omega(s',t')-\omega(s,t)\|\leqslant&\|(\hat{U}(s't')-\hat{U}(st))f\|\\&+\|(\hat{U}(t')-\hat{U}(t))f\|+\|(\hat{U}(s')-\hat{U}(s))f\|.\end{aligned} \tag{8.3.17}$$

因此，根据 $\hat{U}(s)$的强连续性就可以确定 $\omega(s,t)$的连续性. 于是，可以在原点附近$\mathfrak{N}$定义幂级数

$$\ln\omega=\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-1)^m}{m}(\omega-1)^m. \tag{8.3.18}$$

进而，若令 $-i\ln\omega=\xi$，则$\omega=\exp(i\xi)$，再根据条件$|\omega|=1$，$\xi(s,t)$显然是连续的实函数. 称 $\xi$ 为群$G$的**局域指数**. 顺便用实函数 $\zeta(s)$ 把 $\phi(s)$ 也表示成 $\phi(s)=\exp[i\zeta(s)]$.

应用 $\xi$ 和 $\zeta$ 之后，(8.3.14)式就会变成

$$\xi'(s,t)=\xi(s,t)+\zeta(s)+\zeta(t)-\zeta(st). \tag{8.3.19}$$

至此，做好了证明上述定理的准备工作.

[证明] 首先，使用实函数$\xi$ 把(8.3.12)式表示为

$$\hat{U}(s)\hat{U}(t)=\exp[i\xi(s,t)]\hat{U}(st), \tag{8.3.20}$$

取两边的行列式. 根据假定，$\hat{U}$ 是有限维矩阵，设其维数是$n$，就有

$$D(s)D(t)=\exp[in\xi(s,t)]D(st). \tag{8.3.21}$$

其中 $D(s)$ 是 $\hat{U}(s)$ 的行列式，显然 $D(e)=1$，$|D(s)|=1$. 由 $\hat{U}(s)$ 的连续性可知，$D(s)$ 也是连续的，于是，可以写出 $D(s)=\exp[i\delta(s)]$. 其中$\delta(s)$是实函数. 这样，(8.3.21)式变成

$$\delta(s)+\delta(t)=n\xi(s,t)+\delta(st). \tag{8.3.22}$$

另外，对 $\hat{U}'(s)=\exp[i\xi(s)]\hat{U}(s)$中之 $\xi(s)$，利用 $\xi(s)=-\delta(s)/n$，将其代入(8.3.19)式，并考虑到(8.3.22)式，便有 $\xi'(s,t)=0$，即

$$\hat{U}'(s)\hat{U}'(t)=\hat{U}'(st). \qquad \text{[证毕]}$$

对于使该定理的假设条件成立的连续群，显然由开始就可以用矢量表示来叙述。遗憾的是，量子力学中所使用的连续群大多不满足上述假定，已知的连续群中满足这个条件的是半单紧李群，我们身边的旋转群是一个例子。所谓半单李群就是具有上述半单李代数的李群，所谓紧，指的是，对于群空间的任意**开覆盖**来说，其加细仍是有限开覆盖。在一维实空间中，它相当于闭区间。

例如，下节将要处理的三维欧几里得空间中的平行移动构成李群，但即使是它的单参数子群也是**不紧**的。实际上，如果用$g(\tau)$表示沿 $x$ 轴移动 $\tau$ 的操做，那么，由于 $\tau$ 的定义域是开区间，即 $\tau$ 可以从$-\infty$变化到$+\infty$，所以不是紧的，不能用有限维矩阵表示。因此在上述定理的适用范围之外。与此相反，三维欧几里得空间中的旋转量用三个参数表示，它们的定义域无论如何都是闭区间，并且可以用有限维矩阵来表示。因此，根据上述定理，对于旋转群的局域表示，不妨从开始就采用矢量表示。关于这一点，通过下节具体地推导出旋转群的李代数，并以此求得等价于 1 的局域因子，就可以直接看出来。

不过，为此必须先求出上节处理过的具有几个参数的李群 $G$ 射线表示的局域性质。用局域指数 $\xi$ 表示 (8.3.12)式中的局域因子，得到与(8.2.5)式相当的

$$\exp(i\alpha_j\hat{A}_j)\exp(i\beta_k\hat{A}_k)=\exp[i\xi(0,\cdots,\alpha_j,\cdots,0;0,\cdots,\beta_k,\cdots,0)]\hat{U}(f_1,\cdots,f_n).$$

经过与上面相同的计算，可以得到

$$i[\hat{A}_j,\hat{A}_k]=\sum_{m=1}^{n}C_{jk}^{m}\hat{A}_m+\beta_{jk}1, \qquad (8.3.23)$$

其中$C_{jk}^{m}$与(8.2.10)式中给出的相同，新出现的$\beta_{jk}$定义为

$$\beta_{jk}=\left(\frac{\partial^2\xi}{\partial\beta_k\partial\alpha_j}-\frac{\partial^2\xi}{\partial\beta_j\partial\alpha_k}\right)_{\substack{\alpha_l=0\\ \beta_l=0}}. \qquad (8.3.24)$$

显然$\beta_{ik}=-\beta_{ki}$，再由(8.3.23)式和雅可比恒等式，可以得到

$$\sum_{m=1}^{n}(C_{ij}^{m}\beta_{km}+C_{jk}^{m}\beta_{im}+C_{ki}^{m}\beta_{jm})=0。\qquad(8.3.25)$$

## §8.4 动量和角动量

上节已叙述过连续群的射线表示，作为第一个应用实例，我们来考虑三维欧几里得空间中的平行移动。取三维实矢量$a=(a_x,a_y,a_z)$和$b=(b_x,b_y,b_z)$，若把坐标系只平行移动$a$的操作记为$g(a_x,a_y,a_z)$，则显然有$g(b_x,b_y,b_z)g(a_x,a_y,a_z)=g(a_x+b_x,a_y+b_y,a_z+b_z)$。这表明，全部$g$的集合$G$是具有三个参数的交换李群。然而，令$a_x=a_1,a_y=a_2,a_z=a_3$，根据(8.3.23)式，有

$$i[\hat{A}_j,\hat{A}_k]=\beta_{jk}\mathbf{1}。\qquad(8.4.1)$$

在矢量表示中对易的算符$\hat{A}_j$和$\hat{A}_k$在射线表示中已经不对易了，说起来多少有点令人惊异.为慎重起见，我们令$\beta_{12}=\kappa_3,\beta_{23}=\kappa_1,\beta_{31}=\kappa_2(\beta_{ii}=0)$，再应用(8.3.26)式求群$G$的表示。得到

$$\begin{aligned}\hat{U}(a_1,a_2,a_3)\hat{U}(b_1,b_2,b_3)=&\exp\left[i\left\{\frac{\kappa_1}{2}(a_2b_3-a_3b_2)\right.\right.\\&\left.\left.+\frac{\kappa_2}{2}(a_3b_1-a_1b_3)+\frac{\kappa_3}{2}(a_1b_2-a_2b_1)\right\}\right]\\&\times\hat{U}(a_1+b_1,a_2+b_2,a_3+b_3),\end{aligned}\qquad(8.4.2)$$

除$\kappa_1=\kappa_2=\kappa_3=0$或$\boldsymbol{a}/\!/\boldsymbol{b}$的情况之外，有

$$\hat{U}(a_1,a_2,a_3)\hat{U}(b_1,b_2,b_3)\neq\hat{U}(b_1,b_2,b_3)\hat{U}(a_1,a_2,a_3)。$$

把$x$轴取在$\boldsymbol{a}$的方向上，就会知道，$\boldsymbol{a}/\!/\boldsymbol{b}$的情况相当于取了单参数子群。如果是具有单参数的交换李群，那么，根据$\beta_{11}=0$，它显然总会与矢量表示等价。在经典力学中，任意两个平行移动的次序交换后，结果不变，然而，却不能把这个概念强加于量子力学。到目前为止，我们一直是特地叙述射线表示的一般理论，现在，在此框架中，让我们来讨论用矢量表示三维欧几里得空间中平行移动的依据。为此，最好先考虑三维欧几里得空间中的旋转群。

在三维欧几里得空间中取两个直角坐标系 $\Sigma$ 和 $\Sigma'$，可以通过平行移动和旋转将它们重叠.也就是说，平行移动原点重合之后使之固定不动，再旋转坐标轴使它们叠合起来.将在后面集中处理其全部操作.若取全这类操作，则它们构成群. 显然，到这一步，各个元素均可以用三阶实方阵来表示，其行列式等于 1，其转置矩阵等于其逆矩阵. 用 $SO(3)$来表示这个群，为了讨论群 $SO(3)$的局域结构，可以求该群的李代数 $SO(3)$. 由于代数的结构不依赖于表示，因此，我们使用三维实方阵来表示单位元素附近的任意元素. 利用 $\varepsilon_i \ll 1(i=1,2,3)$ 进行简单计算，有

$$\begin{bmatrix} 1 & -\varepsilon_3 & \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 & 1 & -\varepsilon_1 \\ -\varepsilon_2 & \varepsilon_1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$+\varepsilon_1\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} + \varepsilon_2\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$+\varepsilon_3\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

因此，令

$$\hat{B}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{B}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\hat{B}_3 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{8.4.3}$$

直接可得

$$[\hat{B}_1,\hat{B}_2] = \hat{B}_3, [\hat{B}_2,\hat{B}_3] = \hat{B}_1, [\hat{B}_3,\hat{B}_1] = \hat{B}_2. \tag{8.4.4}$$

这样就弄清楚了 $SO(3)$的李代数的结构，而为了与上节的说明密切吻合，我们还需要提及两个代数之间同构的概念. 一般地，若存在着使代数 $g_1$ 和 $g_2$ 各自的元素一一对应的线性映射 $f$，并且

对于 $X、Y \in \mathfrak{g}_1$，有 $f([X,Y]) = [f(X),f(Y)]$ 成立，则说 $\mathfrak{g}_1$ 和 $\mathfrak{g}_2$ **同构**. 考虑(8.4.4)式所给出的代数与

$$i[\hat{A}_1,\hat{A}_2] = \hat{A}_3, i[\hat{A}_2,\hat{A}_3] = \hat{A}_1, i[\hat{A}_3,\hat{A}_1] = \hat{A}_2 \quad (8.4.5)$$

所给出的代数，通过映射 $\hat{A}_j = f(\hat{B}_j) = -i\hat{B}_j (j = 1,2,3)$，不难证实，它仍是同构的。从(8.4.3)式可知，$\hat{B}_j (j = 1,2,3)$是反对称矩阵，故 $\hat{A}_j (j = 1,2,3)$是厄米矩阵，正适用于量子力学。

终于到了该求出 $SO(3)$ 群的局域幺正射线表示的时候了。

关于上节导出的一般公式(8.3.23)中所出现的结构常数 $C_{jk}^m$，根据(8.4.5)式，可得

$$C_{12}^3 = C_{23}^1 = C_{31}^2 = 1 \text{ 其它 } C_{jk}^m = 0.$$

另外，采用$\beta_{12} \equiv \beta_3, \beta_{23} = \beta_1, \beta_{31} = \beta_2$记号，得到

$$i[\hat{A}_1,\hat{A}_2] = \hat{A}_3 + \beta_3, i[\hat{A}_2,\hat{A}_3] = \hat{A}_1 + \beta_1, i[\hat{A}_3,\hat{A}_1] = \hat{A}_2 + \beta_2. \quad (8.4.6)$$

在上式中进行变换

$$\hat{A}_j + \beta_j = \hat{A}'_j, \quad (8.4.7)$$

便有

$$i[\hat{A}'_1,\hat{A}'_2] = \hat{A}'_3, i[\hat{A}'_2,\hat{A}'_3] = \hat{A}'_1, i[\hat{A}'_3,\hat{A}'_1] = \hat{A}'_2. \quad (8.4.8)$$

它与矢量表示相同。上一节说明局域因子的等价关系时曾用过 $\phi(s)$，现在，若取其为 $\exp(i\alpha_j\beta_j)(j = 1,2,3)$，则可直接表明，变换(8.4.7)不改变等价性。

这样便证实了，$SO(3)$ 的幺正射线表示与局域矢量表示等价. 于是，我们可以讨论有关在前面所述条件下的平行移动群的射线表示的问题了.三维欧几里得空间中，使矢量$\boldsymbol{x} = (x_1,x_2,x_3)$ 长度不变的变换可以一般地写为

$$\boldsymbol{x}' = R\boldsymbol{x} + \boldsymbol{u}, \quad (8.4.9)$$

其中$R$是表示旋转的矩阵，$\boldsymbol{u}$是原点移动的矢量。也就是说，变换(8.4.9)集中写出了先使原点旋转 $R$，再让原点仅仅移动 $\boldsymbol{u}$ 这样的操作。稍施技巧，使用四行四列实方阵就可以把(8.4.9)式表示为

$$\begin{bmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} & u_1 \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} & u_2 \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} & u_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ 1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} R & \boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (8.4.10)$$

接着(8.4.9)式的变换，令

$$\boldsymbol{x}'' = R'\boldsymbol{x}' + \boldsymbol{u}', \quad (8.4.9')$$

则有

$$\boldsymbol{x}'' = R'R\boldsymbol{x} + R'\boldsymbol{u} + \boldsymbol{u}', \quad (8.4.11)$$

用矩阵乘法，有

$$\begin{bmatrix} R' & \boldsymbol{u}' \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R & \boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R'R & R'\boldsymbol{u} + \boldsymbol{u}' \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (8.4.12)$$

在 $R$ 取遍阶有旋转矩阵、$\boldsymbol{u}$ 取遍阶有矢量的情况下，不难验证，矩阵

$$g(R,\boldsymbol{u}) = \begin{pmatrix} R & \boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (8.4.13)$$

的全部集合相对于矩阵乘法构成六参数李群．为慎重起见，我们写出单位元素和逆元素：

$$e = g(\mathbf{1},0) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$g^{-1}(R,\boldsymbol{u}) = \begin{bmatrix} R^{-1} & -R^{-1}\boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

用**非齐次线性变换群**之一 $I_3^3$ 来记这个群．不难证实，$I_3^3$ 具有子群 $G_3^3 = \{g(R,0)\}$ 和 $T_3 = \{g(\mathbf{1},\boldsymbol{u})\}$．值得注意的是，$T_3$ 是不变子群，而 $G_3^3$ 则不是．实际上

$$g(R_0,\boldsymbol{u}_0)\begin{bmatrix} R & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} g^{-1}(R,\boldsymbol{u}_0) = \begin{bmatrix} R_0RR_0^{-1} & -R_0RR^{-1}\boldsymbol{u}_0 + \boldsymbol{u}_0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\notin G_3^3, \quad (8.4.14)$$

$$g(R_0,\boldsymbol{u}_0)\begin{bmatrix}\mathbf{1} & \boldsymbol{u}\\ 0 & 1\end{bmatrix}g^{-1}(R_0,\boldsymbol{u}_0)=\begin{bmatrix}\mathbf{1} & R_0\boldsymbol{u}\\ 0 & 1\end{bmatrix}\in T_3. \tag{8.4.15}$$

显然，$G_3^3$ 和 $T_3$ 分别是前面讨论过的旋转群和平行移动群.由于 $T_3$ 是不变子群，因此可以做商群 $I_3^3/T_3$.若就运算关系而言，两个群是一一对应的，则称它们**同构**，并用符号 $\cong$ 相连，不难证实，这时有

$$I_3^3/T_3\cong G_3^3. \tag{8.4.16}$$

到现在为止，我们分别处理了 $G_3^3$ 和 $T_3$，讨论了它们各自的射线表示.从物理上来讲，更有意义的是 $I_3^3$，尽管其中 $G_3^3$ 不是不变子群.另一方面，我们业已证明，$G_3^3$ 的射线表示与矢量表示等价.而且也看出，$T_3$ 的射线表示一般不与其矢量表示等价.当然也不否认，$T_3$ 的射线表示有与矢量表示等价的部分存在.也就是说，允许在(8.4.2)式中取 $\kappa_1=\kappa_2=\kappa_3=0$.因此，作为包含在 $I_3^3$ 射线表示中的 $T_3$ 射线表示，即使采用与矢量表示等作的部分，也不会引起矛盾.下面将要证明，“$I_3^3$ 李代数的射线表示与矢量表示等价”[巴格曼定理].因此，作为其子群，$T_3$ 的李代数的射线表示当然与矢量表示等价.

[证明] 首先写出 $I_3^3$ 的李代数的构造.截止到目前，旋转群和平行移动群是当作坐标系的变换群来处理的.现在，为了明确物理意义，考虑空间的所有点在固定坐标系中动.这相当于颠倒以前所使用的旋转角的符号和平行移动矢量的方向.显然，绕 $x_i(i=1,2,3)$ 轴转过一小角 $\theta_i$、沿 $x_i$ 轴移动一小位移 $\delta_i$ 的 $I_3^3$ 的元素可以表示为

$$g(\theta_1,\theta_2,\theta_3,\delta_1,\delta_2,\delta_3)=\mathbf{1}+\theta_1\begin{bmatrix}\cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot\\ \cdot & -1 & \cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\end{bmatrix}$$

$$+\theta_2\begin{bmatrix}\cdot & \cdot & -1 & \cdot\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\end{bmatrix}+\theta_3\begin{bmatrix}\cdot & 1 & \cdot & \cdot\\ -1 & \cdot & \cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\end{bmatrix}$$

$$+\delta_1\begin{bmatrix}\cdot&\cdot&\cdot&1\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{bmatrix}+\delta_2\begin{bmatrix}\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&1\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{bmatrix}+\delta_3\begin{bmatrix}\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&1\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{bmatrix}$$

$$=1+\sum_{j=1}^{3}\theta_jR_j+\sum_{j=1}^{3}\delta_jT_j, \tag{8.4.17}$$

其中矩阵元中的点“·”表示 0. 因此，通过直接计算即可求出 $I_3^3$ 的李代数的构造，为了便于查看，我们将全部对易关系列举如下：

$$[R_1,R_2]=-R_3,[R_2,R_3]=-R_1,[R_3,R_1]=-R_2, \tag{8.4.18}$$

$$\left.\begin{aligned}&[R_1,T_1]=0,\ [R_1,T_2]=-T_3,[R_1,T_3]=T_2,\\ &[R_2,T_1]=T_3,\ [R_2,T_2]=0,[R_2,T_3]=-T_1,\\ &[R_3,T_1]=-T_2,[R_3,T_2]=T_1,\ [R_3,T_3]=0.\end{aligned}\right\} \tag{8.4.19}$$

$$[T_1,T_2]=0,\ [T_2,T_3]=0,\ [T_3,T_1]=0. \tag{8.4.20}$$

不出所料，当 $j\neq k$ 时，微小旋转算符 $R_j$ 和微小平行移动算符 $T_k$ 并不对易.

在此，为了进行一般性的讨论，令 $A_j=R_j\ (j=1,2,3)$，而 $A_j=T_{j-3}(j=4,5,6)$，便可以把(8.4.18)、(8.4.19)和(8.4.20) 诸式归纳为

$$[A_j,A_k]=\sum_{m=1}^{6}C_{jk}^{m}A_m.$$

若把该李代数的幺正射线表示记为 $D(A_j)$（前面为避免繁琐，而且亦无必要，曾省略了 $D$），则根据(8.3.23)式，有

$$i[D(A_j),D(A_k)]=\sum_{m=1}^{6}C_{jk}^{m}D(A_m)+\beta_{jk}\cdot 1. \tag{8.4.21}$$

一般来说，会出现 $C_6^2=15$ 个非零的实常数 $\beta_{jk}=-\beta_{kj}(j,k=1,\cdots,6)$. 问题在于，能否用 §8.3 所述的等价变换把(8.4.21)式中所有 $\beta_{jk}$ 消去.

为了讨论这个问题，应用巴格曼所引入的下列函数较为方便.

从(8.4.21)式可见，$\beta_{jk}$ 通过 $[D(A_j),D(A_k)]$ 依赖于该李代数的元 $A_j$ 及 $A_k$，因它是一个内含其顺序的唯一确定的实数，故可写成

$$\beta_{jk}=\Xi(A_j,A_k). \tag{8.4.22}$$

即用 $\Xi$ 表示从代数到实数域的映射.

$I_3^3$ 的李氏数 $\ni A_j,A_k\mapsto[D(A_j),D(A_k)]\mapsto\beta_{jk}=\Xi(A_j,A_k)\in\mathbf{R}$.

若 $A_i$ 和 $A_j$ 同为该李代数的元，则 $[A_k, A_i]$ 也是这个李代数的元，故

$$A_j, [A_k, A_i] \mapsto [D(A_j), D([A_k, A_i])] \mapsto \Xi(A_j, [A_k, A_i]).$$

另一方面，$D$ 是李代数的表示，当然有

$$D([A_k, A_i]) = [D(A_k), D(A_i)]. \tag{8.4.23}$$

因此，对应于雅可比恒等式

$$[D(A_i), [D(A_j), D(A_k)]] + [D(A_j), [D(A_k), D(A_i)]] + [D(A_k), [D(A_i), D(A_j)]] = 0,$$

有

$$\Xi(A_i, [A_j, A_k]) + \Xi(A_j, [A_k, A_i]) + \Xi(A_k, [A_i, A_j]) = 0. \tag{8.4.24}$$

显然会有 $\Xi(A_j, A_k) = -\Xi(A_k, A_j)$. 至此，证明的准备工作已臻完善.

首先来讨论(8.4.20)式的射线表示. 利用(8.4.19)和(8.4.24)两式，可以得到

$$\begin{aligned} 2\beta_{45} &= 2\Xi(T_1, T_2) = \Xi(T_1, [R_1, T_3]) + \Xi(T_1, [T_1, R_3]) \\ &= -\Xi(R_1, [T_3, T_1]) - \Xi(T_3, [T_1, R_1]) \\ &\quad - \Xi(T_1, [R_3, T_1]) - \Xi(R_3, [T_1, T_1]) \\ &= \Xi(T_1, T_2) = \beta_{45}, \end{aligned}$$

$\therefore \beta_{45} = 0$，同样 $\beta_{56} = \beta_{64} = 0$.

然后讨论(8.4.19)式中右边为零的射线表示. 有

$$\begin{aligned} 2\beta_{14} &= 2\Xi(R_1, T_1) = \Xi(R_1, [R_3, T_2]) + \Xi(R_1, [T_3, R_2]) \\ &= -\Xi(R_3, [T_2, R_1]) - \Xi(T_2, [K_1, R_3]) \\ &\quad - \Xi(T_3, [R_2, R_1]) - \Xi(R_2, [R_1, T_3]) = 0, \end{aligned}$$

同样 $\beta_{25} = \beta_{36} = 0$.

关于(8.4.19)式中其余部分，有

$$\begin{aligned} 2\beta_{15} &= 2\Xi(R_1, T_2) = \Xi(R_1, [R_1, T_3]) + \Xi(R_1, [T_1, R_3]) \\ &= -\Xi(R_1, [T_3, R_1]) - \Xi(T_3, [R_1, R_1]) \\ &\quad - \Xi(T_1, [R_3, R_1]) - \Xi(R_3, [R_1, T_1]) \\ &= \Xi(R_1, T_2) - \Xi(R_2, T_1) = \beta_{15} - \beta_{24} \end{aligned}$$

$\therefore \beta_{15} = -\beta_{24}$，同样 $\beta_{34} = -\beta_{16}$，$\beta_{26} = -\beta_{35}$.

因此，若令 $\beta_{12} = \beta_3, \beta_{23} = \beta_1, \beta_{31} = \beta_2, \beta_{15} = \beta_4, \beta_{34} = \beta_5$，$\beta_{26} = \beta_6$，并进行等价变换(参看(8.4.7)式)

$$D(R_i) \to D'(R_i) = D(R_i) - \beta_i \mathbf{1} (i = 1,2,3), \tag{8.4.25}$$

$$D(T_i) \to D'(T_i) = D(T_i) - \beta_{3+i} \mathbf{1} (i = 1,2,3), \tag{8.4.26}$$

则所有的 $\beta_{jk}$ 均会消失.

[证毕]

在更为一般的情况下,即,在 $n$ 维实线性空间中,对于使

$$F_p = \sum_{i=1}^{p} x_i^2 - \sum_{i=p+1}^{n} x_i^2 \tag{8.4.27}$$

不变的非齐次线性变换群 $I_p^n(n>2)$,上述定理及其证明依然成立[1](参看 [Bargmann]§6或 [Hamermesh]§12). 其中我们感兴趣的是 $I_3^4$. 它正是闵可夫斯基空间中的非齐次正常洛伦兹群,也就是庞加莱(Poincaré) 群.庞加莱群是具有十个实参数的非紧李群.其李代数的结构与 $I_3^3$ 的极为相似,从而可以几乎原封不动地采用上述证明方法. 乍一看似乎很麻烦,但实际证明起来却非常简单,请读者自己试着证明之.

为慎重起见,我们写出庞加莱群李代数的结构. 庞加莱群的元素像(8.4.13)式那样表示为

$$g(W,u) = \begin{pmatrix} W & u \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{8.4.28}$$

其中$W$是正常洛伦兹变换, $u$ 是四维矢量($x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$, $x_4 = ct$). 若把无限小庞加莱变换表示为

$$\begin{aligned} g(\varepsilon_1,\cdots,\varepsilon_{10}) = 1 &+ \varepsilon_1 A_1 + \varepsilon_2 A_2 + \varepsilon_3 A_3 + \varepsilon_4 B_1 \\ &+ \varepsilon_5 B_2 + \varepsilon_6 B_3 + \varepsilon_7 C_1 + \varepsilon_8 C_2 \\ &+ \varepsilon_9 C_3 + \varepsilon_{10} C_4, \end{aligned} \tag{8.4.29}$$

其中

$$A_1 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix},$$

---

1) $n>2$ 的条件至关重要,$x^1 - c^2t^2 =$ 恒量的变换确实是洛伦兹群的子群,但即使取非齐次变换,亦无法导出射线表示与矢量表示的等价性.

$$A_3 = \begin{bmatrix} \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix},$$

$$B_1 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \quad B_2 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix},$$

$$B_3 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix},$$

$$C_1 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \quad C_2 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix},$$

$$C_3 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \quad C_4 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix},$$

则可以得到

$$[A_1, A_2] = A_3, [A_2, A_3] = A_1, [A_3, A_1] = A_2, \tag{8.4.30}$$

$$[B_1, B_2] = -A_3, [B_2, B_3] = -A_1, [B_3, B_1] = -A_2, \tag{8.4.31}$$

$$\left.\begin{aligned} &[A_1, B_2] = B_3, [A_1, B_3] = -B_2, [A_2, B_1] = -B_3, \\ &[A_2, B_3] = B_1, [A_3, B_1] = B_2, [A_3, B_2] = -B_1, \end{aligned}\right\} \tag{8.4.32}$$

$$[A_1, C_2] = C_3, [A_1, C_3] = -C_2, [A_2, C_1] = -C_3,$$
$$[A_2, C_3] = C_1, [A_3, C_1] = C_2, [A_3, C_2] = -C_1, \quad (8.4.33)$$

$$[B_1, C_1] = C_4, [B_2, C_2] = C_4, [B_3, C_3] = C_4,$$
$$[B_1, C_4] = C_1, [B_2, C_4] = C_2, [B_3, C_4] = C_3, \quad (8.4.34)$$

其它所有对易子均为零.(8.4.30)式与(8.4.18)式右边的符号不同，是坐标系变换的结果，代数的结构并无变化。因为(8.4.32)与(8.4.33)两式的代数具有完全相同的形式，所以可以原封不动地应用$I_3^3$的证明。

然而，我们已经学过，量子力学所使用的矢量空间是被称为希尔伯特空间$H$的线性函数空间。希尔伯特空间的严格定义和各种性质的数学处理留待第六部分第十六章，在此只做直观说明。另外，关于量子力学状态为什么必须用矢量来表示，其信息理论方面的意义将放在第七部分第二十章讨论。

目前我们所关心的是，用作用于希尔伯特空间中矢量上的幺正算符来表示三维欧几里得空间中使直角坐标系$\Sigma$做平行移动或旋转变换的各种群。也就是说，使群$G$的任意元素$g$与作用于$H$的元$\psi$上的幺正算符$\hat{U}(g)$相对应。用式子写出来，就是求出满足

$$\psi \to \psi' = \hat{U}(g)\psi$$
$$(\psi', \psi') = (\hat{U}\psi, \hat{U}\psi) = (\psi, \psi) = 1$$
$$g_1, g_2 \in G \Longrightarrow \hat{U}(g_1)\hat{U}(g_2) = \hat{U}(g_1 g_2)$$

的$\hat{U}(g)$.这里需要注意的是，量子力学中所使用的希尔伯特空间始终是为了描述物理系统的状态而想出来的办法，因此希望它尽可能全面和方便，只要能满足公理系统(参看第六部分第十六章)，希尔伯特空间的元是什么样的矢量都可以。它既可以是三维欧几里得空间中坐标的函数$\psi(x_1, x_2, x_3)$，也可以是二维复空间中的二分量分量。即使对函数$\psi$，亦未必要求它在各点连续和可微.前面曾见到过(§ 2.4)，我们已经采用了阶梯势中那样的不连续函数.在有限个或可计数的点上的不连续性是不会有问题的。积分或其逆运算(微分)都可以无障碍地扩展到这类函数。凡是积分就用勒贝格(Lebesque)积分，凡连续就用绝对连续，便可以实现这种扩展。

也许会稍感奇怪，$\psi$ 在无数点没有定义，不可微的点当然也有无数多，然而，只要这种点的勒贝格测度为零，就全然无妨。这样，不冲破上述数学方法的框架，就不可能充分开动我们的物理思想。下面将叙述一个有说服力的例子，即，有关轨道角动量为什么只能是 $\hbar$ 的整数倍的问题。

首先，以三维空间的坐标为自变量，处处连续且多次可微的复函数 $\psi(x_1,x_2,x_3)$ 构成希尔伯特空间，试求其中平行移动群和旋转群的局域矢量表示。为此，可以看一看，当坐标系平行移动时，简单的实函数 $f(x_1)(x_1\in\mathbf{R})$ 如何变换。

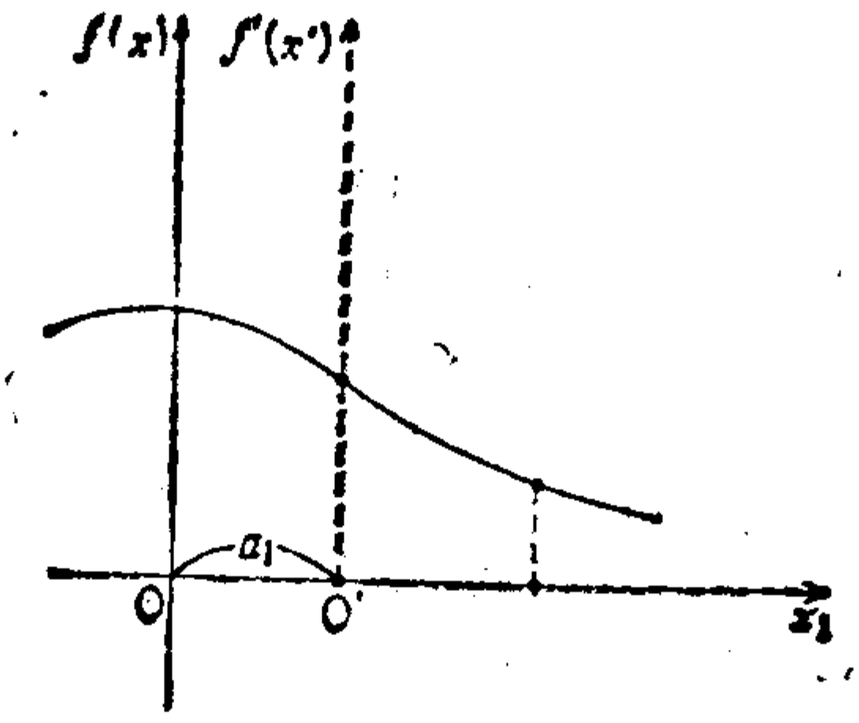



图 8.1

当把坐标系的原点仅移动 $a_1$ 时，若把变量和函数分别写为 $x_1'$ 和 $f'(x_1')$，则由图 8.1 可知

$$f'(x_1')=f(x_1-a_1).$$

即使是复函数，对实部和虚部亦可照样进行上述讨论，故有

$$\psi(x)\to\psi'(x')=\psi(x-a),\text{当 } x\to x'=x+a.\tag{8.4.35}$$

对于坐标系旋转，可以类似写出

$$\psi(x)\to\psi'(x')=\psi(R^{-1}x),\text{当 } x\to x'=Rx.\tag{8.4.36}$$

因此，对(8.4.35)做泰勒展开，可以把坐标系沿 $x_1$ 轴方向的微小平行移动变换表示为

$$\psi(x_1,x_2,x_3)\to\psi(x_1-a_1,x_2,x_3)$$

$$= \left(1 - a_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{a_1^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{a_1^3}{3!}\frac{\partial^3}{\partial x_1^3} + \cdots\right)$$

$$\times \psi(x_1, x_2, x_3). \tag{8.4.37}$$

若在其中采用定义

$$\exp\left[-a_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right] \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-a_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right)^n, \tag{8.4.38}$$

则可把(8.4.37)式简洁地写成

$$\psi(x) \to \exp\left[-a_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right]\psi(x) = \exp\left[-ia_1\left(-i\frac{\partial}{\partial x_1}\right)\right]$$

$$\times \psi(x) = \exp[-ia_1\hat{A}_1]\psi(x). \tag{8.4.39}$$

进而，令

$$\hat{U}(a_1) \equiv \exp[-ia_1\hat{A}_1], \tag{8.4.40}$$

则 $\hat{U}(a_1)$ 应该是幺正算符，并且显然有

$$\hat{U}(a_1)\hat{U}(a_1') = \hat{U}(a_1 + a_1'), \tag{8.4.41}$$

因此，根据 §8.2 所述的斯托恩定理，$\hat{A}_1$ 是自共轭算符. 不采用斯托恩定理，而直接证明 $\hat{A}_1 = -i(\partial/\partial x_1)$ 算符在希尔伯特空间中是自共轭的，这尚待第六部分第十六章进行.无需再次说明，$\hat{p}_1 \equiv -i(\partial/\partial x_1)$ 叫动量算符.动量算符的定义中加了符号“—”的原因是，坐标系平行移动 $a$ 与所有空间点平行移动 $-a$ 是等价的. 并且，就该群而言，$\hat{A}_j(j = 1,2,3)$ 在代数上是对易的，即使作为微商算符，亦可直接验证

$$(\hat{p}_1\hat{p}_2 - \hat{p}_2\hat{p}_1)\psi = 0, (\hat{p}_2\hat{p}_3 - \hat{p}_3\hat{p}_2)\psi = 0, (\hat{p}_3\hat{p}_1 - \hat{p}_1\hat{p}_3)\psi = 0. \tag{8.4.42}$$

接着，让坐标系绕 $x_1$ 轴做微小旋转，并就这种变换进行同样的讨论. 若用 $a_1$ 表示微小角度，则有

$$\psi(x_1, x_2, x_3) \to \psi(x_1, x_2 + a_1x_3 + O(a_1^2), -a_1x_2 + x_3 + O(a_1^2))$$

$$= \left(1 - a_1\left(x_2\frac{\partial}{\partial x_3} - x_3\frac{\partial}{\partial x_2}\right) + \cdots\right)\psi(x_1, x_2, x_3),$$

所以，如果令

$$\hat{A}_1 \equiv -i\left(x_2\frac{\partial}{\partial x_3} - x_3\frac{\partial}{\partial x_2}\right), \tag{8.4.43}$$

那么，$\hat{A}_1$ 应该是自共轭算符。同样，根据绕 $x_2$ 轴和绕 $x_3$ 轴的微小旋转，可以得到

$$\hat{A}_2 \equiv -i\left(x_3\frac{\partial}{\partial x_1} - x_1\frac{\partial}{\partial x_3}\right), \tag{8.4.44}$$

$$\hat{A}_3 \equiv -i\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right). \tag{8.4.45}$$

$\hat{A}_2$ 和 $\hat{A}_3$ 也应该是自共轭算符。不过，与动量的情形相同，以上所定义 $\hat{A}_j(j=1,2,3)$ 是空间各点旋转时生成运动的微小算符，因此并非与坐标系旋转有关的(8.4.5)式。它们应该满足

$$[\hat{A}_1,\hat{A}_2] = i\hat{A}_3 \tag{8.4.46}$$

(把(8.4.5)式中的 $\hat{A}_j$ 换成 $-\hat{A}_j$)。

自(8.4.43)式之后，多次使用“应该”一词，其原因在于，为了说明这些包含微商在内的算符的自共轭性质，在使这些算符作用具有意义的希尔伯特空间中矢量 $\psi(x_1,x_2,x_3)$ 的集合[1]确定之后，有必要相当仔细地验证希尔伯特空间的条件与合理性。正像已经学过的那样，把上面的 $\{\hat{A}_j\}$ 分别乘以 $\hbar$ 之后写成 $\{L_j\}$，称为**轨道角动量算符**。

让我们用李代数的有限阶方阵表示来说明，轨道角动量算符 $\hat{L}_j(j=1,2,3)$ 是希尔伯特空间中的自共轭算符，也就是说，它是可观测量，进而可以验证，其本征值即观测值是 $\hbar$ 的整数倍。换句话说，用有限阶方阵 $\rho(\hat{A}_j)$ 来表示(8.4.46)式中的代数关系

$$[\rho(\hat{A}_1),\rho(\hat{A}_2)] = i\rho(\hat{A}_3),[\rho(\hat{A}_2),\rho(\hat{A}_3)] = i\rho(\hat{A}_1),$$

$$[\rho(\hat{A}_3),\rho(\hat{A}_1)] = i\rho(\hat{A}_2). \tag{8.4.47}$$

从中可以看出对应 $\hat{A}_j \to \rho(\hat{A}_j)$。当然，这里隐含着，存在维数与矩阵 $\rho(\hat{A}_j)$ 相等的复矢量空间 $V$。不过矢量的分量可以随意分解。另外，我们事先不确定表示的维数，只非常模糊地假定，其代价是空

---

1) 这叫做 $\hat{A}_j$ 的定义域。详见本讲座第四卷《量子力学》(II)第六部分第十六章。

间$V$很抽象，而有利之处是，我们可以利用相当熟悉的有限矩阵。以后会明白，实际上，该矢量空间是量子力学表示希尔伯特空间的子空间。

首先，令

$$A_+ \equiv \rho(\hat{A}_1) + i\rho(\hat{A}_2), A_- \equiv \rho(\hat{A}_1) - i\rho(\hat{A}_2), H \equiv \rho(\hat{A}_3),$$

从(8.4.46)式可以得到[1]

$$[H, A_+] = A_+, [H, A_-] = -A_-, [A_+, A_-] = 2H. \tag{8.4.48}$$

然后，为了求出对角化$H$后的对角元素，我们建立$H$的本征值方程

$$H\phi_\lambda = \lambda\phi_\lambda. \tag{8.4.49}$$

关于$H$，我们仅仅知道关系式(8.4.48)，所以，不能说本征值$\lambda$为实数。不过，由于是在有限维空间$V$中来考虑的，故本征值和本征矢的个数必然有限，记住这一点，从(8.4.48)式就可以证实

$$HA_+\phi_\lambda = (\lambda + 1)A_+\phi_\lambda, HA_-\phi_\lambda = (\lambda - 1)A_-\phi_\lambda. \tag{8.4.50}$$

这样一来，显然由$H$的一个本征矢就可以相继产生$H$的不同本征矢，只是其系数尚未确定：于是把$H$本征值中实部最大的记为$l$，定义一系列 $\phi^l_m(m = l, l-1, \cdots)$：

$$\phi^l_{l-1} \equiv A_-\phi^l_l, \phi^l_{l-2} \equiv A_-\phi^l_{l-1} = A_-A_-\phi^l, \cdots. \tag{8.4.51}$$

若取 $\phi_\lambda \equiv \phi^l_l$，则比(8.4.50)式更清楚的是

$$H\phi^l_m = m\phi^l_m \tag{8.4.52}$$

及

$$HA_+\phi^l_m = (m+1)A_+\phi^l_m. \tag{8.4.53}$$

因此，$A_+\phi^l_m$必须与$\phi^l_{m+1}$成正比。经计算，该比例系数为

---

1) (8.4.48) 式是用表示来描述的，但原先的代数照样成立. 若把[,]看成代数中的积，则(8.4.48)式中的第一、二两式就成了“本征值方程”. (8.4.48) 式又叫韦耳标准方程，用来研究半单紧李代数的结构非常方便. 请注意结构常数成了$H$的“本征值”(详见[山内，杉浦] p.119).

$$A_+\phi_m^l = (l-m)(l+m+1)\phi_{m+1}^l. \qquad (8.4.54)$$

按照 $l$ 的定义，$H$ 不存在本征值$(l+1)$及其对应的本征矢 $\phi_{l+1}^l$，(8.4.54)式确实说明了这一点．可以用归纳法证明(8.4.54)式，请读者试证之．因表示空间 $V$ 的维数有限，故 $H$ 的不同本征函数的个数等于 $V$ 的维数 $k$．也就是说，$\phi_l^l, \phi_{l-1}^l, \cdots, \phi_{l-(k-1)}^l$ 都不会等于零，而 $\phi_{l-k}^l$ 必须为零．在(8.4.54)式中令 $m = l-k$，则左边为零，而右边的 $\phi_{l(k-1)}^l$ 不等于零，故

$$(l-(l-k))(l+(l-k)+1)=0$$

即，必须有

$$k(2l+1-k)=0.$$

因此，本征值 $l$ 显然为

$$l = \frac{1}{2}(k-1)(k=1,2,\cdots). \qquad (8.4.55)$$

因为 $H$ 的本征值个数等于 $V$ 的维数 $k = 2l+1$，所以，若最大本征值为 $l$，则 $H$ 的本征值只能是

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

如果把 $H$ 的本征矢取作 $V$ 的基矢，那么，当然可以根据(8.4.49)和(8.4.50)两式，直接由 $H$ 的矩阵元写出 $A_+$ 和 $A_-$ 的矩阵元．不过，在上面的讨论中，为避免不必要的麻烦，用的是未归一化的矢量 $\phi_m^l$，而为了今后实用，我们将用归一化基矢重写(8.4.54)式．所谓归一化，就是把上述各个 $\phi_m^l$ 分别乘上一个正实数，以使其内积为1，把这样做之后所得的 $H$ 本征矢写成 $\phi_m^{l'}$．于是，有

$$A_+\phi_m^{l'} = a_m\phi_{m+1}^{l'}, \qquad (8.4.56)$$

$$A_-\phi_m^{l'} = b_m\phi_{m-1}^{l'}. \qquad (8.4.57)$$

显然，$a_m \neq (l-m)(l+m+1)$，而 $a_m$ 却为正实数．若加上符号“†”来表示 $A_+$ 的厄米共轭，则因 $A_+^\dagger = A_-$，$A_-^\dagger = A_+$，故有

$$(A_+\phi_m^{l'}, A_+\phi_m^{l'}) = (\phi_m^{l'}, A_-A_+\phi_m^{l'}) = a_m b_{m+1},$$

$$(a_m\phi_{m+1}^{l'}, a_m\phi_{m+1}^{l'}) = (a_m)^2.$$

所以

$$a_m = b_{m+1}, \qquad (8.4.58)$$

而

$$A_+\phi_{m-1}^{l'} = \frac{1}{b_m}(A_-A_+ + 2H)\phi_m^{l'}$$

$$= \frac{1}{b_m}(a_m b_{m+1} + 2m)\phi_m^{l'},$$

因此

$$a_{m-1}b_m = a_m b_{m+1} + 2m. \tag{8.4.59}$$

若考虑到前面所讨论的 $b_{-l} = 0$，则从(8.4.58)和(8.4.59)两式可以得到

$$a_m^2 = b_{m+1}^2 = (l + m + 1)(l - m)$$

因此，有

$$a_m = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}, \tag{8.4.60}$$

$$b_m = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}. \tag{8.4.61}$$

所以，取归一化后的 $\phi_m^{l'}$ 为基矢，可以把 $H$、$A_+$ 和 $A_-$ 写成

$$H = \begin{bmatrix} l & 0 & \cdots\cdots & 0 & 0 \\ 0 & l-1 & \cdots\cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots\cdots & -l+1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots\cdots & 0 & -l \end{bmatrix},$$

$$A_+ = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2l} & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{(2l-1)2} & \cdots\cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2l} \\ 0 & 0 & \cdots\cdots & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$A_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \sqrt{2l} & 0 & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & \sqrt{2(2l-1)} & 0 & \cdots & \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ & & & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \sqrt{2l} & 0 \end{bmatrix}.$$

由此不难写出 $\rho(\hat{A}_1)$、$\rho(\hat{A}_2)$ 和 $\rho(\hat{A}_3)$。这时，表示空间 $V$ 的维数由 $l$ 决定，为 $2l+1$，为了明确地标明这一点，以后我们将写成 $\rho_l(\hat{A}_i)$ 和 $V^{2l+1}$。以 $l=0$、$\frac{1}{2}$ 为例，它们是

| $l$ | $V^{2l+1}$的维数 | $\rho_l(\hat{A}_1)$ | $\rho_l(\hat{A}_2)$ | $\rho_l(\hat{A}_3)$ |
|---|---|---|---|---|
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| $\frac{1}{2}$ | 2 | $\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ | $\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ | $\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ |
| 1 | 3 | $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ | $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}$ | $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$. |

由这些表示可以预料，$\{\rho_{1/2}(\hat{A}_i)\}$ 和 $\{\rho_1(\hat{A}_i)\}$ 分别与自旋和轨道角动量有关，为了直接了当地体现物理意义，有必要进一步深入地讨论一下表示空间 $V^{2l+1}$。我们将在下一节来谈这个问题.由目前的讨论可以直接得到另一个重要关系式

$$((\rho_l(\hat{A}_1))^2+(\rho_l(\hat{A}_2))^2+(\rho_l(\hat{A}_3))^2)\psi_m^l = l(l+1)\psi_m^l$$
$$(m=l,l-1,\cdots,-l). \tag{8.4.62}$$

由于证明简单，故读者不妨一试.

通过以上说明得知，角动量具有离散本征值这种量子力学性质，这不是用“量子条件”，而是从旋转群的代数自然地推出来了.量子力学的本质到底隐藏于何处？在于把希尔伯特空间用作李代数的表示。也就是说，在用希尔伯特空间描述力学系的状态时，正是量子力学的本质发挥着作用.关于这一点，第六部分第十六章还

要讨论。

## §8.5 轨道角动量和自旋

如果所考虑的力学系的哈密顿量相对于空间旋转是不变的，那么，旋转群的李代数就由角动量构成，作为其表示的希尔伯特空间的维数成了好量子数．然而，作为结果，却有可能出现具有 $\hbar/2$ 量子的角动量。

另一方面，我们在第四章已详细讨论过，与质点的经典力学角动量相对应的轨道角动量只能有 $\hbar$ 整数倍的本征值．那么，$\hbar/2$ 量子的角动量有什么含义？其表示空间与轨道角动量的表示空间又有何关系？

为了考虑这个问题，我们去掉不必要的严格数学条件，在物理学所采用的尽可能宽的框架内再次研究一下，轨道角动量的本征值是否本来就只能取 $\hbar$ 的整数倍．首先，采用复函数表示力学系的状态，其内积定义中所使用的积分为勒贝格积分．仿照 §5.2b，用球坐标(为书写简单，取 $\hbar=1$ 的单位制)将轨道角动量表示为

$$\hat{L}_x = i\left(\sin\varphi\,\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{8.5.1}$$

$$\hat{L}_y = i\left(-\cos\varphi\,\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\,\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{8.5.2}$$

$$\hat{L}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{8.5.3}$$

以前多次提到过，在量子力学中，采用自共轭算符表示物理量．为了确认自共轭性，必须决定 $\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$ 所作用的函数的范围，即 $\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$ 的定义域。

首先，我们来研究一下，能否就最简单的 $\hat{L}_z$ 做出这样的定义，这时，有下述可能：

$$\text{作用：}\ \hat{L}_z f(\theta,\varphi) = -i\,\frac{\partial f(\theta,\varphi)}{\partial\varphi}, \tag{8.5.4}$$

定义域: $D^{(\delta)}(\hat{L}_z) = \{f(\theta,\varphi): f(\theta,2\pi)$

$$= \exp(2i\delta\pi)f(0,0), \theta \in [0,2\pi],$$

关于 $\varphi$ 绝对连续, $\dfrac{\partial f}{\partial \varphi} \in L^2(\theta,2\pi)\}$. (8.5.5)

其中 $\delta$ 是[0,1]之中任意实常数.按照这样的定义,即使 $\delta \neq 0$, $\hat{L}_z$ 也是自共轭算符.其详细证明将放到第六部分 §16.3b,此处不再赘述,不过,从物理上来考虑,该定义域的设定决非不自然,虽然乍一看边界条件似乎令人感到奇怪,但是,取 $f^*f$ 时,会消掉相位因子,而且即使 $\varphi = 0$ 处的微商无法定义,也对我们的运算毫无影响(不管在零测度的点集合处会出现什么!)

其次,我们来研究一下 $\hat{L}_x$ 的自共轭性质,其作用由(8.5.1)式给出,定义域 $D^{(\delta)}(\hat{L}_x)$ 包含着与 $D^{(\delta)}(\hat{L}_z)$ 共同的边界条件

$$f(\theta,2\pi) = \exp(2i\delta\pi)f(\theta,0). \quad (8.5.6)$$

也就是说,对于 $f,g \in D^{(\delta)}(\hat{L}_x)$,验证

$$(g,\hat{L}_x f) = (\hat{L}_x g, f) \quad (8.5.7)$$

是否恒成立. 经过简单的分部积分,可以得到

$$(g,\hat{L}_x f) = (\hat{L}_x g, f) + i\int_0^\pi \cos\theta[f^* g\cos\varphi]_0^{2\pi}d\theta, \quad (8.5.8)$$

因 $f(\theta,\varphi)$ 和 $g(\theta,\varphi)$ 均满足条件(8.5.4),故上式右边第二项消失.同样,尚能定义出 $D^{(\delta)}(\hat{L}_y)$ 而使 $\hat{L}_y$ 是自共轭的.

因此,若重新选取定义域 $D = D^{(\delta)}(\hat{L}_x) \cap D^{(\delta)}(\hat{L}_y) \cap D^{(\delta)}(\hat{L}_z)$,那么, 即使 $\delta \neq 0$, $D$ 亦是稠密的,并且 $\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$ 均为自共轭.所谓稠密,其含义将在后面 (第六部分第十六章)详细说明,这里,把 $f \in D$ 理解为可以用 $\hat{L}_z$ 的本征函数来展开就行了. $\hat{L}_z$ 的本征值 $\mu$ 和本征函数 $f_\mu^\lambda(\theta,\varphi)$ 可以直接求出:

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}f_\mu^\lambda(\theta,\varphi) = \mu f_\mu^\lambda(\theta,\varphi), \quad (8.5.9)$$

$$f_\mu^\lambda(\theta,\varphi) = (2\pi)^{-1/2}\exp(i\mu\varphi)\Theta_\mu^\lambda(\theta), \quad (8.5.10)$$

其中 $\Theta_\mu^\lambda(\theta)$ 归一化为

$$\int_0^\pi \Theta_\mu^{\lambda *}(\theta)\Theta_\mu^\lambda(\theta)\sin\theta d\theta = 1, \quad (8.5.11)$$

从边界条件(8.5.4) 可以得到 $\mu = \delta + m(m = 0, \pm 1, \pm 2\cdots)$.

这样,如果取 $\delta = \frac{1}{2}$, 那么,$\hat{L}_z$ 就具有半整数的本征值!

量子力学中,物理量是线性自共轭算符,若仅需满足这一个要求,则上面所定义的轨道角动量算符就可以具有半整数本征值.但是, 尚无根据赋于可在 [0, 1] 区间内取任意值的 $\delta$ 一个特定值 $\frac{1}{2}$. 实际上,若 $\delta \neq 0$,则会出现如下几个难点:

(1) 能让 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的本征值为整数而与 $\delta$ 无关. 因此, 若 $\delta \neq 0$,则无法用幺正变换把 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 等过渡到 $\hat{L}_z$.

(2) 无法找到下式中 $f$ 的定义域:

$$\boldsymbol{L}^2 f = \hat{L}_x^2 f + \hat{L}_y^2 f + \hat{L}_z^2 f, f \in \mathbf{D}(\boldsymbol{L}^2) \subset \mathbf{D}. \qquad (8.5.12)$$

(3)亦无法找到下式中 $f$ 的定义域:

$$\hat{L}_x L_y f - \hat{L}_y \hat{L}_x f = i\hat{L}_z f, f \in \mathbf{D}(\boldsymbol{L}^2) \subset \mathbf{D}. \qquad (8.5.13)$$

而如果取 $\delta = 0$,则上述三个难点一起消失, 问题就可以解决.由于其证明需要用到第六部第十六章的知识,故此只好忍痛割爱(参看 [Winter]).

这样总算弄清楚了, 轨道角动量具有整数本征值. 这时, 如 §5.2 中详细阐述的那样,本征函数 $\psi_m^l(x, y, z)$ 为球函数 $\boldsymbol{Y}_{lm}(\theta, \varphi)$, 那么,半整数本征值在量子力学中是否就不再出现了呢?

从上一章连续读下来的读者马上会联想到相对论, 如果用四维闵可夫斯基空间的洛伦兹变换代替三维欧几里得空间的旋转群,更正确一些来说,用正常洛伦兹变换来代替,那么,会出现本征值为半整数的角动量. 这样使我们想到,如果用连续群 $SL(2, \mathbf{C})$ 来代替正常洛伦兹变换群,那么,不用洛伦兹群,也就是说,在非相对论量子力学中,能否得出本征值为半整数的角动量? 下面,我们就来考虑这个问题.

用一个复函数 $\psi(x, y, z)$ 表示力学系的状态,而把三维欧几里得空间中旋转群 $SO(3)$ 的李代数表示为包含有对 $\psi$ 微商的算符. 就是角动量, 作为其最简单的推广, 力学系的状态可以用两个一

组的复函数 $\phi(x,y,z)$ 和 $\varphi(x,y,z)$ 来表示，剩下要做的与前面进行的讨论类似. 让空间中的一点 $(x, y, z)$ 与两个以上的数值相对应，在物理学中并非过于勉强. 例如，在经典电磁理论中，对应于空间中的一点 $(x, y, z)$，就有静电场的三个一组实函数 $E_x(x,y,z)$、$E_y(x,y,z)$、$E_z(x,y,z)$.

为了尽可能自然地推广，分别像以前所做的那样来取 $\phi$ 和 $\varphi$. 即，令 $\phi$、$\varphi \in \mathbf{H}$. 这样，当空间坐标系 $\Sigma$ 旋转 $R$ 时，它们的变换是

$$\begin{bmatrix}\phi(x)\\ \varphi(x)\end{bmatrix}\xrightarrow{R}\begin{bmatrix}\phi'(x')\\ \varphi'(x')\end{bmatrix}=U(R)\begin{bmatrix}\phi(R^{-1}x)\\ \varphi(R^{-1}x)\end{bmatrix}. \quad (8.5.14)$$

$U(R)$ 是由 $R$ 决定的两行两列的复矩阵. 如前所述，$R$ 是具有三个参数的李群 $SO(3)$ 元素的表示，因此，$U(R)$ 也必须是具有三个参数的某一李群的元素. 好在若在满足

$$\phi'\phi' + \varphi'\varphi' = \phi\phi + \varphi\varphi \quad (8.5.15)$$

的两行两列复矩阵之中选择行列式值为 1 的特殊矩阵，则它们全体构成具有三个参数的李群. 称之为 $SU(2)$ 群. 实际上，与 §8.4 中所述一样，在 $SU(2)$ 中单位元素附近，即，从恒等变换稍稍离开一点，有

$$\begin{bmatrix}1+i\varepsilon_3 & \varepsilon_2+i\varepsilon_1\\ -\varepsilon_2+i\varepsilon_1 & 1-i\varepsilon_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}$$
$$+i\varepsilon_1\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}+i\varepsilon_2\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix}+i\varepsilon_3\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}. \quad (8.5.16)$$

因此，用泡利矩阵

$$\sigma_1=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix},\ \sigma_2=\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix},\ \sigma_3=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix} \quad (8.5.17)$$

立刻可以求出该李代数的结构

$$[\sigma_1,\sigma_2]=2i\sigma_3,[\sigma_2,\sigma_3]=2i\sigma_1,[\sigma_3,\sigma_1]=2i\sigma_2. \quad (8.5.18)$$

进而令 $s_1=\sigma_1/2$，$s_2=\sigma_2/2$，$s_3=\sigma_3/2$，则 $\{s_j\}$ 显然满足与(8.4.27)式完全相同的对易关系. 这一点表明，两个李群 $SO(3)$ 和 $SU(2)$ 的局域结构，即李代数 $so(3)$ 和 $su(2)$ 完全一样. 称之为**局域同构**. 因为 $s_3$ 的本征值是 1/2 和 −1/2，所以我们得到了角动量在二维空间

中的表示。

确实，我们未以洛伦兹变换为媒介，而通过对三维欧几里得空间的旋转群进行“量子力学处理”就能直接得到自旋为$\frac{1}{2}$的粒子形象。那么，这儿引入的二分量复矢量$(\phi,\varphi)$与§7.2 中所定义的旋量 $(\xi_1, \xi_2)$ 是否相同？要回答这个问题，可以比较一下 $SU(2)$ 和 $SO(3)$的结构。本节引入 $SU(2)$ 的动机是，它与旋转群 $SO(3)$ 具有相同数目(三个)的实参数。与此对应，$SL(2,\mathbf{C})$ 具有 $2\times 4-2=6$ 个实参数，它与正常洛伦兹群所具有的实参数数目一样。但是，$SL(2,\mathbf{C})$所具有的六个实参数并不是以分散形式出现的，从定义本身可知，它仍包含于三个复数之中。因此，可以把$SL(2,\mathbf{C})$叫做复李群。

所以，当涉及角动量之类物理量时，重要的不是李群本身，而是由它导出的李代数，至此，我们已多次谈到这一点。那么，两个李代数 $\mathfrak{su}(2)$ 和 $\mathfrak{su}(2,\mathbf{C})$ 关系如何？显然，前者是实数域上的李代数，而后者是复数域上的李代数，但 $\mathfrak{sl}(2\mathbf{C})$ 的任意元素 $Z$ 都可以用 $\mathfrak{su}(2)$ 的两个元素 $X$ 和 $Y$ 唯一地表示为

$$Z = X + iY.$$

请读者自己证明之。这样一来，可以予料，$\mathfrak{sl}(2,\mathbf{C})$ 的表示的等价性和不可约分解的条件与 $\mathfrak{su}(2)$ 的完全相同。这确实是可以证明的(参看[山内、杉浦] p.153)。

让坐标系 $\Sigma$ 做微小旋转 $R$，以与 $U(R)$ 共同的参数来表示(8.5.14)式。采用由(8.4.23)、(8.4.24)和(8.4.25)诸式所定义的 $\hat{A}_j(j=1,2,3)$，及 $\varepsilon_j \ll 1$，便有

$$\begin{bmatrix}\psi'(x')\\ \varphi'(x')\end{bmatrix} = \left(1+i\sum_{j=1}^{3}\varepsilon_j\hat{s}_j\right)\begin{bmatrix}\left(1-i\sum_{i=1}^{3}\varepsilon_i\hat{A}_i\right)\psi(x)\\ \left(1-i\sum_{i=1}^{3}\varepsilon_i\hat{A}_i\right)\varphi(x)\end{bmatrix}$$

$$= \left(1+i\sum_{j=1}^{3}\varepsilon_j(\hat{s}_j+\hat{L}_j)\right)\begin{bmatrix}\psi(x)\\ \varphi(x)\end{bmatrix}, \qquad (8.5.19)$$

其中，采用了 $-\hat{A}_i = \hat{L}_i$(参看 §10.2b(ii))。(8.5.19) 式表明，一个粒子的总角动量为

$$\hat{J}_i = \hat{s}_i + \hat{L}_i, (j = 1,2,3)。 \tag{8.5.20}$$

而 $\hat{s}_i$ 是两行两列矩阵，$\hat{L}_i$ 是含有微商的某一算符，这样原封不动，难以解释明白。当轨道角动量具有最大本征值 $l$ 时，可以用 $(2l+1)$ 个本征函数 $\phi_m^l(x)$ 来展开 $\psi$ 和 $\varphi$。即

$$\psi(x) = \sum_{m=-l}^{l} \lambda_m \phi_m^l(x), \varphi(x) = \sum_{m=-l}^{l} \mu_m \phi_m^l(x)。 \tag{8.5.21}$$

于是，$\psi$ 和 $\varphi$ 分别用 $V^{2l+1}$ 中的矢量 $(\lambda_l, \lambda_{l-1}, \cdots, \lambda_{-l})$ 和 $(\mu_l, \mu_{l-1}, \cdots, \mu_{-l})$充分地表示出来了。另一方面，$\hat{L}_i$ 在该空间 $V^{2l+1}$ 中的表示 $\rho_l(\hat{L}_i)$ 是 $(2l+1)$ 阶方阵。因此，用

$$\hat{s}_j = \begin{bmatrix} s_{11} s_{12} \\ s_{21} s_{22} \end{bmatrix} \tag{8.5.22}$$

构成下面的 $2(2l+1)$ 阶方阵：

$$\begin{bmatrix} s_{11}\rho_l(\hat{L}_i) & s_{12}\rho_l(\hat{L}_i) \\ s_{21}\rho_l(\hat{L}_i) & s_{22}\rho_l(\hat{L}_i) \end{bmatrix}。 \tag{8.5.23}$$

这叫做 $\hat{s}_i$ 和 $\rho_l$ 的**克朗内克积**或**张量积**，通常写作 $\hat{s}_i \otimes \rho_l$。用这种表达式，不难确认，把 $\hat{L}_i$ 的表示 $\rho_l(\hat{L}_i)$ 取为矩阵时，有

$$(\hat{s}_i + \hat{L}_i)\begin{bmatrix} \psi \\ \varphi \end{bmatrix} = \hat{s}_i \otimes \rho_l(\hat{L}_i) \begin{bmatrix} \lambda_l \\ \lambda_{l-1} \\ \vdots \\ \lambda_{-l} \\ \mu_l \\ \mu_{l-1} \\ \vdots \\ \mu_{-l} \end{bmatrix}。 \tag{8.5.24}$$

通过以上分析可知，当力学系的状态用两个复函数 $\psi$ 和 $\varphi$ 的组合表示时，若体系的哈密顿量对于空间旋转不变，则 $\hat{J}_i = \hat{s}_i + \hat{L}_i (j = 1,2,3)$ 是守恒量。特别是当轨道角动量为零，即 $l = 0$ 时，在(8.5.24)式中，有

$$\hat{s}_j \otimes \rho_0(\hat{L}_j) = \hat{s}_j, \tag{8.5.25}$$

$J_3 = s_3$ 具有本征值 1/2 和 −1/2. 这对应于经典物理学中的自转，被称为自旋.

本来，在量子力学中，之所以引入轨道角动量的本征态，是为了说明原子光谱，以及描述原子内电子的运动状态. 而且，它不仅可以说明状态的分类，还能从理论上说明决定光发射和吸收的状态间跃迁的规律. 关于这一点，在§8.6 中还将要阐述，然而随着原子光谱实验的进一步研究，只用轨道角动量的量子数就不能充分描述电子的状态了，对应于轨道角动量的各本征态，必须有两个状态. 1925年 G.E. 乌伦贝克和 S.A. 高茨密特用电子因自旋而具有两个本征态的模型说明了这一点，但却难以对不具有延展的点粒子的自转予以公式化. 1927 年，W. 泡利用本节叙述过的旋转群的李代数的最小不可约表示，在非相对论范围内解决了这个困难. 但并不能就此从物理上明确解释电子的自旋. 如 §7.6 所示，对于电子磁矩和托马斯因子的解释，一直到 P.A.M. 狄拉克对电子做了相对论处理才得以完成(1928年). 由于用四个复函数表示电子的状态，因此，旋转群李代数的表示是可约的. 这之所以必要，是因为，要描述电子的状态，除了自旋以外，还必须指定能量的正负.

那么，用三个一组复函数 $\psi$、$\varphi$、$\chi$ 来表示状态，又将如何呢? 这时容易想到，在使实数值 $\bar{\psi}\psi + \bar{\varphi}\varphi + \bar{\chi}\chi$ 不变的线性变换之中，行列式值为 1 的特殊矩阵全体 $SU(3)$为变换群. 由于这个群是半单紧李群，因而上节和本节所述的对 $SU(2)$ 的处理当然可以照用不误，该李代数的结构及其矢量表示亦可同样求出. 但是，这个群却有八个参数，不可能与旋转群 $SO(3)$ 直接相关. 不过，$SU(3)$ 的李代数 $su(3)$ 包含两个能够相互对易的元素，它们的本征值可以用于某些模型，它们分别对应于自旋之外的基本粒子量子数——同位旋和超荷. (参看本讲座第十卷《基本粒子理论》第八章，其中具体地给出了 $su(3)$ 代数及它的不同维的一些表示.)

如上所述，重要的，也可以说是决定性的一点是，两个李群 $SO(3)$ 和 $SU(2)$ 各自的李代数完全一致. 也就是说，原来两个群的局域性质相同. 以此足以理解非相对论量子力学框架中轨道角动

量和自旋的关系。不过，读者当然也会对 $SO(3)$ 和 $SU(2)$ 的大范围性质的不同发生兴趣。这不只是有数学上的趣味，而且，当空间坐标系进行有限旋转时，它还涉及到自旋将如何变化这样一个技术问题。故我们在此来探讨这个问题以结束这一节。

说起来，极为简单，若令

$$H=\left\{\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix},\begin{bmatrix}-1&0\\0&1\end{bmatrix}\right\}, \tag{8.5.26}$$

则 $H$ 显然是 $SU(2)$ 的不变子群。因此，用 $H$ 去除 $SU(2)$ 就可以构成商群 $SU(2)/H$（不变子群和商群的定义见 §8.1）。可以通过后面的证明而得到

$$SO(3)\cong SU(2)/H, \tag{8.5.27}$$

其中，$\cong$ 是表示群同构关系的符号。上述关系表明，$SO(3)$ 的任意一个元素都与 $SU(2)$ 的两个元素对应。

首先，定义 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{z}$ 为

$$\boldsymbol{x}\equiv\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{bmatrix},x_1,x_2,x_3\in\mathbf{R};\ \boldsymbol{z}\equiv\begin{bmatrix}z_1\\z_2\end{bmatrix},|z_1|^2+|z_2|^2=1,$$

$$z_1,z_2\in\mathbf{C} \tag{8.5.28}$$

然后，应用泡利矩阵 (8.5.17)，构造 $\boldsymbol{z}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 的对应关系

$$\boldsymbol{z}\to\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}(\bar{\boldsymbol{z}},\sigma_1\boldsymbol{z})\\(\bar{\boldsymbol{z}},\sigma_2\boldsymbol{z})\\(\bar{\boldsymbol{z}},\sigma_3\boldsymbol{z})\end{bmatrix}. \tag{8.5.29}$$

当 $T\in SU(2)$ 时，借助于

$$\boldsymbol{z}\to\boldsymbol{z}'=T\boldsymbol{z}, \tag{8.5.30}$$

可以研究变换

$$\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{x}'=\begin{bmatrix}(\bar{\boldsymbol{z}}',\sigma_1\boldsymbol{z}')\\(\bar{\boldsymbol{z}}',\sigma_2\boldsymbol{z}')\\(\bar{\boldsymbol{z}}',\sigma_3\boldsymbol{z}')\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(\bar{\boldsymbol{z}},T^\dagger\sigma_1T\boldsymbol{z})\\(\bar{\boldsymbol{z}},T^\dagger\sigma_2T\boldsymbol{z})\\(\bar{\boldsymbol{z}},T^\dagger\sigma_3T\boldsymbol{z})\end{bmatrix} \tag{8.5.31}$$

会变成什么形式。为了简单，先用 $\sigma_3$ 来构成 $T$，令

$$T = \exp(i\theta\sigma_3) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^n}{n!}\sigma_3^n = \cos\theta + i(\sin\theta)\sigma_3. \tag{8.5.32}$$

(8.5.30) 式中 $T^\dagger$ 是 $T$ 的厄米共轭. (8.5.31) 式中最后一步用到了 $\sigma_3^2 = 1$. 利用泡利矩阵的性质,经过简单计算,可以得到

$$x' = \begin{bmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta & 0 \\ -\sin 2\theta & \cos 2\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} x. \tag{8.5.33}$$

这是坐标系绕 $x_3$ 轴旋转 $-2\theta$ 的变换. 由此可知, 绕 $x_3$ 轴只旋转 $\theta$ 的变换为

$$T = \exp\left(-i\frac{\theta}{2}\sigma_3\right). \tag{8.5.34}$$

不过,还不限于此. 即使按照

$$-T = -\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\sigma_3\right) \in SU(2), \tag{8.5.35}$$

也可得到完全相同的绕 $x_3$ 轴的旋转. 同样,绕 $x_1$ 和 $x_2$ 轴旋转一个 $\theta$ 角,显然分别为 $SU(2)$ 的

$$\pm\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\sigma_1\right), \pm\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\sigma_2\right).$$

## § 8.6 角动量的合成与分解

在§8.4中也已阐明,由作为旋转群李代数的矢量表示,可以得到量子力学的角动量,但从实用上讲,有必要把角动量的合成和分解公式化. 在说明这个问题之前, 让我们先叙述一下一般李代数 $\mathfrak{G}$ 的表示的等价性和不可约性的定义及其物理意义. 现在,让不同的 $n$ 阶方阵 $\rho$ 和 $\rho'$ 对应于 $\mathfrak{G}$ 的任意一个元素 $\hat{A}$. 如果存在着行列式不为零的某 $n$ 阶矩阵 $P$ 使

$$\rho'(\hat{A}) = P\rho(\hat{A})P^{-1}, \forall \hat{A} \in \mathfrak{G}, \tag{8.6.1}$$

则称 $\rho$ 与 $\rho'$ **等价**. 当表示空间为希尔伯特空间、$P$ 为幺正矩阵时,

称为**幺正等价**. 这样公式化的结果具有不依赖于表示空间基矢取法的性质,这才是有物理意义的.若$U$是$V$的子空间,且 $\rho(\hat{A})U\subset U,\forall\hat{A}\in\mathfrak{G}$,则称$U$为**不变子空间**.如果$\rho$不具有 $U=0$或$U=V$以外的不变子空间,则说表示 $(\rho,V)$ 是**不可约**的.

截止目前,我们所求得的旋转群李代数的表示$(\rho_l,V^{2l+1})$都是不可约的.其证明并不复杂.该空间$V^{2l+1}$由$\rho_l(\hat{A}_3)$的 $(2l+1)$个本征矢$\{\psi^l_m,(m=l,l-1,\cdots,-l)\}$张成. 因此,$V^{2l+1}$的子空间$U$(当然除0或$V^{2l+1}$以外)至少不包含某个本征矢 $\psi^l_{m'}$. 如果$U$仅仅不包含 $\psi^l_{m'}$,那么$\psi^l_{m'+1}$和$\psi^l_{m'-1}$就都包含在该子空间之中. 这样一来,借助于 $A_+U$ 或 $A_-U$ 就可以得到 $\psi^l_{m'}$,于是,$U$显然不是不变子空间. 当$U$不包含两个以上的本征矢时,同样可以说明,$U$不是不变子空间.

下面考虑两个表示 $(\rho_l,V^{2l+1})$ 和$(\rho_{l'},V^{2l'+1})$的合成.$V^{2l+1}$和$V^{2l'+1}$分别由$\{\psi^l_m,(m=l,l-1,\cdots,-l)\}$和$\{\psi^{l'}_{m'},(m'=l',l'-1,\cdots-l')\}$ 张成,每次分别取一个来构成本征矢之积,考虑其全部$\{\psi^l_m\psi^{l'}_{m'}\}$张成的空间$V$, 它的阶数显然为$(2l+1)(2l'+1)$. 在该空间中,令角动量第三分量为$\hat{A}_3=H$. 由于在轨道角动量的情况下,$H$是微商算符,所以,通过关系式

$$\begin{aligned}H(\psi^l_m\psi^{l'}_{m'})&=(H\psi^l_m)\psi^{l'}_{m'}+\psi^l_m(H\psi^{l'}_{m'})\\&=(m+m')\psi^l_m\psi^{l'}_{m'}\end{aligned}\tag{8.6.2}$$

可知,$\psi^l_m\psi^{l'}_{m'}$ 是$H$的本征矢. 在自旋的情况下,$H$不用微商算符表示,因此,如上节所述,必须作用于$V$之中具有 $(2l+1)(2l'+1)$个分量的矢量上. 从(8.5.23)的表示方式不难知道,即使用矩阵来表示轨道角动量算符,(8.6.2)式也会成立.因 $\psi^l_m$ 和 $\psi^{l'}_{m'}$ 都是基矢,并非矢量分量,故不应混淆!

于是,(8.6.2)式中的$m$和$m'$分别取 $(l,l-1,\cdots,-l)$ 和 $(l',l-1,\cdots,-l')$的值,由此可知

$$M=m+m'\tag{8.6.3}$$

可以取$(2l+1)(2l'+1)$种组合. 不过, 这些值当然不是全都不同.实际上,无论是$(m=l,m'=l'-1)$或者是 $(m=l-1,m'=$

$l'-1$),都有 $M=l+l'-1$.这样,把$V$之中$H$的所有本征值$M$都排列成(先设 $l>l'$)

$$\begin{matrix} l+l', l+l'-1, \cdots\cdots, -l-l'+1, -l-l' \\ l+l'-1, \cdots\cdots, -l-l'+1 \\ \ddots \qquad\qquad \ddots \\ l-l', \cdots, -l+l' \end{matrix}$$

各行的个数分别是 $2(l+l')+1$、$2(l+l'-1)+1$、$\cdots$、$2(l-l')+1$,其总计确为 $(2l+1)(2l'+1)$. 在$H$的最大本征值分别取 $l+l', l+l'-1, \cdots, l-l'$ 的情况下,各行列出了所有本征值. 也就是说,囊括了$H$在各个不可约表示 $\rho_{l+l'}, \rho_{l+l'-1}, \cdots, \rho_{l-l'}$ 之中的本征值. 因此,在 $V$ 空间中这种排列相当于进行了一个幺正变换,把 $V$ 分解为与李代数 so(3) 有关的几个不变子空间

$$V^{2(l+l')+1}, V^{2(l+l'-1)+1}, \cdots, V^{2(l-l')+1}.$$

这种幺正变换的矩阵元稍后即将说明. 与该对角相对应,如图 8.2 所示,在 $V$ 中 $\hat{A}_i$ 的矩阵表示 $\rho(\hat{A}_i)$ 全都由一些阶数小于 $(2l+1)(2l'+1)$ 的方阵呈对角线状排列而成. 当 $l<l'$ 时,结果亦然,只不过最小的空间是 $V^{(l'-l)+1}$. 上述内容一般用记号表示为

$$\rho_l \otimes \rho_{l'} = \rho_{l+l'} \oplus \rho_{l+l'-1} \oplus \cdots \oplus \rho_{|l-l'|}, \tag{8.6.4}$$

其中,⊗是上节已经说明过的克朗内克积(8.5.23)的推广,若用 $a_{ij}$ 表示$\rho_l$的矩阵元,则有

$$\rho_l \otimes \rho_{l'} = \begin{bmatrix} a_{11}\rho_{l'} & a_{12}\rho_{l'} \cdots & a_{1,2l+1}\rho_{l'} \\ a_{21}\rho_{l'} & a_{22}\rho_{l'} & \vdots \\ & \ddots & \\ a_{2l+1,1}\rho_{l'} & \cdots\cdots & a_{2l+1,2l+1}\rho_{l'} \end{bmatrix}, \tag{8.6.5}$$

而⊕则称为**直和**.

在各个子空间中,$\hat{A}_1^2+\hat{A}_2^2+\hat{A}_3^2$ 的本征值分别是 $(l+l')\times(l+l'+1), (l+l'-1)(l+l'), \cdots, |l-l'|(|l-l'|+1)$. 下面列举几个实用中经常出现的例子. 括号内的数字标明了表示空间的维数.

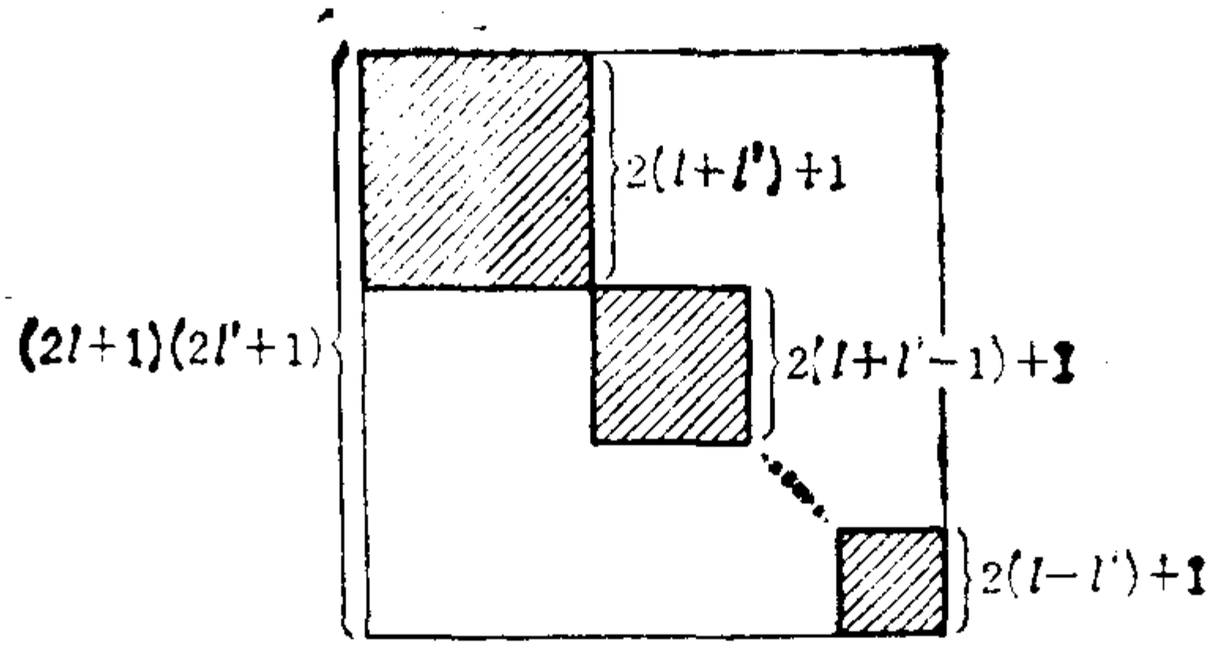



图 8.2　直积的不可约分解 ($l>l'$). 斜线部分之外的矩阵元均为零

$$\underset{(2(2l+1))}{\rho_{\frac{1}{2}}} \otimes \underset{(2l)}{\rho_l} = \underset{(2l+2)}{\rho_{l+\frac{1}{2}}} \oplus \underset{(2l)}{\rho_{l-\frac{1}{2}}}, \tag{8.6.6}$$

其左边的含义在上节末业已说明.

$$\underset{(4)}{\rho_{\frac{1}{2}}} \otimes \underset{(2)}{\rho_{\frac{1}{2}}} = \underset{(3)}{\rho_1} \oplus \underset{(1)}{\rho_0}. \tag{8.6.7}$$

这又一次表明,若让两个自旋为1/2的粒子合成，则会出现一个三重态和一个单态.

$$\underset{(9)}{\rho_1} \otimes \underset{(3)}{\rho_1} = \underset{(5)}{\rho_2} \oplus \underset{(3)}{\rho_1} \oplus \underset{(1)}{\rho_0}. \tag{8.6.8}$$

$$\underset{(2l+1)}{\rho_0} \otimes \underset{(2l+1)}{\rho_l} = \underset{(2l+1)}{\rho_l}. \tag{8.6.9}$$

上述例子中特别有意义的是 (ii) 例 $\rho_{1/2}\otimes\rho_{1/2}$ 的不可约分解. 具体地构成其右边 $\rho_1$ 和 $\rho_0$ 的本征矢,分别为

$$\rho_1: \psi^{1/2}_{1/2}\psi'^{1/2}_{1/2},\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi^{1/2}_{1/2}\psi'^{1/2}_{-1/2}+\psi^{1/2}_{-1/2}\psi'^{1/2}_{1/2}\right),\ \psi^{1/2}_{-1/2}\psi'^{1/2}_{-1/2}.$$

$$\rho_0: \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi^{1/2}_{1/2}\psi'^{1/2}_{-1/2}-\psi^{1/2}_{-1/2}\psi'^{1/2}_{1/2}\right).$$

对于了解三重态和单态的读者来说，这一点似乎是多余的。为了书写简单,令 $u_1\equiv\psi^{1/2}_{1/2}, v_1\equiv\psi^{1/2}_{-1/2}, u_2\equiv\psi'^{1/2}_{1/2}$, $v_2\equiv\psi'^{1/2}_{-1/2}$, 则有

$$\psi^1_1=u_1u_2,\ \psi^1_0=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(u_1v_2+u_2v_1\right), \psi^1_{-1}=v_1v_2,$$

$$\psi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1v_2 - u_2v_1).$$

于是可知，$\psi_m^1$ 和 $\psi_m^0$ 都是用 $u_1, v_1, u_2, v_2$ 的双线性型表示的. 并且，有意思的是，就下角标 1 和 2 而言，$\psi_m^1$ 是对称的，$\psi_m^0$ 是反对称的. 为写出这种多项式，采用 1903 年 A. 杨 (Young) 所发明的下述方法是方便的. 在我们的例子中，该方法就是用图形来研究，把两个正方形框子排列起来的方式有几种. 显然，这时有两种形式 □□ 和 $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$. 一个方框内放入 $u_1$ 或 $v_1$，另一个方框放入 $u_2$ 或 $v_2$. 对于下角标 1 和 2 来说，组成的多项式在□□中是对称的，而在 $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$ 中则是反对称的. 这样，归一化后，从□□会得到 $\psi_1^1$、$\psi_0^1$ 和 $\psi_{-1}^1$ 从 $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$ 得到 $\psi_0^0$. 可以用图表示为

$$\square \times \square = \square\square + \begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}. \qquad (8.6.10)$$

这样的图形称为**杨图**. 这样，似乎不难预料，$\psi_m^2$ 可以用 $u$ 和 $v$ 的多项式表示，重复同样的步骤，也会 $\psi_m^{3/2}, \psi_m^2, \cdots$ 依次用 $u$ 和 $v$ 的齐次式来表示. 当然，维数将增加到 4、5 或更高.

让我们来讨论上面叙述的角动量的不可约分解的物理意义. 为此，首先必须考虑与体系总角动量 $\hat{J} \equiv (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ 的两个本征值 $j$ 和 $m$ 有关的那些量与观测的关系，以往为便于说明，我们求 $\hat{J}_z$ 的本征值 $m$，设其最大值为 $j$. 而且已经知道 $\hat{J}^2 \equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ 的本征值是 $j(j+1)$. 但是，若所考虑的物理体系是空间对称的，则空间坐标系可以选在任意方向上，因此，没有必要非得把 $\hat{J}_z$ 对角化. 因为 $\hat{J}^2$ 不仅与 $\hat{J}_z$ 对易，而且也与 $\hat{J}_x$、$\hat{J}_y$ 对易，所以也可以把 $\hat{J}_x$ 或 $\hat{J}_y$ 对角化，在这些情况下，$\hat{J}^2$ 都具有相同的本征值. 因此，角动量的 $z$ 分量 $\hat{J}_z$ 具有本征值 $m$ 并没有特别的物理意义. 这时，体系状态的角动量只用 $j$ 就能确定，可以认为该状态是 $(2j+1)$ 重简并的. 当物理体系受到某种各向异性的影响时，这种简并会消除. 例如，加工磁场或电场时，若将其方向选为空间 $z$ 轴，则 $m$ 不同的状态与磁场或电场就有不同的相互作用. 这会使 $(2j+1)$ 重简并的能量状态分成 $(2j+1)$ 个状态. 若 $\psi_m$ 态的能量为 $E_m$，则

当发生跃迁$m \to n$时，会有 $h\nu = E_n - E_m$ 的能量被释放或被吸收。如§5.6所述，其跃迁概率为

$$W_{m\to n} = |\langle \psi_n | U(t,t_0) | \psi_m \rangle|^2. \qquad (8.6.11)$$

如果已知 $U(t,t_0)$，当然就可以直接计算 $W_{m\to n}$；然而，根据$U$的形式，只须利用$\psi_m$的性质，不用计算，也能知道，什么样的跃迁有$W_{m\to n} = 0$，即，跃迁$m \to n$被禁戒。

在此，比较一下经典力学与量子力学中的角动量合成是颇有意义的。众所周知，经典力学中角动量的合成由矢量和唯一决定，而被合成角动量的分量则表示为原来各个角动量矢量的分量之和. 与此不同，当量子力学中的两个角动量 $j_1$ 和 $j_2$ 合成时，如上所述，通过不可约分解，允许 $j$ 具有量子数 $j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \cdots, |j_1 - j_2|$. 下面我们来考虑本征矢. 因为属于 $j$ 的分量的是表示空间 $V^{2j+1}$ 中的本征矢，所以它应该用 $j_1$ 在表示空间的本征矢 $\psi^{j_1}_{m_1}$ 和 $j_2$ 的 $\psi^{j_2}_{m_2}$ 来表示. 在 $j_1 = \frac{1}{2}$ 和 $j_2 = \frac{1}{2}$ 的情况下，已经求出了具体形式，但一般情形却是相当麻烦的. 因此，有必要预先求出

$$\psi^j_m = \sum_{m_1 m_2} C(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m) \psi^{j_1}_{m_1} \psi^{j_2}_{m_2} \qquad (8.6.12)$$

中的展开系数 $C(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m)$. 称其为 CG. 系数. 为避免角标使用过多而造成印刷不便，通常把(8.6.12)简化为

$$\psi(jm) = \sum_{m_1 m_2} \psi(j_1 m_1)\psi(j_2 m_2)(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m). \qquad (8.6.13)$$

若只有两个角动量合成，则把 $(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m)$ 写成 $(j_1 m_1 j_2 m_2 | j m)$ 亦未尝不可，考虑到三个以上角动量合成，所以才把前面的写法保留下来. 由于 CG 系数是不可约表示 $\rho_{j_1}$ 和 $\rho_{j_2}$ 的张量积进行不可约分解时表示空间 $V^{2j+1}$ 中本征矢的展开系数，因此它是$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$阶幺正变换的矩阵元. 所以，若全部求出CG系数，则到现在所叙述的不可约分解就可以完成. 而且，两个角动量合成时，所得角动量的所有本征矢马上可以用原来角动量的本征矢写出来.

$j_2 = 1/2、1、3/2$ 时的 CG 系数表列于 §5.2 末尾. $j_2 = 2$ 和 3

时的系数表可以分别于[Condon, Shortley] p.27 和[山田、森由]中找到。

三个角动量$j_1$、$j_2$、$j_3$的合成只不过是按照上述步骤相继完成而已。但是，次序不同就会得出表观上不同的结果，似乎结合律不复成立。是否本当如此呢？首先用上述方法求出 $j_1 + j_2 = j_{12}$ 的本征矢。为了明确表示合成的经过，把 $\phi(j_{12}m_{12})$ 写成 $\phi(j_1j_2j_{12}m_{12})$，按照(8.6.13)式，有

$$\phi(j_1j_2j_{12}m_{12}) = \sum_{m_1m_2}\phi(j_1m_1)\phi(j_2m_2)(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j_{12}m_{12}).$$

(8.6.14)

然后再用$\phi(j_1j_2j_{12}j_3JM)$表示$j_{12} + j_3$的本征矢，做同样的展开，可得

$$\phi(j_1j_2j_{12}j_3JM) = \sum_{m_{12}m_3}\phi(j_1j_2j_{12}m_{12})\phi(j_3m_3)(j_{12}m_{12}j_3m_3|j_{12}j_3JM).$$

(8.6.15)

另一方面，若先求$j_2 + j_3 = j_{23}$，然后再计算$j_1 + j_{23}$的本征矢，则有

$$\phi(j_1j_2j_3j_{23}JM) = \sum_{m_1m_{23}}\phi(j_1m_1)\phi(j_2j_3j_{23}m_{23})(j_1m_1j_{23}m_{23}|j_1j_{23}JM).$$

(8.6.16)

一般来说，$\phi(j_1j_2j_{12}j_3JM) \neq \phi(j_1j_2j_3j_{23}JM)$，所以各个本征矢确实互相不一致。但是，无论是$\{\phi(j_1j_2j_{12}j_3JM)\}$还是$\{\phi(j_1j_2j_3j_{23}JM)$ 均构成了$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_3 + 1)$维表示空间的基，因此可以用幺正变换把它仍连系起来。实际上，可以做出这样的公正变换，以使

$$\phi(j_1j_2j_3j_{23}JM) = \sum_{j_{12}}\phi(j_1j_2j_{12}j_3JM)\langle j_1j_2j_{12}j_3J|j_1j_2j_3j_{23}J\rangle.$$

(8.6.17)

当该变换矩阵元表示成

$$\langle j_1j_2j_{12}j_3J|j_1j_2j_3j_{23}J\rangle = \sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)}$$

$$\times W(j_1j_2Jj_3;j_{12}j_{23}) \qquad (8.6.18)$$

时，称 $W(abcd;ef)$ 为**拉卡**（Racah）**系数**。可以证明，上述变换

并不依赖于$M$，故记法上有所省略（关于其证明，可参看[山内] pp. 145—146）。

这样，关于量子力学中的角动量，也有幺正等价意义下的加法结合律：

$$(j_1 + j_2) + j_3 = j_1 + (j_2 + j_3)。 \tag{8.6.19}$$

由以上计算可见，拉卡系数可用 CG 系数来表示。这儿不再推导 CG 系数的一般表达式了，而用上述 $u_1, v_1, u_2, v_2$ 的多项式表示角动量的本征矢只不过是用代数方法求本征矢的一种附注，就此结束本节（对推导 CG 系数有兴趣的读者请参看[山内]、[Van der Waerden]等著作）。

## §8.7 伽利略变换

可以认为，到目前已处理过的变换不仅把空间和时间的连续性，而且也把空间的均匀性和各向同性公式化了。也就是说，三维欧几里得空间中的坐标系的平行移动和旋转分别是以空间的均匀性和各向同性为前提的，通过在该空间中考虑一个哈密顿量不随平行移动和转动而变化的力学系，我们就能够用构成这些变换的群的李代数引出动量和角动量概念。这时，我们尽可能忠实于量子力学理论，试用这些李代数的射线表示，其结果是，动量和角动量的射线表示均与它们的矢量表示等价。可是，如下所述，对于物理学中具有重要意义的坐标系变换来说，射线表示与矢量表示不等价。

物理学中所谓坐标系，无非是各个观察者用以测量而建立的框架，它的选择与打算观察的物理现象中内在物理规律密切相关。在经典力学中，它就是惯性系，而坐标变换则是使牛顿运动方程总能以相同形式来表达的伽利略变换。也就是说，这时坐标变换与经典力学物理规律公式化的本质有关。伽利略在牛顿之前业已发现，两个以匀速相互运动的观察者看来，力学规律呈现出相同形式，伽利略变换正是由此而命名的。牛顿力学也可以看成是伽利略变换的公式化。把伽利略变换进一步推广到麦克斯韦电磁方程，便导

致了洛伦兹变换，关于这些，是本讲座第二卷《经典物理学》(II) 的内容.这里打算用上述方法处理伽利略变换，来讨论它与量子力学的相互关系。

通常，当$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)$为空间坐标，$t$ 为时间时，把坐标系的相对速度$\boldsymbol{v}=(v_1,v_2,v_3)$当作参数，利用四阶方阵，可以把伽利略变换表示为

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ t\end{bmatrix}\to\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}'\\ t'\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{1} & -\boldsymbol{v}\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ t\end{bmatrix},\tag{8.7.1}$$

这个变换显然构成交换连续群．按照下述理由，我们把这个群叫做**狭义伽利略群** $G_0$。由于群 $G_0$ 与 §8.4 说明过的平均移动群同构，因而 $G_0$ 的李代数 $g_0$ 的射线表示与矢量表示一般不等价。但是，若把平行移动群作为会有旋转群子群的 $I_3^3$，则其射线表示就与矢量表示等价（请联想 §8.4 中的证明）。而对于 $G_0$ 来说，不会发生这种情况。为了忠实于伽利略本来的思想，应该把包含了坐标系旋转和匀速运动在内的一般变换

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ t\\ 1\end{bmatrix}\to\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}'\\ t'\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}R & -\boldsymbol{v} & -\boldsymbol{u}\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ t\\ 1\end{bmatrix}\tag{8.7.2}$$

叫做伽利略变换。我们把它所构成的群叫做**广义伽利略群** $G$ 或简称伽利略群 $G$，来讨论与此有关的问题。

群 $G$ 是由九个参数的连续群，为了找到“乘法表”，将其元素表示成 $g(R,\boldsymbol{v},\boldsymbol{u})$。应用(8.7.2)式的矩阵表示，不难得出

$$g(R,\boldsymbol{v},\boldsymbol{u})g(R',\boldsymbol{v}',\boldsymbol{u}')=g(RR',R\boldsymbol{v}'+\boldsymbol{v},R\boldsymbol{u}'+\boldsymbol{u}),\tag{8.7.3}$$

由此马上知道，存在着子群

$$G_0=\{g(1,\boldsymbol{v},0)\}\subset G,\tag{8.7.4}$$

$$T_3=\{g(1,0,\boldsymbol{u})\}\subset G,\tag{8.7.5}$$

$$G_0'=\{g(1,\boldsymbol{v},\boldsymbol{u})\}\subset G,\tag{8.7.6}$$

$$I_3^3=\{g(R,0,\boldsymbol{u})\}\subset G.\tag{8.7.7}$$

此外尚存在的其它子群则无关紧要。

大致可以预料，子群$G_0'$是交换群，其李代数的射线表示与上述$T_3$的李代数的有相同性质。若用前面的方法求出原$G$的李代数的结构，则除(8.4.18)、(8.4.19)和(8.4.20)诸式之外，还有

$$[\hat{R}_1,\hat{R}_2]=-\hat{R}_3,\ [\hat{R}_1,\hat{R}_3]=\hat{R}_2,\cdots \tag{8.7.8}$$

$$[\hat{K}_1,\hat{K}_2]=0,\ [\hat{K}_2,\hat{K}_3]=0,[\hat{K}_3,\hat{K}_1]=0, \tag{8.7.9}$$

$$[\hat{K}_i,\hat{T}_i]=0. \tag{8.7.10}$$

其中

$$\hat{R}_1=\begin{bmatrix}\cdot&\cdot&\cdot&1&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{bmatrix},\quad \hat{R}_2=\begin{bmatrix}\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&1&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{bmatrix},$$

$$\hat{R}_3=\begin{bmatrix}\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&1&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{bmatrix}.$$

至于$\hat{R}_i$和$\hat{T}_i$，只要联想§8.4的有关内容，就无需再特意说明了。

就该李代数的射线表示而言，我们已经证明(8.4.18)、(8.4.19)和(8.4.20)诸代数的射线表示与矢量表示等价，所以，现在仅需就(8.7.8)、(8.7.9)和(8.7.10)诸式来进行讨论。而且幸运的是，用与以前完全一样的方法，可以证明，(8.7.8)和(8.7.9)两代数的射线表示与矢量表示等价。因此，剩下来的只是与(8.7.10)式有关的问题。实际上，前面的方法对它照样可用。但是，结果却迥然不同!

取前面用过的$\Xi$为(8.7.10)式的射线表示，有

$$i[D(\hat{K}_j),D(\hat{T}_k)]=\Xi(\hat{K}_j,\hat{T}_k). \tag{8.7.11}$$

于是，仿照代数关系(8.4.19)、(8.4.20)、(8.7.9)和(8.7.10)的计算(参考(8.4.28)和(8.4.29)两式的计算，请读者自行证明)，可以得到

$$\Xi(\hat{K}_1,\hat{T}_1)=\Xi(\hat{K}_2,\hat{T}_2)=\Xi(\hat{K}_3,\hat{T}_3),\tag{8.7.12}$$

$$\Xi(\hat{K}_j,\hat{T}_k)=0,\ (j\neq k).\tag{8.7.13}$$

因此,(8.7.11)式变为

$$i[D(\hat{K}_j),D(\hat{T}_k)]=\kappa\delta_{jk},\tag{8.7.14}$$

其中,$\kappa$ 为任意实数,看不出必须让 $\kappa=0$ 的根据。

虽然我们希望,通过把狭义伽利略群$G_0$与包含空间旋转和 平行移动的$I_3^3$连系起来,能使射线表示的等价类变成矢量表示,但却剩下了(8.7.14)式所示的非矢量表示。这一点表明,$G_0$和$T_3$以空间旋转为媒介而互相关联。如本节开头所提到的那样,伽利略变换在经典力学中具有重要意义,再考虑到微小平行移动算符在量子力学中表示粒子的动量,自然会想到,伽利略变换的生成算符的量子力学表示,即射线表示 $D(\hat{K}_j)(j=1,2,3)$ 应该对应着什么力学量。

因此,令 $D(\hat{T}_k)=\hat{p}_k, D(\hat{K}_j)=\hat{q}_j, \kappa=-\hbar$,则可把(8.7.14)式写成

$$[\hat{q}_j,\hat{p}_k]=i\hbar\delta_{jk}.\tag{8.7.15}$$

为了明确$\hat{q}_i$的物理意义,引用对应于牛顿运动方程的量子力学运动方程

$$i\hbar\frac{d\hat{X}}{dt}=[\hat{X},\hat{H}],\tag{8.7.16}$$

其中,$\hat{H}$是所考虑力学系的哈密顿量,$\hat{X}$是任意力学量。(8.7.16)式是与前面相同的方程,[,] 的意义亦完全一样。 我们已经知道,$(\hat{p}_1,\hat{p}_2,\hat{p}_3)$ 表示一个粒子的动量,因此,一个质量为$m$的自由粒子的 $\hat{H}$ 可以写成

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_1^2+\hat{p}_2^2+\hat{p}_3^2).\tag{8.7.17}$$

把(8.7.16)式中的$\hat{X}$取为$\hat{q}_i$,再把$\hat{H}$的(8.7.17)式代入(8.7.16)式,利用(8.7.15)式中关系,就可以得到

$$\frac{d}{dt}\hat{q}_i=\frac{1}{m}\hat{p}_i.\tag{8.7.18}$$

由这个关系式便可以明白，$\hat{q}_i$是给出粒子位置的算符的 $i$ 分量.若这样规定$\hat{q}_i$的意义，则(8.7.17)式的哈密顿量也可以取为

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_1^2+\hat{p}_2^2+\hat{p}_3^2)+V(\hat{q}_1,\hat{q}_2,\hat{q}_3). \tag{8.7.19}$$

这时也可以得到与(8.7.18)式相同的结果。因此可以说，无论是否有势，$\hat{q}_i$ 均为粒子位置这个物理量的量子力学表示。值得注意的是，作为量子力学中最基本的关系之一，正则对易关系 (8.7.15)当然可以说成是由伽利略的量子力学表示得到的。

## §8.8 规 范 变 换

我们已经看到，量子力学是经典力学在复希尔伯特空间中的幺正射线表示，现在再来考虑算符的一般相位变换，以一个粒子为例来说，射线表示与矢量表示的差异就是用$f(\boldsymbol{x})=\{e^{i\alpha}f(\boldsymbol{x}):\alpha\in\mathbf{R}\}$去代替 $f(\boldsymbol{x})\in\mathbf{H}_3$. 到目前为止，我们仍设 $\alpha$ 为实参数，但更一般地，它可以取为实函数 $\chi[\boldsymbol{x},t]$. 这时，射线的内积

$$\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g}=|(f\cdot g)|$$

依然不变. 但是，对于$\boldsymbol{f}\cdot\hat{O}\boldsymbol{g}=|(\boldsymbol{f}\cdot\hat{O}\boldsymbol{g})|$来说，必须注意下述情况。

现在，进行相位变换

$$f\to f'=\exp[i\chi(\hat{\boldsymbol{x}},t)]f, \tag{8.8.1}$$

$$g\to g'=\exp[i\chi(\hat{\boldsymbol{x}},t)]g. \tag{8.8.2}$$

这时，为了使

$$(f',\hat{O}'g')=(f,\hat{O}g), \tag{8.8.3}$$

必须有

$$\hat{O}\to\hat{O}'=\exp[i\chi(\hat{\boldsymbol{x}},t)]\hat{O}\exp[i\chi(\hat{\boldsymbol{x}},t)]. \tag{8.8.4}$$

由此可以直接得到

$$\hat{x}\to\hat{x}'=\hat{x}, \tag{8.8.5}$$

$$\hat{p}_x\to\hat{p}'_x=\hat{p}_x-\hbar\frac{\partial}{\partial x}\chi(\hat{\boldsymbol{x}},t), \tag{8.8.6}$$

关于$\hat{y}$、$\hat{z}$、$\hat{p}_y$、$\hat{p}_z$，亦可得到同样结果。把它们统一写为

$$\begin{cases}\hat{x} \to \hat{x}' = \hat{x}, & (8.8.7)\\ \hat{p} \to \hat{p}' = \hat{p} - \hbar \mathrm{grad}\chi(\hat{x}, t). & (8.8.8)\end{cases}$$

下面，设薛定谔方程中的$\hat{H}$为

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} - \alpha(\hat{x}))^2 + b(\hat{x}), \qquad (8.8.9)$$

让我们来求解关于$f'$的方程

$$i\hbar \frac{d}{dt}(\exp[-i\chi(\hat{x}, t)]f') = \hat{H}\exp[-i\chi(\hat{x}, t)]f', \qquad (8.8.10)$$

左乘 $\exp[i\chi(\hat{x}, t)]$后再整理，可得

$$i\hbar \frac{d}{dt} f' = \left\{\frac{1}{2m}(\hat{p} - \alpha(\hat{x}) - \hbar \mathrm{grad}\chi(\hat{x}, t))^2 + b(\hat{x}) - \hbar \frac{\partial}{\partial t}\chi(\hat{x}, t)\right\} f'. \qquad (8.8.11)$$

实际上，(8.8.8)式中的$\alpha$、$b$可以显含时间$t$。这是因为，我们一再注意到，$t$ 是个单一的参数，而并非观测量.因此，若重新以 $(e/c)\boldsymbol{A}$ 和 $e\phi$ 来代替 $\alpha$ 和 $b$，以 $(e/\hbar c)\chi$ 代替 $\chi$，我们就会分别得到变换前后的薛定谔方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} f = \left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}^2\right)^2 + e\phi\right\} f, \qquad (8.8.12)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} f' = \left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}(\boldsymbol{A} + \mathrm{grad}\chi)\right)^2 + e\left(\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi\right)\right\} f'. \qquad (8.8.13)$$

在(8.8.13)式中，令

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \mathrm{grad}\chi, \quad \phi' = \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi, \qquad (8.8.14)$$

则

$$i\hbar \frac{d}{dt} f' = \left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2 + e\phi'\right\} f'.$$

请注意，$\hat{p}$上没有一撇“'”。(8.8.14)式是使麦克斯韦方程不变的变换之一，即规范变换，而之所以称之为规范变换，正如本讲座第二卷《经典物理学》(II) 中所述，是因为它与韦耳根据时空规范在各个点可以任意选择这样一个要求而推导出来的结果一致。当然，当时的时空坐标是用实数描述的。问题在于，复希尔伯特空间中以什么为规范，选择上节引入$\hbar$的所暗示的实参数测量单位，是一个自然的想法。这样一来，(8.8.1)式就意味着，在空间各点，规范是任意选择的。因此可以说，将其称为量子力学中的规范变换，比起用(8.8.14)式所做的形式上的定义，更接近于韦耳原来的思想。

## §8.9 力学系内在的对称性

到现在，我们把非相对论时空中力学系所具有的对称性称为物理量对坐标系各种变换的协变性，可以说，这是站在外部观察立场上来研究的。当然这些变换必须以量子力学的方式表示，这样，作为希尔伯特空间的射线和算符，对称性所具有的物理意义已明朗可见。然而，除了这些本来就是经典的变换群所引出的对称性之外，尚可存在力学系内在的对称性。该对称性称为动力学对称性。其首例是氢原子薛定谔方程中所看到的开普勒运动的对称性，如下所述，它与相互作用的本质密切相关。为了说明，我们从下面几个例子开始讨论。

例 1　二维各向同性谐振子

粒子质量为$m$时，哈密顿量是

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2)+\frac{m\omega^2}{2}(\hat{x}^2+\hat{y}^2), \tag{8.9.1}$$

它所决定的运动对于$xy$平面内的旋转显然不变，但除此之外是否就没有对称性了呢？在§2.4e一维谐振子的情形，我们已经学会运用方便的产生算符和湮没算符。在这里也可以效仿。也就是说，定义

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x, \tag{8.9.2}$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x, \tag{8.9.3}$$

$$b = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{y} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_y, \tag{8.9.4}$$

$$b^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{y} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_y. \tag{8.9.5}$$

用以改写(8.9.1)式

$$\hat{H} = \omega\hbar(a^\dagger a + b^\dagger b + 1). \tag{8.9.6}$$

要想知道能量本征值及其简并度，只要用(8.9.6)式和对易关系

$$[a, a^\dagger] = 1,\ [b, b^\dagger] = 1, \text{其它均为零} \tag{8.9.7}$$

就足够了。

然而，为了说明下面的例子，多少还要加上一点技巧，我们来构成算符

$$K_+ = ia^\dagger b^\dagger,\ K_- = iab,\ K_0 = \frac{1}{2}(a^\dagger a + b^\dagger b + 1) \equiv \frac{\hat{H}}{2\omega\hbar}. \tag{8.9.8}$$

不难知道，与(8.4.48)式中令$\hbar = 1$时的对易关系完全相同，它们满足

$$[K_0, K_\pm] = \pm K_\pm,\ [K_+, K_-] = 2K_0. \tag{8.9.9}$$

因此可以推出，$K_0$的本征值是0、$\pm\frac{1}{2}$、$\pm1$、$\pm3/2$、……。而在这种情况下，考虑到

$$\int\psi^*(a^\dagger a + b^\dagger b)\psi d^3x = \|a\psi\|^2 + \|b\psi\|^2 \geqslant 0, \tag{8.9.10}$$

就可以把$\hat{H}$的本征值写成$E_n = \omega\hbar(n+1)$ $(n = 0, 1, 2, \cdots)$。当然，之所以得到此式，是由于从(8.9.7)式得到的$a^\dagger a = n_a$和$b^\dagger b = n_b$为零或正整数。而(8.9.8)式正是$SU(2)$的李代数的结构，由此推知，这个力学系具有$SU(2)$对称性。为了确认这一点，方便的做法

是考虑以算符为元素的矩阵

$$\Psi = \sqrt{\frac{\omega\hbar}{2}}\begin{bmatrix} a & b \\ -b^\dagger & a^\dagger \end{bmatrix}. \tag{8.9.11}$$

因此

$$\Psi^\dagger = \sqrt{\frac{\omega\hbar}{2}}\begin{bmatrix} a^\dagger & -b \\ b^\dagger & a \end{bmatrix}. \tag{8.9.12}$$

再注意到

$$\mathrm{tr}(\Psi\Psi^\dagger) = \omega\hbar(a^\dagger a + b^\dagger b + 1) = \hat{H}, \tag{8.9.13}$$

则 $\hat{H}$ 的 $SU(2)$ 不变性可以换成 $\mathrm{tr}(\Psi\Psi^\dagger)$ 对于

$$\Psi \to \Psi' = T(g)\Psi \equiv g\Psi g^{-1},\ g \in SU(2) \tag{8.9.14}$$

的不变性。不过，这时 $SU(2)$ 的元素 $g$ 是用两行两列复矩阵表示的，即

$$g = \begin{bmatrix} z_1 & z_2 \\ -z_2^* & z_1^* \end{bmatrix}, z_1 z_1^* + z_2 z_2^* = 1, z_1, z_2 \in C. \tag{8.9.15}$$

例 2　开普勒运动中的对称性

牛顿力学在其初始阶段所取得的最大成功是从力学角度探明了行星运动的开普勒定律，同样，氢原子中电子的运动是量子力学的开普勒运动，它作为量子力学的出发点而具有重大意义.在量子力学建立的第二年(1926年)，泡利就已经深入地从根本上研究了它与经典力学的对应关系。之后又有一些人从不同角度进行了研究.而通过所有这些研究看出，量子力学强烈地依赖于经典力学的各种概念。作为经典力学中的运动恒量，在开普勒运动情况下，除了角动量之外 还有让-楞次(Ruuge-Lenz)矢量。这一点已由解析力学的创始人拉格朗日发现，而泡利对此充分地赋于了量子力学表示。因此，我们把它叫做让-楞次-泡利矢量。

历来都是通过相应地假定让-楞次-泡利矢量的存在来讨论开普勒运动的对称性的.但是，这次我们要指出，只用基本的正则对易关系，就能直接从原始哈密顿量导出角动量矢量和让-楞次-泡利矢量，两者均源于本质上相同的一种对称性([Ravandal,Toyoda]).于是，此过程会说明，开普勒运动具有的对称性比 $O(3)$ 群更广.虽

然历来都认为，该对称性源于 $O(4)$，即四维实欧几里得空间旋转群的不变性，但是这种简单的方式似乎并不恰当。其理由会通过下面的讨论而逐渐明了。

一个质量为 $m$、电荷为 $e$ 的粒子仅受到源于某点电荷 $e$ 的库仑力而运动。其哈密顿量是

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)-\frac{e^2}{\sqrt{\hat{x}^2+\hat{y}^2+\hat{z}^2}}. \tag{8.9.16}$$

这里引入以下坐标：

$$\left.\begin{aligned} x&=\mu\nu\cos\varphi\\ y&=\mu\nu\sin\varphi\\ z&=\frac{1}{2}(\mu^2-\nu^2)\end{aligned}\right\}. \tag{8.9.17}$$

它与通常所谓的“抛物线坐标

$$\left.\begin{aligned} x&=\sqrt{\mu\nu}\cos\varphi\\ y&=\sqrt{\mu\nu}\sin\varphi\\ z&=\frac{1}{2}(\mu-\nu)\end{aligned}\right\}. \tag{8.9.17'}$$

相比，似乎差别不大，但是，以后我们要将 $\mu$ 和 $\nu$ 复数化，二者的区别就不容忽视了。在这个意义下，把(8.9.17)式所定义的 $(\mu,\nu,\varphi)$ 称为**二次抛物线坐标**。采用这个坐标，可以把(8.9.16)式改写为

$$\begin{aligned}\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Bigg\{&\frac{1}{\mu^2+\nu^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\mu^2}+\frac{1}{\mu}\frac{\partial}{\partial\mu}\right)\\&+\frac{1}{\mu^2+\nu^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\nu^2}+\frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial\nu}\right)\\&+\frac{1}{\mu^2\nu^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Bigg\}-\frac{2e^2}{\mu^2+\nu^2}.\end{aligned} \tag{8.9.18}$$

因为现在讨论的是束缚态，所以可以取 $\hat{H}$ 的本征值为负

$$E_i=-\frac{m}{2}\omega_i^2\hbar^2. \tag{8.9.19}$$

将(8.9.18)式代入薛定谔方程

$$\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i, \tag{8.9.20}$$

再在两边乘以 $(\mu^2 + \nu^2)$，经过整理，可以得到

$$(\hat{H}_\mu + \hat{H}_\nu)\psi_i = 2\varepsilon^2\psi_i, \tag{8.9.21}$$

其中

$$\hat{H}_\mu \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\mu^2} + \frac{1}{\mu}\frac{\partial}{\partial\mu} + \frac{1}{\mu^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) + \frac{m}{2}\omega_i^2\hbar^2\mu^2, \tag{8.9.22}$$

$$\hat{H}_\nu \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\nu^2} + \frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial\nu} + \frac{1}{\nu^2}\frac{\partial^2}{\varphi^2}\right) + \frac{m}{2}\omega_i^2\hbar^2\nu^2. \tag{8.9.23}$$

(8.9.22)和(8.9.23)两式就是用极坐标表示的二维谐振子的哈密顿量。实际上，引入新的$\varphi_\mu$和$\varphi_\nu$

$$\xi_\mu = \mu\cos\varphi_\mu,\ \eta_\mu = \mu\sin\varphi_\mu, \tag{8.9.24}$$

$$\xi_\nu = \nu\cos\varphi_\nu,\ \eta_\nu = \nu\sin\varphi_\nu, \tag{8.9.25}$$

其中，令

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi_\mu^2} = \frac{\partial^2}{\partial\varphi_\nu^2} = \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}, \tag{8.9.26}$$

我们就令用两组“直角坐标”$(\xi_\mu,\eta_\mu)$和$(\xi_\nu,\eta_\nu)$把(8.9.22)式和(8.9.23)式表示出来

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_\mu^2} + \frac{\partial^2}{\partial\eta_\mu^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega_i^2\hbar^2(\xi_\mu^2 + \eta_\mu^2) = \hat{H}_\mu, \tag{8.9.27}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_\nu^2} + \frac{\partial^2}{\partial\eta_\nu^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega_i^2\hbar^2(\xi_\nu^2 + \eta_\nu^2) = \hat{H}_\nu. \tag{8.9.28}$$

显然，$\hat{H}_\mu$和$\hat{H}_\nu$都与例 1 中处理过的二维各向同性谐振子的哈密顿量的形式完全相同。因此，利用例 1 的方法，就能直接求出各自的“本征值”。将其写为$\lambda_{\mu_i}$和$\lambda_{\nu_i}$，分别有

$$\lambda_{\mu_i} = \omega_i(n_{\mu_i} + 1)\hbar^2, (n_{\mu_i} = 0,1,2,\cdots), \tag{8.9.29}$$

$$\lambda_{\nu_i} = \omega_i(n_{\nu_i} + 1)\hbar^2, (n_{\nu_i} = 0,1,2,\cdots), \tag{8.9.30}$$

根据(8.9.21)式，有

$$\omega_i(n_{\mu_i}+n_{\nu_i}+2)\hbar^2=2e^2. \tag{8.9.31}$$

因此，按照(8.9.10)式，所要求的$\hat{H}$的本征值为

$$E_i=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\left(\frac{n_{\mu i}+n_{\nu i}}{2}+1\right)^{-2}. \tag{8.9.32}$$

但是，从上面的讨论看，$n_{\mu_i}$和$n_{\nu_i}$似乎是完全独立的，因此，不能取代(8.9.32)式而写成早已熟知的形式

$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2}(n+1)^{-2},(n=0,1,2,\cdots). \tag{8.9.33}$$

实际上，(8.9.27)和(8.9.28)两式并非独立，而是由(8.9.26)式相互联系。因此

$$n_{\mu_i}+n_{\nu_i}=2n. \tag{8.9.34}$$

我们的目的不是推导众所周知的(8.9.33)式，以及为此而证明(8.9.34)式，我们的目的是要同时导出轨道角动量$\hat{\boldsymbol{L}}$和让-楞次-泡利矢量$\hat{\boldsymbol{A}}$，从而弄清哈密顿量(8.9.16)中所包含的内在对称性。因此，现在我们直接用微商算符，来定义下面讨论中所必须的算符

$$\left.\begin{aligned}
a_\mu&=\sqrt{\frac{m\omega_i}{2}}\xi_\mu+\frac{1}{\sqrt{2m\omega_i}}\frac{\partial}{\partial\xi_\mu}\\
a_\mu^\dagger&=\sqrt{\frac{m\omega_i}{2}}\xi_\mu-\frac{1}{\sqrt{2m\omega_i}}\frac{\partial}{\partial\xi_\mu}\\
b_\mu&=\sqrt{\frac{m\omega_i}{2}}\eta_\mu+\frac{1}{\sqrt{2m\omega_i}}\frac{\partial}{\partial\eta_\mu}\\
b_\mu^\dagger&=\sqrt{\frac{m\omega_i}{2}}\eta_\mu-\frac{1}{\sqrt{2m\omega_i}}\frac{\partial}{\partial\eta_\mu}
\end{aligned}\right\}. \tag{8.9.35}$$

请注意，上面定义中，$h$和$i$均不出现。这些算符中不对易的只有

$$[a_\mu,a_\mu^\dagger]=1,[b_\mu,b_\mu^\dagger]=1. \tag{8.9.36}$$

如果进一步把它们组合起来构成

$$\left.\begin{aligned}
A_+&=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_\mu+ib_\mu),A_-=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_\mu-ib_\mu),\\
A_+^\dagger&=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_\mu^\dagger-ib_\mu^\dagger),A_-^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_\mu^\dagger+ib_\mu^\dagger),
\end{aligned}\right\} \tag{8.9.37}$$

则不对易的只有

$$[A_+, A_+^\dagger] = 1, [A_-, A_-^\dagger] = 1. \tag{8.9.38}$$

若完全类似地定义$a_v, a_v^\dagger, b_v, b_v^\dagger$;再引入它们的组合

$$\left.\begin{aligned} B_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_v + ib_v),\ B_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_v - ib_v), \\ B_+^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_v^\dagger - ib_v^\dagger),\ B_-^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_v^\dagger + ib_v^\dagger), \end{aligned}\right\} \tag{8.9.39}$$

则依然是

$$[B_+, B_+^\dagger] = 1, [B_-, B_-^\dagger] = 1, \tag{8.9.40}$$

其它均对易。准备工作就此完毕。于是,我们用 $A_\pm, A_\pm^\dagger, B_\pm, B_\pm^\dagger$ 构成两组李代数

$$\left.\begin{aligned} X_0 &= \frac{1}{2}(A_+^\dagger A_+ - B_-^\dagger B_-),\ Y_0 = \frac{1}{2}(B_+^\dagger B_+ - A_-^\dagger A_-), \\ X_+ &= A_+^\dagger B_-, & Y_+ &= -B_+^\dagger A_-, \\ X_- &= A_+ B_-^\dagger, & Y_- &= -B_+ A_-^\dagger, \end{aligned}\right\} \tag{8.9.41}$$

并讨论它们的性质,不难证实,它们均具有 $SU(2)$ 群时李代数的结构

$$\left.\begin{aligned} [X_+, X_-] &= 2X_0, [Y_+, Y_-] = 2Y_0, \\ [X_0, X_\pm] &= \pm X_\pm, [Y_0, Y_\pm] = \pm Y_\pm, \end{aligned}\right\} \tag{8.9.42}$$

其中的重号同序。而令

$$\left.\begin{aligned} X_1 &\equiv \frac{1}{2}(X_+ + X_-), Y_1 \equiv \frac{1}{2}(Y_+ + Y_-), \\ X_2 &\equiv \frac{1}{2i}(X_+ - X_-), Y_2 \equiv \frac{1}{2i}(Y_+ - Y_-), \\ X_3 &\equiv X_0, & Y_3 &\equiv Y_0, \end{aligned}\right\} \tag{8.9.43}$$

并把$X_i$和$X_j$的内积定义为

$$(X_i, X_j) = \mathrm{tr}(X_i X_j^\dagger). \tag{8.9.44}$$

关于$Y_i$和$Y_j$亦如此。这样一来,$(X_1, X_2, X_3)$ 和$(Y_1, Y_2, Y_3)$显然分别为“正交基矢”。精彩的是,用它们就可以求得所期望的轨道角动量矢量$\hat{\boldsymbol{L}}$和让-楞次-泡利矢量$\hat{\boldsymbol{A}}$,即

$$\left.\begin{aligned}\hat{L}_x &= X_1 + Y_1,\ \hat{A}_x = X_1 - Y_1,\\ \hat{L}_y &= X_2 + Y_2,\ \hat{A}_y = X_2 - Y_2,\\ \hat{L}_z &= X_3 + Y_3,\ \hat{A}_z = X_3 - Y_3.\end{aligned}\right\} \tag{8.9.45}$$

用不太麻烦的变量变换回到原来的笛卡儿坐标，确实会有

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{x}} \times \hat{\boldsymbol{p}},$$

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \sqrt{\frac{m}{-2E}}\left\{\frac{1}{2}\left(\hat{\boldsymbol{L}} \times \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m} - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m} \times \hat{\boldsymbol{L}}\right) + e^2 \frac{\hat{\boldsymbol{x}}}{|\hat{\boldsymbol{x}}|}\right\}. \tag{8.9.46}$$

看看 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 在笛卡儿坐标中的表达式，就不难知道，$\hat{\boldsymbol{L}}$ 是轴矢量，$\hat{\boldsymbol{A}}$ 是极矢量，而从(8.9.46)式却更容易看出这一点。 其原因是，由(8.9.17)式可知，镜像变换使 $\mu$ 和 $\nu$ 互换，而在(8.9.45)式中，这无非是使 $X_i$ 和 $Y_i(i = 1,2,3)$ 互相交换而已。

(8.9.26 )式表明，与“轨道角动量 $z$ 分量”相当的 $\partial/\partial\varphi_\mu$ 和 $\partial/\partial\varphi_\nu$ 的本征值的平方相等.因而 $X_0$ 和 $Y_0$ 的本征值的平方相等.

若令

$$M_+ = A_+^\dagger A_+, M_- = A_-^\dagger A_-, N_+ = B_+^\dagger B_+, N_- = B_-^\dagger B_-, \tag{8.9.47}$$

则根据(8.9.38)和(8.9.40)两式，$M_+$，$M_-$，$N_+$，$N_-$ 的本征值 $m_+$，$m_-$，$n_+$，$n_-$ 是零或正整数。按照(8.9.41)式，$X_0$ 和 $Y_0$ 的本征值分别是 $m_+ - n_-$ 和 $n_+ - m_-$，因此，(8.9.26)式意味着

$$m_+ - n_- = n_+ - m_-, \tag{8.9.48}$$

或者

$$m_+ - n_- = -n_+ + m_-. \tag{8.9.49}$$

由 (8.9.48) 式可得 $m_+ + m_- = n_+ + n_-$，而由 (8.9.49) 式可得 $m_+ + n_+ = m_- + n_-$。 因此，无论在什么情况下 $n_{\mu_i} + n_{\nu_i} = m_+ + m_- + n_+ + n_- = 2n(n = 0,1,2,\cdots)$ 均会成立。

由例 1 我们已经知道，二维各向同性谐振子具有 $SU(2)$ 对称性。通过本例的变量变换，开普勒运动可以分解成“$\mu$ 空间”和“$\nu$ 空间”的二维各向同性谐振子，它们靠变换所引入的关于“角度” $\varphi_\mu$ 和 $\varphi_\nu$ 的微商算符条件(8.9.26)而联系在一起。由于在各自“空

间中的运算都具有 $SU(2)$ 对称性，因此，整体显然具有 $SU(2)\otimes SU(2)$ 对称性。其中⊗表示群的直积。也就是说，当 $g_1\in SU(2)$和 $g_2\in SU(2)$时，$g_1$ 和 $g_2$的组合就是群 $G$ 的元素。用 $C$ 表示与 $G$ 的全部元素对易的不变子群，构造这时的商群 $G/C$，有

$$\frac{SU(2)\otimes SU(2)}{C}\cong SO(4). \tag{8.9.50}$$

这个结论在群论中可以得到证明 ([Ravndal, Toyoda])。$SO(4)$ 是 $\mathbf{R}^4$ 中的旋转群，其行列式等于 1，≅表示同构。这里未加证明，多少是因为需要用到抽象的群论公式。

运用 (8.9.42) 和 (8.9.43) 两式可知，$\hat{\boldsymbol{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 不仅分别具有 $SU(2)$ 群的李代数的结构

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hat{L}_z,[\hat{L}_y,\hat{L}_z]=i\hat{L}_x,[\hat{L}_z,\hat{L}_x]=i\hat{L}_y, \tag{8.9.51}$$

$$[\hat{A}_x,\hat{A}_y]=i\hat{A}_z,[\hat{A}_y,\hat{A}_z]=i\hat{A}_x,[\hat{A}_z,\hat{A}_x]=i\hat{A}_y, \tag{8.9 52}$$

而且还有对易关系

$$[\hat{L}_x,\hat{A}_y]=i\hat{A}_z,[\hat{L}_y,\hat{A}_z]=iA_x,[\hat{L}_z,\hat{A}_x]=i\hat{A}_y. \tag{8.9.53}$$

下面，考虑除 $x_1=x,x_2=y,x_3=z$ 之外的第四个实坐标 $x_4$，并取使

$$x_1^2+x_2^2+x_3^2+x_4^2=1$$

不变的四行四列变换矩阵 $R_4=(a_{ij})(i,j=1,2,3,4)$，$R_4$ 的集合形成了具有六个实参数的连续群。把这个群写成 $O(4)$。其中 $\det R_4=1$ 的部分构成子群，用 $SO(4)$ 表示。为了讨论这个群的局域构造，取其李代数为

$$\left.\begin{aligned}&\hat{L}_x=\hat{L}_{23},\ \hat{L}_y=\hat{L}_{31},\ \hat{L}_z=\hat{L}_{12},\\&\hat{A}_x=\hat{L}_{41},\ \hat{A}_y=\hat{L}_{42},\ \hat{A}_z=\hat{L}_{43}.\end{aligned}\right\} \tag{8.9.54}$$

(8.9.51)—(8.9.53)诸式一起就可以决定 $SO(4)$ 的李代数的结构。为此，人们以前都用这个方法来讨论开普勒运动的对称性。但是，第四个实数轴不仅在物理上难于理解，而且，为了保持空间反演时 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 性质不同，还必须将第四轴与空间轴区别开来，加上这样的条件，就完全丧失了四维实欧几里得空间的各向同性。

从本质上来讲，应该考虑的问题是，作为出发点的哈密顿量中

出现了库仑势，这倒底具有什么物理意义？可以从带电粒子与电磁场相互作用的静态近似中得到答案，欲探求其对称性的根源，就应在用场论来处理与电磁场的相互作用的过程中去寻找。这时，也便于考虑空间反演时$SU(2)\otimes SU(2)$群的有关性质。但是，其说明必须要有相对论场论知识，因此，本书只好割爱。

## §8.10 置换对称性

在这一章，我们花费了大量篇幅，用以说明连续群，特别是旋转群和平行移动群以及伽利略群的各李代数的表示，这样做有利于理解量子力学的基本物理量。那末，有限群，特别是**置换群**[1]在量子力学中起着什么样的作用呢？我们对此简单地予以说明，一言以蔽之，当实际解决量子力学中的多体问题时，如果相互作用弱到可以作为微扰来处理，那么，它不仅可以明显地减少工作量，而且也可以成为正确预言的有利工具[2]。在虽然像蛇足一样却又要证明（一般五阶方程不可能有“代数解法”等）的数学核心问题中，置换群确系关键，而不只是一种工具。

我们在本节讨论多粒子体系的量子力学处理，其核心部分实际上是通过角动量合成来说明的。也就是说，当涉及两个角动量合成时，我们是以两个粒子存在为前提的。过去多次强调过，为了按量子力学方式确定粒子图像，与该粒子有关的物理量必须成为希耳伯空间中的不可约表示。因此，两个角动量$\hat{\boldsymbol{J}}_1$和$\hat{\boldsymbol{J}}_2$的合成就归结于，在各个粒子的表示空间$\mathbf{H}$和$\mathbf{H}_2$的直积空间中，在属于第一个粒子的角动量的不可约表示$\boldsymbol{j}_1$和第二个粒子的$\boldsymbol{j}_2$的共同表示里，寻找出现的不可约表示。

这样，也许会有人反问，一个粒子的轨道角动量$\hat{\boldsymbol{L}}$和自旋$\hat{\boldsymbol{S}}$

---

1）所谓置换群，就是后面所说的对称群的子群，因置换群本身也是对称群，故常在同一含义下来使用这两个词。

2）为了应用于量子力学而初学群论的读者，学过群的抽象性质后，就可以跳过详细的有限群论而直接进入连续群。

将怎样合成?在§8.5已详细说明过,具有自旋的粒子的角动量本来就应该把$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}$看成是一个粒子的物理量,而不应该看成是$\hat{\boldsymbol{L}}$和$\hat{\boldsymbol{s}}$的合成,如果是合成的,就应能从该粒子取掉自旋。自然界中还没有发生过这种事情。自旋的有无是粒子固有的性质,一个粒子的自旋从有变到无,或其逆过程均不会存在。值得注意的是,具有自旋的两个粒子仅交换自旋态的那种相互作用却确实存在.但这与改变轨道角动量本征态的相互作用同样,即不会取掉自旋,也不会加上自旋。

那么,用角动量的合成是否就足以处理多粒子体系了呢?回答当然是否定的。首先,角动量的概念源于空间的各向同性或力学系的旋转不变性,它只不过给出表示粒子或粒子体系状态的波函数中角度部分的信息。如在氢原子的例子中所学过的那样,一个带电粒子在库仑场中运动时,确定其能量本征态的主量子数$n$与角动量无关。因此,即使两个粒子同处于$s$态($l=0$),只要主量子数不同,它们就会处于截然不同的状态。这时,在角动量合成中起绝对重要作用的不可约分解(8.6.4)几乎毫无意义,这时

$$\rho_0\otimes\rho_0=\rho_0. \tag{8.10.1}$$

因此,我们来考虑多粒子体系最简单的情况,该体系有在物理上全同的两个无自旋(或近似可忽略)的粒子,其本征态一个用$\psi_1$表示,另一个用$\psi_2$表示。具体地说,考虑它们都是$s$态,一个的主量子数是$n_1$,另一个的是$n_2$。若两个粒子间的相互作用十分弱,则该体系的状态是以$\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$和$\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)$为基底的希耳伯空间子空间中的矢量

$$\psi(1,2)=\xi_1\psi_1(\varepsilon_1)\psi_2(q_2)+\xi_2\psi_1(q_2)\psi_2(q_1),\xi_1,\xi_2\in\mathbf{C}, \tag{8.10.2}$$

其中,$q_j(j=1,2)$是第$j$个粒子的空间坐标,$\psi_j(j=1,2)$是能量为$E_j$的归一化本征态。因$\psi_1$和$\psi_2$正交,故$\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$和$\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)$也正交。若把该体系的哈密顿量写为$\hat{H}$,则

$$\hat{H}\psi(1,2)=(E_1+E_2)\psi(1,2) \tag{8.10.3}$$

的成立与$\xi_1$和$\xi_2$的值无关。其中,$\psi(1,2)$是归一化的。

下面，用 $P(12)$ 表示置换坐标 $q_1$ 和 $q_2$ 的算符，设 $\hat{H}$ 与之对易．当 $\hat{H}$ 中的势仅为 $|q_1 - q_2|$ 的函数时，该条件总可以被满足。（在物理上，有时用到的势是 $q_1 - q_2$ 的函数，参看本讲座第一卷《经典物理学》(I) §3.15 户田点阵一段．）这时，让 $P(12)$ 由左边作用于(8.10.3)式两边，则

$$P(12)\hat{H}P(12)P(12)\psi(1,2) = (E_1 + E_2)P(12)\psi(1,2).$$

故 $P(12)\psi(1,2) = \psi(2,1)$ 也是同一能量 $(E_1 + E_2)$ 的本征态。$P(12)$的海森伯方程为

$$i\hbar \frac{d}{dt}P(12) = [P(12),\hat{H}] = 0. \tag{8.10.4}$$

由此可知，$P(12)$是运动恒量。

从(8.10.2)式可知，在我们最初选定基矢的空间中，$\psi(1,2)$可用二分量的复矢量 $\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}$ 来表示。由(8.10.2) 来看，$P(1\ 2)$ 是把 $\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}$变成$\begin{bmatrix}\xi_2\\ \xi_1\end{bmatrix}$的矢量变换。显然，它可以表示成矩阵

$$P(12) = \begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \tag{8.10.5}$$

不过，这却不是对角矩阵。因 $P(12)$ 与 $\hat{H}$ 对易，故应能把它们同时对角化。这时，矢量空间的子空间不应被 $P(12)$ 改变，首先找出这种情况下的不变矢量。它显然是

$$\lambda(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) + \psi_1(q_2)\psi_2(q_1)),\lambda \in \mathbf{C}. \tag{8.10.6}$$

因此，取新的基矢为

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) + \psi_1(q_2)\psi_2(q_1)), \tag{8.10.7}$$

其中$1/\sqrt{2}$是归一化所需要的．可以直接得到与之正交的矢量，即

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) - \psi_1(q_2)\psi_2(q_1)). \tag{8.10.8}$$

可以由(8.10.7)和(8.10.8)两式直接写出从原基矢组到新基矢组的变换，有

$$Q=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}. \tag{8.10.9}$$

因此，在新基矢系 $(\psi_+,\psi_-)$ 中，$P(12)$ 表示为

$$Q^{-1}P(12)Q=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}. \tag{8.10.10}$$

显然，$\psi_+$和$\psi_-$是本征值分别为 1 和$-1$的$P(12)$的本征态。

在上面的叙述中，依靠物理直观很容易用波函数具体地写出基矢，先以矩阵表示 $P(12)$操作，然后再将其对角化。从另一个角度再来谈这个问题，可以把它抽象为两个“客体”的置换操作所构成的群在二维复空间中的表示问题。一般用数字 1 和 2 表示两个“客体”，把 1 换为 2 而把 2 换为 1 的映射表示为$\begin{pmatrix}12\\21\end{pmatrix}$，同时再考虑把 1 换成 1 把 2 换成 2 的映射$\begin{pmatrix}12\\12\end{pmatrix}$，则$\left\{\begin{pmatrix}12\\12\end{pmatrix}\begin{pmatrix}12\\21\end{pmatrix}\right\}$相对于接续置换的运算确实会构成群。称其为二阶对称群 $S_2$。因此，若表示成

$$e=\begin{pmatrix}1 & 2\\ 1 & 2\end{pmatrix},P(12)=\begin{pmatrix}1 & 2\\ 2 & 1\end{pmatrix},$$

则 $P^2(12)=e$，因 $e$ 的矩阵表示为$\begin{bmatrix}10\\01\end{bmatrix}$，故若对角化后的 $P(12)$为 $\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{bmatrix}$，则 $\lambda_1^2=\lambda_2^2=1$。便直接可以得到 $\lambda_1、\lambda_2=\pm1$。根据$+1$的本征态是对称的，$-1$的本征态是反对称的，可以直接得到$\psi_+$和$\psi_-$。由(8.10.10)式可知，$S_2$的二维表示会不可约分解为两个一维表示。二维表示空间忠实地描绘了两个粒子位置坐标的变换，由此出发，我们达到了一维不可约表示。实际上，根据“交换群的复不可约表示都是一维的”定理，当然可以预料到这一结果。$S_2$显然是交换群！若用在角动量合成时采用过的杨图来表示上述结果，则有

$$\left.\begin{aligned}&\mathbf{H}=\mathbf{H}_{+}\oplus\mathbf{H}_{-},\\&\square\otimes\square=\square\square+\begin{array}{|c|}\hline\\\hline\\\hline\end{array}.\end{aligned}\right\}\tag{8.10.11}$$

下面要处理三粒子体系的简单情形。在此之前，我们先就二粒子体系来研究一下，当两个粒子分别处于两个本证态 $\psi_1$ 和 $\psi_2$ 时，会出现什么情况。这时，考虑四个基矢 $\psi_1(q_1)\psi_1(q_2)$、$\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$，$\psi_2(q_1)\psi_1(q_2)$，$\psi_2(q_1)\psi_2(q_2)$。即

$$\begin{aligned}\psi(1,2)=&\xi_1\psi_1(q_1)\psi_1(q_2)+\cdots\\&+\xi_4\psi_2(q_1)\psi_2(q_2),\xi_i\in\mathbf{C},(i=1,2,3,4).\end{aligned}$$

这样

$$P(1\ \ 2)=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}\xrightarrow{\text{对角化}}\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{bmatrix},$$

对称状态是 $\psi_1(q_1)\psi_1(q_2)$、$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)+\psi_2(q_1)\psi_1(q_2))$、$\psi_2(q_1)\psi_2(q_2)$，反对称状态是 $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)-\psi_2(q_1)\psi_1(q_2))$。

若把$\psi_1$和$\psi_2$取为自旋 $\frac{1}{2}$的本证态$\psi_{\uparrow}$和$\psi_{\downarrow}$，则上述结果极类似于

$$\rho_{1/2}\otimes\rho_{1/2}=\rho_1\oplus\rho_0$$

读者或许已经注意到，(8.10.5)式和 (8.10.10) 式分别是泡利矩阵$\sigma_x$和$\sigma_y$。实际上，寻求对称群的矩阵表示时，可以利用泡利矩阵。

三粒子体系的最简单情况是可以忽略彼此之间相互作用的近似情况，这时，无自旋的三个全同粒子之中某一个处于本征态 $\psi_1$，剩下两个之中一个处于 $\psi_2$，最后一个处于 $\psi_3$。这样，共有六个本征态 $\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)\psi_3(q_3)$，$\psi_1(q_1)\psi_2(q_3)\psi_3(q_2)$，$\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)\psi_3(q_3)$，$\psi_1(q_2)\psi_2(q_3)\psi_3(q_1)$，$\psi_1(q_3)\psi_2(q_1)\psi_3(q_2)$，$\psi_1(q_3)\psi_2(q_2)\psi_3(q_1)$。这六个矢量显然正交。把该体系的波函数写成 $\psi(1,2,3)$，哈密顿量写成$\hat{H}$，$\psi(1,2,3)$ 可以用这六个基矢的线性组合来表示，而无论采用什么组合方式，均有下式成立：

$$\hat{H}\psi(1,2,3) = (E_1 + E_2 + E_3)\psi(1,2,3), \quad (8.10.12)$$

其中，$E_j(j = 1, 2, 3)$ 是与 $\hat{H}$ 的本征态 $\psi_j$ 相对应的单粒子能量本征值。(8.10.12)式表明，这种三粒子体系是六重简并的。因此，若考虑到以前所忽略的粒子间的相互作用，则该简并应以某种形式消除。

这种计算，即通过微扰来消除简并，要以此其矢系为完备系，即共有六个基矢为出发点来具体地做。从原理上来说，仅用已经学过的量子力学内容就完全可行。但是，随着粒子数 $n$ 的增加，基矢的数目是 $n!$，因而矩阵的阶数也以 $n!$ 形式骤增，计算会异常烦杂。所以，预先掌握关于粒子坐标置换的对称性，整理该体系与相互作用无关的本证态，不仅可以使运算简化，而且有利于物理上的预测。我们不是一般地讨论 $n$ 粒子的情形，而是就 $n = 3$，即上述三粒子体系的情况，作为一般理论的例子来进行论述。

为使语言简单易懂，我们将记号简化，把上面列举的六个本征矢或基底表示为$\psi_a(1)\psi_b(2)\psi_c(3)$，$\psi_a(1)\psi_b(3)\psi_c(2)$，$\psi_a(2)\psi_b(1)\psi_c(3)$，$\psi_a(2)\psi_b(3)\psi_c(1)$，$\psi_a(3)\psi_b(1)\psi_c(2)$，$\psi_a(3)\psi_b(2)\psi_c(1)$。这样一来，这些基底显然可以通过对第一基底进行如下的数字置换而得到：

$$\left.\begin{aligned} e &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} p_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} p_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \\ p_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} p_4 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} p_5 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}\right\}. \quad (8.10.13)$$

特地采用记号 ↓，是为了明确表示，置换仅由 ↓ 决定，而与横着排列的数字毫无关系。通常省略 ↓，而在这儿暂且予以保留。两个置换之积就是接续进行置换，即定义为箭头的接续对应。

我们用算符来处理置换时，在先进行置换$p_i$再进行置换$p_j$这个意义下把置换$p_i$和$p_j$之积写成 $p_jp_i$。例如

$$p_2p_1=\begin{pmatrix}1&2&3\\\downarrow&\downarrow&\downarrow\\1&3&2\\\downarrow&\downarrow&\downarrow\\2&3&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&3\\\downarrow&\downarrow&\downarrow\\2&3&1\end{pmatrix}=p_3, \tag{8.10.14}$$

$$p_1p_2=\begin{pmatrix}1&2&3\\\downarrow&\downarrow&\downarrow\\2&1&3\\\downarrow&\downarrow&\downarrow\\3&1&2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&3\\\downarrow&\downarrow&\downarrow\\3&1&2\end{pmatrix}=p_4. \tag{8.10.15}$$

不难证实，$\{e,p_1,\cdots,p_5\}$ 置换集合对于上面定义的积构成六个元素的非交换群．称之为三阶**对称群**，用 $S_3$ 表示．为了讨论 $S_3$ 的结构，再引入下面的圆弧箭头，同时定义括弧记号，将会方便一些．

$$e=\begin{pmatrix}1&2&3\end{pmatrix}\equiv(1)(2)(3) \tag{8.10.16}$$

$$p_1=\begin{pmatrix}1&2&3\end{pmatrix}\equiv(1)(2\ 3)=(1)(3\ 2) \tag{8.10.17}$$

$$p_2=\begin{pmatrix}1&2&3\end{pmatrix}\equiv(1\ 2)(3)=(3)(1\ 2)=(3)(2\ 1) \tag{8.10.18}$$

$$p_3=\begin{pmatrix}1&2&3\end{pmatrix}\equiv(1\ 2\ 3)=(2\ 3\ 1)=(3\ 1\ 2) \tag{8.10.19}$$

$$p_4=\begin{pmatrix}1&2&3\end{pmatrix}\equiv(1\ 3\ 2)=(3\ 2\ 1)=(2\ 1\ 3) \tag{8.10.20}$$

$$p_5=\begin{pmatrix}1&2&3\end{pmatrix}\equiv(2)(1\ 3)=(2)(3\ 1) \tag{8.10.21}$$

(1)、(12)、(123)分别称为 1 的、1 和 2 的、1 和 2 和 3 的**循环置换**．于是，$S_3$ 的所有元素都可以用**循环置换**之积来表示．这对 $S_n$ 也适

用，用归纳法不难证明之。循环置换有下列重要性质：

$$(ij)^2 = (i)(j),(i \neq j);(ijh)^3 = (i)(j)(k),(i \neq j \neq k \neq i).$$

我们来试着把与 $S_3$ 有关的六维矢量空间 $V_6$ 分解成几个不变子空间的直和。首先，矢量集

$$V_1 = \{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x} = \lambda(e + p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_5)\psi(1,2,3),\lambda \in \mathbf{C}\} \tag{8.10.22}$$

显然构成一维不变子空间。其次，考虑与$V_1$正交的三维空间

$$V_3 = \{\boldsymbol{y}:\boldsymbol{y} = (\lambda p_1 + \mu p_5 + \nu p_2 - \frac{1}{3}(\lambda + \mu + \nu)(e + p_3 + p_4))\psi(1,2,3),\lambda,\mu,\nu \in \mathbf{C}\}, \tag{8.10.23}$$

它也形成$S_3$的不变子空间.通过直接计算就可以弄清楚这一点，例如

$$\begin{aligned} p_1\boldsymbol{y} &= p_1(\lambda p_1 + \mu p_5 + \nu p_2 - \frac{1}{3}(\lambda + \mu + \nu)(e + p_3 + p_4))p_1^{-1}p_1\psi(1,2,3) \\ &= (\lambda p_1 + \nu p_5 + \mu p_2 - \frac{1}{3}(\lambda + \mu + \nu)(e + p_3 + p_4))p_1\psi(1,2,3) \in V_3. \end{aligned} \tag{8.10.24}$$

因此，剩下的不变子空间当然是二维矢量空间 $V_2$。于是便可以把$V_6$分解成$V_1$、$V_3$及$V_2$的直和，不过，这还不是不可约分解。实际上，若从$V_3$之中取出

$$V_1' = \{\boldsymbol{y}:\boldsymbol{y} = \lambda(p_1 + p_5 + p_2 - e - p_3 - p_4) \times \psi(1,2,3),\lambda \in C\} \subset V_3, \tag{8.10.25}$$

则不难看出，它依然是不变子空间。$V_3$ 中剩余部分形成二维不变子空间$V_2'$。$V_2'$和$V_2$都不能再分解成一维不变子空间.如若不然，$S_3$的所有元素都能对角化了，而这与$S_3$为非交换群相矛盾。结果，$V_6$的不可约分解如图8.3所示。在$S_3$的情况下，用初等计算就可以求出其二维不可约表示。我们把它留给读者作为练习(在[弥永，杉浦] p.166 之中有详细的说明)。

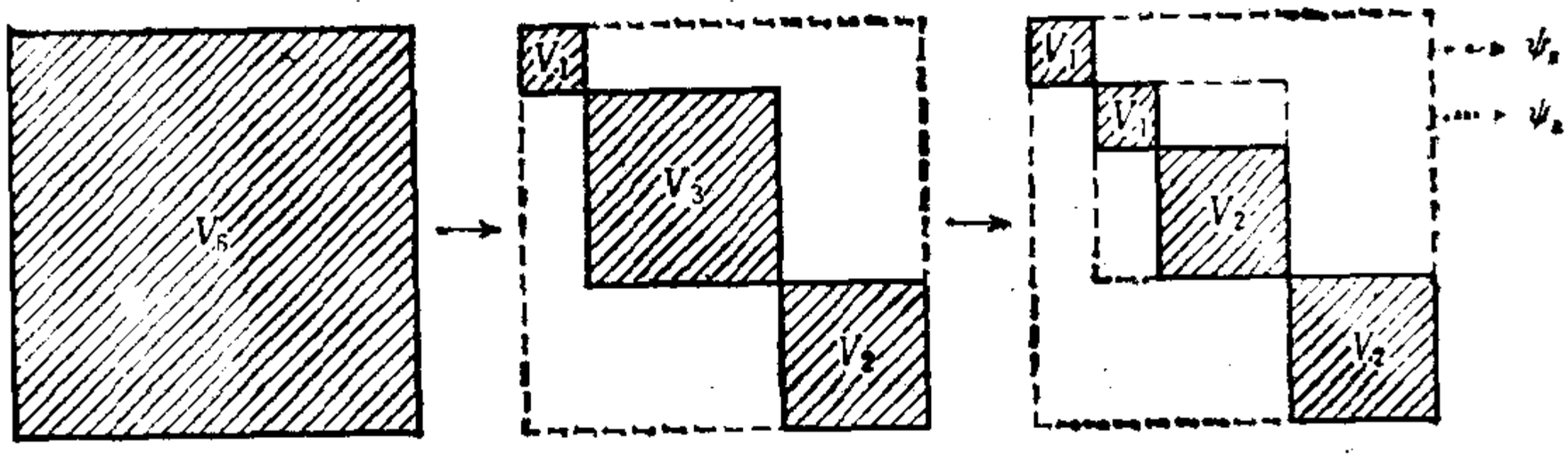



图8.3　$V_6$的不可约分解

目前我们所关心的，不是这种不可约表示本身，而是进行不可约分解时的本征矢，即与该粒子系状态对称性有关的性质。通常把 $V_1$ 和 $V_1'$ 的本征矢分别写成 $\psi_s$ 和 $\psi_a$，于是根据 (8.10.22) 和 (8.10.25)两式，有

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{6}}(e + p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_5)\psi(1,2,3), \quad (8.10.26)$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{6}}(-e + p_1 + p_2 - p_3 - p_4 + p_5)\psi(1,2,3), \quad (8.10.27)$$

显然 $\psi_s$ 和 $\psi_a$ 正交。通过直接计算，可以发现下面这些显而易见的性质：

$$(12)\psi_s = \psi_s, (13)\psi_s = \psi_s, (23)\psi_s = \psi_s, \quad (8.10.28)$$

$$(12)\psi_a = -\psi_a, (13)\psi_a = -\psi_a, (23)\psi_a = -\psi_a. \quad (8.10.29)$$

这表明，$\psi_s$ 在任何两个粒子互换时不变，而 $\psi_a$ 在任何两个粒子互换时改变符号。若 $\psi(1,2,3) = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2)\psi_3(q_3)$，则有

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{6}}(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)\psi_3(q_3) + \psi_1(q_1)\psi_2(q_3)\psi_3(q_2) + \cdots + \psi_1(q_3)\psi_2(q_2)\psi_3(q_1)), \quad (8.10.30)$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \psi_1(q_2) & \psi_1(q_3) \\ \psi_2(q_1) & \psi_2(q_2) & \psi_2(q_3) \\ \psi_3(q_1) & \psi_3(q_2) & \psi_3(q_3) \end{vmatrix}. \quad (8.10.31)$$

为了便于把多粒子体系的状态按关于粒子置换的对称性来进行分类整理，我们处理了粒子空间坐标$q_i$ 的交换。而在历史上，为了分析原子光谱而按照量子力学求解多电子体系时，作为泡利原

理的公式化，斯莱特(Slater)提出了(8.10.31)式，在$q_i$中包含了第$i$个电子的自旋坐标，因此，称这样的(8.10.31)式为斯莱特转行列式。若想以上述方式去处理物理上的多粒子体系，则不得不涉及统计问题。我们到第九章再来处理这一问题。

本节用实验方法(即实际检验的方法）找出了对称群$S_2$和$S_3$的与量子力学有关的必要信息。在最后来说明一般地求$S_n$的不可约分解的方法.其证明请参看[弼永，杉浦]p.p.176—242。

(i) 把$S_n$的元素用不含共同数字的循环置换之积来表示。若用$m_i$表示各个循环置换中所包含数字的个数，则显然有

$$m_1 + m_2 + \cdots + m_r = n. \tag{8.10.32}$$

设

$$m_1 \geqslant m_2 \geqslant \cdots \geqslant m_r \geqslant 0, \tag{8.10.33}$$

把$n$个小正方形像图8.4那样排列起来。在角动量合成时，作为杨图，我们已经用过这种图形。若杨图相同，则与之对应的$S_n$的元素就属于同一类$C$。这意味着

$$\pi \in C \Rightarrow q\pi q^{-1} \in C, \forall q \in S_n. \tag{8.10.34}$$

显然，类的数目等于不等式(8.10.33)和方程(8.10.32)的整数解的个数，这也就是$S_n$的不可约表示的个数。

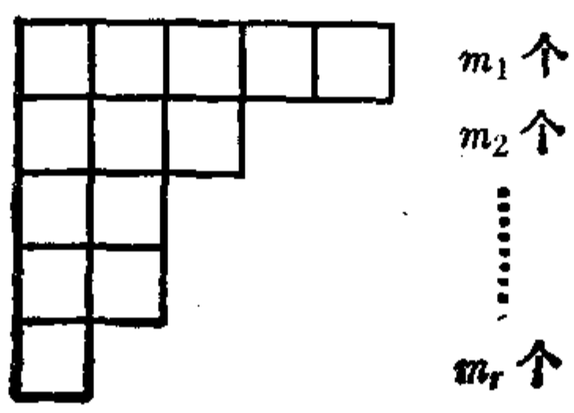



图 8.4

(ii) 各个不可约表示的维数等于按如下条件把数字 1、2、…、$n$填入其杨图的方法的数目：

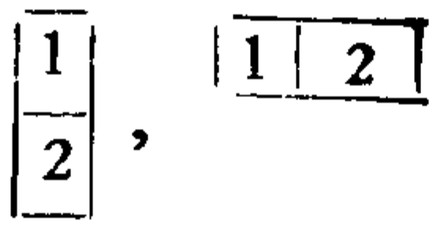
(a) 各行的数字按由左向右减小的顺序排列，

(b) 各列的数字按由上到下减小的顺序排列。

(iii) 各个不可约表示维数的平方和等于 $n!$。这一条可用于

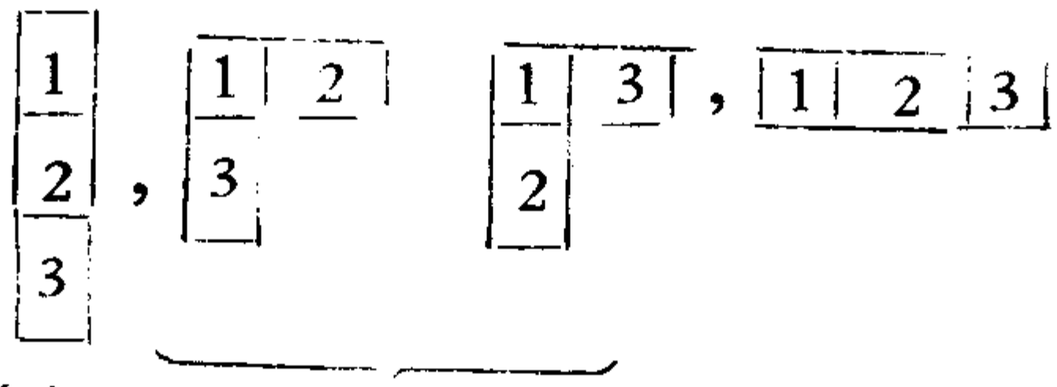
验算。

例 1 $S_2$:



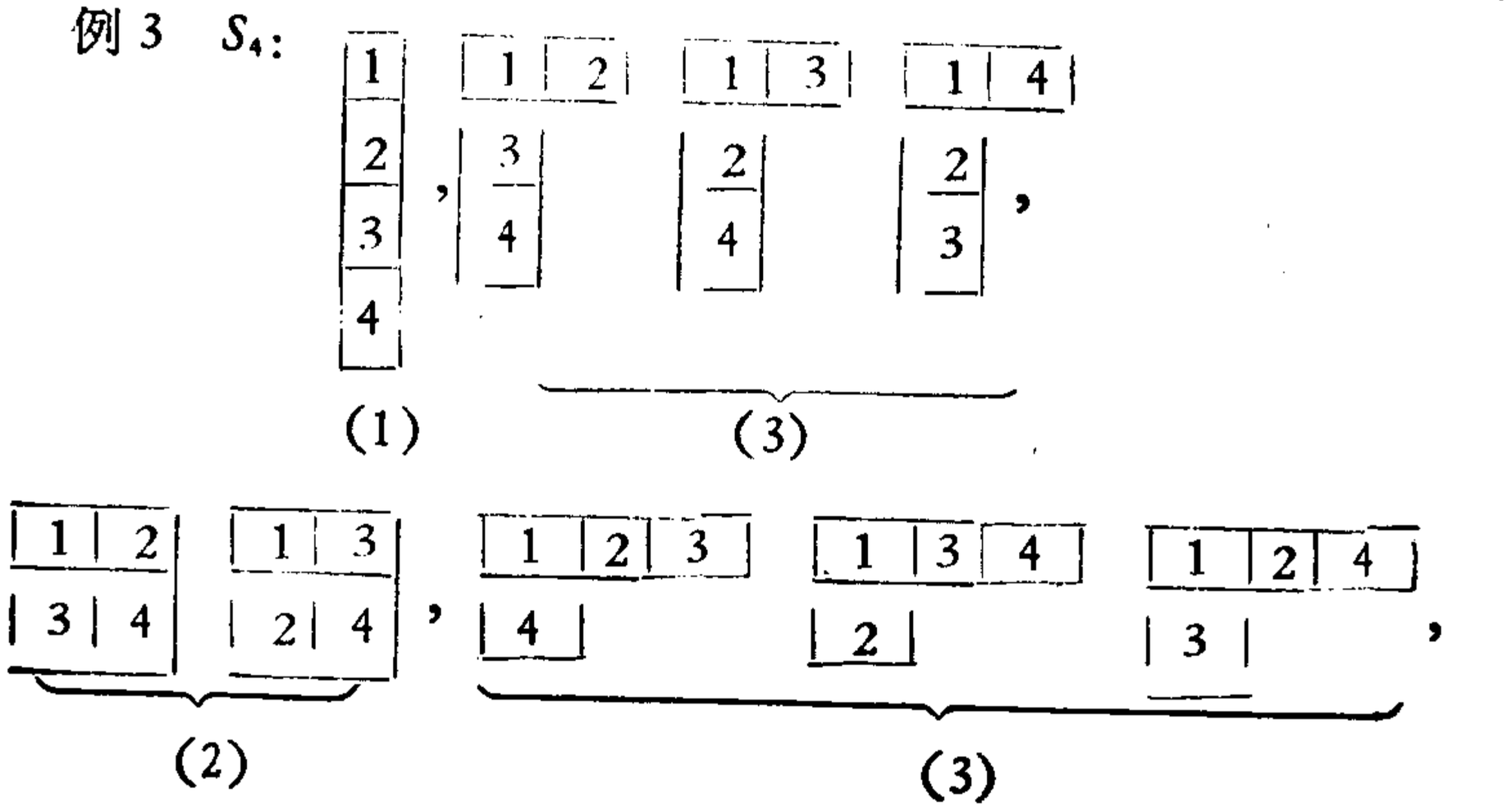
维数：(1)　(1)　　$1^2 + 1^2 = 2!$

例 2 $S_3$:



(1)　(2)　(1)　$1^2 + 2^2 + 1^2 = 3!$

例 3 $S_4$:



(1)　(3)　(2)　(3)　(1)

$1^2 + 3^2 + 2^2 + 3^2 + 1^2 = 4!$

# 第四部分　多粒子体系与场

## 第九章　多粒子体系的量子力学

### §9.1　全同粒子体系的态空间

#### a）全同粒子体系的波函数

我们考虑由多个全同粒子所构成的体系，在此，作为二粒子体系的推广，首先着眼于描述 $N$ 粒子体系运动的方式，以后再来研究与粒子间相互作用的性质有关的力学性质．描述该体系状态的空间，是 $N$ 个描述单粒子状态的空间 $\mathbf{R}$ 的积空间 $\mathbf{R}^N$．假设描述粒子 $i$ 的运动的变量为 $\boldsymbol{X}_i$（取配位空间的坐标为 $\boldsymbol{X}$．当有位置坐标 $\boldsymbol{X}$ 及自旋变量时，一般把它们统称为坐标），则 $N$ 粒子体系的波函数一般可以写成 $\Psi(\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$ 的形式．若单粒子空间 $\mathbf{R}$ 由完备系 $\{\varphi_i(\boldsymbol{X})\}$ 构成，即 $R$ 的函数可由 $\varphi_i(\boldsymbol{X})(i = 1,2,\cdots)$ 的线性组合来表示，那么 $\Psi(\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$ 就能用完备系 $\{\varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_1)\varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{X}_2)\cdots\varphi_{\alpha N}(\boldsymbol{X}_N)\}$ 展开．其中 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_N$ 是 1、2、…中的某一个．即，$\{\varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_1)\varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{X}_2)\cdots\varphi_{\alpha N}(\boldsymbol{X}_N)\}$ 构成 $\mathbf{R}^N$．虽然作为函数系 $\{\varphi_i\}$，取什么样的完备系都可以，但为了与物理状况相对应，通常取单粒子运动的哈密顿算符 $H_0$ 的本征正交函数系：

$$H_0(\boldsymbol{X}_j)\varphi_{\alpha_j}(\boldsymbol{X}_j) = \varepsilon_{\alpha_j}\varphi_{\alpha_j}(\boldsymbol{X}_j)\text{．} \tag{9.1.1}$$

一般来说，$N$ 粒子体系的哈密顿算符 $H$ 可以写成单粒子运动的哈密顿算符 $H_0$ 之和再加上粒子间相互作用的哈密顿算符 $H_1$ 的形式：

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_0(\boldsymbol{X}_i) + H_I(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_N)\text{．} \tag{9.1.2}$$

方便一些的作法是把此处的 $H_0$ 取作(9.1.1)式的 $H_0$。

下面我们认为构成体系的粒子是全同的。在二粒子体系中，当两个粒子全同(或相同)时，粒子 1 处于状态 $A$ 而粒子 2 处于状态 $B$，还是粒子 2 处于状态 $A$ 而粒子 1 处于状态 $B$，从物理上是无法鉴别的。其原因在于，我们鉴别粒子，依据的是该粒子所具有的属性的差异，而所谓的全同粒子，可以说面目是一样的，除了依据状态的差异外无法予以区别。这种情况可以考虑推广到全同粒子的多粒子体系。即使对粒子加上编号，而设定某一状态，从物理上来说也是同一的。例如，从物理上无法区别粒子 1 处于状态 $\alpha_1$，粒子 2 处于状态 $\alpha_2,\cdots$，粒子 $N$ 处于状态 $\alpha_N$，还是粒子 $i_1$ 处于状态 $\alpha_1$，粒子 $i_2$ 处于 $\alpha_2,\cdots$，粒子 $i_N$ 处于状态 $\alpha_N$。这种状况在量子力学中将如何体现呢?

全同粒子的物理体系，其组成粒子编号的各种编法是一样的，也就是说，置换粒子编号时物理量不变。例如，通过二体相互作用组合而成的 $N$ 个全同粒子体系，其哈密顿算符可以写为

$$H=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m}+U(\boldsymbol{X}_i)\right)+\frac{1}{2}\sum_{ij}V(\boldsymbol{X}_i,\boldsymbol{X}_j),\quad(9.1.3)$$

此式显然不随粒子编号而变。

假设该哈密顿算符的一个本征函数为 $\Psi(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N)$，将其粒子坐标的编号 $(1,2,\cdots,N)$ 换成 $(i_1,i_2,\cdots,i_N)$ 而得到的函数 $\Psi(\boldsymbol{X}_{i_1},\boldsymbol{X}_{i_2},\cdots,\boldsymbol{X}_{i_N})$，因 $H$ 对该置换是不变的，所以依然是 $H$ 的属于同一本征值的本征函数。由于 $N$ 个粒子有 $N!$ 个不同的置换方式，因而，如果不考虑其它原因所产生的简并，则对应于一个本征值就应该出现 $N!$ 个本征函数。倘若考虑这 $N!$ 个函数所构成的空间，那么，该空间中的函数对于粒子编号的置换来说就会在该空间中被变换成另一个函数。$N$ 个编号的对换操作，即 $N$ 个字母置换，形成一个群。它就是 $N$ 阶对称群。于是，以上所考虑的空间为该群的表示空间。稍为一般的情况如下所述。

设 $N$ 个字母的置换为 $P$，对上例来说就是 $(1,2,\cdots,N)\rightarrow(i_1,i_2,\cdots,i_N)$。该置换的全体构成 $N$ 阶对称群。就坐标 $(x_1,$

$x_2,\cdots,x_N$) 而言，现在我们对其脚标(粒子编号)进行置换：$(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N)\to(\boldsymbol{X}_{i_1},\boldsymbol{X}_{i_2}\cdots,\boldsymbol{X}_{i_N})=P(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N)$。$\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N$ 的函数 $\Psi(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N)$ 一般会由于这个操作而发生函数形式的变化：$\Psi\to\Psi'$。我们把该变换定义为 $\Psi'(\boldsymbol{X})=\Psi(P\boldsymbol{X})$，而把变换 $\Psi\to\Psi'$ 记作 $U_P:\Psi'=U_P\Psi$。根据这个变换的性质，$\|\Psi\|$ 不随变换而变化，即 $U_P$ 是幺正变换，而且可以证明 $\Psi$ 空间中的变换形成对称群的幺正表示。另外，设坐标 $\boldsymbol{X}_i$ 是 $N$ 个全同粒子体系中的粒子 $i$ 的坐标，而考虑与该体系有关的物理量 $A$。在全同粒子体系中即使加上粒子编号也不会改变物理状况，或者说，我们无法区别它们，与此相应，可以要求

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle=\langle\Psi'|A|\Psi'\rangle.$$

因为

$$\langle\Psi'|A|\Psi'\rangle=\langle U_P\Psi|A|U_P\Psi\rangle=\langle\Psi|U_P^{-1}AU_P|\Psi\rangle,$$

所以，由于置换 $P$ 而引起的算符 $A$ 的变换是

$$A\to U_P^{-1}AU_P,$$

上述要求为

$$A=U_P^{-1}AU_P \text{ 或 } U_PA=AU_P.$$

在前面的例子中则把 $H$ 取作 $A$。

$U_P$ 的集合虽然构成对称群的表示，但却未必是不可约表示。上面所构成的 $\Psi$ (以及由此得到的全体 $U_P\Psi$) 的空间，是按照对称群的不可约表示分解的。在对称群的不可约表示中，与群的阶数无关的有对称表示和反对称表示。它们都是一维表示，对于所有的置换，对称表示为 $U_P=1$；而反对称表示对于偶置换为 $U_P=1$，对于奇置换为 $U_P=-1$。也就是说，假若 $\Psi_S(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N)$ 和 $\Psi_A(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N)$ 分别为这两个表示的基，则

$$\left.\begin{aligned}&\Psi_S(P\boldsymbol{X}_i)=\Psi_S(\boldsymbol{X}_i),\qquad \Psi_A(P\boldsymbol{X}_i)=\delta_P\Psi_A(\boldsymbol{X}_i)\\&(\delta_P\text{ 与置换 }P\text{ 的奇偶性对应分别为}-1\text{ 或}+1)\end{aligned}\right\}.\quad(9.1.4)$$

$\Psi_S$、$\Psi_A$ 可以由 $\Psi(\boldsymbol{x})$ 构成，即

$$\left.\begin{aligned}\Psi_S &= \mathscr{S}\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P U_P\Psi(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N)\\ \Psi_A &= \mathscr{A}\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P \delta_P U_P\Psi(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N)\end{aligned}\right\}. \quad (9.1.5)$$

在全同粒子体系中区别粒子编号是没有物理意义的，这就是说，即使加上粒子编号，在物理上也无法鉴别粒子编号置换前后的状态．由于是物理上无法鉴别的同一客体，因此与该体系对应的物理状态的态矢或波函数只会有一个，这个波函数只能是上述 $\Psi_S$ 或 $\Psi_A$ 中的一种形式．这一点是量子力学所特有的．在经典力学中，即使是同种粒子也能追踪每个粒子的运动轨迹，所以可以识别粒子 1 处于运动状态 $A$ 而粒子 2 处于运动状态 $B$，还是粒子 1 处于运动状态 $B$ 而粒子 2 处于运动状态 $A$．相反，在量子力学中，并不能通过观测来识别它们．因此，在这个意义上状态简并是无法消除的．

**b）泡利原理，统计**

在上面定义 $\mathscr{S}$ 或 $\mathscr{A}$ 时所用过的 $\Psi$ 是 $N$ 粒子体系的空间波函数，但却没有必要是 $N$ 粒子体系的本征态．从而索性可以选为 $N$ 粒子体系的空间基矢更为方便一些，把 $\Psi$ 表示成(9.1.1)式中单粒子态之积

$$\Psi^{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N}(\boldsymbol{X}_1,\ \boldsymbol{X}_2,\ \cdots,\ \boldsymbol{X}_N) = \varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_1)\varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{X}_2)\cdots\varphi_{\alpha N}(\boldsymbol{X}_N), \quad (9.1.6)$$

则 $\Psi_A$ 为

$$\Psi_A^{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N}(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_1) & \varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_2) & \cdots & \varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_N)\\ \varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{X}_1) & \varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{X}_2) & \cdots & \varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{X}_N)\\ \cdots & \cdots & & \cdots\\ \varphi_{\alpha N}(\boldsymbol{X}_1) & \varphi_{\alpha N}(\boldsymbol{X}_2) & \cdots & \varphi_{\alpha N}(\boldsymbol{X}_N)\end{vmatrix}. \quad (9.1.7)$$

这叫作斯莱特行列式．

由这种形式立刻可以判断，如果单粒子态 $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N$ 之中

有任意两个相同时，就会导致 $\Psi_A = 0$. 也就是说，在这种情况下不能有两个以上的粒子占据同一状态，一个状态只会有一个粒子. 具有这种性质的粒子称为**费米子**. 而这种性质则叫做**泡利原理**或泡利不相容原理.

与此相应，$\Psi_S$ 却是

$$\Psi_S^{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N}(\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \cdot \sum_P U_P(\varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_1)\varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{X}_2)\cdots\varphi_{\alpha_N}(\boldsymbol{X}_N)), \quad (9.1.8)$$

显然，这时 $\alpha_1$、$\alpha_2$、$\cdots$、$\alpha_N$ 之中即使有相同的，也将会导致 $\Psi_S = 0$. 也就是说，一个单粒子态可以为多个粒子所占据. 表示粒子体系状态的波函数具有 $\Psi_S$ 这样的对称性，该粒子就叫做玻色子.

对(9.1.8)式来说，在单粒子态 $\alpha_i$ 之中可以有 $n$ 个是相同的. 因此，在玻色子体系的情况下，说明各单粒子态到底有多少个粒子，就能表示出系统的状态. 将单粒子态编上号(例如，从低能开始顺序编号)，设状态 1 有 $n_1$ 个粒子，状态 2 有 $n_2$ 个粒子，…，状态 $i$ 有 $n_i$ 个粒子. 也就是说，(9.1.8)式的 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_N$ 之中，$\alpha = 1$ 的粒子数有 $n_1$ 个，$\alpha = 2$ 的粒子数有 $n_2$ 个，…，$\alpha = i$ 的粒子数有 $n_i$ 个，$n_i \geqslant 0 (i = 1, 2, \cdots)$. 因为整个体系的粒子数为 $N$，所以 $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$. 体系的状态可由状态分布 $(n_1, n_2, \cdots)$ 来确定. 这时

$$\Psi(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_N) = \underbrace{\varphi_1(\boldsymbol{X}_1)\cdots\varphi_1(\boldsymbol{X}_{n_1})}_{n_1\text{个}}\varphi_2(\underbrace{\boldsymbol{X}_{n_1+1}\cdots\varphi_2(\boldsymbol{X}_{n_1+n_2})}_{n_2\text{个}})\cdots, \quad (9.1.9)$$

由此再采用(9.1.8)式的步骤而得到的 $\Psi_S$ 显然不能归一化. 因而，由(9.1.9)式出发，归一化的波函数为

$$\Psi_S^{n_1 n_2\cdots}(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_N) = C(n_1, n_2, \cdots)\sum_P U_P\Psi(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_N). \quad (9.1.10a)$$

式中 $C$ 是归一化常数. (9.1.10a) 式右边 $\Sigma$ 的求和个数为 $N!$. 然

而，若 $n_1 \neq 0$，则置换 $P$ 中从 1 到 $n_1$ 的那种置换并不会改变 $\Psi$ 的形式. 同样，若 $n_2 \neq 0$，则 $n_1+1,\cdots,n_1+n_2$ 字母的置换也不会改变 $\Psi$ 的形式，这种使 $\Psi$ 的形式不变的置换总共有 $n_1!n_2!\cdots$ 个. 因此，(9.1.10a)式也可以写成

$$\Psi_S^{n_1 n_2\cdots}(\boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N)=C'(n_1,n_2,\cdots)\sum_{P'}{}' U_{P'}\Psi(\boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N). \tag{9.1.10b}$$

式中 $U_{P'}$ 是只考虑了改变 $\Psi$ 形式的那种置换. 所谓不改变 $\Psi$ 形式的置换，指的是只在 $(1,\cdots,n_1),(n_1+1,\cdots,n_1+n_2),\cdots$ 的各个括号中字母的置换. 它们在置换 $P$ 的群中构成子群. $P'$ 置换属于除掉这些子群所得的商群，$\Sigma'$ 表示对 $P'$ 求和. 因 $\Sigma'$ 的求和个数显然是 $N!/(n_1!n_2!\cdots)$，故

$$C'(n_1,n_2,\cdots)=\sqrt{\frac{n_1!n_2!\cdots}{N!}} \tag{9.1.11}$$

($\Sigma'$ 的和中所含的各项相互正交). 与此相应，(9.1.8)式的 $\Sigma$ 诸项中相同的有 $n_1!n_2!\cdots$ 个，所以 $C$ 就是

$$C(n_1,n_2\cdots)=\frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\cdots}}. \tag{9.1.12}$$

### c) 粒子占有数表象

单粒子态的完备系 $\{\varphi_i\}$ 决定之后，$\Psi_S$ 和 $\Psi_A$ 就可以由各个单粒子态中粒子占有的个数来决定. 也就是说，由一组数 $(n_1,n_2,\cdots)$ 决定. 在费米子体系的情况下，$n_i$ 是 1 或 0. 若整个体系的粒子数为 $N$，则 $\sum_i n_i=N$. 如上所述，用 $\left\{\prod_{i=1}^{N}\varphi_{\alpha_i}(\boldsymbol{X}_i)\right\}$ 可以构成 $N$ 粒子体系的态空间，因此，倘若把 $\Psi_S^{n_1 n_2\cdots}$ 或 $\Psi_A^{n_1 n_2\cdots}$ 所描述的状态表示成

$$|n_1,n_2,\cdots\rangle, \tag{9.1.13}$$

就可以用它作为 $N$ 粒子体系的状态的基矢. 若 $\{\varphi_i\}$ 构成完备正交系，则 $|n_1,n_2,\cdots\rangle$ 就具有性质

$$\langle n_1', n_2', \cdots | n_1, n_2, \cdots \rangle = \delta_{n_1 n_1'} \delta_{n_2 n_2'} \cdots, \quad (9.1.14)$$

从而也是正交系。 $N$粒子体系的状态 $|\phi(1,2,\cdots,N)\rangle$ 将能用 $|n_1, n_2, \cdots\rangle$ 的线性组合来表示：

$$\left|\Psi(1,2,\cdots,N)\right\rangle = \sum_{(n_i)} A_{n_1 n_2 \cdots} \left| n_1, n_2, \cdots \right\rangle$$

$$= \sum_{(n_i)} \langle n_1, n_2, \cdots | \Psi \rangle | n_1, n_2, \cdots \rangle. \quad (9.1.15)$$

这是用占据单粒子态的一组粒子数来表示体系状态的方法，所以往往也叫做**粒子占有数表象。**

以上所述，粒子数$N$都是确定的。但是，粒子占有数表象这种表示方法无论对怎样的$N$都能适用。可以认为，$|n_1, n_2, \cdots\rangle$ 是粒子数与 $\Sigma n_i$ 的值相对应的体系的基底（当然，这种情况下的波函数，即坐标表象，应该与粒子数相对应）。 如果将态空间进一步推广，而考虑所有单粒子体系空间、二粒子体系空间、三粒子体系空间、…的和空间，则像 $\sum n_i = N$ 那样的 $|n_1, n_2, \cdots\rangle$ 会给出作为其子空间的$N$粒子空间的状态。这样一来，只要选定粒子占有数表象的基底，就可以用不显含体系粒子数的形式，或能适用于任何粒子数的形式进一步讨论。这在处理粒子数变化的现象时，或处理与体系的粒子数无关的一般性质时均有用处。

最后，我们看一下$N$粒子体系的波函数与$(N-1)$粒子体系的波函数之间的关系。首先，在玻色子体系的情况下，由(9.1.10b)和(9.1.11)两式可知

$$\Psi_S^{n_1 n_2 \cdots}(\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$$

$$= \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\frac{n_i}{N}}\, \varphi_i(\boldsymbol{X}_1) \Psi_S^{n_1 n_2 \cdots n_i - 1 \cdots}(\boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_N), \quad (9.1.16)$$

或者根据(9.1.12)式有

$$\Psi_S^{n_1 n_2 \cdots}(\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{n_i N}} \varphi_i(\boldsymbol{X}_k) \Psi_S^{n_1 \cdots n_i - 1 \cdots}(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_{k-1}, \boldsymbol{X}_{k+1}, \cdots, \boldsymbol{X}_N).$$

(9.1.17)

在费米子体系的情况下，因 $n_i = 1$ 或 0，故(9.1.7)式的 $\alpha$ 只取 $n_i = 1$ 那样的状态 $i$。对于被占据的状态来说，我们约定，从编号小的一方开始顺序排列成 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_N$。因(9.1.7)是行列式，故将其用第一列展开就有

$$\Psi_A^{\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N}(\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$$

$$= \sum_{m=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N}} (-1)^m \varphi_{\alpha_m}(\boldsymbol{X}_1) \Psi^{\alpha_1 \cdots \alpha_{m-1} \alpha_{m+1} \cdots \alpha_N}(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_N).$$

为了把它写成通常的 $(n_1, n_2, \cdots)$ 的形式，我们定义下面这样的量：

$$\Sigma(i, j) = \sum_{k=i}^{j} n_k. \tag{9.1.18}$$

因为当 $\alpha_m = i$ 时 $m = \Sigma(1, i)$，所以如果把 $\Psi_A^{\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N}$ 写成 $\Psi_A^{n_1 n_2 \cdots}(n_{\alpha_i} = 1,\ i = 1, 2, \cdots, N$，其余的 $n_i = 0)$，则有

$$\Psi_A^{n_1 n_2 \cdots}(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{\infty} \varphi_i(\boldsymbol{X}_1) n_i (-1)^{\Sigma(1, i-1)} \Psi_A^{n_1 \cdots n_i - 1 \cdots}(\boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_N).$$

(9.1.19)

或者，把(9.1.7)式用第 $k$ 行展开，则有

$$\Psi_A^{n_1 n_2}(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^{N} \varphi_{\alpha_k}(\boldsymbol{X}_l)(-1)^{l-1}$$

$$\times \Psi_A^{\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{k-1} \alpha_{k+1} \cdots \alpha_N}(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_{k-1}, \boldsymbol{X}_{k+1}, \cdots, \boldsymbol{X}_N),$$

所以把右边的 $\Psi$ 写成 $\Psi^{n_1 n_2 \cdots}$ 的形式，就可以得到

$$\Psi_A^{n_1 n_2 \cdots}(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^{N} \varphi_i(\boldsymbol{X}_l)(-1)^{l-1}$$

$$\times \Psi_A^{\alpha_1 \cdots \alpha_{k-1} \alpha_{k+1} \cdots \alpha_N}(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_{k-1}, \boldsymbol{X}_{k+1}, \cdots, \boldsymbol{X}_N), \tag{9.1.20}$$

其中右边的 $i$ 取$(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N)$之中的某一个值(即取 $n_i\neq 0$ 那样的 $i$)。

## §9.2 二次量子化

### a) 多粒子体系中物理量的矩阵元

在上节所述的表象中，物理量的矩阵元到底可以写成怎样的形式呢？首先考虑只与一个粒子坐标有关的量．也就是 $V(X_i)$ 这种形式的量．例如，作用于粒子的外力势就属于这一类．由于这种形式的量只与一个粒子坐标有关，故可称之为**单粒子算符**．由于现在所考虑的是全同粒子体系，因而根据粒子的全同性，这类量的形式将选为

$$V^{(1)}=\sum_{i=1}^{N}v^{(1)}(\boldsymbol{X}_i)。\tag{9.2.1}$$

因为单粒子算符只作用于一个粒子坐标，所以它具有使一个单粒子态发生变化的矩阵元，却不能改变多个粒子的状态．考虑由于 $V^{(1)}$ 而使粒子状态由 $\alpha_l$ 变到 $\alpha_m$ 的一类矩阵元($l=m$ 也可以)．就上节的表象而言，应当考虑初态向 $n_{\alpha_l}$ 减少 1 而 $n_{\alpha_m}$ 增加 1 的状态变化的矩阵元，也就是考虑

$$\langle\cdots,n_{\alpha_l}-1,\cdots,n_{\alpha_m}+1,\cdots|V^{(1)}|\cdots,n_{\alpha_l},\cdots,n_{\alpha_m},\cdots\rangle。\tag{9.2.2}$$

当 $l=m$ 时显然为 $\langle\cdots,n_{\alpha_l},\cdots,n_{\alpha_m},\cdots|V^{(1)}|\cdots,n_{\alpha_l},\cdots,n_{\alpha_m},\cdots\rangle$。单粒子算符没有除此以外的矩阵元。

与两个粒子的坐标有关的算符，例如粒子间的力势等等，则称为二粒子算符．根据粒子的全同性，能把两粒子算符的形式写成

$$V^{(2)}=\sum_{ij}v^{(2)}(\boldsymbol{X}_i,\boldsymbol{X}_j)。\tag{9.2.3}$$

这时，可以考虑与两个粒子状态的变化相对应的矩阵元

$$\langle\cdots,n_{\alpha_k}-1,\cdots,n_{\alpha_l}-1,\cdots,n_{\alpha_m}+1,\cdots,n_{\alpha_n}+1,\cdots|V^{(2)}|\cdots,n_{\alpha_k},\cdots,n_{\alpha_l},\cdots,n_{\alpha_m},\cdots,n_{\alpha_n},\cdots\rangle。\tag{9.2.4}$$

**玻色子的情况** 我们先对玻色子体系来求单粒子算符(9.2.1)的矩阵元(9.2.2)。波函数是(9.1.10a)。

$$\langle\cdots,n_{\alpha_l}-1,\cdots,n_{\alpha_m}+1,\cdots|V^{(1)}|\cdots,n_{\alpha_l},\cdots,n_{\alpha_m},\cdots\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N!n_{\alpha_1}!\cdots(n_{\alpha_l}-1)!\cdots(n_{\alpha_m}+1)!\cdots}}$$

$$\times\frac{1}{\sqrt{N!n_{\alpha_1}!\cdots n_{\alpha_l}!\cdots n_{\alpha_m}!\cdots}}$$

$$\times\sum_{P_1}\sum_{P_2}\int U_{P_2}\{\varphi^*_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_1)\cdots\varphi^*_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_{n_{\alpha_1}})\cdots\varphi^*_{\alpha_l}(\overbrace{\boldsymbol{X}_k)\cdots\varphi^*_{\alpha_l}(\boldsymbol{X}_{k+\alpha_l-1}}^{n_{\alpha_l}-1})$$

$$\cdots\varphi^*_{\alpha_m}\overbrace{(\boldsymbol{X}_j)\cdots\varphi_{\alpha_m}(\boldsymbol{X}_{i+n_{\alpha_m}}+1)}^{n_{\alpha_m}+1\uparrow}\cdots\}$$

$$\times\left(\sum_{i=1}^{N}v^{(1)}(\boldsymbol{X}_i)\right)v_{P_1}\{\varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_1)\cdots\varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_{n_{\alpha_1}})\cdots\varphi_{\alpha_l}(\boldsymbol{X}_k)$$

$$\cdots\varphi_{\alpha_l}(\boldsymbol{X}_{k+n_{\alpha_l}})\cdots\varphi_{\alpha_m}(\boldsymbol{X}_i)\cdots\varphi_{\alpha_m}(\boldsymbol{X}_{i+n_{\alpha_m}})\prod_{i=1}^{N}d\boldsymbol{X}_i$$

$$=\frac{1}{N!n_{\alpha_1}!\cdots n_{\alpha_l}!\cdots n_{\alpha_m}!\cdots}\sqrt{\frac{n_{\alpha_l}}{n_{\alpha_m}^{+1}}}N!n_{\alpha_1}!\cdots n_{\alpha_l}!\cdots$$

$$\times(n_{\alpha_m}+1)!\cdots\int\varphi^*_{\alpha_m}(\boldsymbol{X}_i)v^{(1)}(\boldsymbol{X}_i)\varphi_{\alpha_l}(\boldsymbol{X}_i)d\boldsymbol{X}_i$$

$$=\sqrt{n_{\alpha_l}(n_{\alpha_m}+1)}\ v^{(1)}_{\alpha_m\alpha_l}。$$

其中

$$v^{(1)}_{ij}=\int\varphi^*_i(\boldsymbol{X})v^{(1)}(\boldsymbol{X})\varphi_j(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X} \tag{9.2.5}$$

为了把上面矩阵元写成更对称的形式，若 $n_{\alpha_m}$ 为 $n_{\alpha_m}-1$，则

$$\langle\cdots,n_{\alpha_l}-1,\cdots,n_{\alpha_m},\cdots,n_{\alpha_N}|V^{(1)}|\cdots,n_{\alpha_l},\cdots,n_{\alpha_m}$$

$$-1,\cdots,n_{\alpha_N}\rangle=\sqrt{n_{\alpha_l}n_{\alpha_m}}v^{(1)}_{\alpha_m\alpha_l}, \tag{9.2.6}$$

写成更一般的形式，就是

$$\langle\cdots,n_i-1,\cdots,n_j,\cdots|V^{(1)}|\cdots,n_i,\cdots,n_j-1,\cdots\rangle$$

$$=\sqrt{n_in_j}v^{(1)}_{ji}。 \tag{9.2.7}$$

显然，对角元为

$$\langle n_1, n_2, \cdots | V^{(1)} | n_1, n_2, \cdots \rangle = \sum_i n_i v_{ii}^{(1)}$$

$$- \sum_i \sqrt{n_i n_i}\, v_{ii}^{(1)}. \qquad (9.2.8)$$

**费米子的情况** 这时，波函数为(9.1.7)式，我们来求与单粒子态由 $i$ 变到 $j$ 时相对应的 $V^{(1)}$ 的矩阵元。取 $i<j$($i>j$ 时结果相同)，体系开始所占据的单粒子状态排列为 $\alpha_1\alpha_2\cdots$。$i$ 是这些 $\alpha$ 中的某一个。令 $i=\alpha_l$。因为是费米子体系，所以粒子不能转移到已占据的单粒子状态中去。也就是说，$j$ 不在开始所考虑的 $\{\alpha\}$ 之中。把 $j$ 与 $\{\alpha\}$ 合起来重新按大小顺序排列，则变为 $(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_{m-1}, j, \alpha_m, \cdots, \alpha_N)$，我们将它改写成 $(\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_{m-1}, \beta_m(=j), \beta_{m+1}(=\alpha_m), \cdots, \beta_{N+1})$。因此，始态应由 $(\beta_1, \cdots, \beta_l, \cdots, \beta_{m-1}, \beta_{m+1}, \cdots, \beta_{N+1})$ 确定，终态应由 $(\beta_1, \cdots, \beta_{l-1}, \beta_{l+1}, \cdots, \beta_m, \cdots, \beta_{N+1})$ 确定。所考虑的矩阵元则为

$$\langle n_1, \cdots, n_i=0, \cdots, n_j=1, \cdots | V^{(1)}$$

$$\times | n_1, \cdots, n_i=1, \cdots, n_j=0, \cdots \rangle$$

$$= \langle \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_{l-1}, \beta_{l+1}, \cdots, \beta_m, \cdots, \beta_{N+1} |$$

$$\times V^{(1)} | \beta_1, \cdots, \beta_l, \cdots, \beta_{m-1}, \beta_{m+1}, \cdots, \beta_{N+1} \rangle$$

$$= \frac{1}{N!} \int \Big[ \sum_{P_2} \delta_{P_2} U_{P_2} \{ \varphi^*_{\beta_1}(\boldsymbol{X}_1) \cdots$$

$$\times \varphi^*_{\beta_{l-1}}(\boldsymbol{X}_{l-1}) \varphi^*_{\beta_{l+1}}(\boldsymbol{X}_l) \cdots \varphi^*_{\beta_m}(\boldsymbol{X}_{m-1}) \cdots$$

$$\times \varphi^*_{\beta_{N+1}}(\boldsymbol{X}_N) \} \Big] \Big( \sum_{i=1}^{N} v^{(1)}(\boldsymbol{X}_i) \Big)$$

$$\times \Big[ \sum_{P_1} \delta_{P_1} U_{P_1} \{ \varphi_{\beta_1}(\boldsymbol{X}_1) \cdots \varphi_{\beta_l}(\boldsymbol{X}_l) \cdots$$

$$\times \varphi_{\beta_{m-1}}(\boldsymbol{X}_{m-1}) \varphi_{\beta_{m+1}}(\boldsymbol{X}_m) \cdots \varphi_{\beta_{N+1}}(\boldsymbol{X}_N) \} \Big]$$

$$\times \prod_{i=1}^{\wedge} d\boldsymbol{X}_i.$$

如果对右边的积分内所出现的项

$$\varphi^*_{\beta_{l+1}}(\boldsymbol{X}_l)\varphi^*_{\beta_{l+2}}(\boldsymbol{X}_{l+1})\cdots\varphi^*_{\beta_{m-1}}(\boldsymbol{X}_{m-2})\varphi^*_{\beta_m}(\boldsymbol{X}_{m-1})$$

进行变数替换 $X_{l+1}\to X_l, X_{l+2}\to X_{l+1},\cdots, X_{m-1}\to X_{m-2}, X_i\to X_{m-1}$，则得

$$\varphi^*_{\beta_{l+1}}(\boldsymbol{X}_{l+1})\varphi_{\beta_{l+2}}(\boldsymbol{X}_{l+2})\cdots\varphi^*_{\beta_{m-1}}(X_{m-1})\varphi^*_{\beta_m}(\boldsymbol{X}_l).$$

因为这个变数替换相当于在行列式(9.1.7)中进行了列的替换，所以对于该替换来说应加上一个因子 $(-1)^{\Sigma(\beta_{l+1},\beta_{m-1})}$($\Sigma(\beta_{l+1},\beta_{m-1})$ 等于在单粒子态 $\beta_l$ 和 $\beta_m$ 之间已经占据了的单粒子态的粒子数)。该替换规定，由以上积分的 $\sum_{P_2}\delta_{P_2}U_{P_2}$ 各项之中取出这样一些项，它们与 $\sum_{P_1}\delta_{P_1}U_{P_1}$ 之中的

$$\varphi_{\beta_l}(\boldsymbol{X}_l)\varphi_{\beta_{l+1}}(\boldsymbol{X}_{l+1})\varphi_{\beta_{l+1}}(\boldsymbol{X}_{l+2})\cdots\varphi_{\beta_{m-1}}(\boldsymbol{X}_{m-1})$$

相乘应该可积(插入 $v^{(1)}(\boldsymbol{X}_l)$)。如果对 $\sum_{P_1}\delta_{P_1}U_{P_1}$ 的各项采取同样作法再进行积分，则有

$$\begin{aligned}&\langle\beta_1,\cdots,\beta_{l-1},\beta_{l+1},\cdots,\beta_m,\cdots,\beta_{N+1}|V^{(1)}\\&\quad\times|\beta_1,\cdots,\beta_{l_1}\cdots,\beta_{m-1},\beta_{m+1},\cdots,\beta_{N+1}\rangle\\&=(-1)^{\Sigma(\beta_{l+1},\beta_{m-1})}v^{(1)}_{\beta_m\beta_l}.\end{aligned}\tag{9.2.9}$$

若以 $(n_1,n_2,\cdots)$ 取代，$(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_{N+1})$，则

$$\begin{aligned}&\left\langle n_1,n_2,\cdots,n_i=0,\cdots,n_j=1,\cdots\left|\sum_{k=1}^{N}v^{(1)}(\boldsymbol{X}_k)\right.\right.\\&\quad\times\left.\left|n_1,n_2,\cdots,n_i=1,\cdots,n_j=0,\cdots\right\rangle\right.\\&=(-1)^{\Sigma(i+1,j-1)}v^{(1)}_{ji}.\end{aligned}\tag{9.2.10}$$

同样，

$$\begin{aligned}&\left\langle n_1,n_2,\cdots,n_i=1,_2\cdots,n_j=0\cdots\left|\sum_{k=1}^{N}v^{(1)}(\boldsymbol{X}_k)\right.\right.\\&\quad\times\left.\left|n_1,n_2,\cdots,n_i=0,\cdots,n_j=1,\cdots\right\rangle\right.\\&=(-1)^{\Sigma(i+1,j-1)}v^{(1)}_{ij}.\end{aligned}\tag{9.2.11}$$

而且，不难证明，对角元为

$$\left\langle n_1, n_2, \cdots \left| \sum_{k=1}^{N} v^{(1)}(\boldsymbol{X}_k) \right| n_1, n_2, \cdots \right\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} n_i v_{ii}^{(1)}. \quad (9.2.12)$$

**b）产生和湮没算符**

(9.2.7)或(9.2.10)诸式的矩阵元，是由与算符 $V^{(1)}$ 的力学性质有关的部分 $v_{ij}^{(1)}$ 和与体系的状态 $n_i$ 有关的部分构成的。为了只取出后一部分而作算符方面的处理，我们引入以下算符 $C_i$、$C_i^\dagger$。

玻色子的情况　定义成

$$c_i|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = \sqrt{n_i}\,|n_1, \cdots, n_i - 1, \cdots\rangle, \quad (9.2.13a)$$

即

$$\langle n_1, \cdots, n_i - 1, \cdots|c_i|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = \sqrt{n_i}, \quad (9.2.14a)$$

而 $c_i^\dagger$ 是与之厄米共轭的算符，定义成

$$\langle n_1, \cdots, n_i, \cdots|c_i^\dagger|n_1, \cdots, n_i - 1, \cdots\rangle = \sqrt{n_i}, \quad (9.2.14b)$$

即

$$c_i^\dagger|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = \sqrt{n_i + 1}\,|n_1, \cdots, n_i + 1, \cdots\rangle. \quad (9.2.13b)$$

$c_i$ 是使体系迁移到位于单粒子状态 $i$ 中的粒子个数减少一个的状态的算符，而 $c_i^\dagger$ 则是使体系迁移到位于单粒子状态 $i$ 中的粒子个数增加一个的状态的算符。也就是说，$c_i^\dagger$ 是在单粒子状态 $i$ 中产生粒子的算符，$c_i$ 是使单粒子状态 $i$ 中的粒子湮没的算符。今后，具有这种性质的算符称为**产生和湮没算符**。(9.2.13a)—(9.2.14b) 诸式与体系的总粒子数相关。不过，$c_i$、$c_i^\dagger$ 是使体系的总粒子数变化 1 个的算符，这样的算符在体系的总粒子数固定的态空间中是不会出现的。如上节所述，推广了态空间就能重新定义它。该算符对于处理体系的粒子数有所变化的现象(例如，吸收或发射光子的现象)大有用处。

根据(9.2.13a)和(9.2.13b)式，

$$c_i^\dagger c_i|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = n_i|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle,$$

$$c_i c_i^\dagger|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = (n_i + 1)|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle,$$

将其合在一起为

$$(c_ic_i^\dagger - c_i^\dagger c_i)|n_1,\cdots,n_i,\cdots\rangle = |n_1,\cdots,n_i,\cdots\rangle。\quad (9.2.15)$$

另外，对于 $i \neq k$ 来说，

$$c_k^\dagger c_i|n_1,\cdots,n_i,\cdots,n_k,\cdots\rangle$$
$$= \sqrt{(n_k+1)n_i}\,|n_1,\cdots,n_i-1,\cdots,n_k+1,\cdots\rangle,$$
$$c_ic_k^\dagger|n_1,\cdots,n_i,\cdots,n_k,\cdots\rangle$$
$$= \sqrt{(n_k+1)n_i}\,|n_1,\cdots,n_i-1,\cdots,n_k+1,\cdots\rangle,$$

故

$$(c_ic_k^\dagger - c_k^\dagger c_i)|n_1,\cdots,n_i,\cdots,n_k,\cdots\rangle = 0。\quad (9.2.16)$$

同样(包括 $i = k$ 的情况)可以得到下列关系式

$$(c_ic_k - c_kc_i)|n_1,\cdots,n_i,\cdots,n_k,\cdots\rangle = 0,\quad (9.2.17)$$
$$(c_i^\dagger c_k^\dagger - c_k^\dagger c_i^\dagger)|n_1,\cdots,n_i,\cdots,n_k,\cdots\rangle = 0。\quad (9.2.18)$$

因为不管 $(n_1,\cdots,n_i,\cdots,n_k,\cdots)$ 如何，(9.2.15)—(9.2.18)诸式均成立，所以，作为算符，以下关系式成立：

$$c_ic_k^\dagger - c_k^\dagger c_i = [c_i,c_k^\dagger] = \delta_{ik},$$
$$c_ic_k - c_kc_i = c_i^\dagger c_k^\dagger - c_k^\dagger c_i^\dagger = 0。\quad (9.2.19)$$

另外，因

$$c_i^\dagger c_i|n_1,\cdots,n_i,\cdots\rangle = n_i|n_1,\cdots,n_i,\cdots\rangle,\quad (9.2.20)$$

故

$$N_i = c_i^\dagger c_i\quad (9.2.21)$$

这样的算符是以单粒子状态 $i$ 中的粒子数为本征值的算符，称为**粒子数算符。**

全部 $n_i = 0$ 的状态，是任何单粒子态都是空的状态，所以称之为“真空”，用$|0\rangle$表示。在状态 $i$ 中只有一个粒子的那种状态是由算符 $c_i^\dagger$ 作用于$|0\rangle$而得到的：$c_i^\dagger|0\rangle = |0,\cdots,n_i=1,0,\cdots\rangle$。根据 $c_i^\dagger$ 的矩阵元，有

$$|0,\cdots,n_i=2,0,\cdots\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}c_i^\dagger|0,\cdots,n_i=1,0,\cdots\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}c_i^\dagger c_i^\dagger|0\rangle,$$

继续这一作法，则

$$|0,\cdots,n_i=m,0,\cdots\rangle=\frac{1}{\sqrt{m!}}(c_i^\dagger)^m|0\rangle。$$

将其推广，就可以通过如下手续而由真空构成$|n_1,n_2,\cdots\rangle$：

$$|n_1,n_2,\cdots\rangle=\frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!\cdots}}\pi(c_i^\dagger)^{n_i}|0\rangle。\qquad(9.2.22)$$

如果应用具有这种性质的 $c_i,c_i^\dagger$，则在粒子占有数表象中，显然可以根据(9.2.7)式把单粒子算符 $V^{(1)}$ 的形式写成

$$V^{(1)}=\sum_{ij}v_{ij}^{(1)}c_i^\dagger c_j。\qquad(9.2.23)$$

**费米子的情况** 在费米子体系的情况下，我们来做一下同样的工作。与玻色子的情况一样，矩阵元 (9.2.10) 和 (9.2.11) 由与 $V^{(1)}$ 的力学性质有关的部分 $v_{ij}^{(1)}$ 和与体系的状态 $(n_1,n_2,\cdots)$ 有关的部分组成。为了处理后一部分，如果考虑在状态 $i$ 中产生粒子的算符 $c_i^\dagger$ 和使状态 $i$ 中的粒子湮没的算符 $c_i$，则由(9.2.10)式可以得到

$$\begin{aligned}&\langle n_1,\cdots,n_i=0,\cdots,n_j=1,\cdots|c_i^\dagger c_i\\&\quad\times|n_1,\cdots,n_i=1,\cdots,n_j=0,\cdots\rangle=(-1)^{\Sigma(i+1,j-1)}。\end{aligned}$$

因此，应该是

$$\langle n_1,\cdots,n_i=0,\cdots|c_i|n_1,\cdots,n_i=1,\cdots\rangle=(-1)^{\Sigma(1,i-1)}\qquad(9.2.24a)$$

$$\langle n_1,\cdots,n_j=1,\cdots|c_j^\dagger|n_1,\cdots,n_j=0,\cdots\rangle=(-1)^{\Sigma(1,j-1)}。\qquad(9.2.24b)$$

其它矩阵元为零。

为使粒子状态作出 $i\to j$ 的跃迁，可以进行 $c_ic_j^\dagger$ 的运算。而算得其矩阵元为

$$\begin{aligned}&\langle\cdots,n_i=0,\cdots,n_j=1,\cdots|c_ic_j^\dagger|\cdots,n_i=1,\cdots,n_j=0,\cdots\rangle\\&=\langle\cdots,n_i=0,\cdots,n_j=1,\cdots|\\&\quad\times c_i|\cdots,n_i=1,\cdots,n_j=1,\cdots\rangle\\&\quad\times\langle\cdots,n_i=1,\cdots,n_j=1,\cdots|\\&\quad\times c_j^\dagger|\cdots,n_i=1,\cdots,n_j=0,\cdots\rangle\end{aligned}$$

$$= (-1)^{\Sigma(1,i-1)} \times (-1)^{\Sigma(1,i-1)}.$$

因右边出现的 $\Sigma(1,j-1)$ 是占据状态 $j-1$ 的粒子数，故

$$\Sigma(1,j-1) = \Sigma(1,i-1) + 1 + \Sigma(i+1,j-1).$$

因此，上列矩阵元的右边变为

$$(-1)^{\Sigma(1,i-1)+1+\Sigma(i+1,j-1)+\Sigma(1,i-1)} = -(-1)^{\Sigma(i+1,j-1)}.$$

根据此式以及 $c_j^\dagger c_i$ 的矩阵元，有

$$\langle \cdots, n_i = 0, \cdots, n_j = 1, \cdots | c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i | \cdots, n_i = 1, \cdots, n_j = 0, \cdots \rangle = 0.$$

与(9.2.11)式相应，亦可得到

$$\langle \cdots, n_i = 1, \cdots, n_j = 0, \cdots | c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i | \cdots, n_i = 0, \cdots, n_j = 1, \cdots \rangle = 0.$$

因此，作为算符，以下关系是成立的：

$$c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i = 0 \qquad (i \neq j).$$

其次考虑算符 $c_i^\dagger c_i$，它是对角型的，其对角元当 $n_i = 1$ 时为1，当 $n_i = 0$ 时变为零，因此，

$$N_i = c_i^\dagger c_i$$

也是粒子数算符。对 $c_i c_i^\dagger$ 进行和上面一样的计算，则显然有

$$\langle \cdots, n_i, \cdots | c_i c_i^\dagger | \cdots, n_i, \cdots \rangle = 1 - n_i.$$

对 $c_i c_j$ 和 $c_i^\dagger c_j^\dagger$ 进行同样讨论，就可以得到下述关系式：

$$c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i = \delta_{ij},\ c_i c_j + c_j c_i = 0,\ c_i^\dagger c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i^\dagger = 0. \quad (9.2.25)$$

就算符 $A$ 和 $B$ 而言，我们把 $AB + BA$ 记成 $[A,B]_+$ 或 $\{A,B\}$，并称其为 $A$、$B$ 的**费米型对易子**或**反对易子**。而 $c$ 和 $c^\dagger$ 的反对易关系则应当用(9.2.25)式定义。

为了由真空产生 $N$ 粒子体系，与玻色子体系的情况相同，可以将 $c^\dagger$ 逐次作用于 $|0\rangle$。不过，现在 $c^\dagger$ 是反对易的，所以有一个顺序问题。因粒子状态编号是由低能一方算起的，故

$$|n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \cdots, n_{\alpha_N}\rangle = c_{\alpha_N}^\dagger \cdots c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle. \quad (9.2.26)$$

利用该产生和湮没算符，$V^{(1)}$ 就可以写成

$$V^{(1)} = \sum_{ij} v_{ij}^{(1)} c_i^\dagger c_j, \quad (9.2.27)$$

这与玻色子的情况是一样的。

以上虽然考虑的是单粒子算符，但完全可以用 $c, c^\dagger$ 同样写出二粒子算符。设

$$V^{(2)} = \sum_{ij} v^{(2)}(\boldsymbol{X}_i, \boldsymbol{X}_j),$$

则

$$V^{(2)} = \sum_{ijkl} v^{(2)}_{ij,kl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k, \tag{9.2.28}$$

其中

$$v^{(2)}_{ij,kl} = \int d\boldsymbol{X} d\boldsymbol{X}' \varphi_i^*(\boldsymbol{X}) \varphi_j^*(\boldsymbol{X}') v^2(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}') \varphi_k(\boldsymbol{X}) \varphi_l(\boldsymbol{X}'). \tag{9.2.29}$$

产生和湮没算符作为一个算符，其性质是由对易关系(9.2.19)和(9.2.25)确定的。反之，从这些对易关系出发也可以证明，$c_i, c_i^\dagger$ 具有产生和湮没算符的性质。作为一例，我们考虑一组算符 $\{c_i\}$、$\{c_i^\dagger\}$，它们满足与玻色子的情况相应的(9.2.19)式。如果算符 $N_i$ 是由(9.2.21)式定义的，那么利用 $c, c^\dagger$ 的对易关系就会得出 $[N_i, N_k] = 0$。因 $N_i$ 互相对易，故用 $\{N_i\}$ 的共同本征态可以构成空间。把 $N_i$ 的本征值写成 $n_i$，选 $|n_1, n_2, \cdots\rangle$ 为基矢。那么 $N$ 与 $c$ 或 $c^\dagger$ 的对易关系就是

$$[N_i, c_i^\dagger] = c_i^\dagger, \quad [N_i, c_i] = -c_i. \tag{9.2.30}$$

因此，

$$\begin{aligned}
&\langle n_1', n_2', \cdots, n_i', \cdots | c_i^\dagger | n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots \rangle \\
&\quad = \langle \cdots, n_i', \cdots | [N_i, c_i^\dagger] | \cdots, n_i, \cdots \rangle \\
&\quad = (n_i' - n_i) \langle \cdots, n_i', \cdots | c_i^\dagger | \cdots, n_i, \cdots \rangle,
\end{aligned}$$

即

$$(n_i' - n_i - 1) \langle \cdots, n_i', \cdots | c_i^\dagger | \cdots, n_i, \cdots \rangle = 0. \tag{9.2.31a}$$

同样，

$$(n_i' - n_i + 1) \langle \cdots, n_i', \cdots | c_i | \cdots, n_i, \cdots \rangle = 0. \tag{9.2.31b}$$

这一点表明，$c_i^\dagger, c_i$ 只是在 $N_i$ 的本征值相差为 1 的状态之间才会有矩阵元。而 $N_i$ 的本征值显然逐个差 1。其次，因为

$$N_i c_i^\dagger |\cdots,n_i,\cdots\rangle = (c_i^\dagger N_i + c_i^\dagger)|\cdots,n_i,\cdots\rangle$$
$$= (n_i + 1)c_i^\dagger |\cdots,n_i,\cdots\rangle,$$

所以 $c_i^\dagger|\cdots,n_i,\cdots\rangle$ 是 $N_i$ 的本征值为 $n_i+1$ 时的本征态. 同样,$c_i|\cdots,n_i,\cdots\rangle$ 是本征值为 $n_i-1$ 时 $N_i$ 的本征态. 如果让 $c_i$ 继续作用下去,那么,迟早会出现本征值为负的本征态,或者在某处 $c_i\cdots c_i|\cdots,n_i,\cdots\rangle$ 成为零矢量. 可是,根据定义 $N_i = c_i^\dagger c_i$,$N_i$ 不可能有负本征值.因此,在某处就会出现 $c_i|\cdots\rangle=0$ 的状态$|\cdots\rangle$. 由于对该状态而言 $N_i|\cdots\rangle = 0$,所以 $N_i$ 的本征值是零. 根据这一点,$N_i$ 的本征值为零或正整数. 因此,如果认为 $N_i$ 是表示 $i$ 状态中粒子数的算符,则 $|n_1,n_2,\cdots\rangle$ 就是粒子占有数表象中体系的基矢,而 $c_i^\dagger$,$c_i$ 就是分别使单粒子态 $i$ 中的粒子增加一个或减少一个的算符,即产生和湮没算符.

以上就粒子状态$\{i\}$定义了产生和湮没算符,也可以依据坐标定义它们:

$$\psi(\boldsymbol{X}) = \sum_i c_i\varphi_i(\boldsymbol{X}),\ \psi^\dagger(\boldsymbol{X}) = \sum_i c_i^\dagger\varphi_i^*(\boldsymbol{X}). \quad (9.2.32)$$

其中,与 $c_i$、$c_i^\dagger$ 是满足玻色型对易关系,还是满足费米型对易关系的不同情况相对应,$\psi$ 应该加上脚标 B、F 以示区别. 当二者都满足时,则不加脚标. 根据 $c$ 的对易关系和$\{\varphi_i(X)\}$ 的完备性,可以得到下面这些对易关系:

$$\left.\begin{aligned}[\psi_B(\boldsymbol{X}),\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}')] &= \sum_{ij}[c_i,c_j^\dagger]\varphi_i(\boldsymbol{X})\varphi_j^*(\boldsymbol{X}')\\ &= \sum_i \varphi_i(\boldsymbol{X})\varphi_i^*(\boldsymbol{X}') = \delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')\\ [\psi_B(\boldsymbol{X}),\psi_B(\boldsymbol{X}')] &= [\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}),\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}')] = 0\end{aligned}\right\},\quad (9.2.33)$$

$$\left.\begin{aligned}[\psi_F(\boldsymbol{X}),\psi_F^\dagger(\boldsymbol{X}')]_+ &= \delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')\\ [\psi_F(\boldsymbol{X}),\psi_F(\boldsymbol{X}')]_+ &= [\psi_F^\dagger(\boldsymbol{X}),\psi_F^\dagger(\boldsymbol{X}')]_+ = 0\end{aligned}\right\}. \quad (9.2.34)$$

显然 $\psi$ 最初是借助于特定的单粒子状态系列 $\{i\}$ 用 (9.2.32) 式定义的,但现在却可以置此不顾,而认为它是满足对易关系(9.2.33)或(9.2.34)的算符. 因给出体系总粒子数的算符 $N = \sum_i N_i$ 可以

写成

$$N=\sum_i c_i^\dagger c_i=\int \psi^\dagger(\boldsymbol{X})\psi(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}, \qquad (9.2.35)$$

故 $\psi^\dagger(\boldsymbol{X})\psi(\boldsymbol{X})$ 是表示粒子密度的算符。其次，$N$ 和 $\psi^\dagger$ 的对易关系为

$$[N,\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X})]=\int\{\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}')\psi_B(\boldsymbol{X}')\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X})$$
$$-\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X})\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}')\psi_B(\boldsymbol{X}')\}d\boldsymbol{X}'$$
$$=\int\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}')\delta(\boldsymbol{X}',\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}'=\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}). \quad (9.2.36a)$$

同样，

$$[N,\psi_F^\dagger(\boldsymbol{X})]_+=\psi_F^\dagger(\boldsymbol{X}). \qquad (9.2.36b)$$

如果把 $N_i$ 的本征值全都为零的状态(真空)记做 $|0\rangle$，则 $N|0\rangle=0$，从而(根据 $c$、$c^\dagger$ 的性质)

$$\psi(\boldsymbol{X})|0\rangle=0,\ \langle 0|\psi^\dagger(\boldsymbol{X})=0. \qquad (9.2.37)$$

再由(9.2.36)式得出

$$N\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X})|0\rangle=(N\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X})-\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X})N)|0\rangle=\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X})|0\rangle,$$
$$N\psi_F^\dagger(\boldsymbol{X})|0\rangle=\psi_F^\dagger|0\rangle.$$

也就是说，$\psi^\dagger|0\rangle$ 是 $N$ 的本征值为 1 的本征态，即粒子数为 1 的状态，同样，$\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}_1)\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}_2)|0\rangle$ 或 $\psi_F^\dagger(\boldsymbol{X}_1)\psi_F^\dagger(\boldsymbol{X}_2)|0\rangle$ 是粒子数为 2 的状态。根据 $\psi$ 的定义，

$$\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}_1)\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}_2)|0\rangle=\sum_{ij}\varphi_i^*(\boldsymbol{X}_1)\varphi_j^*(\boldsymbol{X}_2)c_i^\dagger c_j^\dagger|0\rangle$$
$$=\sqrt{2}\sum_{i<j}\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_i^*(\boldsymbol{X}_1)\varphi_j^*(\boldsymbol{X}_2)$$
$$+\varphi_i^*(\boldsymbol{X}_1)\varphi_i^*(\boldsymbol{X}_2))c_i^\dagger c_j^\dagger|0\rangle,$$

根据(9.1.5)式，

$$\text{右边}=\sqrt{2}\sum_{(ij)}\Psi_S^{ij*}(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2)|n_i=1,n_j=1\rangle.$$

如果让这一作法继续下去，那么一般来说，$N$ 粒子体系将是

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}_1)\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}_2)\cdots\psi_B^\dagger(\boldsymbol{X}_N)|0\rangle$$

$$=\sum_{(n_i)}\Psi_S^{n_1n_2\cdots*}(\boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N)|n_1,n_2,\cdots\rangle, \quad (9.2.38)$$

或

$$\Psi_S^{n_1n_2\cdots}(\boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\psi_B(\boldsymbol{X}_N)\cdots\psi_B(\boldsymbol{X}_2)\psi_B(\boldsymbol{X}_1)|n_1,n_2,\cdots\rangle.$$

(9.2.39a)

对费米子体系亦可进行同样讨论，结果是

$$\Psi_A^{n_1n_2\cdots}(\boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\psi_F(\boldsymbol{X}_N)\cdots\psi_F(\boldsymbol{X}_2)\psi_F(\boldsymbol{X}_1)|n_1,n_2,\cdots\rangle.$$

(9.2.39b)

### c) 福克 (Fock) 空间

对于用单粒子态系列$\{i\}$定义的产生和湮没算符$c^\dagger$、$c$来说，已经用(9.2.13a,b)及(9.2.24a,b)得到了粒子占有数表象中的矩阵元，对基于坐标定义的产生和湮没算符 $\psi^\dagger$、$\psi$，也可以求出对应的矩阵元。 为此首先考虑$N$个粒子的状态(相当于(9.2.38)式的右边)

$$|\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N;N\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\psi^\dagger(\boldsymbol{X}_1)\psi^\dagger(\boldsymbol{X}_2)\cdots\psi^\dagger(\boldsymbol{X}_N)|0\rangle.$$

(9.2.40)

也就是说

$$\psi(\boldsymbol{X})|\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N;N\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N!}}\psi(\boldsymbol{X})\psi^\dagger(\boldsymbol{X}_1)\cdots\psi^\dagger(\boldsymbol{X}_N)|0\rangle.$$

利用$\psi$和$\psi^\dagger$的对易关系将$\psi(\boldsymbol{X})$右移，那么注意到$\psi(\boldsymbol{X})|0\rangle=0$，就会得出

$$\psi_B(X)|X_1,\cdots,X_N;N\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{i=1}^{N}\delta(X,X_i)\psi_B^\dagger(X_1)\cdots$$

$$\times\ \psi_B^\dagger(X_{i-1})\psi_B^\dagger(X_{i+1})\cdots\psi_B^\dagger(X_N)|0\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N}\delta(X,X_i)|X_1,\cdots,$$

$$X_{i-1},X_{i+1},\cdots,X_N;N-1\rangle\text{(玻色子体系)},\quad(9.2.41a)$$

$$\psi_F(X)|X_1,\cdots,X_{Ni};N\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum(-1)^{i-1}\delta(X,X_i)|X_1,\cdots,$$

$$X_{i-1},X_{i+1},\cdots,X_N;N-1\rangle\text{(费米子体系)}.\quad(9.2.41b)$$

另外，根据 $|X_1,\cdots,X_N;N\rangle$ 的定义，

$$\psi^\dagger(X)|X_1,\cdots,X_N;N\rangle=\sqrt{N+1}\ |X,X_1,X_2,\cdots,$$

$$X_N;N+1\rangle.\quad(9.2.42)$$

如果按照 § 9.1 的思路将态空间扩广，而考虑所有单粒子体系空间、二粒子体系空间、…的和空间，并设其中的广义状态为$|\Psi\rangle$，则 $|X_1,\cdots,X_N;N\rangle$ 就是其中的$N$粒子体系的状态，而且，

$$\langle X_1,\cdots,X_N;N|\Psi\rangle=\sum_{(n_i)}\Psi_{S;A}^{n_1,n_2\cdots}(X_1,\cdots X_N)\langle n_1,n_2,\cdots|\Psi\rangle.$$

$$(9.2.43)$$

(9.2.41)—(9.2.42)诸式将是

$$\langle X_1,\cdots,X_N;N|\psi_B^\dagger|\Psi\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N}\delta(X,X_i))\langle X_1,\cdots,X_{i-1},X_{i+1},\cdots,$$

$$X_N;N-1|\Psi\rangle\text{（玻色子体系）},\quad(9.2.44)$$

$$\langle X_1,\cdots,X_N;N|\psi_F^\dagger(X)|\Psi\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N}(-1)^{i-1}\delta(X_1X_i)\langle X_1,\cdots,X_{i-1},X_{i+1},\cdots X_N;$$

$$N-1|\Psi\rangle\ \text{（费米子体系）}\quad(9.2.45)$$

$$\langle X_1,\cdots,X_N;N|\Psi(X)|\Psi\rangle$$

$$=\sqrt{N+1}\langle X,X_1,X_2,\cdots,X_N;N+1|\Psi\rangle.\quad(9.2.46)$$

如此设想的空间称之为**福克空间**。在该空间中态矢$|\Psi\rangle$可以看成

是以个别粒子数$N$的体系的状态为分量的矢量. 也就是说,以$\langle 0|\Psi\rangle$,$\langle \boldsymbol{X}_1;1|\phi\rangle$,$\cdots$为分量,可以写成

$$|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1(\boldsymbol{X}_1) \\ \Psi_2(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2) \\ \vdots \\ \Psi_N(\boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N) \\ \vdots \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \langle 0|\Psi\rangle \\ \langle \boldsymbol{X}_1;1|\Psi\rangle \\ \langle \boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2;2|\Psi\rangle \\ \vdots \\ \langle \boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N;N|\Psi\rangle \\ \vdots \end{bmatrix}. \tag{9.2.47}$$

各分量是用(9.2.43)式定义的,$\langle \boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N;\boldsymbol{N}|\Psi\rangle$ 给出了各粒子坐标为$\boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N$ 的$N$粒子体系的状态的概率幅.这种表象就叫做**福克表象**. 在该表象中,$\phi(\boldsymbol{X})$ 和 $\phi^\dagger(\boldsymbol{X})$ 为

$$\phi(\boldsymbol{X})\begin{bmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1(\boldsymbol{X}_1) \\ \Psi_2(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Psi_1(\boldsymbol{X}) \\ \sqrt{2}\,\Psi_2(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_1) \\ \sqrt{3}\,\Psi_3(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2) \\ \vdots \end{bmatrix}, \tag{9.2.48a}$$

$$\phi_B^\dagger(\boldsymbol{X})\begin{bmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1(\boldsymbol{X}_1) \\ \Psi_2(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_1)\Psi_0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\{\delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_1)\Psi_1(\boldsymbol{X}_2)+\delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_2)\Psi_1(\boldsymbol{X}_1)\} \\ \vdots \end{bmatrix}, \tag{9.2.48b}$$

$$\phi_F^\dagger(\boldsymbol{X})\begin{bmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1(\boldsymbol{X}_1) \\ \Psi_2(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_1)\Psi_0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\{\delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_1)\Psi_1(\boldsymbol{X}_2)-\delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_2)\Psi_1(\boldsymbol{X}_1)\} \end{bmatrix}. \tag{9.2.48c}$$

它们就是福克空间中$\psi$和$\psi^\dagger$的表达式.

最后,我们来求有关$|\psi\rangle$的运动方程式. 取(9.1.3)为$N$粒子体系的哈密顿算符. 不管$N$的值如何,体系的哈密顿算符都是这种形式,$U(X_i)$是单粒子算符,$V(X_i,X_j)$是二粒子算符. 单粒子算符和两粒子算符所给出的物理量,在粒子占有数表象中可以写成(9.2.23)或(9.2.27)、(9.2.28)式. 若用$\psi$和$\psi^\dagger$表示,则

$$V^{(1)}=\sum_{ij}U_{ij}c_i^\dagger c_j=\int\sum_{ij}c_i^\dagger\varphi_i^*(\boldsymbol{X})U(\boldsymbol{X})\varphi_j(\boldsymbol{X})c_j d\boldsymbol{X}$$

$$=\int\psi^\dagger(\boldsymbol{X})U(\boldsymbol{X})\psi(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}. \tag{9.2.49}$$

同样,

$$V^{(2)}=\int\psi^\dagger(\boldsymbol{X})\psi^\dagger(\boldsymbol{X}')V(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')\psi(\boldsymbol{X}')\psi(\boldsymbol{X}')\psi(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}d\boldsymbol{X}'. \tag{9.2.50}$$

因粒子的动能算符也是单粒子算符,故可写成

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int\psi^\dagger(\boldsymbol{X})\nabla^2\psi(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}.$$

把它与上式合并,则(9.1.3)式的哈密顿算符$H$将为

$$H=\int\psi^\dagger(\boldsymbol{X})\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\boldsymbol{X})\right\}\psi(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}$$

$$+\frac{1}{2}\int\psi^\dagger(\boldsymbol{X})\psi^\dagger(\boldsymbol{X}')V(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')\psi(\boldsymbol{X}')\psi(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}d\boldsymbol{X}', \tag{9.2.51}$$

这是在$N$粒子体系空间中所考虑的算符. 因此,有关$|\Psi\rangle$的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle=H|\Psi\rangle. \tag{9.2.52}$$

在$|\Psi\rangle$之中取出$N$粒子体系的分量,则

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_N(\boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N)}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2+\sum_{i=1}^{N}U(\boldsymbol{X}_i)\right.$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{ij}V(\boldsymbol{X}_i,\boldsymbol{X}_j)\Big\}\Psi_N(\boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N), \tag{9.2.53}$$

这就是$N$粒子体系的薛定谔方程。

## §9.3 多粒子体系的运动和状态 I——基态

当粒子间有相互作用时要想求得多粒子体系准确的波函数，除了极少数的例外情况，一般来说，相当困难。因为物理上有意义的多粒子体系大都异常复杂，所以在许多情况下人们经常引入有希望表示出其特征的模型。即使在这时亦难以作出既能严格求解又能再现体系物理性质的模型。当然，也有必要多少牺牲一些物理性质，找出严格求解的模型，并通过对其解的性质进行考察而得到研究多粒子体系特有性质的线索。然而，一般来说，重要的是求得近似解。相应于粒子的种类和个数、相互作用的性质以及作为研究对象的物理量等等，有着各种各样的近似方法。

另外，因为多粒子体系运动学的自由度数极多，所以要求得其全面的信息是过于复杂的，反倒难以预测。找出有代表性的反映体系性质的物理量，对于理解多粒子体系的运动来说极为重要。近似方法亦多与此有关。下面几节将叙述多粒子体系中有意义的状态与概念，以及二、三例与之相关的方法。

### a） 密度矩阵

密度矩阵是一个表示多粒子体系状态的量，它用于了解粒子的分布.当$N$粒子体系的状态一定，其波函数为$\Psi(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N)$时，

$$\rho(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N;\boldsymbol{X}'_1,\boldsymbol{X}'_2,\cdots,\boldsymbol{X}'_N)$$
$$=\Psi(\boldsymbol{X}_1,\cdots,\boldsymbol{X}_N)\Psi^*(\boldsymbol{X}'_1,\cdots,\boldsymbol{X}'_N) \tag{9.3.1}$$

叫做该状态的密度矩阵。 将(9.3.1)式对 $N-1$ 个坐标(让 $\boldsymbol{X}_i$ 和 $\boldsymbol{X}'_i$ 成对)积分，得到的是

$$\rho(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')=N\int d\boldsymbol{X}_2\cdots\int d\boldsymbol{X}_N\Psi(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N)\Psi^*(\boldsymbol{X}_1',\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_N),\tag{9.3.2}$$

这叫做单粒子密度矩阵．显然，该矩阵是厄米型的．单粒子算符 $\boldsymbol{V}^{(1)}=\sum_{i=1}^{N}v^{(1)}(\boldsymbol{X}_i)$（(9.2.1)式）的期待值可用单粒子密度矩阵表示成

$$\langle V^{(1)}\rangle=\int v^{(1)}(\boldsymbol{X})\rho(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}.$$

利用(9.2.32)式所定义的 $\phi(\boldsymbol{X})$ 和 $\phi^\dagger(\boldsymbol{X})$，则 $\rho(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')$ 亦可写成

$$\rho(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')=\langle\Psi|\phi^\dagger(\boldsymbol{X}')\phi(\boldsymbol{X})|\Psi\rangle.\tag{9.3.3}$$

因此，也可以把

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')=\phi^\dagger(\boldsymbol{X}')\phi(\boldsymbol{X})\tag{9.3.4}$$

定义成量子化了的单粒子密度矩阵(算符)．取 $\hat{\rho}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')$ 的迹，则

$$\mathrm{tr}\hat{\rho}(\boldsymbol{X}',\boldsymbol{X}')=\int\phi^\dagger(\boldsymbol{X})\phi(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}=N,\tag{9.3.5}$$

这正是(9.2.35)式的总粒子数算符．另外，利用这个 $\hat{\rho}$，则单粒子算符(如(9.2.23)或(9.2.27)式的) $V^{(1)}$ 为

$$\begin{aligned}V^{(1)}&=\int\phi^\dagger(\boldsymbol{X})v^{(1)}(\boldsymbol{X})\phi(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}\\&=\int v^{(1)}(\boldsymbol{X})\hat{\rho}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X}=\mathrm{tr}(v^{(1)}\hat{\rho}).\end{aligned}\tag{9.3.6}$$

其中，$\mathrm{tr}(v^{(1)}\hat{\rho})$ 内的 $v^{(1)}$ 应该看成是与其用 $v^{(1)}(\boldsymbol{X})$，倒不如用 $v^{(1)}(\boldsymbol{X}',\boldsymbol{X})=v^{(1)}(\boldsymbol{X})\delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')=\sum_{ij}v_{ij}^{(1)}\varphi_i(\boldsymbol{X}')\varphi_j^*(\boldsymbol{X})$ 来定义的矩阵(即矩阵 $v_{ij}^{(1)}$ 的坐标表象)．

把 $\hat{\rho}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')$ 看作算符 $\hat{\rho}$ 的 $(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')$ 表象而写成

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')\equiv\langle\boldsymbol{X}|\hat{\rho}|\boldsymbol{X}'\rangle.\tag{9.3.7}$$

若将其变换为粒子占有数表象，则

$$\langle i|\hat{\rho}|j\rangle=\int\langle i|\boldsymbol{X}\rangle\langle\boldsymbol{X}|\hat{\rho}|\boldsymbol{X}'\rangle\langle\boldsymbol{X}'|j\rangle d\boldsymbol{X}d\boldsymbol{X}'$$

$$= -\int dX dX' \varphi_i^*(X)\left(\sum_{kl} c_k^\dagger \varphi_k^*(X') c_l \varphi_l(X)\right)\varphi_j(X')$$

$$= c_j^\dagger c_i. \tag{9.3.8}$$

因此,(9.2.23)式与上面的(9.3.6)形式相同,

$$V^{(1)} \equiv \sum_{ij} v_{ij}^{(1)} c_j^\dagger c_i = \sum_{ij} v_{ij}^{(1)} \langle j|\hat{\rho}|i\rangle = \mathrm{tr}(v^{(1)}\hat{\rho}). \tag{9.3.6'}$$

不久就会知道，假如$|\Psi\rangle$为用粒子占有数表象表示时的单一状态$|n_1\cdots\rangle$,则

$$\langle\Psi|\langle i|\hat{\rho}|j\rangle|\Psi\rangle = n_i\delta_{ij}.$$

当体系为费米子体系，状态$|\Psi\rangle$的波函数由单粒子态$\varphi_i$($i=1,\cdots,N$)之积反对称化斯莱特行列式给定时，

$$\rho(X,X') = \sum_{i=1}^{N} \varphi_i(X)\varphi_i^*(X'). \tag{9.3.9}$$

根据此式及上面$\langle\Psi|\langle i|\hat{\rho}|j\rangle|\Psi\rangle$的表达式,显然有

$$\rho^2 = \rho. \tag{9.3.10}$$

也就是说，$\rho^2=\rho$是状态$|\Psi\rangle$在粒子占有数表象中用单一状态表示的条件，换句话说，是用单一的斯莱特行列式来表示的必要条件,尚可证明,该条件亦是其充分条件.

为了计算二粒子算符的期待值,用单粒子密度矩阵是不够的,有必要引人二粒子密度矩阵.与(9.3.2)式相对应，二粒子密度矩阵的定义为

$$\rho(X_1,X_2;X_1',X_2') = N(N-1)$$

$$\times\int dX_3\cdots\int dX_N \Psi(X_1,X_2,X_3,\cdots,X_N)\Psi^*(X_1',X_2',X_3,\cdots,X_N)$$

$$= \langle\Psi|\phi^\dagger(X_2')\phi^\dagger(X_1')\phi(X_1)\phi(X_2|\phi\rangle. \tag{9.3.11}$$

这时同样可以定义量子化后的二粒子密度矩阵算符

$$\hat{\rho}(X_1,X_2;X_1',X_2') = \phi^\dagger(X_2')\phi^\dagger(X_1')\phi(X_1)\phi(X_2). \tag{9.3.12}$$

如果将它看作$\hat{\rho}$的$(X_1,X_2;X_1',X_2')$表象并变换为粒子占有数表象,则

$$\langle ij|\hat{\rho}|i'j'\rangle = c_i^{\dagger}c_j^{\dagger}c_{i'}c_{j'}. \tag{9.3.13}$$

因为在二粒子密度矩阵 $\rho(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2;\ \boldsymbol{X}_1'\boldsymbol{X}_2')$ 中，将 $\boldsymbol{X}_1$、$\boldsymbol{X}_2$ 和 $\boldsymbol{X}_1'$、$\boldsymbol{X}_2'$ 互换就会得到复共轭量，所以它也是厄米型的．另外，亦不难知道存在着下述关系：

$$\int\rho(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2;\boldsymbol{X}_1',\boldsymbol{X}_2')d\boldsymbol{X}_2 = (N-1)\rho(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_1'). \tag{9.3.14}$$

如果状态 $|\Psi\rangle$ 在粒子占有数表象中是用单一状态表示的，则二粒子密度矩阵(实际上多粒子密度矩阵一样)可由单粒子密度矩阵确定．例如，对费米子体系来说，与(9.3.9)式相应，可以得到关系式

$$\begin{aligned}&\rho(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2;\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2')\\&=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}[\varphi_i(\boldsymbol{X}_1)\varphi_j(\boldsymbol{X}_2)\varphi_i^*(\boldsymbol{X}_1')\varphi_j^*(\boldsymbol{X}_2')\\&\quad-\varphi_i(\boldsymbol{X}_1)\varphi_j(\boldsymbol{X}_2)\varphi_j^*(\boldsymbol{X}_1')\varphi_i^*(\boldsymbol{X}_2')]\\&=\rho(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_1')\rho(\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{X}_2')-\rho(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2')\rho(\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{X}_1').\end{aligned} \tag{9.3.15}$$

因二粒子算符

$$V^{(2)} = \sum_{ij} v^{(2)}(\boldsymbol{X}_i,\boldsymbol{X}_j)$$

的期待值为

$$\langle V^{(2)}\rangle = \int v^{(2)}(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2)\rho(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2;\boldsymbol{X}_1',\boldsymbol{X}_2')d\boldsymbol{X}_1d\boldsymbol{X}_2, \tag{9.3.16}$$

所以若定义出矩阵

$$v^{(2)}(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2;\boldsymbol{X}_1',\boldsymbol{X}_2') = v^{(2)}(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2)\delta(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_1')\delta(\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{X}_2'), \tag{9.3.17}$$

则

$$\langle V^{(2)}\rangle = \int v^{(2)}(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2;\boldsymbol{X}_1',\boldsymbol{X}_2')\rho(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2;\boldsymbol{X}_1',\boldsymbol{X}_2')d\boldsymbol{X}_1d\boldsymbol{X}_2d\boldsymbol{X}_1'd\boldsymbol{X}_2'.$$

根据此式，$V^{(2)}$ 显然可以写为

$$V^{(2)} = \sum_{ij,i'j'} v_{ij,,i'j'}^{(2)}\langle i'j'|\hat{\rho}|ij\rangle = \mathrm{tr}(v^{(2)}\hat{\rho}). \tag{9.3.18}$$

其中 $v_{ij,i'j'}^{(2)}$ 是矩阵 $v^{(2)}(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2;\boldsymbol{X}_1',\boldsymbol{X}_2')$ 变换到粒子占有数表象而得到的形式．

二粒子以上的多粒子密度矩阵，也完全可以同样定义。

密度矩阵的对角元与粒子密度相对应。单粒子密度 $\rho(\boldsymbol{X}) = \rho(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X})$ 给出粒子在 $\boldsymbol{X}$ 上的平均密度。对应于(9.3.4)式，可以把算符

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{X}) = \psi^{\dagger}(\boldsymbol{X})\psi(\boldsymbol{X}) \tag{9.3.19}$$

定义成单粒子密度算符。因 $\rho(\boldsymbol{X}) = \langle\Psi|\hat{\rho}(\boldsymbol{X})|\Psi\rangle$，故与上述定义等价，亦可令

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{X}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_i), \tag{9.3.20}$$

与单粒子密度类似，可以考虑二粒子密度

$$\rho^{(2)}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}') = \rho(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}';\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}'). \tag{9.3.21}$$

它给出在 $\boldsymbol{X}$ 处有一个粒子，在 $\boldsymbol{X}'$ 处有第二个粒子的相对概率。与(9.3.20)式相应，二粒子密度算符的定义是

$$\hat{\rho}^{(2)}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}') = \sum_{i<j}^{N} [\delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_i)\delta(\boldsymbol{X}',\boldsymbol{X}_j) + \delta(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_j)\delta(\boldsymbol{X}',\boldsymbol{X}_i)]. \tag{9.3.22}$$

作为一个简单的粒子，我们来考虑无相互作用的费米子放入带有周期边界条件的大箱之中的情况。这就是所谓的费米气体。假设箱是边长为 $L$ 的立方体，则单粒子态由下式给出：

$$\varphi_i(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{x}}\chi_i, \tag{9.3 23}$$

其中，$\chi_i$ 是自旋函数（如有同位旋变量存在，就有必要将其包含在内，为了简单起见，现在只考虑自旋，其大小为 $\frac{1}{2}$）。波矢 $\boldsymbol{k}_i$ 满足关系式

$$\boldsymbol{k}_i = \frac{2\pi}{\mathrm{L}}\boldsymbol{n}_i,\ \boldsymbol{n}_i = (n_{ix},n_{iy},n_{iz})\quad (n_{ix},n_{iy},n_{iz}\text{ 是整数}). \tag{9.3.24}$$

该单粒子态的能量是 $\hbar^2\boldsymbol{k}_i^2/2m$，其中 $m$ 为粒子质量。体系的最低能态是此单粒子态从低能态开始顺次被粒子占据了的状态。设这

时所占据的最高单粒子态的波数为 $k_F$。应用(9.3.15)式，可以得到

$$\rho^{(2)}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')=\frac{1}{L^3}\sum_i\sum_j[1-e^{i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_j)\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\delta_{s_is_j}]$$

($s_i$ 是状态 $i$ 中粒子自旋在 $z$ 方向上分量的本征值)，将对 $i,j$ 的求和换成对 $\boldsymbol{k}$ 的积分 $\left(\sum_{k_i}\to\frac{L^3}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{k}\right)$，得

$$\rho^{(2)}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')=\frac{k_F^6}{36\pi^4}-\delta_{ss'}\left[\frac{1}{8\pi^3}\int_{|\boldsymbol{k}|<k)_F}d^3\boldsymbol{k}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\right]^2$$

$$=\frac{k_F^6}{36\pi^4}-\delta_{ss'}\frac{1}{4\pi^4}\left[\frac{\sin k_F|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{X}'|}{|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{X}'|^3}\right.$$

$$\left.-k_F\frac{\cos k_F|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{X}'|}{|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{X}'|^2}\right]^2.$$

另一方面，不久就会知道，$e(\boldsymbol{X})$为常数，即

$$\rho(\boldsymbol{X})=\frac{k_F^3}{3\pi^2}=\rho_0,$$

所以 $\rho^{(2)}$ 为

$$\rho^{(2)}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')=\frac{1}{4}\rho_0^2[1-\delta_{ss'}C^2(k_F|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{X}'|)]. \qquad (9.3.25)$$

其中，(参看图 9.1)

$$C(x)=\frac{3}{x^2}\left(\frac{\sin x}{x}-\cos x\right). \qquad (9.3.25')$$

因 $x\to 0$ 时 $C(x)\to 1$，故(9.3.25)式表明，泡利不相容原理阻碍粒子相互接近。这是在无相互作用的粒子体系中由泡利原理所引起的相关。

最后，我们来寻求密度矩阵的运动方程。如果利用哈密顿算符(9.1.3)，把 $\Psi(x_1,\cdots,x_N)$ 的运动方程写成

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{N}\nabla_i^2+\sum_{i=1}^{N}U(\boldsymbol{X}_i)\right.$$

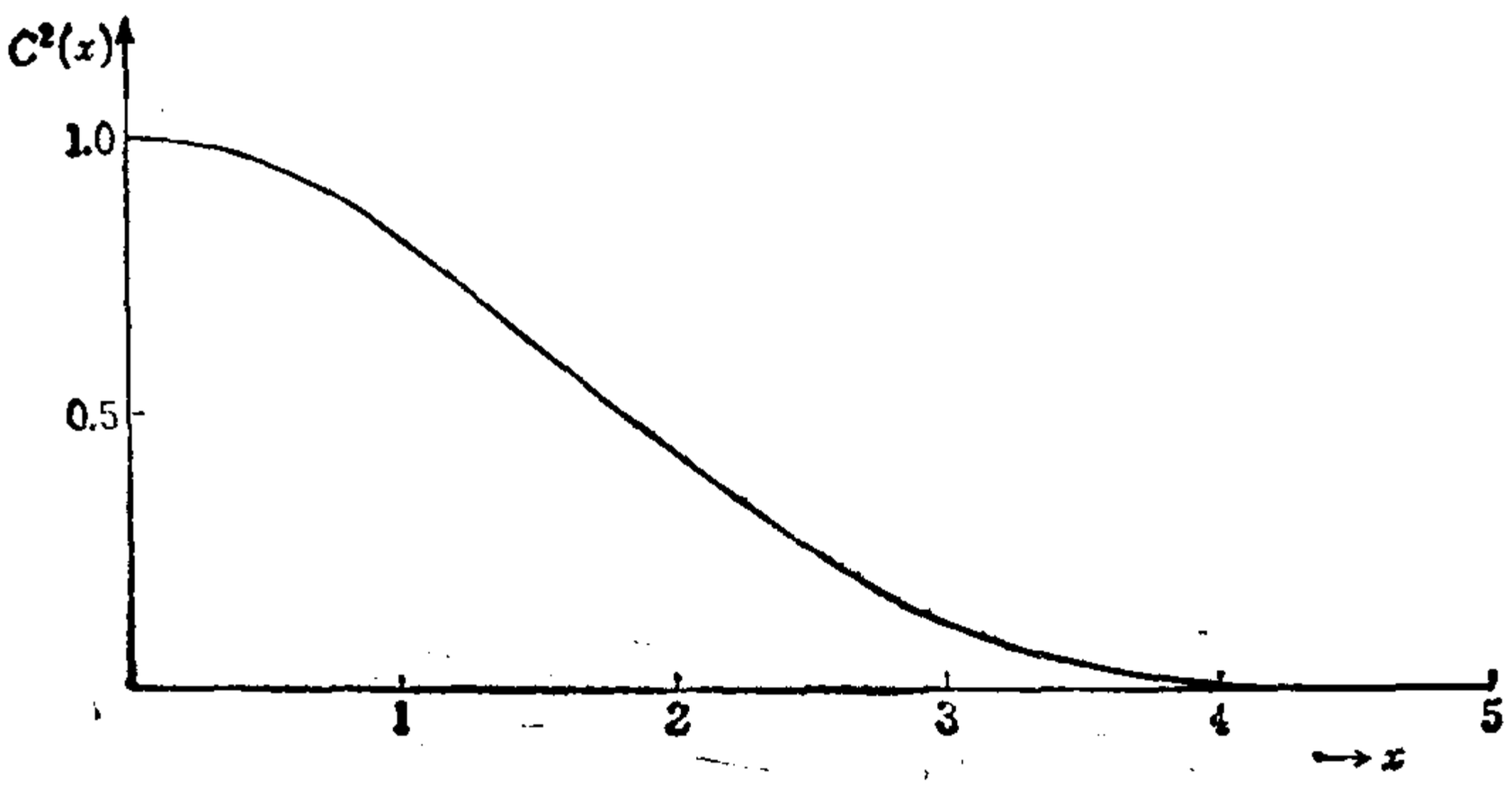



图 9.1　函数 $C^2(x)$

$$+\frac{1}{2}\sum_{ij}V(\boldsymbol{X}_i,\boldsymbol{X}_j)\Big\}\Psi,$$

则 $\rho(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')$ 的运动方程(令 $V(\boldsymbol{X}_i,\boldsymbol{X}_i)=V(\boldsymbol{X}_j,\boldsymbol{X}_i)$) 为

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\rho(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')}{\partial t}=&\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2-\nabla'^2)+U(\boldsymbol{X})\\&-U(\boldsymbol{X}')\Big\}\rho(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')+\int(V(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_2)\\&-V(\boldsymbol{X}',\boldsymbol{X}_2))\rho(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}_2;\boldsymbol{X}',\boldsymbol{X}_2)d\boldsymbol{X}_2,\end{aligned}\tag{9.3.26}$$

也就是说，当两个粒子间存在相互作用时，单粒子密度矩阵的运动方程含有二粒子密度矩阵. 若列出二粒子密度矩阵的运动方程，则会含有三粒子密度矩阵. 依次类推，就应该得出 $n$ 粒子密度矩阵（$n=1,2,\cdots N$）的联立运动方程.

### b) 哈特里（Hartree）方程

作为多粒子体系空间的基底，单粒子态的函数系 $\{\varphi_i\}$ 只要是完备系都行，但尽量具有物理意义的则更易理解. 假如整个体系的状态通常能够只用 $|n_1,n_2,\cdots\rangle$ 的一项来表示，则该体系就非常便于处理. 也就是说，这时体系是当作独立运动的粒子的集合来处理的. 在有相互作用的粒子体系中，一般来说所有状态并不

能用这种形式表示。但是，在与所研究的现象有关的能量范围内，可以考虑用这种形式来表示的近似。 即所谓的单体近似。通常，对体系的基态大都采取该处理方式。这就是哈特里近似。

取 $\{\varphi_i\}$ 所满足的表达式为

$$H_0\varphi_i(x) \equiv \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + v(x)\right\}\varphi_i(x) = \varepsilon_i\varphi_i(x). \qquad (9.3.27)$$

为简单起见，假设没有能量简并，也不考虑自旋之类的自由度。而且由 $\varepsilon_i$ 小的一方加上编号 $i$. 当体系是玻色子体系时，单体近似的最低能态为 $|n_1 = N\rangle$，而当体系是费米子体系时，则为 $|n_1 = 1, \cdots, n_N = 1\rangle$. 该状态 $|\Phi_0\rangle$ 并非体系的哈密顿算符

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + U(x_i)\right\} + \frac{1}{2}\sum_{ij} V(x_i, x_j) \qquad (9.3.28)$$

的本征态。因此，只能选择 $\varphi_i$ 及有关的 $H_0$，使得该状态中 $H$ 的期待值尽可能减小。

因为在玻色子的情况下

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle = &\sum_{i=1}^{N}\int\varphi_1^*(x_i)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + U(x_i)\right\}\varphi_1(x_i)d^3x_i \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{ij}\int\varphi_1^*(x_i)\varphi_1^*(x_i)V(x_i, x_i) \\ &\cdot\varphi_1(x_i)\varphi_1(x_i)d^3x_i\cdot d^3x_i,\end{aligned}$$

所以，在 $\varphi_1$ 的归一化条件 $\int|\varphi_1(x)|^2d^3x = 1$ 之下，根据 $\langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle$ 对 $\varphi_1$ 的变分为零的条件，可得

$$\begin{aligned}&\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x)\right\}\varphi_1(x) \\ &+ \sum_{i=1}^{N}\int\varphi_1^*(x_i)V(x, x_i)\varphi_1(x_i)d^3x_i\varphi_1(x) \\ &= \varepsilon\varphi_1(x). \qquad (9.3.29)\end{aligned}$$

其中，$\varepsilon$ 是拉格朗日待定系数，将上式与(9.3.27)式相比较，可以

得到

$$v(\boldsymbol{x}) = U(\boldsymbol{x}) + \sum_i \int \varphi_i^*(\boldsymbol{x}_i) V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i) \varphi_i(\boldsymbol{x}_i) d^3\boldsymbol{x}_i. \quad (9.3.30)$$

也就是说，确定粒子状态的势 $v$，可以是该粒子同其它粒子相互作用的平均值与$H$中的单粒子势之和。 确定$\varphi$的（9.3.27）式，其$v(\boldsymbol{x})$ 又可以根据(9.3.30)式而由$\varphi$来确定，在这个意义上，并不会自相矛盾。这时，

$$\begin{aligned}\langle E_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle \\ &= N\varepsilon - \frac{1}{2} \sum_{ij} \int \varphi_i^*(\boldsymbol{x}_i) \varphi_i^*(\boldsymbol{x}_j) V(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) \varphi_1(\boldsymbol{x}_i) \varphi_1(\boldsymbol{x}_j) d^3\boldsymbol{x}_i d^3\boldsymbol{x}_j.\end{aligned} \quad (9.3.31)$$

$\langle E_0 \rangle$之所以不是单粒子态的能量 $\varepsilon$ 的$N$倍，原因在于，对$N\varepsilon$ 来说，粒子间的相互作用应该重复计算两次，哈特里表达式无论在什么时候都是这样。

因为在费米子体系的情况下，

$$\begin{aligned}\langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle = \sum_{i=1}^{N} \int \varphi_i^*(\boldsymbol{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\boldsymbol{x}) \right\} \varphi_i(\boldsymbol{x}) d^3\boldsymbol{x} \\ + \frac{1}{2} \sum_{ij} \int \varphi_i^*(\boldsymbol{x}) \varphi_i^*(\boldsymbol{x}') V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \\ \cdot \{ \varphi_i(\boldsymbol{x}) \varphi_j(\boldsymbol{x}') - \varphi_i(\boldsymbol{x}') \varphi_j(\boldsymbol{x}) \} d^3\boldsymbol{x} d^3\boldsymbol{x}',\end{aligned}$$

所以，如果以正交归一化条件 $\int \varphi_i^*(\boldsymbol{x}) \varphi_j(\boldsymbol{x}) d^3\boldsymbol{x} = \delta_{ij}$ 作为附加条件对 $\varphi_i$ 进行变分，则 $\langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle$ 变分为零的条件就会变成

$$\begin{aligned}\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\boldsymbol{x}) \right\} \varphi_i(\boldsymbol{x}) + \sum_{i \neq j} \int V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \{ \varphi_j^*(\boldsymbol{x}') \varphi_j(\boldsymbol{x}') \varphi_i(\boldsymbol{x}) \\ - \varphi_j^*(\boldsymbol{x}') \varphi_j(\boldsymbol{x}) \varphi_i(\boldsymbol{x}') \} d\boldsymbol{x}' = \sum_j \omega_{ij} \varphi_j(\boldsymbol{x}).\end{aligned} \quad (9.3.32)$$

其中，$\omega_{ij}$ 是拉格朗日待定系数。左边第二项由两部分组成，一部分是直接项

$$V_D(\boldsymbol{x}) \varphi_i(\boldsymbol{x}) = \int \sum_{j \neq i} |\varphi_j(\boldsymbol{x}')|^2 V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') d^3\boldsymbol{x}' \varphi_i(\boldsymbol{x}), \quad (9.3.33a)$$

另一部分是交换项

$$V_{\mathrm{E}}(\boldsymbol{x})\varphi_i(\boldsymbol{x}) = -\int \sum_{j\neq i} \varphi_j^*(\boldsymbol{x}')\varphi_i(\boldsymbol{x})V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\varphi_i(\boldsymbol{x}')d\boldsymbol{x}'\,. \tag{9.3.33b}$$

不难知道，$V_{\mathrm{E}}$ 是厄米型的。这样一来，即可得到联立方程

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\boldsymbol{x}) + V_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{x}) + V_{\mathrm{E}}(\boldsymbol{x})\right\}\varphi_i(\boldsymbol{x}) = \sum_j \omega_{ij}\varphi_j(\boldsymbol{x}). \tag{9.3.34}$$

如果将其对角化，并再次设左边算符的本征函数为 $\varphi$，则

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\boldsymbol{x}) + V_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{x}) + V_{\mathrm{E}}(\boldsymbol{x})\right\}\varphi_i(\boldsymbol{x}) = \varepsilon_i\varphi_i(\boldsymbol{x}). \tag{9.3.35}$$

其中 $\varepsilon_i$ 是本征值。(9.3.35)式叫做哈特里-福克方程(在(9.3.35)式中省略 $V_{\mathrm{E}}$ 后所得到的表达式有时简称为哈特里方程)。此时，

$$\begin{aligned}\langle E_0\rangle = \langle \Phi_0|H|\Phi_0\rangle &= \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_i \\ &- \frac{1}{2}\sum_{ij}\int \varphi_i^*(\boldsymbol{x})\varphi_j^*(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\{\varphi_i(\boldsymbol{x})\varphi_j(\boldsymbol{x}') \\ &- \varphi_i(\boldsymbol{x}')\varphi_j(\boldsymbol{x})\}d^3\boldsymbol{x}d^3\boldsymbol{x}'\,,\end{aligned} \tag{9.3.36}$$

果然出现了修正粒子间相互作用能量计算值的部分。

哈特里表达式所依据的是变分法，用单粒子态的波函数之积的形式，来获得尽可能低的能量。这时，将单粒子波函数 $\varphi$ 变分，而体系的能量的期待值则取为固定值。如果将$\{\varphi_i\}$作为完备系预先固定，则单粒子波函数就可以表示为它们的线性组合。$\varphi$ 的变分是该线性组合的系数的变分，用这种方法，亦能得到同样结果。为今后叙述方便，我们对费米体系演示一下这种作法。

这时，因单粒子态是预先指定的，故可用粒子占有数表象来表示。哈密顿算符(9.3.28)在粒子占有数表象中是

$$H = \sum_{ij} (T_{ij} + U_{ij}) c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k. \quad (9.3.37)$$

其中，

$$T_{ij} = \int \varphi_i^*(\boldsymbol{x}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \varphi_j(\boldsymbol{x}) d^3\boldsymbol{x},$$

$$U_{ij} = \int \varphi_i^*(\boldsymbol{x}) U(\boldsymbol{x}) \varphi_j(\boldsymbol{x}) d^3\boldsymbol{x},$$

$$V_{ij,kl} = \int \varphi_i^*(\boldsymbol{x}) \varphi_j^*(\boldsymbol{x}') V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \varphi_k(\boldsymbol{x}) \varphi_l(\boldsymbol{x}') d^3\boldsymbol{x} d^3\boldsymbol{x}'. \quad (9.3.38)$$

在该表象中状态 $|\Psi_0\rangle = |n_1 = 1, n_2 = 1, \cdots, n_N = 1\rangle$ 需要选择能量的最低值。取 $|\Psi_0\rangle$ 的变分 $\delta|\Psi_0\rangle$ 为

$$\delta|\Psi_0\rangle = \lambda c_\beta^\dagger c_\alpha |\Psi_0\rangle. \quad (9.3.39)$$

若 $\alpha$ 是 $|\Psi_0\rangle$ 中已被占据的状态，$\beta$ 是未被占据的状态，则

$$\delta|\Psi_0\rangle = \lambda |\cdots, n_\alpha = 0, \cdots, n_N = 1, \cdots, n_\beta = 1, \cdots\rangle,$$

其它情况 $\delta|\Psi_0\rangle = 0$。也就是说，应该取 $|\Psi_0\rangle$ 的激发态为 $|\Psi_0\rangle$ 的变分。就单粒子态 $\varphi$ 而言，相当于把 $\varphi_\alpha$ 变成 $\varphi_\alpha + \lambda\varphi_\beta$。对于这个变分来说，$\langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle$ 的变分为零的条件则是

$$T_{\beta\alpha} + U_{\beta\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (V_{i\beta,i\alpha} - V_{i\beta,\alpha i} - V_{\beta i,i\alpha} + V_{\beta i,\alpha i}) = 0$$

$$(\alpha \leqslant N, \beta > N). \quad (9.3.40)$$

若从一开始就考虑到 $c$ 的反对易性，并用

$$\bar{V}_{ij,kl} = \frac{1}{4} (V_{ij,kl} - V_{ji,kl} - V_{ij,lk} + V_{ji,lk}) \quad (9.3.41)$$

来代替(9.3.37)式中的 $V_{ij,kl}$，则

$$H = \sum (T_{ij} + U_{ij}) c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum \bar{V}_{ij,kl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k, \quad (9.3.42)$$

而条件(9.3.40)变成

$$T_{\beta\alpha} + U_{\beta\alpha} + 2 \sum_{i=1}^{N} \bar{V}_{i\beta,i\alpha} = 0. \quad (9.3.43)$$

在此，我们把哈特里的哈密顿算符定义为

$$H^{\mathrm{HF}} = \sum_{ij}\left(T_{ij} + U_{ij} + 2\sum_{k=1}^{N}\bar{V}_{ki,ki}\right)c_i^{\dagger}c_j. \quad (9.3.44)$$

其中，对 $i$、$j$ 的求和是对所有状态取的。条件(9.3.40)或(9.3.43)表明，在 $|\Psi_0\rangle$ 被占有的和未被占有的状态之间 $H^{\mathrm{HF}}$ 的矩阵元为零。因此，即使在被占有的状态之间构成的线性组合，亦不会改变变分条件，利用这一点就可以找出将 $H^{\mathrm{HF}}$ 对角化的表象，也就是说，重新选择基底 $\{\varphi_i\}$，以使

$$T_{ij} + U_{ij} + 2\sum_{k=1}^{N}\bar{V}_{ki,kj} = \varepsilon_i\delta_{ij}. \quad (9.3.45)$$

(9.3.45) 式与(9.3.35)式是等价的。像这样重新选择基底时，$H$ 在状态 $|\Psi_0\rangle$ 中的期待值为

$$\langle E\rangle = \langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_i - \sum_{k=1}^{N}\bar{V}_{ki,ki}, \quad (9.3.46)$$

而且与(9.3.36)式类似，对于 $|\Psi_0\rangle$ 的变分，$\langle E\rangle$ 取固定值。

选择变分(9.3.39)，按以下思路也行[1]。对状态 $|\Psi_0\rangle$ 进行变分

$$|\Psi\rangle = e^{i\lambda(S+S^{\dagger})}|\Psi_0\rangle, \quad (9.3.47)$$

$|\Psi\rangle$ 的能量期待值为

$$E(\lambda) = \langle\Psi|H|\Psi\rangle. \quad (9.3.48)$$

$S$ 是 $c$、$c^{\dagger}$ 的多项式所给定的算符。若 $S$ 是不改变粒子数的算符(即构成的积使 $c$ 和 $c^{\dagger}$ 的数目相同)，则 $|\Psi\rangle$ 是和 $|\Psi_0\rangle$ 相同的 $N$ 粒子体系的状态。选择各种各样的 $S$，就可以构成不同形式的 $|\Psi\rangle$。把这个 $|\Psi\rangle$ 看成是变分函数，$\lambda$ 是变分参量。假设 $\lambda$ 为微小量，将 $E(\lambda)$ 展开，则

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle + i\lambda\langle\Psi_0|[H, S+S^{\dagger}]\Psi_0\rangle \\ &\quad + \frac{(-1)}{2}\lambda^2\langle\Psi_0|[H, S+S^{\dagger}], S+S^{\dagger}]|\Psi_0\rangle + \cdots \\ &= \langle E\rangle + \lambda\delta^{(1)}E + \lambda^2\delta^{(2)}E + \cdots. \end{aligned} \quad (9.3.49)$$

---

1) 以下讨论依据沢田、福田所著：*Prog. Theor. Phys.*, **25**, 653(1961)。而有关稳定性的详细讨论则见于沢田克郎：《多体问题》(岩波书店)。

因为

$$\partial E(\lambda)/\partial\lambda|_{\lambda=0} = i\langle\Psi_0|[H, S+S^\dagger]|\Psi_0\rangle, \qquad (9.3.50)$$

所以若(9.3.50)式右边为零，则对该变分来说，$|\Psi_0\rangle$ 会给出固定的能量期待值。$S$ 最简单的形式是

$$S = c_\beta^\dagger c_\alpha \ (\beta \text{是被占有的状态，} \alpha \text{是未被占有的状态}) \qquad (9.3.51)$$

这种取法与(9.3.39)式相当，不难知道，若$|\Psi_0\rangle$为哈特里-福克意义下的基态，则(9.3.50)式右边就是零。

$S$ 可以有各种各样的形式。若 $|\Psi_0\rangle$ 是哈特里-福克意义下的基态，则 $S^\dagger|\Psi_0\rangle$ 通常是相当于 $|\Psi_0\rangle$ 的激发态。但是，一般来说，$S^\dagger|\Psi_0\rangle$ 却未必是$H$的本征态。因此，作为 $S^\dagger$ 这个算符，要尽可能选得可以构成$H$的本征态。这就是下一节所要阐述的正则振动。这时，$S^\dagger$满足关系式(一般在某一近似范围内)

$$[H, S^\dagger] = \omega S^\dagger, \ [H, S] = -\omega^* S. \qquad (9.3.52)$$

若这样来选择 $S$ 和 $S^\dagger$，则(9.3.50)式的右边为

$$i\langle\Psi_0|\omega S^\dagger - \omega^* S|\Psi_0\rangle,$$

根据 $S$ 和$|\Psi_0\rangle$的性质，此表达式通常等于零。但是，假如 $S$ 具有性质 $\langle\Psi_0|S|\Psi_0\rangle \neq 0$ 或 $\langle\Psi_0|S^\dagger|\Psi_0\rangle \neq 0$，那么，用这样的 $S, S^\dagger$ 进行变分，$|\Psi_0\rangle$ 将不会给出固定的能量值。适当选择 $\lambda$，会使(9.3.49)式右边第二项(即能量的一次变分) $\delta^{(1)}E < 0$，从而有必要寻求一个更好的状态来作为 $|\Psi_0\rangle$。

即使假定 $\delta^{(1)}E = 0$，状态亦未必稳定。为此，我们来看一看展开式(9.3.49)的$\lambda^2$项。因为当 $S$ 和 $S^\dagger$ 满足关系(9.3.52)时，$\lambda^2\delta^{(2)}E$ 是

$$-\frac{\lambda^2}{2}\langle\Psi_0|[[H, S, S^\dagger], S+S^\dagger]|\Psi_0\rangle$$

$$= -\frac{\lambda^2}{2}\langle\Psi_0|[\omega S^\dagger - \omega^* S, S+S^\dagger]|\Psi_0\rangle$$

$$= \frac{\lambda^2}{2}(\omega+\omega^*)\langle\Psi_0|[S, S^\dagger]|\Psi_0\rangle,$$

所以，即使$\omega$是实数，它也将随$[S, S^\dagger]$的值而可正可负，当 $\delta^{(2)}E$

$>0$ 时，体系是稳定的，当 $\delta^{(2)}E<0$ 时，即使 $\delta^{(1)}E=0$ 的体系也不会稳定. 另一个有意义的情况是 $\omega$ 为纯虚数，这时 $\delta^{(2)}E=0$，对于这种变形，体系依然不稳定，在超导之类的问题中可以见到这类例子(参考本讲座第七卷《物性学》(II))!

### c) 费米子体系的基态

作为费米子体系的基态，我们首先考虑哈特里近似中的基态. 这就是所谓的费米海. 设哈特里单粒子态的系列 $\{\varphi_i\}$ 中，状态的编号从低能一方开始顺次排列，则基态为

$$|\Psi_0\rangle=\prod_{i=1}^{N}c_i^{\dagger}|0\rangle. \tag{9.3.53}$$

其中，$|0\rangle$ 是连一个粒子都没有的真空，$c_i^{\dagger}$ 是在 $\varphi_i$ 所描述的状态中产生一个粒子的产生算符.

在费米子的情况下，往往以(9.3.53)式所给出的基态为基准. 这时，把 $|\Psi_0\rangle$ 写成 $|\tilde{0}\rangle$ 与此为准，激发态是出现 $i>N$ 的单粒子态，并随之湮没了 $i\leqslant N$ 的单粒子态，相对于 $|\tilde{0}\rangle$ 来说，这是空穴所对应的状态. 也就是说，使 $i\leqslant N$ 的单粒子态湮没，对 $|\tilde{0}\rangle$ 来说则是产生空穴状态. 因此，我们以 $|\tilde{0}\rangle$ 为基准，把粒子状态的产生和湮没算符 $c_i^{\dagger}$、$c_i$ 分成 $i>N$ 和 $i\leqslant N$ 两类，并写成

$$c_i^{\dagger}=\begin{cases}a_i^{\dagger} & i>N\\ b_i & i\leqslant N\end{cases}\qquad c_i=\begin{cases}a_i & i>N\\ b_i^{\dagger} & i\leqslant N.\end{cases} \tag{9.3.54}$$

$a^{\dagger}$ 和 $a$ 分别是使 $i>N$ 的粒子状态产生、湮没的算符，而 $b^{\dagger}$ 是在 $i\leqslant N$ 的粒子状态产生空穴(相对于 $|\tilde{0}\rangle$)的算符，$b$ 是在 $i\leqslant N$ 的粒子状态遇到空穴时使之湮没(即填上粒子)的算符. 因为是费米子体系，故

$$a_i|\tilde{0}\rangle=0,\ b_i|\tilde{0}\rangle=0. \tag{9.3.55}$$

如上所述，对于无相互作用的费米子体系来说，$\varphi_i$ 可以取为平面波. 这时，$|\tilde{0}\rangle$ 所占据的最高动量状态的动量大小 $p_F$($p_F/\hbar$ 相当于 $a$) 中的 $k_F$) 称为费米动量. 费米动量与粒子数 $N$ 的关系(设自旋自由度为 $(2s+1)$) 是

$$N = (2s+1)\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \frac{4\pi}{3} p_F^3, \tag{9.3.56}$$

即

$$p_F = \hbar\left(\frac{6\pi^2}{2s+1}\right)^{1/3}\left(\frac{N}{L^3}\right)^{1/3}. \tag{9.3.57}$$

即使有相互作用存在，由于哈特里表达式(9.3.34)在无外场 $U(x)$ 时对于平行移动是不变的，因而也可以把动量 $p(=\hbar k)$ 选作表征单粒子态的量。与(9.3.23)式相当，作为$\{\varphi_i\}$将选择

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{ip\cdot x/\hbar},$$

其中 $\Omega$ 是归一化体积，相当于(9.3.23)式的 $L^3$（为简单起见，这儿未考虑自旋之类的情况。即使涉及自旋坐标，其本质亦将相同）。在(9.3.34)式中令 $U(x) = 0$，以此得到单粒子态的能量为

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m} + \frac{N}{\Omega} v_0 - \frac{1}{\Omega}\sum_{p'} v_{p-p'}. \tag{9.3.58}$$

其中 $v_p$ 是粒子间相互作用 $V(x)$ 的傅里叶分量

$$v_p = \int V(x) e^{ip\cdot x/\hbar} d^3x, \tag{9.3.59}$$

(9.3.58)式右边第三项 $\sum_{p'}$ 是对被占据的单粒子态 $p'$ 求和。哈特里基态相当于由其单粒子的低能态开始依次填充粒子所得到的状态。

在许多情况下，动量小的状态能量偏低，这时，由动量小的一方依次填充单粒子态，则形成基态。其能量（即 $\langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle = \langle E_0\rangle$）为

$$\begin{aligned}\langle E_0\rangle &= \sum_p^{p_F} \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} N \frac{N}{\Omega} v_0 - \frac{1}{2}\frac{1}{\Omega}\sum_{p,p'}^{p_F} v_{p-p'} \\ &= \sum_p^{p_F} \varepsilon_p - \frac{1}{2}\frac{N^2}{\Omega} v_0 + \frac{1}{2}\frac{1}{\Omega}\sum_{pp'}^{p_F} v_{p-p'}.\end{aligned} \tag{9.3.60}$$

这样一来，即使有相互作用，费米子体系的基态中动量状态的分布也有希望选成在费米动量附近不连续(或接近于不连续)变化的形状，不过，这时动量 $p$ 一定的单粒子态的能量却与无相互作用时的值（$=p^2/2m$）有所差异。这种状态的运动虽然表面上被描述为独立粒子运动，但是，实际上由于运动时对其它粒子的拖曳或挤压，所以即使当作独立粒子也有不同于无相互作用时的粒子图像。在该意义上，一般把这样的"粒子"叫做准粒子。

在以上讨论中，用动量来表征单粒子态是行之有效的，换句话说，就是默许无相互作用时的状态与有相互作用时的状态可以一一对应。但是，根据相互作用的性质，在有的情况下这种假定并不成立。这时，准粒子的内涵与通常的粒子差异极大。超导状态即其明显一例。不言而喻，在这种情况下，即使不是准粒子，对于基态也完全有可能得出比哈特里的$\langle E_0\rangle$更低的能量值。

### d) 托马斯-费米法或局域费米动量法

作为多费米子体系中求解单粒子运动的方法，哈特里法是正面求解的方法。但是，在粒子数众多的情况下进行计算，即使借助于电子计算机亦难于完成。当粒子数众多的时候，索性采用逆近似法，也就是统计处理法，往往还能很好地掌握体系的性质。托马斯-费米法即为其一，原先，它是作为一个求确定原子内电子运动的势的方法而提出来的。

托马斯-费米法首先着眼于粒子密度。假设势只是空间位置的函数，则用粒子密度和势就能确定势能密度。这对应于，在经典静电场中势能密度是由电荷密度与势的乘积之半给出的。另一方面，假定动能密度也只是粒子密度的函数，当场缓慢变化时这是一个恰当的近似。

如果密度是均匀的，则体系的基态是直到费米动量的动量状态均被占满的状态。若密度变化缓慢，那么选择某一小区域，在该区域内就可以认为密度是恒定的。这样一来，对于该密度来说能够考虑费米动量。虽然该区域非常小，但是如果选得大到足以使

密度概念成立，则可对空间各点来定义费米动量 $p_F(x)$. 设粒子自旋为 1/2,则密度 $\rho(x)$ 与 $p_F(x)$ 的关系是

$$\rho(x) = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{p_F(x)}{\hbar}\right)^3. \tag{9.3.61}$$

能量密度是

$$\varepsilon_k(x) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3}\int \frac{p^2}{2m}\, d^3p = \frac{3}{10m}\, p_F^2(x)\rho(x)$$

$$= \frac{3\hbar^2}{10m}(3\pi^2)^{2/3}\rho^{5/3}(x). \tag{9.3.62}$$

若体系处于平衡状态，则粒子在体系的各点上所能取的最高能量必然与位置无关,而是一个定值. 其原因在于,倘不如此则粒子就会向附近低能处移动. 这个条件可以写成$p_F^2(x)/2m + V(x)$ = 恒值,即

$$\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2)^{2/3}(\rho(x))^{2/3} + V(x) = \text{恒值}. \tag{9.3.63}$$

对于原子内的电子来说，该条件如下所示. 用 $\phi(x)$ 表示影响电子运动的静电势,则

$$\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2)^{2/3}(\rho(x))^{2/3} - e\phi(x) = \text{常数}. \tag{9.3.64}$$

用$-e\phi_0$($\phi_0$ 是正数)表示右边的常数（$\phi_0$ 之所以为正，是由于电子被束缚在原子之内). 通过泊松方程

$$\Delta\phi(x) = 4\pi e\rho(x),$$

静电势 $\phi(x)$ 与电荷密度$-e\rho(x)$ 有关. 由此可以得到 $\phi(x)$ 的方程

$$\Delta\phi(x) = e(2me)^{3/2}(1/3\pi^2\hbar^3)(\phi(x) - \phi_0)^{3/2}. \tag{9.3.65}$$

对中性原子来说,在无限远处 $\phi = 0$，故 $\phi_0 = 0$. 假设密度分布是球对称的,令

$$\phi(x) = \frac{ze}{|x|}\chi(x), \quad x = \frac{2me^2}{\hbar^2}\cdot z^{1/3}|x|, \tag{9.3.66}$$

则(9.3.65)式就变成

$$\sqrt{x}\,\chi''(x) = \frac{4\pi}{3}[\chi(x)]^{3/2}. \tag{9.3.67}$$

边界条件是 $\chi(0) = 1$（即 $|\boldsymbol{x}|$ 不大时 $\phi(\boldsymbol{x}) \simeq ze/|\boldsymbol{x}|$），$\chi(\infty) = 0$。该方程可以数值求解，从而作出 $\chi(x)$ 的表。

在以上探讨中，为推导 $\rho$ 的方程利用了泊松方程。在没有与之相当的表达式时，则必须使用其它方法。例如，以粒子间相互作用的知识为基础，采取适当方法求出势能密度$W$作为粒子密度的函数，则用 $\int W(\rho)\rho(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x}$ 或与此类似的表达式就能给出体系的总能量.这时，通过对 $\rho$ 变分以使总能量最小，便可得出 $\rho$ 的方程.为了使推导 $\rho$ 的方程而采用的假定或方法可以与托马斯-费米方法的基本思路分开考虑，也可以综合应用其它各种有用的假定或近似.

### e） 玻色子体系的基态

玻色子体系有代表性的一例是光子集团，只要不在特殊条件下，一般来说粒子数并不会守恒。在玻色子体系的情况下，特别是在考虑到与别的粒子相互作用时，粒子数一般不会守恒。这意味着，将不再涉及截止目前所谈到的默许体系的粒子数保持固定的讨论方式。根据情况，应放弃粒子占有数表象，下章将要叙述的表示相干状态的方法往往与物理图像一致。但是，一方面，粒子数一定的玻色子体系也是存在的(如 $^4$He 流体)，另一方面，粒子占有数表象在粒子数发生变化时也是一种方便的表象。因此，我们将沿用至此使用的框架。

假如有相互作用的玻色子体系并不随平行移动而变，则可用动量来识别粒子状态。倘若相互作用是弱斥力，则在一般情况下动量为零的粒子状态就是能量最低的单粒子态，利用哈特里方程可以算出这个能量。在哈特里的意义上体系的基态指的是，全部粒子都占据该单粒子态。因为体系的波函数由这种单粒子波函数(即动量为零的平面波)之积给出，所以就空间而言密度将趋于均

匀。但是，与费米子体系的情形相同，哈特里近似未必给出体系的最低能量，全部粒子都占据同样的哈特里单粒子态，也不见得就会给出好的基态。其简单的一例如下所示。

设相互作用的哈密顿算符为

$$H_1 = \frac{1}{2}\sum_{kpq} V_k c^\dagger_{p+k} c^\dagger_{q-k} c_q c_p. \tag{9.3.68}$$

其中，$V_k$ 是两粒子间的相互作用势 $V(x)$ 的傅里叶分量。当 $V(x)$ 为短程力势时，用 $\delta$ 函数来近似它，就可以取 $V_k =$ 常数 $= V_0$。$H_1$ 的对角成分是

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}V_0\left(\sum_p n_p(n_p-1) + 2\sum_{p\neq q} n_p n_q\right) \\
&= \frac{1}{2}V_0\left(2\sum_{p,q} n_p n_q - \sum_p n_p(n_p+1)\right) \\
&= \frac{1}{2}V_0\left(2N^2 - N - \sum_p n_p^2\right).
\end{aligned} \tag{9.3.69}$$

其中 $n_p = c^\dagger_p c_p$ 是粒子数算符，$N$ 是体系总粒子数。

若相互作用强得足以忽视动能（或假设粒子的质量相当重），则当 $V$ 为引力场时，在所有 $n_p = 0$ 或 1 的情况下就可以得到(9.3.69)式的极小值。也就是说，该体系类似于费米子体系，粒子尽量不取相同的动量状态。但当 $V$ 为斥力时，某一个 $n_p$ 等于 $N$ 而其它为零的情况将会给出(9.3.69)式的最小值，导致所有粒子占据一个单粒子态。

上例多少有些极端，所以我们再列举一下稍微接近于现实的（也可以说是简化的）例子。这就是使 $^4$He 流体的一部分性质简化了的模型[1]。

我们把具有相互作用的玻色子体系的哈密顿算符写为

$$H = H_0 + H_1 = \sum_p \varepsilon_p c^\dagger_p c_p$$

---

1）有关其物理意义等内容，请参看本讲座第六卷«物性学»（I）和第七卷«物性学»(II).

$$+\frac{1}{2}\sum_{kpq}V_k c^\dagger_{p+k}c^\dagger_{q-k}c_q c_p. \tag{9.3.70}$$

若无相互作用，则全部粒子处于 $p=0$ 的状态，正因为有相互作用，所以全部粒子未必就处于 $p=0$ 的状态。但是，在相互作用弱的情况下，可以预料，大部分粒子是处于 $p=0$ 的状态。设 $p=0$ 的状态中的粒子数为 $N_0$，假定这个数与体系的总粒子数 $N$ 相差不太大 $(1-(N_0/N)\ll 1)$。取体系的基态为 $|\Psi_0(N_0)\rangle$，则由 $c^\dagger$ 和 $c$ 的性质，就可以写成

$$c^\dagger|\Psi_0(N_0)\rangle=\sqrt{N_0+1}\,|\Psi_0(N_0+1)\rangle$$

$$c_0|\Psi_0(N_0)\rangle=\sqrt{N_0}\,|\Psi_0(N_0-1)\rangle. \tag{9.3.71}$$

其中，$|\Psi_0(N_0\pm1)\rangle$ 是状态 $p=0$ 的粒子多(或少)一个的状态。倘若 $N$ 和 $N_0$ 相当大，则 $\sqrt{N_0+1}\simeq\sqrt{N_0}$，可以认为 $|\Psi_0(N_0\pm1)\rangle$ 与 $|\Psi_0(N_0)\rangle$ 无太大差别。如果取这样的近似：用 $\sqrt{N_0}$ 代替 $\sqrt{N_0+1}$，用 $|\Psi_0(N_0)\rangle$ 代替 $|\Psi_0(N_0\pm1)\rangle$，则 $c_0^\dagger$ 和 $c_0$ 就是简单地乘以 $\sqrt{N_0}$ 的算符，可以作为 c 数来处理。因对 $p=0$ 的状态而言其粒子数 $N_0$ 相当大，故可以忽略不计由于粒子数的起伏而引起的性质变化。

当采取这样的近似时，粒子数将不守恒。即

$$N=\sum_p c^\dagger_p c_p\left(=\sum_{p\neq0}{}' c^\dagger_p c_p+N_0\right)$$

与 $H$ 不对易。这种情况显然是由于在相互作用中（如果在 $\sum_{kpq}$ 中只取出 $p=q=0$ 的项）出现了 $\frac{1}{2}\sum_k V_k N_0 c^\dagger_k c^\dagger_k$ 之类的使粒子数不守恒的项。所以，我们放弃粒子数严格守恒的观念，而采取所谓粒子数平均起来保持守恒的立场。因此，在哈密顿算符中就要加上 $-\mu\sum_{p\neq0}{}' c^\dagger_p c_p$ 一类的项。其中 $\mu$ 是拉格朗日待定系数，在此起着化学势的作用。因总粒子数算符本来就是 $\sum_p c^\dagger_p c_p$，故当采取

使粒子数平均起来保持守恒的立场时，通常的作法是在哈密顿算符中加上$-\mu\sum c_p^\dagger c_p$. 但是，现在要把 $c_0^\dagger$ 和 $c_0$ 作为 c 数处理，而把 $N_0 = c_0^\dagger c_0$ 作为常数处理，所以数字算符 $\sum_{p\neq 0}{}' c_p^\dagger c_p$ 比起 $\sum_p c_p^\dagger c_p$ 更为恰当(由于 $N_0$ 的变化而引起的体系能量变化除外).

因此，设新的哈密顿算符为

$$H' = H - \mu \sum_p{}' c_p^\dagger c_p. \tag{9.3.72}$$

右边第二项 $\Sigma'$ 表示求和中不包括脚标为 0 的量. 以下如无特殊声明. $\Sigma'$ 均指这种意义下的求和. 把(9.3.72)式改写，则

$$H' = H_1 + H_2 + \frac{1}{2} N_0^2 V_0,$$

$$H_1 = \sum_p{}' (\varepsilon_p + N_0 V_0 + N_0 V_p - \mu) c_p^\dagger c_p$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_p{}' N_0 V_p (c_{-p}^\dagger c_p^\dagger + c_p c_{-p}),$$

$$H_2 = \sum_{pk}{}' \sqrt{N_0}\, V_k (c_{p+k}^\dagger c_k c_p + c_{p+k}^\dagger c_{-k} c_p)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{kpq}{}' V_k c_{p+k}^\dagger c_{q-k}^\dagger c_q c_p. \tag{9.3.73}$$

(以上计算中假设 $V_k = V_{-k}$，当 $V(x)$ 为 $|x|$ 的函数时，正好如此.)设 $H_1$ 中 $c_p^\dagger c_p$ 的系数为 $\varepsilon_p$，则

$$\varepsilon_p = \varepsilon_p + N_0 V_0 + N_0 V_p - \mu, \tag{9.3.74}$$

这正是哈特里-福克近似中的单粒子能量，(取 $N \simeq N_0$ 这样的近似. )而化学势 $\mu$ 和 $N_0$ 是用以下条件确定的. 首先，体系总粒子数的平均值等于给定的数 $N$，因此

$$N = N_0 + \langle \Psi_0 | \sum_p{}' c_p^\dagger c_p | \Psi_0 \rangle, \tag{9.3.75}$$

另外，$H'$ 在 $|\Psi_0\rangle$ 中的平均值 $E_0'$ 是

$$E_0' = E_0 - \mu\langle\Psi_0|\sum{}' c_p^\dagger c_p|\Psi_0\rangle$$
$$= E_0 - \mu(N - N_0) \quad (E_0 = \langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle),$$

因 $N$ 变化时它取定值，故

$$\mu = \partial E_0/\partial N. \tag{9.3.76a}$$

而对 $N_0$ 的变分来说(因 $\partial E_0/\partial N_0 = 0$)亦可写成

$$\mu = \partial E_0'/\partial N_0. \tag{9.3.76b}$$

$H_1$ 右边第二项的和本来源于 $H_1$ 中形式为 $c_0c_0c_{-p}^\dagger c_p^\dagger$ 和 $c_0^\dagger c_0^\dagger c_p c_{-p}$ 的项，因此它表示的是一种相互作用，即动量状态为 $\boldsymbol{p}$ 和 $-\boldsymbol{p}$ 的一对粒子从动量状态为 $\boldsymbol{p} = 0$ 的一对粒子产生出来，或者转变为该粒子对。这种粒子间相互作用形式的常见例子是处于一定关系之中(目前的情况是动量之和为零)的粒子对紧密结合。使该粒子对转变为另一个同样类型的粒子对(保持粒子间的关系)的相互作用在这种情况下至关重要。现在，由于动量状态为 $\boldsymbol{p} = 0$ 的粒子居多，从而该状态的粒子对亦居多，因此可以认为，从该粒子对向其它粒子对的转换或从其它粒子对向该粒子对的转换是相互作用中的主要成份。这样一来，就可以(设相互作用 $V$ 不太强)假定 $H_2$ 比 $H_1$ 小。因此首先考虑将 $H_1$ 对角化。这时，注意到动量为 $\boldsymbol{p}$ 的粒子和动量为 $-\boldsymbol{p}$ 的粒子是耦合的，从而按照玻戈留波夫 (Bogoliubov) 的作法把新算符 $\alpha_p$ 和 $\alpha_p^\dagger$ 定义为

$$\left.\begin{aligned} \alpha_p &= u_p c_p + v_p c_{-p}^\dagger \\ \alpha_p^\dagger &= u_p c_p^\dagger + v_p c_{-p} \end{aligned}\right\} \text{或} \left\{\begin{aligned} c_p &= u_p\alpha_p - v_p\alpha_{-p}^\dagger \\ c_p^\dagger &= u_p\alpha_p^\dagger - v_p\alpha_{-p} \end{aligned}\right\}. \tag{9.3.77}$$

其中，$u$ 和 $v$ 为实数，满足条件

$$u_p^2 - v_p^2 = 1, \quad u_{-p} = u_p, \quad v_{-p} = v_p. \tag{9.3.78}$$

因为算符 $\alpha$ 和 $\alpha^\dagger$ 满足对易关系

$$[\alpha_p, \alpha_{p'}^\dagger] = \delta_{pp'}, \quad [\alpha_p, \alpha_{p'}] = [\alpha_p^\dagger, \alpha_{p'}^\dagger] = 0, \tag{9.3.79}$$

所以，它们具有使玻色子产生和湮没的那种算符的性质。通过该变换来确定系数 $u$ 和 $v$，使 $H_1$ 成为对角型。进行这个变换，并根据 $H_1$ 中形式为 $\alpha^\dagger\alpha^\dagger$ 和 $\alpha\alpha$ 的项的系数为零的条件显然可得

$$\left.\begin{aligned} u_p^2 &= \frac{1}{2}\left[1+\sqrt{\varepsilon_p^2/(\varepsilon_p^2-N_0^2V_p^2)}\right] = \frac{1}{2}\left[1+\varepsilon_p/\bar{\varepsilon}_p\right] \\ v_p^2 &= \frac{1}{2}\left[-1+\sqrt{\varepsilon_p^2/(\varepsilon_p^2-N_0^2V_p^2)}\right] = \frac{1}{2}\left[-1+\varepsilon_p/\bar{\varepsilon}_p\right] \\ \bar{\varepsilon}_p^2 &= \varepsilon_p^2 - N_0^2V_p^2 \end{aligned}\right\}. \tag{9.3.80}$$

而 $H_1$ 则变成

$$H_1 = \Sigma'\left[\varepsilon_p\alpha_p^\dagger\alpha_p + \frac{1}{2}(\bar{\varepsilon}_p-\varepsilon_p)\right]. \tag{9.3.81}$$

因化学势 $\mu$ 为

$$\mu = N_0V_0,$$

故 $\varepsilon_p = \epsilon_p + N_0V_p$，从而

$$\bar{\varepsilon}_p^2 = \epsilon_p^2 + 2\epsilon_pN_0V_p. \tag{9.3.82}$$

(9.3.81) 式是能量为 $\varepsilon_p$ 的自由玻色子集团的哈密顿算符，$\bar{n}_p = \alpha_p^\dagger\alpha_p$ 是其粒子数算符。这种玻色子可以用动量 $p$ 识别，但它却与原来的粒子有所差异，因而是一种“准粒子”。如果原来的粒子间相互作用为斥力，则 $p=0$ 的 $\varepsilon_p$ 就是最低的粒子能量。因此，在忽略不计 $H_2$ 的近似条件下，全部准粒子处于状态 $p=0$ 的组态给出体系的基态。这时，$H'$ 的基态能为

$$E_0 = \frac{1}{2}N_0^2V_0 + \frac{1}{2}\Sigma'(\varepsilon_p-\epsilon_p), \tag{9.3.83}$$

它比哈特里近似的基态能低。

作为(9.3.75)式中的 $|\Psi_0\rangle$，取以上所得的状态，则基态中处于状态 $p=0$ 的原粒子数 $N_0$ 为

$$N_0 = N - \Sigma'v_p^2.$$

换句话说，在该基态中，原来粒子的动量分布是 $v_p^2(p\neq 0)$。$v_p$ 的形式取决于相互作用 $V_p$，但只要不是十分特殊的相互作用，当 $|p|$ 增大时，$v_p$ 通常趋近于零。但是，对于 $p\neq 0$ 来说，$v_p$ 并不为零。也就是说，在有相互作用的情况下，即使是基态，全部粒子也不会都占据 $p=0$ 的状态。

## §9.4 多粒子体系的运动和状态 II——集体运动

在多粒子体系中与基态性质同样重要的，是激发态的性质和激发的机制. 换句话说，就是运动的形态在如何变化，取决于粒子的种类和相互作用的性质，多粒子体系的运动会呈现出各式各样的情况. 假如粒子间的相互作用相当弱，则每个粒子的运动就接近于自由运动，体系的激发将以每个粒子运动状态的变化为主，来自其它粒子的力对它只不过起着一个辅助作用. 上节所述的哈特里近似和准粒子的设想，就是要在体系的运动中尽可能抽出独立粒子的运动（为此，有时应该把体系看成是与原粒子有所不同的“粒子”的集合）. 这时的激发就是所谓的单一粒子的激发.

在相互作用不弱的情况下，每个粒子的运动与独立的自由运动相去甚远，要正确求解这个问题必然不易. 另外，由于其它粒子大量存在，单粒子运动将会如何变化，这也是一个颇有意义的问题，然而，对多粒子体系来说，特别有意义的而且在物理上也至关重要的，则是适当将相位调整一致而使多粒子运动所产生的体系整体地运动，即**集体运动**.

### a） 正则振动——谐振子之一例

关于多粒子体系的集体运动和激发机制，众所周知的一个例子是耦合振子体系的正则振动. 在几个频率不同的振子耦合的体系中，会发生其频率与各振子频率不同的整个体系的振动. 这时，描述该振动的坐标一般与所有振子的坐标有关. 这种振动是正则振动，坐标是正则坐标. 因此，该正则振动的求解法，就是集体运动形态求解方法的一个典型例子.

与此同时，这个例子也是玻色子体系集体运动的有代表性的一例. 角频率为 $\omega$ 的简谐振子，其本征态由量子数 $n$ 确定，其能量为 $\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$. 这是能量为 $\hbar\omega$ 的运动模有 $n$ 个被激发起来的状

态。若把该运动模叫做粒子，则谐振子就等价于运动状态为同一类型而粒子数不确定的玻色子体系，耦合的振子体系与有相互作用的玻色子体系相对应。

设角频率为$\omega$的单位质量的简谐振子，其哈密顿算符为

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2). \tag{9.4.1}$$

其中$q$是振子坐标，$p$为与之共轭的动量。因此如果定义下述量

$$Q_\pm = q \pm i\frac{p}{\omega}, \tag{9.4.2}$$

则会有关系式

$$[H, Q_\pm] = \mp\hbar\omega Q_\pm. \tag{9.4.3}$$

(9.4.3)式表示

$$\dot{Q}_\pm = \frac{1}{i\hbar}[Q_\pm, H] = \mp i\omega Q_\pm, \tag{9.4.4}$$

也就是说，$Q_\pm \propto \exp(\mp i\omega t)$，$Q_\pm$做周期运动。

若用振子量子数$n$来标记状态，并记为$|n\rangle$，则不难求出$Q_\pm$的矩阵元为

$$\left.\begin{aligned}\langle n+1|Q_-|n\rangle &= \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega}}\sqrt{n+1}\\ \langle n-1|Q_+|n\rangle &= \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega}}\sqrt{n}\end{aligned}\right\}. \tag{9.4.5}$$

与§9.2的表达式进行比较，设

$$Q_- = \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega}}c^\dagger,\ Q_+ = \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega}}c, \tag{9.4.6}$$

则$c^\dagger$和$c$就分别具有与产生和湮没算符相同的矩阵元。另外，根据$p$和$q$的对易关系

$$[c, c^\dagger] = 1, \tag{9.4.7}$$

可以把$c^\dagger$和$c$分别看成是产生和湮没算符。$c^\dagger$是使量子数增1，即激发一个振动模的算符，而$c$是使量子数减1，即湮没一个振动

模的算符. 用 $c^\dagger$ 和 $c$ 来表示,$H$ 为

$$H = \hbar\omega\left(c^\dagger c + \frac{1}{2}\right). \tag{9.4.8}$$

粒子数算符 $n = c^\dagger c$ 的本征值等于振动量子数. 而(9.4.3)式是

$$[H, c^\dagger] = \hbar\omega c^\dagger, \ [H, c] = -\hbar\omega c. \tag{9.4.9}$$

这就是使振动产生或湮没的算符的运动方程,

当考虑频率分别为 $\omega_i (i = 1,2,\cdots)$ 的振子集合时,哈密顿算符是

$$H_0 = \sum_i \hbar\omega_i\left(c_i^\dagger c_i + \frac{1}{2}\right). \tag{9.4.10}$$

$c_i^\dagger$、$c_i$ 分别是使频率为 $\omega_i$ 的振动产生或湮没的算符,满足以下对易关系:

$$[c_i, c_j^\dagger] = \delta_{ij}, \ [c_i, c_j] = [c_i^\dagger, c_j^\dagger] = 0. \tag{9.4.11}$$

与(9.4.9)式相对应,$c_i, c_i^\dagger$ 的运动方程为

$$[H_0, c_i^\dagger] = \hbar\omega_i c_i^\dagger, \ [H_0, c_i] = -\hbar\omega_i c_i. \tag{9.4.12}$$

体系的状态可用 $|n_1, n_2, \cdots\rangle$ 表示. $n_i$ 是频率为 $\omega_i$ 的振动被激发的个数(量子数). 体系的基态就是所有振动均未被激发的状态 $|0,0,\cdots\rangle$,将其表示为$|0\rangle$. 则 $c_{i_1}^\dagger c_{i_2}^\dagger \cdots |0\rangle$的形式就给出激发态. 这时激发模,即体系的运动形态,是频率为$\omega_i$的振动,而各个振动均互相独立地被激发. 激发态当然是体系的本征态.

下面,我们考虑将振子耦合在一起的情况. 产生耦合的相互作用,其哈密顿算符在坐标表象中一般可以写成 $f(q_1, q_2, \cdots)$ 的形式($q_i$ 是第 $i$ 个振子坐标). 假如耦合不太强,在各振子的平衡点附近将 $f$ 展开,则产生振子耦合的首项的形式为 $\sum_{ij} f_{ij} q_i q_j$, 因此,我们只取该形式为相互作用. 考虑到各振子的对称性,而取相互作用的哈密顿算符为

$$H_1 = \frac{1}{2} v \sum_{ij} q_i q_j \quad (v \text{ 是常数}). \tag{9.4.13}$$

用 $c_i^\dagger$、$c_i$ 表示的话,则是

$$H_1 = \frac{1}{2}\sum_{ij} v_i v_j (c_i^\dagger + c_i)(c_j^\dagger + c_j), \qquad (9.4.14)$$

$$v_i = (v\hbar/2\omega_i)^{1/2}.$$

把它与(9.4.10)式中的$H_0$ 合在一起就是耦合振子体系的哈密顿算符

$$H = H_0 + H_1 = \sum_i \hbar\omega_i\left(c_i^\dagger c_i + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\sum_{ij} v_i v_j (c_i^\dagger + c_i)(c_j^\dagger + c_j). \qquad (9.4.15)$$

我们依据这个$H$来求正则运动。 假设已得到了正则振动$\alpha$，则存在着使之产生和湮没的算符 $A_\alpha^\dagger$ 和 $A_\alpha$，像(9.4.9)式和(9.4.12)式那样，它们应该满足的表达式是

$$[H, A_\alpha^\dagger] = \hbar\omega_\alpha A_\alpha^\dagger, \quad [H, A_\alpha] = -\hbar\omega_\alpha A_\alpha. \qquad (9.4.16)$$

假定$A$是由 $c$ 的线性组合给出的，我们来求解方程(9.4.16)。 而且，在实际的振动这个意义上，认为$\omega$是实数。作为一般的讨论，可以容许$\omega$是复数。这时，取代(9.4.16)，应该考虑方程

$$[H, A_\alpha^\dagger] = \hbar\omega_\alpha A_\alpha^\dagger, \quad [H, A_\alpha] = -\hbar\omega_\alpha^* A_\alpha. \qquad (9.4.16')$$

假定$A$的形式是

$$A_\alpha^\dagger = \sum_i X_\alpha^i c_i^\dagger, \quad A_\alpha = \sum_i X_\alpha^i c_i. \qquad (9.4.17)$$

设系数 $x$ 为实数。 利用 $c_i$ 和 $c_i^\dagger$ 的对易关系对(9.4.16)式的左边进行计算，则可得到

$$[H, A_\alpha^\dagger] = \sum_i \hbar\omega_i X_\alpha^i c_i^\dagger + \sum_{ij} v_i v_j X_\alpha^i c_i^\dagger + \sum_{ij} v_i v_j X_\alpha^i c_i$$

以及与之厄米共轭的表达式。在这儿，如果再次构成与 $H$ 的对易子，则为

$$[H, [H, A_\alpha^\dagger]] = [H, \hbar\omega_\alpha A_\alpha^\dagger] = (\hbar\omega_\alpha)^2 A_\alpha^\dagger, \qquad (9.4.18)$$

上式的左边是

$$[H,[H,A_\alpha^\dagger]]=\sum_i(\hbar\omega_i)^2X_\alpha^i c_i^\dagger+\sum_{ij}v_iv_jX_\alpha^j(\hbar\omega_i+\hbar\omega_j)c_i^\dagger$$

$$+\sum_{ij}v_iv_jX_\alpha^j(\hbar\omega_j-\hbar\omega_i)c_i,$$

同样可以得到

$$[H,[H,A_\alpha]]=\sum_i(\hbar\omega_i)^2X_\alpha^i c_i+\sum_{ij}v_iv_jX_\alpha^j(\hbar\omega_i+\hbar\omega_j)c_i$$

$$+\sum_{ij}v_iv_jX_\alpha^j(\hbar\omega_j-\hbar\omega_i)c_i^\dagger.$$

根据(9.4.18)式及其厄米共轭式有

$$\sum_i X_\alpha^i\{(\hbar\omega_\alpha)^2-(\hbar\omega_i)^2\}c_i^\dagger=\sum_{ij}v_iv_jX_\alpha^j(\hbar\omega_j+\hbar\omega_i)c_i^\dagger$$

$$+\sum_{ij}v_iv_jX_\alpha^j(\hbar\omega_j-\hbar\omega_i)c_i,$$

$$\sum_i X_\alpha^i\{(\hbar\omega_\alpha)^2-(\hbar\omega_i)^2\}c_i=\sum_{ij}v_iv_jX_\alpha^j(\hbar\omega_j-\hbar\omega_i)c_i^\dagger$$

$$+\sum_{ij}v_iv_jX_\alpha^j(\hbar\omega_j+\hbar\omega_i)c_i.$$

将上面两式分别相加，就会得到

$$\sum_i X_\alpha^i\{(\hbar\omega_\alpha)^2-(\hbar\omega_i)^2\}(c_i^\dagger+c_i)$$

$$=2\sum_{ij}v_iv_jX_\alpha^j\hbar\omega_j(c_i^\dagger+c_i).$$

因该式对各个 $i$ 来说是独立成立的，故可得到有关 $X$ 的联立方程

$$X_\alpha^j=2\sum_i\frac{v_iv_jX_\alpha^j\hbar\omega_j}{(\hbar\omega_\alpha)^2-(\hbar\omega_i)^2}. \tag{9.4.19}$$

两边乘以 $v_i\hbar\omega_i$，再对 $i$ 求和，则会得到散射公式

$$\sum_i v_2\hbar\omega_iX_\alpha^i=2\sum_i\frac{v_i^2\hbar\omega_i}{(\hbar\omega_\alpha)^2-(\hbar\omega_i)^2}\left(\sum_j v_j\hbar\omega_jX_\alpha^j\right),$$

即

$$1 = 2\sum_i \frac{v_i^2 \hbar\omega_i}{(\hbar\omega_\alpha)^2 - (\hbar\omega_i)^2}. \qquad (9.4.20)$$

此式之根是正则振动的能量，对于各个 $\hbar\omega_\alpha$ 来说，利用求解(9.4.19)式所得到的 $X_\alpha^i$ 就能求出 $A_\alpha^\dagger$ 和 $A_\alpha$。根据(9.4.14)式，(9.4.20)式亦可写为

$$1 = v\sum_i \frac{1}{\omega_\alpha^2 - \omega_i^2}. \qquad (9.4.20')$$

把 $v\sum_i 1\Big/(\omega^2 - \omega_i^2)$ 看成是 $\omega$ 的函数，则对应于 $v$ 的正负值，就会有图 9.2 (a)和(b)的曲线。当其值为 1 时，$\omega^2$ 的值是根 $\omega_\alpha^2$。$v > 0$ 时，在大于 $\omega_i^2$ 的地方可以得到根 $\omega_\alpha^2$。随着 $v$ 的增大，最大的根将出现在很大的 $\omega^2$ 值处。$v < 0$ 时，得到的根 $\omega_\alpha^2$ 比相应的各个 $\omega_i^2$ 小，随着 $|v|$ 的增大，最小的根应该出现在 $\omega^2 < 0$ 的地方。因为已经假定 $\omega_\alpha$ 是实数，所以首先由解中将这个根舍去。但是，即使从(9.4.16′)式出发，当 $\omega_\alpha$ 为纯虚数时，以上讨论亦照样可行，故解中也能包含 $\omega^2 < 0$ 时所出现的根。它作为一种振动应给出衰减振动，像这样的激发是不稳定的。而且，如 §9.3b)中所叙述过的那样，在此情况下对于该 $A_\alpha^\dagger$ 所给出的变化来说，哈特里基态是不稳定的。

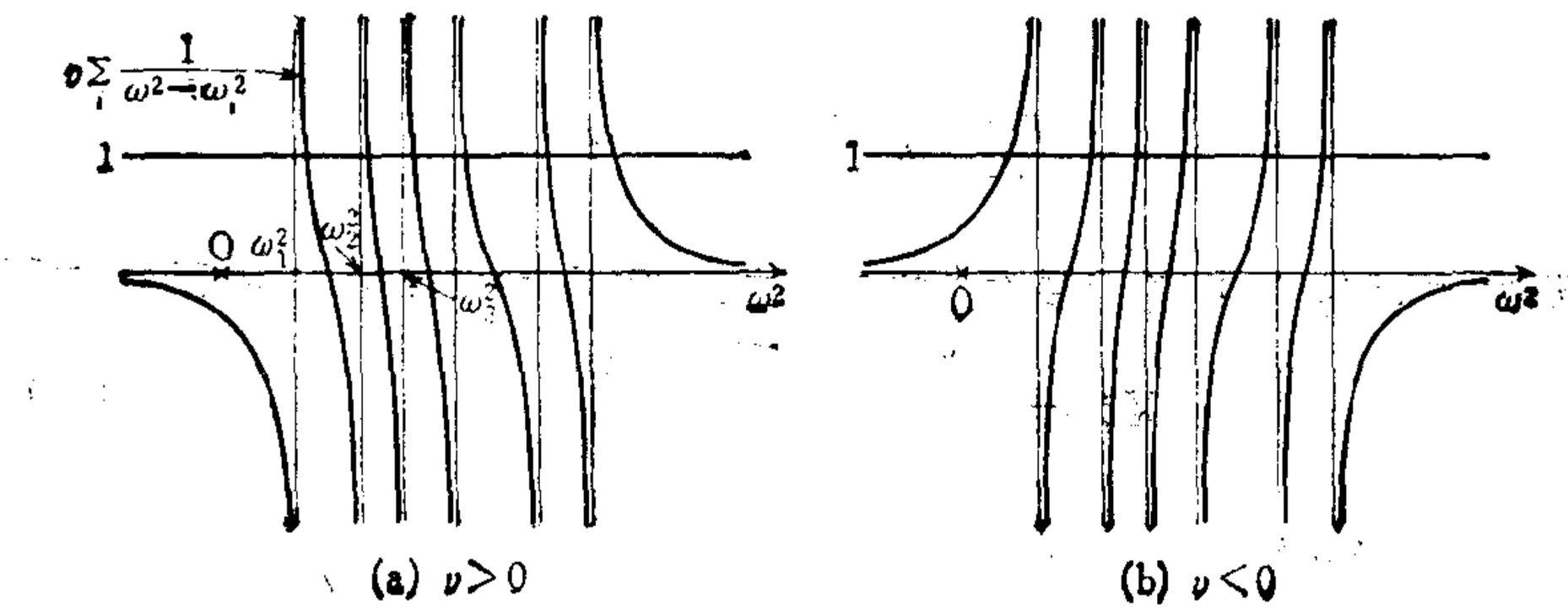



图 9.2　函数 $v\sum_i 1\Big/(\omega^2 - \omega_i^2)$

根据 $A$ 和 $A^\dagger$ 的定义有

$$[A_\alpha, A_\beta] = [A_\alpha^\dagger, A_\beta^\dagger] = 0, \tag{9.4.21a}$$

再由本征值方程(9.4.19)的解 $(X_\alpha^i\}$ 的正交性可知，$[A_\alpha, A_\beta^\dagger] = 0$ $(\alpha \neq \beta)$，故适当地将 $X$ 归一化，就得到

$$[A_\alpha, A_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}. \tag{9.4.21b}$$

这一点表明，$A_\alpha^\dagger$ 和 $A_\beta^\dagger$ $(\alpha \neq \beta)$ 是激发互相独立的运动模的算符.

上述例子虽然是有关振子集合的，它却表示一种方法，来求激发态及给出该激发的运动模. 也就是说，假如能够找到满足形式为(9.4.16)的方程的产生算符 $A_2^\dagger$，则 $A_2^\dagger|0\rangle$ 就会给出激发态，而激发能是 $\hbar\omega_\alpha$. 这种方法叫**正则坐标法**或**运动方程法**，它是寻求多粒子体系运动模的有力工具. 像上例那样能够准确求解正则振动的情况固然不错，但一般来说大多却只能近似求解. 后面所述的例子即为其一. 近似程度的好坏取决于体系的状态和力的性质，一般地讨论是困难的.

### b) 正则振动——费米子体系之一例

为了考虑费米子体系的激发态，作为基态，我们将从哈特里基态 $|\phi_0\rangle$((9.3.53)) 出发，与 § 9.3c)一样，设该状态为 $|\tilde{0}\rangle$，用 $c^\dagger$、$c$ 或 $a^\dagger$、$a$、$b^\dagger$、$b$ 表示粒子的产生和湮没算符.

一个粒子从 $i \leqslant N$ 的状态被激发而转移到 $j > N$ 的状态，该状态可表示为

$$a_j^\dagger b_i^\dagger|\tilde{0}\rangle. \tag{9.4.22}$$

这是单粒子激发态. 当粒子间无相互作用时(或者在哈特里近似中)，该状态显然是定态，设粒子状态 $i$ 的能量为 $\varepsilon_i$，则(9.4.22)式所给出的激发态的能量就是 $\varepsilon_j - \varepsilon_i$. 这个状态由$(i,j)$来决定，倘若 $i$ 和 $j$ 之间存在一定的关联，则由给出该关联的量也可以决定它. 例如，假设粒子状态用粒子动量来表征，就可以取 $i$ 和 $j$ 分别是动量为 $p_i$ 和 $p_j$ 的状态. 这时，令 $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{p}_j - \boldsymbol{p}_i$，则 $\boldsymbol{k}$ 一定的一对$(i,j)$就给出动量转移为 $\boldsymbol{k}$ 的运动模. 即使 $\boldsymbol{k}$ 相同，对于不同的$(i,j)$对来说，其激发态也具有不同的能量. 当粒子间有相互作

用时，$a_i^\dagger b_i^\dagger|\tilde{0}\rangle$ 一般不是定态。换句话说，$a_i^\dagger b_i^\dagger$ 不会满足(9.4.16)那种形式的方程。但是，通过粒子间相互作用，具有相同 $k$ 的 $(i,i)$ 对其激发耦合起来有可能得到相当于正则振动的激发。这时，几个 $(i,i)$ 对的激发是按适当的相位关系同时发生的，于是体系应该作集体运动。

根据 § 9.2 所述，我们把体系的哈密顿算符写成

$$H=\sum_{ij}(T_{ij}+U_{ij})c_i^\dagger c_j+\frac{1}{2}\sum_{ijkl}V_{ij,kl}c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k. \tag{9.4.23}$$

设单粒子态 $\varphi_i$ 为 $T+U$ 的本征态，即

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi_i+U\varphi_i=\varepsilon_i\varphi_i,$$

则可写成

$$H=\sum_i\varepsilon_i c_i^\dagger c_i+\frac{1}{2}\sum_{ijkl}V_{ij,kl}c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k. \tag{9.4.24}$$

当体系相对于平动不变时，可以选择动量为表征状态的量。为简单起见，假设不考虑自旋等物理量。而且单粒子态是用单位体积内的归一化平面波给出的。把表示状态的脚标 $i$ 换成动量：

$$\varphi_p(x)=e^{ip\cdot x/\hbar}, \tag{9.4.25}$$

因粒子间相互作用的矩阵元为

$$\begin{aligned}V_{p_1'p_2',p_1p_2}&=\int e^{i(p_1-p_1')\cdot x+i(p_2-p_2')\cdot x'}v(x-x')d^3x\,d^3x'\\&=(2\pi)^3\delta(p_1+p_2-p_1'-p_2')\\&\quad\times\int e^{ir\cdot(p_1-p_1')}v(r)d^3r,\end{aligned}$$

所以，若取 $v(x)$ 的傅里叶分量为

$$v_q=\int e^{iq\cdot x}v(x)d^3x, \tag{9.4.26}$$

并利用 $\delta$ 函数改写对 $p_1,p_2,p_1',p_2'$ 的求和，则

$$H=\sum_p\varepsilon_p c_p^\dagger c_p+\frac{1}{2}\sum_{qpp'}v_q c_p^\dagger c_{p'}^\dagger c_{p'-q}c_{p+q}. \tag{9.4.27}$$

以$|\tilde{0}\rangle$为准，用 $a$、$a^\dagger$、$b$、$b^\dagger$ 来改写 $c$、$c^\dagger$，则(9.4.27)式右边第一项变为

$$\sum_{|p|>p_F} \varepsilon_p a_p^\dagger a_p + \sum_{|p|\leqslant p_F} \varepsilon_p b_p b_p^\dagger = \sum_{|p|>p_F} \varepsilon_p a_p^\dagger a_p - \sum_{|p|\leqslant p_F} \varepsilon_p b_p^\dagger b_p + \sum_{|p|<p_F} \varepsilon_p,$$

此式右边第三项是无相互作用时$|\tilde{0}\rangle$的能量。 假如把它取作能量基准，则上式就是

$$H_0 = \sum_{|p|>p_F} \varepsilon_p a_p^\dagger a_p - \sum_{|p|<p_F} \varepsilon_p b_p^\dagger b_p. \tag{9.4.28}$$

另一方面，若用 $a$、$b$ 表示粒子间相互作用，就会出现 $a^\dagger a^\dagger aa$、$a^\dagger a^\dagger b^\dagger b^\dagger$、$a^\dagger a^\dagger b^\dagger a$、$\cdots$ 等各种形式的项，而我们只采用形式为 $a^\dagger b^\dagger$ 的激发模的项。因为在此考虑的是动量转移为 $\boldsymbol{k}$ 的一对，所以采取 $a_{p+k}^\dagger b_p^\dagger$（动量 $\boldsymbol{k}$ 产生）和 $b_p a_{p+k}$（动量 $\boldsymbol{k}$ 湮没）的耦合形式。在(9.4.27)式中与此对应的是

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{kpp'} v_{-k}(a_{p+k}^\dagger b_p^\dagger + b_{p+k} a_p)(a_{-p'-k}^\dagger b_{-p'}^\dagger + b_{-p'-k} a_{-p'}). \tag{9.4.29}$$

可以认为，除此以外的项对目前所讨论的运动模来说会给出高次修正。因为关于这种近似程度的讨论并非本节的目的，所以在以下所讲述的内容中体系的哈密顿量算符为 $H = H_0 + H_1$[1]。产生动量转移 $\boldsymbol{k}$ 的算符 $a_{p+k}^\dagger b_p^\dagger$ 的运动方程为

$$[H, a_{p+k}^\dagger b_p^\dagger] \cong (\varepsilon_{p+k} - \varepsilon_p) a_{p+k}^\dagger b_p^\dagger + \frac{1}{2}(v_k + v_{-k}) \times \left\{ \sum_q (a_{q+k}^\dagger b_q^\dagger + b_{-q} a_{-q-k}) \right\}.$$

---

1）近似程度与体系的状态、粒子的密度、相互作用的性质等因素有关，必须根据具体例子来讨论。例如，读者可以参看沢田克郎《多体问题》(岩波书店(1961))或者本讲座第七卷《物性学》(II)。

右边另外还出现四个包含 $a$、$b$、$a^\dagger$、$b^\dagger$ 的项，但将其舍去。这相当于舍掉了作用于$|\tilde{0}\rangle$会得零的那些项。为了找到能在基态$|\tilde{0}\rangle$上产生激发态的算符，并不要求(9.4.16)式中的 $[H,A^\dagger]=EA^\dagger$ 严格成立，可以说，只要求 $[H,A^\dagger]|\tilde{0}\rangle=EA^\dagger|0\rangle$ 成立，假如这个条件成立，$A^\dagger|\tilde{0}\rangle$就是$H$的本征态。而且，虽然上式右边还会出现包含 $v_{p-q}$ 的项，但却作为(与包含 $v_k$ 的项相比)较小的项而舍去。这相当于对某一特定的 $k$ 首先提取相位一致的激发，并称其为无规相位近似。可以认为，这些舍掉的项将给出高次修正。

对于上式右边所出现的 $b_{-p}a_{-p-k}$ (给出相同的动量转移 $k$)，同样列出运动方程，则

$$[H,b_{-p}a_{-p-k}]\simeq-(\varepsilon_{-p-k}-\varepsilon_{-p})b_{-p}a_{-p-k}-\frac{1}{2}(v_k+v_{-k})\left[\sum_q(a^\dagger_{q+k}b^\dagger_q+b_{-q}a_{-q-k})\right].$$

一般来说 $v(x)$ 往往只是 $|x|$ 的函数，因此，如果写成 $v_k=v_{-k}\equiv v(k)$，并用等号代替近似等号≃，则可得到联立方程

$$[H,a^\dagger_{p+k}b^\dagger_p]=(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p)a^\dagger_{p+k}b^\dagger_p+v(k)\sum_q(a^\dagger_{q+k}b^\dagger_q+b_{-q}a_{-q-k}),\quad(9.4.30a)$$

$$[H,b_{-p}a_{-p-k}]=-(\varepsilon_{-p-k}-\varepsilon_{-p})b_{-p}a_{-p-k}-v(k)\sum_q(a^\dagger_{q+k}b^\dagger_q+b_{-q}a_{-q-k}).\quad(9.4.30b)$$

此式与振子耦合时所出现的表达式极为相似。也就是说，把 $a^\dagger_{p+k}b^\dagger_p$ 看做运动模，这些就是给出 $a^\dagger_{q+k}b^\dagger_q$ 与 $b_{-q}a_{-q-k}$ 关联的式子，它们能产生同样的动量转移 $k$。因此，定义产生正则振动的算符

$$A^\dagger_\alpha(k)=\sum_p(X^p_\alpha(k)a^\dagger_{p+k}b^\dagger_p+Y^p_\alpha(k)b_{-p}a_{-p-k}).\quad(9.4.31)$$

表达式 $[H,A^\dagger_\alpha(k)]=E_\alpha A^\dagger_\alpha(k)$ 变为

$$\sum_{p}\left[\left(E_\alpha-(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p)\right)X_\alpha^p(\boldsymbol{k})a_{p+k}^{\dagger}b_p^{\dagger}\right.$$

$$\left.+\left(E_\alpha+(\varepsilon_{-p-k}-\varepsilon_{-p})\right)\cdot Y_\alpha^p(\boldsymbol{k})b_{-p}a_{-p-k}\right]$$

$$=v(k)\left[\sum_{p,q}\left(X_\alpha^q(\boldsymbol{k})-Y_\alpha^q(\boldsymbol{k})\right)a_{p+k}^{\dagger}b_p^{\dagger}\right.$$

$$\left.+\sum_{p,q}\left(X_\alpha^q(\boldsymbol{k})-Y_\alpha^q(\boldsymbol{k})b_{-p}a_{-p-k}\right]\right.\text{.}$$

令两边 $a_{p+k}^{\dagger}b_p^{\dagger}$、$b_{-p}a_{-p-k}$ 的系数分别相等，则可得

$$\left[E_\alpha-(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p)\right]X_\alpha^p(\boldsymbol{k})=v(k)\sum_q\left(X_\alpha^q(\boldsymbol{k})-Y_\alpha^q(\boldsymbol{k})\right),$$

(9.4.32a)

$$\left[E_\alpha+(\varepsilon_{-p-k}-\varepsilon_p)\right]Y_\alpha^p(\boldsymbol{k})=v(k)\sum_q\left(X_\alpha^q(\boldsymbol{k})-Y_\alpha^q(\boldsymbol{k})\right).$$

(9.4.32b)

因此(否则 $X\equiv Y\equiv 0$)

$$1=v(k)\sum_p\left[\frac{1}{E_\alpha-(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p)}\right.$$

$$\left.-\frac{1}{E_\alpha+(\varepsilon_{-p-k}-\varepsilon_{-p})}\right],\qquad(9.4.33)$$

或者，因为通常都是 $\varepsilon_{-p}=\varepsilon_p$，故可得到散射公式

$$1=2v(k)\sum_p\frac{\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p}{E_\alpha^2-(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p)^2}.\qquad(9.4.34)$$

可以根据它求出正则振动能量 $E_\alpha$。(9.4.34) 式右边的求和是对 $|\boldsymbol{p}|\leqslant p_F$ 和 $|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k}|>p_F$ 那样的 $\boldsymbol{p}$ 来进行的。

在粒子数多的情况下，$\varepsilon_p$ 近于连续谱。因此，$\varepsilon_{p-k}-\varepsilon_p$ 也近似于连续谱。当 $v(k)<0$ 时，由图 9.2 可知，散射公式(9.4.34)的根 $E_\alpha$ 几乎出现在原来的 $\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p$ 的附近，完全埋没在周围的波谱之中。与此相反，当 $v(k)>0$ 时，在偏离 $\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p$ 的最大值的地方还出现一个根。这种情况见于等离子体振动之类的现象中。

如在§9.3a)中所见，$a^\dagger b^\dagger$ 或 $c^\dagger c$ 为密度矩阵(算符)。也就是说，$a^\dagger b^\dagger$ 所给出的运动是密度起伏。为了更直截了当地表示这一点，我们用密度矩阵的运动方程来描述以上的运动。密度矩阵 $\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ 的运动方程是由(9.3.26)式给出的。如果构成 $\rho$ 时的状态 $|\Psi\rangle$ 由单一的斯莱特行列式给出，那么，根据(9.3.15)式，在(9.3.26)式右边出现的二粒子密度矩阵 $\rho(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2;\boldsymbol{x}_1',\boldsymbol{x}_2')$ 由单粒子密度矩阵确定。因此，(9.3.26)式成为

$$i\hbar\frac{\partial\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2-\nabla'^2)+U(\boldsymbol{x})-U(\boldsymbol{x}')\right\}\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$$
$$+\int\{V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_2)-V(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}_2)\}\{\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_2)$$
$$-\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_2)\rho(\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}')\}d^3\boldsymbol{x}_2. \tag{9.4.35}$$

用矩阵形式还可以将它写成

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}=[T+U+U',\rho]. \tag{9.4.36}$$

其中，$T$ 是动能算符，$U'$ 是出现在哈特里方程中的场，若用矩阵元写出来，则有

$$U_{ij}=\sum_{ik}(V_{ik,jl}-V_{ik,lj})\rho_{lk}. \tag{9.4.37}$$

如果取的是哈特里场，则 $\rho$ 为对角型，应用哈特里方程，(9.4.35)式右边变成零。即哈特里解给出定态。因为所研究的是密度起伏，所以要考虑与该解稍稍偏离的状态。但是，体系的状态依然由单一的斯莱特行列式给出，即附加有 $\rho^2=\rho$ 这样的条件。假设与稳定解偏离不大，则对它取到一次项。因此，就可以只考虑稳定解所占据的粒子能级和空能级之间的矩阵元，这相当于只取 $a^\dagger b^\dagger$，$ab$ 型的矩阵元。设该矩阵元 $\rho_{\beta\alpha}$($\alpha$ 为占据态，$\beta$ 为空态)为 $A_{\beta\alpha}(t)$，则

$$\rho_{\beta\alpha}=A_{\beta\alpha},\quad \rho_{\alpha\beta}=A^*_{\beta\alpha}. \tag{9.4.38}$$

根据(9.4.35)式或(9.4.36)式，有

$$i\hbar\frac{dA_{\beta\alpha}(t)}{dt}=(\varepsilon_\beta-\varepsilon_\alpha)A_{\beta\alpha}(t)$$

$$+\sum_{\alpha'\beta'}[(V_{\beta\alpha',\alpha\beta'}-V_{\beta\alpha',\beta'\alpha})A_{\beta'\alpha'}$$

$$+(V_{\beta\beta',\alpha\alpha'}-V_{\beta\beta',\alpha'\alpha})A^*_{\beta'\alpha'}].$$

于是求得以下形式的解：

$$A_{\beta\alpha}(t)=AX_{\beta\alpha}e^{-i\omega t}+A^*Y^*_{\beta\alpha}e^{i\omega t}. \tag{9.4.40}$$

将这个表达式代入 $A_{\beta\alpha}$ 的运动方程，会得到关于 $X$ 和 $Y$ 的表达式

$$\left.\begin{aligned}
&(\varepsilon_\beta-\varepsilon_\alpha)X_{\beta\alpha}+\sum_{\alpha'\beta'}[(V_{\beta\alpha',\alpha\beta'}-V_{\beta\alpha',\beta'\alpha})X_{\beta'\alpha'}\\
&\qquad+(V_{\beta\beta',\alpha\alpha'}-V_{\beta\beta',\alpha'\alpha})Y_{\beta'\alpha'}]=\hbar\omega X_{\beta\alpha}\\
&(\varepsilon_\beta-\varepsilon_\alpha)Y_{\beta\alpha}+\sum_{\alpha'\beta'}[(V_{\alpha\alpha',\beta\beta'}-V_{\alpha\alpha',\beta'\beta})X_{\beta'\alpha'}\\
&\qquad+(V_{\alpha\beta',\beta\alpha'}-V_{\alpha\beta',\alpha'\beta})Y_{\beta'\alpha'}]=-\hbar\omega Y_{\beta\alpha}
\end{aligned}\right\} \tag{9.4.41}$$

它与(9.4.32)式相当。

# 第十章　场的量子论

场的量子论，作为正确反映微观世界本质的理论体系，现在已经相当有效地应用到许多学科中去了。相对论的场的量子论，尽管其本身尚存在着困难和局限，但它仍对描述目前的基本粒子世界有极重要的意义。伴随着非微扰法的最新发展，它在阐明原子核、物性学中多体系统的新性质时也起着关键作用。

本章首先在引入场的量子论的同时，叙述它在量子论的一般框架中处于什么样的地位，特别是与截止上一章所叙述的狭义的量子力学有着怎样的关系，接着再重点了解一下对于基本粒子的应用，并阐述场的量子论的概要以作为引玉之砖。不过，其中的讨论只限定于所谓的局域场理论，虽然多种迹象表明，目前被称之为基本粒子的客体背后还存在更为基本的结构单元，但其本质尚未查明。上述被限定了的场的量子论在这样的基本单元的描述之中到底能有怎样的关联，虽然尚属未知，但是在揭示这种关联的过程中，场的量子论的很多概念无疑将起到重要的作用。在目前学习场的量子论之际，特别需要注意这两个方面的认识。

## §10.1　德布罗意波，量子化了的波场以及经典场

在此我们重新回顾一下截止目前所叙述的量子力学的来龙去脉。首先注意到的是已引入了**两种量子力学的波动**的概念。其中之一当然是在量子力学建立初期所出现的德布罗意物质波。这在第一章已经引入，而在第二章也已将它所遵从的薛定谔方程规范化。另一个是上一章由二次量子化引入的具有算符性质的波场(9.2.32)。后者是在以量子力学的方式描述**多体系统**时极其自然地引入的，并在其规范化过程中起着相当有效的作用。

因此，首先会产生这样的问题：该“二次量子化”场，其本质如何。如上所述，就德布罗意物质波而言，它与光的量子假说一起由正面捣毁了我们对电子和光的经典图象，因而作为量子力学建立之际最令人关心的大事，而成为争论的焦点。按照那时已经得到的正统解释，即建立在叠加原理基础上的概率解释，德布罗意波应该具有概率幅的意义。与此相反，却可以认为“二次量子化”场纯粹是在描述多粒子体系时的工具。但是，以下将会明了，引入这种“二次量子化”场的概念，才开始使我们能够真正搞清作为量子论出发点的波粒二象性的含义。也可以说，直到这种场的量子论才开始使物质一般的量子论成为完整的理论体系。

### a） 广义概率幅和德布罗意波

兼有粒子性和波动性的量子力学对象，用德布罗意波函数可进行恰当的描述，乍一看给人的印象是，二象性中似乎偏重于波动性。但是，纵观量子力学理论体系的发展过程，就可以知道波动性的本质寓于量子力学状态的叠加原理之中。事实上，如果暂时丢掉该叠加原理而只用波函数来描述状态，那么就应该允许在量子力学建立之初所出现的解释，即波函数绝对值的平方会给出三维空间中经典粒子的存在概率分布，或三维延伸的经典连续体的密度分布.不过，正如已经叙述过的那样，按照现代的看法，量子力学状态最终应该用希尔伯特空间的矢量来描述，叠加原理所依据的是该空间的基本性质——线性。而德布罗意波函数可以理解成是与该矢量等价的几种表示之一的坐标表象，即与对象的位置测定有关的概率幅。因此，当对象是由$N$个粒子组成的多粒子体系时，作为上述观点的极其自然的推广，德布罗意波就具有上章所述的在$3N$维配位空间中定义的描象的概率幅$\Psi_N(x_1,x_2,\cdots,x_N,t)$的广义性质。在这个意义上，以后往往把后者称为**广义薛定谔函数**.而且，正如本节 c)将要叙述的那样，在相对论量子论中，如果坐标表象一般不再适用，则把德布罗意波与光一样解释为我们现实时空内的波动，就更没有道理了。

那么，在量子力学中，三维空间或者按相对论所说的四维时空中，我们有关物质运动的概念是否就会消失了呢？这个问题，在量子力学建立以后的很长时间内得不到解决，屡次引起争论。归根结底，其性质涉及物质存在与时间空间之类的哲学问题。由于量子论的出现，机械的决定论寿终正寝，进而产生了一种观念，这种观念认为我们现实时空中的因果律、运动等等都要消失。如下所述，上述“二次量子化”波动场的概念，和由此而来的场的量子论，将针对这样的问题给出明快的答复。也就是说，该波动场不同于原先作为广义概率幅的德布罗意波，而是我们现实时空内的波动场。并且，由今日量子电动力学所取得的成功之中可见，最低限度，对于光子和电子的体系来说，利用这样“二次量子化”的电子场和电磁场的概念，就能相当直观地描述在我们现实时空中产生的相互作用，而且这种图像的正确性亦在实验中以极高的精度获得了验证。

### b） 运动的时空描述和二次量子化场的作用

在此我们具体地回顾一下第九章中**二次量子化场**引入的过程及其作用。那么，首先在描述$N$粒子体系时，粒子占有数表象起着重要的作用。以后又以玻色子体系为例进行讨论。现在，设单粒子函数的正交归一化系为 $\{\varphi_\alpha(x)\}$，则 $\alpha=1$ 的状态中有 $n_1$ 个粒子占据、$\alpha=2$ 的状态中有 $n_2$ 个粒子占据，…的状态就可以表示成

$$|n_1,n_2,\cdots\rangle_N \qquad \left(\sum_i n_i = N\right). \tag{10.1.1}$$

在此我们分别引入具有以下性质的产生和湮没算符 $c_i^\dagger$、$c_i$：

$$\left.\begin{aligned} c_i|n_1,n_2,\cdots\rangle &= \sqrt{n_i}\,|n_1,\cdots,n_i-1,\cdots\rangle \\ c_i^\dagger|n_1,n_2,\cdots\rangle &= \sqrt{n_i+1}\,|n_1,\cdots,n_i+1,\cdots\rangle \end{aligned}\right\}, \tag{10.1.2}$$

以及利用该算符得到的二次量子化场的算符

$$\left.\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_i c_i\varphi_i(x)\\ \psi^\dagger(x) &= \sum_i c_i^\dagger\varphi_i(x)\end{aligned}\right\}. \tag{10.1.3}$$

这样，我们就可以确认该二次量子化场的算符在坐标表象中具有粒子产生和湮没算符的含义．为了证实这一点，我们应用确定该场算符性质的对易关系(9.2.33)

$$\left.\begin{aligned}&[\psi(x),\psi^\dagger(x)'] = \delta(x-x')\\ &[\psi(x),\psi(x')] = [\psi^\dagger(x),\psi^\dagger(x')] = 0\end{aligned}\right\}, \tag{10.1.4}$$

来研究一下同样在§9.2c)引入的$N$粒子体系的状态

$$|x_1,x_2,\cdots,x_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\psi^\dagger(x_1)\psi^\dagger(x_2)\cdots\psi^\dagger(x_N)|0\rangle \tag{10.1.5}$$

的内积

$$\begin{aligned}&\langle x_1',x_2',\cdots,x_N'|x_1,x_2,\cdots,x_N\rangle\\ &= \frac{1}{N!}\sum_P \delta(x_1-x_{i_1}')\delta(x_2-x_{i_2}')\cdots\delta(x_N-x_{i_N}').\end{aligned} \tag{10.1.6}$$

其中 $|x_1,x_2,\cdots,x_N\rangle$ 描述的是置于三维空间中的$N$个粒子分别在各自确定位置 $x_1、x_2、\cdots、x_N$ 上的状态。为了更正确地阐明这一点，有必要确认，$|x_1,x_2\cdots,x_N\rangle$ 的变量 $x_i$ 实际上具有位置坐标的意义。为此注意到(参看§10.3c))我们这个体系的总动量算符 $\boldsymbol{P}$ 是用现在的产生和湮没算符给出的：

$$\boldsymbol{P} = \int d^3x\psi^\dagger(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x), \tag{10.1.7}$$

从而引入众所周知的位移 $a$ 的**平移算符**

$$D(a) = e^{-ia\cdot p/\hbar}. \tag{10.1.8}$$

这时，$D(a)$ 满足

$$\left.\begin{aligned}D(a)\psi(x)D^{-1}(a) &= \psi(x+a)\\ D(a)\psi^\dagger(x)D^{-1}(a) &= \psi^\dagger(x+a)\end{aligned}\right\}. \tag{10.1.9}$$

因此，再利用对易关系(10.1.4)，则不难确认 $D(\boldsymbol{a})$ 还具有以下性质：

$$D(\boldsymbol{a})|\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N\rangle = |\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{a},\boldsymbol{x}_2+\boldsymbol{a},\cdots,\boldsymbol{x}_N+\boldsymbol{a}\rangle. \tag{10.1.10}$$

以上关系式表明，变量 $\boldsymbol{x}$ 实际上是表示三维空间中位置坐标的量，因而 $|\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N\rangle$ 就是具有上述物理意义的状态。再回顾(10.1.5)式，便可以得出结论： 二次量子化场的算符 $\psi(\boldsymbol{x})$ 和 $\psi^\dagger(\boldsymbol{x})$ 分别是使**局域**于空间位置 $\boldsymbol{x}$ 的粒子湮没和产生算符。

那么，引入具有这种性质的场算符，其意义何在？第九章中业已表明，借助于量子化场，实际上可以极为简洁地描述目前所考虑的多粒子体系的哈密顿算符，特别能清楚地表现其相互作用的时空行为。也就是说，通过二体相互作用而耦合在一起的 $N$ 粒子体系的哈密顿算符为

$$H=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m}+U(\boldsymbol{x}_i)\right)+\frac{1}{2}\sum_{ij}V(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j), \tag{9.1.3}$$

采用场算符则可记为

$$H=\int d^3\boldsymbol{x}\psi^\dagger(\boldsymbol{x})\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\boldsymbol{x})\right\}\psi(\boldsymbol{x})$$
$$+\frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x}d^3\boldsymbol{x}'\psi^\dagger(\boldsymbol{x})\psi^\dagger(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',)\psi(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}). \tag{9.2.51}$$

$H$ 对态矢的作用，当然由对易关系(10.1.4)来确定。

(9.2.51) 式 $H$ 的第二项，当然是描述该体系相互作用的**元过程**。 按经典力学的观点，这种相互作用是三维空间中位于 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{x}'$ 上的两个粒子之间的超距作用。从量子力学的角度来看，该超距作用则按照(9.2.51)的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle, \tag{9.2.52}$$

而引起体系的态矢 $|\Psi(t)\rangle$ 随着时间的变化。但是，这种变化过程却与经典粒子时连续的轨道变化有所不同，而是按照上述 $\psi(\boldsymbol{x})$

和$\psi^{\dagger}(x)$的性质被描述为这样的过程，即局域于$x$和$x'$各点上的两个量子力学粒子湮没，又有其各个点上重新产生两个粒子.这样一来，并非否定了我们关于在四维时空内运动的概念，而是通过引入二次量子化场的概念，将量子力学体系随时间的变化，描述成三维空间中量子力学粒子不间断地湮没和产生的过程。与经典物质粒子连续运动的概念不同，这意味着引人新的量子力学的概念.

量子化场的概念也可以这样来理解，在体系的**粒子数**$N$和**粒子种类**守恒的情况下，像（9.2.51）式的$H$那样，量子化场也许是描述多粒子体系的简单工具。但就其本质而言，$H$的功用就是描述引起系统粒子数变化以及粒子种类变化的相互作用，例如熟知的光的吸收与发射及电子正电子对的湮没与产生属于粒子数变化的情况，而原子核$\beta$衰变的过程则属于粒子种类发生变化的情形·原子核$\beta$衰变的机理，从上一世纪起就是一个难解之谜，在大量实验研究和理论探讨之后，于1934年费米作出了明确解释，1935年汤川又从理论上进一步发展了它(参看本讲座第十卷《基本粒子理论》)。按照汤川理论，这个现象可以解释为构成原子核的中子和质子之间**相互蜕变**并同时放出电子和中微子的过程。它可以表示为(参看图10.1)

中子(n)→质子(p)＋电子(e)＋中微子($\nu$)。(10.1.11)

费米把这种机理变成量子力学的正式公式时，正好必须根据量子化场的理论。历史上，场的量子论紧接着量子力学的建立，在1927至1928年间狄拉克、约当、克莱因、威斯考普（Weisskopf)、维格纳等人的一系列研究之后，以1929年海森伯和泡利的工作为顶峰大体上宣告完成.该理论体系考虑到了相对论，构成今日相对论的场的量子论的原型，而费米最先把它用于解释$\beta$衰变的现象.也就是说，用二次量子化场$\psi_n(x)$、$\psi_p(x)$，$\psi_e(x)$、$\psi_\nu(x)$分别表示中子、质子、电子、中微子，借助于与(9.2.51)式中$H$的相互作用项相类似的形式

$$G\int d^3x\psi_p^{\dagger}(x)\psi_n(x)\psi_e^{\dagger}(x)\psi_\nu(x) \qquad (10.1.12)$$

可以描述(10 1.11)式中的相互作用(有关相对论式的严格公式,请参看本讲座第十卷《基本粒子理论》)。这样一来,$\beta$ 衰变(10.1.11)就应该被解释为原子核内的中子遭到**湮没**而代之以重新**产生**质子、电子和中微子的过程。

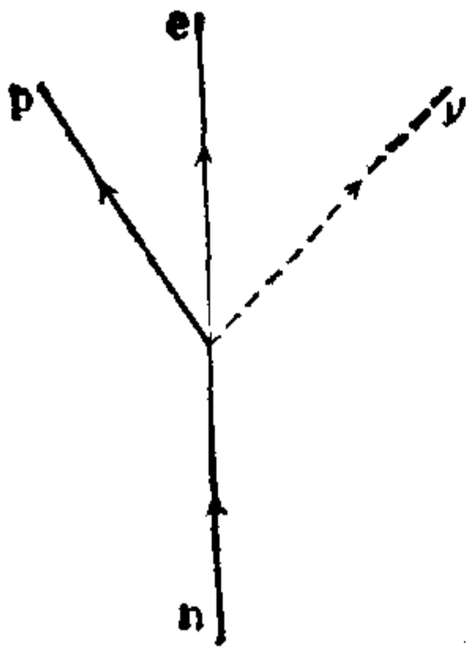



图 10.1 $\beta$ 衰变

今天,众所周知,在上面的 $\beta$ 衰变现象中所看到的粒子种类的相互转化、产生和湮没的现象,是基本粒子世界中极为普遍的现象。在描述这种**基本粒子相互转化**的规律时,特别是在描述相互作用所具有的局域性、因果律、相对论不变性等时空行为时,量子化场起着本质的作用。截止目前,只谈到了量子化场在描述一般量子力学体系的哈密顿算符时所起到的作用,但以后就会看到,体系的所有可观测量都应该通过该量子化场的算符来表示。

### c) 广义薛定谔函数和二次量子化场

接着我们来看一下二次量子化场与 $N$ 粒子体系的概率幅的关系。根据(9.2.47)式,给出二者之间的关系:

$$\Psi_N(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N,t)=\langle \boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N|\Psi(t)\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\phi(\boldsymbol{x}_1)\phi(\boldsymbol{x}_2)\cdots\phi(\boldsymbol{x}_N)|\Psi(t)\rangle。\qquad (9.2.47')$$

不用说,$N=1$ 的概率幅就是作为量子力学出发点的德布罗意波,它为

$$\psi_{N=1}(\boldsymbol{x},t)=\langle \boldsymbol{x}|\Psi(t)\rangle=\langle 0|\phi(\boldsymbol{x})|\Psi(t)\rangle。\quad (10.1.13)$$

截止目前我们一直把 $\phi(\boldsymbol{x})$ 叫做二次量子化场,但照字面解释,理解成“把作为经典粒子一次量子化结果的德布罗意波 $\psi_{N=1}(\boldsymbol{x},t)$ '二次(再次)量子化',就会得到 $\phi(\boldsymbol{x})$”却未必正确。首先,从二者波动方程的结构来看,其差别显而易见。虽然最初 $\phi(\boldsymbol{x})$ 是作为不依赖于时间的算符引入的,但它却起因于薛定谔绘景,从而不难引入与时间微商相对应的算符 $\dot{\phi}(\boldsymbol{x})$,

$$\dot{\phi}(\boldsymbol{x}) = \frac{i}{\hbar}[H,\phi(\boldsymbol{x})]. \tag{10.1.14}$$

将(9.2.51)式代入上式的$H$，利用对易关系(9.2.33)，就可以推导出波动方程

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\phi}(\boldsymbol{x}) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\boldsymbol{x})\right\}\phi(\boldsymbol{x})$$
$$+\int d^3\boldsymbol{x}'\phi^\dagger(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\phi(\boldsymbol{x}')\phi(\boldsymbol{x}). \tag{10.1.15}$$

另一方面，将(10.1.15)式用于

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_{N=1}(\boldsymbol{x},t) = \langle 0|\phi(\boldsymbol{x})H|\Psi(t)\rangle = \langle 0|\dot{\phi}(\boldsymbol{x})|\Psi(t)\rangle,$$

则可得到德布罗意波所满足的波动方程

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_{N=1}(\boldsymbol{x},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\boldsymbol{x})\right)\psi_{N=1}(\boldsymbol{x},t). \tag{10.1.16}$$

(10.1.15)式右边第二项之所以没有贡献，是因为$\langle 0|\phi^\dagger(x) = 0$，从物理上来看，则是由于这里所考虑的体系的哈密顿算符(9.2.51)使粒子数保持守恒的结果。 就广义的 $\psi_N(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N,t)$ 而言，有

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_N(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N,t)$$
$$= -\frac{\hbar}{i}\sum_{k=1}^{N}\langle 0|\phi(\boldsymbol{x}_1)\phi(\boldsymbol{x}_2)\cdots\dot{\phi}(\boldsymbol{x}_k)\cdots\phi(\boldsymbol{x}_N)|\Psi(t)\rangle$$
$$= \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N}U(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}\sum_{ij}V(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)\right\}$$
$$\times\psi_N(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N,t). \tag{10.1.17}$$

亦即得到了第九章的(9.2.53)式。

在这里必须注意以下情况。$N=1$ 的德布罗意波 $\psi_{N=1}(\boldsymbol{x},t)$ 所满足的薛定谔方程 (10.1.16) 与二次量子化场的波动方程(10.1.15)极为相似。但是，前者对于波函数 $\psi_{N=1}$ 来说是**线性**的，

而后者通常却包含**非线性**项，在这一点上二者有着本质差异。后者的非线性项表示粒子间的相互作用。然而该相互作用在薛定谔方程(10.1.17)中并未导致 $\psi_N(x_1,x_2,\cdots,x_N,t)$ 的非线性性质，即使是在下一节所要处理的那种使粒子数通常并不守恒的情况下，其线性性质也总可以保持，充其量只会出现有关 $\{\psi_N,N=0,1,2,\cdots\}$ 的联立方程。不用说，其概率幅的线性性质当起因于薛定谔方程(9.2.52)中 $|\Psi(t)\rangle$ 的线性性质。

上面已经阐述了二次量子化场和在配位空间中定义的$N$粒子体系的概率幅——广义薛定谔函数——之间的关系，现在有必要进一步对后者作些补充说明。可以断言，二次量子化场(今后称之为量子化场)是量子力学体系中的基本的量，而在上述配位空间中所引入的$N$粒子体系的概率幅都是对应于态矢 $|\Psi(t)\rangle$ 的一个表象，而且在相对论量子力学中一般并不能具有概率幅的意义。实际上，就上述例子而言，为了决定量子力学体系的运动，知道薛定谔方程(9.2.52)中的哈密顿算符$H$就可以了。而这个$H$可以由量子化场的量 $\psi(x)$ 构成，后者作为算符的性质则由对易关系(9.2.33)确定。为了具体地求解薛定谔方程，一般要引入适当的表象——即适当的正交基矢系.(10.1.5)式给出现在所讨论的配位空间中的广义薛定谔函数，该基矢系亦为其中之一。可是，当要求体系满足相对论不变性时，在限制$H$的结构的同时，还要修正量子化场的波动方程(10.1.15)及对易关系(10.1.4)，使之满足相对论协变性(参看 § 10.4)。其结果，在玻色子体系中(10.1.5)式的基矢系列已经不再满足正交性(10.1.6)，因此，一般来说，$\{\psi_N,N=0,1,2,\cdots\}$也就不会满足对于概率解释所必不可少的归一化条件

$$1=\sum_{N=0}^{\infty}\int d^3x_1\cdots d^3x_N\,|\psi_N(x_1,x_2,\cdots,x_N,t)|^2. \quad (10.1.18)$$

这样一来，即使把 $\psi_N(x_1,x_2,\cdots,x_N,t)$ 定义为波函数，它也不能具有概率幅的意义。另一方面，量子化场 $\psi(x)$，$\psi^\dagger(x)$ 亦不能正确保持局域于 $x$ 处的粒子湮没产生算符的那种性质。再者，根据相对论性协变性的要求，它所遵从的波动方程将呈现出对时间

空间的二阶微分方程的形式，即所谓的克莱因-戈登型方程(参看§10.4)。与这一点形成明显对比的是，按照概率解释的原理，将严格要求薛定谔方程是时间的一阶微分方程。

如上所述，对相对论量子力学来说，‘坐标表象’中的基矢系(10.1.5)并不合适，可以代之以广泛采用的动量表象。那就是以(9.2.22)或(9.2.26)式为基矢系的粒子占有数表象，除动量外，状态角标 $i$ 还表示诸如自旋态之类的意义。这时，即使在相对论量子力学中，也保留了(9.2.19)和(9.2.25)那种形式的对易关系，从而保证了基矢系的正交性，因此该表象中的振幅还具有概率幅的意义。

### d) 相干态与经典波动

如上所述，若认为粒子占有数表象比坐标表象更适于确定状态，则在量子论中，粒子性似乎要比波动性更为基本一些。但是，正如下面将要看到的那样，“波动现象”实际上在我们三维空间中出现，是通过产生、湮没算符所具有的相位概念来实现的。通过**量子化场**就会明瞭，它与实际的经典波动的相位相对应。

讨论仍限于**玻色子体系**，我们首先按(9.2.21)式引入粒子数算符

$$N_i = c_i^+ c_i. \tag{10.1.19}$$

再引入**相位算符** $\phi_i$，就可以把 $c_i$ 和 $c_i^\dagger$ 写成

$$c_i = e^{i\phi_i}\sqrt{N_i} \qquad c_i^\dagger = \sqrt{N_i}e^{-i\phi_i}. \tag{10.1.20}$$

$c_i$ 和 $c_i^\dagger$ 互为厄米共轭，与此对应，$N_i$ 和 $\phi_i$ 都是厄米算符。若将(10.1.20)式代入 $c_i$ 和 $c_i^\dagger$ 所满足的对易关系

$$[c_i, c_k^\dagger] = \delta_{ik}, \tag{10.1.21}$$

则

$$e^{i\phi_i}N_i - N_i e^{i\phi_i} = e^{i\phi_i}. \tag{10.1.22}$$

只需研究一下量子化场 $\psi(x)$[(10.1.3)式]，就不难搞清楚 $N_i$ 和 $\phi_i$ 的物理意义，

$$\phi(x) = \sum_i e^{i\phi_i} \sqrt{N_i}\varphi_i(x). \qquad (10.1.23)$$

也就是说，倘若忽略(10.1.22)式中 $\phi_i$ 和 $N_i$ 的非对易性，而过渡到经典理论，则 $\phi_i$ 是与经典波动 $\phi(x)$的子波的相位相对应的量，而 $N_i$ 是与其强度相对应的量，显然，二者是相互正则共轭的变量(参看本节 e))。

若 $\phi_i$ 和 $N_i$ 满足众所周知的正则对易关系

$$[\phi_i, N_i] = -i, \qquad (10.1.24)$$

则不难确认（10.1.22）式的对易关系。 实际上，只要留意到从(10.1.24)式能导出 $[\phi_i^N, N_i] = -in\phi_i^{n-1}$，而且

$$e^{i\phi_i} = \sum_{n=0}^{\infty} (i\phi_i)^n/n!,$$

该关系即可得证。但是，如约旦(1927 年)曾指出的那样，当作为正则变量的 $N_i$ 取 0、1、2… 等离散本征值时，不应该要求它与其正则共轭量 $\phi_i$ 之间有正则对易关系（10.1.24），因而必须局限于(10.1.22)的形式。有关这个问题将在下面的 e)小节中详细介绍。

再回过头去看一看对易关系(10.1.22)，就会明白 $N$ 和 $\phi$ 有互补关系，因此 $N$ 的本征态显然牺牲了波动形象。

相干表象　那么，通过兼顾粒子数和相位不就能建立湮没算符 $c = e^{i\phi}\sqrt{N}$ 自身的本征态了吗？ 如有可能，那么根据(10.1.23)式，它就意味着量子化场 $\phi(x)$ 本身的本征态，所以将会再现我们现实时空内的经典波动。 这样的表象实际上是存在的，叫做**相干表象**. 因为目前只就特定的 $c_i$ 和 $c_i^\dagger$ 进行讨论，故略去其脚标 $i$。现在将所求的 $c$ 的本征值记作 $\alpha$，将其本征态记作 $|\alpha\rangle$，则

$$c|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \qquad (10.1.25)$$

另一方面，按照(9.2.22)式，$N$ 的本征态 $|n\rangle$ 是

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(c^\dagger)^n|0\rangle, \qquad (10.1.26)$$

取它和(10.1.25)式两边状态的内积，会得到等式

$$(n+1)^{1/2}\langle n+1|\alpha\rangle = \alpha\langle n|\alpha\rangle. \qquad (10.1.27)$$

其中已应用了性质(9.2.13)。(10.1.27)式是所求的 $|\alpha\rangle$ 在粒子占有数表象中的振幅 $\langle n|\alpha\rangle$ 的递推公式。该式不难求解，

$$\langle n|\alpha\rangle = A\alpha^n/(n!)^{1/2}. \tag{10.1.28}$$

其中 $A \equiv \langle 0|\alpha\rangle$，可由 $|\alpha\rangle$ 的归一化来决定。这样归一化了的 $|\alpha\rangle$ 如下所示：

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}}|n\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\exp(\alpha c^\dagger)|0\rangle. \tag{10.1.29}$$

作为本征值 $\alpha$，可以允许是任意复数，而在相干态 $|\alpha\rangle$ 之中的粒子数 $N$ 的期待值则是

$$\langle N\rangle = |\alpha|^2. \tag{10.1.30}$$

在此需要注意两个问题。首先一点，按照(10.1.25)式，$|\alpha\rangle$ 是 $c$ 的本征态，却不是 $c^\dagger$ 的本征态，但它满足与(10.1.25)共轭的关系式

$$\langle\alpha|c^\dagger = \langle\alpha|\alpha^*. \tag{10.1.25'}$$

其次，由于 $c$ 和 $c^\dagger$ 本身并非厄米算符，因而如上所述可以允许本征值为复数。但在此可以确定，一般来说，与不同本征值 $\alpha$、$\beta$ 相对应的本征态 $|\alpha\rangle$、$|\beta\rangle$ 却不正交，其内积为

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \exp\left\{\alpha^*\beta - \frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2\right\}. \tag{10.1.31}$$

这时尚可证明下述**完备性**(实际上是超完备性)

$$\frac{1}{\pi}\int d^2\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| \equiv \frac{1}{\pi}\int r\,dr\,d\varphi|re^{i\varphi}\rangle\langle re^{i\varphi}| = 1. \tag{10.1.32}$$

其中 $\alpha \equiv re^{i\varphi}$。

上面考察了特定的状态，而由上面结果的直积不难得到一般的相干态。现在，记 $|\alpha_1,\alpha_2,\cdots\rangle \equiv |\alpha_1\rangle|\alpha_2\rangle\cdots$，它就会成为量子化场的本征态。实际上，

$$\psi(x)|\alpha_1,\alpha_2,\cdots) = \sum_{i=1}^{\infty}c_i|\alpha_1,\alpha_2,\cdots\rangle\varphi_i(x)$$

$$= \left(\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \varphi_i(\boldsymbol{x})\right) |\alpha_1, \alpha_2, \cdots\rangle. \quad (10.1.33)$$

同样，

$$\langle \alpha_1, \alpha_2, \cdots | \psi^{\dagger}(\boldsymbol{x}) = \langle \alpha_1, \alpha_2 \cdots | \left(\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i^* \varphi_i^*(\boldsymbol{x})\right). \quad (10.1.34)$$

也就是说，在相干态之下，量子化场量 $\psi(\boldsymbol{x})$ 与经典 c 数波动

$$\varphi_{\mathrm{cl}} \cdot (\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \varphi_i(\boldsymbol{x}) \quad (10.1.35)$$

同样变化。

按照经典的观点，现实的光被认为是一种波，作为极好的近似，近来已经实现了用相干态来描述它的尝试。其代表就是激光。然而，自然光并非纯相干态，而是其混合态 $\sum_{\alpha} w(\alpha)|\alpha\rangle\langle\alpha|$。一般来讲，能否维持上述相干态长时间持续稳定，也作为一个重要课题而进行了大量的研究。这当然取决于 $\psi(\boldsymbol{x})$ 所服从的波动方程，例如，上面讨论过的(10.1.15)式，是确定 $\psi$ 的波动方程，其中除了 $\psi$ 之外还包含有 $\psi^{\dagger}$，而后者就会产生破坏相干的作用。

显然，如上面反复叙述过那样，相干态中作为“经典波动”出现的不是德布罗意波，而是场算符 $\psi(\boldsymbol{x})$，在光的情况下，就是电场磁场算符 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x})$ 和 $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})$，它们无非是在特殊的量子多粒子体系状态中表示 c 数行为。然而，对于光来说，把相对论考虑进去具有根本的重要性。实际上，$\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 服从众所周知的相对论协变的麦克斯韦波动方程.而且，由于 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 是可观测量，因此必须是厄米算符，所以，当用产生和湮没算符来表示它们时，会与上述 $\psi$ 的表达式(10.1.3)不同，而要求用其产生和湮没算符的线性组合来表示。详细情况留待 § 10.4 中再讨论。先用 $a^{\dagger}(\boldsymbol{k},\lambda)$ 和 $a(\boldsymbol{k},\lambda)$($\boldsymbol{k}$ 表示光子动量，$\lambda$ 表示自旋态）分别表示动量表象中的产生湮没算符，把场表示为(参看本讲座第十卷《基本粒子理论》§ 3.1)

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{A} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} A_0, \quad \boldsymbol{H} = \nabla \times \boldsymbol{A}. \quad (10.1.36)$$

其中矢势 $A_\mu(x)$ 为

$$A_\mu(x) = (A(x), A_0(x))$$
$$= (2\pi)^{-3/2} \sum_{\lambda=1}^{4} \int d^3k \sqrt{\frac{\varepsilon}{2\omega}}\, e_\mu(k,\lambda)[a(k,\lambda)e^{ikx} + a^\dagger(k,\lambda)e^{-ikx}]. \quad (10.1.37)$$

式中

$$\omega = \sqrt{k^2}, \quad (10.1.38)$$

$$[a_\mu(k,\lambda), a_\nu^\dagger(k',\lambda')] = \hbar\delta_{\lambda\lambda'}\delta^3(k-k'). \quad (10.1.39)$$

而 $e_\mu(k,\lambda)$ 作为表示光偏振的 4 矢则满足

$$e_\mu(k,\lambda)e_\mu(k,\lambda') = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (10.1.40)$$

这种把量子化场表示为产生和湮没算符的线性组合的方式，并不限于电磁场，在相对论场中是普遍的。前面引入的相干态 $|\alpha\rangle(\equiv|\alpha_1,\alpha_2,\cdots\rangle)$ 已经不是 $E$、$H$ 的本征态。把 $E(x)$ 和 $H(x)$ 分解成包含产生算符和湮没算符的部分（对应于自由场的正、负频率部分），用 $E^{(\pm)}(x)$ 和 $H^{(\pm)}(x)$ 来标记它们，首先有

$$\left.\begin{aligned} E^{(-)}(x)|\alpha\rangle &= E_{\mathrm{cl.}}^{(-)}(x)|\alpha\rangle \\ \langle\alpha|E^{(+)}(x) &= E_{\mathrm{cl.}}^{(+)}(x)\langle\alpha| \end{aligned}\right\}, \quad (10.1.41)$$

$$\left.\begin{aligned} H^{(-)}(x)|\alpha\rangle &= H_{\mathrm{cl.}}^{(-)}(x)|\alpha\rangle \\ \langle\alpha|H^{(+)}(x) &= H_{\mathrm{cl.}}^{(+)}(x)\langle\alpha| \end{aligned}\right\}, \quad (10.1.42)$$

其中 $E_{\mathrm{cl.}}^{(\pm)}(x)$ 和 $H_{\mathrm{cl.}}^{(\pm)}(x)$分别是在 $E^{(\pm)}(x)$和 $H^{(\pm)}(x)$ 中做置换

$$\left.\begin{aligned} a(k,\lambda) &\to \alpha(k,\lambda) \\ a^\dagger(k,\lambda) &\to \alpha^*(k,\lambda) \end{aligned}\right\} \quad (10.1.43)$$

所得到的 c 数波函数。对于用 $E(x)$ 和 $H(x)$ 构成的以经典方式认识的物理量 $f(E,H)$ 来说，在量子论中对应有将其实施正规乘积（参见 § 10.4）操作之后的可观测量：$f(E,H)$:。在后者之中，只是把 $f$ 里的 $E$ 和 $H$ 分解成 $E^{(\pm)}$ 和 $H^{(\pm)}$，再排好乘积的顺序，使所有产生算符 $E^{(+)}$ 和 $H^{(+)}$ 均位于所有湮没算符 $E^{(-)}$ 和 $H^{(-)}$的左面。于是

$$\langle\alpha|:f(E,H):|\alpha\rangle = f(E_{\mathrm{cl.}},H_{\mathrm{cl.}}), \quad (10.1.44)$$

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{E}_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{E}_{\mathrm{cl}}^{(+)}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{E}_{\mathrm{cl}}^{(-)}(\boldsymbol{x}) \\ \boldsymbol{H}_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{H}_{\mathrm{cl.}}^{(+)}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{H}_{\mathrm{cl.}}^{(-)}(\boldsymbol{x}) \end{aligned}\right\}. \tag{10.1.45}$$

现在已经知道，存在着多种多样的基本粒子，但经典波动只有关于光子的波，这样的经验事实应该怎样解释呢？反过来说，就是一般物质的相干态如何才能实现的问题。从定义(10.1.29)可知，相干态是粒子数不确定的状态。具体地说，应该能供给无数个粒子。在光的情况下，光子质量为零，而电子是容易产生光子的源，作为自然界物质的结构单元，它异常丰富地到处存在，这是可以举出的上述现象的根本原因。另外，仅次于光子的轻玻色子是 $\pi$ 介子，它的质量是电子的 270 倍。核子是生成这种 $\pi$ 介子的源，具有比电磁相互作用强得多的强相互作用，目前已经制造出它们的各种共振态(参看本讲座第十卷《基本粒子理论》§ 1.3，§6.7)。考虑到这些事实，按照现代理论的看法，如果有所谓“核物质”，具有每 $(10^{-13}\mathrm{cm})^3$ 一个粒子这样高的粒子密度，那么可以期望，在其中会实现 $\pi$ 介子的相干态(称之为 $\pi$ 介子凝聚)，即实现 $\pi$ 介子的经典波。例如，中子星等天体就是这类值得注意的对象。

费米子情形上面是对纯玻色子系统进行讨论的。费米子系统是否会同样出现经典波？这是一个有意思的问题。这时与玻色子的情形明显不同的是有泡利原理的作用。产生和湮没算符满足反对易关系

$$\left.\begin{aligned} &c_i c_j^{\dagger} + c_j^{\dagger} c_i = \delta_{ij} \\ &c_i c_j + c_j c_i = c_i^{\dagger} c_j^{\dagger} + c_j^{\dagger} c_i^{\dagger} = 0. \end{aligned}\right\} \tag{10.1.46}$$

下面再一次只讨论某特定的 $i$ 态，仅用 $c$ 表示 $c_i$。像(10.1.20)式中那样引入粒子数算符 $N$ 和相位算符 $\phi$，从(10.1.46)式导出

$$\left.\begin{aligned} &e^{i\phi} N + N e^{i\phi} = e^{i\phi} \\ &e^{i\phi}\sqrt{N}\, e^{i\phi}\sqrt{N} = 0 \end{aligned}\right\}. \tag{10.1.47}$$

由上面对易关系可知，$N$ 的本征值只限于 0 和 1。另外，在玻色子系统引入相干态概念，是以同一个状态中能有无数个粒子同时存在为前提的，不能把它原封不动地搬到费米子情形。不考虑湮没

算符的本征态，代之以考虑下述状态：

$$|\alpha\rangle = (1 - |\alpha|^2)^{1/2}|0\rangle + \alpha|1\rangle \quad (|\alpha|^2 < 1), \tag{10.1.48}$$

可以证明它满足与(10.1.30)、(10.1.32)类似的性质

$$\langle\alpha|N|\alpha\rangle = |\alpha|^2, \tag{10.1.30'}$$

$$\frac{1}{\pi}\int_{|\alpha|^2<1} dadb|\alpha\rangle\langle\alpha| = 1 \quad (\alpha = a + ib). \tag{10.1.32'}$$

根据上面的讨论，显然不能期望会出现费米子本身的经典场．然而我们知道，由偶数个费米子构成的复合系统可能具有玻色子的性质．实际上，中子和质子都是费米子，由它们构成的原子粒却按照质量数的奇偶性分别服从费米统计或玻色统计．因而，描述费米子的量子化场 $\psi_F(x)$ 本身不会呈现经典波，由其偶数个积构成的复合玻色子场中却可望存在着显示宏观波动性的状态．这时，可以用费米子的 $c_i^{(F)}$ 构成复合玻色子场的湮没算符 $c_i^{(B)}$，例如

$$c_i^{(B)} = \sum_{jk} f_{jk}^i c_j^{(F)} c_k^{(F)}, \tag{10.1.49}$$

它**近似**满足对易关系 (10.1.21)．从费米子的能级来看，$c_i^{(B)}$ 近似得到的相干态并不与泡利原理抵触，显然可以有无数个不同状态的费米子构成(10.1.49)式中成对的形式．作为实际例子，我们知道，合成体系自旋为零服从玻色统计的 $^4$He 原子，在极低温度下会发生第二类相变，并显示出超流动性，这就说明了上述机制．同样，电子也服从费米统计，然而我们知道，金属中的**电子对**(库珀(Cooper) 对) 在低温下具有相干态，并且有好几种超导金属(参看本讲座第七卷《物性学》(II)§4.6)．

如上所述，相干表象对连结量子论与经典理论，或者说对连结**微观**世界的法则与**宏观**的现象起着重要的作用，薛定谔早就指出了这一点．1926 年，在所完成的一系列波动力学的论文中，就有一篇名为“从微观力学到宏观力学的连续过渡”(Der stetige Übergang von der Mikro-zur Makromechanik) 的论文，其中薛定谔进一步展开了简谐振子的波动力学，考察了新力学的意义．

已经知道，可以用一组产生和湮没算符描述简谐振子系统（参看§ 3.5），于是薛定谔引入了对应于上述相干态的波函数，凝聚为高斯函数形式的波束长时间保持，显示了其中心进行着与经典图像一致的正弦振动．根据这个例子，薛定谔主张，即使在用德布罗意波描述的微观世界中，也不会出现矩阵力学学派说的所谓神秘现象，如电子位置概念消失等，而是存在着与宏观经典世界现象的不间断的联系．然而，正如此后海森伯所指出的那样，这种波束凝聚的持续性是谐振子模型所特有的，对于其它的一般系统，可以证明它不能成立．并且，与扩展德布罗意波自身的密度分布有关的薛定谔经典解释很快被扬弃而归并入哥本哈根学派．实际上，上面所叙述的宏观经典世界中直观的波动，不是在对应于粒子数确定的状态的德布罗意波中实现的，即不是在广义薛定谔函数中实现的，可以把它看成是粒子数根本不确定的相干态，或与此近似状态的**量子化场算符**的性质．即使如此，上述把相干态当作微观与宏观连结点的薛定谔的分析，也可以说具有先驱的意义．

最后，经典场或宏观场中还有必要提到的是**引力场**．它不仅仅是弱的静场，而且作为理论上预言的波动场可能是现实的，它在本质上与上述辐射场等一样，也具有微观世界相应的量子（称之为引力子），或者说是与时空有关的不同质的存在，然而，这些目前均尚未得到证实（参看本讲座第十一卷《宇宙物理学》§ 7.11）．

### e） 多粒子体系的量子力学和场的正则量子化

在上面讨论的伴有粒子产生和湮没的正规量子论中，量子化场的概念显然是至关重要的．这时要假设波动方程形式和对易关系，它们决定了这个量子化场的基本性质，然而，与其涉及这些原理，不如由多粒子体系的量子力学求出一套方法．场的正则量子化的普遍形式由海森伯和泡利于 1929 年完成，而很早以前就已了解为辐射场的发射和吸收光的量子论，直到 1927 年才由狄拉克首次公式化．接着引入与上述产生和湮没算符对应的量，由它们再构成辐射场系统的正则共轭变量，在此基础上，按照质点系正则量子化

的步骤，给定它们之间的对易关系。把这些考虑也用于物质波，以统一描述光和物质波为目标，等等，这些是约旦和克莱因在1927年的工作。然而，我们已经说过，与辐射场不同，如何考虑物质粒子的波动是一个大问题。历史上，这一发展既是必然的又是迂回曲折的。约旦和克莱因又进行了“电相互作用下的德布罗意波量子化”，以量子化场的波动方程(10.1.15)相同的形式，揭示了c数德布罗意波 $\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)$ 的波动方程。这时与 $\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)$ 有关的非线性项中的势是库仑势

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\boldsymbol{x})\right\}\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)$$

$$+\int d^3\boldsymbol{x}'\psi^*_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x}',t)V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x}',t)\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)。\tag{10.1.50}$$

以此式为量子化的对象，得到的结果是正确的，然而，上面已经说过，这时 $\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)$ 不再具有量子力学概率幅的意义。应用下面的非微扰解构成归一化正交系列 $\{\varphi_i(\boldsymbol{x})\}$：

$$\varepsilon_i\varphi_i(\boldsymbol{x})=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right\}\varphi_i(\boldsymbol{x}),\tag{10.1.51}$$

把(10.1.50)式的解展开

$$\left.\begin{aligned}\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)&=\sum_i c_i(t)\varphi_i(\boldsymbol{x})\\ \psi^*_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)&=\sum_i c_i^*(t)\varphi_i^*(\boldsymbol{x})\end{aligned}\right\},\tag{10.1.52}$$

$$c_i(t)=\int d^3\boldsymbol{x}\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)\varphi^*(\boldsymbol{x}),\tag{10.1.53}$$

$$c_i^*(t)=\int d^3\boldsymbol{x}\psi^*_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)\varphi_i(\boldsymbol{x})。\tag{10.1.54}$$

这样，波函数随时间的变化完全由 $\{c_i(t)\}$ 随时间的变化决定。由于后者的运动方程具有哈密顿形式，因此先求给出(10.1.50)式(作为欧勒方程)的作用量(详见§10.2a))

$$\delta A=\delta\int dt\int d^3\boldsymbol{x}L(x)=0,\tag{10.1.55}$$

$$L(x) = \frac{-\hbar^2}{2m}(\nabla\psi^*_{\mathrm{cl.}})\cdot(\nabla\psi_{\mathrm{cl.}}) - \frac{\hbar}{2i}\Big(\psi^*_{\mathrm{cl.}}\frac{\partial\psi_{\mathrm{cl.}}}{\partial t}$$

$$-\Big(\frac{\partial\psi_{\mathrm{cl.}}}{\partial t}\Big)^*\psi_{\mathrm{cl.}}\Big)$$

$$-\int d^3x\psi^*_{\mathrm{cl.}}(x,t)U(x)\psi_{\mathrm{cl.}}(x,t)$$

$$-\frac{1}{2}\int d^3x'\psi^*_{\mathrm{cl.}}(x,t)\psi_{\mathrm{cl.}}(x',t)V(x,x')$$

$$\times\psi_{\mathrm{cl.}}(x',t)\psi_{\mathrm{cl.}}(x,t). \qquad (10.1.56)$$

把(10.1.52)式代入上式，则

$$\bar{L} \equiv \int d^3x L = -\sum_i \varepsilon_i c_i^*(t)c_i(t) - \frac{\hbar}{2i}\sum_i\Big(c_i^*(t)\frac{\partial c_i(t)}{\partial t}$$

$$-\Big(\frac{\partial c_i^*(t)}{\partial t}c_i(t)\Big) - \sum_{ij} v_{ij}^{(1)}c_i^*(t)c_j(t)$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{ijkl} v^{(2)}_{ij,kl}c_i^*(t)c_j^*(t)c_k(t)c_l(t). \quad (10.1.57)$$

式中 $v^{(1)}$ 和 $v^{(2)}$ 分别是由(9.2.5)式和(9.2.29)式给出的系数。现在把 $\{c_i(t),c_i^*(t)\}(i=1,2,\cdots)$ 当做广义坐标，用(10.1.57)式求其正则共轭变量 $\pi_i(t)$、$\pi_i^*(t)$，有

$$\left.\begin{aligned}\pi_i(t) &= \frac{\partial\bar{L}}{\partial\dot{c}_i(t)} = -\frac{\hbar}{2i}c_i^*(t),\\ \pi_i^*(t) &= \frac{\partial\bar{L}}{\partial\dot{c}_i^*(t)} = \frac{\hbar}{2i}c_i(t),\end{aligned}\right\} \qquad (10.1.58)$$

$\{\pi_i,\pi_i^*\}$ 和 $\{c_i,c_i^*\}$ 不能独立。在一阶时间微分方程中这种情况经常出现（参看§10.4.c)）。若要原封不动地完成这种正则形式，则必须应用第十一章叙述的有约束时量子化的一般理论。不过，目前情况下，这个约束条件可以用简单的技巧避开。即，由于即使在(10.1.57)式中的 $\bar{L}$ 中加上一项 $-\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial t}\sum_i c_i^*(t)\,c_i(t)$，由此导出的欧拉方程也是不变的，因此采用它作为新的 $\bar{L}$。于

是，它的第二项只有 $-\frac{\hbar}{i}\sum_i c_i^*(t)\frac{\partial}{\partial t}c_i(t)$，而不再有含

$$\frac{\partial}{\partial t}c_i^*(t)$$

的项。这样，广义坐标取为 $\{c_i(t)\}$ $(i=1,2,\cdots)$ 其正则共轭广义动量是

$$\pi_i(t)=-\frac{\hbar}{i}c_i^*(t). \tag{10.1.59}$$

体系的哈密顿量是

$$\begin{aligned}\bar{H}=&\frac{-\hbar}{i}\sum_i c_i^*(t)\frac{\partial}{\partial t}c_i(t)-\int d^3x L\\&=\sum_i \varepsilon_i c_i^*(t)c_i(t)+\sum_{ij}v_{ij}^{(1)}c_i^*(t)c_j(t)\\&+\frac{1}{2}\sum_{ij,kl}v_{ij,kl}^{(2)}c_i^*(t)c_j^*(t)c_k(t)c_l(t).\end{aligned} \tag{10.1.60}$$

于是所求之正则运动方程为

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}c_i&=\frac{1}{i\hbar}\frac{\partial\bar{H}}{\partial c_i^*}\\\frac{\partial}{\partial t}c_i^*&=-\frac{1}{i\hbar}\frac{\partial\bar{H}}{\partial c_i}\end{aligned}\right\}. \tag{10.1.61}$$

显然，$c_i(t)$ 和 $c_i^*(t)$ 分别是与上面考察过的产生和湮没算符相对应的经典量，上面的结果表明，$\{c_i(t)\}$ 和 $\{i\hbar c_i^*(t)\}$ 形成正则共轭变量组。

这里顺便给出，对应于粒子数和位相的量的正则方程与(10.1.20)式类似，令

$$\left.\begin{aligned}c_i(t)&=\sqrt{N_i(t)}\,e^{i\phi_i(t)}\\c_i^*(t)&=\sqrt{N_i(t)}\,e^{-i\phi_i(t)}\end{aligned}\right\}. \tag{10.1.62}$$

其中 $N_i(t)$ 和 $\phi_i(t)$ 是实 c 数。把 (10.1.62) 式代入(10.1.57)式中的 $\bar{L}$，包含时间微商的第二项变成

$$-\frac{\hbar}{2i}\sum_i\left\{c_i^*\frac{\partial}{\partial t}c_i-\left(\frac{\partial}{\partial t}c_i^*\right)c_i\right\}=-\hbar\sum_i N_i(t)\frac{\partial}{\partial t}\phi_i.$$

(10.1.63)

从而，采用 $\{\phi_i(t)\}(i=1,2,\cdots)$为新的广义坐标，其正则共轭广义动量为

$$\pi_i(t)=-\hbar N_i(t). \tag{10.1.64}$$

可以用 $\phi_i$ 和 $N_i$ 把哈密顿量(10.1.60)写成一致的形式

$$\bar{H}=\sum_i \varepsilon_i N_i(t)+\sum_{ij} v_{ij}^{(1)}\sqrt{N_i(t)}\,e^{-i\phi_i(t)}\sqrt{N_j(t)}\,e^{i\phi_j(t)}+\cdots.$$

(10.1.65)

正则运动方程为

$$\left.\begin{aligned}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_i(t)&=\frac{-\partial\bar{H}}{\partial N_i(t)}\\ \hbar\frac{\partial}{\partial t}N_i(t)&=\frac{\partial\bar{H}}{\partial\phi_i(t)}\end{aligned}\right\}. \tag{10.1.66}$$

下面讨论**量子化问题.** 在§9我们从多粒子体系的量子力学导出了两类对易关系，即玻色子型的（9.2.19）式和费米子型的(9.2.25)式. 用现在的正则变量组 $\{c_i(t),\pi_i(t)=i\hbar c_i^*(t)\}$，那些结果分别变成相应的对易关系

$$\left.\begin{aligned}&[c_i(t),\pi_i(t)]=i\hbar\delta_{ij}\\ &[c_i(t),c_j(t)]=[\pi_i(t),\pi_j(t)]=0,\end{aligned}\right\} \tag{10.1.67}$$

或

$$\left.\begin{aligned}&\{c_i(t),\pi_j(t)\}=i\hbar\delta_{ij}\\ &\{c_i(t),c_j(t)\}=\{\pi_i(t),\pi_j(t)\}=0\end{aligned}\right\}. \tag{10.1.68}$$

根据已知的质点系量子化时的对应原理，可以原封不动地导出玻色子型的（10.1.67）式，但用这个原理却无法说明费米子型的(10.1.68)式. 关于这点，约当(1927)进行了很有意义的研究.

**正则变量与正则对易关系** 约当的这个研究之所以重要是因为它涉及经典理论与量子论的联系. 由于这与后面的讨论有关，所以这里简单提一下. 通常，从经典理论向量子论过渡时，要借用

泊松括号，假设其正则共轭变量组 $(q;p)\equiv(q_1,q_2,\cdots,q_f;p_1,p_2,\cdots,p_f)$ 满足**正则对易关系**

$$[q_i,p_i](\equiv(q_ip_i-p_iq_i)=\frac{i}{\hbar}[q_i,p_i]_p=\frac{i}{\hbar}\delta_{ii}. \tag{10.1.69}$$

但是，在 $q_i$ 和 $p_i$ 具有连续本征值的情况下，上式是正确的，而在 $q_i$ 或 $p_i$ 有离散本征值的情况下，它一般不成立。例如，$f=1$ 的简单情况下，$p$ 具有离散本征值 $\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\cdots$。这时，用 $f(z)$ 表示在 $z=\alpha_i$ $(i=1,2,3,\cdots)$ 处有一阶零点的超越整函数

$$f(p)=0. \tag{10.1.70}$$

而从(10.1.69)式得到

$$[q,f(p)]=-\frac{\hbar}{i}f'(p)\neq 0. \tag{10.1.71}$$

结果与(10.1.70)式矛盾。因此，作为一般要求，约当不再用关系式(10.1.69)，而引入了下面的设想：设 $q=(q_1,q_2,\cdots,q_f)$ 和 $p=(p_1,p_2,\cdots,p_f)$ 为两组完备可观测量。满足

$$\left.\begin{aligned}q_i|q;q'(=q'_1,q'_2,\cdots,q'_f)\rangle&=q'_i|q;q'\rangle\\ p_i|p;p'(=p'_1,p'_2,\cdots,p'_f)\rangle&=p'_i|p;p'\rangle\end{aligned}\right\} \tag{10.1.72}$$

的本征态 $|q;q'\rangle$ 和 $|p;p'\rangle$ 是分别服从下面两个式子的正交归一化系列：

$$\left.\begin{aligned}\langle q;q'|q;q''\rangle&=\prod_{i=1}^{f}\delta(q'_i-q''_i)\\ \langle p;p'|p;p''\rangle&=\prod_{i=1}^{f}\delta(p'_i-p''_i)\end{aligned}\right\}. \tag{10.1.73}$$

对应于离散本征值部分，上式右边的 $\delta$ 函数表示克朗内克 $\delta$，而对应于连续本征值部分，它代表了狄拉克 $\delta$ 函数。我们把 $q$ 和 $p$ 作为量子力学的正则共轭量的条件像下面那样公式化：

$$\langle q;q'|p;p'\rangle=\text{常数}\ \exp\left\{\left(i\sum_{i=1}^{f}p'_iq'_i\right)\Big/\hbar\right\}. \tag{10.1.74}$$

关系式(10.1.74)、(10.1.72)、(10.1.73)足以确定 $q$ 和 $p$ 的矩阵关

系，连续本征值时，容易给出正则对易关系（10.1.69）。考虑到(10.1.73)式，一般可由(10.1.74)式的条件导出下述关系：

$$\left.\begin{aligned}\widetilde{\sum_{\{p'\}}} e^{i\sum_{i=1}^{f} p_i'(q_i'-q_i'')} &= \text{常数}\prod_{i=1}^{f}\delta(q_i'-q_i'')\\ \widetilde{\sum_{\{q'\}}} e^{-i\sum_{i=1}^{f} q_i'(p_i'-p_i'')} &= \text{常数}\prod_{i=1}^{f}\delta(p_i'-p_i'')\end{aligned}\right\}. \tag{10.1.75}$$

对应于离散本征值部分，上式中的 $\widetilde{\sum}$ 意味着通常的求和，而对应于连续本征值部分，它意味着积分。(10.1.75)结果表明，$\{q_i\}$ 和 $\{p_i\}$ 的本征值谱一般并不独立。例如，当广义变量是粒子占有数 $N$ 和位相 $\phi$（或周期系如作用量、角变量等）时，若 $N$ 具有 $k$ 个整数本征值

$$N = 0,1,2,\cdots,k-1, \tag{10.1.76}$$

则其正则共轭变量 $\hbar\phi$ 的离散本征值

$$\hbar\phi = \frac{h}{k}(0,1,2,\cdots,k-1) \tag{10.1.77}$$

显然满足(10.1.75)式。

前一小节 d)中讨论的玻色子情形中取了 $k\to\infty$ 的极限，这时 $\phi$ 具有 $0\leqslant\phi\leqslant 2\pi$ 的连续本征值，不过(10.1.24)式不成立，而是明显地导出(10.1.22)式。

另外，若这种约当考虑可应用于费米子，则对应于 $k=2$ 的情形，按照(10.1.77)式，$\phi$ 具有离散本征值

$$\phi = (0,\pi). \tag{10.1.78}$$

假定有(10.1.74)式，用粒子占有数表象来计算 $N$、$\phi$、$e^{i\phi}$ 的矩阵元，应用泡利自旋矩阵，就有

$$N = \begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} = \frac{1}{2}(1+\tau_3), \tag{10.1.79}$$

$$\left.\begin{aligned}\phi &= \frac{\pi}{2}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \frac{\pi}{4}(1-\tau_1) \\ e^{i\phi} &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \tau_1 \end{aligned}\right\}. \qquad (10.1.80)$$

用这个矩阵表示可以正确地再现对易关系(10.1.47)。但是，即使是对于 $[\phi,N]_{\pm}$，(10.1.69) 形式的所谓正则对易关系也不成立。

根据上述结果看到，约当的**广义正则量子化假定**至少可以说是一个有意思的假说，它把玻色统计的可能性与费米统计的可能性统一加以说明。不过，要进一步考虑 $k$ 的可能性的话，还有另外的可能，即按玻色型和费米型之外的统计进行场的量子化，以及随之而来的存在新种类粒子的可能。另外，从其他观点出发，格林(Green)也指出并研究了玻色型和费米型之外的统计的可能性，或者说，他研究了**并行统计**理论的可能性（参看 § 10.5）。

然而，我们以后的讨论主要限于考察玻色统计和费米统计.在上面的叙述中还缺少一个原理，它可以决定某给定场该服从哪个统计。对此，将在下节进行一般地考察，由这些内容可以明白，在系统能量正值性以及在时间反演时系统不变等要求下，可以决定**自旋与统计**的关系。

## § 10.2 拉格朗日形式的场方程和诺芝（Noether）定理

在上一节 e)中，以波动方程(10.1.50)为例，我们说明了在多粒子体系量子力学的框架中引入的二次量子化.具有与对应场(有普遍意义)的正则量子化相同的内容。因而，以后与其以多粒子体系的量子力学为媒介，还不如从开始就假设所考虑的各种场的方程，来试试可否用这种正则量子化直接达到场的量子论。这样就从上述多粒子体系的约束（例如粒子数一定等等）中解放出来了，使得我们有可能处理一般的量子力学体系。 这里所谓假定“所考虑的各种场的方程”，最终不外乎是要找到自然实在的场.实际上，场的对象的范围比物性学所包含的范围更为广泛，下面将以自然

界基本的物质成分——基本粒子为重点进行讨论.对此,我们有丰富的实验事实和理论思想，以及确定场方程的各种原理。在构造场的量子论的过程中,物理定律所具有的变分原理的性质、理论的相对论不变性、根据经验所知道的各种对称性或守恒量的存在等等,确实起到了关键的作用。

按照以下步骤可以把上节 e) 中叙述的场量子化程序以普遍的形式公式化。

### a) 拉格朗日形式的场方程

现在考察的对象是一系列场 $u_A(x,\ t)$。脚标 $A$ 代表了(10.1.37)式中电磁势 $A_\mu$ 的四维矢量分量、§7.4 的狄拉克场 $\psi_\alpha(x)$ 的 4 个分量，以及核子中区别质子或中子的同位旋分量等等。并且,一般 $u_A(x)$ 可以是复函数,这时,对于同一个 $A$,$u_A$ 和 $u_A^*$ 可以是独立的。

在用**变分原理**推导场所满足的波动方程时,把 $u_A(x,t)$ 看成是广义坐标 $q_r(t)$，$r$ 对应于 $(x,\ A)$ 有无限的自由度，与变分 $\delta q_r(t)\equiv q'_r(t)-q_r(t)$ 相应,考虑场的变分

$$\delta u_A(x,t)=u'_A(x,t)-u_A(x,t). \tag{10.2.1}$$

这时,下式成立:

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}\delta u_A(x)=\delta\frac{\partial}{\partial x_\mu}u_A(x). \tag{10.2.2}$$

其中,为了便于以后进行相对论描述,已经使用了记号

$$\left.\begin{aligned}&x_\mu=(x_i,ix_0)\ (\mu=1,2,3,4;i=1,2,3)\\&x_0=ct\end{aligned}\right\}. \tag{10.2.3}$$

除非事先声明,我们均采用 $c=\hbar=1$ 的**自然单位**。在这个单位制中，所有物理量都归结于长度量纲的某次幂。只要不会引起混淆,就把对 $x_\mu$ 的微商 $\frac{\partial}{x_\mu}u_A(x)$ 记为 $\partial_\mu u_A(x)$ 或者 $u_{A,\mu}(x)$。再根据 $A_\mu B_\mu=A_1B_1+A_2B_2+A_3B_3+A_4B_4=A_iB_i-A_0B_0$，今后只要不致于引起混乱,在一项中出现重复的希腊文下标(或欧文

斜体下标)都理解为省略了求和号 $\sum_{\mu=1}^{4}\left(\text{或}\sum_{i=1}^{3}\right)$.

对变分对象拉格朗日函数 $\bar{L}(x_0)$ 做如下重要假定.即

$$\bar{L}(x_0)=\int d^3x L(x,x_0), \tag{10.2.4}$$

$\bar{L}$ 具有拉格朗日密度函数 $L(x_\mu)$ 的空间积分的构造，$L(x_\mu)$ 是四维元时空点 $x_\mu$ 上 $\{u_A(x)\}$ 和 $\{u_{A,\mu}(x)\}$ 的**局域函数** $L(u(x),u_{,\mu}(x))$. 这里包含两个假定，其一是，$L(x)$ 包含 $u_A(x)$ 和它的顶多一阶时空微商 $u_{A,\mu}(x)$，因为前提是，由此导出的波动方程最多是时空的二阶微分方程. 其二是 $L(x)$ 的**局域性**，$L(x)$ 当然包含场的相互作用项，然而按照这个假定，相互作用的元过程只是局域产生的，因此不允许在例子(10.1.50)中看到那样的超距作用，必须代之以存在这种场媒介的近距作用.

应当注意，上述两个假定在下面的意义下互相关联. 例如，若 $L(x)$ 不是局域的，包含有下述**非局域的相互作用**

$$L_1(x)=g\int d^4x' u_1(x)u_2(x)F(x-x')u_3(x'). \tag{10.2.5}$$

此后我们用记号 $d^4x\equiv d^3xdx_0$. **形状因子** $F(x-x')$ 与场量无关，是某给定函数. 将其做傅里叶展开，写成下面形式:

$$\begin{aligned}F(x-x')&=\int d^4k\tilde{F}(k_\sigma)e^{ik_\mu(x_\mu-x'_\mu)}\\&=\tilde{F}\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_\sigma}\right)\int d^4k e^{ik_\mu(x_\mu-x'_\mu)}\\&=(2\pi)^4\tilde{F}\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_\sigma}\right)\delta^4(x-x').\end{aligned} \tag{10.2.6}$$

把它代入(10.2.5)式

$$L_1=(2\pi)^4 g u_1(x)u_2(x)F\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_\sigma}\right)u_2(x). \tag{10.2.7}$$

即可以用局域形式写出非局域相互作用，不过其中出现了具有场的**无限阶时空微商**的相互作用.

总之，对 $L(x)$所做的假定会限制理论的可适用的范围，然而，若取消这个限制则会带来与相对论、量子力学诸原理抵触的困难，直到目前所进行的许多研究也没有得到积极的有突破的可能性. § 10.7 将涉及与局域理论带来的发散困难问题有关的含高阶时空微商的场论.

再回到正题，在上述 $L(x)$ 之下，实行如下作用量积分的变分：

$$\delta A = \delta \int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}} dx_0 \bar{L}(x_0) = \int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}} d^4x \delta L(u(x), u_{,\mu}(x))$$

$$= \int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}} d^4x \sum_A \left\{ \frac{\partial L}{\partial u_A(x)} \delta u_A(x) + \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}(x)} \delta u_{A,\mu}(x) \right\}$$

$$= \int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}} d^4x \sum_A \left( \frac{\partial L}{\partial u_A} - \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}} \right) \delta u_A$$

$$+ \int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}} d^4x \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left( \sum_A \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}} \delta u_A \right). \qquad (10.2.8)$$

其中积分$\int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}} d^4x \cdots$ 是在 $x_0^{(1)}$ 与 $x_0^{(2)}$ 的时间区间和无限远的空间区间所组成的四维范围内进行的. 这时，由于假定场量在无限远空间变为零，所以(10.2.8)式的第二次变成

$$\int d^3x \sum_A \frac{\partial L}{\partial u_{A,0}} \delta u_A(x) \Big|_{x_0=x_0^{(1)}}^{x_0=x_0^{(2)}},$$

由已知 $\delta u_A|_{x_0=x_0^{(1)},\, x_0^{(2)}} = 0$，这项是零. 因此，在任意变分下要求 $\delta A = 0$，所求解的欧拉运动方程就是

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}(x)} - \frac{\partial L}{\partial u_A(x)} = 0. \qquad (10.2.9)$$

象以前说过那样，考虑场 $u_A(x)$ 为复函数时，$u_A^*(x)$ 和 $u_A(x)$ 都成了独立的变分对象. 这时，可以分别导出 $u_A$ 和 $u_A^*$ 的欧拉方程，为使二者不发生矛盾，$L$ 必须是实函数.

### b) 诺芝定理——各种不变性和守恒量

现在，用场 $u_A(x)$ 描述的对象一般都具有固有质量、自旋、同

位旋、电荷等属性．下面会看到，系统在各种变换下具有**不变性**(或对称性)，伴随着它们会引出各种**守恒量**，多数情况下，这些守恒量与上述物理量有关．在不变性和守恒量当中，认为相对论不变性和电荷守恒是严格成立的．而同位旋空间旋转不变性近似成立．在这一小节，我们用与$L$无关的一般形式推导，系统所具有的各种不变性分别与哪种守恒量有关，然后叙述几个充分了解的例子．

系统所具有的不变性中，特别重要的是**连续变换**和**非连续变换**下的不变性．后一种变换是在下节要叙述的各种反转，例如时间反演、空间反演、粒子-反粒子反转等．下面要讨论前一种，它是以几个连续参数为特征的变换．例如，四维空间中的平动和旋转、标度变换、规范变换等．我们知道，要了解这种变换的性质，只要考察与参数的无限小变化对应的**无限小变换**就足够了．

现在，无限小变换是由 $s$ 个独立的无限小参数 $\delta\omega_i$ ($i=1,2,\cdots,s$) 引起的．在坐标变换

$$x_\mu \to x'_\mu = x_\mu + \delta x_\mu \tag{10.2.10}$$

中，把 $\delta x_\mu$ 写成下述 $\delta\omega_i$ 的线性组合的形式：

$$\delta x_\mu = \sum_{i=1}^{s} X_{\mu i}\delta\omega_i . \tag{10.2.11}$$

其中 $X_{\mu i}(x)$ 一般是坐标 $x$ 的函数．而场量 $\{u_A(x)\}$ 变换成 $\{u'_A(x')\}$，用 $\delta\omega_i$ 把它们像下面那样联系起来：

$$u_A(x) \to u'_A(x') = u_A(x) + \bar{\delta}u_A(x), \tag{10.2.12}$$

$$\bar{\delta}u_A(x) = \sum_{i=1}^{s} \Psi_{Ai}\delta\omega_i . \tag{10.2.13}$$

$\Psi_{Ai}$ 一般是 $\{u_B(x)\}$ 的函数．我们现在考虑的无限小变换中，不包含同位旋空间内的旋转以及伴随规范变换而来的坐标变换．这时可以使(10.2.11)式中的 $X_{\mu i}$ 为零．

在上述变换下，求任意闭合四维元区域 $R_4$ 内作用量积分的变化 $\delta A_{R_4}$

$$\bar{\delta}A_{R_4} = \bar{\delta}\int_{R_4} d^4x L(u(x), u_{,\mu}(x))$$

$$= \int_{R_4} d^4x' L(u'(x'), u'_{,\mu}(x') - \int_{R_4} d^4x L(u(x), u_{,\mu}(x)). \tag{10.2.14}$$

最后表达式中各项的积分遍及**几何学**上的四维元区域 $R_4$。计算上式时，从第一项抽出 $\int_{R_4} d^4x L(u'(x'), u'_{,\mu}(x'))$，与第二项相加，变成下式：

$$\bar{\delta} A_{R_4} = \int_{R_4} d^4x \left( \frac{\partial}{\partial x_\mu} \delta x_\mu \right) L(u(x), u_{,\mu}(x))$$

$$+ \int_{R_4} \delta^4 x \bar{\delta} L(u(x), u_{,\mu}(x)). \tag{10.2.15}$$

求右边第一项时，注意，只考虑到一阶无限小量，应用下面结果：

$$\delta d^4x \equiv d^4x' - d^4x = \prod_\mu (dx_\mu + d\delta x_\mu) - d^4x$$

$$= d^4x \frac{\partial}{\partial x_\mu} \delta x_\mu. \tag{10.2.16}$$

第二项 $\bar{\delta} L$ 是

$$\bar{\delta} L \equiv L(u'(x'), u'_{,\mu}(x')) - L(u(x), u_{,\mu}(x))$$

$$= \sum_A \left\{ \frac{\partial L}{\partial u_A} \bar{\delta} u_A + \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}} \bar{\delta} u_{A,\mu} \right\}. \tag{10.2.17}$$

必须注意，上式中的 $\bar{\delta} u_A$ 与(10.2.1)式中的 $\delta u_A$ 不同，即有下述关系：

$$\bar{\delta} u_A(x) = \delta u_A(x) + u_{A,\mu}(x) \delta x_\mu. \tag{10.2.18}$$

对于变分 $\bar{\delta}$，与 $\frac{\partial}{\partial x_\mu}$ 的对易关系 (10.2.2) 不再成立。因而在用 (10.2.17) 形式导出 (10.2.8) 式的过程中，用分部积分不能消去 $\bar{\delta} u_{A,\mu}$。所以，把 $\bar{\delta} L(x)$ 重写成

$$\bar{\delta} L = \delta L(x) + \frac{\partial L}{\partial x_\mu} \delta x_\mu, \tag{10.2.19}$$

把(10.2.15)式改写为下面形式：

$$\bar{\delta} A_{R_4} = \int_{R_4} d^4x \delta L + \int_{R_4} d^4x \frac{\partial}{\partial x_\mu} (L \delta x_\mu). \tag{10.2.20}$$

上式右边第一项，除了积分域不同之外，与(10.2.8)式同样进行计算，现在由于已有的欧拉方程(10.2.9)成立，因此只是与(10.2.8)式中第二项对应的项剩下．这样最后得

$$\delta A_{R_4} = \int_{R_4} d^4x \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left\{ \sum_A \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}} \delta u_A + L\delta x_\mu \right\}$$

$$= -\int_{R_4} d^4x \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left( \sum_{i=1}^{s} Q_{\mu i}(x)\delta\omega_i \right), \qquad (10.2.21)$$

其中

$$Q_{\mu i}(x) \equiv \sum_A \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}} (u_{A,\sigma}(x)X_{\sigma i} - \Psi_{Ai}) - LX_{\mu i}. \qquad (10.2.22)$$

系统在(10.2.10)、(10.2.12)式中的无限小变换下不变，必然要求，对于任何四维区域 $R_4$，以及任意 $s$ 个 $\delta\omega_i$，(10.2.21) 式中的 $\delta A_{R_4}$ 为零．因此，要求在所有时空点均有

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} Q_{\mu i}(x) = 0 \quad (i = 1,2,\cdots,s). \qquad (10.2.23)$$

称之为局域守恒公式．为了研究其物理意义，把(10.2.23)式对任意 $R_4$ 积分，应用高斯积分定理，可以写成 $R_4$ 的面积分形式

$$0 = \int_{R_4} d^4x \frac{\partial}{\partial x_\mu} Q_{\mu i}(x) = \oint_S d\sigma_\mu Q_{\mu i}(x). \qquad (10.2.24)$$

其中 $d\sigma_\mu$ 是由

$$d\sigma_\mu \equiv (dx_2dx_3dx_0,\ dx_3dx_1dx_0,\ dx_1dx_2dx_0,\ dx_1dx_2dx_3/i). \qquad (10.2.25)$$

给出的四维矢量，而其含义还要具体地看看．现在所考虑的 $R_4$ 的表面 S 就是一个例子，四维空间中的三维**超曲面**是作为三个连续参数 $(u,v,w)$ 的函数的时空点 $x_\mu(u,v,w)$ 的集合．因此，现在引入下述三阶反对称张量

$$dS_{\mu\nu\sigma} = \frac{\partial(x_\mu,x_\nu,x_\sigma)}{\partial(u,v,w)} dudvdw \qquad (10.2.26)$$

或者与其等价的四维赝矢

$$d\sigma_\mu = \frac{1}{6} \varepsilon_{\mu\nu\sigma\rho} dS_{\nu\sigma\rho}. \qquad (10.2.27)$$

其中，$e$ 是四阶完全反对称张量（$e_{1234}=1$）。（10.2.25）式中 $\sigma_\mu$ 也就是(10.2.27)式中的 $\sigma_\mu$。根据(10.2.26)式中的雅可比行列式的性质，有

$$d\sigma_\mu \frac{\partial x_\mu}{\partial u} = d\sigma_\mu \frac{\partial x_\mu}{\partial v} = d\sigma_\mu \frac{\partial x_\mu}{\partial w} = 0, \quad (10.2.28)$$

也就是说，$d\sigma_\mu$ 与三维超曲面内三个独立的矢量 $\left(\frac{\partial x_\mu}{\partial u}, \frac{\partial x_\mu}{\partial v}, \frac{\partial x_\mu}{\partial w}\right)$全都正交。关于 $R_4$，图 10.2 中画出了两个超曲面 $\sigma^{(1)}$ 和 $\sigma^{(2)}$，想象它们延展到无限远的空间区域。它们的面积元

$$\left.\begin{aligned} d\sigma_\mu &= -n_\mu d\sigma \\ d\sigma &= n_\mu d\sigma_\mu \end{aligned}\right\} \quad (10.2.29)$$

正比于“类时”单位矢量 $n_\mu(n_\mu^2=-1)$，因此 $\sigma^{(1)}$ 和 $\sigma^{(2)}$ 是“平坦”的“类空”超曲面。假设场量 $u_A(x)$ 在无限远空间变为零，根据(10.2.24)式，有

$$\int_{\sigma^{(1)}} d\sigma_\mu Q_{\mu i} = \int_{\sigma^{(2)}} d\sigma_\mu Q_{\mu i}, \quad (10.2.30)$$

也就是说，根据连续变换时系统的不变性要求明显地导出了 $s$ 个守恒量

$$\bar{Q}_i = \int d\sigma_\mu Q_{\mu i} \ (i=1,2,\cdots,s). \quad (10.2.31)$$

现在，式中的 $n_\mu$ 取为 $(\mathbf{0},i)$，就有

$$\bar{Q}_i = \int d^3\boldsymbol{x} Q_{0i}. \quad (10.2.31')$$

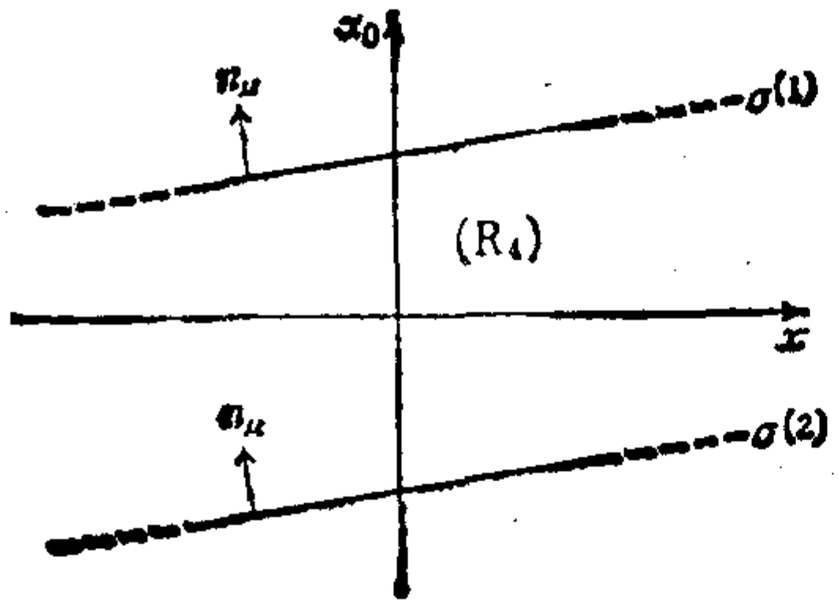



图 10.2

上面讨论中，把 $\sigma^{(1)}$ 和 $\sigma^{(2)}$ 选择为平坦超曲面，实际上，没有必要非得是平坦的。在后面的讨论中，为了使 $\bar{Q}$ 是量子力学可观测量，$\sigma$ 应是“类空”的，即 $\sigma$ 上任意两点相互是“类空”的关系。实际上，在这种 $\sigma$ 上做(10.2.31)式中积分，一般，

$\bar{Q}_i$ 是超曲面 $\sigma$ 的泛函 $\bar{Q}_i(\sigma)$，而由于有局域守恒公式 (10.2.23)，通过上面的讨论，显然 $\bar{Q}_i$ 与 $\sigma$ 面的形状无关. 反之也成立. 为了看出这点，对于 $\bar{Q}_i(\sigma)$ 做下面那样的相对于 $\sigma$ 的**泛函微商**. 按一般定义，有

$$\frac{\delta}{\delta\sigma(x)}F(\sigma)=\lim\{F(\sigma')-F(\sigma)\}/\Delta. \qquad (10.2.32)$$

$\sigma$ 和 $\sigma'$ 是图 10.3 中所示的在 $x$ 附近稍有不同的两个“类空”超曲面，二者之间的四维微小体积为 $\Delta$. $\bar{Q}_i(\sigma)$ 是 $F(\sigma)$ 的特殊情形，有

$$\frac{\delta\bar{Q}_i(\sigma)}{\delta\sigma(x)}=\frac{\partial Q_{\mu i}(x)}{\partial x_\mu}. \qquad (10.2.33)$$

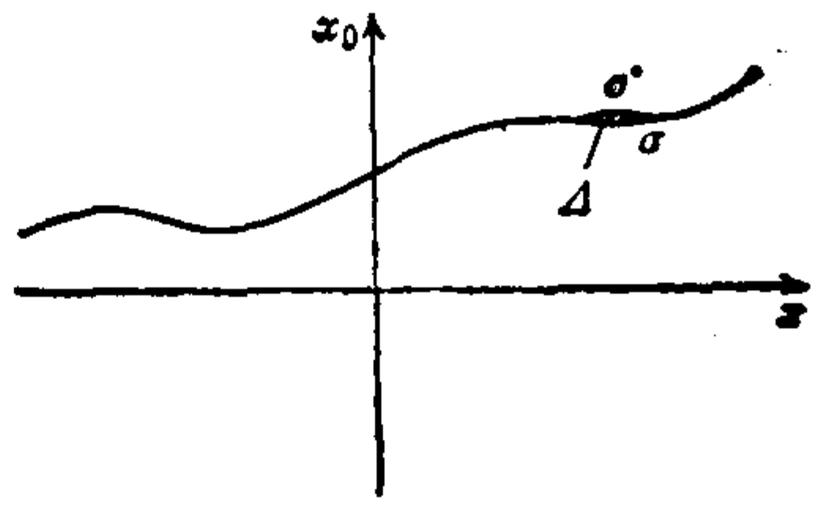


图 10.3

这样，若 $\bar{Q}_i(\sigma)$ 是不依赖于 $\sigma$ 的宏观守恒量，则显然可以导出(10.2.23)式中的局域守恒公式.

上面所叙述的系统在连续变换时的不变性与存在守恒量之间的关系是著名的诺芝定理. 下面叙述几个例子.

(i) 四维平移与能量·动量　能量·动量守恒定律自古以来就一直处于力学的根本法则的地位，而它又是从四维时空的均匀性(即时空平移时理论的不变性)导出来的. 这时，$\delta\omega_i$ 与四个无限小平动参数 $\varepsilon_i$ 对应

$$\delta\omega_{i=\mu}=\varepsilon_\mu, \qquad (10.2.34)$$

$$x_\mu\to x'_\mu=x_\mu+\varepsilon_\mu. \qquad (10.2.35)$$

于是从(10.2.11)式，有

$$X_{\mu i=\nu}=\delta_{\mu\nu}. \qquad (10.2.36)$$

另一方面，作为场来说，$u_A(x)$ 和 $u'_A(x')$ 本是几何上同一时空点的场，又由于变换只是平移，所以，$\delta u_A=0$，即

$$\Psi_{Ai=\mu}=0. \qquad (10.2.37)$$

这样，与(10.2.22)式中 $Q_{\mu i=\nu}$ 对应的量，称为正则能量·动量张量

$$T_{\mu\nu}(x)=\sum_{A}\frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}}u_{A,\mu}-L\delta_{\mu\nu},\qquad(10.2.38)$$

根据系统平移不变性的要求，它满足

$$\frac{\partial}{\partial x_{\mu}}T_{\mu\nu}=0.\qquad(10.2.39)$$

与(10.2.31)式中的 $\bar{Q}_{i=\mu}$ 对应，导出守恒的能量·动量

$$P_{\mu}=\int d\sigma_{\nu}T_{\nu\mu}=\int d^{3}xT_{0\mu}.\qquad(10.2.40)$$

立刻注意到，为得到守恒的四维矢量 $P_{\mu}$，场量在空间无限远处必须是零。

(ii) 四维旋转与四维角动量　下面，可以考虑没有伴随着平移的所谓齐次洛伦兹变换。这时，$\delta\omega_{i}$ 是具有六个独立分量的无限小反对称张量 $\delta\omega_{\mu\nu}$。

$$\delta\omega_{i=(\mu,\nu)}=\delta\omega_{\mu\nu}=-\delta\omega_{\nu\mu},\qquad(10.2.41)$$

$$x_{\mu}\rightarrow x'_{\mu}=x_{\mu}+\delta\omega_{\mu\nu}x_{\nu}.\qquad(10.2.42)$$

因而

$$X_{\mu i=(\sigma\rho)}=x_{\rho}\delta_{\mu\sigma}-x_{\sigma}\delta_{\mu\rho}.\qquad(10.2.43)$$

另一方面，当场 $u_{A}$ 变化

$$\bar{\delta}u_{A}(x)=\sum_{\sigma<\rho}\Psi_{Ai=(\sigma\rho)}\delta\omega_{\sigma\rho}\qquad(10.2.44)$$

时，正如在后面(参看 § 10.3)的例子中表明的，通常把场 $\Psi_{A\sigma\rho}$ 表示为 $\{u_{A}(x)\}$ 的线性组合。

$$\Psi_{A\sigma\rho}=\sum_{B}S^{B}_{A\sigma\rho}u_{B}(x).\qquad(10.2.45)$$

其中，$S^{B}_{A\sigma\rho}(=-S^{B}_{A\rho\sigma})$ 是根据场的类型决定的常系数，称为自旋矩阵。于是，对应于(10.2.22)式中的 $Q_{\mu i=(\sigma\rho)}$，得到

$$M_{\mu\sigma\rho}(x)=L_{\mu\sigma\rho}(x)+S_{\mu\sigma\rho}(x).\qquad(10.2.46)$$

其中，

$$L_{\mu\sigma\rho}=x_{\rho}T_{\mu\sigma}-x_{\sigma}T_{\mu\rho},\qquad(10.2.47)$$

$$S_{\mu\sigma\rho} = -\sum_{AB} \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}} S^{B}_{A\sigma\rho} u_B . \tag{10.2.48}$$

根据系统旋转不变的要求，有

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} M_{\mu\sigma\rho} = 0 . \tag{10.2.49}$$

作为守恒量，得到了称为四维角动量的反对称张量

$$M_{\sigma\rho} = \int d\sigma_\mu M_{\mu\sigma\rho} = \int d^3x M_{0\sigma\rho} = \int d^3x (L_{0\sigma\rho}(x) + S_{0\sigma\rho}) . \tag{10.2.50}$$

在此表达式中看到，角动量分成 $L$ 部分和 $S$ 部分，它们分别对应于轨道角动量和自旋角动量。实际上，它们分别由与(10.2.42)式的 $\delta x_\mu$ 和(10.2.44)式的 $\bar{\delta} u_A$ 对应的变分来确定。

这里请注意，上述 $L_{\mu\sigma\rho}$ 中的正则能量·动量张量 $T_{\mu\nu}$ 一般不是对称张量，下面导出的新的对称张量用 $\Theta_{\mu\nu}$ 表示，从 $M_{\sigma\rho}$ 的表达式中消去 $S$ 部分就看出来了。首先，根据(10.2.49)式得到

$$T_{\sigma\rho} - T_{\rho\sigma} = \frac{\partial}{\partial x_\mu} S_{\mu\sigma\rho} , \tag{10.2.51}$$

注意到这点就可以定义新的 $\Theta_{\mu\nu}$

$$\Theta_{\mu\nu} \equiv T_{\mu\nu} + \frac{\partial}{\partial x_\rho} G_{\rho\mu\nu} , \tag{10.2.52}$$

其中

$$G_{\rho\mu\nu} = \frac{1}{2}(S_{\rho\mu\nu} + S_{\mu\nu\rho} + S_{\nu\mu\rho}) = -G_{\mu\rho\nu} , \tag{10.2.53}$$

用 $\Theta_{\mu\nu}$ 来代替 $T_{\mu\nu}$。它满足与 $T_{\mu\nu}$ 相同的局域守恒公式

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \Theta_{\mu\nu} = 0 . \tag{10.2.54}$$

略去详细说明，注意(10.2.53)式中 $G$ 的反对称性，显然可以用新的 $\Theta_{\mu\nu}$ 把 $P_\mu$ 和 $M_{\mu\nu}$ 表示为

$$P_\nu = \int d\sigma_\mu \Theta_{\mu\nu} , \tag{10.2.40'}$$

$$M_{\sigma\rho} = \int d\sigma_\mu (x_\rho \Theta_{\mu\sigma} - x_\sigma \Theta_{\mu\rho}) . \tag{10.2.50'}$$

上面叙述的四维平移和旋转，总称非齐次洛伦兹变换，根据在此变换下理论的不变性，显然可导出十个守恒量 $P_\mu$ 和 $M_{\mu\nu}$。另一方面，通过拉格朗日密度函数的形式来看看这种**不变性条件**。因为在四维平移或旋转时有 $\dfrac{\partial}{\partial x_\mu}\delta x_\mu = 0$，所以(10.2.15)式中右边第一项是零。因此，系统的不变性显然意味着 $L$ 的下述不变性：

$$\delta L = L(u'(x'), u'_{,\mu}(x')) - L(u(x), u_{,\mu}(x)) = 0。\quad (10.2.55)$$

(iii) 标度变换　下面，我们来考虑不改变时空尺度的标度变换。再次把 $\varepsilon$ 取为无限小参数，有

$$x_\mu \to x'_\mu = x_\mu/(1+\varepsilon) = x_\mu - \varepsilon x_\mu。\quad (10.2.56)$$

采用 $\hbar = c = 1$ 的单位制，场 $u_A(x)$ 具有本征长度的某个幂的量纲，把这个幂记为 $D_A$，有

$$u_A(x) \to u'_A(x') = (1+\varepsilon)^{D_A}u_A(x) = (1 + D_A\varepsilon)u_A(x)。\quad (10.2.57)$$

因此，与 $Q_{\mu i}$ 对应的四维流是

$$\begin{aligned} S_\mu(x) &= -\sum_A \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}}(D_A u_A + u_{A,\sigma}x_\sigma) + Lx_\mu \\ &= -T_{\mu\sigma}x_\sigma - \sum_A D_A \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}}u_A, \end{aligned} \quad (10.2.58)$$

这时也应像 $M_{\mu\nu}$ 那样，用一个新能量·动量张量 $\Theta_{\mu\nu}$ 替换第一项的 $T_{\mu\sigma}$，再在一定条件下消去第二项。但是，在这里，上述做法不成立。

(iv) **规范变换与四维流**　作为最后一个例子，让我们来考虑，不伴随有坐标变换的场的常位相变换

$$u_A(x) \to u'_A(x') = e^{i\lambda_A\delta\omega}u_A(x)。\quad (10.2.59)$$

其中 $\delta\omega$ 是无限小参数，$\lambda_A$ 是各个场 $u_A$ 的特有的常数，称之为荷，实场时，$\lambda_A = 0$。由此导出与 $Q_{\mu i}$ 对应的四维流 $j_\mu(x)$ 为

$$j_\mu(x) = -i\sum_A \lambda_A \frac{\partial L(x)}{\partial u_{A,\mu}}u_A(x)。\quad (10.2.60)$$

若系统在此规范变换时不变，则得到电流守恒等早已清楚了解的

流守恒公式

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} j_\mu(x) = 0, \tag{10.2.61}$$

以及作为守恒量的总电荷

$$Q = \int d\sigma_\mu j_\mu(x) = \int d^3x j_0(x). \tag{10.2.62}$$

## §10.3 场的正则量子化

### a) 正则变量和量子化

像 §10.1,c)中讨论的那样,场量子化时,首先必须找出系统的正则变量. 当时用适当的正交函数系$\{\varphi_i(x)\}$把 $\psi_{c1.}(x,t)$ 展开,用这个展开系数 $c_i(t)$ 作为广义坐标.然而,这里将像 § 10.2,a)中推导拉格朗日运动方程时那样,采用场量 $u_A(x,x_0)$ 本身以 $r \equiv (A,x)$ 为标志作为广义坐标. 不过,用连续的标记难以讨论下面的量子化,于是,把三维空间分割成微小的体积元,这些体积元用 $s$ 编号,这样就把上述标记离散化了. 各个体积元的平均位置为 $x^{(s)}$,体积是 $\delta^3x^{(s)}$. 这时对场量做替换

$$\left.\begin{aligned} & u_A(x,x_0) \to u^s_A(x_0) \\ & \frac{\partial}{\partial x_i} u_A(x,x_0) \to \frac{u^{s+1}_A(x_0) - u^s_A(x_0)}{\delta x_i} \\ & \frac{\partial}{\partial x_0} u_A(x,x_0) \to \frac{\partial}{\partial x_0} u^s_A(x_0) \end{aligned}\right\}, \tag{10.3.1}^{1)}$$

把(10.2.4)式中的 $\bar{L}$ 写成下面形式:

$$\bar{L} = \sum_s \delta^3x^s L^{(s)}, \tag{10.3.2}$$

其中,

$$L^{(s)} = L\left(u^s(x_0), \frac{u^{s+1}(x_0) - u^s(x_0)}{\delta x_i}, \frac{\partial}{\partial x_0} u^s(x_0)\right). \tag{10.3.3}$$

---

1) $s+1$ 代表了与第 $s$ 个体积元相邻一个体积元.

在这儿，同质点系力学的情形一样，定义下述广义动量 $\{\pi^s_A(x_0)\}$：

$$\Pi^s_A(x_0) = \partial \bar{L}/\partial u^s_{A,0} = \delta^3 x^s \pi^s_A(x_0), \tag{10.3.4}$$

$$\pi^s_A(x_0) \equiv \partial L^{(s)}/\partial u^s_{A,0}. \tag{10.3.5}$$

为使变量组 $\{u^s_A(x_0), \pi^s_A(x_0)\}$ 成为正则变量，必须解(10.3.4)式，以便用这些变量把 $\dfrac{\partial}{\partial x_0} u^s_A(x_0)$ 表示出来．要使这成为可能，必要条件是

$$\left| \frac{\partial^2 \bar{L}}{\partial u^s_{A,0} \partial u^s_{A',0}} \right| \neq 0. \tag{10.3.6}$$

当上述行列式为零，即所谓 $\bar{L}$ 奇异时，变量 $(u^s_A, \Pi^s_A)$ 互相不独立，对应于这个行列式的秩，在那些变量之间就出现几个**约束条件**．这种情况下，绝对必要特别注意下面关于量子化的讨论，关于这点的详细讨论留待第十一章进行．因此，下面以(10.3.6)式成立为前提进行讨论．

系统的哈密顿量由下式给出：

$$\bar{H}_\delta = \sum_s \delta^3 x^s \left( \sum_A \pi^s_A(x_0) u^s_{A,0}(x_0) - L^{(s)} \right), \tag{10.3.7}$$

在 $\delta^3 x^s \to 0$ 极限，它变成

$$\bar{H} = \int d^3 x H(x), \tag{10.3.8}$$

$$H(x) = \sum_A \pi_A(x) u_{A,0}(x) - L = T_{00}, \tag{10.3.9}$$

与(10.2.40)式的 $P_0$ 一致．把(10.3.9)式中的 $H(x)$ 称为哈密顿**量密度**．把 $\bar{H}_\delta$ 中的 $u^s_{A,0}$ 用正则变量写出来，通过泊松括号，哈密顿正则运动方程为

$$\left.\begin{aligned} \frac{d}{dx_0} u^s_A(x_0) &= \{u^s_A(x_0), \bar{H}_\delta\}_{\text{Poiss.}} = \frac{\partial \bar{H}_\delta}{\partial \Pi^s_A(x_0)} \\ \frac{d}{dx_0} \Pi^s_A(x_0) &= \{\Pi^s_A(x_0), \bar{H}_\delta\}_{\text{Poiss.}} = \frac{-\partial \bar{H}_\delta}{\partial u^s_A(x_0)} \end{aligned}\right\}. \tag{10.3.10}$$

取 $\delta^3 x^s \to 0$ 时的极限

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x_0}u_A(x)&=\frac{\delta\bar{H}}{\delta\pi_A(x)}\\ \frac{\partial}{\partial x_0}\pi_A(x)&=\frac{-\delta\bar{H}}{\delta u_A(x)}\end{aligned}\right\}. \tag{10.3.11}$$

可以把$\bar{H}$看成是函数$u_A(x)$和$\pi_A(x)$的函数，因而上式右边的微商表达式是一个泛函微商，具有下面含义：

$$\frac{\delta\bar{H}}{\delta u_A(x)}\equiv\lim_{\delta\to 0}\frac{1}{\delta^3x^s}\frac{\partial\bar{H}_\delta}{\partial u'_A(x_0)}\Big|_{x^s=x}$$

$$=\frac{\partial H(x)}{\partial u_A(x)}-\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial H(x)}{\partial u_{A,i}(x)}. \tag{10.3.12}$$

同样

$$\frac{\delta\bar{H}}{\delta\pi_A(x)}\equiv\lim_{\delta x\to 0}\frac{1}{\delta^3x^s}\frac{\partial\bar{H}_\delta}{\partial\pi'_A(x_0)}=\frac{\partial H(x)}{\partial\pi_A(x)}. \tag{10.3.13}$$

下面来讨论**量子化**问题。§ 10.1，e)中叙述过的，“正则量子化”方法不是无条件的，而是只限于玻色统计或费米统计的情形.这时，对应于(10.1.67)式，在**玻色统计**情形假设有下述对易关系：

$$\left.\begin{aligned}&[u^s_A(x_0),\Pi^{s'}_{A'}(x_0)]=i\delta_{AA'}\delta_{ss'}\\ &[u^s_A(x_0),u^{s'}_{A'}(x_0)]=[\Pi^s_A(x_0),\Pi^{s'}_{A'}(x_0)]=0\end{aligned}\right\}. \tag{10.3.14}$$

取它在 $\delta^3x^s\to 0$ 时的极限，注意到(10.3.4)式，有

$$\left.\begin{aligned}&[u_A(x,x_0),\pi_{A'}(x',x_0)]=i\delta_{AA'}\delta^3(x-x')\\ &[u_A(x,x_0),u_{A'}(x',x_0)]=[\pi_A(x,x_0),\pi_{A'}(x',x_0)]=0\end{aligned}\right\}. \tag{10.3.15}$$

其中 $\pi_A(x,x_0)$ 是(10.3.5)式中 $\pi^s_A(x_0)$ 的极限

$$\pi_A(x,x_0)=\partial L/\partial u_{A,0}(x). \tag{10.3.16}$$

而 $\lim\limits_{\delta x\to 0}\delta_{ss'}/\delta^3x^s=\delta(x-x')$（其中 $x^s=x$，$x^{s'}=x'$）。完全一样，与(10.1.68)式对应，在**费米统计情形**，有

$$\left.\begin{aligned}&\{u_A(x,x_0),\pi_{A'}(x',x_0)\}=i\delta_{AA'}\delta(x-x')\\ &\{u_A(x,x_0),u_{A'}(x',x_0)\}=\{\pi_A(x,x_0),\pi_{A'}(x',x_0)\}=0\end{aligned}\right\}. \tag{10.3.17}$$

正如下节要说明的那样，具体的场服从什么统计的问题基本上取决于各个场自旋是整数还是半整数。

### b) 正则运动方程及其与经典理论的对应

现在让我们来考虑(10.3.15)式或(10.3.17)式中的量子化场随时间的变化.经典理论中的场当然服从哈密顿运动方程(10.3.11)，而量子化场若保证服从这个方程，就会与上面引人的对易关系矛盾。原先方程中的 $\bar{H}$ 是正则变量的函数，而过渡到量子论后，$\bar{H}$ 应该是厄米算符，必须考虑它们在乘积中的顺序。必须弄清楚泛函微商 $\delta\bar{H}/\delta u_A$ 和 $\delta\bar{H}/\delta\pi_A$ 在量子论中的定义。当实际进行微分运算时，$\bar{H}$ 中的 $u_A$ 和 $\pi_A$ 分别受到变分 $\delta u_A$ 和 $\delta\pi_A$，然而无法决定 $\delta u_A$ 和 $\delta\pi_A$ 与 $\{u_A\}$ 和 $\{\pi_A\}$ 具有什么样的对易关系，也无法决定泛函微商.

因此，一般对于不显含时间的正则变量的函数 $F(x_0)$，在质点的量子力学中就知道，有海森伯运动方程成立(§ 3.3)

$$\frac{d}{dx_0}F(x_0)=-i[F(x_0),\bar{H}]. \tag{10.3.18}$$

于是，场服从**玻色统计**情况下，将其对易关系（10.3.15）应用于(10.3.18)式右边，哈密顿运动方程显然保持那种形式，即

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x_0}u_A(x)&=-i[u_A(x),\bar{H}]=\frac{\delta\bar{H}}{\delta\pi_A}\\ \frac{\partial}{\partial x_0}\pi_A(x)&=-i[\pi_A(x),\bar{H}]=\frac{-\delta\bar{H}}{\delta u_A}\end{aligned}\right\}. \tag{10.3.19}$$

其中泛函微商时，$\delta u_A$、$\delta\pi_A$ 与 $\{u_A\}$、$\{\pi_A\}$ 对易，上面最后一个等号成立。下面来看服从费米统计的场，(10.3.19)式中头一等号成立，是(10.3.18)式的要求，为了完成这儿出现的 $u_A$ 和 $\pi_A$ 与 $\bar{H}$ 的**反对易关系**的计算，有必要适当应用下面清楚了解的两个恒等式：

$$\left.\begin{aligned}[A,BC]&=[A,B]C+B[A,C]\\ [A,BC]&=\{A,B\}C-B\{A,C\}\end{aligned}\right\}, \tag{10.3.20}$$

将其归结于正则变量之间的**对易关系**，经过简单的考察发现，为

使其成为可能，$\bar{H}$ 可以由偶数个服从费米统计的场的积构成.实际上，这样的 $\bar{H}$ 的构造，可以由下节看到的自旋与统计的关系保证.另一方面，在做泛函微商时，取 $\delta u_A, \delta\pi_A$ 与 $\{u_A\}, \{\pi_A\}$ 全反对易(意味着 $\{\pi_A, \delta u_A\} = 0$，等等)，因此，若把 $\delta u_A$ 移到各项的右端，把 $\delta\pi_A$ 移到各项的左端，分别定义泛函微商 $\delta\bar{H}/\delta u_A$ 和 $\delta\bar{H}/\delta\pi_A$，则可确定，(10.3.19)式最后一个等号成立.

海森伯运动方程(10.3.18)表明，$F(x_0)$ 随时间的变化可以用下述么正变换显示出来:

$$F(x_0) = e^{i\bar{H}(x_0-\bar{x}_0)}F(\bar{x}_0)e^{-i\bar{H}(x_0-\bar{x}_0)}. \qquad (10.3.21)$$

因此，若场的对易关系(10.3.15)或(10.3.17)在某时刻成立，则在其它时刻会自动保证成立.

### c) 量子化场的无限小变换及生成元

现在，再来看(10.3.18)式，系统的哈密顿量 $\bar{H}$ 显然起着无限小时间平移生成元 (generator)[1] 的作用. 另一方面，$\bar{H}$ 是 §10.2 诺芝定理导出的(10.2.31)式中 $\bar{Q}_i$ 的一员. 因此，我们推测，不仅 $\bar{H}$ 而且 $\bar{Q}_i$ 一般都是可观测量，它们具有量子化场的无限小变换(10.2.12)的生成元的性质. 于是，先在玻色统计的情况下算一算 $i[u_A(x), \bar{Q}_i(x_0)]$. 而 $\sigma$ 可以是通过 $x_\mu$ 的任意"类空"超曲面，为简单，取 $\bar{Q}_i(x_0) = \int d^3x' Q_{0i}(x', x_0)$. 与 $\bar{H}$ 对应，(10.3.19)式变成

$$\begin{aligned} i[u_A(x), \bar{Q}_i(x_0)] &= -\frac{\delta\bar{Q}_i(x_0)}{\delta\pi_A(x)} = -\frac{\partial Q_{0i}(x)}{\partial\pi_A(x)} \\ &= -\frac{\partial}{\partial\pi_A(x)}\Big\{\sum_{A'}\pi_{A'}(x)(-\Psi_{A'i} \\ &\quad + u_{A',\sigma}X_{\sigma i}) - LX_{0i}\Big\} \\ &= \left(\Psi_{Ai} - \frac{\partial u_A}{\partial x_\sigma}X_{\sigma i}\right) \end{aligned}$$

1) 在本卷其它章把 generator 译为产生算符. 在本章和下一章，因为 creation operator 叫产生算符，为了避免混淆，将前者改译成生成元.

$$-\left(\sum_{A'}\pi_{A'}\frac{\partial}{\partial\pi_A}u_{A',0}-\frac{\partial L}{\partial\pi_A}\right)X_{0i},$$

其中已经用到了 $\partial\Psi_{A'i}/\partial\pi_A(x)=0$。注意,最后式子中第二项括号内的量恒等于零,于是,最终得

$$i\left[u_A(x),\ \sum_i\bar{Q}_i(x_0)\delta\omega_i\right]=\delta u_A(x)。\qquad(10.3.22)$$

其中右边的 $\delta u_A(x)$ 是

$$\begin{aligned}\delta u_A(x)&=u_A(x)-u_A(x)\\&=\sum_i(\Psi_{Ai}-u_{A,\sigma}X_{\sigma i})\delta\omega_i,\end{aligned}\qquad(10.3.23)$$

值得注意的是,它与(10.2.13)式或(10.2.18)式中的 $\bar{\delta}u_A(x)=u'_A(x')-u_A(x)$ 不同。

即使是服从费米统计的场,只要像在 b) 中对 $\bar{H}$ 所要求的那样,$\bar{Q}_i$ 是偶数个服从费米统计的场的积构成,上述关系式就原封不动地成立。

(10.3.22)式可以写成下面的形式:

$$e^{i\sum_i\bar{Q}_i(x_0)\delta\omega_i}u_A(x)e^{-i\sum_i\bar{Q}_i(x_0)\delta\omega_i}=u'_A(x)。\qquad(10.3.24)$$

也就是说,若可观测量 $\bar{Q}_i$ 是厄米算符,则 $u'_A(x)$ 和 $u_A(x)$ 通过幺正变换联系起来了,$\bar{Q}_i$ 就是此变换的生成元。而用上面讨论可知,即使 $\bar{Q}_i$ 不是守恒量,它也具有生成元 $\bar{Q}_i(x_0)$的性质,这是必须注意的。

作为(10.3.24)式的具体例子,考虑 § 10.2 的(i)、(ii)考察过的无限小**洛伦兹变换**。

$$x_\mu\to x'_\mu=x_\mu+\varepsilon_\mu+\delta\omega_{\mu\nu}x_\nu,\qquad(10.3.25)$$

与其对应的幺正算符是

$$U(\varepsilon,\delta\omega)=\exp i\left(P_\mu\varepsilon_\mu+\frac{1}{2}M_{\mu\nu}\delta\omega_{\mu\nu}\right)。\qquad(10.3.26)$$

场量 $u_A(x)$ 按照下式变换:

$$U(\varepsilon,\delta\omega)u_A(x)U^{-1}(\varepsilon,\delta\omega)=u'_A(x)$$

$$= \left(1 - \varepsilon_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu}\right) u_A(x) + \frac{1}{2} \delta\omega_{\sigma\rho} \sum_B \left\{ \delta_{AB} \left( x_\sigma \frac{\partial}{\partial x_\rho} \right.\right.$$

$$\left.\left. - x_\rho \frac{\partial}{\partial x_\sigma} \right) + S^B_{A\sigma\rho} \right\} u_B(x). \tag{10.3.27}$$

最后这个表达式说明，$U(\varepsilon, \delta\omega)$ 实际上借助于四维时空中的平移和旋转(自旋与轨道)产生了场的变化。这时的平移、旋转生成元 $P_\mu$、$M_{\mu\nu}$ 还互相构成下面的封闭对易关系，或代数**环**

$$[P_\mu, P_\nu] = 0, \tag{10.3.28}$$

$$[M_{\mu\nu}, M_{\lambda\sigma}] = i(\delta_{\mu\sigma} M_{\lambda\nu} + \delta_{\mu\lambda} M_{\nu\sigma} + \delta_{\nu\sigma} M_{\mu\lambda} + \delta_{\lambda\nu} M_{\sigma\mu}), \tag{10.3.29}$$

$$[P_\lambda, M_{\mu\nu}] = -i(P_\nu \delta_{\mu\lambda} - P_\mu \delta_{\nu\lambda}). \tag{10.3.30}$$

在左边对易关系中，若把一个看成生成元，则(10.3.28)式表明 $P_\mu$ 是平移不变量，(10.3.29)式和(10.2.30)式说明，$M_{\mu\nu}$ 和 $P_\lambda$ 分别是四维旋转下的二阶张量和矢量。

满足上述对易关系的 $P_\mu$ 和 $M_{\mu\nu}$ 的**表示**给出了洛伦兹群的表示，有关问题留待本讲座第十卷《基本粒子理论》第十二章再讨论。

## §10.4 自由场的量子论

实际上我们关心的量子化场方程一般包含有非线性相互作用项，这反映了构成自然界的成分之间的复杂相互作用。另一方面，识别基本粒子（它们是否由更基本的东西组成是另一个问题)时，与其依靠它们的通过相互作用才具有的属性，例如，强弱相互作用的有无、电荷种类等等，还不如依靠与相互作用无关而与自由粒子结合在一起的质量、自旋等重要性质。实际上，大部分基本粒子都可以近似地理解为处于自由粒子的运动状态，以往的场论就是这么处理的。也就是说，用称之为微扰论的方法，先建立自由场量子论，再将相互作用的影响看成是微扰。在相互作用具有特殊结构，并且相互作用常数很小的量子电动力学中，这个方法取得了惊人

的成功。最近，在各个领域都试探了场论的非微扰方法，但是，它们的基本概念都没有脱离自由场的量子论。

如上所述，把自由场看成是消除了相互作用的假想世界，无论是电子、$\mu$子还是核子，不考虑它们的内部构造，除了质量不同之外，均由自旋 $\frac{1}{2}$ 的狄拉克波动方程描述。也就是说，上面讲过的那些自由场的性质，基本上是在洛伦兹变换下变换性质的不同体现，即可看成是洛伦兹群表示多样性的一种表现形式，可以根据**质量**和**自旋**而标志其特征(参看本讲座第十卷《基本粒子理论》第十二章)。

本节开始以自旋为零、具有有限质量 $m$（取其等于 $\hbar\kappa/c$ 时，$\kappa^{-1}$ 就是康普顿波长)的标量场为中心内容，具体讨论上一节的量子化内容，然后简述自旋 $\frac{1}{2}$ 的狄拉克场。而辐射场的量子论要等到下一章考察多时间理论时处理。

### a） 标量场理论

标量场满足克莱因-戈登波动方程

$$(\Box - \kappa^2)\phi(x) = 0 \quad \left(\Box = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_0^2}\right), \qquad (10.4.1)$$

历史上，这是德布罗意为物质波建立的。之后，薛定谔、克莱因、泡利、威斯科夫等许多人都研究过。服从这个简单二阶相对论微分方程的标量场像 § 10.1 所叙述的那样，不能解释为德布罗意波的几率幅，只有把它解释为汤川理论(1935 年)中出现的 $\pi$ 介子的量子化场，才使其获得了现实性。 $\pi$ 介子在空间反演下具有赝标量的性质，它与标量介子的不同是通过相互作用产生的，因此它们的自由场都服从(10.4.1)式。作为标量介子的候补者，后来发现了 $\sigma$ 介子（～970MeV）等几种介子(参看本讲座第十卷《基本粒子理论》第一章基本粒子表)。

把(10.4.1)式当作欧拉方程而推出来的拉氏密度函数是

$$L(x) = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\phi\right)^2 - \frac{1}{2}\kappa^2\phi^2. \tag{10.4.2}$$

其中，$\phi(x)$ 是实函数，量子化时变成厄米算符。$\phi(x)$ 的正则共轭量 $\pi(x)$ 是

$$\pi(x) = \frac{\partial L}{\partial \phi_{,0}} = \frac{\partial}{\partial x_0}\phi, \tag{10.4.3}$$

哈密顿量 $\bar{H}$ 是

$$\bar{H} = \frac{1}{2}\int d^3x\{\pi^2(x) + (\nabla\phi)^2 + \kappa^2\phi^2\}. \tag{10.4.4}$$

量子化时，既可能用玻色统计也可能用费米统计，以后再来检查费米统计的可能性，这里先采用**玻色统计**.

$$\left.\begin{aligned}&[\phi(x,x_0),\pi(x',x_0)] = i\delta(x-x')\\&[\phi(x,x_0),\phi(x',x_0)] = [\pi(x,x_0),\pi(x',x_0)] = 0\end{aligned}\right\}. \tag{10.4.5}$$

量子化了的 $\phi(x)$ 和 $\pi(x)$ 是厄米算符，(10.4.4)式中的 $\bar{H}$ 原封不动的就是厄米算符。海森伯运动方程(10.3.18)变为

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial x_0}\phi(x) = \delta\bar{H}/\delta\pi = \pi(x)\\&\frac{\partial}{\partial x_0}\pi(x) = -\delta\bar{H}/\delta\phi = \Delta\phi(x) - \kappa^2\phi(x)\end{aligned}\right\}, \tag{10.4.6}$$

与(10.4.1)式一致。 在上面泛函微商中，$\delta\phi$、$\delta\pi$ 与 $\phi$、$\pi$ 是对易的。

下面我们从同时刻场的对易关系(10.4.5)的知识出发，求任意不同时刻场的对易关系。根据下面的实际情况，这是可能的。现在考虑的是自由场，再根据时间的二阶微分方程，正象下面会看到的那样，任意时刻场的值由给定时刻场的值及其一阶时间微商的知识来定。让我们先来检验这一点。

*初值问题和不变 Δ 函数* 为了求克莱因-戈登方程(10.4.1)的普遍解，让我们来考察齐次洛伦兹变换下不变(以后往往简单地称为相对论不变)的 c 数函数解 $G(x)$ 的构造

$$(\Box - \kappa^2)G(x) = 0. \tag{10.4.7}$$

其傅里叶展开式一般写为

$$G(x)=\frac{-i}{(2\pi)^3}\int d^4kG(k)e^{ik_\mu x_\mu}。\tag{10.4.8}$$

满足相对论不变性 $G(x')=G(x)$ 的独立的解(除了常数因子之外)只有下面两个:

$$G(k)=\begin{cases}\Delta(k)=\varepsilon(k_0)\delta(k_\mu^2+\kappa^2) & (10.4.9)\\ \Delta^{(1)}(k)=i\delta(k_\mu^2+\kappa^2)。 & (10.4.10)\end{cases}$$

(10.4.10)式的相对论不变性是明显的。而(10.4.9)式包含有 $k_0$ 的符号函数 $\varepsilon(k_0)$,若 $k_\mu$ 是"类时"矢量,则齐次洛伦兹变换下 $\varepsilon(k_0)$ 不变。因此**$\kappa$限于实数**时,$\Delta(k)$也不变。反之,若 $\kappa$ 是虚数(对应于虚质量的假想粒子,称其为**快子**)时,则意味着只允许 $\Delta^{(1)}(k)$ 是傅里叶展开的可能的不变函数。根据(10.4.9)式和(10.4.10)式,$\Delta(x)$ 和 $\Delta^{(1)}(x)$ 函数有下面的奇偶性:

$$\Delta(x)=-\Delta(-x),\tag{10.4.11}$$

$$\Delta^{(1)}(x)=\Delta^{(1)}(-x)。\tag{10.4.12}$$

应用

$$\delta(k_\mu^2+\kappa^2)=\frac{1}{2\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}}\{\delta(k_0-\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2})+\delta(k_0+\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2})\},$$

可以把这些函数的具体形式写为

$$\Delta(x)=\frac{-1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}d^3\boldsymbol{k}\,\frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}}\sin\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}\,x_0e^{ikx}$$

$$=\frac{-1}{2\pi}\varepsilon(x_0)\delta(x_\mu^2)+\frac{\kappa^2}{4\pi\sqrt{-x_\mu^2}}\theta(-x_\mu^2)\varepsilon(x_0)J_1(\kappa\sqrt{-x_\mu^2}),\tag{10.4.13}$$

$$\Delta^{(1)}(x)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{k}\,\frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}}\cos\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}\,x_0e^{ikx}$$

$$=\theta(x_\mu^2)\frac{\kappa}{2\pi^2\sqrt{x_\mu^2}}K_1(\kappa\sqrt{x_\mu^2})$$

$$-\theta(-x_\mu^2)\frac{\kappa}{4\pi\sqrt{-x_\mu^2}}N_1(\kappa\sqrt{-x_\mu^2}), \tag{10.4.14}$$

其中，

$$\theta(a)=\begin{cases}1 & a>0\\ 0 & a<0.\end{cases} \tag{10.4.15}$$

$J_n$、$N_n$、$K_n$ 等是清楚了解的各类贝塞耳函数。从上面的表达式可知，$\Delta(x)$ 具有下述重要性质：

$$\Delta(x)=0,\quad x_\mu^2=x^2-x_0^2>0, \tag{10.4.16}$$

$$\frac{\partial\Delta(x)}{\partial x_0}\Big|_{x_0=0}=-\delta^3(x). \tag{10.4.17}$$

也就是说，在闵可夫斯基空间，$\Delta$ 函数在“类空”区域为零，在光锥上具有 $\delta$ 函数奇异性以及 $\theta(-x_\mu^2)\varepsilon(x_0)$ 形式的非连续性。而当 $\kappa=0$ 时，它在“类时”区域也变成零。

用上面导出的 $\Delta$ 函数，克莱因-戈登方程的初值问题化为下述公式：

$$\begin{aligned}\phi(x,x_0)&=\int d\sigma'_\mu\Delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x'_\mu}\phi(x')\\&=\int d\sigma'_\mu\Big\{\Delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x'_\mu}\phi(x')\\&\quad-\Big(\frac{\partial}{\partial x'_\mu}\Delta(x-x')\Big)\phi(x')\Big\}.\end{aligned} \tag{10.4.18}$$

为了证明上式，首先我们看到，右边与 $\sigma'$ 的选取方式无关。实际应用(10.2.32)意义下的泛函微商，再由它变成零，就容易弄清楚这一点。这里，下述 $\sigma'$ 变成 $x'_0$ 固定的平坦的面

$$\begin{aligned}\phi(x,x_0)=\int d^3x'\Big\{&\Delta(x-x',x_0-x'_0)\frac{\partial}{\partial x'_0}\phi(x',x'_0)\\&-\Big(\frac{\partial}{\partial x'_0}\Delta(x-x',x_0-x'_0)\Big)\phi(x',x'_0)\Big\}.\end{aligned} \tag{10.4.18'}$$

进而在上式中选 $x'_0=x_0$，根据(10.4.16)式，上式右边第一项消失，根据(10.4.17)式，第二项变成 $\phi(x,x_0)$，结果，证明了(10.4.18)

式。

正如在图 10.4 中看到的那样，表达式(10.4.18)意味着，在 $x_\mu$ 处场的值能够用以 $x_\mu$ 为原点在过去区域（或未来区域）内画出的任意空间超曲面 $\sigma$ 上场的值及其时间方向（垂直于超曲面方向）上的微商来表示。这点表明，服从克莱因-戈登波动方程的波的传播满足**相对论的因果律**。

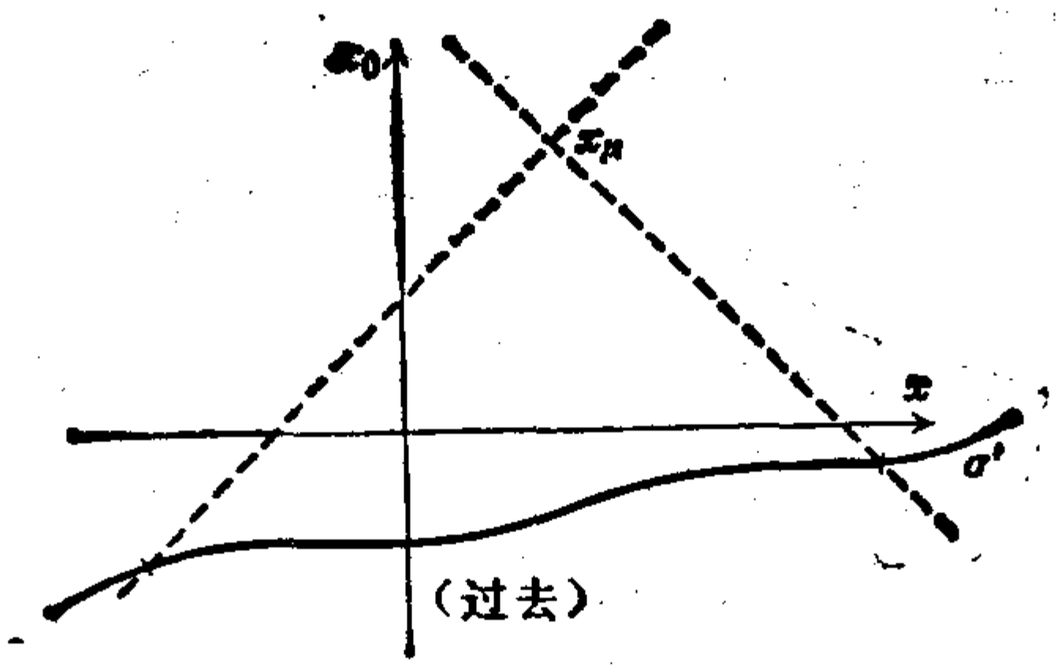



图 10.4

应用上述结果，不同时刻场的对易关系可由同时刻的相应的对易关系给出。而后者可用前面从玻色统计得来的对易关系(10.4.5)，最后得

$$[\phi(\boldsymbol{x},x_0),\phi(\boldsymbol{x}',x_0')]=i\Delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',x_0-x_0'). \quad (10.4.19)$$

上面结果表明，相互间有“类空”关系两点的场量是对易的。因而也就保证了，“类空”两点处物理量可以同时观测。总之这意味着，一处观测所引起的影响不可能以超过光速的速度传播而扰乱另一处的观测。

因此，在上述初值问题的公式(10.4.18)中，不只场要量子化，而且，由于量子化过程不依赖于场的统计性质而成立，因此，若在(10.4.5)式时用费米型对易关系量子化，就会导出下面的结果：

$$\{\phi(\boldsymbol{x},x_0),\phi(\boldsymbol{x}',x_0')\}=i\Delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',x_0-x_0'). \quad (10.4.20)$$

但是，这样显然会出现矛盾。也就是说，像在(10.4.11)式中看到的那样，$\Delta$ 函数是 $x$ 的奇函数，而(10.4.20)式的左边是 $x$ 的偶函数。

**这就说明了，要求标量场服从费米统计与克莱因-戈登运动规律矛盾。**

下面变换到粒子占有数表象。这时最简单的是动量表象。把(10.4.1)式的解 $\phi(x)$ 做傅里叶展开：

$$\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^4k U(\boldsymbol{k}, k_0)\delta(k_\mu^2 + \kappa^2) e^{ik_\mu x_\mu}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{2\omega(k)} \{U(\boldsymbol{k}, \omega) e^{i(\boldsymbol{k}\cdot x - \omega x_0)}$$

$$+ U(-\boldsymbol{k}, -\omega) e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot x - \omega x_0)}\}. \qquad (10.4.21)$$

其中 $\omega(k)$（或简写成 $\omega$）为

$$\omega(k) = \sqrt{\boldsymbol{k}^2 + \kappa^2}. \qquad (10.4.22)$$

使 $\phi(x)$ 成为厄米的条件是

$$U(\boldsymbol{k}, \omega(k)) = U^\dagger(-\boldsymbol{k}, -\omega(k)). \qquad (10.4.23)$$

把(10.4.21)式代入(10.4.19)式，比较两边同类的项，就导出下面的对易关系：

$$\left.\begin{aligned} [U(\boldsymbol{k}, \omega(k)), U^\dagger(\boldsymbol{k}', \omega(k'))] &= 2\omega(k)\delta^3(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \\ [U(\boldsymbol{k}, \omega(k)), U(\boldsymbol{k}', \omega(k'))] &= 0 \end{aligned}\right\}. \qquad (10.4.24)$$

现在引进新的算符

$$a(\boldsymbol{k}) \equiv U(\boldsymbol{k}, \omega(k))/\sqrt{2\omega(k)}, \qquad (10.4.25)$$

有

$$\phi = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{\sqrt{2\omega(k)}} \{a(\boldsymbol{k}) e^{i(\boldsymbol{k}\cdot x - \omega x_0)} + a^\dagger(k) e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot x - \omega x_0)}\}, \qquad (10.4.26)$$

$$\left.\begin{aligned} [a(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')] &= \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \\ [a(\boldsymbol{k}), a(\boldsymbol{k}')] &= 0 \end{aligned}\right\}. \qquad (10.4.27)$$

下面在动量空间中再引入任意正交函数系 $\{f_n(\boldsymbol{k})\}$

$$\int d^3\boldsymbol{k} f_n^*(\boldsymbol{k}) f_m(\boldsymbol{k}) = \delta_{mn}, \qquad (10.4.28)$$

把 $a(\boldsymbol{k})$ 展开为

$$a(\boldsymbol{k}) = \sum_n c_n f_n(\boldsymbol{k}), \tag{10.4.29}$$

$$c_n \equiv \int d^3\boldsymbol{k} f_n^*(\boldsymbol{k}) a(\boldsymbol{k}). \tag{10.4.30}$$

根据(10.4.27)式,有

$$\left.\begin{aligned} [c_n, c_m^\dagger] &= \delta_{mn} \\ [c_n, c_m] &= [c_n^\dagger, c_m^\dagger] = 0 \end{aligned}\right\}. \tag{10.4.31}$$

其中 $c_n$ 和 $c_n^\dagger$ 无非是(9.2.19)型的湮没和产生算符。实际上,$a(\boldsymbol{k})$ 和 $a^\dagger(\boldsymbol{k})$ 本身就分别是动量为 $\boldsymbol{k}$ 的粒子的湮没和产生算符,然而,正像在质点量子力学中知道的那样,动量严格确定的状态不可能归一化,不允许用做量子力学的状态。于是,像在 § 10.2 节配位空间中所做的那样,把三维动量空间分割成微小体积元,用离散的角标 $n$ 把它们编号。若选择上述正交函数系 $f_n(\boldsymbol{k})$ 这样归一化,即除了体积元 $n$(其平均动量为 $\boldsymbol{k}^{(n)}$) 之外它处处为零,则可以把(10.4.30)式中的 $c_n$ 看成是动量大致为 $\boldsymbol{k}_n$ 的粒子的湮没算符。以后将其记为 $c(\boldsymbol{k}^{(n)})$。

根据(10.2.40)式和(10.2.38)式,系统的能量·动量 $P_\mu$ 是

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{P}_i &= \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x}\left[\left(\frac{\partial\phi(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}\right)\frac{\partial\phi}{\partial x_0} + \frac{\partial\phi}{\partial x_0}\frac{\partial\phi}{\partial x_i}\right] \\ \boldsymbol{P}_0 &= \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x}\left[\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_0}\right)^2 + (\nabla\phi)^2 + \kappa^2\phi^2\right] \end{aligned}\right\}. \tag{10.4.32}$$

用产生、湮没算符写为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{P}_i &= \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{k} k_i (a^\dagger(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k}) + a(\boldsymbol{k})a^\dagger(\boldsymbol{k})) \\ &= \frac{1}{2}\sum k_i^{(n)}(c^\dagger(\boldsymbol{k}^{(n)})c(\boldsymbol{k}^{(n)}) + c(\boldsymbol{k}^{(n)})c^\dagger(\boldsymbol{k}^{(n)})) \\ &= \sum_n k_i^{(n)}\left(N(\boldsymbol{k}^{(n)}) + \frac{1}{2}\right), \end{aligned} \tag{10.4.33}$$

$$\boldsymbol{P}_0 = \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{k}\omega(k)(a^\dagger(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k}) + a(\boldsymbol{k})a^\dagger(\boldsymbol{k}))$$

$$= \sum_n \omega(k^{(n)})\left( N(\boldsymbol{k}^{(n)}) + \frac{1}{2}\right). \tag{10.4.34}$$

其中

$$N(\boldsymbol{k}^{(n)}) = c^\dagger(\boldsymbol{k}^{(n)})c(\boldsymbol{k}^{(n)}) \tag{10.4.35}$$

是动量为 $\boldsymbol{k}^{(n)}$ 的粒子的粒子数算子。 $P_i$ 和 $P_0$ 的最后表达式中 $N(\boldsymbol{k}^{(n)})$ 的旁边有一个 $\frac{1}{2}$，这是调换 $c(\boldsymbol{k}^{(n)})c^\dagger(\boldsymbol{k}^{(n)})$ 积的次序得到粒子数算子时产生的，它带来了**真空起伏能量**。实际上，用下式定义真空态：

$$\left.\begin{aligned} &a(\boldsymbol{k})|0\rangle = 0 \ (\text{或 } c(\boldsymbol{k}^{(n)})|0\rangle = 0) \\ &\langle 0|0\rangle = 1 \end{aligned}\right\}. \tag{10.4.36}$$

这确实是 $P_0$ 的最低本征态，然而，其本征值为**无限大**

$$P_0|0\rangle = \left(\sum_n \omega(k^{(n)}/2\right)|0\rangle. \tag{10.4.37}$$

对于动量，有

$$P_i|0\rangle = \left(\sum_n k_i^{(n)}/2\right)|0\rangle, \tag{10.4.38}$$

其本征值一般是不定的。在谐振子量子力学中就知道了真空起伏能。从上面 $P_0$ 的构成可以看出，实际的标量场可以看成是频率不同的**无数谐振子的集合**。但是，由于场的这种无限自由度，真空起伏中出现了上面那样的无限大或不定性。因此，从经典理论向量子论过渡时，假定要对物理量施以下述**正规乘积**的程序。所谓正规乘积就是：用产生和湮没算符写出构成场的物理量 $O$ 时，这些算符或者是对易的(玻色统计时)，或者是反对易的(费米统计时)，在各项中全部产生算符都要位于所有湮没算符的左边，把它记成 $:O:$。应用于 $P_\mu$，得到

$$P_i = \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x} :\left\{\frac{\partial\phi(x)}{\partial x_k}\frac{\partial\phi}{\partial x_0} + \frac{\partial\phi}{\partial x_0}\frac{\partial\phi}{\partial x_k}\right\}:$$

$$= \sum_n k_i^{(n)} N(\boldsymbol{k}^{(n)}). \tag{10.4.33'}$$

$$P_0 = \frac{1}{2}\int d^3x : \left\{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_0}\right)^2 + (\nabla\phi)^2 + \kappa^2\phi^2\right\} :$$

$$= \sum_n \omega(k^{(n)})N(k^{(n)}). \qquad (10.4.34')$$

现在注意某特定的 $k^{(n)}$，将其记为 $k$. $N(k)$ 的本征态

$$|n(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(k)!}} c^\dagger(k)^{n(k)}|0\rangle \qquad (10.4.39)$$

也是 $P_\mu$ 的本征态

$$P_\mu|n(k)\rangle = (k_\mu \cdot n(k))|n(k)\rangle. \qquad (10.4.40)$$

具有本征值 $(k_\mu n(k))$，其中 $k_\mu = (k, i\omega(k))$. 从(10.4.40)式可以清楚地看出量子化标量场的“量子性”.

场的真空期待值　从(10.4.26)、(10.4.27)和(10.4.36)诸式容易推导出下述结果：

$$\langle 0|\phi(x)\phi(x')|0\rangle = i\Delta^{(+)}(x - x'). \qquad (10.4.41)$$

其中 $\Delta^{(+)}(x)$ 是 (10.4.13) 式中 $\Delta(x)$ 函数的正频部分，与负频部分 $\Delta^{(-)}(x)$ 有下述关系：

$$\Delta(x) = \Delta^{(+)}(x) + \Delta^{(-)}(x), \qquad (10.4.42)$$

$$\Delta^{(+)}(x) = -\Delta^{(-)}(-x) = \frac{-i}{(2\pi)^3}\int_{k_0>0} d^4k\delta(k_\sigma^2 + \kappa^2)e^{ik_\mu x_\mu}$$

$$= \frac{-i}{(2\pi)^3}\int \frac{d^3k}{2\omega(k)} e^{i(k\cdot x - \omega(k)x_0)}$$

$$= \frac{-\varepsilon(x_0)}{4\pi}\delta(x_\mu^2) - \theta(x_\mu^2)\frac{i\kappa}{4\pi^2\sqrt{x_\mu^2}}K_1(\kappa\sqrt{x_\mu^2})$$

$$+ \frac{i\kappa}{8\pi\sqrt{-x_\mu^2}}\theta(-x_\mu^2)\{N_1(\kappa\sqrt{-x_\mu^2})$$

$$- i\in(x_0)J_1(\kappa\sqrt{-x_\mu^2})\}. \qquad (10.4.43)$$

根据(10.4.43)式的性质，有

$$\langle 0|\{\phi(x), \phi(x')\}|0\rangle = \Delta^{(1)}(x - x'). \qquad (10.4.44)$$

其中，$\Delta^{(1)}(x)$ 是(10.4.14)式定义的函数，它满足

$$\Delta^{(1)}(x) = i(\Delta^{(+)}(x) - \Delta^{(-)}(x)). \qquad (10.4.45)$$

标量场的局域性　在§10.1，由**非相对论**多粒子系统的量子力学导出的二次量子化场 $\phi(x)$，具有局域于空间点 $x$ 的粒子湮没算符的性质。现在，**相对论**标量场是(10.4.18)式中那样的传播波，在对易关系(10.4.19)条件下，规定了在光锥上具有奇异性的不变函数 $\Delta(x)$，从而表明它也具有上述意义下的局域性。现在来看状态

$$|x\rangle = \phi(x,0)|0\rangle, \tag{10.4.46}$$

它不再具有(10.1.6)式中看到的那种正交性

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \tag{10.1.6'}$$

根据(10.4.43)式，变成

$$\langle x|x'\rangle = i\Delta^{(+)}(x-x',0) = \frac{\kappa}{4\pi^2|x-x'|}K_1(\kappa|x-x'|). \tag{10.4.47}$$

其中，$K_1(\kappa r)$ 是变形贝塞耳函数，当 $r\to\infty$ 时，它像 $e^{-\kappa r}$ 一样指数衰减。正如§10.1，c)中所述，在这种相对论标量场中，不可能从场 $\phi(x)$ 得到局域的满足正交性(10.1.6)的基矢 $|x_1,x_2,\cdots,x_N\rangle$，因而无法在组态空间中的概率幅里引入相对论。关于这点，牛顿-维格纳在1949年就已作过详细研究。

### b)　复标量场

在 $\phi(x)$ 是复函数的情况下，若用两个实函数 $\phi_1(x)$ 和 $\phi_2(x)$，即若令 $\phi(x)=(\phi_1(x)+i\phi_2(x))/\sqrt{2}$，则可以将其归于 a) 的情形来进行讨论。只是与 $\phi_1$ 和 $\phi_2$ 之间变换自由度相对应，增加了新的物理内容。

这时的拉氏密度函数为

$$L(x) = -\frac{\partial\phi^*(x)}{\partial x_\mu}\frac{\partial\phi(x)}{\partial x_\mu} - \kappa^2\phi^*(x)\phi(x)$$

$$= \sum_{i=1,2}\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi^{(i)}}{\partial x_\mu}\right)^2 - \frac{1}{2}\kappa^2(\phi^{(i)})^2\right\}. \tag{10.4.48}$$

正则变量是 $\{\phi(x),\phi^*(x);\pi(x)=\partial\phi^*(x)/\partial x_0,\pi^*(x)=\partial\phi(x)/\partial x_0\}$，按照玻色统计量子化的结果，与 a)中的讨论相同，

$$[\phi(x),\phi^\dagger(x')]=i\Delta(x-x'). \tag{10.4.49}$$

其中，$\phi^\dagger(x)=(\phi_1-i\phi_2)/\sqrt{2}$，在量子化阶段与 $\phi(x)$ 对应，它们互为厄米共轭。与(10.4.26)式相应，对 $\phi$ 和 $\phi^\dagger$ 做傅里叶展开，

$$\left.\begin{aligned}\phi(x)&=(2\pi)^{-3/2}\int\frac{d^3k}{\sqrt{2\omega(k)}}\{a(k)e^{i(k\cdot x-\omega x_0)}+b^\dagger(k)e^{-i(k\cdot x-\omega x_0)}\}\\ \phi^\dagger(x)&=(2\pi)^{-3/2}\int\frac{d^3k}{\sqrt{2\omega(k)}}\{b(k)e^{i(k\cdot x-\omega x_0)}+a^\dagger(k)e^{-i(k\cdot x-\omega x_0)}\}\end{aligned}\right\},\tag{10.4.50}$$

$\phi^{(1)}$、$\phi^{(2)}$ 的算符与 $a(k)$、$b(k)$ 的关系是

$$\left.\begin{aligned}a(k)&=(a^{(1)}(k)+ia^{(2)}(k))/\sqrt{2}\\ b(k)&=(a^{(1)}(k)-ia^{(2)}(k))/\sqrt{2}\end{aligned}\right\}.\tag{10.4.51}$$

根据(10.4.49)式或(10.4.27)式，$a(k)$、$b(k)$ 的对易关系为

$$\left.\begin{aligned}&[a(k),a^\dagger(k')]=\delta(k-k')\\ &[b(k),b^\dagger(k')]=\delta(k-k')\\ &\text{其他对易关系全都等于零}\end{aligned}\right\}.\tag{10.4.52}$$

$L(x)$ 相对于 $\phi^{(1)}$ 和 $\phi^{(2)}$ 是对称的，在下述规范变换下：

$$\phi(x)\to\phi'(x)=e^{-i\alpha}\phi(x),\tag{10.4.53}$$

$L(x)$ 不变，即

$$\left.\begin{aligned}\phi_1\to\phi_1'&=\cos\alpha\phi_1+\sin\alpha\phi_2\\ \phi_2\to\phi_2'&=-\sin\alpha\phi_1+\cos\alpha\phi_2\end{aligned}\right\}.\tag{10.4.53'}$$

这个变换相应于，在(10.2.59)式中做置换 $\alpha=\lambda\delta\omega$，守恒的四维流 $j_\mu(x)$ 为

$$j_\mu(x)=i\lambda:\phi^\dagger(x)\frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial x_\mu}\phi(x):=i\lambda:\phi_1(x)\frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial x_\mu}\phi_2(x):,\tag{10.4.54}$$

总荷 $Q$(10.2.62)为

$$Q=-\lambda\int d^3k\{a^\dagger(k)a(k)-b^\dagger(k)b(k)\},\tag{10.4.55}$$

能量动量 $P_\mu$ 由下式给出：

$$P_\mu = \int d^3\boldsymbol{k} k_\mu \{a^\dagger(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k}) + b^\dagger(\boldsymbol{k})b(\boldsymbol{k})\}. \quad (10.4.56)$$

从以上结果看出，量子化复标量场具有四维动量 $k_\mu = (\boldsymbol{k}, i\omega(k))$，包含了具有相反符号电荷的**正反粒子**的自由度。$a(\boldsymbol{k})$、$b(\boldsymbol{k})$是它们各自的湮没算符。

最后谈一点统计问题。如果在（10.4.49）式中采用费米型对易关系，那么容易看出，上面 $Q$ 和 $P_\mu$ 的表达式中 $b^\dagger b$ 项的符号要变。这个结果说明，粒子、反粒子具有的电荷相反，反粒子变成具有负能量的粒子。当然，要是允许负能粒子存在，在相互作用下系统就不会稳定，出现了非物理的结论。

### c） 狄拉克场

导出 §7.4 中狄拉克场方程(7.4.1)(其中 $\gamma_4 \equiv \gamma^0, \gamma_k \equiv -i\gamma^k$)

$$\left(\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \kappa\right)\psi(x) = 0 \quad (10.4.57)$$

的实拉氏密度函数由下式给出：

$$L = -\frac{1}{2}\left\{\bar{\psi}\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu}\psi - \frac{\partial\bar{\psi}}{\partial x_\mu}\gamma_\mu\psi\right\} - \kappa\bar{\psi}\psi, \quad (10.4.58)$$

其中 $\bar{\psi}$ 表示 $\psi^*\gamma_4$，而 $\psi$ 量子化之后，它变为 $\psi^\dagger\gamma_4$。从上述 $L$ 出发，求与广义坐标 $\psi$ 和 $\psi^*$ 对应的广义动量，得到 $\pi = i\psi^*/2$ 和 $\pi^* = -i\psi/2$，它们显然与 $\psi$ 和 $\psi^*$ 不独立。因此，像在 §10.1 e)中对 $\bar{L}$(10.1 57)讨论的那样，在上述 $L$ 中加上一项

$$\left(-\frac{1}{2}\right)(\partial/\partial x_\mu)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi),$$

得到新的 $L$

$$L = -\bar{\psi}\left(\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \kappa\right)\psi. \quad (10.4.59)$$

这时，正则变量是 $\psi(x)$ 及其共轭的

$$\pi(x) = \partial L/\partial\psi_{,0} = i\psi^*(x). \quad (10.4.60)$$

这儿既可以采用玻色统计也可以采用**费米统计**，根据前面所得的结果，我们先用费米统计

$$\left.\begin{aligned}\{\psi_\alpha(\boldsymbol{x},x_0),\psi^\dagger_\beta(\boldsymbol{x}',x_0)\}&=\delta_{\alpha\beta}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\\ \{\psi_\alpha(\boldsymbol{x},x_0),\psi_\beta(\boldsymbol{x}',x_0)\}&=0\end{aligned}\right\}. \tag{10.4.61}$$

经过与标量场情形同样的讨论，波动方程(10.4.57)的初值问题显然可以有下面的解：

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},x_0)&=\int_{\sigma'}d\sigma'_\mu\left(\gamma_\sigma\frac{\partial}{\partial x_\sigma}-\kappa\right)\Delta(x-x')\gamma_\mu\psi(x')\\&=-i\int d^3\boldsymbol{x}'\left(\gamma_\sigma\frac{\partial}{\partial x_\sigma}-\kappa\right)\Delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',x_0\\&\quad-x'_0)\gamma_4\psi(\boldsymbol{x}',x'_0).\end{aligned} \tag{10.4.62}$$

综合(10.4.61)和(10.4.62)两式，得到任意时刻场的对易关系

$$\left.\begin{aligned}\{\psi_\alpha(x),\psi_\beta(x')\}&=-iS_{\alpha\beta}(x-x')\\ \{\psi_\alpha(x),\psi_\beta(x')\}&=0\end{aligned}\right\}. \tag{10.4.63}$$

其中

$$S_{\alpha\beta}(x)=\left(\gamma_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu}-\kappa\right)_{\alpha\beta}\Delta(x). \tag{10.4.64}$$

(10.4.63)结果表明，不同空间位置的 $\psi$ 和 $\psi$ 互相不对易。但是，应用恒等式 (10.3.20) 容易证明，由偶数个 $\psi$ 和 $\psi$ 的积组成的量，在不同空间位置时对易。因此，若可观测量只限于这种结构，则与玻色统计的情形一样，可以排除观测影响以超光速传播的危险。

下面，像 § 7.4，c) 中所做的那样，把(10.4.57)式的通解 $\psi_\alpha(x)$ 做傅里叶展开

$$\begin{aligned}\psi_\alpha(x)=(2\pi)^{-3/2}\int d^3\boldsymbol{k}\sum_{r=1,2}\{&a_r(\boldsymbol{k})u^r_\alpha(\boldsymbol{k})e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega x_0)}\\&+b_r(\boldsymbol{k})v^r_\alpha(\boldsymbol{k})e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega x_0)}\}.\end{aligned} \tag{10.4.65}$$

其中 $u$ 和 $v$ 分别是满足下式的(10.4.57)的正能和负能本征解.

$$\left.\begin{aligned}&(i\gamma_\mu k_\mu+\kappa)u^r(\boldsymbol{k})=0\\&(i\gamma_\mu k_\mu-\kappa)v^r(\boldsymbol{k})=0\\&(k_\mu=(\boldsymbol{k},i\omega))\end{aligned}\right\}, \tag{10.4.66}$$

二者靠下述**正反粒子变换**(或电荷共轭变换)$C$联系起来

$$u^r(\boldsymbol{k}) = C\bar{v}^r(\boldsymbol{k}). \tag{10.4.67}$$

其中$C$是满足下面条件的四行四列幺正矩阵:

$$C\gamma_\mu^T C^{-1} = -\gamma_\mu,\ C^T = -C. \tag{10.4.68}$$[1]

而 $r = 1, 2$ 表示 § 7.4c) 中讲过的**螺旋性**状态。即

$$\left.\begin{aligned}\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}}{k}u^r(\boldsymbol{k}) &= \epsilon_r u^r(\boldsymbol{k})\\ \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}}{k}v^r(\boldsymbol{k}) &= -\epsilon_r v^r(\boldsymbol{k})\end{aligned}\right\}\ (\epsilon_r = \pm 1). \tag{10.4.69}$$

把上面(10.4.65)式代入(10.4.63)式,比较两边对应的项,得到对易关系

$$\left.\begin{aligned}\{a_r(\boldsymbol{k}), a_{r'}^\dagger(\boldsymbol{k}')\} &= \delta_{rr'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\\ \{b_r(\boldsymbol{k}), b_{r'}^\dagger(\boldsymbol{k}')\} &= \delta_{rr'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\end{aligned}\right\}. \tag{10.4.70}$$

其中已经用到了 $u$ 和 $v$ 满足的下述关系:

$$\left.\begin{aligned}\sum_r u_\alpha^r(\boldsymbol{k})\bar{u}_\beta^r(\boldsymbol{k}) &= (-i\gamma_\mu k_\mu + \kappa)_{\alpha\beta}/2\omega(k)\\ \sum_r v_\alpha^r(\boldsymbol{k})\bar{v}_\beta^r(\boldsymbol{k}) &= -(i\gamma_\mu k_\mu + \kappa)_{\alpha\beta}/2\omega(k)\end{aligned}\right\}. \tag{10.4.71}$$

$L$(10.4.58)在规范变换 $\psi \to \psi' = e^{-i\alpha}\psi$ 时不变,与此相应,得到四维守恒流 $j_\mu(x)$

$$j_\mu(x) = -i\lambda{:}\bar{\psi}(x)\gamma_\mu\psi(x){:}. \tag{10.4.72}$$

总荷 $Q$(10.2.62)为

$$Q = -\lambda\int d^3\boldsymbol{k}\sum_{1,2}\{a_r^\dagger(\boldsymbol{k})a_r(\boldsymbol{k}) - b_r^\dagger(\boldsymbol{k})b_r(\boldsymbol{k})\}, \tag{10.4.73}$$

系统的能量·动量 $P_\mu$ 为

$$P_i = \int d^3\boldsymbol{x}{:}\psi^\dagger(x)\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_i}\psi(x){:},\ P_0 = \int d^3\boldsymbol{x}{:}\psi^\dagger(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla} + \kappa\beta)\psi{:}, \tag{10.4.74}$$

---

1) $T$ 意味着将矩阵转置。

$$P_\mu = \int d^3k k_\mu \sum_{1,2} \{a_r^\dagger(k)a_r(k) + b_r^\dagger(k)b_r(k)\}. \quad (10.4.75)$$

上述结果是从费米统计的假定导出来的，若在(10.4.63)式中采用玻色统计，则 $Q$ 和 $P_\mu$ 的表达式中与反粒子对应的项 $b_r^\dagger b_r$ 的符号要改变，与标量场采用费米统计时一样，也导出了非物理的结果．于是得出结论，自旋 $\frac{1}{2}$ 的狄拉克场服从费米统计。

最后可以找到角动量 $M_{\mu\nu}$

$$M_{\mu\nu} = \int d^3x :\phi^\dagger(x)\left(x_\mu \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_\mu} - x_\nu \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_\mu}\right)\phi(x):$$

$$+ \int d^3x :\phi^\dagger(x)\frac{1}{4i}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu)\phi(x): \quad (10.4.76)$$

据此，其空间分量 $J = (M_{23}, M_{31}, M_{12})$ 为

$$J = \int d^3x :\phi^\dagger(x)\left(x \times \frac{1}{i}\nabla + \frac{\sigma}{2}\right)\phi(x):$$

$$= \int d^3k \left\{\sum_r a_r^\dagger(k)k \times \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k} a_r(k)\right.$$

$$\left. + \sum_r b_r^\dagger(k)k \times \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k} b_r(k)\right\}$$

$$+ \int d^3k \sum_{r,s}\left\{a_r^\dagger(k)a_s(k)u_r^*(k)\frac{\sigma}{2}u_s(k)\right.$$

$$\left. - b_r^\dagger(k)b_s(k)v_r^*(k)\frac{\sigma}{2}v_r(k)\right\}. \quad (10.4.77)$$

若只考虑 $J$ 的沿动量方向的分量 $\Gamma$，则上式第一项的轨道角动量部分消失，而得到了自旋角动量的动量方向分量——**螺旋性**。实际上，应用(10.4.69)式就有下述结果：

$$\Gamma = \int d^3k \sum_{r,s}\left\{a_r^\dagger(k)a_s(k)u_r^*(k)\frac{\sigma\cdot k}{2k}u_s(k)\right.$$

$$\left. - b_r^\dagger(k)b_s(k)v_r^*(k)\frac{\sigma\cdot k}{2k}v_r(k)\right\}.$$

$$= \int d^3k \sum_r \left\{ \frac{\epsilon_r}{2} a_r^\dagger(\boldsymbol{k}) a_r(\boldsymbol{k}) + \frac{\epsilon_r}{2} b_r^\dagger(\boldsymbol{k}) b_r(\boldsymbol{k}) \right\}. \quad (10.4.78)$$

## § 10.5 反演不变性及自旋与统计的关系

### a) 空间反演，正反粒子变换

我们已经知道，克莱因-戈登方程和狄拉克方程在空间反演($P$)和正反粒子变换($C$)(也叫电荷共轭变换)下是不变的。这时场量按下式变换：

$$\left.\begin{aligned} P\text{：标量场}\quad & \phi(x) \to \phi'(x') = \eta_P \phi(x) \\ \text{狄拉克场}\quad & \phi(x) \to \phi'(x') = \eta_P \gamma_4 \phi(x) \\ & (\boldsymbol{x}' = -\boldsymbol{x}, x_0' = x_0). \end{aligned}\right\} \quad (10.5.1)$$

其中 $\eta_P$ 是 $|\eta_P| = 1$ 的常数因子，各种场之间有相互作用时，它变成具有宇称（例如，会出现标量场（$\eta_P = 1$）和赝标量场（$\eta_P = -1$）的区别)物理意义的量。

$$\left.\begin{aligned} C\text{：标量场}\quad & \phi(x) \to \phi'(x) = \eta_C \phi^\dagger(x) \\ \text{狄拉克场}\quad & \phi(x) \to \phi'(x) = \eta_C C \bar{\phi}(\equiv \eta_C \phi^C) \end{aligned}\right\}. \quad (10.5.2)^{1)}$$

$\eta_C$ 也是 $|\eta_C| = 1$ 的常数因子。像连续变换情形一样，上述场变换，可以由幺正算符 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 进行幺正变换

$$\left.\begin{aligned} P\text{：}\quad & \boldsymbol{P}\phi(\boldsymbol{x}, x_0)\boldsymbol{P}^{-1} = \phi'(-\boldsymbol{x}, x_0) = \eta_P \phi(-\boldsymbol{x}, x_0) \\ & \boldsymbol{P}\psi(\boldsymbol{x}, x_0)\boldsymbol{P}^{-1} = \psi'(-\boldsymbol{x}, x_0) = \eta_P \gamma_4 \psi(-\boldsymbol{x}, x_0) \end{aligned}\right\}, \quad (10.5.3)$$

$$\left.\begin{aligned} C\text{：}\quad & \boldsymbol{C}\phi(x)\boldsymbol{C}^{-1} = \eta_C \phi^\dagger(x) \\ & \boldsymbol{C}\psi(x)\boldsymbol{C}^{-1} = \eta_C C \bar{\psi}(x) \end{aligned}\right\}. \quad (10.5.4)$$

$C$ 变换使得湮没算符 $a$ 和 $b$ 互换（正反粒子互换），根据(10.4.55)、(10.4.56)、(10.4.73)、(10.4.75)诸式，有

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{C}Q\boldsymbol{C}^{-1} &= -Q \\ \boldsymbol{C}P_\mu\boldsymbol{C}^{-1} &= P_\mu \end{aligned}\right\}. \quad (10.5.5)$$

---

1) 式中的 $C$ 由(10.4.68)式定义。

而如果上面决定的自旋与统计的关系（零自旋的标量场对应玻色统计，$\frac{1}{2}$ 自旋的狄拉克粒子对应费米统计）发生反转，则已述的 $P_\mu$ 和 $Q$ 表达式中与反粒子对应的 $b^\dagger b$ 项符号就要反转，与此相应，上面变换(10.5.5)也要变符号。因而，实际上，根据**正反粒子变换**下所要求的变换性质(10.5.5)，可以定出更**一般的自旋与统计的关系**(整数自旋的场对应于玻色统计，而半整数自旋场对应于费米统计)。

### b） 时间反演

时间反演与上述 $P$，$C$ 变换的最大不同在于，进行量子力学处理时，$T$ 变换无法在幺正变换的框架内解决。为了看出这点，让我们一般地用幺正变换 $U$ 来对薛定谔方程

$$-\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H(t)\psi(t) \tag{10.5.6}$$

实行 $T$ 变换。所谓(10.5.6)式在 $T$ 变换下不变，就是说像“影片倒转”一样，当 $\psi(t)$ 是(10.5.6)式的解时，$\psi'(t) = U\psi(-t)$ 也是它的解，根据这一要求来确定 $U$。实际上，$U$ 要服从下面条件：

$$UH(t)U^{-1} = -H(-t). \tag{10.5.7}$$

这时，某任意状态 $\psi_a$ 及其**时间反演态** $\phi_a \equiv U\psi_a$ 之间的关系是

$$(\psi_a, H(t)\psi_a) = -(\psi_a, H(-t)\psi_a), \tag{10.5.8}$$

竟然普遍地允许破坏**能量正值性**的状态存在！

那么，让我们用包含复共轭演算的反幺正变换来实现 $T$ 变换：

$$\psi_a = T\psi_a = U\psi_a^*. \tag{10.5.9}$$

其中 $U$ 是幺正算符。这种情况下，(10.5.6)式不变的条件是，当 $\psi(t)$ 是(10.5.6)式的解时，$\psi'(t) \equiv T\psi(-t) = U\psi^*(-t)$ 也是其解。这点是由下式保证的：

$$TH(-t)T^{-1} = UH^*(-t)U^{-1} = H(t) \tag{10.5.10}$$

($H^*$ 是 $H$ 的复共轭算符)。

一旦$\boldsymbol{T}$具有反幺正性，则应注意，下面那样的运算成立。对于任意算符 $O$，有

$$(\Psi_a, O\Psi_b) = (\Psi_a, \boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{T}O\Psi_b) = (\boldsymbol{T}\Psi_a, \boldsymbol{T}O\Psi_b)^* = (\Psi_{\underset{\sim}{a}}, \boldsymbol{T}O\boldsymbol{T}^{-1}\Psi_{\underset{\sim}{b}})^* = (\Psi_{\underset{\sim}{b}}, UO^TU^{-1}\Psi_{\underset{\sim}{a}}) \quad (10.5.11)$$

（$O^T$ 是 $O$ 的转置算符）。

为使自由场的哈密顿量满足(10.5.10)式，显然可以对场施加下述变换。实际上，这时有两种变换

$$\left.\begin{aligned} &\boldsymbol{T}\phi(\boldsymbol{x}, x_0)\boldsymbol{T}^{-1} = \eta_T\phi(\boldsymbol{x}, -x_0) \text{ 或 } \eta_T\phi^\dagger(\boldsymbol{x}, -x_0) \\ &\boldsymbol{T}\psi(\boldsymbol{x}, x_0)\boldsymbol{T}^{-1} = \eta_T\psi^{c\dagger}(\boldsymbol{x}, -x_0)\gamma_5\gamma_4 \text{ 或 } \eta_T\psi^\dagger(\boldsymbol{x}, -x_0)\gamma_5\gamma_4 \end{aligned}\right\}. \quad (10.5.12)$$

前者称为维格纳型，后者称为泡利型。二者与正反粒子变换有关，泡利型 $T$ 变换伴随着正反粒子置换。

### c) *CPT* 变换

讨论了上述 $T$ 变换的性质后，让我们来考虑称为强反转 $S$ 的一系列变换 $CPT$。其中 $T$ 是维格纳型的。因此，$S$ 带来了时空反转和正反粒子替换。

先看狄拉克场，重叠进行上述 $C$、$P$、$T$ 变换

$$\boldsymbol{S}\psi(x)\boldsymbol{S}^{-1} = \eta\psi^\dagger(-x)\gamma_5. \quad (10.5.13)$$

由此，可以找到由两个狄拉克场 $\psi_a$ 和 $\psi_b$ 构成的各种张量

$$t_A^{ab}(x) = \bar{\psi}_a(x)\Gamma_A\psi_b(x) \quad (10.5.14)$$

的变换性质。其中 $\Gamma_A$ 为

$$\Gamma_A = (1, \gamma_5, \gamma_\mu, i\gamma_\mu\gamma_5, \sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{2i}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu), \gamma_5\sigma_{\mu\nu}), \quad (10.5.15)$$

$t_A$ 在 $P$ 变换下分别具有标量、赝标量、矢量、赝矢量、张量、赝张量的变换性质。在 $C$ 变换下

$$\boldsymbol{C}t_A^{ab}(x)\boldsymbol{C}^{-1} = \epsilon_A t_A^{ab}(x), \quad (10.5.16)$$

其中 $\epsilon_A$ 在矢量和张量情况下为 $-1$，其它情况下为 $+1$。在(10.5.13)式中选 $\eta_a = \eta_b = 1$，有

$$S t_A^{ab}(x) S^{-1} = (\gamma_5 \phi_a(-x))(\gamma_4 \Gamma_A)^*(\phi_b^\dagger(-x)\gamma_5)$$
$$= -\phi_b^\dagger(-x)\gamma_5(\gamma_4\Gamma_A)^\dagger\gamma_5\phi_a(-x) = \zeta_A(t_A^{ab}(-x))^\dagger. \quad (10.5.17)$$

其中 $\gamma_5\Gamma_A\gamma_5 = \zeta_A\Gamma_A, \zeta_A$ 在矢量、赝矢量情形是$-1$，其它情形是1．无论在(10.5.16)式或是在(10.5.17)式中，用的都是 $\phi_a$ 和 $\phi_b$ 之间的**反对易性**．如果假定它们是**对易**的，那么 $\epsilon_A$ 和 $\zeta_A$ 将变号，其结果会使狄拉克场的拉氏密度函数（10.4.59）在 $C$ 和 $S$ 变换下变号。

在推导上面(10.5.16)式和(10.5.17)式的过程中，为了在交换 $\phi_a$ 和 $\phi_b$ 的顺序时，避开(包含 $a = b$ 情况时所产生的) $\delta$ 函数附加项的困难，可以把 $t_A^{ab}$ 反对称化

$$t_A^{ab}(x) = \frac{1}{2}\{\bar{\phi}_a(x)\Gamma_A\phi_b(x) - \phi_b(x)\Gamma_A^T\bar{\phi}_a(x)\}. \quad (10.5.18)$$

这时，与 $\phi_a$ 和 $\phi_b$ 的对易或反对易关系无关，都可推导(10.5.16)式和(10.5.17)式．而为了 $t_A^{ab}(x)$ 不致变成无意义的常数，必须只假定反对易性。

下面来看看自旋为整数的场，在 $P, C, T, S$ 变换下，也有与上述 $t_A(x)$ 或者这种积同样变换的各种张量、赝张量．这时，作为(10.5.17)式中 $S$ 变换所具有的最独特之点，必须注意，这个变换($\zeta_A$ 的值) 只依赖于**张量的阶数**，而不依赖于空间反射下宇称的差(例如，标量与赝标量之差，矢量与赝矢量之差)．通过考察这个性质的缘由，就会导致下面的所谓 ***CPT* 定理**．即，由满足上述自旋与统计关系的场构成的局域相互作用哈密顿量是厄米的，若它在正常洛伦兹变换(不包含反转)下是不变的，则理论在 $CPT$ 变换($S$ 变换)下是不变的．上述三个条件，在目前所认识的局域场理论范围内，被看成是各种相互作用必须满足的又是较松的条件．这样，在不仅 $P$、$C$ 而且 $CP$ 不变性也破坏时，例如在弱相互作用情形，只要 $CPT$ 定理成立，就会导致其时间反演($T$ 变换)不变性也要破坏的重要结果．(关于 $CP$ 破坏，参看本讲座第十卷《基本粒子理论》§ 9.3.)

### d) 关于并行统计

我们在 § 10.2，通过约当的讨论了解了正则量子化的种种可能性。与此不同，这里要涉及所谓**并行统计**的理论。其基本要点是，不是用正则变量的对易关系的形式直接求，而是以海森伯运动方程(10.3.18)成立为条件来求出量子化。 这时哈密顿量 $\overline{H}$ 的形式特别重要，而其中并没有取正规乘积的操作，对于零自旋场，退到(10.4.34)式，即下式

$$P_0 = \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{k}\omega(k)(a^\dagger(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k}) + a(\boldsymbol{k})a^\dagger(\boldsymbol{k})). \quad (10.5.19)$$

另一方面，对于 $\frac{1}{2}$ 自旋的场，去掉(10.4.74)式中 $P_0$ 的正规乘积符号，代之以施行(10.5.18)式中的反对称化手续

$$P_0 = \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{k}\sum_r \{a_r^\dagger(\boldsymbol{k})a_r(\boldsymbol{k}) - a_r(\boldsymbol{k})a_r^\dagger(\boldsymbol{k}) + b_r^\dagger(\boldsymbol{k})b_r(\boldsymbol{k}) - b_r(\boldsymbol{k})b_r^\dagger(\boldsymbol{k})\}. \quad (10.5.19')$$

由于自旋分量 $r$ 和反粒子自由度($b_r$)的存在对我们目前所讨论的问题来说不是关键的，因此，在下面我们把它们省略，并采用(10.4.30)式中离散的产生和湮没算符($c(\boldsymbol{k}^{(n)}) = c_n$ 等)，抓住主要特征，把(10.5.19)和(10.5.19′)两式写成

$$P_0 = \frac{1}{2}\sum_n \omega_n(c_n^\dagger c_n \pm c_n c_n^\dagger). \quad (10.5.20)$$

右边的±号分别对应于零自旋和 $\frac{1}{2}$ 自旋的情形(或更一般的，对应于整数自旋和半整数自旋情形)。

对于自由场，为使海森伯方程成立，应保证下述关系式：

$$[c_r,(c_s^\dagger c_t \pm c_t c_s^\dagger)] = 2\delta_{rs}c_t. \quad (10.5.21)$$

作为量子化的条件，上式包含了非常广泛的可能性。实际上，对此再加上条件

$$[c_r,(c_s c_t \pm c_t c_s)] = 0, \quad (10.5.22)$$

它们可以靠通常的玻色或费米统计的对易关系

$$\left.\begin{aligned} c_r c_s \mp c_s c_r &= 0 \\ c_r c_s^\dagger \mp c_s^\dagger c_r &= \delta_{sr} \end{aligned}\right\} \tag{10.5.23}$$

而得到保证。除此之外，(10.5.21)式还有无数个解。

格林找到了实现对易关系(10.5.21)和(10.5.22)的下述形式：

$$c_r = \sum_{i=1}^{k} c_r^{(i)}. \tag{10.5.24}$$

其中：$k$ 是称为并行阶的量，允许是任意**整数值**。这儿引入或说假定格林分量 $c_r^{(i)}, c_r^{(i)\dagger}$ 满足下述对易关系：

$$\left.\begin{aligned} c_r^{(i)} c_s^{(i)} \mp c_s^{(i)} c_r^{(i)} &= 0 \\ c_r^{(i)} c_s^{(i)\dagger} \mp c_s^{(i)\dagger} c_r^{(i)} &= \delta_{sr} \end{aligned}\right\}, \tag{10.5.25}$$

$$c_r^{(i)} c_s^{(j)} \pm c_s^{(j)} c_r^{(i)} = c_r^{(i)} c_s^{(j)\dagger} \pm c_s^{(j)\dagger} c_r^{(i)} = 0 (i \neq j). \tag{10.5.26}$$

也就是说，同一分量的 $c_r^{(i)}, c_s^{(i)\dagger}$ 满足上述玻色或费米统计的对易关系，而在不同的分量之间，玻色与费米的关系反转了。容易验证，在(10.5.25)式和(10.5.26)式的条件下，可以保证(10.5.21)、(10.5.22)式成立。这里采用

$$\left.\begin{aligned} c_i |0\rangle &= 0 \\ c_i c_j^\dagger |0\rangle &= k\delta_{ij} |0\rangle \end{aligned}\right\} \tag{10.5.27}$$

作真空条件。于是，一次次把产生算符乘在$|0\rangle$上造出希耳伯空间，研究其构造，在以阶 $k$ 为特征的新统计下，共存于给定状态的粒子按 $k$ 个团分类，于是结论为，属于同一个团的粒子形成互相对称(并行玻色情形)或反对称(并行费米情形)的状态。作为其结果，对于并行玻色粒子(并行费米粒子)，允许的完全反对称状态(完全对称状态)最多可以有 $k$ 个。而且并行费米子情形中，属于同一本征态的粒子在各个团中不能多于一个，总共可以有 $k$ 个。并行玻色子情形没有这种限制。自然，原来的玻色、费米统计对应于 $k=1$ 的情形。

上面是格林指出的与传统统计不同的并行统计理论的概要，这里不再给出更详细的内容。(同样的考虑曾由冈山提出，参看本讲座第十卷《基本粒子理论》§8.7 和 §11.1。)

## §10.6　从不同时理论到超不同时理论

§10.4 考察过的自由场拉氏密度函数中，加上相互作用项就毫不困难地找到了相对论场方程。在用海森伯形式实行量子化的过程中，作为“同时刻”正则变量的场量及其时间微商的引入，破坏了形式上的相对论协变性，当然其内容本身还是相对论不变的。例如，若上述的 $L$ 满足(10.2.55)式，则作为海森伯方程的场运动方程便具备洛伦兹变换下的协变形式。并且在海森伯绘景中，态矢不随时间变化。但是，除了在 § 10.4 处理过的自由场之外，一般很难解具有非线性相互作用项的场方程。因此，我们来考虑薛定谔绘景中的情况。这时，构成可观测量的场量不随时间变化，系统的变化完全由态矢随时间的变化来表明。因此，场量 $u_B(\boldsymbol{x}, x_0)$ 对时间和空间变量的依赖是明显不对称的，并且，态矢所服从的薛定谔方程中，时间也起着特殊的作用。在这种意义上，从相对论的形式来看，这点是非常不能令人满意的。因此，我们考虑下面的相对论的**相互作用绘景**的理论。它处于海森伯绘景与薛定谔绘景之间，具有相对论的形式，还具备有易于得到微扰解的构造。这一节，开头叙述在辐射场之下相对论电子的多体系统的狄拉克**不同时理论**，在此基础上，简单讨论朝永-许温格（Schwinger）场的**超不同时理论**.

### a)　相对论电子多体系的不同时理论

现在考虑在辐射场的相互作用下 $n$ 个电子的多体系。整个体系的薛定谔方程为

$$\left(\bar{H} - i\frac{\partial}{\partial T}\right)\Psi(T) = 0. \tag{10.6.1}$$

哈密顿量 $\bar{H}$ 为下列诸项：

$$\bar{H} = \bar{H}_a + \bar{H}_b + V. \tag{10.6.2}$$

$\bar{H}_a$ 是 $n$ 个电子系统的哈密顿量

$$\bar{H}_a = \sum_{s=1}^{n} (\boldsymbol{\alpha}^s \cdot \boldsymbol{p}^s + \kappa\beta^s) \equiv \sum_{s=1}^{n} H_s. \qquad (10.6.3)$$

$(\boldsymbol{\alpha}^s, \beta^s)$ 是第 $s$ 个电子的四行四列狄拉克矩阵，也可写为 $\boldsymbol{\alpha}^s = i\gamma_4^{(s)}\boldsymbol{\gamma}^{(s)}, \beta^s = \gamma_4^{(s)}$. $\boldsymbol{p}^s$ 是其动量， $\kappa$ 是其质量. $\bar{H}_b$ 是辐射场哈密顿量，$V$ 描述电子与辐射场的相互作用

$$V = \varepsilon \sum_{s=1}^{n} V_s = \varepsilon \sum_{s=1}^{n} (A_0(\boldsymbol{x}^s) - \boldsymbol{\alpha}^s \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^s)), \qquad (10.6.4)$$

其中，$A_\mu(\boldsymbol{x})$ 是描述辐射场的矢势， $\boldsymbol{x}^s$ 是第 $s$ 个电子的坐标，$\varepsilon$ 表示电子电荷.

在这个薛定谔绘景中，场 $A_\mu(\boldsymbol{x})$ 不依赖于时间，并且在薛定谔方程(10.6.1)中，时间要特殊处理，这样与相对论形式相差太远. 因此对系统施加下述幺正变换

$$\tilde{\Psi}(T) = e^{i\bar{H}_b T}\Psi(T). \qquad (10.6.5)$$

$\bar{H}_b$ 与电子系统的可观测量 $\boldsymbol{\alpha}^s$、$\beta^s$、$\boldsymbol{x}^s$、$\boldsymbol{p}_-$ 对易，而 $A_\mu(\boldsymbol{x})$ 变换为

$$\tilde{A}_\mu(\boldsymbol{x}, T) \equiv e^{i\bar{H}_b T} A_\mu(\boldsymbol{x}) e^{-i\bar{H}_b T}, \qquad (10.6.6)$$

$\tilde{A}_\mu(\boldsymbol{x}, x_0)$ (以后写成 $\tilde{A}_\mu(\boldsymbol{x})$) 服从下一小节要叙述的无相互作用自由辐射场方程. 另一方面，从薛定谔方程(10.6.1)中去掉 $H_b$ 的项，剩下

$$\left\{\sum_{s=1}^{n}(H_s + \tilde{V}_s) - i\frac{\partial}{\partial T}\right\}\tilde{\Psi}(\boldsymbol{x}^1, \boldsymbol{x}^2, \cdots, \boldsymbol{x}^n, F; T) = 0, \qquad (10.6.7)$$

其中

$$\tilde{V}_s = \varepsilon\{\tilde{A}_0(\boldsymbol{x}^s, T) - \boldsymbol{\alpha}^s \cdot \tilde{A}(\boldsymbol{x}^s, T)\}. \qquad (10.6.8)$$

状态函数 $\Psi(\boldsymbol{x}^1, \boldsymbol{x}^2, \cdots, \boldsymbol{x}^n, F; T)$，除了依赖辐射场 $F$ 之外，还与 $n$ 个电子的坐标 $\{\boldsymbol{x}^s\}$ 和**共同时间** $T$ 有关. 也就是说，这个薛定谔方程具有非相对论构造的主要原因是，具有不同位置坐标 $\boldsymbol{x}^s$ 的 $n$ 个电子去挤一个共同时间 $T$. 因此，应研究下述可能. 即考虑 $\Psi(\{\boldsymbol{x}^s, t^s\}, F)$ 样的状态函数，既依赖于 $n$ 个电子的位置坐标 $\boldsymbol{x}^s$，又依赖于各个时间 $t^s(=x_0^s)$，一旦 $n$ 个时间 $\{t^s\}$ 都等于共同时间，要求结果与上述 $\tilde{\Psi}$ 一致. 这种可能性容易实现，只要对于

$\tilde{\Psi}(\{x^s,t^s\},F)$ 加上下述 $n$ 个方程：

$$\left(R^s - i\frac{\partial}{\partial t^s}\right)\Psi(\{x^s,t^s\},F) = 0 \quad (s=1,2,\cdots,n), \quad (10.6.9)$$

其中

$$R^s \equiv \alpha^s \cdot p^s + \kappa\beta^s + \varepsilon\{A_0(x^s,t^s) - \alpha^s \cdot A(x^s,t^s)\}. \quad (10.6.10)$$

再把(10.6.9)式写成下面完全相对论协变形式：

$$\left\{\gamma_\mu^s \frac{\partial}{\partial x_\mu^s} + \kappa - i\varepsilon\gamma_\mu^s \tilde{A}_\mu(x^s)\right\}\tilde{\Psi} = 0 \quad (s=1,2,\cdots,n). \quad (10.6.11)$$

这就是不同时理论的基本方程。

### b) 辐射场的量子化和附加条件

上面方程中的辐射场矢势 $\tilde{A}_\mu(x)$，就像已经说过的那样，服从无相互作用自由场方程。但是，大家都知道，辐射场量子论中伴随有复杂的问题。实际上，直接用场强 $F_{\mu\nu}(x) = (E(x),H(x))$ 描述辐射场时，它并不复杂。然而，若要对荷电粒子的相互作用进行相对论描述，则象在(10.6.11)式中看到的那样，以矢势 $A_\mu(x)$ 为媒介是必要的，由此便出现了 $A_\mu$ 的**规范变换**、洛伦兹条件等问题。并且与之相应，有各种公式化的方法。

用 $A_\mu$ 定义 $F_{\mu\nu}(x)$ 如下：

$$F_{\mu\nu}(x) = \frac{\partial}{\partial x_\mu} A_\nu(x) - \frac{\partial}{\partial x_\nu} A_\mu(x), \quad (10.6.12)$$

它服从麦克斯韦方程

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} F_{\mu\nu} = 0, \quad (10.6.13)$$

由此得到 $A_\mu(x)$ 遵守的波动方程

$$\Box A_\mu(x) - \frac{\partial}{\partial x_\mu}\frac{\partial}{\partial x_\nu} A_\nu(x) = 0. \quad (10.6.14)$$

作为欧勒方程将上式推导出来的拉氏密度函数是

$$L(x) = -\frac{1}{4}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} A_\nu - \frac{\partial}{\partial x_\nu} A_\mu\right)^2. \qquad (10.6.15)$$

由于这个 $L$ 不含 $A_0(x)$ 对时间的微商，因此过渡到量子论时，$A_0(x)$ 的正则共轭场为零，必须像上面屡次提到过的那样，按有约束的情形来量子化（第十一章）。所以，$F_{\mu\nu}$ 的定义(10.6.12)中，$A_\mu$ 还留有不定性

$$A_\mu(x) \to A_\mu(x) + \frac{\partial}{\partial x_\mu} \Lambda(x), \qquad (10.6.16)$$

利用所谓规范自由度把方程(10.6.14)分成两个

$$\Box A_\mu(x) = 0, \qquad (10.6.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} A_\mu(x) = 0. \qquad (10.6.18)$$

并且，关于 $L(x)$，代替(10.6.15)式而采用

$$L(x) = -\frac{1}{4}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} A_\nu(x) - \frac{\partial}{\partial x_\nu} A_\mu(x)\right)^2$$

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} A_\mu(x)\right)^2, \qquad (10.6.15')$$

作为欧勒方程仅可以导出(10.6.17)式。因此，对于后者，即所谓洛伦兹条件，有必要再做一些考察。使用上面的新 $L$，对应于 $\boldsymbol{A}$、$A_0$ 的正则共轭量是 $\frac{\partial}{\partial x_0}\boldsymbol{A}$、$\frac{\partial}{\partial x_0}A_0$，假定玻色型对易关系，与标量场情形一样，注意到

$$A_\mu(x) = \int_\sigma d\sigma'_\nu D(x - x') \frac{\partial'}{\partial x'_\nu} A_\mu(x'), \qquad (10.6.19)$$

得

$$[A_\mu(x), A_\nu(x')] = i\delta_{\mu\nu} D(x - x') (\mu, \nu = 1, 2, 3, 4). \qquad (10.6.20)$$

其中 $D(x)$ 是在（10.4.13）式的$\Delta$函数中令 $\kappa = 0$ 得到的不变函数。其具体形式为

$$D(x) = \frac{-1}{2\pi} \in (x_0)\delta(x_\mu^2). \qquad (10.6.21)$$

对易关系(5.6.20)与洛伦兹条件(10.6.18)不能同时成立。 因此不能把后者看成是算符方程，我们把它考虑为下面那种物理上允许的**状态函数的附加条件**

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} A_\mu(x)\Psi = 0。 \tag{10.6.22}$$

称之为费米条件。

回到前面 a)中有相互作用的多电子系统的情形。(10.6.6) 式中的 $\tilde{A}_\mu(x)$ 与上述自由场 $A_\mu(x)$ 一样，服从

$$\Box\tilde{A}_\mu(x) = 0, \tag{10.6.23}$$

$$[\tilde{A}_\mu(x), \tilde{A}_\nu(x')] = iD(x - x')。 \tag{10.6.24}$$

不过，由于 $A_\mu$ 的费米条件 (10.6.22) 是与电子系统无相互作用时的条件，因而 $\Psi$ 仍是不依赖时间的海森伯绘景的状态函数。而现在情况下，由于状态函数是服从(10.6.11)式的 $\tilde{\Psi}$，因此不能保证满足与(10.6.22)式对应的

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \tilde{A}_\mu(x)\tilde{\Psi} = 0。 \tag{10.6.22'}$$

实际上，有 $F\tilde{\Psi} = 0$ 和 $G\tilde{\Psi} = 0$ 两个方程普遍成立时，可以导出 $[F, G]\tilde{\Psi} = 0$。这时，若$[F, G]$是与 $F$、$G$ 独立的新的算符，则会出现施于$\Psi$的第三个条件，这意味着，一开始就不能一般地保证 $F\tilde{\Psi} = 0$ 和 $G\tilde{\Psi} = 0$ 会同时成立。然而，若(10.6.11)式中 $n$ 个方程式的括号内的量 $x'_\mu(s = 1, 2, \cdots, n)$ 相互都是**"类空的"**，则由于(10.6.24)式，两个量变为互相对易，也就不存在同时成立的问题了。但是，这些量与 $(\partial/\partial x_\mu)\tilde{A}_\mu(x)$ 一般不对易。因此，采用下式来修正(10.6.22′)式：

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} \tilde{A}_\mu(x) + \varepsilon\sum_{s=1}^{n} D(x - x')\right)\tilde{\Psi}(\{x'_s\}, F) = 0, \tag{10.6.25}$$

左边括号内的式子与 $n$ 个方程（10.6.11）的括号内的式子全都对易，从而保证了上面两式的同时成立。

这样，系统的基本方程（10.6.11)、(10.6.25)、(10.6.23) 和(10.6.24)都按相对论形式公式化了。不过，这里有必要对费米条

件(10.6.25)再说几句。实际上，(10.6.22)式已经出问题了，注意，由(10.6.25)式可导出下面式子：

$$\left(\tilde{\Psi}, \left[\frac{\partial}{\partial x_\mu}\tilde{A}_\mu(x) + \varepsilon\sum_{s=1}^{n} D(x-x^s), \tilde{A}_\nu(y)\right]\tilde{\Psi}\right) = 0。$$

(10.6.26)

然而，若按照对易关系 (10.6.24)，则上式左边的对易关系变成 $ih\frac{\partial}{\partial x_\nu}D(x-y)$，不等于零。为了解决这个矛盾，注意能够把费米条件(10.6.25)按 $x_0$ 分成正频部分和负频部分两个条件，可以把改了的前半部作为附加条件(古玻塔 (Gupta) 条件)采用。即

$$\left\{\frac{\partial}{\partial x_\mu}\tilde{A}_\mu^{(+)}(x) + \varepsilon\sum_{s=1}^{n} D^{(+)}(x-x^s)\right\}\tilde{\Psi} = 0。 \quad (10.6.27)$$

这样做的话，就不会引起(10.6.26)式那样的内部矛盾了，并且保证了**期待值**的洛伦兹条件

$$\left(\tilde{\Psi}, \left\{\frac{\partial}{\partial x_\mu}\tilde{A}_\mu(x) + \varepsilon\sum_{s=1}^{n} D(x-x^s)\right\}\tilde{\Psi}\right) = 0。 \quad (10.6.28)$$

另外我们还知道，按照(10.6.24)式进行辐射场量子化，在希耳伯空间中伴随着 $A_0$ 分量会有不定度规。不过这时，由于有上述附加条件，不会发生 § 10.7 中叙述的那种原理方面的困难(参看本讲座第十讲《基本粒子理论》§ 3.2)。

### c) 场的超不同时理论

上述不同时理论具有相对论不变的形式，然而，它只限于电子系统这种粒子数一定的多体系统，这一点是不能令人满意的。那么，不仅辐射场而且电子系统也用量子化了的场来描述，这样能得到完全相对论性的量子论吗？ 这种程序由朝永和许温格完成了。下面，尽可能用与上述不同时理论类似的方式，叙述其概要。

现在考虑各种场的相互作用系统。其薛定谔方程为

$$\left(\bar{H} - i\frac{\partial}{\partial T}\right)\Psi(T) = 0, \tag{10.6.29}$$

其中哈密顿量 $\bar{H}$ 具有下述构造：

$$\bar{H} = \int d^3x \Big[ \sum_A H_A(u_A(x),\ \pi_A(x)) + H_1(u_A(x), u_B(x), \cdots) \Big]. \tag{10.6.30}$$

式中 $H_A$ 是 $u_A$ 为自由场时的哈密顿量密度，$H_1(x)$ 描述了相互作用．例如，对于电子和辐射场的相互作用系统

$$H_1(x) = ie\bar{\Psi}(x)\gamma_\mu\Psi(x)A_\mu(x) \tag{10.6.31}$$

做下述幺正变换：

$$\Omega(T) = e^{i\sum_A \bar{H}_A T}\Psi(T), \tag{10.6.32}$$

(10.6.29)式变成

$$i\frac{\partial}{\partial T}\Omega(T) = \int d^3x H_1(u_A(x,T), u_B(x,T), \cdots)\Omega(T). \tag{10.6.33}$$

其中，$H_1$ 里的 $u_A(x, x_0)$ 由下式给出：

$$u_A(x, x_0) \equiv e^{i\bar{H}_A x_0} u_A(x) e^{-i\bar{H}_A x_0}, \tag{10.6.34}$$

它满足自由场海森伯方程和对易关系．这种绘景通常称为**相互作用绘景**．这里再用 § 10.3 中把三维空间分成无限微小体积元的办法，把(10.6.33)式写成

$$i\frac{\partial}{\partial T}\Omega(T) = \left\{\sum_i \delta^3 x' H_1^i(u_A^i(T), u_B^i(T), \cdots)\right\}\Omega(T). \tag{10.6.35}$$

把它与不同时理论中的(10.6.7)式比较，可以看出，代替 $\sum_{i=1}^{n}$ 的有限求和，这儿出现了关于无限多个空间点 $x'$ 的求和．因此，现在可以引入各个 $x'$ 中的固有时间 $t'(=x_0')$，即无限多个不同的时间，用下面无限多个方程组代替薛定谔方程(10.6.35)

$$i\frac{\partial}{\partial t_s}\Omega(t_1,t_2,\cdots)=\delta^3x^s H_{\mathrm{I}}^s\left(u_A^s(t_s),u_B^s(t_s),\cdots\right)\Omega(t_1,t_2,\cdots)。$$

(10.6.36)

这里，若 $x_\mu^s=(x^s,ix_0^s)$ 在图 10.5 所示的“**类空**”超曲面 $\sigma$ 上，$H_{\mathrm{I}}^s$ 互相对易，因此（10.6.36）式中全部方程均可同时成立。 取 $\delta^3x^s\to 0$ 的极限，$\Omega(t_1,t_2,\cdots)\to\Omega(\sigma)$，变成了 $\sigma$ 的泛函，(10.6.36)式变成

$$i\frac{\delta\Omega(\sigma)}{\delta\sigma(x)}=H_{\mathrm{I}}(u_A(x),u_B(x),\cdots)\Omega(\sigma)。\qquad(10.6.37)$$

左边的泛函微商由(10.2.32)式定义。 这就是朝永-许温格**场的超不同时理论**中的薛定谔方程。它满足相对论不变要求，并具备在相互作用 $H_{\mathrm{I}}$ 条件下用微扰论求解的最恰当的形式。 不过，这里不再叙述其具体应用了(参看本讲座第十卷《基本粒子理论》第四章)。

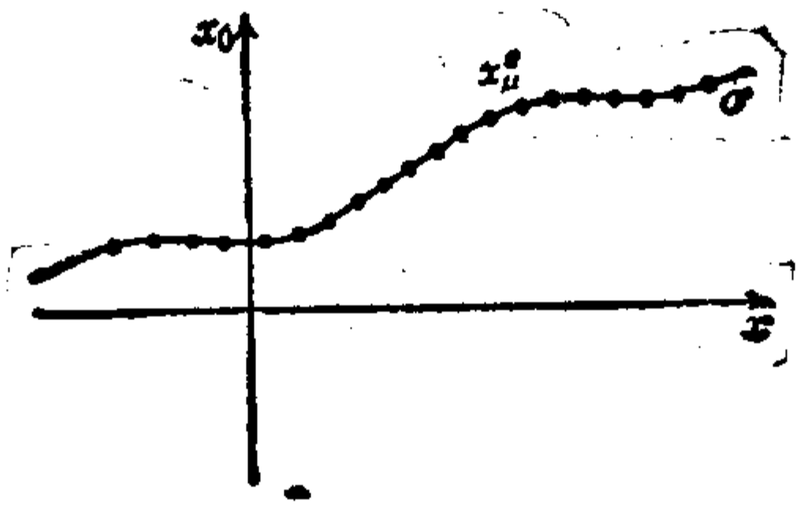



图 10.5

## §10.7 具有不定度规的场的量子论

### a) 发散困难和具有不定度规的混合场理论

上述场的量子论，像 §10.2 所叙述的那样，从一开始就做了一个基本的假定。即，假定理论是**局域**的。接着，在场本身局域的前提下，进一步讨论的相互作用也是局域的。然而，我们清楚地知道，这个假定成了目前场论带有发散困难的根本原因。另一方面，按照上节最后叙述的超不同时理论形式的相对论的场论，可能详

细检查这个发散的细节，其中不少内容与量子电动力学有关，按照这个逐步逼近的方案，可以完全挖掘出发散背后的理论实质.

在基本粒子理论的整个发展过程中，逐级近似理论所取得的成功究竟处于什么地位，这是一个复杂的问题. 例如，也有一种看法，把它在量子电动力学中的成功描绘成早期量子论在某对应论领域中的已取得的业绩. 发散问题是由什么机制引起的，不投身到具体计算(参看本讲座第十卷《基本粒子理论》第四章)中是难以体会的. 其原始表现，可以看成是，反映了场的局域性的(10.4.13)式和(10.4.14)式中不变Δ函数和 $\Delta^{(1)}$ 函数在光锥上有奇异性. 把其中出现的 $\delta$ 函数称为**赝函数**，它是一个与一般的函数相乘再积分才有意义的量. 场量子论的发散就是通过几个这种赝函数的积的积分即通过光锥上的奇异性以重叠形式产生的.

为了避开发散，进行了各种尝试，试图从(10.4.19)形式的量子化条件

$$[\phi(x),\phi(x')] = i\Delta(x-x') \qquad (10.7.1)$$

中的 $\Delta(x)$ 开始就除去在光锥上的奇异性. 这时的目标是保证相对论不变性和因果律，考虑下面形式的新Δ函数:

$$\tilde{\Delta}(x) = \int d\kappa^2 \rho(\kappa^2)\Delta(x;\kappa). \qquad (10.7.2)$$

其中，把(10.4.13)式内Δ函数里的 $\kappa$ 明显写出来了，成为 $\Delta(x;\kappa)$. 把 $\rho(\kappa^2)$ 叫做谱函数，一般，它由离散部分和连续部分构成

$$\rho(\kappa^2) = \sum_i c_i\delta(\kappa^2-\kappa_i^2) + \rho_c(\kappa^2). \qquad (10.7.3)$$

因为 $\tilde{\Delta}(x)$ 是 $\Delta(x,\kappa)$ 的线性组合，所以是相对论不变的，并且在空间区域中变成零. 我们知道，即使在通常的场论中，有相互作用时，一开始的对易关系(10.7.1)就已经不是 c 数了，其真空期待值为上面的 $i\tilde{\Delta}(x-x')$ 形式. 这时(10.7.2)形式的表达式称为莱曼 (Lehmann) 展开. 这个结论不是根据相互作用的细节，而是根据下述一系列公理性假定推出来的;即，场的四维平动算子是能量动量 $P_\mu, P_0$ 的最低本征态是真空(其本征值规定为零)，理论具

有相对论不变性等。这时 $P_\mu$ 的本征态构成完备正交系，其模通常是**正定**的：

$$\rho(\kappa^2) \geqslant 0, \tag{10.7.4}$$

并且(10.7.2)式中积分限制在 $\kappa^2 > 0$ 的区域内。然而，只要这种谱函数是正定的，由表达式(10.4.13)得到的 $\tilde{\Delta}$ 在光锥上的奇异性就无法除去。因此，作为可能摆脱场论发散的一个方法，自由场量子化

$$[\Phi(x), \Phi(x')] = i\tilde{\Delta}(x - x') \tag{10.7.5}$$

本身就应该按照避开 $\rho(\kappa^2)$ 正定条件的道路，把除掉光锥上奇异性的可能从头追到底。作为这种例子我们推荐，**混合场理论**，形式化了的规则方法，海森伯统一场论等等。

$\Delta$ 函数和 $\Delta^{(1)}$ 函数的奇异性，由下面 $\Delta^{(\pm)}$ 函数

$$\Delta^{(\pm)}(x,\kappa) = \frac{\varepsilon(x_0)}{4\pi}\delta(x_\mu^2) \pm \frac{i}{4\pi^2 x_\mu^2} \pm \frac{i\kappa^2}{8\pi^2}\ln\frac{\kappa|x_\mu^2|^{1/2}}{2} + \frac{\kappa^2}{16}\varepsilon(x_0)\theta(-x_\mu^2) + O(\sqrt{|x_\mu^2|}\ln|x_\mu^2|) \tag{10.7.6}$$

在光锥附近（$x_\mu^2 \sim 0$）的行为，通过(10.4.42)和(10.4.45)两式给出。在(10.7.3)中只取离散部分，有

$$\sum_i c_i = 0, \ \sum_i \kappa_i^2 c_i = 0, \cdots, \ \sum_i \kappa_i^{2n} c_i = 0. \tag{10.7.7}$$

这样，在 $(c_i, \kappa_i)$ 上逐渐加上越来越高的条件，在最前面的两个条件下，对应于上述各种 $\Delta$ 函数的 $\tilde{\Delta}$ 函数的奇异性全部除掉了，最后直到它们的 $(n-1)$ 次微商均为连续。条件(10.7.7)称为泡利-维拉斯（Villars）**标准条件**。

另外，用连续谱作一个有意义的例子，考虑

$$\rho(\kappa^2) = \delta(\kappa^2) - \frac{a}{2\kappa}J_1(a\kappa). \tag{10.7.8}$$

把这时的 $\tilde{\Delta}$ 记为 $\tilde{D}_a$，有

$$\widehat{D}_{\bullet} = \frac{-\varepsilon(x_0)}{2\pi}\delta(x_\mu^2 + a^2)_{\bullet} \qquad (10.7.9)$$

像在图 10.6 中看到的那样，把 $D(x)$ 函数在光锥上的奇异性错开时间区域，把 $a$ 与**长度普适常数**联系起来，这是马尔可夫(Markov)提倡的。在上式推导过程中，用到了

$$\int xyJ_1(xy)J_1(xz)dx = \delta(y-z)_{\bullet} \qquad (10.7.10)$$

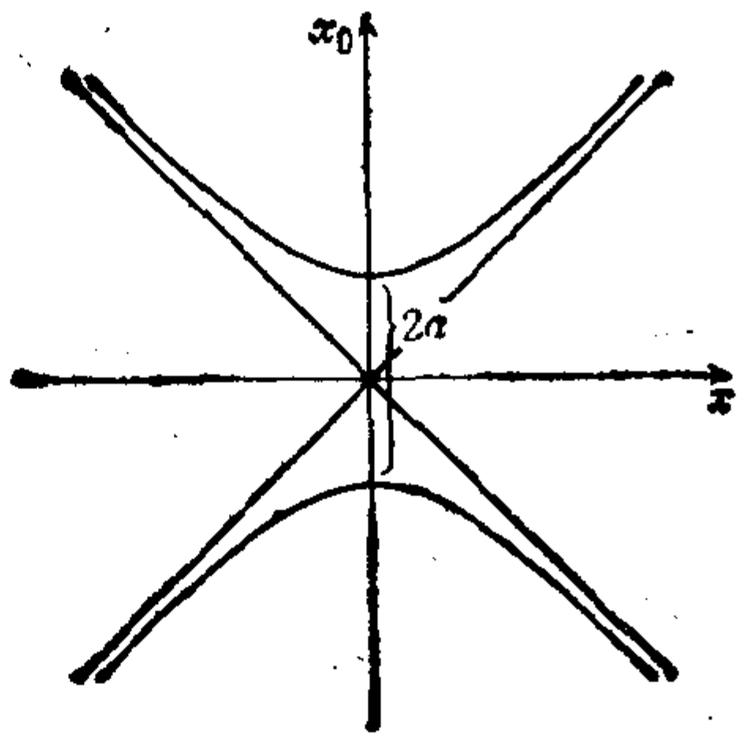


图 10.6

不过，同上面情形一样，为了除掉在光锥上的奇异性，像在(10.7.7)式和(10.7.8)式中看到的那样，必须抛弃谱函数的正定条件。我们下面的讨论只限于离散谱情形。来研究研究这时满足对易关系(10.7.5)的场 $\Phi(x)$ 具有哪些内容。我们与其说它不满足简单的克莱因-戈登方程，不如说它应该表示成具有各种质量 $\kappa_i$ 的相互独立的场 $\phi_i(x)$ 的叠加：

$$\Phi(x) = \sum_i \alpha_i\phi_i(x) \quad (\alpha_i \text{ 为实数})_{\bullet} \qquad (10.7.11)$$

将其代入(10.6.5)式，得

$$[\Phi(x),\Phi(x')] = \sum_i \alpha_i^2[\phi_i(x),\phi_i(x')]$$

$$= i\sum c_i\Delta(x-x',\kappa_i)_{\bullet} \qquad (10.7.12)$$

为此，要求选择

$$c_i = \varepsilon_i(\alpha_i)^2,\ \ \varepsilon_i = \pm 1, \qquad (10.7.13)$$

$$[\phi_i(x),\phi_i(x')] = i\varepsilon_i\Delta(x-x',\kappa_i)_{\bullet} \qquad (10.7.14)$$

这里重要的是，(10.7.14)式中出现了符号因子 $\varepsilon_i$。当 $\varepsilon_i$ 为正时，不会出现与 § 10.4 中讨论标量场时出现的同样问题。而在 $\varepsilon_i$ 为负时，即当

$$[\phi(x),\phi(x')] = -i\Delta(x-x') \qquad (10.7.15)$$

时，(10.4.27)式换了符号，变成

$$\left.\begin{aligned}[a(\boldsymbol{k}),a^{\dagger}(\boldsymbol{k}')] &= -\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\\ [a(\boldsymbol{k}),a(\boldsymbol{k}')] &= 0\end{aligned}\right\}. \tag{10.7.16}$$

这里真空的定义与(10.4.36)式相同

$$\left.\begin{aligned}a(\boldsymbol{k})|0\rangle &= 0\\ \langle 0|0\rangle &= 1\end{aligned}\right\}, \tag{10.7.17}$$

场的真空期待值由(10.4.41)和(10.4.44)式改变了符号,变成

$$\langle 0|\phi(x)\phi(x')|0\rangle = -i\Delta^{(+)}(x-x'), \tag{10.7.18}$$

$$\langle 0|\{\phi(x),\phi(x')\}|0\rangle = -i\Delta^{(1)}(x-x'). \tag{10.7.19}$$

这样,对于场 $\Phi(x)$,有

$$\Phi^{(+)}(x)|0\rangle = 0, \tag{10.7.20}$$

$$\langle 0|\{\Phi(x),\ \Phi(x')\}|0\rangle = \sum_i c_i\Delta^{(1)}(x-x',\kappa_i), \tag{10.7.21}$$

$\Delta^{(1)}$ 函数在光锥上的奇异性也被除掉了。

### b) 不定度规的引入

然而，根据对易关系(10.7.16)和真空(10.7.17)所构成的希耳伯空间中,必然包含具有不定度规的状态。作为简单的例子,我们来计算 $a^{\dagger}(\boldsymbol{k})|0\rangle$ 的标积

$$\{\langle 0|a(\boldsymbol{k}')\}\{a(\boldsymbol{k})|0\rangle\} = -\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'). \tag{10.7.22}$$

进而可以确定,对于一般的态矢 $(a^{\dagger n}(\boldsymbol{k})/\sqrt{n!})|0\rangle$，当 $n$ 为偶数时,它有正模,当 $n$ 为奇数时,它有负模。

为了在这种赝希尔伯特空间中公式化，与通常的希尔伯特空间情形一样,对应于所建立的右矢$|\alpha\rangle$空间,再引入左矢$\langle\alpha|$ 空间,它们之间所定义的**标积**满足下面关系

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^{*}. \tag{10.7.23}$$

$\langle\alpha|\alpha\rangle$ 只必须是实数,而不必正定。与此相应，把与算符 $A$ 对应的原来的厄米共轭算符 $A^{\dagger}$ 的概念也加以推广，变成伴随算符。其形式与厄米共轭相同,对应于 $A|\alpha\rangle$，通过左矢 $\langle\alpha|A^{\dagger}$ 来定义，满足 $\langle\alpha|A|\beta\rangle = \langle\beta|A^{\dagger}|\alpha\rangle^{*}$。但是必须注意其矩阵表示。赝希尔

伯特空间具有正交归一系 $\{|n\rangle\}$ 时，一般有

$$\langle n|n'\rangle = \varepsilon_n \delta_{nn'}, \tag{10.7.24}$$

包含符号因子 $\varepsilon_n(=\pm 1)$。现在计算与厄米算符对应的自伴算符 $F(=F^\dagger)$ 的矩阵元

$$f_{nm} \equiv \langle n|F|m\rangle = \langle m|F|n\rangle^* = f^*_{mn}. \tag{10.7.25}$$

即 $[f_{nm}]$ 给出一个厄米矩阵。但是，另一方面根据

$$F|m\rangle = \sum_n F_{nm}|n\rangle \tag{10.7.26}$$

定义 $F$ 的表示矩阵 $[F_{nm}]$，其矩阵元满足

$$f_{nm} = \varepsilon_n F_{nm}, \tag{10.7.27}$$

它一般不是厄米矩阵。

若像上面那样，持有不定度规，则显然可以建立在光锥上没有奇异性的场论。但是，这并不是说，仅因为对易关系(10.7.15)中的负号，就不可避免地要引入不定度规。实际上，交换上面的产生和湮灭算符的作用，不用(10.7.17)式中的真空定义，而代之以

$$\left.\begin{aligned} a^\dagger(\boldsymbol{k})|0\rangle &= 0 \\ \langle 0|0\rangle &= 1 \end{aligned}\right\}. \tag{10.7.28}$$

这样做了之后，系统的正交基矢 $(a^{*n}(\boldsymbol{k})/\sqrt{n!})|0\rangle$全部具有正模。但是，这时真空期待值 $\langle 0|\{\phi(x), \phi(x')\}|0\rangle$ 显然回到(10.4.44)的形式。因此，对于场 $\Phi(x)$，有

$$\langle 0|\{\Phi(x), \Phi(x')\}|0\rangle = \sum_i |c_i| \Delta^{(1)}(x-x', \kappa_i), \tag{10.7.29}$$

不仅没有除掉 $\Delta^{(1)}$ 函数的奇异性，也不能像(10.7.20)式那样通过场$\Phi(x)$来简洁地规定真空。

### c) 多质量波动方程

尝试从拉氏形式用力学方式导出具有上述性质的场，是派伊(Pais)和乌伦贝克(1950)的工作。他们假定了下面含有高阶微商的拉氏密度函数：

$$L = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\Phi(x)\right) f(\Box)\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\Phi(x)\right), \tag{10.7.30}$$

其中

$$f(\Box) = \prod_{i=1}^{N}\left(1 - \frac{\Box}{\kappa_i^2}\right). \tag{10.7.31}$$

由此可导出下面的欧勒方程：

$$\Box f(\Box)\Phi(x) = 0. \tag{10.7.32}$$

作为包含时间高阶微商的拉氏正则形式，已知的有奥斯特洛格拉德斯基（Ostrogradski）方法，而这里采用稍微不同的相对论不变的方法．首先引入下面辅助场：

$$\left.\begin{aligned}\phi_0(x) &= f(\Box)\Phi(x)\\ \phi_i(x) &= \frac{\Box}{\kappa_i^2}\prod_{l\neq i}\left(1 - \frac{\Box}{\kappa_l^2}\right)\Phi(x)\end{aligned}\right\}. \tag{10.7.33}$$

它们满足下面的波动方程：

$$\left.\begin{aligned}&\Box\phi_0(x) = 0\\ &(\Box - \kappa_i^2)\phi_i(x) = 0 \quad (i = 1,2,\cdots,N)\end{aligned}\right\}. \tag{10.7.34}$$

作为$\Phi$场的拉氏密度函数，这儿不用(10.7.30)式，而采用

$$\tilde{L} = -\frac{1}{2}\sum_{i=0}^{N}\zeta_i\left\{\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\phi_i\right)^2 + \kappa_i^2\phi_i\right\}. \tag{10.7.35}$$

不过，适当选择$(N+1)$个常数$\zeta_i$，则除了$\frac{\partial}{\partial x_\mu}f_\mu(x)$形式的项之外，这个$\tilde{L}$就与(10.7.30)式中的$L$相同了．这时$L$和$\tilde{L}$给出同一作用量积分，与(10.4.58)式中狄拉克场情形中叙述过的一样．实际上，把(10.7.33)式代入(10.7.35)式，再与(10.7.30)式比较，稍加计算之后，就得到了下面关于$\zeta_i$的条件

$$\zeta_0 f(\Box) - \sum_{j=1}^{N}\zeta_j\frac{\Box}{\kappa_j^2}f(\Box)\Big/\left(1 - \frac{\Box}{\kappa_j^2}\right) = 1. \tag{10.7.36}$$

首先令 $\Box=0$，有

$$\zeta_0 = 1. \tag{10.7.37}$$

再令 $\square - \kappa_i^2$，有

$$\zeta_i = -1/\prod_{l\neq i}(1-\kappa_i^2/\kappa_l^2) = 1/(\kappa_i^2 f'(\kappa_i^2)). \quad (10.7.38)$$

这样定出的 $\zeta_i$ 满足下面恒等式：

$$\sum_{i=0}^{N} \zeta_i \kappa_i^{2n} = 0 \quad (n = 0,1,\cdots,N-1). \quad (10.7.39)$$

并且由(10.7.36)式可以导出下面关系：

$$\Phi(x) = \zeta_0\phi_0 - \sum_{i=1}^{N} \zeta_i\phi_i(x). \quad (10.7.40)$$

选用(10.7.33)式中的 $\phi_i(x)(i=0,1,2,\cdots,N)$ 作为系统的广义坐标，其共轭广义动量由下式给出：

$$\pi_i(x) = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial(\partial_0\phi_i(x))} = \zeta_i \frac{\partial\phi_i}{\partial x_0}, \quad (10.7.41)$$

得到正则对易关系

$$[\phi_i(x),\phi_j(x')] = i\delta_{ij}\frac{1}{\zeta_i}\Delta(x-x',\kappa_i). \quad (10.7.42)$$

由此得

$$[\Phi(x),\Phi(x')] = i\left[D(x-x') + \sum_{i=1}^{N}\zeta_i\Delta(x-x',\kappa_i)\right]. \quad (10.7.43)$$

系统的哈密顿量 $\bar{H}$ 为

$$\bar{H} = \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{N}\zeta_l\int d^3x : \left[\left(\frac{\partial\phi_l}{\partial x_0}\right)^2 + (\nabla\phi_l)^2 + \kappa_l^2\phi_l^2\right] : . \quad (10.7.44)$$

其中应注意由(10.7.38)式定义的 $\zeta_l$ 的符号。设 $\kappa_1^2 < \kappa_2^2 < \cdots < \kappa_N^2$，由于 $f(x)$ 是一个如图 10.7 所示的函数，因此 $\zeta_i$ 与 $i$ 一起变号.

若在此理论中作下面置换：

$$\zeta_i \to c_i,\ \sqrt{|\zeta_i|}\,\phi_i \to \phi_i, \quad (10.7.45)$$

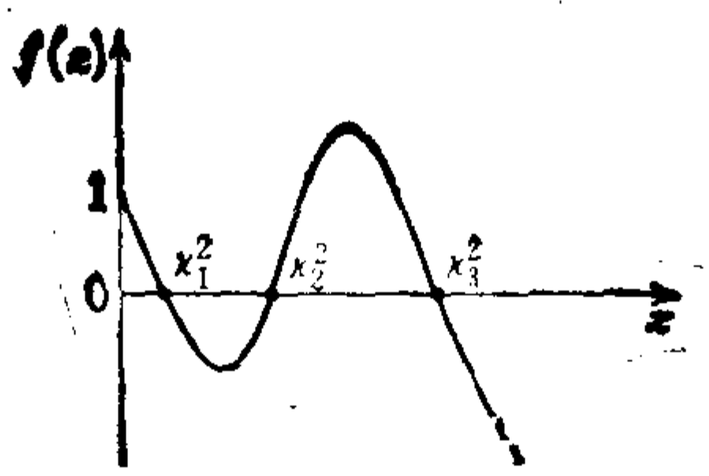



图 10.7

则如何利用 a)中混合场的讨论是清楚的. 为了看出 $\overline{H}$ 的构造,象(10.4.26)式中那样做$\sqrt{|\zeta_i|}\,\phi_i(x)$ 的傅里叶展开，考虑到对易关系(10.7.42),得到

$$\left.\begin{aligned}&[a_i(\boldsymbol{k}),a_j^\dagger(\boldsymbol{k}')]=\delta_{ij}\frac{\zeta_i}{\zeta}\,\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\\&[a_i(\boldsymbol{k}),a_j(\boldsymbol{k}')]=0\end{aligned}\right\}. \tag{10.7.46}$$

于是便把(10.7.44)式中的 $\overline{H}$ 写成下面样子:

$$\overline{H}=\sum_{i=0}^{N}\frac{\zeta_i}{|\zeta_i|}\int d^3\boldsymbol{k}\,\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa_i}\,a_i^\dagger(\boldsymbol{k})a_i(\boldsymbol{k}). \tag{10.7.47}$$

像(10.7.17)式那样定义真空:

$$\left.\begin{aligned}&a_i(\boldsymbol{k})|0\rangle=0\quad(i=0,1,2,\cdots,N)\\&\langle 0|0\rangle=1\end{aligned}\right\}, \tag{10.7.48}$$

对于 $\zeta_i/|\zeta_i|=-1$ 的场,应该有不定度规。但是,这里应该注意的是,在与全部 $i$ 对应的基矢 $(a_i^{\dagger n}(\boldsymbol{k})/\sqrt{n!})|0\rangle$ 上,$\overline{H}$ 的**本征值**常常是**正定**的。

派伊和乌伦贝克所做的是，把这个场 $\Phi(x)$ 换成矢量场,对于 $\kappa_0=0$ 的电磁势 $A_\mu(0)$ 还伴随有质量为 $\kappa_i$ 的具有不定度规的假想场 $A_\mu^{(i)}$,目的在于建立不发散的量子电动力学。但是，这个理论缺少决定 $\kappa_i$ 分布(即**质量谱**)的原理,并且,如上所述，不得不引入具有不定度规的粒子状态，而这种度规又不可避免地与**量子力学的概率解释**不相容。关于克服后一困难方面，请注意刚才叙述过的重要性质，即作为系统守恒量的哈密顿量本征值在这种情况下也是正定的(期待值的符号不确定)。实际上，具有不定度规的假

想场的质量都十分大，若其静止能在目前已知的基本粒子的反应能之上，则观测这些粒子的产生不会存在困难，存在着消除发散的理论上的可能性。 但是，在这种大质量的不定度规粒子的“稳定性”等方面，还留有原则上的困难问题。

以上本章所叙述的场量子论，仍如开始所说的那样，是在所谓**局域性**的大框架中进行讨论的。与这个研究不同的课题是自古以来就追求的**非局域**理论，关于这方面的详细内容，请参看本讲座第十卷《基本粒子理论》第十四章。

# 第十一章　约束系的正则理论

本章首先讨论有约束的哈密顿体系正则形式的一般理论。其次，作为应用，考察光锥中用一根母线连接的超平面上场的正则理论及其量子化，以标量场作为例子。再次，通过比较空间超平面上的量子化，研究其共同点及不同点。

## §11.1 广义狄拉克的一般正则理论

有约束哈密顿体系正则形式的一般理论是 P. A. M. 狄拉克(1950)开始讨论的。这节考虑最简单的有限自由度体系。

### a) 奇异拉氏量和约束

体系的拉氏量为

$$L(\dot{q},q),\ q=(q_1,\cdots,q_N).$$

其中 $\dot{q}=d\dot{q}/dt$，$L$ 不显含时间 $t$。定义 $q_n$ 的正则共轭动量 $p_n$ 为

$$p_n=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n}\qquad (n=1,\cdots,N),\tag{11.1.1}$$

在通常的体系中，求解上式得到

$$\dot{q}_n=f_n(p,q).$$

但是，$p_n$ 不是 $\dot{q}_n$ 的独立函数，有时无法象上面那样解出 $\dot{q}$ 来。在拉氏量奇异，即

$$\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_n\partial \dot{q}_{n'}}\right)=0\tag{11.1.2}$$

成立的情况下，就会如此。把上式左边得到的矩阵的秩记为 $N-M(<N)$，这个系统具有 $M$ 个独立的约束

$$\phi_m(p,q)=0\qquad (m=1,\cdots,M),\tag{11.1.3}$$

系统的运动与初始条件无关，而限制在 $2N$ 维相空间 $\Gamma$ 内的 $2N-M$ 维子空间 $\Gamma_1$ 里。上面那样的仅由动量的定义得到的约束称为**第一种约束**。

系统的哈密顿量由下式给出：

$$H(p,q)=\sum_{n=1}^{N}p_n\dot{q}_n-L(\dot{q},q), \tag{11.1.4}$$

由此，其变分为

$$\delta H=\sum_{n=1}^{N}(\delta p_n\dot{q}_n+p_n\delta\dot{q}_n)-\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_n}\delta\dot{q}_n+\frac{\partial L}{\partial q_n}\delta q_n\right).$$

使用 $p_n$ 的定义(11.1.1)得到

$$\delta H=\sum_{n=1}^{N}\left(\delta p_n\dot{q}_n-\frac{\partial L}{\partial q_n}\delta q_n\right).$$

即使在有约束情形，$H$ 也显然可以表示为 $p$ 和 $q$ 的函数。

在经典理论中起重大作用的泊松括号的定义是

$$\{A,B\}=\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial q_n}\frac{\partial B}{\partial p_n}-\frac{\partial B}{\partial q_n}\frac{\partial A}{\partial p_n}\right), \tag{11.1.5}$$

象在第三章已经知道的那样，它具有如下代数性质：

$$\{A,B\}=-\{B,A\}, \tag{11.1.6a}$$

$$\{c_1A_1+c_2A_2,B\}=c_1\{A_1,B\}+c_2\{A_2,B\}, \tag{11.1.6b}$$

$$\{A,B_1B_2\}=\{A,B_1\}B_2+B_1\{A,B_2\}, \tag{11.1.6c}$$

$$\{A,\{B,C\}\}+\{B,\{C,A\}\}+\{C,\{A,B\}\}=0. \tag{11.1.6d}$$

根据泊松括号的定义可知，正则变量满足

$$\{q_n,p_{n'}\}=\delta_{nn'},$$

$$\{q_n,q_{n'}\}=\{p_n,p_{n'}\}=0.$$

在没有约束的系统中，物理量 $A$ 随时间的变化可由下式给出(参看第三章)：

$$\dot{A}=\{A,H\}.$$

而在有约束情形，作为时移生成元，在(11.1.4)式给出的 $H$ 中应加进 $\phi_m$ 的任意线性组合。就是说，必须用下式来代替 $H$：

$$H^* = H + \sum_{m=1}^{M} u_m \phi_m . \tag{11.1.7}$$

其中 $u_m$ 不仅是 $q$ 和 $p$ 的函数，而且还是 $\dot{q}$ 的函数。由于 $2N$ 个变量 $q$ 和 $p$ 之间有 $M$ 个约束，因此只有 $2N - M$ 个独立变量，只有加上 $M$ 个 $u$ 才能表示 $2N$ 个拉格朗日变量 $q$ 和 $\dot{q}$。在这种含义下，也把 $p$、$q$、$u$ 叫做哈密顿变量。

对于新哈密顿量 $H^*$，$A$ 随时间的变化由下式给出：

$$\dot{A} = \{A, H^*\}, \tag{11.1.8}$$

由于(11.1.7)式右边的 $u_m$ 不只是用 $p$ 和 $q$ 表示的，因此必须扩充泊松括号的定义。但是为了达到我们的目的，没有必要具体地给出广义泊松括号，而只要求有与(11.1.6)式相同的代数性质就足够了。把(11.1.7)式代入(11.1.8)式得

$$\dot{A} = \{A, H\} + \sum_{m=1}^{M} u_m \{A, \phi_m\} + \sum_{m=1}^{M} \{A, u_m\} \phi_m .$$

只有当全部约束(11.1.3)都满足时，才意味着等号，这里最好用≈。（含意是，只在 $2N - M$ 维子空间 $\Gamma_1$ 中等号才成立，也常常把它写成 $\underset{\Gamma_1}{=}$ .）这样，上式最右边一项去掉后，写成

$$\dot{A} \approx \{A, H\} + \sum_{m=1}^{M} u_m \{A, \phi_m\}. \tag{11.1.9}$$

把记号≈叫做**弱等于**。与此相对应，在区别≈时，把＝叫做**强等于**。上面规定了约束的(11.1.3)式必须写成

$$\phi_m(p, q) \approx 0. \tag{11.1.3'}$$

值得注意的是，取泊松括号之前没有令 $\phi_m \approx 0$。由于泊松括号包含着微商运算，因此显然，即使取了 $\phi_m \approx 0$，做了括号之后的量也不一定会变成≈0。

这里要讨论选择约束函数 $\phi$ 的方法。代替 $\phi$，可以取 $\phi^2$，或者也可以考虑取 $\phi^{1/3}$，这是一个所谓如何选择的问题。如果某 $\phi$ 的 $\{p_n, \phi\}$ 和 $\{q_n, \phi\}$ 都不趋向无限大也都不近似等于零，则称 $\phi$ 为正则约束函数。如果 $\phi$ 是正则的，那么 $\phi^2$ 与 $p$ 以及与 $q$ 的泊松括

号都近似等于零，因此 $\phi^2$ 不是正则的。可以认为这类约束函数等于零。而由于 $\phi^{1/3}$ 与 $p$ 或者与 $q$ 的泊松括号趋向于无限大，所以 $\phi^{1/3}$ 同样不是正则的。以后要经常把约束函数取为正则的。若某量 $A$ 近似等于零，则把它写为 $A = f(\phi_m;p,q,u)-f(0;p,q,u)$，而由于考虑到两个以上 $\phi$ 的乘积等于零，因此可以把 $A$ 表示为 $\phi_m$ 的线性组合

$$A = \sum_{m=1}^{M} c_m\phi_m,\ c_m(p,q,u) = \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_m}\right)_{\phi=0}$$

为了简便，常把这种约束函数就叫做约束。

为了使理论保持一致，(11.1.3′) 式必须在任意时刻成立。这样，有必要使

$$\begin{aligned}\dot{\phi}_m &= \{\phi_m, H^*\}\\ &\approx \{\phi_m, H\} + \sum_{m'=1}^{M} u_{m'}\{\phi_m, \phi_{m'}\}\\ &\approx 0 \qquad (m = 1,\cdots,M).\end{aligned} \tag{11.1.10}$$

若上式成立，$\phi_m$ 的更高次时间微商也全都近似等于零，只要把近似等于零的含义理解为 $\phi_m$ 的某个线性组合，立刻就会明白这点。上式包含了 $u$，这正是它给出的关于 $u$ 的条件。否则，它就不只是一个恒等式，而应该得到一个新的约束。由理论一致性而得到的这种新约束叫做**第二种约束**，而为了使它也在任意时刻成立，必须要求与(11.1.10)式一样的条件。建议读者用奇异拉格朗日量

$$L = \frac{m}{2}(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) + \lambda\dot{q}_3(q_1 - q_2) - \frac{\omega}{2}(q_1 - q_2)^2,\ \lambda \neq 0.$$

来具体地做做看。

由于有限自由度系统的约束也是有限的，因此这种操作必然在有限次内结束，结果，除第一种约束(11.1.3′)外，得到一些第二种约束

$$\phi_k(p,q) \approx 0 \quad (k = M+1,\cdots,M+K), \tag{11.1.11}$$

以及对于 $u$ 的条件

$$\{\phi_j, H\} + \sum_{m=1}^{M} u_m \{\phi_j, \phi_m\} \approx 0. \qquad (11.1.12)$$

在包括第二种约束的全部约束都满足时，上面的≈号变成等号.而$\phi$的角标 $j$ 从 1 变到$M+K$的过程中，除了使上式成为恒等式或归结于第二种约束的情形之外，顶多只能取$M$个值。

把(11.1.12)式看成是 $u$ 的非齐次方程，为使理论上一致，必然存在解 $u$[1]，$u$ 的解一般不是唯一的。若存在特解 $u_m \approx U_m$，并且齐次方程的特解为 $V_{am}$

$$\sum_{m=1}^{M} V_{am}\{\phi_j, \phi_m\} \approx 0, \qquad (11.1.13)$$

则用任意函数 $v_a$，可以把 $u$ 的通解表示为下述形式：

$$u_m \approx U_m + \sum_a v_a V_{am}. \qquad (11.1.14)$$

把这样的 $u$ 代入(11.1.7)式，得

$$H^* \approx H + \sum_{m=1}^{M} \left\{ U_m + \sum_a v_a V_{am} \right\} \phi_m,$$

由于可以在取泊松括号之前去掉两个约束函数相乘的项，因此，不用≈而用=，写成

$$H^* = H' + \sum_a v_a \phi_a, \qquad (11.1.15)$$

其中

$$H' = H + \sum_{m=1}^{M} U_m \phi_m, \qquad (11.1.16)$$

$$\phi_a = \sum_{m=1}^{M} V_{am} \phi_m. \qquad (11.1.17)$$

下面，对于物理量(或约束)，分别定义所谓第一类量和第二类量。对于全部约束来说，若某个量 $A$ 满足条件

$$\{A, \phi_j\} \approx 0 \quad (j = 1, \cdots, M + K),$$

1) 若(11.1.12)式的解不存在，则开始设的拉格朗日量就必须舍去。

则称 $A$ 为第一类量，否则叫第二类量。量 $A$、$B$ 都是第一类量，它们的泊松括号 $\{A, B\}$ 也是第一类量，很容易用雅可比恒等式(11.1.6d) 证明这点。 从拉格朗日量出发最初得到的哈密顿量 $H$ 一般不一定是第一类量，但应注意，(11.1.16)式给出的 $H'$ 就变成第一类的了。 并且(11.1.17)式给出的 $\phi_a$ 是第一类约束。把 $H$ 换成 $H^*$，哈密顿量显然变成第一类的了。

即使满足理论的一致性所要求的全部条件，一般仍留有所谓 $v_a$ 任意性。 在这种情况下，即使给定某时刻力学变量 $p(t_0)$ 和 $q(t_0)$，再根据

$$\left.\begin{aligned} \dot{p}_n &\approx \{p_n, H'\} + \sum_a v_a\{p_n, \phi_a\} \\ \dot{q}_n &\approx \{q_n, H'\} + \sum_a v_a\{q_n, \phi_a\} \end{aligned}\right\} \tag{11.1.18}$$

也不能完全决定后一时刻的力学变量值。当然，物理状态是完全决定了，这样就意味着，物理状态和 $p(t)$、$q(t)$ 之间不是一一对应的。因此，$\phi_a$ 不过就是使物理状态不变的无限小接触变换的生成元。

一般称物理状态不变的变换为规范变换，若 $\phi_a$、$\phi_b$ 是规范变换的生成元，则 $\{\phi_a, \phi_b\}$ 也是同一规范变换的生成元。 根据 $\phi_a$ 和 $\phi_b$ 是第一类约束，也可以把 $\{\phi_a, \phi_b\}$ 表示为第一类约束的线性组合，而它却不一定是第一种约束。但是，把约束分成第一种第二种，并没有什么物理意义。这是因为，作为规范变换的生成元，它们没有产生什么不同的作用。因此，在(11.1.15)式中毫无理由把 $\phi_a$ 限制为第一种约束。 作为最一般的哈密顿量，不是(11.1.15)，而应该考虑

$$H_T = H' + \sum_a v_a\phi_a. \tag{11.1.19}$$

与(11.1.15)式不同之处在于，上式对 $a$ 求和包括全部独立的第一类约束。注意，即使新加进去第二种约束，因为它是第一类的，所以上述讨论完全不受影响。

### b) 狄拉克括号和向量子论的过渡

取第二类约束 $\phi_i$ 的适当线性组合，往往可以得到第一类约束。即使这样尽量地把第二类约束换成第一类，也会有一些无论如何也换不成第一类约束的，这时把这些剩下的约束叫做第二类约束的不可约组。将其表示为

$$\chi_s(p,q) \approx 0 \quad (s = 1,\cdots,S),$$

于是定义一 $S$ 行 $S$ 列矩阵

$$C_{ss'} \equiv \{\chi_s,\chi_{s'}\}. \tag{11.1.20}$$

它具有性质

$$\det(C) \not\approx 0. \tag{11.1.21}$$

若 $\det(C) \approx 0$，则可证明，能够取 $\chi_s$ 的适当线性组合来建造第一类约束，而这与 $\chi_s$ 属于第二类约束的不可约组这一事实矛盾。反之，当第二类约束具有性质(11.1.21)时，$\chi_s$ 构成不可约组。由于 $C$ 是反对称矩阵，若 $S$ 是奇数，则 $\det(C) = 0$，因此，不可约的第二类约束的个数 $S$ 必须是偶数。

由(11.1.21)式知 $C$ 存在着逆矩阵，将其表示为 $C^{-1}$，定义**狄拉克括号**

$$\{A,B\}_D \equiv \{A,B\} - \sum_{s=1}^{S}\{A,\chi_s\}(C^{-1})_{ss'}\{\chi_{s'},B\}. \tag{11.1.22}$$

这个狄拉克括号具有的代数性质与原来泊松括号的(11.1.6)完全相同(前三个性质已经被证明了，关于最后的雅可比恒等式，例如可参看本卷末的 [Dirac] (1950))。根据狄拉克括号的定义，若 $A$ 和 $B$ 中至少有一个是第一类量，则有

$$\{A,B\}_D \approx \{A,B\}.$$

由于(11.1.18)式中给出的 $H_T$ 是第一类的，因此物理量 $A$ 随时间的变化就可以用狄拉克括号表示为

$$\dot{A} \approx \{A,H_T\}_D. \tag{11.1.23}$$

狄拉克括号的优点可以从下面看出，从(11.1.22)式得

$$\{A,\chi_s\}_D = \{A,\chi_s\} - \sum_{s',s''=1}^{S} \{A,\chi_{s'}\}(C^{-1})_{s's''}C_{s''s}$$

$$= \{A,\chi_s\} - \{A,\chi_s\} = 0.$$

因此，在狄拉克括号中，即使是不可约第二类约束，也可以令

$$\chi_s = 0. \tag{11.1.24}$$

换句话说，通过引人狄拉克括号，可以去掉与物理上多余自由度相对应的第二类约束。

再来谈谈第一类约束。前面说过，它对应于规范自由度。在理论上也希望把这种规范自由度原封不动地保留下来，可以施加适当的规范条件而除掉哈密顿量的任意性，其方法往往是简单的。为此，可以在应消去的第一类约束$\phi_a \approx 0$中加上适当的约束$\tilde{\phi}_a \approx 0$，使二者都变成不可约第二类约束，以便换到新的狄拉克括号时消去它们。

从经典理论过渡到量子论，是通过把狄拉克括号换成对易子，即通过下述置换来实现的：

$$\{A,B\}_D \to \frac{1}{i\hbar}[A,B]. \tag{11.1.25}$$

波函数 $\psi(q,t)$ 的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = H_T\psi. \tag{11.1.26}$$

第二类约束满足算符方程

$$\chi_s(p,q) = 0, \tag{11.1.27}$$

但必须把第一类约束看成是对于$\psi$的辅助条件

$$\phi_a\psi = 0. \tag{11.1.28}$$

由于有这个条件，就可以把薛定谔方程(11.1.26)写为

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = H'\psi, \tag{11.1.29}$$

$\psi$中的$v_a$的任意性消失了。

实际地考虑一般性理论，过渡到量子论的问题是一个麻烦问题。 虽然也能建立起没有约束的系统，但是因为物理量不对易，

又无法从经典理论出发来决定对应算符的演算顺序，因此，对应于对象系统，必须找出其演算顺序使得构成的理论没有矛盾．现在的这个讨论仍有困难，例如，第一类约束 $\phi_\alpha$ 和 $\phi_{\alpha'}$ 的对易子为

$$[\phi_\alpha,\phi_{\alpha'}]=\sum_{\alpha''}C_{\alpha\alpha',\alpha''}\phi_{\alpha''}, \qquad (11.1.30)$$

往往不能把右边的 $\phi_{\alpha''}$ 写在最右边．幸运的是，我们一般处理的系统中，运算的顺序可以说没有什么大问题．

上面叙述的关于有限自由度系统的讨论，推广到有无限自由度的场论，在一般情况下没有特别的困难．另外，这里没有涉及具体内容，卷末推荐的文献 [Hanson, Regge, Teitelboim] 是关于相对论质点、相对论性陀螺、弦模型、电磁场、杨-密尔斯(Mills)规范场、重力场等各种问题的应用．下节叙述一般正则理论的一个恰当的有意思的例子，即讨论非空间超平面上场正则量子化的可能性．

## §11.2 在类光的超平面上场的正则理论

### a) 正则量子化面及其稳定群

正如上一章所详细叙述的那样，相对论场量子论研究的理论基础是由海森伯-泡利的论文 (1929)给出的．他们把自由场看成是无限多个谐振子的叠加，导出同时刻场的正则对易关系．这就是海森伯-泡利所做的场正则量子化．

正则形式中，四维闵可夫斯基时空用三维空间超平面(或说超曲面)与沿某时间方向的动参数来表示，后者起时间的作用，前者起某时刻的所谓空间的作用．把四维时空如此分割，使理论的洛伦兹不变性明显化不一定是所期望的，而掌握正则形式的方法可以靠与所谓某时刻状态的传统方法对应．另外，从经典理论向量子论过渡比较容易，这也是所能例举出来的正则量子化的又一个优点．下面我们的讨论将只限于正则量子化，而在这个范围内，从

比海森伯-泡利量子化稍微扩大了的视野出发，再来看看所谓场的正则量子化问题。

海森伯-泡利量子化的最大特征在于，用一定时刻的超平面作为进行量子化的面(以下称为**量子化面**)，更一般地用空间超曲面作为量子化面。为了讨论简单，以后只考虑用超平面来做量子化面。现在，用 $C_S$ 表示包含四维时空原点的全部空间超平面的集合，其中任意两个面互相靠洛伦兹变换联系。因此，无论在那个面上进行量子化，与 $x^0 = 0$ 时刻面上的量子化都是幺正等价的。所以，如果同时还考虑其他的量子化，那么必须取消所谓"类空"的限制。但是，允许把量子化面取成非空间超平面吗？

这里，我们来简单复习庞加莱群生成元的性质。正像第八章叙述的那样，庞加莱群可以源于洛伦兹群和时空平移群。洛伦兹群的六个生成元给出引起空间旋转的角动量 $J_i$ 与引起洛伦兹变换的 $K_i(i = 1,2,3)$，它们满足 $SL(2\mathbf{C})$ 的对易关系

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k, \tag{11.2.1a}$$

$$[J_i, K_j] = i\epsilon_{ijk}K_k, \tag{11.2.1b}$$

$$[K_i, K_j] = -i\epsilon_{ijk}J_k. \tag{11.2.1c}$$

而时空平移群的四个生成元由能量动量 $P_\mu = (P_0, P_i)$ 给出，构成交换群 $T(4)$。这里省略 $J_i$ 与 $P_\mu$ 的对易关系，$K_i$ 与 $P_\mu$ 的对易关系是

$$[K_i, P_0] = iP_i, \tag{11.2.2a}$$

$$[K_i, P_j] = i\delta_{ij}P_0. \tag{11.2.2b}$$

在数学上，用洛伦兹群和时空平移群的半直积 $SL(2\mathbf{C}) \times T(4)$ 表示庞加莱群。

超平面代数性质重要特征是，在面上的所谓稳定群的概念。在闵可夫斯基时空内保持某超平面不变的庞加莱变换的全体构成了庞加莱群的子群，就把这个子群称为那个超平面的**稳定群**。例如取 $x^0 = 0$ 的面，在空间旋转和空间平移时，它不变，于是这个面的稳定群就是由 $P_i$ 和 $J_i$ 生成的 $SU(2) \times T(3)$。

下面，考虑由庞加莱变换联系的二个超平面 S 和 S′。把 S 的

稳定群记为 $G$，由 S 到 $S'$ 的庞加莱变换对应的幺正算符记为 $U$，则 $S'$ 的稳定群 $G'$ 由下式给出：

$$G' = UGU^{-1}。 \tag{11.2.3}$$

也就是说，庞加莱变换联系的两个超平面的稳定群是同构的．因此，考察稳定群，只要研究通过时空内一点(例如原点)的超平面就足够了。

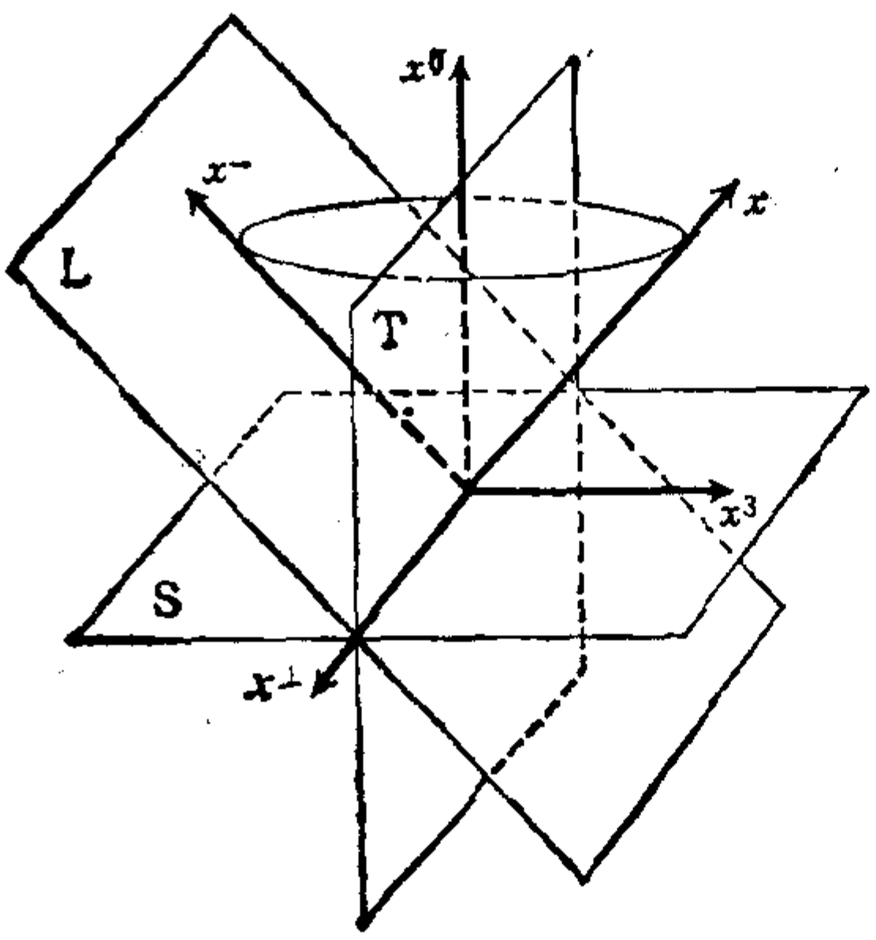



图 11.1 闵可夫斯基时空中的三类超平面．S,L,T 分别代表 $C_S$,$C_L$,$C_T$

通过闵可夫斯基时空原点的超平面中，把可以由洛伦兹变换联系的划为一类，于是能够把它们分成下面三类（参看图 11.1)。 第一类 $C_S$ 基本上在光锥之外，仅原点与光锥共有．它无非是已经叙述过的空间超平面。 第二类 $C_L$ 是与光锥的一条母线相切的全体超平面，可以称其为**光的超平面**(含意是，超平面中包含了光的方向矢量)。 第三类 $C_T$ 的特点是它通过原点并把光锥分成两半．按照(11.2.3)式，由于属同一类的面的稳定群是同构的，因此稳定群的代数构造决定于各个类。

作为 $C_S$ 的代表，先取 $\chi^0 = 0$ 面，其稳定群是上面叙述过的 $SU(2) \times T(3)$．再取作为 $C_T$ 代表的 $\chi^3 = 0$ 面，使这个面保持不变的变换的生成元是 $J_3$、$K_r$ 和 $P_0$、$P_r(r = 1,2)$。 由于下面不再研究属于 $C_T$ 的超平面了，因此应叙述其结果，其稳定群具有 $SL(2,R) \times T_+(3)$ 构造。 式中 $T$ 的下角——正号表示其动量之一 $P_0$ 具有非负的本征值。 请注意，这里 $P_0$ 的作用与 $P_3$ 的作用交换了。

最后考虑作为 $C_L$ 的代表——$\chi^+ = 0$ 面，其中

$$\chi^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi^0 \pm \chi^3)。 \tag{11.2.4}$$

已经知道，对于绕 3 轴的旋转(生成元为 $J_3$)和 $\chi^-,\chi^r(r=1,2)$ 方向的空间平移(生成元为 $P_-,P_r$)，$\chi^+=0$ 面不变．其中

$$P_\pm=\frac{1}{\sqrt{2}}(P_0\pm P_3), \tag{11.2.5}$$

它们中任何一个在真空(除非存在零质量的粒子)以外的状态都只能保持正本征值。

3 轴方向的变速 ($K_3$) 要引起 $\chi^+$ 和 $\chi^-$ 的伸缩，而 $\chi^+=0$ 面作为整体依然不变．下面定义

$$F_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(K_1+J_2),\quad F_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(K_2-J_1), \tag{11.2.6}$$

根据 (11.2.1) 式，它们二者对易．对于 $\chi^+=0$ 面上的点，$\exp(i\beta_rF_r)$ 引起下述变换：

$$\left.\begin{aligned}\chi^-&\to\chi^-+\beta_r\chi^r\\ \chi^r&\to\chi^r\end{aligned}\right\}, \tag{11.2.7}$$

因此，$\chi^+=0$ 面的整体在此变换下不变。

根据(11.2.2)式，$P_\mu$ 和 $F_r$ 的对易关系由下面给出：

$$\left.\begin{aligned}[F_r,P_+]&=iP_r\\ [F_r,P_-]&=0\\ [F_r,P_s]&=i\delta_{rs}P_-\end{aligned}\right\}. \tag{11.2.8}$$

而且，根据(11.2.16)式，$K_3$ 与 $J_3$ 对易，而与 $F_r$ 不对易：

$$[K_3,F_r]=-iF_r. \tag{11.2.9}$$

但是，$F_r$ 与 $P_-$ 对易，由于除了真空以外，$P_-$ 有正的本征值，因此令

$$E_r=F_r/P_-, \tag{11.2.10}$$

得

$$[K_3,E_r]=[K_3,F_r]\frac{1}{P_-}+F_r\left[K_3,\frac{1}{P_-}\right]$$

$$=-iF_r\frac{1}{P_-}+F_r\frac{i}{P_-}=0. \tag{11.2.11}$$

也就是说，$K_3$ 与 $J_3$ 和 $E_r$ 都对易．作为 $E_r$ 的重要性质，补充写下 $[E_r, P_s] = i\delta_{rs}$．

因为 $J_3$ 和 $E_r$ 满足

$$\left.\begin{aligned}&[J_3, E_1] = iE_2, [J_3, E_2] = -iE_1\\&[E_1, E_2] = 0\end{aligned}\right\}, \qquad (11.2.12)$$

所以它们生成二维欧几里得群 $E(2)$．而 $K_3$ 在 $\chi^+ = 0$ 的面上引起 $\chi^-$ 方向的伸缩．由于这两个变换互相对易，因此可以把它表示为 $E(2)\otimes D$．结论显然是，$\chi^+ = 0$ 面的稳定群具有 $\{E(2)\otimes D\} \times T_+(3)$ 的构造．注意，$C_S$ 和 $C_T$ 的稳定群各有六个生成元，而 $C_L$ 有 7 个．

现在，让我们从物理角度来考虑各类超平面性质的不同．在经典理论中，往往是从必须给出的系统的初始条件的角度来选择空间的超平面，在面上取什么样的两点的根据是所谓因果独立性，即应该使其间不可能传递物理信号．显然，在属于 $C_L$ 或 $C_T$ 的超平面上，不存在这种独立性．

关于这种因果独立性，有没有可能用一个稍微弱一些的条件来代替它呢？对此，让我们来考虑与因果顺序有关的所谓可能条件．先取空间超平面 $\chi^0 = 0$，称其为现在，再取 $\chi^0 > 0$，称为未来，$\chi^0 < 0$，称为过去．显然，物理信号决不会逆着过去→现在→未来的方向传播．沿着这个顺序，在属于 $C_T$ 的超平面上是不可能的，而在属于 $C_L$ 的超平面上是可能的．

在沿因果顺序的所谓可能条件下，出现了在光面上量子化的可能性，这个量子化就是狄拉克 1949 年已经提出过的．而与海森伯-泡利量子化的重要区别是，面上各点不限于一定是因果独立的．下一小节以标量场为例讨论在光面上的正则形式，我们想事先指出，在光面上，初始条件不能任意给出，理论要求它必须满足某个约束，像前面预先叙述过的那样．之所以在上节讨论有约束系统的一般的正则理论，正是这个理由．最后，问题归结于，对于一般正则理论，在光面上进行场量子化是否会出现矛盾．

### b) 中性标量场的光面正则形式

首先说明一下后面要用到的记号. 四维矢量 $a^\mu$ 表示为

$$a^\mu = (a^+, a^-, a^1, a^2),$$

这时,度规张量 $g^{\mu\nu}$ 的非零元由下式给出

$$g^{+-} = g^{-+} = -g^{11} = -g^{22}. \tag{11.2.13}$$

因此,矢量的标量积为

$$\begin{aligned} a \cdot b &= a_+ b^+ + a_- b^- + a_1 b^1 + a_2 b^2 \\ &= a_+ b_- + a_- b_+ - a_1 b_1 - a_2 b_2. \end{aligned} \tag{11.2.14}$$

并且,常常把 $\chi^+(\equiv\tau)$ 取作起时间作用的坐标. 与此相应,时间平移生成元由 $P_+(=P^-)$ 给出.

以最简单的场——中性标量场 $\varphi(\chi)$ 为例,其拉氏密度为

$$\begin{aligned} L(\chi) &= \frac{1}{2}\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi - \frac{1}{2}m^2\varphi^2 - V(\varphi) \\ &= \partial_+\varphi\partial_-\varphi - \frac{1}{2}\partial_r\varphi\partial_r\varphi - \frac{1}{2}m^2\varphi^2 - V(\varphi), \end{aligned} \tag{11.2.15}$$

其中 $\partial_\mu \equiv \partial/\partial\chi^\mu$, 质量 $m$ 不等于零. 并且 $V$ 表示非微分型相互作用项. 作为对上一小节讨论的补充,让我们预先求出由上述拉氏密度规定的十个庞加莱生成元.

首先用

$$T^{\mu\nu}(\chi) \equiv \frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\varphi)}\partial^\nu\varphi - g^{\mu\nu}L = \partial^\mu\varphi\partial^\nu\varphi - g^{\mu\nu}L \tag{11.2.16}$$

给出能量·动量密度,根据欧勒方程,它满足

$$\partial_\mu T^{\mu\nu} = 0. \tag{11.2.17}$$

为简单,把 $dx$ 写成

$$dx = dx^- dx^1 dx^2 = d^3x\delta(x^+ - \tau),$$

能量·动量 $P_\nu$ 由下式给出:

$$P_\nu = \int dx T_{-\nu} = \int dx\{\partial_-\varphi\partial_\nu\varphi - g_{-\nu}L\}. \tag{11.2.18}$$

$P_\mu$ 没有 $\tau$ 分量。把上式明显写出来，是

$$P_+ = \int dx \left\{ \frac{1}{2} (\partial_\mu \varphi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \varphi^2 + V(\varphi) \right\}, \quad (11.2.19a)$$

$$P_- = \int dx (\partial_- \varphi)^2, \quad (11.2.19b)$$

$$P_\mu = \int dx \partial_- \varphi \partial_\mu \varphi. \quad (11.2.19c)$$

$P_+$ 显含 $V(\varphi)$，因此只有它不属于稳定群。根据(11.2.19)式，为了使经典场 $\varphi(x)$ 的能量·动量有限，$\varphi$ 和 $\partial_- \varphi, \partial_\nu \varphi$ 在 $x^+ = \tau$ 面上必须有可能做二重积分。

角动量密度为

$$M^{\lambda\mu\nu} = x^\mu T^{\lambda\nu} - x^\nu T^{\lambda\mu}, \quad (11.2.20)$$

由于(11.2.17)式以及 $T^{\mu\nu}$ 是对称张量，所以 $M^{\lambda\mu\nu}$ 满足

$$\partial_\lambda M^{\lambda\mu\nu} = 0, \quad (11.2.21)$$

由此得角动量张量

$$M^{\mu\nu} = \int dx M^{+\mu\nu} = \int dx \{ x^\mu T^{+\nu} - x^\nu T^{+\mu} \}. \quad (11.2.22)$$

在 $\tau = 0$ 的情况下把上式分别写为

$$J_3 \equiv M^{12} = \int dx \partial_- \varphi (x^1 \partial^2 - x^2 \partial^1) \varphi, \quad (11.2.23a)$$

$$F_\mu \equiv M^{+\mu} = -\int dx \partial_- \varphi x^\mu \partial_- \varphi, \quad (11.2.23b)$$

$$K_3 \equiv -M^{+-} = \int dx \partial_- \varphi x^- \partial_- \varphi, \quad (11.2.23c)$$

$$G_\mu \equiv M^{-\mu} = \int dx \left[ \partial_- \varphi x^- \partial^\mu \varphi - x^\mu \left\{ \frac{1}{2} (\partial_\mu \varphi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \varphi + V \right\} \right]. \quad (11.2.23d)$$

只有 $G_\mu$ 也显含 $V$，也不属于稳定群。这样，空间面上的正则形式也是一样的。$x^0 = 0$ 的面上，属于稳定群的 $J_i$ 和 $P_i$ 是运动学量，而 $P_0$ 和 $K_i$ 是动力学量。

此后常常取 $\tau = 0$，再用 $x = (x^-, x^1, x^2)$ 表示空间坐标而

不再事先说明. 注意,由于 $g^{\mu\nu}$ 是非对角的,(11.2.15)式给出的 $L$ 关于 $\varphi$ 的时间微商 $\partial_+\varphi$ 是线性的. 因此其结果,$\varphi$ 的正则共轭动量 $\pi$ 为

$$\pi(x) \equiv \frac{\partial L}{\partial(\partial_+\varphi)} = \partial_-\varphi(x), \qquad (11.2.24)$$

它不是 $\varphi$ 的时间微商,而是其空间微商. 因此,为了避免与 $\varphi$ 和 $\pi$ 的泊松括号

$$\left.\begin{aligned}\{\varphi(x),\pi(y)\} &= \delta(x-y)\\ \{\varphi(x),\varphi(y)\} &= \{\pi(x),\pi(y)\} = 0\end{aligned}\right\} \qquad (11.2.25)$$

矛盾,令

$$\theta(x) \equiv \pi(x) - \partial_-\varphi(x), \qquad (11.2.26)$$

必须把 $\theta(x) \approx 0$ 看成是(第一种)约束. 从(11.2.25)式得到

$$\{\theta(x),\theta(y)\} = -2\frac{\partial}{\partial x^-}\delta(x-y). \qquad (11.2.27)$$

由于(11.2.27)式中有奇异性,因此光面上的约束问题容易误入迷途. 为了尽量避开这种危险,我们用波包展开 $\varphi(x)$ 的办法来考虑这个问题. 但是,对光面上的波包,选择什么样的函数空间,是不容易弄明白的. 下面叙述的内容,可理解为一种尝试.

根据(11.2.19)式后面的叙述,波包 $f(x)$ 对 $x^-$ 和 $x^r$ 几乎处处可微,考虑 $f$ 以及 $\partial_- f$ 和 $\partial_r f$ 为具有有限 $L_2$ 模的函数,用 $\Phi$ 表示这种函数全体造成的线性空间[1]. [$\Phi$ 当然是 $L_2$ 空间的子空间,但是它关于 $L_1$ 模没有封闭. 也就是说,由 $\Phi$ 的元构成的科希系列 $\{f_n\}$ 不一定收敛到 $\Phi$ 的元上. 不过,在 $\Phi$ 中引入

$$\|f\|_\Phi \equiv \mathrm{Max}\left\{\|f\|_2, \frac{1}{m}\|\partial_- f\|_2, \frac{1}{m}\|\partial_r f\|_2\right\}$$

来定义新模,关于这个模,$\Phi$ 变成完备模空间.]

另外,用 $\Phi_-$ 表示属于 $\Phi$ 的 $\partial_- f$($f$ 对 $x^-$ 的微商)的全体构成的线性空间. [对于由

---

(1) 下面方括号里的内容可以略去不读.

$$\|\partial_- f\|_{\Phi_-} \equiv \mathrm{Max}\{m\|f\|_2, \|\partial_- f\|_2, \|\partial_r f\|_2\}$$

定义的模，$\Phi_-$ 也是完备模空间。对于 $\Phi$ 和 $\Phi_-$ 中的新模，$\partial_-$是从 $\Phi$到 $\Phi_-$ 上的有界（因而连续）线性算符.并且 $\partial_-$ 的逆算符 $\partial_-^{-1}$ 存在，$\partial_-^{-1}$ 也是有界的.]

特地把属于 $\Phi$ 的 $f$ 表示成下述形式

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int dk \tilde{f}(k) e^{-ik\cdot x}, \tag{11.2.28}$$

用 $\Phi^{(+)}$ 记其全体，用 $\Phi^{(-)}$ 记 $f^*(x)$ 全体。上式中

$$dk \equiv \theta(k_-) dk_- dk_1 dk_2,$$

而 $k \cdot x = k_- x^- + k_r x^r$。也就是说，$\Phi^{(+)}(\Phi^{(-)})$在 $x^-$ 方向上由只含正（负）频率的函数构成。因为 $\Phi^{(+)} \cap \Phi^{(-)} = 0$，所以可以写 $\Phi = \Phi^{(+)} \oplus \Phi^{(-)}$。也可以同样定义 $\Phi^{(\pm)}$，有 $\Phi_- = \Phi^{(\pm)} \oplus \Phi^{(-)}$。以后常常用 $f$、$g$、$\cdots$表示属于 $\Phi^{(+)}$ 的波包，用 $f^*$，$g^*$，$\cdots$表示属于 $\Phi^{(-)}$ 的波包。

下面定义模空间 $\Phi^{(+)}$ 中的标积

$$(g, f) \equiv i \int dx g^*(x) \vec{\partial}_- f(x), \tag{11.2.29}$$

其中，$A\vec{\partial}B \equiv A(\partial B) - (\partial A)B$。取上式的复共轭，得

$$(g, f)^* = (f, g). \tag{11.2.30}$$

在 $\Phi^{(+)}$ 和 $\Phi^{(-)}$ 中，关于标积(11.2.29)，各选择一完备归一化正交系 $\{f_\alpha(x)\}$ 和 $\{f_\alpha^*(x)\}(\alpha = 1, 2, \cdots)$。其中，正交归一性用下式表示：

$$(f_\alpha, f_\beta) \equiv i \int dx f_\alpha^*(x) \vec{\partial}_- f_\beta(x) = \delta_{\alpha\beta}, \tag{11.2.31}$$

而关于 $\Phi^{(+)}$ 和 $\Phi^{(-)}$ 的完备性条件为

$$-2i \sum_\alpha \{f_\alpha(x)\partial_- f_\alpha^*(y) - f_\alpha^*(x)\partial_- f_\alpha(y)\} = I_\Phi(x - y). \tag{11.2.32}$$

上式右边的 $I_\Phi(x - y)$ 表示$\Phi$ 中的恒等算符(将其看成是积分算符时)的核。并且，两个核之间的等号意味着对应的算符相等.[上式的严格含意是，用 $I_{\Phi,n}$ 表示左边直到 $\alpha = n$ 部分和的算符，对于

属于 $\Phi$ 的任意 $h$，有 $\lim\limits_{n\to\infty}\|I_{\varphi,n}h-h\|_{\varphi}=0$（$I_{\varphi,n}$ 强收敛于 $I_{\varphi}$）.]

根据(11.2.32)式，可以用

$$\varphi(x)=\sum_{a}\{q_a f_a(x)+q_a^* f^*(x)\} \tag{11.2.33}$$

展开属于 $\Phi$ 的光面上的标量场 $\varphi(x)$，根据(11.2.31)式，其展开系数 $q_a$ 为

$$q_a=i\int dx f_a^*(x)\overleftrightarrow{\partial}_-\varphi(x), \tag{11.2.34}$$

而 $q_a^*$ 由上式的复共轭表达式给出。

另外，$\{\partial_- f_a(x)\}$和 $\{\partial_- f_a(x)\}$ 分别给出 $\Phi^{(+)}$ 和 $\Phi^{(-)}$ 的基本系，并且有

$$2i\sum_{a}\{\partial_- f_a(x)f_a^*(y)-\partial_- f_a^*(x)f_a(y)\}=I_{\varphi}(x-y), \tag{11.2.35}$$

其中，可以令

$$2i\sum_{a}\{f_a(x)f_a^*(y)-f_a^*(x)f_a(y)\}\equiv\partial^{-1}(x-y), \tag{11.2.36}$$

从(11.2.31)式可知，$\partial^{-1}(x-y)$ 是把 $\partial_- f$ 映射到 $f$、把 $\partial_- f^*$ 映射到 $f^*$ 的积分算符的核。$\partial^{-1}$ 是 $\partial_-$ 的逆算符，换句话说，有

$$\frac{\partial}{\partial x^-}\partial^{-1}(x-y)=I_{\varphi_-}(x-y),$$

而由于(11.2.36)式左边对于交换 $x$ 和 $y$ 是反对称的，所以可以一般地表示为

$$\partial^{-1}(x-y)=\frac{1}{2}\varepsilon(x^- -y^-)\delta(x^\perp-y^\perp). \tag{11.2.37}$$

不过，不要忘了 $\partial^{-1}$ 是 $\Phi_-$ 映射到 $\Phi$ 的(有界线性)算符。

光面上的约束问题之所以困难，其另一理由是，作为正则动量 $\pi(x)$，取什么范围的函数才好并不清楚。这里要进一步说明的是，$\pi(x)$与 $\partial_-\varphi(x)$ 同属于 $\Phi_-$。后面会知道，这样做不会出现矛盾。

这时 $\pi(x)$ 可以按照(11.2.35)式展开

$$\pi(x) = 2i \sum_{\alpha} \{p_\alpha \partial_- f_\alpha(x) - p_\alpha^* \partial_- f_\alpha^*(x)\}, \quad (11.2.38)$$

展开系数 $p_\alpha$ 是

$$p_\alpha = \int dx f_\alpha^*(x)\pi(x), \quad (11.2.39)$$

而 $p_\alpha^*$ 由上式的复共轭表达式给出。

因为 $\varphi(x)$属于 $\Phi$，$\pi(x)$ 属于 $\Phi_-$，所以，有必要把(11.2.25)式右边的 $\delta(x-y)$ 重新看成是 $l_\varphi(x-y)$ 或 $l_{\varphi-}(y-x)$。先注意

$$\int dy^- l_{\varphi-}(y-x) = 0.$$

再求 $q_\alpha$ 和 $p_\beta^*$ 的泊松括号

$$\begin{aligned}\{q_\alpha, p_\beta^*\} &= i\int dxdy f_\alpha^*(x) f_\beta(y)\{\vec{\partial}_- \varphi(x), \pi(y)\} \\ &= i\int dx f_\alpha^*(x)\vec{\partial}_- f_\beta(x) \\ &= \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (11.2.40)$$

其他组合对应的泊松括号也可以立即计算，结论是，$p_\alpha^*$ 与 $q_\alpha$ 而 $p_\alpha$ 与 $q_\alpha^*$ 互为正则共轭变量。

因为(11.2.26)式定义的 $\theta(x)$ 属于 $\Phi_-$，所以可以展开为

$$\theta(x) = 2i \sum_{\alpha} \{\theta_\alpha \partial_- f_\alpha(x) - \theta_\alpha^* \partial_- f_\alpha^*(x)\}, \quad (11.2.41)$$

从(11.2.38)式和(11.2.33)式得到

$$\theta_\alpha \equiv \int dx f_\alpha^*(x)\theta(x) = p_\alpha - \frac{q_\alpha}{2i}. \quad (11.2.42)$$

由此可知

$$\{\theta_\alpha, \theta_\beta^*\} = \left\{p_\alpha - \frac{q_\alpha}{2i}, \quad p_\beta^* + \frac{q_\beta^*}{2i}\right\} = i\delta_{\alpha\beta}. \quad (11.2.43)$$

也可以直接从(11.2.27)式出发得到此式。根据展开式 (11.2.41)，用 $\theta_\alpha \approx 0$ 和 $\theta_\alpha^* \approx 0(\alpha = 1, 2, \cdots)$ 表示约束 $\theta(x) \approx 0$，可以把难以处理的(11.2.27)式变换为简单的(11.2.43)式。这是用波包

展开的优点。

经过上面的充分准备之后，现在可以应用前节叙述的一般正则理论了。按照(11.1.7)式，系统的哈密顿量由下式给出：

$$P_+ = \int dx \left\{ \frac{1}{2} (\partial_r \varphi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \varphi^2 + V(\varphi) \right.$$

$$\left. + \sum_\alpha (u_\alpha^* \theta_\alpha + u_\alpha \theta_\alpha^*) \right. . \qquad (11.2.44)$$

用(11.2.43)式计算约束 $\theta_\alpha \approx 0$ 在任意时刻成立的条件

$$\frac{d\theta_\alpha}{d\alpha} = \{\theta_\alpha, P_+\} \approx 0, \qquad (11.2.45)$$

得

$$u_\alpha \approx i \int dx f_\alpha^*(x) \{\partial_r \partial_r \varphi - m^2 \varphi - V'(\varphi)\}. \qquad (11.2.46)$$

同样，由 $\theta^* \approx 0$ 在任意时刻成立的条件出发，可以得到，$u^*$ 由上式的复共轭表示。

(11.1.20) 式定义的矩阵 $C$ 的行和列均按 $\theta_1, \theta_1^*, \theta_2, \theta_2^*, \cdots$ 的顺序排列，有

$$C = \begin{bmatrix} & i & & & \\ -i & & & & \\ & & t & & \\ & -i & & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & t \end{bmatrix} \qquad (11.2.47)$$

因此，其逆矩阵是

$$C^{-1} = C. \qquad (11.2.48)$$

由逆矩阵存在可知 $\theta_\alpha \approx 0$ 和 $\theta_\alpha^* \approx 0$ $(\alpha = 1, 2, \cdots)$ 变成第二类约束的不可约组。

根据(11.1.22)式，$\varphi(x)$ 和 $\varphi(y)$ 的基本狄拉克括号为

$$\{\varphi(\boldsymbol{x}),\varphi(\boldsymbol{y})\}_{\mathrm{D}} = \{\varphi(\boldsymbol{x}),\varphi(\boldsymbol{y})\} + i\sum_{\gamma}\{\varphi(\boldsymbol{x}),\theta^*_\gamma\}\{\theta_\gamma,\varphi(\boldsymbol{y})\}$$

$$- i\sum_{\gamma}\{\varphi(\boldsymbol{x}),\theta_\gamma\}\{\theta^*_\gamma,\varphi(\boldsymbol{y})\}$$

$$= i\sum_{\alpha,\beta,\gamma}\{q_\alpha,p^*_\gamma\}\{p_\gamma,q^*_\beta\}f_\alpha(\boldsymbol{x})f^*_\beta(\boldsymbol{y})$$

$$- i\sum_{\alpha,\beta,\gamma}\{q^*_\alpha,p_\gamma\}\{p^*_\gamma,q_\beta\}f^*_\alpha(\boldsymbol{x})f_\beta(\boldsymbol{y})$$

$$= -i\sum_{\alpha}\{f_\alpha(\boldsymbol{x})f^*_\alpha(\boldsymbol{y}) - f^*_\alpha(\boldsymbol{x})f_\alpha(\boldsymbol{y})\}$$

$$= -\frac{1}{2}\partial^{-1}_{-}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}),$$

其中已经用到了(11.2.36)式. 根据(11.2.37)式，上述结果通常写为

$$\{\varphi(\boldsymbol{x}),\varphi(\boldsymbol{y})\}_{\mathrm{D}} = -\frac{1}{4}\varepsilon(x^- - y^-)\delta(\boldsymbol{x}^\perp - \boldsymbol{y}^\perp). \quad (11.2.49)$$

另外，从上面的推导得到

$$\{q_\alpha,q^*_\beta\}_{\mathrm{D}} = -i\delta_{\alpha\beta}. \quad (11.2.50)$$

它显然更简单

过渡到狄拉克括号以后，因为不可约的第二类约束等于零，故 $\theta_\alpha = \theta^*_\alpha = 0$，即 $\theta(\boldsymbol{x}) = 0$，因而下式成立：

$$\pi(\boldsymbol{x}) = \partial_-\varphi(\boldsymbol{x}). \quad (11.2.51)$$

在光面上，只给出 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 为正则独立场. 与空间面上的正则独立场 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 和 $\pi(\boldsymbol{x}) = \dot{\varphi}(\boldsymbol{x})$ 比较看出，独立场的数目只剩一半了. 这不限于标量场，自旋 1/2 的狄拉克场情形一样，这是光面正则形式的主要特征之一.

经过置换(11.1.25)而过渡到量子论，(11.2.49)式变成

$$[\varphi(\boldsymbol{x}),\varphi(\boldsymbol{y})] = -\frac{i\hbar}{4}\varepsilon(x^- - y^-)\delta(\boldsymbol{x}^\perp - \boldsymbol{y}^\perp). \quad (11.2.52)$$

在无因果关系的空间面上，$\varphi(\boldsymbol{x})$ 和 $\varphi(\boldsymbol{y})$ 往往是对易的，因为在光面上仅仅 $\varphi$ 正则独立，所以 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 和 $\varphi(\boldsymbol{y})$ 一般不对易. 然而，

上式右边的因子 $\delta(x^{\perp}-y^{\perp})$ 表明，在空间中间隔开的两点，不对易性消失了．若非如此，则会与微观因果律发生矛盾．

另外，注意在量子论中，(11.2.50)式与湮没和产生算符的对易关系相同．即有

$$[q_\alpha, q_\beta^\dagger] = \hbar\delta_{\alpha\beta}. \tag{11.2.53}$$

### c） 产生和湮没算符与福克空间

我们预期，可以把 $q_\alpha$ 解释为湮没算符，将其改用 $a_\alpha$ 表示，把 $\varphi(x)$ 在量子论中的展开式写成

$$\varphi(x) = \sum_\alpha \{a_\alpha f_\alpha(x) + a_\alpha^\dagger f_\alpha^*(x)\}. \tag{11.2.54}$$

之所以把它分离成与 $a_\alpha$ 有关的项以及与 $a_\alpha^\dagger$ 有关的项，是为了动量 $P_-$ 的本征值不取负值．下面取 $\hbar = 1$ 的单位，$\varphi$ 之间的正则对易关系(11.2.52)可以用 $a$ 与 $a^\dagger$ 以更深刻的形式

$$\left.\begin{aligned}[a_\alpha, a_\beta^\dagger] &= \delta_{\alpha\beta}\\ [a_\alpha, a_\beta] &= [a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger] = 0\end{aligned}\right\} \tag{11.2.55}$$

表示．

因为 $\varphi(x)$ 可以按与 $a$、$a^\dagger$ 有关的项分离，所以可定义与 $\varphi(x)$ 的积对应的威克(Wick)积．在普通的积中，在 $a$ 处于 $a^\dagger$ 左边的项中，把 $a$ 换到 $a^\dagger$ 的右边，就得到了威克积．（若是服从费米统计的场，则变换 $a$ 和 $a^\dagger$ 时必须变号．）与庞加莱生成元(11.2.19)和(11.2.23)对应的量子论表达式中，被积算符的乘积往往要求采用威克积．

用 $a$ 和 $a^\dagger$ 表示动量 $P_-$ 和 $P_\perp$ 时，不用 $\tilde{f}_\alpha(k)$，而用

$$\tilde{f}_\alpha(k) \equiv \frac{\tilde{h}_\alpha(k)}{2k_-} \tag{11.2.56}$$

定义的 $\tilde{h}(k)$ 是方便的．根据(11.2.31)式，$\tilde{h}_\alpha(k)$ 满足下述正交关系：

$$\int \frac{dk}{2k_-}\, \tilde{h}_\alpha^*(k)\tilde{h}_\beta(k) = \delta_{\alpha\beta}. \tag{11.2.57}$$

现在，有

$$(k_-)_{\alpha\beta} \equiv \int \frac{d\boldsymbol{k}}{2k_-} \tilde{h}_\alpha^* k_- \tilde{h}_\beta, \tag{11.2.58a}$$

$$(\boldsymbol{k}_\perp)_{\alpha\beta} \equiv \int \frac{d\boldsymbol{k}}{2k_-} \tilde{h}_\alpha^* \boldsymbol{k}_\perp \tilde{h}_\beta, \tag{11.2.58b}$$

$P_-$ 和 $\boldsymbol{P}_\perp$ 分别为

$$P_- = \sum_{\alpha,\beta} (k)_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta, \tag{11.2.59a}$$

$$\boldsymbol{P}_\perp = \sum_{\alpha,\beta} (\boldsymbol{k}_\perp)_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta. \tag{11.2.59b}$$

根据(11.2.59a)式，只要不是全部 $c_\alpha$ 等于零，便有

$$\sum_{\alpha,\beta} (k_-)_{\alpha\beta} c_\alpha^* c_\beta > 0,$$

因此，$(k)$ 是正定的厄米矩阵。

应用(11.2.55)式，经过简单计算可以导出

$$[P_-, a_\alpha] = -\sum_\beta (k_-)_{\alpha\beta} a_\beta. \tag{11.2.60}$$

用$|0\rangle$表示系统的物理真空，根据上式和 $P_-|0\rangle = 0$，得

$$P_- a_\alpha |0\rangle = -\sum_\beta (k_-)_{\alpha\beta} a_\beta |0\rangle.$$

为了使 $P_-$ 的本征值不取负值，同时矩阵$(-k_-)$又负定，必须对于全部 $\alpha$ 有

$$a_\alpha |0\rangle = 0. \tag{11.2.61}$$

这样，显然可以把 $a_\alpha$ 解释为湮没算符，而把 $a_\alpha^\dagger$ 解释为产生算符。

作为动力学量的 $P_+$，它的通过 $a$ 和 $a^\dagger$ 表示的表达式显然是十分复杂的。若是 $\varphi^4$ 型相互作用，则 $P_+$ 会包含 $a^\dagger a^\dagger aa$、$a^\dagger a^\dagger a^\dagger a$、$a^\dagger aaa$ 之类的项。不过，因为与 $P_-$ 对易，不允许有 $a^\dagger a^\dagger a^\dagger a^\dagger$ 和 $aaaa$ 之类的项。关于这点，要是考虑到 $a(a^\dagger)$ 必然减少(增大)$P_-$ 的本征值，大概就会立即明白了。总之，$P_+$ 表达式的右端必须是 $a$，左端必须是 $a^\dagger$。因此，下式成立：

$$P_+|0\rangle = 0. \tag{11.2.62}$$

对于物理真空之外的状态，只要不存在零质量的粒子，就有

$$P^2 \equiv 2P_+P_- - \boldsymbol{P}_\perp^2 > 0,$$

根据这些以及 $P_- > 0$，显然有 $P_+ > 0$. 也就是说，物理真空是能量最低的状态。

在光面上，有意义的物理量的另一个例子是用

$$N \equiv \sum_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha \tag{11.2.63}$$

定义的量。因为，只要有相互作用，$N$ 与 $P_+$ 就不对易，所以，$N$ 不是守恒量。$N$ 与 $G_1, G_2$ 也不对易，而与剩下的七个运动学生成元对易。像这种 $N$ 不是守恒量，而是与稳定群对易的物理量，在光面上的量子论中起着重要作用。狄拉克场理论中出现的非守恒的光的轴向荷也是这种例子。

在(11.2.61)式中，用$|0\rangle$表示物理真空是重要的一点。这点，在空间量子化中没有出现，是光面量子化的特有性质。这里应注意，“有限自由度系统的正则对易关系的表象在幺正等价意义下是唯一的”是所谓冯诺埃曼定理，它在场的理论中不成立。实际上，现在已经知道，在场的理论中不幺正等价的表象连续无限多地存在(参看本讲座第四卷《量子力学》(II)§18.3)。

用海森伯-泡利方法量子化标量场时，正则对易关系由下式给出：

$$[a(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'), \tag{11.2.64}$$

湮没算符 $a(\boldsymbol{k})$ 湮没了自由真空 $|0_{\text{free}}\rangle$：

$$a(\boldsymbol{k})|0_{\text{free}}\rangle = 0. \tag{11.2.65}$$

因此，用任意个 $a^\dagger$ 作用于$|0_{\text{free}}\rangle$，其结果的线性组合全体可以构成一种希尔伯特空间，称之为福克空间。把这个空间中的 $a$、$a^\dagger$ 表象称为福克表象。自由场理论中，当然应采用这个表象。

有相互作用的情况下，成问题的是，在物理的希尔伯特空间中，$a, a^\dagger$ 是否取为福克表象。自由真空 $|0_{\text{free}}\rangle$ 是福克空间中具有有

限模的 $P=0$ 唯一的状态. 因此, 如果物理真空 $|0\rangle$ 也属于福克空间,那么它是 $P=0$ 模有限的状态,必然有

$$|0\rangle = |0_{free}\rangle. \tag{11.2.66}$$

因为在有真空极化效应的理论中,上述等式不成立,所以在这种理论中, 物理真空不属于福克空间. 这点与海森伯-泡利量子化符合. 换句话说,这个量子化中, 必须取与 $a, a^\dagger$ 的福克表象不同构的表象[R. Haag、1955]. 空间量子化是物理上最容易理解的,但这样我们就失去了福克空间这个在量子论中有用的概念.

另一方面,光面量子化中,由于 $P_-$ 守恒,即使有相互作用也不会引起真空极化. 在这种量子化中$|0_{free}\rangle$和$|0\rangle$是没有区别的.因此,任意个 $a^\dagger$ 作用于$|0\rangle$,根据其结果线性组合全体的完备性, 就可以构造福克空间,它为相互作用系统提供了物理的希尔伯特空间. 能够把 $a$ 和 $a^\dagger$ 分别解释为湮没算符和产生算符的理由是,与对易关系(11.2.55)一起,可以用它们得到物理的福克表象(物理的希尔伯特空间中的福克表象).

已经叙述了两种量子化方法的相同点和不同点, 而要想知道光面上的量子化是否包含矛盾,就必须进一步详细研究各个细节. 这个问题不可能详细讨论了, 现在只想简单提及它与通常的量子化方法的关系. 在量子电动力学中, 从光面的正则形式出发建立的微扰论的散射矩阵,与微扰的所有阶的费曼-德松 (Dyson) 结果一致. 但是,不幺正等价的两个正则形式,是否对任何理论都能给出相同的结果, 并不是不言自明的. 在非交换的规范场理论(杨-密尔斯理论)中,微扰论的散射矩阵被认为是没有意义的,这时,即使在时空取二维的简单情况下, 也没有证实所谓结果不取决于量子化方法问题.

在量子电动力学中, 即使应用光面量子化, 按照上面的讨论, 显然也没有特别新的结果. 在能应用微扰论的场论中, 这种情形多半是不会改变的.这种量子化有效的场合,仅限于现在的强子弦模型和上面提到的二维杨-密尔斯理论等例子, 而无论哪种理论, 人们的兴趣都在于, 物理的粒子(强子)不是简单的基本粒子. 这

点始且不论，光面量子化的大难点在于，无法用明显的形式把理论的庞加莱协变性表示出来。例如，在自旋或宇称状态分类中重要的概念都成了动力学量。因此，在考虑光面上的量时，一齐应用可能的有限的协变方法是有希望的。

# 文献与参考书

首先列出与整个量子力学有关的参考文献和参考书，其次是各个部分和各章的。不过没有单列第一至三章的参考文献和参考书，有关资料可以在整个量子力学的文献和参考书中找到。

## 总的参考文献和参考书

回顾量子力学的历史发展时，不能去详细阅读各个阶段的原始论文和原始著作。这不仅是由于其数量太大，而且还由于其中会碰到许多困难。幸而下面所列的翻译成日文的丛书和选集中包括了绝大部分重要内容，以供给有兴趣的读者参考。


[1] 物理学史研究刊行会編：《物理学古典論文叢書》，全 12 卷，東海大学出版会(1969—1971)

[2] 湯川秀樹監修：《アインシュタイン選集》，第 1 卷，共立出版(1971)

[3] 田中正，南政次訳：《シュレーディンガー選集》第 1 卷，共立出版(1974).

[4] 湯川秀樹，井上健編：《现代の科学 II》(世界の名著，第 66 卷)，中央公論社(1970)

[5] 林一編訳：《アインシュタインとの論争》，東京図書(1969)


另外，近年来出现了大量的关于量子力学的教科书和参考书。下面只列出几本国内外作为标准的著作 。


[6] D. Bohm: *Quantum Theory*, Prentice-Hall (1951)

[7] 朝永振一郎：《量子力学I,II》，みすず書房(1952)

[8] P.A.M. Dirac: *The Principles of Quantum Mechamcs* (4th ed.) Oxford Univ. Press (1958)

[9] A. Messiah: *Mécanique Quatique*, Dunod (1959)

[10] Л.Л. Ландау И Е.М. Лифшиц: *Квантовая механика——нерелятивисмская меория* (изд. 2-е), Наука (1963)

[11] L.I. Schiff: *Quantum Mechanics* (3rd ed.) McGraw-Hill (1968)


第二部分

## 第四章

要深入理解量子力学的基础体系，最好细致体会上面所列的狄拉克的书。同时，通过下面的书弄清其物理背景


[12] W. Heisenberg: *Die Physikalische Prinzipien der Quantenmechanik*, Hirzel (1930)

## 第三部分

### 第五一七章

无论是典型的状态结构还是近似方法，都包含了许许多多部分和内容，不自己动手去做一做是不可能充分掌握它们的。下面这本书可以作为引导，同时也起到了对本书所欠缺内容进行补充的作用。

[13] 小谷正雄，梅沢博臣编«大学演習量子力学»，裳華房(1959)

再列几本各个方面的参考书。关于量子力学中的角动量，

[14] E. P. Wigner: *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik*, Vieweg (1931)

属于经典著作。要学计算方法，可以参考

[15] A.R. Edmonds: *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton Univ. Press (1968)

后面列出来的[29]中有方便的公式集。关于电子的自旋，

[16] 朝永振一郎:«スピンはめぐる——成熟期の量子力学»(自然選書)，中央公論社(1974)

从其发现到它在场论中的地位都进行了饶有历史意味的叙述。

关于时间反演，下面的论文意义深远：

[17] S. Watanabe: *Rev. Mod. Phys.* **27**, 26, 40, 179 (1955)

关于束缚态，§5.4 c)讨论的前半部分可以参考

[18] H. Ezawa, K. Nakamura & Y. Yamamoto: *Proc. Japan Acad.* **46**, 168 (1970)

§5.4c)后半部分束缚态的几个判别式可以参看

[19] V. Bargmann: *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **38**, 961 (1952)

关于这类判别式，还可以参看

[20] A.S. Wightman *et al.* ed.: *Studies in Mathematical Physics*, Princeton Univ. Press (1977)

中 B. 西蒙(Simon) 的普遍论述。

关于散射问题，以势阱为例详细研究 S 矩阵的性质，可以参考

[21] H.M. Nussenzweig: *Nucl. Phys.* **11**, 499 (1959)

在图 5.2 说明中引用列文松定理时没有证明，其原始论文为

[22] N. Levinson: *Kgl. Danske Videnskab Selskab Mat. -fys. Medd.*, **25**, 9 (1949)

应用该定理求给定势的束缚态的数目，可参看

[23] H.M. Shey & J.L. Schwarz: *Phys. Rev.* **B139**, 1428 (1967)

在«量子力学»(II) 中将详细讨论散射问题。下面列出三本这方面的入门参考书：

[24] 砂川重信«散乱の量子论»(岩波全書)，岩波書店(1977)

[25] J.R. Taylor: *Scattering Theory——The Quantum Theory on Non-Relativistic Collisions*, Wiley (1972)

[26] R. G. Newton: *Scattering Theory of Waves and Particles*, McGraw-

Hill (1966)

关于原子分子问题，本讲座中没有单独的一卷，我们把有关参考书列在下面：


[27] 水島三一郎，長倉三郎：«(改稿)量子化学»(岩波全書)，岩波書店(1959)

[28] H. Bethe & E. Salpeter: *Quantum Mechanics of* One-and *Two-Electron Problems*, in *Hab. d. Phys.*, Bd. XXXV, Springer-Verlag (1957)

[29] И.И. Собельман: *Введение в меорию амомных спекмров*, Физматгиз (1963)

[30] L. C. Slater: *Quantum Theory of Atomic Structure* I, II, McGraw-Hill (1960)

[31] J. C. Slater: *Quantum Theory of Molecules and Solids* I, McGraw-Hill (1963)


§5.7 中引用过的He基态能级的变分计算可参考


[32] T. Kinoshita: *Phys. Rev.*, **105**, 1490 (1957)

[33] C. L. Pekeris: *Phys. Rev.*, **112**, 1649 (1958)


因此，表 5.6 中记述的 $H^-$ 的基态能级的“实验值” 实际上是上述[33]中的计算值. [31]所列书中暗示了 §5.6d)所叙述的位置相关.

另外，本下所用的里德伯常数(§5.7c))是下面书中给出的：


[34] E.R. Cohen & J.W. M. DuMond: *The Fundamental Atomic Constants*, in *Hab.d. Phys.*, Bd. XXXV, Springer-Verlag (1957)


§5.7a)中所引用的电子电荷和质量可在下述文章中找到：


[35] Particle Data Group: *Rev. Mod. Phys.*, **48**, S1(1976)


比较两个物理常数的体系是有趣的，物理常数的计算精度逐年增加.

关于处理分子中角动量状态的方法，还可参考


[36] B. R. Judd: *Angular Momentum for Diatomic Molecules*, Academic Press (1975)


关于微扰论、变分法等近似方法，请参看


[37] 寺沢寛一编：«自然科学者のための数学概論，応用编»，岩波書店(1960)

[38] 宮武修，加藤祐輔：«固有值問題»(数学選書)，槇書店(1871)


正式的参考书是


[39] T. Kato: *Perturbation Theory for Linear Operators* (2nd ed.) Springr-Verlag (1976)


这方面，作为微扰论提供了错误答案意义深远的例子，请参看


[40] E.P. Wigner, *Phys. Rev.* **94**, 77 (1954)


也可参看从逐次群出发的论文


[41] K.G. Wilson: *Advances in Math.*, **16**, 170 (1975) 中的注.


关于帕狄 (Padé) 近似，还没有成熟的理论，建议从下面两本书开始学习：


[42] G. A. Baker & J. L. Gammel: *Padé Approximants in Theoretical Physics*, Academic Press (1970)

[43] G. A. Baker: *Essentials of Padé Approximations*, Academic Press (1975)

这种近似法在非谐振子情形给出了收敛的正确答案，其证明可在下文中找到：

[44] B.Simon: *Ann. of Phys.* (*N.Y.*),**58**, 76 (1970)

与时间有关的微扰论是在下面书中叙述的：

[45] H. Ezawa: *Proc. of Eastern US Theoretical Physics Conference* 1963, Univ. of North Carolina Press (1963)

各种方法的比较综述，可在下文中找到：

[46] P. W. Langhoff, S. T. Epstein & M. Karplus: *Rev. Mod. Phys.*, **44**. 602 (1972)

关于§6.2叙述与时间有关微扰论时证明过程中引用的布里渊-维格纳微扰公式，请参看

[47] H A. Kramers: *Collected Scientific Papers*, North-Holland (1956) 中 p929 收录的论文 "Remarks on the Perturbation Formulae of Brillouin and Wigner" (Courant Anniversary Volume 1948)

另外，由于光的发射吸收等跃迁概率公式的应用实例叙述得不够充分，希望能用[9]、[10]、[11]等适当的教科书予以补充.

关于玻恩-奥本海默近似应用于分子的情形，最好参看原始论文

[48] M. Born & J. R. Oppenheimer: *Ann.d. Phys.*, **84**, 457 (1927)

其数学基础在

[49] W. Thirring & P. Urban, ed.: *Schrödinger Equation*, Springer-Verlag (1977)

中由J. -M孔布(Combes)等人进行了论述. 在§6.3b) 涉及到的费曼定理可在下文中找到：

[50] R. P. Feynman, *Phys. Rev.*, **56**, 340, (1939)

在考虑用核与核之间电子云的静电引力来说明分子的形成时，就得到了这个定理.

关于进行相对论处理时出现的旋量计算，请参看

[51] E. M. Corson: *Introduction to Tensors, Spinors and Relativistic Wave Equations*, Hafner (1953)

关于相对论波动方程的"推导"，建议参阅

[52] 大貫義郎:«ポアンカレ群と波動方程式»(応用数学叢書), 岩波書店(1976)

要学习狄拉克方程的物理含义，可参看

[53] J.J. Sakurai: *Advanced Quantum Mechanics*, Addison-Wesley (1967)

[54] 西島和彦«相対論的量子力学»(新物理学シリーズ, 13), 培風館(1973)

[55] J.D. Bjorken & S.D. Drell: *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill (1965)

[56] M.E. Rose: *Relativistic Electron Theory*, John-Wiley (1960)

另外，关于具有§7.5c)中碰到的那类奇异势的波动方程，建议阅读

[57] K. M. Case: *Phys. Rev.*, **80**, 797 (1950)

[58] M. Frank, D.J. Land & R.J. Spector: *Rev. Mod. Phys.*, **43**, 36(1971)

## 第八章

下面所列的是正文中引用过或作为参考文献的论文或著作，一般说来，对于学习物理的人来说大部分内容其数学程度较高，但读者能够进一步参考有严格的证明或数学结构的文章是件有益的事．此外，还有许多优秀的著作，而作为执笔者来说，我本人只限于介绍直接有关部分，关于这几点附上一简单地说明．

欲深入了解量子力学中重要的斯通定理 请参看下述论文或著作

[59] M. H. Stone: *Ann. of Math.*, **33**, 643 (1932)

[60] K. Yosida: *J. Math. Soc. Japan*, **1**, 15 (1948)

[61] B. L. van der Waerden: *Group Theory and Quantum Mechanics*, Springer-Verlag (1974)

[62] 吉田耕作，河田敬義，岩村聯：«位相解析の基礎»，岩波書店(1960)

[63] 吉田耕作：«ヒルベルト空間論»(共立全書)，共立出版(1971)

其中 [61] 全面改写了旧版 (1932)，以简洁明快的方式叙述了量子力学的基础．

关于李代数，尤其是对半单李代数的分类进行了详细描述的有

[64] N. Jacobson: *Lie Algebras*, Interscience (1962)

关于群论和量子力学，经典名著有前面的[14]和

[65] H. Weyl: *Gruppen theorie und Quanten mechanik*, Springer-Verlag (1928)

关于射线表示的经典文献有

[66] J. Schur: *J. für die Reine und Angewandte Math.*, **127**, 20 (1904); **132**, 85 (1907)

而关于其量子力学应用，下述论文是相当全面的：

[67] V. Bargmann: *Ann. of Math.*, **59**, 1(1954)

另外，下面这本书关于群论有细致而全面的叙述：

[68] M. Hamermesh: *Group Theory and its Application to Physical Problems*, Addison-Wesley(1962)

推荐日文书

[69] 山内恭彦，杉浦光夫：«連続群論入門»，培風館(1960)

这是一本小册子，它简洁地叙述了较深的内容．

从应用的角度来看，详细论述 CG 系数的著作中

[70] E. U. Condon & G. H. Shortley: *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press (1935)

比较有名．其中不是称 CG 系数，而是称为“变换系数”．但书中表格不多，作为其补充有

[71] K. Yamada & M. Morita: *Prog. Theor. Phys.*, **4** 444(1952)

而以旋转群的表示为重点叙述对量子力学的应用的书有

[72] 山内恭彦：«回転群とその表現»，岩波書店(1958)这是比较早的著作．

另外，本章中与轨道角动量，开普勒运动的对称性有关的论述大多可在

下面两篇论文中找到:

[73] C. van Winter: *Ann. of Phys.*, **47**, 232(1968)

[74] T. ToyoTa & F. Ravndal: *Nucl. Phys.*, **B3**, 312(1967)

最后,作为为物理学者中肯而严密地论述代数学的书,推荐详述庞加莱群应用的[52]和

[75] 彌永昌吉,杉浦光夫:《応用数学者のための代数学》岩波書店(1969)

## 第四部分

### 第九章

有关多粒子体系问题(或多体问题)的教科书很多. 一般来说,以哪些具体问题为重点,那方面的努力便有成效,下面推荐几本一般的书.

日文书有

[76] 沢田克郎:《多体問題》岩波書店(1971)

[77] 西山敏之:《多体問題入門》,共立出版(1975)

等等 .都是这方面的专家的优秀著作. 其中,[77]讨论的内容比较广泛 .而[76]基本上是作者的工作,它用独特方法进行了协调一致的叙述,是独特而细致的一本书. 对本书也极有参考价值.

外文书也很多,各有特色,如

[78] D. J. Thouless: *The Quantum Mechanics of Many-Body Systems*(2nd ed.), Academic Press(1972)

[79] D. Pines: *The Many-Body Problems*, Benjamin, Inc. (1961)

[80] N. H. March, W. H. Young & S. Sampanthar: *The Many-Body Problem in Quanturn Machanics*, Cambridge Univ. Press(1967)

当进一步学习时,这些书中又都列举了各个方面的参考书.

由于对多体问题所列文献的篇数不够多,因此,下面给出与正文有关的问题的历史文献.

关于费米粒子系统波函数或斯莱特行列式的论文有

[81] J. C. Slater: *Phys. Rev.* **34**, 1293(1929)

关于二次量子化的论文数量较多,有代表性的有

[82] W. Heisenberg, u. W. Panli: *Z. Physik*, **56**, 1(1929); **59**, 169(1930)

关于薛定谔方程和算符方程的等价性,有

[83] P. Jordan, u. O. Klein: *Z. Physik*, **45**, 751(1927)

[84] P. Jordan, u. E. P. Wigner: *Z. Physik*, **47**, 631(1928)

关于福克空间的历史文献是

[85] V. Fock: *Z. Physik*, **75**, 622(1932)

关于密度矩阵,

[86] P. A. M. Dirac: *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **26**, 376(1930)

指出了其重要性,而

[87] P. O. löwdin: *Phys. Rev.*, **97**, 1474(1955)

进行了普遍论述.

哈特里-福克方法是由

[88] D. R. Hartree: *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **24**, 89(1929)
[89] V. Fock: *Z. Physik*, **61**, 126(1930)
[90] J. C. Slater: *Phys. Rev.*, **35**, 210(1930)
等开始的，论述哈特里基态稳定性的文章中
[91] K. Sawada & N. Fukuda: *Prog. Theor. Phys.*, **25**, 653(1961)
是较有名的．前面的[76]也详细论述了这个问题．
[92] L. H. Thomas: *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **23**, 541 (1927)
[93] E. Fermi: *Z. Physik*, **48** 73; **49**, 550(1928)
是提出托马斯-费米方法的原始论文．这个方法又由
[94] R. Feynman, F. Metropolis & E. Teller: *Phys Rev.*, **75**, 1561(1949)
等发展了．关于这些近似方法，除了上述论文以外，在许多量子力学教科书中还提到过大量关于分子、原子问题应用的综合报告．

关于费米粒子系统或玻色粒子系统的基态，有许多具体的以电子气或氦流体等为对象的论文．由于这些显然是本讲座其它卷处理的问题，因此有关文献也请看涉及到的卷． 这儿仅列出玻色粒子系统中与玻戈留波夫变换有关的论文
[95] N. N. Bogoliubov: *J. Phys. USSR*, **11**, 23 (1947)
[96] N. N. Bogoliubov & D. N. Zubarev: *Soviet Phys JETP*, **1**, 83 (1955)
[97] N. M. Hugenholtz & D. Pines: *Phys. Rev.*, **116**, 489(1959)

关于集体运动的论文也很多，也按具体问题归入其他各卷(上面[76]—[80]引用了个别问题的论文)，这儿只列出本书中用过的正则振动方法的原著是
[98] K. Sawada: *Phys. Rev.*, **106**, 372(1957)

## 第十章

关于场的量子理论，有许多参考书，首先列出几本早就著名的传统教科书
[99] W. Heitler: *The Quantum Theory of Radiation* (3rd ed.), Oxford Uuiv. Press (1954)
[100] 湯川秀樹: «素粒子論序說，上»，岩波書店(1948)
[101] G. Wentzel: *Quantum Theory of Field* Interscience(1949)
[102] J. M. Jauch & F. Rohrlich: *The Theory of Pholons and Electrons*, Addison-Wesley(1955)
[103] H. Umezawa: *Quantum Field Theory*, North-Holland(1956)
较后些时候，直到最近的有
[104] N. N. Bogoliubov & D. V. Shirkov: *Introduction to the Theory of Quantized Fields*, Interscience(1959)
[105] J. D. Bjorken & S. D. Drell: *Relativistic Quantum Fields*, McGraw-Hill (1965)
[106] K. Nishijima: *Fields and Particles*, Benjamin(1969)
[107] В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшичи Л. П. Питаевский: *Релямив-*

*исмская квантовая теория*, часть 1, Наука(1968)
[108] 湯川秀樹,片山泰久編:«素粒子論»(岩波講座現代物理学の基礎[初版] 11),岩波書店 1974

另外,不是入门书,而是具有特色的小书,有

[109] 梅沢博臣,江沢洋,河原林研: «素粒子論の話題»(核物理学講座, 12)共立出版(1963)
[110] N. N. Bogoliubov, A. A. logunov & I. T. Todorov: *Introduction to Axiomatic Quantum Field Theory*, Benjamin (1925)
[111] 中西襄: «場の量子論»(新物理学シリーズ",19),培風館(1975)

以及前面的[52]等 .与[52]有关,还要提到评述具有高自旋场的相对论波动方程的小书[51].

此外,关于§10.1 涉及的相干态

[112] 加野泰: «コヒーレンス理論とその応用»(応用数学叢書),岩波書店(1976)

叙述得很详细.

下面来看看与第十章有关的论文,首先, 场的量子理论建立初期的重要论文基本上都收集在

[113] 崗林孝郎編: «場の量子論»(新编物理学選集, 17),日本物理学会(1955)

从其中选出下面两篇:

[114] P. A. M. Dirac: *Proc. Roy. Soc.* (London), **A114**, 243(1927)
[115] W. Heisenberg, u. W. Pauli: *Z. Physik*, **56**, 1(1929); **59**, 168(1930)

[115]是关于场的量子理论的出发点和目的的基本文献.

另外,下面列出第十章叙述中明显提到的原始论文, 所提到相干态与经典理论关系的薛定谔的论文是

[116] E. Schrödinger: *Naturwiss.*, **28**, 664(1926)
[117] P. Jordan, u, O. Klein: *Z. Physik*, **45**, 751(1927)

它们和狄拉克关于辐射场量子化的[114]一起, 都是处理物质场量子化的开创性的论文.

[118] P. Jordan: *Z. Physik*, **44**, 1(1927)

对具有离散本征值的系统的正则量子化给予了足够的重视.

关于并行统计,有下面两篇:

[119] H. S. Green: *Phys. Rev.*, **90**, 270(1953)
[120] Y. Ohnuki & S. Kamefuchi: *Prog. Theor. Phys.*, **50**, 258 (1973)

关于不同时理论、超不同时理论的基本文献有

[121] P. A. M. Dirac: *Proc. Roy. Soc.* **A136**, 453(1932)
[122] P. A. M. Dirac, V. A. Fock & B. Podolsky: *Phys. Zeits. USSR*, **2**, 468 (1932)
[123] S. Tomonaga: *Prog. Theor. Phys.*, **1**, 27 (1946)
[124] J. Schwinger: *Phys. Rev.*, **74**, 1439 (1948)

关于消除场论的奇异性所涉及的论文有

[125] W. Pauli & F. Villars: *Rev. Mod. Phys.* **21**, 434(1949)
[126] M. A. Markov: *Nncl. Phys.*, **10**, 140(1959)
[127] A. Pais & G. E. Uhlenbeck: *Phys. Rev.*, **79**, 145(1950)

## 第十一章

关于狄拉克的一般正则理论，有

[128] P. A. M. Dirac: *Can. Journ. Math.*, **2**, 129(1950)

[129] P. A. M. Dirac: *Lectures on Quantum Mechanics* (Belfer Graduate School of Science), Yeshiva Univ.(1964)

[130] 山内恭彦，内山龍雄，中野董夫: 《一般相対性および重力の理論》，裳華房(1967)

[131] A. J. Hanson, T. Regge & C. Teitelboim: *Constrained Hamiltonian Systems*, Accademia Nazionale dei lincei, (to be published)

等等. [128]是原始论文，其它是解释，开始学习时[129]最容易读 .关于各种应用，[131]较详细。

[Ｇｅｎｅｒａｌ　Ｉｎｆｏｒｍａｔｉｏｎ]
书名＝量子力学（Ⅰ）
作者＝[日]汤川秀树
页数＝６９２
ＳＳ号＝１００７１５３５
出版日期＝