经典译丛·物理篇

现代量子力学 第2版

Modern Quantum Mechanics Second Edition

[美]樱井纯 [美]J. 拿波里塔诺 著
丁亦兵 沈彭年 译

世界图书出版公司

现代量子力学

第2版

[美]樱井纯 著
[美]J.拿波里塔诺
丁亦兵 译
沈彭年

世界图书出版公司
北京·广州·上海·西安

图书在版编目（CIP）数据

现代量子力学：第2版/（美）樱井纯（Sakurai，J.J.），（美）拿波里塔诺（Napolitano，J.）著；丁亦兵，沈彭年译．—北京：世界图书出版公司北京公司，2014.5
书名原文：Modern quantum mechanics 2nd ed.
ISBN 978-7-5100-6099-1

Ⅰ.①现… Ⅱ.①樱… ②拿… ③丁… ④沈… Ⅲ.①量子力学 Ⅳ.①O413.1

中国版本图书馆CIP数据核字（2014）第090635号

Authorized translation from the English language edition, entitled MODERN QUANTUM MECHANICS, 2E, by SAKURAI, J.J.; NAPOLITANO, J., published by Pearson Education, Inc Addison-Wesley, Copyright © 1994,2011 by Addison-Wesley Publishing Company,Inc.

All Rights Reserved. No Part of this book may be reproduced or transmitted in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording or by any information storage retrieval system, without permission from Pearson Education, Inc.

CHINESE SIMPLIFIED Language edition published by PEARSON EDUCATION ASIA LTD., and BEIJING WORLD PUBLISHING CORPORATION Copyright © 2016.

著　　者：樱井纯　J.拿波里塔诺
译　　者：丁亦兵　沈彭年
责任编辑：刘　慧
装帧设计：蔡　彬

出版发行：世界图书出版公司北京公司
地　　址：北京市东城区朝内大街137号
邮　　编：100010
电　　话：010-64038355（发行）　64015580（客服）　64033507（总编室）
网　　址：http://www.wpcbj.com.cn
邮　　箱：wpcbjst@vip.163.com
销　　售：新华书店
印　　刷：三河市国英印务有限公司
开　　本：787mm×1092mm　1/16
印　　张：26
字　　数：480千
版　　次：2016年8月第1版　2016年8月第1次印刷
版权登记：01-2011-1089
定　　价：99.00元

版权所有　翻印必究
（如发现印装质量问题，请与本公司联系调换）

译者前言

在世界图书出版公司（以下简称世图）北京公司的大力支持下，由樱井纯（J. J. Sakurai）与 J. 拿波里塔诺（J. Napolitano）撰写的《现代量子力学》（第 2 版）中译本终于出版面世. 作为该书的译者，我们感到十分欣慰.

在为数众多的量子力学教科书中，该书以新颖的物理内容和独特的叙述风格广受赞誉. 据了解，该书作为物理学研究生的高等量子力学教材，在国内外被相当普遍地采用. 正因如此，世图北京公司对该书的出版一直十分重视，2005 年影印出版了由美国夏威夷大学段三复（San Fu Tuan）教授整理的 *Modern Quantum Mechanics*（1994 年修订版）；2011 年影印出版了该书第 2 版. 在该版中，除了原作者之外的另一位署名作者 J. 拿波里塔诺是执笔改编者，他是美国纽约州伦斯勒理工学院（Rensselaer Polytechnic Institute）物理系教授. 相继出版的这两部影印版著作均受到了读者的欢迎，赢得了很好的口碑. 为了扩大该书在我国的使用范围，满足高等量子力学教学的需要，使国内更多领域的读者能够更方便地选用和参考，我们受出版社的委托，非常荣幸地承担起将其英文第 2 版翻译成中文的重任.

关于此书的写作背景、各个版本的特色以及内容简介，在几个版本（包括影印版）的序言中均有详细介绍，此处不再赘述. 但我们想要指出的是，在英文第 2 版出版后不久，执笔修订者 J. 拿波里塔诺教授就发现了书中的许多错误，相继发布了两份勘误表（可在拿波里塔诺教授的个人主页上查到）. 我们在这次翻译中，按照勘误表的内容一一做了修正. 需要强调的是，勘误表中有一些内容是对书中习题给出的评注，指出这些题目存在不妥之处，以后应该进行修改. 作为译者，我们无权对这些内容做相应的改动，只好建议读者参考勘误表，自行判断. 我们还发现了一些没有列入勘误表的明显错误，在翻译时做了更正，并在书中以“译者注”的形式注明.

受到译者英文水平、翻译能力与物理知识水平的局限，译文中的错误与不当之处恐难避免，欢迎热心的专家、读者不吝赐教，以便再版时予以更正.

本书得以出版，与世图北京公司的大力支持是分不开的. 特别是编辑高蓉与刘慧的热心指导与帮助对于本书的完成起到了保障作用，译者借此机会对她们表示深深的谢意.

中国科学院大学　教　授　丁亦兵
中国科学院高能物理研究所　研究员　沈彭年
2015 年 6 月于北京

第 1 版前言

樱井纯是一位罕见的认为实验事实比只做理论推演甚至更有意义的理论家之一，是欧洲核子研究中心（CERN）广受欢迎的客人．他还以工作在理论物理研究以及教学这一他持有强烈观点的领域为乐而著称．尽管如此，他认为很多理论物理的教学面太窄，离应用太远．“……我们看到很多富有经验但缺乏知识的理论家，他们熟知海森伯（Heisenberg）场算符的 LSZ 形式体系，却不知道为什么受激发的原子会辐射，或者他们不知道解释天空是蔚蓝色的瑞利（Rayleigh）定律的量子理论推导．”他坚称学生必须会使用所学过的知识，读了书但不能做习题的读者等于什么也没有学到．

他的杰作《不变性原理与基本粒子》（1964）和《高等量子力学》（1967）充分运用了这些原则．在欧洲核子研究中心的图书馆，这两本书一直被频繁地借用．《现代量子力学》这本新书甚至被一个更大的、欠缺专业知识的群体使用．这本书把广泛的兴趣和详尽的实用性结合在一起．经过持续努力把书读懂，读者就会在这里找到他们想要知道的东西．

樱井纯于 1982 年 11 月 1 日突然去世，留下了这本未完成的书．莱因霍尔德·博德曼（Reinhold Bertlmann）和我帮助樱井纯夫人整理了她丈夫在欧洲核子研究中心的论文．在这些论文中，我们找到了一本有关该书大部分内容未经加工的手稿和大量的习题．尽管只有三章已完全写好，大部分创造性的工作业已完成，然而还是明显地留下了许多需要填补空白、斟词酌句和整理手稿的工作．

今天，这本书的完成应归功于樱井法子（Noriko Sakurai）的决心和段三复的奉献．樱井纯去世后，其夫人立即决定不能让樱井纯最后的工作付之东流．她以极大的勇气和威严，克服了所有的困难并设定了一直被保持下来的高标准，成为了这个项目的幕后推动力．段三复欣然付出他的时间和精力，编辑和完成了樱井纯的著作．也许，只有那些与高能理论物理这一令人紧张而且兴奋的领域密切相关的人，才能领悟到其中奉献的价值．

对我个人而言，樱井纯早就不只是一个特别杰出的同事．我感到非常悲哀的是，我们将再也不能一起笑谈物理、物理学家以及日常生活，而他也再看不到他最后工作的成就．但让我感到欣慰的是他的这部作品终成硕果．

J. S. 贝尔（John S. Bell）
欧洲核子研究中心，日内瓦

第 1 版修订版序

1989 年以来，为了使这本教科书能延用到 21 世纪，编辑一直致力于出版由他的已故挚友樱井纯撰写的《现代量子力学》的修订版. 为此，他咨询了多位曾协助第一版出版的樱井纯的朋友，特别是日本筑波大学的原康夫（Yasuo Hara）教授及京都产业大学的樱井明夫（Akio Sakurai）教授.

本书是为学过初等或高等量子力学的一年级研究生撰写的，因此没有为初学者提供量子力学导论内容，本书要求读者应该具备一定的求解时间相关和时间无关波动方程的能力. 作为求解一维透射-反射问题的必备能力，读者应熟悉高斯波包在无力场区域随时间演化的知识. 使用本书的学生还应该知道一些能量本征函数和能量本征值的一般性质.

修订版有三处重要的补充或更改，除此之外的其他部分均保持不变. 这些变更包括：麻省理工学院（MIT）的肯尼思·约翰逊（Kenneth Johnson）教授对 5.2 节简并情况下时间无关微扰论部分进行了修改；印第安纳大学的罗杰·牛顿（Roger Newton）教授对斯塔克效应中寿命展宽的细化，以及对共振态相移、光学定理和不可归一态的补充解释作出了贡献，并以“编者评注”或“编者按”的形式出现；约翰霍普金斯大学的托马斯·富尔顿（Thomas Fulton）教授重写了他所写的库仑散射贡献，并以强调物理的、简短的正文出现，而数学细节则转移到了附录 C 中.

尽管一些补充不是正文的主要内容，但考虑到 1982 年 11 月 1 日以来量子力学中的那些重要发展，补充若干这方面的内容是必要的. 为了这个目的，在本书的末尾加入了两篇补遗. 补遗 I 是关于绝热变化和几何相位的［1983 年以来，M. V. 贝里（M. V. Berry）已将其通俗化］，它是樱井明夫教授为日文版《现代量子力学》（Yoshioka-Shoten Publishing of Kyoto 出版）撰写的补遗的英文译文. 关于非指数衰变的补遗 II，由我的同事薛西斯·塔塔（Xerxes Tata）教授撰写，并由得克萨斯大学奥斯汀分校的 E. C. G. 苏达珊（E. C. G. Sudarshan）教授仔细核对. 理论上讲，虽然研究非指数衰变问题已有很长的历史，但间接检验这类衰变的跃迁速率的实验仅在 1990 年做过. 引入附加材料当然是编辑方的主观决定，读者可自行判断它的适用性. 感谢樱井明夫教授认真地核对，他修正了原来版本中的印刷错误. 这次修订自始至终是在我的同事桑迪普·帕克瓦萨（Sandip Pakvasa）教授的整体指导和鼓励下进行的.

除了感谢以上几位之外，我以前的学生李萍（Li Ping 的音译——译者注）、史小红（Shi Xiaohong 的音译——译者注）和铃木安永（Yasunaga Suzuki），1992 年春季在夏威夷大学选修量子力学研究生课程时，为出版修订版出谋划策. 作为课程的学期论文，铃木安永提供了日文补遗 I 的最初译文. 安迪·阿克（Andy Acker）博士帮助我解决了计算机图形问题. 夏威夷大学马诺阿分校的物理学和天文学系，特别是高能物理组，再次向我提供了设施和良好的氛围以完成我的编辑任务. 最后，我希望向爱迪生-韦斯利（Addison-Wesley）公司的高级物理编辑（及赞助）斯图尔特·约翰逊（Stuart Johnson）和他的助

理编辑珍妮弗·杜根（Jennifer Duggan），以及高级印制主管埃米·威尔卡特（Amy Willcutt）表达我的感激之情，他们的鼓励和乐观精神使修订版最终得以面世.

段三复

夏威夷，檀香山

第 2 版序

量子力学使我着迷. 它基于很少的几个假设描述了种类繁多的现象；它始于一个完全不同于经典物理学微分方程的框架，却把经典物理学也包含其中；它对许多物理研究现状提供了量化的预言，这些预言均与实验相吻合. 简而言之，如今，量子力学已是我们认识物质世界最根本的依据.

因此，对被邀请撰写樱井纯原著的《现代量子力学》的第 2 个修订版我深感荣幸. 我讲授以该书为蓝本的讲义已有几年，其表述方式也与该书非常一致. 然而，就像许多其他教师一样，我也发现这本书的某些方面有欠缺. 因此，我的混合讲义从其他书籍及我自己的研究成果中引入了一些材料，这为新版本的变更打下了基础.

当然，我原先的建议比起可能实现的结果更为雄心勃勃，即便如此，它所花费的时间仍然远长于我的预期. 那么多好的建议通过众多审阅人到了我的手中，我希望我已将它们全部纳入. 我对这个结果很满意，我尽力保持了樱井纯原稿的精髓.

第 1 章基本没有变动. 更新了一些图，对展示狄拉克（Dirac）磁矩相对论起源的第 8 章给出了参考.

第 2 章添加了一些材料. 新增关于基础解一节，其中包括三维自由粒子，使用生成函数的薛定谔方程中的简谐振子，以及作为一种引入艾里（Airy）函数方法的线性势. 线性势的解可供给 WKB 近似方法的讨论，其本征值可与“反弹中子”实验的测量相比较. 另外，还增加了展示量子力学干涉的中微子振荡的简短讨论.

第 3 章包括中心势场薛定谔方程的解. 展示了一般的径向方程，并将其应用于三维自由粒子以及无限深球形势阱，求解了各向同性谐振子，并讨论了它在“核势阱”中的应用. 我们还用库仑势进行了求解，并讨论了简并度. 强调了一些高级数学技巧.

第 4 章增加了一小节讨论库仑问题的内在对称性，该对称性在经典物理中曾基于楞次（Lenz）矢量获知. 作为修订版第 3 章中关于连续对称性讨论的扩充，它提供了对 SO（4）的介绍.

第 5 章有两个补充. 首先，5.3 节对动能的相对论修正的范畴内，把微扰论应用于氢原子给出了新的介绍. 修改自旋-轨道相互作用内容，有助于将本书末尾的狄拉克方程在氢原子中应用进行比较.

其次，加入了一节有关“极端”时间依赖的哈密顿量的内容. 其中包括对瞬变近似的简要讨论和对绝热近似的一段较长讨论. 之后，把绝热近似发展到了贝里相位的讨论，其中包括一个自旋$\frac{1}{2}$系统的具体例子（配合实验验证）.

本书的末尾有一些最有意义的修改，包括颠倒了散射和全同粒子这两章的顺序. 这样做的部分原因是因为我本人（和几位审阅人）的一种强烈感觉，认为散射的内容需要特别加以注意. 再有，根据审阅人的建议，既把二次量子化包括进来作为全同粒子内容的扩充，又新增关于相对论量子力学一章，二者都会把读者更近地带到量子场论的主题.

因此，本版中涵盖量子力学散射的第 6 章就有了一个几乎完全重写的引言. 用时间相关的处理来展示这一主题. 与此同时，遵循这一新的思路，关于散射振幅和玻恩（Born）近似的几节都重写了. 它包括将曾经是一小节的关于光学定理的内容并入到散射振幅的处理中. 然后再转到阐述玻恩近似. 随着某些材料的删除，剩余的几节都已被编辑、组合和重新加工过，并力图保留我和审阅者们认为在前一个版本中最重要的物理内容.

第 7 章有两节是新的，这对已有的全同粒子内容是重要的扩充［关于杨（Young）图的一节已被删除］. 书中用二次量子化方法展开了多粒子态的讨论，并较为详细地给出了两个应用实例. 其中之一是在带正电的均匀背景中的电子气问题，另一个是电磁场的正则量子化.

多粒子量子态的论述只是通向量子场论的一条途径，另一条途径牵涉到把狭义相对论引入到量子力学中，这是第 8 章的主题，并且在只要我认为是合理的地方用克莱因-戈尔登（Klein-Gordan）方程介绍本章主题. 书中还以几乎标准的方式，较为详细地论述了狄拉克方程. 最后，求解了狄拉克方程的库仑问题，提出了继续学习相对论量子场论的建议.

重新组织了附录. 新的关于电磁单位的附录是针对那些特定的学生写的，他们在大学期间用的是国际单位制，而在研究生期间却要面对高斯单位制.

我是一个实验物理学家，因而我尝试着把相关实验结果纳入到我的教学中. 我已经找到把其中的一些内容写入这个版本的方法，最常用的方法是借助那些现代出版物中的图.

- 图 1.6 说明了利用斯特恩-盖拉赫（Stern-Gerlach）仪器分析铯原子束流的极化态.
- 依据 μ 子 g－2 高精度测量的自旋转动如图 2.1 所示.
- 神岗（KamLAND）合作组观测到的中微子振荡展示在图 2.2 中.
- 图 2.4 所示的“反弹中子”量子能级的迷人实验被囊括进来，以强调线性势情况中的精确本征值和 WKB 本征值的一致性.
- 图 2.10 展示了出现在前一版中的引力相移.
- 引入一个老标准的图 3.6，以强调中心势问题非常适用于真实世界.
- 尽管宇称破坏自发现以来的 50 多年中已被多次测量，图 4.6 所示的吴建雄的原始测量仍是最清晰的证明之一.
- 用超冷中子测量的自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的贝里相位展示在图 5.6 中.
- 图 6.6 是一个如何使用散射数据解释靶的性质的清楚例子.
- 有时，细心实施的实验会显示出预言中的某些问题，图 7.2 就展示了交换对称性未被包括时所发生的效应.
- 用开西米尔（Casimir）效应（图 7.9）和观测压缩光（图 7.10）的数据证明了电磁场的量子化.
- 最后，展示了相对论量子力学需要的某些经典证明. 卡尔·安德逊（Carl Anderson）的正电子的原始发现如图 8.1 所示. 氢原子能级细节的现代信息放在了图 8.2 中.

此外，我还把手边与实验工作相关的许多参考文献收录了进来.

我要感谢诸多帮助我实施这个项目的人. 物理方面的同事包括 John Cummings、Stuart Freedman、Joel Giedt、David Hertzog、Barry Holstein、Bob Jaffe、Joe Levinger、

Alan Litke、Kam-Biu Luk、Bob McKeown、Harry Nelson、Joe Paki、Murray Peshkin、Olivier Pfister、Mike Snow、John Townsend、段三复、David Van Baak、Dirk Walecka、Tony Zee，以及那些校读稿件各版清样的审稿人. 这项工作从头到尾都得到了爱迪生-韦斯利公司的 Adam Black、Katie Conley、Ashley Eklund、Deb Greco、Dyan Menezes 和 Jim Smith 的指导. 我还要感谢 Techsetters 公司 John Rogosich 和 Carol Sawyer 的技术支持和建议. 另外，对那些在我撰写这段致谢时遗漏了名字的人深表歉意.

最后，衷心希望这个新版本真实地展示了樱井最初的愿望，不要因为我的介入而被明显地削弱.

J. 拿波里塔诺

纽约，特洛伊

追　思

J. J. 樱井 1933 年出生于东京，1949 年以高中生的身份来到了美国. 他就读于哈佛大学和康奈尔大学，并于 1958 年获得博士学位. 之后，他获得了芝加哥大学物理学助理教授的职位，并于 1964 年成为正教授. 之后，他工作在芝加哥直到 1970 年转至加利福尼亚大学洛杉矶分校，在那里工作直至去世. 他一生撰写了 119 篇基本粒子方面的理论文章，以及一些量子理论和粒子理论方面的专著.

理论物理学的主要目标是，要使物理世界具有既简洁又全面的理论描述的公式框架. 因为自然是微妙且复杂的，对新发现现象的前沿，理论物理的追求需要有大胆和热烈的冒险精神. 在这样的一个领域，樱井以他不可思议的物理洞察力和直觉，以及用启发性的物理术语简单易懂地诠释这些现象的能力占据着权威地位. 人们只要读过他的异常清晰的教科书《不变性原理与基本粒子》和《高等量子力学》，或者他的评述，以及听他在学校中的暑期讲座，都会领会到这一点. 可以毫不夸张地说，关于粒子物理学，很多我确实弄懂的知识正是来自于这些地方，以及来自他的文章和个别的辅导.

当樱井还是一名研究生时，他就与理查德·费曼（Richard Feynman）、莫瑞·盖尔曼（Murray Gell-Mann）、罗伯特·马沙克（Robert Marshak）、乔治·苏达珊（George Sudarshan）分别（且同时）提出了当今众所周知的弱相互作用 V-A 理论. 1960 年，他在《物理学年鉴》上发表的一篇预言文章，或许是他最重要的一篇单人的论文. 其中，首次尝试基于阿贝尔与非-阿贝尔（Yang-Mills）规范不变性构建一种强相互作用理论. 这一影响深远的工作使得理论家们试图理解规范（矢量）场的质量产生机制，即现在公认的希格斯（Higgs）机制. 尤其是，自从著名的格拉肖-温伯格-萨拉姆（Glashow-Weinberg-Salam）的弱力和电磁力统一理论取得圆满成功以来，它激励着人们去寻找一种在规范原理下的力的真实统一. 在唯象学方面，樱井追求并积极倡导强子动力学中的矢量介子为主模型. 他是讨论 ω 和 ϕ 介子态混合的第一人. 事实上，在更广泛的意义上说，他对粒子物理唯象学做出了许多重要的贡献，因为他的心总是与实验活动紧密地联系在一起.

我与 J. J. 樱井相识超过 25 年，而我最钦佩的不仅是他作为理论物理学家的超强能力，还有他的热心和慷慨的精神. 尽管 1957 年至 1958 年他自己还是康奈尔大学的研究生，他却从判断自己正在进行的 K-核子色散关系的先驱性研究工作中挤出时间（通过频繁的通信），来帮助我在伯克利分校进行相同主题的博士论文研究. 桑迪普·帕克瓦萨和我有幸与他合作了他最后的关于重夸克弱耦合论文中的一篇，该论文再次显示了他做物理的感召力和直觉判断. 当然，回想起 J. J. 樱井认为这篇文章属于很多他已发表的特别得意作品之一，我们感到非常高兴.

J. J. 樱井的离世使物理学界蒙受了巨大的损失，对此我深感悲痛. 因此，我深感荣幸能有机会编辑并出版他的《现代量子力学》手稿. 我深信没有比让我通过有意义的服务表达我对 J. J. 樱井的尊重和挚爱更为珍贵的礼物.

段三复

目　录

第 1 章　基本概念 …… 1
1.1　斯特恩-盖拉赫实验 …… 1
1.2　右矢、左矢和算符 …… 8
1.3　基右矢和矩阵表示 …… 13
1.4　测量、可观测量和不确定度关系 …… 17
1.5　基的改变 …… 27
1.6　位置、动量和平移 …… 30
1.7　位置和动量空间中的波函数 …… 37
第 2 章　量子动力学 …… 49
2.1　时间演化和薛定谔方程 …… 49
2.2　薛定谔绘景和海森伯绘景 …… 59
2.3　简谐振子 …… 66
2.4　薛定谔波动方程 …… 71
2.5　薛定谔波动方程的基本解 …… 76
2.6　传播子和费曼路径积分 …… 85
2.7　位势和规范变换 …… 95
第 3 章　角动量理论 …… 115
3.1　转动与角动量对易关系 …… 115
3.2　自旋$\frac{1}{2}$系统和有限转动 …… 119
3.3　SO(3)、SU(2)和欧拉转动 …… 127
3.4　密度算符和纯系综与混合系综 …… 131
3.5　角动量的本征值和本征态 …… 140
3.6　轨道角动量 …… 146
3.7　中心势的薛定谔方程 …… 152
3.8　角动量的加法 …… 160
3.9　角动量的施温格振子模型 …… 171
3.10　自旋关联测量和贝尔不等式 …… 175
3.11　张量算符 …… 181
第 4 章　量子力学中的对称性 …… 193
4.1　对称性、守恒定律和简并 …… 193
4.2　分立对称性、宇称或空间反射 …… 198
4.3　晶格平移作为一种分立对称性 …… 206
4.4　时间反演分立对称性 …… 209

第5章 近似方法 …… 223
5.1 时间无关的微扰论:非简并情况 …… 223
5.2 时间无关的微扰论:简并情况 …… 231
5.3 类氢原子:精细结构和塞曼效应 …… 235
5.4 变分法 …… 244
5.5 时间相关的势:相互作用绘景 …… 246
5.6 具有极端时间依赖性的哈密顿量 …… 252
5.7 时间相关的微扰论 …… 260
5.8 与经典辐射场相互作用的应用 …… 267
5.9 能量移动和衰变宽度 …… 271
第6章 散射理论 …… 281
6.1 作为时间相关微扰的散射 …… 281
6.2 散射振幅 …… 285
6.3 玻恩近似 …… 290
6.4 相移和分波 …… 294
6.5 程函近似 …… 303
6.6 低能散射和束缚态 …… 307
6.7 共振散射 …… 312
6.8 散射中对称性的考虑 …… 315
6.9 电子-原子非弹性散射 …… 317
第7章 全同粒子 …… 325
7.1 置换对称性 …… 325
7.2 对称化假定 …… 328
7.3 双电子系统 …… 329
7.4 氦原子 …… 331
7.5 多粒子态 …… 334
7.6 电磁场的量子化 …… 343
第8章 相对论量子力学 …… 355
8.1 通向相对论量子力学之路 …… 355
8.2 狄拉克方程 …… 361
8.3 狄拉克方程的对称性 …… 366
8.4 求解中心势问题 …… 370
8.5 相对论量子场论 …… 376
附录A 电磁单位 …… 381
A.1 库仑定律、电荷和电流 …… 381
A.2 制式间的转换 …… 382
附录B 薛定谔波动方程基本解的简要概述 …… 385
B.1 自由粒子($V=0$) …… 385
B.2 一维分段常数势 …… 385
B.3 透射-反射问题 …… 386

B.4　简谐振子 …… 387
B.5　中心力问题[球对称势 $V=V(r)$] …… 388
B.6　氢原子 …… 391
附录 C　方程(3.8.38)给出的角动量加法规则的证明 …… 393
第 2 版新增参考书目 …… 394
以前版本中的参考书目 …… 395

第 1 章　基本概念

在 20 世纪的前 27 年中，我们对微观现象的理解发生了革命性的变化，这是自然科学史上前所未有的. 我们不仅目睹了对经典物理学有效范围的严格限制，而且还发现取代经典物理学理论的替代理论是涵盖范围更广泛、应用领域更丰富的一种理论.

初学量子力学的最传统方法是遵循历史的发展——普朗克（Planck）的辐射定律、爱因斯坦-德拜（Einstein-Debye）的比热理论、波尔（Bohr）的原子、德布罗意（de Broglie）的物质波等——连同对一些关键实验的仔细分析，诸如康普顿（Compton）效应、富兰克-赫兹（Franck-Hertz）实验和戴维逊-革末-汤普森（Davisson-Germer-Thompson）实验. 这样，我们才能领会到在 20 世纪最初的 25 年中物理学家们怎样被迫一点一点地放弃曾经钟爱的经典物理学概念，以及那些了不起的大师们，诸如他们中的海森伯，薛定谔和狄拉克等，除去他们在早期的一些不正确的起始点和错误的转折点外，最终怎样成功地阐明了我们今天所熟知的量子力学.

然而，在本书中我们没有遵循这种历史的方法. 作为替代，我们从一个实例开始，这个实例也许能比其他例子更清楚地以一种基本的方式阐明经典物理学的缺陷. 我们希望，一开始让读者接受“轰击处理”将会使他们在初始阶段就与我们所谓的“量子力学思考方式”合拍.

这种不同的处理方法不仅仅是一种纯学术的做法. 我们关于物理世界的知识来自于：做一些关于自然界的假设，把这些假设表述为一些基本原理，从这些基本原理导出一些预言，以及对照实验检验这些预言. 如果实验和预言不一致，那时，这些原始的假设很可能是不正确的. 我们的方法强调我们所做的关于自然界的基本假设，在这些假设的基础上我们逐步建立起所有的物理定律，而且这些假设的目标是一开始就最大限度地容纳量子力学的观测数据.

1.1　斯特恩-盖拉赫实验

在这一节我们将集中关注的例子是斯特恩-盖拉赫实验，它最初是由 O. 斯特恩于 1921 年构想的，而后于 1922 年他与 W. 盖拉赫合作在法兰克福完成的.* 这个实验以激动人心的方式阐明彻底偏离经典力学概念的必要性. 在随后的几节中，我们将以多少有点公理化的方式阐述量子力学的基本形式，但是始终把斯特恩-盖拉赫实验的例子放在心里. 在某种意义上，斯特恩-盖拉赫类型的双态系统是最少经典力学而最多量子力学的系统. 对涉及双态系统问题的坚实理解将对任何认真学习量子力学的学生都是有益的. 正是由于这个理由，我们在本书中自始至终都会反复提到双态问题.

---

* 斯特恩-盖拉赫实验历史的精彩讨论可参见 Bretislav Friedrich 和 Dudley Herschbach 发表于 *Physics Today*（December，2003）的 *Stern and Gerlach：How a Bad Cigar Helped Reorient Atomic Physics*

实验的描述

现在我们来简要地讨论斯特恩-盖拉赫实验，几乎每一本现代物理的书都要讨论它.* 首先，银原子在一个炉子中被加热. 炉子有一个小洞，一些银原子可以穿过它跑出来. 如图 1.1 所示，束流穿过准直器后进入到一个非均匀磁场，该磁场由一对磁极产生，其中的一个磁极有着非常尖锐的边沿.

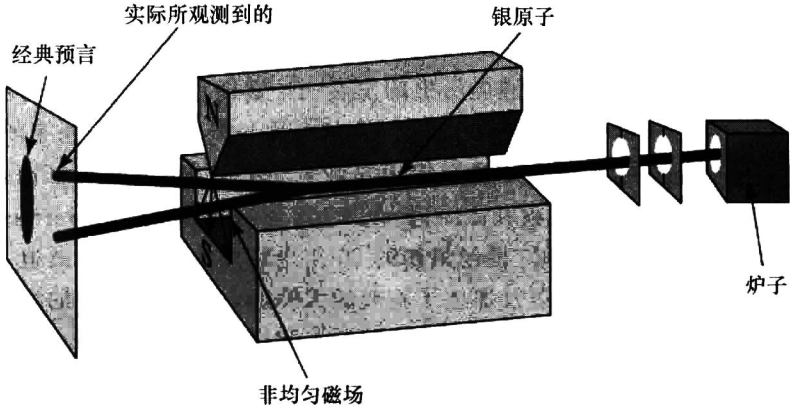


图 1.1 斯特恩-盖拉赫实验

现在我们必须弄清磁场对于银原子的影响. 就我们的目的而言，下列极为简化的银原子模型就足够了. 银原子由一个原子核与 47 个电子组成，这 47 个电子中的 46 个可以看作形成一个净角动量为零的、球对称的电子云. 如果忽略与讨论没有关系的原子核自旋，可以看到，原子作为一个整体确实具有一个角动量，它仅仅来自于单独的第 47 个 $(5s)$ 电子的自旋（是内禀的而非轨道的）角动量. 这 47 个电子束缚于约比电子重 2×10^5 倍的原子核上；结果这个重原子作为一个整体具有一个磁矩，它等于第 47 个电子的自旋磁矩. 换句话说，原子的磁矩 $\boldsymbol{\mu}$ 正比于电子的自旋 $\mathbf{S}$

$$\boldsymbol{\mu} \propto \mathbf{S}, \tag{1.1.1}$$

在大约 0.2%的精度上，其精确的比例因子为 $e/m_e c$（在本书中 $e<0$）.

由于磁矩与磁场的相互作用能正好是 $-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}$，所以原子所受力的 z 分量由下式给出

$$F_z = \frac{\partial}{\partial z}(\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}) \simeq \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}, \tag{1.1.2}$$

在那里我们已经忽略了 $\mathbf{B}$ 在不同于 z 方向上的分量. 由于原子作为一个整体非常重，我们预期经典的轨道概念可以合理地应用，这一点可以利用稍后导出的海森伯不确定度原理证明是正确的. 按照图 1.1 所示的装置，$\mu_z<0$ $(S_z>0)$ 的原子受到一个向上的力，而 $\mu_z>0$ $(S_z<0)$ 的原子受到一个向下的力. 于是可以预期束流会依据 μ_z 的取值劈裂. 换句话说，SG（Stern-Gerlach）仪器可“测量”出 $\boldsymbol{\mu}$ 的 z 分量，或者等价地，最多只差一个比例因子下的 $\mathbf{S}$ 的 z 分量.

原子在炉子中是随机取向的，$\boldsymbol{\mu}$ 的取向不存在更为偏好的方向. 假如电子就像一个经

---

* 一个初等的但有启发性的斯特恩-盖拉赫实验的讨论请参见：*French and Taylor*(1978)，432～438 页.

典的自转物体，我们预期 μ_z 可在 $|\boldsymbol{\mu}|$ 和 $-|\boldsymbol{\mu}|$ 之间任意取值. 这将导致我们预期有一束连续的束流从 SG 仪器飞出来，正如图 1.1 中所标明的，或多或少均匀地弥散在预期的区域. 实际并非如此，我们实验观测到的更像是图 1.1 中所显示的那种情况，即观测到两个“斑点”，对应于一个“上”和一个“下”两种取向. 换句话说，SG 仪器把来自炉子的银原子束流劈裂成两个不同的分量，这是在量子论早期的一种被称为“空间量子化”的现象. 在可把 $\boldsymbol{\mu}$ 看作是只差一个比例因子的电子自旋 $\mathbf{S}$ 的范围内，观测到 $\mathbf{S}$ 的 z 分量只有两个可能的取值：S_z 朝上和 S_z 朝下，我们分别称之为 S_z+ 和 S_z-. S_z 的这两个可能值都是某个角动量基本单位的倍数；其数值结果是 $S_z=\hbar/2$ 和 $S_z=-\hbar/2$，其中

$$\begin{aligned}\hbar &= 1.0546\times10^{-27}\,\text{erg-s}\\ &= 6.5822\times10^{-16}\,\text{eV-s},\end{aligned}\tag{1.1.3}$$

电子自旋角动量* 的这种“量子化”是我们从斯特恩-盖拉赫实验导出的第一个重要的特征.

图 1.2a 显示了人们预期的从实验得到的结果. 依据经典物理学，对应于磁矩取向的（连续）区域，束流本身应弥散在一段竖直的距离上. 与此相反，人们观测到了图 1.2b，它与经典物理完全不符. 束流本身神奇地劈裂成两部分，一个对应于自旋“向上”，而另一个对应于自旋“向下”.

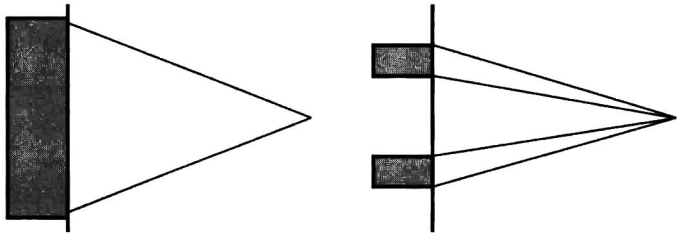


图 1.2　(a) 对于斯特恩-盖拉赫实验结果的经典物理预言. 束流应当按照磁矩乘以方向角余弦的数值的范围，沿竖直方向散开一段距离. 然而斯特恩-盖拉赫观测到的是 (b) 的结果，即只有磁矩的两种取向独自显示出来. 这两种取向并没有布满整个预期的范围.

当然，这个上-下方向或 z 轴绝非神圣不可侵犯. 我们也不妨把非均匀磁场加在水平方向，比如 x 方向，而让束流沿 y 方向运动. 这样一来我们就能把从炉子中出来的束流分离成一个 S_x+ 分量和一个 S_x- 分量.

序列斯特恩-盖拉赫实验

现在让我们考虑一个序列斯特恩-盖拉赫实验. 这里，我们指的是让原子束流依次通过两个或多个 SG 仪器. 我们考虑的第一种配置是相对简单的. 让炉子中出来的束流经由图 1.3a 所示的装置，在那里，像往常一样，SG$\hat{\mathbf{z}}$ 是一个非均匀磁场沿 z 方向的装置. 然后我们遮挡住来自第一个 SG$\hat{\mathbf{z}}$ 装置的 S_z- 分量，而让余下的 S_z+ 分量经由另一个 SG$\hat{\mathbf{z}}$ 装置. 这时只有一个束流分量——只是 S_z+ 分量从第二个装置中出来. 这或许并非那么令人吃惊，毕竟，如果原子的自旋都向上，则人们预期它们会保持向上，因为在第一个和第二

* 对这一量子化根源的一种理解归之于把相对论应用于量子力学. 请见本书 8.2 节的讨论.

个 SG$\hat{\mathbf{z}}$ 装置之间不存在使自旋转动的任何外场.

更有趣一点的是图 1.3b 所示的装置. 此时，第一个 SG 装置和以前一样，但第二个（SG$\hat{\mathbf{x}}$）装置则有一个沿 x 方向的非均匀磁场. 进入第二个装置（SG$\hat{\mathbf{x}}$）的 S_z+ 束流现在劈裂成两束，一个 S_x+ 束流和一个 S_x- 束流，二者有着相等的强度. 我们如何解释这个结果呢？它意味着来自第一个装置（SG$\hat{\mathbf{z}}$）的 S_z+ 束流中有 50%的原子是由特征既为 S_z+ 又为 S_x+ 的原子组成的，而剩下的 50%既有 S_z+ 又有 S_x- 特征吗？正如下面我们将看到的，结果表明这样一幅图像会遇到困难.

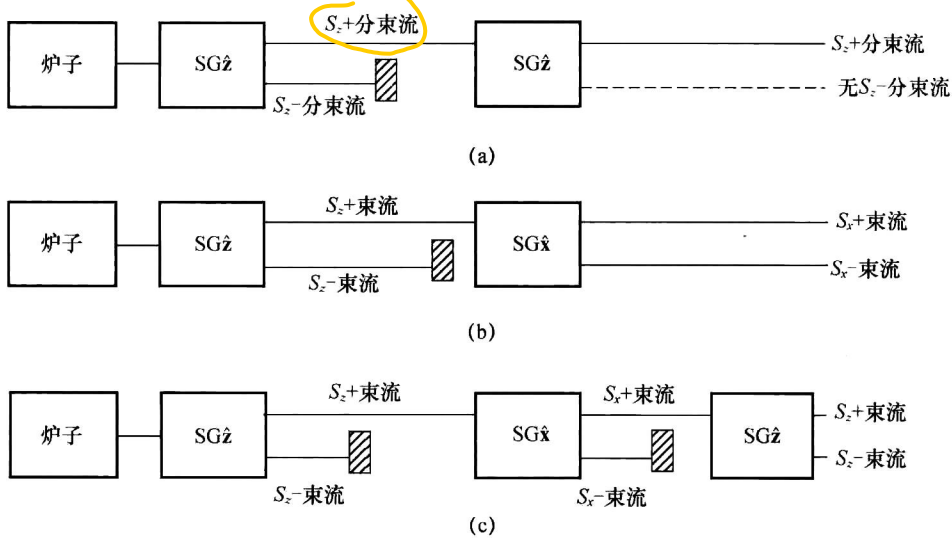


图 1.3 序列斯特恩-盖拉赫实验

现在我们考虑图 1.3c 所示的第三步配置，它最明确地阐述了量子力学系统的奇特之处. 这一次在图 1.3b 的配置中再添加第三个 SG$\hat{\mathbf{z}}$ 型的仪器. 实验上观测到从第三个仪器出来了两个分量而不是一个；看到的出射束流既有 S_z+ 分量又有 S_z- 分量. 这是绝对令人称奇的，因为原子从第一个仪器出来之后，我们已经确信 S_z- 分量已全部被遮挡住了. 我们以为早就消除掉的 S_z- 分束流怎么可能又重新出现了呢？把进入到第三个仪器的原子视为既有 S_z+ 又有 S_x- 的模型显然不能令人满意.

这个例子经常用来阐明在量子力学中我们不可能同时确定 S_z 和 S_x. 更确切地讲，我们可以说，通过第二个仪器（SG$\hat{\mathbf{x}}$）挑选出 S_x+ 束流完全破坏了以往任何有关 S_z 的信息.

把这种情况与经典力学中的旋转陀螺的情况相比较是很有意思的，在那里可通过确定陀螺角速度矢量 $\boldsymbol{\omega}$ 的各个分量来测定它的角动量

$$\mathbf{L}=I\boldsymbol{\omega}. \tag{1.1.4}$$

通过观测陀螺在哪个方向转得多快，我们就可以同时确定 ω_x，ω_y 和 ω_z. 如果知道了旋转陀螺的质量密度与几何形状，则惯性矩 I 就可计算，所以在这种经典情况下，同时确定 L_z 和 L_x 没有任何困难.

显然可以理解，在确定 S_z 和 S_x 时我们所遇到的限制并不是由于实验家的无能. 我们不可能通过改进实验技术使得出自图 1.3c 第三个仪器的 S_z- 分量消失. 量子力学的这个奇怪特性由实验本身强加给了我们. 事实上，这个限制在微观现象中是固有的.

与光的极化类比

由于这种情况是如此之新奇，在这里与一种熟悉的经典情况做一些类比可能是有益的. 为此，我们先离开话题考虑一下光波的极化. 这种类比将会帮助我们发展用公式表示量子力学假设的数学框架.

考虑一束沿 z 方向传播的单色光波. 极化矢量沿 x 方向的线性极化（或平面极化）光，简称为 x 极化光，具有一个在 x 方向振荡的依赖于时空的电场

$$\mathbf{E} = E_0\hat{\mathbf{x}}\cos(kz - \omega t). \tag{1.1.5}$$

同样地，我们还可以考虑沿 z 方向传播的 y 极化光，

$$\mathbf{E} = E_0\hat{\mathbf{y}}\cos(kz - \omega t). \tag{1.1.6}$$

让一束非极化光通过一个偏振片滤光器可得到（1.1.5）式或（1.1.6）式类型的极化光束. 我们把只允许 x 方向极化的光束通过的滤光器称为 x 滤光器. 当然，当一个 x 滤光器绕传播方向（z 方向）转动 90°时，就变成一个 y 滤光器. 众所周知，如果让一束光通过一个 x 滤光器，随后射到一个 y 滤光器上，则不会有任何光束透过（当然，我们所使用的是效率为 100%的偏振片）；请参见图 1.4a.

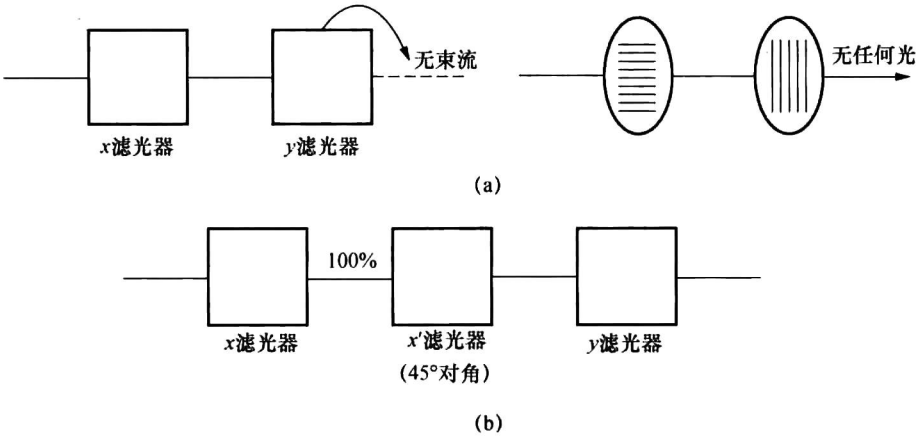


图 1.4　光束受到偏振片滤光器的影响

更有趣的是如果我们在 x 滤光器与 y 滤光器之间再插入另外一个偏振片，它只允许在 xy 平面上与 x 轴成 45°角方向——我们称之为 x' 方向——极化的光束通过；参见图 1.4b. 这时，就会有一束光透过 y 滤光器，事实上尽管光束刚刚穿过 x 滤光器之后没有任何 y 方向的极化分量. 换句话说，一旦 x' 滤光器插入进来而且挑选出 x' 极化束，则光束以前是否为 x 极化就无关紧要了. 通过第二个偏振片挑选 x' 极化光束破坏了以往任何有关于光的极化信息. 注意，只要做下列相应的改变：

$$\begin{aligned} &S_z \pm \text{原子} \leftrightarrow x, y \text{ 极化光} \\ &S_{\perp} \pm \text{原子} \leftrightarrow x', y' \text{ 极化光}, \end{aligned} \tag{1.1.7}$$

其中 x' 和 y' 轴的定义如图 1.5 所示，这种情况就与我们早些时候在图 1.3b 中遇到的 SG 配置十分类似.

让我们考察在经典电动力学的框架内如何定量描写 45°极化光束（x' 和 y' 极化光束）的行为. 利用图 1.5 我们得到

$$E_0\hat{\mathbf{x}}'\cos(kz-\omega t)=E_0\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathbf{x}}\cos(kz-\omega t)+\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathbf{y}}\cos(kz-\omega t)\right],$$
$$E_0\hat{\mathbf{y}}'\cos(kz-\omega t)=E_0\left[-\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathbf{x}}\cos(kz-\omega t)+\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathbf{y}}\cos(kz-\omega t)\right], \tag{1.1.8}$$

在图1.4b所示的三重滤光器装置中，从第一个偏振片透射出的束流是一个 $\hat{\mathbf{x}}$ 极化束，它可以看作是一个 x' 极化束与一个 y' 极化束的线性组合. 第二个偏振片挑选出 x' 极化束，反过来它又可以看作是一个 x 极化束与一个 y 极化束的线性组合. 最后，第三个偏振片选择出 y 极化分量.

把在图1.3c的序列斯特恩-盖拉赫实验中使用的(1.1.7)对应式应用到图1.4b的三重滤光器实验中将表明：或许能够使用新一类二维矢量空间中的某类矢量表述一个银原子的自旋态，这是一个抽象的矢量空间，不要和通常的二维（xy）空间相混淆. 正如(1.1.8)式中的 $\hat{\mathbf{x}}$ 和 $\hat{\mathbf{y}}$ 是用来分解 $\hat{\mathbf{x}}'$ 极化光的极化矢量 $\hat{\mathbf{x}}'$ 的基矢量一样，可以合理地使用一个矢量表示 S_x+ 态，在下一节充分发展的狄拉克符号中该矢量被称为右矢（ket）. 我们用 $|S_x;+\rangle$ 表示这个矢量，并把它写成分别对应于 S_z+ 和 S_z- 态的两个基矢 $|S_z;+\rangle$ 和 $|S_z;-\rangle$ 的线性组合. 因此，类似于(1.1.8)式，我们可以猜测

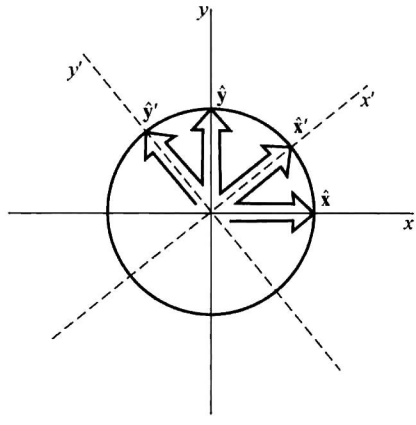


图1.5 x' 和 y' 轴的取向

$$|S_x;+\rangle \overset{?}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;+\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;-\rangle \tag{1.1.9a}$$
$$|S_x;-\rangle \overset{?}{=} -\frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;+\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;-\rangle \tag{1.1.9b}$$

以后我们将证明如何利用量子力学的一般形式给出这些表达式.

这样，从图1.3c的第二个（SG$\hat{\mathbf{x}}$）装置出来的未被阻拦掉的分束流将被看作是 S_z+ 和 S_z- 在(1.1.9a)式意义上的叠加. 正是由于这个缘故，从第三个（SG$\hat{\mathbf{z}}$）装置出来了两个分束流.

立即要关注的下一个问题是：我们将如何表示 $S_y\pm$ 态？对称性的论证表明，如果我们观测沿 x 方向传播的 $S_z\pm$ 的束流，而且让它穿过一个 SG$\hat{\mathbf{y}}$ 装置，由此产生的情况非常类似于沿 y 方向传播的 $S_z\pm$ 的束流穿过一个 SG$\hat{\mathbf{x}}$ 装置. 那时 $S_y\pm$ 的两个右矢应当看作 $|S_z;\pm\rangle$ 的线性组合，但是，从(1.1.9)式看到在写 $|S_x;\pm\rangle$ 时我们已经用完了现有的可能性. 我们矢量空间的形式怎样把 $S_y\pm$ 态与 $S_x\pm$ 态区分开呢？

这里与极化光的类比使我们再次摆脱困境. 这一次，我们考虑一个圆偏振光束，它可以通过让一束线偏振光穿过一个四分之一波片得到. 当我们让这样一束圆偏振光束穿过一个 x 滤光器或者 y 滤光器时，我们再一次得到强度相等的一条 x 极化光束或一条 y 极化光束. 迄今大家都知道，圆偏振光与45°线极化（x' 极化或 y' 极化）光完全不相同.

数学上，我们如何表示一个圆极化光呢？一个右旋圆极化光只不过是一个 x 极化光和一个 y 极化光的线性组合，其中 y 极化分量电场振荡的相位与 x 极化分量电场振荡的相位

差 90°*，即：

$$\mathbf{E}=E_0\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathbf{x}}\cos(kz-\omega t)+\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathbf{y}}\cos\left(kz-\omega t+\frac{\pi}{2}\right)\right]. \tag{1.1.10}$$

通过引入下述的 $\boldsymbol{\epsilon}$，使用复数表示更为简洁：

$$\mathrm{Re}(\boldsymbol{\epsilon})=\mathbf{E}/E_0. \tag{1.1.11}$$

那时，对于一个右旋圆极化光我们可以写成：

$$\boldsymbol{\epsilon}=\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathbf{x}}e^{i(kz-\omega t)}+\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{\mathbf{y}}e^{i(kz-\omega t)}\right], \tag{1.1.12}$$

其中我们用到了 $i=e^{i\pi/2}$.

我们可以与银原子的自旋态做下列的类比：

$$\begin{aligned}&S_y+\text{原子}\leftrightarrow\text{右旋圆极化束},\\&S_y-\text{原子}\leftrightarrow\text{左旋圆极化束}.\end{aligned} \tag{1.1.13}$$

将这一类比用到（1.1.12）式可看到，如果允许基右矢前的系数取为复数，则不难把这些 $S_y\pm$原子纳入到我们的矢量空间形式：

$$|S_y;\pm\rangle\overset{?}{=}\frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;+\rangle\pm\frac{i}{\sqrt{2}}|S_z;-\rangle, \tag{1.1.14}$$

它显然不同于（1.1.9）式. 因此，我们看到描写银原子自旋态所需要的二维矢量空间必须是一个复矢量空间；该矢量空间的一个任意矢量可以写成基矢量 $|S_z;\pm\rangle$ 的线性组合，一般说来，其系数为复数. 在这样一个简单的例子中复系数的必要性已经很明显，这一事实是相当引人注目的.

至此，读者一定已经注意到我们有意避开论及光子. 换句话说，我们完全忽略了光的量子特征；并且没有在任何地方提到单个光子的极化态. 我们所做的类比是在描写单个原子自旋态的抽象矢量空间的右矢与经典电磁场的极化矢量之间的类比. 事实上，通过引入光子概念和谈及在一个线性极化态上找到一个圆极化光子的概率等等，我们已经做了更为生动的对比；然而在这里并不需要这样做. 不用这样做我们就已经达到了本节的目标：引入可用抽象的复矢量空间中的矢量表示量子力学态的观点.**

最后，在概述量子力学的数学形式之前，我们注意到斯特恩-盖拉赫装置的物理学远远超出了学术的兴趣. 分离原子自旋态的能力也具有大量的实用价值. 图 1.6 展示了使用斯特恩-盖拉赫技术分析在铯原子的原子束流中自旋操控的结果. 这个碱金属原子唯一稳定的同位素，^{133}Cs，具有 $I=7/2$ 的原子核自旋，而实验辨别出 $F=4$ 的超精细磁分裂子态，给出了九种自旋取向. 在使用这种一度是谜一般的效应的诸多例子中，这是唯一的一个用到了实际装置. 当然，所有这些应用只为了肯定地确立这一效应及我们即将要阐述并进一步发展的量子力学原理.

---

* 不幸的是，关于右旋与左旋圆极化光的定义在文献中没有统一的约定.

** 对通过仔细研究光子极化了解量子力学的基本概念感兴趣的读者可以发现，Baym（1969）的第一章阐释得非常清楚.

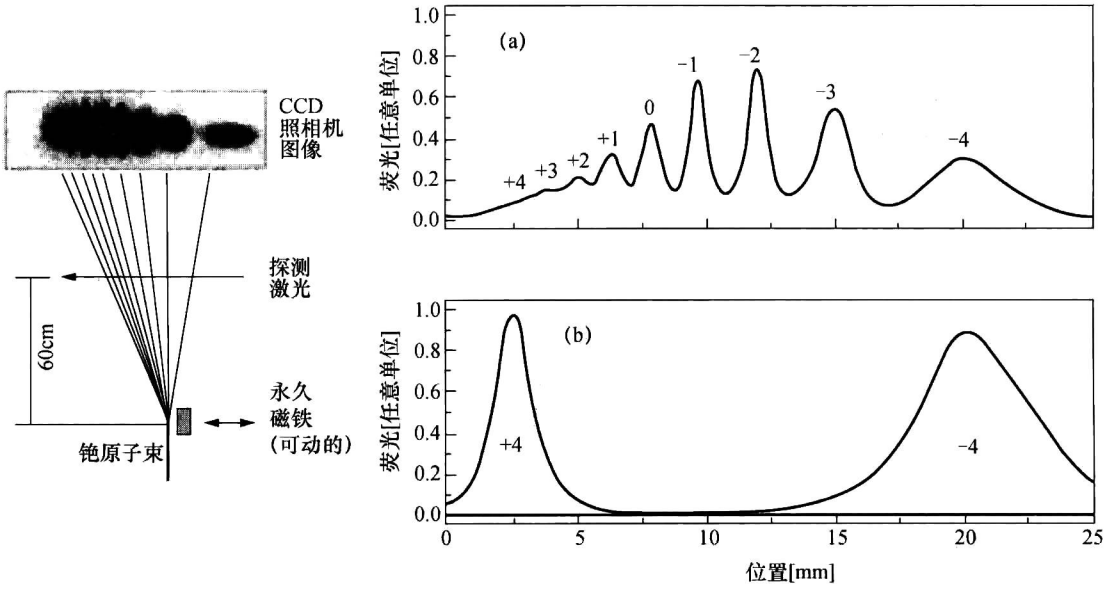


图 1.6 用于分离铯原子的自旋态的现代斯特恩-盖拉赫实验装置，取自 F. Lison et al.，*Phys. Rev.* A **61**（1999）013405. 图的左部显示了该装置，而数据显示自旋为 4 的原子的 9 个不同的投影，其中（a）和（b）分别表示光泵浦被用来只填充最极端自旋投影之前和之后的情况. 自旋量子数 $F=4$ 是原子的最外层电子与原子核的自旋 $I=7/2$ 之间的耦合.

1.2 右矢、左矢和算符

上一节我们指出了斯特恩-盖拉赫实验的分析如何导致我们考虑一个复矢量空间. 在这一节和下一节我们将确切地阐述量子力学中用到的矢量空间的基本数学. 本书从头到尾采用的符号是 P. A. M. 狄拉克研发出的左矢和右矢符号. 当然，早在量子力学诞生之前数学家们就已经知道了线性矢量空间理论，但是狄拉克引入矢量空间的方法，特别是从物理学家的观点看，具有许多优点.

右矢空间

我们考虑一个复矢量空间，它的维数按照所考虑的物理系统的性质确定. 在斯特恩-盖拉赫类型的实验中，仅有的量子力学自由度是一个原子的自旋，其维数由经过 SG 仪器时原子能够通过的可替换的路径数确定：在前一节银原子的情况下，维数恰好是二，对应着 S_z 具有两个可能的取值.* 稍后，在 1.6 节我们考虑连续谱——例如，一个粒子的位置（坐标）或动量——那时，可替换的数目是不可数的无穷大，在这种情况下所涉及的矢量空间被称为**希尔伯特空间**，它是用研究过无穷维矢量空间的 D. 希尔伯特的名字命名的.

在量子力学中，一个物理态——例如，一个有着确定自旋取向的银原子——用一个复矢量空间的**态矢量**表示. 按照狄拉克的建议，我们称这样的一个矢量为一个**右矢**，用 $|\alpha\rangle$

* 很多物理系统的状态空间维数是可数的无穷大. 尽管我们常常指出右矢空间的一个有限的维数，N，但结果对于可数的无穷大维数也成立.

表示. 这个态矢量被假定包含物理态的全部信息：我们要了解的有关这个状态的一切都包含在这个右矢中. 两个右矢可以相加：

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle. \tag{1.2.1}$$

其和$|\gamma\rangle$只不过是另一个右矢. 如果我们用一个复数c乘以一个$|\alpha\rangle$，则得到的积$c|\alpha\rangle$是另一个右矢. 数c可以放在右矢的左边也可以放在右边；两者没有区别.

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c. \tag{1.2.2}$$

在c为零的特殊情况下，得到的右矢称为一个**零右矢**.

物理假定之一是：$|\alpha\rangle$和$c|\alpha\rangle$在$c\neq 0$时表示同一个物理态. 换句话说，矢量空间中只有方向是有意义的. 数学家更喜欢说，我们在这里处理的是射线而不是矢量.

一个**可观测量**，诸如动量和自旋的分量，可用所涉矢量空间中的**算符**，比如A，来表示. 总的来说，一个算符从左边作用于一个右矢

$$A\cdot(|\alpha\rangle) = A|\alpha\rangle, \tag{1.2.3}$$

结果将是另一个右矢. 稍后，关于乘法运算将会有更多的涉及.

一般而言，$A|\alpha\rangle$不是$|\alpha\rangle$乘上一个常数. 然而，有一些特殊的重要右矢，称作算符A的**本征右矢**，它们用

$$|a'\rangle, |a''\rangle, |a'''\rangle, \cdots \tag{1.2.4}$$

表示，具有下列性质：

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle, A|a''\rangle = a''|a''\rangle, \cdots \tag{1.2.5}$$

其中a'，a''…只是一些数. 注意，A作用于一个本征右矢只是重新产生只差一个乘数的同样的右矢. 数的集合$\{a', a'', a''', \cdots\}$，更紧凑一点用$\{a'\}$表示，称之为算符$A$的**本征值集**. 当有必要把本征值按一种特定方式排序时，可以用$\{a^{(1)}, a^{(2)}, a^{(3)}, \cdots\}$代替$\{a', a'', a''', \cdots\}$.

与一个本征右矢相对应的物理态称为**本征态**. 在最简单的自旋 1/2 的系统中，本征值-本征右矢的关系式（1.2.5）可被表示为

$$S_z|S_z;+\rangle = \frac{\hbar}{2}|S_z;+\rangle, \quad S_z|S_z;-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|S_z;-\rangle. \tag{1.2.6}$$

其中$|S_z;\pm\rangle$是算符S_z的本征右矢，本征值为$\pm\hbar/2$. 这里，为与$|a'\rangle$一致我们可以使用$|\hbar/2\rangle$表示$|S_z;+\rangle$，在那里一个本征右矢用它的本征值标记，但在前一节已经用过的符号$|S_z;\pm\rangle$在这里更为方便，因为我们也要考虑S_x的本征右矢：

$$S_x|S_x;\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|S_x;\pm\rangle. \tag{1.2.7}$$

早些时候我们曾谈到矢量空间的维数由斯特恩-盖拉赫类实验中的可供选择的路径数目确定. 较正式一点地说，我们涉及的是由可观测量A的N个本征右矢所张的一个N维矢量空间. 任意的一个右矢$|\alpha\rangle$都可用a'，a''，…直至$a^{(N)}$写成

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'}|a'\rangle, \tag{1.2.8}$$

式中的$c_{a'}$为复系数. 这种展开的唯一性问题将被推迟到本征右矢正交性的证明之后讨论.

左矢空间和内积

我们一直处理的矢量空间是右矢空间. 现在我们引入**左矢空间**的概念，它是一个与右矢空间**“对偶”**的矢量空间. 我们假定对应于每个右矢$|\alpha\rangle$，在这个对偶空间或左矢空间

中都存在一个左矢，用$\langle\alpha|$表示. 左矢空间由本征左矢$\{\langle a'|\}$所张成，它们与本征右矢$\{|a'\rangle|\}$相对应. 右矢空间与左矢空间的一一对应关系为：

$$|\alpha\rangle \overset{\text{DC}}{\leftrightarrow} \langle\alpha|$$

$$|a'\rangle, |a''\rangle, \cdots \overset{\text{DC}}{\leftrightarrow} \langle a'|, \langle a''|, \cdots$$

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle \overset{\text{DC}}{\leftrightarrow} \langle\alpha| + \langle\beta|, \tag{1.2.9}$$

其中DC代表**对偶对应**. 粗略地说，我们可以把左矢空间看作是右矢空间的某种镜像.

与$c|\alpha\rangle$对偶的左矢被假定为$c^*\langle\alpha|$而不是$c\langle\alpha|$，这一点非常重要. 更一般地讲，我们有

$$c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle \overset{\text{DC}}{\leftrightarrow} c_\alpha^*\langle\alpha| + c_\beta^*\langle\beta|. \tag{1.2.10}$$

我们现在定义一个左矢和一个右矢的**内积**.* 这个乘积写成一个左矢在左边而一个右矢在右边，例如，

$$\langle\beta|\alpha\rangle = (\underset{\text{左矢}(c)\text{右矢}}{\langle\beta|)\cdot(|\alpha\rangle}). \tag{1.2.11}$$

这个乘积，一般来说，是一个复数. 注意，在构成一个内积时，我们总是从左矢空间取一个矢量和从右矢空间取一个矢量.

我们假定内积有两个基本性质. 首先，

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*. \tag{1.2.12}$$

换句话说，$\langle\beta|\alpha\rangle$与$\langle\alpha|\beta\rangle$互为复共轭. 注意，尽管内积在某种意义上讲类似于熟悉的标量积$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$，但$\langle\beta|\alpha\rangle$必须与$\langle\alpha|\beta\rangle$明显地区分开；而类似的区别在实矢量空间中并不需要，因为$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$等于$\mathbf{b}\cdot\mathbf{a}$. 利用(1.2.12)式我们可以马上导出，$\langle\alpha|\alpha\rangle$一定是一个实数. 要证明这一点，只要令$\langle\beta|\to\langle\alpha|$.

关于内积的第二个假定是

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geqslant 0, \tag{1.2.13}$$

其中等号仅当$|\alpha\rangle$是一个零右矢时成立. 该式有时称为**正定度规**假设. 从物理学家的观点看，这个假定对量子力学的概率解释是绝对必要的，这一点稍后将会明显可见.**

如果两个右矢$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$满足

$$\langle\alpha|\beta\rangle = 0, \tag{1.2.14}$$

它们被称为是**正交**的，尽管在这个内积的定义中出现了左矢$\langle\alpha|$. 通过(1.2.12)式，正交性关系(1.2.14)式还意味着

$$\langle\beta|\alpha\rangle = 0. \tag{1.2.15}$$

给定一个非零的右矢，我们可以构成一个**归一的右矢**$|\tilde{\alpha}\rangle$，记为

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}\right)|\alpha\rangle, \tag{1.2.16}$$

它有下列性质

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1. \tag{1.2.17}$$

类似于欧几里得空间矢量的长度$\sqrt{\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}} = |\mathbf{a}|$，$\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$总的说来被认为是$|\alpha\rangle$的**模**. 由于

---

* 文献中内积经常称为标量积，因为它类似于欧几里得空间的$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$；然而，本书中我们对一个在通常三维空间中转动不变的量保留标量的术语.

** 试图摒弃这一假定将导致具有“不定度规”的物理理论. 在本书中我们将不涉及这样的理论.

$|\alpha\rangle$ 和 $c|\alpha\rangle$ 表示同一个物理态，我们也可要求用于描述物理态的右矢都是在 (1.2.17) 式意义上归一的.*

算符

正如我们早些时候提到的，诸如动量和自旋的分量等可观测量都将用能作用于右矢的算符来表示. 我们可以考虑更为普遍类型的作用于右矢的算符；它们将用 X，Y 等表示，而 A，B 等将仅限于用在相应于可观测量的那类算符.

算符从左边作用在右矢上

$$X\cdot(|\alpha\rangle)=X|\alpha\rangle, \tag{1.2.18}$$

得到的乘积是另一个右矢. 如果对于所涉及右矢空间的任意一个右矢都有

$$X|\alpha\rangle=Y|\alpha\rangle, \tag{1.2.19}$$

则称算符 X 和 Y **相等**

$$X=Y. \tag{1.2.20}$$

若对任意的右矢 $|\alpha\rangle$，我们都有

$$X|\alpha\rangle=0. \tag{1.2.21}$$

则称算符 X 为**零算符**. 算符可以相加：加法运算是可交换的和可结合的：

$$X+Y=Y+X, \tag{1.2.21a}$$

$$X+(Y+Z)=(X+Y)+Z. \tag{1.2.21b}$$

除了第 4 章将考虑的时间反演算符是唯一的例外，本书所出现的算符都是线性算符，即

$$X(c_\alpha|\alpha\rangle+c_\beta|\beta\rangle)=c_\alpha X|\alpha\rangle+c_\beta X|\beta\rangle. \tag{1.2.22}$$

算符 X 总是从*右边*作用在左矢上

$$(\langle\alpha|)\cdot X=\langle\alpha|X, \tag{1.2.23}$$

得到的积是另一个左矢. 一般而言，右矢 $X|\alpha\rangle$ 与左矢 $\langle\alpha|X$ 彼此并不相互对偶. 我们把符号 $X^\dagger$ 定义为

$$X|\alpha\rangle\overset{\text{IX}}{\leftrightarrow}\langle\alpha|X^\dagger. \tag{1.2.24}$$

算符 $X^\dagger$ 称为 X 的**厄米共轭**或简称 X 的共轭算符. 如果一个算符满足

$$X=X^\dagger, \tag{1.2.25}$$

它被称作为厄米算符.

乘法

算符 X 和 Y 可以相乘. 一般而言，乘法运算是非对易的；这就是说：

$$XY\neq YX. \tag{1.2.26}$$

然而，乘法运算是可结合的：

$$X(YZ)=(XY)Z=XYZ. \tag{1.2.27}$$

我们还有

$$X(Y|\alpha\rangle)=(XY)|\alpha\rangle=XY|\alpha\rangle,\quad(\langle\beta|X)Y=\langle\beta|(XY)=\langle\beta|XY. \tag{1.2.28}$$

注意

$$(XY)^\dagger=Y^\dagger X^\dagger \tag{1.2.29}$$

---

* 对于具有连续谱的可观测量的本征态，将采用不同的归一化约定，请见 1.6 节.

因为

$$XY|\alpha\rangle = X(Y|\alpha\rangle) \overset{\text{DC}}{\leftrightarrow} (\langle\alpha|Y^\dagger)X^\dagger = \langle\alpha|Y^\dagger X^\dagger. \tag{1.2.30}$$

到此为止，我们已经考虑了如下的乘积：$\langle\beta|\alpha\rangle$，$X|\alpha\rangle$，$\langle\alpha|X$ 和 XY. 还有其他允许我们构成的乘积吗？让我们用 $|\beta\rangle$ 顺序去乘 $\langle\alpha|$. 得到的乘积

$$(|\beta\rangle)\cdot(\langle\alpha|) = |\beta\rangle\langle\alpha| \tag{1.2.31}$$

称为 $|\beta\rangle$ 和 $\langle\alpha|$ 的**外积**. 我们稍后将强调指出，$|\beta\rangle\langle\alpha|$ 被视为一个算符，因此它与只是一个数的内积 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 根本不同.

也有一些“不合法的乘积”. 我们已经提到过，一个算符必须放在一个右矢的左边或者一个左矢的右边. 换言之，$|\alpha\rangle X$ 和 $X\langle\alpha|$ 都是不合法乘积的例子. 它们既不是右矢也不是左矢，又不是算符；它们只是一些毫无意义的东西. 当 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$（$\langle\alpha|$ 和 $\langle\beta|$）是属于同一个右矢（左矢）空间的右矢（左矢）时，$|\alpha\rangle|\beta\rangle$ 和 $\langle\alpha|\langle\beta|$ 等这样的乘积也都是不合法的.*

结合公理

正如从（1.2.27）式可清楚地看到，算符之间的乘法运算是可结合的. 实际上，只要我们在处理右矢、左矢和算符之间的“合法”的乘法，结合性质就被假定是相当普遍成立的. Dirac 把这一重要的假定称为**乘法的结合公理**.

为显示这个公理的能力，让我们首先考虑一个外积作用在一个右矢上：

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|)\cdot|\gamma\rangle. \tag{1.2.32}$$

由于结合公理，我们也可以把这个等式看作是

$$|\beta\rangle\cdot(\langle\alpha|\gamma\rangle), \tag{1.2.33}$$

其中 $\langle\alpha|\gamma\rangle$ 只是个数. 于是外积作用于一个右矢上只不过是另一个右矢；换句话说，$|\beta\rangle\langle\alpha|$ 可以看作一个算符. 由于（1.2.32）式与（1.2.33）式是相等的，我们也可以忽略掉乘积中的那个点，让 $|\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle$ 就代表算符 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ 作用在 $|\gamma\rangle$ 上，或者，等价地，数 $\langle\alpha|\gamma\rangle$ 乘以 $|\beta\rangle$. [另一方面，如果把（1.2.33）式写成 $(\langle\alpha|\gamma\rangle)\cdot|\beta\rangle$，我们就不能再忽略那个点和括号，因为作为结果得到的表示式看上去就会是不合法的了.] 要注意，算符 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ 把 $|\gamma\rangle$ 转到了 $|\beta\rangle$ 方向. 很容易得到，如果

$$X = |\beta\rangle\langle\alpha|, \tag{1.2.34}$$

则

$$X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|, \tag{1.2.35}$$

我们把它留作一个练习.

在结合公理第二个重要的实例中，我们注意到

$$\underset{\text{左矢}}{(\langle\beta|)}\cdot\underset{\text{右矢}}{(X|\alpha\rangle)} = \underset{\text{左矢}}{(\langle\beta|X)}\cdot\underset{\text{右矢}}{(|\alpha\rangle)}. \tag{1.2.36}$$

因为两边是相等的，我们或许也可以用更为紧凑的符号

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle \tag{1.2.37}$$

来代表（1.2.36）式的每一边. 现在回忆一下，$\langle\alpha|X^\dagger$ 是与 $X|\alpha\rangle$ 对偶的左矢，所以

---

* 稍后在本书我们将遇到像 $|\alpha\rangle|\beta\rangle$ 这类乘积，把它写成 $|\alpha\rangle\otimes|\beta\rangle$ 更为恰当，但是在这种情况下 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 总是涉及来自不同的矢量空间的右矢. 例如，第一个右矢属于电子自旋的矢量空间，而第二个右矢属于电子轨道角动量的矢量空间；或者第一个右矢处于粒子1的矢量空间，而第二个右矢处于粒子2的矢量空间等等.

$$\begin{aligned}\langle\beta|X|\alpha\rangle &= \langle\beta|\cdot(X|\alpha\rangle)\\ &= \{(\langle\alpha|X^{\dagger})\cdot|\beta\rangle\}^{*}\\ &= \langle\alpha|X^{\dagger}|\beta\rangle^{*},\end{aligned}\tag{1.2.38}$$

其中，除了结合公理，我们还用了内积（1.2.12）式的基本性质. 对于一个厄米的 X，我们有

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\alpha|X|\beta\rangle^{*}.\tag{1.2.39}$$

1.3　基右矢和矩阵表示

可观测量的本征矢

让我们来考虑一个厄米算符 A 的本征右矢和本征值. 我们使用早先为可观测量保留的符号 A，因为在量子力学中感兴趣的厄米算符常常被证明都是代表某些物理可观测量的算符.

我们从陈述一个重要定理开始.

定理 1.1　厄米算符 A 的本征值均为实数；A 的相应于不同本征值的本征矢是正交的.

证明　首先，回顾

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle.\tag{1.3.1}$$

因为 A 是厄米的，我们还有

$$\langle a''|A = a''^{*}\langle a''|,\tag{1.3.2}$$

其中 a'、a'',…都是 A 的本征值. 如果我们把（1.3.1）式的两边都左乘以 $\langle a''|$，（1.3.2）式的两边都右乘以 $|a'\rangle$，然后相减，就可得到

$$(a'-a''^{*})\langle a''|a'\rangle = 0,\tag{1.3.3}$$

现在 a' 和 a'' 可以取相同的值也可以取不同的值. 让我们先将它们取相同的；可以推证出实数条件（该定理的前半部分）

$$a' = a'^{*},\tag{1.3.4}$$

其中我们用到了 $|a'\rangle$ 不是一个零矢量的事实. 现在让我们假定 a' 与 a'' 不同. 因为刚刚证明了的实数条件，在（1.3.3）式中出现的差 $a'-a''^{*}$ 等于 $a'-a''$，根据假定，它不可能是零. 于是内积 $\langle a''|a'\rangle$ 一定是零：

$$\langle a''|a'\rangle = 0,\quad (a'\neq a''),\tag{1.3.5}$$

由此证明了正交性（定理的后半部分）.

在物理的基础之上我们预期一个可观测量具有实的本征值，这一点在下一节将会更为清楚，在那里我们将讨论量子力学的测量问题. 只要算符是厄米的，则刚刚证明的这个定理就保证了它的本征值的实数性. 这正是在量子力学中我们讨论厄米的可观测量的原因.

通常的做法是把 $|a'\rangle$ 归一化，以使 $\{|a'\rangle\}$ 构成一个**正交**集：

$$\langle a''|a'\rangle = \delta_{a''a'}.\tag{1.3.6}$$

从逻辑上讲，我们可以问这样的问题：这个本征右矢的集合是完备的吗？因为我们的讨论始于整个右矢空间是由 A 的本征右矢所张成的断言，通过我们的右矢空间的构造，A 的本

征右矢必然形成一个完备集.*

本征右矢作为基右矢

我们已经看到 A 的归一化的本征右矢构成了一个完备正交集. 右矢空间的一个任意右矢可以用 A 的本征右矢展开. 换句话说，A 的本征右矢被用作基右矢就像一组相互正交的单位矢量被用作欧几里得空间的基矢量一样.

在 A 的本征右矢所张的右矢空间中给定一个任意右矢 $|\alpha\rangle$，让我们试着将其展开如下：

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle. \tag{1.3.7}$$

用 $\langle a''|$ 左乘且利用正交性（1.3.6）式，我们立即可以得到展开系数：

$$c_{a'} = \langle a'|\alpha\rangle. \tag{1.3.8}$$

换句话说，我们有

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle, \tag{1.3.9}$$

它类似于（实）欧几里得空间的一个矢量 $\mathbf{V}$ 的展开：

$$\mathbf{V} = \sum_i \hat{\mathbf{e}}_i (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{V}), \tag{1.3.10}$$

，其中的 $\{\hat{\mathbf{e}}_i\}$ 形成一组单位矢量的正交集. 我们现在来回忆一下乘法的结合公理：$|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$ 既可以看作数 $\langle a'|\alpha\rangle$ 乘以 $|a'\rangle$，或等价地，也可以看成算符 $|a'\rangle\langle a'|$ 作用在 $|\alpha\rangle$ 上. 因为（1.3.9）式中的 $|\alpha\rangle$ 是一个任意的右矢，所以我们一定有：

$$\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = 1, \tag{1.3.11}$$

其中右边的 1 被理解为单位算符. 方程（1.3.11）式称为**完备性关系**或**封闭性**.

对于（1.3.11）式的用途怎样评价都不会过高. 以合理的次序给定一串右矢、算符或者左矢，在我们认为方便的任何位置我们都可以插入写成（1.3.11）式形式的单位算符. 例如，考虑 $\langle\alpha|\alpha\rangle$；通过在 $\langle\alpha|$ 和 $|\alpha\rangle$ 之间插入这种单位算符，我们得到

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\alpha\rangle &= \langle\alpha| \cdot \Big(\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\Big) \cdot |\alpha\rangle \\ &= \sum_{a'} |\langle a'|\alpha\rangle|^2.\end{aligned} \tag{1.3.12}$$

顺便提一句，该式表明，如果 $|\alpha\rangle$ 是已经归一了的，则它在（1.3.7）式中的展开系数一定满足

$$\sum_{a'} |c_{a'}|^2 = \sum_{a'} |\langle a'|\alpha\rangle|^2 = 1. \tag{1.3.13}$$

现在让我们来看一看（1.3.11）式中出现的 $|a'\rangle\langle a'|$. 因为这是一个外积，它一定是一个算符. 让它作用在 $|\alpha\rangle$ 上：

$$(|a'\rangle\langle a'|) \cdot |\alpha\rangle = |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = c_{a'}|a'\rangle. \tag{1.3.14}$$

我们看到，$|a'\rangle\langle a'|$ 从右矢 $|\alpha\rangle$ 中挑出了平行于 $|a'\rangle$ 的部分，所以 $|a'\rangle\langle a'|$ 被称为沿着基右矢 $|a'\rangle$ 的**投影算符**，用 $\Lambda_{a'}$ 表示：

---

* 已经熟悉波动力学的聪明读者可能会指出，我们所用的本征函数的完备性可以通过把斯特姆-刘维尔（Sturm-Liouville）理论用于薛定谔波动方程来证明. 但是为了要从我们的基本原理“推导”出薛定谔波动方程，必须假定位置本征右矢的完备性.

$$\Lambda_{a'} \equiv |a'\rangle\langle a'|. \tag{1.3.15}$$

完备性关系（1.3.11）式现在可以写成

$$\sum_{a'} \Lambda_{a'} = 1. \tag{1.3.16}$$

矩阵表示

规定了基右矢之后，我们现在可以显示如何把一个算符，比如 X，表示成为一个方矩阵. 首先，利用（1.3.11）式两次，可把算符 X 写成：

$$X = \sum_{a''}\sum_{a'} |a''\rangle\langle a''|X|a'\rangle\langle a'|. \tag{1.3.17}$$

总共有 N^2 个形式为 $\langle a''|X|a'\rangle$ 的数，其中 N 是该右矢空间的维数. 我们可以把它们排列成一个 $N \times N$ 的方矩阵，使它的行和列指标呈现如下形式：

$$\langle a''|X|a'\rangle. \tag{1.3.18}$$
$$\text{行} \qquad \text{列}$$

我们可以把这个矩阵明显地写成

$$X \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(1)}|X|a^{(2)}\rangle & \cdots \\ \langle a^{(2)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(2)}|X|a^{(2)}\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{1.3.19}$$

其中符号“$\doteq$”代表“被表示为”*.

利用（1.2.38）式，我们可以写出

$$\langle a''|X|a'\rangle = \langle a'|X^\dagger|a''\rangle^*. \tag{1.3.20}$$

最终，原来由（1.2.24）式定义的厄米共轭算符就与（或许更为熟悉的）*复共轭转置*概念联系了起来. 如果一个算符 B 是厄米的，我们有

$$\langle a''|B|a'\rangle = \langle a'|B|a''\rangle^*. \tag{1.3.21}$$

我们把 $\langle a''|X|a'\rangle$ 排列成一个方阵的形式与通常的矩阵乘法规则是一致的. 要看到这一点，只要注意到算符关系式

$$Z = XY \tag{1.3.22}$$

的矩阵可写成

$$\begin{aligned} \langle a''|Z|a'\rangle &= \langle a''|XY|a'\rangle \\ &= \sum_{a'''} \langle a''|X|a'''\rangle\langle a'''|Y|a'\rangle. \end{aligned} \tag{1.3.23}$$

同样，我们所做的就是把形式为（1.3.11）式的单位算符插入到 X 和 Y 之间！

现在让我们考察一下右矢的关系式

$$|\gamma\rangle = X|\alpha\rangle \tag{1.3.24}$$

怎样能利用我们的基右矢来表示. $|\gamma\rangle$ 的展开系数可以通过用 $\langle a'|$ 左乘求得

$$\begin{aligned} \langle a'|\gamma\rangle &= \langle a'|X|\alpha\rangle \\ &= \sum_{a''} \langle a'|X|a''\rangle\langle a''|\alpha\rangle. \end{aligned} \tag{1.3.25}$$

但是，只要 $|\alpha\rangle$ 和 $|\gamma\rangle$ 的展开系数自身排列成如下的列矩阵：

---

* 在这里我们不用等号，因为一个矩阵表示的特殊形式依赖于所用的基右矢的特殊选择. 算符不同于算符的表示恰如演员不同于该演员的海报.

$$|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(3)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |\gamma\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\gamma\rangle \\ \langle a^{(2)}|\gamma\rangle \\ \langle a^{(3)}|\gamma\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{1.3.26}$$

则上式就可以看作是一个方矩阵乘以一个列矩阵规则的应用. 同样地，给定

$$\langle\gamma| = \langle\alpha|X, \tag{1.3.27}$$

我们可以看到

$$\langle\gamma|a'\rangle = \sum_{a''}\langle\alpha|a''\rangle\langle a''|X|a'\rangle. \tag{1.3.28}$$

于是一个左矢被表示成一个如下的行矩阵：

$$\begin{aligned}\langle\gamma| &\doteq (\langle\gamma|a^{(1)}\rangle, \langle\gamma|a^{(2)}\rangle, \langle\gamma|a^{(3)}\rangle, \cdots) \\ &= (\langle a^{(1)}|\gamma\rangle^*, \langle a^{(2)}|\gamma\rangle^*, \langle a^{(3)}|\gamma\rangle^*, \cdots).\end{aligned} \tag{1.3.29}$$

注意，当列矩阵元被写成（1.3.29）式中的形式时出现了复共轭. 内积$\langle\beta|\alpha\rangle$可以写成表示$\langle\beta|$的行矩阵和表示$|\alpha\rangle$的列矩阵之积：

$$\begin{aligned}\langle\beta|\alpha\rangle &= \sum_{a'}\langle\beta|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \\ &= (\langle a^{(1)}|\beta\rangle^*, \langle a^{(2)}|\beta\rangle^*, \cdots)\begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{1.3.30}$$

如果把表示$\langle\alpha|$的行矩阵与表示$|\beta\rangle$的列矩阵相乘，则我们求得的只不过是上式的复共轭，这与内积的基本性质（1.2.12）式是自洽的. 最后，很容易看到，外积$|\beta\rangle\langle\alpha|$的矩阵表示是：

$$|\beta\rangle\langle\alpha| \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\beta\rangle\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(1)}|\beta\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \cdots \\ \langle a^{(2)}|\beta\rangle\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(2)}|\beta\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{1.3.31}$$

如果将可观测量A自身的本征右矢作为基右矢，则A的矩阵表示变得特别简单. 首先，我们有

$$A = \sum_{a''}\sum_{a'}|a''\rangle\langle a''|A|a'\rangle\langle a'|. \tag{1.3.32}$$

但是方阵$\langle a''|A|a'\rangle$显然是对角矩阵：

$$\langle a''|A|a'\rangle = \langle a'|A|a'\rangle\delta_{a'a''} = a'\delta_{a'a''}. \tag{1.3.33}$$

所以，

$$\begin{aligned}A &= \sum_{a'}a'|a'\rangle\langle a'| \\ &= \sum_{a'}a'\Lambda_{a'}.\end{aligned} \tag{1.3.34}$$

自旋$\frac{1}{2}$系统

在这里考虑自旋$\frac{1}{2}$系统的特殊情况是有指导意义的. 所用的基右矢是$|S_z;\pm\rangle$，而为了简单，我们把它们表示为$|\pm\rangle$. 在$|\pm\rangle$所张的右矢空间中，最简单的算符是单位算符，按照（1.3.11）式，它可以写成

$$1 = |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|. \tag{1.3.35}$$

依据（1.3.34）式，我们一定能把 S_z 写成

$$S_z = (\hbar/2)[(|+\rangle\langle +|) - (|-\rangle\langle -|)]. \tag{1.3.36}$$

由 $|\pm\rangle$ 的正交性质，立即可得本征右矢-本征值关系

$$S_z|\pm\rangle = \pm(\hbar/2)|\pm\rangle \tag{1.3.37}$$

看一看下面另外两个算符也很有启发性，

$$S_+ \equiv \hbar|+\rangle\langle -|, \quad S_- \equiv \hbar|-\rangle\langle +|, \tag{1.3.38}$$

可见这两个算符都是非厄米算符. 算符 S_+ 作用在自旋向下的右矢 $|-\rangle$ 上时，使 $|-\rangle$ 变成自旋向上的右矢 $|+\rangle$ 并乘上 $\hbar$. 另一方面，将算符 S_+ 作用在自旋向上的右矢 $|+\rangle$ 上时，使其变成了一个零右矢. 于是，S_+ 的物理解释为，它使自旋分量升高一个 $\hbar$；如果自旋分量不能再升高，我们自动得到一个零态. 同样地，S_- 可以解释为使自旋分量降低一个 $\hbar$ 的算符. 以后，我们将证明 $S_\pm$ 可以写成 $S_x \pm iS_y$.

在构造角动量算符的矩阵表示时，惯用的做法是按照角动量分量减小的顺序标记列（行）指标；这就是说，排在第一位的对应于最大的角动量分量，第二位的对应于次最大的，等等. 在我们特定的自旋$\frac{1}{2}$系统中，有

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{1.3.39a}$$

$$S_z \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S_+ \doteq \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- \doteq \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{1.3.39b}$$

当我们在第 3 章讨论泡利的二分量形式时，将用到这些显式表示式.

1.4　测量、可观测量和不确定度关系

测量

建立了右矢空间的数学之后，我们现在就能讨论测量过程的量子理论了. 对于初学者这不是一个特别容易理解的题目，所以作为引导我们首先求助于大师狄拉克的话（Dirac，1958，第 36 页）：“测量总是导致系统跳到被测量的动力学变量的一个本征态上.”这意味着什么呢？我们这样解读狄拉克的话：在对可观测量 A 进行测量之前，假定系统被表示成某种线性组合

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'}|a'\rangle = \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle. \tag{1.4.1}$$

进行测量时，系统被“抛进”可观测量 A 的某个本征态，比如 $|a'\rangle$. 换句话说，

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{测量}} |a'\rangle. \tag{1.4.2}$$

例如，一个有着任意自旋取向的银原子，在通过一个 SG$\hat{\mathbf{z}}$ 类型的 SG 仪器时，将变成 $|S_z;+\rangle$ 或 $|S_z;-\rangle$. 因此，测量常常使状态改变. 唯一的例外是，当该状态已经是被测量的可观测量的某个本征态时，在那种情况下，正如将进一步讨论的那样，肯定会有

$$|a'\rangle \xrightarrow{\text{测量}} |a'\rangle \tag{1.4.3}$$

当测量导致$|\alpha\rangle$变成$|a'\rangle$时，人们就说测量A得到a'. 正是在这种意义上，一次测量的结果产生了被测量可观测量的某个本征值.

给定了（1.4.1）式，它是测量之前一个物理系统的态右矢，我们事先并不知道作为测量结果系统将会被抛进各种$|a'\rangle$态中的哪一个. 然而，我们的确可以假定跳到某个$|a'\rangle$态的概率由下式给定

$$\text{取 } a' \text{ 的概率} = |\langle a'|\alpha\rangle|^2, \tag{1.4.4}$$

只要$|\alpha\rangle$是归一的.

尽管我们正在讨论一个单独的物理系统，要从实验上确定概率（1.4.4），我们必须考虑对一个全同地制备的、且以同样的右矢$|\alpha\rangle$表征的物理系统的系综——也即一个集合——做大量的测量. 这样的一个系综称为一个**纯系综**.（在第3章，我们将更多地谈到系综.）在图1.3中，通过遮挡住S_z－分量的第一个SG$\hat{\mathbf{z}}$仪器存活下来的银原子束流就是纯系综的一个例子，因为该系综中的每个原子都由$|S_z;+\rangle$来表征.

对内积平方$|\langle a'|\alpha\rangle|^2$的概率解释（1.4.4）式是量子力学的基本假定之一，所以它不能被证明. 然而，我们应该注意，在一些极端的情况下它具有明确的意义. 假定在测量之前态右矢就是$|a'\rangle$，则按照（1.4.4）式，可预言作为测量结果得到a'，或更精确地说，被抛进$|a'\rangle$态的概率是1，这正是我们所预期的. 再一次测量A，我们当然只能得到$|a'\rangle$；一般来说，连续重复测量同一个可观测量得到的结果相同.* 另一方面，如果我们对最初由$|a'\rangle$表征的系统被抛进某个具有$a''\neq a'$的本征右矢$|a''\rangle$的概率感兴趣，那时，则因为$|a'\rangle$和$|a''\rangle$间的正交性致使（1.4.4）式给出零. 从测量理论的观点来看，正交的右矢对应着排他的替代性；例如，如果一个自旋$\frac{1}{2}$系统处在$|S_z;+\rangle$态；它肯定不会处于$|S_z;-\rangle$态.

通常，任何事物的概率一定是非负的. 而且，各种可替代可能性的概率加起来一定等于1. 这两种预期都被我们的概率假设（1.4.4）式所满足.

我们定义A对于态$|\alpha\rangle$取的**期待值**为

$$\langle A\rangle \equiv \langle\alpha|A|\alpha\rangle. \tag{1.4.5}$$

为了确定所涉及的是态$|\alpha\rangle$，有时我们采用符号$\langle A\rangle_\alpha$. 方程（1.4.5）式是一个定义，然而，它与我们平均测量值的直观符号是一致的，因为它可以写成

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \sum_{a'}\sum_{a''}\langle\alpha|a''\rangle\langle a''|A|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \\ &= \sum_{a'} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{测量值}}}{a'} \underbrace{|\langle a'|\alpha\rangle|^2}_{\text{得到}a'\text{的概率}}\end{aligned} \tag{1.4.6}$$

非常重要的是不要混淆本征值与期待值. 例如，自旋为$\frac{1}{2}$时，S_z的期待值可以取$-\hbar/2$和$\hbar/2$之间的任何实数值，比如$0.273\hbar$；而相比之下，S_z的本征值只取$\hbar/2$和$-\hbar/2$两个值.

为了进一步阐明测量在量子力学中的意义，我们引进一个**选择测量**概念，或者筛选概念. 在1.1节我们考虑了这样一种斯特恩-盖拉赫安排，在那里我们仅让其中的一个自旋

---

* 这里，连续地测量必须是在一次测量之后立即进行的. 这一点在第2章中讨论态右矢的时间演化时将会变得更清楚.

分量通过该仪器，同时完全遮挡住另外一个分量. 更一般地说，我们设想这样的一种测量过程，它使用的设备仅能挑选出 A 的本征右矢，比如 $|a'\rangle$，而摈弃所有其他的本征右矢，请参看图 1.7. 这就是选择测量的意思，它也称为筛选，因为通过严格的检验它只把 A 的本征右矢中的一个过滤了出来. 数学上，我们可以说这样一种选择测量等同于把投影算符 $\Lambda_{a'}$ 作用于 $|\alpha\rangle$：

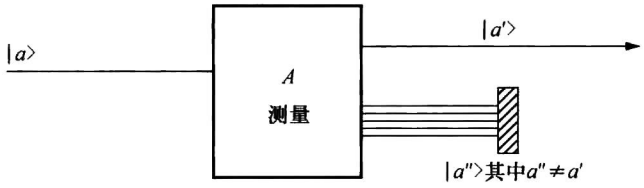


图 1.7　选择测量

$$\Lambda_{a'}|\alpha\rangle = |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle. \tag{1.4.7}$$

J. 施温格曾基于选择测量的彻底考查，发展了量子力学的一种公式形式. 他从一开始就引进了一个测量符号 $M(a')$，它等同于我们符号中的 $\Lambda_{a'}$ 或 $|a'\rangle\langle a'|$，然后通过研究各种斯特恩-盖拉赫类实验的结果，导出 $M(a')$（以及等同于 $|b'\rangle\langle a'|$ 的 $M(b',a')$）的许多性质. 用这种方法他促成了右矢、左矢和算符的全部数学. 在本书中，我们并没有遵循施温格的做法，感兴趣的读者可以查阅 Gottfried (1966).

再谈自旋 $\frac{1}{2}$ 系统

在继续进行可观测量的普遍讨论之前，我们再一次考虑自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统. 这一次我们来证明，当与迄今为止讨论过的量子力学假设相结合时，序列斯特恩-盖拉赫实验的结果不仅足以确定 $S_{x,y}$ 的本征右矢 $|S_x;\pm\rangle$ 和 $|S_y;\pm\rangle$，而且还足以确定算符 S_x 和 S_y.

首先，我们来回忆一下，S_x+ 束流通过一台 SG$\hat{\mathbf{z}}$ 类仪器时，它将劈裂为强度相等的两个分束流. 这意味着 S_x+ 态被抛到了 $|S_z;\pm\rangle$ 态（简单地标记为 $|\pm\rangle$），每一个态的概率均为 $\frac{1}{2}$，因此

$$|\langle +|S_x;+\rangle| = |\langle -|S_x;+\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{1.4.8}$$

于是我们可以将 S_x+ 右矢构造如下

$$|S_x;+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}|-\rangle. \tag{1.4.9}$$

其中的 δ_1 为实数. 在写下 (1.4.9) 式时，我们用到了这样一个事实，即一个态右矢的整体相因子（对于 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 两者是共同的）是不重要的，按照惯例，$|+\rangle$ 的系数可以选为实的和正的. S_x- 右矢必须与 S_x+ 右矢正交，因为 S_x+ 的可选性与 S_x- 的可选性是相互排斥的. 这种正交性要求导致

$$|S_x;-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}|-\rangle. \tag{1.4.10}$$

其中我们再一次按照惯例选择了 $|+\rangle$ 的系数为实的和正的. 现在利用 (1.3.34) 式，我

们可以将 S_x 算符构造如下

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2}[(|S_x;+\rangle\langle S_x;+|)-(|S_x;-\rangle\langle S_x;-|)] \\ &= \frac{\hbar}{2}[e^{-i\delta_1}(|+\rangle\langle -|)+e^{i\delta_1}(|-\rangle\langle +|)]. \end{aligned} \tag{1.4.11}$$

注意，正如它所必须的那样，我们所构造的这个 S_x 是厄米的. 以 S_y 代替 S_x，类似的论证导致

$$|S_y;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_2}|-\rangle. \tag{1.4.12}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2}[e^{-i\delta_2}(|+\rangle\langle -|)+e^{i\delta_2}(|-\rangle\langle +|)]. \tag{1.4.13}$$

有没有什么办法确定 δ_1 和 δ_2 呢？实际上，有一个我们还没有用过的信息. 假定我们有一束自旋为$\frac{1}{2}$的原子，沿 z 方向运动. 我们可以考虑一个在 SG$\hat{\mathbf{x}}$ 后面接着一个 SG$\hat{\mathbf{y}}$ 的序列斯特恩-盖拉赫实验. 这样一个实验的结果完全类似于早些时候导致（1.4.8）式的情况；

$$|\langle S_y;\pm|S_x;+\rangle| = |\langle S_y;\pm|S_x;-\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{1.4.14}$$

鉴于物理系统在转动之下的不变性，这一结果并不奇怪. 把（1.4.10）式和（1.4.12）式代入（1.4.14）式中，得到

$$\frac{1}{2}|1\pm e^{i(\delta_1-\delta_2)}| = \frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{1.4.15}$$

且仅当

$$\delta_2-\delta_1 = \frac{\pi}{2} \text{ 或 } -\frac{\pi}{2} \tag{1.4.16}$$

时，上式才能够被满足. 于是我们看到，S_x 和 S_y 的矩阵元不可能都是实的. 如果 S_x 的矩阵元是实的，则 S_y 的矩阵元一定是纯虚的（反之亦然）. 正是从这个非常简单的例子中可以看到，复数的引入被视为量子力学的一个必需特征. 取 S_x 的矩阵元为实* 并设 $\delta_1=0$ 是一种方便的做法；假如我们选 $\delta_1=\pi$ 的话，正的 x 轴就会指向相反的方向. 接着第二个相因子 δ_2 必须是 $-\pi/2$ 或 $\pi/2$. 仍然存在一个这种类型的不确定性并不奇怪. 我们还没有规定所使用的坐标系是右手系还是左手系；给定 x 和 z 轴后，在选择 y 轴的正向时仍然有着一种双重的歧义. 以后我们将使用右手坐标系讨论作为一个转动生成元的角动量；那时可以证明 $\delta_2=\pi/2$ 是正确的选择.

总结一下，有

$$|S_x;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle, \tag{1.4.17a}$$

$$|S_y;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle, \tag{1.4.17b}$$

Sx

* 这总可以通过调整$|+\rangle$和$|-\rangle$定义中的任意相因子做到. 这一点将在第3章中阐明，在那里将讨论转动之下$|\pm\rangle$的行为.

和

$$S_x = \frac{\hbar}{2}[(|+\rangle\langle -|) + (|-\rangle\langle +|)], \tag{1.4.18a}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2}[-i(|+\rangle\langle -|) + i(|-\rangle\langle +|)]. \tag{1.4.18b}$$

可见，这里给出的 S_x 本征右矢是与早些时候基于线极化和圆极化光的类比所做出的猜测（1.1.9）式及（1.1.14）式是一致的.（注意，在这一比较中，只有 $|+\rangle$ 与 $\langle -|$ 分量之间的相对相因子才有物理意义.）此外，由（1.3.38）式定义的非厄米 $S_\pm$ 算符现在可以写成

$$S_\pm = S_x \pm iS_y. \tag{1.4.19}$$

很容易证明算符 S_x 和 S_y 与较早给出的 S_z 一起满足对易关系

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar S_k \tag{1.4.20}$$

以及反对易关系

$$\{S_i, S_j\} = \frac{1}{2}\hbar^2\delta_{ij}. \tag{1.4.21}$$

其中的对易子 $[,]$ 与反对易子 $\{,\}$ 被定义为

$$[A, B] \equiv AB - BA, \tag{1.4.22a}$$

$$\{A, B\} \equiv AB + BA. \tag{1.4.22b}$$

（我们使用了完全反对称符号 ϵ_{ijk}，对 ϵ_{123} 及对其下指标的任何循环置换，该符号取值为 $+1$；对 ϵ_{213} 及对其下指标的任何循环置换，该符号取值为 -1；而当任何两个下指标相同时取值为 0.）（1.4.20）式中的对易关系将被视为角动量对易关系的最简单的实现，它的重要意义将在第 3 章中详细讨论. 相比之下，（1.4.21）式中的反对易关系被证明是自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的一个特殊性质.

我们还可以如下定义算符 $\mathbf{S}\cdot\mathbf{S}$，或简写为 $\mathbf{S}^2$，

$$\mathbf{S}^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2. \tag{1.4.23}$$

因为（1.4.21）式，可以证明这个算符只不过是一个单位算符的常数倍数

$$\mathbf{S}^2 = \left(\frac{3}{4}\right)\hbar^2. \tag{1.4.24}$$

显然，我们有

$$[\mathbf{S}^2, S_i] = 0. \tag{1.4.25}$$

正如将在第 3 章中证明的，对大于 $\frac{1}{2}$ 的自旋，$\mathbf{S}^2$ 不再是单位算符的倍数，然而，（1.4.25）式仍旧成立.

相容可观测量

现在回到普遍形式，我们将对照讨论相容的和不相容的可观测量. 当相应的算符对易时，即

$$[A, B] = 0. \tag{1.4.26}$$

可观测量 A 和 B 被定义为**相容**的，而当

$$[A,B]\neq 0 \tag{1.4.27}$$

时，A 和 B 被定义为**不相容**的. 例如，$\mathbf{S}^2$ 和 S_z 是相容的可观测量，而 S_x 和 S_z 是不相容的可观测量.

让我们先来考虑相容可观测量 A 和 B 的情况. 像往常一样，我们假定右矢空间是由 A 的本征右矢所张成的. 我们还可以把这个同样的右矢空间看作是由 B 的本征右矢所张成的. 现在我们要问：当 A 和 B 是相容的可观测量时，A 的本征右矢与 B 的本征右矢有什么样的关系？

在回答这个问题之前，我们必须涉及早些时候避开的非常重要的一点——简并性的概念. 假定存在两个（或多个）线性独立的 A 的本征右矢，它们具有相同的本征值；则这两个本征右矢的本征值就称为**简并的**. 在这样的情况下，单用本征值标记本征右矢的符号 $|a'\rangle$ 给不出一种完整的描述；此外，我们还可以回忆一下，我们前面给出的关于不同本征右矢的正交性定理是在非简并的假设下证明的. 更糟糕的是，当右矢空间的维数大于 A 的可区分本征值的个数时，这个由 $\{|a'\rangle\}$ 张成右矢空间的整个概念似乎陷入了困境. 幸运的是，在量子力学的实际应用中，通常的情况是此时某个其他对易的可观测量（比如 B）的本征值，可以用来标记这些简并的本征右矢.

现在我们准备表述一个重要的定理

定理 1.2 假定 A 和 B 是相容的可观测量，而且 A 的本征值是非简并的. 则矩阵元 $\langle a''|B|a'\rangle$ 是全对角的.（在这里回顾一下，如果用 $\{|a'\rangle\}$ 作为基右矢，则 A 的矩阵元已经是对角的.）

证明 这个重要定理的证明是极其简单的. 利用相容可观测量的定义（1.4.26）式，我们注意到

$$\langle a''|[A,B]|a'\rangle=(a''-a')\langle a''|B|a'\rangle=0. \tag{1.4.28}$$

因此，$\langle a''|B|a'\rangle$ 一定是零，除非 $a'=a''$，这就证明了我们的论点.

我们可以把 B 的矩阵元写成

$$\langle a''|B|a'\rangle=\delta_{a'a''}\langle a'|B|a'\rangle. \tag{1.4.29}$$

于是，使用同样的基右矢集合，A 和 B 都可以用对角矩阵表示. 用（1.3.17）式和（1.4.29）式，我们可以把 B 写成

$$B=\sum_{a''}|a''\rangle\langle a''|B|a''\rangle\langle a''|. \tag{1.4.30}$$

假定这个算符作用在 A 的一个本征右矢上：

$$B|a'\rangle=\sum_{a''}|a''\rangle\langle a''|B|a''\rangle\langle a''|a'\rangle=(\langle a'|B|a'\rangle)|a'\rangle. \tag{1.4.31}$$

然而，这只不过是算符 B 的本征方程，其本征值为

$$b'\equiv\langle a'|B|a'\rangle. \tag{1.4.32}$$

因此，$|a'\rangle$ 是 A 和 B 的一个**共同本征右矢**. 正是要不偏不倚地对待这两个算符，我们可以利用 $|a',b'\rangle$ 来表征这个共同本征右矢.

我们已经看到，相容的可观测量具有共同本征右矢. 尽管这是在 A 的本征右矢是非简并的情况下证明的，这个表述即使在 n 重简并存在时也成立. 这就是说，

$$A|a'^{(i)}\rangle=a'|a'^{(i)}\rangle \quad \text{对于 } i=1,2,\cdots,n, \tag{1.4.33}$$

其中 $|a'^{(i)}\rangle$ 是 A 的 n 个相互正交的本征右矢. 它们都有相同的本征值 a'. 为了看清这一点，我们所需要做的就是构造一个适当的 $|a'^{(i)}\rangle$ 的线性组合，它能按照将在 1.5 节讨论的

对角化手续把 B 算符对角化.

A 和 B 的共同本征右矢用 $|a',b'\rangle$ 表示，它有下列性质：

$$A|a',b'\rangle = a'|a',b'\rangle, \tag{1.4.34a}$$

$$B|a',b'\rangle = b'|a',b'\rangle. \tag{1.4.34b}$$

当不存在任何简并时，这个符号有点多余，因为从（1.4.32）式可明显看到，如果确定了 a'，我们就一定知道出现在 $|a',b'\rangle$ 中的 b'. 当有简并存在时，符号 $|a',b'\rangle$ 要强有力得多. 可用一个简单的例子来说明这一点.

尽管在第 3 章之前，本书将不会完整地讨论轨道角动量，读者可能从他或她早期学过的初等波动力学知道 $\mathbf{L}^2$（轨道角动量平方）和 L_z（轨道角动量的 z 分量）的本征值分别是 $\hbar^2 l(l+1)$ 和 $m_l\hbar$，其中 l 是一个整数且 $m_l=-l$，$-l+1$，…，$+l$. 为了完整地表征一个轨道角动量态，必须同时给定 l 和 m_l. 例如，如果我们只是说 $l=1$，则 m_l 的值仍然可以取 0，+1 或 −1；如果只是说 $m_l=1$，则 l 可以是 1，2，3，4，等等. 只有同时给定 l 和 m_l，我们才能在轨道角动量态唯一表征的问题上取得成功. 通常使用一个**集体指标** K' 来表示 (a',b')，使

$$|K'\rangle = |a',b'\rangle. \tag{1.4.35}$$

显然可以把我们的考虑推广到有几个（两个以上）互相相容可观测量的情况，即

$$[A,B] = [B,C] = [A,C] = \cdots = 0. \tag{1.4.36}$$

假定我们已经找到了一个对易可观测量的**最大**集合；这就是说，我们不可能在不破坏（1.4.36）式的情况下，再在我们的清单中添加可观测量. 各个算符 A，B，C，…的本征值可以有简并，但是如果我们确定了一个组合 $(a',\ b',\ c',\ \cdots)$，则 A，B，C，…的共同本征右矢就被唯一地确定了. 我们可以再一次利用一个集体指标 K' 表示 $(a',\ b',\ c',\ \cdots)$. 对于

$$|K'\rangle = |a',b',c',\cdots\rangle \tag{1.4.37}$$

其正交关系记为

$$\langle K''|K'\rangle = \delta_{K'K''} = \delta_{a'a''}\delta_{b'b''}\delta_{c'c''}\cdots, \tag{1.4.38}$$

而完备性关系或封闭性可以写成

$$\sum_{K'} |K'\rangle\langle K'| = \sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{c'}\cdots|a',b',c',\cdots\rangle\langle a',b',c',\cdots| = 1. \tag{1.4.39}$$

现在我们考虑当 A 和 B 是相容的可观测量时对它们的测量. 假定我们先测量 A，得到结果 a'. 紧接着，我们可以测量 B 而得到结果 b'. 最后，我们再测量 A. 从我们的测量公式框架可得到第三次测量总是确定地给出 a'. 这就是说，第二次（B）测量并不破坏以前在第一次（A）测量中得到的信息. 当 A 的本征值非简并时，这个结果是非常明确的：

$$|a\rangle \xrightarrow{A\text{ 测量}} |a',b'\rangle \xrightarrow{B\text{ 测量}} |a',b'\rangle \xrightarrow{A\text{ 测量}} |a',b'\rangle. \tag{1.4.40}$$

当存在简并时，情况应该是这样的：第一次（A）测量得到 a' 之后，系统被抛进某种线性组合

$$\sum_{i}^{n} c_{a'}^{(i)} |a',b^{(i)}\rangle, \tag{1.4.41}$$

其中 n 是简并度. 并且就 A 而言，所有的右矢 $|a',b^{(i)}\rangle$ 都有着同样的本征值 a'. 第二次（B）测量可能从线性组合（1.4.41）式的诸项中只挑出一项——比如，$|a',b^{(j)}\rangle$. ——但进行第三次（A）测量时，仍得到 a'. 不管是否有简并存在，A 测量与 B 测量互不干涉. 的确可以认为术语相容是恰当的.

不相容可观测量

现在我们转向不相容可观测量，此时情况就要复杂得多了. 第一点需要强调的是不相容可观测量没有共同本征右矢完备集. 为证明这一点，让我们假定其逆命题是对的. 那么就会存在一组共同本征右矢，具有性质（1.4.34a）式和（1.4.34b）式. 显然

$$AB|a',b'\rangle = Ab'|a',b'\rangle = a'b'|a',b'\rangle. \tag{1.4.42}$$

同样

$$BA|a',b'\rangle = Ba'|a',b'\rangle = a'b'|a',b'\rangle; \tag{1.4.43}$$

因此

$$AB|a',b'\rangle = BA|a',b'\rangle. \tag{1.4.44}$$

于是有 $[A,B]=0$，它与假设矛盾. 所以，一般而言，对于不相容的可观测量，$|a',b'\rangle$ 没有什么意义. 然而，存在一个有意思的例外：在右矢空间中可能存在一个这样的子空间，尽管 A 和 B 是不相容的可观测量，（1.4.44）式对该子空间的所有元素都成立. 在这里，轨道角动量理论中的一个例子可能有助于理解. 假定我们考虑一个 $l=0$ 的态（s 态）. 尽管 L_x 和 L_z 不对易，这个态却是 L_x 和 L_z 的一个共同本征态（对于这两个算符，本征值均为零）. 这种情况下的这个子空间是一维的.

当我们在1.1节讨论序列斯特恩-盖拉赫实验时，已经碰到过一些与不相容可观测量相联系的奇特的现象. 现在我们给出有关那类实验的更为一般的讨论. 考虑图1.8a所示的序列选择测量. 第一个过滤器（A）挑选出了某个具体的 $|a'\rangle$ 并且摈弃了所有的其他态，然后第二个过滤器（B）挑选出某个具体的 $|b'\rangle$ 并且摈弃了所有的其他态，而第三个过滤器（C）挑选出某个具体的 $|c'\rangle$ 并且摈弃了所有的其他态. 我们感兴趣的是当从第一个过滤器出来的束流被归一化为1时得到某个具体的 $|c'\rangle$ 的概率. 由于概率是可相乘的，我们显然有

$$|\langle c'|b'\rangle|^2|\langle b'|a'\rangle|^2. \tag{1.4.45}$$

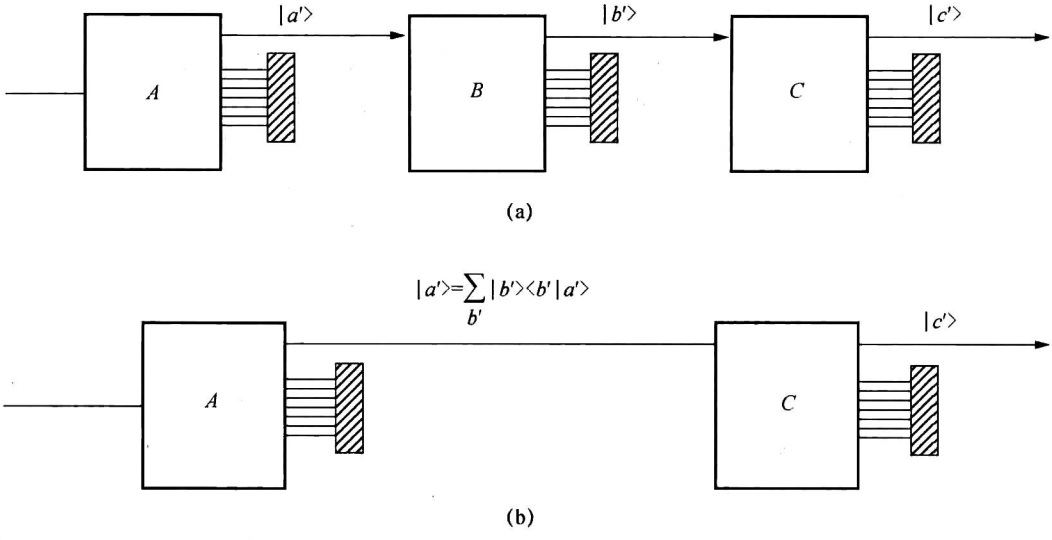


图 1.8 连续选择测量

现在让我们对 b' 求和以考虑跑遍所有可能 b' 路径的总概率. 从操作上看，这意味着我们首先记录除第一个 b' 路径外的其他路径都被遮掉时得到 c' 的概率；然后我们重复这种过程只是换成第二个 b' 不被遮，等等；最后，我们将这些概率求和，从而得到

$$\sum_{b'}|\langle c'|b'\rangle|^2|\langle b'|a'\rangle|^2=\sum_{b'}\langle c'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle\langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle. \tag{1.4.46}$$

现在我们把这个结果与一种不同的安排做个比较，在这种安排下，过滤器 B 不存在(或不进行操作)，参见图 1.8b. 显然，概率刚好就是 $|\langle c'|a'\rangle|^2$，它还可以写成下面的形式

$$|\langle c'|a'\rangle|^2=|\sum_{b'}\langle c'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle|^2=\sum_{b'}\sum_{b''}\langle c'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle\langle a'|b''\rangle\langle b''|c'\rangle. \tag{1.4.47}$$

注意，(1.4.46) 式和 (1.4.47) 式是不同的！这一点是值得注意的，因为在这两种情况下，从第一个过滤器出来的纯 $|a'\rangle$ 束流都可以看作是由 B 的本征右矢构成的

$$|a'\rangle=\sum_{b'}|b'\rangle\langle b'|a'\rangle. \tag{1.4.48}$$

其中的求和是对所有可能的 b' 值进行的. 要注意的关键点是通过过滤器 C 产生的结果依赖于 B 测量是否真正地做了. 在前一种情况下，我们从实验上确定了哪些 B 的本征值实际上出现了；而在后一种情况下，只能设想 $|a'\rangle$ 将在 (1.4.48) 式的意义上由各种 $|b'\rangle$ 构成. 换成另一种方式看，实际记录通过各种 b' 途径的概率造成了所有这些差别，即使我们后来对 b' 求了和. 量子力学的核心正在于此.

在什么样的条件下这两个表达式变成相等呢？我们给读者留一个练习，证明要得到这个结果，在不存在简并时，只要

$$[A,B]=0 \quad 或 \quad [B,C]=0 \tag{1.4.49}$$

就足够了. 换句话说，我们所阐述的这个奇特的现象是不相容可观测量的特征.

不确定度关系

这一节要讨论的最后一个论题是不确定度关系. 给定一个可观测量 A，我们定义一个**算符**

$$\Delta A\equiv A-\langle A\rangle, \tag{1.4.50}$$

其中期待值是针对所考虑的确定的物理态的. $(\Delta A)^2$ 的期待值称为 A 的**弥散度**. 因为我们有

$$\langle(\Delta A)^2\rangle=\langle(A^2-2A\langle A\rangle+\langle A\rangle^2)\rangle=\langle A^2\rangle-\langle A\rangle^2. \tag{1.4.51}$$

(1.4.51) 式中最后的一个式子，可作为弥散度的另一个可选用的定义. 有时还把术语**方差**或**均方偏差**用于这同一个量. 显然，当所谈及的态是 A 的一个本征态时，弥散度为零. 粗略地讲，一个可观测量的弥散度表征着“模糊性”. 例如，对于一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的 S_z+ 态，S_x 的弥散度可以计算出来，结果为

$$\langle S_x^2\rangle-\langle S_x\rangle^2=\hbar^2/4. \tag{1.4.52}$$

相比之下，对于 S_z+ 态，弥散度 $\langle(\Delta S_z)^2\rangle$ 显然为零. 因此，对于 S_z+ 态，S_z 是“尖锐的”(S_z 有零弥散度) 而 S_x 是模糊的.

我们现在来表述不确定度关系，它是 1.6 节将要讨论的著名的 x-p 不确定度关系的推

广. 设 A 和 B 是两个可观测量. 那么，对任意一个态，我们一定有下列的不等式：

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geqslant \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2. \tag{1.4.53}$$

要证明该式，我们先来表述三个引.

引理 1.1 施瓦茨（Schwarz）不等式

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geqslant |\langle\alpha|\beta\rangle|^2, \tag{1.4.54}$$

它类似于实欧几里得空间中的

$$|\mathbf{a}|^2|\mathbf{b}|^2 \geqslant |\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}|^2 \tag{1.4.55}$$

证明 首先，注意到

$$(\langle\alpha|+\lambda^*\langle\beta|)\cdot(|\alpha\rangle+\lambda|\beta\rangle) \geqslant 0, \tag{1.4.56}$$

其中 λ 可以是一个任意复数. 当令 $\lambda=-\langle\beta|\alpha\rangle/\langle\beta|\beta\rangle$ 时，不等式

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle-|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \geqslant 0 \tag{1.4.57}$$

一定成立，它与（1.4.54）式是一样的.

引理 1.2 厄米算符的期待值是纯实数.

证明 该式的证明是平凡的——只要用（1.3.21）式即可

引理 1.3 定义为 $C=-C^\dagger$ 的反厄米算符，其期待值是纯虚数.

证明 证明是平凡的.

有了这些引理，我们就能够证明不确定度关系（1.4.53）式. 利用引理 1 并取

$$|\alpha\rangle = \Delta A|\rangle,$$
$$|\beta\rangle = \Delta B|\rangle. \tag{1.4.58}$$

其中空的右矢$|\rangle$强调了我们的考虑可用于任意右矢的事实，我们得到

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geqslant |\langle\Delta A\Delta B\rangle|^2, \tag{1.4.59}$$

在那里用到了 ΔA 和 ΔB 的厄米性. 为了求出（1.4.59）式右边的值，我们注意到

$$\Delta A\Delta B = \frac{1}{2}[\Delta A,\Delta B]+\frac{1}{2}\{\Delta A,\Delta B\}, \tag{1.4.60}$$

其中，对易关系 $[\Delta A,\Delta B]$ 就等于 $[A,B]$，显然它是反厄米的.

$$([A,B])^\dagger = (AB-BA)^\dagger = BA-AB = -[A,B]. \tag{1.4.61}$$

相反，反对易关系 $\{\Delta A,\Delta B\}$ 显然是厄米的，于是，

$$\langle\Delta A\Delta B\rangle = \frac{1}{2}\underbrace{\langle[A,B]\rangle}_{\text{纯虚数}}+\frac{1}{2}\underbrace{\langle\{\Delta A,\Delta B\}\rangle}_{\text{纯实数}}, \tag{1.4.62}$$

在那里用到了引理 2 和引理 3. 现在（1.4.59）式的右边变成

$$|\langle\Delta A\Delta B\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2+\frac{1}{4}|\langle\{\Delta A\Delta B\}\rangle|^2. \tag{1.4.63}$$

由于忽略掉（1.4.63）式的第二项（反对易项）只会使不等关系更强一些，现在（1.4.53）式就证明了.*

---

* 文献中，许多作者用 ΔA 取代我们的 $\sqrt{\langle(\Delta A)^2\rangle}$，因此不确定度关系被写成 $\Delta A\Delta B\geqslant\frac{1}{2}|\langle[A,B]\rangle|$. 然而，本书中 ΔA 和 ΔB 均被理解为算符［见（1.4.50）］，而不是数.

不确定度关系在自旋$\frac{1}{2}$系统中的应用将留作练习. 当我们在 1.6 节讨论 x-p 基本对易关系时我们还会回到这一论题.

1.5 基的改变

变换算符

假定我们有两个不相容的可观测量 A 和 B. 论及的右矢空间既可以看作为集合$\{|a'\rangle\}$所张，也可看作为集合 $\{|b'\rangle\}$ 所张. 例如，对于自旋$\frac{1}{2}$的系统，$|S_z \pm\rangle$ 可以用作基右矢. 此外，$|S_x \pm\rangle$ 也可以用作我们的基右矢. 当然，这两个不同的基右矢集合张着同一个右矢空间. 我们感兴趣的是找到这两种描写是怎样关联着的. 基矢集合的改变称之为**基矢的改变**或者**表象的改变**. 由 $\{|a'\rangle\}$ 给定基本征右矢的基被称为 A 表象，有时也称为 A 对角表象，因为在这个基中 A 所对应的方阵是对角矩阵.

我们的基本任务是构造一个变换算符，它把老的正交归一集合 $\{|a'\rangle\}$ 和新的正交归一集合 $\{|b'\rangle\}$ 联系起来. 为此，我们首先证明下述定理.

定理 1.3　给定两个基右矢的集合，它们都满足正交归一性和完备性，则存在这样的一个幺正算符 U，使得

$$|b^{(1)}\rangle = U|a^{(1)}\rangle, |b^{(2)}\rangle = U|a^{(2)}\rangle \cdots, |b^{(N)}\rangle = U|a^{(N)}\rangle. \tag{1.5.1}$$

作为一个**幺正算符**，我们指的是一个算符满足条件

$$U^\dagger U = 1 \tag{1.5.2}$$

和

$$UU^\dagger = 1. \tag{1.5.3}$$

证明　我们通过具体地构建来证明这个定理. 我们断定算符

$$U = \sum_k |b^{(k)}\rangle\langle a^{(k)}| \tag{1.5.4}$$

将满足这一要求，并把这个 U 作用于$|a^{(l)}\rangle$ 上. 显然，$\{|a'\rangle\}$ 的正交归一性保障了

$$U|a^{(l)}\rangle = |b^{(l)}\rangle. \tag{1.5.5}$$

另外，U 是幺正的：

$$U^\dagger U = \sum_k \sum_l |a^{(l)}\rangle\langle b^{(l)}|b^{(k)}\rangle\langle a^{(k)}| = \sum_k |a^{(k)}\rangle\langle a^{(k)}| = 1. \tag{1.5.6}$$

其中，我们用到了$\{|b'\rangle\}$的正交归一性和 $\{|a'\rangle\}$ 的完备性. 用类似的方式我们得到关系式 (1.5.3) 式.

变换矩阵

研究算符 U 在老的基 $\{|a'\rangle\}$ 中的矩阵表示是有意义的. 我们有

$$\langle a^{(k)}|U|a^{(l)}\rangle = \langle a^{(k)}|b^{(l)}\rangle, \tag{1.5.7}$$

它显然来自于 (1.5.5) 式. 换言之，U 算符的矩阵元由老基左矢和新基右矢的内积构成. 我们记得在三维空间中，把一组单位基矢量 $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}})$ 变为另一组单位基矢量 $(\hat{\mathbf{x}}', \hat{\mathbf{y}}', \hat{\mathbf{z}}')$

的转动矩阵可以写成［例如 Goldstein（2002），134～144 页］

$$R=\begin{pmatrix}\hat{\mathbf{x}}\cdot\hat{\mathbf{x}}' & \hat{\mathbf{x}}\cdot\hat{\mathbf{y}}' & \hat{\mathbf{x}}\cdot\hat{\mathbf{z}}'\\ \hat{\mathbf{y}}\cdot\hat{\mathbf{x}}' & \hat{\mathbf{y}}\cdot\hat{\mathbf{y}}' & \hat{\mathbf{y}}\cdot\hat{\mathbf{z}}'\\ \hat{\mathbf{z}}\cdot\hat{\mathbf{x}}' & \hat{\mathbf{z}}\cdot\hat{\mathbf{y}}' & \hat{\mathbf{z}}\cdot\hat{\mathbf{z}}'\end{pmatrix}. \tag{1.5.8}$$

由 $\langle a^{(k)}|U|a^{(l)}\rangle$ 组成的方矩阵称为从基 $\{|a'\rangle\}$ 到基 $\{|b'\rangle\}$ 的**变换矩阵**.

给定一个任意右矢 $|\alpha\rangle$，它在老基中的展开系数 $\langle a'|\alpha\rangle$ 是已知的，即

$$|\alpha\rangle=\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle. \tag{1.5.9}$$

怎样得到它在新基中的展开系数 $\langle b'|\alpha\rangle$ 呢？答案非常简单：只要用 $\langle b^{(k)}|$ 乘以（1.5.9）式（为了避免混淆用 $a^{(l)}$ 代替了 a'）：

$$\langle b^{(k)}|\alpha\rangle=\sum_{l}\langle b^{(k)}|a^{(l)}\rangle\langle a^{(l)}|\alpha\rangle=\sum_{l}\langle a^{(k)}|U^{\dagger}|a^{(l)}\rangle\langle a^{(l)}|\alpha\rangle. \tag{1.5.10}$$

用矩阵符号，（1.5.10）式是说，只要用方矩阵 $U^{\dagger}$ 作用在老基中的列矩阵上，即可得到新基中的列矩阵：

$$(\text{新})=(U^{\dagger})(\text{老}) \tag{1.5.11}$$

老矩阵元和新矩阵元之间的关系也很容易得到：

$$\begin{aligned}\langle b^{(k)}|X|b^{(l)}\rangle&=\sum_{m}\sum_{n}\langle b^{(k)}|a^{(m)}\rangle\langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle\langle a^{(n)}|b^{(l)}\rangle\\&=\sum_{m}\sum_{n}\langle a^{(k)}|U^{\dagger}|a^{(m)}\rangle\langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle\langle a^{(n)}|U|a^{(l)}\rangle.\end{aligned} \tag{1.5.12}$$

这只不过是矩阵代数中熟知的**相似变换**

$$X'=U^{\dagger}XU. \tag{1.5.13}$$

一个算符 X 的**迹**定义为对角矩阵元之和：

$$\mathrm{tr}(X)=\sum_{a'}\langle a'|X|a'\rangle. \tag{1.5.14}$$

尽管在定义中使用了一组特定的基右矢，但可以证明 $\mathrm{tr}(X)$ 是不依赖于表象的，如下所示：

$$\begin{aligned}\sum_{a'}\langle a'|X|a'\rangle&=\sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{b''}\langle a'|b'\rangle\langle b'|X|b''\rangle\langle b''|a'\rangle\\&=\sum_{b'}\sum_{b''}\langle b''|b'\rangle\langle b'|X|b''\rangle\\&=\sum_{b'}\langle b'|X|b'\rangle.\end{aligned} \tag{1.5.15}$$

我们还可以证明：

$$\mathrm{tr}(XY)=\mathrm{tr}(YX), \tag{1.5.16a}$$

$$\mathrm{tr}(U^{\dagger}XU)=\mathrm{tr}(X), \tag{1.5.16b}$$

$$\mathrm{tr}(|a'\rangle\langle a''|)=\delta_{a'a''}, \tag{1.5.16c}$$

$$\mathrm{tr}(|b'\rangle\langle a'|)=\langle a'|b'\rangle. \tag{1.5.16d}$$

对角化

到此为止我们还没有讨论：假定一个算符 B 在老基 $\{|a'\rangle\}$ 中的矩阵元已知，如何找到这个算符的本征值和本征矢. 这个问题等价于寻找对角化 B 的幺正矩阵. 尽管读者可能已

经熟悉矩阵代数中的对角化程序，用狄拉克的左矢-右矢符号解答这个问题仍是值得的.

我们感兴趣的是求得本征值 b' 和本征右矢 $|b'\rangle$，它们有下列性质

$$B|b'\rangle = b'|b'\rangle. \tag{1.5.17}$$

首先，我们把上式改写成

$$\sum_{a'}\langle a''|B|a'\rangle\langle a'|b'\rangle = b'\langle a''|b'\rangle. \tag{1.5.18}$$

当（1.5.17）式中的 $|b'\rangle$ 代表 B 的第 l 个本征右矢时，我们可以用矩阵符号把（1.5.18）式写成如下形式

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & \cdots \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_1^{(l)} \\ C_2^{(l)} \\ \vdots \end{pmatrix} = b^{(l)}\begin{pmatrix} C_1^{(l)} \\ C_2^{(l)} \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{1.5.19}$$

其中的

$$B_{ij} = \langle a^{(i)}|B|a^{(j)}\rangle \tag{1.5.20a}$$

和

$$C_k^{(l)} = \langle a^{(k)}|b^{(l)}\rangle, \tag{1.5.20b}$$

而 i，j，k 从 1 取到右矢空间的维数 N. 正如我们从线性代数中知道的，仅当特征方程

$$\det(B-\lambda 1) = 0 \tag{1.5.21}$$

成立时，$C_k^{(l)}$ 才可能有非平庸解. 这是一个关于 λ 的 N 次代数方程，解得的 N 个根就等同于我们试图确定的各个 $b^{(l)}$. 知道了 $b^{(l)}$，我们就可以解得相应的 $C_k^{(l)}$ 直至一个由归一化条件确定的整体常数因子. 将（1.5.20b）式与（1.5.7）式对比，我们看到 $C_k^{(l)}$ 恰恰就是 $\{|a'\rangle\}\to\{|b'\rangle\}$ 基变换所涉及的幺正矩阵的矩阵元.

对于这种解法，B 的厄米性很重要. 例如，考虑由（1.3.38）式或（1.4.19）式所定义的 S_+. 这个算符显然是非厄米的. 用 S_z 基写出来的相应的矩阵

$$S_+ \doteq \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{1.5.22}$$

不可能用任何幺正矩阵对角化. 在第 2 章我们将遇到一个与简谐振子相干态相关的一个非厄米算符的本征右矢. 然而，已经知道这样的本征右矢不能形成一个完备的正交归一基，因此，我们在这一节所发展的公式框架就不能直接使用.

幺正等价可观测量

我们通过讨论可观测量幺正变换的一个著名定理来结束这一节.

定理 1.4　再一次考虑由（1.5.4）式的 U 算符联系着的两组正交归一基 $\{|a'\rangle\}$ 和 $\{|b'\rangle\}$. 知道了 U，我们可以构造 A 的一个**幺正变换**，UAU^{-1}；则称 A 和 UAU^{-1} 为**幺正等价可观测量**. A 的本征值方程，

$$A|a^{(l)}\rangle = a^{(l)}|a^{(l)}\rangle, \tag{1.5.23}$$

显然意味着

$$UAU^{-1}U|a^{(l)}\rangle = a^{(l)}U|a^{(l)}\rangle. \tag{1.5.24}$$

但是该式可以改写为

$$(UAU^{-1})|b^{(l)}\rangle = a^{(l)}|b^{(l)}\rangle. \tag{1.5.25}$$

这个看似简单的结果是相当深奥的. 它告诉我们，这些 $|b'\rangle$ 是 UAU^{-1} 的本征右矢，它们有着与 A 的本征值完全相同的本征值. 换言之，幺正等价可观测量具有全同的谱.

根据定义，本征右矢$|b^{(l)}\rangle$满足关系

$$B|b^{(l)}\rangle = b^{(l)}|b^{(l)}\rangle. \tag{1.5.26}$$

把（1.5.25）式与（1.5.26）式对比，我们推断B和UAU^{-1}是可以同时对角化的. 一个自然的问题是：UAU^{-1}和B本身是相同的吗？在有物理兴趣的情况中，答案通常是“是的”. 例如，取S_x和S_z，它们通过一个幺正算符关联在一起，正如我们在第3章将要讨论的，这个幺正算符实际上是绕y轴转动$\pi/2$角的转动算符. 在这种情况下，S_x自身就是S_z的幺正变换. 因为我们知道S_x和S_z展示了相同的本征值——即，$+\hbar/2$和$-\hbar/2$——可看到在这个特定的例子中，我们的定理是成立的.

1.6 位置、动量和平移

连续谱

到目前为止，所考虑的可观测量都被假定具有分立的本征值谱. 然而，量子力学中有一些可观测量具有连续的本征值. 例如，取动量的z分量p_z. 在量子力学中这个量再一次用一个厄米算符来表示. 然而，与S_z大不相同，p_z的本征值（在适当的单位下）可以取$-\infty$到∞之间的任何实数值.

连续谱本征右矢所张矢量空间的严格数学是相当靠不住的. 这样的一个空间的维数显然是无穷大的. 幸运的是，很多从具有分立本征值的有限维矢量空间中得到的结果都可以立即推广. 在直接推广不适用的地方，我们会指明危险信号.

我们从与本征值方程（1.2.5）式类似的方程开始，在连续谱的情况下它被写成

$$\xi|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle, \tag{1.6.1}$$

其中，ξ是一个算符，而ξ'只是个数. 换句话说，右矢$|\xi'\rangle$是算符ξ的一个本征右矢，其本征值为ξ'，就像$|a'\rangle$是算符A的一个本征右矢，其本征值为a'一样.

在追求这一类比时，我们用狄拉克的δ函数替代克罗内克（Kronecker）符号——用对连续变量ξ'的积分代替对本征值$\{a'\}$的分立求和——因此，

$$\langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''} \to \langle\xi'|\xi''\rangle = \delta(\xi'-\xi''), \tag{1.6.2a}$$

$$\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'| = 1 \to \int d\xi'|\xi'\rangle\langle\xi'| = 1, \tag{1.6.2b}$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \to |\alpha\rangle = \int d\xi'|\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle, \tag{1.6.2c}$$

$$\sum_{a'}|\langle a'|\alpha\rangle|^2 = 1 \to \int d\xi'|\langle\xi'|\alpha\rangle|^2 = 1, \tag{1.6.2d}$$

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \sum_{a'}\langle\beta|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \to \langle\beta|\alpha\rangle = \int d\xi'\langle\beta|\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle, \tag{1.6.2e}$$

$$\langle a''|A|a'\rangle = a'\delta_{a'a''} \to \langle\xi''|\xi|\xi'\rangle = \xi'\delta(\xi''-\xi'). \tag{1.6.2f}$$

特别要注意，如何用完备性关系（1.6.2b）式求得（1.6.2c）式和（1.6.2e）式.

位置本征右矢和位置测量

在1.4节我们强调量子力学中的一次测量实质上是一个过滤过程. 为了把这种想法扩展到具有连续谱的可观测量的测量，最好的做法是处理一个特殊的例子. 为此我们来考虑

一维的位置（或坐标）算符.

位置算符 x 的本征右矢 $|x'\rangle$ 满足

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle \tag{1.6.3}$$

人们假定它形成一个完备集. 这里 x' 只是一个有着长度量纲的数，例如 0.23cm，而 x 是个算符. 一个任意物理态的态右矢可以用 $\{|x'\rangle\}$ 展开：

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle. \tag{1.6.4}$$

现在我们考虑位置可观测量的一个高度理想化的选择性测量. 假定我们安放了一个非常微小的探测器，仅当粒子精确地处于 x' 处而不在任何其他地方时，该探测器才发出咔嗒声. 一经探测器发出咔嗒声，我们就可以说，所谈及的态由 $|x'\rangle$ 表示. 换句话说，当该探测器发出咔嗒声时，$|\alpha\rangle$ 突然“跳入”了 $|x'\rangle$，非常类似于一个任意自旋态经由一个 S_z 类型的 SG 仪器时跳到 S_z+（或 S_z-）态.

实际上，探测器最多能做的是把粒子定位于 x' 附近的一个很窄的间隔. 当观测到一个粒子位于某个很窄的区间（$x'-\Delta/2$，$x'+\Delta/2$）时，一个实际的探测器就会发出咔嗒声. 当该探测器显出一次计数时，态右矢突然改变如下：

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx''|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{测量}} \int_{x'-\Delta/2}^{x'+\Delta/2} dx''|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle. \tag{1.6.5}$$

假定在这个狭窄的区间内，$\langle x''|\alpha\rangle$ 没有可以察觉的变化，探测器发出响声的概率由下式给出

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx', \tag{1.6.6}$$

其中我们把 Δ 写成 dx'. 这与测量 A 时 $|\alpha\rangle$ 跳到 $|a'\rangle$ 的概率为 $|\langle a'|\alpha\rangle|^2$ 类似. 在 $-\infty$ 和 ∞ 之间的某个地方记录到粒子的概率为：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx'|\langle x'|\alpha\rangle|^2, \tag{1.6.7}$$

它是归一到 1 的，只要 $|\alpha\rangle$ 是归一化的，即

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx'\langle\alpha|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = 1. \tag{1.6.8}$$

这时熟悉波动力学的读者可能已经看到，$\langle x'|\alpha\rangle$ 就是由 $|\alpha\rangle$ 表示的物理态的波函数. 在 1.7 节我们将更多地谈到把这种展开系数确定为波函数的 x 表象.

位置本征右矢的概念可以扩充到三维. 在非相对论量子力学中人们假定位置的本征右矢 $|\mathbf{x}'\rangle$ 是完备的. 因此，一个忽略了内部自由度（比如自旋）的粒子的态右矢可以用 $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ 做如下展开：

$$|\alpha\rangle = \int d^3x'|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle, \tag{1.6.9}$$

其中 $\mathbf{x}'$ 代表 x'，y' 和 z'；换句话说，$|\mathbf{x}'\rangle$ 是可观测量 x，y 和 z 在 1.4 节意义上的共同本征右矢：

$$|\mathbf{x}'\rangle \equiv |x', y', z'\rangle, \tag{1.6.10a}$$

$$x|\mathbf{x}'\rangle = x'|\mathbf{x}'\rangle, \quad y|\mathbf{x}'\rangle = y'|\mathbf{x}'\rangle, \quad z|\mathbf{x}'\rangle = z'|\mathbf{x}'\rangle, \tag{1.6.10b}$$

既然能够考虑这样的一个共同本征右矢，我们就隐含地假定了位置矢量的三个分量能在任意精度下同时测量. 因此，我们一定有

$$[x_i, x_j] = 0, \tag{1.6.11}$$

其中 x_1，x_2 和 x_3 分别表示 x，y 和 z.

平移

现在我们引入非常重要的平移或空间位移的概念. 假定开始时我们有一个准确地处于 $\mathbf{x}'$ 周围的态. 让我们考虑一种操作，它把这个态改变为另一个准确定位的态，这一次它位于 $\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'$ 周围，而其他的一切（例如自旋方向）都不变. 这样一种操作被定义为**无穷小平移** $d\mathbf{x}'$，实现这种操作的算符用 $\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$ 表示，即

$$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle. \tag{1.6.12}$$

其中按照约定，将一个可能的任意相因子设为 1. 注意，(1.6.12) 式的右边仍是一个位置本征右矢，但是这一次，其本征值为 $\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'$. 显然，$|\mathbf{x}'\rangle$ 不是无穷小平移算符的一个本征右矢.

用位置本征右矢把一个任意态的右矢 $|\alpha\rangle$ 展开，可以考查无穷小平移对于 $|\alpha\rangle$ 的影响：

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{J}(d\mathbf{x}')|\alpha\rangle = \mathcal{J}(d\mathbf{x}')\int d^3x'|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle = \int d^3x'|\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle. \tag{1.6.13}$$

我们还可以把（1.6.13）式的右边写成

$$\int d^3x'|\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle = \int d^3x'|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'-d\mathbf{x}'|\alpha\rangle \tag{1.6.14}$$

因为积分是对全空间进行的，而 $\mathbf{x}'$ 只是一个积分变量. 这表明，平移态 $\mathcal{J}(d\mathbf{x}')|\alpha\rangle$ 可以通过把 $\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle$ 中的 $\mathbf{x}'$ 替换成 $\mathbf{x}'-d\mathbf{x}'$ 得到.

在文献中有一种经常用来处理平移的等价方法. 代替考虑物理系统本身的无穷小平移，我们考虑对于坐标系作这样一种变化，即坐标原点沿相反的方向移动 $-d\mathbf{x}'$. 从物理上讲，在这样一种替代做法中我们要问，对于其坐标系移动了 $-d\mathbf{x}'$ 的另一位观察者，同一个态右矢看上去会是怎么样的. 在本书中我们尽量不采用这种方法. 显然，重要的是我们不要把这两种方法混在一起.

现在，我们列出无穷小平移算符 $\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$ 的一些性质. 我们要求的第一个性质是由概率守恒所强加的幺正性. 如果右矢 $|\alpha\rangle$ 归一为 1，要求平移后的右矢 $\mathcal{J}(d\mathbf{x}')|\alpha\rangle$ 也被归一为 1 是合理的，因此

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\mathcal{J}^{\dagger}(d\mathbf{x}')\,\mathcal{J}(d\mathbf{x}')|\alpha\rangle, \tag{1.6.15}$$

通过要求无穷小平移是幺正的

$$\mathcal{J}^{\dagger}(d\mathbf{x}')\,\mathcal{J}(d\mathbf{x}') = 1. \tag{1.6.16}$$

这个条件可以得到保障. 总的说来，在幺正变换下右矢的模保持不变. 对于第二个性质，我们假定考虑两个相继的无穷小平移——首先平移 $d\mathbf{x}'$，接着再平移 $d\mathbf{x}''$，其中 $d\mathbf{x}'$ 和 $d\mathbf{x}''$ 不必沿同一个方向. 我们预期最终的结果就是一个通过矢量之和 $d\mathbf{x}'+d\mathbf{x}''$ 的单一的平移操作，于是我们要求

$$\mathcal{J}(d\mathbf{x}'')\,\mathcal{J}(d\mathbf{x}') = \mathcal{J}(d\mathbf{x}'+d\mathbf{x}''). \tag{1.6.17}$$

第三个性质是，假定考虑一个沿相反方向的平移，我们预期这个反方向的平移与原来平移的逆相同

$$\mathcal{J}(-d\mathbf{x}') = \mathcal{J}^{-1}(d\mathbf{x}'). \tag{1.6.18}$$

第四个性质要求，当 $d\mathbf{x}'\rightarrow 0$ 时，平移算符约化为恒等算符

$$\lim_{d\mathbf{x}'\to 0}\mathcal{J}(d\mathbf{x}')=1 \tag{1.6.19}$$

并且$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$与单位算符之差是$d\mathbf{x}'$的一级小量.

我们现在证明，如果把无穷小平移算符取为

$$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')=1-i\mathbf{K}\cdot d\mathbf{x}', \tag{1.6.20}$$

其中$\mathbf{K}$的分量K_x，K_y和K_z都是**厄米算符**，则上述所有的性质都能得到满足. 第一个性质［即$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$的幺正性］的检验如下

$$\begin{aligned}\mathcal{J}^{\dagger}(d\mathbf{x}')\mathcal{J}(d\mathbf{x}')&=(1+i\mathbf{K}^{\dagger}\cdot d\mathbf{x}')(1-i\mathbf{K}\cdot d\mathbf{x}')\\&=1-i(\mathbf{K}-\mathbf{K}^{\dagger})\cdot d\mathbf{x}'+0[(d\mathbf{x}')^2]\\&\simeq 1,\end{aligned} \tag{1.6.21}$$

其中对于无穷小变换，我们忽略了$d\mathbf{x}'$的二级项. 第二个性质（1.6.17）式也可以证明如下

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(d\mathbf{x}'')\mathcal{J}(d\mathbf{x}')&=(1-i\mathbf{K}\cdot d\mathbf{x}'')(1-i\mathbf{K}\cdot d\mathbf{x}')\\&\simeq 1-i\mathbf{K}\cdot(d\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'')\\&=\mathcal{J}(d\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'').\end{aligned} \tag{1.6.22}$$

第三个和第四个性质显然为（1.6.20）式所满足.

若认为（1.6.20）式为$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$的正确形式，我们就能推导出一个算符$\mathbf{K}$与算符$\mathbf{x}$之间的非常基本的关系. 首先注意到

$$\mathbf{x}\mathcal{J}(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle=\mathbf{x}|\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle=(\mathbf{x}'+d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle \tag{1.6.23a}$$

和

$$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle=\mathbf{x}'\mathcal{J}(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle=\mathbf{x}'|\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle; \tag{1.6.23b}$$

因此，

$$[\mathbf{x},\mathcal{J}(d\mathbf{x}')]|\mathbf{x}'\rangle=d\mathbf{x}'|\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle\simeq d\mathbf{x}'|\mathbf{x}'\rangle, \tag{1.6.24}$$

在（1.6.24）式最后一步的近似中产生的误差是$d\mathbf{x}'$的二级小量. 这里，$|\mathbf{x}'\rangle$可以是任意的位置本征右矢，并且知道位置本征右矢形成了一个完备集. 因此我们一定有一个**算符恒等式**

$$[\mathbf{x},\mathcal{J}(d\mathbf{x}')]=d\mathbf{x}', \tag{1.6.25}$$

或

$$-i\mathbf{x}\mathbf{K}\cdot d\mathbf{x}'+i\mathbf{K}\cdot d\mathbf{x}'\mathbf{x}=d\mathbf{x}', \tag{1.6.26}$$

，其中，在（1.6.25）式和（1.6.26）式的右边，$d\mathbf{x}'$被认为是一个数$d\mathbf{x}'$乘以一个由$|\mathbf{x}'\rangle$所张的右矢空间中的单位算符. 取$d\mathbf{x}'$沿$\hat{\mathbf{x}}_j$方向并且取它与$\hat{\mathbf{x}}_i$的标量积，我们得到

$$[x_i,K_j]=i\delta_{ij}, \tag{1.6.27}$$

其中，δ_{ij}再次被认为乘上一个单位算符.

动量作为一个平移生成元

方程（1.6.27）式是位置算符x，y，z和K算符K_x，K_y，K_z之间的基本对易关系. 记住，到此为止，K算符是借助无穷小平移算符通过（1.6.20）式定义的. 我们可以赋予$\mathbf{K}$什么样的物理意义呢?

施温格讲授量子力学时曾经谈到："……对于一些基本性质，我们将仅仅从经典物理中借用一些名字." 在目前的情况中，我们希望从经典力学借用如下概念：动量是一个无穷小平移的生成元. 经典力学中的一个无穷小平移可以看作是一个正则变换

$$\mathbf{x}_{\text{新}} \equiv \mathbf{X} = \mathbf{x} + d\mathbf{x}, \quad \mathbf{p}_{\text{新}} \equiv \mathbf{P} = \mathbf{p}. \tag{1.6.28}$$

它可以从生成函数（Goldstein 2002，386页和403页）

$$F(\mathbf{x},\mathbf{P}) = \mathbf{x}\cdot\mathbf{P} + \mathbf{p}\cdot d\mathbf{x} \tag{1.6.29}$$

求得，其中 $\mathbf{p}$ 和 $\mathbf{P}$ 涉及相应的动量.

这个方程与量子力学中的无穷小平移算符（1.6.20）式有着惊人的相似性，特别是如果我们回想（1.6.29）式中的 $\mathbf{x}\cdot\mathbf{P}$ 是恒等变换（$\mathbf{X}=\mathbf{x}$，$\mathbf{P}=\mathbf{p}$）的生成函数. 由此导致我们猜测算符 $\mathbf{K}$ 在某种意义上与量子力学中的动量算符有关.

可以把算符 K 视为与动量算符本身等同吗？不幸的是，量纲完全不对，算符 K 具有1/(长度）的量纲，因为 $\mathbf{K}\cdot d\mathbf{x}'$ 必须是无量纲的. 但是令

$$\mathbf{K} = \frac{\mathbf{p}}{\text{量纲为作用量的普适常数}} \tag{1.6.30}$$

似乎是合法的. 没有任何办法从量子力学的基本假设确定这个普适常数的实际数值. 相反，这个常数在这里是需要的，因为从历史上看，在量子力学之前，经典物理学是使用如：地球的周长、1cc（译者注：1立方厘米）水的质量、平均太阳日的持续时间，等等，这些便于描写宏观量的单位发展起来的. 倘若微观物理学是在宏观物理学之前就已被明确地阐述了的话，则物理学家们几乎肯定会以这样一种方式选择基本单位，它使（1.6.30）式中的普适常数为1.

在这里，来自静电学的一种类比可能会有些帮助. 两个电荷为 e、距离为 r 的粒子之间的相互作用正比于 e^2/r. 若取非合理高斯单位，则比例因子恰好为1；但是若取对电机工程师更方便的合理mks单位，则比例因子是 $1/4\pi\varepsilon_0$（见附录A）.

（1.6.30）式中出现的普适常数结果与在1924年写下的德布罗意关系

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}, \tag{1.6.31}$$

中出现的常数 $\hbar$ 是相同的，式中的 λ 是一个“粒子波”的波长. 换句话说，算符 K 是与波数（2π 乘以波长的倒数，通常用 k 表示）相对应的量子力学算符. 采用这种规定，无穷小平移算符 $\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$ 可写为

$$\mathcal{J}(d\mathbf{x}') = 1 - i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'/\hbar, \tag{1.6.32}$$

其中的 $\mathbf{p}$ 是动量算符. 对易关系（1.6.27）式现在变成

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{1.6.33}$$

对易关系（1.6.33）式意味着，例如，x 和 p_x（而不是 x 和 p_y）是不相容的可观测量. 因此不可能找到 x 和 p_x 的共同本征右矢. 1.4节的普遍形式可以用在这里，求得海森伯的**位置与动量的不确定度关系**

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_x)^2\rangle \geqslant \hbar^2/4. \tag{1.6.34}$$

（1.6.34）式的一些应用将在1.7节见到.

到此为止，我们仅限于无穷小平移. 一个有限的平移（即一个有限大小的空间平行移动）可以通过相继地组合无穷小平移得到. 让我们考虑沿 x 方向平移一段 $\Delta x'$ 距离的有限平移：

$$\mathcal{J}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})\,|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + \Delta x'\hat{\mathbf{x}}\rangle. \tag{1.6.35}$$

通过组合 N 次无穷小平移，其中的每一次都由一个沿 x 方向的空间平移 $\Delta x'/N$ 所表征，并且令 $N\to\infty$，我们得到

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}}) &= \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{ip_x\Delta x'}{N\hbar}\right)^N \\ &= \exp\left(-\frac{ip_x\Delta x'}{\hbar}\right).\end{aligned} \tag{1.6.36}$$

这里的 $\exp(-ip_x\Delta x'/\hbar)$ 被认为是算符 p_x 的一个函数；一般而言，对于任何算符 X 我们都有：

$$\exp(X)\equiv 1+X+\frac{X^2}{2!}+\cdots. \tag{1.6.37}$$

平移的一个基本性质是沿不同方向的相继平移，比如沿 x 方向和 y 方向的平移，是对易的. 在图 1.9 中我们可以清晰地看到这一点，在从 A 移动到 B 时，与我们经由 C 还是经由 D 是没有关系的. 从数学上看，

$$\begin{aligned}&\mathcal{J}(\Delta y'\hat{\mathbf{y}})\,\mathcal{J}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})=\mathcal{J}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}}+\Delta y'\hat{\mathbf{y}}),\\ &\mathcal{J}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})\,\mathcal{J}(\Delta y'\hat{\mathbf{y}})=\mathcal{J}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}}+\Delta y'\hat{\mathbf{y}}).\end{aligned} \tag{1.6.38}$$

这一点并不像它可能从表面上看的那么平庸，第 3 章我们将证明，绕不同轴的转动不对易. 对于 $\Delta x'$ 和 $\Delta y'$ 做展开保留到第二阶，我们得到

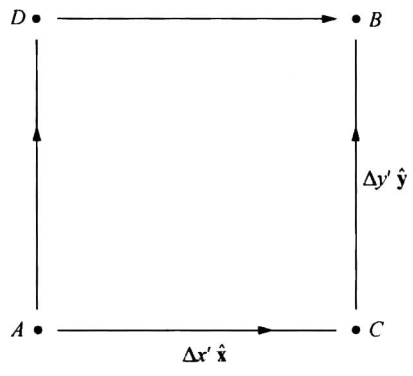


图 1.9　沿不同方向的相继平移

$$\begin{aligned}[\mathcal{J}(\Delta y'\hat{\mathbf{y}}),\mathcal{J}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})] &= \left[\left(1-\frac{ip_y\Delta y'}{\hbar}-\frac{p_y^2(\Delta y')^2}{2\hbar^2}+\cdots\right),\right.\\ &\qquad\left.\left(1-\frac{ip_x\Delta x'}{\hbar}-\frac{p_x^2(\Delta x')^2}{2\hbar^2}+\cdots\right)\right]\\ &\simeq -\frac{(\Delta x')(\Delta y')[p_y,p_x]}{\hbar^2}.\end{aligned} \tag{1.6.39}$$

由于 $\Delta x'$ 和 $\Delta y'$ 都是任意的，按(1.6.38)式的要求，或

$$[\mathcal{J}(\Delta y'\hat{\mathbf{y}}),\mathcal{J}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})]=0, \tag{1.6.40}$$

立即导致

$$[p_x,p_y]=0, \tag{1.6.41}$$

或更普遍地，

$$[p_i,p_j]=0. \tag{1.6.42}$$

这个对易关系是沿不同方向平移相互对易的直接后果. 在任何情况下平移的生成元都互相对易，相应的群被称为是**阿贝尔 (Abel) 群**. 三维平移群是阿贝尔群.

方程 (1.6.42) 式意味着 p_x，p_y 和 p_z 是彼此相容的可观测量. 因此，我们可以构想一个 p_x，p_y 和 p_z 的共同本征右矢，即

$$|\mathbf{p}'\rangle\equiv|p_x',p_y',p_z'\rangle, \tag{1.6.43a}$$

$$p_x|\mathbf{p}'\rangle=p_x'|\mathbf{p}'\rangle,\quad p_y|\mathbf{p}'\rangle=p_y'|\mathbf{p}'\rangle,\quad p_z|\mathbf{p}'\rangle=p_z'|\mathbf{p}'\rangle. \tag{1.6.43b}$$

求出 $\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$ 在这样一个动量本征右矢上的效应是有意义的

$$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')|\mathbf{p}'\rangle=\left(1-\frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)|\mathbf{p}'\rangle=\left(1-\frac{i\mathbf{p}'\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)|\mathbf{p}'\rangle. \tag{1.6.44}$$

我们看到尽管遇到了一个微小的位相变化，这个动量的本征右矢仍保持不变，所以，与$|\mathbf{x}'\rangle$不同，$|\mathbf{p}'\rangle$是$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$的一个本征右矢，这一点我们已经预料到了，因为

$$[\mathbf{p},\mathcal{J}(d\mathbf{x}')]=0. \tag{1.6.45}$$

然而，要注意，$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$的本征值是复数；在这里，我们不可能期待一个实的本征值，因为尽管$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$是幺正的，但却不是厄米的.

正则对易关系

我们总结一下通过研究平移的性质导出的对易关系：

$$[x_i,x_j]=0,\quad [p_i,p_j]=0,\quad [x_i,p_j]=i\hbar\delta_{ij}. \tag{1.6.46}$$

这些关系构成了量子力学的基石. 在狄拉克的书中，他把它们称之为“基本的量子条件”. 通常，它们以**正则对易关系**或**基本对易关系**闻名于世.

历史上，是W. 海森伯于1925年证明，如果把一些遵从一定乘法规则的数组与相应的频率联系在一起，则当时已知的一些原子的跃迁谱线组合规则就能够得到最佳解释. 紧随其后，玻恩和约当（P. Jordan）指出海森伯的乘法规则实际上就是矩阵代数的乘法规则，于是基于（1.6.46）式与矩阵类似的理论发展了起来，它现在被称为**矩阵力学***.

还是在1925年，狄拉克注意到只要把经典的泊松（Poisson）括号用对易关系作如下的替换，则各种量子力学关系都可以从相应的经典关系得到：

$$[,]_{\text{经典}}\to\frac{[,]}{i\hbar}, \tag{1.6.47}$$

在那里我们可以回想，作为q和p的函数，经典泊松括号被定义为

$$[A(q,p),B(q,p)]_{\text{经典}}\equiv\sum_s\left(\frac{\partial A}{\partial q_s}\frac{\partial B}{\partial p_s}-\frac{\partial A}{\partial p_s}\frac{\partial B}{\partial q_s}\right). \tag{1.6.48}$$

例如，在经典力学中我们有

$$[x_i,p_j]_{\text{经典}}=\delta_{ij}, \tag{1.6.49}$$

在量子力学中它变成了（1.6.33）式.

狄拉克规则（1.6.47）式似乎很合理，因为经典泊松括号和量子力学对易关系满足类似的代数性质. 特别地，不管[,]被理解为经典的泊松括号还是量子力学的对易关系，都可以证明下列的关系式：

$$[A,A]=0 \tag{1.6.50a}$$

$$[A,B]=-[B,A] \tag{1.6.50b}$$

$$[A,c]=0\quad (c\text{只是一个数}) \tag{1.6.50c}$$

$$[A+B,C]=[A,C]+[B,C] \tag{1.6.50d}$$

$$[A,BC]=[A,B]C+B[A,C] \tag{1.6.50e}$$

$$[A,[B,C]]+[B,[C,A]]+[C,[A,B]]=0, \tag{1.6.50f}$$

其中，最后一个关系式称为**雅可比（Jacobi）恒等式**.** 然而，存在着一些重要的差别. 首先，经典泊松括号的量纲不同于量子力学对易关系的量纲，因为在（1.6.48）式中出现了对q和p的微商. 其次，q和p的实函数的泊松括号是纯实的，而两个厄米算符的对易关系是反厄米的（请看1.4节的引理3）. 考虑到这些差别，在（1.6.47）式中插入了因子$i\hbar$.

---

* 把$pq-qp=h/2\pi i$雕刻在哥廷根（Göttingen）的玻恩的墓碑上是恰当的.

** 有意思的是，量子力学中的雅可比恒等式比经典的类似关系更容易证明.

我们有意回避了探讨在获取正则对易关系时狄拉克的类比. 我们通向对易关系的方法仅仅基于 (1) 平移的性质和 (2) 把平移的生成元认定为动量算符模数，一个带有作用量量纲的普适常数. 我们相信这一方法更强有力，因为它可以推广到没有经典类比的可观测量情况. 例如，我们在 1.4 节所遇到的自旋角动量分量与经典力学的 p 和 q 毫不相干. 但正如我们将在第 3 章中证明的，自旋角动量分量的对易关系可以使用转动性质推导出来，就像我们使用平移性质推导出正则对易关系一样.

1.7　位置和动量空间中的波函数

位置空间波函数

在这一节将对位置与动量空间波函数性质进行系统研究. 为了简单起见，让我们回到一维情况. 使用的基右矢是位置右矢，它满足

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle, \tag{1.7.1}$$

它以这样的一种方式归一化，即使正交条件表示为

$$\langle x''|x'\rangle = \delta(x''-x'). \tag{1.7.2}$$

我们已经指出过，代表一个物理态的右矢可以用 $|x'\rangle$ 展开

$$|\alpha\rangle = \int dx'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle, \tag{1.7.3}$$

而展开系数 $\langle x'|\alpha\rangle$ 以这样的一种方式解释，即

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' \tag{1.7.4}$$

是在 x' 附近一个狭窄间隔 dx' 内找到粒子的概率. 在我们的形式中，内积 $\langle x'|\alpha\rangle$ 就是通常所说的 $|\alpha\rangle$ 态的**波函数** $\psi_\alpha(x')$

$$\langle x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x'). \tag{1.7.5}$$

在初等波动力学中展开系数 $c_{a'}(=\langle a'|\alpha\rangle)$ 以及波函数 $\psi_\alpha(x')(=\langle x'|\alpha\rangle)$ 的概率解释经常作为各自独立的假定给出的. 我们的形式来源于狄拉克，它的主要优点之一是，这两类概率解释是统一的，与 $c_{a'}$ 基本一样，$\psi_\alpha(x')$ 也是一个展开系数 [见 (1.7.3) 式]. 沿着狄拉克的足迹，我们得以欣赏量子力学的统一.

考虑内积 $\langle\beta|\alpha\rangle$. 利用 $|x'\rangle$ 的完备性，我们有

$$\begin{aligned}\langle\beta|\alpha\rangle &= \int dx'\langle\beta|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx'\psi_\beta^*(x')\psi_\alpha(x'),\end{aligned} \tag{1.7.6}$$

所以 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 表征两个波函数之间的重叠度. 注意，我们并不是把 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 定义为重叠积分，确认 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 为重叠积分是由我们对 $|x'\rangle$ 的完备性假定推知的. $\langle\beta|\alpha\rangle$ 更为一般的、不依赖于表象的解释是，它表示在 $|\beta\rangle$ 态中找到 $|\alpha\rangle$ 态的概率振幅.

这一次让我们用波函数语言解释展开式

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \tag{1.7.7}$$

我们就用位置本征右矢 $\langle x'|$ 左乘 (1.7.7) 式的两边. 这样

$$\langle x'|\alpha\rangle = \sum_{a'}\langle x'|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle. \tag{1.7.8}$$

用通常的波动力学符号，可以看出该式为

$$\psi_\alpha(x') = \sum_{a'} c_{a'} u_{a'}(x'),$$

在那里我们引入了本征值为 a' 的算符 A 的**本征函数**：

$$u_{a'}(x') = \langle x'|a'\rangle. \tag{1.7.9}$$

现在让我们研究怎么使用 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 的波函数写出 $\langle\beta|A|\alpha\rangle$. 显然，我们有

$$\begin{aligned}\langle\beta|A|\alpha\rangle &= \int dx' \int dx'' \langle\beta|x'\rangle\langle x'|A|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle \\ &= \int dx' \int dx'' \psi_\beta^*(x')\langle x'|A|x''\rangle\psi_\alpha(x'').\end{aligned} \tag{1.7.10}$$

因此，为了能够求出 $\langle\beta|A|\alpha\rangle$，我们必须知道矩阵元 $\langle x'|A|x''\rangle$，一般来说，它是 x' 和 x'' 两个变量的函数.

如果可观测量 A 是位置算符 x 的函数就会出现极大的简化. 特别是，考虑

$$A = x^2, \tag{1.7.11}$$

它实际出现于第2章将要讨论的简谐振子问题的哈密顿量中. 我们有

$$\langle x'|x^2|x''\rangle = (\langle x'|)\cdot(x''^2|x'')) = x'^2\delta(x'-x''), \tag{1.7.12}$$

其中我们用到了（1.7.1）式和（1.7.2）式. 双重积分（1.7.10）式现在约化为一个单重积分：

$$\begin{aligned}\langle\beta|x^2|\alpha\rangle &= \int dx' \langle\beta|x'\rangle x'^2\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx' \psi_\beta^*(x') x'^2 \psi_\alpha(x').\end{aligned} \tag{1.7.13}$$

一般地说，

$$\langle\beta|f(x)|\alpha\rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') f(x') \psi_\alpha(x'). \tag{1.7.14}$$

注意，（1.7.14）式左边的 $f(x)$ 是一个算符，而右边的 $f(x')$ 不是算符.

位置基中的动量算符

现在我们研究在位置基中，即在位置本征右矢作为基矢的表象中，动量算符看起来是什么样的. 我们的出发点是动量作为无穷小平移生成元的定义

$$\begin{aligned}\left(1-\frac{ip\Delta x'}{\hbar}\right)|\alpha\rangle &= \int dx' \mathcal{J}(\Delta x')|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx' |x'+\Delta x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx' |x'\rangle\langle x'-\Delta x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx' |x'\rangle\left(\langle x'|\alpha\rangle - \Delta x' \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right),\end{aligned} \tag{1.7.15}$$

比较两边得到

$$p|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) \tag{1.7.16}$$

或

$$\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle \tag{1.7.17}$$

在那里我们用到了正交性质（1.7.2）式. 对 x 表象中的 p 矩阵元，我们得到

$$\langle x'|p|x''\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x''). \tag{1.7.18}$$

从（1.7.16）我们得到一个非常重要的恒等式：

$$\begin{aligned}\langle\beta|p|\alpha\rangle &= \int dx'\langle\beta|x'\rangle\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right)\\ &= \int dx'\psi_\beta^*(x')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi_\alpha(x').\end{aligned} \tag{1.7.19}$$

在我们的形式中，（1.7.19）式不是一个假定，在一定程度上，它是利用动量的基本性质推导出来的. 重复应用（1.7.17）式，我们还可以求得

$$\langle x'|p^n|\alpha\rangle = (-i\hbar)^n\frac{\partial^n}{\partial x'^n}\langle x'|\alpha\rangle. \tag{1.7.20}$$

$$\langle\beta|p^n|\alpha\rangle = \int dx'\psi_\beta^*(x')(-i\hbar)^n\frac{\partial^n}{\partial x'^n}\psi_\alpha(x'). \tag{1.7.21}$$

动量空间波函数

到目前为止，我们所做的都只是在 x 基中进行的. 但在 x 和 p 之间（除了偶然的负号之外）实际上存在着完全的对称性，我们可以从正则对易关系推知这一点. 现在我们改用 p 基，即在动量表象进行处理.

为了简单，我们仍取一维空间. 在 p 基中的基本征右矢规定

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle \tag{1.7.22}$$

以及

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p''). \tag{1.7.23}$$

动量的本征右矢 $\{|p'\rangle\}$ 以和位置空间本征右矢 $\{|x'\rangle\}$ 大体相同的方式张成右矢空间. 于是，一个任意的态矢量 $|\alpha\rangle$ 可展开如下

$$|\alpha\rangle = \int dp'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle. \tag{1.7.24}$$

对于展开系数 $\langle p'|\alpha\rangle$ 我们可以给出一种概率解释，测量 p 给出的本征值 p' 处于一个狭窄间隔 dp' 内的概率为 $|\langle p'|\alpha\rangle|^2dp'$. 按照惯例，称 $\langle p'|\alpha\rangle$ 为**动量空间波函数**，通常采用符号 $\phi_\alpha(p')$：

$$\langle p'|\alpha\rangle = \phi_\alpha(p'). \tag{1.7.25}$$

如果 $|\alpha\rangle$ 已被归一化了，则我们得到

$$\int dp'\langle\alpha|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle = \int dp'|\phi_\alpha(p')|^2 = 1. \tag{1.7.26}$$

现在让我们建立 x 表象与 p 表象之间的联系. 我们回忆一下，在分立谱的情况下，从老的基 $\{|a'\rangle\}$ 到新的基 $\{|b'\rangle\}$ 的基的改变是用变换矩阵（1.5.7）式表征的. 同样地，我们预期，欲求的信息包含在 $\langle x'|p'\rangle$ 中，它是 x' 和 p' 的函数，通常称之为从 x 表象到 p 表象的**变换函数**. 为了推导出 $\langle x'|p'\rangle$ 的显示表达式，首先回忆一下（1.7.17）式，令 $|\alpha\rangle$ 为动量本征右矢 $|p'\rangle$，我们得到

$$\langle x'|p|p'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle \tag{1.7.27}$$

或

$$p'\langle x'|p'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle. \tag{1.7.28}$$

$\langle x'|p'\rangle$ 的这个微分方程的解是

$$\langle x'|p'\rangle = N\exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right), \tag{1.7.29}$$

其中 N 是马上就要确定的归一化常数. 尽管变换函数 $\langle x'|p'\rangle$ 是两个变量 x' 和 p' 的函数，我们可以暂时把它看作是 p' 取固定值时的 x' 的函数. 那么，它可以看作是在位置 x' 处找到由 p' 确定的动量本征态的概率振幅；换句话说，它就是动量本征态 $|p'\rangle$ 的波函数，通常称之为动量本征函数（仍在 x 空间）. 所以，(1.7.29) 式只不过是说一个动量本征态是一个平面波. 有趣的是，我们在没有求解薛定谔方程（它还没有被写出来）的情况下就已经得到了这个平面波解.

为了得到归一常数 N，让我们首先考虑

$$\langle x'|x''\rangle = \int dp'\langle x'|p'\rangle\langle p'|x''\rangle. \tag{1.7.30}$$

左边正是 $\delta(x'-x'')$；右边可以利用 $\langle x'|p'\rangle$ 的显示表示式计算出来

$$\begin{aligned}\delta(x'-x'') &= |N|^2\int dp'\exp\left[\frac{ip'(x'-x'')}{\hbar}\right] \\ &= 2\pi\hbar|N|^2\delta(x'-x'').\end{aligned} \tag{1.7.31}$$

按照惯例，选 N 为纯实数且取正值，最后我们得到

$$\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right). \tag{1.7.32}$$

现在来论证坐标空间波函数与动量空间波函数是如何联系起来的. 我们所要做的就是把

$$\langle x'|\alpha\rangle = \int dp'\langle x'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle \tag{1.7.33a}$$

和

$$\langle p'|\alpha\rangle = \int dx'\langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \tag{1.7.33b}$$

改写成

$$\psi_\alpha(x') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right]\int dp'\exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right)\phi_\alpha(p') \tag{1.7.34a}$$

和

$$\phi_\alpha(p') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right]\int dx'\exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar}\right)\psi_\alpha(x'). \tag{1.7.34b}$$

这一对方程式恰恰是人们从傅里叶（Fourier）反演定理预期的结果. 显然，我们所发展的数学莫名其妙地“知道”了傅里叶的积分变换工作.

高斯型波包

通过观察一个物理实例来阐述我们的基本形式是有益的. 我们考虑一个所谓的**高斯型波包**，它的 x 空间波函数由下式给定

$$\langle x'|\alpha\rangle = \left[\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}}\right]\exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right]. \tag{1.7.35}$$

这是一个被中心位于原点的高斯型轮廓线调制的、波数为 k 的平面波. 对于 $|x'|>d$，观测到这个粒子的概率迅速地变为零；更定量地讲，概率密度 $|\langle x'|\alpha\rangle|^2$ 具有宽度为 d 的高斯型形状.

我们现在计算 x，x^2，p 和 p^2 的期待值. 根据对称性，x 的期待值显然是零：

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'\langle\alpha|x'\rangle x'\langle x'|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'|\langle x'|\alpha\rangle|^2 x' = 0. \tag{1.7.36}$$

对于 x^2 我们求得

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 |\langle x'|\alpha\rangle|^2 \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}d}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 \exp\left[\frac{-x'^2}{d^2}\right] \\ &= \frac{d^2}{2}.\end{aligned} \tag{1.7.37}$$

它导致位置算符的弥散度为

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \frac{d^2}{2} \tag{1.7.38}$$

p 和 p^2 的期待值也可以计算如下

$$\langle p\rangle = \hbar k \tag{1.7.39a}$$

$$\langle p^2\rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2, \tag{1.7.39b}$$

我们把它留作一个练习. 因此，动量的弥散度由下式给出

$$\langle(\Delta p)^2\rangle = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2} \tag{1.7.40}$$

有了 (1.7.38) 式和 (1.7.40) 式，我们可以检验海森伯的不确定度关系 (1.6.34) 式；在这种情况下，不确定度乘积由下式给出

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}, \tag{1.7.41}$$

它不依赖于 d，因此对于一个高斯型波包，我们实际上有一个等式的关系式而不是更为普遍的不等式关系式 (1.6.34) 式. 由于这个缘故，一个高斯型波包经常被称为*最小不确定度波包*.

我们现在转向动量空间. 通过直接的积分，只要把指数部分配成平方，我们求得

$$\begin{aligned}\langle p'|\alpha\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)\left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar} + ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right) \\ &= \sqrt{\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}}\exp\left[\frac{-(p'-\hbar k)^2 d^2}{2\hbar^2}\right].\end{aligned} \tag{1.7.42}$$

这个动量空间波函数提供了获得 $\langle p\rangle$ 和 $\langle p^2\rangle$ 的替代方法，它也被留作一个练习.

找到动量为 p' 的粒子的概率也是高斯型的 (在动量空间)，其中心位于 $\hbar k$，就像在 x' 点找到该粒子的概率是高斯型的 (在位置空间)，其中心位于零点一样. 而且，两个高斯型的宽度彼此成反比，这是用另一种方式表述用 (1.7.41) 式明显计算出来的不确定度乘积 $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle$ 的恒定性. 在 p 空间的弥散得越宽，在 x 空间就弥散得越窄，反之亦然.

作为一个极端的例子，假设我们令 $d\to\infty$. 那么，位置空间波函数 (1.7.35) 式就变

成了一个扩展到全空间的平面波，找到粒子的概率正好是个常数，不依赖于 x'. 相比之下，动量空间的波函数是个类 δ 函数，在 $\hbar k$ 处有一个尖锐的峰. 在相反的极端情况下，通过令 $d \to 0$，我们得到一个类 δ 函数的定域位置空间波函数，但动量空间波函数 (1.7.42) 式只是一个常数，不依赖于 p'.

我们已经看到，一个极好的定域（在 x 空间）态可以看作是具有所有可能动量值的动量本征态的叠加. 甚至那些动量与 mc 可比或更大的动量本征态也必须被包括在叠加中. 然而，在这样高动量值的情况下，基于非相对论量子力学的描述肯定不再适用*. 尽管有这种局限，在位置本征右矢 $|x'\rangle$ 存在的基础上建立的我们的形式有着广泛的应用空间.

推广到三维

至此，为简单起见，在这一节中我们的工作都只是在一维空间进行的，但是只要做一些必要的改变，我们所做的一切都可以推广到三维空间. 所用的基右矢既可以取满足

$$\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}'|\mathbf{x}'\rangle \tag{1.7.43}$$

的位置本征右矢，也可以取满足

$$\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}'|\mathbf{p}'\rangle \tag{1.7.44}$$

的动量本征右矢. 它们遵从归一化条件

$$\mathbf{x}|\mathbf{x}''\rangle = \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \tag{1.7.45a}$$

和

$$\langle\mathbf{p}|\mathbf{p}''\rangle = \delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p}''), \tag{1.7.45b}$$

其中的 δ^3 代表三维 δ 函数

$$\delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') = \delta(x' - x'')\delta(y' - y'')\delta(z' - z''). \tag{1.7.46}$$

完备性关系为

$$\int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'| = 1 \tag{1.7.47a}$$

和

$$\int d^3p' |\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'| = 1, \tag{1.7.47b}$$

它们可以用来展开一个任意的态右矢

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle, \tag{1.7.48a}$$

$$|\alpha\rangle = \int d^3p' |\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'|\alpha\rangle. \tag{1.7.48b}$$

展开系数 $\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle$ 和 $\langle\mathbf{p}'|\alpha\rangle$ 被分别视为位置空间的波函数 $\psi_\alpha(\mathbf{x}')$ 和动量空间的波函数 $\psi_\alpha(\mathbf{p}')$.

把动量算符置于 $|\beta\rangle$ 和 $|\alpha\rangle$ 之间时，动量算符变成

$$\langle\beta|\mathbf{p}|\alpha\rangle = \int d^3x' \psi_\beta^*(\mathbf{x}')(-i\hbar\nabla')\psi_\alpha(\mathbf{x}'). \tag{1.7.49}$$

类似于 (1.7.32) 式的变换函数是

---

* 结果表明，在相对论量子力学中，由于“负能态”或者对产生的可能性，使得定域态的概念非常复杂. 请看本书第8章.

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] \exp\left(\frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}{\hbar} \right), \tag{1.7.50}$$

所以有

$$\psi_a(\mathbf{x}') = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] \int d^3p' \exp\left(\frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}{\hbar} \right) \phi_a(\mathbf{p}') \tag{1.7.51a}$$

和

$$\phi_a(\mathbf{p}') = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] \int d^3x' \exp\left(\frac{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}{\hbar} \right) \psi_a(\mathbf{x}'). \tag{1.7.51b}$$

核对一下波函数的量纲是有意思的. 在一维问题中，归一化条件（1.6.8）式意味着 $|\langle x' | \alpha \rangle|^2$ 具有长度倒数的量纲，因此，波函数本身必须有（长度）$^{-1/2}$ 的量纲. 与之相比，三维问题中的波函数一定有（长度）$^{-3/2}$ 的量纲，因为 $|\langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle|^2$ 对全空间体积积分之后必须为 1（无量纲）.

习题

1.1 证明

$$[AB, CD] = -AC\{D, B\} + A\{C, B\}D - C\{D, A\}B + \{C, A\}DB.$$

1.2 假定一个 2×2 矩阵 X（不一定是厄米或幺正矩阵）被写成

$$X = a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a},$$

其中 a_0 和 $a_{1,2,3}$ 都是数.

(a) a_0 和 a_k（$k=1,2,3$）与 $\mathrm{tr}(X)$ 和 $\mathrm{tr}(\sigma_k X)$ 有什么样的关系？

(b) 利用矩阵元 X_{ij} 求出 a_0 和 a_k.

1.3 证明一个 2×2 矩阵 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}$ 的行列式在如下变换中不变：

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \to \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}' \equiv \exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2} \right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2} \right).$$

当 $\hat{\mathbf{n}}$ 沿 z 正方向时，利用 a_k 求出 a_k' 并解释你的结果.

1.4 利用左矢-右矢代数规则证明或计算下列各式：

(a) $\mathrm{tr}(XY) = \mathrm{tr}(YX)$，其中 X 和 Y 都是算符.

(b) $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$，其中 X 和 Y 都是算符.

(c) 在左矢-右矢形式下 $\exp[if(A)] = ?$ 其中 A 是厄米算符，其本征值是已知的.

(d) $\sum a' \psi_{a'}^*(\mathbf{x}') \psi_{a'}(\mathbf{x}'')$，其中 $\psi_{a'}(\mathbf{x}') = \langle \mathbf{x}' | a' \rangle$.

1.5 (a) 考虑两个右矢 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$. 假定 $\langle a' | \alpha \rangle$，$\langle a'' | \alpha \rangle$，…和 $\langle a' | \beta \rangle$，$\langle a'' | \beta \rangle$，…均为已知，其中 $|a'\rangle$，$|a''\rangle$，…组成基右矢的完备集. 求在该基下算符 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ 的矩阵表示.

(b) 现在考虑一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统，设 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 分别为 $|s_z = \hbar/2\rangle$ 和 $|s_x = \hbar/2\rangle$ 态. 写出在通常（s_z 对角）的基下，与 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ 对应的方阵的显示式.

1.6 假定 $|i\rangle$ 和 $|j\rangle$ 都是某厄米算符 A 的本征右矢. 在什么条件下 $|i\rangle + |j\rangle$ 也是 A 的一个本征右矢. 证明答案的正确性.

1.7 考虑被厄米算符 A 的本征右矢 $\{|a'\rangle\}$ 所张的一个右矢空间. 不存在任何简并.

(a) 证明

$$\prod_{a'} (A - a')$$

是零算符.

(b) 解释

$$\prod_{a'' \neq a'} \frac{(A - a'')}{(a' - a'')}$$

的意义.

(c) 令 A 等于自旋$\frac{1}{2}$系统的 S_z，用它解释 (a) 与 (b).

1.8 利用$|+\rangle$和$|-\rangle$的正交性证明

$$[S_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk}\hbar S_k, \quad \{S_i, S_j\} = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right)\delta_{ij},$$

其中

$$S_x = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle -|+|-\rangle\langle +|), \quad S_y = \frac{i\hbar}{2}(-|+\rangle\langle -|+|-\rangle\langle +|),$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle +|-|-\rangle\langle -|).$$

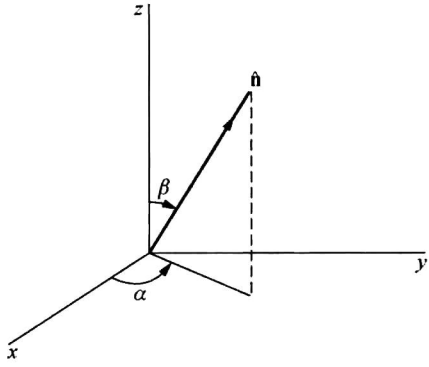
1.9 构造一个这样的$|\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}};+\rangle$ 态，使其满足

$$\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}|\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}};+\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right)|\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}};+\rangle,$$

其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 由附图中所示的角度表征. 把你的答案表示为$|+\rangle$ 和$|-\rangle$ 的线性组合. [注：答案是

$$\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)|+\rangle + \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{i\alpha}|-\rangle.$$

但是不要只是证明这个答案满足上述本征值方程. 而是要把这个问题作为直接的本征值问题处理. 再有，不要使用我们将在本书稍后介绍的转动算符.]



1.10 一个双态系统其哈密顿算符由下式给出

$$H = a(|1\rangle\langle 1|-|2\rangle\langle 2|+|1\rangle\langle 2|+|2\rangle\langle 1|),$$

其中 a 是一个数，其量纲为能量. 求能量的本征值和相应的能量本征右矢（作为$|1\rangle$ 和$|2\rangle$的线性组合）.

1.11 一个双态系统的哈密顿量由下式给出

$$H = H_{11}|1\rangle\langle 1| + H_{22}|2\rangle\langle 2| + H_{12}[|1\rangle\langle 2|+|2\rangle\langle 1|],$$

其中 H_{11}，H_{22}和 H_{12}都是有着能量量纲的实数，$|1\rangle$和$|2\rangle$是某个可观测量（$\neq H$）的本征右矢. 求能量的本征右矢和相应的能量本征值. 核实你的答案对于 $H_{12}=0$ 是合理的.（你不需要从头解这个问题. 下列事实可以不加证明地使用：

$$(\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}})|\hat{\mathbf{n}};+\rangle = \frac{\hbar}{2}|\hat{\mathbf{n}};+\rangle,$$

而$|\hat{\mathbf{n}};+\rangle$ 由下式给定

$$|\hat{\mathbf{n}};+\rangle = \cos\frac{\beta}{2}|+\rangle + e^{i\alpha}\sin\frac{\beta}{2}|-\rangle,$$

其中 β 和 α 分别为表征 $\hat{\mathbf{n}}$ 的极角和方位角. 在习题 1.9 的附图中给出了这些角度的定义.）

1.12 已知一个自旋$\frac{1}{2}$的系统处于$\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$的一个本征态，其本征值为$\hbar/2$，其中$\hat{\mathbf{n}}$为$xz$平面上的一个单位矢量，与正$z$轴夹$\gamma$角.

(a) 假定已测得S_x. 得到$+\hbar/2$的概率是什么?

(b) 计算S_x的弥散度，即

$$\langle(S_x-\langle S_x\rangle)^2\rangle.$$

(为了让你自己放心起见，验证在$\gamma=0$，$\pi/2$和π等特殊情况下的答案.)

1.13 一束自旋$\frac{1}{2}$的原子通过如下一系列斯特恩-盖拉赫类的测量

(a) 第一次测量存留$s_z=\hbar/2$的原子而舍弃$s_z=-\hbar/2$的原子.

(b) 第二次测量存留$s_n=\hbar/2$的原子而舍弃$s_n=-\hbar/2$的原子，其中s_n是算符$\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$的本征值，而$\hat{\mathbf{n}}$在$xz$平面上与$z$轴夹角为$\beta$.

(c) 第三次测量存留$s_z=-\hbar/2$的原子而舍弃$s_z=\hbar/2$的原子. 当第一次测量存活下的$s_z=\hbar/2$束流归一到1时，找到$s_z=-\hbar/2$束流的强度是什么? 如果我们想使最后找到$s_z=-\hbar/2$束流的强度取最大值，我们必须怎样设置第二次测量仪器取向?

1.14 量子力学中某一可观测量有如下的3×3矩阵表示

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}.$$

(a) 求这个可观测量的归一化本征矢和相应的本征值. 有简并存在吗?

(b) 给出一个与上述结果相关的物理实例.

1.15 设A和B是两个可观测量. 假定A和B的共同本征右矢$\{|a',b'\rangle\}$构成一组正交完备的基右矢集合. 我们是否总可以得出结论

$$[A,B]=0?$$

如果你的答案是可以，证明这一论断. 如果你的答案是不可以，举出一个反例.

1.16 两个厄米算符反对易

$$\{A,B\}=AB+BA=0.$$

能够存在一个A和B的同时(即，共同)的本征右矢吗? 证明或举例说明你的论断.

1.17 已知两个可观测量A_1和A_2均不显含时间，且相互不对易

$$[A_1,A_2]\neq0,$$

我们还知道A_1和A_2均与哈密顿量对易:

$$[A_1,H]=0,\qquad[A_2,H]=0.$$

证明，在一般情况下，能量本征态是简并的. 存在例外吗? 作为一个例子你可以考虑中心力问题$H=\mathbf{p}^2/2m+V(r)$，在那里取$A_1\to L_z$，$A_2\to L_x$.

1.18 (a) 推导施瓦茨不等式的最简单的方法如下. 首先注意到，对于任何复数λ都有

$$(\langle\alpha|+\lambda^*\langle\beta|)\cdot(|\alpha\rangle+\lambda|\beta\rangle)\geqslant0$$

然后，选择λ，使得上面的这个不等式约化为施瓦茨不等式.

(b) 证明，如果在λ为纯虚数的情况下，问题所涉及的态满足

$$\Delta A|\alpha\rangle=\lambda\Delta B|\alpha\rangle$$

则推广的不确定度关系中的等号成立.

(c) 利用通常的波动力学规则进行的直接计算可证明，由下式给出的高斯型波包

$$\langle x'|\alpha\rangle=(2\pi d^2)^{-1/4}\exp\left[\frac{i\langle p\rangle x'}{\hbar}-\frac{(x'-\langle x\rangle)^2}{4d^2}\right]$$

满足最小不确定度关系

$$\sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle}\ \sqrt{\langle(\Delta p)^2\rangle}=\frac{\hbar}{2}.$$

证明这样的一个高斯型波包的确满足

$$\langle x'|\Delta x|\alpha\rangle=(\text{虚数})\langle x'|\Delta p|\alpha\rangle$$

的要求，与（b）相符.

1.19 （a）计算

$$\langle(\Delta S_x)^2\rangle\equiv\langle S_x^2\rangle-\langle S_x\rangle^2,$$

其中的期待值取自 S_z 十态. 在 $A\to S_x$，$B\to S_y$ 的情况下，用你的结果检验推广的不确定度关系

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle\geqslant\frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2,$$

（b）对 S_x 十态，在 $A\to S_x$，$B\to S_y$ 的情况下检验这个不确定度关系.

1.20 找出使不确定度乘积

$$\langle(\Delta S_x)^2\rangle\langle(\Delta S_y)^2\rangle.$$

取最大值的右矢 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 的线性组合. 直接证明，你所找到的这个线性组合不破坏 S_x 和 S_y 的不确定度关系.

1.21 对于一个禁闭于两个刚性壁之间的一维粒子，

$$V=\begin{cases}0 & \text{对于 } 0<x<a,\\ \infty & \text{其他}\end{cases}$$

求出 x-p 不确定度乘积 $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle$ 的值. 对基态和激发态都进行求解.

1.22 如果唯一的限制是由海森伯不确定度原理所设置的，试估算一个冰锥能用锥尖平衡的时间长短的粗略量级. 假定该锥尖是尖锐的，而且它与支持它的面都是坚硬的. 你可以取一些不变更结果一般数量级的近似. 假设冰锥的尺度和重量取了合理的数值. 求出一个近似的数值结果，并用秒表示.

1.23 考虑一个三维右矢空间. 如果某一组正交的右矢集合，比如 $|1\rangle$，$|2\rangle$ 和 $|3\rangle$，用作基右矢，算符 A 和 B 由

$$A\doteq\begin{pmatrix}a&0&0\\0&-a&0\\0&0&-a\end{pmatrix},\quad B\doteq\begin{pmatrix}b&0&0\\0&0&-ib\\0&ib&0\end{pmatrix}$$

表示，其中 a 和 b 都是实数.

（a）显然，A 展示了一个简并的谱. B 也展示了简并的谱吗？

（b）证明 A 和 B 对易.

（c）找到一组新的正交归一右矢集合，它们是 A 和 B 的共同本征右矢. 具体确定在这三个本征右矢的每一个本征右矢上 A 和 B 的本征值. 你确定的本征值能完全地表征每个本征右矢吗？

1.24 （a）证明，$(1/\sqrt{2})(1+i\sigma_x)$ 作用在一个二分量旋量上可被看作绕 x 轴旋转 $-\pi/2$ 的转动算符的矩阵表示.（负号意味着转动是顺时针的）.

（b）用 S_y 的本征右矢作为基矢时，构造 S_z 的矩阵表示.

1.25 当一个算符在某个表象（在这种情况下 $\{|b'\rangle\}$ 为基矢）中的矩阵元 $\langle b'|A|b''\rangle$ 都是实数时有些作者把该算符定义为实的. 这个概念是表象无关的吗？也就是说，即使在使用不同于 $\{|b'\rangle\}$ 的其他基时，这些矩阵元还能保持是实数吗？利用熟知的算符，如 S_y 和 S_z（见习题 1.24）或 x 和 p_x 算符，检验你的断言.

1.26 构造一个变换矩阵，它把 S_z 对角的基和 S_x 对角的基联系起来. 证明你的结果与下列的普遍关系式自洽：

$$U=\sum_r|b^{(r)}\rangle\langle a^{(r)}|.$$

1.27 （a）假定 $f(A)$ 是一个具有性质 $A|a'\rangle=a'|a'\rangle$ 的厄米算符 A 的一个函数. 已知从基 a' 到基 b' 的变换矩阵时，求 $\langle b''|f(A)|b'\rangle$ 的值.

(b) 利用 (a) 中所得结果的连续态类比，求

$$\langle \mathbf{p}''|F(r)|\mathbf{p}'\rangle.$$

尽你所能简化你的表示式. 注意：r 是 $\sqrt{x^2+y^2+z^2}$，其中 x，y 和 z 都是算符.

1.28 (a) 设 x 和 p_x 是一维的坐标（原文此处多了一个动量 momentum，疑为笔误. ——译者注）和线动量. 求经典泊松括号

$$[x,F(p_x)]_{经典}$$

的值.

(b) 这一次，设 x 和 p_x 是相应的量子力学算符，求对易关系

$$\left[x,\exp\left(\frac{ip_x a}{\hbar}\right)\right].$$

(c) 利用在 (b) 中得到的结果，证明

$$\exp\left(\frac{ip_x a}{\hbar}\right)|x'\rangle, \qquad (x|x'\rangle = x'|x'\rangle)$$

是坐标算符 x 的本征态. 相应的本征值是什么？

1.29 (a) Gottfried (1966) 在他的书的 247 页上说：对所有能表示成其宗量的幂级数的函数 F 和 G，从基本对易关系都可以“容易地推导”出

$$[x_i,G(\mathbf{p})] = i\hbar\frac{\partial G}{\partial p_i}, \qquad [p_i,F(\mathbf{x})] = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial x_i}$$

证明这个说法.

(b) 求 $[x^2,p^2]$ 的值. 把你的结果与经典的泊松括号 $[x^2,p^2]_{经典}$ 相比较.

1.30 一个有限的（空间）位移的平移算符由

$$\mathcal{J}(\mathbf{l}) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}}{\hbar}\right),$$

给出，其中 $\mathbf{p}$ 是动量算符.

(a) 求

$$[x_i,\ \mathcal{J}(\mathbf{l})].$$

(b) 利用 (a)（或其他方法），展示期待值 $\langle\mathbf{x}\rangle$ 在平移下如何改变.

1.31 在正文中我们讨论了 $\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$ 在位置和动量本征右矢上以及在一个更一般的态右矢 $|\alpha\rangle$ 上的效应. 我们还可以研究期待值 $\langle\mathbf{x}\rangle$ 和 $\langle\mathbf{p}\rangle$ 在无穷小平移下的行为. 利用 (1.6.25) 式和 (1.6.45) 式并仅令 $|\alpha\rangle \to \mathcal{J}(d\mathbf{x}')|\alpha\rangle$，证明在无穷小平移下 $\langle\mathbf{x}\rangle \to \langle\mathbf{x}\rangle + d\mathbf{x}'$，$\langle\mathbf{p}\rangle \to \langle\mathbf{p}\rangle$.

1.32 (a) 从高斯型波包 (1.7.35) 式出发，证明 p 和 p^2 期待值的 (1.7.39a) 式和 (1.7.39b) 式.

(b) 利用动量空间波函数 (1.7.42) 式，求 p 和 p^2 的期待值.

1.33 (a) 证明下列各式：

i. $\langle p'|x|\alpha\rangle = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial p'}\langle p'|\alpha\rangle$，

ii. $\langle\beta|x|\alpha\rangle = \int dp'\phi_\beta^*(p')i\hbar\dfrac{\partial}{\partial p'}\phi_\alpha(p')$. 其中 $\phi_\alpha(p') = \langle p'|\alpha\rangle$ 和 $\phi_\beta(p') = \langle p'|\beta\rangle$ 都是动量空间波函数.

(b)

$$\exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)$$

的物理意义是什么，其中 x 是位置算符，而 Ξ 是某个量纲为动量的数？证明你的答案的正确性.

第 2 章　量子动力学

到此为止，我们还没有讨论物理系统如何随时间改变. 本章专门阐述态右矢和/或可观测量的动力学演化. 换言之，在这一章我们所关心的是牛顿，或拉格朗日（Lagrange）和哈密顿运动方程的量子力学类似方程.

2.1　时间演化和薛定谔方程

我们应当记住的首要之点是：时间在量子力学中只是一个参量而不是一个算符. 特别地，时间不是前一章所说的可观测量. 像谈论位置算符一样谈论时间算符是无意义的. 具有讽刺意味的是，在波动力学发展的历史过程中，德布罗意也好，薛定谔也罢都受到过能量与时间为一方及动量与位置（空间坐标）为另一方的二者之间协变类比的启发. 然而，我们现在来看量子力学的最终形式时，已见不到在时间与空间之间对称处理的踪迹. 场的相对论量子理论确实平等地处理了时间与空间坐标，但它只是在做出了牺牲，把位置从可观测量的地位降低到只是一个参量的情况下做到这一点的.

时间演化算符

在这一节我们关注的基本点是：一个态右矢如何随时间改变？假定我们有一个物理系统，它的态右矢在 t_0 时刻由 $|\alpha\rangle$ 表示. 在稍后的时刻，一般而言，我们不要指望该系统保持在同样的状态 $|\alpha\rangle$. 让我们把某稍后时刻与该状态相对应的右矢表示为

$$|\alpha,t_0;t\rangle,\quad (t>t_0), \tag{2.1.1}$$

其中标出 α，t_0 是为了提醒我们自己，该系统在某个较早的参考时刻 t_0 曾经处于态 $|\alpha\rangle$. 由于时间被认为是一个连续参量，我们预期

$$\lim_{t\to t_0}|\alpha,t_0;t\rangle=|\alpha\rangle, \tag{2.1.2}$$

但是，我们也可以用一种简化符号，

$$|\alpha,t_0;t_0\rangle=|\alpha,t_0\rangle, \tag{2.1.3}$$

代替它. 我们的基本任务是研究一个态右矢的时间演化：

$$|\alpha,t_0\rangle=|\alpha\rangle\xrightarrow{\text{时间演化}}|\alpha,t_0;t\rangle. \tag{2.1.4}$$

换成另一种表达方式，我们感兴趣的是，探寻在时间位移变换 $t_0\to t$ 下，态右矢如何变化.

就像平移的情况一样，这两个右矢由一个被称之为**时间演化算符**的 $\mathcal{U}(t,t_0)$ 联系起来：

$$|\alpha,t_0;t\rangle=\mathcal{U}(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle. \tag{2.1.5}$$

我们希望描述时间演化算符的哪些性质呢？第一个重要的性质源于概率守恒对 $\mathcal{U}(t,t_0)$ 的幺正性的要求. 假定在 t_0 时刻态右矢用某个可观测量 A 的本征右矢展开：

$$|\alpha,t_0\rangle=\sum_{a'}c_{a'}(t_0)|a'\rangle. \tag{2.1.6}$$

同样地，在稍后某个时刻，我们有

$$|\alpha,t_0;t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t)|a'\rangle, \tag{2.1.7}$$

一般来说，我们无法指望各个展开系数的模保持相同*：

$$|c_{a'}(t)| \neq |c_{a'}(t_0)|. \tag{2.1.8}$$

例如，考虑一个自旋$\frac{1}{2}$系统，其自旋磁矩受到一个沿 z 方向的均匀磁场的作用. 为确定起见，假定 t_0 时刻该自旋沿正 x 方向，即发现该系统处在 S_x 的一个本征态上，其本征值为 $\hbar/2$. 正如稍后将在本节中定量证明的，随着时间的推移，该自旋在 xy 平面上进动. 这意味着，在 $t>t_0$ 时刻观测到 S_x+ 的概率不再是 1，还有有限的概率观测到 S_x-. 而在所有的时刻，观测到 S_x+ 和 S_x- 的概率之和都保持为 1. 尽管对于各个展开系数有 (2.1.8) 式，采用 (2.1.6) 式和 (2.1.7) 式的符号，一般我们一定有

$$\sum_{a'} |c_{a'}(t_0)|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}(t)|^2 \tag{2.1.9}$$

另一种表述方式是，如果态右矢初始时归一到了 1，则在所有以后的时刻它一定保持归一到 1：

$$\langle\alpha,t_0|\alpha,t_0\rangle = 1 \Rightarrow \langle\alpha,t_0;t|\alpha,t_0;t\rangle = 1. \tag{2.1.10}$$

就像在平移的情况一样，如果时间演化算符取为幺正算符，这一性质就能确保. 为此，我们将幺正性，

$$\mathcal{U}^\dagger(t,t_0)\,\mathcal{U}(t,t_0) = 1, \tag{2.1.11}$$

取为$\mathcal{U}$算符基本性质中的一个. 它与许多作者把幺正性视为概率守恒的同义词并非巧合.

我们要求$\mathcal{U}$算符具有的另外一个特征是它的结合性：

$$\mathcal{U}(t_2,t_0) = \mathcal{U}(t_2,t_1)\,\mathcal{U}(t_1,t_0), \quad (t_2 > t_1 > t_0). \tag{2.1.12}$$

这个方程是说，如果对获得从 t_0 到 t_2 的时间演化感兴趣，我们则可以通过考虑先从 t_0 到 t_1，再从 t_1 到 t_2 的时间演化得到相同的结果——这是一个合理的要求. 注意我们要从右向左读 (2.1.12) 式！

考虑一个无穷小时间演化算符$\mathcal{U}(t_0+dt,t_0)$ 总是十分有益的：

$$|\alpha,t_0;t_0+dt\rangle = \mathcal{U}(t_0+dt,t_0)|\alpha,t_0\rangle. \tag{2.1.13}$$

由于连续性 [见 (2.1.2) 式]，当 dt 趋于零时，该无穷小时间演化算符一定约化为单位算符，

$$\lim_{dt\to 0} \mathcal{U}(t_0+dt,t_0) = 1, \tag{2.1.14}$$

而且，就像在平移情况中那样，我们预期$\mathcal{U}(t_0+dt,t_0)$ 与 1 之差为 dt 的量级.

我们断言，下式满足所有这些要求

$$\mathcal{U}(t_0+dt,t_0) = 1 - i\Omega dt, \tag{2.1.15}$$

其中 Ω 是一个厄米算符**

$$\Omega^\dagger = \Omega. \tag{2.1.16}$$

使用 (2.1.15) 式时，该无穷小时间平移算符满足结合性

$$\mathcal{U}(t_0+dt_1+dt_2,t_0) = \mathcal{U}(t_0+dt_1+dt_2,t_0+dt_1)\,\mathcal{U}(t_0+dt_1,t_0); \tag{2.1.17}$$

它与单位算符只相差一个 dt 量级的项. 幺正性还可以在 $(dt)^2$ 或更高阶的项可以忽略的

---

* 然而，稍后我们将证明，如果哈密顿量与 A 对易，则$|c_{a'}(t)|$的确等于$|c_{a'}(t_0)|$.

** 如果这个 Ω 算符显含时间，那时它必须在 t_0 时刻求值.

程度上被验证

$$\mathcal{U}^{\dagger}(t_0+dt,t_0)\,\mathcal{U}(t_0+dt,t_0)=(1+i\Omega^{\dagger}dt)(1-i\Omega dt)\simeq 1. \tag{2.1.18}$$

算符 Ω 具有频率或者反比于时间的量纲. 那么存在我们熟悉的具有频率量纲的可观测量吗? 回忆一下, 在旧量子论中, 假定角频率 ω 通过普朗克-爱因斯坦关系

$$E=\hbar\omega. \tag{2.1.19}$$

与能量联系起来. 现在让我们借用经典力学中哈密顿量是时间演化生成元的概念 (Goldstein 2002,401～402 页). 那时自然可以把 Ω 与哈密顿量算符 H 联系起来:

$$\Omega=\frac{H}{\hbar}. \tag{2.1.20}$$

综上所述, 无穷小时间演化算符可写为:

$$\mathcal{U}(t_0+dt,t_0)=1-\frac{iHdt}{\hbar}, \tag{2.1.21}$$

其中假定了哈密顿量算符 H 是厄米的. 读者可能要问, 这里引入的 $\hbar$ 是否与出现在平移算符表达式 (1.6.32) 中的 $\hbar$ 相同. 人们可通过稍后导出的量子力学运动方程与经典运动方程做比较回答这个问题. 结果表明, 除非这两个 $\hbar$ 是一样的, 否则就不能够得到作为相应量子力学关系式的经典极限关系式

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt}=\frac{\mathbf{p}}{m} \tag{2.1.22}$$

薛定谔方程

我们现在能够推导时间演化算符 $\mathcal{U}(t,t_0)$ 满足的基本微分方程. 在 (2.1.12) 式中令 $t_1\to t$, $t_2\to t+dt$, 利用时间演化算符的结合性:

$$\mathcal{U}(t+dt,t_0)=\mathcal{U}(t+dt,t)\,\mathcal{U}(t,t_0)=\left(1-\frac{iHdt}{\hbar}\right)\mathcal{U}(t,t_0), \tag{2.1.23}$$

其中的时间差 $t-t_0$ 不必为无穷小. 我们有

$$\mathcal{U}(t+dt,t_0)-\mathcal{U}(t,t_0)=-i\left(\frac{H}{\hbar}\right)dt\,\mathcal{U}(t,t_0), \tag{2.1.24}$$

它可以写成微分方程形式:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t,t_0)=H\,\mathcal{U}(t,t_0). \tag{2.1.25}$$

这就是**时间演化算符的薛定谔方程**. 随时间推移发生的每件事都一定遵从这个基本方程.

方程 (2.1.25) 立刻导致了一个态右矢满足的薛定谔方程. 用 $|\alpha,t_0\rangle$ 右乘 (2.1.25) 式的两边得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle=H\,\mathcal{U}(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle. \tag{2.1.26}$$

但是 $|\alpha,t_0\rangle$ 不依赖于 t, 所以该式与

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle=H|\alpha,t_0;t\rangle, \tag{2.1.27}$$

是相同的, 其中用到了 (2.1.5) 式.

如果 $\mathcal{U}(t,t_0)$ 已经给出, 并进一步知道了 $\mathcal{U}(t,t_0)$ 如何作用于初始态右矢 $|\alpha,t_0\rangle$, 就没有必要为求解态右矢的薛定谔方程 (2.1.27) 式操心. 我们所须做的就是把 $\mathcal{U}(t,t_0)$ 作用在 $|\alpha,t_0\rangle$ 上, 用这种方法我们可以求得任意时刻 t 的态右矢. 因此, 我们的第一个任务就

是推导出时间演化算符的薛定谔方程（2.1.25）的形式解. 存在三种需要分别处理的情况：

情况1. 哈密顿量算符不依赖时间. 这时我们指的是，甚至当参量 t 改变时，哈密顿量算符也保持不变. 一个自旋磁矩与一个时间无关的磁场相互作用的哈密顿量就是这种情况的实例. 在这种情况下（2.1.25）式的解由下式给出：

$$\mathcal{U}(t,t_0)=\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]. \tag{2.1.28}$$

为了证明这一点，让我们将该指数展开如下：

$$\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]=1+\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}+\left[\frac{(-i)^2}{2}\right]\left[\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right]^2+\cdots. \tag{2.1.29}$$

由于这个展开式的时间微商为

$$\frac{\partial}{\partial t}\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]=\frac{-iH}{\hbar}+\left[\frac{(-i)^2}{2}\right]2\left(\frac{H}{\hbar}\right)^2(t-t_0)+\cdots, \tag{2.1.30}$$

表达式（2.1.28）式显然满足微分方程（2.1.25）. 因为 $t\to t_0$ 时，（2.1.28）式约化为单位算符，边界条件也被满足. 就像我们求得有限平移的（1.6.36）式一样，求解（2.1.28）式的另一种方法是相继地组合无穷小时间演化算符：

$$\lim_{N\to\infty}\left[1-\frac{(iH/\hbar)(t-t_0)}{N}\right]^N=\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]. \tag{2.1.31}$$

情况2. 哈密顿量算符与时间相关，但不同时间的 H 对易. 作为一个例子，让我们考虑一个自旋磁矩受到一个强度随时间改变但方向保持不变的磁场的作用. 此时（2.1.25）式的形式解为

$$\mathcal{U}(t,t_0)=\exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t}dt'H(t')\right]. \tag{2.1.32}$$

它可以用类似的方法证明. 我们只要把（2.1.29）和（2.1.30）式中的 $H(t-t_0)$ 换成 $\int_{t_0}^{t}dt'H(t')$ 即可.

情况3. 不同时刻的 H 不对易. 继续用与自旋磁矩相关的例子，这一次我们假定磁场的方向也随着时间改变：$t=t_1$ 时沿 x 方向，$t=t_2$ 时沿 y 方向等. 因为 S_x 与 S_y 不对易，所以 $H(t_1)$和 $H(t_2)$的行为像 $\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}$，也不对易. 在这种情况下，形式解由下式给出：

$$\mathcal{U}(t,t_0)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_nH(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n). \tag{2.1.33}$$

该式有时称为戴森（Dyson）级数，它以 F. J. 戴森的名字命名，因为他在量子场论中发展了这种形式的微扰展开. 我们现在不证明（2.1.33）式，因为其证明非常类似于在第5章中给出的相互作用绘景中时间演化算符的证明.

在初等应用中，只有情况1是实际感兴趣的. 在本章余下的部分，我们假定 H 算符是时间无关的. 在第5章我们将遇到时间相关的哈密顿量.

能量本征右矢

为了能够计算时间演化算符作用于一个一般初始右矢 $|\alpha\rangle$ 的效应，我们必须首先知道它如何作用于展开 $|\alpha\rangle$ 时使用的基右矢. 如果所用的基右矢是满足

$$[A,H]=0 \tag{2.1.34}$$

的 A 的本征右矢，那就简单了. 那时，A 的本征右矢也是 H 的本征右矢，称之为**能量本征右矢**，它的本征值用 $E_{a'}$ 表示：

$$H|a'\rangle = E_{a'}|a'\rangle. \tag{2.1.35}$$

我们现在可以用 $|a'\rangle\langle a'|$ 展开时间演化算符. 为简单起见，取 $t_0=0$，我们得到

$$\begin{aligned}\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) &= \sum_{a'}\sum_{a''}|a''\rangle\langle a''|\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)|a'\rangle\langle a'| \\ &= \sum_{a'}|a'\rangle\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right)\langle a'|.\end{aligned} \tag{2.1.36}$$

一旦初始右矢利用 $\{|a'\rangle\}$ 的展开知道了，则写成这种形式的时间演化算符就使我们能够求解任何初值问题. 作为例子，假定初始右矢的展开为

$$|\alpha, t_0=0\rangle = \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = \sum_{a'}c_{a'}|a'\rangle. \tag{2.1.37}$$

则我们就有

$$|\alpha, t_0=0; t\rangle = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)|\alpha, t_0=0\rangle = \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right). \tag{2.1.38}$$

换句话说，展开系数随时间变化如下

$$c_{a'}(t=0) \to c_{a'}(t) = c_{a'}(t=0)\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right). \tag{2.1.39}$$

其模保持不变. 注意，各分量之间的相对位相的确是随时间改变，因为振荡的频率各不相同.

一种有意思的特殊情况是，初态碰巧是 $\{|a'\rangle\}$ 自身中的一个. 初始时，我们有

$$|\alpha, t_0=0\rangle = |a'\rangle, \tag{2.1.40}$$

而在一个稍后的时刻

$$|\alpha, t_0=0; t\rangle = |a'\rangle\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right), \tag{2.1.41}$$

因此，如果初始时系统是 A 和 H 的一个共同本征态，它在所有的时刻都将保持如此. 最多可能发生的是相位的调制，即 $\exp(-iE_{a'}t/\hbar)$. 在这个意义上说，一个与 H 相容的可观测量 [见(2.1.34)] 是一个运动常数. 当讨论海森伯运动方程时，我们将再次遇到这种联系的不同形式.

在前面的讨论中，量子力学的基本任务被简化为寻找一个与 H 对易的可观测量并计算它的本征值. 一旦完成了这一步，我们就可以用那个可观测量的本征右矢展开初始右矢，然后只要用时间演化算符去作用即可. 最后的这一步只不过意味着，如 (2.1.39) 式所示，改变每个展开系数的相位.

尽管我们解决了只有一个与 H 对易的可观测量 A 的情况，当存在几个相互相容且均与 H 对易的可观测量时：

$$\begin{aligned}&[A,B]=[B,C]=[A,C]=\cdots=0, \\ &[A,H]=[B,H]=[C,H]=\cdots=0.\end{aligned} \tag{2.1.42}$$

我们的考虑能够很容易地被推广. 利用 1.4 节的集团指标符号 [见 (1.4.37) 式]，我们有

$$\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) = \sum_{K'}|K'\rangle\exp\left(\frac{-iE_{K'}t}{\hbar}\right)\langle K'|, \tag{2.1.43}$$

其中只要 a'，b'，c'，…被确定了，$E_{K'}$ 也就唯一地被确定了. 因此，找到一个相互相容而且还与 H 对易的可观测量的完备集是关键. 只要找到这样的一个集合，我们就可以把这个初始右矢表示为 A，B，C，…与 H 的共同本征右矢的叠加. 最后一步只是使用了写成

(2.1.43) 式的时间演化算符. 用这样一种方法，我们可以求解具有时间无关 H 的最普遍的初值问题.

期待值的时间依赖

研究一个可观测量的期待值作为时间函数如何变化是有益的. 假定 $t=0$ 时初态是一个与 H 对易的可观测量 A 的一个本征态，如 (2.1.40) 式所示. 我们现在看一下某个不必与 A 或 H 对易的可观测量 B 的期待值. 因为在稍后的时刻这个态右矢为

$$|a',t_0=0;t\rangle=\mathcal{U}(t,0)|a'\rangle \tag{2.1.44}$$

故 $\langle B\rangle$ 由下式给出

$$\begin{aligned}\langle B\rangle&=(\langle a'|\mathcal{U}^{\dagger}(t,0))\cdot B\cdot(\mathcal{U}(t,0)|a'\rangle)\\&=\langle a'|\exp\left(\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)B\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right)|a'\rangle\\&=\langle a'|B|a'\rangle,\end{aligned} \tag{2.1.45}$$

它是不依赖于 t 的. 所以一个可观测量对于能量本征态的期待值不随时间变化. 由于这个原因，能量的本征态经常被称为**定态**.

对能量本征态的一个叠加或一个非**定态**取期待值的时候，情况更为有趣. 假定初始时有

$$|\alpha,t_0=0\rangle=\sum_{a'}c_{a'}|a'\rangle. \tag{2.1.46}$$

很容易算出 B 的期待值为

$$\begin{aligned}\langle B\rangle&=\left[\sum_{a'}c_{a'}^{*}\langle a'|\exp\left(\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)\right]\cdot B\cdot\left[\sum_{a''}c_{a''}\exp\left(\frac{-iE_{a''}t}{\hbar}\right)|a''\rangle\right]\\&=\sum_{a'}\sum_{a''}c_{a'}^{*}c_{a''}\langle a'|B|a''\rangle\exp\left[\frac{-i(E_{a''}-E_{a'})t}{\hbar}\right].\end{aligned} \tag{2.1.47}$$

于是，这时期待值是由一些振荡项组成，它们的角频率由波尔频率条件

$$\omega_{a''a'}=\frac{(E_{a''}-E_{a'})}{\hbar}. \tag{2.1.48}$$

确定.

自旋进动

在这里最恰当的是给出一个例子. 我们考虑一个极为简单、然而却能阐明我们所发展的基本形式框架的系统.

我们从一个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的系统的哈密顿量

$$H=-\left(\frac{e}{m_ec}\right)\mathbf{S}\cdot\mathbf{B} \tag{2.1.49}$$

(对于电子 $e<0$) 出发，该系统具有 $e\hbar/2m_ec$ 的磁矩，受到一个外磁场 $\mathbf{B}$ 作用. 此外，我们取 $\mathbf{B}$ 为一个沿 z 方向的均匀静磁场. 这时我们可把 H 记为

$$H=-\left(\frac{eB}{m_ec}\right)S_z. \tag{2.1.50}$$

因为 S_z 与 H 只差一个常数因子，所以它们显然对易. S_z 的本征态也是能量本征态，其相应的本征值为

$$E_{\pm}=\mp\frac{e\hbar B}{2m_e c},\quad \text{对于 } S_z\pm. \tag{2.1.51}$$

最方便的做法是以下述方式定义一个 ω

$$\omega\equiv\frac{|e|B}{m_e c}, \tag{2.1.52}$$

它使两个能量本征值之差为 $\hbar\omega$. 然后我们就可以把算符 H 简单地改写为

$$H=\omega S_z. \tag{2.1.53}$$

所有随时间演化的信息全都包含在时间演化算符中

$$\mathcal{U}(t,0)=\exp\left(\frac{-i\omega S_z t}{\hbar}\right). \tag{2.1.54}$$

我们将其作用于初态. 展开初始右矢所必须使用的基右矢显然是 S_z 的本征右矢 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$，它们也是能量本征右矢. 假定 $t=0$ 时刻该系统由下式描写

$$|\alpha\rangle=c_+|+\rangle+c_-|-\rangle. \tag{2.1.55}$$

将 (2.1.54) 式作用在上面，我们看到，态右矢在稍后某时刻为

$$|\alpha,t_0=0;t\rangle=c_+\exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)|+\rangle+c_-\exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right)|-\rangle, \tag{2.1.56}$$

其中我们用到了

$$H|\pm\rangle=\left(\frac{\pm\hbar\omega}{2}\right)|\pm\rangle. \tag{2.1.57}$$

具体地说，让我们假定该初始右矢 $|\alpha\rangle$ 表示自旋向上（或更精确地说，S_z+）的态 $|+\rangle$，它意味着

$$c_+=1,\quad c_-=0. \tag{2.1.58}$$

(2.1.56) 式告诉我们，在一个稍后的时刻，它仍处于自旋向上的态，这并不奇怪，因为该态是一个定态.

接下来，让我们假定初始时该系统处在 S_x+ 态. 比较 (1.4.17a) 式与 (2.1.55) 式，我们看到

$$c_+=c_-=\frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{2.1.59}$$

可直截了当地求出在稍后某个时刻 t 系统处于 $S_x\pm$ 态的概率：

$$\begin{aligned}|\langle S_x\pm|\alpha,t_0=0;t\rangle|^2&=\left|\left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\langle+|\pm\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\langle-|\right]\cdot\left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)|+\rangle\right.\right.\\&\left.\left.+\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right)|-\rangle\right]\right|^2\\&=\left|\frac{1}{2}\exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)\pm\frac{1}{2}\exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right)\right|^2\\&=\cos^2\frac{\omega t}{2}\quad\text{对于}\quad S_x+,\text{和}\qquad(2.1.60a)\\&=\sin^2\frac{\omega t}{2}\quad\text{对于}\quad S_x-\qquad(2.1.60b)\end{aligned}$$

尽管初始时自旋沿正 x 方向，但沿 z 方向的磁场导致它旋转，结果我们得到了在稍后某时刻找到 S_x- 的有限的概率. 可以看到，这两个概率之和在所有的时刻都是 1，它与时间演化算符的幺正性相符.

利用（1.4.6）式，我们可以把 S_x 的期待值写成

$$\begin{aligned}\langle S_x\rangle &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)+\left(\frac{-\hbar}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)\\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)\cos\omega t\,,\end{aligned} \tag{2.1.61}$$

故此量随时间振荡，其角频率为相应的两个能量本征值之差除以 $\hbar$，它与我们的普遍公式（2.1.47）式是一致的. 对 S_y 和 S_z 做类似的操作表明

$$\langle S_y\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right)\sin\omega t \tag{2.1.62a}$$

和

$$\langle S_z\rangle = 0. \tag{2.1.62b}$$

物理上这意味着自旋在 xy 平面上进动. 在第3章中讨论转动算符时，我们将进一步评述自旋进动.

自旋进动已被实验严格确证. 事实上，它被用作研究其他基本量子力学现象的工具. 例如，对于类点粒子，诸如对于电子或 μ 子而言，哈密顿量（2.1.49）式的形式可以推导出来，这些粒子遵从狄拉克方程，它们的回转磁比 $g=2$.（见8.2节）然而，来自量子场论的更高阶修正预言了相对于该值的一个微小但精确可算的偏离，因此进行极具竞争的 $g-2$ 的精确测量是一项高优先级的任务.

这样的一个实验最近已经完成. 请参看 G. W. Bennett et al.，*Phys. Rev.* D **73**（2006）072003. μ 子被注入到一个如此设计的“储存环”中，使得仅当 $g\equiv 2$ 时，它的自旋将与它们的动量矢量锁步进动. 因此，对它们进动的观测可直接测量 $g-2$，促成了非常精确结果的获得. 图2.1显示了实验家们观测到的一百多个周期的 μ 子自旋转动. 他们确定了 $g-2$ 的值，其精度小于百万分之一，与理论值符合得相当好.

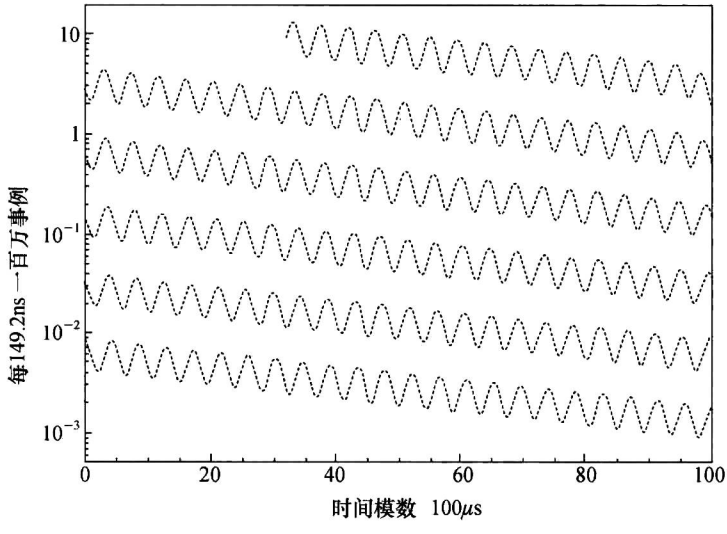


图2.1 μ 子自旋进动的观测［见 G. W. Bennett et al.，*Phys. Rev.* D **73**（2006）072003］. 每 100μs 中的数据点打成一个数据包. 因为 μ 衰变，信号的大小随时间减小.

中微子振荡

基于当前物理学研究，导致双态系统相干的量子力学动力学的一个迷人的实例是由称之为*中微子振荡*的现象提供的.

中微子是不带电荷且质量很小的基本粒子，它们的质量比电子小得多. 已知它们在自然界以三种不同的“味”出现，尽管这里的讨论只要考虑其中的两种就足够了. 这两种“味”可以由它们的相互作用来识别：它可以与电子相互作用，此时记为 ν_e；也可以与 μ 子相互作用，记为 ν_μ. 事实上，它们都是控制这些作用的哈密顿量的本征态.

另一方面，很可能（事实上，现在已经知道确实如此）中微子具有另外的一些相互作用，在这种情况下它们的能量本征态对应于质量有明确定义的态. 这些“质量本征态”具有本征值 E_1 和 E_2，比如说，分别对应于质量 m_1 和 m_2，并可用 $|\nu_1\rangle$ 和 $|\nu_2\rangle$ 表示. “味本征态”与这些“质量本征态”通过由某个混合角 θ 决定的如下简单的幺正变换

$$|\nu_e\rangle = \cos\theta|\nu_1\rangle - \sin\theta|\nu_2\rangle \tag{2.1.63a}$$

$$|\nu_\mu\rangle = \sin\theta|\nu_1\rangle + \cos\theta|\nu_2\rangle \tag{2.1.63b}$$

联系起来. 如果混合角为零，则 $|\nu_e\rangle$ 和 $|\nu_\mu\rangle$ 就分别与 $|\nu_1\rangle$ 和 $|\nu_2\rangle$ 相同. 然而，我们想不出为什么应该这样. 的确，对于任何具体的 θ 值都不存在强烈的理论偏好，目前它是一个只能通过实验才能确定的自由参量.

中微子振荡是可用来测量混合角的现象. 假定我们在 $t=0$ 时刻制备了一种味中微子（比如 $|\nu_e\rangle$）的动量本征态. 之后按照（2.1.63a）式，两种不同质量的本征态分量将以不同的频率演化，因而产生了一个相对的相位差. 如果质量差足够小，则经过一个宏观距离后，这个相位差就能建立起来. 事实上，通过测量作为相位差函数的干涉，人们可以观测到振荡，其周期依赖于质量差，而振幅依赖于混合角.

使用（2.1.63）式与（2.1.28）式以及我们的量子力学假定，找到一种显示中微子振荡的可测量是很简单的（见本章末尾的习题 2.4）. 在这种情况下，哈密顿量就是自由粒子的哈密顿量，但是我们需要小心一点. 中微子质量非常小，所以在任何实际的实验条件下它们都是高度相对论的. 因此在极好的近似下，对一个确定的动量 p，质量为 m 的中微子的能量本征值由

$$E = [p^2c^2 + m^2c^4]^{1/2} \approx pc\left(1 + \frac{m^2c^2}{2p^2}\right) \tag{2.1.64}$$

给出. 接下去如果我们允许态 $|\nu_e\rangle$ 演化，然后在某个稍后的时刻 t 询问该态仍然以 $|\nu_e\rangle$（而不是 $|\nu_\mu\rangle$）出现的概率是什么，我们发现

$$P(\nu_e \to \nu_e) = 1 - \sin^2 2\theta \sin^2\left(\Delta m^2 c^4 \frac{L}{4Ehc}\right), \tag{2.1.65}$$

其中 $\Delta m^2 \equiv m_1^2 - m_2^2$，$L=ct$ 是中微子的飞行距离，而 $E=pc$ 是微小的中微子的能量.

（2.1.65）式所预言的振荡被神岗实验引人瞩目地观测到了. 参见图 2.2. 在大约 150km 的距离探测来自于一系列核反应堆的中微子，并将其比率与反应堆的功率及性质所预期的值比较. 曲线不是完美的正弦波，因为反应堆并不都处在与探测器同样的距离.

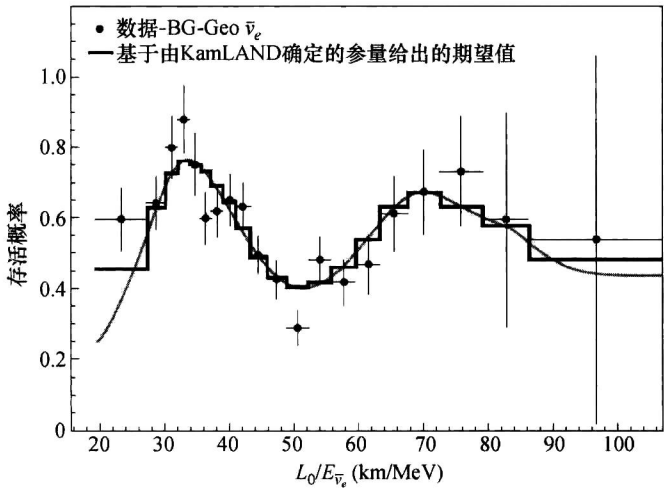


图 2.2 由神岗实验观测到的中微子振荡［取自 S. Abe et al.，*Phys. Rev. Lett.* **100**（2008）221803］. 作为 L/E 函数的振荡证明了不同的中微子质量本征态之间的干涉.

关联振幅和能量时间不确定度关系

我们以探讨不同时刻的态右矢如何彼此关联来结束这一节. 假定一个物理系统在 $t=0$ 时刻的初态右矢由 $|\alpha\rangle$ 定. 它随时间变成 $|\alpha,t_0=0;t\rangle$，我们可使用时间演化算符的作用得到它. 我们关心在稍后时刻 t 该态右矢与 $t=0$ 时刻的态右矢的相似程度，因此，我们构造一个在不同时刻的两个态右矢之间的内积：

$$\begin{aligned} C(t) &\equiv \langle\alpha|\alpha,t_0=0;t\rangle \\ &= \langle\alpha|\mathcal{U}(t,0)|\alpha\rangle, \end{aligned} \tag{2.1.66}$$

它被称为**关联振幅**. $C(t)$的模给出了不同时刻态右矢间“相似程度”的一种定量的测量.

作为一个极端的例子，考虑一个非常特殊的情况，在那里初始右矢 $|\alpha\rangle$ 是 H 的本征右矢；因此我们有：

$$C(t)=\langle a'|a',t_0=0;t\rangle=\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right), \tag{2.1.67}$$

所以这个关联振幅的模在所有的时刻都是 1——对于一个定态，这并不奇怪. 在更普遍的情况下，初始右矢被表示为 $\{|a'\rangle\}$ 的叠加，如(2.1.37)式所示，我们有

$$\begin{aligned} C(t) &= \left(\sum_{a'} c_{a'}^{*}\langle a'|\right)\left[\sum_{a''} c_{a''}\exp\left(\frac{-iE_{a''}t}{\hbar}\right)|a''\rangle\right] \\ &= \sum_{a'}|c_{a'}|^2\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right). \end{aligned} \tag{2.1.68}$$

由于我们要对许多具有不同频率的振荡时间相关项求和，对于适当的大的 t 值，就可能会有强烈地相消. 我们预期关联振幅从 $t=0$ 时的 1 开始随着时间减小.

为了更具体地估算（2.1.68）式，让我们假定这个态右矢可以看作是如此多的有类似能量的能量本征右矢的叠加，以至我们可以把它们视为实质上显示的一个准连续谱. 于是可以合理地用积分代替求和

$$\sum_{a'}\to\int dE\rho(E),\quad c_{a'}\to g(E)\Big|_{E\simeq E_{a'}}, \tag{2.1.69}$$

其中 $\rho(E)$ 表示能量本征态的密度. 现在表示式 (2.1.68) 变成

$$C(t)=\int dE\,|g(E)|^2\rho(E)\exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right), \tag{2.1.70}$$

并服从归一化条件

$$\int dE\,|g(E)|^2\rho(E)=1. \tag{2.1.71}$$

在真实的物理情况下，$|g(E)|^2\rho(E)$ 可能会有一个以 $E=E_0$ 为中心、宽度为 ΔE 的峰. 把 (2.1.70) 写成

$$C(t)=\exp\left(\frac{-iE_0t}{\hbar}\right)\int dE\,|g(E)|^2\rho(E)\exp\left[\frac{-i(E-E_0)t}{\hbar}\right], \tag{2.1.72}$$

我们看到，随着 t 变大，除非 $|E-E_0|$ 小到与 $\hbar/t$ 可比，否则被积函数振荡得非常剧烈. 如果使 $|E-E_0|\simeq\hbar/t$ 成立的间隔比 $|g(E)|^2\rho(E)$ 的宽度 ΔE 窄得多，则由于强烈的相消，基本上得不到对 $C(t)$ 的贡献. 关联振幅的模开始明显异于 1 的特征时间由下式给定：

$$t\simeq\frac{\hbar}{\Delta E} \tag{2.1.73}$$

尽管这个方程是针对具有准连续能谱的叠加态求得的，但对于两能级系统也是有意义的. 在前面考虑过的自旋进动问题中，初始处于 $|S_x+\rangle$ 的态右矢在大约 $1/\omega=\hbar/(E_+-E_-)$ 之后开始失去它的身份，这一点从 (2.1.60) 式可明显看到.

总之，作为时间演化的结果，一个物理系统的态右矢在量级为 $\hbar/\Delta E$ 的一段时间间隔之后，不再保持它的原始形式. 在文献中，这一点经常被说成阐明了**时间-能量不确定度关系**

$$\Delta t\Delta E\simeq\hbar. \tag{2.1.74}$$

然而，这个时间-能量不确定度关系与 1.4 节讨论的两个不相容的可观测量间的不确定度关系有着非常不同的本质. 在第 5 章，我们将回到 (2.1.74) 式以便与时间相关微扰论相关联.

2.2　薛定谔绘景和海森伯绘景

幺正算符

在上一节通过考虑影响态右矢的时间演化算符，我们引入了时间演化的概念，这种量子动力学的方法称为**薛定谔绘景**. 另外还有一种量子动力学的公式框架，在那里可观测量而不是态右矢随时间改变，这第二种方法称为**海森伯绘景**. 在讨论这两种方法间区别的细节之前，我们离开本题对幺正算符做一些一般性的论述.

在量子力学中，幺正算符被用于许多不同的目的. 在本书中，我们引入了 (1.5 节) 一个满足幺正性性质的算符. 在那一节中我们关心的是，一个表象中的基右矢如何与一些其他表象中的基右矢联系. 我们假定：当我们转换到一个不同的基右矢集合时，态右矢自身不会改变，尽管在不同的表象中，$|\alpha\rangle$ 展开系数的数值是显然不同的. 随后，我们引入实际上改变了态右矢的两个幺正算符，1.6 节的平移算符和 2.1 节的时间演化算符. 我

们有

$$|\alpha\rangle \to U|\alpha\rangle, \tag{2.2.1}$$

其中 U 可以是 $\mathcal{J}(d\mathbf{x})$ 或者 $\mathcal{U}(t,t_0)$. 这里 $U|\alpha\rangle$ 是一个实际经受了平移或时间演化的物理系统的态右矢.

重要的是要记住，在改变态右矢的幺正变换下，一个态左矢和一个态右矢的内积保持不变：

$$\langle\beta|\alpha\rangle \to \langle\beta|U^\dagger U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle. \tag{2.2.2}$$

利用这些变换只影响态右矢而不影响算符这一事实，我们可以推知 $\langle\beta|X|\alpha\rangle$ 会如何变化：

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle \to (\langle\beta|U^\dagger)\cdot X\cdot(U|\alpha\rangle) = \langle\beta|U^\dagger XU|\alpha\rangle. \tag{2.2.3}$$

我们现在做一个由乘法的结合公理推出的非常简单的数学推断：

$$(\langle\beta|U^\dagger)\cdot X\cdot(U|\alpha\rangle) = \langle\beta|\cdot(U^\dagger XU)\cdot|\alpha\rangle. \tag{2.2.4}$$

在这个推断中有什么物理内涵吗？这个数学等式暗示着幺正变换的两种方法：

方法 1：

$$|\alpha\rangle \to U|\alpha\rangle, \text{而算符不变.} \tag{2.2.5a}$$

方法 2

$$X \to U^\dagger XU, \text{而态右矢不变.} \tag{2.2.5b}$$

在经典物理中我们没有引入态右矢，然而谈到了平移、时间演化等等. 这是可能的，因为这些操作实际上改变的是诸如 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{L}$ 等量，它们都是经典力学的可观测量. 因此，我们猜测，如果我们按照方法 2 去做，与经典物理更紧密的联系就可能建立起来.

这里举一个简单的例子可能会有帮助. 我们回顾无穷小平移算符 $\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$. 1.6 节中阐述的形式是基于方法 1 的，$\mathcal{J}(d\mathbf{x}')$ 只影响态右矢而不影响位置算符：

$$|\alpha\rangle \to \left(1-\frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)|\alpha\rangle,$$
$$\mathbf{x} \to \mathbf{x}. \tag{2.2.6}$$

相比之下，如果按照方法 2，我们得到

$$\begin{aligned} &|\alpha\rangle \to |\alpha\rangle, \\ &\mathbf{x} \to \left(1+\frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\mathbf{x}\left(1-\frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right) \\ &\quad = \mathbf{x}+\left(\frac{i}{\hbar}\right)[\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}', \mathbf{x}] \\ &\quad = \mathbf{x}+d\mathbf{x}'. \end{aligned} \tag{2.2.7}$$

我们把它留给读者作为一个练习，证明这两种方法对 $\mathbf{x}$ 期待值的结果是相同的：

$$\langle\mathbf{x}\rangle \to \langle\mathbf{x}\rangle + \langle d\mathbf{x}'\rangle. \tag{2.2.8}$$

薛定谔绘景和海森伯绘景中的态右矢和可观测量

现在我们回到时间演化算符 $\mathcal{U}(t,t_0)$. 前一节我们考查了态右矢如何随时间演化. 这意味着我们遵照方法 1，当它应用于时间演化时称为**薛定谔绘景**. 此外，我们也可以遵照方法 2，当它应用于时间演化时称为**海森伯绘景**.

在薛定谔绘景中，正如前一节指出的，对应于诸如 x，p_y 和 S_z 等可观测量的算符不随时间变化，而态右矢则随着时间变化. 相比之下，在海森伯绘景中，对应于可观测量的算符随着时间改变；态右矢则固定，可以说是冻结，在 t_0 时刻所处的态. 为简单起见，方

便的做法是令$\mathcal{U}(t,t_0)$中的t_0为零，而改用$\mathcal{U}(t)$，其定义为

$$\mathcal{U}(t,t_0=0)\equiv\mathcal{U}(t)=\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right). \tag{2.2.9}$$

受到方法 2 的（2.2.5b）式的启发，我们定义海森伯绘景的可观测量为

$$A^{(H)}(t)\equiv\mathcal{U}^{\dagger}(t)A^{(S)}\,\mathcal{U}(t), \tag{2.2.10}$$

其中上标 H 和 S 分别表示海森伯和薛定谔. 在 $t=0$ 时，海森伯绘景的可观测量与薛定谔绘景对应的可观测量相重合：

$$A^{(H)}(0)=A^{(S)}. \tag{2.2.11}$$

在 $t=0$ 时，两个绘景的态右矢也相重合；在稍后的 t 时刻，海森伯绘景态右矢被冻结在 $t=0$ 时所处的状态：

$$|\alpha,t_0=0;t\rangle_H=|\alpha,t_0=0\rangle, \tag{2.2.12}$$

与时间无关. 这与薛定谔绘景的态右矢形成巨大的反差，

$$|\alpha,t_0=0;t\rangle_S=\mathcal{U}(t)|\alpha,t_0=0\rangle. \tag{2.2.13}$$

在两个绘景中期待值 $\langle A\rangle$ 显然是相同的

$$\begin{aligned}{}_S\langle\alpha,t_0=0;t|A^{(S)}|\alpha,t_0=0;t\rangle_S&=\langle\alpha,t_0=0|\mathcal{U}^{\dagger}A^{(S)}\,\mathcal{U}|\alpha,t_0=0\rangle\\&={}_H\langle\alpha,t_0=0;t|A^{(H)}(t)|\alpha,t_0=0;t\rangle_H.\end{aligned} \tag{2.2.14}$$

海森伯运动方程

我们现在推导海森伯绘景中的基本运动方程. 假定 $A^{(S)}$ 不显含时间，许多感兴趣的物理情况正是这样的，我们得到［通过把（2.2.10）式求微商］

$$\begin{aligned}\frac{dA^{(H)}}{dt}&=\frac{\partial\mathcal{U}^{\dagger}}{\partial t}A^{(S)}\,\mathcal{U}+\mathcal{U}^{\dagger}A^{(S)}\,\frac{\partial\mathcal{U}}{\partial t}\\&=-\frac{1}{i\hbar}\,\mathcal{U}^{\dagger}H\,\mathcal{U}\mathcal{U}^{\dagger}A^{(S)}\,\mathcal{U}+\frac{1}{i\hbar}\,\mathcal{U}^{\dagger}A^{(S)}\,\mathcal{U}\mathcal{U}^{\dagger}H\,\mathcal{U}\\&=\frac{1}{i\hbar}[A^{(H)},\mathcal{U}^{\dagger}H\,\mathcal{U}],\end{aligned} \tag{2.2.15}$$

其中我们用到了［见（2.1.25）式］

$$\frac{\partial\mathcal{U}}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}H\,\mathcal{U}, \tag{2.2.16a}$$

$$\frac{\partial\mathcal{U}^{\dagger}}{\partial t}=-\frac{1}{i\hbar}\,\mathcal{U}^{\dagger}H. \tag{2.2.16b}$$

由于最初的 H 是在薛定谔绘景中引入的，我们可能会想到依照（2.2.10）式定义

$$H^{(H)}=\mathcal{U}^{\dagger}H\,\mathcal{U} \tag{2.2.17}$$

不过，在（2.2.9）式给出的$\mathcal{U}$的一些初等应用中，$\mathcal{U}$与 H 明显对易；作为结果

$$\mathcal{U}^{\dagger}H\,\mathcal{U}=H, \tag{2.2.18}$$

于是把（2.2.15）式写成

$$\frac{dA^{(H)}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[A^{(H)},H]. \tag{2.2.19}$$

是合理的. 这个方程称为**海森伯运动方程**. 注意，推导该式时我们用到了时间演化算符的性质和 $A^{(H)}$ 的定义式.

将（2.2.19）式与泊松括号形式的经典运动方程相比较是有益的. 在经典物理中，对于一个不显含时间的 q 和 p 的函数 A，我们有（Goldstein 2002,396～397 页）

$$\frac{dA}{dt}=[A,H]_{经典}. \tag{2.2.20}$$

我们再一次看到狄拉克的量子化规则（1.6.47）导致了量子力学中的正确方程. 确实，历史上（2.2.19）式最早是由狄拉克写出来的，他以其谦逊的天性把这个方程称为海森伯运动方程. 然而，值得注意的是不管 $A^{(H)}$ 是否有经典类比，（2.2.19）式都是有意义的. 例如，在海森伯绘景中，自旋算符满足

$$\frac{dS_i^{(H)}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[S_i^{(H)},H], \tag{2.2.21}$$

它可以用来讨论自旋进动，但是这个方程没有任何经典的对应物，因为 S_z 不可能被写成为 q 和 p 的函数. 与其说是坚持狄拉克规则（1.6.47）式，倒不如说我们可以论证，对于具有经典对照物的那些量，正确的经典方程可以借助拟设（ansatz，一种先猜测再试图证明的方法. ——译者注）

$$\frac{[,]}{i\hbar}\to[,]_{经典}. \tag{2.2.22}$$

从相应的量子力学方程得到. 经典力学可以从量子力学推导出来，反过来却不行*.

自由粒子及埃伦费斯特（Ehrenfest）定理

不管我们是在薛定谔绘景还是在海森伯绘景中工作，为了能够使用运动方程，我们必须先要知道，如何构造合适的哈密顿量算符. 对于一个有经典类比的物理系统，我们假设哈密顿量是和经典物理中的哈密顿量有同样的形式，我们只要把经典的 x_i 和 p_i 代之以相应的量子力学算符即可. 采用这一假设，我们可以在经典极限下重新产生正确的经典方程. 每当由于非对易可观测量的存在而出现歧义时，我们可试着要求 H 是厄米的来解决它；例如，我们把经典乘积 xp 的量子力学类比写成 $\frac{1}{2}(xp+px)$. 当所讨论的物理系统没有任何经典类比时，我们只能猜测哈密顿量算符的结构. 我们可尝试各种形式，直至得到一个能使结果与实验观测一致的哈密顿量为止.

实际应用中，经常必须要做的是计算 x_i（或 p_i）与 x_j 及 p_j 的函数的对易关系. 为此，下列的一些公式很有用：

$$[x_i,F(\mathbf{p})]=i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_i} \tag{2.2.23a}$$

和

$$[p_i,G(\mathbf{x})]=-i\hbar\frac{\partial G}{\partial x_i}, \tag{2.2.23b}$$

其中，F 和 G 分别为可用 x_j 和 p_j 的幂展开的函数. 通过重复应用（1.6.50e）式可以很容易证明这两个公式.

现在我们能把海森伯运动方程用于一个质量为 m 的自由粒子. 哈密顿量取经典力学中的形式：

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}=\frac{(p_x^2+p_y^2+p_z^2)}{2m}. \tag{2.2.24}$$

---

* 在本书中，我们遵循下列次序：薛定谔绘景→海森伯绘景→经典. 对于同样问题的一种启发性处理是沿相反的次序，经典→海森伯绘景→薛定谔绘景，见 Finkelstein（1973），68～70 页和 109 页.

我们来看一下可观测量 p_i 和 x_i，它们可被理解为海森伯绘景中的动量与位置算符，尽管我们省略了上标 (H). 因为 p_i 与任何 p_j 的函数都对易，所以我们有

$$\frac{dp_i}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[p_i,H]=0. \tag{2.2.25}$$

于是对于一个自由粒子，动量算符是一个运动常数，它意味着，在任何时刻 $p_i(t)$ 都与 $p_i(0)$ 相同. 通常从海森伯运动方程（2.2.19）可明显看到：只要 $A^{(H)}$ 与哈密顿量对易，$A^{(H)}$ 就是一个运动常数. 其次，

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt}&=\frac{1}{i\hbar}[x_i,H]=\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\sum_{j=1}^{3}p_j^2\right)\\&=\frac{p_i}{m}=\frac{p_i(0)}{m},\end{aligned} \tag{2.2.26}$$

其中我们利用了（2.2.23a）式，于是我们求得解

$$x_i(t)=x_i(0)+\left(\frac{p_i(0)}{m}\right)t, \tag{2.2.27}$$

它与匀速直线运动的经典轨道方程相似. 重要的是要注意，尽管在相等时刻我们有

$$[x_i(0),x_j(0)]=0, \tag{2.2.28}$$

处于不同时刻的 x_i 间的对易关系不为零. 特别是，

$$[x_i(t),x_i(0)]=\left[\frac{p_i(0)t}{m},x_i(0)\right]=\frac{-i\hbar t}{m}. \tag{2.2.29}$$

把不确定度关系（1.4.53）式应用于这个对易子，可得

$$\langle(\Delta x_i)^2\rangle_t\langle(\Delta x_i)^2\rangle_{t=0}\geqslant\frac{\hbar^2t^2}{4m^2}. \tag{2.2.30}$$

此外，这个关系意味着即使粒子的位置在 $t=0$ 时是严格确定的，它的位置随着时间变得越来越不确定，这个结论还可以通过研究波动力学中自由粒子波包随时间演化行为求得.

我们现在把一个位势 $V(\mathbf{x})$ 添加到我们前述的自由粒子哈密顿量中：

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(\mathbf{x}). \tag{2.2.31}$$

这里的 $V(\mathbf{x})$ 被理解为 x，y 和 z 算符的函数. 这时利用（2.2.23b）式我们得到

$$\frac{dp_i}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[p_i,V(\mathbf{x})]=-\frac{\partial}{\partial x_i}V(\mathbf{x}), \tag{2.2.32}$$

另一方面，我们看到因为 x_i 与新添加的 $V(\mathbf{x})$ 项对易，

$$\frac{dx_i}{dt}=\frac{p_i}{m} \tag{2.2.33}$$

仍然成立. 我们可以再一次利用海森伯运动方程推导出：

$$\begin{aligned}\frac{d^2x_i}{dt^2}&=\frac{1}{i\hbar}\left[\frac{dx_i}{dt},H\right]=\frac{1}{i\hbar}\left[\frac{p_i}{m},H\right]\\&=\frac{1}{m}\frac{dp_i}{dt},\end{aligned} \tag{2.2.34}$$

把该式和（2.2.32）式结合在一起，我们最后得到矢量形式的

$$m\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2}=-\nabla V(\mathbf{x}). \tag{2.2.35}$$

这是类似于牛顿第二定律的量子力学公式. 在不随时间变动的海森伯态右矢上对该式的两

边取期待值，我们得到

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\mathbf{x}\rangle=\frac{d\langle\mathbf{p}\rangle}{dt}=-\langle\nabla V(\mathbf{x})\rangle. \tag{2.2.36}$$

该式称为**埃伦费斯特定理**，以P. 埃伦费斯特的名字命名，他在1927年利用波动力学形式推导出这个公式. 当把这个定理写成这种期待值形式时，它的适用性与是否用海森伯绘景还是薛定谔绘景无关，毕竟在这两个绘景中期待值是相同的. 相比之下，仅当我们把算符形式（2.2.35）中的 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{p}$ 当成海森伯绘景的算符时，该式才是有意义的.

我们注意到在（2.2.36）式中，$\hbar$ 完全消失了. 因此，一个波包中心像一个受到 $V(\mathbf{x})$ 支配的经典粒子那样运动就不奇怪了.

基右矢和跃迁振幅

至此，我们一直回避回答基右矢如何随时间演化. 一个通常的错误概念是随着时间的推移，所有的右矢在薛定谔绘景中都是运动的，而在海森伯绘景中都是固定的. 正如我们不久就将阐明的，情况并非如此. 重要之处在于区分态右矢的行为与基右矢的行为.

在1.2节，通过阐述可观测量的本征右矢将被用作基右矢，我们开始着手关于右矢空间的讨论. 对于所定义的本征方程

$$A|a'\rangle=a'|a'\rangle \tag{2.2.37}$$

而言，随着时间会有什么事情发生呢？在薛定谔绘景中，A 不改变，所以，例如，作为该本征方程在 $t=0$ 时刻的解而得到的基右矢，必须保持不变. 与态右矢不一样，在薛定谔绘景中基右矢不变.

在海森伯绘景中，整个情况就完全不同了，在那里我们必须研究的本征值方程是针对时间相关的算符

$$A^{(H)}(t)=\mathcal{U}^{\dagger}A(0)\,\mathcal{U}, \tag{2.2.38}$$

的. 由两个绘景一致时的 $t=0$ 时刻得到的（2.2.37）式，我们推导出

$$\mathcal{U}^{\dagger}A(0)\,\mathcal{U}\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle=a'\,\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle, \tag{2.2.39}$$

它意味着对于 $A^{(H)}$ 的一个本征值方程：

$$A^{(H)}(\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle)=a'(\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle). \tag{2.2.40}$$

如果我们继续坚持使用可观测量的本征右矢构建基右矢的观点，那么在海森伯绘景中 $\{\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle\}$ 必然用作基右矢. 随着时间的推移，用 $|a',t\rangle_H$ 表示的海森伯绘景的基右矢将按照下式运动：

$$|a',t\rangle_H=\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle. \tag{2.2.41}$$

由于是 $\mathcal{U}^{\dagger}$ 而不是 $\mathcal{U}$ 出现在（2.2.41）式中，所以与薛定谔绘景的态右矢相比，所看到的海森伯绘景的基右矢沿相反方向转动. 特别是，$|a',t\rangle_H$ 满足“错误符号的薛定谔方程”

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|a',t\rangle_H=-H|a',t\rangle_H. \tag{2.2.42}$$

至于本征值本身，我们从（2.2.40）式可以看到，它们不随时间改变. 这与1.5节讨论的幺正等价可观测量的定理是一致的. 还要注意，基于海森伯绘景的基右矢与基左矢，$A^{(H)}(t)$ 的展开

$$A^{(H)}(t)=\sum_{a'}|a',t\rangle_H\, a'_H\langle a',t|$$
$$=\sum_{a'}\mathcal{U}^\dagger|a'\rangle a'\langle a'|\mathcal{U} \tag{2.2.43}$$
$$=\mathcal{U}^\dagger A^{(S)}\mathcal{U},$$

表明一切都是完全自洽的，只要海森伯基右矢按照（2.1.41）式变化.

我们看到，一个态右矢借助基右矢的展开系数在两个绘景中是一样的：

$$c_{a'}(t)=\underbrace{\langle a'|}_{\text{基左矢}}\cdot\underbrace{(\mathcal{U}|\alpha,t_0=0\rangle)}_{\text{态右矢}}\text{（薛定谔绘景）} \tag{2.2.44a}$$

$$c_{a'}(t)=\underbrace{(\langle a'|\mathcal{U})}_{\text{基左矢}}\cdot\underbrace{|\alpha,t_0=0\rangle}_{\text{态右矢}}\text{（海森伯绘景）} \tag{2.2.44b}$$

我们可以形象化地说，不管我们是把态右矢反时针方向转动还是把基右矢顺时针转动，态右矢与基右矢之间夹角的余弦总是相同的. 这些考虑同样也适用于显示连续谱的基右矢，特别是，波函数 $\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle$ 可以看作是（1）固定的位置本征左矢与运动的态右矢（薛定谔绘景）的内积，或者是（2）运动的位置本征左矢与固定的态右矢（海森伯绘景）的内积. 在 2.4 节，我们将讨论波函数的时间相关性，在那里，我们将导出著名的薛定谔波动方程.

为了进一步证明两个绘景之间的等价性，我们研究跃迁振幅，它将在 2.6 节起着重要的作用. 假定在 $t=0$ 时制备的一个物理系统处在可观测量 A 的一个本征态上，其本征值为 a'. 在稍后的某个时刻 t 我们可以问：在本征值为 b' 的可观测量 B 的本征态上找到该系统的概率振幅，即所谓的**跃迁振幅**，是什么？这里的 A 与 B 可以是相同的也可以是不同的. 在薛定谔绘景中，t 时刻的态右矢由 $\mathcal{U}|a'\rangle$ 给出，而基右矢 $|a'\rangle$ 和 $|b'\rangle$ 不随时间变化，因此，该跃迁振幅为

$$\underbrace{\langle b'|}_{\text{基左矢}}\cdot\underbrace{(\mathcal{U}|a'\rangle)}_{\text{态右矢}}. \tag{2.2.45}$$

与之相比，在海森伯绘景中态右矢是固定不变的. 这就是说，在所有时刻它都保持为 $|a'\rangle$，但是，基左矢反方向演化. 因此跃迁振幅是：

$$\underbrace{(\langle b'|\mathcal{U})}_{\text{基左矢}}\cdot\underbrace{|a'\rangle}_{\text{态右矢}}. \tag{2.2.46}$$

显然，(2.2.45) 式与 (2.2.46) 式是相同的. 它们都可以写成

$$\langle b'|\mathcal{U}(t,0)|a'\rangle. \tag{2.2.47}$$

从某种意义上讲，这就是从态 $|a'\rangle$ 到态 $|b'\rangle$ 的跃迁振幅.

为了结束这一节，让我们汇总一下薛定谔绘景与海森伯绘景之间的区别. 表 2.1 列出了这一总结.

表 2.1　薛定谔绘景与海森伯绘景的对比

	薛定谔绘景	海森伯绘景
态右矢	运动的：(2.1.5)，(2.1.27)	固定的
可观测量	固定的	运动的：(2.2.10)，(2.2.19)
基右矢	固定的	反向运动的：(2.2.41)，(2.2.42)

2.3 简谐振子

简谐振子是量子力学中最重要的问题之一．它不仅诠释了量子力学的许多基本概念和方法，而且还具有许多实用价值．本质上，任何势阱都可以用一个简谐振子来近似，因此它能描写从分子振动到核结构的各种现象．而且，因为哈密顿量基本上是两个正则共轭变量的平方和，所以也是量子场论中许多问题的重要出发点．

能量本征右矢和能量本征值

利用狄拉克的简洁算符方法开始讨论，其基于玻恩和维纳（N. Wiener）早期工作，求出简谐振子的能量本征右矢和能量本征值．基本的哈密顿量为

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2}, \tag{2.3.1}$$

其中 ω 是经典谐振子的角频率，按照胡克（Hooke）定律它与弦常数 k 的关系为 $\omega=\sqrt{k/m}$．算符 x 和 p 当然是厄米的．方便的做法是定义两个非厄米算符

$$a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{ip}{m\omega}\right),\quad a^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x-\frac{ip}{m\omega}\right), \tag{2.3.2}$$

它们分别称为**湮灭算符**和**产生算符**，其理由不久就会证明．利用正则对易关系，我们很容易得到

$$[a,a^\dagger]=\left(\frac{1}{2\hbar}\right)(-i[x,p]+i[p,x])=1. \tag{2.3.3}$$

我们还定义了粒子数算符

$$N=a^\dagger a. \tag{2.3.4}$$

它显然是厄米的．可直接证明

$$\begin{aligned}a^\dagger a&=\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)\left(x^2+\frac{p^2}{m^2\omega^2}\right)+\left(\frac{i}{2\hbar}\right)[x,p]\\&=\frac{H}{\hbar\omega}-\frac{1}{2},\end{aligned} \tag{2.3.5}$$

于是，我们得到粒子数算符与哈密顿算符之间的一个重要关系：

$$H=\hbar\omega\left(N+\frac{1}{2}\right). \tag{2.3.6}$$

因为 H 只不过是 N 的一个线性函数，所以 N 与 H 可以同时对角化．我们用 N 的本征值 n 标记它的能量本征态，于是有

$$N|n\rangle=n|n\rangle. \tag{2.3.7}$$

稍后我们将证明 n 一定是一个非负整数．因为（2.3.6）式，我们还有

$$H|n\rangle=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle, \tag{2.3.8}$$

它意味着能量本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \tag{2.3.9}$$

为了理解 a，$a^\dagger$ 和 N 的物理意义，我们首先注意到

$$[N,a]=[a^\dagger a,a]=a^\dagger[a,a]+[a^\dagger,a]a=-a, \tag{2.3.10}$$

其中，我们用到了（2.3.3）式. 同样地，我们可以导出

$$[N,a^\dagger]=a^\dagger. \tag{2.3.11}$$

作为结果，我们有

$$Na^\dagger|n\rangle=([N,a^\dagger]+a^\dagger N)|n\rangle=(n+1)a^\dagger|n\rangle \tag{2.3.12a}$$

和

$$Na|n\rangle=([N,a]+aN)|n\rangle=(n-1)a|n\rangle \tag{2.3.12b}$$

这些关系式意味着 $a^\dagger|n\rangle(a|n\rangle)$ 也是 N 的本征值加（减）1 的本征右矢. 因为 n 增加（减少）1 相当于产生（湮灭）一个量子单位的能量 $\hbar\omega$，所以，$a^\dagger(a)$ 的术语为产生算符（湮灭算符）是十分恰当的.

方程（2.3.12b）意味着 $a|n\rangle$ 与 $|n-1\rangle$ 相同，至多差一个常数因子. 我们记为

$$a|n\rangle=c|n-1\rangle, \tag{2.3.13}$$

其中 c 是通过要求 $|n\rangle$ 和 $|n-1\rangle$ 均为归一的时候所确定的一个数值常数. 首先，注意到

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle=|c|^2. \tag{2.3.14}$$

通过注意到 $a^\dagger a$ 只是个粒子数算符，我们能够计算（2.3.14）的左边，故有

$$n=|c|^2. \tag{2.3.15}$$

按照约定，取 c 为的正实数，我们最后得到

$$a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle. \tag{2.3.16}$$

很容易类似地证明

$$a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle. \tag{2.3.17}$$

假定我们持续地把湮灭算符 a 作用于（2.3.16）式的两边

$$\begin{aligned}
a^2|n\rangle&=\sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle,\\
a^3|n\rangle&=\sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle,\\
&\vdots
\end{aligned} \tag{2.3.18}$$

我们可以得到粒子数算符的本征右矢，其本征值 n 越来越小，直到这个序列中断，这是每当从一个正整数 n 开始后将出现的边界. 人们可能争辩，如果我们从一个非整数 n 出发，这个序列将不会中断，它将导致一个负 n 本征值的本征右矢. 然而，我们还有对于 $a|n\rangle$ 模的正定性要求：

$$n=\langle n|N|n\rangle=(\langle n|a^\dagger)\cdot(a|n\rangle)\geqslant 0, \tag{2.3.19}$$

它意味着 n 绝不可能为负！所以，我们得出结论：这个序列必须中断于 $n=0$，而且 n 所允许的值为非负的整数.

由于 n 的最小可能值为零，所以谐振子的基态有

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{2.3.20}$$

我们现在可以相继地把产生算符 $a^\dagger$ 作用在基态 $|0\rangle$ 上. 利用（2.3.17）式，我们求得

$$\begin{aligned}
|1\rangle&=a^\dagger|0\rangle,\\
|2\rangle&=\left(\frac{a^\dagger}{\sqrt{2}}\right)|1\rangle=\left[\frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{2}}\right]|0\rangle,\\
|3\rangle&=\left(\frac{a^\dagger}{\sqrt{3}}\right)|2\rangle=\left[\frac{(a^\dagger)^3}{\sqrt{3!}}\right]|0\rangle,\\
&\vdots
\end{aligned}$$

$$|n\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\right]|0\rangle. \tag{2.3.21}$$

用这种方法，我们成功地构造出 N 和 H 的共同本征态，其能量本征值为

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (n=0,1,2,3,\cdots). \tag{2.3.22}$$

从（2.3.16）和（2.3.17）式以及对 $\{|n\rangle\}$ 的正交性要求，我们求得矩阵元

$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}, \quad \langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}. \tag{2.3.23}$$

利用这些结果以及

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^\dagger), \quad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-a+a^\dagger), \tag{2.3.24}$$

我们推导出算符 x 和 p 的矩阵元：

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}), \tag{2.3.25a}$$

$$\langle n'|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}), \tag{2.3.25b}$$

注意，在我们采用的 N 表象中，x 和 p 都不是对角的. 这并不奇怪，因为就像 a 和 $a^\dagger$ 一样，x 和 p 与 N 不对易.

这种算符方法还可以用于求位置空间的能量波函数. 让我们由定义为

$$a|0\rangle = 0 \tag{2.3.26}$$

的基态开始，在 x 表象中它记为

$$\langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x'|\left(x+\frac{ip}{m\omega}\right)|0\rangle = 0. \tag{2.3.27}$$

回顾（1.7.17）式，我们可以把上式看成基态波函数 $\langle x'|0\rangle$ 满足的一个微分方程：

$$\left(x' + x_0^2\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle = 0, \tag{2.3.28}$$

其中我们引入了

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \tag{2.3.29}$$

它设定了谐振子的长度标度. 我们看到（2.3.28）式归一化的解为

$$\langle x'|0\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\right)\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right]. \tag{2.3.30}$$

我们还可以通过下列计算求得激发态的能量本征函数

$$\langle x'|1\rangle = \langle x'|a^\dagger|0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle,$$

$$\langle x'|2\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\langle x'|(a^\dagger)^2|0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2!}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)^2\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)^2\langle x'|0\rangle, \cdots, \tag{2.3.31}$$

其通式为

$$\langle x'|n\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}\right)\left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}}\right)\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)^n\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right]. \tag{2.3.32}$$

查看 x^2 和 p^2 在基态上的期待值是有帮助的. 首先，注意到

$$x^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)(a^2 + a^{\dagger 2} + a^\dagger a + aa^\dagger). \tag{2.3.33}$$

当我们取 x^2 的期待值时，(2.3.33) 式中只有最后一项有非零的贡献

$$\langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{x_0^2}{2}. \tag{2.3.34}$$

同样地，

$$\langle p^2\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}. \tag{2.3.35}$$

由此得出，动能和势能的期待值分别为

$$\left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\langle H\rangle}{2} \text{ 和} \left\langle \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\langle H\rangle}{2}, \tag{2.3.36}$$

这正像维里（virial）定理所预期的那样. 从 (2.3.25a) 式和 (2.3.25b) 式得出：

$$\langle x\rangle = \langle p\rangle = 0, \tag{2.3.37}$$

它们对于激发态也成立. 因此我们有

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \text{ 和} \langle(\Delta p)^2\rangle = \langle p^2\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}, \tag{2.3.38}$$

而且我们看到不确定度关系以最小不确定度乘积

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}. \tag{2.3.39}$$

的形式被满足. 这并不奇怪，因为基态波函数具有高斯形状. 相比之下，激发态不确定度的乘积更大一些：

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2\hbar^2, \tag{2.3.40}$$

这一点读者可以很容易证明.

谐振子的时间演化

至此，我们还没有讨论谐振子态右矢或者诸如 x 和 p 等可观测量的时间演化. 我们已经做的一切都是假定在某个瞬时，比如 $t=0$，成立；而算符 x，p，a 和 $a^\dagger$ 都被看作是薛定谔绘景的算符（在所有时刻）或者是在 $t=0$ 时的海森伯绘景的算符. 在本节剩下的部分，我们专门在海森伯绘景中工作，它意味着 x，p，a 和 $a^\dagger$ 都是时间相关的，虽然我们没有明显地写成 $x^{(H)}(t)$，等等.

由 (2.2.32) 式和 (2.2.33) 式得知 p 和 x 的海森伯运动方程为

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x \tag{2.3.41a}$$

和

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}. \tag{2.3.41b}$$

这一对耦合微分方程等价于 a 和 $a^\dagger$ 满足的两个无耦合微分方程，即

$$\frac{da}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\frac{p}{m} - i\omega x\right) = -i\omega a \tag{2.3.42a}$$

和

$$\frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger, \tag{2.3.42b}$$

它们的解是

$$a(t)=a(0)\exp(-i\omega t)\text{ 和 }\quad a^{\dagger}(t)=a^{\dagger}(0)\exp(i\omega t).\tag{2.3.43}$$

碰巧的是，正如所必须的那样，这些关系式清楚地表明了，即使是在海森伯绘景，N 和 H 也都是时间无关的算符. 借助于 x 和 p，我们可以把（2.3.43）式改写为

$$\begin{aligned}x(t)+\frac{ip(t)}{m\omega}&=x(0)\exp(-i\omega t)+i\left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\exp(-i\omega t),\\ x(t)-\frac{ip(t)}{m\omega}&=x(0)\exp(i\omega t)-i\left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\exp(i\omega t).\end{aligned}\tag{2.3.44}$$

令两边的厄米和反厄米部分各自相等，我们导出

$$x(t)=x(0)\cos\omega t+\left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\sin\omega t\tag{2.3.45a}$$

和

$$p(t)=-m\omega x(0)\sin\omega t+p(0)\cos\omega t.\tag{2.3.45b}$$

看上去，它们的样子与经典运动方程一样. 我们看到，x 和 p 算符恰如它们经典的相似量一样“振动”.

为了适应教学需要，我们现在给出另一种可选的（2.3.45a）式的推导. 代替求解海森伯运动方程，我们尝试求解

$$x(t)=\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)x(0)\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right).\tag{2.3.46}$$

为此，我们引入一个非常有用的公式

$$\begin{aligned}\exp(iG\lambda)A\exp(-iG\lambda)&=A+i\lambda[G,A]+\left(\frac{i^2\lambda^2}{2!}\right)[G,[G,A]]\\&\quad+\cdots+\left(\frac{i^n\lambda^n}{n!}\right)[G[G,[G,\cdots[G,A]]]\cdots]+\cdots,\end{aligned}\tag{2.3.47}$$

其中，G 是一个厄米算符，λ 是一个实参数. 我们把这个所谓的**贝克-豪斯多夫（Baker-Hausdorff）引理**的证明留作一个习题. 把该式应用于（2.3.46）式，我们求得

$$\begin{aligned}&\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)x(0)\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)\\&=x(0)+\left(\frac{it}{\hbar}\right)[H,x(0)]+\left(\frac{i^2t^2}{2!\hbar^2}\right)[H,[H,x(0)]]+\cdots.\end{aligned}\tag{2.3.48}$$

通过重复使用

$$[H,x(0)]=\frac{-i\hbar p(0)}{m}\tag{2.3.49a}$$

和

$$[H,p(0)]=i\hbar m\omega^2x(0).\tag{2.3.49b}$$

上式右边的每一项都可以简化为 x 或者简化为 p. 于是，

$$\begin{aligned}\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)x(0)\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)&=x(0)+\left[\frac{p(0)}{m}\right]t-\left(\frac{1}{2!}\right)t^2\omega^2x(0)\\&\quad-\left(\frac{1}{3!}\right)\frac{t^3\omega^2p(0)}{m}+\cdots\\&=x(0)\cos\omega t+\left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\sin\omega t,\end{aligned}\tag{2.3.50}$$

它与（2.3.45a）一致.

从（2.3.45a）式和（2.3.45b）式，可能会诱使人们得出结论：$\langle x\rangle$ 和 $\langle p\rangle$ 总是以角频率 ω 振动. 然而，这个推断是不对的. 取任何一个由确定的 n 标记的能量本征态，因为算符 $x(0)$和 $p(0)$使 n 改变 ±1，且 $|n\rangle$ 和 $|n\pm1\rangle$ 是正交的，期待值 $\langle n|x(t)|n\rangle$ 为零. 这一点无疑可从我们早些时候得到的结论（参见第 2.1 节）：即一个可观测量对一个定态所取的期待值不随时间改变得到. 要观测到像经典振子一样的振动，我们必须看一看诸如

$$|\alpha\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle. \tag{2.3.51}$$

这样的能量本征态的叠加态. $x(t)$对于（2.3.51）式的期待值确实振动，这一点读者可以很容易证明.

我们已经看到，一个能量本征态的行为并不像经典振子，就 x 和 p 的振动的期待值而言，不管 n 可能有多大. 逻辑上可以问：我们怎样才能构造一个能量本征态的叠加态，它能最好地模拟经典振子呢？用波动力学的语言讲，我们想要一个这样的波包，它来回地反弹而形状不弥散. 结果表明，由一般具有复本征值 λ 的非厄米湮灭算符 a 的本征值方程

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \tag{2.3.52}$$

定义的相干态的确满足上述的要求. 这个相干态有许多其他不寻常的性质：

1. 当把它表示为能量（或 N）的本征态叠加时

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)|n\rangle, \tag{2.3.53}$$

$|f(n)|^2$对 n 的分布是关于某个平均值$\bar{n}$的泊松型分布

$$|f(n)|^2 = \left(\frac{\bar{n}^n}{n!}\right)\exp(-\bar{n}). \tag{2.3.54}$$

[平均值为 μ 的、整数阶 n 的泊松分布为 $P_n(\mu) = e^{-\mu}\mu^n/n!$]

2. 它可以通过把振子基态平移某个有限距离得到.

3. 它在所有的时间都满足最小不确定度乘积关系.

由 R. 格劳伯（R. Glauber）开创的相干态的系统研究是非常有意义的，我们极力推荐读者去做本章末尾关于这一主题的习题 2.19*.

2.4　薛定谔波动方程

时间相关的波函数

我们现在转向薛定谔绘景，并考查在 x 表象中 $|\alpha,t_0;t\rangle$ 的时间演化. 换句话说，我们的任务是研究波函数

$$\psi(\mathbf{x}',t) = \langle \mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle \tag{2.4.1}$$

作为时间函数的行为，其中 $|\alpha,t_0;t\rangle$ 是薛定谔绘景中时刻 t 的一个态右矢，而 $\langle \mathbf{x}'|$是一个时间无关的本征值为 $\mathbf{x}'$的位置本征左矢. 取哈密顿算符为

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}). \tag{2.4.2}$$

---

* 对于激光物理的应用，请参见 Sargent，Scully 和 Lamb（1974）以及 Loudon（2000）. 还请参看本书 7.6 节末尾关于压缩光的讨论.

位势 $V(\mathbf{x})$ 是一个厄米算符. 在 $\mathbf{x}$ 表象我们有

$$\langle \mathbf{x}''|V(\mathbf{x})|\mathbf{x}'\rangle = V(\mathbf{x}')\delta^3(\mathbf{x}'-\mathbf{x}''), \tag{2.4.3}$$

在这个意义上它还是定域的，其中 $V(\mathbf{x}')$ 是 $\mathbf{x}'$ 的一个实函数. 在本书稍后一些，我们将考虑更复杂的哈密顿量——一个时间相关的 $V(\mathbf{x},t)$；一个非定域但可分离的势，其中把 (2.4.3) 式的右边用 $\upsilon_1(\mathbf{x}'')\upsilon_2(\mathbf{x}')$ 代替；一个形为 $\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$ 的动量相关相互作用，其中的 $\mathbf{A}$ 是电动力学中的矢量势，等等.

现在我们推导薛定谔时间相关波动方程. 首先在 $\mathbf{x}$ 表象写出态右矢的薛定谔方程 (2.1.27)：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle = \langle \mathbf{x}'|H|\alpha,t_0;t\rangle, \tag{2.4.4}$$

其中我们用到了在薛定谔绘景中位置本征左矢不随时间变化的事实. 利用 (1.7.20) 式，我们可以把动能对 (2.4.4) 式右边的贡献写成

$$\left\langle \mathbf{x}'\left|\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right|\alpha,t_0;t\right\rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2\langle \mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle. \tag{2.4.5}$$

至于 $V(\mathbf{x})$，我们只利用

$$\langle \mathbf{x}'|V(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}'|V(\mathbf{x}'), \tag{2.4.6}$$

其中 $V(\mathbf{x}')$ 不再是一个算符. 把所有的这一切结合在一起，我们推出

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2\langle \mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle + V(\mathbf{x}')\langle \mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle, \tag{2.4.7}$$

我们认出它就是著名的薛定谔时间相关波动方程，通常写作

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}',t) = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2\psi(\mathbf{x}',t) + V(\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}',t). \tag{2.4.8}$$

在波动方程 (2.4.8) 式的基础上建立的量子力学称为**波动力学**. 这个方程事实上是许多量子力学教科书的出发点. 然而，在我们的形式框架中，它只是当取哈密顿算符为 (2.4.2) 式时，在 x 基中明显写出的态右矢的薛定谔方程.

时间无关波动方程

我们现在推导能量本征函数满足的偏微分方程. 在 2.1 节我们证明了定态的时间依赖关系由 $\exp(-iE_{a'}t/\hbar)$ 给出. 这使我们能够把它的波函数写成

$$\langle \mathbf{x}'|a',t_0;t\rangle = \langle \mathbf{x}'|a'\rangle\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right), \tag{2.4.9}$$

该式可以理解为，初始时制备该系统处于 A 和 H 的共同本征态，其本征值分别为 a' 和 $E_{a'}$. 现在让我们把 (2.4.9) 式代入时间相关的薛定谔方程 (2.4.7). 之后我们有

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2\langle \mathbf{x}'|a'\rangle + V(\mathbf{x}')\langle \mathbf{x}'|a'\rangle = E_{a'}\langle \mathbf{x}'|a'\rangle. \tag{2.4.10}$$

这是一个能量本征值为 $E_{a'}$ 的能量本征函数 $\langle \mathbf{x}'|a'\rangle$ 所满足的偏微分方程. 实际上，在波动力学中，哈密顿量算符是由 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{p}$ 的函数给出的，就像 (2.4.2) 式那样，没有必要显式地表明与 H 对易的可观测量 A，因为我们总可以把 A 选成是与 H 本身一致的、可观测量 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{p}$ 的函数. 因此，我们可以不再提到 a'，而简单地把 (2.4.10) 式写成能量本征函数 $u_E(\mathbf{x}')$ 满足的偏微分方程

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2 u_E(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}')u_E(\mathbf{x}') = Eu_E(\mathbf{x}'). \tag{2.4.11}$$

这就是薛定谔的时间无关波动方程——发表在四篇不朽文章的第一篇中，这些文章全部都是在 1926 年上半年写成的，它奠定了波动力学的基础. 在同一篇文章中，他还直接使用 (2.4.11) 式推导了氢原子的能谱.

为了求解 (2.4.11) 式，必须强加一些边界条件. 假定我们寻求具有

$$E < \lim_{|\mathbf{x}'|\to\infty} V(\mathbf{x}'), \tag{2.4.12}$$

性质的 (2.4.11) 式的解，其中该不等式对沿任何方向的 $|\mathbf{x}'|\to\infty$ 都成立. 在这种情况下将被使用的适宜的边界条件为

$$u_E(\mathbf{x}') \to 0 \quad \text{当} \quad |\mathbf{x}'|\to\infty. \tag{2.4.13}$$

物理上，这意味着粒子被束缚或被禁闭在一个有限的空间区域内. 我们从偏微分方程理论知道，在边界条件 (2.4.13) 式约束下，(2.4.11) 式只对 E 值的分立集合有非平凡的解. 在这个意义上，时间无关的薛定谔方程 (2.4.11) 产生了能级的量子化*. 一旦写出了偏微分方程 (2.4.11) 式，则求解微观物理系统能级的问题就像求解振动的弦或膜的特征频率一样简单. 在这两种情况下，我们都是求解数学物理的边值问题.

在这里讲一点量子力学史方面简短的题外话正是时候. 偏微分方程理论中精确可解的本征值问题也可以利用矩阵方法处理，这件事实在二十世纪头二十五年数学家就已经知道了. 此外，理论物理学家们如玻恩，经常求教当时的一些大数学家，特别是希尔伯特和外尔 (H. Weyl). 然而，当矩阵力学于 1925 年夏诞生时，并没有理论物理学家或数学家利用偏微分方程语言重新表述它. 在海森伯的先驱性文章发表之后六个月，薛定谔创立了波动力学. 然而，仔细地查阅他的文章显示，他完全没有受到早些时候的海森伯、玻恩和约当工作的影响. 相反，导致薛定谔表述波动力学的推理思路植根于光学与力学之间的哈密顿类比（这一点我们稍后还要评述）和德布罗意的粒子-波假设. 一旦波动力学用公式表述之后，许多人，包括薛定谔本人，都证明了波动力学与矩阵力学之间的等价性.

我们假定，本书的读者具有求解时间相关和时间无关波动方程的一些经验. 他或她应当熟悉一个高斯波包在不存在力的区域内的时间演化；应当会求解包含一个方势垒的一维透射-反射问题，等等；应当见到过推导出的时间无关波动方程的简单解——一个箱子中的粒子、一个方势阱中的粒子、简谐振子、氢原子等等；还应当熟悉能量本征函数和能量本征值的某些普遍性质，诸如 (1) 能级显示分立谱还是连续谱依赖于 (2.4.12) 式是否被满足，以及 (2) 一维的能量本征函数是正弦曲线还是衰减的性质依赖于 $E-V(\mathbf{x}')$ 是正还是负.

在本书中，我们完全没有包括这些比较初等的论题及解. 其中的一些内容（例如，谐振子与氢原子）虽然也有讨论，但是是在比通常大学课程见到的多少高一些的数学水平上. 不管怎么样，在附录 B 中还是概述了一些薛定谔方程的基本解.

波函数的解释

我们现在转而讨论波函数的物理解释. 在 1.7 节，我们评述了 $|\psi|^2$ 的概率解释，这种解释源于把 $\langle \mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle$ 看作是 $|\alpha,t_0;t\rangle$ 用位置本征右矢 $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ 展开的系数. 因此，由

$$\rho(\mathbf{x}',t) = |\psi(\mathbf{x}',t)|^2 = |\langle \mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle|^2 \tag{2.4.14}$$

---

* 薛定谔发表 (2.4.11) 式的文章有一个合适的标题 *Quantisierung als Eigenwertproblem*（英文译文为 *Quantization as an Eigenvalue Problem*，中文译文为《作为一个本征值问题的量子化》——译者注）.

定义的量 $\rho(\mathbf{x}',t)$，在波动力学中被视为**概率密度**. 具体地说，当我们使用一个探测器确认在 $\mathbf{x}'$ 附近一个小体积元 d^3x' 内存在粒子时，在 t 时刻记录到一个肯定结果的概率由 $\rho(\mathbf{x}',t)\ d^3x'$ 给出.

在本节余下的部分中，因为位置算符将不出现，我们用 $\mathbf{x}$ 取代 $\mathbf{x}'$. 利用薛定谔时间相关波动方程，可以直接推导出连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{j}=0, \tag{2.4.15}$$

其中 $\rho(\mathbf{x},t)$ 像前面一样代表 $|\psi|^2$，而 $\mathbf{j}(\mathbf{x},t)$ 称作**概率流**，由下式给出

$$\begin{aligned}\mathbf{j}(\mathbf{x},t)&=-\left(\frac{i\hbar}{2m}\right)[\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi]\\&=\left(\frac{\hbar}{m}\right)\mathrm{Im}(\psi^*\nabla\psi).\end{aligned} \tag{2.4.16}$$

位势 V 的实数性（或算符 V 的厄米性）在我们求得上述结果时起着决定性作用. 相反，一个复的位势可唯象地解释一个粒子的消失，这样的位势经常用在核反应中，在那里入射的粒子被原子核吸收了.

我们可以凭直觉预期概率流 $\mathbf{j}$ 与动量相关. 对于全空间积分的 $\mathbf{j}$ 来说，情况的确如此. 由（2.4.16）式我们求得

$$\int d^3x\mathbf{j}(\mathbf{x},t)=\frac{\langle\mathbf{p}\rangle_t}{m}, \tag{2.4.17}$$

其中 $\langle\mathbf{p}\rangle_t$ 是动量算符在 t 时刻的期待值.

方程（2.4.15）让人想起流体力学中的连续性方程，它描述流体在一个无源、无漏区域的流体动力学流动的特征. 的确，历史上薛定谔是最早的一个把 $|\psi|^2$ 解释为实际物质密度，或者把 $e|\psi|^2$ 解释为实际电荷密度的人. 如果我们采纳了这样的观点，就会把我们引导到某些奇异的结果.

位置测量的一种典型的争论或许会如下所示. 原子的一个电子被看作是连续分布的物质充满在原子核周围一个有限的区域；然而，当进行了一次测量，肯定电子处于某个特殊点上，这种连续分布的物质突然收缩为一个没有空间延展的类点粒子. 把 $|\psi|^2$ 作为概率密度的较为满意的统计解释首先是由玻恩提出来的.

为了理解波函数的物理意义，把它写成

$$\psi(\mathbf{x},t)=\sqrt{\rho(\mathbf{x},t)}\exp\left[\frac{iS(\mathbf{x},t)}{\hbar}\right], \tag{2.4.18}$$

其中 S 为实的并且 $\rho>0$，对于 $\mathbf{x}$ 和 t 的任何一个复函数总可以这么写. ρ 的意义已经给出了. S 的物理意义又是什么呢？注意到

$$\psi^*\nabla\psi=\sqrt{\rho}\,\nabla(\sqrt{\rho})+\left(\frac{i}{\hbar}\right)\rho\nabla S, \tag{2.4.19}$$

我们可以把概率流写成［见(2.4.16)式］

$$\mathbf{j}=\frac{\rho\nabla S}{m}. \tag{2.4.20}$$

我们现在看到这个波函数具有比把 $|\psi|^2$ 视为概率密度更多的东西，相位 S 的梯度包含一个极为重要的信息. 从（2.4.20）式可见，波函数相位的空间变化描绘了概率流的特征，相位变化越剧烈，概率流越强. 在某点 $\mathbf{x}$ 处 $\mathbf{j}$ 的方向可以看作是通过该点的等相位面的法线. 在特别简单的平面波（动量本征函数）的例子中

$$\psi(\mathbf{x},t) \propto \exp\left(\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar} - \frac{iEt}{\hbar}\right), \tag{2.4.21}$$

其中 $\mathbf{p}$ 代表动量算符的本征值. 所有的结果都是显然的，因为

$$\nabla S = \mathbf{p}. \tag{2.4.22}$$

更一般地讲，使人感兴趣的是把 $\nabla S/m$ 看作是某种“速度”，

$$\text{“}\mathbf{v}\text{”} = \frac{\nabla S}{m}, \tag{2.4.23}$$

而且把连续性方程（2.4.15）写成

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\text{“}\mathbf{v}\text{”}) = 0, \tag{2.4.24}$$

它恰与流体动力学相同. 然而，我们愿意提醒读者不要太拘泥于字面上把 $\mathbf{j}$ 解释为 ρ 乘以在空间每一点定义的速度，因为位置与速度的同时精确测量必然会破坏不确定度原理.

经典极限

我们现在讨论波动力学的经典极限. 首先，我们把写成（2.4.18）式形式的 ψ 代入到时间相关波动方程的两边. 直接求微商导致

$$\begin{aligned} &-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \\ &\times\left[\nabla^2\sqrt{\rho} + \left(\frac{2i}{\hbar}\right)(\nabla\sqrt{\rho})\cdot(\nabla S) - \left(\frac{1}{\hbar^2}\right)\sqrt{\rho}\,|\nabla S|^2 + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\sqrt{\rho}\,\nabla^2 S\right] + \sqrt{\rho}V \\ &= i\hbar\left[\frac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial t} + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\sqrt{\rho}\,\frac{\partial S}{\partial t}\right]. \end{aligned} \tag{2.4.25}$$

至此一切都是精确的. 现在让我们假定，在某种意义上，可以把 $\hbar$ 看成一个小量. 这种近似的精确物理意义现在还不明显，稍后我们还要回到这一点，但是让我们假定

$$\hbar|\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2, \tag{2.4.26}$$

等等. 接着我们可以收集（2.4.25）式中那些不显含 $\hbar$ 的项，得到一个 S 满足的非线性偏微分方程：

$$\frac{1}{2m}|\nabla S(\mathbf{x},t)|^2 + V(\mathbf{x}) + \frac{\partial S(\mathbf{x},t)}{\partial t} = 0. \tag{2.4.27}$$

我们看到该式正是最早于 1836 年写出的经典力学中的**哈密顿-雅可比（Hamilton-Jacobi）方程**，其中 $S(\mathbf{x},t)$ 是哈密顿主函数. 因此，在 $\hbar\to 0$ 的极限下，经典力学被包含在薛定谔波动力学中就不奇怪了. 我们有一个关于波函数相位的半经典解释：$\hbar$ 乘以相位等于哈密顿主函数，只要 $\hbar$ 可被视为一个小量.

现在让我们来看看一个有着时间依赖关系 $\exp(-iEt/\hbar)$ 的定态. 这种时间依赖关系可由这样的事实预料到，即对于具有一个恒定哈密顿量的经典系统，哈密顿量主函数是可分离的：

$$S(x,t) = W(x) - Et, \tag{2.4.28}$$

其中 $W(x)$ 称为**哈密顿特征函数**（Goldstein 2002，440～444 页）. 随着时间推移，S 为常数的曲面向前推移，很像波动光学中相位恒定的曲面——波前的推移. 经典哈密顿-雅可比理论中的动量由下式给出

$$\mathbf{P}_{\text{经典}} = \nabla S = \nabla W, \tag{2.4.29}$$

它与前面我们已确认 $\nabla S/m$ 为某类速度是一致的. 在经典力学中，速度矢量是粒子轨道的切线，因此作为结果，我们通过连续地追踪速度矢量的方向就可以追踪这条轨道. 粒子的轨道就像几何光学中的一条光线，因为追踪轨道的 ∇S 垂直于由常数 S 定义的波前. 在这个意义上，几何光学对波动光学，就如同经典力学对波动力学.

事后来看，人们或许感到好奇，为什么这种光-力学类比在十九世纪没被充分探讨. 理由就在于没有任何动机把哈密顿主函数看作某个传播波的相位. 直到二十世纪二十年代，一个物质粒子的波动性才变得清晰. 此外，由于量纲的原因必须进入（2.4.18）式的作用量的基本单位 $\hbar$ 在十九世纪的物理学中也还没有出现.

2.5 薛定谔波动方程的基本解

对特殊选择的势函数 $V(\mathbf{x})$，看一下（2.4.11）式的相对基本的解既有指导意义也是有用的. 在这一节，我们选择了一些例子，它们诠释了当代物理学，并且/或者将对本书以后的几章是有用的.

三维自由粒子

$V(\mathbf{x})=0$ 的情况有重要意义. 这里我们将在三维情况下利用笛卡儿坐标考虑薛定谔方程的解. 球坐标中的解将留到下一章阐述角动量的处理时给出. 方程（2.4.11）式变成

$$\nabla^2 u_E(\mathbf{x}) = -\frac{2mE}{\hbar^2}u_E(\mathbf{x}). \tag{2.5.1}$$

定义一个矢量 $\mathbf{k}$，使

$$\mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2}, \tag{2.5.2}$$

这就是说，$\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$. 利用所谓的“变量分离”技术，微分方程（2.5.1）可以很容易求解. 取

$$u_E(\mathbf{x}) = u_x(x)u_y(y)u_z(z), \tag{2.5.3}$$

我们得到

$$\left[\frac{1}{u_x}\frac{d^2u_x}{dx^2}+k_x^2\right]+\left[\frac{1}{u_y}\frac{d^2u_y}{dy^2}+k_y^2\right]+\left[\frac{1}{u_z}\frac{d^2u_z}{dz^2}+k_z^2\right]=0 \tag{2.5.4}$$

这导致三个单独的平面波解：$u_w(w)=c_w e^{ik_w w}$，其中 $w=x$，y，z. 注意对于 $\pm k_w$ 值，人们得到相同的能量 E.

把这些解收集起来并与归一常数组合在一起，我们得到

$$u_E(\mathbf{x}) = c_x c_y c_z e^{ik_x x+ik_y y+ik_z z} = Ce^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}. \tag{2.5.5}$$

归一常数 C 呈现出通常遇到的困难，我们一般利用 δ 函数的归一条件来进行处理. 然而，在很多情况下，最方便的是利用一个“大箱子”归一化，在那里整个空间被包含在边长为 L 的立方体中. 我们在箱子上强加周期边界条件，从而求得一个有限的归一常数 C. 对任何实际的计算，我们只要在计算末尾让箱子的大小 $L\to\infty$即可.

强加了条件 $u_x(x+L)=u_x(x)$，我们就有 $k_xL=2\pi n_x$，其中 n_x 是整数. 这就是说，

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L}n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L}n_z, \tag{2.5.6}$$

而归一化的判据变成

$$1=\int_0^L dx\int_0^L dy\int_0^L dz u_E^*(\mathbf{x})u_E(\mathbf{x})=L^3|C|^2, \tag{2.5.7}$$

在这种情况下，$C=1/L^{3/2}$ 而

$$u_E(\mathbf{x})=\frac{1}{L^{3/2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}. \tag{2.5.8}$$

能量的本征值是

$$E=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}=\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2(n_x^2+n_y^2+n_z^2). \tag{2.5.9}$$

我们早先提到过的六重简并对应于（$\pm n_x,\pm n_y,\pm n_z$）的六种组合，但是实际上简并度可能要大得多，因为，在某些情况下，存在着 n_x,n_y 和 n_z 的各种组合，它们都能给出相同的 E. 事实上，在 L 非常大的（实际的）极限下，可能会有大量的 N 的状态，能量都在 E 到 $E+dE$ 之间. 这个“态密度” dN/dE 对含有自由粒子过程的计算是一个重要的量. 例如，请参看 5.8 节中的光电效应的讨论.

为了计算态密度，设想 $\mathbf{k}$ 空间中的一个球壳，其半径为 $|\mathbf{k}|=2\pi|\mathbf{n}|/L$，厚度为 $d|\mathbf{k}|=2\pi d|\mathbf{n}|/L$. 在这个球壳内的所有的态都具有能量 $E=\hbar^2\mathbf{k}^2/2m$. 在这个球壳内态的数目 dN 为 $4\pi\mathbf{n}^2d|\mathbf{n}|$. 因此

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dE}&=\frac{4\pi\mathbf{n}^2d|\mathbf{n}|}{\hbar^2|\mathbf{k}|d|\mathbf{k}|/m}=\frac{4\pi}{\hbar^2}m\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2|\mathbf{k}|\frac{L}{2\pi}\\&=\frac{m^{3/2}E^{1/2}L^3}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}.\end{aligned} \tag{2.5.10}$$

在一个典型的“真实”计算中，态密度将被乘以某个含有 $u_E^*(\mathbf{x})u_E(\mathbf{x})$ 的概率. 在这种情况下，因子 L^3 将被明显地消掉了，因此极限 $L\to\infty$ 就没有意义了. 这种“大箱子”归一化也产生了概率流的正确答案. 用这个归一化重写（2.4.21）式，我们有

$$\psi(\mathbf{x},t)=\frac{1}{L^{3/2}}\exp\left(\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}-\frac{iEt}{\hbar}\right), \tag{2.5.11}$$

在这种情况下我们发现

$$\mathbf{j}(\mathbf{x},t)=\frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}(\psi^*\nabla\psi)=\frac{\hbar\mathbf{k}}{m}\frac{1}{L^3}=\mathbf{v}\rho, \tag{2.5.12}$$

其中 $\rho=1/L^3$ 的确是概率密度.

简谐振子

在 2.3 节我们看到了 $V(x)=m\omega^2x^2/2$ 情况的一个漂亮的解，它给出了能量本征值、本征态和波函数. 这里，我们演示一种不同的方法求解这个微分方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u_E(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2u_E(x)=Eu_E(x). \tag{2.5.13}$$

我们的方法将引入*生成函数*的概念，这是一个在许多微分本征值问题的处理中见到的普遍有用的技术.

首先，将（2.5.13）式用一个无量纲的位置 $y\equiv x/x_0$ 做变量变换，其中 $x_0\equiv\sqrt{\hbar/m\omega}$. 再引进一个无量纲的能量变量 $\epsilon\equiv 2E/\hbar\omega$. 因此，我们需要求解的微分方程变成

$$\frac{d^2}{dy^2}u(y)+(\varepsilon-y^2)u(y)=0. \tag{2.5.14}$$

对于 $y\to\pm\infty$，解必须趋向于零；否则波函数不是可归一的，因而是非物理的. 微分方程 $w''(y)-y^2w(y)=0$ 有解 $w(y)\propto\exp(\pm y^2/2)$，所以我们不得不选负号. 然后，通过取

$$u(y)=h(y)e^{-y^2/2}, \tag{2.5.15}$$

"消除"波函数的渐近行为，其中，函数 $h(y)$ 满足微分方程

$$\frac{d^2h}{dy^2}-2y\frac{dh}{dy}+(\varepsilon-1)h(y)=0. \tag{2.5.16}$$

到此为止，我们一直遵循简谐振子的传统解法，它在很多教科书中都可以找到. 典型的做法是，人们现在会寻找 $h(y)$ 的级数解，而且发现，仅当这个级数中断，一个可归一的解才是可能的. （事实上，在本书中我们对三维各向同性谐振子使用了这种方法. 参见3.7节）人们通过强加 $\varepsilon-1$ 是非负偶整数 $2n$，$n=0$，1，2，…的条件迫使它中断. 然后，使用得到的多项式 $h_n(y)$ 写出这个解. 当然，$\varepsilon-1=2n$ 等价于 $E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，即量子化关系（2.3.22）式.

让我们采用一种不同的方法. 考虑由"生成函数"$g(x,t)$ 通过

$$g(x,t)\equiv e^{-t^2+2tx} \tag{2.5.17a}$$

$$\equiv\sum_{n=0}^{\infty}H_n(x)\frac{t^n}{n!}. \tag{2.5.17b}$$

定义的"厄米（Hermite）多项式"$H_n(x)$. $H_n(x)$ 的某些性质显而易见. 例如，$H_0(x)=1$. 再有，因为

$$g(0,t)=e^{-t^2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}t^{2n}, \tag{2.5.18}$$

显然，若 n 为奇数，则 $H_n(0)=0$，因为这个级数仅含有 t 的偶次幂. 另一方面，如果限于偶数值的 n，则有

$$g(0,t)=e^{-t^2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^{(n/2)}}{(n/2)!}t^n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^{(n/2)}}{(n/2)!}\frac{n!}{n!}t^n \tag{2.5.19}$$

所以 $H_n(0)=(-1)^{n/2}n!/(n/2)!$. 并且，因为 $g(-x,t)$ 仅反转 t 的奇次幂项的符号，故 $H_n(-x)=(-1)^nH_n(x)$.

我们可以取 $g(x,t)$ 的微商，并使用在它们与它们的微商之间的递推关系来构建厄米多项式. 这个技巧就是，我们可以对生成函数的解析形式（2.5.17a）式或级数形式（2.5.17b）式求微商，然后比较所得的结果. 例如，如果我们对（2.5.17a）式求微商，则

$$\frac{\partial g}{\partial x}=2tg(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}2H_n(x)\frac{t^{n+1}}{n!}=\sum_{n=0}^{\infty}2(n+1)H_n(x)\frac{t^{n+1}}{(n+1)!}, \tag{2.5.20}$$

其中，在取微商之后，我们插入了生成函数的级数定义. 另一方面，我们可以直接取（2.5.17b）式的微商，在这种情况下有

$$\frac{\partial g}{\partial x}=\sum_{n=0}^{\infty}H'_n(x)\frac{t^n}{n!}. \tag{2.5.21}$$

比较（2.5.20）式与（2.5.21）式给出

$$H'_n(x)=2nH_{n-1}(x). \tag{2.5.22}$$

以下是我们构建厄米多项式所需的足够的信息

$$H_0(x) = 1$$

于是 $H_1'(x) = 2$，　　因此　$H_1(x) = 2x$

于是 $H_2'(x) = 8x$，　　因此　$H_2(x) = 4x^2 - 2$

于是 $H_3'(x) = 24x^2 - 12$，因此　$H_3(x) = 8x^3 - 12x$

$$\vdots$$

至此为止，这只是一个奇妙的数学练习. 要看到为什么它与简谐振子有关，考虑生成函数对 t 的微商. 如果我们从 (2.5.17a) 式开始，则

$$\begin{aligned}\frac{\partial g}{\partial t} &= -2tg(x,t) + 2xg(x,t)\\ &= -\sum_{n=0}^{\infty} 2H_n(x)\frac{t^{n+1}}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty} 2xH_n(x)\frac{t^n}{n!} \qquad (2.5.23)\\ &= -\sum_{n=0}^{\infty} 2nH_{n-1}(x)\frac{t^n}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty} 2xH_n(x)\frac{t^n}{n!}.\end{aligned}$$

或者，如果我们微商(2.5.17b)式，则我们有

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} nH_n(x)\frac{t^{n-1}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_{n+1}(x)\frac{t^n}{n!}. \qquad (2.5.24)$$

把(2.5.23)式与(2.5.24)式相比较，给出递推关系

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \qquad (2.5.25)$$

我们把它与(2.5.22)组合在一起，得到

$$\begin{aligned}H''_n(x) &= 2n \cdot 2(n-1)H_{n-2}(x)\\ &= 2n[2xH_{n-1}(x) - H_n(x)] \qquad (2.5.26)\\ &= 2xH'_n(x) - 2nH_n(x).\end{aligned}$$

换句话说，厄米多项式满足微分方程

$$H''_n(x) - 2xH'_n(x) + 2nH_n(x) = 0, \qquad (2.5.27)$$

其中，n 是个非负整数. 然而，因为 $\varepsilon - 1 = 2n$，所以该式与写成 (2.5.16) 式形式的薛定谔方程是相同的. 这就是说，简谐振子的波函数由下式给出

$$u_n(x) = c_n H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)e^{-m\omega x^2/2\hbar} \qquad (2.5.28)$$

至多差一个归一化常数 c_n. 这个常数可以从正交关系

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx H_n(x)H_m(x)e^{-x^2} = \pi^{1/2}2^n n!\delta_{mn}, \qquad (2.5.29)$$

确定，该式很容易利用生成函数证明. 请看本章末尾的习题 2.21.

生成函数具有实用性，它远超出我们这里的有限应用范围. 尤其是，很多源于求解不同位势的薛定谔方程的正交多项式都可以从生成函数推导出来. 例如，第 3 章的习题 3.22. 我们鼓励有兴趣的读者可从许多优秀的数学物理教科书中任选一本继续研习.

线性势

也许能想到的第一个具有束缚态的势能函数是线性势，即

$$V(x) = k|x|, \qquad (2.5.30)$$

其中 k 是一个任意的正的常数. 给定一个总能量 E，这个势在 $x=a$ 处有一个经典转折点，

在那里 $E=ka$. 这一点对理解一个质量为 m 被该势束缚的粒子的量子行为十分重要.

薛定谔方程变成

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_E}{dx^2}+k|x|u_E(x)=Eu_E(x). \tag{2.5.31}$$

把注意力限制在 $x\geqslant 0$ 的区域处理绝对值是最容易的. 我们之所以可以这样做是因为 $V(-x)=V(x)$，因此存在两类解，即 $u_E(-x)=\pm u_E(x)$. 在任何一种情况下，我们都需要在 $x\to\infty$ 时，$u_E(x)$ 趋于零. 若 $u_E(-x)=-u_E(x)$，则需要 $u_E(0)=0$. 另一方面，若 $u_E(-x)=+u_E(x)$，则有 $u'_E(0)=0$，因为 $u_E(\epsilon)-u_E(-\epsilon)\equiv 0$，甚至当 $\epsilon\to 0$ 时也成立. （正如我们将在第4章讨论的，我们把这些解称为具有“奇”和“偶”宇称的解.）

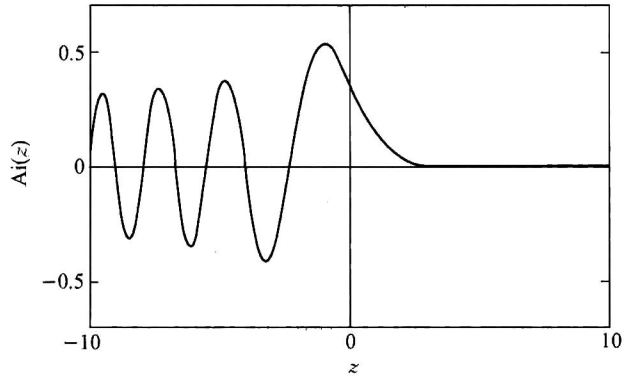


图 2.3 艾里函数

基于适当的长度与能量的标度，我们再次用无量纲变量把微分方程写出来. 在这种情况下，无量纲长度标度为 $x_0=(\hbar^2/mk)^{1/3}$ 且无量纲能量标度为 $E_0=kx_0=(\hbar^2k^2/m)^{1/3}$. 定义 $y\equiv x/x_0$ 和 $\varepsilon\equiv E/E_0$ 使我们能够把（2.5.31）式改写成

$$\frac{d^2u_E}{dy^2}-2(y-\varepsilon)u_E(y)=0 \quad y\geqslant 0. \tag{2.5.32}$$

注意，当 $x=E/k$——即经典转折点 $x=a$ 时，$y=\varepsilon$. 事实上，定义一个位置平移变量 $z\equiv 2^{1/3}(y-\varepsilon)$，（2.5.32）就变成

$$\frac{d^2u_E}{dz^2}-zu_E(z)=0 \tag{2.5.33}$$

这就是艾里方程，它的解是图2.3中的艾里函数 $\mathrm{Ai}(z)$. 艾里函数具有一个特别的行为，在负宗量值时是振荡的，而在正宗量值时急剧衰减，趋向于零. 当然，这正是我们所期待的波函数的行为，因为 $z=0$ 是经典转折点.

注意，在 $x=0$ 处的边界条件平移到了 $\mathrm{Ai}'(z)$ 或 $\mathrm{Ai}(z)$ 的零点，在那里 $z=-2^{1/3}\varepsilon$. 换句话说，艾里函数或者它的微商的零点确定了量子化的能量. 人们发现，

$$\mathrm{Ai}'(z)=0 \quad \text{对于 } z=-1.019,-3.249,-4.820,\cdots \text{（偶）}, \tag{2.5.34}$$

$$\mathrm{Ai}(z)=0 \quad \text{对于 } z=-2.338,-4.088,-5.521,\cdots \text{（奇）} \tag{2.5.35}$$

例如，基态能量为 $E=(1.019/2^{1/3})(\hbar^2k^2/m)^{1/3}$.

线性势的量子理论处理似乎与真实世界没有什么关系. 然而，结果表明（2.5.30）类型的势事实上在研究称为**夸克偶素**的夸克与反夸克束缚态能谱时具有实际意义. 在那种情

况下，(2.5.30) 式中的 x 被夸克-反夸克分开的距离 r 所代替. 而经验估算的常数 k 是在

$$1\text{GeV/fm} \simeq 1.6\times10^{5}\text{N}, \tag{2.5.36}$$

的邻域，它相应于一个大约 16 吨的引力.

的确，线性势的另一个在真实世界的例子是“弹跳的球”. 人们把 (2.5.30) 式解释为在地板上方高度为 x 处一个质量为 m 的球的势能，且 $k=mg$，其中 g 是来自于重力的局域加速度. 当然，这是一个只限于 $x\geqslant0$ 的势能，因为存在一个无穷大的势垒使球“弹跳”. 从量子力学的观点看，这意味着只允许有奇宇称的解 (2.5.35).

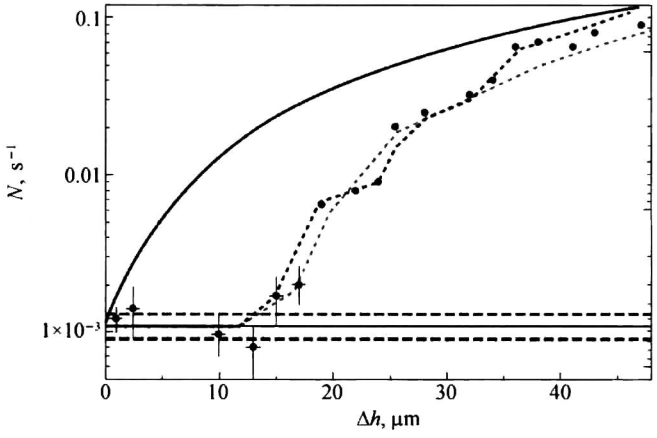


图 2.4　一个弹跳中子的实验观测，取自 V. V. Nesvizhevsky et al.，*Phys*，*Rev.* D **67** (2003) 102002. 实线是基于经典力学数据拟合. 注意纵轴标度为对数的.

弹跳球碰巧是那些可以宏观地观测到量子力学效应的稀有情况中的一个. 其技巧是有一个质量非常小的“球”，它由在法国格勒诺布尔 (Grenoble) 的 (Laue-Langevin) 劳厄-朗之万学院 (ILL) 工作的一个组* 用中子做到了. 对 $m=1.68\times10^{-27}$kg 的中子，特征长度的标度是 $x_0=(\hbar^2/m^2g)^{1/3}=7.40\mu$m. 一个中子能弹起的“允许高度”是 $(2.338/2^{1/3})x_0=14\mu$m、$(4.088/2^{1/3})x_0=24\mu$m、$(5.521/2^{1/3})x_0=32\mu$m 等等. 它们都是些很小 (但用精密设备可以测量) 的且能量很低 (亦称“超冷”) 的中子. 实验结果如图 2.4 所示. 画出的是探测到的中子速率作为狭缝高度的函数，该狭缝只允许超过这个高度的中子穿过. 除非高度至少约为 14μm，否则观测不到任何中子. 在约为 24μm 和约为 32μm 处观测到清晰的突变，极好地符合了量子力学的预言.

WKB (半经典) 近似

求解了线性势问题之后，引进一种称为 WKB 法的重要近似技术是很值得花些时间的，这种方法是以温采 (G. Wentzel)、克拉默斯 (A. Kramers) 和布里渊 (L. Brillouin) 三位提出者的名字命名的**. 这种技术基于利用波长较势能发生改变的典型距离短得多的区域. 这绝不会是在经典转折点附近的情况，但却是可以用线性势的解来连接两边的解的地方.

---

* 见 V. V. Nesvizhevsky et al.，*Phys*，*Rev.* D **67** (2003) 102002，和 V. V. Nesvizhevsky et al.，*Eur. Phys. J.* C **40** (2005) 4792005.

** 类似的技巧更早曾由杰弗里斯 (H. Jeffreys) 使用过；在某些英文书中这一解法也称作 JWKB 解法.

我们再次限于一维，把薛定谔波动方程写成

$$\frac{d^2u_E}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))u_E(x)=0. \tag{2.5.37}$$

定义如下的一些量

$$k(x)\equiv\left[\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\right]^{1/2} \qquad \text{对 } E>V(x) \tag{2.5.38a}$$

和

$$k(x)\equiv -i\kappa(x)\equiv -i\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\right]^{1/2} \quad \text{对 } E<V(x), \tag{2.5.38b}$$

所以（2.5.37）式变成

$$\frac{d^2u_E}{dx^2}+[k(x)]^2u_E(x)=0. \tag{2.5.39}$$

现在，若$V(x)$不随x改变，则$k(x)$就将是个常数，而$u(x)\propto\exp(\pm ikx)$就是（2.5.39）式的解. 因此，如果我们假定$V(x)$只是“缓慢地”随x变化，那时我们很想尝试如下形式的解

$$u_E(x)\equiv\exp[iW(x)/\hbar]. \tag{2.5.40}$$

（包含$\hbar$的原因在这一节的末尾讨论WKB近似方法的物理解释时将变得清晰）. 在这种情况下，（2.5.39）式变成

$$i\hbar\frac{d^2W}{dx^2}-\left(\frac{dW}{dx}\right)^2+\hbar^2[k(x)]^2=0, \tag{2.5.41}$$

它完全等价于薛定谔方程，尽管它被改写成了一种看上去很不舒服的形式. 但不管怎么样，我们将考虑该方程在如下条件下的解，即

$$\hbar\left|\frac{d^2W}{dx^2}\right|\ll\left|\frac{dW}{dx}\right|^2. \tag{2.5.42}$$

这个条件把我们“缓慢变化”位势$V(x)$的概念定量化了，不久我们将返回到这个条件的物理意义.

继续下去，我们使用条件（2.5.42）式与微分方程（2.5.41）一起写出$W(x)$的最低级近似，即

$$W'_0(x)=\pm\hbar k(x), \tag{2.5.43}$$

基于

$$\begin{aligned}\left(\frac{dW_1}{dx}\right)^2&=\hbar^2[k(x)]^2+i\hbar W''_0(x)\\&=\hbar^2[k(x)]^2\pm i\hbar^2k'(x),\end{aligned} \tag{2.5.44}$$

导致$W(x)$的一级近似，其中（2.5.44）式中的第二项比第一项小得多，因此

$$\begin{aligned}W(x)\approx W_1(x)&=\pm\hbar\int^x dx'[k^2(x')\pm ik'(x')]^{1/2}\\&\approx\pm\hbar\int^x dx'k(x')\left[1\pm\frac{i}{2}\frac{k'(x')}{k^2(x')}\right]\\&=\pm\hbar\int^x dx'k(x')+\frac{i}{2}\hbar\ln[k(x)].\end{aligned} \tag{2.5.45}$$

波函数的WKB近似由（2.5.40）式和对于$W(x)$的一级近似（2.5.45）式给出，即

$$u_E(x)\approx\exp[iW(x)/\hbar]=\frac{1}{[k(x)]^{1/2}}\exp\left[\pm i\int^x dx'k(x')\right]. \tag{2.5.46}$$

注意，这个近似具体指定了(±)这两个解是在 $k(x)$ 由 (2.5.38a) 给出的，$E>V(x)$ 区域；或者，$k(x)$ 由 (2.5.38b) 给出的，$E<V(x)$ 区域. 把经典转折点两边的两个解连接起来是下一步任务.

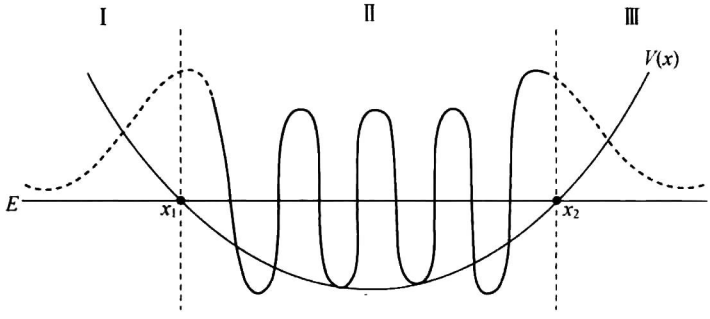


图 2.5　在具有转折点 x_1 和 x_2 的势阱 $V(x)$ 中，波函数 $u_E(x)$ 行为的示意图. 注意在转折点附近与图 2.3 的相似性.

我们不去详细地讨论连接手续，因为在许多书中都讨论过（例如，Schiff 1968，268～276 页，或 Merzbacher 1988，第7章）. 作为替代，对图 2.5 示意性给出的具有转折点 x_1 和 x_2 的势阱，我们只满足于展示对该势阱做的这样一种分析的结果. 波函数必须依照(2.5.46)式变化，其中在区域 II 中的 $k(x)$ 由(2.5.38a)式给定，在区域 I 和 III 中的 $k(x)$ 由 (2.5.38b) 式给定. 而在转折点邻域的解，如图 2.5 中的虚线所示，由艾里函数给出，因为我们假定在这些区域的位势取线性近似. 注意艾里函数渐近依赖关系*是

$$\mathrm{Ai}(z)\to\frac{1}{2\sqrt{\pi}}z^{-1/4}\exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right)\quad z\to+\infty \tag{2.5.47a}$$

$$\mathrm{Ai}(z)\to\frac{1}{\sqrt{\pi}}|z|^{-1/4}\cos\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\quad z\to-\infty \tag{2.5.47b}$$

为了连接 I 区和 II 区，(2.5.46) 式的两个解的正确线性组合通过如下方式选择积分常数来确定

$$\begin{aligned}&\left\{\frac{1}{[V(x)-E]^{1/4}}\right\}\exp\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_x^{x_1}dx'\ \sqrt{2m[V(x')-E]}\right]\\&\to\left\{\frac{2}{[E-V(x)]^{1/4}}\right\}\cos\left[\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x_1}^{x}dx'\ \sqrt{2m[E-V(x')]}-\frac{\pi}{4}\right].\end{aligned} \tag{2.5.48}$$

同样地，从区域 III 到区域 II 我们有

$$\begin{aligned}&\left\{\frac{1}{[V(x)-E]^{1/4}}\right\}\exp\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x_2}^{x}dx'\ \sqrt{2m[V(x')-E]}\right]\\&\to\left\{\frac{2}{[E-V(x)]^{1/4}}\right\}-\cos\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x}^{x_2}dx'\ \sqrt{2m[E-V(x')]}+\frac{\pi}{4}\right].\end{aligned} \tag{2.5.49}$$

当然，不管分析哪个转折点，对于区域 II 的波函数我们必须得到相同的形式. 这意味着

---

* 实际上有一个第二类艾里函数，Bi(z)，它非常类似于 Ai(z)，但是在原点是奇异的. 它与这个讨论有关，但我们跳过了这些细节.

(2.5.48) 式和 (2.5.49) 式中余弦函数的宗量必须至多相差一个整数倍的 π [不是 2π，因为 (2.5.49) 式两边的符号可能是相反的]. 用这样的方法我们求得一个非常有趣自洽条件：

$$\int_{x_1}^{x_2} dx\ \sqrt{2m[E-V(x)]} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar \quad (n=0,1,2,3,\cdots). \tag{2.5.50}$$

除去 $n+\frac{1}{2}$ 与 n 的差别之外，这个方程就是索末菲（A. Sommerfeld）和威尔逊（W. Wilson）于 1915 年写出的旧量子论的量子化条件

$$\oint p dq = nh. \tag{2.5.51}$$

其中的 h 是普朗克的 h，而不是狄拉克的 $\hbar$，积分是对经典运动的一个完整周期求的，从 x_1 积到 x_2 然后再积回来.

使用方程 (2.5.50) 可求得禁闭在一个势阱中的粒子能级近似表示式. 作为一个例子，我们考虑在一个坚硬表面上方上下弹跳的球，即本节早先讨论过的“跳跃中子”的能谱，即

$$V=\begin{cases} mgx, & \text{对于 } x>0 \\ \infty, & \text{对于 } x<0. \end{cases} \tag{2.5.52}$$

其中 x 代表从坚硬表面量起测得的球的高度. 人们或许总是想在 (2.5.50) 式中直接使用

$$x_1=0, \quad x_2=\frac{E}{mg}, \tag{2.5.53}$$

这两个点是该问题的经典转折点. 然而，我们注意到，(2.5.50) 式是在假定 WKB 波函数“渗透”进 $x<x_1$ 的区域导出的，而在我们问题中，波函数在 $x\leqslant x_1=0$ 的区域严格为零. 处理该问题的更为满意的方法是考虑由

$$V(x)=mg|x| \quad (-\infty<x<\infty), \tag{2.5.54}$$

它的转折点为

$$x_1=-\frac{E}{mg}, \quad x_2=\frac{E}{mg}, \tag{2.5.55}$$

所定义的修改过的问题的奇宇称解，——这些解保证在 $x=0$ 处为零. 对于这个修改过的问题，奇宇称态的能谱一定与原问题的能谱相同. 于是量子化条件变成

$$\int_{-E/mg}^{E/mg} dx\ \sqrt{2m(E-mg|x|)} = \left(n_{奇}+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar \quad (n_{奇}=1,3,5,\cdots) \tag{2.5.56}$$

或与之等价的

$$\int_{0}^{E/mg} dx\ \sqrt{2m(E-mgx)} = \left(n-\frac{1}{4}\right)\pi\hbar \quad (n=1,2,3,4,\cdots). \tag{2.5.57}$$

这个积分是初等的，于是对于这个跳跃球的量子化能级，我们求得

$$E_n=\left\{\frac{\left[3\left(n-\frac{1}{4}\right)\pi\right]^{2/3}}{2}\right\}(mg^2\hbar^2)^{1/3}, \tag{2.5.58}$$

表 2.2　一个跳跃球的量子化能级，单位取为 $(mg^2\hbar^2/2)^{1/3}$

n	WKB	精确值
1	2.320	2.338
2	4.082	4.088
3	5.517	5.521
4	6.784	6.787
5	7.942	7.944
6	9.021	9.023
7	10.039	10.040
8	11.008	11.009
9	11.935	11.936
10	12.828	12.829

表 2.2 比较了前 10 个能级的 WKB 近似解与利用艾里函数的零点得到的精确解. 我们看到，甚至对较小的 n 值，符合都是相当好的，而且在 $n\simeq 10$ 时，实际上就是精确值.

在结束之前，让我们返回到条件 (2.5.42) 式的解释. 在 $\hbar\to 0$ 的情况下它是精确的，它暗示着 WKB 近似和经典极限之间的联系. 事实上，当我们利用 (2.5.40) 式时，时间相关波函数变成

$$\psi(x,t)\propto u_E(x)\exp(-iEt/\hbar)=\exp(iW(x)/\hbar-iEt/\hbar). \tag{2.5.59}$$

把它与 (2.4.18) 式和 (2.4.28) 式比较，我们看到 $W(x)$ 直接对应于哈密顿特征函数. 的确，条件 (2.5.42) 与达到经典极限所需的条件 (2.4.26) 是相同的. 由于这些原因，WKB 近似经常称为“半经典”近似.

我们还注意到，条件 (2.5.42) 式等价于 $|k'(x)|\ll|k^2(x)|$. 使用德布罗意波长除以 2π，这个条件等同于

$$\lambda=\frac{\hbar}{\sqrt{2m[E-V(x)]}}\ll\frac{2[E-V(x)]}{|dV/dx|}. \tag{2.5.60}$$

换言之，与位势发生显著改变所需的特征距离相比，λ 必须是小的. 粗略地讲，在许多个波长的区间位势必须基本上是常数. 这样，我们看到半经典图像在短波长极限下是可靠的.

2.6　传播子和费曼路径积分

波动力学中的传播子

在 2.1 节我们指出了，一旦我们把初始右矢借助一个与 H 对易的可观测量的本征右矢展开，具有时间无关哈密顿量的最普遍的时间演化问题是如何求解的. 让我们把这种说法翻译成波动力学语言. 我们开始有

$$\begin{aligned}|\alpha,t_0;t\rangle&=\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]|\alpha,t_0\rangle\\&=\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha,t_0\rangle\exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right].\end{aligned} \tag{2.6.1}$$

把上式的两边都左乘 $\langle \mathbf{x}'|$，我们有

$$|\mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle = \sum_{a'}\langle \mathbf{x}'|a'\rangle\langle a'|\alpha,t_0\rangle\exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right], \tag{2.6.2}$$

它具有如下的形式

$$\psi(\mathbf{x}',t) = \sum_{a'}c_{a'}(t_0)u_{a'}(\mathbf{x}')\exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right], \tag{2.6.3}$$

其中

$$u_{a'}(\mathbf{x}') = \langle \mathbf{x}'|a'\rangle \tag{2.6.4}$$

表示本征值为 a' 的算符 A 的本征函数. 还要注意

$$\langle a'|\alpha,t_0\rangle = \int d^3x'\langle a'|\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'|\alpha,t_0\rangle, \tag{2.6.5}$$

看得出来，该式就是波动力学中求初态展开系数的常用规则

$$c_{a'}(t_0) = \int d^3x' u_{a'}^*(\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}',t_0). \tag{2.6.6}$$

上述这一切应当是简单而且熟悉的. 现在（2.6.2）式和（2.6.5）式一起还可以视为某种积分算符作用于初始波函数上产生终态波函数

$$\psi(\mathbf{x}'',t) = \int d^3x' K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)\psi(\mathbf{x}',t_0) \tag{2.6.7}$$

这里的这个积分算符的核，称为波动力学中的**传播子**，由下式给出

$$K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0) = \sum_{a'}\langle \mathbf{x}''|a'\rangle\langle a'|\mathbf{x}'\rangle\exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right]. \tag{2.6.8}$$

在任何已知的问题中传播子只依赖于位势而不依赖于初始波函数. 一旦能量本征函数和它们的本征值给定，就可以把它构造出来.

显然，如果已知 $K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)$，且初始时给定了 $\psi(\mathbf{x}',t_0)$，则完全可以预言波函数的时间演化. 在这个意义上，薛定谔的波动力学是一个完美的因果理论. 只要系统保持不受扰动，受某个位势约束的波函数的时间演化，就像经典力学中任何其他的现象一样是“确定性的”. 唯一独特的地方，如果有的话，就是当一次测量介入时，波函数以一个不可控制的方式突然变成被测可观测量的本征函数中的一个.

传播子有两个性质值得在这里指明. 首先，对于 $t>t_0$，$K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)$ 满足以 $\mathbf{x}''$ 和 t 为变量、而 $\mathbf{x}'$ 和 t_0 取固定值的薛定谔时间相关波动方程. 这一点从（2.6.8）式看是很明显的，因为 $\langle \mathbf{x}''|a'\rangle\exp[-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar]$ 作为与 $\mathcal{U}(t,t_0)|a'\rangle$ 相对应的波函数，满足波动方程. 第二，

$$\lim_{t\to t_0} K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0) = \delta^3(\mathbf{x}''-\mathbf{x}'), \tag{2.6.9}$$

该式也是显然的. 当 $t\to t_0$ 时，由于 $\{|a'\rangle\}$ 的完备性，（2.6.8）式的求和正好约化为 $\langle \mathbf{x}''|\mathbf{x}'\rangle$.

由于这两个性质，作为 $\mathbf{x}''$ 函数的传播子（2.6.8）式，就是一个在较早的某时刻 t_0 精确定位于 $\mathbf{x}'$ 的粒子在 t 时刻的波函数. 的确，注意到（2.6.8）式还可以写成

$$K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0) = \langle \mathbf{x}''|\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]|\mathbf{x}'\rangle, \tag{2.6.10}$$

其中时间演化算符作用在 $|\mathbf{x}'\rangle$ 上恰好是 $t_0(<t)$ 时刻曾经精确定位于 $\mathbf{x}'$ 的系统在 t 时刻的态右矢，或许由此给出的解释更为漂亮. 如果希望求解一个更为普遍的问题，在那里初

态波函数扩展到一个有限的空间区域，我们必须做的就是用传播子 $K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)$ 去乘 $\psi(\mathbf{x}',t_0)$，然后在全空间（即，对 $\mathbf{x}'$）求积分. 以这种方式，我们可以把来自不同位置 $(\mathbf{x}')$ 的各种贡献加起来. 这种情况与静电学类似，如果我们希望得到由一个普遍的电荷分布 $\rho(\mathbf{x}')$ 产生的静电势，我们首先求解点电荷问题，然后用电荷分布乘上点电荷的解，再求积分：

$$\phi(\mathbf{x})=\int d^3x'\,\frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}. \tag{2.6.11}$$

熟悉格林函数理论的读者这时一定已经认出，这个传播子就是时间相关波动方程的格林函数，满足

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla''^2+V(\mathbf{x}'')-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)=-i\hbar\delta^3(\mathbf{x}''-\mathbf{x}')\delta(t-t_0) \tag{2.6.12}$$

其边界条件为

$$K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)=0,\quad \text{对于 } t<t_0. \tag{2.6.13}$$

(2.6.12) 式的右边需要 δ 函数 $\delta(t-t_0)$ 是因为在 $t=t_0$ 时 K 的变化不连续.

传播子的特殊的形式当然依赖于粒子所遭受的特殊位势. 作为一个例子，考虑一个一维自由粒子. 明显与 H 对易的可观测量是动量；$|p'\rangle$ 是算符 p 与 H 的一个共同本征态：

$$p|p'\rangle=p'|p'\rangle\quad H|p'\rangle=\left(\frac{p'^2}{2m}\right)|p'\rangle. \tag{2.6.14}$$

动量本征函数正是 1.7 节的变换函数［见 (1.7.32) 式］，它是平面波形式. 把上述各项组合在一起，我们有

$$K(x'',t;x',t_0)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)\int_{-\infty}^{\infty}dp'\exp\left[\frac{ip'(x''-x')}{\hbar}-\frac{ip'^2(t-t_0)}{2m\hbar}\right]. \tag{2.6.15}$$

通过把指数上的项配成平方可以计算出积分. 这里只列出结果：

$$K(x'',t;x',t_0)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\exp\left[\frac{im(x''-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right]. \tag{2.6.16}$$

例如，这个表示式可以用于研究一个高斯型波包作为时间函数如何弥散.

对于简谐振子，能量本征态的波函数为

$$u_n(x)\exp\left(\frac{-iE_nt}{\hbar}\right)=\left(\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}\right)\times H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\exp\left[-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t\right], \tag{2.6.17}$$

传播子由下式给出

$$K(x'',t;x',t_0)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin[\omega(t-t_0)]}}\exp\left[\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin[\omega(t-t_0)]}\right\}\times\{(x''^2+x'^2)\cos[\omega(t-t_0)]-2x''x'\}\right]. \tag{2.6.18}$$

证明该式的一种方法是利用

$$\left(\frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}}\right)\exp\left[\frac{-(\xi^2+\eta^2-2\xi\eta\zeta)}{(1-\zeta^2)}\right]=\exp[-(\xi^2+\eta^2)]\sum_{n=0}\left(\frac{\zeta^n}{2^nn!}\right)H_n(\xi)H_n(\eta), \tag{2.6.19}$$

它可以在关于特殊函数的书（Morse 和 Feshbach 1953，786 页）中找到. 它还可以利用

a，$a^{\dagger}$ 算符方法（Saxon 1968，144～145 页），或者，作为另一种选择，利用稍后将要描述的路径积分方法求得．注意，（2.6.18）式是一个 t 的角频率为 ω 的周期函数，这里 ω 是经典振子频率．此外，这还意味着，一个初始时精确定位于 x' 的粒子在 $2\pi/\omega$（$4\pi/\omega$，等等）之后将确定无疑地返回到原来位置．

从 $K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)$ 导出的某些空间和时间积分是相当有趣的．不失普遍性，在下面我们令 $t_0=0$．我们所考虑的第一个积分可以通过令 $\mathbf{x}''=\mathbf{x}'$ 并对全空间求积分得到．我们有

$$\begin{aligned} G(t) &\equiv \int d^3\mathbf{x}' K(\mathbf{x}',t;\mathbf{x}',0) \\ &= \int d^3x' \sum_{a'} |\langle \mathbf{x}'|a'\rangle|^2 \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \\ &= \sum_{a'} \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right). \end{aligned} \tag{2.6.20}$$

这个结果是预料得到的：回顾（2.6.10）式，我们注意到令 $\mathbf{x}'=\mathbf{x}''$ 和求积分等价于在 $\mathbf{x}$ 表象对时间演化算符求迹．然而求迹是不依赖于表象的；利用基 $\{|a'\rangle\}$ 计算可能更容易，在那里时间演化算符是对角的，它立即导致（2.6.20）式的最后结果．现在我们看到（2.6.20）式恰为“对态求和”，它让人联想到统计力学中的配分函数．事实上，如果我们把 t 变量解析延拓，且取 t 为纯虚数，利用由

$$\beta = \frac{it}{\hbar} \tag{2.6.21}$$

定义的正实数 β，我们可以把（2.6.20）式与配分函数联系起来：

$$Z = \sum_{a'} \exp(-\beta E_{a'}). \tag{2.6.22}$$

由于这个缘故，在研究量子力学中的传播子时遇到的某些技巧在统计力学中也是有用的．

其次，让我们考虑 $G(t)$ 的拉普拉斯-傅里叶变换：

$$\begin{aligned} \tilde{G}(E) &\equiv -i\int_0^{\infty} dt G(t)\exp(iEt/\hbar)/\hbar \\ &= -i\int_0^{\infty} dt \sum_{a'} \exp(-iE_{a'}t/\hbar)\exp(iEt/\hbar)/\hbar, \end{aligned} \tag{2.6.23}$$

这里的被积函数是一直振荡的．但是我们可以通过让 E 有一个小的正虚部：

$$E \to E + i\varepsilon \tag{2.6.24}$$

使这个积分有意义．于是，我们在极限 $\varepsilon \to 0$ 的情况下求得

$$\tilde{G}(E) = \sum_{a'} \frac{1}{E - E_{a'}}. \tag{2.6.25}$$

现在看到，完整的能谱被显示为 $\tilde{G}(E)$ 在 E 的复平面上的单极点．如果我们希望知道一个物理系统的能谱，只要研究 $\tilde{G}(E)$ 的解析性质就足够了．

传播子作为跃迁振幅

为了更深刻地理解传播子的物理意义，我们希望把它和 2.2 节引入的跃迁振幅概念联系起来．但首先回忆一下，波函数作为固定的位置左矢 $\langle \mathbf{x}'|$ 与运动的态右矢 $|\alpha,t_0;t\rangle$ 的内积，还可以看作是随时间“相反”运动的海森伯绘景的位置左矢 $\langle \mathbf{x}',t|$ 与海森伯绘景中时间固定的态右矢 $|\alpha,t_0\rangle$ 的内积．同样地，传播子也可以写为

$$K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0) = \sum_{a'} \langle \mathbf{x}''|a'\rangle\langle a'|\mathbf{x}'\rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right]$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) | a' \rangle \langle a' | \exp\left(\frac{iHt_0}{\hbar}\right) | \mathbf{x}' \rangle \\
&= \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle ,
\end{aligned}
\tag{2.6.26}
$$

其中$|\mathbf{x}', t_0\rangle$和$|\mathbf{x}'', t\rangle$被理解为海森伯绘景中位置算符的一个本征右矢和一个本征左矢. 在 2.1 节我们证明了，海森伯绘景的符号$\langle b', t | a' \rangle$，是一个系统在初始$t_0 = 0$时刻被制备的本征值为$a'$的$A$的一个本征态，在稍后的$t$时刻在本征值为$b'$的$B$的本征态上被找到的概率振幅，我们称它为从态$|a'\rangle$到态$|b'\rangle$的跃迁振幅. 因为$t_0$的选取不存在任何特殊性——只有时间差$t - t_0$是重要的，我们可以确认$\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$为$t_0$时制备的具有位置本征值$\mathbf{x}'$的粒子将在稍后的$t$时刻在$\mathbf{x}''$处被发现的概率振幅. 粗略地讲，$\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$是粒子从时空点$(\mathbf{x}', t_0)$到另一个时空点$(\mathbf{x}'', t)$的振幅，因此，术语跃迁振幅对于这个表示式是非常恰当的，当然，这个解释与早些时候我们对$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$的解释完全一致.

还有如下的另一种解释$\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$的方法. 正如早些时候我们强调指出的，$|\mathbf{x}', t_0\rangle$是海森伯绘景中$t_0$时刻本征值为$\mathbf{x}'$的位置本征右矢. 因为在任何给定时刻，一个可观测量的海森伯绘景本征右矢都可以选作基右矢，我们可以把$\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$看作联系不同时刻两组基矢的变换函数. 因此，在海森伯绘景中，时间演化在使基改变的意义上可以看作是一个**幺正变换**，它把一组形式为$\{|\mathbf{x}', t_0\rangle\}$的基右矢与另一组形式为$\{|\mathbf{x}'', t\rangle\}$的基右矢联系起来. 这让我们想起经典物理，一个经典动力学变量随时间的变化，比如$\mathbf{x}(t)$，被看作是由经典哈密顿量生成的正则（或相切）变换（Goldstein 2002，401～402 页）.

结果表明，使用更为对称地处理空间和时间坐标的符号会很方便. 为此，我们用$\langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle$代换$\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$. 因为在任何给定时刻，海森伯绘景中的位置右矢构成完备集，所以，在我们任何需要的地方插入一个写成

$$
\int d^3x'' | \mathbf{x}'', t'' \rangle \langle \mathbf{x}'', t'' | = 1 \tag{2.6.27}
$$

形式的恒等算符是合理的. 例如，考虑从t'到t'''的时间演化；通过把时间间隔(t', t''')分割成(t', t'')和(t'', t''')两部分，我们有

$$
\begin{aligned}
\langle \mathbf{x}''', t''' | \mathbf{x}', t' \rangle &= \int d^3x'' \langle \mathbf{x}''', t''' | \mathbf{x}'', t'' \rangle \langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle , \\
&\quad (t''' > t'' > t').
\end{aligned}
\tag{2.6.28}
$$

我们称上式为跃迁振幅的**结合性***. 显然，我们可以把时间间隔按我们的希望分成许多更小的子间隔. 我们有

$$
\begin{aligned}
\langle \mathbf{x}'''', t'''' | \mathbf{x}', t' \rangle = \int d^3x''' \int d^3x'' &\langle \mathbf{x}'''', t'''' | \mathbf{x}''', t''' \rangle \langle \mathbf{x}''', t''' | \mathbf{x}'', t'' \rangle \\
&\times \langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle , \quad (t'''' > t''' > t'' > t').
\end{aligned}
\tag{2.6.29}
$$

等等. 如果我们以某种方式猜出了无穷小间隔（在t'与$t'' = t' + dt$之间）的$\langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle$的形式，我们就应当能够通过把无穷小间隔的那些适当的跃迁振幅以类似于（2.6.29）式的方式结合起来，求得有限时间间隔的振幅$\langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle$. 这类推理导致费曼在 1948 年发表了量子力学的一种独立的表述形式，我们现在就把注意力转到它上面.

---

* 在概率论中（2.6.28）式的类似结果称为查普曼-科尔莫戈罗夫（Chapman-Kolmogoroff）方程，而在扩散理论中称为斯莫鲁霍夫斯基（Smoluchowsky）方程.

路径积分作为对路径的求和

不失普遍性，我们仅限于一维问题．而且，通过利用诸如 x_N 的符号，来避免像

$$\underbrace{x'''' \cdots x'''}_{N\text{次}}$$

这样的笨拙表示式．用这个符号我们考虑对于一个粒子从初始时空点 (x_1,t_1) 到终了时空点 (x_N,t_N) 的跃迁振幅．把 t_1 与 t_N 之间的整个时间间隔分成 $N-1$ 个相等的部分：

$$t_j - t_{j-1} = \Delta t = \frac{(t_N - t_1)}{(N-1)}. \tag{2.6.30}$$

利用结合性，我们得到

$$\begin{aligned}\langle x_N,t_N \mid x_1,t_1\rangle = &\int dx_{N-1}\int dx_{N-2}\cdots\int dx_2 \langle x_N,t_N \mid x_{N-1},t_{N-1}\rangle \\ &\times\langle x_{N-1},t_{N-1} \mid x_{N-2},t_{N-2}\rangle\cdots\langle x_2,t_2 \mid x_1,t_1\rangle.\end{aligned} \tag{2.6.31}$$

为了把上式用图形形象地表示出来，我们考虑一个时空平面，如图 2.6 所示．初始的和终了的时空点分别固定为 (x_1,t_1) 和 (x_N,t_N)．对于每一个时间段，比如 t_{n-1} 和 t_n 之间的一段，我们遵照指令考虑从 (x_{n-1},t_{n-1}) 到 (x_n,t_n) 的跃迁振幅，然后我们对 $x_2,x_3,\cdots,x_{N-1}$ 求积分．这意味着我们必须对这个时空平面上具有固定端点的所有可能路径求和．

在进一步进行之前，在这里评述一下在经典力学中这些路径怎么出现是很有用的．假定有一个受到可由位势 $V(x)$ 导出的力场作用的粒子．经典的拉格朗日量记为

$$L_{\text{经典}}(x,\dot{x}) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \tag{2.6.32}$$

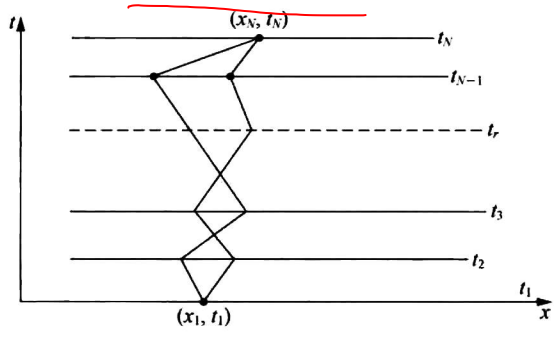


图 2.6 在 xt 平面上的路径

给定了端点 (x_1,t_1) 和 (x_N,t_N) 的拉格朗日量，在经典力学中并不去考虑任何连接 (x_1,t_1) 和 (x_N,t_N) 的路径．相反，存在一条唯一的路径对应于经典粒子的实际运动．例如，给定

$$V(x) = mgx,\quad (x_1,t_1) = (h,0),\quad (x_N,t_N) = \left(0,\sqrt{\frac{2h}{g}}\right), \tag{2.6.33}$$

其中 h 可以代表 Pisa 斜塔的高度，在 xt 平面上的经典路径只能是

$$x = h - \frac{gt^2}{2}. \tag{2.6.34}$$

更为普遍的是，按照哈密顿原理，这条唯一的路径是使经典拉格朗日量的时间积分定义的作用量取最小值的路径

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} dtL_{经典}(x,\dot{x}) = 0, \tag{2.6.35}$$

由它可以求得拉格朗日运动方程.

费曼的公式化表述

经典力学与量子力学之间的基本差别现在应当清晰了. 在经典力学中，在 xt 平面上有一条确定的路径与粒子的运动联系在一起，而相比之下，在量子力学中所有可能的路径都不可避免地起作用，包括那些与经典路径没有任何共同之处的路径. 然而，在 $\hbar\to 0$ 的极限下，我们必须设法能够以光滑的方式重新产生经典力学. 我们如何实现这一点呢?

作为普林斯顿大学的一名年轻的研究生，费曼试图攻克这一难题. 在寻找可能的线索时，据说他被 Dirac 书中一段不可思议的评注迷住了，用我们的记号，它相当于下列说法

$$\exp\left[i\int_{t_1}^{t_2}\frac{dtL_{经典}(x,\dot{x})}{\hbar}\right] \quad 对应于 \quad \langle x_2,t_2|x_1,t_1\rangle.$$

费曼试图理解这个评注. “对应于”与“等于”或者“正比于”是一回事吗? 这种做法导致他构想出了一种基于路径积分的量子力学时空方法.

在费曼的公式化表述中，经典作用量起着非常重要的作用. 为了简洁起见，我们引进一种新的记号:

$$S(n,n-1)\equiv\int_{t_{n-1}}^{t_n} dtL_{经典}(x,\dot{x}). \tag{2.6.36}$$

由于 $L_{经典}$ 是 x 和 $\dot{x}$ 的函数，只有在规定了一条沿着它做积分的确定的路径之后，才能把 $S(n,n-1)$ 确定下来. 因此，尽管在这个记号中路径相关性并不明显，人们相信在计算这个积分时，我们正在考虑一条特殊的路径. 现在想象我们正沿着某条指定的路径. 我们把注意力集中在沿着这条路径的一小分段上，比如在 (x_{n-1},t_{n-1}) 和 (x_n,t_n) 之间的一段. 按照狄拉克的做法，要求我们把 $\exp[iS(n,n-1)/\hbar]$ 与这一小段联系起来. 沿着这条准备跟踪的确定路径，我们把这类表示式依次相乘得到

$$\prod_{n=2}^{N}\exp\left[\frac{iS(n,n-1)}{\hbar}\right]=\exp\left[\left(\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{n=2}^{N}S(n,n-1)\right]=\exp\left[\frac{iS(N,1)}{\hbar}\right]. \tag{2.6.37}$$

该式还没有给出 $\langle x_N,t_N|x_1,t_1\rangle$；更确切地讲，这个方程是我们已考虑的特殊路径对 $\langle x_N,t_N|x_1,t_1\rangle$ 的贡献. 我们还必须对 $x_2,x_3,\cdots,x_{N-1}$ 求积分. 与此同时，利用结合性，我们让 t_{n-1} 和 t_n 之间的时间间隔为无穷小. 于是在某种意义上，$\langle x_N,t_N|x_1,t_1\rangle$ 的候选表示式可以写成

$$\langle x_N,t_N|x_1,t_1\rangle\sim\sum_{所有路径}\exp\left[\frac{iS(N,1)}{\hbar}\right], \tag{2.6.38}$$

其中求和跑遍一个不可数的无穷大的路径集合!

在给出更精确的公式表示之前，让我们看一下顺着这条思路的考虑在经典极限下是否有意义. 当 $\hbar\to 0$ 时，(2.6.38) 式中的指数项振荡得非常剧烈，因此来自相邻路径的各种贡献间有着相消的倾向. 这是因为，作为 $\hbar$ 很小的结果，某个确定路径的 $\exp[iS/\hbar]$ 与稍微不同路径的 $\exp[iS/\hbar]$ 有着非常不同的相位. 因此，当 $\hbar$ 可以看作一个小量时，绝大多数路径没有贡献. 但是，有一个重要的例外.

假定我们考虑一条路径，它满足

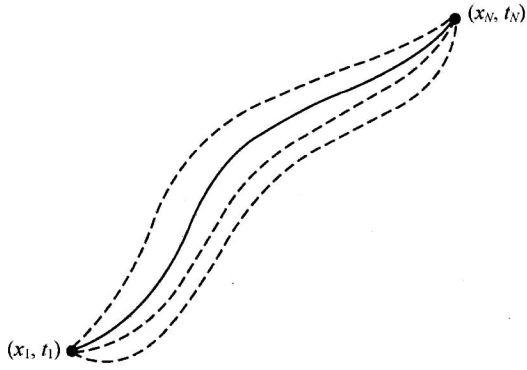


图 2.7 在 $\hbar\to 0$ 极限下的重要路径

$$\delta S(N,1)=0, \tag{2.6.39}$$

其中 S 的变化是由于在保持端点固定情况下路径的略微形变. 这正是由哈密顿原理所决定的经典路径. 我们把满足（2.6.39）式的 S 表示为 $S_{\text{最小}}$. 现在试着把经典路径做一点小的形变. 得到的 S 在形变的第一级仍然等于 $S_{\text{最小}}$. 这意味着即使 $\hbar$ 很小，当我们稍微偏离经典路径时，$\exp[iS/\hbar]$ 的相位也不会变得太大. 作为一个结果，只要我们停留在经典路径附近，则相邻路径之间的相干相加就有可能. 在 $\hbar\to 0$ 的极限下，主要的贡献一定来自包含经典路径的一条非常狭窄的带子（或者在更高维时的一根管子），如图 2.7 所示. 基于狄拉克不可思议的评注，我们（或费曼）的猜测很有道理，因为在 $\hbar\to 0$ 的极限下，经典路径被挑选了出来. 为了更精确地阐述费曼的猜测，让我们回到 $\langle x_n,t_n\,|\,x_{n-1},t_{n-1}\rangle$，其中的时间差 t_n-t_{n-1} 被假定为无穷小. 我们写出

$$\langle x_n,t_n\,|\,x_{n-1},t_{n-1}\rangle=\left[\frac{1}{w(\Delta t)}\right]\exp\left[\frac{iS(n,n-1)}{\hbar}\right], \tag{2.6.40}$$

其中的 $S(n,n-1)$ 马上就在 $\Delta t\to 0$ 的极限下计算. 注意，我们插入了一个权重因子 $1/w(\Delta t)$，并假定它只依赖于时间间隔 t_n-t_{n-1}，而不依赖于 $V(x)$. 由量纲分析可清楚地看到需要这样一个因子，按照我们把位置本征右矢归一化的方法，$\langle x_n,t_n\,|\,x_{n-1},t_{n-1}\rangle$ 必须具有 1/（长度）的量纲.

现在我们看一下（2.6.40）式中的指数. 我们的任务是计算 $S(n,n-1)$ 在 $\Delta t\to 0$ 时的极限. 因为时间间隔如此之小，可以合理地对连接 (x_{n-1},t_{n-1}) 和 (x_n,t_n) 的路径做直线近似：

$$\begin{aligned}S(n,n-1)&=\int_{t_{n-1}}^{t_n}dt\left[\frac{m\dot{x}^2}{2}-V(x)\right]\\&=\Delta t\left\{\left(\frac{m}{2}\right)\left[\frac{(x_n-x_{n-1})}{\Delta t}\right]^2-V\left(\frac{(x_n+x_{n-1})}{2}\right)\right\}.\end{aligned} \tag{2.6.41}$$

作为一个例子，我们具体考虑自由粒子的情况，此时 $V=0$. 现在方程（2.6.40）式变成

$$\langle x_n,t_n\,|\,x_{n-1},t_{n-1}\rangle=\left[\frac{1}{w(\Delta t)}\right]\exp\left[\frac{im(x_n-x_{n-1})^2}{2\hbar\Delta t}\right]. \tag{2.6.42}$$

我们看到，这里出现的指数与自由粒子传播子表示式（2.6.16）中的指数完全一样. 对于简谐振子，读者可做出类似的比较.

早些时候我们曾指出过，在（2.6.40）式中出现的权重因子 $1/w(\Delta t)$ 被假定不依赖

于 $V(x)$，因此我们也可以用自由粒子求出它. 注意到，在 δ 函数的意义上，海森伯绘景中等时位置本征右矢的正交归一性

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle |_{t_n = t_{n-1}} = \delta(x_n - x_{n-1}), \tag{2.6.43}$$

我们得到

$$\frac{1}{w(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta t}}, \tag{2.6.44}$$

其中我们用到了

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\Delta t}{m}} \tag{2.6.45a}$$

和

$$\lim_{\Delta t \to 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) = \delta(\xi). \tag{2.6.45b}$$

当然，这个权重因子可以从自由粒子传播子表示式（2.6.16）式预料得到.

概括起来，当 $\Delta t \to 0$ 时，我们得到

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \exp\left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar}\right]. \tag{2.6.46}$$

在 $t_N - t_1$ 有限的情况下，跃迁振幅的最后表示式为

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = & \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{(N-1)/2} \\ & \times \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \prod_{n=2}^{N} \exp\left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar}\right], \end{aligned} \tag{2.6.47}$$

其中，x_N 和 t_N 是固定的并取了 $N \to \infty$ 的极限. 通常定义一类新的多维（事实上，无穷维）积分算符

$$\int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \equiv \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{(N-1)/2} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \tag{2.6.48}$$

并把（2.6.47）式写成

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \exp\left[i \int_{t_1}^{t_N} dt \, \frac{L_{\text{经典}}(x, \dot{x})}{\hbar}\right]. \tag{2.6.49}$$

这个表达式称为**费曼路径积分**. 它作为对所有可能的路径求和的意义应当从（2.6.47）式中清晰地看到.

我们求得（2.6.49）式的步骤并不意味着是一种推导. 相反，我们（遵循费曼）尝试了一种基于路径概念的量子力学新形式，它是以狄拉克不可思议的评注为动机的. 我们从常规量子力学形式那里借用的仅有的一些思想是：(1) 叠加原理（用在各种可选路径贡献的求和）；(2) 跃迁振幅结合性；(3) 在 $\hbar \to 0$ 极限时的经典对应.

尽管我们对于自由粒子情况求得的结果与常规理论的结果相同，但从迄今为止我们已经做的一切明显可见：费曼形式完全等价于薛定谔波动方程. 我们通过证明费曼的 $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ 表达式确实满足以 x_N, t_N 为变量的薛定谔时间相关波动方程，就如同用（2.6.8）式定义的传播子所做的那样，来结束这一节.

我们由

$$\langle x_N,t_N|x_1,t_1\rangle=\int dx_{N-1}\langle x_N,t_N|x_{N-1},t_{N-1}\rangle\langle x_{N-1},t_{N-1}|x_1,t_1\rangle$$
$$=\int_{-\infty}^{\infty}dx_{N-1}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left[\left(\frac{im}{2\hbar}\right)\frac{(x_N-x_{N-1})^2}{\Delta t}-\frac{iV\Delta t}{\hbar}\right]$$
$$\times\langle x_{N-1},t_{N-1}|x_1,t_1\rangle \tag{2.6.50}$$

开始，其中我们假定了 t_N-t_{N-1} 是无穷小. 引入

$$\xi=x_N-x_{N-1} \tag{2.6.51}$$

且设 $x_N\to x$ 和 $t_N\to t+\Delta t$，我们得到

$$\langle x,t+\Delta t|x_1,t_1\rangle=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}-\frac{iV\Delta t}{\hbar}\right)\langle x-\xi,t|x_1,t_1\rangle. \tag{2.6.52}$$

正如从（2.6.45b）式显而易见的，在 $\Delta t\to 0$ 的极限下，对该积分的主要贡献来自 $\xi\simeq 0$ 的区域. 因此可以合理地使用 ξ 的幂来展开 $\langle x-\xi,t|x_1,t_1\rangle$. 我们还用 Δt 的幂来展开 $\langle x,t+\Delta t|x_1,t_1\rangle$ 和 $\exp(-iV\Delta t/\hbar)$，于是

$$\langle x,t|x_1,t_1\rangle+\Delta t\frac{\partial}{\partial t}\langle x,t|x_1,t_1\rangle$$
$$=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right)\left(1-\frac{iV\Delta t}{\hbar}+\cdots\right) \tag{2.6.53}$$
$$\times\left[\langle x,t|x_1,t_1\rangle+\left(\frac{\xi^2}{2}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle x,t|x_1,t_1\rangle+\cdots\right],$$

其中我们丢掉了 ξ 的线性项，因为当对 ξ 求积分时它为零. 由于（2.6.45a）式，上式左边的 $\langle x,t|x_1,t_1\rangle$ 项正好与右边的领头项相对应. 把 Δt 的一级项收集在一起，我们得到

$$\Delta t\frac{\partial}{\partial t}\langle x,t|x_1,t_1\rangle=\left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\right)(\sqrt{2\pi})\left(\frac{i\hbar\Delta t}{m}\right)^{3/2}\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle x,t|x_1,t_1\rangle$$
$$-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\Delta tV\langle x,t|x_1,t_1\rangle, \tag{2.6.54}$$

其中我们用到了

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\xi^2\exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right)=\sqrt{2\pi}\left(\frac{i\hbar\Delta t}{m}\right)^{3/2}, \tag{2.6.55}$$

它是通过把（2.6.45a）式对 Δt 求微商得到的. 就这样，我们看到 $\langle x,t|x_1,t_1\rangle$ 满足薛定谔时间相关波动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x,t|x_1,t_1\rangle=-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle x,t|x_1,t_1\rangle+V\langle x,t|x_1,t_1\rangle. \tag{2.6.56}$$

由此我们可以得到结论：按照费曼的规定构建的 $\langle x,t|x_1,t_1\rangle$ 和薛定谔波动力学中的传播子是相同的.

费曼基于路径积分的时空方法对于处理非相对论量子力学的实际问题并不太方便. 甚至对于简谐振子，要明显地求出有关的路径积分也是相当麻烦的*. 然而，他的做法从概念观点上看是十分令人满意的. 通过把一组必然的合乎情理的要求强加到一个物理理论中，我们必然被引导到一种等价于通常量子力学公式表示的形式. 这使得我们想知道，是否完全可能构建一个合乎情理的可选理论使微观现象的解释同样的成功.

人们发现基于路径积分的一些方法在现代物理的其他分支，比如量子场论和统计力学

---

* 利用在本章习题 2.34 中的费曼路径积分方法求解简谐振子问题对读者是一个挑战.

中，是极为有效的. 本书中，当我们讨论阿哈罗诺夫-玻姆（Aharonov-Bohm）效应*时，路径积分方法还会再次出现.

2.7　位势和规范变换

恒定位势

在经典力学中众所周知位势的零点是没有任何物理意义的. 动力学变量随时间的变化，诸如 $\mathbf{x}(t)$ 和 $\mathbf{L}(t)$，不依赖于我们使用的是 $V(\mathbf{x})$ 还是 $V(\mathbf{x})+V_0$，其中的 V_0 对空间和时间都是常数. 在牛顿第二定律中出现的力只依赖于位势的梯度，一个可加的常数显然是没有关系的. 在量子力学中，类似的情况是什么呢?

我们来看一下受位势约束的薛定谔绘景态右矢的时间演化. 令 $|\alpha,t_0;t\rangle$ 是 $V(\mathbf{x})$ 存在时的一个态右矢，并且令 $|\alpha,\tilde{t_0};t\rangle$ 是适合于

$$\tilde{V}(\mathbf{x})=V(\mathbf{x})+V_0. \tag{2.7.1}$$

的相应的态右矢. 确切地说，让我们约定，初始条件是在 $t=t_0$ 时，这两个右矢都与 $|\alpha\rangle$ 一致. 如果它们代表着同样的物理情况，这总可以通过适当地选择相位实现. 回忆一下，t 时刻的态右矢可以通过把时间演化算符 $\mathcal{U}(t,t_0)$ 作用在 t_0 时刻的态右矢上求得，于是我们得到

$$\begin{aligned}|\alpha,\tilde{t_0};t\rangle&=\exp\left[-i\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(x)+V_0\right)\frac{(t-t_0)}{\hbar}\right]|\alpha\rangle\\&=\exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right]|\alpha,t_0;t\rangle,\end{aligned} \tag{2.7.2}$$

换句话说，在 $\tilde{V}$ 的影响下计算的右矢，其时间依赖关系仅差一个相因子 $\exp[-iV_0(t-t_0)/\hbar]$. 对于定态，这意味着，如果用 $V(\mathbf{x})$ 算得的时间依赖关系为 $\exp[-iE(t-t_0)/\hbar]$，则用 $V(\mathbf{x})+V_0$ 算得的相应的时间依赖关系为 $\exp[-i(E+V_0)(t-t_0)/\hbar]$. 换句话说，用 $\tilde{V}$ 代替 V 只意味着下列改变：

$$E\to E+V_0, \tag{2.7.3}$$

这一点，或许读者马上就能猜到. 可观测量受到的影响，比如期待值 $\langle\mathbf{x}\rangle$ 和 $\langle\mathbf{S}\rangle$ 的时间演化，总是依赖于能量差［见(2.1.47)］；不管我们是用 $V(\mathbf{x})$ 还是用 $V(\mathbf{x})+V_0$，表征着期待值的正弦时间依赖关系的波尔频率都是一样的. 一般来说，倘若世界上每一个态右矢都乘上一个共同的因子 $\exp[-iV_0(t-t_0)/\hbar]$，则可观测量的期待值可能没有任何差别.

虽然看上去这可能是很平庸的，但这里我们看到了称之为**规范变换的**一类变换的第一个例子. 在我们约定中势能零点能的变化

$$V(\mathbf{x})\to V(\mathbf{x})+V_0 \tag{2.7.4}$$

一定伴随着态右矢的一个变化

$$|\alpha,t_0;t\rangle\to\exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right]|\alpha,t_0;t\rangle, \tag{2.7.5}$$

---

* 对于路径积分的基础及应用感兴趣的读者可以查阅 Feynman 和 Hibbs(1965) 的专著，也可参看 Zee (2010) 的专著.

当然，这个变化意味着波函数有下列改变：

$$\psi(\mathbf{x}',t) \to \exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right]\psi(\mathbf{x}',t). \tag{2.7.6}$$

接下来，我们考虑，V_0 是空间均匀但随时间变化的. 我们很容易看到与（2.7.5）式类似的表达式

$$|\alpha,t_0;t\rangle \to \exp\left[-i\int_{t_0}^{t} dt' \frac{V_0(t')}{\hbar}\right]|\alpha,t_0;t\rangle. \tag{2.7.7}$$

物理上，用 $V(\mathbf{x})+V_0$ 代替 $V(\mathbf{x})$ 只不过意味着，在每个瞬间我们都选择了一个新的能量标度零点.

尽管势能绝对标度的选取是任意的，但势能差具有非平庸的物理意义，而且事实上可用非常引人注目的方式被探测到. 为阐明这一点，让我们考虑图 2.8 所示的布置. 一束带电粒子被劈裂成两个部分，每个部分进入一个金属笼子. 如果我们愿意的话，如图所示，通过接通一个开关，就可以在两个笼子之间保持一个有限的位势差. 束流中的一个粒子可以视为一个波包，其尺寸比笼子尺寸小得多. 假定只有在波包进入笼子以后接通位势差，而在波包离开笼子之前就断掉它. 因为在盒子内位势是空间均匀的，粒子在笼子中不受任何力的作用，因此，没有任何电场存在. 现在让我们把这两个束流的分量以这样一种方式重新组合，即让它们在图 2.8 所示的干涉区相交. 由于位势的存在，每个束流分量都会有一个由（2.7.7）式所指出的位相的改变. 结果，在干涉区束流强度就有了一个可观测的干涉项，即

$$\cos(\phi_1-\phi_2), \quad \sin(\phi_1-\phi_2), \tag{2.7.8}$$

其中

$$\phi_1-\phi_2 = \left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{t_i}^{t_f} dt[V_2(t)-V_1(t)]. \tag{2.7.9}$$

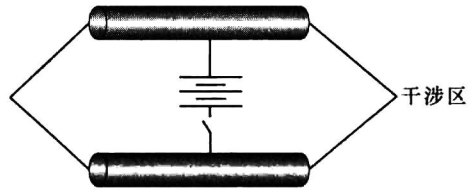


图 2.8 用于探测位势差的量子力学干涉

所以，尽管事实上粒子没有受到力，却存在一个可观测效应，它依赖于 $V_2(t)-V_1(t)$ 是否作用其上. 注意，这个效应是纯量子力学的，在 $\hbar\to 0$ 的极限下，这个有趣的干涉效应被抹掉了，因为余弦项的振荡变得无穷剧烈*.

量子力学中的引力

有一个引人注目地显示引力效应如何出现在量子力学中的实验. 在描述它之前，我们首先评论一下经典力学和量子力学二者之中引力的作用. 考虑一个纯落体的经典运动方程：

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -m\nabla\Phi_{\text{引力}} = -mg\hat{\mathbf{z}}. \tag{2.7.10}$$

质量因子可以消掉，所以，在不存在空气阻力时，一片羽毛与一块石头在引力的影响下有相同的行为方式——按照伽利略（Galileo）的方式. 当然，这是引力质量和惯性质量相等的直接结果. 由于在一个粒子运动轨迹的方程中不出现质量，在经典力学中引力经常称为纯几何理论.

---

* 这个假想实验是本节稍后将要讨论的阿哈罗诺夫-玻姆实验的闵可夫斯基（Minkowski）转动后的形式.

在量子力学中情况全然不同. 在波动力学形式中，(2.7.10) 式的类似公式为

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2+m\Phi_{\text{引力}}\right]\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{2.7.11}$$

质量不再相消了，而是以组合 $\hbar/m$ 的形式出现. 所以在一个有 $\hbar$ 出现的问题中，预期 m 也会出现. 使用基于

$$\langle \mathbf{x}_n,t_n\,|\,\mathbf{x}_{n-1},t_{n-1}\rangle=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left[i\int_{t_{n-1}}^{t_n}dt\,\frac{\left(\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2-mgz\right)}{\hbar}\right],$$

$$(t_n-t_{n-1}=\Delta t\to 0) \tag{2.7.12}$$

的一个落体的费曼路径积分公式框架，我们也可以看到这一点. 在这里我们再一次看到，m 出现在组合 $m/\hbar$ 中. 这与基于

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}dt\left(\frac{m\dot{\mathbf{x}}^2}{2}-mgz\right)=0, \tag{2.7.13}$$

的哈密顿经典方法形成鲜明的对比，在那里的 m 一开始就可以消掉，

从薛定谔方程 (2.7.11) 式出发，我们可以导出埃伦费斯特定理

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle\mathbf{x}\rangle=-g\hat{\mathbf{z}}. \tag{2.7.14}$$

然而，在这里既不出现 $\hbar$，也不出现 m. 要看到引力的非平庸量子力学效应，我们必须研究 $\hbar$ 显式出现的效应，因此，我们预期质量也在那里出现，它与经典力学的纯引力现象相反.

到 1975 年为止，一直没有直接的实验来确证 (2.7.11) 式中 $m\Phi_{\text{引力}}$ 项的存在. 不可否认，已经观测到一个基本粒子的自由落体，但是经典运动方程——或埃伦费斯特定理 (2.7.14) 式，在那里 $\hbar$ 不出现——已足以解释这一现象. 庞德 (V. Pound) 与其合作者的著名的“光子重量”实验，也没有在量子范畴内检验引力，因为他们测量了一个频移，在那里 $\hbar$ 没有明显地出现.

在微观尺度上，引力太弱，因而不容易观测. 为了体会在观察束缚态问题中的引力所涉及的困难，让我们考虑一个电子和一个中子靠引力束缚形成的基态. 这是电子与质子靠库仑力束缚的氢原子的引力对照物. 在相同的距离，电子与中子之间的引力比电子与质子之间的库仑力小了一个$\sim 2\times 10^{39}$的因子. 这里涉及的波尔半径可以简单地求得：

$$a_0=\frac{\hbar^2}{e^2m_e}\to\frac{\hbar^2}{G_Nm_e^2m_n}, \tag{2.7.15}$$

其中 G_N 是牛顿引力常数. 如果我们把数字代入这个方程，结果则表明这个引力束缚系统的波尔半径为$\sim 10^{31}$，或$\sim 10^{13}$光年，它比估算的宇宙半径还要大几个数量级.

我们现在讨论一个引人瞩目的称之为**引力诱导量子干涉**的现象. 一束几乎是单能量的粒子束流——实际上是热中子，劈裂成两个部分，然后如图 2.9 所示交汇在一起. 在实际的实验中利用硅晶体将中子束劈裂和弯折，但是中子干涉仪的这种漂亮艺术的细节不是我们这里所关心的. 由于可以假定波包比两条可选路径形成的圈的宏观尺寸小得多，我们可以应用经典的轨道概念. 让我们先假定路径 $A\to B\to D$ 和路径 $A\to C\to D$ 处于一个水平面上. 因为源于引力的势能绝对零点是没有任何意义的，对于在这个水平面上发生的任何现象我们都可以设 $V=0$；换句话说，完全忽略引力是合理的. 如果由这两条可选路径形成的平面绕线段 AC 旋转一个 δ 角，则情况就非常不一样了. 这时，BD 水平的势能比 AC

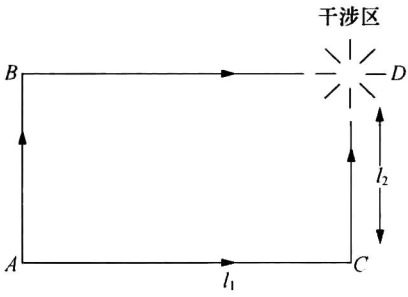


图 2.9 探测引力诱导的量子干涉的实验

的高 $mgl_2\sin\delta$，这意味着与路径 BD 相关联的态右矢“转动得更快”. 这导致在到达 D 点的两个波包振幅之间出现了一个引力诱导的相位差. 实际上还存在一个与 AB 及 CD 相关联的引力诱导的相位改变，但是当我们比较这两条可选路径时，他们的效应相消了. 净剩的结果是经过路径 ABD 到达 D 的波包相对于经过路径 ACD 到达 D 的波包发生的相位变化

$$\exp\left[\frac{-im_n gl_2(\sin\delta)T}{\hbar}\right] \tag{2.7.16}$$

其中 T 是波包从 B 到 D（或从 A 到 C）所用的时间，而 m_n 是中子质量. 我们可以通过转动图 2.9 的平面控制这个相位差，δ 可以从 0 变到 $\pi/2$，或 0 变到 $-\pi/2$. 用中子的德布罗意波长 λ 表示所用的时间 T，或 $l_1/v_{波包}$，我们得到相位差的表示式为：

$$\phi_{ABD}-\phi_{ACD}=-\frac{(m_n^2 gl_1 l_2\lambda\sin\delta)}{\hbar^2}. \tag{2.7.17}$$

用这种方式，我们预言了一种依赖于角度 δ 的可观测的干涉效应，它让人联想起光学中迈克尔逊（Michelson）类型干涉仪的条纹.

下面是（2.7.17）式的另一种可以代替的、更符合波动力学方式的理解. 因为我们关心的是时间无关的势，动能与势能之和是个常数：

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+mgz=E. \tag{2.7.18}$$

BD 与 AC 水平面之间的高度差别意味着 $\mathbf{p}$ 或者 λ 的微小差别. 作为结果，存在一个源于 λ 差别的相位差积累. 我们把这个波动力学方法也会导致（2.7.17）式结果的证明留做一个习题.

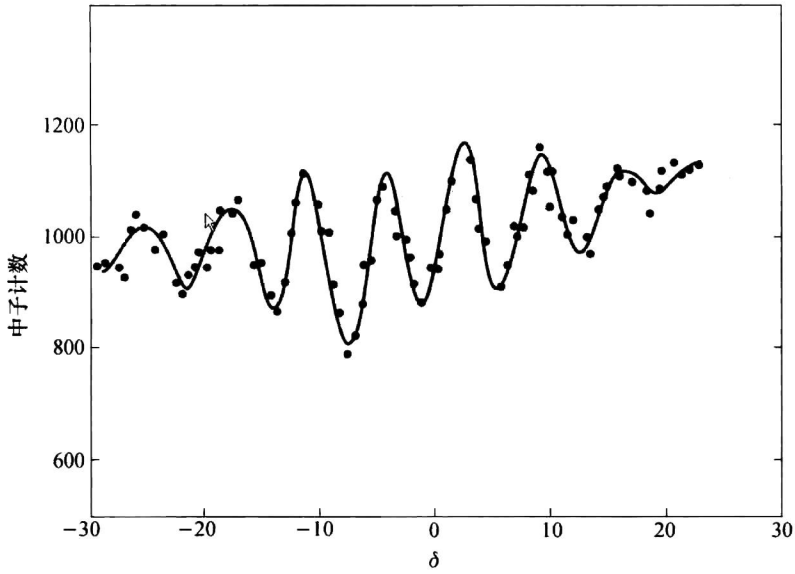


图 2.10 引力诱导相位对转动角度 δ 的依赖关系. 取自 R. Colella, A. W. Overhauser, 和 S. A. Werner, *Phys. Rev. Lett.* **34** (1975) 1472.

对表达式（2.7.17）感兴趣的地方是它的幅值既不太小，也不太大. 它恰好能让热中子通过“桌面”尺度的路径探测到这个有趣的效应. 对于 $\lambda=1.42\text{Å}$（与硅原子之间间隙可比）和 $l_1 l_2=10\text{cm}^2$，我们得到 $m_n^2 g l_1 l_2 \lambda/\hbar^2$ 为 55.6. 随着我们把圈平面逐渐转动到 90° 时，我们预言干涉区内的强度将显示一系列的极大和极小值，定量上我们应当看到 $55.6/2\pi \simeq 9$ 次振荡. 极不寻常的是，这样一种效应的确被实验上观测到了，见图 2.10，它取自科勒拉（R. Colella），奥弗豪泽（A. Overhauser）和沃纳（S. A. Werner）在 1975 年的实验. 来自引力的相移在 1% 范围内很好地得到了证实.

我们强调：这个效应是纯量子力学的，因为当 $\hbar \to 0$ 时，干涉条纹消失了. 正如所预期的，显示了引力位势进入到薛定谔方程之中. 这个实验还表明在量子水平上引力不是纯几何的，因为其效应依赖于 $(m/\hbar)^2$. *

电磁学中的规范变换

现在让我们回到电磁学中出现的势. 我们考虑从时间无关的标量势和矢量势，$\phi(\mathbf{x})$ 和 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$，导出的电场与磁场：

$$\mathbf{E}=-\nabla\phi, \quad \mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A}. \tag{2.7.19}$$

一个电荷为 e（对于电子 $e<0$）受到电磁场作用的粒子，由经典物理给出的哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2+e\phi. \tag{2.7.20}$$

在量子力学中 ϕ 和 $\mathbf{A}$ 被认为是带电粒子的位置算符 $\mathbf{x}$ 的函数. 因为 $\mathbf{p}$ 和 $\mathbf{A}$ 不对易，在解释（2.7.20）式时需要小心点. 最安全的做法是写成

$$\left(\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2 \to p^2-\left(\frac{e}{c}\right)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\mathbf{p})+\left(\frac{e}{c}\right)^2\mathbf{A}^2. \tag{2.7.21}$$

在这种形式下，哈密顿量显然是厄米的.

为了研究一个受到 ϕ 和 $\mathbf{A}$ 作用的带电粒子的动力学，让我们首先在海森伯绘景中操作. 我们可以直接计算 $\mathbf{x}$ 的时间微商

$$\frac{dx_i}{dt}=\frac{[x_i,H]}{i\hbar}=\frac{(p_i-eA_i/c)}{m}, \tag{2.7.22}$$

它显示本书中定义为平移生成元的算符 $\mathbf{p}$ 与 $md\mathbf{x}/dt$ 不同. $\mathbf{p}$ 经常称为**正则动量**，以示与**运动学**（或力学）**动量**的区别，后者用 Π 标记：

$$\Pi\equiv m\frac{d\mathbf{x}}{dt}=\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}. \tag{2.7.23}$$

尽管对于正则动量我们有

$$[p_i,p_j]=0, \tag{2.7.24}$$

力学动量的类似对易关系不为零. 相反，我们有

$$[\Pi_i,\Pi_j]=\left(\frac{i\hbar e}{c}\right)\varepsilon_{ijk}B_k, \tag{2.7.25}$$

这一点，读者可以很容易证明. 把哈密顿量改写为

---

* 然而，这并不意味着在理解这类效应时，等价原理不重要. 如果引力质量（$m_{\text{引力}}$）和惯性质量（$m_{\text{惯性}}$）不相等，则 $(m/\hbar)^2$ 必须代之以 $m_{\text{引力}}m_{\text{惯性}}/\hbar^2$. 我们可以正确地预言干涉条纹而不需要区分 $m_{\text{引力}}$ 和 $m_{\text{惯性}}$ 表明对于量子水平的等价原理的某种支持.

$$H=\frac{\boldsymbol{\Pi}^2}{2m}+e\phi \tag{2.7.26}$$

并利用基本对易关系，我们可以导出量子力学版本的洛伦兹（Lorentz）力，即

$$m\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2}=\frac{d\boldsymbol{\Pi}}{dt}=e\left[\mathbf{E}+\frac{1}{2c}\left(\frac{d\mathbf{x}}{dt}\times\mathbf{B}-\mathbf{B}\times\frac{d\mathbf{x}}{dt}\right)\right] \tag{2.7.27}$$

这就是海森伯绘景中，当 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{B}$ 存在时，带电粒子的埃伦费斯特定理.

现在，我们研究具有 ϕ 和 $\mathbf{A}$ 的薛定谔波动方程. 我们的第一个任务是在 $\langle\mathbf{x}'|$ 和 $|\alpha,t_0;t\rangle$ 之间夹入 H. 唯一需要加以小心的项是

$$\begin{aligned}&\langle\mathbf{x}'|\left[\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{c}\right]^2|\alpha,t_0;t\rangle\\&=\left[-i\hbar\,\boldsymbol{\nabla}'-\frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c}\right]\langle\mathbf{x}'|\left[\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{c}\right]|\alpha,t_0;t\rangle\\&=\left[-i\hbar\,\boldsymbol{\nabla}'-\frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c}\right]\cdot\left[-i\hbar\,\boldsymbol{\nabla}'-\frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c}\right]\langle\mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle.\end{aligned} \tag{2.7.28}$$

需要强调的是，在最后一行中的第一个$\boldsymbol{\nabla}'$既要对 $\langle\mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle$ 微商，也要对 $\mathbf{A}(\mathbf{x}')$ 微商. 把这一切组合起来，我们有

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2m}\left[-i\hbar\,\boldsymbol{\nabla}'-\frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c}\right]\cdot\left[-i\hbar\,\boldsymbol{\nabla}'-\frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c}\right]\langle\mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle\\&+e\phi(\mathbf{x}')\langle\mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle\end{aligned} \tag{2.7.29}$$

从这个表达式我们很容易得到连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}'\cdot\mathbf{j}=0, \tag{2.7.30}$$

在那里，像以前一样 ρ 是 $|\psi|^2$，$\langle\mathbf{x}'|\alpha,t_0;t\rangle$ 是 ψ，而对概率流 $\mathbf{j}$ 我们有

$$\mathbf{j}=\left(\frac{\hbar}{m}\right)\mathrm{Im}(\psi^*\,\boldsymbol{\nabla}'\psi)-\left(\frac{e}{mc}\right)\mathbf{A}|\psi|^2, \tag{2.7.31}$$

它正是我们由代换

$$\boldsymbol{\nabla}'\to\boldsymbol{\nabla}'-\left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\mathbf{A}. \tag{2.7.32}$$

所预期的. 若把波函数写成$\sqrt{\rho}\exp(iS/\hbar)$ ［见（2.4.18）式］，我们得到 $\mathbf{j}$ 的一个替代形式，即

$$\mathbf{j}=\left(\frac{\rho}{m}\right)\left(\boldsymbol{\nabla}S-\frac{e\mathbf{A}}{c}\right), \tag{2.7.33}$$

它将与(2.4.20)式相比较. 我们将发现，这种形式在讨论超导、通量量子化等问题时是方便的. 我们还注意到，除去 $1/m$ 外，$\mathbf{j}$ 的空间积分就是运动学动量（而不是正则动量）的期待值

$$\int d^3x'\mathbf{j}=\frac{\langle\mathbf{p}-e\mathbf{A}/c\rangle}{m}=\langle\boldsymbol{\Pi}\rangle/m. \tag{2.7.34}$$

现在我们是讨论电磁学中**规范变换**问题的时候了. 首先，考虑

$$\phi\to\phi+\lambda,\quad\mathbf{A}\to\mathbf{A}, \tag{2.7.35}$$

其中的 λ 是个常数，这就是说，不依赖于 $\mathbf{x}$ 和 t. $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{B}$ 二者显然都保持不变. 这个变换只意味着能量标度零点的变化，它是在本节开始时用过的一种可能性；我们只不过用 $e\phi$ 代替了 V. 我们已经讨论过了态右矢所需要的伴随变化［见(2.7.5)式］，因此，我们不再

赘述这个变换.

更有趣的是变换

$$\phi \to \phi, \quad \mathbf{A} \to \mathbf{A} + \nabla\Lambda, \tag{2.7.36}$$

其中Λ是 $\mathbf{x}$ 的函数. 在 (2.7.36) 式变换下，静电磁场 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{B}$ 是不变的. (2.7.35) 式和 (2.7.36) 式都是

$$\phi \to \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}, \quad \mathbf{A} \to \mathbf{A} + \nabla\Lambda, \tag{2.7.37}$$

的特殊情况，它们保持由

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla\times\mathbf{A}, \tag{2.7.38}$$

给出的 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{B}$ 不变，但下面我们不考虑时间相关的场和势. 在本节的余下部分，术语规范变换指的都是(2.7.36)式.

在经典物理中，诸如带电粒子轨道这样的可观测量效应不依赖所使用的规范——即我们碰巧采用的特别选择的 Λ. 考虑一个带电粒子处于沿 z 方向的均匀磁场中

$$\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}. \tag{2.7.39}$$

这个磁场可以从

$$A_x = \frac{-By}{2}, \quad A_y = \frac{Bx}{2}, \quad A_z = 0 \tag{2.7.40}$$

推导出来. 或者也可以从

$$A_x = -By, \quad A_y = 0, \quad A_z = 0, \tag{2.7.41}$$

推导出来. 第二种形式是通过

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A} - \nabla\left(\frac{Bxy}{2}\right), \tag{2.7.42}$$

从第一种形式中求得的，它的确是 (2.7.36) 的形式. 不管我们可能会用哪个 $\mathbf{A}$，具有一组给定初始条件的带电粒子的轨道都是相同的，它就是一条螺旋线——投影到 xy 平面时的一个匀速圆周运动，同时叠加上沿 z 方向的一个匀速直线运动. 然而，如果我们看一下 p_x 和 p_y，结果则是很不一样的. 首先，当使用 (2.7.41) 式时，p_x 是个运动常数，而当使用 (2.7.40) 式时它就不再是运动常数.

回顾哈密顿运动方程：

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \frac{dp_y}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial y}, \cdots \tag{2.7.43}$$

一般说来，正则动量 $\mathbf{p}$ 不是一个规范不变量，即使我们针对的是同一个物理情况，它的数值仍依赖于所采用的特殊规范. 相比之下，跟踪粒子轨迹的*运动学动量*Π，或 $m d\mathbf{x}/dt$，是一个规范不变量，这一点可以明确证明. 因为 $\mathbf{p}$ 和 $m d\mathbf{x}/dt$ 通过 (2.7.23)式相关联，$\mathbf{p}$ 必须改变以补偿 (2.7.42)式给出的 $\mathbf{A}$ 的变化.

现在我们回到量子力学. 我们相信，在规范变换下要求量子力学中的期待值具有类似于相应的经典量的行为方式是合理的，所以在规范变换下，预期 $\langle\mathbf{x}\rangle$ 和 $\langle\Pi\rangle$ 不变，而 $\langle\mathbf{p}\rangle$ 会变化.

让我们用 $|\alpha\rangle$ 表示 $\mathbf{A}$ 存在时的态右矢；当用

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \nabla\Lambda \tag{2.7.44}$$

代替 $\mathbf{A}$ 时，同样物理情况下的态右矢用 $|\tilde{\alpha}\rangle$ 表示. 这里的Λ，和 $\mathbf{A}$ 一样，是位置算符 $\mathbf{x}$ 的

函数. 我们的基本要求是

$$\langle\alpha|\mathbf{x}|\alpha\rangle=\langle\tilde{\alpha}|\mathbf{x}|\tilde{\alpha}\rangle \tag{2.7.45a}$$

和

$$\langle\alpha|\left(\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)|\alpha\rangle=\langle\tilde{\alpha}|\left(\mathbf{p}-\frac{e\tilde{\mathbf{A}}}{c}\right)|\tilde{\alpha}\rangle. \tag{2.7.45b}$$

此外，像往常一样，我们要求态右矢的模保持不变：

$$\langle\alpha|\alpha\rangle=\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle \tag{2.7.46}$$

我们必须构建一个把$|\tilde{\alpha}\rangle$和$|\alpha\rangle$如下联系起来的算符$\mathcal{J}$

$$|\tilde{\alpha}\rangle=\mathcal{J}|\alpha\rangle. \tag{2.7.47}$$

倘若

$$\mathcal{J}^{\dagger}\mathbf{x}\mathcal{J}=\mathbf{x} \tag{2.7.48a}$$

和

$$\mathcal{J}^{\dagger}\left(\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}-\frac{e\nabla\Lambda}{c}\right)\mathcal{J}=\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}. \tag{2.7.48b}$$

则不变性（2.7.45a)式和（2.7.45b)式都能得到保障. 我们断言

$$\mathcal{J}=\exp\left[\frac{ie\Lambda(\mathbf{x})}{\hbar c}\right] \tag{2.7.49}$$

能满足这个要求. 首先，$\mathcal{J}$是幺正的，所以(2.7.46)式能满足. 其次，因为$\mathbf{x}$与$\mathbf{x}$的任意函数对易，(2.7.48a) 式显然满足. 至于(2.7.48b)式，只需指出

$$\begin{aligned}\exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right)\mathbf{p}\exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right)&=\exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right)\left[\mathbf{p},\exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right)\right]+\mathbf{p}\\&=-\exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right)i\hbar\nabla\left[\exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right)\right]+\mathbf{p}\\&=\mathbf{p}+\frac{e\nabla\Lambda}{c},\end{aligned} \tag{2.7.50}$$

其中我们用到了(2.2.23b) 式.

规范变换下的量子力学不变性还可以通过直接观察薛定谔方程来展示. 设$|\alpha,t_0;t\rangle$是$\mathbf{A}$存在时薛定谔方程的一个解：

$$\left[\frac{(\mathbf{p}-e\mathbf{A}/c)^2}{2m}+e\phi\right]|\alpha,t_0;t\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle. \tag{2.7.51}$$

在$\tilde{\mathbf{A}}$存在时，相应的解必须满足

$$\left[\frac{(\mathbf{p}-e\mathbf{A}/c-e\nabla\Lambda/c)^2}{2m}+e\phi\right]|\alpha,\tilde{t_0};t\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,\tilde{t_0};t\rangle. \tag{2.7.52}$$

我们看到，如果依照(2.7.49)式把新的右矢取为

$$|\alpha,\tilde{t_0};t\rangle=\exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right)|\alpha,t_0;t\rangle, \tag{2.7.53}$$

则新的薛定谔方程(2.7.52)式将得到满足；我们必须注意的是

$$\exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right)\left(\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}-\frac{e\nabla\Lambda}{c}\right)^2\exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right)=\left(\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2, \tag{2.7.54}$$

它是通过使用(2.7.50)式两次得到的.

方程（2.7.53）式还意味着相应的波函数通过

$$\psi(\mathbf{x}',t)=\exp\left[\frac{ie\Lambda(\mathbf{x}')}{\hbar c}\right]\psi(\mathbf{x}',t), \tag{2.7.55}$$

关联起来，其中的$\Lambda(\mathbf{x}')$现在是位置矢量本征值$\mathbf{x}'$的一个实函数. 当然，通过直接把(2.7.55)式代入以$\mathbf{A}+\nabla\Lambda$代替$\mathbf{A}$的薛定谔波动方程，也可以证明这一点. 从ρ和S的角度来讲，我们看到，ρ是不变的，而S被修改为

$$S \to S + \frac{e\Lambda}{c}. \tag{2.7.56}$$

这一点是非常令人满意的，因为我们看到由(2.7.33)式给出的概率流是规范不变的.

总之，当对同样的物理情况使用不同规范下的矢量势时，相应的态右矢（或波函数）必定是不同的. 然而，仅仅需要简单的改变；只要把老的右矢（或老的波函数）乘以$\exp[ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c](\exp[ie\Lambda(\mathbf{x}')/\hbar c])$，就可以从由$\mathbf{A}$确定的规范变到另一个由$\mathbf{A}+\nabla\Lambda$确定的规范. 在其期待值依赖于特殊规范的这样一种意义上，定义为平移生成元的**正则动量**显然是规范相关的，而**运动学动量**和概率流都是规范不变的.

读者可能会想，为什么在(2.7.49)式作用下的不变性称为规范不变性. 这个词是德文 *Eichinvarianz* 翻译过来的，其中的 *Eich* 意思是“规范（gauge）”.（其后的部分与英文的不变性，invariance 是一样的. ——译者注）有一个历史掌故伴随着这个术语的起源. 请继续读下去.

考虑在$\mathbf{x}$处的某个位置的函数$F(\mathbf{x})$. 在相邻的点我们显然有

$$F(\mathbf{x}+d\mathbf{x}) \simeq F(\mathbf{x}) + (\nabla F)\cdot d\mathbf{x}. \tag{2.7.57}$$

但是假定当我们从$\mathbf{x}$到$\mathbf{x}+d\mathbf{x}$时做了一个标度变化如下：

$$1\,|_{\text{在}\mathbf{x}\text{处}} \to [1+\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{x})\cdot d\mathbf{x}]\,|_{\text{在}\mathbf{x}+d\mathbf{x}\text{处}}. \tag{2.7.58}$$

那么，代替(2.7.57)式，我们必须重新标度$F(\mathbf{x})$

$$F(\mathbf{x}+d\mathbf{x})|_{\text{重新标度后}} \simeq F(\mathbf{x}) + [(\nabla+\boldsymbol{\Sigma})F]\cdot d\mathbf{x}. \tag{2.7.59}$$

组合$\nabla+\boldsymbol{\Sigma}$类似于在(2.7.32)式见到过的规范不变组合

$$\nabla - \left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\mathbf{A} \tag{2.7.60}$$

除不存在i之外. 历史上，外尔通过把(2.7.58)式和(2.7.59)式中的标度函数$\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{x})$等同于矢量势$\mathbf{A}$本身，企图构建一个基于规范不变性的电磁学几何理论的尝试不成功. 随着量子力学的诞生，福克（V. Fock）和伦敦（F. London）认识到规范不变性组合(2.7.60)式的重要性，通过比较$\boldsymbol{\Sigma}$和i乘$\mathbf{A}$，他们回顾了外尔早期的工作. 我们坚持了术语规范不变性，尽管(2.7.58)式的量子力学类比

$$1\Big|_{\text{在}\mathbf{x}\text{处}} \to \left[1 - \left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}\right]\Big|_{\text{在}\mathbf{x}+d\mathbf{x}\text{处}}, \tag{2.7.61}$$

将实际对应于“相位改变”而不是“标度改变”.

阿哈罗诺夫-玻姆效应

在量子力学中矢量势的使用有很多深远影响，我们现在准备讨论其中的一些. 我们从一个看似平淡无奇的问题开始.

考虑一个中空的圆柱形壳，如图 2.11a 所示. 我们假定一个电荷为e的粒子能够完全地被禁闭在这个刚性壁壳的内部. 要求波函数在内壁（$\rho=\rho_a$）和外壁（$\rho=\rho_b$）上为零，在顶部和底部也为零. 这是一个数学物理中求解能量本征值的简单的边值问题.

让我们现在考虑一个修改过的装置，在那里一个圆柱壳把一个均匀磁场包围了起来，如图 2.11b 所示. 特别是，你可以想象一个非常长的螺线管插到中间的孔中，以致没有任

何磁场泄漏到 $\rho \geqslant \rho_a$ 的区域. 波函数的边界条件取为与以前的一样；并且假定壁是刚性的. 凭直觉，我们可以猜测到能谱不会改变，因为 $\mathbf{B} \neq 0$ 的区域完全不可能达到被禁闭在壳内的带电粒子. 然而，量子力学告诉我们这个猜测不对.

尽管磁场在内部区域为零，那里的矢量势不为零. 利用斯托克斯（Stokes）定理，我们可以推知要产生磁场 $\mathbf{B}(=B\hat{\mathbf{z}})$ 所需的矢量势为

$$\mathbf{A} = \left(\frac{B\rho_a^2}{2\rho}\right)\hat{\boldsymbol{\phi}}, \tag{2.7.62}$$

其中的 $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 是沿方位角增加方向的单位矢量. 在试图求解薛定谔方程以找到这个新问题的能量本征值时，我们仅需要用 $\nabla - (ie/\hbar c)\mathbf{A}$ 代替梯度 ∇；我们可以在柱坐标系中把对 ϕ 的偏微商做如下代换来实现这一点：

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \to \frac{\partial}{\partial \phi} - \left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\frac{B\rho_a^2}{2}; \tag{2.7.63}$$

这里要回顾柱坐标系中梯度的表示式：

$$\nabla = \hat{\boldsymbol{\rho}}\frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{\mathbf{z}}\frac{\partial}{\partial z} + \hat{\boldsymbol{\phi}}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \phi}. \tag{2.7.64}$$

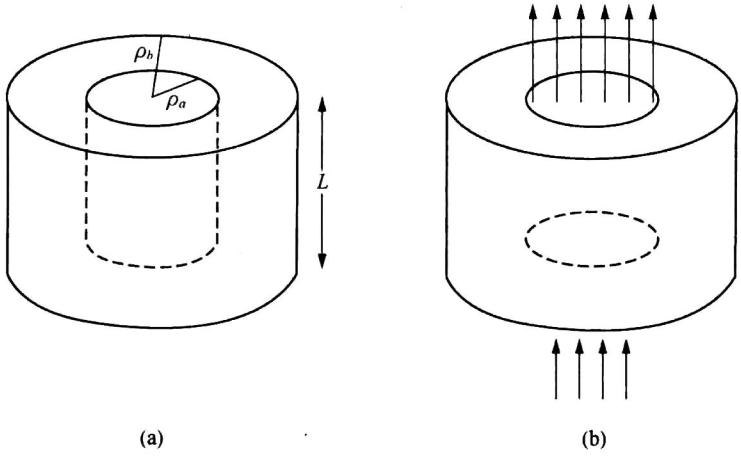


图 2.11 空心圆柱壳（a）没有磁场，（b）有一个均匀磁场.

(2.7.63) 式的代换导致了能谱可观测的变化，这一点读者可以明显地证明. 这是非常引人瞩目的，因为粒子从来没有“接触”到磁场；在这个问题中粒子受到的洛伦兹力恒为零，然而能级却取决于粒子不可达到的孔区内的磁场是否有限.

我们刚刚处理的这个问题是通常被称作*阿哈罗诺夫-玻姆效应**的束缚态版本. 现在我们着手讨论阿哈罗诺夫-玻姆效应自身的原始形式. 考虑一个电荷为 e 的粒子，经过一个非常长的不可穿透的圆柱体之上或之下，如图 2.12 所示. 圆柱体内部是一个平行于圆柱体轴的磁场，而该轴垂直于图 2.12 的平面. 所以粒子的上路径和下路径包围了磁通量. 我们的目标是研究在相互作用区 B 找到粒子的概率如何依赖于磁通量.

---

* 以 Y. Aharonov 和 D. Bohm 1959 年的文章得名. 实际上同样的效应早在 10 年前就由 W. Ehrenberg 和 R. E. Siday 讨论过.

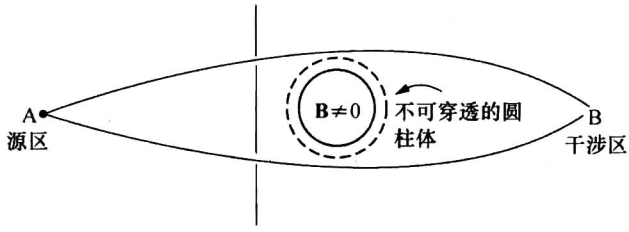


图 2.12　阿哈罗诺夫-玻姆效应

尽管可以通过比较 **B** 存在和不存在时薛定谔方程的解来处理这个问题，为了便于教学，我们宁可采用费曼路径积分方法. 设 $\mathbf{x}_1$ 和 $\mathbf{x}_N$ 分别是源区 A 和干涉区 B 中的两个有代表性的点. 从经典力学得知，存在磁场时的拉格朗日量可从不存在磁场时的拉格朗日量（用 $L^{(0)}_{经典}$ 表示）得到

$$L^{(0)}_{经典} = \frac{m}{2}\left(\frac{d\mathbf{x}}{dt}\right)^2 \to L^{(0)}_{经典} + \frac{e}{c}\frac{d\mathbf{x}}{dt}\cdot\mathbf{A}. \tag{2.7.65}$$

然后，对于从 $(\mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1})$ 到 $(\mathbf{x}_n, t_n)$ 的某段确定的路径单元，作用量相应的改变由下式给出

$$S^{(0)}(n,n-1) \to S^{(0)}(n,n-1) + \frac{e}{c}\int_{t_{n-1}}^{t_n} dt\left(\frac{d\mathbf{x}}{dt}\right)\cdot\mathbf{A}. \tag{2.7.66}$$

而最后的这个积分可以写成

$$\frac{e}{c}\int_{t_{n-1}}^{t_n} dt\left(\frac{d\mathbf{x}}{dt}\right)\cdot\mathbf{A} = \frac{e}{c}\int_{x_{n-1}}^{x_n}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}, \tag{2.7.67}$$

其中的 $d\mathbf{s}$ 是沿着这段路径单元的微分线元，因此当我们考虑从 $\mathbf{x}_1$ 到 $\mathbf{x}_N$ 的全部贡献时，有下列的改变

$$\prod \exp\left[\frac{iS^{(0)}(n,n-1)}{\hbar}\right] \to \left\{\prod \exp\left[\frac{iS^{(0)}(n,n-1)}{\hbar}\right]\right\}\exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}\right). \tag{2.7.68}$$

所有这一切只是对于一条特殊的路径，比如从圆柱体上部通过的路径. 我们还必须对所有的可能路径求和，这似乎是一个令人生畏的任务. 幸运的是，我们从电磁学理论知道，$\int\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}$ 的线积分与路径无关. 即，只要一对不同的路径形成的圈不包围磁通量，它就仅依赖于两个端点. 作为结果，由于 $\mathbf{A}\neq 0$ 所有从圆柱体上部通过的路径的贡献都由一个共同的相位因子给出；类似地，来自所有从圆柱体下部通过的路径的贡献都将乘以另一个共同的相位因子. 用路径积分符号，对于整个跃迁振幅我们有

$$\begin{aligned}
&\int_{上}\mathcal{D}[\mathbf{x}(t)]\exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right] + \int_{下}\mathcal{D}[\mathbf{x}(t)]\exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right] \\
&\to \int_{上}\mathcal{D}[\mathbf{x}(t)]\exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right]\left\{\exp\left[\left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}\right]_{上}\right\} \\
&+ \int_{下}\mathcal{D}[\mathbf{x}(t)]\exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right]\left\{\exp\left[\left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}\right]_{下}\right\}
\end{aligned} \tag{2.7.69}$$

在干涉区 B 找到粒子的概率依赖于整个跃迁振幅模的平方，因此依赖于来自上部和下部路径贡献的相位差. 由于 **B** 的存在，这个相位差正好是

$$\left[\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\int_{x_1}^{x_N}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}\right]_{上}-\left[\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\int_{x_1}^{x_N}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}\right]_{下}=\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\oint\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}$$
$$=\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\Phi_B, \tag{2.7.70}$$

其中的 Φ_B 代表不可穿透的圆柱体内部磁通量. 这意味着，当我们改变磁场强度时，在B区观测粒子的概率中存在一个正弦分量，其周期用磁通量的基本单位给出，即

$$\frac{2\pi\hbar c}{|e|}=4.135\times10^{-7}\text{高斯-厘米}^2 \tag{2.7.71}$$

我们强调这里讨论的干涉效应是纯粹量子力学的. 经典上，带电粒子的运动只由牛顿第二定律再加上洛伦兹力定律确定. 这里，像前面的束缚态问题一样，粒子绝不可能进入到 **B** 为有限的区域；在粒子波函数有限的所有区域内洛伦兹力恒为零. 然而有一组引人瞩目的干涉条纹，它依赖于在不可穿透的圆柱体内部存在还是不存在磁场. 这一点曾导致一些人得出结论：在量子力学中与其说 **B** 倒不如说 **A** 是基本的. 然而，值得注意的是，这两个例子中的观测量效应都仅仅依赖于 Φ_B，它可以直接用 **B** 来表示. 实验家们利用一根称为触须*的铁的磁化细丝，实现了证明阿哈罗诺夫-玻姆效应的实验.

磁单极

我们用量子物理最引人瞩目的预言之一来结束这一节，但它还有待于实验证实. 一个机敏的学习经典电动力学的学生很可能迷恋上这样的事实：在 **E** 和 **B** 之间存在很强的对称性，然而，类似于电荷的磁荷——通常称之为磁单极，却没有单独地存在于在麦克斯韦(Maxwell)方程中. 在自然界中观测到的磁场的来源是一个运动电荷，或者是一个静磁偶极子，而绝不是一个静磁荷. 代替

$$\nabla\cdot\mathbf{B}=4\pi\rho_M \tag{2.7.72}$$

与

$$\nabla\cdot\mathbf{E}=4\pi\rho, \tag{2.7.73}$$

的类似，在以通常方式书写麦克斯韦方程时，$\nabla\cdot\mathbf{B}$ 实际上为零. 量子力学并没有预言磁单极必须存在. 然而，它明白无误地要求，假如一个磁单极在自然界中不管什么时候被发现了，则磁荷的大小必须是借助于 e，$\hbar$ 和 c 量子化的，我们现在来证明这一点.

假定，类似于一个点电荷，存在一个位于原点的强度为 e_M 的点磁单极. 则静磁场由

$$\mathbf{B}=\left(\frac{e_M}{r^2}\right)\hat{\mathbf{r}}. \tag{2.7.74}$$

给出. 初看起来，似乎磁场 (2.7.74) 可以从

$$\mathbf{A}=\left[\frac{e_M(1-\cos\theta)}{r\sin\theta}\right]\hat{\boldsymbol{\phi}}. \tag{2.7.75}$$

推导出来. 回顾旋度在球坐标中的表示式：

$$\nabla\times\mathbf{A}=\hat{\mathbf{r}}\left[\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(A_\phi\sin\theta)-\frac{\partial A_\theta}{\partial\phi}\right]$$
$$+\hat{\theta}\frac{1}{r}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial A_r}{\partial\phi}-\frac{\partial}{\partial r}(rA_\phi)\right]+\hat{\boldsymbol{\phi}}\frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}(rA_\theta)-\frac{\partial A_r}{\partial\theta}\right]. \tag{2.7.76}$$

---

* 最近的一个这类实验见 A. Tonomura et al., *Phys. Rev. Lett.* **48** (1982) 1443.

但是矢量势（2.7.75）式有一个困难——在负 z 轴（$\theta=\pi$）上它是奇异的. 事实上，结果表明，对这个问题构造一个没有奇异性且到处都适用的势是不可能的. 要看到这一点，我们首先注意到，对于任何包围磁单极所在的原点的边界曲面，“高斯定理”都给出

$$\int_{\text{封闭曲面}} \mathbf{B}\cdot d\sigma = 4\pi e_M \tag{2.7.77}$$

另一方面，假如 $\mathbf{A}$ 是非奇异的，就会处处都有

$$\nabla\cdot(\nabla\times\mathbf{A}) = 0 \tag{2.7.78}$$

因此，

$$\int_{\text{封闭曲面}} \mathbf{B}\cdot d\boldsymbol{\sigma} = \int_{\text{曲面内体积}} \nabla\cdot(\nabla\times\mathbf{A})d^3x = 0, \tag{2.7.79}$$

它与（2.7.77）式矛盾.

然而，有人或许会争辩，因为矢量势只不过是求 $\mathbf{B}$ 的一种手段，我们并不需要坚持有一个处处适用的 $\mathbf{A}$ 的单一表示式. 假定我们构造一对这样的势，

$$\mathbf{A}^{(\mathrm{I})} = \left[\frac{e_M(1-\cos\theta)}{r\sin\theta}\right]\hat{\boldsymbol{\phi}}, \quad (\theta<\pi-\varepsilon) \tag{2.7.80a}$$

$$\mathbf{A}^{(\mathrm{II})} = -\left[\frac{e_M(1+\cos\theta)}{r\sin\theta}\right]\hat{\boldsymbol{\phi}}, \quad (\theta>\varepsilon) \tag{2.7.80b}$$

使得势 $\mathbf{A}^{(\mathrm{I})}$ 除了在一个环绕负 z 轴的由 $\theta=\pi-\varepsilon$ 定义的锥形内部以外处处有效；同样，势 $\mathbf{A}^{(\mathrm{II})}$ 在除了绕正 z 轴的一个由 $\theta=\varepsilon$ 定义的锥形内部以外处处有效；见图 2.13. 它们一起导致了处处都是正确的 $\mathbf{B}$ 的表示式*.

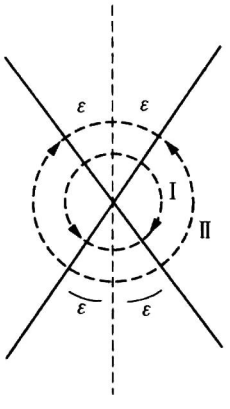


图 2.13　势 $\mathbf{A}^{(\mathrm{I})}$ 和 $\mathbf{A}^{(\mathrm{II})}$ 的适用区

现在考虑在重叠区 $\varepsilon<\theta<\pi-\varepsilon$ 发生了什么，在那里我们既可以用 $\mathbf{A}^{(\mathrm{I})}$ 也可以用 $\mathbf{A}^{(\mathrm{II})}$. 因为这两个势导致同样的磁场，它们必须通过一个规范变换彼此联系起来. 为了找到适合这个问题的 Λ，我们首先注意到

$$\mathbf{A}^{(\mathrm{II})} - \mathbf{A}^{(\mathrm{I})} = -\left(\frac{2e_M}{r\sin\theta}\right)\hat{\boldsymbol{\phi}}. \tag{2.7.81}$$

回顾球坐标中的梯度表示式

$$\nabla\Lambda = \hat{\mathbf{r}}\frac{\partial\Lambda}{\partial r} + \hat{\boldsymbol{\theta}}\frac{1}{r}\frac{\partial\Lambda}{\partial\theta} + \hat{\boldsymbol{\phi}}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\Lambda}{\partial\phi}, \tag{2.7.82}$$

我们推断

$$\Lambda = -2e_M\phi \tag{2.7.83}$$

将会做到这一点.

其次，我们考虑一个电荷为 e，受到（2.7.74）式磁场作用的带电粒子的波函数. 正如我们早些时候强调的，波函数的特殊形式依赖于采用的特殊的规范. 在重叠区我们既可以用 $\mathbf{A}^{(\mathrm{I})}$ 也可以用 $\mathbf{A}^{(\mathrm{II})}$，按照（2.7.55）式，相应的波函数彼此通过下式联系起来：

$$\psi^{(\mathrm{II})} = \exp\left(\frac{-2iee_M\phi}{\hbar c}\right)\psi^{(\mathrm{I})}. \tag{2.7.84}$$

波函数 $\psi^{(\mathrm{I})}$ 和 $\psi^{(\mathrm{II})}$ 各自都必须是单值的，因为一旦我们选择了特殊规范，用位置本征右矢展开的态右矢必须是唯一的. 毕竟，正如我们曾经反复强调的，波函数只不过是用位置本

---

* 这个问题另一个可选的方法是到处都用 $\mathbf{A}^{(\mathrm{I})}$，但要特别处理称作**狄拉克弦**的沿负 z 轴的一串奇点.

征右矢展开态右矢的展开系数.

现在让我们考查波函数 $\psi^{(\mathrm{II})}$ 在某个确定半径 r 的赤道（$\theta=\pi/2$）上的行为. 如果我们让方位角 ϕ 沿赤道增加，直到转一周，比如从 $\phi=0$ 到 $\phi=2\pi$，那时 $\psi^{(\mathrm{II})}$ 和 $\psi^{(\mathrm{I})}$ 一样都必须回到它的起始值，因为它们每一个都是单值函数. 按照（2.7.84）式，这是可能的，但仅当

$$\frac{2ee_M}{\hbar c}=\pm N,\quad N=0,\pm 1,\pm 2,\cdots \tag{2.7.85}$$

所以我们得到了一个影响极为深远的结论：磁荷必须是以

$$\frac{\hbar c}{2|e|}\simeq\left(\frac{137}{2}\right)|e|. \tag{2.7.86}$$

为单位量子化的.

最小的可能的磁荷是 $\hbar c/2|e|$，其中 e 是电荷. 有意思的是，一旦一个磁单极被假定存在，可以这么说，我们就可以反向使用（2.7.85）式去解释为什么电荷是量子化的，例如，为什么质子的电荷不可能是 0.999972 倍的 $|e|$*.

我们再一次重复指出，量子力学不要求磁单极存在. 然而，它毫不含糊地预言，一个磁荷，如果有一天它在自然界中被发现的话，一定是以单位 $\hbar c/2|e|$ 量子化的. 在量子力学中磁荷的量子化最早是由狄拉克于 1931 年证明的. 这里给出的推导源于吴大峻和杨振宁. 把狄拉克的量子化条件与角动量的量子化联系起来的一个不同的解，由 H. J. Lipkin, W. I. Weisberger, 和 M. Peshkin 在 *Annals of Physics* **53**（1969）203 上讨论过. 最后，在 5.6 节与绝热近似配合讨论贝里相位时，我们将再次回到这个题目.

习题

2.1 考虑正文中讨论的自旋进动问题. 它还可以在海森伯绘景中求解. 利用哈密顿量

$$H=-\left(\frac{eB}{mc}\right)S_z=\omega S_z,$$

写出时间相关算符 $S_x(t)$，$S_y(t)$ 和 $S_z(t)$ 的海森伯运动方程. 求解它们以得到作为时间函数的 $S_{x,y,z}$.

2.2 再看一下第 1 章习题 1.11 的哈密顿量. 假定打字员出了一个错，把 H 写成

$$H=H_{11}|1\rangle\langle 1|+H_{22}|2\rangle\langle 2|+H_{12}|1\rangle\langle 2|.$$

现在什么原理被破坏了？通过尝试利用这类不合法的哈密顿量求解最一般的问题（为了简单，你可以假定 $H_{11}=H_{22}=0$），阐明你的观点.

2.3 一个电子受到一个时间无关的、强度为 B 的沿正 z 方向的均匀磁场的作用. 在 $t=0$ 时已知电子处在 $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ 的本征态上，本征值为 $\hbar/2$，其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 是一个单位矢量，位于 xz 平面上，与 z 轴夹 β 角.

(a) 求找到电子处在 $s_y=\hbar/2$ 态上作为时间函数的概率.

(b) 求作为时间函数的 S_x 的期待值.

(c) 为让你自己放心，在 (i) $\beta\to 0$ 和 (ii) $\beta\to\pi/2$ 的极端情况下证明你的答案是有意义的.

2.4 导出中微子振荡概率（2.1.65）式，并与图 2.2 中的数据一起使用它估算 Δm^2c^4（以 eV^2 为单位）和 θ 的值.

2.5 设 $x(t)$ 是一维自由粒子在海森伯绘景中的坐标算符. 求

$$[x(t),x(0)].$$

---

* 实验上，电子和质子电荷数值的相等在 $4/10^{19}$ 的精度上得到确认.

2.6 考虑一个一维粒子，其哈密顿量由下式给出

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x).$$

通过计算 $[[H,x],x]$，证明

$$\sum_{a'}|\langle a''|x|a'\rangle|^2(E_{a'}-E_{a''})=\frac{\hbar^2}{2m},$$

其中 $|a'\rangle$ 是一个能量本征态，本征值为 $E_{a'}$.

2.7 考虑一个三维粒子，其哈密顿量由下式给出

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(\mathbf{x}).$$

通过计算 $[\mathbf{x}\cdot\mathbf{p},H]$，求

$$\frac{d}{dt}\langle\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}\rangle=\left\langle\frac{\mathbf{p}^2}{m}\right\rangle-\langle\mathbf{x}\cdot\nabla V\rangle.$$

为了使我们能把上面的关系式等同于维里定理的量子力学类似物，左边等于零是必要的. 这会在什么条件下发生？

2.8 考虑一个一维自由粒子的波包. $t=0$ 时它满足最小不确定度关系

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle=\frac{\hbar^2}{4}\quad(t=0).$$

此外，我们知道

$$\langle x\rangle=\langle p\rangle=0\quad(t=0).$$

利用海森伯绘景，当 $\langle(\Delta x)^2\rangle_{t=0}$ 给定时，求作为 t（$t\geqslant 0$）的函数的 $\langle(\Delta x)^2\rangle_t$.（提示：利用你在第 1 章习题 1.18 中得到的最小不确定度波包的性质.）

2.9 设 $|a'\rangle$ 和 $|a''\rangle$ 是厄米算符 A 的本征态，本征值分别为 a' 和 a''（$a'\neq a''$）. 哈密顿量算符由下式给出

$$H=|a'\rangle\delta\langle a''|+|a''\rangle\delta\langle a'|,$$

其中 δ 只是个实数.

(a) 显然，$|a'\rangle$ 和 $|a''\rangle$ 不是这个哈密顿量的本征态. 写出该哈密顿量的本征态. 它们的能量本征值是什么？

(b) 假定已知 $t=0$ 时系统处在 $|a'\rangle$ 态上. 在薛定谔绘景中写出 $t>0$ 时的态矢量.

(c) 如果已知 $t=0$ 时系统处在 $|a'\rangle$ 态上，在 $t>0$ 时找到该系统在 $|a''\rangle$ 态的概率是多少？

(d) 你能想出与这个问题相对应的一种物理情况吗？

2.10 含有一个粒子的一个盒子用一个薄的隔板分成左右两个隔间. 如果已知该粒子确定无疑地处在右（左）边，则状态用 $|R\rangle$（$|L\rangle$）表示，在那里我们忽略了在盒子的每一半中的空间变量. 然后，最一般的态矢量可以写成

$$|\alpha\rangle=|R\rangle\langle R|\alpha\rangle+|L\rangle\langle L|\alpha\rangle,$$

其中 $\langle R|\alpha\rangle$ 和 $\langle L|\alpha\rangle$ 可以看作“波函数”. 该粒子可以隧穿过隔板；这种隧道效应由哈密顿量

$$H=\Delta(|L\rangle\langle R|+|R\rangle\langle L|),$$

表征，其中的 Δ 是个有能量量纲的实数.

(a) 求归一化的能量本征右矢. 相应的能量本征值是什么？

(b) 在薛定谔绘景中基右矢 $|R\rangle$ 和 $|L\rangle$ 是固定不变的，而态矢量随时间运动. 假定系统就由上面在 $t=0$ 时给定的 $|\alpha\rangle$ 表示. 通过用适当的时间演化算符作用于 $|\alpha\rangle$，求 $t>0$ 时的态矢量 $|\alpha,t_0=0;t\rangle$.

(c) 假定 $t=0$ 时粒子确定无疑地处在右边. 观测到粒子在左边的、作为时间函数的概率是多少？

(d) 写出波函数 $\langle R|\alpha,t_0=0;t\rangle$ 和 $\langle L|\alpha,t_0=0;t\rangle$ 的耦合薛定谔方程. 证明该耦合薛定谔方程的解正是你在 (b) 中所预期的.

(e) 假定打印机出了个错，把 H 写成了

$$H=\Delta|L\rangle\langle R|.$$

通过明显地求解具有该哈密顿量的最普遍的时间演化问题，证明概率守恒被破坏了.

2.11 以一维简谐振子为例，阐明海森伯绘景与薛定谔绘景之间的差别. 特别是，讨论（a）动力学变量 x 和 p 以及（b）最一般的态矢量，分别在这两个绘景中如何随时间演化.

2.12 考虑一个处在一维简谐振子位势中的粒子. 假定在 $t=0$ 时态矢量为

$$\exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right)|0\rangle,$$

其中 p 是动量算符，而 a 是某个具有长度量纲的数. $|0\rangle$ 是这样的一个态，它使 $\langle x\rangle=0=\langle p\rangle$. 利用海森伯绘景求 $t\geqslant 0$ 时的期待值 $\langle x\rangle$.

2.13 （a）写出 $t=0$ 时习题 2.12 中确定的态的波函数（在坐标空间）. 你可以利用

$$\langle x'|0\rangle=\pi^{-1/4}x_0^{-1/2}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right],\quad \left(x_0\equiv\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}\right).$$

（b）求在 $t=0$ 时的基态中找到该状态概率的简单表示式. $t>0$ 时这个概率改变吗？

2.14 考虑一个一维简谐振子.

（a）利用

$$\left.\begin{matrix}a\\a^\dagger\end{matrix}\right\}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x\pm\frac{ip}{m\omega}\right),\quad \left.\begin{matrix}a|n\rangle\\a^\dagger|n\rangle\end{matrix}\right\}=\begin{cases}\sqrt{n}\,|n-1\rangle\\ \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\end{cases},$$

计算 $\langle m|x|n\rangle$，$\langle m|p|n\rangle$，$\langle m|x^2|n\rangle$ 和 $\langle m|p^2|n\rangle$.

（b）维里定理可表述为

$$\left\langle\frac{\mathbf{p}^2}{m}\right\rangle=\langle\mathbf{x}\cdot\nabla V\rangle\quad\text{三维时，}\quad\text{或}\quad\left\langle\frac{p^2}{m}\right\rangle=\left\langle x\frac{dV}{dx}\right\rangle\quad\text{一维时.}$$

检验对于动能和势能在一个能量本征态上的期待值，维里定理成立.（按勘误表要求，这里给出了维里定理. ——译者注）

2.15 （a）利用

$$\langle x'|p'\rangle=(2\pi\hbar)^{-1/2}e^{ip'x'/\hbar}\quad(\text{一维}),$$

证明

$$\langle p'|x\,|\alpha\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\langle p'|\alpha\rangle.$$

（b）考虑一个一维简谐振子. 从态矢量的薛定谔方程出发，推导出动量空间波函数满足的薛定谔方程（一定要区分开算符 p 和本征值 p'）. 你能猜出动量空间的能量本征函数吗？

2.16 考虑一个称为**关联函数**的函数，其定义为

$$C(t)=\langle x(t)\,x(0)\rangle,$$

其中 $x(t)$ 是海森伯绘景中的位置算符. 对一个一维简谐振子的基态明显地求出该关联函数.

2.17 再一次考虑一个一维简谐振子. 用代数方法，即不用波函数做下列几件事：

（a）构造 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的这样的一个线性组合，使得 $\langle x\rangle$ 尽可能的大.

（b）假定该振子在 $t=0$ 时处于（a）中所构造的态上. 在薛定谔绘景中 $t>0$ 时的态矢量是什么？利用（i）薛定谔绘景和（ii）海森伯绘景，求 $t>0$ 时作为时间函数的期待值 $\langle x\rangle$.

（c）利用两个绘景中的任何一个求作为时间函数的 $\langle(\Delta x)^2\rangle$.

2.18 证明对于一维简谐振子，

$$\langle 0|e^{ikx}|0\rangle=\exp[-k^2\langle 0|x^2|0\rangle/2],$$

其中 x 是坐标算符.

2.19 一个一维简谐振子的相干态定义为（非厄米的）湮灭算符 a 的一个本征态：

$$a|\lambda\rangle=\lambda|\lambda\rangle,$$

其中的 λ，一般地说，是个复数.

（a）证明

$$|\lambda\rangle=e^{-|\lambda|^2/2}e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle$$

是一个归一化的相干态.

(b) 证明对这样的一个态有最小不确定度关系.

(c) 把$|\lambda\rangle$写成

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0} f(n)|n\rangle.$$

证明$|f(n)|^2$对n的分布是泊松形式的. 求最可几的n值，以及对应的E值.

(d) 证明一个相干态也可以通过将一个平移（有限的位移）算符$e^{-ipl/\hbar}$（其中p是动量算符，而l是位移的距离）作用于基态上得到. 还请见 Gottfried 1966，262～264 页.

2.20 设

$$J_\pm = \hbar a_\pm^\dagger a_\pm, \quad J_z = \frac{\hbar}{2}(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-), \quad N = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-,$$

其中$a_\pm$和$a_\pm^\dagger$是两个独立的简谐振子的湮灭和产生算符，它们满足通常简谐振子的对易关系. 证明

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm, \quad [\mathbf{J}^2, J_z] = 0, \quad \mathbf{J}^2 = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right)N\left[\left(\frac{N}{2}\right)+1\right].$$

其中$\mathbf{J}^2$为

$$\mathbf{J}^2 \equiv J_z^2 + \left(\frac{1}{2}\right)(J_+ J_- + J_- J_+).$$

2.21 通过使用生成函数推导正交关系（2.5.29）式，导出（2.5.28）式中的归一常数c_n. 从计算出积分

$$I = \int_{-\infty} g(x,t)g(x,s)e^{-x^2}dx,$$

出发，之后借助于厄米多项式的级数再一次利用生成函数考虑这个积分.

2.22 考虑一个质量为m的粒子处于下列形式的一维势中：

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}kx^2 & \text{对于 } x>0 \\ \infty & \text{对于 } x<0. \end{cases}$$

(a) 其基态能量是什么?

(b) 对于该基态的期待值$\langle x^2\rangle$是什么?

2.23 一个一维粒子约束在两个刚性壁之间，即：

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{对于 } 0<x<L \\ \infty, & \text{对于 } x<0,\ x>L. \end{cases}$$

$t=0$时确知该粒子准确地处在$x=L/2$处. 在能量的各种本征态上找到该粒子的相对概率是什么? 写出$t\geqslant 0$时的波函数. (你无需担心绝对归一化、收敛性和其他的一些数学细节).

2.24 考虑一维粒子被一个δ函数势

$$V(x) = -\nu_0\delta(x), \quad (\nu_0 \text{ 为正实数})$$

束缚于一个固定的中心位置处. 求波函数和基态束缚能. 有激发的束缚态吗?

2.25 一个一维的质量为m的粒子被一个吸引的δ函数势

$$V(x) = -\lambda\delta(x), \quad (\lambda>0)$$

束缚于一个固定的中心. 在$t=0$时该势突然被撤掉（即：$t>0$时，$V=0$）. 求$t>0$时的波函数. (要定量地求解! 但是你不必试图计算可能出现的积分).

2.26 一个一维粒子（$-\infty<x<\infty$）受到一个可从

$$V=\lambda x, \quad (\lambda>0)$$

导出的恒力的作用.

(a) 其能谱是连续的还是分立的? 写出由E所确定的能量本征函数的近似表示式. 然后粗略地画出其示意图.

(b) 简略地讨论，如果用

$$V=\lambda|x|.$$

代替 V，什么地方需要改动？

2.27 推导二维自由粒子态密度表示式，它是用在一个边长为 L 的盒子中的周期性边界条件归一的.

2.28 考虑限制在一个中空的圆柱壳内的一个电子，该圆柱的轴与 z 轴相吻合. 要求波函数在内壁 $\rho=\rho_a$，外壁 $\rho=\rho_b$，以及底部 $z=0$ 和顶部 $z=L$ 等处均为零.

(a) 求能量本征函数.（不必担心归一化.）证明能量本征值由下式给出：

$$E_{lmn}=\left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\right)\left[k_{mn}^2+\left(\frac{l\pi}{L}\right)^2\right] \quad (l=1,2,3,\cdots,\ m=0,1,2,\cdots),$$

其中 k_{mn} 是如下超越方程的第 n 个根

$$J_m(k_{mn}\rho_b)N_m(k_{mn}\rho_a)-N_m(k_{mn}\rho_b)J_m(k_{mn}\rho_a)=0,$$

(b) 当 $0<\rho<\rho_a$ 区域存在一个均匀磁场 $\mathbf{B}=B\hat{\mathbf{z}}$ 时，重复求解同样的问题. 注意，尽管电子从未“触及”该磁场，能量本征值仍会受到磁场的影响.

(c) 特别是，比较 $B=0$ 与 $B\neq0$ 问题中的基态. 如果我们要求在 B 存在时的基态能量不变，展示我们求得的“磁通量量子化”为

$$\pi\rho_a^2B=\frac{2\pi N\hbar c}{e}, \quad (N=0,\pm1,\pm2,\cdots).$$

2.29 考虑一个在位势 $V(x)$ 的影响下做一维运动的粒子. 假定它的波函数可以写成 $\exp[iS(x,t)/\hbar]$. 证明在某种意义上 $\hbar$ 可以视为小量的范围内，$S(x,t)$ 满足经典的哈密顿-雅可比方程. 展示从 $V(x)$ 等于零的经典哈密顿-雅可比方程的解出发，人们怎样可以求得一个平面波的正确波函数. 为什么在这种特殊情况下我们能得到精确的波函数？

2.30 使用球坐标，求解氢原子基态和激发态 $\mathbf{j}$ 的表示式. 特别是证明，对于 $m_l\neq0$ 的态，在这样的一种意义上存在一个环形通量，即 $\mathbf{j}$ 是沿着 ϕ 增加还是减小的方向取决于 m_l 是正还是负.

2.31 导出（2.6.16）式，并求得（2.6.16）式的三维推广.

2.32 如同在（2.6.20）－（2.6.22）式中那样，定义配分函数为

$$Z=\int d^3x'K(\mathbf{x}',t;\mathbf{x}',0)|_{\beta=it/\hbar},$$

证明通过取

$$-\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}, \quad (\beta\to\infty)$$

可求得基态能量. 以一维盒子中的一个粒子为例说明这个结果.

2.33 类似于（2.6.26）式，动量空间的传播子由 $\langle\mathbf{p}'',t\,|\,\mathbf{p}',t_0\rangle$ 给出. 推导对自由粒子的 $\langle\mathbf{p}'',t\,|\,\mathbf{p}',t_0\rangle$ 显式表示式.

2.34 (a) 写出一个简谐振子对于一个有限时间间隔的经典作用量.

(b) 对于一个简谐振子，利用费曼方法构造出微小的 $t_n-t_{n-1}=\Delta t$ 情况下的 $\langle x_n,t_n\,|\,x_{n-1},t_{n-1}\rangle$. 只保留到 $(\Delta t)^2$ 量级的项，证明它与由（2.6.26）式给出的传播子在 $t-t_0\to0$ 时的极限完全一致.

2.35 陈述施温格作用原理（见 Finkelstein 1973，155 页）. 通过把施温格原理求积分求出 $\langle x_2t_2\,|\,x_1t_1\rangle$，并将其与对于 $\langle x_2t_2\,|\,x_1t_1\rangle$ 相应的费曼表达式比较. 描述这两个表达式的经典极限.

2.36 证明在 2.7 节讨论的引力诱导问题上波动力学方法也会给出相位差表达式（2.7.17）式.

2.37 (a) 证明（2.7.25）式和（2.7.27）式的正确性.

(b) 证明具有由（2.7.31）式给定的 $\mathbf{j}$ 的连续性方程（2.7.30）的正确性.

2.38 考虑一个电荷为 e 的无自旋粒子的哈密顿量. 在静磁场存在时，相互作用项可以通过

$$\mathbf{p}_{算符}\to\mathbf{p}_{算符}-\frac{e\mathbf{A}}{c},$$

生成，其中 **A** 是适当的矢量势．为了简单起见，假定磁场 **B** 是均匀的，且沿 z 的正方向．证明上述做法的确导致轨道磁矩 $(e/2mc)\mathbf{L}$ 与磁场 **B** 相互作用的正确表示式．证明还存在一个正比于 $B^2(x^2+y^2)$ 的多余的项，并简略地解释它的物理意义．

2.39 一个电子在一个均匀的、沿 z 方向的磁场（$\mathbf{B}=B\hat{\mathbf{z}}$）中运动．

(a) 求

$$[\Pi_x,\Pi_y],$$

其中

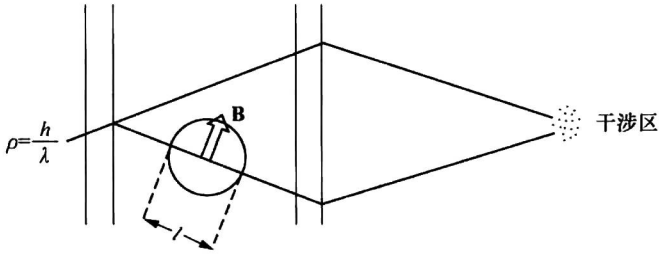
$$\Pi_x\equiv p_x-\frac{eA_x}{c},\quad \Pi_y\equiv p_y-\left(\frac{eA_y}{c}\right).$$

(b) 通过将哈密顿量及 (a) 中得到的对易关系与一维谐振子问题中相应的结果比较，展示我们怎样能够立即写出能量本征值

$$E_{k,n}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\left(\frac{|eB|\hbar}{m}\right)\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

其中 $\hbar k$ 是算符 p_z 的连续本征值，而 n 是包括零在内的非负整数．

2.40 考虑中子干涉仪



证明在计数率中产生两个相继极大值的磁场差由下式给出

$$\Delta B=\frac{4\pi\hbar c}{|e|g_n\bar{\lambda}l},$$

其中 g_n（$=-1.91$）是中子磁矩．单位为 $-e\hbar/2m_nc$．（假如你在 1967 年解出了这个问题的话，你就会在 *Physical Review Letters* 上发表你的解！）

第 3 章　角动量理论

这一章关注角动量理论和相关论题的系统处理. 在现代物理中角动量理论的重要性怎么强调也不过分. 在分子、原子及核谱学中，彻底理解角动量是极为重要的；角动量的考虑不仅在散射和碰撞问题中，也在束缚态问题中起着重要的作用. 此外，角动量概念还有着重要的推广——核物理中的同位旋，粒子物理中的 SU(3)，SU(2)⊗U(1) 等等.

3.1　转动与角动量对易关系

有限转动与无穷小转动的对比

我们回想起在基础物理绕同一个轴的转动是对易的，而绕不同轴的转动不对易. 例如，绕 z 轴转 30°紧接着绕同一个 z 轴再转 60°显然等价于绕同样的轴先转一个 60°再转一个 30°. 然而，让我们考虑一个绕 z 轴的 90°的转动，用 $R_z(\pi/2)$ 表示，紧接着绕 x 轴转 90°，用 $R_x(\pi/2)$ 表示；把它和一个绕 x 轴转 90°，紧跟着绕 z 轴转 90°对比. 最终的结果是不同的，这一点我们可以从图 3.1 看到.

我们的第一个基本任务是找出一个定量的、绕不同轴的转动不对易的方式. 为此，我们先回忆一下三维的转动怎样用 3×3 的实正交矩阵来表示. 考虑一个矢量 $\mathbf{V}$，它的三个分量为 V_x，V_y 和 V_z. 当我们转动时，这三个分量变成某个另外的数组 V'_x，V'_y 和 V'_z. 老的分量和新的分量通过一个 3×3 的正交矩阵 R 联系起来：

$$\begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & R & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}, \tag{3.1.1a}$$

$$RR^T = R^T R = 1, \tag{3.1.1b}$$

其中的上标代表矩阵的转置. 正交矩阵有一个性质：

$$\sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2} = \sqrt{V_x'^2 + V_y'^2 + V_z'^2} \tag{3.1.2}$$

是自动满足的.

为明确起见，我们考虑一个绕 z 轴转 ϕ 角的转动. 本书中自始至终沿用的约定是一个转动算符影响物理系统本身，如图 3.1 所示，而坐标轴保持不变. 当所讨论的转动在 xy 平面上从正 z 轴看是逆时针的，我们就取 ϕ 角为正. 如果把一个右手螺旋与这样一个转动联系起来，一个绕 z 轴的正 ϕ 角的转动意味着这个螺旋朝正 z 方向前进. 在这样的约定下，很容易证明

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{3.1.3}$$

假如我们采用不同的约定，让物理系统保持固定不动，而坐标轴被转动，这个具有正 ϕ 角

的同一矩阵，就会表示从正 z 方向看的 x 轴和 y 轴的顺时针转动. 显然，重要的是不要把这两种约定弄混！有一些作者通过使用术语“主动转动”表示物理系统转动而“被动转动”表示坐标轴转动来区分这两种方法.

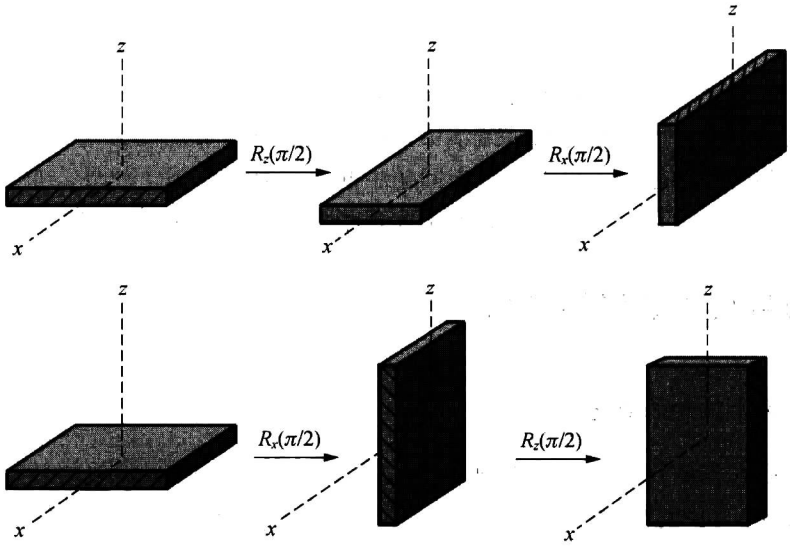


图 3.1 演示有限转动不对易的例子

我们特别感兴趣的是 R_z 的无穷小形式：

$$R_z(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1-\frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon & 0\\ \varepsilon & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}, \tag{3.1.4}$$

其中略去了 ε^3 以及更高阶的项. 同样我们有

$$R_x(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon\\ 0 & \varepsilon & 1-\frac{\varepsilon^2}{2}\end{pmatrix} \tag{3.1.5a}$$

和

$$R_y(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1-\frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon\\ 0 & 1 & 0\\ -\varepsilon & 0 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2}\end{pmatrix}, \tag{3.1.5b}$$

它们可以由（3.1.4）式通过 x，y，z 的循环置换——即，$x\to y$，$y\to z$，$z\to x$——得到. 现在，把一个 y 轴转动紧跟着一个 x 轴转动与一个 x 轴转动紧跟着一个 y 轴转动的效果加以比较. 由矩阵乘法得

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon)=\begin{pmatrix}1-\frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon\\ \epsilon^2 & 1-\frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon\\ -\epsilon & \epsilon & 1-\epsilon^2\end{pmatrix} \tag{3.1.6a}$$

和

$$R_y(\epsilon)R_x(\epsilon)=\begin{pmatrix}1-\frac{\epsilon^2}{2} & \epsilon^2 & \epsilon\\ 0 & 1-\frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon\\ -\epsilon & \epsilon & 1-\epsilon^2\end{pmatrix} \tag{3.1.6b}$$

从（3.1.6a）式与（3.1.6b）式得到第一个重要结果：如果忽略 ϵ^2 量级以及更高量级的项，则绕不同轴的无穷小转动对易*. 第二个，也是更重要的结果，涉及这样的一种方式：当 ϵ^2 量级的项被保留下来时，绕不同轴的转动不再对易

$$\begin{aligned}R_x(\epsilon)R_y(\epsilon)-R_y(\epsilon)R_x(\epsilon)&=\begin{pmatrix}0 & -\epsilon^2 & 0\\ \epsilon^2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\\ &=R_z(\epsilon^2)-1,\end{aligned} \tag{3.1.7}$$

在这里，整个推导过程中所有比 ϵ^2 量级更高的项都被忽略了. 我们还有

$$1=R_{\text{任何}}(0), \tag{3.1.8}$$

其中的“任何”代表对任意转动轴. 于是最终的结果可以写成

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon)-R_y(\epsilon)R_x(\epsilon)=R_z(\epsilon^2)-R_{\text{任何}}(0), \tag{3.1.9}$$

这是绕不同转动轴的转动操作之间的对易关系的一个例子，稍后我们将用它推导量子力学中的角动量对易关系.

量子力学中的无穷小转动

到此为止，我们还没有用到量子力学概念. 矩阵 R 只是一个 3×3 的正交矩阵，它作用于写成列矩阵形式的矢量 $\mathbf{V}$ 上. 现在我们必须弄懂如何表征量子力学中的转动.

因为转动影响物理系统，预期转动后系统的态右矢与原来未经转动系统的态右矢有所不同. 给定由一个 3×3 正交矩阵 R 表征的一个转动算符 R，我们将其与适当的右矢空间里的一个算符$\mathcal{D}(R)$ 这样联系起来，使得：

$$|\alpha\rangle_R=\mathcal{D}(R)|\alpha\rangle, \tag{3.1.10}$$

其中 $|\alpha\rangle_R$ 和 $|\alpha\rangle$ 分别代表转动后系统和原始系统的右矢**. 注意，3×3 正交矩阵 R 作用在一个由经典矢量的三个分量构成的一个列矩阵上，然而，算符$\mathcal{D}(R)$ 作用在右矢空间的态矢量上. $\mathcal{D}(R)$ 的矩阵表示——将在随后几节非常详细地研究——依赖所涉及的特定的右矢空间的维数 N. 对于 $N=2$，适用于描写没有其他自由度的自旋$\frac{1}{2}$系统，$\mathcal{D}(R)$ 用一个 2

---

* 在基础力学中有一个熟悉的例子. 角速度矢量 ω，它表征转动角在一个无穷小时间间隔内的一个无穷小改变，遵从矢量加法的通常规则，包括矢量加法的交换性. 然而，我们不能认为一个有限的角变化具有这一矢量性质.

** 符号$\mathcal{D}$来自德文的 *Drehung*，意思是“转动”.

×2 矩阵表示；而对于自旋为 1 的系统，适当的表示是一个 3×3 的幺正矩阵，等等.

要构建转动算符$\mathcal{D}(R)$，最有成效的方法仍然是先考查它在一个无穷小转动下的性质. 我们几乎可以猜到必须怎样通过类比来进行. 在我们于 1.6 节和 2.1 节分别研究的平移与时间演化这两种情况下，适用的无穷小算符都可以用一个厄米算符 G 写成

$$U_\varepsilon = 1 - iG\varepsilon. \tag{3.1.11}$$

具体说来，对于沿 x 方向位移 dx' 的无穷小平移取

$$G \to \frac{p_x}{\hbar}, \quad \varepsilon \to dx' \tag{3.1.12}$$

而对于时间平移 dt 的无穷小时间演化取

$$G \to \frac{H}{\hbar}, \quad \varepsilon \to dt \tag{3.1.13}$$

由经典力学我们知道角动量是转动的生成元，就像动量和哈密顿量分别为平移与时间演化的生成元一样. 因此，我们以这样的方式来定义角动量算符 J_k，通过在（3.1.11）式中让

$$G \to \frac{J_k}{\hbar}, \quad \varepsilon \to d\phi \tag{3.1.14}$$

得到一个绕第 k 个轴转 $d\phi$ 角的无穷小转动算符. 若 J_k 是厄米的，无穷小转动算符保证是幺正的，而且在 $d\phi \to 0$ 的极限下约化为单位算符. 更普遍地，对一个绕着由单位矢量 $\hat{\mathbf{n}}$ 表征的方向转无穷小 $d\phi$ 角的转动，我们有

$$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, d\phi) = 1 - i\left(\frac{\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}}{\hbar}\right)d\phi \tag{3.1.15}$$

在本书中，我们强调并没有把角动量算符定义为 $\mathbf{x}\times\mathbf{p}$. 这一点很重要，因为自旋角动量——我们的普遍形式也适用于它——与 x_i 和 p_j 毫无关系. 换个方式讲，在经典力学中，可以证明定义为 $\mathbf{x}\times\mathbf{p}$ 的角动量是转动的生成元；相比之下，在量子力学中我们定义 $\mathbf{J}$ 使得一个无穷小转动算符取（3.1.15）式形式.

一个有限转动可以通过组合相继地绕同一个轴的无穷小转动得到. 例如，如果我们对于一个绕 z 轴转 ϕ 角的有限转动感兴趣，我们考虑

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_z(\phi) &= \lim_{N\to\infty}\left[1 - i\left(\frac{J_z}{\hbar}\right)\left(\frac{\phi}{N}\right)\right]^N \\ &= \exp\left(\frac{-iJ_z\phi}{\hbar}\right) \\ &= 1 - \frac{iJ_z\phi}{\hbar} - \frac{J_z^2\phi^2}{2\hbar^2} + \cdots.\end{aligned} \tag{3.1.16}$$

为了求得角动量对易关系，我们还需要一个概念. 正如我们前面评注的，对每个用 3×3 正交矩阵 R 表示的转动 R，在恰当的右矢空间中都存在一个转动算符$\mathcal{D}(R)$. 我们进一步假设$\mathcal{D}(R)$ 与 R 有相同的群性质

$$\text{单位元：} \quad R\cdot 1 = R \Rightarrow \mathcal{D}(R)\cdot 1 = \mathcal{D}(R) \tag{3.1.17a}$$

$$\text{封闭性：} \quad R_1R_2 = R_3 \Rightarrow \mathcal{D}(R_1)\,\mathcal{D}(R_2) = \mathcal{D}(R_3) \tag{3.1.17b}$$

$$\text{逆：} \quad RR^{-1} = 1 \Rightarrow \mathcal{D}(R)\,\mathcal{D}^{-1}(R) = 1, \quad R^{-1}R = 1 \Rightarrow \mathcal{D}^{-1}(R)\,\mathcal{D}(R) = 1 \tag{3.1.17c}$$

$$
\begin{aligned}
\text{结合律：}\quad & R_1(R_2R_3)=(R_1R_2)R_3=R_1R_2R_3 \\
& \Rightarrow \mathcal{D}(R_1)[\mathcal{D}(R_2)\,\mathcal{D}(R_3)] \\
& =[\mathcal{D}(R_1)\,\mathcal{D}(R_2)]\,\mathcal{D}(R_3) \\
& =\mathcal{D}(R_1)\,\mathcal{D}(R_2)\,\mathcal{D}(R_3).
\end{aligned}
\tag{3.1.17d}
$$

现在让我们返回到基于 R 矩阵写成的转动操作（3.1.9）式的基本对易关系. 它的转动算符类似公式为

$$
\begin{aligned}
&\left(1-\frac{iJ_x\epsilon}{\hbar}-\frac{J_x^2\epsilon^2}{2\hbar^2}\right)\left(1-\frac{iJ_y\epsilon}{\hbar}-\frac{J_y^2\epsilon^2}{2\hbar^2}\right) \\
&-\left(1-\frac{iJ_y\epsilon}{\hbar}-\frac{J_y^2\epsilon^2}{2\hbar^2}\right)\left(1-\frac{iJ_x\epsilon}{\hbar}-\frac{J_x^2\epsilon^2}{2\hbar^2}\right)=1-\frac{iJ_z\epsilon^2}{\hbar}-1.
\end{aligned}
\tag{3.1.18}
$$

ϵ 量级的项已自动地消掉了. 让（3.1.18）式两边的 ϵ^2 量级的项相等，我们得到

$$
[J_x,J_y]=i\hbar J_z, \tag{3.1.19}
$$

将这种做法重复用于绕其他轴的转动可得到

$$
[J_i,J_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k, \tag{3.1.20}
$$

该式称为**角动量的基本对易关系**.

一般说来，当无穷小变换的生成元不对易时，相应操作的群称为**非阿贝尔群**. 基于（3.1.20）式，三维转动群是非阿贝尔的. 相比之下，三维平移群是阿贝尔的，因为即使 $i\neq j$，p_i 和 p_j 也是对易的.

注意在获得对易关系（3.1.20）时，使用了以下两个概念

1. J_k 是绕第 k 轴转动的生成元.
2. 绕不同轴的转动不对易.

毫不夸张地说，对易关系（3.1.20）式以一种紧凑的方式归纳了三维转动的一切基本性质.

3.2　自旋 $\frac{1}{2}$ 系统和有限转动

自旋 $\frac{1}{2}$ 的转动算符

角动量对易关系（3.1.20）可以实现的最低维数 $N=2$. 在第 1 章的习题 1.8 中读者已经核对过，由

$$
\begin{aligned}
S_x&=\left(\frac{\hbar}{2}\right)\{(|+\rangle\langle-|)+(|-\rangle\langle+|)\}, \\
S_y&=\left(\frac{i\hbar}{2}\right)\{-(|+\rangle\langle-|)+(|-\rangle\langle+|)\}, \\
S_z&=\left(\frac{\hbar}{2}\right)\{(|+\rangle\langle+|)-(|-\rangle\langle-|)\}
\end{aligned}
\tag{3.2.1}
$$

定义的算符满足把 J_k 换成 S_k 的对易关系(3.1.20)式. 自然界利用(3.1.20)式的最低维实现不是先验显然的，但许多实验——从原子光谱到核磁共振——足以让我们相信这就是实际的情况.

考虑一个绕 z 轴转有限角度 ϕ 的转动. 如果一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的右矢在转动前由 $|\alpha\rangle$ 给

定，则转动后的右矢为

$$|\alpha\rangle_R = \mathcal{D}_z(\phi)|\alpha\rangle \tag{3.2.2}$$

其中

$$\mathcal{D}_z(\phi) = \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right). \tag{3.2.3}$$

为了看到这个算符真的转动了这个物理系统，让我们看一看它对于$\langle S_x\rangle$的影响. 转动之下这个期待值变化如下

$$\langle S_x\rangle \to {}_R\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle_R = \langle\alpha|\mathcal{D}_z^\dagger(\phi)S_x\mathcal{D}_z(\phi)|\alpha\rangle, \tag{3.2.4}$$

因此我们必须计算

$$\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right)S_x\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right). \tag{3.2.5}$$

为了教学原因，我们用两种不同的方法计算它.

推导1：这里我们使用由（3.2.1）式给出的S_x的具体形式. 于是对（3.2.5）式，我们得到

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\hbar}{2}\right)\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right)\{(|+\rangle\langle-|)+(|-\rangle\langle+|)\}\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right)\\
&=\left(\frac{\hbar}{2}\right)(e^{i\phi/2}|+\rangle\langle-|e^{i\phi/2}+e^{-i\phi/2}|-\rangle\langle+|e^{-i\phi/2})\\
&=\frac{\hbar}{2}[\{(|+\rangle\langle-|)+(|-\rangle\langle+|)\}\cos\phi+i\{(|+\rangle\langle-|)-(|-\rangle\langle+|)\}\sin\phi]\\
&=S_x\cos\phi-S_y\sin\phi.
\end{aligned} \tag{3.2.6}$$

推导2：换一种做法，我们可以使用（2.3.47）式计算（3.2.5）式：

$$\begin{aligned}
\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right)S_x\exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) &= S_x+\left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)\underbrace{[S_z,S_x]}_{i\hbar S_y}\\
&+\left(\frac{1}{2!}\right)\left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^2\underbrace{[S_z,\underbrace{[S_z,S_x]}_{i\hbar S_y}]}_{\hbar^2 S_x}+\left(\frac{1}{3!}\right)\left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^3\underbrace{[S_z,\underbrace{[S_z,\underbrace{[S_z,S_x]}_{i\hbar S_y}]}_{\hbar^2 S_x}]}_{i\hbar^3 S_y}+\cdots\\
&=S_x\left[1-\frac{\phi^2}{2!}+\cdots\right]-S_y\left[\phi-\frac{\phi^3}{3!}+\cdots\right]\\
&=S_x\cos\phi-S_y\sin\phi.
\end{aligned} \tag{3.2.7}$$

注意，在推导2中我们只用到了S_i的对易关系，所以这个方法可被推广到角动量高于$\frac{1}{2}$的系统的转动.

对于自旋$\frac{1}{2}$，这两种方法都给出

$$\langle S_x\rangle \to {}_R\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle_R = \langle S_x\rangle\cos\phi-\langle S_y\rangle\sin\phi, \tag{3.2.8}$$

其中，无下标的期待值被理解为是对（老的）未转动的系统取的. 类似地，

$$\langle S_y\rangle \to \langle S_y\rangle\cos\phi+\langle S_x\rangle\sin\phi. \tag{3.2.9}$$

至于S_z的期待值，由于S_z与$\mathcal{D}_z(\phi)$对易，因而无变化

$$\langle S_z\rangle \to \langle S_z\rangle. \tag{3.2.10}$$

关系式（3.2.8）、（3.2.9）和（3.2.10）是十分合理的. 它们表明当转动算符（3.2.3）

作用于态右矢时，它的确把 **S** 的期待值绕 z 轴转动了 ϕ 角. 换句话说，自旋算符期待值的行为仿佛是在旋转

$$\langle S_k\rangle \to \sum_l R_{kl}\langle S_l\rangle, \tag{3.2.11}$$

之下的经典矢量，其中 R_{kl} 是所涉及问题中确定转动的 3×3 正交矩阵 R 的矩阵元. 从我们的推导 2 应该很清楚，这个性质不只限于自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的自旋算符. 一般地说，在转动下，我们有

$$\langle J_k\rangle \to \sum_l R_{kl}\langle J_l\rangle \tag{3.2.12}$$

其中 J_k 是满足角动量对易关系（3.1.20）式的转动生成元. 稍后，将证明这种关系可以进一步推广到任何矢量算符.

至此每件事情都在预料之中. 但现在，准备给你一个惊喜！稍微仔细地考查一下转动算符（3.2.3）式在一般的态右矢

$$|\alpha\rangle = |+\rangle\langle+|\alpha\rangle + |-\rangle\langle-|\alpha\rangle, \tag{3.2.13}$$

上的效应. 我们看到

$$\exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = e^{-i\phi/2}|+\rangle\langle+|\alpha\rangle + e^{i\phi/2}|-\rangle\langle-|\alpha\rangle. \tag{3.2.14}$$

在这里，半角 $\phi/2$ 的出现具有一个很意思的后果.

让我们考虑一个转 2π 角的转动. 那时我们有

$$|\alpha\rangle_{R_z(2\pi)} \to -|\alpha\rangle. \tag{3.2.15}$$

因此，转了 360°以后的态右矢与原来的右矢差了一个负号. 我们需要一个 720°（$\phi=4\pi$）的转动，才能回到具有正号的同样的右矢. 注意，对于 **S** 的期待值，这个负号消失了，因为 **S** 被 $|\alpha\rangle$ 和 $\langle\alpha|$ 夹在中间，而这两个右矢和左矢都改变了符号. 这个负号能被观测到吗？在讨论自旋进动之后，我们将给出这个有趣问题的答案.

再谈自旋进动

现在用一种新的观点来处理在 2.1 节已经讨论过的自旋进动问题. 回想一下这个问题的基本哈密顿量为

$$H = -\left(\frac{e}{m_e c}\right)\mathbf{S}\cdot\mathbf{B} = \omega S_z, \tag{3.2.16}$$

其中

$$\omega \equiv \frac{|e|B}{m_e c}. \tag{3.2.17}$$

基于该哈密顿量的时间演化算符由

$$\mathcal{U}(t,0) = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{-iS_z\omega t}{\hbar}\right). \tag{3.2.18}$$

给出. 把这个方程与（3.2.3）式比较，我们看到在（3.2.3）式中令 ϕ 等于 ωt，这个时间演化算符就与（3.2.3）式中的转动算符精确地相同. 这样，我们就可立即看到为什么这个哈密顿量引起自旋进动. 重新改写（3.2.8）式、（3.2.9）式和（3.2.10）式，我们得到

$$\langle S_x\rangle_t = \langle S_x\rangle_{t=0}\cos\omega t - \langle S_y\rangle_{t=0}\sin\omega t, \tag{3.2.19a}$$

$$\langle S_y\rangle_t = \langle S_y\rangle_{t=0}\cos\omega t + \langle S_x\rangle_{t=0}\sin\omega t, \tag{3.2.19b}$$

$$\langle S_z\rangle_t = \langle S_z\rangle_{t=0}. \tag{3.2.19c}$$

在 $t=2\pi/\omega$ 之后，自旋回到原始方向.

这组方程可以用于讨论一个 μ 子的自旋进动，该粒子是一个类电子的粒子，其重量是电子的 210 倍. μ 子的磁矩可以从其他一些实验——例如，μ 子偶素，一个正的 μ 子与一个电子的束缚态的超精细分裂——确定，结果正如自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的狄拉克相对论理论所预期的那样为 $e\hbar/2m_\mu c$. （在这里我们将忽略非常小的、来自量子场论效应的修正.）知道了磁矩我们就能预言进动的角频率. 因此，(3.2.19) 式就可以，事实上已经，被实验检验（见图 2.1）. 实际上，当外磁场引起自旋进动时，可利用来自 μ 衰变的电子倾向于优先沿 μ 子自旋反方向发射来分析自旋的方向.

现在让我们来看一下态右矢自身的时间演化. 假定初始时（$t=0$）右矢由 (3.2.13) 式给定，在 t 时刻之后我们得到

$$|\alpha, t_0=0; t\rangle = e^{-i\omega t/2}|+\rangle\langle+|\alpha\rangle + e^{+i\omega t/2}|-\rangle\langle-|\alpha\rangle. \tag{3.2.20}$$

表示式 (3.2.20) 在 $t=2\pi/\omega$ 得到了一个负号，我们必须等到 $t=4\pi/\omega$ 时才能回到有同样符号的原始的态右矢. 总之，态右矢的周期是自旋进动周期的两倍长：

$$\tau_{\text{进动}} = \frac{2\pi}{\omega}, \tag{3.2.21a}$$

$$\tau_{\text{态右矢}} = \frac{4\pi}{\omega}, \tag{3.2.21b}$$

研究 2π 转动的中子干涉仪实验

我们现在描述用于探测 (3.2.15) 式中负号的实验. 非常清楚，假如宇宙中每个态右矢都乘上一个负号，就不会有任何可观测效应. 探测所预言负号的唯一方法是将一个未转动的态和一个转动后的态做比较. 正如在 2.7 节讨论的引力引起的量子干涉一样，我们依靠中子干涉仪的技巧证明量子力学的这种反常预言.

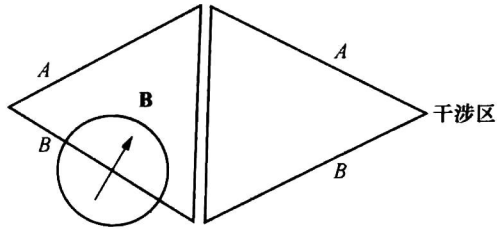


图 3.2 研究在 2π 转动下所预言的负号的实验

一束几乎是单能的热中子束流被劈裂为两部分——路径 A 和路径 B，见图 3.2. 路径 A 始终通过无磁场区；反之，路径 B 进入一个有静磁场存在的小区域. 结果是：经过路径 B 的中子态右矢遭遇到了一个相位的改变 $e^{\mp i\omega T/2}$，其中 T 是穿过 $\mathbf{B}\neq 0$ 的区域花费的时间，而 ω 是一个磁矩为 $g_n e\hbar/2m_p c$ 的中子的自旋进动频率

$$\omega = \frac{g_n eB}{m_p c}, \quad (g_n \simeq -1.91) \tag{3.2.22}$$

如果将其与磁矩为 $e\hbar/2m_e c$ 的电子适用的 (3.2.17) 式比较，就可以看到. 当路径 A 和路

径 B 再一次在图 3.2 的干涉区相遇时，穿过路径 B 到达的中子的振幅为

$$c_2 = c_2(B=0)e^{\mp i\omega T/2}, \tag{3.2.23}$$

而通过路径 A 到达的中子的振幅是 c_1，与 **B** 无关. 因此，在干涉区观测到的强度一定显示出一种正弦的变化

$$\cos\left(\frac{\mp\omega T}{2}+\delta\right), \tag{3.2.24}$$

其中 δ 是 c_1 和 c_2（$B=0$）之间的相位差. 实际上，花费在 $B\neq 0$ 区的时间 T 是固定的，但进动频率 ω 是通过磁场强度的改变而变化的. 故预言：在干涉区的强度作为 B 的函数按正弦变化. 如果把产生相邻极大值所需的 B 值的差称为 ΔB，很容易证明

$$\Delta B = \frac{4\pi\hbar c}{eg_n\lambda l}, \tag{3.2.25}$$

其中 l 为路径的长度.

在推导该式时，我们用到了这样的事实：正如我们的理论形式所要求的那样，为使态右矢回到有相同符号的原始右矢，需要转动 4π. 另一方面，假如我们对于自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的描写是不正确的，在 2π 转动之下右矢就会回到有相同符号的原始右矢，那么预言的 ΔB 就会只有（3.2.25）式的一半.

两个不同的组用实验令人信服地证明（3.2.25）式的预言在小于百分之一的精度内是正确的*. 这是量子力学的又一次胜利. 以直接的方式用实验确认了（3.2.15）式的非平庸预言.

泡利二分量形式

利用泡利在 1926 年引入的二分量旋量形式，可以很方便地处理自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的态右矢. 在 1.3 节我们学会了怎样使用一个列（行）矩阵表示一个右矢（左矢）；我们所要做的是把基于某个指定基右矢的展开系数安排到一个列（行）矩阵中. 在自旋 $\frac{1}{2}$ 的情况下，对于基右矢和基左矢，我们有

$$\begin{aligned} |+\rangle &\doteq \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \equiv \chi_+ \qquad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \equiv \chi_- \\ \langle +| &\doteq (1,0) = \chi_+^\dagger \quad \langle -| \doteq (0,1) = \chi_-^\dagger \end{aligned} \tag{3.2.26}$$

和对一个任意的态右矢和相应的态左矢有

$$|\alpha\rangle = |+\rangle\langle +|\alpha\rangle + |-\rangle\langle -|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix}\langle +|\alpha\rangle\\ \langle -|\alpha\rangle\end{pmatrix} \tag{3.2.27a}$$

和

$$\langle\alpha| = \langle\alpha|+\rangle\langle +| + \langle\alpha|-\rangle\langle -| \doteq (\langle\alpha|+\rangle, \langle\alpha|-\rangle) \tag{3.2.27b}$$

列矩阵（3.2.27a）式称为**二分量旋量**，记为

$$\chi = \begin{pmatrix}\langle +|\alpha\rangle\\ \langle -|\alpha\rangle\end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix}c_+\\ c_-\end{pmatrix}$$

---

* H. Rauch et al. *Phys. Lett.* **54A**(1975) 425; S. A. Werner et al. *Phys. Rev. Lett.* **35**(1975) 1053.

$$= c_+ \chi_+ + c_- \chi_-, \tag{3.2.28}$$

其中 c_+ 和 c_- 一般都是复数. 对于 $\chi^\dagger$ 我们有

$$\chi^\dagger = (\langle \alpha|+\rangle, \langle \alpha|-\rangle) = (c_+^*, c_-^*), \tag{3.2.29}$$

矩阵元 $\langle \pm|S_k|+\rangle$ 和 $\langle \pm|S_k|-\rangle$，除去 $\hbar/2$ 之外，被设定等于那些 2×2 的、以**泡利矩阵**著称的矩阵 σ_k. 我们确定

$$\langle \pm|S_k|+\rangle \equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right)(\sigma_k)_{\pm,+}, \quad \langle \pm|S_k|-\rangle \equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right)(\sigma_k)_{\pm,-}. \tag{3.2.30}$$

现在我们可以用 χ 和 σ_k 写出期待值 $\langle S_k\rangle$

$$\begin{aligned}\langle S_k\rangle &= \langle \alpha|S_k|\alpha\rangle = \sum_{a'=+,-}\sum_{a''=+,-}\langle \alpha|a'\rangle\langle a'|S_k|a''\rangle\langle a''|\alpha\rangle \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)\chi^\dagger\sigma_k\chi,\end{aligned} \tag{3.2.31}$$

其中在最后一行用到了矩阵乘法的常用规则. 显然我们可从（3.2.1）和（3.2.30)式看到

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \tag{3.2.32}$$

其中下标 1，2 和 3 分别代表 x，y 和 z.

下面列出泡利矩阵的一些性质，首先，

$$\sigma_i^2 = 1 \tag{3.2.33a}$$

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 0, \quad \text{对于 } i \neq j, \tag{3.2.33b}$$

其中（3.2.33a）式的右边被理解为 2×2 单位矩阵. 当然，这两个关系式等价于反对易关系

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}, \tag{3.2.34}$$

还有对易关系

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \tag{3.2.35}$$

可以看出，它显然就是角动量对易关系（3.1.20）的 2×2 矩阵实现. 比较（3.2.34）式和（3.2.35）式，我们可以得到

$$\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3 \cdots \tag{3.2.36}$$

还要注意

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i, \tag{3.2.37a}$$

$$\det(\sigma_i) = -1, \tag{3.2.37b}$$

$$\mathrm{Tr}(\sigma_i) = 0. \tag{3.2.37c}$$

现在考虑 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a}$，其中 $\mathbf{a}$ 是一个三维矢量. 要把这个量理解为实际上是一个 2×2 矩阵. 于是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a} &\equiv \sum_k a_k\sigma_k \\ &= \begin{pmatrix}+a_3 & a_1 - ia_2\\ a_1 + ia_2 & -a_3\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{3.2.38}$$

还有一个非常重要的恒等式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{b}) = \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{a}\times\mathbf{b}). \tag{3.2.39}$$

为证明该式，所需的是反对易关系和对易关系，它们分别为（3.2.34）式与（3.2.35）式：

$$\sum_j \sigma_j a \sum_k \sigma_k b_k = \sum_j \sum_k \left(\frac{1}{2}\{\sigma_j, \sigma_k\} + \frac{1}{2}[\sigma_j, \sigma_k] \right) a_j b_k$$
$$= \sum_j \sum_k (\delta_{jk} + i\varepsilon_{jkl}\sigma_l) a_j b_k \tag{3.2.40}$$
$$= \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}).$$

如果 $\mathbf{a}$ 的分量都是实的，我们有

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})^2 = |\mathbf{a}|^2, \tag{3.2.41}$$

其中 $|\mathbf{a}|$ 是矢量 $\mathbf{a}$ 的长度.

二分量形式中的转动

现在研究转动算符 $\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, \phi)$ 的 2×2 矩阵表示. 如下

$$\exp\left(\frac{-i\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) \doteq \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right). \tag{3.2.42}$$

利用从 (3.2.41) 式得到的

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}})^n = \begin{cases} 1 & \text{对于偶数的 } n, \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}} & \text{对于奇数的 } n, \end{cases} \tag{3.2.43}$$

我们可以写出

$$\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right) = \left[1 - \frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}})^2}{2!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^2 + \frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}})^4}{4!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^4 - \cdots\right]$$
$$-i\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}})\frac{\phi}{2} - \frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}})^3}{3!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^3 + \cdots\right] \tag{3.2.44}$$
$$= \mathbf{1}\cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\sin\left(\frac{\phi}{2}\right).$$

显然，以 2×2 形式我们有

$$\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (-in_x - n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (-in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix}, \tag{3.2.45}$$

正像算符 $\exp(-i\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi/\hbar)$ 作用在态右矢 $|\alpha\rangle$ 上一样，2×2 矩阵 $\exp(-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi/2)$ 作用于一个二分量旋量 χ 上. 在转动之下，我们使 χ 发生如下改变：

$$\chi \to \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right)\chi. \tag{3.2.46}$$

另一方面，σ_k 自身在转动下保持不变. 因此，严格地说，尽管 $\boldsymbol{\sigma}$ 的外貌像矢量，人们却不把它看成一个矢量；而是把遵从矢量的变换性质的 $\chi^\dagger\boldsymbol{\sigma}\chi$ 看成一个矢量：

$$\chi^\dagger\sigma_k\chi \to \sum_l R_{kl}\chi^\dagger\sigma_l\chi. \tag{3.2.47}$$

它的明确证明可以利用

$$\exp\left(\frac{i\sigma_3\phi}{2}\right)\sigma_1\exp\left(\frac{-i\sigma_3\phi}{2}\right) = \sigma_1\cos\phi - \sigma_2\sin\phi \tag{3.2.48}$$

等给出，它是 (3.2.6) 式的 2×2 矩阵类比.

在利用右矢形式讨论 2π 转动时，我们曾经看到一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的右矢 $|\alpha\rangle$ 变成了 $-|\alpha\rangle$. 这个说法的 2×2 类比是

$$\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right)\Bigg|_{\phi=2\pi}=-1,\quad \text{对任何 } \hat{\mathbf{n}}, \tag{3.2.49}$$

它从（3.2.44）式显然可得.

作为转动矩阵（3.2.45）式的一个有益的应用，让我们看一下怎样构建本征值为 $+1$ 的 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ 的本征旋量，其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 是某特定方向的一个单位矢量. 我们的目的是构建一个满足

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\chi=\chi. \tag{3.2.50}$$

的 χ. 换句话说，我们要寻找由

$$\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}|\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}};+\rangle=\left(\frac{\hbar}{2}\right)|\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}};+\rangle. \tag{3.2.51}$$

定义的 $|\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}};+\rangle$ 的二分量列矩阵表示. 实际上，该式可作为一个直接的本征值问题来求解（见第1章的习题1.9），但是这里，我们给出另一种可选的基于转动矩阵（3.2.45）的方法.

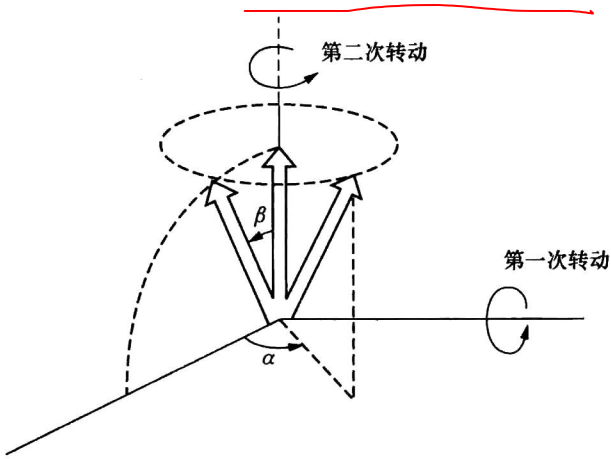


图 3.3 构建 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ 的本征旋量

设表征 $\hat{\mathbf{n}}$ 的极角与方位角分别为 β 和 α. 我们从表示自旋向上态的二分量旋量 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 开始. 给定这个旋量之后，我们先绕 y 轴转 β 角；随后绕 z 轴转 α 角. 然后我们看到，所期待的自旋态就得到了，见图 3.3. 用泡利旋量语言，这一系列操作等价于把 $\exp(-i\sigma_2\beta/2)$ 作用于 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，随后再用 $\exp(-i\sigma_3\alpha/2)$ 作用. 净结果是

$$\begin{aligned}\chi&=\left[\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)-i\sigma_3\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\right]\left[\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)-i\sigma_2\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)-i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)&0\\0&\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)+i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)&-\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\\\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)&\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{-i\alpha/2} \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}. \tag{3.2.52}$$

如果我们意识到上分量和下分量的共同相位是没有什么物理意义的话，则上式与第 1 章的习题 1.9 是完全一致的.

3.3　SO(3)、SU(2)和欧拉转动

正交群

现在，我们更系统地研究在前两节曾经涉及的一些操作的群的性质.

研究转动的最基本方法是建立在规定了转动轴和转动角的基础之上的. 显然，我们需要用三个实数来表征一个一般的转动：沿转轴方向单位矢量 $\hat{\mathbf{n}}$ 的极角和方位角以及转角 ϕ 本身. 等价地，同样一个转动可以用矢量 $\hat{\mathbf{n}}\phi$ 的三个笛卡尔分量确定. 然而，表征转动的这些方法从研究转动的群性质观点来看并不太方便. 首先，除非 ϕ 是无穷小，或者 $\hat{\mathbf{n}}$ 永远沿着同一个方向，否则我们不能添加一些 $\hat{\mathbf{n}}\phi$ 形式的矢量去表征一系列相继的转动. 用一个 3×3 的正交矩阵 R 来工作比较容易，因为相继转动的效果只要通过适当的正交矩阵相乘即可求得.

一个 3×3 正交矩阵有多少个独立参量呢？一个实的 3×3 正交矩阵有 9 个矩阵元，但我们有正交性约束

$$RR^T = 1. \tag{3.3.1}$$

它对应于 6 个独立的方程，因为乘积 RR^T 和 R^TR 相同都是有 6 个独立元素的对称矩阵. 作为结果，R 中只有 3（即 9−6）个独立的数，同样的数字我们以前用更基本的方法得到过.

正交矩阵的所有乘法运算的集合构成一个群. 此时，满足下列四个要求：

1. 任何两个正交矩阵之积是另一个正交矩阵，它之所以被满足是因为

$$(R_1R_2)(R_1R_2)^T = R_1R_2R_2^TR_1^T = 1. \tag{3.3.2}$$

2. 结合律成立：

$$R_1(R_2R_3) = (R_1R_2)R_3. \tag{3.3.3}$$

3. 恒等矩阵 1——物理上对应没有任何转动——由下式定义

$$R1 = 1R = R \tag{3.3.4}$$

它是所有正交矩阵类中的一个成员.

4. 逆矩阵 R^{-1}——物理上对应于相反意义上的转动——由

$$RR^{-1} = R^{-1}R = 1 \tag{3.3.5}$$

定义，也是一个群元.

这个群名为 SO(3)，其中的 S 代表“特殊”，O 代表“正交”，3 代表三维. 注意，这里只考虑转动操作，所以有 SO(3) 而不是 O(3)（它可以包括将在第 4 章讨论的反演操作）.

么正么模群

在前一节我们还学会了另外一种表征一个任意转动的方法，即观察作用于二分量旋量

χ 上的 2×2 矩阵（3.2.45）式. 显然，（3.2.45）是幺正的. 作为一个结果，对于（3.2.28）式中定义的 c_+ 和 c_-，

$$|c_+|^2+|c_-|^2=1 \tag{3.3.6}$$

是保持不变的. 此外，矩阵（3.2.45）式是幺模的，即它的行列式为 1，下面将会明确地证明这一点.

最一般的幺正幺模矩阵可以写成

$$U(a,b)=\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \tag{3.3.7}$$

其中 a 和 b 都是复数，满足幺模条件

$$|a|^2+|b^2|=1. \tag{3.3.8}$$

可以很容易地建立（3.3.7）式的幺正性质：

$$U(a,b)^{\dagger}U(a,b)=\begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}=1, \tag{3.3.9}$$

很容易看到，表征一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统转动的 2×2 矩阵（3.2.45）可以写成 $U(a,b)$，比较（3.2.45）式与（3.3.7）式，我们确认

$$\begin{aligned} &\mathrm{Re}(a)=\cos\left(\frac{\phi}{2}\right), \quad \mathrm{Im}(a)=-n_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right), \\ &\mathrm{Re}(b)=-n_y\sin\left(\frac{\phi}{2}\right), \quad \mathrm{Im}(b)=-n_x\sin\left(\frac{\phi}{2}\right). \end{aligned} \tag{3.3.10}$$

由此，（3.3.8）式的幺模性质立即可得. 反过来说，形为（3.3.7）式的最普遍的幺正幺模矩阵可以解释为表示一个转动.

a 和 b 这两个复数称为**凯莱-克莱因（Cayley-Klein）参量**. 历史上，在远早于量子力学诞生之前人们就知道了幺正幺模矩阵和转动之间的联系. 事实上，凯莱-克莱因参量在刚体运动学中曾用于表征陀螺仪的复杂运动.

无需借助转动来解释幺正幺模矩阵，就可以直接检验幺正幺模矩阵乘法运算的群性质. 特别注意到

$$U(a_1,b_1)U(a_2,b_2)=U(a_1a_2-b_1b_2^*,a_1b_2+a_2^*b_1), \tag{3.3.11}$$

其中乘积矩阵的幺模条件是

$$|a_1a_2-b_1b_2^*|^2+|a_1b_2+a_2^*b_1|^2=1. \tag{3.3.12}$$

对于 U 的逆，我们有

$$U^{-1}(a,b)=U(a^*,-b). \tag{3.3.13}$$

这个群常称 SU(2)群，其中的 S 代表“特殊”，U 代表“幺正”，2 代表维数为 2. 相比之下，由一般的 2×2 幺正矩阵（不必受幺模的限制）的乘法定义的群称为 U(2)群. 最普遍的 2 维幺正矩阵有 4 个独立参量，可以写成 $e^{i\gamma}$（γ 为实数）乘以一个幺正幺模矩阵：

$$U=e^{i\gamma}\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad |a|^2+|b|^2=1, \quad \gamma^*=\gamma. \tag{3.3.14}$$

SU(2) 称为 U(2) 的一个**子群**.

因为既能用 SO(3)语言也可以用 SU(2)语言表征转动，可能会想得出结论：SO(3)和 SU(2)群是同构的，这就是说，SO(3)群的一个元素和 SU(2)群的一个元素之间存在着一一对应关系. 这个推论并不正确. 考虑一个 2π 转动和另一个 4π 转动. 用 SO(3)语言，表示

一个 2π 转动的矩阵和表示一个 4π 转动的矩阵都是 3×3 单位矩阵，然而，用 SU(2) 语言，相应的矩阵分别为 -1 乘以 2×2 单位矩阵和该单位矩阵自身. 更一般地说，$U(a,b)$ 和 $U(-a,-b)$ 二者都对应于 SO(3) 语言中的一个单独的 3×3 矩阵. 因此这种对应是二对一的，对于一个给定的 R，对应的 U 是双值的. 然而，人们可以说，这两个群是局域同构的.

欧拉转动

由经典力学，读者可能熟悉这样的事实，即：一个刚体的任意的转动可以分成三步完成，它们被称为**欧拉转动**. 这种由三个欧拉角确定的欧拉转动语言，提供了另外一种方式来表征最一般的三维转动.

欧拉转动的三步如下所示. 第一步，将刚体反时针绕 z 轴（从正 z 一边看）转 α 角. 现在设想，比如说，有一个如此嵌入刚体的本体 y 轴，使得绕 z 轴转动之前，这个本体 y 轴与通常的、称为**空间固定**的 y **轴相重合**. 显然，在绕 z 轴转动之后，这个本体 y 轴不再与空间固定 y 轴相重合了，让我们把前者称为 y' 轴. 为了看到对一个薄盘子这些现象怎样出现，可参考图 3.4a. 现在我们做一个第二次转动，这一次绕 y' 轴转 β 角. 结果，本体 z 轴不再指向空间固定的 z 轴方向. 我们称第二次转动之后的这个本体固定的 z 轴为 z' 轴，见图 3.4b. 第三次最终的转动是绕 z' 轴转 γ 角. 现在本体 y 轴变成图 3.4c 的 y'' 轴. 借助 3×3 正交矩阵，这三次操作的乘积可以写成

$$R(\alpha,\beta,\gamma)\equiv R_{z'}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_{z}(\alpha). \tag{3.3.15}$$

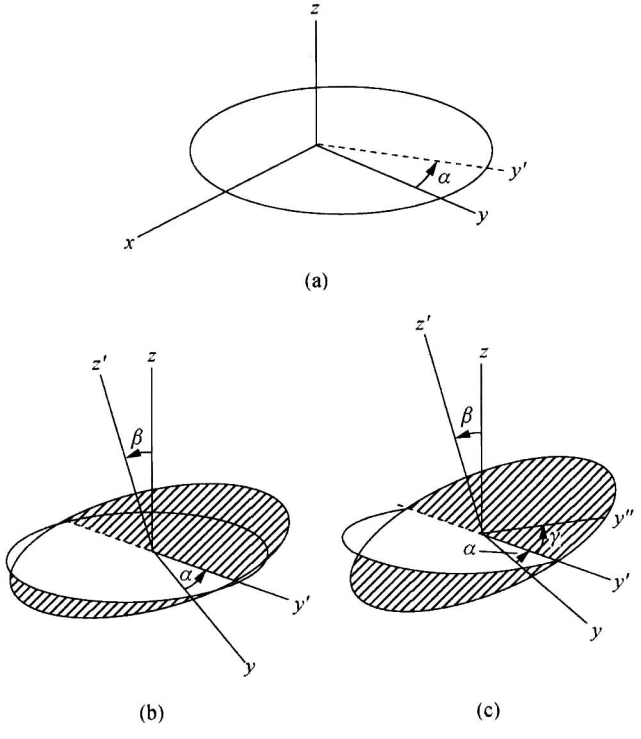


图 3.4　欧拉转动

在这里有必要给出一个警示性的评注. 在许多经典力学的教科书中，更喜欢绕本体 x 轴而不是本体 y 轴做第二次转动［中间的那次转动，例如，Goldstein (2002)］. 这个约定

由于一种原因没有被量子力学采用，该原因过一会就会明了.

在（3.3.15）式中，出现了$R_{y'}$和$R_{z'}$，它们都是绕本体轴的转动矩阵. 欧拉转动的方法在量子力学中是相当不方便的，因为早先我们得到的是**S**算符在各空间固定轴（不带撇的）上的分量的简单表示式，而不是在各本体轴上的分量. 因此，所需要的做法是借助绕空间固定轴的转动来表示所考虑的绕本体轴的转动. 幸运的是，存在一个非常简单的关系：

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha). \tag{3.3.16}$$

该式右边的意义如下. 首先，通过绕z轴顺时针（从正z一边看）转α角，把图3.4a中的本体y轴（即y'轴）转回到原来的固定空间y方向；然后绕着这个y轴转β角. 最后，通过绕固定空间z轴（不是绕z'轴!）转α角，使本体y轴回到y'轴方向. 方程（3.3.16）式告诉我们，这些转动的净效果是一个单独的绕y'轴转β角的转动.

为了证明这个论点，让我们仔细观察（3.3.16）式两边在图3.4a的圆盘上的效果. 显然，在这两种情况下，本体y轴的取向是不变的，即沿y'方向. 此外，无论我们使用$R_{y'}(\beta)$还是$R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)$，最终本体$z$轴的取向是相同的. 在这两种情况下，最终的本体$z$轴都相对固定$z$轴（与初始的$z$轴相同）转了一个极角$\beta$，而其方位角正是如同在固定坐标系中测量到的$\alpha$. 换句话说，最后的本体$z$轴与图3.4b的$z'$轴是相同的. 类似地可以证明

$$R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)R_{y'}^{-1}(\beta). \tag{3.3.17}$$

现在我们利用（3.3.16）式和（3.3.17）式，可以改写（3.3.15）式. 我们得到

$$\begin{aligned} R_{z'}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) &= R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)R_{y'}^{-1}(\beta)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) \\ &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)R_z(\gamma)R_z(\alpha) \\ &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma), \end{aligned} \tag{3.3.18}$$

其中在最后一步中我们用到了$R_z(\gamma)$和$R_z(\alpha)$对易的事实. 总之，

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma), \tag{3.3.19}$$

其中右边所有的三个矩阵都只涉及固定轴的转动.

现在，把这一组运算应用到量子力学中自旋$\frac{1}{2}$的系统. 对应于（3.3.19）式中的正交矩阵之积，在所考虑的自旋$\frac{1}{2}$系统的右矢空间中，存在着一个转动算符的乘积：

$$\mathcal{D}(\alpha,\beta,\gamma) = \mathcal{D}_z(\alpha)\,\mathcal{D}_y(\beta)R_z(\gamma), \tag{3.3.20}$$

这个乘积的2×2矩阵表示是

$$\begin{aligned} &\exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_3\gamma}{2}\right) \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos(\beta/2) & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\sin(\beta/2) \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2}\sin(\beta/2) & e^{i(\alpha+\gamma)/2}\cos(\beta/2) \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{3.3.21}$$

其中用到了（3.2.44）式. 这个矩阵显然是幺正幺模形式的. 反过来，最普遍的2×2幺正幺模矩阵均可以写成这种欧拉角形式.

注意，第二个（中间的）转动$\exp(-i\sigma_y\phi/2)$是纯实的. 假如像许多经典力学教科书中所做的那样，我们选择绕x轴而不是y轴转动，则情况就不会是这样了. 在量子力学中

坚持我们的约定是值得的，因为我们更喜欢这种第二个转动的矩阵元，它是唯一的包含非对角元、且为纯实数的转动矩阵*.

(3.3.21) 式中的 2×2 矩阵称为转动算符$\mathcal{D}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的 $j=\frac{1}{2}$不可约表示. 它的矩阵元用$\mathcal{D}^{(1/2)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ 表示. 借助角动量算符，有

$$\mathcal{D}^{(1/2)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=\left\langle j=\frac{1}{2},m'\left|\exp\left(\frac{-iJ_z\alpha}{\hbar}\right)\right.\right.$$
$$\left.\left.\times\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iJ_z\gamma}{\hbar}\right)\right|j=\frac{1}{2},m\right\rangle \qquad (3.3.22)$$

在 3.5 节我们将广泛地研究 (3.3.21) 的更高 j 值的类似公式.

3.4　密度算符和纯系综与混合系综

极化束与非极化束

至此，已发展的量子力学形式关于一个全同制备的物理系统的系综，即一个集合作出了统计的预言. 更精确地说，在这样的一个系综内假定所有的成员都由同样的态右矢$|\alpha\rangle$ 所表征. 通过 SG 过滤器的一束银原子就是这种系综的一个好例子. 束流中的每个原子其自旋指向相同的方向，即由该过滤器的非均匀磁场确定的方向. 我们迄今还没有讨论过如何用量子力学描述这样的一个系综，其中的某些物理系统，比如 60%，由$|\alpha\rangle$ 表征，而其余的 40%由某个其他的右矢$|\beta\rangle$ 表征.

为了生动地说明到此为止发展的形式体系的不完备性，让我们考虑直接由热炉子飞出的银原子，它们将受到斯特恩-盖拉赫类型的过滤器的作用. 基于对称性，我们预期这样的原子具有随机的自旋取向；换句话说，没有任何优势的方向与这样的一个原子系综相联系. 按照到此为止发展的形式体系，一个自旋$\frac{1}{2}$系统的最普遍的态右矢由下式给出

$$|\alpha\rangle=c_+|+\rangle+c_-|-\rangle. \qquad (3.4.1)$$

这个方程能够描写有着随机自旋取向的集团吗？显然答案是不能. (3.4.1) 式表征一个这样的态右矢，它的自旋指向某个确定的方向，即沿 $\hat{\mathbf{n}}$ 方向，它的极角和方位角分别为 β 和 α，它们可以通过求解

$$\frac{c_+}{c_-}=\frac{\cos(\beta/2)}{e^{i\alpha}\sin(\beta/2)}, \qquad (3.4.2)$$

得到，见 (3.2.52) 式.

为了应对这类情况，我们引入**分数布居**或概率权重的概念. 一个有着完全随机自旋取向的银原子系综可以看作是这样的一团银原子，其中 50%的系综成员由$|+\rangle$ 表征，而其余的 50%由$|-\rangle$ 表征. 我们通过指定

$$w_+=0.5,\quad w_-=0.5, \qquad (3.4.3)$$

其中 w_+ 和 w_- 分别为自旋向上和向下的分数布居，来确定这样的一个系综. 因为这样的

---

* 这当然依赖于我们的约定：S_y（或更普遍的 J_y）的矩阵元取为纯虚的.

一束束流不存在任何优势方向，可合理地预期这同一系综也可以被看作$|S_x;+\rangle$和$|S_x;-\rangle$一半对一半的混合．不久就会见到实现这一点所需要的数学形式．

非常重要的是要注意，我们只不过引进了两个实数w_+和w_-．没有任何有关自旋向上和自旋向下的右矢间的相对相位信息．通常，我们称这样的情况为自旋向上和自旋向下状态的**非相干混合**．在这里我们正在做的是要把我们在相干线性叠加时所做的清楚地区分开——例如，

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)|+\rangle+\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)|-\rangle, \tag{3.4.4}$$

在那里，$|+\rangle$和$|-\rangle$之间的相位关系包含了有关在xy平面中自旋取向的至关重要的信息，在这种情况下，自旋沿正x方向．一般说来，我们不应把w_+和w_-与$|c_+|^2$和$|c_-|^2$混淆．与w_+和w_-联系起来的概率概念更靠近经典概率论中遇到的那种．在处理直接来自热炉子的银原子所遇到的情况可以与一个毕业班中50%的毕业生是男生，其余的50%是女生的情况相比．当我们随机地挑选出一个学生时，这位特定的学生是男生（或女生）的概率是0.5．究竟谁听说过一个学生可视为男生与女生以一种特定的相位关系线性相关叠加吗？

直接从炉子飞出来的银原子束流是一个**完全随机系综**的例子；该束流被称为**非极化**的，因为其自旋取向没有优势方向．相比之下，通过了一个有选择的斯特恩-盖拉赫类测量的束流是一个**纯系综**的例子；该束流称为**极化束**，因为这个系综的所有成员由一个单一的共同右矢所表征，它描述自旋指向某确定方向的一个态．为了领会完全随机系综和纯系综之间的区别，让我们考虑一个可以转动的SG仪器，在那里通过转动该仪器就可以改变非均匀磁场$\mathbf{B}$的方向．当直接从炉子飞出来的完全非极化的束流遇到这样一个仪器时，不管仪器可能是什么样的取向，我们总是得到两个强度相等的出射束流．相比之下，如果一个极化束流遭遇到这样一个仪器时，两个出射束流的相对强度随着仪器的转动而变化．对于某个特定的取向，实际上的强度之比变为1到0间的值．事实上，第1章所发展的形式体系告诉我们，这个相对强度只不过是$\cos^2(\beta/2)$和$\sin^2(\beta/2)$，其中β是原子的自旋方向和SG仪器中的非均匀磁场方向之间的夹角．

一个完全随机系综和一个纯系综可以看成所谓**混合系综**的两个极端．在一个混合系综中，其成员的某个部分，例如70%由一个态右矢$|\alpha\rangle$表征，而其余的30%用$|\beta\rangle$表征．在这样的情况下，该束流称为**部分极化**．这里的$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$甚至不需要是正交的，例如，有70%的自旋沿正x方向，而30%的自旋沿负z方向*．

系综平均和密度算符

现在介绍冯·诺依曼（J. von Neumann）在1927年首先提出来的密度算符形式，它可定量地描述纯系综以及混合系综的物理情况．在这里，我们的一般性讨论不只限于自旋$\frac{1}{2}$系统，但是为了举例说明的目的，我们会反复回到自旋$\frac{1}{2}$的系统．

一个纯系综被定义为一个这样的物理系统的集合，它的每个成员都由同样的右矢$|\alpha\rangle$表征．相比之下，在一个混合系综内，相对布居数为w_1的那部分成员由$|\alpha^{(1)}\rangle$表征，而相对布居数为w_2的其他部分成员由$|\alpha^{(2)}\rangle$表征，等等．粗略地讲，一个混合系综可以看

* 在文献中，称之为纯的或混合的系综经常指的是纯态和混态．然而，在本书中我们使用态意味着用一个确定的态右矢$|\alpha\rangle$描写的物理系统．

作纯系综的混合，正如它的名字所示. 布居数受到满足归一条件的约束，即

$$\sum_i w_i = 1. \tag{3.4.5}$$

正如我们在前面提到的，$|\alpha^{(1)}\rangle$ 和 $|\alpha^{(2)}\rangle$ 是不需要正交的. 此外在（3.4.5）式中，对 i 求和中的项数不需要与右矢空间的维数 N 一致，它可以很容易超过 N. 例如，对 $N=2$ 的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统，可以考虑有 40% 的态具有沿正 z 方向的自旋，30% 的态具有沿正 x 方向的自旋，而其余 30% 的态具有沿负 y 方向的自旋.

假定在一个混合系综上测量某可观测量 A. 我们可以问：当测量的次数很多时，A 的平均测量值是多少. 答案由 A 的**系综平均**值确定，它被定义为

$$\begin{aligned}[A] &\equiv \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)}|A|\alpha^{(i)}\rangle \\ &= \sum_i \sum_{a'} w_i |\langle a'|\alpha^{(i)}\rangle|^2 a',\end{aligned} \tag{3.4.6}$$

其中 $|a'\rangle$ 是 A 的一个本征右矢. 回想 $\langle \alpha^{(i)}|A|\alpha^{(i)}\rangle$ 是通常量子力学中 A 在 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 上的期待值. （3.4.6）式告诉我们，这些期待值必须再用相应的分数布居数 w_i 加权. 注意，概率概念是如何进来两次的：第一次是在 A 的一个本征态 $|a'\rangle$ 中找到态 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 的量子力学概率 $|\langle a'|\alpha^{(i)}\rangle|^2$，而第二次是在系综中找到一个由 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 表征的量子力学态的概率因子*.

现在可以利用一个更一般的基 $\{|b'\rangle\}$ 改写系综平均值（3.4.6）式：

$$\begin{aligned}[A] &= \sum_i w_i \sum_{b'} \sum_{b''} \langle \alpha^{(i)}|b'\rangle\langle b'|A|b''\rangle\langle b''|\alpha^{(i)}\rangle \\ &= \sum_{b'} \sum_{b''} \Big(\sum_i w_i \langle b''|\alpha^{(i)}\rangle\langle \alpha^{(i)}|b'\rangle \Big) \langle b'|A|b''\rangle.\end{aligned} \tag{3.4.7}$$

在对 $b'(b'')$ 求和中的项数就是右矢空间的维数，而对 i 求和中的项数依赖于这个混合系综是怎么被看作纯系综的混合的. 注意，在这种形式中，不依赖于特定可观测量 A 的系综的基本性质被分离了出来. 这诱使我们把**密度算符** ρ 定义如下：

$$\rho \equiv \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle\langle \alpha^{(i)}|. \tag{3.4.8}$$

相应的**密度矩阵**的矩阵元有下列形式：

$$\langle b''|\rho|b'\rangle = \sum_i w_i \langle b''|\alpha^{(i)}\rangle\langle \alpha^{(i)}|b'\rangle. \tag{3.4.9}$$

密度算符包含了我们可能得到的，关于所论及系综的所有有物理意义的信息. 回到（3.4.7）式，系综平均可以写成

$$\begin{aligned}[A] &= \sum_{b'} \sum_{b''} \langle b''|\rho|b'\rangle\langle b'|A|b''\rangle \\ &= \mathrm{tr}(\rho A).\end{aligned} \tag{3.4.10}$$

因为矩阵的迹不依赖于表象，$\mathrm{tr}(\rho A)$ 可以利用任何方便的基计算. 因此，（3.4.10）式是一个极为有用的关系.

密度算符有两个性质值得记住. 首先，密度算符是厄米的，这从（3.4.8）式显然可见. 第二，密度算符满足归一化条件

---

* 在文献中相当常见，系综平均也称为期待值. 然而，在本书中，术语期待值是指在一个纯系综中进行测量时得到的平均测量值.

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\rho) &= \sum_i \sum_{b'} w_i \langle b'|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|b'\rangle \\ &= \sum_i w_i \langle\alpha^{(i)}|\alpha^{(i)}\rangle \\ &= 1.\end{aligned} \tag{3.4.11}$$

由于厄米性和归一条件，对于维数为2的自旋$\frac{1}{2}$的系统，密度算符或相应的密度矩阵由三个实参量表征．4个实数可以表征一个2×2厄米矩阵．然而，由于归一化条件，只有3个是独立的．所需要的3个数是$[S_x]$，$[S_y]$和$[S_z]$，读者可以证明知道了这三个系综平均值，足以重建密度算符．一个混合系综形成的方式可以是相当复杂的．我们可以把有所有类型的$|\alpha^{(i)}\rangle$所表征的纯系综用适当的w_i混合起来；而对自旋$\frac{1}{2}$的系统，三个实数完全可以表征所涉及的系综．这强烈地暗示，一个混合系综能以许多种不同的方式分解为纯系综．在本章末尾有一个习题说明了这一点．

一个纯系综可以通过对某个$|\alpha^{(i)}\rangle$——例如，$i=n$时，$w_i=1$，而对所有的其他可能的态右矢$w_i=0$来确定，因此相应的密度算符可写成不求和的

$$\rho = |\alpha^{(n)}\rangle\langle\alpha^{(n)}| \tag{3.4.12}$$

显然，一个纯系综的密度算符是幂等的．即

$$\rho^2 = \rho \tag{3.4.13}$$

或，等价地

$$\rho(\rho-1)=0. \tag{3.4.14}$$

于是，除了（3.4.11）式以外，只对纯系综有

$$\mathrm{tr}(\rho^2)=1. \tag{3.4.15}$$

纯系综密度算符的本征值是0或1，这一点可以通过在（3.4.14）式的ρ和$\rho-1$之间插入一个基右矢完全集合看到，该集合能对角化厄米算符ρ．因此，当对角化时，一个纯系综的密度矩阵看起来一定像

$$\rho \doteq \begin{pmatrix} 0 & & & & & & \\ & 0 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & 0 & & & \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & 0 & \\ & & & & & & 0 \\ & & & & & & & 0 & \\ & & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & & 0 \end{pmatrix} \quad \text{（对角形式）} \tag{3.4.16}$$

可以证明，当系综是纯的时候，$\mathrm{tr}(\rho^2)$取最大值；对于一个混合系综，$\mathrm{tr}(\rho^2)$是一个小于1的正数．

给定一个密度算符，让我们看一下在一些具体的基中，怎样构建相应的密度矩阵．为此，首先回顾

$$|\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{b'}\sum_{b''} |b'\rangle\langle b'|\alpha\rangle\langle\alpha|b''\rangle\langle b''|. \tag{3.4.17}$$

这表明，在外积的意义上，可以通过把 $\langle b'|\alpha^{(i)}\rangle$ 形成的列矩阵与 $\langle\alpha^{(i)}|b''\rangle$（当然，它等于 $\langle b''|\alpha^{(i)}\rangle^*$.）形成的行矩阵组合在一起，形成一个对应于 $|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|$ 的方阵. 最后一步，就像（3.4.8）式指出的，用权重因子 w_i 对这样的方阵求和. 正如所期待的，最后的形式与（3.4.9）式一致.

研究几个例子是很有益的，它们都涉及自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统.

例 3.1　一束 S_z+ 的完全极化束流

$$\rho=|+\rangle\langle+|\doteq\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}(1,0)=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}\tag{3.4.18}$$

例 3.2　一束 $S_x\pm$ 的完全极化束流

$$\rho=|S_x;\pm\rangle\langle S_x;\pm|=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|+\rangle\pm|-\rangle)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(\langle+|\pm\langle-|)$$

$$\doteq\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&\pm\frac{1}{2}\\ \pm\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\tag{3.4.19}$$

例 3.1 和 3.2 的系综都是纯的.

例 3.3　一束非极化束流. 它可以看作一个自旋向上的系综和一个自旋向下的系综以相等权重（各为 50%）非相干混合：

$$\rho=\left(\frac{1}{2}\right)|+\rangle\langle+|+\left(\frac{1}{2}\right)|-\rangle\langle-|$$

$$\doteq\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&0\\0&\frac{1}{2}\end{pmatrix},\tag{3.4.20}$$

它正好是一个单位矩阵除以 2. 正如早些时候我们曾指出的，同样的这个系综还可以看作是一种具有相等权重的 S_x+ 系综和 S_x- 系综的非相干混合. 令人欣慰的是，我们的形式自动地满足预期

$$\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&0\\0&\frac{1}{2}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\ \frac{1}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix},\tag{3.4.21}$$

由例 3.2 可以看到，右手边的两项就是 S_x+ 和 S_x- 两个纯系综的密度矩阵. 因为这种情况下的 ρ 正是单位算符除以 2（维数），我们有

$$\mathrm{tr}(\rho S_x)=\mathrm{tr}(\rho S_y)=\mathrm{tr}(\rho S_z)=0,\tag{3.4.22}$$

其中用到了 S_k 是无迹的. 于是，对于 $\mathbf{S}$ 的系综平均值，我们有

$$[\mathbf{S}]=0.\tag{3.4.23}$$

这是合理的，因为在一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的完全随机系综中不应当存在自旋的优势方向.

例 3.4　作为部分极化束的例子，考虑两个纯系综的 75-25 混合，一个是 S_z+ 而另一

个是 S_x+：

$$w(S_z+)=0.75,\quad w(S_x+)=0.25. \tag{3.4.24}$$

相应的 ρ 可以表示为

$$\begin{aligned}\rho &\doteq \frac{3}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}+\frac{1}{4}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix}\frac{7}{8}&\frac{1}{8}\\\frac{1}{8}&\frac{1}{8}\end{pmatrix},\end{aligned} \tag{3.4.25}$$

从上式得到

$$[S_x]=\frac{\hbar}{8},\quad [S_y]=0,\quad [S_z]=\frac{3\hbar}{8}. \tag{3.4.26}$$

把证明这个系综能以异于（3.4.24）式的方式分解作为一个练习留给读者.

系综的时间演化

作为一个时间函数，密度算符 ρ 如何变化？让我们假定在某个 t_0 时刻密度算符由下式给定

$$\rho(t_0)=\sum_i w_i|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|. \tag{3.4.27}$$

如果系综保持不受扰动，我们就不可能改变分数布居数 w_i. 所以 ρ 的变化只是由态右矢 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 的时间演化所控制：

$$t_0\text{ 时}|\alpha^{(i)}\rangle\to|\alpha^{(i)},t_0;t\rangle. \tag{3.4.28}$$

由于 $|\alpha^{(i)},t_0;t\rangle$ 满足薛定谔方程，我们得到

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}&=\sum_i w_i(H|\alpha^{(i)},t_0;t\rangle\langle\alpha^{(i)},t_0;t|-|\alpha^{(i)},t_0;t\rangle\langle\alpha^{(i)},t_0;t|H)\\&=-[\rho,H].\end{aligned} \tag{3.4.29}$$

除了符号相反，该公式的样子很像海森伯运动方程！这一点不会带来烦恼，因为 ρ 不是一个海森伯绘景的动力学可观测量. 相反，ρ 是由薛定谔绘景的态右矢和态左矢构成的，它们的时间演化都是遵从薛定谔方程的.

有意思的是，（3.4.29）式可以看作是经典统计力学中刘维尔定理

$$\frac{\partial\rho_{\text{经典}}}{\partial t}=-[\rho_{\text{经典}},H]_{\text{经典}} \tag{3.4.30}$$

的量子力学类似定理，其中的 $\rho_{\text{经典}}$ 是相空间中代表点的密度*. 因此，对出现在（3.4.29）式中的 ρ，密度算符的名字的确是合适的. 对于某个可观测量 A 的系综平均值，（3.4.10）式的经典类似公式由下式给定：

---

* 记住，一个经典的纯态是用相空间（$q_1,\cdots,q_f,p_1,\cdots,p_f$）中每个时刻的一个单独运动的点表示. 另一方面，一个经典的统计态用我们的非负的密度函数 $\rho_{\text{经典}}(q_1,\cdots,q_f,p_1,\cdots,p_f,t)$ 描写，它使得在 t 时刻在间隔 $dq_1,\cdots,dp_f$ 内找到一个系统的概率是 $\rho_{\text{经典}}dq_1,\cdots,dp_f$.

$$A_{\text{平均}}=\frac{\int\rho_{\text{经典}}A(q,p)d\Gamma_{q,p}}{\int\rho_{\text{经典}}d\Gamma_{q,p}},\tag{3.4.31}$$

其中的 $d\Gamma_{q,p}$ 表示相空间中的体积元.

连续的推广

至此，已经考虑了右矢空间中的密度算符，在那里基右矢是用某个可观测量的分立的本征值标记的. 密度矩阵的概念可以推广到使用的基右矢用连续的本征值标记. 特别是，让我们考虑由位置本征右矢 $|\mathbf{x}'\rangle$ 所张的右矢空间. (3.4.10) 式的类似表达式由下式给定

$$[A]=\int d^3x'\int d^3x''\langle\mathbf{x}''|\rho|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|A|\mathbf{x}''\rangle.\tag{3.4.32}$$

这里的密度矩阵实际上是 $\mathbf{x}'$ 和 $\mathbf{x}''$ 的一个函数，即

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{x}''|\rho|\mathbf{x}'\rangle&=\langle\mathbf{x}''|\Big(\sum_i w_i|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|\Big)|\mathbf{x}'\rangle\\&=\sum_i w_i\psi_i(\mathbf{x}'')\psi_i^*(\mathbf{x}'),\end{aligned}\tag{3.4.33}$$

其中 ψ_i 是相应于态右矢 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 的波函数. 注意，该矩阵的对角元（即 $\mathbf{x}'=\mathbf{x}''$）正是概率密度加权后的求和. 再次印证了术语密度矩阵的确是合适的.

在连续态情况下也一样，重要的是要记住同一个混合系综可以按不同方式分解为纯系综. 例如，一个“真实的”粒子束流既可以看作平面波态（单能量的自由粒子态）的混合也可以看作波包态的混合.

量子统计力学

我们以简略讨论密度算符公式形式与统计力学之间的联系结束这一节. 让我们先记下完全随机的系综和纯系综的一些性质. 一个完全随机系综的密度矩阵在任何表象看起来都像

$$\rho\doteq\frac{1}{N}\begin{pmatrix}1&&&&&&0\\&1&&&&&\\&&1&&&&\\&&&\ddots&&&\\&&&&1&&\\&&&&&1&\\0&&&&&&1\end{pmatrix}\tag{3.4.34}$$

[比较例 3.3 与 (3.4.20) 式]. 这从对应于写出密度矩阵所用的基右矢的所有的态是同等布居的就可以看到. 相比之下，在 ρ 是对角化的基中，对一个纯系综密度算符的矩阵表示我们有 (3.4.16) 式. 而 (3.4.34) 和 (3.4.16) 这两个对角矩阵，都满足归一化要求 (3.4.11)，它们看上去不可能有太大差别. 假如我们能够以某种方式构建一个量，表征这种巨大差异的话，将会是我们所希望的.

因此，用

$$\sigma=-\operatorname{tr}(\rho\ln\rho).\tag{3.4.35}$$

定义一个称为 σ 的量. 算符 ρ 的对数似乎十分令人生畏，但是如果采用使 ρ 对角化的基，则 (3.4.35) 式的意义就十分清楚了：

$$\sigma = -\sum_k \rho_{kk}^{(\text{对角})} \ln \rho_{kk}^{(\text{对角})}. \tag{3.4.36}$$

由于每个元素 $\rho_{kk}^{(\text{对角})}$ 都是 0 和 1 之间的实数，σ 必然是半正定的. 对于一个完全随机的系综（3.4.34），有

$$\sigma = -\sum_{k=1}^{N} \frac{1}{N} \ln\left(\frac{1}{N}\right) = \ln N. \tag{3.4.37}$$

与之相比，对于纯系综（3.4.16），有

$$\sigma = 0 \tag{3.4.38}$$

其中对（3.4.36）式的每一项，都使用了

$$\rho_{kk}^{(\text{对角})} = 0 \quad \text{或} \quad \ln \rho_{kk}^{(\text{对角})} = 0 \tag{3.4.39}$$

现在从物理上论证，σ 可以被看作一个无序的定量测度. 一个纯系综是一个最大程度的有序系综，因为它的所有的成员都用同样的量子力学的态右矢表征，它很像在一支训练有素部队中齐步走的士兵. 按照（3.4.38）式，对这样的一个系综，σ 为零. 在另一个极端，一个完全随机系综，其中所有的量子力学态是同等可能的，它可以比作一群喝醉了酒的士兵四面八方地游荡. 根据（3.4.37）式，σ 很大. 的确，稍后将证明，在归一条件

$$\sum_k \rho_{kk} = 1. \tag{3.4.40}$$

的约束下，σ 最大的可能值是 $\ln N$. 在热力学中我们知道，一个称为**熵**的量是量度无序的. 结果是，σ 与表示系综每个成员的熵 S 通过

$$S = k\sigma \tag{3.4.41}$$

相关联，其中 k 是一个可确定为玻尔兹曼（Boltzman）常数的普适常数. 事实上，（3.4.41）式可以作为量子统计力学中熵的定义.

现在证明，对于一个处于热平衡的系综，怎样可以求得密度算符 ρ. 所做的基本假定是，在哈密顿量的系综平均值有某一指定值的约束下，自然界趋向于把 σ 极大化. 证明这个假定的正确性，将使我们卷入一场关于平衡是如何作为与环境相互作用的结果而建立起来的微妙的讨论，它已超出了本书的范围. 不管怎么样，一旦热平衡得以确立，我们预期

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \tag{3.4.42}$$

由于（3.4.29）式，上式意味着 ρ 与 H 可以同时对角化. 所以，在写出（3.4.36）式时使用的右矢可以被取作能量本征右矢. 采用这一选择，ρ_{kk} 则表示一个能量本征值为 E_k 的能量本征态的分数布居数.

通过要求

$$\delta\sigma = 0 \tag{3.4.43}$$

极大化 σ. 然而，必须考虑 H 的系综平均值具有某一指定值的约束. 用统计力学的说法，$[H]$ 被确定为每个组分的内能，用 U 表示

$$[H] = \mathrm{tr}(\rho H) = U. \tag{3.4.44}$$

此外，不应该忘记归一化约束（3.4.40）式. 因此，基本任务是要求（3.4.43）式受到如下两个约束：

$$\delta[H] = \sum_k \delta\rho_{kk} E_k = 0 \tag{3.4.45a}$$

和

$$\delta(\mathrm{tr}\rho)=\sum_k\delta\rho_{kk}=0. \tag{3.4.45b}$$

可使用拉格朗日乘子法快捷地完成这个任务. 得到

$$\sum_k\delta\rho_{kk}[(\ln\rho_{kk}+1)+\beta E_k+\gamma]=0, \tag{3.4.46}$$

且仅当

$$\rho_{kk}=\exp(-\beta E_k-\gamma-1). \tag{3.4.47}$$

时，它才对任意变分都是可能的. 常数 γ 可以用归一条件（3.4.40）式消掉，最终结果为

$$\rho_{kk}=\frac{\exp(-\beta E_k)}{\sum_l^N\exp(-\beta E_l)}. \tag{3.4.48}$$

它直接给出一个能量本征值为 E_k 的能量本征态的分数布居数. 要始终理解求和是对分立的能量本征态进行的；如果有简并存在，还必须对具有相同能量本征值的态求和.

密度矩阵元（3.4.48）式对于统计力学中所谓的**正则系综**是适用的. 假如试图在没有内能约束（3.4.45a）的条件下极大化 σ，就会相反地得到

$$\rho_{kk}=\frac{1}{N},\quad\text{（不依赖于 }k\text{）}, \tag{3.4.49}$$

它是适用于一个完全随机系综的密度矩阵元. 把（3.4.48）式与（3.4.49）式比较，我们推断，一个完全随机的系综可以看作一个正则系综在 $\beta\to0$ 时的极限（即物理上高温极限）. （3.4.48）式的分母为统计力学中的配分函数

$$Z=\sum_k^N\exp(-\beta E_k) \tag{3.4.50}$$

它还可以写成

$$Z=\mathrm{tr}(e^{-\beta H}). \tag{3.4.51}$$

知道了在能量基中给出的 ρ_{kk}，可以把密度算符写成

$$\rho=\frac{e^{-\beta H}}{Z}. \tag{3.4.52}$$

这是最基本的方程，所需的一切都可以从它得出来. 可以立即计算任何一个可观测量 A 的系综平均值：

$$\begin{aligned}[A]&=\frac{\mathrm{tr}(e^{-\beta H}A)}{Z}\\&=\frac{\left[\sum_k^N\langle A\rangle_k\exp(-\beta E_k)\right]}{\sum_k^N\exp(-\beta E_k)}.\end{aligned} \tag{3.4.53}$$

特别是，求得每组分的内能为

$$\begin{aligned}U&=\frac{\left[\sum_k^N E_k\exp(-\beta E_k)\right]}{\sum_k^N\exp(-\beta E_k)}\\&=-\frac{\partial}{\partial\beta}(\ln Z),\end{aligned} \tag{3.4.54}$$

它是每个统计力学的学生都熟知的一个公式.

参量 β 与温度 T 的关系如下

$$\beta=\frac{1}{kT}, \tag{3.4.55}$$

其中 k 是玻尔兹曼常数. 通过把简谐振子系综平均 $[H]$ 与在经典极限下内能的预期值 kT 相比较，确信这个关系是有益的，这被留作一个练习. 已经阐明在高温极限下，一个正则系综变成一个所有的能量本征态被同等布居的完全随机的系综. 在相反的低温极限下 $(\beta\to\infty)$，(3.4.48) 式告诉我们，一个正则系综变成一个只有基态被布居的纯系综.

作为一个例证考虑一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统组成的正则系综. 它的每一个成员都具有 $eh/2m_ec$ 的磁矩，受到一个沿 z 方向均匀磁场的作用. 与该问题相关的哈密顿量已经给出 [见 (3.2.16) 式]. 因为 H 和 S_z 对易，这个正则系综的密度矩阵在 S_z 基中是对角的. 于是

$$\rho\doteq\frac{\begin{pmatrix}e^{-\beta\hbar\omega/2} & 0\\ 0 & e^{\beta\hbar\omega/2}\end{pmatrix}}{Z}, \tag{3.4.56}$$

其中的配分函数恰为

$$Z=e^{-\beta\hbar\omega/2}+e^{\beta\hbar\omega/2}. \tag{3.4.57}$$

由此得出

$$[S_x]=[S_y]=0,\quad [S_z]=-\left(\frac{\hbar}{2}\right)\tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right). \tag{3.4.58}$$

磁矩分量的系综平均值正是 e/m_ec 乘以 $[S_z]$. 顺磁磁化率 χ 可由下式计算

$$\left(\frac{e}{m_ec}\right)[S_z]=\chi B \tag{3.4.59}$$

用这种方法得到 χ 的布里渊公式：

$$\chi=\left(\frac{|e|\hbar}{2m_ecB}\right)\tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right). \tag{3.4.60}$$

3.5 角动量的本征值和本征态

到现在为止，关于角动量的讨论仅限于维数 $N=2$ 的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统. 在这一节以及其后的几节，研究更一般的角动量态. 为此，首先求出 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的本征值和本征右矢，然后推导角动量算符矩阵元的表示式，它们最早由玻恩，海森伯和约当在 1926 年的文章中给出.

对易关系和阶梯算符

将要做的每一件事都是由角动量对易关系 (3.1.20) 式推出来的，在那里我们可回顾 J_i 被定义为无穷小转动的生成元. 从这些基本对易关系导出的第一个重要性质是存在一个新的算符 $\mathbf{J}^2$，它的定义为

$$\mathbf{J}^2\equiv J_xJ_x+J_yJ_y+J_zJ_z, \tag{3.5.1}$$

它与每一个 J_k 都对易：

$$[\mathbf{J}^2,J_k]=0,\quad (k=1,2,3). \tag{3.5.2}$$

为了证明上式，看一下 $k=3$ 的情况：

$$\begin{aligned}[J_xJ_x+J_yJ_y+J_zJ_z,J_z]&=J_x[J_x,J_z]+[J_x,J_z]J_x+J_y[J_y,J_z]+[J_y,J_z]J_y\\&=J_x(-i\hbar J_y)+(-i\hbar J_y)J_x+J_y(i\hbar J_x)+(i\hbar J_x)J_y\\&=0.\end{aligned}\tag{3.5.3}$$

对 $k=1$ 或 2 情况的证明可以从指标的循环置换（1→2→3→1）得到. 因为 J_x，J_y 和 J_z 彼此不对易，所以只能选其中之一作为与 $\mathbf{J}^2$ 同时对角化的可观测量. 按照惯例，我们选取 J_z.

接下来求 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的共同本征右矢. 用 a 和 b 分别代表 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的本征值：

$$\mathbf{J}^2|a,b\rangle=a|a,b\rangle\tag{3.5.4a}$$

$$J_z|a,b\rangle=b|a,b\rangle\tag{3.5.4b}$$

要确定 a 和 b 的允许值，最方便的是使用被称为**阶梯算符**的非厄米算符

$$J_\pm\equiv J_x\pm iJ_y\tag{3.5.5}$$

而不用 J_x 和 J_y. 它们满足对易关系

$$[J_+,J_-]=2\hbar J_z\tag{3.5.6a}$$

和

$$[J_z,J_\pm]=\pm\hbar J_\pm,\tag{3.5.6b}$$

上述二式可以很容易由（3.1.20）式得到. 还要注意

$$[\mathbf{J}^2,J_\pm]=0,\tag{3.5.7}$$

它是（3.5.2）式的明显结果.

$J_\pm$ 的物理意义是什么呢？要回答这个问题，先考查 J_z 如何作用于 $J_\pm|a,b\rangle$：

$$\begin{aligned}J_z(J_\pm|a,b\rangle)&=([J_z,J_\pm]+J_\pm J_z)|a,b\rangle\\&=(b\pm\hbar)(J_\pm|a,b\rangle),\end{aligned}\tag{3.5.8}$$

其中用到了（3.5.6b）式. 换句话说，如果把 J_+（J_-）作用于 J_z 的一个本征右矢上，作为结果的右矢仍然是 J_z 的一个本征右矢，除了其本征值增加（减少）了一个 $\hbar$ 单位. 所以现在明白了为什么 $J_\pm$——它在 J_z 本征值的“阶梯”上向上（向下）迈了一步——以阶梯算符著称.

现在先离题回忆一下，（3.5.6b）式中的对易关系让人想起在前几章遇到的一些对易关系. 在讨论平移算符 $\mathcal{T}(\mathbf{l})$ 时，我们有

$$[x_i,\mathcal{T}(\mathbf{l})]=l_i\mathcal{T}(\mathbf{l}),\tag{3.5.9}$$

而在讨论简谐振子时，有

$$[N,a^\dagger]=a^\dagger,\quad[N,a]=-a.\tag{3.5.10}$$

可以看到（3.5.9）式和（3.5.10）式都有着类似于（3.5.6b）式的结构. 平移算符的物理解释是，它把位置算符 $\mathbf{x}$ 的本征值改变了 $\mathbf{l}$，这种作用方式与阶梯算符 J_+ 使 J_z 本征值的改变了一个单位 $\hbar$ 的方式差不多相同. 同样地，简谐振子的产生算符 $a^\dagger$ 使粒子数算符 N 的本征值增加了一个单位.

尽管 $J_\pm$ 使 J_z 的本征值改变了一个 $\hbar$ 的单位，它并不改变 $\mathbf{J}^2$ 的本征值：

$$\begin{aligned}\mathbf{J}^2(J_\pm|a,b\rangle)&=J_\pm\mathbf{J}^2|a,b\rangle\\&=a(J_\pm|a,b\rangle),\end{aligned}\tag{3.5.11}$$

其中用到了（3.5.7）式. 总而言之，$J_\pm|a,b\rangle$ 是 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的共同本征右矢，其本征值为 a 和 $b\pm\hbar$. 可以写成

$$J_{\pm}|a,b\rangle = c_{\pm}|a,b\pm\hbar\rangle, \tag{3.5.12}$$

其中比例常数 $c_{\pm}$ 将稍后由角动量本征右矢的归一化要求确定.

$\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的本征值

现在有了构造角动量本征右矢并研究它们的本征值谱所需要的工具. 假定我们把 J_+ 连续地，比如 n 次，作用于 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的共同本征右矢上. 则得到 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的另一个本征右矢，其 J_z 本征值增加了 $n\hbar$，同时 $\mathbf{J}^2$ 的本征值不变. 然而这个过程不可能无限地继续下去. 结果是，对于一个给定的（$\mathbf{J}^2$ 本征值）a，存在一个 b（J_z 本征值）的上限：

$$a \geqslant b^2. \tag{3.5.13}$$

为证明这一说法，首先注意

$$\begin{aligned}\mathbf{J}^2 - J_z^2 &= \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+)\\ &= \frac{1}{2}(J_+ J_+^{\dagger} + J_+^{\dagger} J_+).\end{aligned} \tag{3.5.14}$$

既然因为

$$J_+^{\dagger}|a,b\rangle \overset{DC}{\leftrightarrow} \langle a,b|J_+, \quad J_+|a,b\rangle \overset{DC}{\leftrightarrow} \langle a,b|J_+^{\dagger} \tag{3.5.15}$$

$J_+ J_+^{\dagger}$ 和 $J_+^{\dagger} J_+$ 必须有非负的期待值，于是

$$\langle a,b|(\mathbf{J}^2 - J_z^2)|a,b\rangle \geqslant 0, \tag{3.5.16}$$

反过来，它暗含着（3.5.13）式. 因此，一定存在一个 $b_{\text{最大}}$，使

$$J_+|a,b_{\text{最大}}\rangle = 0. \tag{3.5.17}$$

换句话说，b 的本征值不可能增加到超过 $b_{\text{最大}}$ 的值. 现在，（3.5.17）还意味着

$$J_- J_+|a,b_{\text{最大}}\rangle = 0. \tag{3.5.18}$$

但是

$$\begin{aligned}J_- J_+ &= J_x^2 + J_y^2 - i(J_y J_x - J_x J_y)\\ &= \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z,\end{aligned} \tag{3.5.19}$$

因此

$$(\mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|a,b_{\text{最大}}\rangle = 0. \tag{3.5.20}$$

因为 $|a,b_{\text{最大}}\rangle$ 本身不是一个零矢量，这个关系仅当下式被满足时才是可能的：

$$a - b_{\text{最大}}^2 - b_{\text{最大}}\hbar = 0 \tag{3.5.21}$$

或

$$a = b_{\text{最大}}(b_{\text{最大}} + \hbar). \tag{3.5.22}$$

以类似的方式，从（3.5.13）式推断，一定还存在一个 $b_{\text{最小}}$，使得

$$J_-|a,b_{\text{最小}}\rangle = 0. \tag{3.5.23}$$

与（3.5.19）式类似，通过把 $J_+ J_-$ 写作

$$J_+ J_- = \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \tag{3.5.24}$$

得到：

$$a = b_{\text{最小}}(b_{\text{最小}} - \hbar), \tag{3.5.25}$$

比较（3.5.22）式与（3.5.25）式，得出

$$b_{\text{最大}} = -b_{\text{最小}}, \tag{3.5.26}$$

由于 $b_{\text{最大}}$ 为正值，于是 b 的允许值处与在以下范围之内：

$$-b_{\text{最大}} \leqslant b \leqslant b_{\text{最大}}. \tag{3.5.27}$$

显然通过把 J_+ 连续作用于 $|a,b_{\text{最小}}\rangle$ 有限次，一定能够达到 $|a,b_{\text{最大}}\rangle$. 因此有

$$b_{\text{最大}} = b_{\text{最小}} + n\hbar, \tag{3.5.28}$$

其中 n 是某个整数. 作为结果，我们得到

$$b_{\text{最大}} = \frac{n\hbar}{2}. \tag{3.5.29}$$

更为传统的做法是代替 $b_{\text{最大}}$ 使用定义为 $b_{\text{最大}}/\hbar$ 的 j，所以

$$j = \frac{n}{2}. \tag{3.5.30}$$

J_z 的最大本征值为 $j\hbar$，其中 j 既可以是一个整数，也可以是一个半奇数. （译者注：原书为半整数. 显然不够确切.）方程（3.5.22）式意味着 $\mathbf{J}^2$ 的本征值由

$$a = \hbar^2 j(j+1). \tag{3.5.31}$$

给定. 还定义一个 m，使得

$$b \equiv m\hbar. \tag{3.5.32}$$

若 j 是一个整数，则所有的 m 值都是整数；若 j 是一个半奇数，则所有的 m 值都是半奇数. 对于一个给定的 j，允许的 m 值为

$$m = \underbrace{-j, j+1, \cdots, j-1, j}_{2j+1\text{个态}}. \tag{3.5.33}$$

代替 $|a,b\rangle$，更方便的是用 $|j,m\rangle$ 表示 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的共同本征右矢. 基本的本征值方程现在为

$$\mathbf{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \tag{3.5.34a}$$

和

$$J_z|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle, \tag{3.5.34b}$$

其中 j 或者为一个整数，或者为一个半奇数，而 m 由（3.5.33）给定. 非常重要的是回忆起为了获得这些结果，仅用到对易关系（3.1.20）式. 在（3.5.34）式中显示的角动量量子化，是角动量对易关系的一个直接后果，该对易关系又是由转动的性质以及作为转动生成元 J_k 的定义一起推导出来的.

角动量算符的矩阵元

下面来求各种角动量算符的矩阵元. 假定 $|j,m\rangle$ 已被归一化，由（3.5.34）式显然有

$$\langle j',m'|\mathbf{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\delta_{j'j}\delta_{m'm} \tag{3.5.35a}$$

和

$$\langle j',m'|J_z|j,m\rangle = m\hbar\delta_{j'j}\delta_{m'm}. \tag{3.5.35b}$$

为了获得 $J_\pm$ 的矩阵元，首先考虑

$$\begin{aligned}\langle j,m|J_+^\dagger J_+|j,m\rangle &= \langle j,m|(\mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|j,m\rangle \\ &= \hbar^2[j(j+1) - m^2 - m].\end{aligned} \tag{3.5.36}$$

由于 $J_+|j,m\rangle$ 必须和 $|j,m+1\rangle$（已归一）在最多差一个常数因子的情况下相同［见（3.5.12）式］，因此

$$J_+|j,m\rangle = c_{jm}^+|j,m+1\rangle. \tag{3.5.37}$$

与（3.5.36）式的比较将导致

$$|c_{jm}^{+}|^2 = \hbar^2[j(j+1)-m(m+1)] = \hbar^2(j-m)(j+m+1). \tag{3.5.38}$$

这样，在最多差一个任意相因子的情况下确定了 c_{jm}^{+}. 通常的惯例是选 c_{jm}^{+} 为正实数，于是

$$J_+|j,m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar|j,m+1\rangle. \tag{3.5.39}$$

可以类似地导出

$$J_-|j,m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar|j,m-1\rangle. \tag{3.5.40}$$

最后，$J_\pm$ 的矩阵元确定为

$$\langle j',m'|J_\pm|j,m\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\hbar\delta_{j'j}\delta_{m'm\pm1}. \tag{3.5.41}$$

转动算符的表示

得到了 J_z 和 $J_\pm$ 的矩阵元之后，就能够研究转动算符 $\mathcal{D}(R)$. 如果一个转动 R 由 $\hat{\mathbf{n}}$ 和 ϕ 确定，就可以用

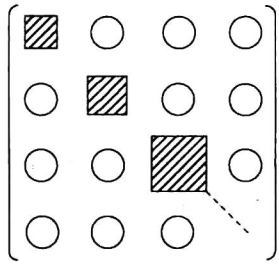
$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) = \langle j,m'|\exp\left(\frac{-i\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right)|j,m\rangle. \tag{3.5.42}$$

定义它的矩阵元. 这些矩阵元有时被称为**维格纳函数**，它以对量子力学中转动的群论性质作出了开拓性贡献的维格纳的名字命名. 这里要注意，在（3.5.42）式中相同的 j 值出现在右矢和左矢中，不需要考虑不同 j 值的态之间的 $\mathcal{D}(R)$ 矩阵元，因为它们显而易见都是零. 这是因为 $\mathcal{D}(R)|j,m\rangle$ 仍是 $\mathbf{J}^2$ 的具有相同本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 的本征态：

$$\mathbf{J}^2\mathcal{D}(R)|j,m\rangle = \mathcal{D}(R)\mathbf{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2[\mathcal{D}(R)|j,m\rangle], \tag{3.5.43}$$

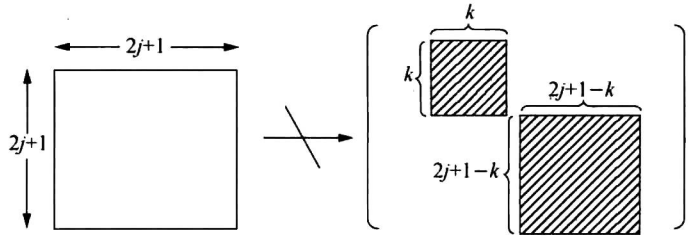
该式可以直接由 $\mathbf{J}^2$ 与 J_k（因此与 J_k 的任何函数）对易得到. 简单地说，转动不改变 j 值，这是一个非常有用的结果.

在文献中经常把 $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ 构成的 $(2j+1)\times(2j+1)$ 矩阵称为转动算符 $\mathcal{D}(R)$ 的 $2j+1$ 维不可约表示. 这意味着，使用一组适当选择的基，在不一定由一个单一的 j 值表征的右矢空间上，对应一个任意转动算符的矩阵可以具有分块对角形式：



(3.5.44)

其中有阴影的方块是由 $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ 构成的、具有某个确定 j 值的 $(2j+1)\times(2j+1)$ 方阵. 而且，每个方阵本身不可能通过任何基的选择，破缺成更小的块.



(3.5.45)

由确定的 j 表征的转动矩阵构成一个群. 首先，单位矩阵是一个群元，因为对应于没有任何转动（$\phi=0$）的转动矩阵是 $(2j+1)\times(2j+1)$ 的单位矩阵. 其次，逆也是一个群元，只不过在不改变转动轴 $\hat{\mathbf{n}}$ 的情况下，反转了转角 $\phi\to-\phi$. 第三，任何两个元的乘积也是一个群元，明确地有

$$\sum_{m'}\mathcal{D}^{(j)}_{m''m'}(R_1)\,\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R_2)=\mathcal{D}^{(j)}_{m''m}(R_1R_2),\tag{3.5.46}$$

其中，乘积 R_1R_2 代表一个单一的转动. 注意，因为相应的转动算符是幺正的，所以转动矩阵是幺正的，显然有

$$\mathcal{D}_{m'm}(R^{-1})=\mathcal{D}^{*}_{mm'}(R).\tag{3.5.47}$$

为了领会转动矩阵的物理意义，从 $|j,m\rangle$ 所代表的一个态出发. 现在转动它：

$$|j,m\rangle\to\mathcal{D}(R)|j,m\rangle.\tag{3.5.48}$$

尽管这个转动操作并不改变 j，但一般将得到一些不同于原来 m 的 m 值态. 为了得到发现处于 $|j,m'\rangle$ 态的振幅，只要把转动后的态展开如下

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(R)|j,m\rangle&=\sum_{m'}|j,m'\rangle\langle j,m'|\mathcal{D}(R)|j,m\rangle\\&=\sum_{m'}|j,m'\rangle\,\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R),\end{aligned}\tag{3.5.49}$$

其中，在使用完备性关系时，利用了 $\mathcal{D}(R)$ 只联系具有相同 j 态的特性. 所以，当原始未转动态由 $|j,m\rangle$ 给出时，矩阵元 $\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R)$ 只不过是找到转动后态处于 $|j,m'\rangle$ 的振幅.

在 3.3 节曾看到怎样利用欧拉角表征最一般的转动. 现在考虑一个任意 j（不一定是 $\frac{1}{2}$）的（3.3.20）式的矩阵实现：

$$\begin{aligned}\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)&=\langle j,m'|\exp\left(\frac{-iJ_z\alpha}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iJ_z\gamma}{\hbar}\right)|j,m\rangle\\&=e^{-i(m'\alpha+m\gamma)}\langle j,m'|\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j,m\rangle.\end{aligned}\tag{3.5.50}$$

注意，唯一非平庸的部分是中间绕 y 轴的转动，它混合了不同 m 值的态. 方便的做法是把一个新矩阵 $d^{(j)}(\beta)$ 定义为

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta)\equiv\langle j,m'|\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j,m\rangle.\tag{3.5.51}$$

最后，转向一些实例. $j=\frac{1}{2}$ 的情况已经在 3.3 节求解出. 请参见（3.3.21）式的中间矩阵

$$d^{1/2}=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)&-\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\\\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)&\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\end{pmatrix}.\tag{3.5.52}$$

下一个最简单的是 $j=1$ 的情况，将较为详细考虑. 显然，首先必须求出 J_y 的 3×3 矩阵表示. 因为由 $J_\pm$ 定义方程（3.5.5）有

$$J_y=\frac{(J_+-J_-)}{2i},\tag{3.5.53}$$

可以利用（3.5.41）式得到

$$J_y^{(j=1)}=\left(\frac{\hbar}{2}\right)\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2}i & 0 \\ \sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{2}i \\ 0 & \sqrt{2}i & 0 \end{pmatrix}\begin{matrix} m'=1 \\ m'=0 \\ m'=-1 \end{matrix}\qquad m=1 \quad m=0 \quad m=-1 \tag{3.5.54}$$

下一个任务是求 $\exp(-iJ_y\beta/\hbar)$ 的泰勒（Taylor）展开. 与 $j=\frac{1}{2}$ 的情况不同，$[J_y^{(j=1)}]^2$ 不依赖于 1 和 $J_y^{(j=1)}$. 然而，很容易求出：

$$\left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^3=\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}. \tag{3.5.55}$$

于是，仅对 $j=1$，可合理地做如下替换

$$\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\to 1-\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2(1-\cos\beta)-i\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)\sin\beta, \tag{3.5.56}$$

读者可以详细地证明它. 具体有

$$d^{(1)}(\beta)=\begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\right)(1+\cos\beta) & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1-\cos\beta) \\ \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \cos\beta & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta \\ \left(\frac{1}{2}\right)(1-\cos\beta) & \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1+\cos\beta) \end{pmatrix} \tag{3.5.57}$$

显然，这种方法对于大的 j 值会很耗时. 别的一些更容易的方法是有可能的，但是在本书中将不继续讨论它们.

3.6 轨道角动量

通过定义角动量为一个无穷小转动的生成元引入了角动量的概念. 当自旋角动量为零或者可以忽略时，还有另一种处理角动量问题的方法. 那时，一个单粒子的角动量 **J** 与定义为

$$\mathbf{L}=\mathbf{x}\times\mathbf{p} \tag{3.6.1}$$

的轨道角动量是一样的. 本节来探讨这两种方法之间的联系.

作为转动生成元的轨道角动量

首先注意到，由于 **x** 和 **p** 各分量之间的对易关系，定义为（3.6.1）式的轨道角动量算符满足角动对易关系

$$[L_i,L_j]=i\epsilon_{ijk}\hbar L_k \tag{3.6.2}$$

这一点很容易证明如下：

$$\begin{aligned}[L_x,L_y]&=[yp_z-zp_y,zp_x-xp_z]\\&=[yp_z,zp_x]+[zp_y,xp_z]\\&=yp_x[p_z,z]+p_yx[z,p_z]\\&=i\hbar(xp_y-yp_x)\\&=i\hbar L_z\\&\vdots\end{aligned} \tag{3.6.3}$$

其次令

$$1-i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z = 1-i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)(xp_y - yp_x) \tag{3.6.4}$$

作用于一个任意的位置本征右矢$|x',y',z'\rangle$，以考察它是否可以解释为绕 z 轴旋转 $\delta\phi$ 角的无穷小转动算符. 利用动量是平移生成元，得到［见（1.6.32）式］

$$\begin{aligned}\left[1-i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right]|x',y',z'\rangle &= \left[1-i\left(\frac{p_y}{\hbar}\right)(\delta\phi x')+i\left(\frac{p_x}{\hbar}\right)(\delta\phi y')\right]|x',y',z'\rangle \\ &= |x'-y'\delta\phi, y'+x'\delta\phi, z'\rangle. \end{aligned}\tag{3.6.5}$$

如果 L_z 生成一个绕 z 轴的无穷小转动，则上式正是所预期的结果. 所以，证明了如果 $\mathbf{p}$ 生成平移，则 $\mathbf{L}$ 生成转动.

假定一个无自旋粒子的任意物理态的波函数由 $\langle x',y',z'|\alpha\rangle$ 给定. 在绕 z 轴做一个无穷小转动之后，转动后态的波函数为

$$\langle x',y',z'|\left[1-i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right]|\alpha\rangle = \langle x'+y'\delta\phi, y'-x'\delta\phi, z'|\alpha\rangle. \tag{3.6.6}$$

实际上改变坐标基

$$\langle x',y',z'|\alpha\rangle \to \langle r,\theta,\phi|\alpha\rangle. \tag{3.6.7}$$

会更为清楚. 按照（3.6.6）式，转动后的态为

$$\begin{aligned}\langle r,\theta,\phi|\left[1-i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right]|\alpha\rangle &= \langle r,\theta,\phi-\delta\phi|\alpha\rangle \\ &= \langle r,\theta,\phi|\alpha\rangle - \delta\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}\langle r,\theta,\phi|\alpha\rangle. \end{aligned}\tag{3.6.8}$$

因为 $\langle r,\theta,\phi|$ 是一个任意的位置本征左矢，可以确认

$$\langle \mathbf{x}'|L_z|\alpha\rangle = -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\phi}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle, \tag{3.6.9}$$

它是一个众所周知的波动力学结果. 尽管这个关系也可轻易地利用动量算符的位置表象求得，这里给出的推导强调了 L_z 作为转动生成元的作用.

其次考虑一个绕 x 轴旋转 $\delta\phi_x$ 角的转动. 与（3.6.6）式类似，有

$$\langle x',y',z'|\left[1-i\left(\frac{\delta\phi_x}{\hbar}\right)L_x\right]|\alpha\rangle = \langle x',y'+z'\delta\phi_x, z'-y'\delta\phi_x|\alpha\rangle. \tag{3.6.10}$$

通过把 x'，y'和 z'用球坐标表示，可以证明

$$\langle \mathbf{x}'|L_x|\alpha\rangle = -i\hbar\left(-\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle. \tag{3.6.11}$$

同样地，

$$\langle \mathbf{x}'|L_y|\alpha\rangle = -i\hbar\left(\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle. \tag{3.6.12}$$

利用（3.6.11）式和（3.6.12）式，对于由（3.5.5）式定义的阶梯算符 $L_\pm$，有

$$\langle \mathbf{x}'|L_\pm|\alpha\rangle = -i\hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm i\,\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle. \tag{3.6.13}$$

最后，利用

$$\mathbf{L}^2 = L_z^2 + \left(\frac{1}{2}\right)(L_+L_- + L_-L_+), \tag{3.6.14}$$

以及（3.6.9）式和（3.6.13）式，可以把 $\langle \mathbf{x}'|\mathbf{L}^2|\alpha\rangle$ 写成如下形式：

$$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{L}^2|\alpha\rangle = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle. \tag{3.6.15}$$

除了 $1/r^2$ 的因子之外，可以看到出现在这里的微商算符正是球坐标中拉普拉斯算子的角度部分.

通过直接观察动能算符，以另外一种方式建立 $\mathbf{L}^2$ 算符与拉普拉斯算子的角度部分间的联系是有益的. 首先写下一个重要的算符恒等式：

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{x}^2\mathbf{p}^2 - (\mathbf{x}\cdot\mathbf{p})^2 + i\hbar\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}, \tag{3.6.16}$$

其中 $\mathbf{x}^2$ 被理解为算符 $\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}$，正如 $\mathbf{p}^2$ 代表算符 $\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}$ 一样. 该式的证明是很容易的：

$$\begin{aligned}
\mathbf{L}^2 &= \sum_{ijlmk}\epsilon_{ijk}x_i p_j \epsilon_{lmk}x_l p_m \\
&= \sum_{ijlm}(\delta_{il}\delta_{jm}-\delta_{im}\delta_{jl})x_i p_j x_l p_m \\
&= \sum_{ijlm}[\delta_{il}\delta_{jm}x_i(x_l p_j - i\hbar\delta_{jl})p_m - \delta_{im}\delta_{jl}x_i p_j(p_m x_l + i\hbar\delta_{lm})] \\
&= \mathbf{x}^2\mathbf{p}^2 - i\hbar\mathbf{x}\cdot\mathbf{p} - \sum_{ijlm}\delta_{im}\delta_{jl}[x_i p_m(x_l p_j - i\hbar\delta_{jl}) + i\hbar\delta_{lm}x_i p_j] \\
&= \mathbf{x}^2\mathbf{p}^2 - (\mathbf{x}\cdot\mathbf{p})^2 + i\hbar\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}.
\end{aligned} \tag{3.6.17}$$

在将上式置于 $\langle \mathbf{x}'|$ 和 $|\alpha\rangle$ 中间之前，首先注意到

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x}'|\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}|\alpha\rangle &= \mathbf{x}'\cdot(-i\hbar\nabla'\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle) \\
&= -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle.
\end{aligned} \tag{3.6.18}$$

同样地，

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x}'|(\mathbf{x}\cdot\mathbf{p})^2|\alpha\rangle &= -\hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle\right) \\
&= -\hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle + r\frac{\partial}{\partial r}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle\right).
\end{aligned} \tag{3.6.19}$$

因此，

$$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{L}^2|\alpha\rangle = r^2\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}^2|\alpha\rangle + \hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle + 2r\frac{\partial}{\partial r}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle\right). \tag{3.6.20}$$

按照动能算符 $\mathbf{p}^2/2m$，有

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m}\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}^2|\alpha\rangle &= -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \\
&= -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\langle \mathbf{x}'|\mathbf{L}^2|\alpha\rangle\right)
\end{aligned} \tag{3.6.21}$$

最后一行中的前两项正是作用于 $\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle$ 上的拉普拉斯算子的径向部分. 最后一项则一定是作用于 $\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle$ 上的拉普拉斯算子的角度部分，这与（3.6.15）式完全一致.

球谐函数

考虑一个受到球对称势的作用的无自旋粒子. 已知波动方程在球坐标系中是可分离变量的，能量本征函数可以写成

$$\langle \mathbf{x}'|n,l,m\rangle = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi), \tag{3.6.22}$$

其中位置矢量 $\mathbf{x}'$ 由球坐标 r,θ 和 ϕ 确定，而 n 表示 l 和 m 之外的某个量子数——例如，束缚态问题的径向量子数或一个自由粒子球面波的能量. 正如将在 3.11 节看得更清楚的，

这种形式可以被视为该问题转动不变的直接后果. 当哈密顿量是球对称的时候，H 与 L_z 和 $\mathbf{L}^2$ 对易，因而预期能量本征右矢也是 $\mathbf{L}^2$ 和 L_z 的本征右矢. 因为在 $k=1,2,3$ 时 L_k 满足角动量对易关系，预期 $\mathbf{L}^2$ 和 L_z 的本征值分别为 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar=[-l\hbar,(-l+1)\hbar,\cdots,(l-1)\hbar,l\hbar]$.

因为角度的依赖关系对于所有球对称的问题是共同的，可以把它孤立出来考虑

$$\langle\hat{\mathbf{n}}|l,m\rangle = Y_l^m(\theta,\phi) = Y_l^m(\hat{\mathbf{n}}), \tag{3.6.23}$$

其中，定义了一个**方向本征右矢** $|\hat{\mathbf{n}}\rangle$. 基于此观点，$Y_l^m(\theta,\phi)$ 就是在 θ 和 ϕ 所规定的方向 $\hat{\mathbf{n}}$ 上找到 l,m 表征的态的振幅.

假定有一个包含轨道角动量本征右矢的关系式，能够立即写出包含球谐函数的相应的关系式. 例如，取本征值方程

$$L_z|l,m\rangle = m\hbar|l,m\rangle. \tag{3.6.24}$$

左乘 $\langle\hat{\mathbf{n}}|$，并且利用 (3.6.9) 式，得到

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\langle\hat{\mathbf{n}}|l,m\rangle = m\hbar\langle\hat{\mathbf{n}}|l,m\rangle. \tag{3.6.25}$$

这个方程就是

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m(\theta,\phi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\phi), \tag{3.6.26}$$

它意味着 $Y_l^m(\theta,\phi)$ 的 ϕ 依赖行为必然像 $e^{im\phi}$. 同样，对应于

$$\mathbf{L}^2|l,m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle, \tag{3.6.27}$$

有 [见 (3.6.15) 式]

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+l(l+1)\right]Y_l^m = 0, \tag{3.6.28}$$

它只不过是 Y_l^m 自身满足的偏微分方程. 正交性关系

$$\langle l',m'|l,m\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{3.6.29}$$

导致

$$\int_0^{2\pi}d\phi\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)Y_{l'}^{m'*}(\theta,\phi)Y_l^m(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}, \tag{3.6.30}$$

其中用到了方向本征右矢的完备性关系

$$\int d\Omega_{\hat{\mathbf{n}}}|\hat{\mathbf{n}}\rangle\langle\hat{\mathbf{n}}| = 1. \tag{3.6.31}$$

为得到 Y_l^m，从 $m=l$ 出发，有

$$L_+|l,l\rangle = 0, \tag{3.6.32}$$

由于 (3.6.13) 式，上式导致

$$-i\hbar e^{i\phi}\left[i\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\langle\hat{\mathbf{n}}|l,l\rangle = 0. \tag{3.6.33}$$

记住 ϕ 依赖的行为一定是 $e^{il\phi}$，可以容易地证明

$$\langle\hat{\mathbf{n}}|l,l\rangle = Y_l^l(\theta,\phi) = c_l e^{il\phi}\sin^l\theta \tag{3.6.34}$$

满足这个偏微分方程，(3.6.33)，其中的 c_l 是由 (3.6.30) 式确定的归一化常数*

---

* 当然，归一化条件 (3.6.30) 式确定不了 c_l 的相因子. 插入一个因子 $(-1)^l$，这样当连续使用 L_- 算符达到了 $m=0$ 的态时，得到的 Y_l^0 有着与勒让德多项式 $P_l(\cos\theta)$ 相同的符号，而后者的相位是由 $P_l(1)=1$ 确定的，见公式 (3.6.39).

$$c_l = \left[\frac{(-1)^l}{2^l l!}\right]\sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}}. \tag{3.6.35}$$

从（3.6.34）式出发，可以连续运用

$$\langle\hat{\mathbf{n}}|l,m-1\rangle = \frac{\langle\hat{\mathbf{n}}|L_-|l,m\rangle}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}}e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle\hat{\mathbf{n}}|l,m\rangle \tag{3.6.36}$$

以得到所有固定 l 的 Y_l^m. 因为这在许多初等量子力学教科书中都做过（例如，Townsend，2000），在这里不准备给出其细节. $m\geq 0$ 时的结果为

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}e^{im\phi}\frac{1}{\sin^m\theta}\frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}(\sin\theta)^{2l}, \tag{3.6.37}$$

并且用

$$Y_l^{-m}(\theta,\phi) = (-1)^m[Y_l^m(\theta,\phi)]^*. \tag{3.6.38}$$

定义 Y_l^{-m}. 无论 m 是正还是负，$Y_l^m(\theta,\phi)$ 的 θ 相关部分是 $[\sin\theta]^{|m|}$ 乘以一个最高幂为 $l-|m|$ 的 $\cos\theta$ 的多项式. 对于 $m=0$，我们得到

$$Y_l^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta). \tag{3.6.39}$$

单从角动量对易关系的观点来看，为什么 l 不能是半整数好像不是显然的. 事实表明，几种理由都不利于半整数 l 值. 首先，对于半整数的 l，并因此对于半整数的 m，在 2π 转动下的波函数会获得一个负号，

$$e^{im(2\pi)} = -1, \tag{3.6.40}$$

结果，波函数就会不是单值的. 在2.4节曾经指出，波函数必须是单值的，这是由于要求一个态右矢用位置的本征右矢的展开是唯一的. 可以证明，如果定义为 $\mathbf{x}\times\mathbf{p}$ 的 $\mathbf{L}$ 被确认为转动的生成元，那么在 2π 转动下的波函数必须获得一个正号. 这是由于一个 2π 转动后的态的波函数就是没有符号改变的、原始的波函数：

$$\langle\mathbf{x}'|\exp\left(\frac{-iL_z 2\pi}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = \langle x'\cos 2\pi + y'\sin 2\pi, y'\cos 2\pi - x'\sin 2\pi, z'|\alpha\rangle$$

$$= \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle, \tag{3.6.41}$$

其中用到了有限角度情况下的（3.6.6）式. 其次，假设倘若具有半整数 l 的 $Y_l^m(\theta,\phi)$ 是可能的. 为确定起见，选择最简单的情况，$l=m=\frac{1}{2}$. 按照（3.6.34）式，就会有

$$Y_{1/2}^{1/2}(\theta,\phi) = c_{1/2}e^{i\phi/2}\sqrt{\sin\theta}. \tag{3.6.42}$$

由 L_- 的性质［见（3.6.36）式］，就会得到

$$Y_{1/2}^{-1/2}(\theta,\phi) = e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(c_{1/2}e^{i\phi/2}\sqrt{\sin\theta}\right)$$

$$= -c_{1/2}e^{-i\phi/2}\cot\theta\sqrt{\sin\theta}. \tag{3.6.43}$$

这个表示式是不允许的，因为在 $\theta=0,\pi$ 处它是奇异的. 更糟糕的是，由偏微分方程

$$\left\langle\hat{\mathbf{n}}|L_-|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = -i\hbar e^{-i\phi}\left(-i\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left\langle\hat{\mathbf{n}}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$= 0 \tag{3.6.44}$$

直接得

$$Y_{1/2}^{-1/2} = c'_{1/2} e^{-i\phi/2} \sqrt{\sin\theta} \tag{3.6.45}$$

它与（3.6.43）式有尖锐的矛盾. 最后，从微分方程的斯特姆-刘维尔（Sturm-Liouville）理论知道，（3.6.28）式的 l 为整数的解构成一个完备集. θ 和 ϕ 的任意函数都可以用只取整数 l 和 m 的 Y_l^m 展开. 由于所有这些理由，苦思冥想半整数 l 值的轨道角动量是徒劳的.（这里的半整数，确切地讲，应为半奇数，因为半偶数仍为整数，显然不会产生这些矛盾. 遵照作者的原文，这里没有改正. ——译者注）

球谐函数作为转动矩阵

通过用上一节引入的转动矩阵的观点讨论球谐函数来结束关于轨道角动量的这一节. 通过将适当的转动算符作用于沿正的 z 方向的方向本征右矢 $|\hat{\mathbf{z}}\rangle$ 上，构造最普遍的方向本征右矢 $|\hat{\mathbf{n}}\rangle$，可以很容易地建立所想要的、两种方法间的联系. 希望找到这样的 $\mathcal{D}(R)$，使得

$$|\hat{\mathbf{n}}\rangle = \mathcal{D}(R)|\hat{\mathbf{z}}\rangle. \tag{3.6.46}$$

可以采用在 3.2 节构造 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ 的本征旋量时使用过的技巧. 首先绕 y 轴转 θ 角，然后绕 z 轴转 ϕ 角，见图 3.3，取 $\beta\to\theta$，$\alpha\to\phi$. 用欧拉角的符号，有

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(\alpha=\phi,\beta=\theta,\gamma=0). \tag{3.6.47}$$

把（3.6.46）式写成

$$|\hat{\mathbf{n}}\rangle = \sum_l \sum_m \mathcal{D}(R)|l,m\rangle\langle l,m|\hat{\mathbf{z}}\rangle. \tag{3.6.48}$$

可以看到，当用 $|l,m\rangle$ 展开时，$|\hat{\mathbf{n}}\rangle$ 包含了所有可能的 l 值. 然而，当用 $\langle l,m'|$ 左乘上述方程时，在 l 求和中只有一项有贡献，即

$$\langle l,m'|\hat{\mathbf{n}}\rangle = \sum_m \mathcal{D}^{(l)}_{m'm}(\alpha=\phi,\beta=\theta,\gamma=0)\langle l,m|\hat{\mathbf{z}}\rangle. \tag{3.6.49}$$

此时 $\langle l,m|\hat{\mathbf{z}}\rangle$ 只是一个数. 事实上，它就是在 $\theta=0$，但 ϕ 不确定时算出的 $Y_l^{m*}(\theta,\phi)$. 在 $\theta=0$ 时，$m\neq 0$ 时的 Y_l^m 为零，它也可以直接从 $|\hat{\mathbf{z}}\rangle$ 是 L_z（它等于 xp_y-yp_x）的本征值为零的本征右矢看到. 所以可以写出

$$\begin{aligned}\langle l,m|\hat{\mathbf{z}}\rangle &= Y_l^{m*}(\theta=0,\phi\text{ 不确定})\delta_{m0}\\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}}P_l(\cos\theta)\Big|_{\cos\theta=1}\delta_{m0}\\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}}\delta_{m0}.\end{aligned} \tag{3.6.50}$$

返回到（3.6.49）式，有

$$Y_l^{m'*}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}}\,\mathcal{D}^{(l)}_{m'0}(\alpha=\phi,\beta=\theta,\gamma=0) \tag{3.6.51}$$

或

$$\mathcal{D}^{(l)}_{m0}(\alpha,\beta,\gamma=0) = \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}}Y_l^{m*}(\theta,\phi)\Big|_{\theta=\beta,\phi=\alpha} \tag{3.6.52}$$

注意 $m=0$ 的情况是特别重要的：

$$d^{(l)}_{00}(\beta)\big|_{\beta=0} = P_l(\cos\theta). \tag{3.6.53}$$

3.7 中心势的薛定谔方程

由下列形式的哈密顿量

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(r)\quad r^2=\mathbf{x}^2 \tag{3.7.1}$$

描述的问题是物理世界中许多情况的基础. 这个哈密顿量的基本重要性在于它是球对称的. 在经典物理中，预期轨道角动量在这样的一个系统中是守恒的. 在量子力学中这也是对的，因为很容易证明

$$[\mathbf{L},\mathbf{p}^2]=[\mathbf{L},\mathbf{x}^2]=0 \tag{3.7.2}$$

因此，如果 H 由（3.7.1）式给定，则

$$[\mathbf{L},H]=[\mathbf{L}^2,H]=0 \tag{3.7.3}$$

把这样的问题称之为中心势或中心力问题. 既使哈密顿量并不严格地是这种形式，当考虑构建在对中心势问题做“微小”修正的近似方案时，它经常是一个很好的出发点.

在这一节将讨论由（3.7.1）式导致的本征函数的一些一般性质以及几个有代表性的中心势问题. 为了解更多的细节，建议读者参考诸多非常深入地探讨了这些问题的优秀教材.

径向方程

方程（3.7.3）清晰地表明，应寻找能量本征态 $|\alpha\rangle=|Elm\rangle$，其中

$$H|Elm\rangle=E|Elm\rangle, \tag{3.7.4}$$

$$\mathbf{L}^2|Elm\rangle=l(l+1)\hbar^2|Elm\rangle, \tag{3.7.5}$$

$$L_z|Elm\rangle=m\hbar|Elm\rangle. \tag{3.7.6}$$

最容易做到这一点的是，利用坐标表象并且借助（3.6.22）式所示的径向函数 $R_{El}(r)$ 和球谐函数求解适当的本征函数的微分方程. 把（3.7.1）、（3.7.4）、（3.7.5）与（3.6.21）、（3.6.22）式结合在一起，得到**径向方程***

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)\right]R_{El}(r)=ER_{El}(r). \tag{3.7.7}$$

取决于 $V(r)$ 的具体形式，可用这个方程或者它的一些变形来确定本征函数的径向部分 $R_{El}(r)$ 和/或能量本征值 E.

事实上，通过代换

$$R_{El}(r)=\frac{u_{El}(r)}{r}, \tag{3.7.8}$$

可以马上获得有关角动量对本征函数影响的某些深刻理解，该代换把（3.7.7）式约化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{El}}{dr^2}+\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)\right]u_{El}(r)=Eu_{El}(r). \tag{3.7.9}$$

把上式与球谐函数是单独归一的实际情况结合在一起，使得整体归一化条件变成

$$1=\int r^2dr\,R^*_{El}(r)R_{El}(r)=\int dr\,u^*_{El}(r)u_{El}(r), \tag{3.7.10}$$

---

* 非常抱歉用 m 既表示了“质量”，又表示了角动量量子数. 然而，从本节上下文应当清楚哪个是哪个.

我们看到，$u_{El}(r)$可以解释为一个在“等效势”

$$V_{等效}(r)=V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \tag{3.7.11}$$

中运动的粒子的一维波函数. 方程（3.7.11）展示，如果 $l\neq 0$，则存在一个“角动量势垒”，如图 3.5 所示. 从量子力学讲，这意味着除了 s 态，粒子定位在原点附近的振幅（因此概率）是很小的. 正如稍后将看到的，例如，这件事在原子中有重要的物理后果.

可以做更为定量的解释. 假定势能函数 $V(r)$ 并不是这样奇异，以致 $\lim_{r\to 0} r^2V(r)=0$. 于是，对于很小的 r 值，(3.7.9) 式变成

$$\frac{d^2u_{El}}{dr^2}=\frac{l(l+1)}{r^2}u_{El}(r)\quad (r\to 0), \tag{3.7.12}$$

它的通解为 $u(r)=Ar^{l+1}+Br^{-l}$. 很容易想到马上取 $B=0$，因为 $1/r^l$ 在 $r\to 0$ 时产生严重的奇异性，特别是当 l 较大时. 然而，取 $B=0$ 还有更好的理由，该理由是源于量子力学的基础.

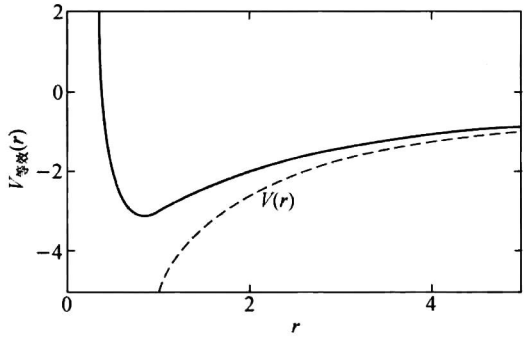


图 3.5　控制“径向波函数”$u_{El}(r)$行为的“等效势”. 如果势能 $V(r)$（如图虚线所示）在原点不太奇异，则对所有 $l\neq 0$ 的态都存在一个角动量位垒，它使得一个粒子定位于原点附近是极不可能的.

考虑由（2.4.16）式给出的概率流. 这是一个矢量，它的径向分量为

$$\begin{aligned} j_r&=\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{j}=\frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial r}\psi\right)\\ &=\frac{\hbar}{m}R_{El}(r)\frac{d}{dr}R_{El}(r). \end{aligned} \tag{3.7.13}$$

现在，如果当 $r\to 0$ 时，$R_{El}(r)\to r^l$，则 $j_r\propto lr^{2l-1}$. 于是，就像它应该的那样，从中心位于原点附近的一个小球“泄漏”出去的概率，对于所有的 l 值都是 $4\pi r^2 j_r\propto lr^{2l+1}\to 0$.

然而，如果当 $r\to 0$ 时，$R_{El}(r)\to r^{-(l+1)}$，则 $j_r\propto(l+1)\ r^{-2l-3}$，并且当 $r\to 0$ 时从小球流出的概率是 $4\pi r^2 j_r\propto\ (l+1)\ r^{-2l-1}\to\infty$，甚至 $l=0$ 时也是如此. 于是，作为（3.7.12）式的解，必须只选择 $u(r)\propto r^{l+1}$；否则，就会破坏量子力学振幅的概率解释.

所以，有

$$R_{El}(r)\to r^l\quad 当\ r\to 0. \tag{3.7.14}$$

这个关系式有深远的影响. 首先，它体现了图 3.5 所示的“角动量势垒”，因为除了 s 态，波函数都趋向于零. 更实际地说，它意味着，比如，在原子核的区域内找到一个原子的电

子的概率遵循 $(R/a_0)^{2l}$，其中 $R<<a_0$ 是原子核的大小，而 a_0 是波尔半径. 当进入原子结构研究时，这些概念将变得明确了.

在研究大 r 处趋于零的势能函数 $V(r)$的束缚态时，有另一种形式的径向方程可以考虑. 对于 $r\to\infty$，(3.7.9) 式变成

$$\frac{d^2u_E}{dr^2}=\kappa^2u \quad \kappa^2\equiv-2mE/\hbar^2>0 \quad r\to\infty, \tag{3.7.15}$$

因为对于束缚态 $E<0$. 这个方程的解简单地就是 $u_E(r)\propto e^{-\kappa r}$. 它也表明，无量纲变量 $\rho\equiv\kappa r$ 对重写径向方程将是有用的. 于是，既消除波函数短距离的奇异行为，又消除长距离的奇异行为，而写成

$$u_{El}(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\rho}w(\rho), \tag{3.7.16}$$

其中函数 $w(\rho)$是“行为很好的”，且满足方程

$$\frac{d^2w}{d\rho^2}+2\left(\frac{l+1}{\rho}-1\right)\frac{dw}{d\rho}+\left[\frac{V}{E}-\frac{2(l+1)}{\rho}\right]w=0. \tag{3.7.17}$$

（导出这个方程的处理方法留给读者.）随后，将集中精力对于特定的函数 $V(r=\rho/\kappa)$ 的 (3.7.17) 式求解 $w(\rho)$.

自由粒子和无穷深球形势阱

在 2.5 节已经利用笛卡尔坐标，得到了三维自由粒子问题的解. 当然可以利用球对称性和角动量处理同样的问题. 从 (3.7.7) 式出发，写出

$$E\equiv\frac{\hbar^2k^2}{2m} \quad 和 \quad \rho\equiv kr \tag{3.7.18}$$

然后得到修改后的径向方程

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0. \tag{3.7.19}$$

这个方程是一个著名的微分方程，它的解称之为球贝塞尔（Bessel）函数 $j_l(\rho)$ 和 $n_l(\rho)$，其中

$$j_l(\rho)=(-\rho)^l\left[\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right]^l\left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right), \tag{3.7.20a}$$

$$n_l(\rho)=-(-\rho)^l\left[\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right]^l\left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right). \tag{3.7.20b}$$

很容易证明，当 $\rho\to0$ 时，$j_l(\rho)\to\rho^l$ 而 $n_l(\rho)\to\rho^{-l-1}$. 因此，$j_l(\rho)$对应着 (3.7.14) 式，该解是在这里唯一考虑的解*. 指出球贝塞尔函数定义在整个复平面也是有用的，而且可以证明

$$j_l(z)=\frac{1}{2i^l}\int_{-1}^{1}ds\,e^{izs}P_l(s). \tag{3.7.21}$$

前几个球贝塞尔函数为

$$j_0(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho}. \tag{3.7.22}$$

$$j_1(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho^2}-\frac{\cos\rho}{\rho}, \tag{3.7.23}$$

---

* 在处理“硬球散射”问题时，原点显然被排除了，因而解 $n_l(\rho)$也被保留了下来. 对于一个给定的 l，这两个解的相对相位称为相移.

$$j_2(\rho)=\left[\frac{3}{\rho^3}-\frac{1}{\rho}\right]\sin\rho-\frac{3\cos\rho}{\rho^2}. \tag{3.7.24}$$

这个结果立即可以应用到一个粒子被禁闭在一个无穷深球势阱中的情况，即，在 $r<a$ 区域内其势能函数 $V(r)=0$，但波函数在 $r=a$ 处被约束为零. 对于任何给定的 l 值，这些约束将导致“量子化条件” $j_l(ka)=0$，即 ka 等于球贝塞尔函数零点的集合. 对 $l=0$，这些值显然是 $ka=\pi,2\pi,3\pi,\cdots$. 对于其他的 l 值，能计算零点的计算机程序是很容易使用的. 可以发现

$$E_{l=0}=\frac{\hbar^2}{2ma^2}[\pi^2,(2\pi)^2,(3\pi)^2,\cdots], \tag{3.7.25}$$

$$E_{l=1}=\frac{\hbar^2}{2ma^2}[4.49^2,7.73^2,10.90^2,\cdots], \tag{3.7.26}$$

$$E_{l=2}=\frac{\hbar^2}{2ma^2}[5.84^2,8.96^2,12.25^2,\cdots]. \tag{3.7.27}$$

应当注意，这一系列的能级显示没有 l 的简并. 的确，除了不同阶的球贝塞尔函数零点之间偶然的相等之外，这样的简并能级是不可能的.

各向同性谐振子

确定哈密顿量

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2r^2 \tag{3.7.28}$$

的能量本征值是很简单的. 用下式引入无量纲能量 λ 和径向坐标 ρ

$$E=\frac{1}{2}\hbar\omega\lambda \quad 和 \quad r=\left[\frac{\hbar}{m\omega}\right]^{1/2}\rho, \tag{3.7.29}$$

把（3.7.9）式变换为

$$\frac{d^2u}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}u(\rho)+(\lambda-\rho^2)u(\rho)=0. \tag{3.7.30}$$

虽然因为大 r 处的 $V(r)$不趋于零因而不能使用（3.7.16）式，但明确地移除大（和小）ρ 处的奇异行为仍然是值得做的. 代替该式，写出

$$u(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\rho^2/2}f(\rho). \tag{3.7.31}$$

这就产生了函数 $f(\rho)$的下列微分方程：

$$\rho\frac{d^2f}{d\rho^2}+2[(l+1)-\rho^2]\frac{df}{d\rho}+[\lambda-(2l+3)]\rho f(\rho)=0. \tag{3.7.32}$$

通过把 $f(\rho)$ 写成一个无穷级数，即

$$f(\rho)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\rho^n. \tag{3.7.33}$$

来求解方程（3.7.32）. 把这个级数插入到微分方程中，并置 ρ 的各次幂都等于零. 唯一留存下来的 ρ^0 项是 $2(l+1)a_1$，所以

$$a_1=0 \tag{3.7.34}$$

正比于 ρ^1 的项允许把 a_2 与 a_0 联系起来，接下来它们可以通过归一条件确定. 继续做下去，（3.7.32）式变成

$$\sum_{n=2}^{\infty}\{(n+2)(n+1)a_{n+2}+2(l+1)(n+2)a_{n+2}-2na_n+[\lambda-(2l+3)]a_n\}\rho^{n+1}=0, \tag{3.7.35}$$

最终，它导致递推关系

$$a_{n+2}=\frac{2n+2l+3-\lambda}{(n+2)(n+2l+3)}a_n. \tag{3.7.36}$$

立即看到，$f(\rho)$只包含ρ的偶次幂，因为（3.7.34）式和（3.7.36）式意味着对于奇数的n有$a_n=0$. 另外，当$n\to\infty$时，有

$$\frac{a_{n+2}}{a_n}\to\frac{2}{n}=\frac{1}{q}, \tag{3.7.37}$$

其中$q=n/2$既包括奇整数也包括偶整数. 因此，对于大ρ，（3.7.33）式变成

$$f(\rho)\to\text{常数}\times\sum_q\frac{1}{q!}(\rho^2)^q\propto e^{\rho^2}. \tag{3.7.38}$$

换言之，由（3.7.31）式给出的$u(\rho)$在大ρ时将按指数增长（因此将不能满足归一条件），除非该级数中断. 所以，对于某个偶数值的$n=2q$有

$$2n+2l+3-\lambda=0 \tag{3.7.39}$$

并且能量本征值为

$$E_{ql}=\left(2q+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega\equiv\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{3.7.40}$$

其中$q=0,1,2,\cdots$，$l=0,1,2,\cdots$和$N\equiv 2q+l$. 人们经常称N为“主”量子数. 可以证明，q给出径向波函数的节点数.

完全不像方势阱，三维各向同性谐振子具有对量子数l简并的能量本征值. 对$N=1$有三个态（都是$l=1$）. 对$N=2$，有五个$l=2$的态，加上一个$q=1$且$l=0$的态，总共给出六个态. 注意，对于偶数（奇数）的N，只有偶数（奇数）的l值是允许的. 因此，波函数的宇称是偶还是奇是随着N值来确定的.

当势能函数是一个某种有限大小的阱时，这些波函数是计算各种自然现象的最流行的基态. 这类方法的最大成就之一是原子核壳模型，单独的质子和中子被描绘成在一个势能函数的势阱中独立运动，而该势能函数是由原子核中所有核子的累积效应产生的. 图3.6将原子核内观测到的能级与对于各向同性谐振子和无穷深球势阱求得的能级做了比较.

把哈密顿量（3.7.28）式的本征态标记为$|qlm\rangle$或$|Nlm\rangle$是很自然的. 然而，这个哈密顿量还可以写成

$$H=H_x+H_y+H_z, \tag{3.7.41}$$

其中$H_i=a_i^\dagger a_i+\frac{1}{2}$是一个沿$i=x,y,z$方向的独立的一维谐振子. 在这种方法中，把本征态标记为$|n_x,n_y,n_z\rangle$，能量本征值为

$$\begin{aligned}E&=\left(n_x+\frac{1}{2}+n_y+\frac{1}{2}+n_z+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\\&=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\end{aligned} \tag{3.7.42}$$

其中，$N=n_x+n_y+n_z$. 很容易从数值上证明，不管使用哪种基，对于前几个能级简并都一样. 总的说来，证明这一点并推导出从一个基变到另一个基的幺正变换矩阵$\langle n_x,n_y,n_z|qlm\rangle$是一个有趣的练习.（见本章末尾的习题3.21.）

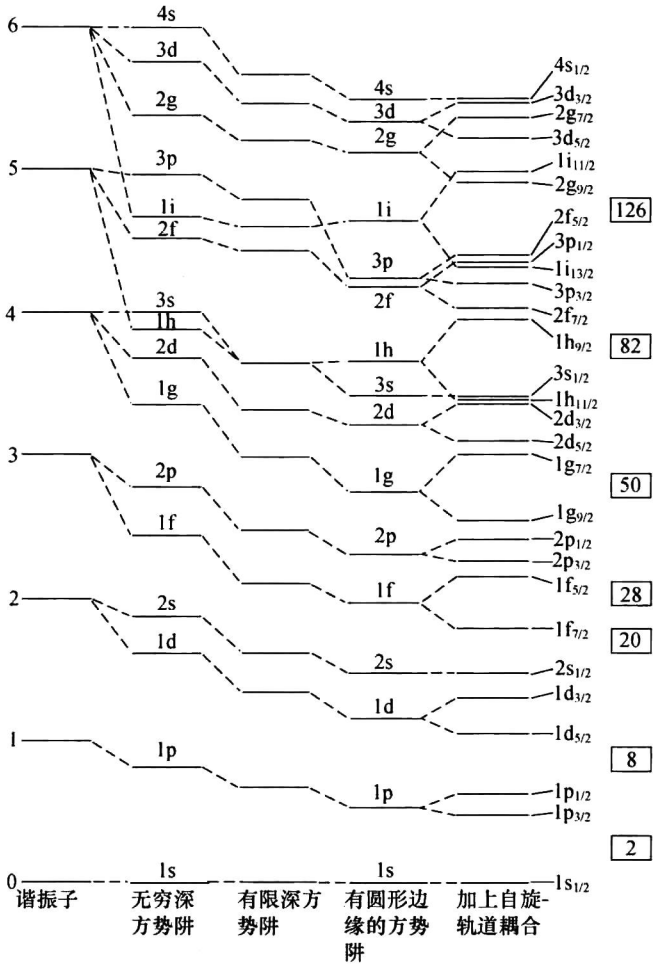


图 3.6　原子核壳模型中的能级，取自 Haxel，Jensen 和 Suess，*Zeitschrift für Physik* **128** (1950) 295. 左边一列是三维各向同性谐振子的能级，紧随着的一列是无穷深球形势阱时的能级. 其右边的两列是修改了的无穷深方势阱的能级，先是有限壁高势阱的情况，然后是“磨圆了角的”方势阱的情况. 最右边能级图显示了包括了核子的自旋与轨道角动量相互作用的势阱的能级. 最后一列标出了总角动量量子数.

库仑 (Coulomb) 势

或许物理学中最重要的势能函数是

$$V(\mathbf{x}) = -\frac{Ze^2}{r}, \tag{3.7.43}$$

很明显，选择常数 Ze^2 是为了使 (3.7.43) 式能表示原子序数为 Z 的一个单电子原子的势能. 除了库仑力以及经典引力外，它广泛地用在适用于很多物理系统的模型中*. 在这里，考虑基于这样一个函数的径向方程以及得出的能量本征值.

$1/r$ 势满足导出 (3.7.17) 式的所有要求. 因此，通过确定函数 $w(\rho)$，寻找形式为

---

* 的确，$1/r$ 势能函数源于任意一个中间交换无质量粒子的、空间维度为三维的量子场论. 见 Zee (2010) 中的 1.6 章.

(3.7.16) 式的解. 定义

$$\rho_0 = \left[\frac{2m}{-E}\right]^{1/2} \frac{Ze^2}{\hbar} = \left[\frac{2mc^2}{-E}\right]^{1/2} Z\alpha, \tag{3.7.44}$$

其中 $\alpha \equiv e^2/\hbar c \approx 1/137$ 是精细结构常数，则 (3.7.17) 式变成

$$\rho \frac{d^2w}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{dw}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]w(\rho) = 0. \tag{3.7.45}$$

当然能够利用一种级数方法开始求解 (3.7.45) 式，并导出系数的递推关系，就像对 (3.7.32) 式所做的那样. 然而，事实证明这个解实际上已经为众所周知.

方程 (3.7.45) 可以写成库默尔 (Kummer) 方程：

$$x\frac{d^2F}{dx^2} + (c-x)\frac{dF}{dx} - aF = 0, \tag{3.7.46}$$

其中

$$\begin{aligned} x &= 2\rho, \\ c &= 2(l+1), \\ \text{和} \quad 2a &= 2(l+1) - \rho_0. \end{aligned} \tag{3.7.47}$$

(3.7.46) 式的解称为合流超几何函数，它被写成为级数

$$F(a;c;x) = 1 + \frac{a}{c}\frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{x^2}{2!} + \cdots. \tag{3.7.48}$$

因此，

$$w(\rho) = F\left(l+1-\frac{\rho_0}{2};2(l+1);2\rho\right). \tag{3.7.49}$$

注意，对于大的 ρ，有

$$\begin{aligned} w(\rho) &\approx \sum_{\text{大的}N} \frac{a(a+1)\cdots}{c(c+1)\cdots}\frac{(2\rho)^N}{N!} \\ &\approx \sum_{\text{大的}N} \frac{(N/2)^N}{N^N}\frac{(2\rho)^N}{N!} \approx \sum_{\text{大的}N}\frac{(\rho)^N}{N!} \approx e^{\rho}. \end{aligned}$$

于是，(3.7.16) 式再一次给出一个会无限增长的径向波函数，除非级数 (3.7.48) 式中断. 因此，对某个整数 N，必须有 $a+N=0$，它导致

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 2(N+l+1), \\ \text{其中} \quad N &= 0,1,2\cdots \\ \text{和} \quad l &= 0,1,2,\cdots \end{aligned} \tag{3.7.50}$$

按照惯例（并且，正如将看到的，这样做是有益的），定义**主量子数** n 为

$$\begin{aligned} n &\equiv N+l+1 = 1,2,3,\cdots, \\ \text{其中} \quad l &= 0,1,\cdots,n-1. \end{aligned} \tag{3.7.51}$$

可以看出，利用 2.5 节曾描述过的生成函数技巧求解库仑势的径向方程是可能的. 见本章末尾的习题 3.22.

通过把 (3.7.44) 式和 (3.7.50) 式组合在一起，根据主量子数推出能量本征值，即

$$\rho_0 = \left[\frac{2mc^2}{-E}\right]^{1/2} Z\alpha = 2n, \tag{3.7.52}$$

它导致

$$E = -\frac{1}{2}mc^2\frac{Z^2\alpha^2}{n^2} = -13.6\text{eV}\frac{Z^2}{n^2}, \tag{3.7.53}$$

其中的数值结果是对一个单电子原子的结果，即 $mc^2=511\text{keV}$. 方程（3.7.53）当然就是熟知的巴耳末（Balmer）公式.

现在是整理各种观点的时候了. 首先，现代量子力学预言能级性质与波尔的旧原子模型的结果存在明显的不一致. 波尔模型在角动量本征值 l 与主量子数 n 之间是一一对应的，事实上，基态对应于 $n=l=1$. 相反，对 $n=1$，只有 $l=0$ 是允许的；而对更高的能级，一些不同的 l 值也都是允许的.

其次，出现了一个自然的长度标度 a_0. 因为 $\rho=\kappa r$，其中 $\kappa=\sqrt{-2mE/\hbar^2}$ [见（3.7.15）式]，有

$$\frac{1}{\kappa}=\frac{\hbar}{mc\alpha}\frac{n}{Z}\equiv a_0\frac{n}{Z}, \tag{3.7.54}$$

其中

$$a_0=\frac{\hbar}{mc\alpha}=\frac{\hbar^2}{me^2} \tag{3.7.55}$$

被称为波尔半径. 对于一个电子，$a_0=0.53\times10^{-8}\,\text{cm}=0.53\text{Å}$. 它的确是典型的原子尺度.

最后，能量本征值（3.7.35）式显示了一种有趣的简并. 本征值只依赖于 n，而不依赖于 l 和 m. 因此，对于一个 $|nlm\rangle$ 态，能级的简并度为

$$\text{简并度}=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2. \tag{3.7.56}$$

实际上，这个简并度并不是偶然的，而是反映了库仑势的微妙对称性. 在第 4 章将回到这个问题.

现在，可以写出氢原子波函数的显示表达式. 回到（3.6.22）式，并且引入适当的归一因子，有

$$\psi_{nlm}(\mathbf{x})=\langle\mathbf{x}|nlm\rangle=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi), \tag{3.7.57}$$

其中

$$R_{nl}(r)=\frac{1}{(2l+1)!}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l e^{-Zr/na_0}\left[\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!}\right]^{1/2}\times F(-n+l+1;2l+2;2Zr/na_0). \tag{3.7.58}$$

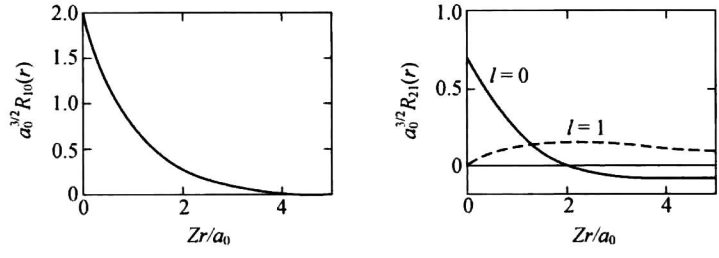


图 3.7　库仑势情况的径向波函数，其主量子数 $n=1$（左）和 $n=2$（右）.

图 3.7 画出了 $n=1$ 和 $n=2$ 的径向波函数. 正如曾讨论过的，只有 $l=0$ 的波函数在原点不为零. 还要注意，$l=0$ 的波函数有 $n-1$ 个节点，而满足 $l=n-1$ 的波函数没有节点.

3.8 角动量的加法

角动量加法在现代物理的所有领域——从原子光谱学到原子核与粒子碰撞——都有重要的应用. 此外，角动量加法的研究提供一个很好的阐明基改变概念的机会，在第1章曾广泛地讨论过.

角动量加法的一些简单例子

在研究角动量加法的形式理论之前，值得看一下读者可能熟悉的两个简单例子：（1）如何把轨道角动量与自旋角动量加在一起，以及（2）如何把两个自旋$\frac{1}{2}$粒子的自旋角动量加在一起.

前面既研究了忽略除自旋以外的一切量子力学自由度（诸如位置和动量）的自旋$\frac{1}{2}$系统，也研究考虑了空间自由度（诸如位置和动量），但忽略了内部自由度（比如自旋）的量子力学粒子. 一个具有自旋的粒子的实际描述当然必须既考虑空间自由度也要考虑内部自由度. 对于一个自旋$\frac{1}{2}$的粒子，其基右矢可以视为由位置本征右矢$\{|\mathbf{x}'\rangle\}$所张的无穷维右矢空间和由$|+\rangle$与$|-\rangle$所张的二维自旋空间的直积空间. 更明确地说，对这种基右矢，有

$$|\mathbf{x}',\pm\rangle = |\mathbf{x}'\rangle \otimes |\pm\rangle, \tag{3.8.1}$$

其中，由$\{|\mathbf{x}'\rangle\}$所张空间中的任何算符与由$|\pm\rangle$所张的二维空间中的任何算符都对易.

转动算符仍取$\exp(-i\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi/\hbar)$的形式，但是转动生成元$\mathbf{J}$现在由两部分构成，即

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \tag{3.8.2}$$

实际上，更明显地是把（3.8.2）式写成

$$\mathbf{J} = \mathbf{L}\otimes 1 + 1\otimes\mathbf{S}, \tag{3.8.3}$$

在$\mathbf{L}\otimes 1$中的1表示自旋空间中的单位算符，而在$1\otimes\mathbf{S}$中的1表示由位置本征右矢所张的无穷维右矢空间中的单位算符. 因为$\mathbf{L}$和$\mathbf{S}$对易，可以写成

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}^{(\text{轨道})}(R)\otimes\mathcal{D}^{(\text{自旋})}(R) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{L}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right)\otimes\exp\left(\frac{-i\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right). \tag{3.8.4}$$

一个有自旋的粒子的波函数可以写成

$$\langle\mathbf{x}',\pm|\alpha\rangle = \psi_{\pm}(\mathbf{x}'). \tag{3.8.5}$$

两个分量$\psi_{\pm}$经常被排布成如下形式的列矩阵

$$\begin{pmatrix}\psi_{+}(\mathbf{x}')\\ \psi_{-}(\mathbf{x}')\end{pmatrix}, \tag{3.8.6}$$

其中，$|\psi_{\pm}(\mathbf{x}')|^2$表示在$\mathbf{x}'$处找到该粒子自旋分别为向上和向下的概率密度. 代替$|\mathbf{x}'\rangle$作为空间部分的基右矢，可以使用$|n,l,m\rangle$，它是$\mathbf{L}^2$和L_z的本征右矢，本征值分别为$l(l+1)\hbar^2$和$m_l\hbar$. 对于自旋部分，$|\pm\rangle$是$\mathbf{S}^2$和S_z的本征右矢，本征值分别为$3\hbar^2/4$和$\pm\hbar/2$. 然而正如稍后将证明的，可以利用$\mathbf{J}^2$，J_z，$\mathbf{L}^2$和$\mathbf{S}^2$的本征右矢作为基矢. 换句话说，可以把一个有自旋的粒子的态右矢或者用$\mathbf{L}^2$，$\mathbf{S}^2$，L_z和S_z的共同本征态展开，或者用$\mathbf{J}^2$，J_z，$\mathbf{L}^2$和$\mathbf{S}^2$的共同本征态展开. 下面将详细地研究这两种描述是如何关联的.

作为第二个例子，研究两个自旋$\frac{1}{2}$的粒子——比方说两个电子——同时略去它们的轨道自由度. 总自旋算符通常写成

$$\mathbf{S}=\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2, \tag{3.8.7}$$

但是再一次将其理解为

$$\mathbf{S}_1\otimes 1+1\otimes\mathbf{S}_2, \tag{3.8.8}$$

其中，在第一（第二）项中 1 代表电子 2(1)的自旋空间中的单位算符. 当然有

$$[S_{1x},S_{2y}]=0 \tag{3.8.9}$$

等. 在电子 1(2)的空间内，有通常的对易关系

$$[S_{1x},S_{1y}]=i\hbar S_{1z},[S_{2x},S_{2y}]=i\hbar S_{2z},\cdots, \tag{3.8.10}$$

作为（3.8.9）式和（3.8.10）式的直接结果，对总自旋算符有

$$[S_x,S_y]=i\hbar S_z \tag{3.8.11}$$

等.

各种自旋算符的本征值表示如下

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^2=(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2&:s(s+1)\hbar^2\\ S_z=S_{1z}+S_{2z}&:m\hbar\\ S_{1z}&:m_1\hbar\\ S_{2z}&:m_2\hbar\end{aligned} \tag{3.8.12}$$

同样地，可以把与两个电子任意自旋态对应的右矢，用 $\mathbf{S}^2$ 和 S_z 的本征右矢或者 S_{1z} 和 S_{2z} 的本征右矢展开. 这两种可能性如下：

1. 基于 S_{1z} 和 S_{2z} 的本征右矢的表示 $\{m_1,m_2\}$：

$$|++\rangle,|+-\rangle,|-+\rangle \text{ 和 } |--\rangle, \tag{3.8.13}$$

其中$|+-\rangle$ 表示 $m_1=\frac{1}{2}$，$m_2=-\frac{1}{2}$，以及等等.

2. 基于 $\mathbf{S}^2$ 和 S_z 的本征右矢的表示（或三重态-单态表示）$\{s,m\}$：

$$|s=1,m=\pm 1,0\rangle,|s=0,m=0\rangle, \tag{3.8.14}$$

其中 $s=1(s=0)$ 被称为自旋三重态（或单态）.

注意，每一集合有四个基右矢. 两组基右矢之间的关系如下：

$$|s=1,m=1\rangle=|++\rangle, \tag{3.8.15a}$$

$$|s=1,m=0\rangle=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|+-\rangle+|-+\rangle), \tag{3.8.15b}$$

$$|s=1,m=-1\rangle=|--\rangle, \tag{3.8.15c}$$

$$|s=0,m=0\rangle=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|+-\rangle-|-+\rangle). \tag{3.8.15d}$$

由（3.8.15a）式的右边得知，有两个自旋都向上的电子，这种情况只对应于 $s=1$，$m=1$. 通过把阶梯算符

$$\begin{aligned}S_-&\equiv S_{1-}+S_{2-}\\ &=(S_{1x}-iS_{1y})+(S_{2x}-iS_{2y})\end{aligned} \tag{3.8.16}$$

作用于（3.8.15a）式的两边，由（3.8.15a）式得到（3.8.15b）式. 在这么做的时候，必须记住，像 S_{1-} 这样一个电子 1 的算符仅影响到$|++\rangle$ 中的第一个量等. 可以把

$$S_-|s=1,m=1\rangle=(S_{1-}+S_{2-})|++\rangle \tag{3.8.17}$$

写成

$$\sqrt{(1+1)(1-1+1)}|s=1,m=0\rangle=\sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)}\times|-+\rangle + \sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)}|+-\rangle, \tag{3.8.18}$$

它立即导致（3.8.15b）式. 同样地，通过把（3.8.16）式再次作用于（3.8.15b）式，可得到$|s=1,m=-1\rangle$. 最后，通过要求它与其他三个右矢，特别是与（3.8.15b）式正交，可得到（3.8.15d）式.

出现在（3.8.15）各式右边的系数是**克莱布什-戈丹（Clebsch-Gordan）系数**最简单的例子，稍后将进一步讨论. 它们只不过是一些把$\{m_1,m_2\}$基与$\{s,m\}$基联系起来的变换矩阵的矩阵元. 用另一种方法导出这些系数是有益的. 假定，利用$\{m_1,m_2\}$基写出对应于

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^2&=\mathbf{S}_1^2+\mathbf{S}_2^2+2\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2\\&=\mathbf{S}_1^2+\mathbf{S}_2^2+2S_{1z}S_{2z}+S_{1+}S_{2-}+S_{1-}S_{2+}\end{aligned} \tag{3.8.19}$$

的4×4矩阵. 这个方阵显然不是对角的，因为S_{1+}这样的一个算符把$|-+\rangle$与$|++\rangle$联系了起来. 把这个矩阵对角化的幺正矩阵使基右矢$|m_1,m_2\rangle$变成基右矢$|s,m\rangle$. 这个幺正矩阵的矩阵元就是这个问题的克莱布什-戈丹系数. 本书鼓励读者详细地算出所有这些系数.

角动量加法的形式理论

通过考虑这些简单例子获得了一些物理的理解之后，现在能够更系统地研究角动量加法形式理论. 考虑在不同子空间的两个角动量算符$\mathbf{J}_1$和$\mathbf{J}_2$. $\mathbf{J}_1(\mathbf{J}_2)$的各分量满足通常的角动量对易关系：

$$[J_{1i},J_{1j}]=i\hbar\epsilon_{ijk}J_{1k} \tag{3.8.20a}$$

和

$$[J_{2i},J_{2j}]=i\hbar\epsilon_{ijk}J_{2k}, \tag{3.8.20b}$$

然而，任何一对取自不同子空间的算符之间有

$$[J_{1k},J_{2l}]=0 \tag{3.8.21}$$

既影响子空间1又影响子空间2的无穷小转动算符可写为

$$\left(1-\frac{i\mathbf{J}_1\cdot\hat{\mathbf{n}}\delta\phi}{\hbar}\right)\otimes\left(1-\frac{i\mathbf{J}_2\cdot\hat{\mathbf{n}}\delta\phi}{\hbar}\right)=1-\frac{i(\mathbf{J}_1\otimes1+1\otimes\mathbf{J}_2)\cdot\hat{\mathbf{n}}\delta\phi}{\hbar}. \tag{3.8.22}$$

把总角动量定义为

$$\mathbf{J}\equiv\mathbf{J}_1\otimes1+1\otimes\mathbf{J}_2, \tag{3.8.23}$$

更常见地被写成

$$\mathbf{J}=\mathbf{J}_1+\mathbf{J}_2, \tag{3.8.24}$$

有限角度下的（3.8.22）式为

$$\mathcal{D}_1(R)\otimes\mathcal{D}_2(R)=\exp\left(\frac{-i\mathbf{J}_1\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right)\otimes\exp\left(\frac{-i\mathbf{J}_2\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right). \tag{3.8.25}$$

注意相同的转动轴和同样的转角的出现.

极为重要的是要注意，作为（3.8.20）式和（3.8.21）式的一个直接后果，总的 $\mathbf{J}$ 满足角动量对易关系

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k \tag{3.8.26}$$

换句话说，$\mathbf{J}$ 是一个 3.1 节意义上的角动量. 这在物理上是合理的，因为 $\mathbf{J}$ 是整个系统的生成元. 在 3.5 节所得到的一切——例如，$\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的本征值谱以及阶梯算符的矩阵元——对总的 $\mathbf{J}$ 也都成立.

至于基右矢，有两种选择.

选择 A：$\mathbf{J}_1^2$，$\mathbf{J}_2^2$，J_{1z} 和 J_{2z} 的共同本征右矢. 把这些右矢表示为 $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$，显然，这四个算符彼此对易. 定义它们的方程为

$$\mathbf{J}_1^2|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle, \tag{3.8.27a}$$

$$J_{1z}|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = m_1\hbar|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle, \tag{3.8.27b}$$

$$\mathbf{J}_2^2|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle, \tag{3.8.27c}$$

$$J_{2z}|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = m_2\hbar|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle. \tag{3.8.27d}$$

选择 B：$\mathbf{J}^2$，$\mathbf{J}_1^2$，$\mathbf{J}_2^2$ 和 J_z 的共同本征右矢. 首先注意到这一组算符相互对易. 特别是，有

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2] = 0, \tag{3.8.28}$$

只要把 $\mathbf{J}^2$ 写成

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}, \tag{3.8.29}$$

（3.8.28）式就很容易证明. 用 $|j_1, j_2; jm\rangle$ 代表选择 B 的基右矢：

$$\mathbf{J}_1^2|j_1 j_2; jm\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1 j_2; jm\rangle, \tag{3.8.30a}$$

$$\mathbf{J}_2^2|j_1 j_2; jm\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1 j_2; jm\rangle, \tag{3.8.30b}$$

$$\mathbf{J}^2|j_1 j_2; jm\rangle = j(j+1)\hbar^2|j_1 j_2; jm\rangle, \tag{3.8.30c}$$

$$J_z|j_1 j_2; jm\rangle = m\hbar|j_1 j_2; jm\rangle. \tag{3.8.30d}$$

通常 j_1，j_2 是不言自明的，因而基右矢简单地写成 $|j, m\rangle$.

非常重要的是要注意，尽管

$$[\mathbf{J}^2, J_z] = 0, \tag{3.8.31}$$

却有

$$[\mathbf{J}^2, J_{1z}] \neq 0, \quad [\mathbf{J}^2, J_{2z}] \neq 0, \tag{3.8.32}$$

实际上读者利用（3.8.29）式很容易证明它们. 这意味着，不能把 $\mathbf{J}^2$ 添加到选择 A 的算符集合中. 同样，不能把 J_{1z} 和/或 J_{2z} 添加到选择 B 的算符集合中. 有两个可能的基右矢集合，它们对应着已经构造的相互相容可观测量的两个极大集合.

考虑在 1.5 节意义上联系着两组基的幺正变换：

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1}\sum_{m_2}|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\langle j_1 j_2; m_1 m_2|j_1 j_2; jm\rangle, \tag{3.8.33}$$

其中用到了

$$\sum_{m_1}\sum_{m_2}|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\langle j_1 j_2; m_1 m_2| = 1 \tag{3.8.34}$$

该式右边是给定 j_1 和 j_2 的右矢空间中的单位算符. 这个变换矩阵矩阵元 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2|j_1 j_2; jm\rangle$ 就是克莱布什-戈丹系数.

现在准备研究的克莱布什-戈丹系数具有许多重要的性质. 首先，除非

$$m = m_1 + m_2. \tag{3.8.35}$$

否则该系数为零. 要证明这一点，注意到，

$$(J_z - J_{1z} - J_{2z})|j_1 j_2; jm\rangle = 0. \tag{3.8.36}$$

用 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2|$ 左乘上式，得到

$$(m - m_1 - m_2)\langle j_1 j_2; m_1 m_2|j_1 j_2; jm\rangle = 0, \tag{3.8.37}$$

它证明了上述论断. 钦佩狄拉克符号的能力！正如已经做到的那样，用狄拉克括号形式写出克莱布什-戈丹系数真的是很值得的.

其次，除非满足

$$|j_1 - j_2| \leqslant j \leqslant j_1 + j_2, \tag{3.8.38}$$

否则该系数为零. 从角动量加法的矢量模型看来，这个性质似乎很显然，在我们把 **J** 视为 $\mathbf{J}_1$ 与 $\mathbf{J}_2$ 的矢量和. 然而，通过如下方法核实一下这一点还是值得的，即：证明若 (3.8.38) 式成立，则 $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$ 所张空间的维数与 $\{|j_1 j_2; jm\rangle\}$ 所张空间的维数是相同. 通过对 (m_1, m_2) 计数的方式，得到

$$N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \tag{3.8.39}$$

因为对给定的 j_1，有 $2j_1+1$ 个可能的 m_1 值；类似的说法对另一个角动量 j_2 也是对的. 至于对 (j, m) 的计数方式，注意到对每个 j，有 $2j+1$ 个态，而按照 (3.8.38) 式，j 本身从 $j_1 - j_2$ 变到 $j_1 + j_2$，其中不失普遍性假定了 $j_1 \geqslant j_2$. 因此，得到

$$\begin{aligned} N &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) \\ &= \frac{1}{2}[\{2(j_1 - j_2) + 1\} + \{2(j_1 + j_2) + 1\}](2j_2 + 1) \\ &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1). \end{aligned} \tag{3.8.40}$$

因为这两种计数方法给出了相同的 N 值，得出 (3.8.38) 式是完全自洽*.

克莱布什-戈丹系数形成一个幺正矩阵. 另外，按照约定，该矩阵的矩阵元都取作实数. 它的直接结果是逆系数 $\langle j_1 j_2; jm|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ 与 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2|j_1 j_2; jm\rangle$ 相同. 一个实的幺正矩阵是正交矩阵，所以，有正交条件

$$\sum_j \sum_m \langle j_1 j_2; m_1 m_2|j_1 j_2; jm\rangle\langle j_1 j_2; m'_1 m'_2|j_1 j_2; jm\rangle = \delta_{m_1 m'_1}\delta_{m_2 m'_2}, \tag{3.8.41}$$

由 $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$ 的正交性与克莱布什-戈丹系数的实数性，上式显然成立. 同样，还有

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2|j_1 j_2; jm\rangle\langle j_1 j_2; m_1 m_2|j_1 j_2; j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}. \tag{3.8.42}$$

作为上式的特殊情况，可以设 $j' = j, m' = m = m_1 + m_2$. 那么，得到

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} |\langle j_1 j_2; m_1 m_2|j_1 j_2; jm\rangle|^2 = 1, \tag{3.8.43}$$

它正是 $|j_1 j_2; jm\rangle$ 的归一化条件.

一些作者采用了略微不同的克莱布什-戈丹系数符号. 代替 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2|j_1 j_2; jm\rangle$，有时用 $\langle j_1 m_1 j_2 m_2|j_1 j_2 jm\rangle$，$C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m)$，$C_{j_1 j_2}(jm; m_1 m_2)$ 等. 它们还可以用**维格纳 3-j 符号**写出来，在文献中偶尔会见到：

---

* 在 Gottfried(1966)，215 页以及本书附录 C 中给出了 (3.8.38) 式的一个完整的证明.

$$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle = (-1)^{j_1 - j_2 + m}\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}. \tag{3.8.44}$$

克莱布什-戈丹系数的递推关系

在 j_1，j_2 和 j 固定的情况下，具有不同的 m_1 和 m_2 的系数彼此通过**递推关系**联系起来．从

$$J_\pm |j_1 j_2; jm\rangle = (j_{1\pm} + j_{2\pm}) \sum_{m_1}\sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle. \tag{3.8.45}$$

出发．利用（3.5.39）式和（3.5.40）式，得到（在 $m_1 \to m_1'$，$m_2 \to m_2'$ 的情况下）

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\,|j_1 j_2; j, m \pm 1\rangle \\ &= \sum_{m_1'}\sum_{m_2'}\Big(\sqrt{(j_1 \mp m_1')(j_1 \pm m_1' + 1)}\,|j_1 j_2; m_1' \pm 1, m_2'\rangle \\ &+ \sqrt{(j_2 \mp m_2')(j_2 \pm m_2' + 1)}\,|j_1 j_2; m_1', m_2' \pm 1\rangle\Big) \\ &\times \langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm\rangle. \end{aligned} \tag{3.8.46}$$

下一步是左乘 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2|$ 并使用正交归一性，它意味着，右边第一项的非零贡献只可能为

$$m_1 = m_1' \pm 1, \quad m_2 = m_2' \tag{3.8.47}$$

而第二项的非零贡献为

$$m_1 = m_1', \quad m_2 = m_2' \pm 1 \tag{3.8.48}$$

用这种方式，得到所要求的递推关系：

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\,\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \pm 1\rangle \\ &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)}\,\langle j_1 j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \\ &+ \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)}\,\langle j_1 j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j_1 j_2; jm\rangle. \end{aligned} \tag{3.8.49}$$

重要的是要注意，因为 $J_\pm$ 算符移动了 m 值，克莱布什-戈丹系数的非零条件（3.8.35）式现在变成［当作用于（3.8.49）式时］

$$m_1 + m_2 = m \pm 1. \tag{3.8.50}$$

通过在 $m_1 m_2$ 平面上观察（3.8.49）式，可以领会递推关系的意义．J_+ 的递推关系（取上面的符号）说明，在 (m_1, m_2) 处的系数与在 $(m_1 - 1, m_2)$ 及 $(m_1, m_2 - 1)$ 处的系数有关，如图 3.8a 所示．同样地，J_- 的递推关系（取下面的符号）也把三个系数联系起来，它们的 m_1, m_2 值在图 3.8b 中给出．

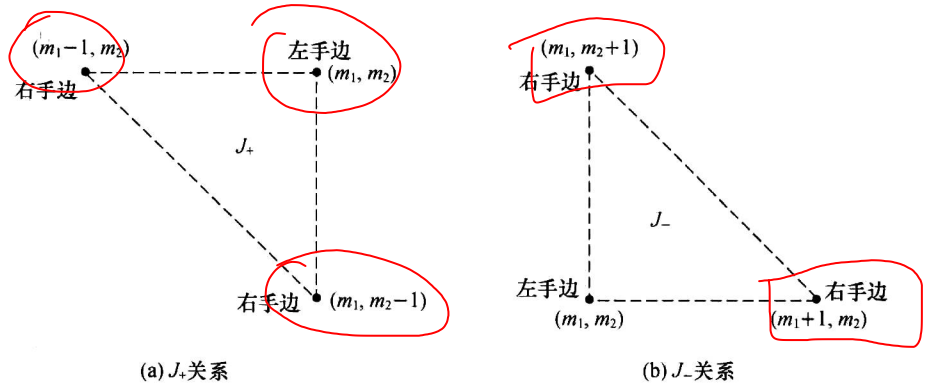
递推关系（3.8.49）和归一化条件（3.8.43）一起几乎唯一地确定了所有的克莱布什-戈丹系数*．（“几乎唯一”是因为某些符号约定还必须规定．）策略如下，返回到 $m_1 m_2$ 平面，仍然对固定的 j_1，j_2 和 j，画出允许区的边界，它由

$$|m_1| \leqslant j_1, \quad |m_2| \leqslant j_2, \quad -j \leqslant m_1 + m_2 \leqslant j \tag{3.8.51}$$

确定，（见图 3.9a）．从右上角出发，用 A 表示它．因为在 A 附近开始工作，一个更详细地“地图”已就绪；见图 3.9b．由 $(m_1, m_2 + 1)$ 对应的 A 开始，使用 J_- 递推关系

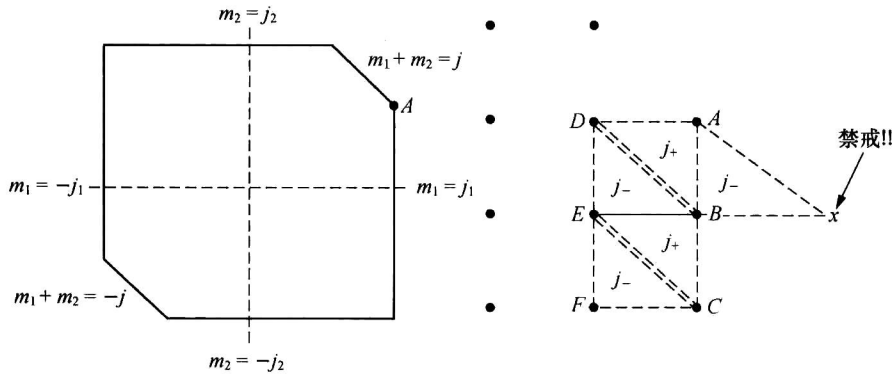
---

* 克莱布什-戈丹和拉卡（Racah）系数、重耦合以及类似的系数的详细讨论已经给出，例如，Edmonds(1960) 的书．



(a) J_+关系　　(b) J_-关系

图 3.8　显示通过递推关系（3.8.49）式关联的克莱布什-戈丹系数的 $m_1 m_2$ 平面



(a)　　(b)

图 3.9　用递推关系求克莱布什-戈丹系数

(3.8.49) 式（靠下的符号）. 现在观察到这个递推关系只把 A 与 B 联系起来，因为对应于 (m_1+1, m_2) 的点是被 $m_1 \leqslant j_1$ 禁戒的. 作为结果，可以借助 A 的克莱布什-戈丹系数求得 B 的克莱布什-戈丹系数. 下一步，构建一个由 A，B 和 D 组成的 J_+ 三角形. 这使得一经确定了 A 的系数，就能够得到 D 的系数. 可以用这种方式继续做下去：知道了 B 和 D，可以得到 E；知道了 B 和 E，可以得到 C，等等. 只要有足够的耐心，就可借助出发点 A 的系数，得到每一点的克莱布什-戈丹系数. 对于整体的归一化，使用（3.8.43）式. 最后的整体符号按照惯例固定下来（见下面的例子）.

作为一个重要的实例，考虑一个自旋 $\frac{1}{2}$ 单粒子的轨道和自旋角动量相加的问题. 有

$$j_1 = l(\text{整数}), \quad m_1 = m_l,$$
$$j_2 = s = \frac{1}{2}, \quad m_2 = m_s = \pm\frac{1}{2}. \tag{3.8.52}$$

j 的允许值由

$$j = l \pm \frac{1}{2}, \quad l > 0; \quad j = \frac{1}{2}, l = 0, \tag{3.8.53}$$

给定，所以，对于每个 l，有两个可能的 j 值. 例如，对于 $l=1$（p 态），得到用光谱学符

号表示的 $p_{3/2}$ 和 $p_{1/2}$，其中的下脚标指的是 j. 这个问题的 m_1m_2 平面，或许用 m_lm_s 平面更好一些，特别简单. 可允许的点只形成两行：上面一行对应于 $m_s=\frac{1}{2}$，而下面一行对应于 $m_s=-\frac{1}{2}$；见图 3.10. 具体地说，计算 $j=l+\frac{1}{2}$ 的情形. 因为 m_s 不可能超过 $\frac{1}{2}$，能够这样使用 J_- 递推关系，确保总是留在上面的一行（$m_2=m_s=\frac{1}{2}$），同时每当 m_l 改变一个单位时，考虑一个新的 J_- 三角形. 在书写克莱布什-戈丹系数时忽略掉 $j_1=l$，$j_2=\frac{1}{2}$，从（3.7.49）式（靠下的符号）得到

$$\begin{aligned}&\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}+m+1\right)\left(l+\frac{1}{2}-m\right)}\left\langle m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},m\right\rangle\\&=\sqrt{\left(l+m+\frac{1}{2}\right)\left(l-m-\frac{1}{2}\right)}\left\langle m+\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},m+1\right\rangle,\end{aligned}\tag{3.8.54}$$

其中用到了

$$m_1=m_l=m-\frac{1}{2},\quad m_2=m_s=\frac{1}{2}.\tag{3.8.55}$$

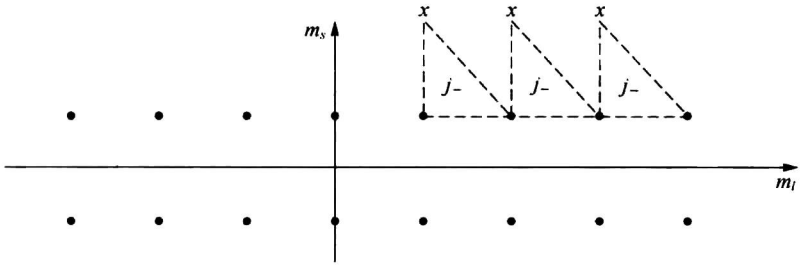


图 3.10　求解 $j_1=l$ 和 $j_2=s=\frac{1}{2}$ 的克莱布什-戈丹系数用到的递推关系

用这种方式，可以水平移动一个单位：

$$\left\langle m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},m\right\rangle=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}}\left\langle m+\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},m+1\right\rangle.\tag{3.8.56}$$

反过来，可用 $\left\langle m+\frac{3}{2},\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},m+2\right\rangle$ 表示出 $\left\langle m+\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},m+1\right\rangle$ 等. 显然，这个程序可以继续下去，直到 m_l 达到最大的可能的值 l：

$$\begin{aligned}\left\langle m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},m\right\rangle&=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{l+m+\frac{5}{2}}}\left\langle m+\frac{3}{2},\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},m+2\right\rangle\\&=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{l+m+\frac{5}{2}}}\sqrt{\frac{l+m+\frac{5}{2}}{l+m+\frac{7}{2}}}\end{aligned}$$

$$\times\left\langle m+\frac{5}{2},\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},m+3\right\rangle$$

$$\vdots$$

$$=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\left\langle l,\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{3.8.57}$$

考虑 m_l 和 m_s 都取最大值的角动量组态——即分别为 l 和 $\frac{1}{2}$. 总的 $m=m_l+m_s$ 是 $l+\frac{1}{2}$，它仅当 $j=l+\frac{1}{2}$ 而不是 $j=l-\frac{1}{2}$ 时才是可能的. 所以 $|m_l=l,m_s=\frac{1}{2}\rangle$ 一定在最多差一个相因子的情况下等于 $|j=l+\frac{1}{2},m=l+\frac{1}{2}\rangle$. 按照惯例，取这个相因子为正实数. 使用这种选择，有

$$\left\langle l,\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}\right\rangle=1. \tag{3.8.58}$$

返回到（3.8.57）式，最终得到

$$\left\langle m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|l+\frac{1}{2},m\right\rangle=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}. \tag{3.8.59}$$

但是这还只是这个故事的四分之一，仍须确定下式中问号的值：

$$\left|j=l+\frac{1}{2},m\right\rangle=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\left|m_l=m-\frac{1}{2},m_s=\frac{1}{2}\right\rangle$$
$$+?\left|m_l=m+\frac{1}{2},m_s=-\frac{1}{2}\right\rangle,$$
$$\left|j=l-\frac{1}{2},m\right\rangle=?\left|m_l=m-\frac{1}{2},m_s=\frac{1}{2}\right\rangle+?\left|m_l=m+\frac{1}{2},m_s=-\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{3.8.60}$$

注意到，由于正交性，预期具有固定 m 值的、从 (m_l,m_s) 基到 (j,m) 基的变换矩阵有下列形式：

$$\begin{pmatrix}\cos\alpha & \sin\alpha\\ -\sin\alpha & \cos\alpha\end{pmatrix}. \tag{3.8.61}$$

与（3.8.60）式对照表明，$\cos\alpha$ 就是（3.8.59）式本身，所以可以很容易地确定 $\sin\alpha$，至多有一个符号有歧义：

$$\sin^2\alpha=1-\frac{\left(l+m+\frac{1}{2}\right)}{(2l+1)}=\frac{\left(l-m+\frac{1}{2}\right)}{(2l+1)}. \tag{3.8.62}$$

要求 $\left\langle m_l=m+\frac{1}{2},\ m_s=-\frac{1}{2}\middle|j=l+\frac{1}{2},\ m\right\rangle$ 必须是正的，因为所有的 $j=l+\frac{1}{2}$ 的态都可以通过 J_- 算符逐次作用于 $\left|j=l+\frac{1}{2},m=l+\frac{1}{2}\right\rangle$ 得到，而按照惯例，J_- 的矩阵元总是

正的. 所以这个 2×2 变换矩阵 (3.8.61) 只能为

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} & \sqrt{\dfrac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \\ -\sqrt{\dfrac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} & \sqrt{\dfrac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \end{pmatrix}. \tag{3.8.63}$$

把二分量形式的**自旋角函数**定义如下：

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_l^{j=l\pm 1/2,m} &= \pm\sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2l+1}}Y_l^{m-1/2}(\theta,\phi)\chi_+ \\ &\quad +\sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2l+1}}Y_l^{m+1/2}(\theta,\phi)\chi_- \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix} \pm\sqrt{l\pm m+\frac{1}{2}}Y_l^{m-1/2}(\theta,\phi) \\ \sqrt{l\mp m+\frac{1}{2}}Y_l^{m+1/2}(\theta,\phi) \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.8.64}$$

通过它们的结构可看到，它们是 $\mathbf{L}^2$，$\mathbf{S}^2$，$\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的共同本征函数. 它们还是 $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ 的本征函数，但是 $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ 只不过是

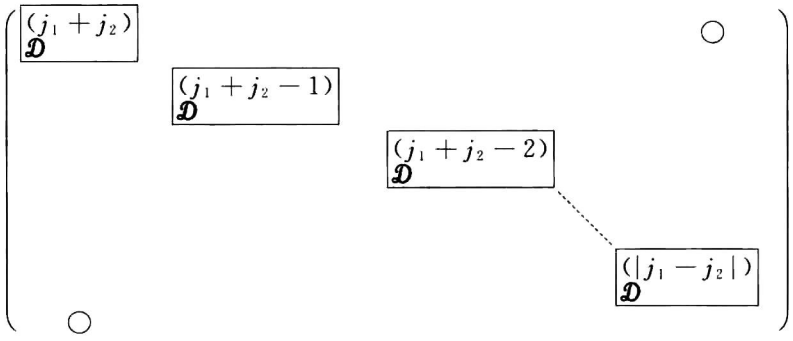
$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}=\left(\frac{1}{2}\right)(\mathbf{J}^2-\mathbf{L}^2-\mathbf{S}^2), \tag{3.8.65}$$

因此是不独立的. 的确，它的本征值可以很容易地计算

$$\left(\frac{\hbar^2}{2}\right)\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]=\begin{cases} \dfrac{l\hbar^2}{2} & \text{对于 } j=l+\dfrac{1}{2}, \\ -\dfrac{(l+1)\hbar^2}{2} & \text{对于 } j=l-\dfrac{1}{2}. \end{cases} \tag{3.8.66}$$

克莱布什-戈丹系数和转动矩阵

可以从转动矩阵观点出发讨论角动量加法. 在本征值为 j_1 的角动量本征右矢所张的右矢空间中考虑转动算符 $\mathcal{D}^{(j_1)}(R)$. 同样，考虑 $\mathcal{D}^{(j_2)}(R)$. 在适当选择了基右矢之后的意义上，乘积 $\mathcal{D}^{(j_1)}\otimes\mathcal{D}^{(j_2)}$ 是可约的，它的矩阵表示可以取如下形式



(3.8.67)

用群论符号，可以将其写成

$$\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(j_1)}\otimes\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(j_2)}=\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(j_1+j_2)}\oplus\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(j_1+j_2-1)}\oplus\cdots\oplus\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(|j_1-j_2|)}. \tag{3.8.68}$$

（原书该式有重要错误，等式右边也写成了张量积的形式．现已订正．——译者注）借助于转动矩阵的矩阵元，有一个称之为**克莱布什-戈丹级数**的重要展开：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(j_1)}_{m_1m'_1}(R)\,\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(j_2)}_{m_2m'_2}(R)=&\sum_j\sum_m\sum_{m'}\langle j_1j_2;m_1m_2|j_1j_2;jm\rangle\\&\times\langle j_1j_2;m'_1m'_2|j_1j_2;jm'\rangle\,\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(j)}_{mm'}(R)\end{aligned} \tag{3.8.69}$$

其中对 j 的求和从 $|j_1-j_2|$ 到 j_1+j_2．这个方程的证明如下．首先，注意（3.8.69）式的左边与

$$\begin{aligned}\langle j_1j_2;m_1m_2|\boldsymbol{\mathcal{D}}(R)|j_1j_2;m'_1m'_2\rangle&=\langle j_1m_1|\boldsymbol{\mathcal{D}}(R)|j_1m'_1\rangle\langle j_2m_2|\boldsymbol{\mathcal{D}}(R)|j_2m'_2\rangle\\&=\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(j_1)}_{m_1m'_1}(R)\,\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(j_2)}_{m_2m'_2}(R).\end{aligned} \tag{3.8.70}$$

是一样的．但是，同样的矩阵元也可以通过插入在 (j,m) 基中的态的完备集来计算．于是

$$\begin{aligned}&\langle j_1j_2;m_1m_2|\boldsymbol{\mathcal{D}}(R)|j_1j_2;m'_1m'_2\rangle\\&\quad=\sum_j\sum_m\sum_{j'}\sum_{m'}\langle j_1j_2;m_1m_2|j_1j_2;jm\rangle\langle j_1j_2;jm|\boldsymbol{\mathcal{D}}(R)|j_1j_2;j'm'\rangle\\&\quad\times\langle j_1j_2;j'm'|j_1j_2;m'_1m'_2\rangle\\&\quad=\sum_j\sum_m\sum_{j'}\sum_{m'}\langle j_1j_2;m_1m_2|j_1j_2;jm\rangle\,\boldsymbol{\mathcal{D}}^{(j)}_{mm'}(R)\delta_{jj'}\\&\quad\times\langle j_1j_2;m'_1m'_2|j_1j_2;j'm'\rangle,\end{aligned} \tag{3.8.71}$$

它正是（3.8.69）式的右边．

作为（3.8.69）式的一个有趣的应用，推导一个包含三个球谐函数的重要积分公式．首先，回忆一下由（3.6.52）式给出的 $D^{(l)}_{m0}$ 和 Y^m_l 间的联系．令（3.8.69）式中的 $j_1\to l_1$，$j_2\to l_2$，$m'_1\to0$，$m'_2\to0$（因此，$m'\to0$），在求复共轭之后，得到，

$$\begin{aligned}Y^{m_1}_{l_1}(\theta,\phi)Y^{m_2}_{l_2}(\theta,\phi)=&\frac{\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)}}{4\pi}\sum_{l'}\sum_{m'}\langle l_1l_2;m_1m_2|l_1l_2;l'm'\rangle\\&\times\langle l_1l_2;00|l_1l_2;l'0\rangle\sqrt{\frac{4\pi}{2l'+1}}Y^{m'}_{l'}(\theta,\phi).\end{aligned} \tag{3.8.72}$$

式子的两边乘以 $Y^{m*}_l(\theta,\phi)$，然后对立体角求积分．由于球谐函数的正交性，求和消失了，留下的是

$$\begin{aligned}&\int d\Omega Y^{m*}_l(\theta,\phi)Y^{m_1}_{l_1}(\theta,\phi)Y^{m_2}_{l_2}(\theta,\phi)\\&=\sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}}\langle l_1l_2;00|l_1l_2;l0\rangle\langle l_1l_2;m_1m_2|l_1l_2;lm\rangle.\end{aligned} \tag{3.8.73}$$

平方根因子乘以第一个克莱布什-戈丹系数不依赖于取向——即 m_1 和 m_2．第二个克莱布什-戈丹系数是一个适用于 l_1 和 l_2 相加得到总 l 的系数．结果表明，方程（3.8.73）是3.11节推导出的维格纳-埃卡特（Wigner-Eckart）定理的一种特殊情况．这个公式在计算原子及原子核光谱学中的多极矩阵元时极为有用．

3.9　角动量的施温格振子模型

角动量和无耦合振子

在角动量代数和两个独立（即，无耦合的）振子的代数之间存在着一个种非常有趣的联系，它是在施温格的一篇短文中提出来的，请见 Biedenharn 和 Van Dam(1965)，229 页. 考虑两个简谐振子，把它们分别叫作**加号型**和**减号型**. 加号型振子的湮灭和产生算符分别用 a_+ 和 $a_+^\dagger$ 表示；同样地，减号型振子的湮灭和产生算符分别用 a_- 和 $a_-^\dagger$ 表示. 粒子数算符 N_+ 和 N_- 定义如下：

$$N_+ \equiv a_+^\dagger a_+, \quad N_- \equiv a_-^\dagger a_-. \tag{3.9.1}$$

假定对于同一种类型的振子，在 a，$a^\dagger$ 和 N 之间通常的对易关系成立（见 2.3 节）.

$$[a_+, a_+^\dagger] = 1, \quad [a_-, a_-^\dagger] = 1, \tag{3.9.2a}$$

$$[N_+, a_+] = -a_+, \quad [N_-, a_-] = -a_-, \tag{3.9.2b}$$

$$[N_+, a_+^\dagger] = a_+^\dagger, \quad [N_-, a_-^\dagger] = a_-^\dagger. \tag{3.9.2c}$$

然而，还假定任何一对不同振子的算符对易：

$$[a_+, a_-^\dagger] = [a_-, a_+^\dagger] = 0 \tag{3.9.3}$$

等等. 因此，正是在这种意义上，这两种振子是无耦合的.

因为借助于（3.9.3）式，N_+ 和 N_- 对易，构建 N_+ 和 N_- 的共同本征态，其本征值分别为 n_+ 和 n_-. 所以，有下列 $N_\pm$ 的本征方程：

$$N_+ |n_+, n_-\rangle = n_+ |n_+, n_-\rangle, \quad N_- |n_+, n_-\rangle = n_- |n_+, n_-\rangle. \tag{3.9.4}$$

完全类似于（2.3.16）式和（2.3.17）式，产生算符 $a_\pm^\dagger$ 和湮灭算符 $a_\pm$ 作用在 $|n_+, n_-\rangle$ 上，有：

$$a_+^\dagger |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_+ + 1}\, |n_+ + 1, n_-\rangle, \quad a_-^\dagger |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_- + 1}\, |n_+, n_- + 1\rangle, \tag{3.9.5a}$$

$$a_+ |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_+}\, |n_+ - 1, n_-\rangle, \quad a_- |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_-}\, |n_+, n_- - 1\rangle. \tag{3.9.5b}$$

通过把 $a_+^\dagger$ 和 $a_-^\dagger$ 连续作用于用

$$a_+ |0,0\rangle = 0, \quad a_- |0,0\rangle = 0. \tag{3.9.6}$$

定义的**真空右矢**上，可得到 N_+ 和 N_- 最普遍的本征右矢. 以这样的方法得到

$$|n_+, n_-\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{n_+} (a_-^\dagger)^{n_-}}{\sqrt{n_+!}\, \sqrt{n_-!}} |0,0\rangle \tag{3.9.7}$$

接着，定义

$$J_+ \equiv \hbar a_+^\dagger a_-, \quad J_- \equiv \hbar a_-^\dagger a_+ \tag{3.9.8a}$$

和

$$J_z \equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right)(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-) = \left(\frac{\hbar}{2}\right)(N_+ - N_-). \tag{3.9.8b}$$

可以很容易地证明，这些算符满足通常形式的角动量对易关系

$$[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm, \tag{3.9.9a}$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z. \tag{3.9.9b}$$

例如，证明（3.9.9）式

$$\begin{aligned}\hbar^2[a_+^\dagger a_-, a_-^\dagger a_+] &= \hbar^2 a_+^\dagger a_- a_-^\dagger a_+ - \hbar^2 a_-^\dagger a_+ a_+^\dagger a_- \\ &= \hbar^2 a_+^\dagger (a_-^\dagger a_- + 1) a_+ - \hbar^2 a_-^\dagger (a_+^\dagger a_+ + 1) a_- \\ &= \hbar^2 (a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-) = 2\hbar J_z.\end{aligned} \tag{3.9.10}$$

定义总 N 为

$$N \equiv N_+ + N_- = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-, \tag{3.9.11}$$

还可以证明

$$\begin{aligned}\mathbf{J}^2 &\equiv J_z^2 + \left(\frac{1}{2}\right)(J_+ J_- + J_- J_+) \\ &= \left(\frac{\hbar^2}{2}\right) N \left(\frac{N}{2} + 1\right),\end{aligned} \tag{3.9.12}$$

把它留作一个练习.

如何从物理上解释所有这些结果？把自旋向上（$m=\frac{1}{2}$）与具有一个量子单位的加号型振子以及把自旋向下（$m=-\frac{1}{2}$）与具有一个量子单位的减号型振子联系起来. 如果喜欢的话，可以把每一个量子单位的加（减）号型振子想象为一个自旋向上（下）的自旋$\frac{1}{2}$的“粒子”. 本征值 n_+ 和 n_- 正好分别是自旋向上和自旋向下的数目. J_+ 的意思是，它消灭一个单位的自旋角动量 z 分量为 $-\hbar/2$ 的向下自旋，并且产生一个单位的自旋角动量 z 分量为 $+\hbar/2$ 的向上自旋；因此角动量的 z 分量增加了 $\hbar$. 同样，J_- 消灭一个单位的向上自旋，并且产生一个单位的向下自旋，因此角动量的 z 分量减少了 $\hbar$. 至于说 J_z 算符，它只不过是计算了 $\hbar/2$ 乘以 n_+ 和 n_- 之差，它正好就是总角动量的 z 分量. 使用（3.9.5）式，就可以很容易地考察 $J_\pm$ 和 J_z 怎样作用在 $|n_+, n_-\rangle$ 上

$$J_+ |n_+, n_-\rangle = \hbar a_+^\dagger a_- |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_-(n_+ + 1)}\,\hbar |n_+ + 1, n_- - 1\rangle, \tag{3.9.13a}$$

$$J_- |n_+, n_-\rangle = \hbar a_-^\dagger a_+ |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_+(n_- + 1)}\,\hbar |n_+ - 1, n_- + 1\rangle. \tag{3.9.13b}$$

$$J_z |n_+, n_-\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right)(N_+ - N_-) |n_+, n_-\rangle = \left(\frac{1}{2}\right)(n_+ - n_-)\hbar |n_+, n_-\rangle. \tag{3.9.13c}$$

注意在所有这些运算中，对应于自旋$\frac{1}{2}$粒子总数的 n_+ 和 n_- 之和保持不变.

现在注意到，只要做如下代换

$$n_+ \to j + m, \quad n_- \to j - m. \tag{3.9.14}$$

（3.9.13a）、（3.9.13b）和（3.9.13c）就能约化成在 3.5 节导出的、熟悉的 $J_\pm$ 和 J_z 算符. 此时（3.9.13a）和（3.9.13b）中的平方根因子变成

$$\begin{aligned}\sqrt{n_-(n_+ + 1)} &\to \sqrt{(j - m)(j + m + 1)}, \\ \sqrt{n_+(n_- + 1)} &\to \sqrt{(j + m)(j - m + 1)},\end{aligned} \tag{3.9.15}$$

它们正是（3.5.39）和（3.5.41）式中的平方根因子.

还要注意，（3.9.12）式定义的 $\mathbf{J}^2$ 算符的本征值变成

$$\left(\frac{\hbar^2}{2}\right)(n_+ + n_-)\left[\frac{(n_+ + n_-)}{2} + 1\right] \to \hbar^2 j(j + 1). \tag{3.9.16}$$

所有这些可能不是太奇怪的，因为已经证明了，用振子算符所构建的 $J_\pm$ 和 $\mathbf{J}^2$ 算符满足通常的角动量对易关系. 但是以一种明确的方式看一下振子矩阵元与角动量矩阵元之间

的联系是有益的. 不管怎么说，使用

$$j \equiv \frac{(n_+ + n_-)}{2}, \quad m \equiv \frac{(n_+ - n_-)}{2} \tag{3.9.17}$$

代替 n_+ 和 n_- 来表征 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的共同本征右矢是很自然的. 按照（3.9.13a）式，J_+ 的作用把 n_+ 变成 $n_+ + 1$，而把 n_- 变成 $n_- - 1$，它意味着 j 不变，而 m 变成 $m+1$. 同样地，J_- 算符把 n_+ 变成 $n_+ - 1$，而把 n_- 变成 $n_- - 1$，使 m 减少一个单位而 j 不改变. 现在可以像（3.9.7）式一样把最普遍的 N_+ 和 N_- 的本征右矢写成：

$$|j,m\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{j+m}(a_-^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle, \tag{3.9.18}$$

其中用 $|0\rangle$ 表示真空右矢，而早些时候用 $|0,0\rangle$ 表示.

（3.9.18）式的一个特殊情况是令人感兴趣的. 令 $m=j$，物理上它意味着对于一个给定的 j，J_z 的本征值尽可能地大. 有

$$|j,j\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle. \tag{3.9.19}$$

可以把这个态想象为 $2j$ 个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子构成的，这些粒子的自旋都指向正 z 方向.

一般来说，注意到，一个高 j 值的复杂客体可以视为由一些简单的自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子构成，其中 $j+m$ 个粒子的自旋向上，而剩下的 $j-m$ 个粒子的自旋向下. 显然，尽管不能总是把一个角动量为 j 的对象从字面上看作是一个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的组合系统，这个图像还是非常方便的. 所说的一切归结为：*就转动下的变换性质而言*，可以把角动量为 j 的任何客体视为一个由 $2j$ 个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子以（3.9.18）式所示的方式构成的复合系统.

按照前一节展开的角动量加法的观点，可以把 $2j$ 个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的自旋相加，得到角动量 $j, j-1, j-2, \cdots$ 的态. 作为一个简单的例子，可以把两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的自旋角动量相加得到一个总角动量为 1，和一个总角动量为零的态. 然而，在施温格的振子方案中，从 $2j$ 个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子出发，仅能得到角动量为 j 的态. 用第 7 章阐述的置换对称性的语言来讲，用这种方法只能构成完全对称的态. 这里出现的原始的自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子实际上是些*玻色子*！如果目的是考察由 j 和 m 表征的态在转动下的性质，不过问这样的态一开始是如何构成的话，这种方法已经足够.

熟悉原子核与粒子物理中同位旋的读者可能注意到，这里所做的提供了一种对同位旋形式体系的新见解. 消灭一个单位的减号型振子，接着产生一个单位的加号型振子的算符 J_+ 完全类似于同位旋阶梯算符 T_+（有时用 I_+ 表示），它湮灭一个中子（同位旋向下），接着产生一个质子（同位旋向上），于是使同位旋的 z 分量升高一个单位. 相反，J_z 类似于 T_z，它只不过计算了原子核中质子数与中子数的差.

转动矩阵的显式表达式

施温格的方案可以以一种非常简单的方式推导最早由维格纳利用类似（但并不全同）

方法求得的转动矩阵的解析形式的公式. 把转动算符$\mathcal{D}(R)$作用到写成（3.9.18）式形式的$|j,m\rangle$上. 用欧拉角符号，唯一非平凡转动是绕y轴的第二次转动，所以把注意力指向

$$\mathcal{D}(R)=\mathcal{D}(\alpha,\beta,\gamma)|_{\alpha=\gamma=0}=\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right). \tag{3.9.20}$$

有

$$\mathcal{D}(R)|j,m\rangle=\frac{[\mathcal{D}(R)a_+^\dagger\mathcal{D}^{-1}(R)]^{j+m}[\mathcal{D}(R)a_-^\dagger\mathcal{D}^{-1}(R)]^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\mathcal{D}(R)|0\rangle. \tag{3.9.21}$$

现在，$\mathcal{D}(R)$作用于$|0\rangle$上，只不过重新产生出$|0\rangle$，因为由（3.9.6）式，在指数（3.9.20）的展开中，只有领头项1有贡献. 所以

$$\mathcal{D}(R)a_\pm^\dagger\mathcal{D}^{-1}(R)=\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)a_\pm^\dagger\exp\left(\frac{iJ_y\beta}{\hbar}\right). \tag{3.9.22}$$

于是，可以使用（2.3.47）式. 在该式中令

$$G\to\frac{-J_y}{\hbar},\quad \lambda\to\beta \tag{3.9.23}$$

意识到必须详细了解各种对易关系，即

$$\begin{aligned}\left[\frac{-J_y}{\hbar},a_+^\dagger\right]&=\left(\frac{1}{2i}\right)[a_-^\dagger a_+,a_+^\dagger]=\left(\frac{1}{2i}\right)a_-^\dagger\\ \left[\frac{-J_y}{\hbar},\left[\frac{-J_y}{\hbar},a_+^\dagger\right]\right]&=\left[\frac{-J_y}{\hbar},\frac{a_-^\dagger}{2i}\right]=\left(\frac{1}{4}\right)a_+^\dagger\end{aligned} \tag{3.9.24}$$

以及等等. 显然，得到的永远是$a_+^\dagger$或者是$a_-^\dagger$. 把各项分别收集起来，得到

$$\mathcal{D}(R)a_+^\dagger\mathcal{D}^{-1}(R)=a_+^\dagger\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)+a_-^\dagger\sin\left(\frac{\beta}{2}\right). \tag{3.9.25}$$

同样地，

$$\mathcal{D}(R)a_-^\dagger\mathcal{D}^{-1}(R)=a_-^\dagger\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)-a_+^\dagger\sin\left(\frac{\beta}{2}\right). \tag{3.9.26}$$

实际上这个结果并不奇怪. 毕竟，基本的自旋向上的态在绕y轴的转动下变换成

$$a_+^\dagger|0\rangle\to\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)a_+^\dagger|0\rangle+\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)a_-^\dagger|0\rangle \tag{3.9.27}$$

把（3.9.25）式和（3.9.26）式代入（3.9.21）式，并回忆二项式定理

$$(x+y)^N=\sum_k\frac{N!x^{N-k}y^k}{(N-k)!k!}, \tag{3.9.28}$$

得到

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(\alpha=0,\beta,\gamma=0)|j,m\rangle=&\sum_k\sum_l\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+m-k)!k!(j-m-l)!l!}\\ &\times\frac{[a_+^\dagger\cos(\beta/2)]^{j+m-k}[a_-^\dagger\sin(\beta/2)]^k}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\\ &\times[-a_+^\dagger\sin(\beta/2)]^{j-m-l}[a_-^\dagger\cos(\beta/2)]^l|0\rangle.\end{aligned} \tag{3.9.29}$$

可以把（3.9.29）式与

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(\alpha=0,\beta,\gamma=0)|j,m\rangle&=\sum_{m'}|j,m'\rangle d^{(j)}_{m'm}(\beta)\\ &=\sum_{m'}d^{(j)}_{m'm}(\beta)\frac{(a_+^\dagger)^{j+m'}(a_-^\dagger)^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}}|0\rangle.\end{aligned} \tag{3.9.30}$$

相比较. 让（3.9.29）式和（3.9.30）式中 $a_+^\dagger$ 各次幂的系数相等，就可得到 $d_{m'm}^{(j)}(\beta)$ 的显式形式. 特别是，在（3.9.30）式中把 $a_+^\dagger$ 升高到 $j+m'$ 次幂与（3.9.29）式中 $a_+^\dagger$ 升高到 $2j-k-l$ 次幂相比较，这样就能确定

$$l = j-k-m'. \tag{3.9.31}$$

寻求固定 m' 的 $d_{m'm}(\beta)$. （3.9.29）式中对 k 求和与对 l 求和彼此不相独立，利用（3.9.31）式消去 l 而剩下 k. 至于 $a_-^\dagger$ 的幂次，注意到，在（3.9.30）式中 $a_-^\dagger$ 升高到 $j-m'$ 次幂与强加了（3.9.31）式而在（3.9.29）式中 $a_-^\dagger$ 升高到 $k+l$ 次幂自动相匹配. 最后一步是让 $\cos(\beta/2)$，$\sin(\beta/2)$ 与 -1 的指数相等，分别是

$$j+m-k+l = 2j-2k+m-m', \tag{3.9.32a}$$

$$k+j-m-l = 2k-m+m', \tag{3.9.32b}$$

$$j-m-l = k-m+m', \tag{3.9.32c}$$

其中用（3.9.31）式消掉了 l. 用这样的方法求得 $d_{m'm}^{(j)}(\beta)$ 的**维格纳公式**：

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \sum_k (-1)^{k-m+m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!k!(j-k-m')!(k-m+m')!} \times \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'}, \tag{3.9.33}$$

其中，只要分母中的各阶乘的宗量没有一个为负，就要对 k 求和.

3.10　自旋关联测量和贝尔不等式

自旋单态中的关联

在 3.8 节遇到的角动量相加的最简单的例子涉及由自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子构成的一个组合系统. 在这一节以这种系统为例说明量子力学中最使人吃惊的一个结果.

考虑处在一个自旋单态的双电子系统——这就是说，它具有零总自旋. 已经看到过，其态右矢可以写成［见（3.8.15d)］:

$$|\text{自旋单态}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|\hat{\mathbf{z}}+;\hat{\mathbf{z}}-\rangle - |\hat{\mathbf{z}}-;\hat{\mathbf{z}}+\rangle), \tag{3.10.1}$$

这里已经明显地标明了量子化的取向. 回忆一下 $|\hat{\mathbf{z}}+;\hat{\mathbf{z}}-\rangle$ 意味着电子 1 是在自旋向上的态而电子 2 是在自旋向下的态. 对于 $|\hat{\mathbf{z}}-;\hat{\mathbf{z}}+\rangle$ 类似的说法也是对的.

假定测量其中一个电子的自旋分量. 很清楚，有 50% 的机会得到自旋向上或者自旋向下，因为该组合系统可以以相等的概率处于 $|\hat{\mathbf{z}}+;\hat{\mathbf{z}}-\rangle$ 或 $|\hat{\mathbf{z}}-;\hat{\mathbf{z}}+\rangle$. 但是，如果成员之一被证明是处在自旋向上的态上，则另一个必然是处在自旋向下的态上，反之亦然. 当电子 1 的自旋分量被证明是向上的，则测量仪器就挑选了（3.10.1）式的第一项 $|\hat{\mathbf{z}}+;\hat{\mathbf{z}}-\rangle$；接着电子 2 自旋分量的测量一定确认该组合系统的态右矢由 $|\hat{\mathbf{z}}+;\hat{\mathbf{z}}-\rangle$ 给出.

值得注意的是，如果这两个粒子飞开，即使它们分开得很远，而且不再发生相互作用，这一类关联却仍能继续存在，只要当它们飞开时，它们的自旋态不发生任何变化. 对于一个 $J=0$ 的系统自发解体为两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的、没有相对轨道角动量的粒子肯定属于这种情况，因为在解体过程中角动量一定守恒. 这种情况的一个例子是 η 介子（质量为

549MeV/c^2）到一对 μ 子的稀有衰变

$$\eta \to \mu^+ + \mu^-, \tag{3.10.2}$$

不幸的是，它的衰变分支比仅约为 6×10^{-6}. 更现实一点，在低动能质子-质子散射中，将在第7章讨论的泡利原理迫使相互作用的质子处于 $^1S_0$ 态（轨道角动量为0，自旋单态），散射后的质子自旋态一定会按照（3.10.1）式指出的方式相关联，即使它们被分隔开一段宏观距离之后.

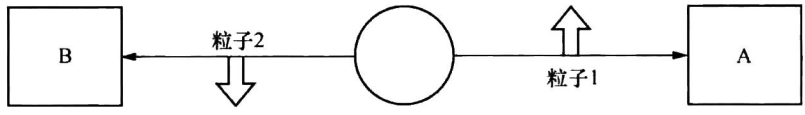


图 3.11 自旋单态中的自旋关联

更形象化一些，考虑沿相反方向运动的两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子，如图3.11所示. 观察者A专门测量（向右飞的）粒子1的 S_z，而观察者B专门测量（向左飞的）粒子2的 S_z. 具体说来，假定观察者A发现粒子1的 S_z 为正. 接着他或她甚至在B做任何测量之前就可以肯定地预言出B的测量结果：B一定会发现粒子2的 S_z 是负的. 另一方面，如果A不做任何测量，则B有50%对50%的机会得到 S_z+ 或 S_z-.

这本身或许还不是这么奇特. 人们可以说，“它只不过像个小罐，已知里面装有一个黑球和一个白球，当随便从罐里抓出一个球时，有50%的机会得到黑球或者白球. 但是如果拿出来的第一个球是黑球时，那时就可以肯定地预言，第二个球将是白的.”

事实证明，这种类比过于简单了. 实际的量子力学情况比这个情况复杂得多！这是因为观察者可能选择测 S_x 代替 S_z. 这同样的一对“量子力学球”或者可以用黑与白，或者可以用蓝与红来分析.

现在回忆一下，对于一个单个的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统，S_x 的本征右矢与 S_z 的本征右矢之间有如下关系：

$$|\hat{\mathbf{x}}\pm\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|\hat{\mathbf{z}}+\rangle \pm |\hat{\mathbf{z}}-\rangle), \quad |\hat{\mathbf{z}}\pm\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|\hat{\mathbf{x}}+\rangle \pm |\hat{\mathbf{x}}-\rangle). \tag{3.10.3}$$

现在回到组合系统，可以通过选择 x 方向作为量子化的轴，把自旋单态右矢（3.10.1）重写为

$$|\text{自旋单态}\rangle = \left(\frac{1}{2}\right)(|\hat{\mathbf{x}}-;\hat{\mathbf{x}}+\rangle - |\hat{\mathbf{x}}+;\hat{\mathbf{x}}-\rangle). \tag{3.10.4}$$

除去在任何情况只不过是一个约定的整体符号外，或许可以直接从（3.10.1）式猜出这个形式，因为自旋单态不具有任何空间的优势方向. 现在假定，观察者A可以通过改变他或她的自旋分析器的取向来选择测量粒子1的 S_x 还是 S_z，而观察者B则永远专门测量粒子2的 S_x. 如果A确定粒子1的 S_z 为正，显然B有50%对50%的机会得到 S_x+ 或 S_x-；尽管已知粒子2的 S_z 肯定为负，但它的 S_x 是完全不确定的. 另一方面，假定A也选择测量 S_x. 如果观察者A确定粒子1的 S_x 为正，则毫无例外，观察者B将会测到粒子2的 S_x 为负. 最后，如果A选择不做任何测量，当然，B将有50%对50%机会得到 S_x+ 或 S_x-. 综上所述：

1. 如果A测量 S_z 而B测量 S_x，则两个测量之间有完全随机的关联.

2. 如果 A 测量 S_x 而 B 测量 S_x，则两个测量之间有 100%（相反符号的）关联.

3. 如果 A 不做任何测量，则 B 的测量显示随机的结果.

表 3.1　自旋关联测量

A 测量的自旋分量	A 的结果	B 测量的自旋分量	B 的结果
z	+	z	−
z	−	x	+
x	−	z	−
x	−	z	+
z	+	x	−
x	+	x	−
z	+	x	+
x	−	x	+
z	−	z	+
z	−	x	−
x	+	z	+
x	+	z	−

表 3.1 显示了，当 B 和 A 都被允许选择测量 S_x 或者 S_z 时，所有可能的这样的测量结果. 这些考虑表明，B 的测量结果表现出对 A 决定做哪一种测量的依赖性：即 A 测量 S_x、测量 S_z 或者不做任何测量. 再次注意，A 和 B 可能分开几英里远，没有任何通讯或相互作用的可能性. 观察者 A 可以决定，在两个粒子分开足够远时，他或她的分析器如何取向. 而粒子 2 就好像“知道”了粒子 1 的哪一个自旋分量被测量了.

正统量子力学对这种情况做如下解释. 测量是一次选择（或过滤）过程. 当测出粒子 1 的 S_z 为正时，则挑选了 $|\hat{\mathbf{z}}+;\hat{\mathbf{z}}-\rangle$ 分量. 接着对另一个粒子的 S_z 的测量只不过要确认这个系统仍然处在 $|\hat{\mathbf{z}}+;\hat{\mathbf{z}}-\rangle$. 必须承认，对该系统的一部分处于什么状态的测量将被看作对整个系统的测量.

爱因斯坦局域性原理和贝尔不等式

许多物理学家对于前述自旋关联的正统解释感到不舒服. 这种感觉体现在下面频繁引用的爱因斯坦的评述中，称它为**爱因斯坦局域性原理**：“但是，在我看来，我们确实应该紧紧抓住一个假定：系统 S_2 的真实情况和系统 S_1 做了些什么无关，它们是空间分离的.”因为这个问题最早是在 1935 年爱因斯坦，波多尔斯基（B. Podolsky）和罗森（N. Rosen）的一篇文章中讨论的，因此有时称之为爱因斯坦-波多尔斯基-罗森（Einstein-Podolsky-Rosen）佯谬.*

---

* 精确的历史事实是，爱因斯坦-波多尔斯基-罗森的原文处理 x 和 p 的测量. 利用组合的 $\frac{1}{2}$ 系统为例说明爱因斯坦-波多尔斯基-罗森佯谬始于玻姆.

有些人曾争辩过，在这里遇到的困难是量子力学的概率解释所固有的，微观层次的动力学行为出现了概率性的结果仅仅是因为某些还不知道的参量——所谓的隐变量——还没有被确定下来. 这里的目的不是要讨论基于隐变量或其他一些考虑的量子力学的各种替代理论. 相反，试问，这样的理论给出了不同于量子力学的预言吗？直到1964年之前，人们一直认为，可以这样编造替代理论，以致给不出任何不同于通常量子力学的而又能被实验证实的预言. 整个争论应该属于形而上学领域而不属于物理学. 当时，J. S. Bell指出，基于爱因斯坦的局域性原理的替代理论，实际上预言了在自旋关联实验中可观测量间的一个可以检验的不等式关系，它与量子力学的预言不相符.

在一个由维格纳构想出来的简单模型框架下推导出贝尔不等式，该模型纳入了各种替代理论的基本特点. 这个模型的支持者们赞同不可能同时确定 S_x 和 S_z. 然而，当有大量自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子时，赋予它们当中的某部分成员具有下列的一些性质：

如果测量 S_z，确定无疑地得到加号.

如果测量 S_x，确定无疑地得到减号.

满足这一性质的粒子被称为属于 $(\hat{\mathbf{z}}+,\hat{\mathbf{x}}-)$ 类型. 注意，并不能断言，可以同时测量分别为＋和－的 S_z 和 S_x. 当测量 S_z 时，不测量 S_x，反之亦然. 赋予沿不止一个方向的确定的自旋分量值，应理解为只有一个或另一个分量可以实际被测量. 尽管这种方法与量子力学的方法根本不同，只要属于 $(\hat{\mathbf{z}}+,\hat{\mathbf{x}}+)$ 类型的粒子像 $(\hat{\mathbf{z}}+,\hat{\mathbf{x}}-)$ 类型的粒子一样多，则对在自旋向上 (S_z+) 的态上所做的 S_z 和 S_x 测量的量子力学预言可以重现.

现在检验这个模型怎样解释在组合自旋单态系统上测量自旋关联的结果. 显然，对于一对特殊的粒子，粒子1和粒子2之间一定有一个完美的匹配，以保证总角动量为零：如果粒子1是 $(\hat{\mathbf{z}}+,\hat{\mathbf{x}}-)$ 类型的，则粒子2一定是 $(\hat{\mathbf{z}}-,\hat{\mathbf{x}}+)$ 类型的，等等. 如果具有相等的布居——即各为25%——的粒子1和粒子2有如下匹配：

粒子1　　粒子2

$$(\hat{\mathbf{z}}+,\hat{\mathbf{x}}-)\leftrightarrow(\hat{\mathbf{z}}-,\hat{\mathbf{x}}+), \tag{3.10.5a}$$

$$(\hat{\mathbf{z}}+,\hat{\mathbf{x}}+)\leftrightarrow(\hat{\mathbf{z}}-,\hat{\mathbf{x}}-), \tag{3.10.5b}$$

$$(\hat{\mathbf{z}}-,\hat{\mathbf{x}}+)\leftrightarrow(\hat{\mathbf{z}}+,\hat{\mathbf{x}}-), \tag{3.10.5c}$$

$$(\hat{\mathbf{z}}-,\hat{\mathbf{x}}-)\leftrightarrow(\hat{\mathbf{z}}+,\hat{\mathbf{x}}+) \tag{3.10.5d}$$

则诸如表3.1所示的关联测量结果就可以重新产生. 这里隐含着一个非常重要的假设. 假定特殊的一对粒子是属于（3.10.5a）类型的，并且观察者A决定测量粒子1的 S_z；那时，他或她必定得到一个加号，不管B决定测量 S_z 或 S_x. 正是在这种意义上，爱因斯坦的局域性原理被包含在这个模型中：A的结果是预先确定的，它与B选择测量什么无关.

到此为止所考虑的例子中，这个模型在重现量子力学预言方面已经获得了成功. 现在考虑该模型能导致不同于通常量子力学预言的更为复杂的情况. 这一次，从三个单位矢量 $\hat{\mathbf{a}}$，$\hat{\mathbf{b}}$ 和 $\hat{\mathbf{c}}$ 开始，一般说来它们不是相互正交的. 设想其中的一个粒子属于某确定类型，比如 $(\hat{\mathbf{a}}-,\hat{\mathbf{b}}+,\hat{\mathbf{c}}+)$，它意味着：如果测量 $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{a}}$，肯定得到负号；如果量 $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{b}}$，肯定得到正号；如果测量 $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{c}}$，也肯定得到正号. 再一次，在为了保证总角动量为零，另一个粒子必定属于 $(\hat{\mathbf{a}}+,\hat{\mathbf{b}}-,\hat{\mathbf{c}}-)$ 类型的意义上，一定有一个完美的匹配. 在任意给定的事例中，所考虑的粒子对一定是表3.2所示的八种类型之一. 这八种可能性互不相容并且没有交集. 每一类的布居数标明在第一列中.

假定观察者 A 发现 $\mathbf{S}_1\cdot\hat{\mathbf{a}}$ 是正号而观察者 B 发现 $\mathbf{S}_2\cdot\hat{\mathbf{b}}$ 也是正号，从表 3.2 显然可见，这一对粒子属于类型 3 或者类型 4，所以，在这种情况中粒子对的数目是 N_3+N_4. 因为 N_i 是半正定的，必须有不等式

$$N_3+N_4\leqslant(N_2+N_4)+(N_3+N_7). \tag{3.10.6}$$

设 $P(\hat{\mathbf{a}}+;\hat{\mathbf{b}}+)$ 是在一种随机选择下，观察者 A 测量 $\mathbf{S}_1\cdot\hat{\mathbf{a}}$ 是正号，并且观察者 B 测量 $\mathbf{S}_2\cdot\hat{\mathbf{b}}$ 也是正号，等等的概率.

表 3.2　在一些替代理论中匹配的自旋分量

布居数	粒子 1	粒子 2
N_1	$(\hat{\mathbf{a}}+,\hat{\mathbf{b}}+,\hat{\mathbf{c}}+)$	$(\hat{\mathbf{a}}-,\hat{\mathbf{b}}-,\hat{\mathbf{c}}-)$
N_2	$(\hat{\mathbf{a}}+,\hat{\mathbf{b}}+,\hat{\mathbf{c}}-)$	$(\hat{\mathbf{a}}-,\hat{\mathbf{b}}-,\hat{\mathbf{c}}+)$
N_3	$(\hat{\mathbf{a}}+,\hat{\mathbf{b}}-,\hat{\mathbf{c}}+)$	$(\hat{\mathbf{a}}-,\hat{\mathbf{b}}+,\hat{\mathbf{c}}-)$
N_4	$(\hat{\mathbf{a}}+,\hat{\mathbf{b}}-,\hat{\mathbf{c}}-)$	$(\hat{\mathbf{a}}-,\hat{\mathbf{b}}+,\hat{\mathbf{c}}+)$
N_5	$(\hat{\mathbf{a}}-,\hat{\mathbf{b}}+,\hat{\mathbf{c}}+)$	$(\hat{\mathbf{a}}+,\hat{\mathbf{b}}-,\hat{\mathbf{c}}-)$
N_6	$(\hat{\mathbf{a}}-,\hat{\mathbf{b}}+,\hat{\mathbf{c}}-)$	$(\hat{\mathbf{a}}+,\hat{\mathbf{b}}-,\hat{\mathbf{c}}+)$
N_7	$(\hat{\mathbf{a}}-,\hat{\mathbf{b}}-,\hat{\mathbf{c}}+)$	$(\hat{\mathbf{a}}+,\hat{\mathbf{b}}+,\hat{\mathbf{c}}-)$
N_8	$(\hat{\mathbf{a}}-,\hat{\mathbf{b}}-,\hat{\mathbf{c}}-)$	$(\hat{\mathbf{a}}+,\hat{\mathbf{b}}+,\hat{\mathbf{c}}+)$

显然有

$$P(\hat{\mathbf{a}}+;\hat{\mathbf{b}}+)=\frac{(N_3+N_4)}{\sum_i^8 N_i}. \tag{3.10.7}$$

用类似的方式，得到

$$P(\hat{\mathbf{a}}+;\hat{\mathbf{c}}+)=\frac{(N_2+N_4)}{\sum_i^8 N_i}\text{ 和 }\quad P(\hat{\mathbf{c}}+;\hat{\mathbf{b}}+)=\frac{(N_3+N_7)}{\sum_i^8 N_i}. \tag{3.10.8}$$

正定性条件（3.10.6）式现在变成

$$P(\hat{\mathbf{a}}+;\hat{\mathbf{b}}+)\leqslant P(\hat{\mathbf{a}}+;\hat{\mathbf{c}}+)+P(\hat{\mathbf{c}}+;\hat{\mathbf{b}}+). \tag{3.10.9}$$

这就是**贝尔不等式**，它源自爱因斯坦局域性原理.

量子力学和贝尔不等式

现在返回到量子力学世界. 在量子力学中，没有谈到粒子对的某一部分，比如 $N_3/\sum_i^8 N_i$，属于类型 3. 相反，用同样的右矢（3.10.1）式表征所有的自旋单态系统；用 3.4 节的语言讲，在这里所涉及的是一个纯系综. 利用这个右矢和所发展的量子力学规则，可以无疑义地计算在不等式（3.10.9）的三项中的每一项.

先求 $P(\hat{\mathbf{a}}+;\hat{\mathbf{b}}+)$. 假定观察者 A 发现 $\mathbf{S}_1\cdot\hat{\mathbf{a}}$ 是正的，由于早先讨论过的 100%（相反的符号）关联，B 测量 $\mathbf{S}_2\cdot\hat{\mathbf{a}}$ 将肯定地产生负号. 但是，为计算 $P(\hat{\mathbf{a}}+;\hat{\mathbf{b}}+)$，必须考虑一个新的量子化轴 $\hat{\mathbf{b}}$，它与 $\hat{\mathbf{a}}$ 夹角为 θ_{ab}，见图 3.12. 按照 3.2 节的公式形式，当已知粒子 2 处在 $\mathbf{S}_2\cdot\hat{\mathbf{a}}$ 的负本征值的本征右矢上时，测量 $\mathbf{S}_2\cdot\hat{\mathbf{b}}$ 产生＋的概率为

$$\cos^2\left[\frac{(\pi-\theta_{ab})}{2}\right]=\sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right). \tag{3.10.10}$$

结果得到

$$P(\hat{\mathbf{a}}+;\hat{\mathbf{b}}+)=\left(\frac{1}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right), \tag{3.10.11}$$

其中因子$\frac{1}{2}$来自初始得到$\mathbf{S}_1\cdot\hat{\mathbf{a}}$为正的概率. 利用（3.10.11）式和它在（3.10.9）式其他两项上的推广，可以把贝尔不等式写成

$$\sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right)\leqslant\sin^2\left(\frac{\theta_{ac}}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\theta_{cb}}{2}\right). \tag{3.10.12}$$

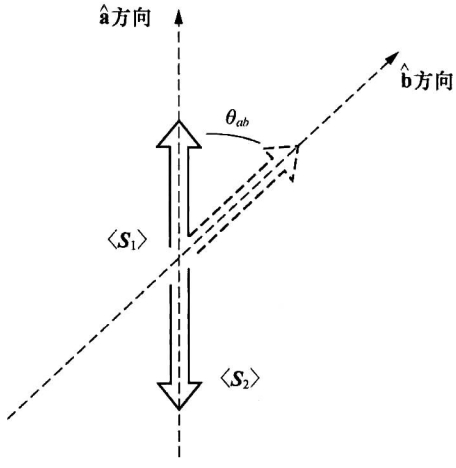


图 3.12 $P(\hat{\mathbf{a}}+;\hat{\mathbf{b}}+)$ 的求值

现在来证明，从几何观点出发，不等式（3.10.12）式不是永远可能的. 为了简单起见，选择$\hat{\mathbf{a}}$，$\hat{\mathbf{b}}$和$\hat{\mathbf{c}}$处在同一平面上，而且设$\hat{\mathbf{c}}$把$\hat{\mathbf{a}}$和$\hat{\mathbf{b}}$确定的两个方向一分为二：

$$\theta_{ab}=2\theta,\quad \theta_{ac}=\theta_{cb}=\theta. \tag{3.10.13}$$

于是，不等式（3.10.12）在

$$0<\theta<\frac{\pi}{2}. \tag{3.10.14}$$

时被破坏. 例如取$\theta=\pi/4$时，就会得到

$$0.500\leqslant 0.292?? \tag{3.10.15}$$

因此，量子力学预言与贝尔不等式不相容. 在量子力学和满足爱因斯坦局域性原理的替代理论之间，存在一个真实、可观测——在可被实验检验的意义上——的差别.

目前已经完成了几个检验贝尔不等式的实验. 最近的评述请见《贝尔不等式检验：比以往任何时候都更理想》，源自 A. Aspect 的 *Nature* 398（1999）189. 在其中的一个实验中，测量了在低能质子-质子散射中，末态质子间的自旋关联. 而其他所有的实验都是在一个激发原子（Ca，Hg，…）的级联跃迁

$$(j=0)\xrightarrow{\gamma}(j=1)\xrightarrow{\gamma}(j=0), \tag{3.10.16}$$

中或者在电子偶素（一个e^+e^-的$^1S_0$束缚态）的衰变中，对一对光子间的光子-极化关联进行测量. 基于1.1节发展出来的类比

$$S_z+\longrightarrow\hat{\epsilon}\quad \text{沿 } x \text{ 方向}, \tag{3.10.17a}$$

$$S_z-\longrightarrow\hat{\epsilon}\quad \text{沿 } y \text{ 方向}, \tag{3.10.17b}$$

$$S_x + \rightarrow \hat{\epsilon} \quad \text{沿 } 45^\circ \text{ 斜线方向，} \tag{3.10.17c}$$

$$S_x - \rightarrow \hat{\epsilon} \quad \text{沿 } 135^\circ \text{ 斜线方向.} \tag{3.10.17d}$$

研究光子-极化关联应当同样地好. 所有最近的精确实验结果都决定性地确证贝尔不等式被破坏了，有一种情况竟超过了九个标准偏差. 此外，在所有这些实验中，这个不等式是以这样的一种方式被破坏的，即量子力学预言在误差范围之内得到满足. 在这场论战中，量子力学取得了辉煌的胜利.

量子力学预言被证实并不意味着现在这整个课题都是无聊的. 虽然有实验的结论，但这类测量的很多方面使人感到心里不舒服. 特别是考虑下面的一点：在观察者 A 对粒子 1 做了一次测量以后，粒子 2——原则上，它可能离开粒子 1 许多光年——怎么会“知道”它的自旋应怎样取向，以使清楚地列在表 3.1 中的那些引人瞩目的关联得以实现呢？在其中一个检验贝尔不等式的实验当中［由阿斯派克特（A. Aspect）和他的合作者完成的］，分析器的设置变化要非常地快，直到任何一类传播速度比光速慢的影响来不及到达 B 之前，A 就已经做出了测量什么的决定.

通过展示下述看法来结束这一节：尽管有这些奇特之处，仍然不可能用自旋关联的测量在两个宏观分离的点之间传送任何有用的信息. 特别是，超光速（比光速还快）的通信是不可能的.

假定 A 和 B 事先都同意测量 S_z，然后，不用问 A，B 就精确地知道 A 得到的是什么. 但是，这并不意味着 A 和 B 正在通信联系，B 只不过观测一个正号与负号的随机系列. 这里面显然没有包含任何有用的信息. 只有当 B 与 A 相聚在一起并且比较了记录（或计算机工作表）才能证实由量子力学预言的令人瞩目的关联.

或许有人会认为，如果 A 和 B 中的一个突然改变了他或她的分析器的取向，他们就能够通信. 假定一开始 A 同意测量 S_z，而 B 测量 S_x. A 的测量结果与 B 的测量结果完全没有关联，因此不存在被传递的信息. 但是之后，假定 A 突然破坏了他或她的许诺，没有告知 B，就开始测量 S_x. 现在，在 A 的结果与 B 的结果之间有了完全的关联. 然而，B 没有任何办法推断 A 已经改变了他或她的分析器的取向. B 通过只看他或她自己的笔记本仅能继续看到“+”和“−”的随机系列. 于是，再次没有被传递的信息.

3.11　张量算符

矢量算符

书中已经使用了诸如 $\mathbf{x}$，$\mathbf{p}$，$\mathbf{S}$ 和 $\mathbf{l}$ 等符号，但到目前为止，还没有系统地讨论过它们的转动性质. 它们都是矢量算符，但在转动之下它们有什么样的性质呢？在本节，基于矢量算符与角动量算符的对易关系，给出它们精确的量子力学定义. 然后推广到具有更复杂变换性质的张量算符，并推导出关于矢量算符和张量算符矩阵元的一个重要定理.

大家都知道，经典物理中的**矢量**是一个具有三个分量的量，在转动之下根据定义像 $V_i \rightarrow \sum_j R_{ij} V_j$ 一样变换. 合理的做法是，要求量子力学中的一个矢量算符 V 的期待值在转动之下像一个经典矢量一样变换. 具体地说，假定在转动之下当态右矢按照

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R)|\alpha\rangle, \tag{3.11.1}$$

变化时，$\mathbf{V}$ 的期待值变化如下：

$$\langle\alpha|V_i|\alpha\rangle \to \langle\alpha|\mathcal{D}^\dagger(R)V_i\,\mathcal{D}(R)|\alpha\rangle = \sum_j R_{ij}\langle\alpha|V_j|\alpha\rangle, \tag{3.11.2}$$

这必须对任意的一个右矢都对. 因此，作为一个**算符方程式**

$$\mathcal{D}^\dagger(R)V_i\,\mathcal{D}(R) = \sum_j R_{ij}V_j \tag{3.11.3}$$

必须成立，其中 R_{ij} 是与转动对应的 3×3 矩阵.

下面考虑一种具体的情况，即一个无穷小转动. 当转动是无穷小时，有

$$\mathcal{D}(R) = 1 - \frac{i\varepsilon\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}}{\hbar}. \tag{3.11.4}$$

可以把（3.11.3）式写成

$$V_i + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_i, \mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}] = \sum_j R_{ij}(\hat{\mathbf{n}};\varepsilon)V_j, \tag{3.11.5}$$

特别是，对于沿 z 轴的 $\hat{\mathbf{n}}$，有

$$R(\hat{\mathbf{z}};\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{3.11.6}$$

所以

$$i=1:\quad V_x + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_x, J_z] = V_x - \varepsilon V_y \tag{3.11.7a}$$

$$i=2:\quad V_y + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_y, J_z] = \varepsilon V_x + V_y \tag{3.11.7b}$$

$$i=3:\quad V_z + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_z, J_z] = V_z. \tag{3.11.7c}$$

这意味着，$\mathbf{V}$ 必须满足对易关系：

$$[V_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk}\hbar V_k. \tag{3.11.8}$$

显然，在一个有限转动下 $\mathbf{V}$ 的行为完全由上述对易关系确定；只要将目前已非常熟悉的公式（2.3.47）应用于

$$\exp\left(\frac{iJ_j\phi}{\hbar}\right)V_i\exp\left(\frac{-iJ_j\phi}{\hbar}\right). \tag{3.11.9}$$

只需计算

$$[J_j,[J_j,[\cdots[J_j,V_i]\cdots]]]. \tag{3.11.10}$$

就像自旋情况下的（3.2.7）式一样，多重对易关系仍然返回 V_i 或者 V_k（$k\neq i,j$）.

用（3.11.8）式作为一个矢量算符的定义属性. 注意，角动量对易关系是（3.11.8）式中令 $V_i\to J_i$，$V_k\to J_k$ 的一种特殊情况. 其他的一些特殊情况是 $[y,L_z]=i\hbar x$，$[x,L_z]=-i\hbar y$，$[p_x,L_z]=-i\hbar p_y$ 和 $[p_y,L_z]=i\hbar p_x$，这些都可以直接证明.

笛卡尔张量与不可约张量

在经典物理中，通常在 3×3 正交矩阵 R 所规定的转动下，通过把 $V_i\to\Sigma_j R_{ij}V_j$ 推广成：

$$T_{ijk\cdots} \to \sum_{i'}\sum_{j'}\sum_{k'}\cdots R_{ii'}R_{jj'}\cdots T_{i'j'k'\cdots} \tag{3.11.11}$$

来定义一个张量 $T_{ijk\cdots}$ 指标的数目称为张量的**秩**. 这样的张量叫**笛卡尔张量**.

最简单的秩为 2 的笛卡尔张量的例子是由两个矢量 **U** 和 **V** 构成的**并矢**. 人们只要取 **U** 的一个笛卡尔分量和 **V** 的一个笛卡尔分量，然后把它们放到一起：

$$T_{ij} \equiv U_i V_j. \tag{3.11.12}$$

注意，总共有九个分量，在转动下显然像 (3.11.11) 式那样变换.

像 (3.11.12) 式那样的一个笛卡尔张量遇到的麻烦是，它是可约的——即它可以分解为几个成员，它们在转动下的变换是不同的. 具体地说，对 (3.11.12) 式中的并矢，有

$$U_i V_j = \frac{\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}}{3}\delta_{ij} + \frac{(U_i V_j - U_j V_i)}{2} + \left(\frac{U_i V_j + U_j V_i}{2} - \frac{\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}}{3}\delta_{ij}\right). \tag{3.11.13}$$

其右边的第一项 $\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}$ 是一个在转动下不变的标量积. 第二项是一个反对称张量，它可以写成一个矢量积 $\varepsilon_{ijk}(\mathbf{U}\times\mathbf{V})_k$. 它一共有 3 个独立的分量. 最后一项是一个有 5(=6−1，其中的 1 来自无迹条件) 个独立分量的 3×3 对称无迹张量. 核对独立分量的个数：

$$3\times 3 = 1 + 3 + 5. \tag{3.11.14}$$

注意到，在 (3.11.14) 式右边出现的数恰好是角动量分别为 $l=0$，$l=1$ 和 $l=2$ 成员的多重数. 这就表明并矢已被分解成能像 $l=0$，$l=1$ 和 $l=2$ 的球谐函数一样变换的张量. 事实上，(3.11.13) 式是一个演示笛卡尔张量约化成不可约**球张量**的最简单的非平凡实例.

在介绍球张量的精确定义之前，先给出一个秩为 k 的球张量的例子. 假定取球谐函数 $Y_l^m(\theta,\phi)$. 它可以写成 $Y_l^m(\hat{\mathbf{n}})$，其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 的取向由 θ 和 ϕ 来表征. 现在用某个矢量 **V** 代替 $\hat{\mathbf{n}}$. 结果是，有了一个秩为 k (代替 l) 磁量子数为 q (代替 m) 的球张量，即

$$T_q^{(k)} = Y_{l=k}^{m=q}(\mathbf{V}). \tag{3.11.15}$$

具体地说，在 $k=1$ 的情况下，取 $l=1$ 的球谐函数，并用 V_z 代替 $(z/r)=(\hat{\mathbf{n}})_z$，等等.

$$\begin{aligned} Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r} \to T_0^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}V_z, \\ Y_1^{\pm 1} &= \mp\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x \pm iy}{\sqrt{2}r} \to T_{\pm 1}^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\mp\frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}}\right). \end{aligned} \tag{3.11.16}$$

显然，这可以推广到更高的 k. 例如

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\frac{(x \pm iy)^2}{r^2} \to T_{\pm 2}^{(2)} \sqrt{\frac{15}{32\pi}}(V_x \pm iV_y)^2. \tag{3.11.17}$$

$T_q^{(k)}$ 像 $Y_l^{(m)}$ 一样是不可约的. 由于这个原因，用球张量比用笛卡尔张量更令人满意.

要看这样构造的球张量的变换，先来评述在转动下 Y_l^m 如何变换. 首先，对于方向本征右矢，有

$$|\hat{\mathbf{n}}\rangle \to \mathcal{D}(R)|\hat{\mathbf{n}}\rangle \equiv |\hat{\mathbf{n}}'\rangle, \tag{3.11.18}$$

它定义了转动后的本征右矢 $|\hat{\mathbf{n}}'\rangle$. 希望检查 $Y_l^m(\hat{\mathbf{n}}')=\langle\hat{\mathbf{n}}'|l,m\rangle$ 怎样用 $Y_l^m(\hat{\mathbf{n}})$ 表示. 从

$$\mathcal{D}(R^{-1})|l,m\rangle = \sum_{m'}|l,m'\rangle\,\mathcal{D}^{(l)}_{m'm}(R^{-1}) \tag{3.11.19}$$

出发，用 $\langle\hat{\mathbf{n}}|$ 从左边收缩，并利用 (3.11.18) 式，很容易看到：

$$Y_l^m(\hat{\mathbf{n}}') = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\hat{\mathbf{n}})\,\mathcal{D}^{(l)}_{m'm}(R^{-1}). \tag{3.11.20}$$

如果有一个算符能像 $Y_l^m(\mathbf{V})$ 那样作用，则预期

$$\mathcal{D}^{\dagger}(R)Y_l^m(\mathbf{V})\,\mathcal{D}(R) = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\mathbf{V})\,\mathcal{D}^{(l)}_{mm'}(R) \tag{3.11.21}$$

是合理的，这里用转动算符的幺正性重写了$\mathcal{D}^{(l)}_{m'm}(R^{-1})$

所有这些工作就是为了诱导出球张量的定义. 现在考虑量子力学中的球张量. 受(3.11.21)式的启发，定义一个有$2k+1$个分量的k秩球张量算符

$$\mathcal{D}^{\dagger}(R)T^{(k)}_q\,\mathcal{D}(R)=\sum_{q'=-k}^{k}\mathcal{D}^{(k)*}_{qq'}T^{(k)}_{q'} \tag{3.11.22a}$$

或等价地

$$\mathcal{D}(R)T^{(k)}_q\,\mathcal{D}^{\dagger}(R)=\sum_{q'=-k}^{k}\mathcal{D}^{(k)}_{q'q}(R)T^{(k)}_{q'} \tag{3.11.22b}$$

不管$T^{(k)}_q$是否可以写成$Y^{m=q}_{l=k}(\mathbf{V})$，这个定义都成立. 例如，尽管$(U_x+iU_y)(V_x+iV_y)$是一个二秩球张量的$q=+2$分量，与$(V_x+iV_y)^2$不同，它不能写成$Y^q_k(\mathbf{V})$.

通过考虑(3.11.22b)式的无穷小形式，可以得到球张量更为方便的定义，即

$$\left(1+\frac{i\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\epsilon}{\hbar}\right)T^{(k)}_q\left(1-\frac{i\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\epsilon}{\hbar}\right)=\sum_{q'=-k}^{k}T^{(k)}_{q'}\langle kq'|\left(1+\frac{i\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\epsilon}{\hbar}\right)|kq\rangle \tag{3.11.23}$$

或

$$[\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}},T^{(k)}_q]=\sum_{q'}T^{(k)}_{q'}\langle kq'|\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}|kq\rangle. \tag{3.11.24}$$

取$\hat{\mathbf{n}}$沿$\hat{\mathbf{z}}$和$(\hat{\mathbf{x}}\pm i\hat{\mathbf{y}})$方向，并且利用$J_z$和$J_\pm$的非零矩阵元［见(3.5.35b)和(3.5.41)式］，得到

$$[J_z,T^{(k)}_q]=\hbar qT^{(k)}_q \tag{3.11.25a}$$

和

$$[J_\pm,T^{(k)}_q]=\hbar\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}\,T^{(k)}_{q\pm1}, \tag{3.11.25b}$$

代替(3.11.22)式，这些对易关系可看作球张量的定义.

张量积

书中已经多次用到了笛卡尔张量的语言. 的确，用它们构造了标量、矢量、反对称张量和无迹对称张量. 例如，请见(3.11.13)式. 当然，也可以利用球张量语言(Baym 1969，第17章)，例如

$$\begin{aligned}
T^{(0)}_0&=\frac{-\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}}{3}=\frac{(U_{+1}V_{-1}+U_{-1}V_{+1}-U_0V_0)}{3},\\
T^{(1)}_q&=\frac{(\mathbf{U}\times\mathbf{V})_q}{i\sqrt{2}},\\
T^{(2)}_{\pm2}&=U_{\pm1}V_{\pm1},\\
T^{(2)}_{\pm1}&=\frac{U_{\pm1}V_0+U_0V_{\pm1}}{\sqrt{2}},\\
T^{(2)}_0&=\frac{U_{+1}V_{-1}+2U_0V_0+U_{-1}V_{+1}}{\sqrt{6}},
\end{aligned} \tag{3.11.26}$$

其中$U_q(V_q)$是一秩球张量的第q个分量，对应着矢量$\mathbf{U}(\mathbf{V})$. 通过与Y^m_l比较并记住$U_{+1}=-(U_x+iU_y)/\sqrt{2}$，$U_{-1}=(U_x-iU_y)/\sqrt{2}$，$U_0=U_z$，可以检验前述的变换性质. 对$V_{\pm1,0}$可做类似的检验. 例如

$$Y^0_2=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,\frac{3z^2-r^2}{r^2},$$

其中 $3z^2-r^2$ 可以写成

$$2z^2+2\left[-\frac{(x+iy)}{\sqrt{2}}\frac{(x-iy)}{\sqrt{2}}\right],$$

因此，Y_2^0 正是 $T_0^{(2)}$ 在 $\mathbf{U}=\mathbf{V}=\mathbf{r}$ 时的特例.

一个更为系统的构成张量积的方法如下所示. 从一个定理开始：

定理 3.1　令 $X_{q_1}^{(k_1)}$ 和 $Z_{q_2}^{(k_2)}$ 分别为 k_1 秩和 k_2 秩的不可约球张量. 则

$$T_q^{(k)}=\sum_{q_1}\sum_{q_2}\langle k_1k_2;q_1q_2\,|\,k_1k_2;kq\rangle X_{q_1}^{(k_1)}Z_{q_2}^{(k_2)} \tag{3.11.27}$$

是一个 k 秩球（不可约）张量.

证明　必须证明在转动下 $T_q^{(k)}$ 一定按照（3.11.22）式变换.

$$\begin{aligned}\mathcal{D}^{\dagger}(R)T_q^{(k)}\mathcal{D}(R)&=\sum_{q_1}\sum_{q_2}\langle k_1k_2;q_1q_2\,|\,k_1k_2;kq\rangle\\&\times\mathcal{D}^{\dagger}(R)X_{q_1}^{(k_1)}\,\mathcal{D}(R)\,\mathcal{D}^{\dagger}(R)Z_{q_2}^{(k_2)}\,\mathcal{D}(R)\\&=\sum_{q_1}\sum_{q_2}\sum_{q_1'}\sum_{q_2'}\langle k_1k_2;q_1q_2\,|\,k_1k_2;kq\rangle\\&\times X_{q_1'}^{(k_1)}\,\mathcal{D}_{q_1'q_1}^{(k_1)}(R^{-1})Z_{q_2'}^{(k_2)}\,\mathcal{D}_{q_2'q_2}^{(k_2)}(R^{-1})\\&=\sum_{k''}\sum_{q_1}\sum_{q_2}\sum_{q_1'}\sum_{q_2'}\sum_{q''}\sum_{q'}\langle k_1k_2;q_1q_2\,|\,k_1k_2;kq\rangle\\&\times\langle k_1k_2;q_1'q_2'\,|\,k_1k_2;k''q'\rangle\\&\times\langle k_1k_2;q_1q_2\,|\,k_1k_2;k''q''\rangle\,\mathcal{D}_{q'q''}^{(k'')}(R^{-1})X_{q_1'}^{(k_1)}Z_{q_2'}^{(k_2)},\end{aligned}$$

其中用到了克莱布什-戈丹系数公式（3.8.69）式. 上述表达式变成

$$=\sum_{k''}\sum_{q_1'}\sum_{q_2'}\sum_{q''}\sum_{q'}\delta_{kk''}\delta_{qq''}\langle k_1k_2;q_1'q_2'\,|\,k_1k_2;k''q'\rangle\,\mathcal{D}_{q'q''}^{(k'')}(R^{-1})X_{q_1'}^{(k_1)}Z_{q_2'}^{(k_2)}$$

其中用到了克莱布什-戈丹系数的正交性（3.8.42）式. 最后，这个表达式约化为

$$\begin{aligned}&=\sum_{q'}\Big(\sum_{q_1'}\sum_{q_2'}\langle k_1k_2;q_1'q_2'\,|\,k_1k_2;kq'\rangle X_{q_1'}^{(k_1)}Z_{q_2'}^{(k_2)}\Big)\mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(R^{-1})\\&=\sum_{q'}T_{q'}^{(k)}\,\mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(R^{-1})=\sum_{q'}\mathcal{D}_{qq'}^{(k)*}(R)T_{q'}^{(k)}.\end{aligned}$$

上述表明，可以通过把两个张量算符相乘构造更高或更低秩的张量算符. 此外，用两个张量构造张量积的方式完全类似于把两个角动量相加构造一个角动量本征态的方式，如果令 $k_{1,2}\to j_{1,2}$ 和 $q_{1,2}\to m_{1,2}$，则出现完全相同的克莱布什-戈丹系数.

张量算符的矩阵元及维格纳-埃卡特定理

在考虑电磁场与原子和原子核相互作用时，经常需要计算张量算符对于角动量本征态的矩阵元. 一些这类的例子将在第 5 章给出. 一般来说，计算这样的矩阵元是一件艰巨的动力学任务. 然而，这些矩阵元具有一些纯粹来自运动学或几何学考虑的性质，现在来讨论它们.

首先，有一个非常简单的 m 选择定则：

$$\langle\alpha',j'm'\,|\,T_q^{(k)}\,|\,\alpha,jm\rangle=0,\quad\text{除非 }m'=q+m. \tag{3.11.28}$$

证明 利用（3.11.25a）式，有

$$\langle \alpha', j'm' | ([J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)}) | \alpha, jm \rangle = [(m' - m)\hbar - \hbar q] \times \langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle = 0,$$

因此

$$\langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle = 0, \quad \text{除非 } m' = q + m.$$

另一种看到这种性质的方法是注意 $T_q^{(k)}|\alpha, jm\rangle$ 在转动下的变换性质，即

$$\mathcal{D} T_q^{(k)} |\alpha, jm\rangle = \mathcal{D} T_q^{(k)} \mathcal{D}^\dagger \mathcal{D} |\alpha, jm\rangle. \tag{3.11.29}$$

如果现在令$\mathcal{D}$为绕 z 轴的一个转动算符，得到［请见（3.11.22b）式和（3.1.16）式］

$$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{z}}, \phi) T_q^{(k)} |\alpha, jm\rangle = e^{-iq\phi} e^{-im\phi} T_q^{(k)} |\alpha, jm\rangle, \tag{3.11.30}$$

除非 $q+m=m'$，否则它与$|\alpha', j'm'\rangle$ 正交.

下面将证明量子力学中的最重要的定理之一，**维格纳-埃卡特定理**.

定理 3.2 维格纳-埃卡特定理. 张量算符对于角动量本征态的矩阵元满足

$$\langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle = \langle jk; mq | jk; j'm' \rangle \frac{\langle \alpha' j' \| T^{(k)} \| \alpha j \rangle}{\sqrt{2j+1}}, \tag{3.11.31}$$

其中的双线矩阵元不依赖于 m，m'和 q.

在阐述该定理的证明之前，先看一下它的意义. 首先，可以看到这个矩阵元被写成两个因子之积. 第一个因子是一个关于 j 和 k 相加得到 j'的克莱布什-戈丹系数. 它只依赖于几何学——即依赖系统相对于 z 轴的取向方式. 不涉及张量算符任何特殊的性质. 第二个因子确实依赖于动力学，例如，α 可以表示径向量子数，因而它的计算可能包含求径向积分. 另一方面，它完全不依赖于确定该物理系统取向的磁量子数 m，m'和 q. 要计算具有 m，m'和 q' 各种组合的 $\langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle$，只要知道它们中的一个就够了，所有其他的矩阵元都能用几何学关联起来，因为它们都正比于克莱布什-戈丹系数，后者是已知的. 共同的比例因子是 $\langle \alpha' j' \| T^{(k)} \| \alpha j \rangle$，它不涉及任何几何特点.

张量算符矩阵元的选择定则可以马上从角动量相加的选择定则中读取出来. 的确，从克莱布什-戈丹系数非零的要求，立即得到前面导出的 m 选择定则（3.11.28）式，以及三角形关系

$$|j - k| \leqslant j' \leqslant j + k. \tag{3.11.32}$$

下面证明这个定理.

证明 利用（3.11.25b）式，有

$$\langle \alpha', j'm' | [J_\pm, T_q^{(k)}] | \alpha, jm \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j'm' | T_{q\pm1}^{(k)} | \alpha, jm \rangle, \tag{3.11.33}$$

或者利用（3.5.39）式和（3.5.40）式，有

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle \alpha', j', m' \mp 1 | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle \\ &\quad = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \pm 1 \rangle \\ &\quad + \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j'm' | T_{q\pm1}^{(k)} | \alpha, jm \rangle. \end{aligned} \tag{3.11.34}$$

把该式与克莱布什-戈丹系数的递推关系（3.8.49）式比较. 注意如果做代换 $j' \to j$，$m' \to$

m，$j\to j_1$，$m\to m_1$，$k\to j_2$ 和 $q\to m_2$，则有惊人的相似性. 这两个递推关系都具有 $\sum_j a_{ij}x_j=0$ 形式，即它们都是一阶齐次线性方程组，而且有相同的系数 a_{ij}. 每当

$$\sum_j a_{ij}x_j=0,\quad \sum_j a_{ij}y_j=0, \tag{3.11.35}$$

不能把 x_j（或 y_j）的解分别都求出来，但可以求解它们的比，所以

$$\frac{x_j}{x_k}=\frac{y_j}{y_k}\quad 或\ x_j=cy_j, \tag{3.11.36}$$

其中 c 是一个普适的比例因子. 注意到克莱布什-戈丹系数的递推关系（3.8.49）式中的 $\langle j_1j_2;m_1,m_2\pm1\,|\,j_1j_2;jm\rangle$ 对应于 $\langle\alpha',j'm'|T^{(k)}_{q\pm1}|\alpha,jm\rangle$，得到

$$\langle\alpha',j'm'|T^{(k)}_{q\pm1}|\alpha,jm\rangle=(\text{不依赖于 } m,q \text{ 和 } m' \text{ 的普适比例常数})\langle jk;mq\pm1|jk;j'm'\rangle, \tag{3.11.37}$$

于是证明了该定理.

现在看一下维格纳-埃卡特定理的两个简单例子.

例 3.5　0 秩张量，即标量 $T^{(0)}_0=S$. 一个标量算符的矩阵元满足

$$\langle\alpha',j'm'|S|\alpha,jm\rangle=\delta_{jj'}\delta_{mm'}\frac{\langle\alpha'j'\,\|\,S\,\|\,\alpha j\rangle}{\sqrt{2j+1}} \tag{3.11.38}$$

因为 S 作用于 $|\alpha,jm\rangle$ 就像加上一个零角动量. 于是，标量算符不可能改变 j,m 的值.

例 3.6　利用球张量语言，矢量算符是一个一秩张量. $\mathbf{V}$ 的球分量可以写成 $V_{q=\pm1,0}$，所以有选择定则

$$\Delta m\equiv m'-m=\pm1,0\qquad \Delta j\equiv j'-j=\begin{cases}\pm1\\0\end{cases} \tag{3.11.39}$$

此外，0→0 的跃迁是禁戒的. 这个选择定则在辐射理论中是非常重要的. 它是在发射光子的长波极限下求得的偶极选择定则.

$j=j'$ 时的维格纳-埃卡特定理——当将其用于矢量算符时——有特别简单的形式，由于一些明显的理由，它经常被称之为**投影定理**.

定理 3.3　投影定理

$$\langle\alpha',jm'|V_q|\alpha,jm\rangle=\frac{\langle\alpha',jm|\mathbf{J}\cdot\mathbf{V}|\alpha,jm\rangle}{\hbar^2j(j+1)}\langle jm'|J_q|jm\rangle, \tag{3.11.40}$$

其中，类似在（3.11.26）式之后的讨论，选择

$$J_{\pm1}=\mp\frac{1}{\sqrt{2}}(J_x\pm iJ_y)=\mp\frac{1}{\sqrt{2}}J_\pm,\quad J_0=J_z. \tag{3.11.41}$$

证明　注意（3.11.26）式，使用维格纳-埃卡特定理（3.11.31）式，有

$$\begin{aligned}\langle\alpha',jm|\mathbf{J}\cdot\mathbf{V}|\alpha,jm\rangle&=\langle\alpha',jm|(J_0V_0-J_{+1}V_{-1}-J_{-1}V_{+1})|\alpha,jm\rangle\\&=m\hbar\langle\alpha',jm|V_0|\alpha,jm\rangle+\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\\&\times\langle\alpha',jm-1|V_{-1}|\alpha,jm\rangle\\&-\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\langle\alpha',jm+1|V_{+1}|\alpha,jm\rangle\end{aligned} \tag{3.11.42}$$

$$= c_{jm}\langle \alpha' j \parallel \mathbf{V} \parallel \alpha j \rangle$$

其中 c_{jm} 不依赖于 α，α' 和 $\mathbf{V}$，并且 $V_{0,\pm 1}$ 的矩阵元都正比于双线矩阵元（有时也称为**约化矩阵元**）. 此外，c_{jm} 不依赖于 m，因为 $\mathbf{J}\cdot\mathbf{V}$ 是一个标量算符，所以也可以把它写做 c_j. 因为 c_j 不依赖于 $\mathbf{V}$，即使令 $\mathbf{V}\to\mathbf{J}$ 和 $\alpha'\to\alpha$，(3.11.42) 式仍成立，即

$$\langle \alpha, jm | \mathbf{J}^2 | \alpha, jm \rangle = c_j \langle \alpha j \parallel \mathbf{J} \parallel \alpha j \rangle. \tag{3.11.43}$$

返回到应用于 V_q 和 J_q 的维格纳-埃卡特定理，有

$$\frac{\langle \alpha', jm' | V_q | \alpha, jm \rangle}{\langle \alpha, jm' | J_q | \alpha, jm \rangle} = \frac{\langle \alpha' j \parallel \mathbf{V} \parallel \alpha j \rangle}{\langle \alpha j \parallel \mathbf{J} \parallel \alpha j \rangle} \tag{3.11.44}$$

但是我们可以利用 (3.11.42) 式和 (3.11.43) 式把 (3.11.44) 式的右边写成 $\langle \alpha', jm | \mathbf{J}\cdot\mathbf{V} | \alpha, jm \rangle / \langle \alpha, jm | \mathbf{J}^2 | \alpha, jm \rangle$. 此外，(3.11.43) 式的左边正是 $j(j+1)\hbar^2$. 所以

$$\langle \alpha', jm' | V_q | \alpha, jm \rangle = \frac{\langle \alpha', jm | \mathbf{J}\cdot\mathbf{V} | \alpha, jm \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle jm' | J_q | jm \rangle, \tag{3.11.45}$$

投影定理得证.

随后的章节将给出这个定理的一些应用.

习题

3.1 求 $\boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ 的本征值和本征矢. 假定一个电子处在自旋态 $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ 上. 如果测得 s_y，结果为 $\hbar/2$ 的概率是什么？

3.2 对于一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子，在存在一个磁场 $\mathbf{B} = B_x\hat{\mathbf{x}} + B_y\hat{\mathbf{y}} + B_z\hat{\mathbf{z}}$ 情况下，通过利用泡利矩阵显式结构，求哈密顿量

$$H = -\frac{2\mu}{\hbar}\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}$$

的本征值.

3.3 考虑由

$$U = \frac{a_0 + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a}}{a_0 - i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a}}.$$

定义的 2×2 矩阵，其中 a_0 是一个实数，而 $\mathbf{a}$ 是一个有着实分量的三维矢量.

(a) 证明 U 是幺正的和幺模的.

(b) 一般地说，一个 2×2 幺正幺模矩阵表示一个三维转动. 借助于 a_0, a_1, a_2 和 a_3，求适合于 U 的转动轴和转角.

3.4 在存在一个沿 z 方向的均匀磁场情况下，一个电子-正电子系统的时间相关哈密顿量可以写成

$$H = A\mathbf{S}^{(e^-)}\cdot\mathbf{S}^{(e^+)} + \left(\frac{eB}{mc}\right)(S_z^{(e^-)} - S_z^{(e^+)}),$$

假定系统的自旋函数由 $\chi_+^{(e^-)}\chi_-^{(e^+)}$ 给出.

(a) 在 $A\to 0$，$eB/mc\neq 0$ 的极限下，它是 H 的本征函数吗？如果它是，能量本征值是什么？如果它不是，H 的期待值是什么？

(b) 当 $eB/mc\to 0$，$A\neq 0$ 时，求解同样的问题.

3.5 考虑一个自旋为 1 的粒子. 求

$$S_z(S_z+\hbar)(S_z-\hbar) \quad \text{和} \quad S_x(S_x+\hbar)(S_x-\hbar)$$

的矩阵元.

3.6 设一个刚体的哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2}\left(\frac{K_1^2}{I_1}+\frac{K_2^2}{I_2}+\frac{K_3^2}{I_3}\right),$$

其中 **K** 是本体坐标架中的角动量. 从这个表示式求 **K** 的海森伯运动方程，然后在相应的极限下求欧拉运动方程.

3.7 令 $U=e^{(i/\hbar)\alpha}e^{(i/\hbar)\beta}e^{(i/\hbar)\gamma}$，其中 (α,β,γ) 是欧拉角. 为了使 U 表示一个转动 (α,β,γ)，G_k 必须满足的对易关系是什么？把 **G** 与角动量算符联系起来.

3.8 下列方程式的意义是什么？

$$U^{-1}A_kU=\sum R_{kl}A_l,$$

其中，**A** 的三个分量都是矩阵. 由这个方程式证明，矩阵元 $\langle m|A_k|n\rangle$ 像一个矢量一样变换.

3.9 考虑一个由下式表示的欧拉转动序列

$$\mathcal{D}^{(1/2)}(\alpha,\beta,\gamma)=\exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_3\gamma}{2}\right)$$

$$=\begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\dfrac{\beta}{2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\sin\dfrac{\beta}{2} \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2}\sin\dfrac{\beta}{2} & e^{i(\alpha+\gamma)/2}\cos\dfrac{\beta}{2} \end{pmatrix}.$$

由于转动的群性质，预期这一序列操作等价于绕某个轴转一个 θ 角的单一转动. 求 θ.

3.10 (a) 考虑全同制备的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的一个纯系综. 假定期待值 $\langle S_x\rangle$ 和 $\langle S_z\rangle$ 已知，而 $\langle S_y\rangle$ 的符号也已知. 证明如何确定态矢量. 为什么不必知道 $\langle S_y\rangle$ 的大小？

(b) 考虑一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的混合系综. 假定系综平均值 $[S_x]$，$[S_y]$ 和 $[S_z]$ 都是已知的. 证明如何可以构造表征这个系综的 2×2 密度矩阵.

3.11 (a) 证明密度算符 ρ（在薛定谔绘景中）的时间演化由下式给定

$$\rho(t)=\mathcal{U}(t,t_0)\rho(t_0)\mathcal{U}^{\dagger}(t,t_0).$$

(b) 假定在 $t=0$ 时有一个纯系综. 证明只要时间演化由薛定谔方程控制，则它不可能演化成一个混合系综.

3.12 考虑自旋为 1 系统的一个系综. 密度矩阵现在是一个 3×3 矩阵. 为了表征这个密度矩阵，需要多少独立的（实）参量？除了 $[S_x]$，$[S_y]$ 和 $[S_z]$，为了完全表征这个系综还必须知道什么？

3.13 一个角动量本征态 $|j,m=m_{最大}=j\rangle$ 绕 y 轴转一个无穷小角度 ϵ. 不使用 $d^{(j)}_{m'm}$ 函数的显式表达式，求在其原来态上发现这个新的转动后的态的概率表示式，直到 ϵ^2 量级项.

3.14 已知 3×3 矩阵 G_i $(i=1,2,3)$，其矩阵元由下式给出：

$$(G_i)_{jk}=-i\hbar\epsilon_{ijk},$$

其中 j 和 k 是行和列指标，证明它满足角动量对易关系. 把 G_i 与比较常用的角动量算符 J_i，在 J_3 取为对角的情况下的 3×3 表示联系起来，实现该联系的变换矩阵的物理（或几何）意义是什么？把得到的结果与无穷小转动下的

$$\mathbf{V}\to\mathbf{V}+\hat{\mathbf{n}}\delta\phi\times\mathbf{V}$$

联系起来.（注：这个问题可能有助于理解光子的自旋.）

3.15 (a) 令 **J** 是角动量.（它可以是轨道角动量 **L**，自旋 **S**，或 $\mathbf{J}_{总}$.）利用 J_x，J_y，J_z（$J_{\pm}\equiv J_x\pm iJ_y$）满足通常角动量对易关系的事实，证明

$$\mathbf{J}^2=J_z^2+J_+J_--\hbar J_z.$$

(b) 利用 (a)（或其他方式）推导出在

$$J_-\psi_{jm}=c_-\psi_{j,m-1}$$

中的系数 c_- 的“著名”的表示式.

3.16 证明轨道角动量算符 **L** 与算符 $\mathbf{p}^2$ 和 $\mathbf{x}^2$ 都对易，即证明 (3.7.2) 式.

3.17 一个受到球对称势 $V(r)$ 作用的粒子的波函数由下式给出：

$$\psi(\mathbf{x}) = (x+y+3z)f(r).$$

(a) ψ 是 $\mathbf{L}^2$ 的一个本征函数吗？如果是的话，l 值是什么？如果不是，当测量 $\mathbf{L}^2$ 时能得到什么样可能的 l 值？

(b) 在各种 m_l 态上找到该粒子的概率是什么？

(c) 假定以某种方式知道 $\psi(\mathbf{x})$ 是一个能量本征函数，本征值为 E. 指出怎样可以找到 $V(r)$.

3.18 已知一个在球对称势中的粒子处在 $\mathbf{L}^2$ 和 L_z 的本征态，本征值分别为 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$. 证明在 $|lm\rangle$ 态之间的期待值满足

$$\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0, \qquad \langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle = \frac{[l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2]}{2}.$$

半经典地解释这个结果.

3.19 假定轨道角动量允许有一个半整数的 l 值，比如 $\frac{1}{2}$. 通常，从

$$L_+ Y_{1/2,1/2}(\theta,\phi) = 0,$$

可以导出

$$Y_{1/2,1/2}(\theta,\phi) \propto e^{i\phi/2}\sqrt{\sin\theta}.$$

现在尝试 (a) 用 L_- 作用于 $Y_{1/2,1/2}(\theta,\phi)$；(b) 用 $L_- Y_{1/2,-1/2}(\theta,\phi)=0$，构造 $Y_{1/2,-1/2}(\theta,\phi)$. 证明这两种做法会导致矛盾的结果.（这给出了轨道角动量不能为一个半奇数 l 值的论据.）

3.20 考虑一个轨道角动量的本征态 $|l=2,m=0\rangle$. 假定这个态绕 y 轴转了 β 角. 求在 $m=0,\pm1$ 和 ±2 的态上找到这个新态的概率.（在附录 B 的 B.5 节中给出的 $l=0$，1 和 2 的球谐函数可能是有用的.）

3.21 本题的目的是借助于笛卡尔本征态 $|n_x\,n_y\,n_z\rangle$，确定写成 $\mathbf{L}^2$ 和 L_z 本征态的三维各向同性谐振子的简并本征态.

(a) 证明角动量算符由下式给出：

$$L_i = i\hbar\epsilon_{ijk}a_j a_k^\dagger$$

$$\mathbf{L}^2 = \hbar^2[N(N+1) - a_k^\dagger a_j^\dagger a_j a_j],$$

其中隐含了对于重复指标的求和，ϵ_{ijk} 是全反对称符号，而 $N\equiv a_j^\dagger a_j$ 计数了总的量子数目.

(b) 使用这些关系式，把态 $|qlm\rangle = |01m\rangle$，$m=0,\pm1$，借助于能量简并的三个本征态 $|n_x\,n_y\,n_z\rangle$ 表示出来. 在坐标空间中表述你的答案，并且检查角度和径向依赖关系都是正确的.

(c) 对 $|qlm\rangle = |200\rangle$ 重复以上两问.

(d) 对 $|qlm\rangle = |02m\rangle$，在 $m=0,1$ 和 2 的情况下，重复 (a) 和 (b) 两问.

3.22 遵照下列步骤，证明库默尔方程（3.7.46）可以用拉盖尔多项式 $L_n(x)$ 写出来，后者按照母函数定义为

$$g(x,t) = \frac{e^{-xt/(1-t)}}{1-t} = \sum_{n=0} L_n(x)\frac{t^n}{n!}$$

其中 $0<t<1$. 2.5 节中关于厄米多项式的母函数的讨论将会很有帮助.

(a) 证明 $L_n(0)=n!$ 和 $L_0(x)=1$.

(b) 把 $g(x,t)$ 对 x 求微商，证明

$$L'_n(x) - nL'_{n-1}(x) = -nL_{n-1}(x),$$

并求出前几个拉盖尔多项式.

(c) 把 $g(x,t)$ 对 t 求微商，证明

$$L_{n+1}(x) - (2n+1-x)L_n(x) + n^2 L_{n-1}(x) = 0.$$

(d) 现在，证明库默尔方程可以通过推导

$$xL''_n(x) + (1-x)L'_n(x) + nL_n(x) = 0,$$

而求解，而且把 n 与氢原子的主量子数联系起来.

(e) 定义缔合拉盖尔多项式为

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k}[L_{n+k}(x)]$$

证明，它满足下列方程

$$xL_n^{k''}(x) + (k+1-x)L_n^{k'}(x) + nL_n^k(x) = 0$$

事实上，可以证明这个方程就是库默尔方程. 这就是说，氢原子的径向波函数是用缔合拉盖尔多项式表示的. [(e) 小题是作者在勘误表中要求加上的. ——译者注]

3.23 在角动量的施温格方案中，算符

$$K_+ \equiv a_+^\dagger a_-^\dagger \quad 和 \quad K_- \equiv a_+ a_-$$

的物理意义是什么？给出 $K_\pm$ 的非零矩阵元.

3.24 通过把 $j_1=1$ 和 $j_2=1$ 相加，求出所形成的 $j=2,1,0$ 的所有 9 个 $|j,m\rangle$ 态. 利用简化符号，以 $\pm$，0 分别代表 $m_{1,2}=\pm1,0$，写出 $|j,m\rangle$ 的显式式，例如

$$|1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|0+\rangle$$

可以利用阶梯算符 $J_\pm$，或递推关系以及正交性. 找一个克莱布什-戈丹系数表用来做比较，检验你的结果.

3.25 (a) 对于任意的 j(整数或半奇数)，求

$$\sum_{m=-j}^{j} |d_{mm'}^{(j)}(\beta)|^2 m.$$

并核对 $j=\frac{1}{2}$ 时所得的答案.

(b) 证明，对于任意的 j

$$\sum_{m=-j}^{j} m^2 |d_{m'm}^{(j)}(\beta)|^2 = \frac{1}{2}j(j+1)\sin^2\beta + m'^2\frac{1}{2}(3\cos^2\beta - 1).$$

[提示：这可以用许多方法证明. 例如，可以利用球（不可约）张量语言检查 J_z^2 的转动性质.]

3.26 (a) 考虑一个 $j=1$ 的系统. 明确地把

$$\langle j=1,m'|J_y|j=1,m\rangle$$

写成 3×3 矩阵形式.

(b) 证明，只有 $j=1$ 时，才可以合理地用

$$1 - i\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)\sin\beta - \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2(1-\cos\beta)$$

代替 $e^{-iJ_y\beta/\hbar}$.

(c) 利用 (b) 证明

$$d^{(j=1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\right)(1+\cos\beta) & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1-\cos\beta) \\ \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \cos\beta & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta \\ \left(\frac{1}{2}\right)(1-\cos\beta) & \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1+\cos\beta) \end{pmatrix}.$$

3.27 借助

$$\mathcal{D}_{mn}^{j}(\alpha\beta\gamma) = \langle\alpha\beta\gamma|jmn\rangle$$

中的级数把矩阵元 $\langle\alpha_2\beta_2\gamma_2|J_3^2|\alpha_1\beta_1\gamma_1\rangle$ 表示出来. (作者在勘误表中认为这个题应该删掉，因为 $|jmn\rangle$ 代表什么，并不清楚. ——译者注)

3.28 考虑由两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子组成的一个系统. 观察者 A 专门测量其中一个粒子的自旋分量 (s_{1z}，s_{1x}，等等)，同时观察者 B 测量另一个粒子的自旋分量. 假定已知系统处在自旋单态，即 $S_{\text{总}}=0$.

(a) 当观察者 B 不做任何测量时，观察者 A 得到 $s_{1z}=\hbar/2$ 的概率是什么？对于 $s_{1x}=\hbar/2$ 求解同样问题.

(b) 观察者 B 肯定地确认粒子 2 的自旋处于 $s_{2z}=\hbar/2$ 态. 如果观察者 A (i) 测量 s_{1z}；(ii) 测 s_{1x}，则对观察者 A 的测量结果能给出的结论是什么？解释你的答案.

3.29 考虑一个秩为 1 的球张量（即一个矢量）

$$V_{\pm1}^{(1)}=\mp\frac{V_x\pm iV_y}{\sqrt{2}},\quad V_0^{(1)}=V_z.$$

利用习题 3.26 给出的 $d^{(j=1)}$ 的表示式，求

$$\sum_{q'}d_{qq'}^{(1)}(\beta)V_{q'}^{(1)},$$

并证明这结果正是从绕 y 轴转动时 $V_{x,y,z}$ 的变换性质所预期的.

3.30 (a) 用两个不同的矢量 $\mathbf{U}=(U_x,U_y,U_z)$ 和 $\mathbf{V}=(V_x,V_y,V_z)$ 构造一个秩为 1 的球张量. 明确地用 $U_{x,y,z}$ 和 $V_{x,y,z}$ 写出 $T_{\pm1,0}^{(1)}$.

(b) 用两个不同的矢量 $\mathbf{U}$ 和 $\mathbf{V}$ 构造一个秩为 2 的球张量. 明确地用 $U_{x,y,z}$ 和 $V_{x,y,z}$ 写出 $T_{\pm2,\pm1,0}^{(2)}$.

3.31 考虑一个无自旋粒子被一个中心力位势束缚于一个固定的中心.

(a) 尽可能只用维格纳-埃卡特定理建立起矩阵元

$$\langle n',l',m'|\mp\frac{1}{\sqrt{2}}(x\pm iy)|n,l,m\rangle\quad\text{和}\quad\langle n',l',m'|z|n,l,m\rangle$$

的关系. 肯定地指出在什么样的条件下这些矩阵元非零.

(b) 利用波函数 $\psi(\mathbf{x})=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$ 求解同样的问题.

3.32 (a) 把 xy，xz 和 (x^2-y^2) 写成一个秩为 2 的球（不可约）张量的分量.

(b) 期待值

$$Q\equiv e\langle\alpha,j,m=j|(3z^2-r^2)|\alpha,j,m=j\rangle$$

被称为四级矩. 利用 Q 和适当的克莱布什-戈丹系数，求

$$e\langle\alpha,j,m'|(x^2-y^2)|\alpha,j,m=j\rangle,$$

其中 $m'=j,j-1,j-2,\cdots$.

3.33 一个处于原点的自旋为 $\frac{3}{2}$ 的原子核受到一个外部非均匀电场的作用. 基本的电四极矩相互作用可以取为

$$H_{\text{int}}=\frac{eQ}{2s(s-1)\hbar^2}\left[\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_0S_x^2+\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)_0S_y^2+\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right)_0S_z^2\right],$$

其中 ϕ 是满足拉普拉斯方程的静电势，而坐标轴的选取，使得：

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x\,\partial y}\right)_0=\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y\,\partial z}\right)_0=\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x\,\partial z}\right)_0=0.$$

证明相互作用可以写成

$$A(3S_z^2-\mathbf{S}^2)+B(S_+^2+S_-^2).$$

并借助于 $(\partial^2\phi/\partial x^2)_0$ 等表示 A 和 B.（借助 $|m\rangle$，其中 $m=\pm\frac{3}{2},\pm\frac{1}{2}$）确定能量本征右矢和相应的能量本征值. 有简并存在吗？

第 4 章　量子力学中的对称性

详细地研究了转动理论之后，我们能以更普遍的术语讨论对称性、简并和守恒定律之间的联系. 这个重要的论题一直故意推迟到现在，以便可以利用第 3 章的转动对称性作为例子来讨论它.

4.1　对称性、守恒定律和简并

经典物理中的对称性

以经典物理中对称性和守恒定律概念的初步评述作为开始. 在量子力学的拉格朗日形式中，从拉格朗日量 L 开始，它是广义坐标 q_i 和相应的广义速度 $\dot{q}_i$ 的函数. 如果 L 在平移

$$q_i \to q_i + \delta q_i \tag{4.1.1}$$

之下不变，则必须有

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = 0. \tag{4.1.2}$$

那么，凭借拉格朗日方程 $d/dt(\partial L/\partial \dot{q}_i) - \partial L/\partial q_i = 0$，可以得到

$$\frac{dp_i}{dt} = 0, \tag{4.1.3}$$

其中正则动量定义为

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}. \tag{4.1.4}$$

所以，如果 L 在平移 (4.1.1) 式之下不变，那么就有一个守恒量，即与 q_i 共轭的正则动量.

同样，在基于被看作 q_i 和 p_i 的函数 H 的哈密顿形式中，有

$$\frac{dp_i}{dt} = 0 \tag{4.1.5}$$

只要

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0. \tag{4.1.6}$$

所以，如果哈密顿量不明显地依赖于 q_i，这是 H 具有在 $q_i \to q_i + \delta q_i$ 之下对称性的另一种说法，则有一个守恒量.

量子力学中的对称性

在量子力学中已经学会把一个**幺正算符**，比如说 $\mathcal{S}$，与一个平移或转动这类算符联系起来. 作为一种惯例，把 $\mathcal{S}$ 称为一个**对称算符**，而不管物理系统本身是否具有与 $\mathcal{S}$ 对应的对称性. 而且我们已经学会，对于与恒等变换相差无穷小的对称操作，可以写成

$$\mathcal{S}=1-\frac{i\varepsilon}{\hbar}G. \tag{4.1.7}$$

其中 G 是所讨论的对称算符的厄米的生成元. 现在假定 H 在$\mathcal{S}$下是不变的. 那么有

$$\mathcal{S}^{\dagger}H\mathcal{S}=H. \tag{4.1.8}$$

但是这等价于

$$[G,H]=0. \tag{4.1.9}$$

凭借海森伯运动方程，有

$$\frac{dG}{dt}=0, \tag{4.1.10}$$

因此，G 是一个运动常数. 例如，如果 H 是平移之下不变，则动量是一个运动常数；而如果 H 是转动之下不变，则角动量是一个运动常数.

很有启发意义的是当 G 与 H 对易时，从 G 的本征右矢的观点看一看在（4.1.9）式与 G 的守恒之间的联系. 假定在 t_0 时刻系统处在 G 的一个本征右矢上. 那么，通过应用时间演化算符可以求得稍后时刻的右矢

$$|g',t_0;t\rangle=U(t,t_0)|g'\rangle \tag{4.1.11}$$

它也是 G 的一个本征右矢，具有相同的本征值. 这个结果的证明极其简单，只要认识到（4.1.9）式和（4.1.10）式还意味着 G 与时间演化算符对易，即

$$G[U(t,t_0)|g'\rangle]=U(t,t_0)G|g'\rangle=g'[U(t,t_0)|g'\rangle]. \tag{4.1.12}$$

简并

现在转向简并概念，尽管简并可以在经典力学层次讨论——例如，在讨论开普勒问题中的闭合（非进动）轨道时（Goldstein 2002）——这个概念在量子力学中起着更重要的作用. 假设对某种对称性算符

$$[H,\mathcal{S}]=0 \tag{4.1.13}$$

而 $|n\rangle$ 为能量本征右矢，本征值为 E_n. 则$\mathcal{S}|n\rangle$ 也是一个具有相同能量的能量本征右矢，因为

$$H(\mathcal{S}|n\rangle)=\mathcal{S}H|n\rangle=E_n(\mathcal{S}|n\rangle). \tag{4.1.14}$$

假定$|n\rangle$ 和$\mathcal{S}|n\rangle$ 代表不同的态. 那么，它们就是具有相同能量的两个态——这就是说，它们是简并态. 通常，$\mathcal{S}$由一个连续参量，比如 λ，表征，在这种情况下，所有的形式为$\mathcal{S}(\lambda)|n\rangle$的态都有相同的能量.

下面特别来考虑转动. 假定哈密顿量是转动不变的，因此

$$[\mathcal{D}(R),H]=0, \tag{4.1.15}$$

它一定意味着

$$[\mathbf{J},H]=0,\quad [\mathbf{J}^2,H]=0. \tag{4.1.16}$$

可以构成 H，$\mathbf{J}^2$ 和 J_z的共同本征态，用$|n;j,m\rangle$ 表示. 刚刚给出的论据意味着所有下列形式的态

$$\mathcal{D}(R)|n;j,m\rangle \tag{4.1.17}$$

具有相同的能量. 在第3章曾看到转动下不同的 m 值要混起来. 一般而言，$\mathcal{D}(R)$ $|n;j,m\rangle$ 是 $2j+1$ 个独立的态的线性组合. 显然，

$$\mathcal{D}(R)|n;j,m\rangle=\sum_{m'}|n;j,m'\rangle\,\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R), \tag{4.1.18}$$

并且，通过改变表征转动算符$\mathcal{D}(R)$的连续参量，可以得到$|n;j,m'\rangle$的不同的线性组合. 如果在任意的$\mathcal{D}(R)$情况下，所有形为$\mathcal{D}(R)|n;j,m\rangle$的态都有相同的能量，那时十分自然地，有着不同 m 的$|n;j,m\rangle$中，每一个都一定有相同的能量. 所以，在这里简并是$(2j+1)$重的，正好等于可能的 m 值的个数. 从这样的事实来看这一点也是显然的，即通过与 H 对易的 $J_\pm$ 相继作用于$|n;jm\rangle$得到的所有的态，具有相同的能量.

作为一个应用，考虑一个原子中的电子，它所受到的势可以写成 $V(r)+V_{LS}(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$. 因为 r 和 $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ 都是转动不变的，预期每一个原子能级都是 $(2j+1)$ 重简并. 另一方面，假定存在有一个，比如沿 z 方向的，外电场或磁场. 转动对称性现在明显被破坏了，其结果不再能预期有 $(2j+1)$ 重简并，因而由不同的 m 值表征的态不再有相同的能量. 在第 5 章将考察这种劈裂如何发生.

库仑势中的 SO(4)对称性

量子力学中连续对称性的一个很好例子是由氢原子问题以及库仑势的解提供的. 在 3.7 节完成了这个问题的求解，在那里能量本征值 (3.7.53) 式表明了 (3.7.56) 式所总结的显著的简并. 假如这一简并只是一种偶然，则会更加引人注目，但事实上，它是 $1/r$ 势束缚态问题特有的一种附加对称性的结果.

在这样的位势中轨道的经典问题，即开普勒问题，当然在量子力学之前很早就已经充分研究过了. 它的解导致椭圆轨道都是闭合的，这一事实意味着应当存在某个保持椭圆主轴取向不变的（矢量）运动常数. 即使对于 $1/r$ 只有一个小的偏离也会导致这个轴的进动，所以我们预期，要找的这个运动常数事实上是 $1/r$ 势所特有的.

经典上，这个新的运动常数是

$$\mathbf{M}=\frac{\mathbf{p}\times\mathbf{L}}{m}-\frac{Ze^2}{r}\mathbf{r} \tag{4.1.19}$$

其中引用了 3.7 节用过的符号. 这个量一般称为楞次矢量或者有时候称为龙格-楞次 (Runge-Lenz) 矢量. 与其在这里反复讨论经典处理，不如转向根据作为这个运动常数起因的对称性的量子力学处理.

这个新的对称性，被称为 SO(4)，完全类似于 3.3 节研究过的 SO(3) 对称性. 这就是说，SO(4) 是四维空间的转动算符群. 等价地，它是行列式为 1 的 4×4 正交矩阵群. 逐步建立起导致楞次矢量作为一个运动常数的这个对称性的性质，那时我们将看到这些性质正是由 SO(4) 预期的.

所用的方法密切遵循席夫 (1968)，pp. 235～239 给出的方法*. 首先需要修改 (4.1.19) 式，以构造一个厄米算符. 对于两个厄米的矢量算符 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$，易证 $(\mathbf{A}\times\mathbf{B})^\dagger=-\mathbf{B}\times\mathbf{A}$. 因此，一个厄米版本的楞次矢量是

$$\mathbf{M}=\frac{1}{2m}(\mathbf{p}\times\mathbf{L}-\mathbf{L}\times\mathbf{p})-\frac{Ze^2}{r}\mathbf{r}. \tag{4.1.20}$$

可以证明，$\mathbf{M}$ 与哈密顿量

---

* 这种求解氢原子的方法最早是由 Pauli 完成的，发表在 Zeitschrift *Phys.*，**33** (1925) 879. 其英译文 "*On the hydrogen spectrum from the standpoint of the new quantum mechanics*"，发表在 *Sources of Quantum Mechanics*，B. L. Van der Waerden，Dover(1967) 上. 作者对于告知该参考文献的 Djordje Minic 深表谢意. 至于龙格-楞次矢量的经典处理，建议读者参考 Goldstein，Poole 和 Safko(2002) 的 3.9 节（本脚注接勘误表要求译出. ——译者注）.

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r} \tag{4.1.21}$$

对易．即

$$[\mathbf{M},H]=0, \tag{4.1.22}$$

因此，$\mathbf{M}$ 的确是一个（量子力学）运动常数．可以证明其他一些有用的关系，即

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{M}=0=\mathbf{M}\cdot\mathbf{L} \tag{4.1.23}$$

$$\text{和}\quad \mathbf{M}^2=\frac{2}{m}H(\mathbf{L}^2+\hbar^2)+Z^2e^4. \tag{4.1.24}$$

为了确认作为这个运动常数起源的对称性，评述一下这个对称性的生成代数是很有意义的．已知的这个代数的一部分

$$[L_i,L_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k, \tag{4.1.25}$$

早些时候曾用这种符号把它写成（3.6.2）式，其中重复指标（在这种情况下是 k）表示对于分量的自动求和．还可以证明

$$[M_i,L_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}M_k, \tag{4.1.26}$$

它事实上确立 $\mathbf{M}$ 为一个（3.11.8）式意义上的矢量算符．最后，能够导出

$$[M_i,M_j]=-i\hbar\varepsilon_{ijk}\frac{2}{m}HL_k, \tag{4.1.27}$$

无疑，(4.1.25) 式、(4.1.26) 式和 (4.1.27) 式构不成一个封闭代数，原因在于在 (4.1.27) 式中存在 H，这使得很难把这些算符看作是一个连续对称性的生成元．然而，可以考虑特定的束缚态问题．在这种情况下，矢量空间被删减为只有 H 的本征态的那部分，其能量 $E<0$．在那种情况下，用 (4.1.27) 式中的 E 取代 H，于是这个代数就封闭了．富有启发的做法是，把 $\mathbf{M}$ 代之以重新标度的矢量算符

$$\mathbf{N}\equiv\left(-\frac{m}{2E}\right)^{1/2}\mathbf{M}. \tag{4.1.28}$$

在这种情况下，有封闭的代数

$$[L_i,L_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k, \tag{4.1.29a}$$

$$[N_i,L_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}N_k, \tag{4.1.29b}$$

$$[N_i,N_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k. \tag{4.1.29c}$$

那么，由 (4.1.29) 式中的算符 $\mathbf{L}$ 和 $\mathbf{N}$ 生成的对称性操作是什么呢？尽管还远非显然，但答案是“四维空间的转动”．第一个线索是生成元的个数，即六个，它们中的每一个都应当对应于绕某个轴的转动．把转动设想为一种将两个正交的轴混合起来的操作．那么，n 维空间中转动生成元的个数应该是 n 个东西每次取两个的组合数，即 $n(n-1)/2$．结果，二维转动要求一个生成元，即 L_z．三维转动要求三个生成元，即 $\mathbf{L}$，而四维转动要求六个生成元．

很难看到，(4.1.29) 式是这类转动的合适的代数，但是按如下步骤操作．在三维空间中，轨道角动量算符 (3.6.1) 式生成转动．在 (3.6.6) 式中清楚地看到了这一点，在那里 $|\alpha\rangle$ 态上绕 z 轴的一个无穷小转动在 $|x,y,z\rangle$ 基的一个转动后的版本中表示了出来．这恰是动量算符作为空间平移生成元的一种后果．事实上，像 $L_z=xp_y-yp_x$ 的这样一种组合的确把 x 轴与 y 轴混合起来，正如人们从绕 z 轴转动的生成元本应期待的那样．

为了把这个做法推广到四维空间，首先把 (x,y,z) 和 (p_x,p_y,p_z) 视为 (x_1,x_2,x_3) 和 (p_1,p_2,p_3)．它导致把生成元改写成 $L_3=\widetilde{L}_{12}=x_1p_2-x_2p_1$，$L_1=\widetilde{L}_{23}$ 和 $L_2=\widetilde{L}_{31}$．然

后，如果虚构一个空间维度 x_4 以及它的共轭动量 p_4（具有通常的对易关系），则可以定义

$$\widetilde{L}_{14} = x_1 p_4 - x_4 p_1 \equiv N_1, \tag{4.1.30a}$$

$$\widetilde{L}_{24} = x_2 p_4 - x_4 p_2 \equiv N_2, \tag{4.1.30b}$$

$$\widetilde{L}_{34} = x_3 p_4 - x_4 p_3 \equiv N_3, \tag{4.1.30c}$$

易证，这些算符 N_i 遵从代数（4.1.29）式. 例如，

$$\begin{aligned}[N_1, L_2] &= [x_1 p_4 - x_4 p_1, x_3 p_1 - x_1 p_3] \\ &= p_4[x_1, p_1]x_3 + x_4[p_1, x_1]p_3 \\ &= i\hbar(x_3 p_4 - x_4 p_3) = i\hbar N_3.\end{aligned} \tag{4.1.31}$$

换句话说，这是四维空间的代数. 稍后将回到这个符号，但是现在，将继续讨论由（4.1.14）式所隐含的库伦势中的简并性.

定义算符

$$\mathbf{I} \equiv (\mathbf{L} + \mathbf{N})/2, \tag{4.1.32}$$

$$\mathbf{K} \equiv (\mathbf{L} - \mathbf{N})/2, \tag{4.1.33}$$

可以容易地证明下列代数：

$$[I_i, I_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} I_k, \tag{4.1.34a}$$

$$[K_i, K_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} K_k, \tag{4.1.34b}$$

$$[I_i, K_j] = 0. \tag{4.1.34c}$$

因此，这些算符遵从独立的角动量代数. 而且显然还有 $[\mathbf{I}, H] = [\mathbf{K}, H] = 0$. 所以，这些“角动量”都是守恒量，于是，算符 $\mathbf{I}^2$ 和 $\mathbf{K}^2$ 的本征值分别用 $i(i+1)\hbar^2$ 和 $k(k+1)\hbar^2$ 代表，其中 $i, k = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$.

因为根据（4.1.23）和（4.1.28），$\mathbf{I}^2 - \mathbf{K}^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{N} = 0$，一定有 $i = k$. 另一方面，算符

$$\mathbf{I}^2 + \mathbf{K}^2 = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^2 + \mathbf{N}^2) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{L}^2 - \frac{m}{2E}\mathbf{M}^2\right) \tag{4.1.35}$$

和（4.1.24）一起，导致数值关系

$$2k(k+1)\hbar^2 = \frac{1}{2}\left(-\hbar^2 - \frac{m}{2E}Z^2 e^4\right). \tag{4.1.36}$$

解出 E，得知

$$E = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(2k+1)^2} \tag{4.1.37}$$

这个结果与（3.7.53）相同，只是主量子数 n 用 $2k+1$ 代替. 我们现在看到库仑问题的简并来源于由算符 $\mathbf{I}$ 和 $\mathbf{K}$ 表示的两个“转动”对称性. 事实上，简并度是 $(2i+1)(2k+1) = (2k+1)^2 = n^2$. 除了很显然这个简并不是偶然的之外，它正是我们在（3.7.56）式中所得到的结果.

值得注意的是，刚刚解出了氢原子的本征值，没有像过去那样诉诸求解薛定谔方程. 相反，利用了内在的对称性，得到了同样的答案. 这个解显然是泡利最早得到的.

用 3.3 节开始发展的连续群理论的语言，可得知代数（4.1.29）式对应于 SO(4) 群. 此外，把这个代数改写为（4.1.34）式表明，它还可以视为两个独立的 SU(2) 群，即 SU(2)×SU(2). 尽管把群论的介绍包括进来不是本书的目的，但仍将稍微地推进一步，

以表明人们如何从形式上实现 n 维空间的转动，即 SO(n) 群.

推广 3.3 节中的讨论，考虑实施 n 维转动的 $n\times n$ 正交矩阵 R. 它们可以参量化为

$$R=\exp\left(i\sum_{q=1}^{n(n-1)/2}\phi^q\tau^q\right). \tag{4.1.38}$$

其中 τ^q 是纯虚的反对称 $n\times n$ 矩阵，即 $(\tau^q)^T=-\tau^q$，而 ϕ^q 是广义转角. 反对称条件保证 R 是正交的. 整体的因子 i 意味着虚的矩阵 τ^q 也是厄米的.

τ^q 显然与转动算符的生成元有关. 事实上，它们的对易关系应当由这些生成元的对易关系模仿得到. 像 3.1 节那样接着做下去，把先绕 q 轴做无穷小转动，然后绕 p 轴转动，同相反次序的转动的作用结果作比较. 那么

$$\begin{aligned}(1+i\phi^p\tau^p)(1+i\phi^q\tau^q)-(1+i\phi^q\tau^q)(1+i\phi^p\tau^p)&\\ =-\phi^p\phi^q[\tau^p,\tau^q]&\\ =1-\left(1+i\phi^p\phi^q\sum_r f_r^{pq}\tau^r\right),&\end{aligned} \tag{4.1.39}$$

其中（4.1.39）式的最后一行确认，这个结果一定是一个绕这两个轴的二级转动，且带有生成元的某种线性组合. f_r^{pq} 称为这个转动群的结构常数. 于是有对易关系

$$[\tau^p,\tau^q]=i\sum_r f_r^{pq}\tau^r. \tag{4.1.40}$$

进一步需要确定这个结构常数 f_r^{pq}，这些细节留给专门的群论教科书. 然而不难证明，在三维如所预期的 $f_r^{pq}=\epsilon_{pqr}$.

4.2 分立对称性、宇称或空间反射

至此，连续对称性操作已经考虑了，即可以通过相继应用无穷小对称性操作得到的那些. 并非所有的在量子力学有用的对称性操作都一定是这种形式的. 在本章将考虑三种与连续性操作相反的、可以认为是分立的对称性操作——宇称、晶格平移和时间反演.

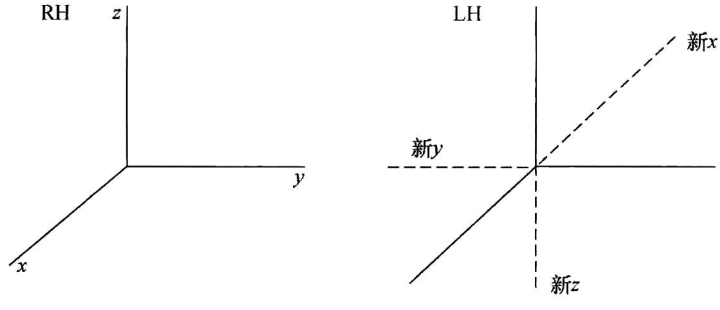


图 4.1 右手（RH）和左手（LH）坐标系

第一个要考虑的操作是**宇称**，或空间反射. 宇称操作应用于坐标系变换时，把一个右手（RH）坐标系变成一个左手（LH）坐标系，如图 4.1 所示. 然而本书中考虑的是对于态右矢的变换，而不是对于坐标系的变换. 给定 $|\alpha\rangle$，考虑一个空间反射态，假定它是通过一个所谓的**宇称算符**的幺正算符 π 的作用得到的，如下所示：

$$|\alpha\rangle\rightarrow\pi|\alpha\rangle. \tag{4.2.1}$$

要求 $\mathbf{x}$ 对于空间反射后的态所取的期待值有相反的符号

$$\langle\alpha|\pi^{\dagger}\mathbf{x}\pi|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\mathbf{x}|\alpha\rangle, \tag{4.2.2}$$

这是一个非常合理的要求. 如果

$$\pi^{\dagger}\mathbf{x}\pi = -\mathbf{x} \tag{4.2.3}$$

或

$$\mathbf{x}\pi = -\pi\mathbf{x}, \tag{4.2.4}$$

则该要求可以实现，其中用到了 π 是幺正的这一事实. 换句话说，$\mathbf{x}$ 和 π 必须反对易.

位置算符的本征右矢在宇称之下如何变换？可以断言

$$\pi|\mathbf{x}'\rangle = e^{i\delta}|-\mathbf{x}'\rangle, \tag{4.2.5}$$

其中 $e^{i\delta}$ 是一个相位因子（δ 为实数）. 为了证明这一说法成立，注意

$$\mathbf{x}\pi|\mathbf{x}'\rangle = -\pi\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = (-\mathbf{x}')\pi|\mathbf{x}'\rangle. \tag{4.2.6}$$

这个方程是说，$\pi|\mathbf{x}'\rangle$ 是 $\mathbf{x}$ 的一个本征右矢，其本征值为 $-\mathbf{x}'$，因此它一定与位置本征右矢 $|-\mathbf{x}'\rangle$ 相同，至多差一个相因子.

按惯例，取 $e^{i\delta}=1$ 作为约定. 把它带入到（4.2.5）式中，有 $\pi^2|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}'\rangle$. 因此，$\pi^2=1$，这就是说，用 π 作用两次，回到了原来的态. 从（4.2.5）式易见，π 现在不只是幺正的，而且也是厄米的：

$$\pi^{-1} = \pi^{\dagger} = \pi. \tag{4.2.7}$$

它的本征值只能是 $+1$ 或者 -1.

动量算符怎么样呢？动量 $\mathbf{p}$ 与 $md\mathbf{x}/dt$ 是一样的，所以自然地预期它在宇称作用之下，像 $\mathbf{x}$ 一样，是奇的. 更满意的论证把动量算符认为是平移生成元，正如可以从图 4.2 可以看出，平移之后紧接着宇称等价于宇称之后紧接着沿反方向的平移，因此

$$\pi\mathcal{J}(d\mathbf{x}') = \mathcal{J}(-d\mathbf{x}')\pi \tag{4.2.8}$$

$$\pi\left(1-\frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\pi^{\dagger} = 1+\frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}, \tag{4.2.9}$$

于是有

$$\{\pi,\mathbf{p}\} = 0 \quad 或 \quad \pi^{\dagger}\mathbf{p}\pi = -\mathbf{p}. \tag{4.2.10}$$

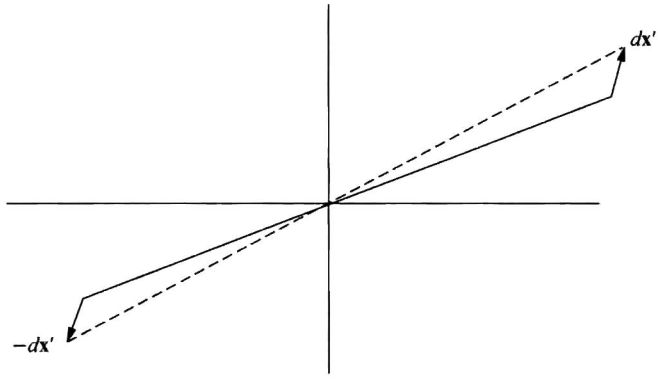


图 4.2　平移紧接着宇称或反过来

现在讨论在宇称之下 $\mathbf{J}$ 的行为. 首先，对于轨道角动量显然有

$$[\pi,\mathbf{L}] = 0 \tag{4.2.11}$$

因为

$$\mathbf{L} = \mathbf{x}\times\mathbf{p}. \tag{4.2.12}$$

而 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{p}$ 二者在宇称下均为奇．然而，要证明这个性质对于自旋也成立，最好利用 $\mathbf{J}$ 为转动生成元的事实．对于 3×3 正交矩阵，有

$$R^{(\text{宇称})}R^{(\text{转动})}=R^{(\text{转动})}R^{(\text{宇称})} \tag{4.2.13}$$

其中明确地写出来

$$R^{(\text{宇称})}=\begin{pmatrix}-1 & & 0\\ & -1 & \\ 0 & & -1\end{pmatrix}; \tag{4.2.14}$$

这就是说宇称和转动算符对易．在量子力学中，自然地假设对于幺正算符有相应的关系，因此

$$\pi\mathcal{D}(R)=\mathcal{D}(R)\pi, \tag{4.2.15}$$

其中，$\mathcal{D}(R)=1-i\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\varepsilon/\hbar$．从（4.2.15）式得出结论

$$[\pi,\mathbf{J}]=0 \quad 或 \quad \pi^{\dagger}\mathbf{J}\pi=\mathbf{J}. \tag{4.2.16}$$

该式与（4.2.11）式一起意味着自旋算符 $\mathbf{S}$（导致总角动量 $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$）也以和 $\mathbf{L}$ 一样的相同方式变换．

在转动下，$\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{J}$ 以相同方式变换，所以它们都是矢量，或秩为1的球张量．然而 $\mathbf{x}$（或 $\mathbf{p}$）在宇称下为奇，［见（4.2.3）式和（4.2.10）式］，而 $\mathbf{J}$ 在宇称下是偶的［见（4.2.16）式］．在宇称下为奇的矢量称为**极矢量**，而宇称下为偶的矢量称为**轴矢量**或**赝矢量**．

现在考虑像 $\mathbf{S}\cdot\mathbf{x}$ 这样的算符．在转动下，它们像普通标量一样的变换，比如 $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ 或 $\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}$ 那样．而在空间反射下有

$$\pi^{-1}\mathbf{S}\cdot\mathbf{x}\pi=-\mathbf{S}\cdot\mathbf{x}, \tag{4.2.17}$$

然而，对于通常的标量有

$$\pi^{-1}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\pi=\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \tag{4.2.18}$$

等．算符 $\mathbf{S}\cdot\mathbf{x}$ 是**赝标量**的一个例子．

宇称下的波函数

现在来看一看波函数的宇称性质．首先，设 ψ 是态右矢为 $|\alpha\rangle$ 的一个无自旋粒子的波函数：

$$\psi(\mathbf{x}')=\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle. \tag{4.2.19}$$

其空间反射态，由态右矢 $\pi|\alpha\rangle$ 表示，相应的波函数为

$$\langle\mathbf{x}'|\pi|\alpha\rangle=\langle-\mathbf{x}'|\alpha\rangle=\psi(-\mathbf{x}'). \tag{4.2.20}$$

假定 $|\alpha\rangle$ 是一个宇称的本征右矢．已知宇称的本征值一定是 ±1，所以

$$\pi|\alpha\rangle=\pm|\alpha\rangle. \tag{4.2.21}$$

看一看它的相应的波函数，

$$\langle\mathbf{x}'|\pi|\alpha\rangle=\pm\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle. \tag{4.2.22}$$

但是还有

$$\langle\mathbf{x}'|\pi|\alpha\rangle=\langle-\mathbf{x}'|\alpha\rangle, \tag{4.2.23}$$

所以在宇称下 $|\alpha\rangle$ 是偶的还是奇的依赖于相应的波函数是否满足

$$\psi(-\mathbf{x}')=\pm\psi(\mathbf{x}')\begin{cases}\text{偶宇称},\\ \text{奇宇称}.\end{cases} \tag{4.2.24}$$

并非所有物理上感兴趣的波函数都有（4.2.24）式意义上的确定宇称．例如，考虑动量本征右矢．动量算符与宇称算符反对易，所以人们预期动量本征右矢不是一个宇称本征右

矢. 的确，很容易看到，平面波，作为一个动量本征右矢的波函数，不满足（4.2.24）式.

预期轨道角动量的本征右矢是一个宇称本征右矢，因为 $\mathbf{L}$ 和 π 对易［见（4.2.11）式］. 为了看到 $\mathbf{L}^2$ 和 L_z 在宇称之下的行为，考察在空间反射下它的波函数

$$\langle \mathbf{x}'|\alpha,lm\rangle = R_\alpha(r)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{4.2.25}$$

的性质，变换 $\mathbf{x}'\to-\mathbf{x}'$ 可以通过设

$$\begin{aligned} &r\to r\\ &\theta\to\pi-\theta \quad (\cos\theta\to-\cos\theta)\\ &\phi\to\phi+\pi \quad (e^{im\phi}\to(-1)^m e^{im\phi}) \end{aligned} \tag{4.2.26}$$

来实现. 对于正的 m 以及（3.6.38）式，利用显式表示式

$$Y_l^m = (-1)^m\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \tag{4.2.27}$$

其中

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = \frac{(-1)^{m+l}}{2^l l!}\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\sin^{-|m|}\theta\left(\frac{d}{d(\cos\theta)}\right)^{l-|m|}\sin^{2l}\theta, \tag{4.2.28}$$

当 θ 和 ϕ 按照（4.2.26）式改变时，很容易证明

$$Y_l^m\to(-1)^l Y_l^m. \tag{4.2.29}$$

因此，得出

$$\pi|\alpha,lm\rangle = (-1)^l|\alpha,lm\rangle. \tag{4.2.30}$$

实际上，不必去看 Y_l^m，得到同样结果的更容易的方法是取 $m=0$，且注意到 $L_\pm^r|l,m=0\rangle$ $(r=0,1,\cdots,l)$ 一定具有同样的宇称，因为 π 与 $(L_\pm)^r$ 对易.

现在来看一看能量本征态的宇称性质，从一个非常重要的定理开始.

定理 4.1　假定

$$[H,\pi]=0 \tag{4.2.31}$$

而 $|n\rangle$ 是 H 的一个非简并的本征右矢，本征值为 E_n：

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle; \tag{4.2.32}$$

则 $|n\rangle$ 也是一个宇称的本征右矢.

证明　首先注意到

$$\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle \tag{4.2.33}$$

是一个本征值为 ±1（只要利用 $\pi^2=1$）的宇称本征右矢，来证明这个定理. 但是，它也是一个本征值为 E_n 的能量本征右矢. 此外，$|n\rangle$ 和（4.2.33）式必须代表相同的态；否则，就会存在两个态有相同的能量——这与非简并假设相矛盾. 因此可以得出结论，$|n\rangle$ 和（4.2.33）式是一样的，至多差一个相乘常数因子，一定是一个宇称为 ±1 的宇称本征右矢.

作为一个例子，看一看简谐振子. 基态 $|0\rangle$ 有偶宇称，因为它的波函数是高斯函数，在 $\mathbf{x}'\to-\mathbf{x}'$ 时是偶的. 第一激发态

$$|1\rangle = a^\dagger|0\rangle, \tag{4.2.34}$$

一定是奇宇称，因为 $a^\dagger$ 对 x 和 p 是线性的，它们都是奇的［见（2.3.2）式］. 一般而论，简谐振子的第 n 个激发态的宇称由 $(-1)^n$ 给出.

重要的是要注意，这里的非简并假设是至关重要的. 例如，考虑非相对论量子力学中

的氢原子. 众所周知，其能量本征值仅依赖于主量子数 n（例如，$2p$ 和 $2s$ 态是简并的）——库伦势在宇称之下显然是不变的——然而一个能量本征右矢

$$c_p|2p\rangle + c_s|2s\rangle \tag{4.2.35}$$

显然不是一个宇称本征右矢.

作为另一个例子，考虑一个动量本征右矢. 动量与宇称反对易，所以——尽管自由粒子哈密顿量 H 是宇称下不变量——动量本征右矢（尽管显然是一个能量本征右矢）不是一个宇称本征右矢. 我们的定理依然正确无误，因为在这里有 $|\mathbf{p}'\rangle$ 和 $|-\mathbf{p}'\rangle$ 之间的简并，二者有相同的能量. 事实上，可以很容易地构造线性组合 $(1/\sqrt{2})(|\mathbf{p}'\rangle \pm |-\mathbf{p}'\rangle)$，它们是宇称的本征右矢，本征值为 ± 1. 利用波函数的语言，$e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'/\hbar}$ 没有确定宇称，但是，$\cos\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'/\hbar$ 和 $\sin\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'/\hbar$ 都有确定宇称.

对称的双阱势

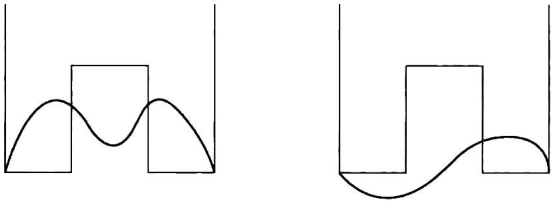


图 4.3 有两个最低态 $|S\rangle$（对称的）和 $|A\rangle$（反对称的）的对称双阱势

作为一个基本的但具有启发意义的例子，考虑一个对称的双阱势，见图 4.3. 哈密顿量显然在宇称下不变. 事实上，两个最低态如图 4.3 所示，通过在经典允许区求出明显包含正弦和余弦，而在经典禁戒区包含双曲正弦（sinh）和双曲余弦（cosh）的解，可以看到这一点. 在势能不连续处把这些解匹配起来，把它们称为**对称态** $|S\rangle$ 和**反对称态** $|A\rangle$. 当然，它们是 H 和 π 的共同本征右矢. 计算还表明，

$$E_A > E_S, \tag{4.2.36}$$

通过注意到反对称态的波函数具有更大的曲率，可以从图 4.3 推出这个结果. 如果中间的势垒很高，则能量差非常小，稍后将讨论这一点.

构造

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle + |A\rangle) \tag{4.2.37a}$$

和

$$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle - |A\rangle). \tag{4.2.37b}$$

(4.2.37a) 式和 (4.2.37b) 式的波函数的大部分分别集中在右边和左边. 它们显然不是宇称的本征态；事实上，在宇称下，$|R\rangle$ 和 $|L\rangle$ 互换. 注意，它们也不是能量本征态. 的确，它们是**非定态**的典型例子. 确切地讲，假定在 $t=0$ 时，系统由 $|R\rangle$ 表示. 在稍后时刻，则有

$$\begin{aligned} |R, t_0 = 0; t\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-iE_S t/\hbar}|S\rangle + e^{iE_A t/\hbar}|A\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_S t/\hbar}(|S\rangle + e^{i(E_A - E_S)t/\hbar}|A\rangle). \end{aligned} \tag{4.2.38}$$

在 $t = T/2 \equiv 2\pi\hbar/2(E_A - E_S)$ 时刻，发现系统处在纯 $|L\rangle$ 态. 在 $t=T$ 时刻，回到纯 $|R\rangle$，

依此类推. 于是，一般而言，我们有一个$|R\rangle$与$|L\rangle$之间的振荡，其角频率为

$$\omega = \frac{(E_A - E_S)}{\hbar}. \tag{4.2.39}$$

这种振荡行为也可以从量子力学穿透观点考虑. 原来被限制在右边的粒子可以通过经典禁戒区（中间的势垒）穿透到左边，然后返回到右边，依此类推. 但是现在设中间的势垒变成无穷高，如图 4.4 所示. 则$|S\rangle$和$|A\rangle$态现在是简并的，所以（4.2.37a）式和（4.2.37b）式也都是能量本征右矢，尽管它们都不是宇称本征右矢. 一旦系统被发现处在$|R\rangle$态，将会永远保持在那里（$|S\rangle$和$|A\rangle$之间的振荡时间现在是∞）. 因为这个中间势垒无穷高，没有任何穿透的可能性. 于是，当存在简并时，物理上可实现的能量本征右矢不需要是宇称本征右矢. 尽管哈密顿量本身在空间反射下是对称的，但因为有一个反对称的基态，所以在简并的情况下，H 的对称性不一定被能量本征态$|S\rangle$和$|A\rangle$所遵从.

这是破缺对称性和简并的一个非常简单的例子. 自然界充满了与此相类似的情况. 考虑一块铁磁体. 对于铁原子的基本哈密顿量是转动不变的，但是这块铁磁体明显地在空间有一个确定的方向；因此（无穷多个）基态都不是转动不变的，因为自旋都沿着某个确定的（但是任意的）方向排列起来.

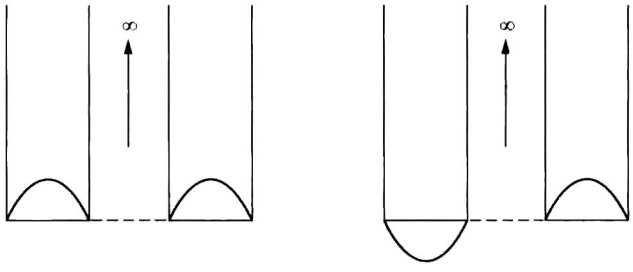


图 4.4　有无穷高中间势垒的对称双阱

教科书给出的证明对称双阱势实际重要性的系统的范例是一个氨分子 NH_3，如图 4.5 所示. 想象三个氢（H）原子形成一个等边三角形的三个角. 氮（N）原子可以在上方或在下方，其中上和下的方向都是确定的，因为正如图 4.5 所示的这个分子正在绕这个轴转动. 氮原子的上和下的两个位置类似于双阱势中的 R 和 L. 宇称和能量本征态分别为（4.2.37a）式和（4.2.37b）式意义上的图 4.5a 和图 4.5b 的叠加，而在能量和宇称的共同本征态之间的能量差对应于一个 24,000 MHz（兆赫）的振荡频率——大约 1cm 的波长，它是在微波范围. 事实上，NH_3 在微波激射器物理学中有着基本的重要性.

存在一些天然有机分子，诸如氨基酸和糖，它们都只是 R 类（或 L 类）的. 有确定手性的这样的一些分子称为**旋光异构体**. 在许多情况下，振荡时间实际上是无穷大——在 10^1 到 10^6 年的量级——因此，R 类分子对于所有的实用目的都保持为右手. 有趣的是，如果试图在实验室中合成这样的一些有机分子，会发现为 R 与 L 的均等的混合物. 为什么会有某一类占了优势，是自然界最深的奥秘. 这是由于一种像蜗牛的螺旋壳那样的遗传事故，还是由于事实上我们的心脏就是在左边呢？*

---

* 有人建议在生命形成期间活跃的核过程中的宇称破坏对于这种手性有贡献. 见 W. A. Bonner, *Parity Violation and the Evolution of Biomolecular Homochirality*, *Chirality*, **12**(2000)114.

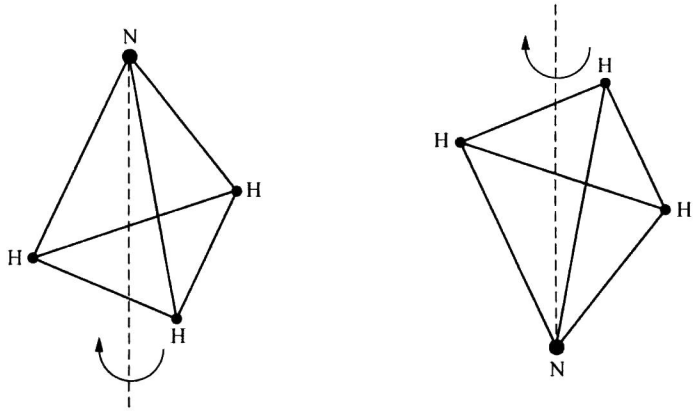


图 4.5 氨分子 NH_3，其中三个氢原子形成一个等边三角形的三个角顶

宇称-选择定则

假定 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 都是宇称本征态，

$$\pi|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle \tag{4.2.40a}$$

和

$$\pi|\beta\rangle = \varepsilon_\beta|\beta\rangle, \tag{4.2.40b}$$

其中 ε_α，ε_β 是宇称本征值（±1）. 可以证明，除非 $\varepsilon_\alpha = -\varepsilon_\beta$，否则

$$\langle\beta|\mathbf{x}|\alpha\rangle = 0. \tag{4.2.41}$$

换句话说，宇称为奇的算符 $\mathbf{x}$ 连接相反宇称的态. 该式证明如下：

$$\langle\beta|\mathbf{x}|\alpha\rangle = \langle\beta|\pi^{-1}\pi\mathbf{x}\pi^{-1}\pi|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha\varepsilon_\beta(-\langle\beta|\mathbf{x}|\alpha\rangle), \tag{4.2.42}$$

除非 ε_α 和 ε_β 符号相反，否则得到一个有限的、非零的 $\langle\beta|\mathbf{x}|\alpha\rangle$ 是不可能的. 如果 ψ_β 和 ψ_α 具有相同的宇称，则由下式

$$\int\psi_\beta^*\,\mathbf{x}\psi_\alpha d\tau = 0 \tag{4.2.43}$$

读者或许会熟悉这一论证. 最早由维格纳提出的这个选择定则对于讨论原子之间的辐射跃迁是重要的. 正如我们稍后将更详细地讨论的，辐射跃迁发生在有相反宇称的态之间是作为多级展开形式的一个后果. 在量子力学诞生之前，这个规则是从谱线分析唯象学上知道的，称作**拉波特（Laporte）规则**. 正是维格纳证明了拉波特规则是宇称选择定则的结果.

如果基本哈密顿量 H 是宇称下不变的，则非简并的能量本征态［作为（4.2.43）式的一个推论］不可能具有一个永久的电偶极矩：

$$\langle n|\mathbf{x}|n\rangle = 0. \tag{4.2.44}$$

该式可以从（4.2.43）式平凡导出，因为在非简并的假设下，能量本征态也是宇称本征态［见（4.2.32）式和（4.2.33）式］. 对于一个简并态，具有一个电偶极矩是完全没有问题的. 在第 5 章讨论线性斯塔克（Stark）效应时，将看到一个这样的例子.

可以考虑推广：宇称下为奇的算符，比如 $\mathbf{p}$ 或 $\mathbf{S}\cdot\mathbf{x}$，只在相反宇称的态之间有非零矩阵元. 相反，宇称下为偶的算符把相同宇称的态连接起来.

宇称不守恒

导致基本粒子的所谓弱相互作用的基本哈密顿量，在宇称下不是不变的．衰变过程中能有相反宇称态叠加的终态．像衰变产物的角分布那样的一些可观测量，可能依赖于诸如〈**S**〉·**p** 那样的赝标量．值得一提的是，以前人们一直都相信宇称守恒是一个不可动摇的神圣原理，直到 1956 年，李政道和杨振宁推测在弱相互作用中宇称不守恒，并且提出了一个检验宇称守恒的有效性的关键实验．随后进行的一些实验的确表明，一些可观测效应确实依赖于诸如〈**S**〉与 **p** 之间的关联那样的赝标量．

至今，宇称不守恒的最清晰的证明之一是最早的这个实验．其结果［见 Wu，Ambler，*Phys. Rev.* **105**（1957）1413］表明了一个依赖于〈**S**〉·**p** 的衰变率．观测的衰变是 $^{60}\mathrm{Co}\rightarrow{}^{60}\mathrm{Ni}+e^{-}+\bar{\nu}_e$，其中 **S** 是 ^{60}Co 原子核的自旋，发射的 e^{-} 动量是 **p**．自旋极化的放射性 ^{60}Co 原子核的样品在低温下制备，衰变得到的 e^{-} 在与自旋平行或反平行的方向探测，它依赖于极化磁场的符号．样品的极化通过观测激发的子核 ^{60}Ni 衰变中 γ 射线的各向异性监控，这是一个宇称守恒的效应．结果如图 4.6 所示．在几分钟的一段时间，样品升温，β 衰变不对称性消失，消失的速率与 γ 射线的各向异性消失的速率相同．

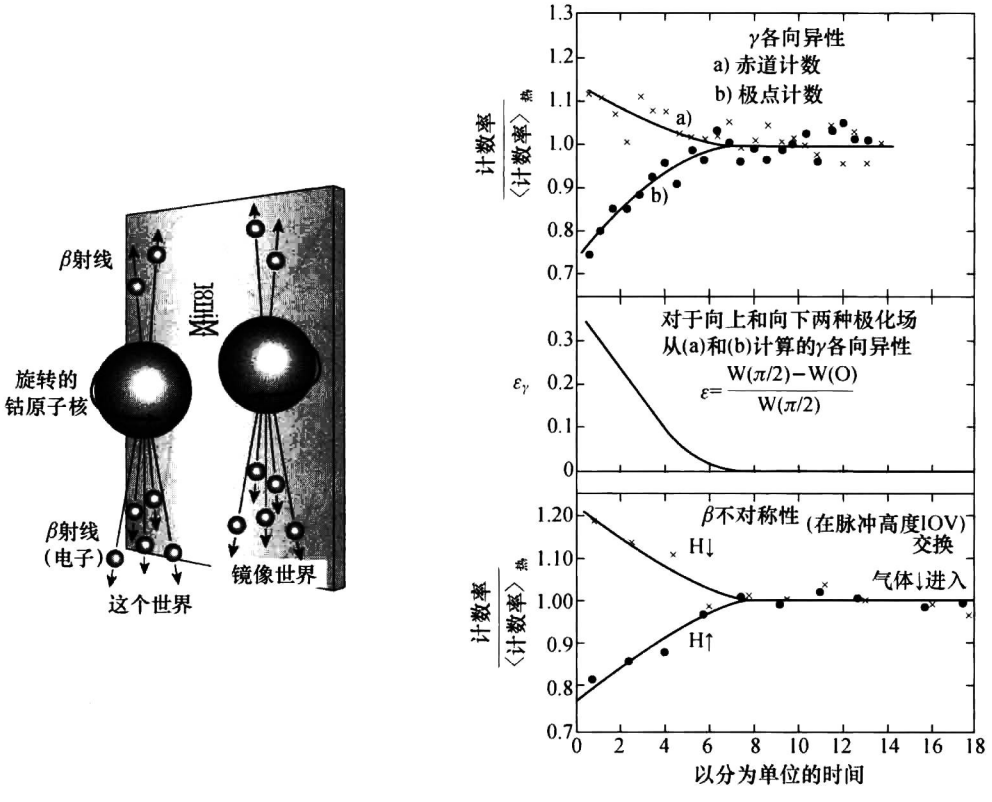


图 4.6　宇称不守恒的实验证明．左图显示的关键观测是按照其核自旋方向取向的放射性钴原子核优先沿反方向发射“β 射线”．右图显示的实验数据表明 β 衰变的上/下不对称性（底部的图框）如何完美地与标明核极化度（上部的图框）的信号相关联．随着时间的推移，样品发热而且钴原子核退极化．［右边的数据来自 Wu，*Phys. Rev.* **105**（1957）1413.］

因为在弱作用中宇称不守恒，以前认为是“纯”的核与原子的态实际上是宇称混合态. 这些难以捉摸的效应也在实验上发现了.

4.3 晶格平移作为一种分立对称性

现在考虑另一类分立对称性操作，即晶格平移. 这一主题在固体物理中有极为重要的应用.

考虑一个一维周期势，其中 $V(x\pm a)=V(x)$，如图 4.7 所示. 但实际上，可以考虑在一个空间位置等间隔排列的正离子链中一个电子的运动. 一般而言，这个哈密顿量在 l 取任意值时由 $\tau(l)$ 所表示的一个平移之下不是不变的，其中 $\tau(l)$ 有如下性质（见 1.6 节）

$$\tau^{\dagger}(l)x\tau(l)=x+l,\quad \tau(l)|x'\rangle=|x'+l\rangle. \tag{4.3.1}$$

然而，当 l 与晶格间距 a 相符时，会有

$$\tau^{\dagger}(a)V(x)\tau(a)=V(x+a)=V(x). \tag{4.3.2}$$

因为哈密顿量的动能部分在任何位移的平移下都是不变的，所以整个哈密顿量满足

$$\tau^{\dagger}(a)H\tau(a)=H. \tag{4.3.3}$$

因为 $\tau(a)$ 是幺正的，从（4.3.3）式有

$$[H,\tau(a)]=0, \tag{4.3.4}$$

因此该哈密顿量与 $\tau(a)$ 可以同时对角化. 尽管 $\tau(a)$ 是幺正的，但不是厄米的，所以它的本征值预期是一个模为 1 的复数.

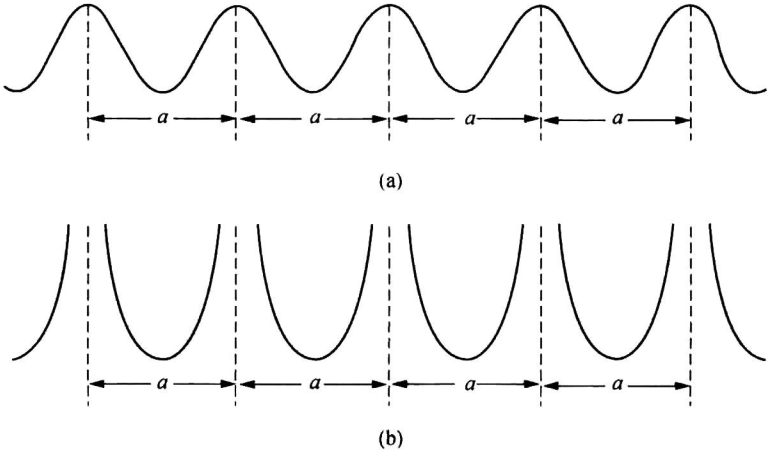


图 4.7 （a）周期为 a 的一维周期势.（b）当相邻两个格点之间势垒高度变成无穷大时的周期势

在确定 $\tau(a)$ 的本征右矢和本征值并考察它们的物理意义之前，富有启发意义的是，看一看如图 4.7b 所示的、当相邻两个格点之间势垒高度趋向无穷大时的周期势的特殊情况. 图 4.7b 位势的基态是什么呢？显然，粒子完全定位于晶格中的一个格点的态可能是基态的一个候选者. 为确定起见，假设粒子定位于第 n 个格点，并且用 $|n\rangle$ 代表相应的右矢. 这是一个能量本征右矢，其能量本征值为 E_0，即 $H|n\rangle=E_0|n\rangle$. 它的波函数 $\langle x'|n\rangle$ 仅在第 n 个格点处有限. 然而，注意到，定位于某另一格点的一个类似的态也有同样的能量 E_0，因此实际上有可数的无穷多个基态 n，其中的 n 从 $-\infty$ 到 ∞.

显然，$|n\rangle$ 不是一个晶格平移算符的本征右矢，因为当晶格平移算符作用于它时，得到 $|n+1\rangle$：

$$\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle. \tag{4.3.5}$$

所以，尽管事实上 $\tau(a)$ 与 H 对易，$|n\rangle$ ——是 H 的一个本征右矢——却不是 $\tau(a)$ 的一个本征右矢. 这一点与早些时候的对称性定理完全自洽，因为有一个无穷维简并. 当存在这样的简并时，这个世界的对称性不需要是能量本征态的对称性. 现在的任务是找到 H 与 $\tau(a)$ 的共同本征右矢.

在这里，可以回忆一下如何处理前一节有点类似的对称双阱势情况. 注意到，尽管 $|R\rangle$ 和 $|L\rangle$ 都不是 π 的本征右矢，却能够容易地构成 $|R\rangle$ 和 $|L\rangle$ 的一个对称组合与一个反对称组合，它们都是宇称的本征右矢. 这种情况与这里类似. 下面具体地构成一个线性组合

$$|\theta\rangle \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n\rangle, \tag{4.3.6}$$

其中的 θ 是一个实参量，取值为 $-\pi \leqslant \theta \leqslant \pi$. 可以断定 $|\theta\rangle$ 是 H 和 $\tau(a)$ 的一个共同本征右矢. 它是 H 的一个本征右矢是显然的，因为 $|n\rangle$ 是能量的一个本征右矢，本征值为 E_0，它不依赖于 n. 为了证明它也是晶格平移算符的一个本征右矢，用 $\tau(a)$ 如下作用

$$\begin{aligned}\tau(a)|\theta\rangle &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n+1\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(n-1)\theta}|n\rangle \\ &= e^{-i\theta}|\theta\rangle.\end{aligned} \tag{4.3.7}$$

注意，H 和 $\tau(a)$ 的这个共同本征右矢用一个连续参量 θ 参量化. 此外，能量本征值 E_0 不依赖于 θ.

现在回到图 4.7a 所示的更为现实的情况，在那里两个相邻格点之间的势垒不是无穷高. 可以构造一个局域的右矢 $|n\rangle$，它恰和前面一样，具有性质 $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$. 然而，这一次可以预期，由于量子力学穿透的结果，存在一些可能进入到相邻格点的泄漏. 换言之，波函数 $\langle x'|n\rangle$ 有一个尾巴延伸到第 n 个格点之外的一些格点中. 因为平移不变性，所以在基 $\{|n\rangle\}$ 中 H 的对角元都相等. 即

$$\langle n|H|n\rangle = E_0, \tag{4.3.8}$$

如前一样，它不依赖于 n. 然而，我们怀疑，作为泄漏的一个后果，在基 $\{|n\rangle\}$ 中 H 不能完全对角化. 现在，假定相邻格点之间的势垒很高（但不是无限高）. 那么可以预期，在距离远的格点之间 H 的矩阵元完全可以忽略. 假设唯一重要的一些非对角元连接最近邻. 这就是说

$$\langle n'|H|n\rangle \neq 0 \quad 反当\ n' = n \quad 或\ n' = n \pm 1, \tag{4.3.9}$$

在固体物理中，这种假设被称为**紧束缚近似**. 定义

$$\langle n \pm 1|H|n\rangle = -\Delta \tag{4.3.10}$$

显然，再一次由于哈密顿量的平移不变性，Δ 不依赖于 n. 在 $n \neq n'$ 时 $|n\rangle$ 和 $|n'\rangle$ 正交的范围内，得到

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle. \tag{4.3.11}$$

注意，$|n\rangle$ 不再是一个能量本征右矢.

正如图 4.7b 所示的位势情况下所做的，构成一个线性组合

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n\rangle. \tag{4.3.12}$$

显然，$|\theta\rangle$ 是平移算符 $\tau(a)$ 的本征右矢，因为（4.3.7）式中的那些步骤仍然成立. 一个自然的问题是，$|\theta\rangle$ 是一个能量本征右矢吗？为了回答这个问题，用 H 作用：

$$\begin{aligned} H\sum e^{in\theta}|n\rangle &= E_0\sum e^{in\theta}|n\rangle - \Delta\sum e^{in\theta}|n+1\rangle - \Delta\sum e^{in\theta}|n-1\rangle \\ &= E_0\sum e^{in\theta}|n\rangle - \Delta\sum (e^{in\theta-i\theta}+e^{in\theta+i\theta})|n\rangle \\ &= (E_0 - 2\Delta\cos\theta)\sum e^{in\theta}|n\rangle, \end{aligned} \tag{4.3.13}$$

该式与以前的情况之间的最大差别是，能量本征值现在依赖于连续的实参量 θ. 当 Δ 变成有限时，简并解除了，而且在 $E_0-2\Delta$ 和 $E_0+2\Delta$ 之间有了一个能量本征值的连续分布. 图 4.8 形象化地显示了随着 Δ 从零增大，能级如何开始形成一个连续的能带.

为了理解参量 θ 的物理意义，研究波函数 $\langle x'|\theta\rangle$. 对于晶格平移后的态 $\tau(a)|\theta\rangle$ 的波函数，通过让 $\tau(a)$ 作用在 $\langle x'|$ 上，有

$$\langle x'|\tau(a)|\theta\rangle = \langle x'-a|\theta\rangle. \tag{4.3.14}$$

也可以让 $\tau(a)$ 作用在 $|\theta\rangle$ 上，然后利用（4.3.7）式. 于是

$$\langle x'|\tau(a)|\theta\rangle = e^{-i\theta}\langle x'|\theta\rangle, \tag{4.3.15}$$

所以，

$$\langle x'-a|\theta\rangle = \langle x'|\theta\rangle e^{-i\theta} \tag{4.3.16}$$

通过设

$$\langle x'|\theta\rangle = e^{ikx'}u_k(x'), \tag{4.3.17}$$

且取 $\theta=ka$，求解上述方程，其中 $u_k(x')$ 是一个周期函数，周期为 a，通过明显地代换容易证明这一点，即

$$e^{ik(x'-a)}u_k(x'-a) = e^{ikx'}u_k(x')e^{-iku}. \tag{4.3.18}$$

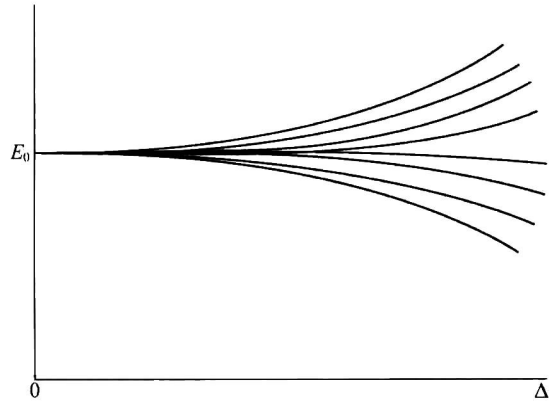


图 4.8 随着 Δ 从零增大，能级形成一个连续的能带

这样，得到**布洛赫（Bloch）定理**的重要条件：作为 $\tau(a)$ 的一个本征右矢，$|\theta\rangle$ 的波函数可以写成一个平面波 $e^{ikx'}$ 乘以一个周期为 a 的周期函数. 注意，利用的唯一的事实是 $|\theta\rangle$ 是 $\tau(a)$ 的一个本征右矢，本征值为 $e^{-i\theta}$［见（4.3.7）式］. 特别是，即使紧束缚近似（4.3.9）式被破坏了，这个定理仍然成立.

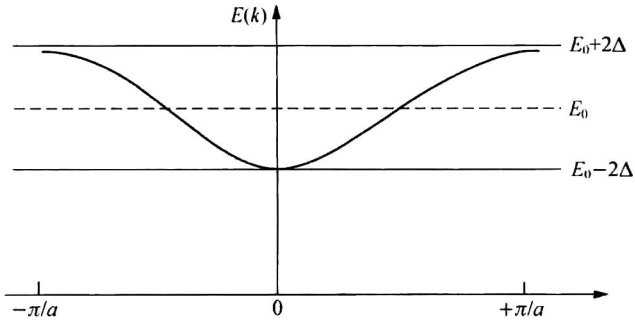


图 4.9　在布里渊区 $|k|\leqslant\pi/a$ 中 $E(k)$ 对 k 的色散曲线

现在解释对于 $|\theta\rangle$ 给出的较早一些的结果（4.3.13）式. 我们知道，这个波函数是一个平面波，由受到了一个周期函数 $u_k(x')$ 调制的、传播的波矢量 k 所表征［见（4.3.17）］. 当 θ 从 $-\pi$ 变到 π 时，波矢量 k 从 $-\pi/a$ 变到 π/a. 而能量本征值 E 现在对 k 的依赖关系如下：

$$E(k)=E_0-2\Delta\cos ka. \tag{4.3.19}$$

注意，只要紧束缚近似适用，这个能量本征值方程不依赖于位势的具体形状. 还要注意，布洛赫波函数（4.3.17）式的波矢量 k 中存在一个截断，由 $|k|=\pi/a$ 给出. 方程（4.3.19）式定义了一条色散曲线，如图 4.9 所示. 作为穿透的一个结果，可数的无穷多重简并现在完全解除了，而可允许的能量值在 $E_0-2\Delta$ 和 $E_0+2\Delta$ 之间形成，一个连续的带，所谓的**布里渊区**.

到此为止，我们仅仅考虑了一个粒子在周期势中运动. 在更为现实的情况下，必须考虑多个电子在这样的位势中运动. 实际上，电子满足泡利不相容原理，正如将在第 7 章更系统地讨论的那样，它们开始填充能带. 以这种方式，金属、半导体以及类似的材料的定性特点可以被理解为平移不变性加上不相容原理的一个推论.

读者可能已经注意到了 4.2 节的对称双阱问题与本节的周期势之间的相似性. 比较图 4.3 与图 4.7，注意到，它们可以看成是具有有限数目谷底的位势的两个相反的极端（2 与无限大）.

4.4　时间反演分立对称性

在这一节将研究另一种分立对称算符，所谓的**时间反演**. 对于初学者，这是一个困难的问题，部分原因是术语时间反演是一个误称，令人想起科幻小说. 在这一节所要做的，可以更合适地用术语运动反演来表征. 的确，这是由维格纳使用的短语，1932 年，他写的一篇非常基本的文章中明确表述了时间反演.

为使目的明确，来看一看经典力学. 假定有一条遭受到某一力场作用的粒子的运动轨道，见图 4.10. $t=0$ 时，让粒子停止，然后反演它的运动：$\mathbf{p}|_{t=0}\rightarrow-\mathbf{p}|_{t=0}$. 则该粒子反向遍历同样的轨道. 假如像（b）中那样向后倒着播放这个轨道（a）的运动图片，可能很难讲清楚这是否是正确的顺序.

更正式地讲，如果 $\mathbf{x}(t)$ 是下列方程的一个解：

$$m\ddot{\mathbf{x}}=-\nabla V(\mathbf{x}), \tag{4.4.1}$$

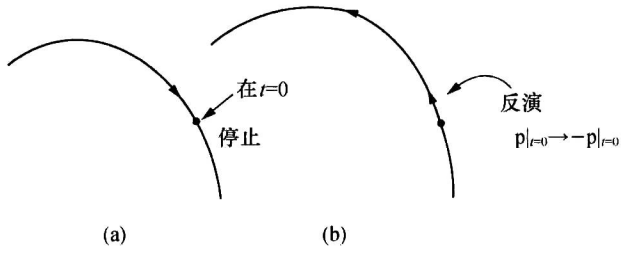


图 4.10 （a）$t=0$ 时停止的经典轨道，和（b）反演了它的运动，$\mathrm{p}|_{t=0}\to-\mathrm{p}|_{t=0}$

则 $\mathbf{x}(-t)$ 也是在由 V 导出的同样的力场中一个可能的解. 当然，特别要注意，在这里我们没有耗散力. 桌面上的一个滑块（由于摩擦力）逐渐减速并最终停了下来. 但是，你见过桌面上的滑块会自动开始运动并逐渐加速吗？

在有磁场存在的情况下，或许能够讲出这种差别. 设想正在拍摄在磁场中的一个做螺旋运动电子轨迹的运动图片. 通过比较旋转相对于标记为 N，S 磁极的感觉，或许能够辨别出运动图片是向前放还是向后倒着放. 然而，从微观观点看，**B** 是由移动的电荷通过电流产生的；假如能把引起 **B** 的电流也反演的话，则情况就会是完全对称的了. 依据图 4.11 所示的图像，你或许会已经猜测出 N 和 S 标错了！另外一种叙述这一切的更正式的方式是，麦克斯韦方程，例如

$$\nabla\cdot\mathbf{E}=4\pi\rho,\quad \nabla\times\mathbf{B}-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}=\frac{4\pi\mathbf{j}}{c},\quad \nabla\times\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t},\tag{4.4.2}$$

和洛伦兹力方程 $\mathbf{F}=e[\mathbf{E}+(1/c)(\mathbf{v}\times\mathbf{B})]$ 在 $t\to-t$ 之下是不变的，只要令

$$\mathbf{E}\to\mathbf{E},\quad \mathbf{B}\to-\mathbf{B},\quad \rho\to\rho,\quad \mathbf{j}\to-\mathbf{j},\quad \mathbf{v}\to-\mathbf{v}.\tag{4.4.3}$$

现在看一看波动力学的基本方程，即薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi.\tag{4.4.4}$$

假定 $\psi(\mathbf{x},t)$ 是一个解. 容易证明 $\psi(\mathbf{x},-t)$ 不是一个解，因为出现了一阶时间的微商. 然而，$\psi^*(\mathbf{x},-t)$ 是一个解，这一点你可以通过取（4.4.4）式的复共轭证实. 有启发意义的是，对于一个能量本征态说服自己相信这一点，即通过把

$$\psi(\mathbf{x},t)=u_n(\mathbf{x})e^{-iE_nt/\hbar},\quad \psi^*(\mathbf{x},-t)=u_n^*(\mathbf{x})e^{-iE_nt/\hbar}\tag{4.4.5}$$

代入到薛定谔方程（4.4.4）式中. 因此，可以猜测时间反演一定与复共轭有某种关系. 如果 $t=0$ 时，波函数由下式给出：

$$\psi=\langle\mathbf{x}|\alpha\rangle,\tag{4.4.6}$$

则相应的时间反演态波函数由 $\langle\mathbf{x}|\alpha\rangle^*$ 给出. 稍后将证明，对于一个无自旋系统波函数，情况确是如此. 作为一个例子，可以容易地对于一个平面波的波函数检验这一点，见本章的习题 4.8.

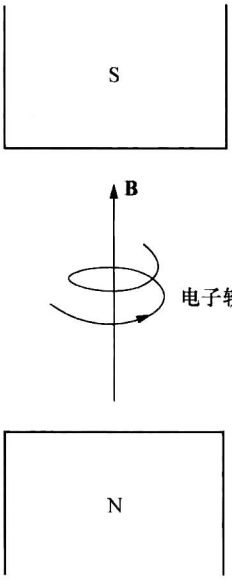


图 4.11 在一块磁体的南北极之间电子的轨迹

关于对称性操作的题外话

在开始系统处理时间反演算符之前，关于对称性操作给出一些一般性的评论是很合适的. 考虑一种对称性操作

$$|\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle, \quad |\beta\rangle \to |\tilde{\beta}\rangle. \tag{4.4.7}$$

要求内积 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 保持不变是很自然的，这就是说

$$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle. \tag{4.4.8}$$

的确，对于诸如转动、平移、甚至是宇称等这类对称操作，情况确是如此. 如果 $|\alpha\rangle$ 被转动了，而 $|\beta\rangle$ 也按相同方式被转动了，则 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 是不变的. 从形式上讲，这源自这样一件事实，即对于前几节中考虑的对称操作，相应的对称算符是幺正的，因此，

$$\langle\beta|\alpha\rangle \to \langle\beta|U^{\dagger}U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle. \tag{4.4.9}$$

然而，在讨论时间反演时，可以看到（4.4.8）式的要求被证明是限制太严了. 的确，只要强加更弱的要求

$$|\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle| = |\langle\beta|\alpha\rangle|. \tag{4.4.10}$$

则（4.4.8）式的要求显然满足（4.4.10）式. 但是，这不是唯一的方式；

$$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^{*} = \langle\alpha|\beta\rangle \tag{4.4.11}$$

同样也可用. 本节中采用后一种可能性，因为，从早些时候基于对薛定谔方程的讨论，推断出时间反演与复共轭有某种联系.

定义　变换

$$|\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle = \theta|\alpha\rangle, \quad |\beta\rangle \to |\tilde{\beta}\rangle = \theta|\beta\rangle \tag{4.4.12}$$

被称为**反幺正的**，如果

$$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^{*}, \tag{4.4.13a}$$

$$\theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^{*}\theta|\alpha\rangle + c_2^{*}\theta|\beta\rangle. \tag{4.4.13b}$$

在这样的情况下，算符 θ 是一个反幺正算符. 关系式（4.4.13b）独自定义一个**反线性**算符.

现在要求一个反幺正算符可以写成

$$\theta = UK, \tag{4.4.14}$$

其中 U 是一个幺正算符，而 K 是复共轭算符，它使乘在一个右矢上的任何系数（位于 K 的右边）变成复共轭. 在检验（4.4.13）式之前，先考察 K 算符的性质. 假定有一个乘上一复数 c 的右矢. 则有

$$Kc|\alpha\rangle = c^{*}K|\alpha\rangle. \tag{4.4.15}$$

人们可能进一步问，如果 $|\alpha\rangle$ 用基右矢 $\{|a'\rangle\}$ 展开会发生什么？在 K 的作用下，有

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \xrightarrow{K} |\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^{*}K|a'\rangle \\ &= \sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^{*}|a'\rangle. \end{aligned} \tag{4.4.16}$$

注意，K 作用于基右矢上不改变这个基右矢. $|a'\rangle$ 的显式表示式是

$$|a'\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.4.17}$$

因而，没有任何会被 K 改变的. 读者可能疑惑，例如，对于一个自旋$\frac{1}{2}$系统，S_y 本征右矢在 K 下是否改变. 答案是，如果 S_z 本征右矢被用作基右矢时，则必须把 S_y 本征右矢改变，因为 S_y 本征右矢（1.1.14）式在 K 作用下经受

$$K\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle\right) \to \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \mp \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle. \tag{4.4.18}$$

另一方面，如果 S_y 本征右矢自身被用作基右矢时，则在 K 作用下，不改变 S_y 本征右矢. 因此，K 的效果随基改变. 作为结果，在（4.4.14）式中的 U 的形式也依赖于所用的特殊的表象（即基右矢的选择）.

回到 $\theta=UK$ 和（4.4.13）式，首先检验性质（4.4.13b）式. 有

$$\begin{aligned} \theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) &= UK(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) \\ &= c_1^* UK|\alpha\rangle + c_2^* UK|\beta\rangle \\ &= c_1^*\theta|\alpha\rangle + c_2^*\theta|\beta\rangle. \end{aligned} \tag{4.4.19}$$

所以，（4.4.13b）式的确成立. 在检验（4.4.13a）式之前，可以断言在 θ 只作用于右矢时，使用该式总是安全的. 恰是通过观察相应的右矢，可以想到左矢会如何改变. 特别是，不必考虑 θ 从右边作用在左矢上，也不必定义 $\theta^\dagger$. 有

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle \xrightarrow{\theta} |\tilde{\alpha}\rangle &= \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* UK|a'\rangle \\ &= \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* U|a'\rangle \\ &= \sum_{a'} \langle \alpha|a'\rangle^* U|a'\rangle. \end{aligned} \tag{4.4.20}$$

至于 $|\beta\rangle$，有

$$\begin{aligned} |\tilde{\beta}\rangle &= \sum_{a'} \langle a'|\beta\rangle^* U|a'\rangle \overset{IX}{\leftrightarrow} \langle\tilde{\beta}| = \sum_{a'} \langle a'|\beta\rangle\langle a'|U^\dagger \\ \langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle &= \sum_{a''}\sum_{a'} \langle a''|\beta\rangle\langle a''|U^\dagger U|a'\rangle\langle\alpha|a'\rangle \\ &= \sum_{a'} \langle\alpha|a'\rangle\langle a'|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle \\ &= \langle\beta|\alpha\rangle^*, \end{aligned} \tag{4.4.21}$$

于是该式得到了检验.（回忆一下 1.2 节的“对偶对应”，或 DC 符号.）

为使（4.4.10）式得到满足，物理上感兴趣的是只考虑两类变换——幺正的和反幺正的. 其他的可能性都与前述的这两种中任何一种通过平凡的相位改变联系起来. 证明这一断言实际非常困难，在这里不再进一步讨论. 然而，可以参见 Gottfried 和 Yan（2003），7.1 节.

时间反演算符

现在终于能够给出时间反演的一种形式理论了. 时间反演算符用 Θ 代表，以便与一个一般的反幺正算符 θ 区分开. 考虑

$$|\alpha\rangle \to \Theta|\alpha\rangle, \tag{4.4.22}$$

其中，$\Theta|\alpha\rangle$ 是时间反演态. 更恰当地，$\Theta|\alpha\rangle$ 应当称为运动反演态. 如果 $|\alpha\rangle$ 是一个动量本征态 $|\mathbf{p}'\rangle$，则预期 $\Theta|\alpha\rangle$ 是 $|-\mathbf{p}'\rangle$，至多差一个可能的相位. 同样地，在时间反演下 $\mathbf{J}$ 也被反转.

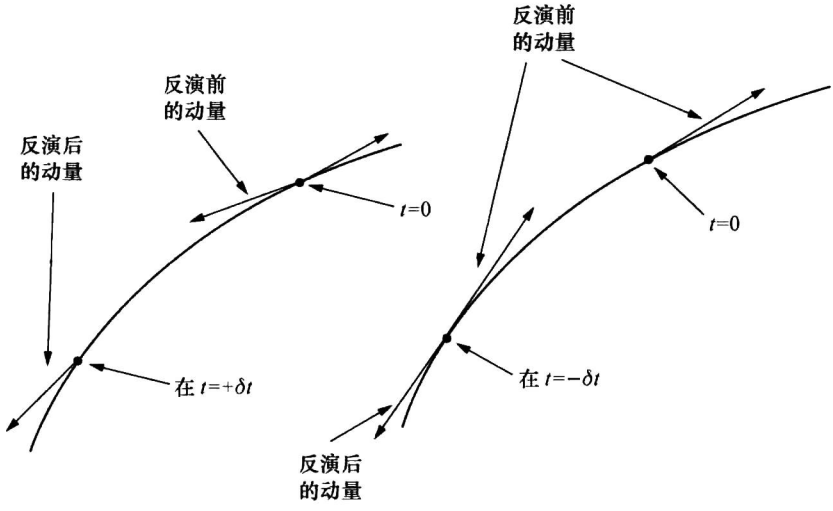


图 4.12　在 $t=0$ 和 $t=\pm\delta t$ 时刻，时间反演之前与之后的动量

现在，通过观察时间反演态的时间演化，推导时间反演算符的基本性质. 考虑一个物理系统，在 $t=0$ 时，由右矢 $|\alpha\rangle$ 表示. 那么，在稍后时刻，$t=\delta t$，发现系统处在

$$|\alpha, t_0 = 0; t = \delta t\rangle = \left(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\right)|\alpha\rangle, \tag{4.4.23}$$

其中，H 是表征时间演化的哈密顿量. 代替上面的这个方程，假定 $t=0$ 时，先作用 Θ，而然后让系统在哈密顿量 H 的影响下演化. 那么，在 δt 时，有

$$\left(1 - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right)\Theta|\alpha\rangle. \tag{4.4.24a}$$

如果运动遵从时间反演下的对称性，预期上述的态右矢与下式相同

$$\Theta|\alpha, t_0 = 0; t = -\delta t\rangle. \tag{4.4.24b}$$

这就是说，先考虑在早些时刻 $t=-\delta t$ 的一个态右矢，然后反转 $\mathbf{p}$ 和 $\mathbf{J}$，见图 4.12. 数学上有

$$\left(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\right)\Theta|\alpha\rangle = \Theta\left(1 - \frac{iH}{\hbar}(-\delta t)\right)|\alpha\rangle. \tag{4.4.25}$$

如果上述关系对任何右矢都对，必须有

$$-iH\Theta|\rangle = \Theta iH|\rangle, \tag{4.4.26}$$

其中，空的 $|\rangle$ 强调，(4.2.26) 式对任何右矢都成立.

现在论证，如果时间反演的运动有意义，Θ 不可能是幺正的. 假定 Θ 真是幺正的，那

么消掉（4.4.26）式中的 i 就会是合理的了，于是就会有算符方程：

$$-H\Theta = \Theta H. \tag{4.4.27}$$

考虑一个能量本征态 $|n\rangle$，其能量本征值为 E_n. 相应的时间反演态就会是 $\Theta|n\rangle$，并且由于（4.4.27）式，就会有

$$H\Theta|n\rangle = -\Theta H|n\rangle = (-E_n)\Theta|n\rangle. \tag{4.4.28}$$

这个方程表明，$\Theta|n\rangle$ 是哈密顿量的一个本征右矢，能量本征值为 $-E_n$，但是，甚至在自由粒子这种非常基本的情况下，这也是荒谬的. 众所周知，自由粒子的能量谱是半正定的——从0到$+\infty$. 不存在任何比静止粒子（动量本征值为零的动量本征态）还要低的态；能谱从$-\infty$到0的范围是完全不可接受的. 通过观察自由粒子哈密顿量的结构也可以看到这一点. 预期 $\mathbf{p}$ 改变符号，但 $\mathbf{p}^2$ 不会；然而（4.4.27）式会意味着

$$\Theta^{-1}\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\Theta = \frac{-\mathbf{p}^2}{2m}. \tag{4.4.29}$$

所有这些论证都强烈地暗示，如果时间反演果真是一个有用的对称性，就不会允许消去（4.4.26）式中的 i；因此，Θ 更为恰当的是反幺正的. 在这种情况下，根据反线性（4.4.13b）式，（4.4.26）式的右边变成

$$\Theta iH|\rangle = -i\Theta H|\rangle. \tag{4.4.30}$$

现在，终于可以消去（4.4.26）式中的 i 了. 通过（4.4.30）式，这最终导致

$$\Theta H = H\Theta. \tag{4.4.31}$$

方程（4.4.31）式表示了哈密顿量在时间反演下的基本性质. 用了这个方程，早些时候提到的困难［见（4.4.27）式到（4.4.29）式］不再存在，因而得到了物理上合理的结果. 从现在起，Θ 总是取为反幺正的.

早些时候曾提到过，最好避免一个反幺正算符从右边作用于左矢上. 不过，可以用

$$\langle\beta|\Theta|\alpha\rangle. \tag{4.4.32}$$

它总是理解为

$$(\langle\beta|)\cdot(\Theta|\alpha\rangle) \tag{4.4.33}$$

而绝不是

$$(\langle\beta|\Theta)\cdot|\alpha\rangle). \tag{4.4.34}$$

事实上不打算定义 $\langle\beta|\Theta$. 这是一处狄拉克的左矢-右矢符号有点混淆的地方. 毕竟，这个符号被发明用来处理线性算符，而不是反线性算符.

伴随这种警示评注，有必要讨论算符在时间反演下的行为. 继续采用这样的观点，即 Θ 算符作用于右矢上

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta|\alpha\rangle, \quad |\tilde{\beta}\rangle = \Theta|\beta\rangle, \tag{4.4.35}$$

谈论算符——特别是可观测量——在时间反演下是奇的或偶的，通常也是很方便的. 从一个重要的恒等式开始：

$$\langle\beta|\otimes|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta\otimes^{\dagger}\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle, \tag{4.4.36}$$

其中$\otimes$是个线性算符. 这个恒等式单由 Θ 的反幺正即可得到. 要证明这一点，定义

$$|\gamma\rangle \equiv \otimes^{\dagger}|\beta\rangle. \tag{4.4.37}$$

通过对偶对应，有

$$|\gamma\rangle \overset{DC}{\leftrightarrow} \langle\beta|\otimes = \langle\gamma|. \tag{4.4.38}$$

因此，

$$\begin{aligned}\langle\beta|\otimes|\alpha\rangle &= \langle\gamma|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\tilde{\gamma}\rangle \\ &= \langle\tilde{\alpha}|\Theta\otimes^{\dagger}|\beta\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta\otimes^{\dagger}\Theta^{-1}\Theta|\beta\rangle \\ &= \langle\tilde{\alpha}|\Theta\otimes^{\dagger}\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle,\end{aligned} \tag{4.4.39}$$

它证明了这个恒等式. 特别是，对于厄米可观测量 A，得到

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle. \tag{4.4.40}$$

可观测量在时间反演下是偶的还是奇的，按照在下式有上面的符号还是下面的符号：

$$\Theta A\Theta^{-1} = \pm A. \tag{4.4.41}$$

注意，这个方程，与（4.4.40）式一起，对于 A 对时间反演态取的矩阵元给了一个相位限制如下：

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle = \pm\langle\tilde{\beta}|A|\tilde{\alpha}\rangle^{*}, \tag{4.4.42}$$

如果 $|\beta\rangle$ 恒等于 $|\alpha\rangle$，正在谈的就是关于期待值的，有

$$\langle\alpha|A|\alpha\rangle = \pm\langle\tilde{\alpha}|A|\tilde{\alpha}\rangle. \tag{4.4.43}$$

其中 $\langle\tilde{\alpha}|A|\tilde{\alpha}\rangle$ 是对时间反演态取的期待值.

作为一个例子，看一看 $\mathbf{p}$ 的期待值. 假定 $\mathbf{p}$ 对于时间反演态取的期待值将有相反的符号是合理的. 这样

$$\langle\alpha|\mathbf{p}|\alpha\rangle = -\langle\tilde{\alpha}|\mathbf{p}|\tilde{\alpha}\rangle. \tag{4.4.44}$$

因此，取 $\mathbf{p}$ 是个奇算符，即

$$\Theta\mathbf{p}\Theta^{-1} = -\mathbf{p}. \tag{4.4.45}$$

这意味着

$$\begin{aligned}\mathbf{p}\Theta|\mathbf{p}'\rangle &= -\Theta\mathbf{p}\Theta^{-1}\Theta|\mathbf{p}'\rangle \\ &= (-\mathbf{p}')\Theta|\mathbf{p}'\rangle.\end{aligned} \tag{4.4.46}$$

方程（4.4.46）式符合早些时候的断言：$\Theta|\mathbf{p}'\rangle$ 是一个动量的本征态，本征值为 $-\mathbf{p}'$. 在适当选择的相位下，它可以认为就是 $|-\mathbf{p}'\rangle$ 本身. 同样地，得到

$$\begin{aligned}&\Theta\mathbf{x}\Theta^{-1} = \mathbf{x} \\ &\Theta|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}'\rangle \quad \text{（至多差一个相因子）}\end{aligned} \tag{4.4.47}$$

它来自下列（绝对合理的）要求：

$$\langle\alpha|\mathbf{x}|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\mathbf{x}|\tilde{\alpha}\rangle. \tag{4.4.48}$$

现在来核对基本对易关系

$$[x_i, p_j]|\rangle = i\hbar\delta_{ij}|\rangle \tag{4.4.49}$$

的不变性，其中的空右矢 $|\rangle$ 代表任何右矢. 把 Θ 作用于（4.4.49）式的两边，有

$$\Theta[x_i, p_j]\Theta^{-1}\Theta|\rangle = \Theta i\hbar\delta_{ij}|\rangle, \tag{4.4.50}$$

在 Θ 跨过 $i\hbar$ 之后，该式导致

$$[x_i, (-p_j)]\Theta|\rangle = -i\hbar\delta_{ij}\Theta|\rangle. \tag{4.4.51}$$

注意，基本对易关系 $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ 凭借 Θ 是反幺正的而得以保持不变. 这也可以作为取 Θ 为反幺正的另一个理由；否则的话，不得不放弃或者（4.4.45）式、或者（4.4.47）式！类似地，要保持

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k, \tag{4.4.52}$$

角动量算符在时间反演下必须是奇的，即

$$\Theta\mathbf{J}\Theta^{-1} = -\mathbf{J}. \tag{4.4.53}$$

对于一个无自旋系统该式是事实自洽的，因为 $\mathbf{J}$ 恰为 $\mathbf{x}\times\mathbf{p}$. 作为一种选择，通过注意到转

动算符和时间反演算符对易（注意额外的 i!）也能够推导出这个关系.

波函数

假定在某一给定时刻，比如在 $t=0$ 时，一个无自旋单粒子系统被发现处在由 $|\alpha\rangle$ 表示的一个态中. 它的波函数 $\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle$ 表现为位置表象中的展开系数

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle. \tag{4.4.54}$$

作用上时间反演算符，得到

$$\begin{aligned}\Theta|\alpha\rangle &= \int d^3x' \Theta|\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle^* \\ &= \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle^*,\end{aligned} \tag{4.4.55}$$

其中选择相位规则，以使 $\Theta|\mathbf{x}'\rangle$ 就是 $|\mathbf{x}'\rangle$ 自己. 那么重新获得如下规则

$$\psi(\mathbf{x}') \to \psi^*(\mathbf{x}') \tag{4.4.56}$$

它在早些时候通过观察薛定谔波动方程［见（4.4.5）式］而推论得到. 波函数的角度部分由球谐函数 Y_l^m 给出. 在通常的相位约定下，有

$$Y_l^m(\theta,\phi) \to Y_l^{m*}(\theta,\phi) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta,\phi). \tag{4.4.57}$$

既然，$Y_l^m(\theta,\phi)$ 是 $|l,m\rangle$ 的波函数［见（3.6.23）式］；因此，从（4.4.56）式，导出

$$\Theta|l,m\rangle = (-1)^m|l,-m\rangle. \tag{4.4.58}$$

如果对于一个（3.6.22）式类型的、样子像 $R(r)Y_l^m$ 的波函数，研究概率流密度（2.4.16）式，将得到结论，对于 $m>0$，从 z 轴正方向看，流密度沿逆时针方向流动. 而对于相应的时间反演态的波函数，其概率流密度沿相反方向流动，因为 m 的符号反过来了. 所有的这些都是非常合理的.

作为时间反演不变性的一个非平凡结果，我们陈述一个关于无自旋粒子能量本征函数的实性的重要定理.

定理 4.2 假定哈密顿量在时间反演下不变，而且能量本征右矢 $|n\rangle$ 是非简并的；则相应的能量本征函数是实的（或者，更一般地，一个实函数乘上一个不依赖于 $\mathbf{x}$ 的相因子.）

证明 要证明这个定理，首先注意到

$$H\Theta|n\rangle = \Theta H|n\rangle = E_n\Theta|n\rangle. \tag{4.4.59}$$

所以 $|n\rangle$ 和 $\Theta|n\rangle$ 有相同的能量. 非简并假设促使我们得到结论：$|n\rangle$ 和 $\Theta|n\rangle$ 一定代表同一个态；否则的话，就会有两个不同的态有同样的能量 E_n，显然矛盾！回忆一下，对于 $|n\rangle$ 和 $\Theta|n\rangle$ 的波函数，分别为 $\langle \mathbf{x}'|n\rangle$ 和 $\langle \mathbf{x}'|n\rangle^*$. 它们一定是相同的——即实际上，

$$\langle \mathbf{x}'|n\rangle = \langle \mathbf{x}'|n\rangle^* \tag{4.4.60}$$

——或者更精确地说，它们至多可以差一个与 $\mathbf{x}$ 无关的相因子.

这样，如果有一个非简并的束缚态，它的波函数总是实的. 另一方面，对于 $l\neq 0, m\neq 0$ 的氢原子，用确定的量子数 (n,l,m) 表征的能量本征函数是复的，因为 Y_l^m 是复的；这与该定理并不矛盾，因为 $|n,l,m\rangle$ 与 $|n,l,-m\rangle$ 是简并的. 类似地，平面波的波函数 $e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$ 是复的，但是它是和 $e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$ 简并的.

可以看到，对于一个无自旋系统，时间反演态的波函数，比如说在 $t=0$ 时刻，通过

求复共轭就可以直接得到. 按照写成 (4.4.16) 式或 (4.4.54) 式形式的右矢$|\alpha\rangle$，算符 Θ 就是复共轭算符 K 本身，因为 K 和 Θ 当作用于基右矢$|\alpha'\rangle$ (或$|\mathbf{x}'\rangle$) 时，有同样的效果. 然而，注意到，当右矢$|\alpha\rangle$ 用动量本征右矢展开时，情况完全不同，因为 Θ 一定会如下把$|\mathbf{p}'\rangle$ 变成$|-\mathbf{p}'\rangle$：

$$\Theta|\alpha\rangle = \int d^3p'|-\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'|\alpha\rangle^* = \int d^3p'|\mathbf{p}'\rangle\langle-\mathbf{p}'|\alpha\rangle^*. \tag{4.4.61}$$

显然，时间反演态的动量空间波函数不只是原来动量空间波函数的复共轭；更恰当地是，必须把 $\phi^*(-\mathbf{p}')$ 认同为时间反演态的动量空间波函数. 这种情况再一次说明关键之点在于，Θ 的特殊形式依赖于所用的特殊表象.

对于自旋$\frac{1}{2}$系统的时间反演

对于一具有自旋——特别是自旋$\frac{1}{2}$——的粒子情况甚至更有趣. 由 3.2 节回忆起，$\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ 的本征值为 $\hbar/2$ 的本征右矢可以写成

$$|\hat{\mathbf{n}};+\rangle = e^{-iS_z\alpha/\hbar}e^{-iS_y\beta/\hbar}|+\rangle, \tag{4.4.62}$$

其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 由分别为 β 和 α 的极角和方位角表征. 注意 (4.4.53) 式，有

$$\Theta|\hat{\mathbf{n}};+\rangle = e^{-iS_z\alpha/\hbar}e^{-iS_y\beta/\hbar}\Theta|+\rangle = \eta|\hat{\mathbf{n}};-\rangle. \tag{4.4.63}$$

另一方面，可以很容易地证明

$$|\hat{\mathbf{n}};-\rangle = e^{-i\alpha S_z/\hbar}e^{-i(\pi+\beta)S_y/\hbar}|+\rangle. \tag{4.4.64}$$

一般地，早些时候曾注意到，乘积 UK 是一个反幺正算符. 把 (4.4.63) 式与 (4.4.64) 式相比较，并设 Θ 等于 UK，而且注意到 K 作用于基右矢$|+\rangle$ 仍只给出$|+\rangle$，得到

$$\Theta = \eta e^{-i\pi S_y/\hbar}K = -i\eta\left(\frac{2S_y}{\hbar}\right)K \tag{4.4.65}$$

其中 η 代表一个任意的相位 (一个模为 1 的复数). 另一种使我们相信 (4.4.65) 式的方法是证明，如果 $\chi(\hat{\mathbf{n}};+)$是相应于$|\hat{\mathbf{n}};+\rangle$的二分量本征旋量 [在 $\sigma\cdot\hat{\mathbf{n}}\chi(\hat{\mathbf{n}};+)=\chi(\hat{\mathbf{n}};+)$ 的意义上]，则

$$-i\sigma_y\chi^*(\hat{\mathbf{n}};+) \tag{4.4.66}$$

(注意复共轭!)是相应于$|\hat{\mathbf{n}};-\rangle$的本征旋量，再一次最多差一个任意的相位，见本章的习题 4.7. S_y 或 σ_y 的出现可以追溯到这样的一件事实，即正在使用的表象是其中 S_z 为对角，而 S_y 的非零矩阵元都是纯虚的.

现在注意

$$e^{-i\pi S_y/\hbar}|+\rangle = +|-\rangle, \quad e^{-i\pi S_y/\hbar}|-\rangle = -|+\rangle. \tag{4.4.67}$$

利用 (4.4.67) 式，能够求出形如 (4.4.65) 式的 Θ 作用在最普遍的自旋$\frac{1}{2}$右矢的效果：

$$\Theta(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle) = +\eta c_+^*|-\rangle - \eta c_-^*|+\rangle. \tag{4.4.68}$$

再用 Θ 作用一次：

$$\begin{aligned}\Theta^2(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle) &= -|\eta|^2c_+|+\rangle - |\eta|^2c_-|-\rangle \\ &= -(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle)\end{aligned} \tag{4.4.69}$$

或

$$\Theta^2 = -1, \tag{4.4.70}$$

(其中 -1 被理解为 -1 乘上恒等算符) 对任何自旋取向都成立. 这是一个非同寻常的结

果．在这里，至关重要的是要注意结论完全与位相的选择无关；不管 η 取什么样的相位约定，(4.4.70) 式都成立．与此相反，我们可能注意到了，对于一个无自旋的态连续用 Θ 作用两次给出

$$\Theta^2 = +1, \tag{4.4.71}$$

这一点，从 (4.4.58) 式是显然的．

更一般地，现在证明

$$\Theta^2 |j \text{ 半奇数}\rangle = -|j \text{ 半奇数}\rangle \tag{4.4.72a}$$

$$\Theta^2 |j \text{ 整数}\rangle = +|j \text{ 整数}\rangle. \tag{4.4.72b}$$

于是，Θ^2 的本征值由 $(-1)^{2j}$ 给出．首先注意到，(4.4.65) 式对于任意自旋推广为

$$\Theta = \eta e^{-i\pi J_y/\hbar} K. \tag{4.4.73}$$

对于用基右矢 $|j,m\rangle$ 展开的一个右矢 $|\alpha\rangle$，有

$$\begin{aligned}\Theta(\Theta\sum |jm\rangle\langle jm|\alpha\rangle) &= \Theta(\eta\sum e^{-i\pi J_y/\hbar}|jm\rangle\langle jm|\alpha\rangle^*) \\ &= |\eta|^2 e^{-2i\pi J_y/\hbar}\sum |jm\rangle\langle jm|\alpha\rangle.\end{aligned} \tag{4.4.74}$$

但是

$$e^{-2i\pi J_y/\hbar}|jm\rangle = (-1)^{2j}|jm\rangle, \tag{4.4.75}$$

从角动量本征态在 2π 转动之下的性质知道，该式是显然的*．

在 (4.4.72b) 式中，$|j$ 整数$\rangle$ 可以代表为双电子系统的自旋态

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle \pm |-+\rangle) \tag{4.4.76}$$

或一个无自旋粒子的轨道态 $|l,m\rangle$．唯一重要的是，j 是一个整数．同样地，$|j$ 半奇数$\rangle$ 代表在任何组态下的一个三电子系统．实际上，对于一个专门由电子组成的系统而言，任何有奇（偶）数个电子的系统——不管它们的空间取向（例如，相对的轨道角动量）——在 Θ^2 之下为奇（偶）；它们甚至不需要是 $\mathbf{J}^2$ 的本征态！

插入一些关于相位约定的评注．在前面基于位置表象的讨论中，我们看到，在对于球谐函数通常的约定的情况下，自然的做法是选择对于 $|l,m\rangle$ 在时间反演下的任意相位，使得

$$\Theta|l,m\rangle = (-1)^m|l,-m\rangle. \tag{4.4.77}$$

有些作者发现，非常吸引人的是把上式推广为

$$\Theta|j,m\rangle = (-1)^m|j,-m\rangle \quad (j \text{ 为一个整数}), \tag{4.4.78}$$

而不管 j 指的是 l 还是 s（对于一个整数自旋系统）．自然要问，当 $|j,m\rangle$ 被视为由“原始的”自旋 $\frac{1}{2}$ 客体按照维格纳和施温格做法构成时，对于自旋 $\frac{1}{2}$ 系统该式与 (4.4.72a) 式相容吗？易见，只要选择 (4.4.73) 式中的 η 是 $+i$，则 (4.4.72a) 式的确是自洽的．事实上，一般而言，对于任何的 j——或为一个半奇数 j，或为一个整数 j，均可以取

$$\Theta|j,m\rangle = i^{2m}|j,-m\rangle \tag{4.4.79}$$

见本章习题 4.10．然而，应当提醒读者，这并不是文献中能见到的唯一的约定．例如，Henley 和 Garcia (2007)．对于某些物理应用，更方便的是利用其他选择；例如，使 $\mathbf{J}_\pm$ 算符的矩阵元简单的相位约定，而不是使时间反演算符性质简单的相位约定．再一次强调，

---

* 这一说法过于草率．对于所有的 j，因子 $(-1)^{2j}$ 并非显然．然而，可以从定义式 (3.5.51) 证明其等于 $d^{(j)}_{mm}(2\pi)$，然后用 (3.9.33) 式求出其值．（本脚注按勘误表要求译出．——译者注）

(4.4.72) 式完全不依赖相位约定.

解决了角动量本征态在时间反演下的行为后，就能再一次研究一个厄米算符的期待值. 回忆一下 (4.4.43) 式，在时间反演下（消去 i^{2m} 因子）得到

$$\langle \alpha, j, m|A|\alpha, j, m\rangle = \pm \langle \alpha, j, -m|A|\alpha, j, -m\rangle. \tag{4.4.80}$$

现在，假定 A 是球张量 $T_q^{(k)}$ 的一个分量. 由于有维格纳-埃卡特定理，只要考察 $q=0$ 分量的矩阵元就足够了. 一般而言，称 $T^{(k)}$（假定是厄米的）为时间反演下为偶还是奇的，依赖于它的 $q=0$ 分量如何满足下式的靠上边还是靠下边的符号：

$$\Theta T_{q=0}^{(k)} \Theta^{-1} = \pm T_{q=0}^{(k)}. \tag{4.4.81}$$

对于 $A=T_0^{(k)}$，方程 (4.4.80) 式变成

$$\langle \alpha, j, m|T_0^{(k)}|\alpha, j, m\rangle = \pm \langle \alpha, j, -m|T_0^{(k)}|\alpha, j, -m\rangle. \tag{4.4.82}$$

依靠 (3.6.46) ～ (3.6.49) 式，预期 $|\alpha, j, -m\rangle = \mathcal{D}(0, \pi, 0)|\alpha, j, m\rangle$，至多差一个位相. 其次，对于 $T_0^{(k)}$ 利用 (3.11.22) 式，导致

$$\mathcal{D}^{\dagger}(0, \pi, 0) T_0^{(k)} \mathcal{D}(0, \pi, 0) = (-1)^k T_0^{(k)} + (q \neq 0 \text{ 分量}). \tag{4.4.83}$$

其中，用到了 $\mathcal{D}_{00}^{(k)}(0, \pi, 0) = P_k(\cos\pi) = (-1)^k$，而且当夹在 $\langle \alpha, j, m|$ 和 $|\alpha, j, m\rangle$ 之间时，$q \neq 0$ 分量贡献为零. 净结果为

$$\langle \alpha, j, m|T_0^{(k)}|\alpha, j, m\rangle = \pm (-1)^k \langle \alpha, j, m|T_0^{(k)}|\alpha, j, m\rangle. \tag{4.4.84}$$

作为一个例子，当取 $k=1$ 时，对于 j，m 本征态求得的期待值 $\langle \mathbf{x} \rangle$ 为零. 可以论证，如果对于宇称本征态求期待值，则从宇称反演已经知道 $\langle \mathbf{x} \rangle = 0$ [见 (4.2.41) 式]. 但是，这里要注意 $|\alpha, j, m\rangle$ 不需要是宇称本征态！例如，对于自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子，$|j, m\rangle$ 可能是 $c_s|s_{12}\rangle + c_p|p_{12}\rangle$.

与电场和磁场的相互作用及克拉默斯简并

考虑在一个外部电场或磁场中的带电粒子. 如果只有一个静电场与该电荷相互作用，则哈密顿量的相互作用部分仅为

$$V(\mathbf{x}) = e\phi(\mathbf{x}), \tag{4.4.85}$$

其中 $\phi(\mathbf{x})$ 是静电势. 因为 $\phi(\mathbf{x})$ 是时间反演偶算符 $\mathbf{x}$ 的一个实函数，有

$$[\Theta, H] = 0. \tag{4.4.86}$$

和宇称的情况不同，(4.4.86) 式并不导致有趣的守恒定律. 理由是即使上式成立，

$$\Theta U(t, t_0) \neq U(t, t_0)\Theta, \tag{4.4.87}$$

因此，在紧接着 4.1 节的 (4.1.9) 式的讨论不再有效. 结果，不存在像“时间反演量子数守恒”这样的东西. 然而，正如已经提到过的，(4.4.86) 式的确导致一种非平庸的相位限制：对于一个无自旋系统非简并波函数的实数性 [见 (4.4.59) 式和 (4.4.60) 式].

时间反演不变性的另一个影响深远的结果是**克拉默斯简并**. 假定 H 和 Θ 对易，且设 $|n\rangle$ 和 $\Theta|n\rangle$ 分别为能量本征态和它的时间反演态. 由 (4.4.86) 式显然可见，$|n\rangle$ 和 $\Theta|n\rangle$ 属于同样的能量本征值 E_n（$H\Theta|n\rangle = \Theta H|n\rangle = E_n\Theta|n\rangle$）. 问题是，$|n\rangle$ 和 $\Theta|n\rangle$ 代表同一个态吗？如果是的话，$|n\rangle$ 和 $\Theta|n\rangle$ 至多可以靠一个相因子来区别. 因此，

$$\Theta|n\rangle = e^{i\delta}|n\rangle, \tag{4.4.88}$$

再一次用 Θ 作用于 (4.4.88) 式，有 $\Theta^2|n\rangle = \Theta e^{i\delta}|n\rangle = e^{-i\delta}\Theta|n\rangle = e^{-i\delta}e^{+i\delta}|n\rangle$；因此，

$$\Theta^2|n\rangle = +|n\rangle. \tag{4.4.89}$$

但是，对于半奇数 j 的系统，这个关系式是不可能的，对于它，Θ^2 总是 -1，因此它导致：$|n\rangle$ 和 $\Theta|n\rangle$，尽管有相同的能量，一定对应于不同的态——这就是说，一定是简并的态. 这意味着，例如，对于在一个外电场 $\mathbf{E}$ 中由奇数个电子组成的系统，无论 $\mathbf{E}$ 可能会如何复杂，每一个能级至少必须是二重简并的. 沿着这样的线索考虑，对于晶体中的电子具有有趣的应用，在那里，奇数电子和偶数电子系统显示出非常不同的行为. 历史上，克拉默斯通过查看薛定谔方程的解，推论出这类简并；随后，维格纳指出克拉默斯简并是时间反演不变性的结果.

现在转向与外磁场的相互作用. 那么，哈密顿量 H 包含有如下的这类项：

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{B},\quad \mathbf{p}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\mathbf{p},\quad (\mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A}), \tag{4.4.90}$$

其中磁场被看作是外部的. 算符 $\mathbf{S}$ 和 $\mathbf{p}$ 在时间反演下都是奇的，这些相互作用项会导致

$$\Theta H\neq H\Theta. \tag{4.4.91}$$

作为一个平庸的例子，对于一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统，自旋向上的态 $|+\rangle$ 和它的时间反演态 $|-\rangle$，在存在一个外磁场的情况下，不再有相同的能量. 一般而言，在一个包含奇数个电子的系统中通过作用上一个外磁场，克拉默斯简并能够被解除.

注意，当把 $\mathbf{B}$ 当作外部的处理时，在时间反演下不改变 $\mathbf{B}$；这是因为原子中的电子被看作是一个我们作用上了时间反演算符的封闭量子力学系统. 这不应与早些时候涉及的麦克斯韦方程（4.4.2）式以及洛伦兹力方程在 $t\to -t$ 以及（4.4.3）式之下的不变性所做的一些评注混淆. 在那里时间反演作用于整个世界，例如，甚至作用于导线中产生磁场 $\mathbf{B}$ 的电流！

习题

4.1 （假定等质量的可区分粒子）计算出下列的系统的三个最低能级以及它们的简并度.

（a）在一个边长为 L 的（三维）盒子中的三个无相互作用的自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子.

（b）在一个边长为 L 的（三维）盒子中的四个无相互作用的自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子.

4.2 设 $\mathcal{J}_{\mathbf{d}}$ 代表平移算符(位移矢量为 $\mathbf{d}$)；设 $\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}},\phi)$ 代表转动算符（$\hat{\mathbf{n}}$ 和 ϕ 分别为转轴和转角）；而设 π 代表宇称算符. 下列的各对算符中，如果有的话，哪几对是对易的？为什么？

（a）$\mathcal{J}_{\mathbf{d}}$ 和 $\mathcal{J}_{\mathbf{d}'}$（$\mathbf{d}$ 和 $\mathbf{d}'$ 沿不同方向），

（b）$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}},\phi)$ 和 $\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}',\phi')$（$\hat{\mathbf{n}}$ 和 $\hat{\mathbf{n}}'$ 沿不同方向）.

（c）$\mathcal{J}_{\mathbf{d}}$ 和 π.

（d）$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}},\phi)$ 和 π.

4.3 已知一个量子力学态 Ψ 是两个厄米算符 A 和 B 的一个共同本征态，且 A 和 B 反对易：

$$AB+BA=0.$$

关于 $|\Psi\rangle$ 态上 A 和 B 的本征值能说些什么？用宇称算符（可以选择它满足 $\pi=\pi^{-1}=\pi^{\dagger}$）和动量算符为例来说明你的观点.

4.4 一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子被一个球对称势束缚于一个固定的中心

（a）写出自旋角度函数 $\mathcal{Y}_{l=0}^{j=1/2,m=\pm\frac{1}{2}}$.

（b）把 $(\sigma\cdot\mathbf{x})\ \mathcal{Y}_{l=0}^{j=\frac{1}{2},m=\pm\frac{1}{2}}$ 用一些另外的 $\mathcal{Y}_l^{j,m}$ 表示出来.

（c）证明若考虑到算符 $(\mathbf{S}\cdot\mathbf{x})$ 在转动下及空间反射（宇称）下的变换性质，在（b）中你的结果可以理解.

4.5 由于弱（中性流）相互作用，在原子中的电子和原子核之间存在一种宇称破坏的位势如下

$$V=\lambda[\delta^{(3)}(\mathbf{x})\mathbf{S}\cdot\mathbf{p}+\mathbf{S}\cdot\mathbf{p}\delta^{(3)}(\mathbf{x})],$$

其中 $\mathbf{S}$ 和 $\mathbf{p}$ 是电子的自旋和动量算符，且假定原子核位于原点. 结果，通常用 $|n,l,j,m\rangle$ 表征的碱金属原子的基态，实际上包含有来自其他本征态的非常小的贡献如下：

$$|n,l,j,m\rangle\to|n,l,j,m\rangle+\sum_{n'l'j'm'}C_{n'l'j'm'}|n',l',j',m'\rangle,$$

单单在考虑对称性的基础上，关于给出非零贡献的 (n',l',j',m') 能说些什么？假定径向波函数和能级都是已知的. 指出怎样可以计算 $C_{n'l'j'm'}$. 能得到关于 (n',l',j',m') 的进一步限制吗？

4.6 考虑一个对称的矩形双阱势：

$$V=\begin{cases}\infty & \text{对于 } |x|>a+b;\\ 0 & \text{对于 } a<|x|<a+b;\\ V_0>0 & \text{对于 } |x|<a.\end{cases}$$

假定 V_0 与低能级能态的量子化能量相比非常高，求在两个低能级的能态之间能级劈裂的近似表示式.

4.7 (a) 设 $\psi(\mathbf{x},t)$ 是一个无自旋粒子的波函数，相应于一个三维平面波. 证明 $\psi^*(\mathbf{x},-t)$ 是动量方向反转的平面波波函数.

(b) 设 $\chi(\hat{\mathbf{n}})$ 是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ 的二分量本征旋量，本征值为 $+1$，利用 $\chi(\hat{\mathbf{n}})$（借助于表征 $\hat{\mathbf{n}}$ 的极角和方位角 β 和 γ）的显式形式，证明 $-i\sigma_2\chi^*(\hat{\mathbf{n}})$ 是自旋方向反转的二分量本征旋量.

4.8 (a) 假定哈密顿量在时间反演下不变，证明对于一个无自旋非简并系统在任意给定时刻的波函数总可以选择为实的.

(b) 对于 $t=0$ 时刻的一个平面波，其波函数由一个复函数 $e^{i(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}/\hbar)}$ 给出. 为什么这不破坏时间反演不变性.

4.9 设 $\phi(\mathbf{p}')$ 是 $|\alpha\rangle$ 态的动量空间波函数，即 $\phi(\mathbf{p}')=\langle\mathbf{p}'|\alpha\rangle$. 对于时间反演态 $\Theta|\alpha\rangle$，其动量空间波函数是由 $\phi(\mathbf{p}')$，$\phi(-\mathbf{p}')$，$\phi^*(\mathbf{p}')$，还是 $\phi^*(-\mathbf{p}')$ 给出？证明你的答案是正确的.

4.10 （译者注：按勘误表的要求，该题被重新改写了，修改后的形式如下所示.）

(a) 用 (4.4.53) 式证明 $\Theta|j,m\rangle$ 等于 $|j,-m\rangle$，至多差一个包含有因子 $(-1)^m$ 的相因子. 这就是说，证明 $\Theta|j,m\rangle=e^{i\delta}(-1)^m|j,-m\rangle$，其中的 δ 不依赖于 m.

(b) 利用同样的相位约定求相应于 $\mathcal{D}(R)|j,m\rangle$ 的时间反演态. 先用无穷小形式 $\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}},d\phi)$ 处理，然后推广到有限转动.

(c) 从这些结果出发证明，不依赖于 δ，有

$$\mathcal{D}^{(j)*}_{m'm}(R)=(-1)^{m-m'}\mathcal{D}^{(j)}_{-m',-m}(R).$$

(d) 可以得出如下结论：可以自由地选取 $\delta=0$，以及 $\Theta|j,m\rangle=(-1)^m|j,-m\rangle=i^{2m}|j,-m\rangle$.

4.11 假定一个无自旋粒子被一个位势 $V(\mathbf{x})$ 束缚在一个固定的中心，该位势是如此之反对称，以至于没有任何能级是简并的. 利用时间反演不变性证明，对于任何能量本征态有

$$\langle\mathbf{L}\rangle=0.$$

（这称为轨道角动量的“弱化”，即“quenching”）如果这样的一个非简并态的波函数展开为

$$\sum_l\sum_m F_{lm}(r)Y_l^m(\theta,\phi),$$

则对于 $F_{lm}(r)$ 得到什么类型的相位限制呢？

4.12 对于一个自旋为 1 的系统，其哈密顿量由下式给定：

$$H=AS_z^2+B(S_x^2-S_y^2).$$

准确地求解这个问题，找到归一化的能量本征态和本征值.（一个这类的自旋相关的哈密顿量实际出现在晶体物理学中.）这个哈密顿量是时间反演下不变的吗？求得的归一化本征态在时间反演下如何变换？

第 5 章　近似方法

极少数的量子力学问题——或者具有不含时哈密顿量或者具有含时哈密顿量——能够严格求解. 最终不得不采取某种近似形式. 随着高速计算机的出现，人们认为总能得到所需预期精度的数值解，但理解近似解的基本物理知识，即使在着手耗时的计算机计算之前，仍然是重要的. 本章将致力于束缚态问题近似解的系统讨论.

5.1　时间无关的微扰论：非简并情况

问题的提出

这里考虑的近似方法是不含时微扰理论——有时称为瑞利-薛定谔微扰论. 这样一个不含时的哈密顿量，它能被分解成两个部分，即：

$$H = H_0 + V, \tag{5.1.1}$$

其中，假定 $V=0$ 问题的精确本征右矢 $|n^{(0)}\rangle$ 和精确本征值 $E_n^{(0)}$ 均已解出

$$H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle. \tag{5.1.2}$$

现在要求解完整哈密顿量问题的近似本征右矢和本征值

$$(H_0 + V)|n\rangle = E_n|n\rangle, \tag{5.1.3}$$

其中 V 被称为**微扰**. 一般说来，它不是全部的势算符. 例如，假设考虑在外电场或外磁场中的氢原子. 无微扰哈密顿量 H_0 取为动能 $\mathbf{p}^2/2m$ 和由于质子核的存在导致的库仑势 $-e^2/r$. 只有由于与外电场 $\mathbf{E}$ 或外磁场 $\mathbf{B}$ 相互作用引起的那部分势用微扰 V 来描述.

代替（5.1.3）式，习惯上求解

$$(H_0 + \lambda V)|n\rangle = E_n|n\rangle, \tag{5.1.4}$$

其中，λ 是一个连续的实参数. 引入该参数是用以跟踪微扰加入的次数. 在计算结束时，可置 $\lambda \to 1$ 以回到完整强度的情况. 换句话说，假定微扰的强度是可以被控制的. 可想象参数 λ 能连续从 0 变化到 1，$\lambda=0$ 的情况对应于无微扰问题，而 $\lambda=1$ 对应于（5.1.3）中完整强度的问题. 在适用该近似方法的物理情况中，期望看到当 λ 从 0 “拨”到 1 时，$|n^{(0)}\rangle$ 平滑地过渡到 $|n\rangle$ 并且 $E_n^{(0)}$ 平滑地过渡到 E_n.

这个方法基于能量本征值和能量本征右矢按照 λ 幂次的展开. 这意味着隐含地假定在复 λ 平面上能量本征值和本征右矢在 $\lambda=0$ 附近的解析性. 当然，若我们的方法是有实用价值的，在展开式中仅取一到两项就可以得到较好的近似.

双态问题

在着手基本方法的系统表述之前，来看一下按 λ 展开的方法怎样在多次碰到过的精确可解的双态问题中确实可能有效. 假定有一个哈密顿量，它能被写成

$$H = E_1^{(0)}|1^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}| + E_2^{(0)}|2^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}| + \lambda V_{12}|1^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}| + \lambda V_{21}|2^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}|, \tag{5.1.5}$$

其中的$|1^{(0)}\rangle$和$|2^{(0)}\rangle$是$\lambda=0$问题的能量本征右矢，并且考虑$V_{11}=V_{22}=0$的情况．在这个表示中，H可用方阵来描述

$$H=\begin{pmatrix}E_1^{(0)} & \lambda V_{12}\\ \lambda V_{21} & E_2^{(0)}\end{pmatrix}, \tag{5.1.6}$$

其中，使用了由无微扰的能量本征右矢构成的基．当然矩阵V必须是厄米的；让我们求解如下情况，即V_{12}和V_{21}是实数：

$$V_{12}=V_{12}^*,\quad V_{21}=V_{21}^*; \tag{5.1.7}$$

因此，根据厄米性，有

$$V_{12}=V_{21}. \tag{5.1.8}$$

这总能通过调整$|2^{(0)}\rangle$相对于$|1^{(0)}\rangle$的相位得以实现．在这里，求能量本征值问题完全类似于求解自旋取向问题，在那里与（5.1.6）式类似的形式是

$$H=a_0+\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a}=\begin{pmatrix}a_0+a_3 & a_1\\ a_1 & a_0-a_3\end{pmatrix}, \tag{5.1.9}$$

其中假定$\mathbf{a}=(a_1,0,a_3)$是小量，且a_0，a_1，a_3都是实数．大家知道，这个问题的本征值正是

$$E=a_0\pm\sqrt{a_1^2+a_3^2}. \tag{5.1.10}$$

通过类比，（5.1.6）式相应的本征值是

$$\begin{Bmatrix}E_1\\ E_2\end{Bmatrix}=\frac{(E_1^{(0)}+E_2^{(0)})}{2}\pm\sqrt{\left[\frac{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}{4}+\lambda^2|V_{12}|^2\right]}. \tag{5.1.11}$$

假定与相关的能标相比，$\lambda|V_{12}|$是小量，则无微扰问题的能量本征值的差为

$$\lambda|V_{12}|\ll|E_1^{(0)}-E_2^{(0)}|. \tag{5.1.12}$$

那时，使用

$$\sqrt{1+\varepsilon}=1+\frac{1}{2}\varepsilon-\frac{\varepsilon^2}{8}+\cdots \tag{5.1.13}$$

得到在微扰$\lambda|V_{12}|$存在时的能量本征值的展开式，即

$$\begin{aligned}E_1&=E_1^{(0)}+\frac{\lambda^2|V_{12}|^2}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})}+\cdots\\ E_2&=E_2^{(0)}+\frac{\lambda^2|V_{12}|^2}{(E_2^{(0)}-E_1^{(0)})}+\cdots.\end{aligned} \tag{5.1.14}$$

它们是可用即将导出的一般公式轻而易举得到的表达式．同样也能类比于自旋取向问题，写出能量本征右矢．

这可能会导致读者认为，对一个足够弱的微扰总是存在一个微扰展开．遗憾的是这并不是必然的情况．作为一个简单的例子，考虑一个质量为m的粒子在一个深度为V_0的非常弱的方势阱（即对于$-a<x<a$，有$V=-V_0$，对$|x|>a$，有$V=0$）中的一维问题．这个问题允许有一个如下能量的束缚态，

$$E=-(2ma^2/\hbar^2)|\lambda V|^2,\quad \text{对吸引力}\ \lambda>0. \tag{5.1.15}$$

可以把方势阱看作是一个非常弱的微扰加到自由粒子哈密顿量上，并且把（5.1.15）式解释为其基态的能量从0移动到$|\lambda V|^2$．特别地，（5.1.15）式是V的二次幂，或许会诱使我们把它看作是按照二级微扰理论算出的基态的能移．但是，这种观点是错误的，因为假如是这样的话，对一个λ为负的排斥势，系统将允许一个$E<0$的态，这纯粹是无稽

之谈.

现在来检查级数展开（5.1.14）式的收敛半径. 假如回到（5.1.11）式的精确表示式，并将其看成一个复变量 λ 的函数，可以看到当 $|\lambda|$ 从 0 增加，在

$$\lambda|V_{12}| = \frac{\pm i(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})}{2}. \tag{5.1.16}$$

处将遇到分支点. 对 $\lambda=1$ 的完全强度情况，级数展开的收敛条件是

$$|V_{12}| < \frac{|E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|}{2}. \tag{5.1.17}$$

如果这个条件得不到满足，微扰展开（5.1.14）式就毫无意义.*

微扰展开的形式推导

现在以更精确的术语来表述想求解的基本问题. 假定知道无微扰哈密顿量 H_0 的完整的和精确的能量本征右矢和能量本征值，即

$$H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle. \tag{5.1.18}$$

在封闭性关系 $1=\sum_n|n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}|$ 成立的意义上，集合 $\{|n^{(0)}\rangle\}$ 是完备的. 这里进一步假定能谱是非简并的，但在下一节将放宽这个假定. 我们对求得（5.1.4）式定义的问题的能量本征值和本征右矢感兴趣. 为与（5.1.18）式一致，应把（5.1.4）式写为

$$(H_0+\lambda V)|n\rangle_\lambda = E_n^{(\lambda)}|n\rangle_\lambda \tag{5.1.19}$$

以表示能量本征值 $E_n^{(\lambda)}$ 和能量本征右矢 $|n\rangle_\lambda$ 是连续参量 λ 的函数. 然而，通常舍弃这种修正，而采用更为复杂的记号.

当连续参数 λ 从 0 递增时，可期待第 n 个本征右矢的能量本征值 E_n 将偏离它的无微扰值 $E_n^{(0)}$，所以对第 n 个能级，能量移动定义为：

$$\Delta_n \equiv E_n - E_n^{(0)}. \tag{5.1.20}$$

将要（近似地）求解的基本薛定谔方程是

$$(E_n^{(0)} - H_0)|n\rangle = (\lambda V - \Delta_n)|n\rangle. \tag{5.1.21}$$

我们可能会想到取算符 $E_n^{(0)}-H_0$ 的逆，但通常逆算符 $1/(E_n^{(0)}-H_0)$ 是病态的，因为它很可能作用于 $|n^{(0)}\rangle$. 幸运的是在我们的计算中，$(\lambda V-\Delta_n)|n\rangle$ 没有沿 $|n^{(0)}\rangle$ 的分量，这可以通过在（5.1.21）式的两边分别左乘 $\langle n^{(0)}|$：

$$\langle n^{(0)}|(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle = 0. \tag{5.1.22}$$

而容易地见到. 假设把互补的投影算符定义为

$$\phi_n \equiv 1 - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = \sum_{k\neq n}|k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|. \tag{5.1.23}$$

当逆算符 $1/(E_n^{(0)}-H_0)$ 右乘 ϕ_n 时，它就被准确地定义了. 显而易见

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n = \sum_{k\neq n}\frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}|k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|. \tag{5.1.24}$$

显然还可以由（5.1.22）式和（5.1.23）式有

$$(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle = \phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle. \tag{5.1.25}$$

于是，这可致使把（5.1.21）式改写为

---

* 参见（5.1.44）式后一般说明中的收敛性讨论.

$$|n\rangle \overset{?}{=} \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle. \tag{5.1.26}$$

然而，此式是不正确的，因为当$\lambda \to 0$时，必须有$|n\rangle \to |n^{(0)}\rangle$及$\Delta_n \to 0$. 不过，即便$\lambda \neq 0$，也总可以将齐次方程（5.1.18）的一个特解$c_n|n^{(0)}\rangle$加到$|n\rangle$上，于是一个恰当的最终解形式是

$$|n\rangle = c_n(\lambda)|n^{(0)}\rangle + \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle, \tag{5.1.27}$$

其中

$$\lim_{\lambda \to 0} c_n(\lambda) = 1. \tag{5.1.28}$$

要注意

$$c_n(\lambda) = \langle n^{(0)}|n\rangle. \tag{5.1.29}$$

由于后面将要看到的原因，背离通常使用的归一化条件

$$\langle n|n\rangle = 1. \tag{5.1.30}$$

是方便的. 更确切地说，令

$$\langle n^{(0)}|n\rangle = c_n(\lambda) = 1, \tag{5.1.31}$$

甚至在$\lambda \neq 0$时也一样. 如果不担心整体的归一化，总是可以这样选取的，因为设置$c_n \neq 1$的唯一效应是引入一个共同的乘积因子. 因此只要愿意，总能在计算的最后归一化右矢. 习惯上还写成

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n \to \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \tag{5.1.32}$$

和类似的

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n, \tag{5.1.33}$$

于是有

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle. \tag{5.1.34}$$

从（5.1.22）和（5.1.31）式中也注意到

$$\Delta_n = \lambda\langle n^{(0)}|V|n\rangle. \tag{5.1.35}$$

一切都依赖于（5.1.34）和（5.1.35）这两个方程. 我们的基本做法是把$|n\rangle$和Δ_n按λ的幂次展开，然后匹配恰当的系数. 这是合理的，因为（5.1.34）和（5.1.35）式是对0和1间所有的λ值都成立的恒等式. 通过写成

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \cdots \\ \Delta_n &= \lambda\Delta_n^{(1)} + \lambda^2\Delta_n^{(2)} + \cdots. \end{aligned} \tag{5.1.36}$$

开始，把（5.1.36）式代入（5.1.35）式，且使λ各幂次的系数相等，就可得到

$$\begin{aligned} O(\lambda^1)&: \quad \Delta_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \\ O(\lambda^2)&: \quad \Delta_n^{(2)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(1)}\rangle \\ &\vdots \qquad\qquad \vdots \\ O(\lambda^N)&: \quad \Delta_n^{(N)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(N-1)}\rangle, \\ &\vdots \qquad\qquad \vdots \end{aligned} \tag{5.1.37}$$

所以，若要求解能量移动至λ^N阶，只要知道到λ^{N-1}阶的$|n\rangle$就可以了. 现在看一下（5.1.34）式，使用（5.1.36）式将其展开，可得到

$$
\begin{aligned}
&|n^{(0)}\rangle+\lambda|n^{(1)}\rangle+\lambda^2|n^{(2)}\rangle+\cdots\\
&\quad=|n^{(0)}\rangle+\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}(\lambda V-\lambda\Delta_n^{(1)}-\lambda^2\Delta_n^2-\cdots)\\
&\quad\times(|n^{(0)}\rangle+\lambda|n^{(1)}\rangle+\cdots).
\end{aligned}
\tag{5.1.38}
$$

令 λ 各幂次的系数相等，有

$$
O(\lambda):\quad |n^{(1)}\rangle=\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}V|n^{(0)}\rangle,
\tag{5.1.39}
$$

其中用到了 $\phi_n\Delta_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle=0$. 有了 $|n^{(1)}\rangle$，现在回到先前的 $\Delta_n^{(2)}$ 表达式是有益的［见 (5.1.37) 式］

$$
\Delta_n^{(2)}=\langle n^{(0)}|V\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}V|n^{(0)}\rangle.
\tag{5.1.40}
$$

知道了 $\Delta_n^{(2)}$，运用 (5.1.39) 式可得到右矢方程 (5.1.38) 中的 λ^2 项

$$
\begin{aligned}
O(\lambda^2):\quad |n^{(2)}\rangle=&\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}V\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}V|n^{(0)}\rangle\\
&-\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}\langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}V|n^{(0)}\rangle.
\end{aligned}
\tag{5.1.41}
$$

很清楚，只要我们愿意，就能按这种模式一直继续做下去. 我们的算符方法是非常紧致的，没有必要每次都写出这些指标. 当然，要做实际计算，在最后必须使用由 (5.1.23) 式给出的 ϕ_n 显式形式.

为了看到所有这些是如何操作的，写出能量移动的显式展开式

$$
\begin{aligned}
\Delta_n&\equiv E_n-E_n^{(0)}\\
&=\lambda V_{nn}+\lambda^2\sum_{k\neq n}\frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}+\cdots,
\end{aligned}
\tag{5.1.42}
$$

其中

$$
V_{nk}\equiv\langle n^{(0)}|V|k^{(0)}\rangle\neq\langle n|V|k\rangle,
\tag{5.1.43}
$$

这就是说，这个矩阵元是对无微扰右矢取的. 注意，当这个展开应用于两态问题时，重新得到早先的表达式 (5.1.14) 式. 微扰右矢的展开结果如下：

$$
\begin{aligned}
|n\rangle=&|n^{(0)}\rangle+\lambda\sum_{k\neq n}|k^{(0)}\rangle\frac{V_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\\
&+\lambda^2\left(\sum_{k\neq n}\sum_{l\neq n}\frac{|k^{(0)}\rangle V_{kl}V_{ln}}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})(E_n^{(0)}-E_l^{(0)})}-\sum_{k\neq n}\frac{|k^{(0)}\rangle V_{nn}V_{kn}}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2}\right)
\end{aligned}
\tag{5.1.44}
$$

方程 (5.1.44) 说明第 n 个能级不再正比于无微扰右矢 $|n^{(0)}\rangle$，而是得到沿其他无微扰能量右矢的分量；换一种说法，微扰 V 将各种无微扰的能量本征右矢混合了起来.

有以下几个一般性的说明. 第一，为了得到一级能量移动，只要求解 V 在无微扰右矢上的期待值就可以了. 第二，从二级能量移动的表达式 (5.1.42) 显然可以看到，两个能级，如第 i 个和第 j 个能级，当用 V_{ij} 联系起来时，倾向于相互排斥；比如，作为与较高的第 j 个能级混合的结果，较低的第 i 个能级趋于被压低 $|V_{ij}|^2/(E_j^{(0)}-E_i^{(0)})$，与此同时第 j 个能级的能量升高了同样的量. 这是一个**无能级交叉定理**的特殊情况，该定理是说当微扰的强度变化时，由微扰联系着的一对能级不交叉.

假如存在一对以上具有可观测矩阵元的能级，而其能量被我们所关注的右矢 $|n\rangle$ 指的是基态，则二级能量移动公式 (5.1.42) 中的每一项都是负的. 这意味着基态的二级能量

移动总是负的，由于混合的结果最低能态甚至趋于更低.

很清楚，如果$|V_{ij}/(E_j^{(0)}-E_i^{(0)})|$足够“小”，微扰展开式（5.1.42）和（5.1.44）将收敛. 对H_0只是动能算符的情况（那时瑞利-薛定谔微扰展开恰为玻恩级数），可给出一个更为具体的判据：对一个$E_0<0$的能量，当且仅当H_0+V和H_0-V二者都没有$E\leqslant E_0$的束缚态时，玻恩级数收敛. 参见 Newton（1982），233页.

波函数归一化

是时候看一下微扰右矢的归一化了. 回顾使用的归一化约定（5.1.31）式，可以看到微扰右矢$|n\rangle$没有按通常的方法归一化. 可以通过定义

$$|n\rangle_N = Z_n^{1/2}|n\rangle, \tag{5.1.45}$$

重新归一化微扰右矢，其中Z_n只是一个满足${}_N\langle n|n\rangle_N=1$的常数. 上式左乘$\langle n^{(0)}|$，可以得到［因为（5.1.31）式］

$$Z_n^{1/2} = \langle n^0|n\rangle_N. \tag{5.1.46}$$

Z_n的物理含义是什么呢？因为$|n\rangle_N$满足通常归一化的要求（5.1.30）式，可将Z_n看成将在相应的无微扰能量本征态中找到微扰能量本征态的概率. 注意到

$${}_N\langle n|n\rangle_N = Z_n\langle n|n\rangle = 1, \tag{5.1.47}$$

有

$$\begin{aligned} Z_n^{-1} &= \langle n|n\rangle = (\langle n^{(0)}|+\lambda\langle n^{(1)}|+\lambda^2\langle n^{(2)}|+\cdots) \\ &\quad\times(|n^{(0)}\rangle+\lambda|n^{(1)}\rangle+\lambda^2|n^{(2)}\rangle+\cdots) \\ &= 1+\lambda^2\langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle+0(\lambda^3) \qquad (5.1.48a) \\ &= 1+\lambda^2\sum_{k\neq n}\frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2}+0(\lambda^3), \end{aligned}$$

这样直到λ^2阶，得到将在相应的无微扰能量本征态中找到微扰能量本征态的概率

$$Z_n \simeq 1-\lambda^2\sum_{k\neq n}\frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2}. \tag{5.1.48b}$$

（5.1.48b）式中的第二项可被理解为“渗漏”到非$|n^{(0)}\rangle$态的概率. 注意Z_n小于1，它正是基于Z的概率解释所预期到的.

从（5.1.42）式还有趣地看到：对λ^2阶，Z与E_n对$E_n^{(0)}$的导数有如下关系：

$$Z_n = \frac{\partial E_n}{\partial E_n^{(0)}}. \tag{5.1.49}$$

当然，理解在求E_n对$E_n^{(0)}$的偏导数时，必须把V的矩阵元视为固定的量. 得到的（5.1.49）式实际上是非常普遍的表达式，不限于二级微扰理论.

基本的例子

为说明上面所发展的微扰方法，来看两个例子. 第一个例子是考虑一个简谐振子，它的无微扰哈密顿量为通常的

$$H_0 = \frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2. \tag{5.1.50}$$

假定弹性常数$k=m\omega^2$有微小改变. 可以通过附加一个额外的势

$$V = \frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2x^2, \tag{5.1.51}$$

来表示该修正，其中 ε 是一个满足 $\varepsilon \ll 1$ 的无量纲参数. 从某种观点看，对它使用微扰论是世界上最愚蠢的问题；只要通过把 ω 改变为精确解马上得到，

$$\omega \to \sqrt{1+\varepsilon}\,\omega \tag{5.1.52}$$

然而这是一个有益的例子，因为它提供了一个微扰近似和精确方法之间的比较.

考虑存在 V 时的新基态右矢 $|0\rangle$ 和基态能量移动 Δ_0：

$$|0\rangle = |0^{(0)}\rangle + \sum_{k\neq 0} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{k0}}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \cdots \tag{5.1.53a}$$

和

$$\Delta_0 = V_{00} + \sum_{k\neq 0} \frac{|V_{k0}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \cdots. \tag{5.1.53b}$$

相关的矩阵元是（见本章习题 5.5）

$$\begin{aligned} V_{00} &= \left(\frac{\varepsilon m\omega^2}{2}\right)\langle 0^{(0)}|x^2|0^{(0)}\rangle = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{4} \\ V_{20} &= \left(\frac{\varepsilon m\omega^2}{2}\right)\langle 2^{(0)}|x^2|0^{(0)}\rangle = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{2\sqrt{2}}. \end{aligned} \tag{5.1.54}$$

所有其他的 V_{k0} 形式的矩阵元均为零. 注意（5.1.53a）式和（5.1.53b）式的非零能量分母是 $-2\hbar\omega$，把所有的东西组合到一起就得到

$$|0\rangle = |0^{(0)}\rangle - \frac{\varepsilon}{4\sqrt{2}}|2^{(0)}\rangle + 0(\varepsilon^2) \tag{5.1.55a}$$

和

$$\Delta_0 = E_0 - E_0^{(0)} = \hbar\omega\left[\frac{\varepsilon}{4} - \frac{\varepsilon^2}{16} + 0(\varepsilon^3)\right]. \tag{5.1.55b}$$

注意到作为微扰的结果，当使用原始无微扰能量本征右矢 $\{|n^{(0)}\rangle\}$ 来展开基态右矢时，该右矢得到一个沿第二激发态的分量. 缺失沿第一激发态的分量并不奇怪，因为总 H 是宇称不变的，因此能量本征态被预期是一个宇称本征态.

对于能移，很容易与精确方法做比较如下：

$$\frac{\hbar\omega}{2} \to \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)\sqrt{1+\varepsilon} = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)\left[1 + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\varepsilon^2}{8} + \cdots\right], \tag{5.1.56}$$

它与（5.1.55b）式完全一致. 至于微扰右矢，看一下波函数的变化. 在没有 V 时，基态的波函数是

$$\langle x|0^{(0)}\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2}, \tag{5.1.57}$$

其中

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \tag{5.1.58}$$

代入（5.1.52）式后，导致

$$x_0 \to \frac{x_0}{(1+\varepsilon)^{1/4}}. \tag{5.1.59}$$

因此

$$\langle x|0^{(0)}\rangle \to \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}(1+\varepsilon)^{1/8}\exp\left[-\left(\frac{x^2}{2x_0^2}\right)(1+\varepsilon)^{1/2}\right]$$

$$\simeq \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2}+\frac{\varepsilon}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2}\left[\frac{1}{8}-\frac{1}{4}\frac{x^2}{x_0^2}\right] \tag{5.1.60}$$

$$=\langle x|0^{(0)}\rangle-\frac{\varepsilon}{4\sqrt{2}}\langle x|2^{(0)}\rangle,$$

其中用到了

$$\langle x|2^{(0)}\rangle=\frac{1}{2\sqrt{2}}\langle x|0^{(0)}\rangle H_2\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

$$=\frac{1}{2\sqrt{2}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2}\left[-2+4\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right], \tag{5.1.61}$$

以及 $H_2(x/x_0)$ 是一个二阶厄米多项式.

作为非简并微扰论的另一个实例，下面讨论**二次斯塔克效应**. 一个单电子原子——在满壳（球对称的）层外有一个价电子的氢原子或类氢原子——被置于一个正 z 方向的均匀的电场中. 哈密顿量 H 被分成两个部分，

$$H_0=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V_0(r)\quad 和\quad V=-e|\mathbf{E}|z\quad (e<0\ \text{对电子}). \tag{5.1.62}$$

[因为当 $z\to-\infty$时，$V\to-\infty$，当然由 H_0 束缚的粒子现在可以逃逸，并且所有以前束缚的态都获得了有限的寿命. 然而，仍然可以形式上使用微扰论去计算能量的移动.（在这里，被忽略的这个移动的虚部会给出这个态的寿命或相应的共振态的宽度.）——编者注]

假定无微扰问题（仅有 H_0）的能量本征右矢和能谱完全已知. 在这个问题中，结果表明电子自旋是无关的，所以假定在自旋自由度被忽略时，没有任何能级是简并的. 这种假设对氢原子 $n\neq1$ 的能级不成立，在那里 V_0 是纯库仑势；稍后将处理该情况. 能量移动由下式给出

$$\Delta_k=-e|\mathbf{E}|z_{kk}+e^2|\mathbf{E}|^2\sum_{j\neq k}\frac{|z_{kj}|^2}{E_k^{(0)}-E_j^{(0)}}+\cdots, \tag{5.1.63}$$

其中，使用 k 代替 n 以避免与主量子数 n 搞混. 由于不简并，预期 $|k^{(0)}\rangle$ 是宇称本征态，因此

$$z_{kk}=0, \tag{5.1.64}$$

就如同在4.2节中看到的. 从物理上讲，不存在线性斯塔克效应——这就是说，因为原子具有为零的恒定电偶极矩，在能量移动中没有正比于 $|\mathbf{E}|$ 的项. 所以，如果忽略 $e^3|\mathbf{E}|^3$ 阶的项或更高阶的项，能量移动则是 $|\mathbf{E}|$ 的二次方阶的.

现在看一下出现在（5.1.63）式中的 z_{kj}，其中 k（或 j）是描述 (n,l,m) 和 (n',l',m') 的**集体指标**. 首先，回顾选择定则［见（3.11.39）式］

$$\langle n',l'm'|z|n,lm\rangle=0\ 除非\begin{cases}l'=l\pm1\\ m'=m\end{cases} \tag{5.1.65}$$

它来自于对角动量（$T^{(1)}_{q=0}$的维格纳-埃卡特定理）和宇称的考虑.

存在另外一种方法理解 m 选择定则. 在有 V 时，哈密顿量完整的球对称性被取正 z 方向的外电场破坏了，但是 V（因此总的 H）仍然是绕 z 轴旋转不变的；换句话说，仍然有一个轴对称性. 形式上，这可由

$$[V,L_z]=0 \tag{5.1.66}$$

体现出来. 这意味着 L_z 仍然是一个好量子数，即使有 V 存在. 作为一个结果，微扰能被

写成一个具有相同 m 的 L_z 的本征右矢的叠加，其中，在这个例子中 $m=0$. 这种说法对所有的级均成立——特别是对第一级右矢. 同样，由于二级能量移动是用一级右矢得到的[见（5.1.40）式]，能理解为什么仅仅 $m=0$ 的项对求和有贡献.

一个原子的极化度 α 是用原子态的能量移动如下定义的：

$$\Delta = -\frac{1}{2}\alpha |\mathbf{E}|^2. \tag{5.1.67}$$

考虑氢原子基态的特殊情况. 尽管氢原子谱中的激发态是简并的，但其基态（忽略自旋）是非简并的，所以非简并微扰论的公式是能够使用的. 使用 (n,l,m) 记号，基态 $|0^{(0)}\rangle$ 是用 $(1,0,0)$ 标记的，所以

$$\alpha = -2e^2 \sum_{k\neq 0}^{\infty} \frac{|\langle k^{(0)}|z|1,0,0\rangle|^2}{[E_0^{(0)} - E_k^{(0)}]}, \tag{5.1.68}$$

其中对 k 求和不仅包括氢的所有束缚态 $|n,l,m\rangle$（对 $n>1$），也包括其正能连续态.

在不同的复杂程度上，有很多近似估算或精确计算（5.1.68）式中求和的方法. 这里展示所有做法中最简单的一个. 假定（5.1.68）式中的分母是常数. 那么，可以通过考虑

$$\begin{aligned}\sum_{k\neq 0} |\langle k^{(0)}|z|1,0,0\rangle|^2 &= \sum_{\text{所有}k} |\langle k^{(0)}|z|1,0,0\rangle|^2 \\ &= \langle 1,0,0|z^2|1,0,0\rangle,\end{aligned} \tag{5.1.69}$$

得到求和，其中，在最后一步中，使用了完备性关系. 但是很容易地如下计算基态的 $\langle z^2\rangle$

$$\langle z^2\rangle = \langle x^2\rangle = \langle y^2\rangle = \frac{1}{3}\langle r^2\rangle, \tag{5.1.70}$$

而且，使用波函数的显式表达式，得到

$$\langle r^2\rangle = a_0^2,$$

其中 a_0 是玻尔半径. 遗憾的是极化度 α 的表达式包含了依赖于 $E_k^{(0)}$ 的能量分母，但我们知道不等式

$$-E_0^{(0)} + E_k^{(0)} \geqslant -E_0^{(0)} + E_1^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0}\left[1 - \frac{1}{4}\right] \tag{5.1.71}$$

对（5.1.68）式中的每一个能量分母都成立. 作为结果，能够得到氢原子基态极化度的上限，即

$$\alpha < \frac{16a_0^3}{3} \simeq 5.3a_0^3, \tag{5.1.72}$$

结果发现，使用由达尔加诺（A. Dalgarno）和刘易斯（J. T. Lewis）创始的方法（例如 Merzbacher，1970，p. 424），能够精确地算出（5.1.68）式中的和，它也与实验测量值相吻合. 即

$$\alpha = \frac{9a_0^3}{2} = 4.5a_0^3. \tag{5.1.73}$$

使用抛物线坐标，可通过精确求解薛定谔方程得到相同的结果（不使用微扰论）.

5.2　时间无关的微扰论：简并情况

当无微扰能量本征右矢简并时，在上一节发展起来的微扰方法就失效了. 上节的方法假定存在一个唯一明确定义的、能量为 $E_n^{(0)}$ 的无微扰右矢，微扰右矢在 $\lambda\to 0$ 时趋近于它.

然而，在存在简并的情况下，无微扰右矢的任意线性组合都具有相同的无微扰能量；在这样的情况下，不能显而易见地推演出在 $\lambda\to 0$ 的极限下，微扰右矢将约化为无微扰右矢的何种线性组合. 这里只指定能量本征值是不够的，其他一些可观测量对完善这个图像是必需的. 更具体一些，由于简并，可以取 H_0 和一些其他的可观测量 A 的共同本征右矢作为基矢，并且可继续用 $|k^{(0)}\rangle$ 标记无微扰能量本征右矢，其中 k 现在是集体指标的符号表示，该符号既表示能量本征值也表示 A 的本征值. 当微扰算符 V 与 A 不对易时，H（包括微扰）的**零级**本征右矢事实上不是 A 的本征右矢.

从一个更实际的观点来看，盲目应用像（5.1.42）式和（5.1.44）式那样的公式，显然会碰到困难，因为如果 V_{nk} 非零并且 $E_n^{(0)}$ 和 $E_k^{(0)}$ 相等，则

$$\frac{V_{nk}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}} \tag{5.2.1}$$

变得奇异. 必须修正上一节的方法使其适合这种情况.

只要存在简并，就可以自由选择无微扰右矢基的集合. 当然应该尽一切办法揭示这个自由度. 从直觉上我们猜测分母为零的灾难可能通过选择这样的基右矢来避免，即 V 没有任何非对角矩阵元，比如在（5.2.1）式中那样的 $V_{nk}=0$. 换句话说，应该使用简并无微扰右矢的线性组合，它在由简并的无微扰右矢所张的子空间内将 H 对角化. 这的确是可使用的正确步骤.

假定在微扰 V 加上之前，存在一个 g 重的简并. 这意味着存在 g 个不同的本征右矢，它们具有相同的无微扰能量 $E_D^{(0)}$. 用 $\{|m^{(0)}\rangle\}$ 表示这些右矢. 一般说来，在有 g 个不同的能量的微扰本征右矢的意义上，微扰解除了简并. 让它们构成一个基的集合 $\{|l\rangle\}$. 当 λ 趋于零时，$|l\rangle\to|l^{(0)}\rangle$，并且各个 $|l^{(0)}\rangle$ 都是 H_0 的具有相同能量 $E_m^{(0)}$ 的本征右矢. 然而集合 $|l^{(0)}\rangle$ 不需要与 $\{|m^{(0)}\rangle\}$ 一致，即使这两组无微扰本征右矢张成相同的、称之为 D 的简并子空间. 可以写为

$$|l^{(0)}\rangle=\sum_{m\in D}\langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle|m^{(0)}\rangle,$$

式中对简并子空间的能量本征右矢求和.

在对 λ 展开之前，对薛定谔方程进行重新整理，这将使展开更易于操作. 令 P_0 为投影到由 $\{|m^{(0)}\rangle\}$ 定义的空间的投影算符.（回顾在1.3节中有关投影算符的讨论.）定义 $P_1=1-P_0$ 为投影到剩余态上的投影算符. 然后，将 $|l\rangle$ 态的薛定谔方程写为

$$\begin{aligned}0&=(E-H_0-\lambda V)|l\rangle\\&=(E-E_D^{(0)}-\lambda V)P_0|l\rangle+(E-H_0-\lambda V)P_1|l\rangle.\end{aligned}\tag{5.2.2}$$

接着分别使用 P_0 和 P_1，从（5.2.2）式左边进行投影，把（5.2.2）分离成两个方程：

$$(E-E_D^{(0)}-\lambda P_0V)P_0|l\rangle-\lambda P_0VP_1|l\rangle=0 \tag{5.2.3}$$

$$-\lambda P_1VP_0|l\rangle+(E-H_0-\lambda P_1V)P_1|l\rangle=0. \tag{5.2.4}$$

因为 E 接近于 $E_D^{(0)}$ 并且 $P_1H_0P_1$ 的本征值均不同于 $E_D^{(0)}$，故 $P_1(E-H_0-\lambda P_1VP_1)$ 在这个子空间就不是奇异的，所以能够在 P_1 的子空间求解（5.2.4）式. 因此，可以写成

$$P_1|l\rangle=P_1\frac{\lambda}{E-H_0-\lambda P_1VP_1}P_1VP_0|l\rangle \tag{5.2.5}$$

或者，当 $|l\rangle$ 展开为 $|l\rangle=|l^{(0)}\rangle+\lambda|l^{(1)}\rangle+\cdots$ 时，到 λ 阶的表达式为

$$P_1|l^{(1)}\rangle=\sum_{k\notin D}\frac{|k^{(0)}\rangle V_{kl}}{E_D^{(0)}-E_k^{(0)}}. \tag{5.2.6}$$

为计算 $P_0|l\rangle$，将（5.2.5）式代入（5.2.3）式，得到

$$\left(E-E_D^{(0)}-\lambda P_0VP_0-\lambda^2P_0VP_1\frac{1}{E-H_0-\lambda V}P_1VP_0\right)P_0|l\rangle=0 \tag{5.2.7}$$

尽管在（5.2.7）式中有一个由于代入造成的 λ^2 阶的项，但它在 $P_0|l\rangle$ 态中将产生一个 λ 阶的项. 这样，得到了能量到 λ 阶及本征函数到零阶的方程

$$(E-E_D^{(0)}-\lambda P_0VP_0)(P_0|l^{(0)}\rangle)=0. \tag{5.2.8}$$

这是一个在 g 维简并子空间的方程，并明确地意味着其本征矢量正是 $g\times g$ 维矩阵 P_0VP_0 的本征矢量，而本征值 $E^{(1)}$ 正是久期方程

$$\det[V-(E-E_D^{(0)})]=0 \tag{5.2.9}$$

的根，其中 V 是 P_0VP_0 的矩阵，它的矩阵元为 $\langle m^{(0)}|V|m'^{(0)}\rangle$. 矩阵的显式形式是

$$\begin{pmatrix}V_{11}&V_{12}&\cdots\\V_{21}&V_{22}&\cdots\\\vdots&\vdots&\ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\langle 1^{(0)}|l^{(0)}\rangle\\\langle 2^{(0)}|l^{(0)}\rangle\\\vdots\end{pmatrix}=\Delta_l^{(1)}\begin{pmatrix}\langle 1^{(0)}|l^{(0)}\rangle\\\langle 2^{(0)}|l^{(0)}\rangle\\\vdots\end{pmatrix}. \tag{5.2.10}$$

它的根确定了本征值 $\Delta_l^{(1)}$，共有 g 个，将其代入（5.2.10）式，对每一个 l，就可求得最多差一个整体归一化常数的 $\langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle$. 这样，通过求解本征值问题，一下子就得到了一级能量移动和正确的零级本征右矢. 注意，当 $\lambda\to 0$ 时，所获得的零级右矢正是将 V 对角化的各种 $|m^{(0)}\rangle$ 的线性组合，该对角化矩阵的对角元素马上给出了一级能移

$$\Delta_l^{(1)}=\langle l^{(0)}|V|l^{(0)}\rangle. \tag{5.2.11}$$

还要注意，假如简并的子空间是整个空间，就已经用这种方式精确地解了这个问题. 不属于简并子空间的无微扰的“远离”的本征右矢将仅出现在更高级别——第一级和更高级的能量本征右矢及第二级和更高级的能量本征值中.

表达式（5.2.11）看起来就像是非简并情况的一级能移［见（5.1.37）式］，除去在这里必须确认所使用的是哪些基右矢，它们使得 V 在简并无微扰本征右矢所张的子空间中，没有非零的非对角矩阵元. 如果在我们使用的基右矢表象中，V 算符已经对角化，则通过取 V 的期待值，就能马上写出一级能移，就像在非简并的情况一样.

看一下（5.2.7）式. 为保险起见，保留出现在（5.2.7）式 $g\times g$ 有效哈密顿量中所有的到 λ^2 阶的项，尽管仅仅要求 $P_0|l\rangle$ 到 λ 阶. 我们发现

$$\left(E-E_D^{(0)}-\lambda P_0VP_0-\lambda^2P_0VP_1\frac{1}{E_D^{(0)}-H_0}P_1VP_0\right)P_0|l\rangle=0. \tag{5.2.12}$$

对 $g\times g$ 的矩阵 P_0VP_0，回顾本征值 v_i 和本征矢 $P_0|l_i^{(0)}\rangle$. 到一级的本征能量是 $E_i^{(1)}=E_D^{(0)}+\lambda v_i$. 假定简并已经完全解除，以致 $E_i^{(1)}=E_j^{(1)}=\lambda(v_i-v_j)$ 全不为零. 现在可以将非简并微扰论（5.1.39）式用于（5.2.12）式中的 $g\times g$ 维的哈密顿量. 所得到的对本征矢 $P_0|l_i^{(0)}\rangle$ 的修正是

$$P_0|l_i^{(1)}\rangle=\sum_{j\neq i}\lambda\frac{P_0|l_j^{(0)}\rangle}{v_j-v_i}\langle l_j^{(0)}|VP_1\frac{1}{E_D^{(0)}-H_0}P_1V|l_i^{(0)}\rangle \tag{5.2.13}$$

或更明显地写成

$$P_0|l_i^{(1)}\rangle=\sum_{j\neq i}\lambda\frac{P_0|l_j^{(0)}\rangle}{v_j-v_i}\sum_{k\notin D}\langle l_j^{(0)}|V|k\rangle\frac{1}{E_D^{(0)}-E_k^{(0)}}\langle k|V|l_i^{(0)}\rangle. \tag{5.2.14}$$

这样，尽管（5.2.12）式中有效哈密顿量的第三项是 λ^2 阶，在形成对本征矢量修正时，它要除以 λ 阶的能量分母，因此在矢量中给出 λ 阶的项. 如果把（5.2.6）式和（5.2.14）式加在一起，就得到了精确到 λ 阶的本征矢量.

如同在非简并的情况，选取归一化约定$\langle l^{(0)}|l\rangle=1$是方便的. 然后，从（5.2.3）式和（5.2.4）式就可得到$\lambda\langle l^{(0)}|V|l\rangle=\Delta_l=\lambda\Delta_l^{(1)}+\lambda^2\Delta_l^{(2)}+\cdots$. 正是这个$\lambda$项产生了（5.2.11）式. 至于$\lambda^2$项，我们由它可得到$\Delta_l^{(2)}=\langle l^{(0)}|V|l^{(1)}\rangle=\langle l^{(0)}|V|P_1 l^{(1)}\rangle+\langle l^{(0)}|V|P_0 l_l^{(1)}\rangle$. 因为矢量$P_0|l_j^{(0)}\rangle$是$V$的本征矢量，对于这个矢量的修正（5.2.14）式对二级能量移动没有任何贡献，所以使用（5.2.6）式，有

$$\Delta_l^{(2)}=\sum_{k\in D}\frac{|V_{kl}|^2}{E_D^{(0)}-E_k^{(0)}}. \tag{5.2.15}$$

这种做法是可行的，给出了在久期方程（5.2.9）的根中不存在任何简并的结果. 否则仍然会有歧义：哪些简并无微扰右矢的线性贡献是由微扰右矢在$\lambda\to 0$的极限下约化出来的？换句话说，如果方法可行，简并应该在第一级就被完全解除. 对专家们的挑战是：如果简并在第一级没有解除——也就是久期方程的一些根是相等的，那么该如何去做？（见本章的习题5.12.）

现在对简并微扰论的基本做法做一个小结：

1. 识别简并的无微扰本征右矢和构建微扰矩阵V，即一个$g\times g$的矩阵，如果简并是g重的.
2. 像通常一样，通过求解恰当的久期方程，对角化这个微扰矩阵.
3. 认为久期方程的根与一级能量移动是一致的；对角化V的基右矢是正确的零级右矢，在$\lambda\to 0$的极限时微扰右矢趋近于它.
4. 对更高级的近似，除了在简并子空间D中的求和，并剔除所有来自于无微扰右矢的贡献，使用相应的非简并微扰论公式.

线性斯塔克效应

作为简并微扰论的例子，研究一个均匀电场在氢原子激发态上的效应. 众所周知，在均匀无自旋纯库仑势的薛定谔理论中，氢原子的束缚态能量仅依赖于主量子数n. 这就导致了除基态外的所有态的简并，因为对一个给定的n，所允许的l值满足

$$0\leqslant l<n. \tag{5.2.16}$$

具体地说，对$n=2$能级，存在一个$l=0$的称之为$2s$的态和三个$l=1$（$m=\pm1,0$）的称之为$2p$的态，它们都具有相同的能量$-e^2/8a_0$. 当沿z方向加入一个均匀的电场，恰当的微扰算符为

$$V=-ez|\mathbf{E}| \tag{5.2.17}$$

必须将其对角化. 在使用通常的（nlm）基仔细地计算矩阵元之前，请注意微扰（5.2.17）式仅在相反的宇称态之间具有非零的矩阵元，即在我们的情况中，是在$l=1$和$l=0$态之间. 进一步，为使矩阵元是非零的，m的值必须是相同的，因为z的行为如同球分量（磁量子数）为零的一阶球张量. 所以只在$2s$（$m=0$是必然的）和$m=0$的$2p$态间有非零矩阵元. 这样

$$V=\begin{array}{c}\begin{array}{cccc}2s & 2p\quad m=0 & 2p\quad m=1 & 2p\quad m=-1\end{array}\\ \begin{pmatrix}0 & \langle 2s|V|2p,m=0\rangle & 0 & 0\\ \langle 2p,m=0|V|2s\rangle & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\end{array} \tag{5.2.18}$$

更明确些

$$\langle 2s|V|2p,m=0\rangle = \langle 2p,m=0|V|2s\rangle$$
$$= 3ea_0|\mathbf{E}|. \tag{5.2.19}$$

这时把精力集中于方阵的左上角就够了. 它看上去非常像 σ_z 矩阵，可以马上写出答案——对能量移动，得到

$$\Delta_{\pm}^{(1)} = \pm 3ea_0|\mathbf{E}|, \tag{5.2.20}$$

其中脚标±指的是将 V 对角化的零级右矢

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s,m=0\rangle \pm |2p,m=0\rangle). \tag{5.2.21}$$

示意性地，能级可用图表示在图 5.1 中.

注意到，该移动对所使用的电场强度是线性的，因此术语称之为**线性斯塔克效应**. 能够形象化地设想这个效应存在的一种方法是，注意到能量本征右矢 (5.2.21) 式不是宇称本征态，因此允许有非零的恒定的电偶极矩，经过具体计算 $\langle z\rangle$ 就能够很容易看到这一点. 十分普遍，对一个能够用相反宇称态的叠加来描述的能量态，容许有一个非零的恒定的电偶极矩，它引起了线性斯塔克效应.

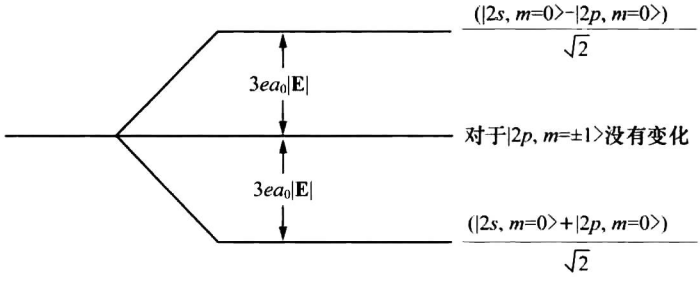


图 5.1　作为简并微扰论的例子，线性斯塔克效应的能级示意图

现在可以问一个有趣的问题了. 如果看一下“真实”的氢原子，$2s$ 和 $2p$ 能级不是真正简并的. 由于自旋轨道力，就像即将在下一节证明的，$2p_{3/2}$ 态与 $2p_{1/2}$ 态分离开了，甚至在单粒子狄拉克理论中仍然存在的 $2s_{1/2}$ 和 $2p_{1/2}$ 能级间的简并，也将被量子电动力学效应[兰姆(Lamb)位移]解除. 因此，或许要问：将简并微扰论用于这个问题是现实的吗？与精确结果的比较显示：如果微扰矩阵元比兰姆位移的劈裂大很多，则对所有的实用目的，能量移动对 $|\mathbf{E}|$ 都是线性的，并且简并微扰论的公式框架是适用的. 在相反的极端情况，如果微扰矩阵元比兰姆位移的劈裂还小，则能量移动(对 $|\mathbf{E}|$) 是二次的，并且能够使用非简并微扰论，见本章习题 5.13. 这顺便证明，当与微扰矩阵元定义的能标相比能级几乎是简并的时候，简并微扰论仍然是有用的. 必须更努力地研究中间的情况，在由所有附近的能级所张的空间内，尝试精确地把哈密顿量对角化是安全的.

5.3　类氢原子：精细结构和塞曼效应

对动能的相对论修正

一个有着单电子的类氢原子具有势能函数 (3.7.43)，给出的哈密顿量是

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r}, \tag{5.3.1}$$

其中第一项是非相对论动能算符. 然而相对论修正的动能为

$$\begin{aligned} K &= \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m_e^2c^4} - m_ec^2 \\ &\approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{8m_e^3c^2}. \end{aligned} \tag{5.3.2}$$

因此，沿用（5.1.1）式中的标记方法，可以用微扰论处理这个问题，在那里 H_0 由（5.3.1）式给出，而微扰为

$$V = -\frac{(\mathbf{p}^2)^2}{8m_e^3c^2}. \tag{5.3.3}$$

现在，原则上，由于氢原子高度简并的本征态 $|nlm\rangle$，这是一个复杂的问题. 然而，由于 $\mathbf{L}$ 与 $\mathbf{p}^2$ 对易，正如在（3.7.2）式中指出的，有

$$[\mathbf{L}, V] = 0. \tag{5.3.4}$$

换言之，V 是旋转对称的，并且已经在 $|nlm\rangle$ 基上对角化了. 所以，由 V 引起的一级能量移动正好等于它在这些基上的期待值. 遵照（5.1.37）式，可写出

$$\Delta_{nl}^{(1)} = \langle nlm|V|nlm\rangle = -\langle nlm|\frac{(\mathbf{p}^2)^2}{8m_e^3c^2}|nlm\rangle, \tag{5.3.5}$$

其中，旋转对称性确保一级能量移动不可能依赖于 m.

原则上说，（5.3.5）式可以硬算，但有更简洁的做法. 因为

$$\frac{(\mathbf{p}^2)^2}{8m_e^3c^2} = \frac{1}{2m_ec^2}\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}\right)^2 = \frac{1}{2m_ec^2}\left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)^2, \tag{5.3.6}$$

马上可以看到

$$\Delta_{nl}^{(1)} = -\frac{1}{2m_ec^2}\left[(E_n^{(0)})^2 + 2E_n^{(0)}\langle nlm|\frac{Ze^2}{r}|nlm\rangle + \langle nlm|\frac{(Ze^2)^2}{r^2}|nlm\rangle\right]. \tag{5.3.7}$$

因此，问题约化到计算 Ze^2/r 和 $(Ze^2)^2/r^2$ 的期待值. 事实上，这两个期待值均可通过使用一些巧妙的技巧来计算. 这里仅仅概述这一做法，对于更多细节感兴趣的读者可参考 Shankar（1994）或 Townsend（2000）的著作.

如果想象一个氢原子具有“微扰” $V_\gamma = \gamma/r$，则（5.3.7）式中第二项的期待值就只是对能量的一级修正，其中 $\gamma = Ze^2$. 另一方面，很容易精确求解这个问题，因为它对应着 $Ze^2 \to Ze^2 - \gamma$ 的氢原子，因而可以由精确解直接找到一级修正. 有

$$\langle nlm|\frac{Ze^2}{r}|nlm\rangle = -2E_n^{(0)}. \tag{5.3.8}$$

的确，这实际上就是维里定理对库仑势的一种说法.

类似的做法能够用于（5.3.7）式中的第三项. 在这种情况下，设想有一个微扰 $V_\gamma = \gamma/r^2$，它修改了等效势中的中心势垒项. 也就是它把 l 变成一种包括 γ 的形式，它能再次被用来写出一级修正. 得到

$$\langle nlm|\frac{(Ze^2)^2}{r^2}|nlm\rangle = \frac{4n}{l+\frac{1}{2}}(E_n^{(0)})^2. \tag{5.3.9}$$

相应地，和来自（3.7.53）式的 $E_n^{(0)}$ 一起，使用（5.3.8）和（5.3.9）式，可把（5.3.7）式重写为

$$\Delta_{nl}^{(1)} = E_n^{(0)}\left[\frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left(-\frac{3}{4}+\frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right)\right] \tag{5.3.10a}$$

$$=-\frac{1}{2}m_e c^2 Z^4\alpha^4\left[-\frac{3}{4n^4}+\frac{1}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}\right]. \tag{5.3.10b}$$

这完全是意料之中的，一级修正的相对大小正比于 $Z^2\alpha^2$，即经典电子轨道速度的平方（以 c 为单位）.

自旋-轨道相互作用和精细结构

现在继续研究一般的类氢原子——即在闭壳层外只有一个价电子的原子——的能级. 碱金属原子，如钠（Na）和钾（K）均属于此类.

价电子受到的中心势（不依赖自旋）$V_c(r)$ 不再是纯库仑形式. 这是因为出现在

$$V_c(r) = e\phi(r) \tag{5.3.11}$$

中的静电势 $\phi(r)$ 不再只由原子核的电荷 $|e|Z$ 引起；必须考虑壳内层的带负电的电子云. 在这里，$\phi(r)$ 的精确形式无关紧要. 我们只给出一个评注：纯库仑势的简并性特征现在以这样一种形式被解除了，即对一个给定的 n，较高 l 的态处在较高的位置. 从物理上说，它源自较高 l 的态更容易受到由电子云引起的排斥力的影响这一事实.

我们不再深究确定类氢原子的总体结构的 $V_c(r)$ 的细节，将探讨引起精细结构的自旋轨道相互作用（$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$）的效应. 以如下的定性方式理解这种相互作用的存在. 由于中心力部分（5.3.11）式，价电子感受到了电场

$$\mathbf{E} = -\left(\frac{1}{e}\right)\nabla V_c(r). \tag{5.3.12}$$

但是每当一个运动电荷受到一个电场作用时，它还会“感受”到一个由下式给出的有效磁场

$$\mathbf{B}_{\text{有效}} = -\left(\frac{\mathbf{v}}{c}\right)\times\mathbf{E}. \tag{5.3.13}$$

由于电子有一个磁矩 $\boldsymbol{\mu}$ 为

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e\mathbf{S}}{m_e c}, \tag{5.3.14}$$

猜测自旋轨道势 V_{LS} 对 H 有如下贡献

$$\begin{aligned} H_{LS} &= -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}_{\text{有效}} \\ &= \boldsymbol{\mu}\cdot\left(\frac{\mathbf{v}}{c}\times\mathbf{E}\right) \\ &= \left(\frac{e\mathbf{S}}{m_e c}\right)\cdot\left[\frac{\mathbf{p}}{m_e c}\times\left(\frac{\mathbf{x}}{r}\right)\frac{1}{(-e)}\frac{dV_c}{dr}\right] \\ &= \frac{1}{m_e^2 c^2}\frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}(\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}). \end{aligned} \tag{5.3.15}$$

将此表达式与观测到的自旋-轨道相互作用比较，可看到其符号是正确的，但大小被证明是太大了，要大出 2 倍. 对此，有一种经典解释是借助于自旋进动［以托马斯（L. H. Thomas）命名，称之为托马斯进动］，但我们将不理会它. 比如参见 Jackson（1975）的著作. 我们只唯象地处理自旋-轨道相互作用，且取 V_{LS} 为（5.3.15）式的一半.

要用量子力学正确地解释这种差异必须等到本书最后一章中讨论的电子狄拉克（相对论性的）理论.

现在把 V_{LS} 视为微扰（5.1 和 5.2 节中的 V），能够将微扰论用于氢原子. 无微扰哈密顿量 H_0 可取为

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_c(r), \tag{5.3.16}$$

其中的中心势 V_c 对碱金属原子不再是纯库仑形式. 只有 H_0 时，可任意选取基右矢：

$$\begin{aligned} &\text{第一组：}\mathbf{L}^2,\ L_z,\ \mathbf{S}^2,\ S_z \text{ 的本征右矢.} \\ &\text{第二组：}\mathbf{L}^2,\ \mathbf{S}^2,\ \mathbf{J}^2,\ J_z \text{ 的本征右矢.} \end{aligned} \tag{5.3.17}$$

没有 V_{LS}（或 H_{LS}）的情况下，在基右矢也是能量本征右矢的意义上，任意一组基右矢都是符合要求的. 加入了 H_{LS} 以后，使用（5.3.17）式中的第二组要好得多，因为 $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ 与 L_z 和 S_z 不对易，但它与 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 对易. 记住一个基本规则：选择使微扰对角化的无微扰右矢. 你可能被迫将 L_z 和 S_z 的本征右矢［（5.3.17）式的第一组］作为该问题的基右矢；如果接着盲目地应用由此（即把第一组基作为基右矢）开始的简并微扰论的方法，将不得不把在 L_z，S_z 表象写出的 V_{LS}（H_{LS}）矩阵对角化. 在大量艰巨的代数运算之后，给出的结果恰与将 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的本征右矢作为零级无微扰右矢的结果相同！

在简并的微扰论中，如果微扰已在所使用的表象中被对角化，为得到一级能量移动所要做的只是计算期待值. 在二分量形式中，波函数可明显地写为

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\,\mathcal{Y}_l^{m\pm\frac{1}{2}}, \tag{5.3.18}$$

其中 $\mathcal{Y}_l^{m\pm\frac{1}{2}}$ 为 3.8 节中的自旋-角度函数［见（3.8.64）式］. 对一阶移动，有

$$\Delta_{nlj} = \frac{1}{2m_e^2c^2}\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}\right\rangle_{nl}\frac{\hbar^2}{2}\begin{Bmatrix} l \\ -(l+1)\end{Bmatrix}\begin{matrix} j=l+\frac{1}{2} \\ j=l-\frac{1}{2}\end{matrix} \tag{5.3.19}$$

$$\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}\right\rangle_{nl} \equiv \int_0^\infty R_{nl}\,\frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}R_{nl}r^2\,dr,$$

其中，用到了 m 无关的恒等式［见（3.8.66）式］

$$\int \mathcal{Y}^{\dagger}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\,\mathcal{Y}\,d\Omega = \frac{1}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]\hbar^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{Bmatrix} l \\ -(l+1)\end{Bmatrix}\begin{matrix} j=l+\frac{1}{2} \\ j=l-\frac{1}{2}\end{matrix}. \tag{5.3.20}$$

方程（5.3.19）就是所谓的**朗德（Lande）间隔定则**.

具体地考虑一个钠原子. 用标准的原子谱学标记方法，基态组态为

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s). \tag{5.3.21}$$

可以看到内部的 10 个电子形成了一个球对称的电子云. 我们感兴趣的是第 11 个电子从 $3s$ 态到一个可能更高的态的激发. 最近的可能是到 $3p$ 的激发. 由于中心势不再是纯库仑的形式，$3s$ 和 $3p$ 态现在是分裂开的. 由 V_{LS} 带来的精细结构指的甚至是在 $3p$ 内一个更精细的分裂，即 $3p_{1/2}$ 和 $3p_{3/2}$ 之间的劈裂，其中脚标指的是 j. 实验上，观测到了两个紧挨着的黄线——称之为**钠 D 线**——一个在 5,896Å，另一个在 5,890Å，见图 5.2. 注意 $3p_{3/2}$ 态更高一些，因为（5.3.19）式中的径向积分是正的.

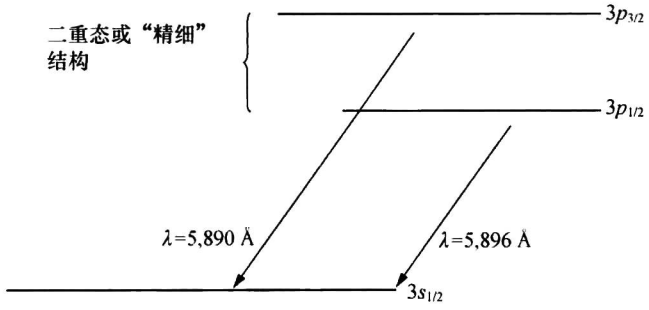


图 5.2　$3s$ 和 $3p$ 线的示意图. $3s$ 和 $3p$ 态的简并被解除了，因为 $V_c(r)$ 现在是一个由于壳内电子的影响导致的屏蔽库仑势，而不是纯库仑势；那时，V_{LS} 解除了 $3p_{1/2}$ 和 $3p_{3/2}$ 的简并.

为体会精细结构分裂大小的量级，注意 $Z\simeq 1$ 时有

$$\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}\right\rangle_{nl} \sim \frac{e^2}{a_0^3} \tag{5.3.22}$$

它正好就是量纲考虑的基准. 所以，精细结构分裂是 $(e^2/a_0^3)(\hbar/m_ec)^2$ 量级的，它将与量级为 e^2/a_0 的巴耳末分裂相比较. 回顾一下电子的经典半径和康普顿波长与波尔半径的下列相关联方式：

$$\frac{e^2}{m_ec^2} : \frac{\hbar}{m_ec} : a_0 :: 1 : 137 : (137)^2, \tag{5.3.23}$$

是很有用的，其中用到了

$$\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}. \tag{5.3.24}$$

非常有代表性的，精细结构分裂与典型的巴耳末分裂通过

$$\left(\frac{e^2}{a_0^3}\frac{\hbar^2}{m_e^2c^2}\right) : \left(\frac{e^2}{a_0}\right) :: \left(\frac{1}{137}\right)^2 : 1, \tag{5.3.25}$$

相关联，它解释了术语精细结构的起源. 还有一些大小量级类似的效应，在本章早些时候讨论过的动能相对论修正就是一个例子.

在结束这个讨论之前，让我们在库仑势——即一个氢原子或具有 Z 个质子的单电子离子——的情况下，算出 (5.3.19) 式的值. 在这个情况下

$$\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}\right\rangle_{nl} = \left\langle \frac{Ze^2}{r^3}\right\rangle_{nl}. \tag{5.3.26}$$

还能够使用另一个技巧计算该期待值. 首先，注意到基于 (5.3.1) 式给出的 H_0，对任意算符 A，有

$$\langle nlm|[H_0, A]|nlm\rangle = 0, \tag{5.3.27}$$

因为 H_0 作用到右边或左边恰好都给出 $E_n^{(0)}$. 如果取径向动量算符 $A=p_r$，则它显然与 H_0 中动能项的径向部分对易. 因此，剩下了

$$\langle nlm|\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_er^2} - \frac{Ze^2}{r}, p_r\right]|nlm\rangle = 0. \tag{5.3.28}$$

现在在坐标空间，因为微分算符 $\partial/\partial\gamma$ 的存在，p_r 与坐标 r 的函数不对易. 因此，可明确地完成在 (5.3.28) 式中的对易关系，得到

$$\langle nlm|\left[-\frac{l(l+1)\hbar^2}{m_e r^3}+\frac{Ze^2}{r^2}\right]|nlm\rangle=0. \tag{5.3.29}$$

最后，利用（5.3.9）式和（3.7.53）式写出

$$\left\langle\frac{Ze^2}{r^3}\right\rangle_{nl}=\frac{m_e}{l(l+1)\hbar^2}\left\langle\frac{(Ze^2)^2}{r^2}\right\rangle_{nl}$$

$$=-\frac{2m_e^2c^2Z^2\alpha^2}{nl(l+1)(l+1/2)\hbar^2}E_n^{(0)}. \tag{5.3.30}$$

因此，从（5.3.19）式得到了氢原子能量本征态的自旋-轨道修正

$$\Delta_{nlj}=-\frac{Z^2\alpha^2}{2nl(l+1)(l+1/2)}E_n^{(0)}\begin{cases}l & j=l+\frac{1}{2}\\ -(l+1) & j=l-\frac{1}{2}\end{cases}. \tag{5.3.31}$$

有趣的是，该表达式对 $l=0$ 是非零的. 不管怎么样，就像在本书后面将要看到的，它给出了狄拉克方程能量本征值的正确答案. 这个移动的起源，归因于那些被称之为达尔文（Darwin）项的贡献，曾在其他地方被讨论过. 例如参见 Townsend（2000）的著作.

塞曼效应

现在讨论在一个均匀磁场中的氢或类氢（单电子）原子——**塞曼效应**，有时把考虑了电子自旋的情况称之为反常塞曼效应. 回想起一个均匀的磁场 $\mathbf{B}$ 是可以由一个矢量势

$$\mathbf{A}=\frac{1}{2}(\mathbf{B}\times\mathbf{r}) \tag{5.3.32}$$

推导出的. 当 $\mathbf{B}$ 沿正 z 方向（$\mathbf{B}=B\hat{\mathbf{z}}$）时，

$$\mathbf{A}=-\frac{1}{2}(By\hat{\mathbf{x}}-Bx\hat{\mathbf{y}}) \tag{5.3.33}$$

就能满足，其中 B 是 $|\mathbf{B}|$. 除去自旋项之外，相互作用哈密顿量通过下面的代换产生

$$\mathbf{p}\to\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}. \tag{5.3.34}$$

因此有

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}+V_c(r)-\frac{e}{2m_ec}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\mathbf{p})+\frac{e^2\mathbf{A}^2}{2m_ec^2}. \tag{5.3.35}$$

因为

$$\langle\mathbf{x}'|\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x})|\rangle=-i\hbar\nabla'\cdot[\mathbf{A}(\mathbf{x}')\langle\mathbf{x}'|\rangle]$$

$$=\langle\mathbf{x}'|\mathbf{A}(\mathbf{x})\cdot\mathbf{p}|\rangle+\langle\mathbf{x}'|\rangle[-i\hbar\nabla'\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x}')], \tag{5.3.36}$$

用 $\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$ 替换 $\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}$ 是合理的，只要

$$\nabla\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x})=0, \tag{5.3.37}$$

而这就是（5.3.33）式的矢量势的情况. 注意到

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}=|\mathbf{B}|\left(-\frac{1}{2}yp_x+\frac{1}{2}xp_y\right)$$

$$=\frac{1}{2}|\mathbf{B}|L_z \tag{5.3.38}$$

和

$$\mathbf{A}^2 = \frac{1}{4}|\mathbf{B}|^2(x^2+y^2), \tag{5.3.39}$$

对（5.3.35）式，有

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V_c(r) - \frac{e}{2m_e c}|\mathbf{B}|L_z + \frac{e^2}{8m_e c^2}|\mathbf{B}|^2(x^2+y^2). \tag{5.3.40}$$

可以将自旋-磁矩相互作用

$$-\mu \cdot \mathbf{B} = \frac{-e}{m_e c}\mathbf{S}\cdot\mathbf{B} = \frac{-e}{m_e c}|\mathbf{B}|S_z \tag{5.3.41}$$

添加到上式中. 对单电子原子来说，二次的$|\mathbf{B}|^2(x^2+y^2)$并不重要；而类似的项对$L_z^{(总)}$和$S_z^{(总)}$均为零的氦原子基态却是重要的. 当读者在本章习题 5.18 和 5.19 中计算反磁化率时，可回到这个问题.

总结一下，忽略了二次项，总哈密顿量由如下三项组成：

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V_c(r) \tag{5.3.42a}$$

$$H_{LS} = \frac{1}{2m_e^2 c^2}\frac{1}{r}\frac{dV_c(r)}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \tag{5.3.42b}$$

$$H_B = \frac{-e|\mathbf{B}|}{2m_e c}(L_z + 2S_z). \tag{5.3.42c}$$

注意在S_z前面的因子 2，这个因子反映出电子的 g 因子是 2 的事实.

假定把H_B视为一个微小的微扰. 可用H_0+H_{LS}的本征右矢——$\mathbf{J}^2$，J_z本征右矢——作为基右矢来研究H_B的效应. 注意到

$$L_z + 2S_z = J_z + S_z. \tag{5.3.43}$$

可把一阶能量移动写为

$$\frac{-e|\mathbf{B}|}{2m_e c}\langle J_z + S_z\rangle_{j=l\pm 1/2,m}. \tag{5.3.44}$$

于是可立即给出J_z的期待值$m\hbar$. 至于$\langle S_z\rangle$，首先回顾

$$\left|j = l\pm\frac{1}{2}, m\right\rangle = \pm\sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\left|m_l = m-\frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{l\mp m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\left|m_l = m+\frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{5.3.45}$$

然后，S_z的期待值可很容易地算出

$$\begin{aligned}\langle S_z\rangle_{j=l\pm 1/2,m} &= \frac{\hbar}{2}(|c_+|^2 - |c_-|^2)\\ &= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{(2l+1)}\left[\left(l\pm m+\frac{1}{2}\right) - \left(l\mp m+\frac{1}{2}\right)\right] = \pm\frac{m\hbar}{(2l+1)}.\end{aligned} \tag{5.3.46}$$

用这种方法，得到了能量移动的朗德公式（由于 **B** 场）

$$\Delta E_B = \frac{-e\hbar B}{2m_e c}m\left[1\pm\frac{1}{(2l+1)}\right]. \tag{5.3.47}$$

我们看到（5.3.47）式中的能量移动正比于 m. 为理解它的物理解释，展示另一种推导（5.3.46）式的方法. 记得也可使用 3.11 节中的投影定理求得S_z的期待值. 于是得到[见（3.11.45）式]

$$\begin{aligned}\langle S_z\rangle_{j=l\pm1/2,m} &= [\langle \mathbf{S}\cdot\mathbf{J}\rangle_{j=l\pm1/2}]\frac{m\hbar}{\hbar^2 j(j+1)}\\ &= \frac{m\langle \mathbf{J}^2+\mathbf{S}^2-\mathbf{L}^2\rangle_{j=l\pm1/2}}{2\hbar j(j+1)}\\ &= m\hbar\left[\frac{\left(l\pm\frac{1}{2}\right)\left(l\pm\frac{1}{2}+1\right)+\frac{3}{4}-l(l+1)}{2\left(l\pm\frac{1}{2}\right)\left(l\pm\frac{1}{2}+1\right)}\right]\\ &= \pm\frac{m\hbar}{(2l+1)},\end{aligned} \tag{5.3.48}$$

它与（5.3.46）式完全吻合.

在上述的讨论中，磁场被视为一个微小的微扰. 现在考虑相反的极端—— **帕刑-巴克（Paschen-Back）极限**——具有一个如此强的磁场，以致 H_B 的效应远比 H_{LS} 的效应重要，而后者作为一个微小的微扰是后来添加进来的. 仅有 H_0+H_B 时，L_z 和 S_z 是好量子数. 甚至 $\mathbf{J}^2$ 也不再是好的量子数，因为强 **B** 场在空间选取了一个特定的 z 方向，球对称性被彻底地破坏了. 现在只剩下了柱对称性，即绕 z 轴旋转不变. 所以 L_z 和 S_z 的本征右矢 $|l,s=1/2,m_l,m_s\rangle$ 被取为基右矢. 主项 H_B 的效应能很容易地算出

$$\langle H_B\rangle_{m_l m_s} = \frac{-e|\mathbf{B}|\hbar}{2m_e c}(m_l+2m_s). \tag{5.3.49}$$

原有 H_0［见（5.3.42a）式］导致的对 m_l 和 m_s 的 $2(2l+1)$ 重简并现在被 H_B 约化成具有相同 $(m_l)+(2m_s)$ 的态，即 $(m_l)+(1)$ 和 $(m_l+2)+(-1)$. 很清楚，必须计算 $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ 对 $|m_l,m_s\rangle$ 的期待值：

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\rangle &= \langle L_z S_z+\frac{1}{2}(L_+S_-+L_-S_+)\rangle_{m_l m_s}\\ &= \hbar^2 m_l m_s,\end{aligned} \tag{5.3.50}$$

其中用到了

$$\langle L_\pm\rangle_{m_l}=0, \qquad \langle S_\pm\rangle_{m_s}=0. \tag{5.3.51}$$

因此，

$$\langle H_{LS}\rangle_{m_l m_s} = \frac{\hbar^2 m_l m_s}{2m_e^2 c^2}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dVc}{dr}\right\rangle. \tag{5.3.52}$$

在很多基础书中都有弱场结果（5.3.47）式和强场结果（5.3.49）式的图解，在这里不再多说. 只把结果归总在表 5.1 中，在那里 **B** 场的弱和强是通过将它们的大小 $e\hbar B/2m_e c$ 与 $(1/137)^2 e^2/a_0$ 比较来“标定的”. 在这个表中，“近于好的”只意味着好到那样的一种程度，即使支配作用较小的相互作用可被忽略.

表 5.1

	主导的相互作用	近于好的	不好的	总是好的
弱 **B**	H_{LS}	$\mathbf{J}^2$（或 $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$）	L_z，S_z*	$\mathbf{L}^2$，$\mathbf{S}^2$，J_z
强 **B**	H_B	L_z，S_z	$\mathbf{J}^2$（或 $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$）	

* 例外的是展宽的组态——例如，$m=\pm3/2$ 的 $p_{3/2}$ 态. 这里，L_z 和 S_z 都是好量子数；这是因为 J_z 的磁量子数 $m=m_l+m_s$ 仅有一种方式被满足.

具体地，看一下一个 p 电子的 $l=1$（$p_{3/2}$，$p_{1/2}$）的能级示意图. 在弱 **B** 的情况下，能

量移动与 **B** 呈线性关系，其斜率由

$$m\left[1\pm\left(\frac{1}{2l+1}\right)\right]$$

确定. 当 **B** 增强，在相同 m 值的态之间就变得可以混合——例如，$m=\pm1/2$ 的 $p_{3/2}$ 态与 $m=\pm1/2$ 的 $p_{1/2}$ 态；在这方面注意到，出现在 H_B [(5.3.42c)] 中的算符 L_z+2S_z 是一个球分量 $q=0$ 的一阶张量算符 $T_{q=0}^{(k=1)}$. 在中等大小 **B** 的区间，期待值公式像 (5.3.47) 和 (5.3.49) 式那么简单是不可能的；确实有必要对角化特定的 2×2 矩阵 [Gottfried 和 Yan (2003) 著作的 5.4 节]. 在强 **B** 的极限下，能量移动仍然正比于 $|\mathbf{B}|$；如同 (5.3.49) 式中看到的，斜率由 m_l+2m_s 确定.

范德瓦耳斯 (Van der Waals) 相互作用

瑞利-薛定谔微扰论的一个重要和漂亮的应用是，计算两个处于基态的氢原子之间的长程相互作用，或**范德瓦耳斯力**. 很容易证明两个间距 r 很大的原子间的能量是吸引的，且按 r^{-6} 变化.

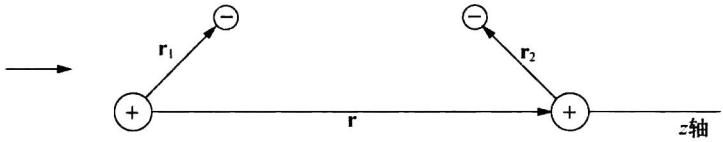


图 5.3　两个氢原子，它们的质子 (+) 被分开一个固定的距离 r，而它们的电子 (−) 相对于相应质子的位移为 $\mathbf{r}_i$.

考虑这两个氢原子的两个质子被放置在距离 r (沿 z 轴) 处，且 $\mathbf{r}_1$ 为第一个质子到它的电子的矢量，$\mathbf{r}_2$ 为第二个质子到它的电子的矢量，见图 5.3. 那么，哈密顿量 H 可记为

$$\begin{aligned}H&=H_0+V\\H_0&=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)-\frac{e^2}{r_1}-\frac{e^2}{r_2}\\V&=\frac{e^2}{r}+\frac{e^2}{|\mathbf{r}+\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1|}-\frac{e^2}{|\mathbf{r}+\mathbf{r}_2|}-\frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}.\end{aligned}\tag{5.3.53}$$

H_0 的最低能量解只是无相互作用的两个氢原子基态波函数的乘积

$$U_0^{(0)}=U_{100}^{(0)}(\mathbf{r}_1)U_{100}^{(0)}(\mathbf{r}_2).\tag{5.3.54}$$

现在在大 r 处 (≫玻尔半径 a_0)，按 $\mathbf{r}_i/\mathbf{r}$ 的幂次展开微扰 V，得到

$$V=\frac{e^2}{r^3}(x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2)+0\left(\frac{1}{r^4}\right)+\cdots.\tag{5.3.55}$$

(5.3.55) 式中最低阶的 r^{-3} 项对应于相距 **r** 的两个电偶极矩 $e\mathbf{r}_1$ 和 $e\mathbf{r}_2$ 的相互作用. 更高阶的项描述更高阶多极矩的相互作用，从而 V 中的每一项都包含球谐函数 Y_l^m，且对每一个氢原子 $l_i>0$. 因此，对 (5.3.55) 式中的每一项，都有一级微扰能量矩阵元 $V_{00}\simeq0$，这是因为对基态 $U_0^{(0)}$ 波函数 (5.3.54) 有 $l_i=0$，并且对 l 及 $m\neq0$ 有 $\int d\Omega Y_l^m(\Omega)=0$. 二级微扰

$$E^{(2)}(r)=\frac{e^4}{r^6}\sum_{k\neq0}\frac{|\langle k^{(0)}|x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2|0^{(0)}\rangle|^2}{E_0^{(0)}-E_k^{(0)}}\tag{5.3.56}$$

一相

将是非零的. 可马上看出这个相互作用按 $1/r^6$ 变化；因为 $E_k^0 > E_0^0$，所以它是负的. 这个 $1/r^6$ 的长程吸引的范德瓦耳斯势是两个处于基态原子间相互作用的一个普遍性质.*

5.4 变分法

显然，除非对一个具有十分相似的哈密顿量的系统，它的精确解已经知道，否则前面章节发展起来的微扰论是没有用的. 在得不到精确解时，现在讨论的变分法将对估算基态能量 E_0 非常有用.

试图通过使用一个设法模拟真实基态右矢 $|0\rangle$ 的“试探右矢” $|\tilde{0}\rangle$ 来猜测基态能量 E_0. 要做到这一点，首先需要一个有重要应用价值的定理. 定义这样一个 $\overline{H}$

$$\overline{H} \equiv \frac{\langle\tilde{0}|H|\tilde{0}\rangle}{\langle\tilde{0}|\tilde{0}\rangle}, \tag{5.4.1}$$

其中已经考虑到了 $|\tilde{0}\rangle$ 或许未被归一化的可能性. 接着可以证明下面的定理

定理 5.1.

$$\overline{H} \geqslant E_0. \tag{5.4.2}$$

这意味着可以通过考虑各种 $|\tilde{0}\rangle$ 来获得 E_0 的上限. 定理的证明非常简单.

证明 尽管不知道哈密顿量 H 的能量本征右矢，但可以想象 $|\tilde{0}\rangle$ 能被展开为

$$|\tilde{0}\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} |k\rangle\langle k|\tilde{0}\rangle, \tag{5.4.3}$$

其中 $|k\rangle$ 是 H 的精确能量本征右矢

$$H|k\rangle = E_k|k\rangle. \tag{5.4.4}$$

当使用 $E_k = E_k - E_0 + E_0$ 计算（5.4.1）式中的 $\overline{H}$ 时，就得到方程（5.4.2）. 有

$$\overline{H} = \frac{\sum_{k=0} |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2 E_k}{\sum_{k=0} |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2} \tag{5.4.5a}$$

$$= \frac{\sum_{k=1}^{\infty} |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2 (E_k - E_0)}{\sum_{k=0} |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2} + E_0 \tag{5.4.5b}$$

$$\geqslant E_0, \tag{5.4.5c}$$

其中在（5.4.5b）式的第一个求和中，使用了 $E_k - E_0$ 必然为正的事实. 从这个证明中也显然可以看到（5.4.2）式中的等号仅在 $|\tilde{0}\rangle$ 与 $|0\rangle$ 完全一致——即全部 $k \neq 0$ 的系数 $\langle k|\tilde{0}\rangle$ 为零——时成立.

定理（5.4.2）式是非常有用的，因为 $\overline{H}$ 提供了一个真实基态能量的上限. 此外对基态来说，一个相对差的试探右矢能够给出一个相当好的能量估算，因为如果

$$\langle k|\tilde{0}\rangle \sim 0(\varepsilon) \qquad \text{对 } k \neq 0, \tag{5.4.6}$$

* 参见 Schiff（1968）专著中 261～263 页的处理，它通过（5.3.56）式和变分计算给出了范德瓦耳斯势大小的一个下限和一个上限. 也要注意 Schiff 专著中第 263 页的第一个脚注涉及的推迟效应.

则由（5.4.5）式，有

$$\overline{H}-E_0\sim 0(\varepsilon^2). \tag{5.4.7}$$

马上就可以看到它的例子. 当然，这个方法并没有提及任何关于 $\overline{H}$ 和 E_0 的偏差，我们所知道的只是 $\overline{H}$ 大于（或等于）E_0.

阐述这个定理的另一个方法是假定 $\overline{H}$ 对变分

$$|\tilde{0}\rangle\to|\tilde{0}\rangle+\delta|\tilde{0}\rangle \tag{5.4.8}$$

是稳定的；即当 $|\tilde{0}\rangle$ 与 $|0\rangle$ 一致时，$\delta\overline{H}=0$. 这意味着，如果用 $|0\rangle+\delta|\tilde{0}\rangle$ 替换（5.4.5）式中的 $|\tilde{0}\rangle$ 并计算 $\overline{H}$，保证在估算真实基态能量中的误差涉及 $|\tilde{0}\rangle$ 的 $(\delta|\tilde{0}\rangle)^2$ 级.

变分法自身并没有告诉我们将用哪一类试探右矢估算基态能量. 很多时候不得不求助于物理直觉. 例如，远距离处波函数的行为. 实际上，我们的作法是用一个或多个参数 λ_1，λ_2，…来表征试探右矢，并且计算作为一个 λ_1，λ_2，…函数的 $\overline{H}$. 接着，通过下列步骤将 $\overline{H}$ 极小化：（1）令它对这些参数的微商全为零，即

$$\frac{\partial\overline{H}}{\partial\lambda_1}=0,\qquad \frac{\partial\overline{H}}{\partial\lambda_2}=0,\cdots, \tag{5.4.9}$$

（2）确定 λ_1，λ_2，…的最佳值，（3）将它们代回到 $\overline{H}$ 的表达式.

假如试探右矢的波函数已经具有一个精确基态能量本征函数的函数形式，用该方法当然可以得到真实的基态能量函数. 例如，假定某人有先见之明，猜测氢原子基态波函数一定有如下的形式

$$\langle\mathbf{x}|0\rangle\propto e^{-r/a}, \tag{5.4.10}$$

其中 a 作为一个变化的参数. 当使用（5.4.10）式极小化 $\overline{H}$ 时，则得到正确的基态能量 $-e^2/2a_0$. 这并不奇怪，当 a 与玻尔半径 a_0 一致时，就达到极小值.

作为第二个例子，试着估算由

$$V=\begin{cases}0, & \text{对 } |x|<a\\ \infty, & \text{对 } |x|>a\end{cases} \tag{5.4.11}$$

定义的无限深势阱（一维盒子）问题的基态. 当然其精确解是众所周知的：

$$\begin{aligned}\langle x|0\rangle&=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right),\\ E_0&=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{\pi^2}{4a^2}\right).\end{aligned} \tag{5.4.12}$$

但是假定不知道这些. 显然，波函数在 $x=\pm a$ 处必须为零；另外基态的波函数不能有任何振荡. 能同时满足这两个要求的最简单的解析函数是通过 $x=\pm a$ 的抛物线：

$$\langle x|\tilde{0}\rangle=a^2-x^2, \tag{5.4.13}$$

其中并不担心 $|\tilde{0}\rangle$ 的归一化. 这里没有变分参数. 可计算 $\overline{H}$ 如下

$$\begin{aligned}\overline{H}&=\frac{\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right)\int_{-a}^{a}(a^2-x^2)\frac{d^2}{dx^2}(a^2-x^2)dx}{\int_{-a}^{a}(a^2-x^2)^2dx}\\ &=\left(\frac{10}{\pi^2}\right)\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{8a^2m}\right)\simeq 1.0132E_0.\end{aligned} \tag{5.4.14}$$

令人吃惊的是使用这样简单的一个试探函数，竟能使其结果与真实基态能量的偏差在 1.3%之内. 如果采用一个更为复杂的试探函数就能得到更好的结果. 尝试使用

$$\langle x|\tilde{0}\rangle = |a|^{\lambda} - |x|^{\lambda}, \tag{5.4.15}$$

其中，λ 现在被视为一个变分参数. 直截了当的代数运算给出

$$\overline{H} = \left[\frac{(\lambda+1)(2\lambda+1)}{(2\lambda-1)}\right]\left(\frac{\hbar^2}{4ma^2}\right), \tag{5.4.16}$$

它具有一个在

$$\lambda = \frac{(1+\sqrt{6})}{2} \simeq 1.72 \tag{5.4.17}$$

处的极小值，与前面考虑的 $\lambda=2$（的一个抛物线）相距不远. 结果给出了

$$\overline{H}_{\text{极小}} = \left(\frac{5+2\sqrt{6}}{\pi^2}\right)E_0 \simeq 1.00298E_0. \tag{5.4.18}$$

所以，使用（5.4.15）式的变分法给出了误差在 0.3% 之内的正确基态能量——考虑到所用试探函数简单性，这是一个意想不到的结果.

这个试探函数对真实基态函数的模拟有多好？有趣的是不必具体计算重叠积分 $\langle 0|\tilde{0}\rangle$ 就能回答这个问题. 假定 $|\tilde{0}\rangle$ 是归一化的，有［由（5.4.1）～（5.4.4）式］

$$\begin{aligned}\overline{H}_{\text{极小}} &= \sum_{k=0}^{\infty} |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2 E_k \\ &\geqslant |\langle 0|\tilde{0}\rangle|^2 E_0 + 9E_0(1-|\langle 0|\tilde{0}\rangle|^2),\end{aligned} \tag{5.4.19}$$

其中 $9E_0$ 是第二激发态的能量. 由于宇称守恒的原因，第一激发态（$k=1$）没有贡献. 求解 $|\langle 0|\tilde{0}\rangle|$ 并使用（5.4.18）式，得到

$$|\langle 0|\tilde{0}\rangle|^2 \geqslant \frac{9E_0 - \overline{H}_{\text{极小}}}{8E_0} = 0.99963. \tag{5.4.20}$$

与 1 的偏离表征了 $|\tilde{0}\rangle$ 在与 $|0\rangle$ 正交方向上存在的一个分量. 如果谈及由

$$\langle 0|\tilde{0}\rangle = \cos\theta \tag{5.4.21}$$

定义的“角度”θ，则（5.4.20）式对应着

$$\theta \lesssim 1.1^{\circ}, \tag{5.4.22}$$

所以，$|0\rangle$ 和 $|\tilde{0}\rangle$ 几乎是“平行的”.

变分法最早期的应用之一涉及氦原子的基态能量，在 7.4 节将讨论它. 变分法也能用于第一激发态能量的估算；所需做的是使用一个正交于基态波函数的试探右矢——如果已知的话，它可以是精确的；也可以是通过变分法近似得到的.

5.5 时间相关的势：相互作用绘景

问题的提出

至此，在这本书中已经考虑了不显含时间的哈密顿量. 然而，实际上有很多重要的与时间相关的量子力学系统. 在本章的剩余部分，将展示如何处理含有时间相关势的情况.

考虑这样的一个哈密顿量 H，它能够被分成两个部分

$$H = H_0 + V(t), \tag{5.5.1}$$

式中的 H_0 不显含时间. 假定 $V(t)=0$ 的问题已经在下述的意义上求得了解，即由

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{5.5.2}$$

定义的能量本征右矢$|n\rangle$和能量本征值E_n已经完全知道*. 我们可能对开始只有一个H_0的本征态——例如$|i\rangle$态——被占据的情形感兴趣. 然而，因为$V(t) \neq 0$，随着时间的推移，非$|i\rangle$态被占据了，不再处理“定态”问题；当H自身包含了时间，时间演化算符不再像$e^{-iHt/\hbar}$那么简单. 时间相关的势$V(t)$常常会引起非$|i\rangle$态的跃迁. 我们要论述的基本问题是：作为系统处于$n \neq i$的$|n\rangle$态的时间函数的概率是什么？

更普遍地，我们可能对随着时间的推移任意态矢如何变化感兴趣，在那里总哈密顿量是H_0和$V(t)$之和. 假定在$t=0$时，一个物理系统的态矢是

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n(0)|n\rangle. \tag{5.5.3}$$

我们希望找到在$t>0$时的$c_n(t)$使得

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \sum_n c_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle, \tag{5.5.4}$$

其中左边的右矢是在t时刻时，一个物理系统在薛定谔绘景中的右矢，在$t=0$时它的态右矢为$|\alpha\rangle$.

敏锐的读者可能已经注意到将（5.5.4）式中$|n\rangle$的系数的时间相关性分离出来的方式. 即使V不存在，因子$e^{-iE_nt/\hbar}$也是存在的. 这种时间依赖性的写法使得下面几点非常清晰：仅仅由于$V(t)$的出现，才引起$c_n(t)$的时间演化；假如V等于零，$c_n(t)$就会完全等于$c_n(0)$，因此不依赖于t. 正如马上就要看到的，这种分离是方便的，因为$c_n(t)$满足相对简单的微分方程. 而找到$|n\rangle$的概率可以通过计算$|c_n(t)|^2$得到.

相互作用绘景

在讨论有关$c_n(t)$的微分方程之前，先讨论相互作用绘景. 假如有这样的一个物理系统，它的态右矢与$t=t_0$时的$|\alpha\rangle$一致，其中t_0常常被取为零. 随后，用$|\alpha, t_0; t\rangle_S$来表示薛定谔绘景中的态右矢，其中下脚标S提示正在处理薛定谔绘景的态右矢.

现在定义

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = e^{iH_0t/\hbar}|\alpha, t_0; t\rangle_S, \tag{5.5.5}$$

其中$|\rangle_I$是一个在相互作用绘景中代表相同物理情况的态右矢. 在$t=0$时，$|\rangle_I$与$|\rangle_S$显然是一致的. 对算符（代表可观测量）来说，们在相互作用绘景把可观测量定义为

$$A_I \equiv e^{iH_0t/\hbar}A_Se^{-iH_0t/\hbar}. \tag{5.5.6}$$

特别是

$$V_I \equiv e^{iH_0t/\hbar}Ve^{-iH_0t/\hbar} \tag{5.5.7}$$

其中没有下脚标的V被理解为薛定谔绘景中的时间相关势. 在这里，读者可能会回顾薛定谔绘景和海森伯绘景之间的联系

$$|\alpha\rangle_H = e^{+iHt/\hbar}|\alpha, t_0 = 0; t\rangle_S \tag{5.5.8}$$

$$A_H = e^{iHt/\hbar}A_Se^{-iHt/\hbar}. \tag{5.5.9}$$

（5.5.8）式和（5.5.9）式与（5.5.6）式和（5.5.7）式的基本区别是出现在指数中的是H而不是H_0.

现在推导表征相互作用绘景中态右矢时间演化的基本微分方程. 对基于由（5.5.1）

---

* 在（5.5.2）式中不再使用记号$|n^{(0)}\rangle$，$E_n^{(0)}$.

式给出的完整 H 的（5.5.5）式取时间导数：

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle_I &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(e^{iH_0t/\hbar}|\alpha,t_0;t\rangle_S) \\ &= -H_0e^{iH_0t/\hbar}|\alpha,t_0;t\rangle_S + e^{iH_0t/\hbar}(H_0+V)|\alpha,t_0;t\rangle_S \\ &= e^{iH_0t/\hbar}Ve^{-iH_0t/\hbar}e^{iH_0t/\hbar}|\alpha,t_0;t\rangle_S. \end{aligned} \tag{5.5.10}$$

于是可看到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle_I = V_I|\alpha,t_0;t\rangle_I, \tag{5.5.11}$$

它是一个用 V_I 替换总的 H 的类薛定谔方程. 换句话说，假如 V_I 不存在的话，则 $|\alpha,t_0;t\rangle_I$ 将会是一个时间上固定的右矢. 对可观测量 A（在薛定谔绘景中不显含时间 t），能证明

$$\frac{dA_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_I,H_0], \tag{5.5.12}$$

这是一个将 H 替换为 H_0 的类海森伯方程.

在很多方面，相互作用绘景，或狄拉克绘景，介于薛定谔绘景和海森伯绘景之间. 这一点从表5.2中可明确地看到.

表 5.2

	海森伯绘景	相互作用绘景	薛定谔绘景
态右矢	无变化	由 V_I 确定的演化	由 H 确定的演化
可观测量	由 H 确定的演化	由 H_0 确定的演化	无变化

在相互作用绘景，继续用 $|n\rangle$ 作为基右矢. 这样，可将 $|\rangle_I$ 展开如下：

$$|\alpha,t_0;t\rangle_I = \sum_n c_n(t)|n\rangle. \tag{5.5.13}$$

当把 t_0 置为0时，看到出现在这里的 $c_n(t)$ 与（5.5.4）式中引入的 $c_n(t)$ 是一样的，这一点可通过将（5.5.4）式的两边乘以 $e^{iH_0t/\hbar}$ 且使用（5.5.2）式很容易得到证明.

最终，可以写出 $c_n(t)$ 的微分方程了. 在（5.5.11）式的两边左乘 $\langle n|$，得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle n|\alpha,t_0;t\rangle_I = \sum_m\langle n|V_I|m\rangle\langle m|\alpha,t_0;t\rangle_I. \tag{5.5.14}$$

使用

$$\langle n|e^{iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar}|m\rangle = V_{nm}(t)e^{i(E_n-E_m)t/\hbar}$$

和

$$c_n(t) = \langle n|\alpha,t_0;t\rangle_I,$$

这个微分方程也可以［由（5.5.13）式］写成

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) = \sum_m V_{nm}e^{i\omega_{nm}t}c_m(t), \tag{5.5.15}$$

其中

$$\omega_{nm} \equiv \frac{(E_n-E_m)}{\hbar} = -\omega_{mn}. \tag{5.5.16}$$

确切地说

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1\\ \dot{c}_2\\ \dot{c}_3\\ \vdots\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & \cdots\\ V_{21}e^{i\omega_{21}t} & V_{22} & \cdots\\ & & V_{33} \quad \cdots\\ \vdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\\ c_3\\ \vdots\end{pmatrix}. \tag{5.5.17}$$

这就是为了求得作为时间 t 的函数的、找到 $|n\rangle$ 态的概率所必须求解的基本耦合微分方程.

时间相关的双态问题：核磁共振，微波激射器等等

可以精确求解的时间相关势的问题相当稀少. 在绝大多数情况下，不得不求助于微扰展开去解耦合微分方程 (5.5.17)，在下一节将讨论它. 然而，存在一个很有实际意义的问题，它能被严格求解——一个具有正弦振动势的双态问题.

这个问题由

$$\begin{aligned}H_0&=E_1|1\rangle\langle 1|+E_2|2\rangle\langle 2| \quad (E_2>E_1)\\ V(t)&=\gamma e^{i\omega t}|1\rangle\langle 2|+\gamma e^{-i\omega t}|2\rangle\langle 1|\end{aligned} \tag{5.5.18}$$

定义，其中 γ 和 ω 都是正实数. 用 (5.5.14) 式和 (5.5.15) 式的语言来说，有

$$\begin{aligned}V_{12}&=V_{21}^{*}=\gamma e^{i\omega t}\\ V_{11}&=V_{22}=0.\end{aligned} \tag{5.5.19}$$

这样，就有了一个时间相关势，它联系着 H_0 的两个能量本征态. 换句话说，能有两个态间的跃迁 $|1\rangle\leftrightarrows|2\rangle$.

这个问题有一个精确解. 如果开始——在 $t=0$ 时——只有较低的能级被占据，使得 [见 (5.5.3) 式]

$$c_1(0)=1,\quad c_2(0)=0, \tag{5.5.20}$$

则找到这两个态中的每个态的概率由（以分子束技术之父 I. I. Rabi 的名字命名的 Rabi 公式）

$$|c_2(t)|^2=\frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2+(\omega-\omega_{21})^2/4}\sin^2\left\{\left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2}+\frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4}\right]^{1/2}t\right\} \tag{5.5.21a}$$

$$|c_1(t)|^2=1-|c_2(t)|^2 \tag{5.5.21b}$$

给出，其中

$$\omega_{21}\equiv\frac{(E_2-E_1)}{\hbar}, \tag{5.5.22}$$

这个结果读者可通过解答本章习题 5.30 来证明.

现在仔细地看一下 $|c_2|^2$. 可以看到，找到较高能态 E_2 的概率显示出一个振动的时间依赖关系，其角频率两倍于

$$\Omega=\sqrt{\left(\frac{\gamma^2}{\hbar^2}\right)+\frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4}}. \tag{5.5.23}$$

当

$$\omega\simeq\omega_{21}=\frac{(E_2-E_1)}{\hbar} \tag{5.5.24}$$

时，即当势的角频率——通常是由于外加的电场或磁场——几乎等于双态系统的特征角频率时，振动的振幅非常大. 因此，(5.5.24) 式被称为**共振条件**.

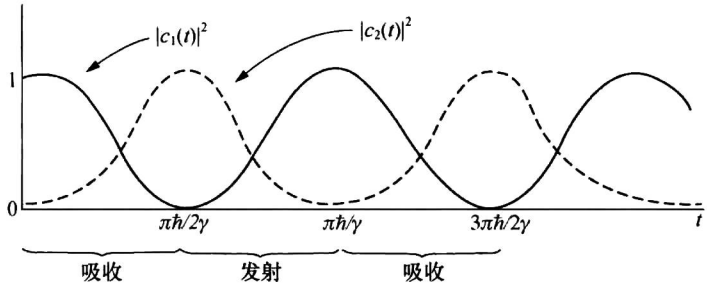


图 5.4 精确地处于共振处 $\omega=\omega_{21}$ 和 $\Omega=\gamma/\hbar$ 的 $|c_1(t)|^2$ 和 $|c_2(t)|^2$ 随时间 t 变化的曲线. 该图也描述了在 $|1\rangle$ 态和 $|2\rangle$ 态间往返跃迁的行为.

稍微仔细地观察正好在共振处

$$\omega=\omega_{21},\quad \Omega=\frac{\gamma}{\hbar} \tag{5.5.25}$$

的（5.5.21a）式和（5.5.21b）式是有益的. 可以画出 $|c_1(t)|^2$ 和 $|c_2(t)|^2$ 作为 t 的函数曲线，见图 5.4. 从 $t=0$ 到 $t=\pi\hbar/2\gamma$，这个双能级系统从时间相关势 $V(t)$ 吸收能量，当 $|c_2(t)|^2$ 变大时，$|c_1(t)|^2$ 由 1 减小. 当 $t=\pi\hbar/2\gamma$ 时，只有较高的能级被占据. 从 $t=\pi\hbar/2\gamma$ 到 $t=\pi\hbar/\gamma$，系统将其［激发态（较高能态）］超出的能量交还给 $V(t)$，此时 $|c_2|^2$ 减小而 $|c_1|^2$ 增大. 这种吸收-发射的循环无限地重复，就像在图 5.4 中展示的那样，因此可把 $V(t)$ 视为能量的源或漏，换句话说，$V(t)$ 可以引起从 $|1\rangle$ 到 $|2\rangle$（吸收）或从 $|2\rangle$ 到 $|1\rangle$（发射）的跃迁. 在讨论辐射的发射和吸收时，将回到这一点.

甚至在偏离共振点的地方，吸收-发射循环依然发生. 然而，现在 $|2\rangle$ 态的振动幅度减小了，$|c_2(t)|^2_{\text{最大}}$ 不再是 1，并且，$|c_1(t)|^2$ 不再一直衰减到 0. 在图 5.5 中，画出了 $|c_2(t)|^2_{\text{最大}}$ 作为 ω 函数的图. 这条曲线在 $\omega=\omega_{21}$ 附近有一个共振峰，它在极大值一半处的总宽度由 $4\gamma/\hbar$ 给出. 值得指出，时间相关势越弱（γ 小），共振峰越窄.

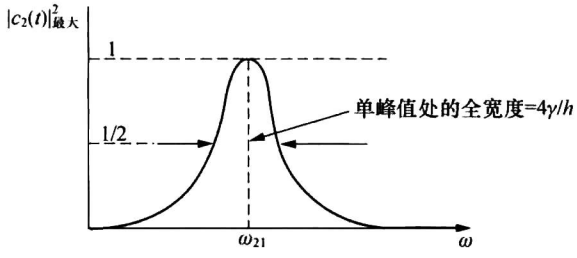


图 5.5 $|c_2(t)|^2_{\text{最大}}$ 作为 ω 函数的图，其中 $\omega=\omega_{21}$ 对应着共振频率

自旋-磁共振：

由（5.5.18）式定义的双态问题有着很多物理应用. 作为第一个例子，考虑一个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的系统——如一个被束缚电子——受到一个与 t 无关的、沿 z 方向的均匀磁场的作用，此外还受到一个与 t 相关的、在 xy 平面转动的磁场的作用

$$\mathbf{B}=B_0\hat{\mathbf{z}}+B_1(\hat{\mathbf{x}}\cos\omega t+\hat{\mathbf{y}}\sin\omega t), \tag{5.5.26}$$

其中 B_0 和 B_1 均为常数. 将均匀的、t 无关的磁场的效应视为 H_0，并将旋转磁场的效应视为 V. 对

$$\boldsymbol{\mu}=\frac{e}{m_e c}\mathbf{S} \tag{5.5.27}$$

有

$$\begin{aligned} H_0&=\left(\frac{e\hbar B_0}{2m_e c}\right)(|+\rangle\langle+|-|-\rangle\langle-|)\\ V(t)&=-\left(\frac{e\hbar B_1}{2m_e c}\right)[\cos\omega t(|+\rangle\langle-|+|-\rangle\langle+|)\\ &\quad+\sin\omega t(-i|+\rangle\langle-|+i|-\rangle\langle+|)] \end{aligned} \tag{5.5.28}$$

其中使用了 $2S_j/\hbar$ 的右矢-左矢形式［见（3.2.1）式］. 在 $e<0$ 时，E_+ 具有比 E_- 更高的能量，可以确认

$$\begin{aligned} |+\rangle&\to|2\rangle\quad\text{（较高能级）}\\ |-\rangle&\to|1\rangle\quad\text{（较低能级）} \end{aligned} \tag{5.5.29}$$

使其与（5.5.18）式的记号一致. 这个双态系统的特征角频率为

$$\omega_{21}=\frac{|e|B_0}{m_e c}, \tag{5.5.30}$$

这正是在 2.1 节处理过的、$B_0\neq0$ 而 $B_1=0$ 问题的自旋进动频率. 尽管自旋在逆时针方向（从正 z 轴一边看到的）的进动导致了 $\langle S_{x,y}\rangle$ 期待值的变化，$|c_+|^2$ 和 $|c_-|^2$ 在没有旋转（磁）场时仍保持不变. 作为旋转场的结果，现在加上了一个新的特性：$|c_+|^2$ 和 $|c_-|^2$ 确实随时间变化. 这一点可通过取

$$\frac{-e\hbar B_1}{2m_e c}\to\gamma,\quad \omega\to\omega, \tag{5.5.31}$$

使其与（5.5.18）式的记号一致；而时间相关的相互作用（5.5.28）严格地取（5.5.18）的形式. $|c_+(t)|^2$ 和 $|c_-(t)|^2$ 按照，比如 $\omega=\omega_{21}$ 时的图 5.4 和相应的（5.5.29）式所示的方式变化的事实，暗示着自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统将在自旋进动之外，经历一连串的自旋翻转，$|+\rangle\leftrightarrows|-\rangle$. 这类自旋翻转可半经典地解释成旋转磁场 $\mathbf{B}$ 施加的驱动转矩引起的结果.

每当旋转磁场的频率与由均匀磁场强度确定的自旋进动的频率一致时，共振条件就被满足. 可以看到自旋翻转的概率特别大.

实际上，可能很难在实验中产生一个旋转的磁场. 幸运的是，一个水平的振动磁场——例如，在 x 方向——也可以. 为了看清这点，首先指出这样的一个振动场能被分解成一个逆时针分量和一个顺时针分量

$$2B_1\hat{\mathbf{x}}\cos\omega t=B_1(\hat{\mathbf{x}}\cos\omega t+\hat{\mathbf{y}}\sin\omega t)+B_1(\hat{\mathbf{x}}\cos\omega t-\hat{\mathbf{y}}\sin\omega t). \tag{5.5.32}$$

只需要反转 ω 的符号来就可以获得逆时针分量的效应. 假定逆时针分量满足共振条件

$$\omega\simeq\omega_{21}. \tag{5.5.33}$$

在一个典型的实验条件下，

$$\frac{B_1}{B_0}\ll1, \tag{5.5.34}$$

由（5.5.30）和（5.5.31）式，意味着

$$\frac{\gamma}{\hbar}\ll\omega_{21}. \tag{5.5.35}$$

作为一个结果，每当逆时针分量满足共振条件时，顺时针分量的效应完全可以被忽略，因为它相当于 $\omega_+ - \omega_-$，并且振幅的幅度变得很小，且振动地非常快.

解得的共振问题在解释原子分子束流和核磁共振实验上是十分重要的. 通过改变振动场的频率，有可能对磁矩进行非常精确的测量. 前面在微分方程（5.5.17）解的基础上进行了讨论；这个问题也许还能通过引入拉比，施温格和范弗莱克（Van Vleck）的转动轴表象更漂亮地解决.

微波激射器

作为时间相关的双态问题的另一个应用，来考虑一个**微波激射器**. 具体地，考虑一个氨分子 NH_3——正像在4.2节看到的——它具有两个宇称本征态 $|S\rangle$ 和 $|A\rangle$，它们靠得非常近，且 $|A\rangle$ 态稍高. 令 μ_{el} 为分子的电偶极算符. 出于对称性考虑，期待 μ_{el} 正比于氮（N）原子的位置算符 $\mathbf{x}$. 基本相互作用是 $-\mu_{el}\cdot\mathbf{E}$ 的形式，对微波激射器来说，$\mathbf{E}$ 是微波腔中的一个时间相关的电场

$$\mathbf{E} = |\mathbf{E}|_{\text{极大}}\hat{\mathbf{z}}\cos\omega t. \tag{5.5.36}$$

因为在微波区域中波长远大于分子尺度，忽略 $\mathbf{E}$ 的空间变化是合理的. 而频率 ω 就成了 $|A\rangle$ 和 $|S\rangle$ 间的能量之差：

$$\omega \simeq \frac{(E_A - E_S)}{\hbar}. \tag{5.5.37}$$

偶极矩算符的对角矩阵元因为宇称的原因为零

$$\langle A|\mu_{el}|A\rangle = \langle S|\mu_{el}|S\rangle = 0, \tag{5.5.38}$$

但一般说来，非对角矩阵元不为零

$$\langle S|\mathbf{x}|A\rangle = \langle A|\mathbf{x}|S\rangle \neq 0. \tag{5.5.39}$$

这意味着存在一个联系着 $|S\rangle$ 态和 $|A\rangle$ 态的时间相关的势，前面讨论过的一般的双态问题现在是可用的.

现在可以讨论微波激射器如何工作了. 对给定的一束既包含 $|S\rangle$ 态又包含 $|A\rangle$ 态的 NH_3 分子束流，首先让它通过一个与时间无关的非均匀电场的区域以消除 $|S\rangle$ 分量. 这样的一个电场把 $|S\rangle$ 态从 $|A\rangle$ 态中分离出去，大体上与在斯特恩-盖拉赫实验中的非均匀磁场将 $|+\rangle$ 态从 $|-\rangle$ 态中分离出去的情况相同. 其后，一束纯 $|A\rangle$ 态束流进入调谐到能量差 $E_A - E_S$ 的微波腔. 这个腔具有这样的尺度，使得分子花费的时间正好是 $(\pi/2)\hbar/\gamma$. 结果，我们保持在图5.4的第一个发射相；有 $|A\rangle$ 态进来和 $|S\rangle$ 态出去. 当 $|A\rangle$ 态转换成 $|S\rangle$ 态时，$|A\rangle$ 态多余的能量都给了时间相关的势，因此辐射（微波）场获得了能量. 这样，通过辐射的受激发射，或微波激射，获得了微波增益.

一般时间相关的双态问题还有很多其他应用，例如原子钟和光泵. 事实上，很有趣地看到已有四个诺贝尔物理奖颁发给那些探索某些形式的时间相关双态系统的科学家.*

5.6 具有极端时间依赖性的哈密顿量

这一节在极快或极慢时间依赖情况下使用某些“明显的”近似，专门讨论时间相关的

---

* 利用双能级系统中的共振获得诺贝尔奖的获奖者是：Rabi（1944）因分子束和核磁共振；Bloch 和 Purcell（1952）因在原子核中的 **B** 场和核磁共振；Townes，Basov 和 Prochorov（1964）因微波激射器、激光和量子光学；以及 Kastler（1966）因光泵.

哈密顿量. 虽然仔细的观察指出了一些有趣现象，但其中之一直至二十世纪末还是没有公布于众.

这里的处理只局限于基础的讨论，并紧跟着给出一些具体的例子. 一个没有讨论的有用例子是阱壁可收缩或扩展的方势阱，在那里阱壁可能快速或缓慢地移动. 对这些情况有兴趣的读者请参考 D. N. Pinder, *Am. J. Phys* **58** (1990) 54 及 D. W. Schlitt and C. Stutz, *Am. J. Phys* **38** (1970) 70.

瞬变近似

如果一个哈密顿量非常迅速地变化，那么系统“没有时间”去适应这个变化. 这使得系统停留在变化前它曾处于的同样的态，这是所谓“瞬变近似”的实质.

当然，尽管之前它可能处于一个本征态，但没有理由相信，它是变换后哈密顿量的一个本征态. 有趣的物理有机会在那里出现. 一个经典的例子是在氚原子 β 衰变后，$^3He^+$ 离子中电子末态布居的计算*. 见本章末的习题 5.35.

让我们考虑瞬变近似的一个更为精确的提法，并给出某些结果. 把时间演化算符 (2.1.25) 式的薛定谔方程重写为

$$i\frac{\partial}{\partial s}\mathcal{U}(t,t_0)=\frac{H}{\hbar/T}\mathcal{U}(t,t_0)=\frac{H}{\hbar\Omega}\mathcal{U}(t,t_0), \tag{5.6.1}$$

其中用无量纲参数 s 和一个时间标度 T 把时间写成 $t=sT$，并定义 $\Omega\equiv 1/T$. 在瞬变近似中，时间标度 $T\to 0$，这意味着 $\hbar\Omega$ 将比 H 代表的能量标度大得多. 假定能通过加上或减去一个任意常数来重新定义 H，将一些总体相因子引入态矢量中，就可看到

$$\mathcal{U}(t,t_0)\to 1 \qquad \text{当 } T\to 0. \tag{5.6.2}$$

这就证实了瞬变近似的合理性. 如果 T 比 $2\pi/\omega_{ab}$ 小，其中 $E_{ab}=\hbar\omega_{ab}$ 是哈密顿量 H 的两个相应本征值间的差，这种近似应该是合适的.

绝热近似

我们倾向于把绝热近似看作理所当然的. 给定一个依赖于某参数组的哈密顿量 H，将寻找依赖于那些参数值的能量本征值. 如果参数随时间“缓慢”变化，则能量本征值将会直接追随参数变化时所得到的数值. 关键的问题是这里所说的“缓慢”意味着什么. 以量子力学的或其他的方式，可以假定意味着，对能量本征值中的某些能量差 E_{ab}，这些参数在比 $2\pi/\omega_{ab}=2\pi\hbar/E_{ab}$ 大得多的一个时间标度 T 上变化.

一个显而易见的经典例子是在地球表面附近各处搬动的一个钟摆. 当你爬上一座山，而钟摆将保持行为正常，那么只要高度变化的时间比钟摆的周期长，则随着引力的减小，只是周期慢慢延长. 如果缓慢地改变穿透氢原子的电场，能级将按照 5.2 节中斯塔克效应的计算一步步变化.

从量子力学的观点考虑绝热变化的数学. 沿用 Griffiths (2005) 给出的处理方法，并特别注意作为时间函数的相位的变化. 用指标 n 依序对态编号，并假定没有简并**，所以

---

* 这对试图从 β 衰变的测量中推断非零中微子质量的现代物理实验来说有重要的暗示. 例如：在撰写本书时，卡尔斯鲁厄 (Karlsruhe) 氚中微子实验 (KATRIN) 正在进行之中. 见 J. Bonn, *AIP Conf. Proc.* **972** (2008) 404.

** 这不是一个有意义的约束. 如果一段时间之后简并被 $H(t)$ 破坏，就可以从那里“开始”. 如果简并从未被 $H(t)$ 破坏，它就无关了.

随时间变化不会有态序交叉的混淆. 以（2.1.27）式为出发点，但将取 $t_0=0$，以便在我们的记号中压缩掉初始时间.

从使用下述写法的本征值方程开始

$$H(t)|n;t\rangle = E_n(t)|n;t\rangle, \tag{5.6.3}$$

只不过要注意，在任意特定的时间 t，态和本征值都可能变化. 如果现在寻找形式为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha;t\rangle = H(t)|\alpha;t\rangle \tag{5.6.4}$$

的薛定谔方程的通解，则可以有

$$|\alpha;t\rangle = \sum_n c_n(t)e^{i\theta_n(t)}|n;t\rangle, \tag{5.6.5}$$

其中

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'. \tag{5.6.6}$$

马上可以证明把展开系数分离成因子 $c_n(t)$ 和 $\exp(i\theta_n(t))$ 是有用的. 把（5.6.5）式代入（5.6.4）式，并使用（5.6.3）式，有

$$\sum_n e^{i\theta_n(t)}\left[\dot{c}_n(t)|n;t\rangle + c_n(t)\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right] = 0. \tag{5.6.7}$$

现在取与 $\langle m;t|$ 的内积并援引等时本征态的正交性，就得到 $c_n(t)$ 的微分方程，即

$$\dot{c}_m(t) = -\sum_n c_n(t)e^{i[\theta_n(t)-\theta_m(t)]}\langle m;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right]. \tag{5.6.8}$$

内积 $\langle m;t|(\partial/\partial t)|n;t\rangle$ 是一个新的特点. 假如 H 不是时间相关的，则 $|n;t\rangle$ 将会是定态，呈现出通常的指数时间相关性. 为了在一般的情况下处理这个问题，可回到（5.6.3）式，并对两边都取时间导数. 对 $m\neq n$ 的情况，我们发现

$$\langle m;t|\dot{H}|n;t\rangle = [E_n(t)-E_m(t)]\langle m;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right]. \tag{5.6.9}$$

最终能把（5.6.8）式重写为

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t)\langle m;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|m;t\rangle\right] - \sum_n c_n(t)e^{i(\theta_n-\theta_m)}\frac{\langle m;t|\dot{H}|n;t\rangle}{E_n-E_m}. \tag{5.6.10}$$

这是一般的时间相关问题的形式解. 方程（5.6.10）表明，随着时间推移，由于哈密顿量 H 的时间相关性，$n\neq m$ 的态将通过第二项与 $|m;t\rangle$ 态相混合.

现在可以使用绝热近似了，该近似相当于忽略（5.6.10）式中的第二项. 这大体上意味着

$$\frac{\langle m;t|\dot{H}|n;t\rangle}{E_{nm}} \equiv \frac{1}{\tau} \ll \langle m;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|m;t\rangle\right] \sim \frac{E_m}{\hbar}. \tag{5.6.11}$$

换句话说，哈密顿量变化的时间标度 τ 与态的相因子自然频率的倒数相比较必须非常大. 也就是说，正如在地球附近各处摆动的钟摆，哈密顿量的变化远慢于系统的振动频率. 所以有

$$c_n(t) = e^{i\gamma_n(t)}c_n(0) \tag{5.6.12}$$

其中

$$\gamma_n(t) \equiv i\int_0^t \langle n;t'|\left[\frac{\partial}{\partial t'}|n;t'\rangle\right]dt'. \tag{5.6.13}$$

注意，根据这个定义，$\gamma_n(t)$ 是实的，因为

$$0=\frac{\partial}{\partial t}\langle n;t|n;t\rangle=\left[\frac{\partial}{\partial t}\langle n;t|\right]|n;t\rangle+\langle n;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right] \tag{5.6.14}$$

或，换句话说，

$$\left(\langle n;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right]\right)^{*}=-\langle n;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right] \tag{5.6.15}$$

在这种情况下，(5.6.13) 式中的被积函数是纯虚的.

因此，在绝热近似中，如果系统开始处于 $H(0)$ 的一个本征态 $|n\rangle$，则由于 $c_i(0)=0$，它将保持在 $H(t)$ 本征态 $|n;t\rangle$，除非 $i=n$，在那个情况下 $c_n(0)=1$. 运用 (5.6.5) 式及 (5.6.12) 式，用一个明显的标记法，有

$$|\alpha^{(n)};t\rangle=e^{i\gamma_n(t)}e^{i\theta_n(t)}|n;t\rangle. \tag{5.6.16}$$

就其本身看 (5.6.16) 式很难使用，因为 (5.6.13) 式的定义假定态的时间依赖性已给出，而我们需要找到充分利用这个结果的方法. 在任何情况下，很容易看到这个结果是自洽的. 已知对 H 不是时间相关的情况，预期

$$|n;t\rangle=e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle, \tag{5.6.17}$$

所以

$$\langle n;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right]=-i\frac{E_n}{\hbar}, \tag{5.6.18}$$

通过 (5.6.13) 式，它给出了 $\gamma_n(t)=+E_nt/\hbar$. 另外一方面，(5.6.6) 式指出 $\theta_n(t)=-E_nt/\hbar$. 这样，(5.6.16) 式中的两个指数因子相互抵消，并且正像所期待的，我们发现

$$|\alpha^{(n)};t\rangle=|n;t\rangle\qquad\text{对 } H\neq H(t). \tag{5.6.19}$$

这个新相位 $\gamma_n(t)$ 的加入仅仅是绝热近似的结果，这一点并非显然. 多年来，人们并不认为它值得探求，直到发现它实际上是可测量的. 的确，结果证明它原来就是牵涉到有时间周期性系统的无数物理现象的量子力学表现.

贝里相位

对 (5.6.13) 式含义的兴奋度随着贝里所著的《伴随绝热变化的量子相因子》(*Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic changes*) 在 *Proceedings of the Royal Society of London*, Series A 392 (1984) 45 上的发表，引人注目地增长. 的确，对在闭合环上移动的系统，所积累的相因子常被称为贝里相位，尽管贝里自己称其为一个“几何相位”.

贝里的文章被广泛地引用，有兴趣的读者能毫无困难地找到很多文献. 特别地，一篇霍斯坦 (B. R. Holstein) 在 *Am. J. Phys.* **57** (1989) 1079 发表的文章《绝热定理和贝里相位》(*The Adiabatic Theorem and Berry's Phase*)，简明扼要并不失趣味性. 事实上，贝里介绍了在他之前该方面工作的动人史实. 参见他在 *Physics Today*, December 1990 上发表的《几何相位的预期》(*Anticipations of the Geometric Phase*).

假定哈密顿量的时间相关性由一个“矢量参数” $\mathbf{R}(t)$ 描述. 也就是说，存在某个空间，在那里一个矢量 $\mathbf{R}(t)$ 的分量确定哈密顿量和它作为时间函数的变化. (在下面的一个例子里，$\mathbf{R}(t)$ 将是磁场.) 因此，有 $E_n(t)=E_n(\mathbf{R}(t))$ 和 $|n;t\rangle=|n(\mathbf{R}(t))\rangle$，以及

$$\langle n;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right]=\langle n;t|[\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle]\cdot\frac{d\mathbf{R}}{dt}, \tag{5.6.20}$$

其中 $\nabla_{\mathbf{R}}$ 只是一个空间 $\mathbf{R}$ 方向的梯度算符. 那么几何相位 (5.6.13) 就变成

$$\gamma_n(T)=i\int_0^T\langle n;t|[\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle]\cdot\frac{d\mathbf{R}}{dt}dt$$
$$=i\int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(T)}\langle n;t|[\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle]\cdot d\mathbf{R}. \tag{5.6.21}$$

在 T 描述一个完整循环周期的情况下，$\mathbf{R}(T)=\mathbf{R}(0)$，其中矢量 $\mathbf{R}$ 沿着一条曲线 C 移动，我们有

$$\gamma_n(C)=i\oint\langle n;t|[\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle]\cdot d\mathbf{R}. \tag{5.6.22}$$

用一个标记方法显示出我们打算怎么继续做下去，定义

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R})\equiv i\langle n;t|[\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle], \tag{5.6.23}$$

在该情况中，使用推广到 $\mathbf{R}$ 维的斯托克斯定理*有

$$\gamma_n(C)=\oint_C\mathbf{A}_n(\mathbf{R})\cdot d\mathbf{R}=\int[\nabla_{\mathbf{R}}\times\mathbf{A}_n(\mathbf{R})]\cdot d\mathbf{a}. \tag{5.6.24}$$

（这里，测度 $d\mathbf{a}$ 是一个由闭合路径包围的某曲面上的微小面积元.）这样，贝里相位就可由一个广义场

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R})\equiv\nabla_{\mathbf{R}}\times\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \tag{5.6.25}$$

通过 $\mathbf{R}(t)$ 移动一个完整循环所遵循的环线包围的曲面 $\mathbf{S}$ 的“通量”确定. 不论 $\mathbf{R}(t)$ 的真实路径如何，只要总的通量相同，人们就能得到相同的位相 γ_n. 注意，十分类似于结果（5.6.15）的推导，$\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ 和 $\mathbf{B}_n(\mathbf{R})$ 都是纯实的量. 马上将考虑 $\mathbf{B}_n(\mathbf{R})$ 场的源.

方程（5.6.24）有一个异常的特性，该特性背弃了选取使用 $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ 的标记方法. 假定对 $|n;t\rangle$ 态乘以一个通过 $\mathbf{R}$ 空间变化的任意相因子. 也就是说，

$$|n;t\rangle\longrightarrow e^{i\delta(\mathbf{R})}|n;t\rangle. \tag{5.6.26}$$

那么根据（5.6.23）式，有

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R})\longrightarrow\mathbf{A}_n(\mathbf{R})-\nabla_{\mathbf{R}}\delta(\mathbf{R}) \tag{5.6.27}$$

它使（5.6.24）式不变. 换句话说，尽管起点是（5.6.16）式，$\gamma_n(C)$ 的值不依赖沿路径的相位行为细节. $\gamma_n(C)$ 确实仅依赖于由 $\mathbf{R}(t)$ 所遵循的路径的几何形状——因此称之为几何相位. 当然，仍然要证明，至少在一定的条件下，$\gamma_n(C)$ 是非零的. 还要指出，（5.6.26）式和（5.6.27）式与电磁学中规范变换的表达式有着完全相同的形式. 见（2.7.36）式和（2.7.49）式. 在结束本节前，这种相似性将被深究.

现在转到 $\gamma_n(C)$ 的估算. 首先指出因为旋量的旋度为零，可以把（5.6.23）式和（5.6.25）式结合在一起，得到

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R})=i[\nabla_{\mathbf{R}}\langle n;t|\,]\times[\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle], \tag{5.6.28}$$

接着插入一组完备态 $|m;t\rangle$，可得到

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R})=i\sum_{m\neq n}[\nabla_{\mathbf{R}}\langle n;t|\,]|m;t\rangle\times\langle m;t|[\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle]. \tag{5.6.29}$$

明确地丢弃了 $m=n$ 的项，但是很容易看到它为零，因为 $\langle n;t|n;t\rangle=1$ 意味着 $[\nabla_{\mathbf{R}}\langle n;t|\,]|n;t\rangle=-\langle n;t|[\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle]$，所以（5.6.29）式中的叉乘一定为零. 现在，通过取（5.6.3）式的 $\mathbf{R}$ 梯度并取其与 $\langle m;t|$ 的内积，得到

---

* 的确，把斯托克斯定理推广到更高的维度不是平庸的. 这方面的讨论可参考贝里的原始文章. 然而，在我们的情况中，所有的例子都仅包含三维参数矢量 $\mathbf{R}$.

$$\langle m;t|[\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle] = \frac{\langle m;t|[\nabla_{\mathbf{R}}H]|n;t\rangle}{E_n - E_m} \qquad m \neq n. \tag{5.6.30}$$

最后，能够写出

$$\gamma_n(C) = \int \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{a}. \tag{5.6.31}$$

其中

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R}) = i\sum_{m\neq n} \frac{\langle n;t|[\nabla_{\mathbf{R}}H]|m;t\rangle \times \langle m;t|[\nabla_{\mathbf{R}}H]|n;t\rangle}{(E_m - E_n)^2} \tag{5.6.32}$$

如同贝里在他的原始文献中说的，最后的这两个方程“包含着他的工作的核心结果”. $\mathbf{R}$ 空间上 $E_m(\mathbf{R}) = E_n(\mathbf{R})$ 的点将对面积分 (5.6.31) 有贡献，即使包围曲面的路径不包含那些点.

人们早已知道，通过光子穿越一条扭曲光纤可观测到贝里相位，且这个相位的几何特征可用实验探测. 参见 A. Tomita 和 R. Chiao，*Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 937. 的确这个实验能在学生实验室做. 这个装置的说明可在 *Experiments in Modern Physics*，A. Melissinos 和 J. Napolitano (Academic Press 2003) 中找到.

例：自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的贝里相位

现在转到一个具体的例子，由 (5.6.31) 式完成 $\gamma_n(C)$ 的计算. 我们将研究通过一个随时间变化的磁场慢慢操控的一个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的相位运动. 这个特殊的例子事实上已经用实验研究过了.

对在磁场中的自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子，回到熟悉的哈密顿量 (2.1.49) 式，但对具有任意磁矩的粒子要略微做修改. 由于在这个情况下，磁场是随时间缓慢变化的，可令磁场由三维矢量 $\mathbf{R}(t)$* 给出. 也就是说，$\mathbf{R}(t)$ 是慢慢改变的参数矢量. 对磁矩 μ，哈密顿量可写成

$$H(t) = H(\mathbf{R}(t)) = -\frac{2\mu}{\hbar}\mathbf{S}\cdot\mathbf{R}(t). \tag{5.6.33}$$

其中 $\mathbf{S}$ 是**自旋** $\frac{1}{2}$ 粒子的自旋角动量算符. 采用这种写法，自旋向上态磁矩的期待值就是 μ.

现在转向用 (5.6.32) 式估算 $\mathbf{B}(\mathbf{R})$. 首先，通过直接 (见第 3 章习题 3.2) 或者基于旋转对称性把 $\mathbf{R}$ 固定在 $\hat{\mathbf{z}}$ 方向去做，可足够简单地证明 (5.6.33) 式的两个本征值为

$$E_{\pm}(t) = \mp\mu R(t), \tag{5.6.34}$$

其中 $R(t)$ 是磁场矢量的大小，(相对于 $\mathbf{R}(t)$ 的方向) 自旋向上 (下) 的本征态为 $|\pm;t\rangle$. 而 (5.6.32) 式中的求和仅包含一项，其分母为

$$(E_{\pm} - E_{\mp})^2 = 4\mu^2R^2. \tag{5.6.35}$$

同样，非常明显的是

$$\nabla_{\mathbf{R}}H = -\frac{2\mu}{\hbar}\mathbf{S}, \tag{5.6.36}$$

剩下的是需要估算叉乘

$$\langle \pm;t|\mathbf{S}|\mp;t\rangle \times \langle \mp;t|\mathbf{S}|\pm;t\rangle = \langle \pm;t|\mathbf{S}|\mp;t\rangle \times \langle \pm;t|\mathbf{S}|\mp;t\rangle^*. \tag{5.6.37}$$

---

* 为了避免与 (5.6.32) 式混淆，不用 $\mathbf{B}$ 描述磁场.

估算这个矩阵元将是很繁琐的，除非能援引旋转对称性并定义相对于 **R** 方向的 **S** 的分量. 也就是说，$|\pm;t\rangle$ 能被取为 S_z 的本征态. 这样，使用（3.5.5）式写出

$$\mathbf{S}=\frac{1}{2}(S_+ + S_-)\hat{\mathbf{x}}+\frac{1}{2i}(S_+ - S_-)\hat{\mathbf{y}}+S_z\hat{\mathbf{z}}, \tag{5.6.38}$$

借助（3.5.39）式和（3.5.40）式发现

$$\langle\pm;t|\mathbf{S}|\mp;t\rangle=\frac{\hbar}{2}(\hat{\mathbf{x}}\mp i\hat{\mathbf{y}}). \tag{5.6.39}$$

结合（5.6.35）式（5.6.37）式和（5.6.39）式，有

$$\mathbf{B}_\pm(\mathbf{R})=\mp\frac{1}{2R^2(t)}\hat{\mathbf{z}}. \tag{5.6.40}$$

当然，这个结果是把 $|\pm;t\rangle$ 取为 S_z 的本征态时导出的，然而事实上它们是在 **R** 的方向. 因此，实际上有

$$\mathbf{B}_\pm(\mathbf{R})=\mp\frac{1}{2R^2(t)}\hat{\mathbf{R}}. \tag{5.6.41}$$

最终，计算出的贝里相位（5.6.31）式为

$$\gamma_\pm(C)=\mp\frac{1}{2}\int\frac{\hat{\mathbf{R}}\cdot d\mathbf{a}}{R^2}=\mp\frac{1}{2}\Omega. \tag{5.6.42}$$

其中 Ω 为参数矢量 $\mathbf{R}(t)$ 移动过的路径相对于 $\mathbf{R}=0$ 的原点，即 **B** 场的源点，所张的“立体角”. 这个结果强调了贝里相位的“几何”特征. 路径的细节不重要，只要路径所张的立体角是一样的即可. 这个结果也与磁矩 μ 无关.

在贝里预言了自旋$\frac{1}{2}$系统的这种效应之后不久，两个研究组用在法国格勒诺布尔的劳厄-朗之万研究所的中子进行了测量. 研究结果之一，T. Bitter 和 D. Dubbers，*Phys. Rev. Lett.* **59**（1987）251，是用慢（500 米/秒）中子束流穿过一个扭曲的磁场. 第二项研究，D. J. Richardson et al.，*Phys . Rev. Lett.* **61**（1988）2030，使用了超冷中子（UCN），其结果更为精确. 由于 UCN 可以存储更长的时间，所以采用了一个 $T=7.387$ 秒的循环周期，确保了绝热定理的有效性. 初始处在 **z** 方向极化的中子受到一个旋转磁场分量的作用，该磁场于 $t=0$ 时打开，并于 $t=T$ 时关闭. 磁场矢量在 yz 平面勾画出一个圆圈（或者椭圆圈，取决于可调整的参数），使中子的极化的大小消除了一部分，该部分依赖于积分相位. 测量最终的极化度就能确定积分相位，再减去动力学相位（5.6.6），就留下了贝里相位.

图 5.6 展示了理查森（Richardson）等人得到的结果. 自旋向上和自旋向下的相位均被测量，并且两者均与贝里的分析极好地吻合. 尽管磁矩的值没有进入计算，它的符号决定了旋转的方向，并且这个实验确认了中子的磁矩的确是负的.

再谈阿哈罗洛夫-玻姆和磁单极

已经看到贝里相位使用了一个与规范变换公式框架密切联系的公式框架. 见（5.6.26）和（5.6.27）式. 现在使这一点更紧密地与曾在 2.7 节的规范变换研究中看到的一些物理联系起来.

首先，注意到由于磁场引起的阿哈罗洛夫-玻姆效应可以证明正是几何相因子的结果. 让束缚了一个电子（电荷 $e<0$）的小盒子沿着一条封闭的路径 C 转一圈，该圈包围着一条磁通线 Φ_B，如图 5.7 所示. 设 **R** 为连接着固定在空间的原点和盒子上的参考点的矢量.

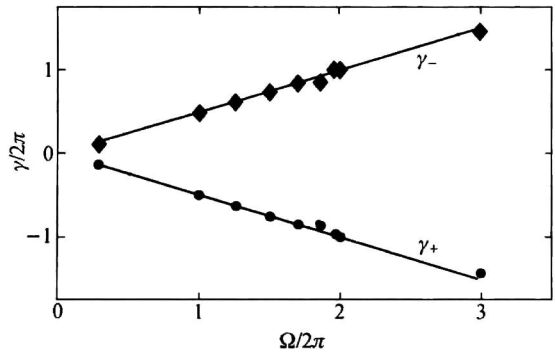


图 5.6　使用超冷中子观测自旋 1/2 粒子的贝里相位，取自 D. J. Richardson et al.，*Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 2030. 数据采自于他们文章的表 1，并展示了作为旋转磁场“立体角”函数的贝里相位. 自旋向上和自旋向下的相位均被测量. 数据点的不确定性大约与点自身的大小相同，或更小一些. 实线取自 (5.6.42) 式.

在这种情况下，矢量 **R** 是一个在实空间自身中的外部参数. 当用矢势 **A** 去描述磁场 **B**，盒子中电子的第 n 个波函数（带有位置矢量 **r**）可写成

$$\langle \mathbf{r}|n(\mathbf{R})\rangle = \exp\left\{\frac{ie}{\hbar c}\int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}')\cdot d\mathbf{r}'\right\}\psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}), \tag{5.6.43}$$

其中 $\psi_n(\mathbf{r}')$ 是磁场不存在时，位于盒子的位置坐标 $\mathbf{r}'$ 处的电子的波函数.

现在让 **R** 沿着圈 C 运动，并计算贝里相位. 能很容易地计算出波函数对外部参数的微商，得到

$$\langle n(\mathbf{R})|[\nabla_{\mathbf{R}}|n(\mathbf{R})\rangle] = \int d^3x\psi_n^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \times\left\{-\frac{ie}{\hbar c}\mathbf{A}(\mathbf{R})\psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})+\nabla_{\mathbf{R}}\psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})\right\} = -\frac{ie\mathbf{A}(\mathbf{R})}{\hbar c}. \tag{5.6.44}$$

对盒子中的电子，积分式下的第二项为零. 从 (5.6.21) 式和 (5.6.44) 式，可看到几何相位由

$$\gamma_n(C) = \frac{e}{\hbar c}\oint_C \mathbf{A}\cdot d\mathbf{R} = \frac{e}{\hbar c}\iint_{S(C)}\mathbf{B}(\mathbf{R})\cdot d\mathbf{S} = \frac{e}{\hbar c}\Phi_B \tag{5.6.45}$$

给出. 这个结果正是 2.7 节得到的阿哈罗洛夫-玻姆效应的表达式 (2.7.70) 式.

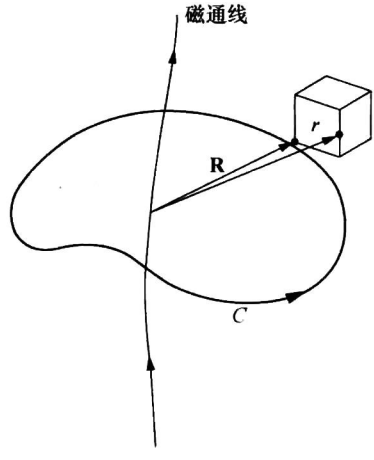


图 5.7　作为贝里相位表现形式的阿哈罗洛夫-玻姆效应. 一个盒子中的电子围绕一条磁通线转了一圈.

在规范不变性与贝里相位之间物理联系的第二个例子* 是**磁单极**的狄拉克量子化条件 (2.7.85) 式. 考虑在 **R** 空间的两个曲面 $\mathbf{a}_1$ 和 $\mathbf{a}_2$，均被同一条曲线 C 包围着. 因为从 C 得到的贝里相位是物理上可测的，对 $\mathbf{a}_1$ 和 $\mathbf{a}_2$ 的面积分 (5.6.31) 式在一个 2π 倍数范围内必然是一样的. 也就是说，

* 这里的讨论密切跟踪文献 B. R. Holstein, *Am. J. Phys.* **57** (1989) 1079.

$$\int_{\mathbf{a}_1}\mathbf{B}\cdot d\mathbf{a}=\int_{\mathbf{a}_2}\mathbf{B}\cdot d\mathbf{a}+2N\pi \qquad N=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{5.6.46}$$

现在通过把 $\mathbf{a}_1$ 放在 C 之“上”和 $\mathbf{a}_2$ 放在 C 之“下”来构建一个封闭的曲面. 假定使用类似右手规则的方法自洽地确定（5.6.46）式中两个积分的 $d\mathbf{a}$ 取向，则其中一个 $d\mathbf{a}$ 必指向内部. 所以，把那个积分的 $d\mathbf{a}$ 反号，就可把（5.6.46）式重写为

$$\oint\mathbf{B}\cdot d\mathbf{a}=2N\pi. \tag{5.6.47}$$

当然，将（5.6.41）式代入（5.6.47）式就得到 $\pm2\pi$，即 $N=\pm1$，但这是为推导（5.6.41）式选择了自旋 1/2 的系统所造成的一个人为的产物. 如果用一个任意自旋的系统为例去做，算出的 N（译者注：原文为“n”是打印错误）将等于自旋投影量子数的两倍.

现在（5.6.41）式看上去非常像一个来自 1/2 电荷的单极子的磁场，但又记得它事实上是一个贝里场. 怎样将它与一个实际上单极子的磁场联系起来呢？当用（5.6.24）式中矢量势围绕曲线 C 的线积分来表示贝里相位时，实际上最容易看到这一点. 规范变换（2.7.83）式给出了矢量势的形式，而线积分只是导致一个 2π 因子的对 ϕ 的积分. 然后可以用它去估算（5.6.47）式的左边，包括与单电荷 e 的相互作用从而完成这个相位，导致如同（2.7.84）式中一样的 $e/\hbar c$ 因子. 这样，（5.6.47）式就变成了

$$\frac{e}{\hbar c}(2e_M)2\pi=2N\pi$$

$$\text{或}\qquad \frac{2ee_M}{\hbar c}=N, \tag{5.6.48}$$

它与早先在 2.7 节中得到的（2.7.85）式的结果是一样的.

5.7 时间相关的微扰论

戴森级数

虽然有少数几个像上节的时间相关双能级问题那样的例外，通常 $c_n(t)$ 微分方程的精确解并不存在. 必须满足于通过下述微扰展开得到（5.5.17）式的近似解

$$c_n(t)=c_n^{(0)}+c_n^{(1)}+c_n^{(2)}+\cdots, \tag{5.7.1}$$

其中 $c_n^{(1)}$，$c_n^{(2)}$，…表示关于时间相关势的强度参数的第一级、第二级等的振幅. 求解这个问题使用的迭代法类似于在时间无关微扰论中使用的方法. 假如最初只有 i 态被占据，把微分方程（5.5.17）式右边的 c_n 近似取为 $c_n^{(0)}=\delta_{ni}$（不依赖于 t），并且把它与 $c_n^{(1)}$ 的时间微商关联起来，求积这个微分方程得到 $c_n^{(1)}$，再把 $c_n^{(1)}$ 代入（5.5.17）式的右边以得到 $c_n^{(2)}$ 的微分方程，等等. 这就是 1927 年狄拉克发展时间相关微扰论的做法.

代替使用 $c_n(t)$ 去做，建议看一看在相互作用绘景中的时间演化算符 $U_I(t,t_0)$，它将在稍后被定义. 我们得到一个 $U_I(t,t_0)$ 的微扰展开，并在最后把 U_I 的矩阵元和 $c_n(t)$ 联系起来. 假如仅对求解非相对论量子力学中的简单问题感兴趣，所有这些看起来都是多余的；然而，我们建立的算符形式体系功能非常强大，因为它能马上被用于更高级的问题，如相对论量子场论和多体问题.

在相互作用绘景中，时间演化算符定义为

$$|\alpha,t_0;t\rangle_I = U_I(t,t_0)|\alpha,t_0;t_0\rangle_I. \tag{5.7.2}$$

相互作用绘景中态右矢的微分方程（5.5.11）等价于

$$i\hbar\frac{d}{dt}U_I(t,t_0) = V_I(t)U_I(t,t_0). \tag{5.7.3}$$

必须经由初始条件

$$U_I(t,t_0)|_{t=t_0} = 1 \tag{5.7.4}$$

求解这个算符微分方程. 首先，注意微分方程和初始条件一起等价于如下的积分方程：

$$U_I(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')U_I(t',t_0)dt'. \tag{5.7.5}$$

通过下述迭代，能得到这个方程的一个近似解：

$$\begin{aligned} U_I(t,t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\left[1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'} V_I(t'')U_I(t'',t_0)dt''\right]dt' \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' V_I(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t')V_I(t'') \\ &\quad + \cdots + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\cdots \\ &\quad \times\int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} V_I(t')V_I(t'')\cdots V_I(t^{(n)}) \\ &\quad + \cdots. \end{aligned} \tag{5.7.6}$$

戴森将这个方法应用于协变的量子电动力学（QED）*，以他的名字命名，这个级数就被称为**戴森级数**. 抛开收敛的困难问题，我们能够计算 $U_I(t,t_0)$ 到微扰论的任意有限级.

跃迁概率

一旦 $U_I(t,t_0)$ 给出，就能够预言任意态右矢随时间的发展. 例如，假如 $t=0$ 时刻的初态是 H_0 能量本征态中的一个，那么为了得到较晚时刻的这个初态右矢，所有要做的就是乘以 $U_I(t,0)$：

$$\begin{aligned} |i,t_0 = 0;t\rangle_I &= U_I(t,0)|i\rangle \\ &= \sum_n |n\rangle\langle n|U_I(t,0)|i\rangle. \end{aligned} \tag{5.7.7}$$

事实上，$\langle n|U_I(t,0)|i\rangle$ 只不过就是早先所说的 $c_n(t)$ [见（5.5.13）式]. 后面将更多地谈到这点.

早先在薛定谔绘景中引入了时间演化算符 $U(t,t_0)$（见 2.2 节）. 现在来探讨 $U(t,t_0)$ 和 $U_I(t,t_0)$ 间的联系. 从（2.2.13）和（5.5.5）式注意到

$$\begin{aligned} |\alpha,t_0;t\rangle_I &= e^{iH_0t/\hbar}|\alpha,t_0;t\rangle_S \\ &= e^{iH_0t/\hbar}U(t,t_0)|\alpha,t_0;t_0\rangle_S \\ &= e^{iH_0t/\hbar}U(t,t_0)e^{-iH_0t_0/\hbar}|\alpha,t_0;t_0\rangle_I. \end{aligned} \tag{5.7.8}$$

所以有

$$U_I(t,t_0) = e^{iH_0t/\hbar}U(t,t_0)e^{-iH_0t_0/\hbar}. \tag{5.7.9}$$

---

* 注意在 QED 中，引入了编时乘积（$t'>t''>\cdots$）之后，微扰级数就能被求和成一个指数形式. 这个指数形式马上就给出了 $U(t,t_0)=U(t,t_1)U(t_1,t_0)$（Bjorken 和 Drell，1965，175～178 页）.

现在看一下 $U_I(t,t_0)$ 在 H_0 能量本征态之间的矩阵元：

$$\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle = e^{i(E_n t-E_i t_0)/\hbar}\langle n|U(t,t_0)|i\rangle. \tag{5.7.10}$$

回顾2.2节中 $\langle n|U(t,t_0)|i\rangle$ 被定义为跃迁振幅. 因此这里的 $\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle$ 与早先定义的跃迁振幅不太相同. 然而，定义为 $\langle n|U(t,t_0)|i\rangle$ 模的平方的跃迁概率与相互作用绘景中类似的量是一样的

$$|\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle|^2 = |\langle n|U(t,t_0)|i\rangle|^2. \tag{5.7.11}$$

顺便说一句，假如 U_I 矩阵元是在非能量本征态的初态和末态之间取的——例如，在（分别是 A 和 B 的本征右矢）$|a'\rangle$ 和 $|b'\rangle$ 之间，其中 $[H_0,A]\neq 0$ 和/或 $[H_0,B]\neq 0$——一般有

$$|\langle b'|U_I(t,t_0)|a'\rangle| \neq |\langle b'|U(t,t_0)|a'\rangle|,$$

这一点读者能很容易证明. 幸运的是，在那些相互作用绘景起作用的问题中，初态和末态通常被取为 H_0 的本征态. 否则，所有要做的是用 H_0 的能量本征右矢展开 $|a'\rangle$，$|b'\rangle$ 等等.

回到 $\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle$，通过考虑一个物理情况来解释，在那里，$t=t_0$ 时已知系统处在 $|i\rangle$ 态. 于是薛定谔表象的态右矢 $|i,t_0;t\rangle_S$ 在最多差一个相因子的情况下等于 $|i\rangle$ 态. 在应用相互作用绘景时，选择 $t=t_0$ 时的相因子使

$$|i,t_0;t_0\rangle_S = e^{-iE_i t_0/\hbar}|i\rangle \tag{5.7.12}$$

是极为便利的，上式意味着在相互作用绘景中有简单的方程

$$|i,t_0;t_0\rangle_I = |i\rangle. \tag{5.7.13}$$

在稍后的时刻，有

$$|i,t_0;t\rangle_I = U_I(t,t_0)|i\rangle. \tag{5.7.14}$$

将其与展开式

$$|i,t_0;t\rangle_I = \sum_n c_n(t)|n\rangle \tag{5.7.15}$$

相比，看到

$$c_n(t) = \langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle. \tag{5.7.16}$$

现在回到 $U_I(t,t_0)$ 的微扰展开［见（5.7.6）式］. 也能像在（5.7.1）式中一样展开 $c_n(t)$，其中 $c_n^{(1)}$ 是 $V_I(t)$ 的第一级，$c_n^{(2)}$ 是 $V_I(t)$ 的第二级，等等. 比较（5.7.16）式的两边的展开式，得到［使用（5.5.7）］

$$\begin{aligned}
c_n^{(0)}(t) &= \delta_{ni} \quad (\text{不依赖于 } t)\\
c_n^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\langle n|V_I(t')|i\rangle dt'\\
&= \frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ni}t'}V_{ni}(t')dt'\\
c_n^{(2)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\sum_m\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''e^{i\omega_{nm}t'}V_{nm}(t')e^{i\omega_{mi}t''}V_{mi}(t''),
\end{aligned} \tag{5.7.17}$$

其中用到了

$$e^{i(E_n-E_i)t/\hbar} = e^{i\omega_{ni}t}. \tag{5.7.18}$$

$|i\rangle \to |n\rangle$ 且 $n\neq i$ 的跃迁概率可通过

$$P(i\to n) = |c_n^{(1)}(t)+c_n^{(2)}(t)+\cdots|^2, \tag{5.7.19}$$

得到.

常微扰

作为（5.7.17）式的应用，考虑一个在 $t=0$ 时打开的常微扰

$$V(t)=\begin{cases}0, & \text{对 } t<0\\ V\ \text{（不依赖于 } t\text{）}, & \text{对 } t\geqslant 0.\end{cases}\tag{5.7.20}$$

虽然算符 V 没有明显的时间依赖，但一般说来，它是由 $\mathbf{x}$，$\mathbf{p}$ 和 $\mathbf{s}$ 一类的算符构成的. 现在假定在 $t=0$ 时，只有 $|i\rangle$ 态. 当取 t_0 等于零时，可得到

$$\begin{aligned}c_n^{(0)}&=c_n^{(0)}(0)=\delta_{ni},\\ c_n^{(1)}&=\frac{-i}{\hbar}V_{ni}\int_0^t e^{i\omega_{ni}t'}dt'\\ &=\frac{V_{ni}}{E_n-E_i}(1-e^{i\omega_{ni}t}),\end{aligned}\tag{5.7.21}$$

或

$$\begin{aligned}|c_n^{(1)}|^2&=\frac{|V_{ni}|^2}{|E_n-E_i|^2}(2-2\cos\omega_{ni}t)\\ &=\frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n-E_i|^2}\sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)t}{2\hbar}\right].\end{aligned}\tag{5.7.22}$$

找到 $|n\rangle$ 态的概率不仅依赖于 $|V_{ni}|^2$，还依赖于能量差 E_n-E_i，所以试着看一下（5.7.22）式如何看上去像是 E_n 的一个函数. 实际上，当存在很多 $E\sim E_n$ 的态时，我们对以这样的一种方式来观察（5.7.22）式感兴趣，使得能够谈及具有几乎同样能量的连续末态. 为此，定义

$$\omega\equiv\frac{E_n-E_i}{\hbar}\tag{5.7.23}$$

并画出对固定的 t 且微扰已经打开的时间间隔内的 $4\sin^2(\omega t/2)/\omega^2$ 随 ω 变化的图，见图 5.8. 中间峰的中心位于 $\omega=0$，其高度为 t^2，而宽度正比于 $1/t$. 当 t 变大时，仅仅对那些满足于

$$t\sim\frac{2\pi}{|\omega|}=\frac{2\pi\hbar}{|E_n-E_i|}\tag{5.7.24}$$

的末态，$|c_n^{(1)}(t)|^2$ 才是相当大的. 如果把 Δt 称为微扰打开的时间间隔，则仅当

$$\Delta t\Delta E\sim\hbar\tag{5.7.25}$$

时才可能有可观的跃迁概率，上式的 ΔE 表示在一个有可观概率的跃迁中能量的变化. 如果 Δt 很小，在图 5.8 中就有一个较宽的峰，结果能容许相当大的能量不守恒. 另一方面，如果微扰打开的时间很长，就有一个非常窄的峰，并且对可察觉得到的跃迁要求近似的能量守恒. 注意，这个“不确定度关系”与 1.6 节中 $x-p$ 的不确定度关系是根本不同的. 在那里，x 和 p 都是可观测量. 与之相反，在非相对论量子力学中，时间是一个参数，不是一个可观测量.

对那些具有精确能量守恒 $E_n=E_i$ 的跃迁，有

$$|c_n^{(1)}(t)|^2=\frac{1}{\hbar^2}|V_{ni}|^2t^2.\tag{5.7.26}$$

在时间间隔 t 之后找到 $|n\rangle$ 态的概率是 V 被打开的时间间隔的二次方，而不是线性的. 直觉上，这可能不合理. 然而，没有理由为此担心. 在我们的形式体系适用的现实情况下，

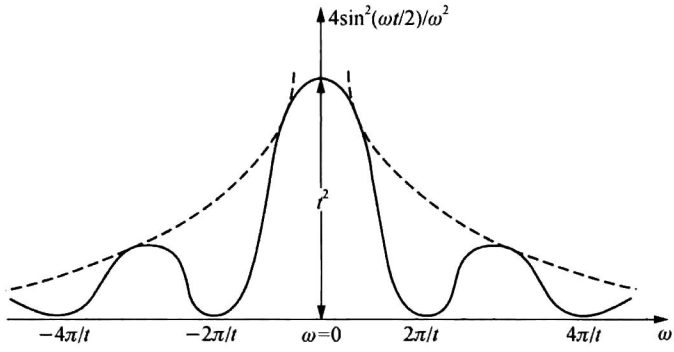


图 5.8 固定 t 的 $4\sin^2(\omega t/2)/\omega^2$ 随 ω 变化的图，其中在 $\omega=(E_n-E_i)/\hbar$ 中把 E_n 视为连续变量

常常存在一组末态，它们的能量都几乎与初态 $|i\rangle$ 的能量相同. 换句话说，一个末态形成了在 E_i 附近的一个连续能量谱. 按照这样的构思给出两个例子. 例如，考虑受到某个有限力程势（见图 5.9）的弹性散射（将在第 6 章中详细地讨论）. 取一个沿正 z 方向传播的

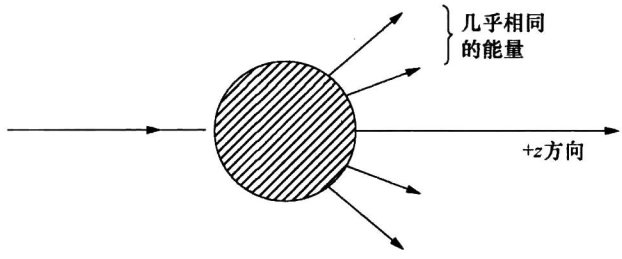


图 5.9 平面波受到某个有限力程势的弹性散射

平面波态为初态；末态可能也是一个平面波态，它具有相同的能量但一般沿着非正 z 方向传播. 另一个有趣的例子是一个激发的原子态通过发射一个俄歇电子的双激发. 最简单的例子是一个氦原子. 初态可能是 $(2s)^2$ 态，在那里这两个电子都被激发了，末态可能是 He^+ 离子的 $(1s)$ 态（即，其中的一个电子仍然被束缚着），与此同时，第二个电子带着正能量 E 逃逸出去；见图 5.10. 在这样的一个情况下，我们感兴趣的是总概率，即对具有 $E_n\simeq E_i$ 的末态求和的跃迁概率：

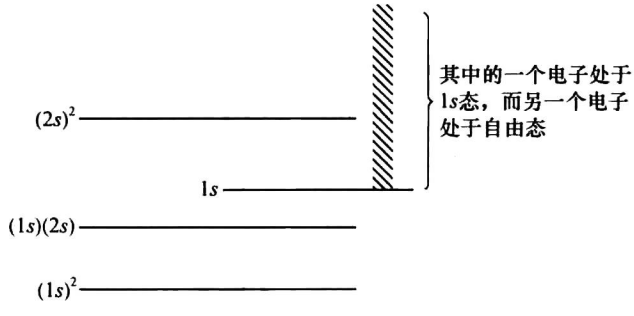


图 5.10 氦原子的两个电子的能级示意图

$$\sum_{n,E_n\simeq E_i}|c_n^{(1)}|^2. \tag{5.7.27}$$

习惯上把末态的态密度定义为在能量间隔（E，$E+dE$）中态的数目

$$\rho(E)dE. \tag{5.7.28}$$

接着把（5.7.27）式写为

$$\begin{aligned}\sum_{n,E_n\simeq E_i}|c_n^{(1)}|^2 &\Rightarrow\int dE_n\rho(E_n)|c_n^{(1)}|^2\\ &=4\int\sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)t}{2\hbar}\right]\frac{|V_{ni}|^2}{|E_n-E_i|^2}\rho(E_n)dE_n.\end{aligned} \tag{5.7.29}$$

当 $t\to\infty$ 时，利用

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{|E_n-E_i|^2}\sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)t}{2\hbar}\right]=\frac{\pi t}{2\hbar}\delta(E_n-E_i). \tag{5.7.30}$$

它是根据下式得出的

$$\lim_{\alpha\to\infty}\frac{1}{\pi}\frac{\sin^2\alpha x}{\alpha x^2}=\delta(x). \tag{5.7.31}$$

现在可以把 $|V_{ni}|^2$ 的平均值拿到积分符号之外，并完成具有 δ 函数的积分：

$$\lim_{t\to\infty}\int dE_n\rho(E_n)|c_n^{(1)}(t)|^2=\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\overline{|V_{ni}|^2}\rho(E_n)t\,|_{E_n\simeq E_i}. \tag{5.7.32}$$

这样，对大的 t，总跃迁概率正比于 t，这就非常合理了. 注意，t 的这种线性性是总跃迁概率正比于图 5.8 中峰下面积的结果，在那里峰的高度按 t^2 变化而宽度按 $1/t$ 变化.

传统上考虑**跃迁率**，即单位时间的跃迁概率. 表达式（5.7.32）告诉我们：由

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_n|c_n^{(1)}|^2\right) \tag{5.7.33}$$

定义的总跃迁率在大 t 时是不随 t 变化的. 把（5.7.33）式命名为 $w_{i\to[n]}$，其中 $[n]$ 是一组具有类似于 i 的能量的末态，倘若一级时间相关微扰论是有效的，得到

$$w_{i\to[n]}=\frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V_{ni}|^2}\rho(E_n)_{E_n\simeq E_i} \tag{5.7.34}$$

不依赖于 t. 这个公式有极重要的实际意义，它被称之为**费米黄金规则**，尽管 t 相关微扰论的基本公式框架始于狄拉克. 有时把（5.7.34）式写成

$$w_{i\to n}=\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)|V_{ni}|^2\delta(E_n-E_i), \tag{5.7.35}$$

必须明白该表达式是要用 $\int dE_n\rho(E_n)$ 积分的.

我们也应该理解 $\overline{|V_{ni}|^2}$ 是什么意思. 如果末态 $|n\rangle$ 形成一个准连续态，则只要 $|n\rangle$ 类似，矩阵元 V_{ni} 常常是类似的. 然而，可能发生这样的情况，不是所有具有相同 E_n 的能量本征态必然有类似的矩阵元. 例如，考虑弹性散射. 确定散射截面的 $|V_{ni}|^2$ 可能依赖于末态动量的方向. 在那样的情况下，应考虑的末态组不仅必须具有近似相同的能量，而且必须具有近似相同的动量方向. 当讨论光电效应时，这点变得更为清晰.

现在仍然使用（5.7.20）式的常微扰来看一下二级项. 由（5.7.17）式，有

$$\begin{aligned}c_n^{(2)}&=\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\sum_m V_{nm}V_{mi}\int_0^t dt'e^{i\omega_{nm}t'}\int_0^{t'}dt''e^{i\omega_{mi}t''}\\ &=\frac{i}{\hbar}\sum_m\frac{V_{nm}V_{mi}}{E_m-E_i}\int_0^t(e^{i\omega_{ni}t'}-e^{i\omega_{nm}t'})dt'\end{aligned} \tag{5.7.36}$$

右边的第一项具有和 $c_n^{(1)}$ 的一样的 t 依赖性［见（5.7.21）式］. 假如这是唯一的一项，那么或许能重复以前一样的论点，并推断在 $t\to\infty$ 时，唯一的重要贡献来自于 $E_n\simeq E_i$. 的确，当 E_m 不同于 E_n 和 E_i 时，第二项的贡献引起了一个快速的振动，它对随 t 增长的跃迁概率没有贡献.

把 $c^{(1)}$ 和 $c^{(2)}$ 合在一起，有

$$w_{i\to[n]}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{ni}+\sum_m\frac{V_{nm}V_{mi}}{E_i-E_m}\right|^2\rho(E_n)\Big|_{E_n\simeq E_i}. \tag{5.7.37}$$

这个公式有如下的物理解释. 设想来自二级项的跃迁分两步发生. 首先，$|i\rangle$ 态发生了一个能量不守恒的跃迁到 $|m\rangle$ 态，接着 $|m\rangle$ 态发生了一个能量不守恒的跃迁到 $|n\rangle$ 态，但在 $|n\rangle$ 和 $|i\rangle$ 之间存在整体的能量守恒. 这样的能量不守恒常常称之为虚跃迁. 对那些到（或来自）虚中间态的虚跃迁能量是不需要守恒的. 与之相反，一级项 V_{ni} 常常称为表示一个直接的能量守恒的“实”跃迁. 如果 $V_{nm}V_{mi}\neq0$ 且 $E_m\simeq E_i$，就需要进行特殊处理. 最好的处理办法是使用缓慢打开微扰势的方法 $V\to e^{\eta t}V$，将在5.9节和本章的习题5.31中讨论它. 最终的结果是（5.7.37）式中的能量分母做如下改变：

$$E_i-E_m\to E_i-E_m+i\varepsilon. \tag{5.7.38}$$

谐波微扰

现在考虑一个按正弦规律变化的时间相关势，通常称为谐波微扰：

$$V(t)=\mathcal{V}e^{i\omega t}+\mathcal{V}^\dagger e^{-i\omega t}, \tag{5.7.39}$$

其中 $\mathcal{V}$ 仍然依赖于 $\mathbf{x}$，$\mathbf{p}$，$\mathbf{s}$ 等. 其实，在5.5节中讨论 t 相关的双能级问题时，已经碰到过这类时间相关的势.

再次假定初始时 H_0 本征态中只有一个被占据. 假设在 $t=0$ 的时候，（5.7.39）式的微扰被打开，所以

$$\begin{aligned}c_n^{(1)}&=\frac{-i}{\hbar}\int_0^t(\mathcal{V}_{ni}e^{i\omega t'}+\mathcal{V}_{ni}^\dagger e^{-i\omega t'})e^{i\omega_{ni}t'}dt'\\&=\frac{1}{\hbar}\left[\frac{1-e^{i(\omega+\omega_{ni})t}}{\omega+\omega_{ni}}\mathcal{V}_{ni}+\frac{1-e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{-\omega+\omega_{ni}}\mathcal{V}_{ni}^\dagger\right],\end{aligned} \tag{5.7.40}$$

其中 $\mathcal{V}_{ni}^\dagger$ 实际上是 $(\mathcal{V}^\dagger)_{ni}$ 的缩写. 这个公式与常微扰情况中的公式相似. 唯一需改变的是

$$\omega_{ni}=\frac{E_n-E_i}{\hbar}\to\omega_{ni}\pm\omega. \tag{5.7.41}$$

所以，当 $t\to\infty$，只有

$$\omega_{ni}+\omega\simeq0\quad\text{或}\quad E_n\simeq E_i-\hbar\omega \tag{5.7.42a}$$

$$\omega_{ni}-\omega\simeq0\quad\text{或}\quad E_n\simeq E_i+\hbar\omega \tag{5.7.42b}$$

时，$|c_n^{(1)}|^2$ 才是相当大的. 很明显，只要因（5.7.42a）式而使第一项是重要的，第二项就不重要，反之亦然. 没有任何能量守恒条件被该量子力学系统单独满足，更确切地说，能量守恒的明显不足是通过能量给予——或取之于——“外部”势 $V(t)$ 得到补偿的. 形象化地用图5.11描述. 在第一种情况下（受激发射），量子力学系统把 $\hbar\omega$ 的能量转移到 V，显然仅在初态是激发态时才是可能的. 在第二种情况下（吸收），量子力学系统从 V 接受到 $\hbar\omega$ 的能量，并达到一个激发态. 这样，一个时间依赖的微扰能被看成一个无穷的能量源或漏.

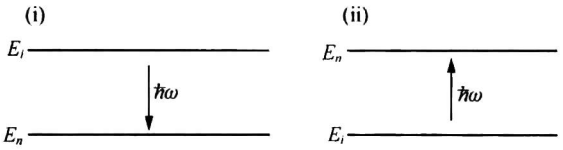


图 5.11　(i) 受激发射：量子力学系统把 $\hbar\omega$ 的能量转移到 V（仅在初态是激发态时才是可能的）. (ii) 吸收：量子力学系统从 V 接受到 $\hbar\omega$ 的能量，并达到一个激发态.

完全类似于 (5.7.34) 式，有

$$w_{i\to[n]}=\frac{2\pi}{\hbar}\overline{|\mathcal{V}_{ni}|^2}\rho(E_n)\Big|_{E_n\cong E_i-\hbar\omega}$$
$$w_{i\to[n]}=\frac{2\pi}{\hbar}\overline{|\mathcal{V}_{ni}^\dagger|^2}\rho(E_n)\Big|_{E_n\cong E_i+\hbar\omega} \tag{5.7.43}$$

或者更普遍地，

$$w_{i\to n}=\frac{2\pi}{\hbar}\left\{\begin{matrix}|\mathcal{V}_{ni}|^2\\|\mathcal{V}_{ni}^\dagger|^2\end{matrix}\right\}\delta(E_n-E_i\pm\hbar\omega). \tag{5.7.44}$$

还要指出

$$|\mathcal{V}_{ni}|^2=|\mathcal{V}_{in}^\dagger|^2, \tag{5.7.45}$$

它是

$$\langle i|\mathcal{V}^\dagger|n\rangle=\langle n|\mathcal{V}|i\rangle^* \tag{5.7.46}$$

的一个结果（记住 $\mathcal{V}^\dagger|n\rangle\overset{\text{DC}}{\leftrightarrow}\langle n|\mathcal{V}$）. 比较 (5.7.43) 和 (5.7.45) 式，得到

$$\frac{i\to[n]\text{的发射率}}{[n]\text{的末态密度}}=\frac{n\to[i]\text{的吸收率}}{[i]\text{的末态密度}}, \tag{5.7.47}$$

其中，在吸收的情况下，让 i 表示末态. 方程 (5.7.47) 被称为**细致平衡**，它描述发射和吸收之间的对称性.

总之，对常微扰，仅当 $E_n\simeq E_i$ 时可得到明显可观的 $|i\rangle\to|n\rangle$ 跃迁概率. 与之相反，对谐波微扰，仅当 $E_n\simeq E_i-\hbar\omega$（受激发射）或 $E_n\simeq E_i+\hbar\omega$（吸收）时可得到明显可观的跃迁概率.

5.8　与经典辐射场相互作用的应用

吸收和受激发射

把时间相关微扰理论的形式体系应用于原子中的电子与经典辐射场的相互作用. 作为一个**经典辐射场**意味着可从经典的（截然不同于量子化的）辐射场推导出电场或磁场.

忽略了 $|\mathbf{A}|^2$ 的基本哈密顿量为

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}+e\phi(\mathbf{x})-\frac{e}{m_ec}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}, \tag{5.8.1}$$

可以证明，当

$$\nabla\cdot\mathbf{A}=0 \tag{5.8.2}$$

该哈密顿量是合理的. 具体地说，用一个单色平面波场

$$\mathbf{A}=2A_0\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cos\left(\frac{\omega}{c}\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}-\omega t\right) \tag{5.8.3}$$

来进行讨论，其中 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 和 $\hat{\mathbf{n}}$ 分别是（线）极化和传播方向. 方程（5.8.3）显然满足（5.8.2）式，因为 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 垂直于传播方向 $\hat{\mathbf{n}}$. 有

$$\cos\left(\frac{\omega}{c}\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}-\omega t\right)=\frac{1}{2}[e^{i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}-i\omega t}+e^{-i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}+i\omega t}]. \tag{5.8.4}$$

并把 $-(e/m_ec)\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$ 作为一个时间依赖的势，而且把（5.8.3）式的 $\mathbf{A}$ 表示为

$$\mathbf{A}=A_0\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}[e^{i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}-i\omega t}+e^{-i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}+i\omega t}]. \tag{5.8.5}$$

把这个结果与（5.7.39）式相比，看到在

$$-\left(\frac{e}{m_ec}\right)\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}=-\left(\frac{e}{m_ec}\right)A_0\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{p}[e^{i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}-i\omega t}+e^{-i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}+i\omega t}] \tag{5.8.6}$$

中的 $e^{-i\omega t}$ 项对吸收负责，而 $e^{+i\omega t}$ 项对受激发射负责.

现在来仔细地处理吸收的情况. 有

$$\mathcal{V}_{ni}^{\dagger}=-\frac{eA_0}{m_ec}(e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x})}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{p})_{ni} \tag{5.8.7}$$

并且

$$w_{i\to n}=\frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2}{m_e^2c^2}|A_0|^2|\langle n|e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x})}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{p}|i\rangle|^2\delta(E_n-E_i-\hbar\omega). \tag{5.8.8}$$

δ 函数的意思是清楚的. 如果 $|n\rangle$ 形成一个连续态，仅需用 $\rho(E_n)$ 积分. 但是，即使 $|n\rangle$ 态是分立的，因为 $|n\rangle$ 不能是基态（尽管它是一个束缚态能级），所以它的能量不是绝对清晰的. 可能存在一个由于有限寿命（见5.9节）导致的自然展宽；还可能存在一个由碰撞引起的展宽机制. 在这样的情况下，把 $\delta(\omega-\omega_{ni})$ 看作

$$\delta(\omega-\omega_{ni})=\lim_{\gamma\to0}\left(\frac{\gamma}{2\pi}\right)\frac{1}{([\omega-\omega_{ni})^2+\gamma^2/4]}. \tag{5.8.9}$$

最后，入射的电磁波不再是理想单色的；事实上，总是存在着一个有限的频率宽度.

我们导出的吸收截面为

$$\frac{\text{被原子吸收}(i\to n)(\text{能量}/\text{单位时间})}{\text{辐射场的能量流}}. \tag{5.8.10}$$

经典电磁理论给出了能量流（单位时间通过单位面积的能量）

$$c\mathcal{U}=\frac{1}{2\pi}\frac{\omega^2}{c}|A_0|^2, \tag{5.8.11}$$

在那里的能量密度（单位体积中的能量）使用了

$$\mathcal{U}=\frac{1}{2}\left(\frac{E_{\text{极大}}^2}{8\pi}+\frac{B_{\text{极大}}^2}{8\pi}\right) \tag{5.8.12}$$

其中

$$\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A},\qquad \mathbf{B}=\nabla\cdot\mathbf{A}. \tag{5.8.13}$$

把所有的东西放在一起，并记住 $\hbar\omega=$每个吸收过程中原子吸收的能量，就可得到

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{吸收}}&=\frac{\hbar\omega(2\pi/\hbar)(e^2/m_e^2c^2)|A_0|^2|\langle n|e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\mathbf{x})}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{p}|i\rangle|^2\delta(E_n-E_i-\hbar\omega)}{(1/2\pi)(\omega^2/c)|A_0|^2}\\&=\frac{4\pi^2\hbar}{m_e^2\omega}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)|\langle n|e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\mathbf{x})}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{p}|i\rangle|^2\delta(E_n-E_i-\hbar\omega).\end{aligned} \tag{5.8.14}$$

如果承认 $\alpha=e^2/\hbar c\simeq1/137$（无量纲）和 $\delta(E_n-E_i-\hbar\omega)=(1/\hbar)\delta(\omega_{ni}-\omega)$，其中 $\delta(\omega_{ni}-\omega)$

具有时间量纲 T，则方程（5.8.14）具有正确的量纲 $[1/(M^2/T)](M^2L^2/T^2)T=L^2$.

电偶极矩近似

电偶极矩近似（E1近似）基于这样的事实：辐射场的波长远长于原子的尺度，以至级数（记住 $\omega/c=1/\lambda$）

$$e^{i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}}=1+i\frac{\omega}{c}\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}+\cdots \tag{5.8.15}$$

能用它的领头项 1 来近似. 对一个轻原子这种近似的合理性可被解释为：首先，辐射场的 $\hbar\omega$ 必须是在原子能级间距的量级，所以

$$\hbar\omega\sim\frac{Ze^2}{(a_0/Z)}\simeq\frac{Ze^2}{R_{\text{原子}}}. \tag{5.8.16}$$

这导致了

$$\frac{c}{\omega}=\lambda\sim\frac{c\hbar R_{\text{原子}}}{Ze^2}\simeq\frac{137R_{\text{原子}}}{Z}. \tag{5.8.17}$$

换句话说，对轻原子（小 Z）

$$\frac{1}{\lambda}R_{\text{原子}}\sim\frac{Z}{137}\ll 1. \tag{5.8.18}$$

因为 x 的矩阵元是 $R_{\text{原子}}$ 的量级，x^2 的矩阵元是 $R^2_{\text{原子}}$ 的量级，以及等等，可以看到用领头项代替（5.8.15）式的近似是极好的近似.

现在有

$$\langle n|e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x})}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{p}|i\rangle\to\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\langle n|\mathbf{p}|i\rangle. \tag{5.8.19}$$

特别是，我们取 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 沿着 x 轴（并且 $\hat{\mathbf{n}}$ 沿着 z 轴）. 必须计算 $\langle n|p_x|i\rangle$. 使用

$$[x,H_0]=\frac{i\hbar p_x}{m}, \tag{5.8.20}$$

有

$$\begin{aligned}\langle n|p_x|i\rangle&=\frac{m}{i\hbar}\langle n|[x,H_0]|i\rangle\\&=im\omega_{ni}\langle n|x|i\rangle.\end{aligned} \tag{5.8.21}$$

因为偶极子算符的近似，这个近似方案被称之为**电偶极近似**. 在这里回顾［见（3.11.39）式］偶极子矩阵元的选择定则. 因为 $\mathbf{x}$ 是 $q=\pm1$ 的一阶球张量，一定有 $m'-m=\pm1$，$|j'-j|=0$，1（没有 $0\to0$ 的跃迁）. 如果 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 沿着 y 轴，有相同的选择定则. 另一方面，如果 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 沿着 z 方向，$q=0$，因此 $m'=m$.

使用电偶极近似，并基于（5.8.19）式和（5.8.21）式，现在吸收截面（5.8.14）式可写成一个更为简单的形式：

$$\sigma_{\text{吸收}}=4\pi^2\alpha\omega_{ni}|\langle n|x|i\rangle|^2\delta(\omega-\omega_{ni}). \tag{5.8.22}$$

换句话说，每当 $\hbar\omega$ 与 $\omega\simeq(E_n-E_i)/\hbar$ 中的能级间距相对应时，作为 ω 函数的 $\sigma_{\text{吸收}}$ 就会展现出一个尖锐的类 δ 函数的峰. 假定 $|i\rangle$ 是基态，则 ω_{ni} 必定为正. 积分（5.8.22）式，得到

$$\int\sigma_{\text{吸收}}(\omega)d\omega=\sum_n 4\pi^2\alpha\omega_{ni}|\langle n|x|i\rangle|^2. \tag{5.8.23}$$

在原子物理学中，定义**振子强度** f_{ni} 为

$$f_{ni}\equiv\frac{2m\omega_{ni}}{\hbar}|\langle n|x|i\rangle|^2. \tag{5.8.24}$$

接下来可直接地（考虑 $[x,[x,H_0]]$）建立**托马斯-莱歇-库恩（Thomas-Reiche-Kuhn）求和规则**

$$\sum_n f_{ni} = 1. \tag{5.8.25}$$

基于对吸收截面的积分，有

$$\int \sigma_{\text{吸收}}(\omega)d\omega = \frac{4\pi^2\alpha\hbar}{2m_e} = 2\pi^2 c\left(\frac{e^2}{m_e c^2}\right). \tag{5.8.26}$$

注意 $\hbar$ 是如何消失的. 确实，这正是在经典电动力学中（例如，Jackson，1975）已知的振动求和规则. 历史上，这曾是“新量子力学”如何导致正确的经典结果的首例之一. 这个求和规则是十分引人注目的，因为没有指定哈密顿量形式的细节.

光电效应

现在考虑**光电效应**，即一个原子被放置在辐射场中时，一个电子的放出. 基本的过程被看成是从一个原子（束缚）态到一个 $E>0$ 的连续态的跃迁. 因此，$|i\rangle$ 是一个原子态的右矢，而 $|n\rangle$ 是一个连续态的右矢，它可以被取为平面波态 $|\mathbf{k}_f\rangle$，如果终态的电子不是太慢，那么近似就是合理的. 早先 $\sigma_{\text{吸收}}(\omega)$ 的公式仍然能用，除掉我们现在必须对 $\delta(\omega_{ni}-\omega)$ 与末态密度 $\rho(E_n)$ 一起积分.

事实上，在2.5节中已经计算了一个自由粒子的态密度. 回顾一下，我们的基本任务是计算单位能量间隔中的末态数. 如同马上就要看到的，这是一个矩阵元不仅依赖于末态能量，还依赖于动量方向的例子. 因此，必须考虑一组同时具有相似动量方向和相似能量的末态.

为计数态的数目，对平面波态，使用箱归一化的约定是方便的. 如果当把其波函数模的平方对于一个边长为 L 的盒子求积分而得到1，就认为该平面波态是归一的. 此外，还假设这个态满足以盒子边长为周期的周期性边界条件. 于是波函数必然具有形式

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}_f\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{x}}}{L^{3/2}}, \tag{5.8.27}$$

该式中，所允许的 k_x 值必须满足

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L},\cdots, \tag{5.8.28}$$

其中 n_x 是一个正的或负的整数. 类似的限制对 k_y 和 k_z 也成立. 注意，当 $L\to\infty$ 时，k_x，k_y 和 k_z 就变成了连续变量.

计算态数目的问题被约化成计算三维格点空间中点的数目. 如下定义 n，使

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2. \tag{5.8.29}$$

当 $L\to\infty$ 时，把 n 当成连续变量处理是一个很好的近似；事实上，它正是格点空间中径向矢量的大小. 考虑这样一个小体元，径向矢量落在 n 到 $n+dn$ 及立体角元 $d\Omega$ 的范围内，显然，它就是体积元 $n^2 dnd\Omega$. 末态平面波的能量与 k_f 相关，并因此与 n 相关，故有

$$E = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{n^2(2\pi)^2}{L^2}. \tag{5.8.30}$$

此外，格点空间径向矢量的方向正是末态的动量方向，所以，在 $\mathbf{k}_f$ 方向进入 $d\Omega$ 中的 E 到 $E+dE$ 间隔内态的数目［记住 $dE=(\hbar^2 k_f/m_e)dk_f$］由

$$n^2 d\Omega\frac{dn}{dE}dE = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3(\mathbf{k}_f^2)\frac{dk_f}{dE}d\Omega dE$$

$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m_e}{\hbar^2} k_f dE d\Omega \tag{5.8.31}$$

给出.* 现在可以把所有东西都放在一起，得到了光电效应微分截面的表达式：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi^2\alpha\hbar}{m_e^2\omega} |\langle \mathbf{k}_f | e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x})} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{p} | i \rangle|^2 \frac{m_e k_f L^3}{\hbar^2 (2\pi)^3}. \tag{5.8.32}$$

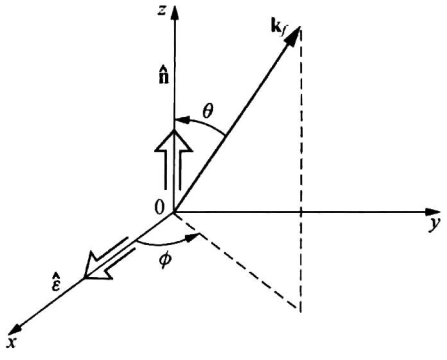


图 5.12　极坐标系统，$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 和 $\hat{\mathbf{n}}$ 分别沿着 x 和 z 轴，且 $\mathbf{k}_f = (k_f \sin\theta\cos\phi,\ k_f \sin\theta\sin\phi,\ k_f \cos\theta)$

具体地说，考虑由光吸收引起的一个 **K** 壳层（最里面的壳层）电子的发射. 除了波尔半径 a_0 用 a_0/Z 来替换之外，初态波函数本质上与基态氢原子波函数是一样的. 这样，

$$\langle \mathbf{k}_f | e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x})} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{p} | i \rangle = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \int d^3x \frac{e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{x}}}{L^{3/2}} e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x})} \times (-i\hbar\nabla)\left[e^{-Zr/a_0}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\right]. \tag{5.8.33}$$

利用分部积分法，能把∇移到左边. 而且，因为 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 垂直于 $\hat{\mathbf{n}}$，有

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot [\nabla e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x})}] = 0. \tag{5.8.34}$$

另一方面，∇作用于 $e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{x}}$ 把因子 $-i\mathbf{k}_f$ 移了下来，它可被移到积分号之外. 这样，为了估算 (5.8.33) 式，所需做的是原子波函数对

$$\mathbf{q} \equiv \mathbf{k}_f - \left(\frac{\omega}{c}\right)\hat{\mathbf{n}} \tag{5.8.35}$$

的傅里叶变换. 最终的答案是（对氢原子波函数的傅里叶变换，见本章的习题 5.41）

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 32e^2 k_f \frac{(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{k}_f)^2}{mc\omega} \frac{Z^5}{a_0^5} \frac{1}{[(Z^2/a_0^2) + q^2]^4}. \tag{5.8.36}$$

如果引入图 5.12 所示的坐标系统，就能用

$$(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{k}_f)^2 = k_f^2 \sin^2\theta\cos^2\phi$$
$$q^2 = k_f^2 - 2k_f\frac{\omega}{c}\cos\theta + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \tag{5.8.37}$$

写出基于 θ 和 ϕ 的微分截面.

5.9　能量移动和衰变宽度

至此考虑的问题一直被限制在非初态的其他态是怎么被占据的. 换句话说，一直关心 n

---

* 这等价于在相空间中的每个立方体 $d^3x d^3p/(2\pi\hbar)^3$ 取一个态.

$\neq i$ 的系数 $c_n(t)$ 随时间的发展. 一个问题就自然地被提出来了：$c_i(t)$ 自身发生了什么变化?

为了避免哈密顿量的突变效应，建议非常缓慢地增加微扰. 在遥远的过去（$t\to-\infty$），假定时间相关的势为零. 接着逐渐加入微扰，直至其完全值，具体地说，

$$V(t)=e^{\eta t}V, \tag{5.9.1}$$

其中，假定 V 是常数并且 η 是正的小量. 在计算的末尾，让 $\eta\to 0$（见图 5.13），那么势就变成一直为常数了.

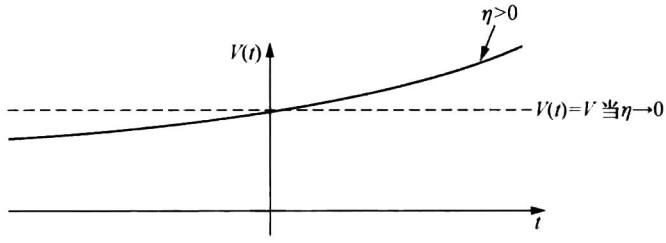


图 5.13 绝热（缓慢打开）图像中的 $V(t)$ 随 t 变化图

在遥远的过去，把这个时间取为 $-\infty$，因此，在相互作用绘景下，态右矢假定为 $|i\rangle$，基本的目标是估算 $c_i(t)$. 然而在开始之前，要确认使用这种缓慢打开的方法能够重现老的黄金规则公式（见 5.7 节）. 对 $n\neq i$ 的 $c_n(t)$，有［使用（5.7.17）］

$$\begin{aligned} c_n^{(0)}(t)&=0\\ c_n^{(1)}(t)&=\frac{-i}{\hbar}V_{ni}\lim_{t_0\to-\infty}\int_{t_0}^{t}e^{\eta t'}e^{i\omega_{ni}t'}dt'\\ &=\frac{-i}{\hbar}V_{ni}\frac{e^{\eta t+i\omega_{ni}t}}{\eta+i\omega_{ni}}. \end{aligned} \tag{5.9.2}$$

因此对最低的非零级，跃迁概率由

$$|c_n(t)|^2\simeq\frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2}\frac{e^{2\eta t}}{\eta^2+\omega_{ni}^2}, \tag{5.9.3}$$

或

$$\frac{d}{dt}|c_n(t)|^2\simeq\frac{2|V_{ni}|^2}{\hbar^2}\left(\frac{\eta e^{2\eta t}}{\eta^2+\omega_{ni}^2}\right) \tag{5.9.4}$$

给出. 现在让 $\eta\to 0$. 很清楚，用 1 代替 $e^{\eta t}$ 是没问题的，但注意

$$\lim_{\eta\to 0}\frac{\eta}{\eta^2+\omega_{ni}^2}=\pi\delta(\omega_{ni})=\pi\hbar\delta(E_n-E_i). \tag{5.9.5}$$

这导致了黄金规则，

$$w_{i\to n}\simeq\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)|V_{ni}|^2\delta(E_n-E_i). \tag{5.9.6}$$

受到该结果的鼓励，再次使用（5.7.17）式计算 $c_i^{(0)}$，$c_i^{(1)}$ 和 $c_i^{(2)}$. 有

$$\begin{aligned} c_i^{(0)}&=1\\ c_i^{(1)}&=\frac{-i}{\hbar}V_{ii}\lim_{t_0\to-\infty}\int_{t_0}^{t}e^{\eta t'}dt'=\frac{-i}{\hbar\eta}V_{ii}e^{\eta t}\\ c_i^{(2)}&=\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\sum_m|V_{mi}|^2\lim_{t_0\to-\infty}\int_{t_0}^{t}dt'e^{i\omega_{im}t'+\eta t'}\frac{e^{i\omega_{mi}t'+\eta t'}}{i(\omega_{mi}-i\eta)}\\ &=\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2|V_{ii}|^2\frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2}+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\sum_{m\neq i}\frac{|V_{mi}|^2e^{2\eta t}}{2\eta(E_i-E_m+i\hbar\eta)}. \end{aligned} \tag{5.9.7}$$

这样，直到第二级，有

$$c_i(t) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar\eta}V_{ii}e^{\eta t} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 |V_{ii}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\sum_{m\neq i} \frac{|V_{mi}|^2 e^{2\eta t}}{2\eta(E_i - E_m + i\hbar\eta)}. \tag{5.9.8}$$

现在考虑取（5.9.8）式的 c_i 的微商 $[dc_i(t)/dt \equiv \dot{c}_i]$. 基于被 c_i 除和置 $\eta \to 0$（这样用 1 代替 $e^{\eta t}$ 和 $e^{2\eta t}$），得到

$$\begin{aligned}\frac{\dot{c}_i}{c_i} &\simeq \frac{\dfrac{-i}{\hbar}V_{ii} + \left(\dfrac{-i}{\hbar}\right)^2 \dfrac{|V_{ii}|^2}{\eta} + \left(\dfrac{-i}{\hbar}\right)\displaystyle\sum_{m\neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)}}{1 - \dfrac{i}{\hbar}\dfrac{V_i i}{\eta}} \\ &\simeq \frac{-i}{\hbar}V_{ii} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\sum_{m\neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta}.\end{aligned} \tag{5.9.9}$$

展开式（5.9.9）在形式上直到 V 的第二级是正确的. 现在要注意 $\dot{c}_i(t)/c_i(t)$ 是不依赖 t 的. 方程（5.9.9）是一个在所有的时间都成立的微分方程. 既然已经得到了这个结果，就很方便做 c_i 的重整化，使 $c_i(0)=1$. 现在尝试这样的拟设

$$c_i(t) = e^{-i\Delta_i t/\hbar}, \quad \frac{\dot{c}_i(t)}{c_i(t)} = \frac{-i}{\hbar}\Delta_i \tag{5.9.10}$$

其中 Δ_i 是（对时间的）常数但不一定是实的. 很清楚，（5.9.10）式与（5.9.9）式是自洽的，因为（5.9.10）式的右边是常数. 注意到在相互作用绘景中的 $e^{-i\Delta_i t/\hbar}|i\rangle$ 暗示着在薛定谔表象中的 $e^{-i\Delta_i t/\hbar - iE_i t/\hbar}|i\rangle$，可以看到 Δ_i 的物理含义. 换句话说，

$$E_i \to E_i + \Delta_i \tag{5.9.11}$$

是微扰的一个结果. 这就是说，已经使用时间相关的微扰论计算了能级移动. 像通常一样，现在展开

$$\Delta_i = \Delta_i^{(1)} + \Delta_i^{(2)} + \cdots, \tag{5.9.12}$$

并把（5.9.10）式与（5.9.9）式比较，得到一级项

$$\Delta_i^{(1)} = V_{ii}. \tag{5.9.13}$$

而这就是我们期待从 t 无关的微扰论中得到的结果. 在查看 $\Delta_i^{(2)}$ 之前，回顾

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{x + i\epsilon} = \mathrm{Pr.}\frac{1}{x} - i\pi\delta(x). \tag{5.9.14}$$

这样，

$$\mathrm{Re}(\Delta_i^{(2)}) = \mathrm{Pr.}\sum_{m\neq i}\frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m} \tag{5.9.15a}$$

$$\mathrm{Im}(\Delta_i^{(2)}) = -\pi\sum_{m\neq i}|V_{mi}|^2\delta(E_i - E_m). \tag{5.9.15b}$$

由黄金规则，（5.9.15b）式的右边是熟悉的，所以能确认

$$\sum_{m\neq i} w_{i\to m} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{m\neq i}|V_{mi}|^2\delta(E_i - E_m) = -\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}[\Delta_i^{(2)}]. \tag{5.9.16}$$

回到 $c_i(t)$，能把（5.9.10）式写为

$$c_i(t) = e^{-(i/\hbar)[\mathrm{Re}(\Delta_i)t] + (1/\hbar)[\mathrm{Im}(\Delta_i)t]}. \tag{5.9.17}$$

如果定义

$$\frac{\Gamma_i}{\hbar} \equiv -\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}(\Delta_i). \tag{5.9.18}$$

则

$$|c_i|^2 = e^{2\mathrm{Im}(\Delta_i)t/\hbar} = e^{-\Gamma_i t/\hbar}. \tag{5.9.19}$$

因此，Γ_i 描述态$|i\rangle$ 消失的速率.

值得检查一下对于小的 t 时直至 V 的第二级的概率守恒

$$|c_i|^2 + \sum_{m\neq i}|c_m|^2 = (1-\Gamma_i t/\hbar) + \sum_{m\neq i} w_{i\to m} t = 1, \tag{5.9.20}$$

其中使用了（5.9.16）式. 这样找到初态和所有其他态的概率加起来就能到1. 换句话说，在小 t 时，态$|i\rangle$ 的损耗被非$|i\rangle$ 的其他态的增长补偿了.

概括一下，能移的实部就是通常与能级移动相联系的部分. 能移的虚部，除去－2 的因子［见（5.9.18）式］，就是**衰变宽度**. 还要注意

$$\frac{\hbar}{\Gamma_i} = \tau_i, \tag{5.9.21}$$

其中 τ_i 是态$|i\rangle$ 的平均寿命，因为

$$|c_i|^2 = e^{-t/\tau_i}. \tag{5.9.22}$$

为了理解为什么 Γ_i 被称为宽度，看一下傅里叶分解

$$\int f(E)e^{-iEt/\hbar}dE = e^{-i[E_i+\mathrm{Re}(\Delta_i)]t/\hbar-\Gamma_i t/2\hbar}. \tag{5.9.23}$$

使用傅里叶反演公式，得到

$$|f(E)|^2 \propto \frac{1}{\{E-[E_i+\mathrm{Re}(\Delta_i)]\}^2+\Gamma_i^2/4}. \tag{5.9.24}$$

因此，Γ_i 具有通常的在极大值一半处的全宽度的意义. 注意，从（5.9.21）式得到时间-能量不确定度关系：

$$\Delta t\Delta E \sim \hbar, \tag{5.9.25}$$

其中，我们认为能量的不确定度等同于 Γ_i，而平均寿命的不确定度等同于 Δt.

尽管在讨论能移和衰变宽度的课题时使用了常微扰 V，它是当 $\eta\to 0$ 时，（5.9.1）式的极限，把我们的考虑推广到 5.7 节讨论的谐波微扰是很容易的. 所需做的就是在（5.9.2）式、（5.9.8）式和（5.9.15）式等公式中令

$$E_{n(m)} - E_i \to E_{n(m)} - E_i \pm \hbar\omega. \tag{5.9.26}$$

这里所说的不稳定态的量子力学描述最初是由维格纳和韦斯科普夫（Weisskopf）在 1930 年提出的.

习题

5.1 一个（一维）简谐振子受到一个微扰

$$\lambda H_1 = bx,$$

其中 b 是一个实常数.

（a）计算基态的能移到最低的非零级.

（b）严格求解这个问题，并与（a）中得到的结果比较. 可以不加证明地假定

$$\langle u_{n'}|x|u_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1}).$$

5.2 在非简并的时间无关的微扰论中，在微扰能量本征态（$|k\rangle$）中找到相应的无微扰本征态（$|k^{(0)}\rangle$）的概率是什么？求解这个问题至 g^2 级.

5.3 考虑一个粒子处于一个二维势阱中

$$V_0 = \begin{cases} 0, & \text{对于 } 0\leqslant x\leqslant L, 0\leqslant y\leqslant L \\ \infty & \text{其他.} \end{cases}$$

写出基态和第一激发态的能量本征函数. 现在加入一个如下形式的时间无关微扰：

$$V_1=\begin{cases}\lambda xy, & \text{对于 } 0\leqslant x\leqslant L, 0\leqslant y\leqslant L\\ 0 & \text{其他.}\end{cases}$$

求基态和第一激发态的零级能量本征函数和一级能移.

5.4 考虑一个二维各向同性谐振子. 其哈密顿量为

$$H_0=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{p_y^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2).$$

(a) 三个最低态的能量是什么？是否有简并？

(b) 现在加入一个微扰

$$V=\delta m\omega^2 xy,$$

其中 δ 是一个远小于 1 的无量纲实数. 找到这三个最低能态中每个态的零级能量本征右矢和相应的到一级的能量［即在 (a) 中得到的无微扰的能量加上一级能移］.

(c) 精确求解 H_0+V 问题. 与 (b) 中得到的微扰结果比较. ［可使用 $\langle n'|x|n\rangle=\sqrt{\hbar/2m\omega}\left(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}+\sqrt{n}\delta_{n',n-1}\right)$.］

5.5 对 (5.1.50) 式给出的一维谐振子和一个额外的微扰 $V=\frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2 x^2$ 建立 (5.1.54) 式. 证明其他所有的矩阵元 V_{k0} 为零.

5.6 (取自 Merzbacher 1970.) 一个稍微各向异性的三维谐振子有 $\omega_z\approx\omega_x=\omega_y$. 一个带电粒子在这个振子的场中移动并在同时遭遇到一个在 x 方向的均匀磁场. 假定塞曼分裂与由各向异性产生的分裂可比，但小于 $\hbar\omega$，计算到第一级的第一激发态各分量的能量. 讨论各种极限情况.

5.7 一个有非简并基态的单电子原子放在了一个 z 方向的均匀电场中. 通过考虑 ez 在算出的一级微扰态矢上的期待值，得到基态感应电偶极矩的近似表达式. 证明同一个表达式也可以从算出的二级的基态能移 $\Delta=-\alpha|\mathbf{E}|^2/2$ 得到. (注意：α 是极化度.) 忽略自旋.

5.8 估算下面给出的矩阵元（或期待值）. 无论哪个为零，使用简单的对称性（或其他）论据，解释它为什么为零.

(a) $\langle n=2,\ l=1,\ m=0|x|n=2,\ l=0,\ m=0\rangle$.

(b) $\langle n=2,\ l=1,\ m=0|p_z|n=2,\ l=0,\ m=0\rangle$.

［在 (a) 和 (b) 中，$|nlm\rangle$ 表示一个忽略了自旋的非相对论氢原子的能量本征右矢.］

(c) 一个量子数为 $j=9/2$，$m=7/2$，$l=4$ 的电子在中心势场的 $\langle L_z\rangle$.

(d) 一个 s 态电子偶素的 〈单态，$m_S=0\,|\,S_z^{(e^-)}-S_z^{(e^+)}\,|$ 三重态，$m_S=0\rangle$.

(e) 一个氢分子基态的 $\langle \boldsymbol{S}^{(1)}\cdot\boldsymbol{S}^{(2)}\rangle$.

5.9 一个由 $|n,l=1,\ m=\pm1,0\rangle$（忽略自旋）描绘的 p 轨道电子受到一个势

$$V=\lambda(x^2-y^2)\qquad(\lambda=\text{常数}).$$

的作用

(a) 求出“正确”的、使该微扰对角化的零级能量本征态. 不必详细地估算能移，但要证明原来的三重简并现在已被完全解除.

(b) 因为 V 是时间反演不变的且不再存在任何简并，我们期待在 (a) 中得到的每一个能量本征态在时间反演下都变到它自身（最多差一个相因子或符号）. 明确地检查这点.

5.10 考虑一个无自旋的粒子处于一个二维无穷深方势阱

$$V=\begin{cases}0, & \text{对 } 0\leqslant x\leqslant a, 0\leqslant y\leqslant a\\ \infty, & \text{其他.}\end{cases}$$

中.

(a) 三个最低态的能量本征值是什么？存在任何简并吗？

(b) 现在加入一个势

$$V_1 = \lambda xy, \qquad 0 \leqslant x \leqslant a, 0 \leqslant y \leqslant a.$$

取其为弱微扰，回答下述问题：

(i) 对这三个态中的每一个，由微扰引起的能移对 λ 是线性的还是二次的？

(ii) 得到精确到 λ 阶的三个最低态的能移的表达式.（不必计算可能出现的积分.）

(iii) 对这三个能态，画出有微扰和没有微扰时的能级图. 确定地指出哪个无微扰态联系着哪个微扰态.

5.11 一个双态系统的哈密顿量矩阵能被写为

$$\mathscr{H} = \begin{pmatrix} E_1^0 & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & E_2^0 \end{pmatrix}$$

很清楚，无微扰问题（$\lambda=0$）的能量本征函数由

$$\phi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \phi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

给出.

(a) 精确求解这个问题以找到能量本征函数 ψ_1 和 ψ_2，及能量本征值 E_1 和 E_2.

(b) 假定 $\lambda|\Delta| \ll |E_1^0 - E_2^0|$，使用时间无关微扰论，求解同样的问题到一级的能量本征函数和到二级的能量本征值. 并与 (a) 中得到的精确结果比较.

(c) 假定两个无微扰的能量是“几乎简并”的，即

$$|E_1^0 - E_2^0| \ll \lambda|\Delta|.$$

证明 (a) 中得到的精确结果非常像通过令 E_1^0 严格等于 E_2^0，而把简并微扰论应用于这个问题时所期待的结果.

5.12 （这是一个棘手的问题，因为在第一个态和第二个态之间的简并在第一级没有被解除. 也可参看 Gottfried 1966，397 页，习题 1.）这个问题取自于 Schiff 1968，295 页，习题 4. 一个具有三个无微扰态的系统由微扰哈密顿量矩阵

$$\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix}$$

描述，其中 $E_2 > E_1$. a 和 b 两个量被看作微扰，它们是相同量级但比 $E_2 - E_1$ 小的量. 使用二级非简并微扰论计算微扰的本征值.（这个过程正确吗？）然后，对角化这个矩阵以找到精确的本征值. 最后，使用二级简并微扰论. 比较得到的三个结果.

5.13 在下述情况下计算氢的 $2S_{1/2}$ 和 $2P_{1/2}$ 能级的斯塔克效应，在那里场 $\mathscr{E}$ 足够的弱以至 $e\mathscr{E}a_0$ 小于精细结构，但要计入兰姆位移 δ（$\delta = 1{,}057\text{MHz}$）（即在计算中忽略 $2P_{3/2}$ 能级）. 证明：当 $e\mathscr{E}a_0 \ll \delta$ 时，能移对 $\mathscr{E}$ 是二次的；而当 $e\mathscr{E}a_0 \gg \delta$ 时，能移对 $\mathscr{E}$ 是线性的.（所需的径向积分是 $\langle 2s|r|2p\rangle = 3\sqrt{3}a_0$.）简要地讨论这个问题的时间反演结果（如果有的话）. 这个问题取自于 Gottfried 1966，习题 7-3.

5.14 忽略自旋-轨道力和相对论修正（兰姆位移），计算氢原子的 $n=3$ 能级的最低非零级斯塔克效应，不仅求对最低非零级的能移，而且还要求相应的零级本征右矢.

5.15 假定电子具有一个类似于自旋磁矩（即正比于 $\boldsymbol{\sigma}$ 的 $\boldsymbol{\mu}_e$）的非常小的内禀电偶极矩. 把假定的 $-\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{E}$ 相互作用视为一个小微扰，在不存在任何外部电磁场的情况下，定性地讨论钠原子（$Z=11$）的能级是如何改变的. 能级移动是一级的还是二级的？明确指出哪些态彼此相混合. 求受微扰影响的最低能级的能移表达式. 自始至终假设只有价电子经受假定的相互作用.

5.16 考虑一个粒子被一个球对称势 $V(r)$ 束缚于一个固定的中心.

(a) 对所有的 s 态，基态和激发态，证明

$$|\psi(0)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\left\langle \frac{dV}{dr} \right\rangle.$$

(b) 对一个三维各向同性振子和氢原子等等的基态，检验这个关系. (注意：实际上发现这个关系在猜测一个夸克和一个反夸克间势的形式时是很有用的)

5.17 (a) 一个刚性转子处于一个垂直于其转轴的磁场中，假设它的哈密顿量具有如下形式 (Merzbacher 1970，习题 17-1)

$$A\mathbf{L}^2 + BL_z + CL_y$$

如果磁场的二次项被忽略的话. 假设 $B \gg C$，将微扰论用到最低非零级以获得近似的能量本征值.

(b) 考虑一个单电子 (如，碱金属) 原子的矩阵元

$$\langle n'l'm'_l m'_s | (3z^2 - r^2) | nlm_l m_s \rangle,$$

$$\langle n'l'm'_l m'_s | xy | nlm_l m_s \rangle.$$

对 Δl，Δm_l 和 Δm_s 写出选择定则. 证明你的答案是合理的.

5.18 对基态氢原子 $[\langle \mathbf{x}|0\rangle = (1/\sqrt{\pi a_0^3})e^{-r/a_0}]$ 计算二次塞曼效应，它是由于取到第一级的哈密顿量中通常被忽略的 $e^2\mathbf{A}^2/2m_e c^2$ 项引起的. 把能移写成

$$\Delta = -\frac{1}{2}\chi \mathbf{B}^2$$

并求抗磁磁化率 χ 的表达式. 下述定积分可能是有用的

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r} r^n dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.$$

5.19 (Merzbacher 1970，448 页，习题 11.) 对氦 (He) 的波函数，使用

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (Z_{\text{有效}}^3/\pi a_0^3)\exp\left[\frac{-Z_{\text{有效}}(r_1 + r_2)}{a_0}\right]$$

其中 $Z_{\text{有效}} = 2 - 5/16$，它是使用变分法得到的. 抗磁磁化率的测量值是 $1.88 \times 10^{-6}\,\text{cm}^3/\text{mole}$.

如果系统处在由矢势 $\mathbf{A} = (1/2)\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ 描写的一个均匀磁场中，使用对于在磁场中原子电子的哈密顿量，确定一个零角动量态的到 B^2 量级的能量变化.

用 $E = -(1/2)\chi B^2$ 定义原子的抗磁磁化率 χ，计算基态氦原子的 χ，并将其与测量值比较.

5.20 使用试探波函数

$$\langle x|\tilde{0}\rangle = e^{-\beta|x|}$$

其中 β 作为变分参数，估算一维简谐振子的基态能量. 可以使用

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x} x^n dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.$$

5.21 以

$$\psi = \begin{cases} c(\alpha - |x|), & |x| < \alpha \\ 0, & |x| > \alpha \end{cases} \qquad (\alpha \text{ 为变分参数})$$

作为试探波函数，用变分法估算微分方程

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\lambda - |x|)\psi = 0, \text{对 } |x| \to \infty \quad \psi \to 0$$

的最小本征值 (λ) (注意：$d\psi/dx$ 在 $x = 0$ 处是不连续的). 下列数值对该问题可能是有用的

$$3^{1/3} = 1.442, \quad 5^{1/3} = 1.710, \quad 3^{2/3} = 2.080, \quad \pi^{2/3} = 2.145.$$

可以证明最小本征值的精确值是 1.019.

5.22 考虑一个一维简谐振子，它的经典角频率是 ω_0. 已知在 $t < 0$ 时，它处于基态. 在 $t > 0$ 时，还存在一个时间相关的势

$$V(t) = F_0 x \cos\omega t \ .$$

其中，F_0 在空间和时间上都是常数. 使用时间相关微扰论到最低的非零级，求作为时间函数的期待值 $\langle x\rangle$. 这个做法对 $\omega \simeq \omega_0$ 适用吗? [可以使用 $\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1})$.]

5.23 一个一维谐振子在 $t < 0$ 时处于它的基态. 在 $t \geq 0$ 时，它受到一个沿 x 方向的时间相关但在空间上均匀的力 (不是势!) 的作用

$$F(t) = F_0 e^{-t/\tau}.$$

(a) 将时间相关的微扰论用到第一级，求振子在 $t > 0$ 时处于它的第一激发态的概率. 证明该表达式在 $t \to \infty$（τ 有限）的极限与时间无关. 这是合理的还是令人吃惊的?

(b) 能发现更高的激发态吗? 可使用

$$\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega}(\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}).$$

5.24 考虑一个粒子被束缚在一个简谐振子势中. 最初（$t<0$）它处于基态. 在 $t=0$ 时，一个形式为

$$H'(x,t) = Ax^2 e^{-t/\tau}$$

的微扰加了进来. 使用时间相关微扰论，计算在足够长的时间（$t \gg \tau$）后，系统跃迁到一个给定的激发态的概率. 考虑所有末态.

5.25 一个双态系统的无微扰哈密顿量由

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix}$$

给出. 除此之外还存在一个时间相关的微扰

$$V(t) = \begin{pmatrix} 0 & \lambda\cos\omega t \\ \lambda\cos\omega t & 0 \end{pmatrix} \quad (\lambda \text{ 是实数}).$$

(a) 系统在 $t=0$ 时处于由下式表示的第一个态

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

使用时间相关微扰论并假定 $E_1^0 - E_2^0$ 不靠近 $\pm\hbar\omega$，推导找到该系统处于由下式表示的第二个态

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

的、作为 t（$t > 0$）的函数的概率.

(b) 为什么当 $E_1^0 - E_2^0$ 接近 $\pm\hbar\omega$ 时，这个做法就不适用了?

5.26 一个角频率为 ω 的一维简谐振子受到一个空间均匀但时间相关的力（不是势!）

$$F(t) = \frac{(F_0\tau/\omega)}{(\tau^2 + t^2)}, \quad -\infty < t < \infty$$

的作用. 在 $t=-\infty$ 时该振子处于基态. 使用到一级的时间相关微扰论，计算振子在 $t=+\infty$ 时处于第一激发态的概率.

对专家们的挑战：$F(t)$ 是这样归一化的，以致给予振子的冲量

$$\int F(t)dt$$

总是一样的，即不依赖于 τ；甚至在 $\tau \gg 1/\omega$ 时，激发的概率基本上是可忽略的. 这是否合理? [x 的矩阵元为 $\langle n' | x | n \rangle = (\hbar/2m\omega)^{1/2}(\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1})$.]

5.27 考虑一个在某时间相关势的影响下做一维运动的粒子. 假设这个问题的能级和相应的本征函数都是已知的. 现在使这个粒子受到一个由时间相关势描述的移动脉冲的作用

$$V(t) = A\delta(x - ct).$$

(a) 假设知道粒子在 $t = -\infty$ 时处于基态，它的能量本征函数是 $\langle x | i \rangle = u_i(x)$. 求系统在 $t=+\infty$ 时处于能量本征函数为 $\langle x | f \rangle = u_f(x)$ 的激发态的概率.

(b) 通过把 δ 函数脉冲看作是谐波微扰的叠加，从物理上解释 (a) 中的结果；回顾

$$\delta(x - ct) = \frac{1}{2\pi c}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega[(x/c)-t]}.$$

强调能量守恒所起的作用，该守恒律即使在量子力学中也成立，只要微扰已经打开了很长的时间.

5.28 一个处于基态 [$(n,l,m) = (1,0,0)$] 的氢原子被放入一个电容器的极板之间. 现在加入一个如下的时间相关但空间均匀的电场（不是势!）

$$\mathbf{E}=\begin{cases}0, & t<0\\ \mathbf{E}_0 e^{-t/\tau}, & t>0\end{cases}\qquad(\mathbf{E}_0\text{ 在正 }z\text{ 方向}).$$

使用一级时间相关微扰论，计算在 $t\gg\tau$ 时，发现这个原子在三个 $2p$ 态 $(n,l,m)=(2,1,\pm1$ 或 $0)$ 中的每一个态的概率. 对 $2s$ 态 $(n,l,m)=(2,0,0)$ 重复这个问题. 不需要试图计算径向积分，但要完成所有的其他积分（对角度和时间）.

5.29 考虑由两个自旋 1/2 的粒子组成的复合系统. 在 $t<0$ 时，哈密顿量不依赖于自旋，并能通过恰当地调整能标使其为零. 在 $t>0$ 时，哈密顿量由

$$H=\left(\frac{4\Delta}{\hbar^2}\right)\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$$

给出. 假定在 $t\leqslant 0$ 时，系统处于 $|+-\rangle$ 态. 作为时间的函数，找出它处于如下几个态：$|++\rangle$，$|+-\rangle$，$|-+\rangle$ 和 $|--\rangle$ 中的每一个态的概率.

(a) 通过精确地求解这个问题.

(b) 通过在下面的条件下求解这个问题：假设一级时间相关微扰论是有效的，而 H 作为微扰在 $t=0$ 时加入. 在什么条件下，(b) 给出正确的结果？

5.30 考虑一个 $E_1<E_2$ 的双能级系统. 存在一个时间相关的势，它以如下方式联系着这两个能级：

$$V_{11}=V_{22}=0,\quad V_{12}=\gamma e^{i\omega t},\quad V_{21}=\gamma e^{-i\omega t}\qquad(\gamma\text{ 为实数})$$

已知在 $t=0$ 时，只有较低的能级被占据，即 $c_1(0)=1$，$c_2(0)=0$.

(a) 通过精确求解耦合微分方程

$$i\hbar\dot{c}_k=\sum_{n=1}^{2}V_{kn}(t)e^{i\omega_{kn}t}c_n,\qquad(k=1,2)$$

求 $t>0$ 时的 $|c_1(t)|^2$ 和 $|c_2(t)|^2$.

(b) 使用时间相关的微扰论到最低的非零级求解同样的问题. 比较小 γ 值时的两种近似的解. 分别处理下列两种情况：(i) ω 与 ω_{21} 的差别非常大；(ii) ω 接近 ω_{21}.

(a) 的答案（拉比公式）

$$|c_2(t)|^2=\frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2+(\omega-\omega_{21})^2/4}\sin^2\left\{\left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2}+\frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4}\right]^{1/2}t\right\},$$

$$|c_1(t)|^2=1-|c_2(t)|^2.$$

5.31 证明微扰 $V\to Ve^{\eta t}$ 的缓慢加入（参见 Baym 1969，257 页）能从 (5.7.36) 式的第二项产生贡献.

5.32 (a) 考虑在第 3 章习题 3.4 中已求解的电子偶素问题. 当存在沿 z 轴的均匀且稳定的磁场 B 时，哈密顿量由

$$H=A\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2+\left(\frac{eB}{m_e c}\right)(S_{1z}-S_{2z})$$

给出. 使用简并的时间无关微扰论（代替对角化哈密顿量矩阵）求解这个问题以获得所有四个态的能级. 把 H 中的第一和第二项分别视为 H_0 和 V. 将你的结果与精确表达式

$$E=-\left(\frac{\hbar^2A}{4}\right)\left[1\pm2\sqrt{1+4\left(\frac{eB}{m_e c\hbar A}\right)^2}\right]\qquad\begin{cases}\text{单态} & m=0\\ \text{三重态} & m=0\end{cases}$$

$$E=\frac{\hbar^2A}{4}\qquad\text{三重态}\quad m=\pm1,$$

相比较，式中三重态（单态）$m=0$ 表示那个在 $B\to0$ 时变成一个具有 $m=0$ 的纯三重态（单态）的态.

(b) 现在试图通过引入一个“正确”频率的振动磁场来引起两个 $m=0$ 态之间的跃迁（经过受激发射和吸收）. 应该把磁场取为沿着 z 轴方向还是沿着 x（或 y）轴方向？证明你的选择.（假设原始静磁场一直是沿着 z 轴方向的.）

(c) 计算到一级的本征矢量.

5.33 重复习题 5.32 的问题，但用氢原子的哈密顿量

$$H=A\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2+\left(\frac{eB}{m_e c}\right)\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{B},$$

其中在超精细项 $AS_1 \cdot S_2$ 中，S_1 是电子自旋，S_2 是质子自旋．［注意：这里的问题与电子偶素情况比较有较小的对称性．］

5.34 考虑一个受激原子自发发射一个光子．这个过程被称为一个 $E1$ 跃迁．假定原子的磁量子数减小一个单位．发射出光子的角分布是什么样的？也要讨论光子的极化，要注意整个系统（原子加上光子）的角动量守恒．

5.35 考虑由一个电子与一个单电荷（$Z=1$）氚核（^{3}H）组成的原子．开始系统处于基态（$n=1$，$l=0$）．假如系统经受 β 衰变，原子核的电荷突然增加了一个单位（实际上发射出一个电子和一个反中微子）．这意味着氚原子核（称为氚核）转变成一个质量为 3（^{3}He）的氦（$Z=2$）原子核．

（a）求系统处于产生的氦离子基态的概率．氢的波函数由

$$\psi_{n=1,l=0}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

给出．

（b）氚 β 衰变中可用的能量约为 18keV，且 ^{3}He 原子的尺度约为 1Å．检查跃迁的时间标度 T 满足瞬变近似合理性的判据．

5.36 证明由（5.6.23）式定义的 $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ 是一个纯的实量．

5.37 考虑一个中子处于这样的一个磁场中，该磁场与 $\mathbf{z}$ 轴成固定的 θ 角但沿着 ϕ 方向缓慢转动．这就是说，磁场的端点在球表面的“纬度” $\pi-\theta$ 上勾画出一个圆．由（5.6.23）式对自旋向上的态具体计算贝里势 $\mathbf{A}$，取它的旋度，并确定贝里相位 γ_+．从而，对于一条曲线 C 的这个特殊例子证明（5.6.42）式．［提示：请见 *The Adiabatic Theorem and Berry's Phase*，B. R. Holstein，*Am. J. Phys.* **57**（1989）1079.］

5.38 一个氢原子的基态（$n=1$，$l=0$）受到一个如下的一个时间相关势

$$V(\mathbf{x},t) = V_0\cos(kz-\omega t)$$

的作用．使用时间相关微扰论，求动量 $\mathbf{p}$ 的电子被发射出来的跃迁速率的表达式．特别要证明如何计算放射出电子的角分布（借助相对于 z 轴定义的 θ 和 ϕ 角）．简要地讨论这个问题与（更实际一些）光电效应的相似性和不同处．（注意：初始波函数可参见习题 5.35．如果有归一化问题，最终的波函数可以取为

$$\psi_f(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{L^{3/2}}\right)e^{i\mathbf{p}\cdot x/\hbar}$$

L 非常大，但应能够证明可观测的效应是不依赖于 L 的．）

5.39 约束在一维运动的一个质量为 m 的粒子，被一个无限深势阱

$$V=\infty \quad \text{对} \quad x<0, x>L,$$
$$V=0 \quad \text{对} \quad 0\leqslant x\leqslant L.$$

禁闭在 $0<x<L$ 的范围中．求在高能情况下，作为 E 的函数的态密度表达式（即单位能量间隔中的态的数目）．（检查你的量纲！）

5.40 角频率为 ω 的线极化光入射到一个单电子“原子”上，它的波函数可由一个角频率为 ω_0 的三维各向同性的谐振子基态来近似．倘若所放出的动量为 $\hbar k_f$ 的电子能被视为处于平面波态（使用的坐标系展示在图 5.12 中），证明放出一个光电子的微分截面由下式给出：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\alpha\hbar^2k_f^3}{m^2\omega\omega_0}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}}\exp\left\{-\frac{\hbar}{m\omega_0}\left[k_f^2+\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right]\right\}$$
$$\times\sin^2\theta\cos^2\phi\exp\left[\left(\frac{2\hbar k_f\omega}{m\omega_0 c}\right)\cos\theta\right].$$

5.41 求基态氢原子具有特定动量 $\mathbf{p}'$ 的概率 $|\phi(\mathbf{p}')|^2 d^3p'$．（这是一个很好的三维傅里叶变换的练习．为进行角积分，选择 z 轴沿 $\mathbf{p}$ 方向．）

5.42 求氢原子的 $\tau(2p\to 1s)$ 的表达式．证明它等于 1.6×10^{-9} s.

第 6 章　散射理论

本章专门阐述散射过程理论. 在这些过程中，一个连续的初态通过某个势的作用转变成一个连续的末态，我们将把该势当作时间相关的微扰. 这样的过程是极有意义的. 一般地，它们是我们通过实验认识分子、原子和亚原子系统的质量、电荷的分布以及势能的基本方法.

6.1　作为时间相关微扰的散射

假定哈密顿量可以写为

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}), \tag{6.1.1}$$

其中

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{6.1.2}$$

是动能算符，其本征值为

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}. \tag{6.1.3}$$

用$|\mathbf{k}\rangle$表示 H_0 的平面波本征矢量，并假设散射势 $V(\mathbf{r})$ 不依赖于时间.

在处理过程中，我们认识到一个入射粒子仅当它处于散射体附近时才能“看到”作为微扰的散射势，这就是说该微扰才被“打开”. 因此，可以在相互作用表象中利用时间相关微扰论分析这个问题.

回顾一下（见 5.7 节），$|\alpha,t_0;t_0\rangle_I$ 态按照

$$|\alpha,t;t_0\rangle_I = U_I(t,t_0)|\alpha,t_0;t_0\rangle_I, \tag{6.1.4}$$

演化成$|\alpha,t;t_0\rangle_I$ 态，其中的 $U_I(t;t_0)$ 满足方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_I(t,t_0) = V_I(t)U_I(t;t_0) \tag{6.1.5}$$

其中 $U_I(t_0;t_0) = 1$，且 $V_I(t) = \exp(iH_0t/\hbar)V\exp(-iH_0t/\hbar)$. 这个方程的解可在形式上写为

$$U_I(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')U_I(t',t_0)dt'. \tag{6.1.6}$$

因此，一个初态$|i\rangle$跃迁到一个末态$|n\rangle$的“跃迁振幅”由

$$\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\sum_m \langle n|V|m\rangle\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{nm}t'}\langle m|U_I(t',t_0)|i\rangle dt' \tag{6.1.7}$$

给出，其中$|i\rangle$和$|n\rangle$都是 H_0 的本征态，且 $\langle n|i\rangle = \delta_{ni}$，$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$.

为把这个形式体系用于散射理论，需要做一些调整. 首先，存在初态和末态的归一化. 方程（6.1.7）假设的是分立态，而散射态是连续态. 通过在一个“大盒子”——边长为 L 的立方体——中散射态量子化来处理这个问题. 在坐标表象中，它给出

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \tag{6.1.8}$$

在那里，$\langle \mathbf{k}'|\mathbf{k}\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$，$\mathbf{k}$ 取分立值. 在任何计算的末尾，都将取 $L\to\infty$.

初态和末态都仅仅渐近存在的事实也需要处理. 也就是 $t\to\infty$ 和 $t_0\to-\infty$ 的情况. 从(6.1.7)式的第一级的处理得到暗示，在那里设在积分内部 $\langle m|U_I(t',t_0)|i\rangle = \delta_{mi}$：

$$\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\langle n|V|i\rangle\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ni}t'}dt'. \tag{6.1.9}$$

在这种情况下，当 $t\to\infty$ 时，“跃迁率”以费米黄金规则的规律出现. 所以，为了也能容纳 $t_0\to-\infty$，定义一个矩阵 T：

$$\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}T_{ni}\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ni}t'+\varepsilon t'}dt', \tag{6.1.10}$$

其中 $\varepsilon>0$ 且 $t\ll(1/\varepsilon)$. 这些条件保证了在 $t\to\infty$ 时 $e^{\varepsilon t'}$ 接近于1，并且在 $t_0\to-\infty$ 时被积函数趋向于0. 我们只需要确定在令 $t\to+\infty$ 之前，先取 $\varepsilon\to0$ 的极限.

现在能够利用 T 矩阵定义散射（或 S）矩阵：

$$\begin{aligned} S_{ni} \equiv \lim_{t\to\infty}\left[\lim_{\varepsilon\to0}\langle n|U_I(t,-\infty)|i\rangle\right] &= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}T_{ni}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{ni}t'}dt' \\ &= \delta_{ni} - 2\pi i\delta(E_n - E_i)T_{ni}. \end{aligned} \tag{6.1.11}$$

很清楚，S 矩阵由两部分组成. 第一部分是其中的末态与初态相同. 第二部分由 T 矩阵支配，是其中某种散射发生的部分.

跃迁率和截面

像5.7节中的一样，定义跃迁率为

$$w(i\to n) = \frac{d}{dt}|\langle n|U_I(t,-\infty)|i\rangle|^2, \tag{6.1.12}$$

其中 $|i\rangle\neq|n\rangle$，有

$$\langle n|U_I(t,-\infty)|i\rangle = -\frac{i}{\hbar}T_{ni}\int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_{ni}t'+\varepsilon t'}dt' = -\frac{i}{\hbar}T_{ni}\frac{e^{i\omega_{ni}t+\varepsilon t}}{i\omega_{ni}+\varepsilon} \tag{6.1.13}$$

并因此

$$w(i\to n) = \frac{d}{dt}\left[\frac{1}{\hbar^2}|T_{ni}|^2\frac{e^{2\varepsilon t}}{\omega_{ni}^2+\varepsilon^2}\right] = \frac{1}{\hbar^2}|T_{ni}|^2\frac{2\varepsilon e^{2\varepsilon t}}{\omega_{ni}^2+\varepsilon^2}.$$

对于有限的 t 值，需要取 $\varepsilon\to0$，然后取 $t\to\infty$. 很清楚，如果 $\omega_{ni}\neq0$，这将使 $w\to0$，所以我们看到 $\delta(\omega_{ni})$ 之类的函数出现了，给定了(6.1.11)式之后，它并不是出乎意料的. 事实上，因为对于 $\varepsilon>0$，有

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\omega^2+\varepsilon^2}d\omega = \frac{\pi}{\varepsilon}, \tag{6.1.14}$$

所以对有限的 t 有

$$\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\varepsilon e^{2\varepsilon t}}{\omega_{ni}^2+\varepsilon^2} = \pi\delta(\omega_{ni}) = \pi\hbar\delta(E_n - E_i). \tag{6.1.15}$$

因此，跃迁率为

$$w(i\to n) = \frac{2\pi}{\hbar}|T_{ni}|^2\delta(E_n - E_i), \tag{6.1.16}$$

它不依赖于时间，所以 $t\to\infty$ 时的极限是平庸的. 这个表达式与费米黄金规则(5.7.35)

式惊人的相似，除掉 V_{ni} 被更为一般的 T_{ni} 所替换. 下面将看到，通常如何确定矩阵元 T_{ni}. 不管怎么样，首先继续这个讨论，并用跃迁率去表示散射截面.

正如使用费米黄金规则的情况一样，为对末态能量 E_n 积分，需要确定末态的密度 $\rho(E_n)=\Delta n/\Delta E_n$. 我们将对弹性散射确定态密度，在那里 $|i\rangle=|\mathbf{k}\rangle$，$|n\rangle=|\mathbf{k}'\rangle$ 和 $|\mathbf{k}|=|\mathbf{k}'|\equiv k$.（回顾在 2.5 节中关于三维自由粒子的讨论.）对“大盒子”归一化，写出

$$E_n=\frac{\hbar^2\mathbf{k}'^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2|\mathbf{n}|^2 \quad \text{所以} \quad \Delta E_n=\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2|\mathbf{n}|\Delta|\mathbf{n}|, \tag{6.1.17}$$

其中 $\mathbf{n}=n_x\hat{\mathbf{i}}+n_y\hat{\mathbf{j}}+n_z\hat{\mathbf{k}}$ 且 $n_{x,y,z}$ 均为整数. 因为 $|\mathbf{n}|=(L/2\pi)|\mathbf{k}'|=(L/2\pi)k$ 并且 L 很大，可认为 $|\mathbf{n}|$ 接近连续，并且在一个半径为 $|\mathbf{n}|$，厚度为 $\Delta|\mathbf{n}|$ 的球壳内，态的数目是

$$\Delta n=4\pi|\mathbf{n}|^2\Delta|\mathbf{n}|\times\frac{d\Omega}{4\pi}, \tag{6.1.18}$$

在这里考虑了由末态波矢 $\mathbf{k}$ 描述的立体角的因子. 因此，

$$\rho(E_n)=\frac{\Delta n}{\Delta E_n}=\frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2|\mathbf{n}|d\Omega=\frac{mk}{\hbar^2}\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3d\Omega, \tag{6.1.19}$$

对末态积分之后，跃迁率由

$$w(i\to n)=\frac{mkL^3}{(2\pi)^2\hbar^3}|T_{ni}|^2d\Omega \tag{6.1.20}$$

给出.

用截面的概念去解释散射实验中的跃迁率. 也就是说，要确定粒子由动量为 $\hbar\mathbf{k}$ 的粒子“束流”散射到立体角 $d\Omega$ 的速率. 这些粒子的速度是 $v=\hbar k/m$，所以一个粒子要通过这个“大盒子”的时间是 L/v. 这样，粒子束流中的流是 $1/L^2\div(L/v)=v/L^3$. 的确，波函数（6.1.8）的概率流（2.4.16）变成了

$$\mathbf{j}(\mathbf{x},t)=\left(\frac{\hbar}{m}\right)\frac{\mathbf{k}}{L^3}=\frac{v}{L^3}. \tag{6.1.21}$$

截面 $d\sigma$ 简单地定义为跃迁率除以流强. 把所有上述的结果合在一起，有

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\right)^2|T_{ni}|^2. \tag{6.1.22}$$

现在我们的工作是把矩阵元 T_{ni} 与散射势的分布 $V(\mathbf{r})$ 联系起来.

求解 T 矩阵

回到矩阵的定义. 由（6.1.10）式和（6.1.13）式，有

$$\langle n|U_I(t,-\infty)|i\rangle=\delta_{ni}+\frac{1}{\hbar}T_{ni}\frac{e^{i\omega_{ni}t+\varepsilon t}}{-\omega_{ni}+i\varepsilon}. \tag{6.1.23}$$

也可以回到（6.1.7）式. 写出 $V_{nm}=\langle n|V|m\rangle$，有

$$\langle n|U_I(t,-\infty)|i\rangle=\delta_{ni}-\frac{i}{\hbar}\sum_m V_{nm}\int_{-\infty}^{t}e^{i\omega_{nm}t'}\langle m|U_I(t',-\infty)|i\rangle dt'. \tag{6.1.24}$$

现在将（6.1.23）式代入（6.1.24）式中的被积函数. 它产生了三项：第一项是 δ_{ni}，第二项很像（6.1.23）式，只是 T_{ni} 换成了 V_{ni}. 第三项是

$$-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{\hbar}\sum_m V_{nm}\frac{T_{mi}}{-\omega_{mi}+i\varepsilon}\int_{-\infty}^{t}e^{i\omega_{nm}t'+i\omega_{mi}t'+\varepsilon t'}dt'. \tag{6.1.25}$$

接着做积分，但因为 $\omega_{nm}+\omega_{mi}=\omega_{ni}$，积分结果可以移到求和之外. 把所有的项收到一起，并与（6.1.23）式的结果相比较，发现下述关系：

$$T_{ni}=V_{ni}+\frac{1}{\hbar}\sum_m V_{nm}\frac{T_{mi}}{-\omega_{mi}+i\varepsilon}=V_{ni}+\sum_m V_{nm}\frac{T_{mi}}{E_i-E_m+i\hbar\varepsilon}. \tag{6.1.26}$$

这是一个非齐次线性方程组，利用已知的矩阵元 V_{nm}，可求解它得到 T_{ni} 的值. 方便的做法是基于某个基中的分量 $|j\rangle$，如此定义一组矢量 $|\psi^{(+)}\rangle$，使得

$$T_{ni}=\sum_j\langle n|V|j\rangle\langle j|\psi^{(+)}\rangle=\langle n|V|\psi^{(+)}\rangle. \tag{6.1.27}$$

（很快，记号的选择就会变得清楚了.）因此，(6.1.26) 式变成

$$\langle n|V|\psi^{(+)}\rangle=\langle n|V|i\rangle+\sum_m\langle n|V|m\rangle\frac{\langle m|V|\psi^{(+)}\rangle}{E_i-E_m+i\hbar\varepsilon}. \tag{6.1.28}$$

因为这必须对所有的 $|n\rangle$ 都是对的，我们就有了 $|\psi^{(+)}\rangle$ 的表达式，即

$$\begin{aligned}|\psi^{(+)}\rangle&=|i\rangle+\sum_m|m\rangle\frac{\langle m|V|\psi^{(+)}\rangle}{E_i-E_m+i\hbar\varepsilon}\\&=|i\rangle+\sum_m\frac{1}{E_i-H_0+i\hbar\varepsilon}|m\rangle\langle m|V|\psi^{(+)}\rangle\end{aligned}$$

或

$$|\psi^{(+)}\rangle=|i\rangle+\frac{1}{E_i-H_0+i\hbar\varepsilon}V|\psi^{(+)}\rangle. \tag{6.1.29}$$

这就是所谓的**李普曼-施温格（Lippmann-Schwinger）方程**. 我们将马上通过观察在远距离处的 $\langle\mathbf{x}|\psi^{(+)}\rangle$ 讨论（+）的物理意义. 很清楚，$|\psi^{(+)}\rangle$ 态是非常重要的，它允许我们将 (6.1.22) 式重写为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\right)^2|\langle n|V|\psi^{(+)}\rangle|^2 \tag{6.1.30}$$

已经引入了 (6.1.10) 式定义的只不过是一些复数的矩阵元 T_{ni}. 然而，也可以通过让 $T|i\rangle=V|\psi^{(+)}\rangle$ 来定义一个算符 T，它的矩阵元为 $\langle n|T|i\rangle=T_{ni}$. 然后，用 V 从左边作用于 (6.1.29) 式，它导致了一个简洁的算符方程

$$T=V+V\frac{1}{E_i-H_0+i\hbar\varepsilon}T. \tag{6.1.31}$$

在散射势 V 是“微弱”的范围内，跃迁算符 T 的一个一级一级的近似方案为

$$T=V+V\frac{1}{E_i-H_0+i\hbar\varepsilon}V+V\frac{1}{E_i-H_0+i\hbar\varepsilon}V\frac{1}{E_i-H_0+i\hbar\varepsilon}V+\cdots. \tag{6.1.32}$$

我们将在 6.3 节返回这个近似方案.

从未来到过去的散射

我们也能把这个散射过程描绘为从遥远未来的一个平面波态 $|i\rangle$ 到久远过去的一个态 $|n\rangle$ 的时间逆向演化. 在这个情况下，把形式解 (6.1.6) 式写为

$$U_I(t,t_0)=1+\frac{i}{\hbar}\int_t^{t_0}V_I(t')U_I(t',t_0)dt', \tag{6.1.33}$$

它是一个适用于 $t_0\to+\infty$ 的形式. 之后，可通过使用反号的指数将积分正规化来定义 T 矩阵：

$$\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle=\delta_{ni}+\frac{i}{\hbar}T_{ni}\int_t^{t_0}e^{i\omega_{ni}t'-\varepsilon t'}dt'. \tag{6.1.34}$$

在这个情况下，T 算符用一个不同的态 $|\psi^{(-)}\rangle$ 的集合通过 $T|i\rangle=V|\psi^{(-)}\rangle$ 来定义. 现在准备研究散射问题实际的求解，并进一步了解不同的散射态 $|\psi^{(+)}\rangle$ 和 $|\psi^{(-)}\rangle$.

6.2　散射振幅

用 ϵ 替换李普曼-施温格方程中的 $h\epsilon$；这会是方便的，也没有任何困难，因为对 ϵ 的唯一约束是它是正的，且任意的小. 将继续预期对于弹性散射的应用，并且用 E 表示初态（和末态）能量. 因此，把（6.1.29）式重新写为

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |i\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} V |\psi^{(\pm)}\rangle. \tag{6.2.1}$$

现在通过左乘 $\langle \mathbf{x}|$ 和插入一组坐标基态的完备集，从而局限在坐标基. 这样

$$\langle \mathbf{x}|\psi^{(\pm)}\rangle = \langle \mathbf{x}|i\rangle + \int d^3x' \left\langle \mathbf{x}\left|\frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}\right|\mathbf{x}'\right\rangle \langle \mathbf{x}'|V|\psi^{(\pm)}\rangle. \tag{6.2.2}$$

这是一个关于散射的**积分方程**，因为未知的右矢 $|\psi^{(\pm)}\rangle$ 出现在积分号之下. 要向前推进，必须首先计算函数

$$G_{(\pm)}(\mathbf{x},\mathbf{x}') \equiv \frac{\hbar^2}{2m}\left\langle \mathbf{x}\left|\frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}\right|\mathbf{x}'\right\rangle. \tag{6.2.3}$$

因为 H_0 的本征态最容易在动量基上计算，可通过插入 $|\mathbf{k}\rangle$ 态的完备集来进行.（回顾在归一化方案中这些态是分立态.）然后，可写出

$$G_{\pm}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\mathbf{k}'}\sum_{\mathbf{k}''}\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}'\rangle \left\langle \mathbf{k}'\left|\frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}\right|\mathbf{k}''\right\rangle \langle \mathbf{k}''|\mathbf{x}'\rangle. \tag{6.2.4}$$

现在让 H_0 作用于 $\langle \mathbf{k}'|$，利用

$$\left\langle \mathbf{k}'\left|\frac{1}{E - (\hbar^2\mathbf{k}'^2/2m) \pm i\epsilon}\right|\mathbf{k}''\right\rangle = \frac{\delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}}{E - (\hbar^2\mathbf{k}'^2/2m) \pm i\epsilon} \tag{6.2.5}$$

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}'\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}}}{L^{3/2}} \tag{6.2.6}$$

和

$$\langle \mathbf{k}''|\mathbf{x}'\rangle = \frac{e^{-i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{x}'}}{L^{3/2}}, \tag{6.2.7}$$

并置 $E = \hbar^2k^2/2m$. 于是方程（6.2.3）就变成

$$G_{\pm}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \frac{1}{L^3}\sum_{k'}\frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}}{k^2 - k'^2 \pm i\epsilon}, \tag{6.2.8}$$

这里再次重新定义了 ϵ. 如果取 $L\to\infty$，并把求和转换成一个积分，这个求和实际上就最容易做. 因为 $k_i = 2\pi n_i/L$（$i = x, y, z$），积分测度变成 $d^3k' = (2\pi)^3/L^3$，因而有

$$\begin{aligned} G_{\pm}(\mathbf{x},\mathbf{x}') &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k' \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}}{k^2 - k'^2 \pm i\epsilon} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty} k'^2 dk' \int_{+1}^{-1} d\mu \frac{e^{ik'|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\mu}}{k^2 - k'^2 \pm i\epsilon} \\ &= \frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{i|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\int_{-\infty}^{\infty} k'dk' \left[\frac{e^{-ik'|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - e^{ik'|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{k^2 - k'^2 \pm i\epsilon}\right], \end{aligned} \tag{6.2.9}$$

可以看到被积函数是 k' 的偶函数. 这个最后的积分可使用复数回路积分法完成，* 它展示出 ϵ 和它的符号的重要性.

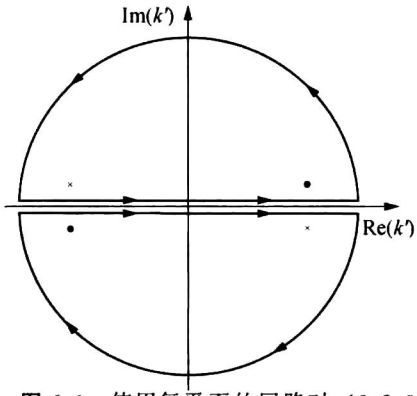


图 6.1 使用复平面的回路对（6.2.9）式中的两项求积分. 黑点（叉号）标记 $G_{\pm}(\mathbf{x},\mathbf{x}')$ 的+(−) 形式中两个极点的位置. 我们把（6.2.9）式中对一个实数值 k' 的积分替换成沿图中两条回路中一条回路的积分，并选取该条回路中其上大 $\mathrm{Im}(k')$ 处的半圆路径上因子 $e^{\pm ik'|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$ 趋于零. 这样，对回路积分的唯一贡献是沿着实轴的.

（6.2.9）式中的被积函数包含两项，每一项都在复 k' 平面上有一个极点. 也就是说，当 $k'^2=k^2\pm i\epsilon$，或 $k'=k\pm i\epsilon$ 和 $k'=-k\mp i\epsilon$ 时，括号中各项的分母变成零.（再次重新定义 ϵ，保持它的符号不变.）想象一个积分回路沿着 $\mathrm{Re}(k')$ 轴，然后用一条或在上半平面或在下半平面的半圆将其闭合. 见图 6.1.

对第一项，在下半平面闭合路径. 在这个情况下，沿半圆被积函数的贡献在 $\mathrm{Im}(k')\to-\infty$ 时，按 $e^{-ik'|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$ 的指数规律趋于零. 当 ϵ 前的符号是正（负）的，在下半平面闭合就把位于 $k'=-k-i\epsilon$（$k'=k-i\epsilon$）处的极点围了起来.（6.2.9）式中的积分正是 $2\pi i$ 乘以这个极点的留数，并带有一个整体的负号因为路径是沿顺时针方向的. 这就是说，在括号中第一项的积分变成

$$(-)2\pi i(\mp k)\frac{e^{-i(\mp k)|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{\mp 2k}=-\pi i e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}, \quad (6.2.10)$$

在那里已取 $\epsilon\to 0$. 第二项用同样的方法处理，除了这条路径是在上半平面闭合之外，结果表明它对积分的贡献与第一项的贡献相同. 因此，得到最终的结果，即

$$G_{\pm}(\mathbf{x},\mathbf{x}')=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}. \quad (6.2.11)$$

读者可能已经看出 $G_{\pm}$ 只不过是亥姆霍兹（Helmholtz）方程

$$(\nabla^2+k^2)G_{\pm}(\mathbf{x},\mathbf{x}')=\delta^{(3)}(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \quad (6.2.12)$$

的格林函数. 也就是说，对 $\mathbf{x}\neq\mathbf{x}'$，$G_{\pm}(\mathbf{x},\mathbf{x}')$ 是本征方程 $H_0G_{\pm}=EG_{\pm}$ 的解.

现在能用（6.2.11）式把（6.2.2）式重写成一个更明确的形式，即

$$\langle\mathbf{x}|\psi^{(\pm)}\rangle=\langle\mathbf{x}|i\rangle-\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x'\frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\langle\mathbf{x}'|V|\psi^{(\pm)}\rangle. \quad (6.2.13)$$

注意，散射体存在时的波函数 $\langle\mathbf{x}|\psi^{(\pm)}\rangle$ 可以写成入射波波函数 $\langle\mathbf{x}|i\rangle$ 和一个描述散射效应的项的和. 如同将明确看到的，倘若势是有限范围的，则在足够大的距离 r 处，第二项的空间依赖性为 $e^{\pm ikr}/r$. 这意味着正号的解（负号的解）对应着平面波加上一个出射（入射）球面波. 从顺（逆）时散射角度来讲，这是与该符号的来源保持一致的. 大部分物理问题对正号解感兴趣，因为很难制备一个系统，它满足对负号解合适的边界条件.

为了能更明确地看到 $\langle\mathbf{x}|\psi^{(\pm)}\rangle$ 的行为，考虑一个具体的情况，在那里 V 是一个定域势，即一个在 $\mathbf{x}$ 表象对角化的势. 只是坐标算符 $\mathbf{x}$ 函数的势就属于这一类. 精确地说，如果 V 能被写成

---

* 任何散射理论的研究都自然导致了使用复数积分的环境. 这个题目被包含在任何数学物理教科书中，例如，Arfken 和 Weber（1995）或 Byron 和 Fuller（1992）.

$$\langle \mathbf{x}'|V|\mathbf{x}''\rangle = V(\mathbf{x}')\delta^{(3)}(\mathbf{x}'-\mathbf{x}''), \tag{6.2.14}$$

则 V 被称为是**定域**的. 结果得到

$$\langle \mathbf{x}'|V|\psi^{(\pm)}\rangle = \int d^3x''\langle \mathbf{x}'|V|\mathbf{x}''\rangle\langle \mathbf{x}''|\psi^{(\pm)}\rangle = V(\mathbf{x}')\langle \mathbf{x}'|\psi^{(\pm)}\rangle. \tag{6.2.15}$$

现在积分方程 (6.2.13) 简化为

$$\langle \mathbf{x}|\psi^{(\pm)}\rangle = \langle \mathbf{x}|i\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}V(\mathbf{x}')\langle \mathbf{x}'|\psi^{(\pm)}\rangle. \tag{6.2.16}$$

让我们试着理解包含在这个方程中的物理. 矢量 $\mathbf{x}$ 被理解为指向要计算的波函数的观测点. 对一个有限力程势，给出非零贡献的范围在空间上是有限的. 在散射过程中，我们感兴趣的是，研究散射体（即有限力程势）在远远超出位势范围之外的一点的效应. 从一个实用的观点看，这是十分有价值的，因为我们无法把探测器放在距离散射中心很近的地方. 观测总是通过一个放置在远离散射体的 r 点的探测器完成的，而 r 远大于势的力程. 换句话说，像在图 6.2 中描绘的一样，我们能安全地取

$$|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'|. \tag{6.2.17}$$

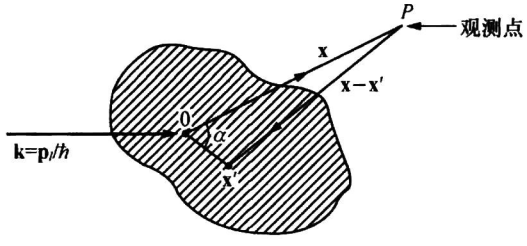


图 6.2　有限力程散射势. 观测点 P 处于要计算波函数 $\langle \mathbf{x}|\psi^{(\pm)}\rangle$ 的地方，而对于 (6.2.16) 式中积分有贡献的是小于力程的那些 $|\mathbf{x}'|$，它在图中用阴影部分描绘..

引入 $r=|\mathbf{x}|$，$r'=|\mathbf{x}'|$ 和 $\alpha=\angle(\mathbf{x},\mathbf{x}')$，对 $r\gg r'$，有

$$\begin{aligned}|\mathbf{x}-\mathbf{x}'| &= \sqrt{r^2-2rr'\cos\alpha+r'^2}\\ &= r\left(1-\frac{2r'}{r}\cos\alpha+\frac{r'^2}{r^2}\right)^{1/2}\\ &\approx r-\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{x}',\end{aligned} \tag{6.2.18}$$

其中

$$\hat{\mathbf{r}} \equiv \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|}, \tag{6.2.19}$$

在这个情况下，$\mathbf{k}'\equiv k\hat{\mathbf{r}}$. 于是，对大的 r，得到

$$e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \approx e^{\pm ikr}e^{\mp i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'}. \tag{6.2.20}$$

仅用 $1/r$ 替换 $1/|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|$ 也是合理的.

在这里，指定初态为自由粒子哈密顿量 H_0 的一个本征态，即 $|i\rangle = |\mathbf{k}\rangle$. 把这些都放在一起，最后有

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}|\psi^{(+)}\rangle &\xrightarrow{r\text{ 很大}} \langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle - \frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3x' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'}V(\mathbf{x}')\langle \mathbf{x}'|\psi^{(+)}\rangle\\ &= \frac{1}{L^{3/2}}\left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}+\frac{e^{ikr}}{r}f(\mathbf{k}',\mathbf{k})\right].\end{aligned} \tag{6.2.21}$$

这个形式非常清楚地表明：有在传播方向 $\mathbf{k}$ 上的原始平面波再加上一个出射的球面波，其

振幅 $f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ 由

$$f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \equiv -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}L^3\int d^3x'\,\frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'}}{L^{3/2}}V(\mathbf{x}')\langle\mathbf{x}'|\psi^{(+)}\rangle$$
$$= -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\langle\mathbf{k}'|V|\psi^{(+)}\rangle \tag{6.2.22}$$

给出. 从（6.2.16）式和（6.2.20）式能证明 $\langle\mathbf{x}|\psi^{(-)}\rangle$ 对应着在传播方向 $\mathbf{k}$ 上的原始平面波加上一个具有空间依赖性为 e^{-ikr}/r 和振幅为 $-(mL^3/2\pi\hbar^2)\langle-\mathbf{k}'|V|\psi^{(-)}\rangle$ 的入射球面波.

$f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ 称为**散射振幅**. 把（6.2.22）式与（6.1.30）式比较，看到微分截面能被写成

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}',\mathbf{k})|^2, \tag{6.2.23}$$

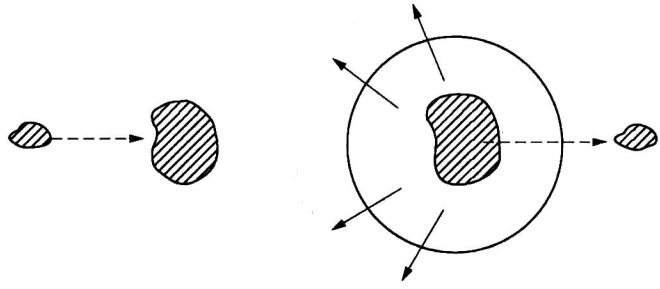


图 6.3 （a）开始时，入射波包接近散射中心.（b）入射波包继续沿原方向移动加上出射波球面波前（经过一段很长的时间）

波包的描述

在这里，读者可能想要知道，散射公式体系与被散射中心弹射的粒子的运动是否有关系. 我们已经使用的入射平面波不仅在空间而且在时间上是无限延伸的. 在一个更为实际的情况下，考虑一个接近散射中心的波包（一个困难的课题!）*. 经过很长的一段时间后，既有在原始方向移动的原始波包，也有一个向外移动的球面波前，如图 6.3 所示. 实际上，平面波的使用是令人满意的，只要波包的尺度远大于散射体的尺寸（或 V 的范围）.

光学定理

有一个基本和有用的关系，普遍地归因于波尔、派尔斯（Peierls）和普拉瑟泽克（Placzek）的贡献**，被称为**光学定理**. 它通过下式把向前散射振幅 $f(\theta=0)\equiv f(\mathbf{k},\mathbf{k})$ 的虚部与总截面 $\sigma_{总}\equiv\int d\Omega(d\sigma/d\Omega)$ 联系起来

$$\mathrm{Im}f(\theta=0) = \frac{k\sigma_{总}}{4\pi}. \tag{6.2.24}$$

---

* 一个更为详细的波包处理方法的介绍可参见 Goldberger 和 Watson（1964）专著中的第 3 章和 Newton（1966）专著中的第 6 章.

** 这个关系最初由 Eugene Feenberg, *Phys. Rev.* **40**（1932）40 给出. 其历史背景参见 R. G. Newton, *Am. J. Phys.* **44**（1976）639.

为证明这点，从$|i\rangle=|\mathbf{k}\rangle$的李普曼-施温格方程（6.2.1）出发，写出

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{k}|V|\psi^{(+)}\rangle&=\left[\langle\psi^{(-)}|-\langle\psi^{(+)}|V\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon}\right]V|\psi^{(+)}\rangle\\&=\langle\psi^{(+)}|V|\psi^{(+)}\rangle-\langle\psi^{(+)}|V\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon}V|\psi^{(+)}\rangle.\end{aligned}\tag{6.2.25}$$

比较（6.2.22）式和（6.2.24）式，可看到要在（6.2.25）式的两边取虚部．（6.2.25）式右边的第一项是一个实数，因为它是厄米算符的期待值．由于$\varepsilon\to0$时沿着实轴有奇点，寻找第二项的虚部较为困难．为此，使用从复变量积分的柯西主值概念借用来的一个技巧．

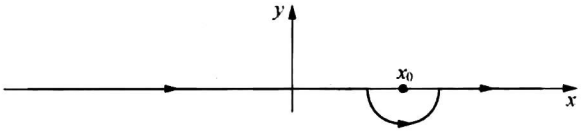


图 6.4　用于环绕位于$z_0=x_0+i\varepsilon$的奇点的积分回路

图 6.4 展示了一个复变量积分回路，它沿着实轴，除去跳过实轴附近的一个奇点的小半圆．这个奇点位于$z_0=x_0+i\varepsilon$，且$\varepsilon>0$，即总是在实轴之上．这样，我们把这个半圆的中心置于实轴上的x_0点，并以半径δ延伸到下半个复平面．这个半圆用$z-x_0=\delta e^{i\phi}$，而ϕ从$-\pi$到 0，来描写．

下一步考虑一个复函数$f(z)$，其中$z=x+iy$．我们能写出

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x-x_0}dx&=\int_{-\infty}^{x_0-\delta}\frac{f(x)}{x-x_0}dx+\int_c\frac{f(z)}{(z-z_0)}dz+\int_{x_0+\delta}^{+\infty}\frac{f(x)}{x-x_0}dx=0\\&=\mathcal{P}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x-x_0}dx+\int_c\frac{f(z)}{z-z_0}dz,\end{aligned}\tag{6.2.26}$$

其中c表示很小的环绕奇点半圆的回路．柯西主值定义为

$$\mathcal{P}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x-x_0}dx=\lim_{\delta\to0}\left\{\int_{-\infty}^{x_0-\delta}\frac{f(x)}{x-x_0}dx+\int_{x_0+\delta}^{+\infty}\frac{f(x)}{x-x_0}dx\right\}.\tag{6.2.27}$$

可算出（6.2.26）式中的第二项为

$$\begin{aligned}\int_c\frac{f(z)}{z-z_0}dz&=\int_{-\pi}^{0}\frac{f(x_0)}{\delta e^{i\phi}}(i\phi\delta e^{i\phi}d\phi)\\&\to i\pi f(x_0)\qquad\text{当}\quad\delta\to0.\end{aligned}\tag{6.2.28}$$

于是，（6.2.26）式重写为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x-x_0}dx=\mathcal{P}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x-x_0}dx+i\pi f(x_0).\tag{6.2.29}$$

现在可以回过头来求（6.2.25）式右边的虚部．有

$$\begin{aligned}\lim_{\varepsilon\to0}\left(\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon}\right)&=\lim_{\varepsilon\to0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\delta(E-E')}{E'-H_0-i\varepsilon}dE'\\&=i\pi\delta(E-H_0),\end{aligned}\tag{6.2.30}$$

其中使用了（6.2.29）式．因此，

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\langle\mathbf{k}|V|\psi^{(+)}\rangle&=-\pi\langle\psi^{(+)}|V\delta(E-H_0)V|\psi^{(+)}\rangle\\&=-\pi\langle\mathbf{k}|T^{\dagger}\delta(E-H_0)T|\mathbf{k}\rangle,\end{aligned}\tag{6.2.31}$$

记得其中的T是通过$T|\mathbf{k}\rangle=V|\psi^{(+)}\rangle$定义的．于是，使用（6.2.22）式，就有

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}f(\mathbf{k},\mathbf{k}) &= -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\mathrm{Im}\langle\mathbf{k}|V|\psi^{(+)}\rangle \\ &= \frac{mL^3}{2\hbar^2}\langle\mathbf{k}|T^{\dagger}\delta(E-H_0)T|\mathbf{k}\rangle \\ &= \frac{mL^3}{2\hbar^2}\sum_{\mathbf{k}'}\langle\mathbf{k}|T^{\dagger}\delta(E-H_0)|\mathbf{k}'\rangle\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle \\ &= \frac{mL^3}{2\hbar^2}\sum_{\mathbf{k}'}|\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle|^2\delta_{E,\hbar^2\mathbf{k}'^2/2m},\end{aligned} \tag{6.2.32}$$

其中 $E=\hbar^2k^2/2m$.

现在光学定理（6.2.24）式开始出现了. 因子$|\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle|^2$正比于微分截面（6.2.23）式. 包括$\delta$函数在内的求和是对所有使能量守恒的被散射的动量进行的；换句话说，它是对空间所有的方向进行的. 因此，（6.2.32）式的右边是一个微分截面对所有方向的积分，所以正比于总截面.

为把（6.2.32）式计算到底，使用$\langle\mathbf{k}'|\mathbf{T}|\mathbf{k}\rangle=\langle\mathbf{k}'|\mathbf{V}|\psi^{(+)}\rangle$和（6.2.22）式，把求和转换成积分，就像从（6.2.8）式到（6.2.9）式时所做的一样. 这就给出

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}f(\mathbf{k},\mathbf{k}) &= \frac{mL^3}{2\hbar^2}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mL^3}\right)^2\sum_{\mathbf{k}'}|f(\mathbf{k}',\mathbf{k})|^2\delta_{E,\hbar^2\mathbf{k}'^2/2m} \\ &\to \frac{2\pi^2\hbar^2}{m(2\pi)^3}\int d^3k'\,|f(\mathbf{k}',\mathbf{k})|^2\delta\left(E-\frac{\hbar^2\mathbf{k}'^2}{2m}\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4\pi m}\,\frac{1}{\hbar^2k/m}k^2\int d\Omega_{k'}\,\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} \\ &= \frac{k}{4\pi}\sigma_{\text{总}},\end{aligned} \tag{6.2.33}$$

这样，证明了（6.2.24）式.

6.5节将提供对于光学定理物理意义的一些见解.

6.3 玻恩近似

现在的任务是计算某些给定势函数$V(\mathbf{x})$的散射振幅$f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$. 这归结为计算矩阵元

$$\langle\mathbf{k}'|V|\psi^{(+)}\rangle=\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle. \tag{6.3.1}$$

然而，这项任务并不简单，因为对$\langle\mathbf{x}'|\psi^{(+)}\rangle$或者$T$都没有封闭的解析表达式. 因此，在这种情况下人们通常求助于近似.

（6.1.32）式中提到过一个有用的近似方案. 再次用ϵ替换$\hbar\epsilon$，就有

$$T=V+V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V+V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V+\cdots, \tag{6.3.2}$$

这是一个按V的幂次展开的展开式. 我们马上将考察把这个展开式截断应当适用的条件. 然而，首先使用这个方案，看它能把我们带到什么地方.

取展开式中的第一项，注意到$T=V$，或等价于$|\psi^{(+)}\rangle=|\mathbf{k}\rangle$，它被称为**一级玻恩近似**. 在这种情况下，把一个组态$|\mathbf{x}'\rangle$的完备集插入（6.2.22）式之后，散射振幅由$f^{(1)}$描述，此时

$$f^{(1)}(\mathbf{k}',\mathbf{k})=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x'e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}'}V(\mathbf{x}'). \tag{6.3.3}$$

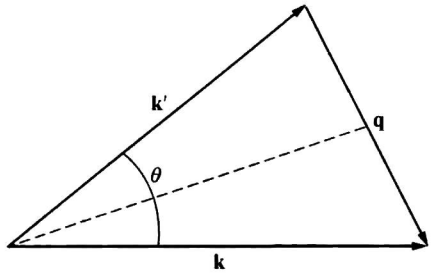


图 6.5　通过 θ 角的散射，其中 $\mathbf{q}=\mathbf{k}-\mathbf{k}'$

换句话说，除去一个整体的因子，一级振幅就是势 $\mathbf{k}'$对 $\mathbf{q}\equiv\mathbf{k}-\mathbf{k}'$的三维傅里叶变换.

一个重要的特例是 V 为一个球对称的势. 这意味着 $f^{(1)}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ 是 $q\equiv|\mathbf{q}|$的一个函数，它只与容易通过实验观测的运动学变量相关. 见图 6.5. 因为根据能量守恒$|\mathbf{k}'|=k$，有

$$q=|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|=2k\sin\frac{\theta}{2}. \tag{6.3.4}$$

可具体地进行 (6.3.3) 式的角度积分，得到

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\theta)&=-\frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{iq}\int_0^\infty\frac{r^2}{r}V(r)(e^{iqr}-e^{-iqr})dr \\ &=-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^\infty rV(r)\sin qr\,dr. \end{aligned} \tag{6.3.5}$$

一个简单但重要的例子是被一个有限深方势阱的散射，即，

$$V(r)=\begin{cases}V_0 & r\leqslant a\\ 0 & r>a.\end{cases} \tag{6.3.6}$$

(6.3.5) 式中的积分很容易完成并有

$$f^{(1)}(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{V_0a^3}{(qa)^2}\left[\frac{\sin qa}{qa}-\cos qa\right]. \tag{6.3.7}$$

这个函数在 $qa=4.49$，7.73，$10.9\cdots$处为零，并且这些零点的位置随同 (6.3.4) 式一起能被用来确定势阱的半径 a. 图 6.6 显示了质子在若干原子核上的弹性散射，所有这些原子核都是钙的同位素. 核势能相当好地用一个有限深方势阱近似，并且微分截面展示了 (6.3.7) 式预言的特征极小值. 此外，数据表明当把一些中子加入钙核时，极小值将出现在较小的角度，显示出核的半径实际上增大了.

另外一个重要的例子是被汤川 (Yukawa) 势

$$V(r)=\frac{V_0e^{-\mu r}}{\mu r}, \tag{6.3.8}$$

的散射，其中的 V_0 与 r 无关，且 $1/\mu$ 在某种意义上对应于势的范围. 注意在 $r\gg1/\mu$ 时，V 迅速地趋于零. 对这个势，由 (6.3.5) 式得到

$$f^{(1)}(\theta)=-\left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\right)\frac{1}{q^2+\mu^2}, \tag{6.3.9}$$

在这里注意，$\sin qr=\mathrm{Im}(e^{iqr})$，并且使用了

$$\mathrm{Im}\left[\int_0^\infty e^{-\mu r}e^{iqr}dr\right]=-\mathrm{Im}\left(\frac{1}{-\mu+iq}\right)=\frac{q}{\mu^2+q^2}. \tag{6.3.10}$$

还要注意

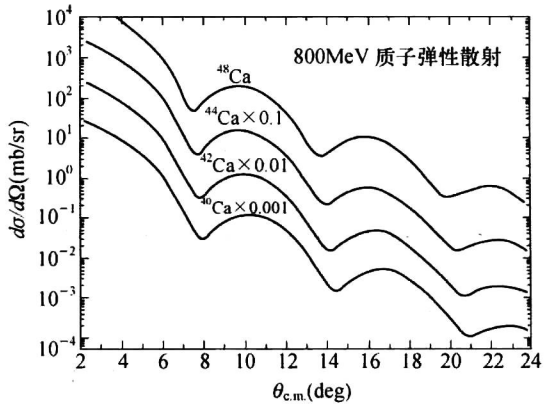


图 6.6 质子从四种不同的钙同位素的原子核弹性散射数据．截面极小处的角度随中子数的增加单调下降．因此，如同人们预期的，钙核的半径随更多的中子加入而加大．取自 L. Ray *et al.*，*Phys. Rev.* **C23**（1980）828.

$$q^2 = 4k^2\sin^2\frac{\theta}{2} = 2k^2(1-\cos\theta). \tag{6.3.11}$$

这样，在一级玻恩近似中，被汤川势散射的微分截面由

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \simeq \left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{[2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2]^2} \tag{6.3.12}$$

给出.

这里，有趣的是注意到，当 $\mu\to 0$ 时，倘若在趋于极限的过程中，V_0/μ 比是固定的值——例如 $ZZ'e^2$——则汤川势会约化成库仑势．我们看到以这种方法得到的一级玻恩微分截面变成

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \simeq \frac{(2m)^2(ZZ'e^2)^2}{\hbar^4}\frac{1}{16k^4\sin^4(\theta/2)}. \tag{6.3.13}$$

如果 $\hbar k$ 被认定为 $|\mathbf{p}|$，则甚至 $\hbar$ 也消失了，于是，

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \frac{1}{16}\left(\frac{ZZ'e^2}{E_{KE}}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \tag{6.3.14}$$

其中 $E_{KE}=|\mathbf{p}|^2/2m$．该式正是卢瑟福（Rutherford）散射截面，它能用经典方法得到.

回到（6.3.5）式，球对称势下的玻恩振幅，如果 $f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ 能用相应的一级玻恩振幅 $f^{(1)}$ 来近似，我们可做下面几点一般的评注：

1. $d\sigma/d\Omega$，或 $f(\theta)$，仅仅是 q 的函数，即 $f(\theta)$ 仅通过组合 $2k^2(1-\cos\theta)$ 依赖于能量 $\hbar^2k^2/2m$ 和 θ.

2. $f(\theta)$ 总是实的.

3. $d\sigma/d\Omega$ 与 V 的符号无关.

4. 对很小的 k（q 必然很小），

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int V(r)d^3x,$$

包含一个与 θ 无关的体积分.

5. 对大 q，由于被积函数快速地震荡，$f(\theta)$ 很小.

为研究玻恩近似应具备的有效条件，回到（6.2.16）式，并把它略做改动写为

$$\langle \mathbf{x}|\psi^{(+)}\rangle = \langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x' \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}V(\mathbf{x}')\langle \mathbf{x}'|\psi^{(+)}\rangle.$$

这个近似就是 $T\approx V$ 的近似，它意味着 $|\psi^{(+)}\rangle$ 能用 $|\mathbf{k}\rangle$ 替换. 因此，这个方程右边的第二项必须远小于第一项. 假设势能 $V(\mathbf{x})$ 的“典型”值是 V_0，并在某个“范围”a 内起作用. 记 $r'=|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|$ 并对积分做一个粗略的近似，可发现有效性条件变成

$$\left|\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{4\pi}{3}a^3\right)\frac{e^{ikr'}}{4\pi a}V_0\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}}{L^{3/2}}\right| \ll \left|\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{L^{3/2}}\right|.$$

现在在低能量情况下（$ka\ll 1$），指数因子可用 1 代替. 接着，假如忽略了量级为 1 的数值因子，就会出现下列的简洁判据

$$\frac{m|V_0|a^2}{\hbar^2} \ll 1. \tag{6.3.15}$$

考虑在（6.3.8）式中力程为 $a=1/\mu$ 的汤川势的特殊情况. 此时有效性判据变成 $\frac{m|V_0|}{\hbar^2\mu^2}\ll 1$. 这个要求可以与汤川势形成一个束缚态的条件相比较，后者我们可以证明是 $\frac{2m|V_0|}{\hbar^2\mu^2}\geqslant 2.7$，且 V_0 为负. 换句话说，如果势强到足以产生一个束缚态，玻恩近似可能会给出误导的结果.

在高能情况下（$ka\gg 1$）（原文此处有误，打印成 $ka\ll 1$. ——译者注），因子 $e^{ikr'}$ 和 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}$ 在积分的区域内强烈地振荡，所以它们不能取为 1. 相反，可证明

$$\frac{2m}{\hbar^2}\frac{|V_0|a}{k}\ln(ka) \ll 1. \tag{6.3.16}$$

当 k 变得较大时，这个不等式很容易被满足. 通常，能量越高则玻恩近似越好.

高阶的玻恩近似

现在使用（6.3.2）式把 T 写到 V 的第二级，即

$$T = V + V\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}V.$$

很自然地继续玻恩近似的做法，并写出

$$f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \approx f^{(1)}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) + f^{(2)}(\mathbf{k}',\mathbf{k}),$$

其中 $f^{(1)}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ 由（6.3.3）式给出，而

$$\begin{aligned} f^{(2)} &= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\int d^3x'\int d^3x''\langle \mathbf{k}'|\mathbf{x}'\rangle V(\mathbf{x}') \\ &\quad\times\left\langle \mathbf{x}'\left|\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}\right|\mathbf{x}''\right\rangle V(\mathbf{x}'')\langle \mathbf{x}''|\mathbf{k}\rangle \\ &= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x'\int d^3x'' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'}V(\mathbf{x}') \\ &\quad\times\left[\frac{2m}{\hbar^2}G_+(\mathbf{x}',\mathbf{x}'')\right]V(\mathbf{x}'')e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}''}. \end{aligned} \tag{6.3.17}$$

这个方案无疑可继续进行到更高阶.

图 6.7 中给出（6.3.17）式的一个物理解释，在图中入射波在 $\mathbf{x}''$ 处发生相互作用——它解释了 $V(\mathbf{x}'')$ 的出现——之后通过亥姆霍兹方程（6.2.12）的格林函数从 $\mathbf{x}''$ 处传播到 $\mathbf{x}'$ 处. 随后，在 $\mathbf{x}'$ 处发生第二次相互作用——这样 $V(\mathbf{x}')$ 出现了——最后入射波被散射到 $\mathbf{x}'$ 方向. 换句话说，$f^{(2)}$ 对应着一个被视为两步过程的散射. 同样，$f^{(3)}$ 能被视为一个三步

过程的散射，等等.

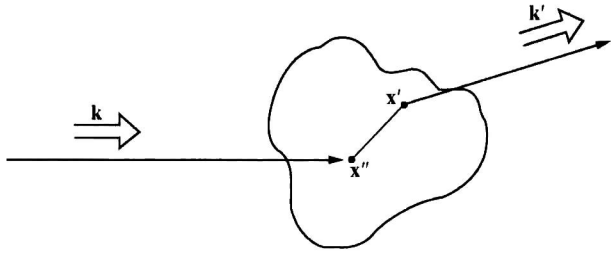


图 6.7 高阶玻恩项 $f^{(2)}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ 的物理解释

6.4 相移和分波

在用球对称势研究散射时，常常要考查具有确定角动量的态如何受到散射体影响. 这种研究导致了即将讨论的分波法. 然而在讨论散射态的角动量分解前，首先谈一谈自由粒子态，该态也是角动量本征态.

自由粒子态

对一个自由粒子，其哈密顿量正好是动能算符，它显然与动量算符对易. 然而我们知道，自由粒子的哈密顿量也与 $\mathbf{L}^2$ 和 L_z 对易. 这样，考虑一个 H_0，$\mathbf{L}^2$ 和 L_z 的共同本征右矢是可能的. 在忽略自旋的情况下，这样的一个态由 $|E,l,m\rangle$ 描述，并常被称为一个**球面波态**.

更普遍地，最一般的自由粒子态能被看成是具有不同 E，l，m 值的 $|E,l,m\rangle$ 态的叠加，它非常类似于最一般的自由粒子态能被看成是具有不同 $\mathbf{k}$ 值的，即在大小和方向上都不同的，$|\mathbf{k}\rangle$ 态的叠加. 换另一种方式来说，一个自由粒子态既可以使用平面波基$\{|\mathbf{k}\rangle\}$，也可使用球面波基 $\{|E,l,m\rangle\}$ 进行分析.

现在来推导把平面波基和球面波基联系起来的变换函数 $\langle\mathbf{k}|E,l,m\rangle$. 这个量可被看成是由 E，l 和 m 表征的球面波的动量空间波函数. 我们对球面波本征右矢采用如下的归一化约定：

$$\langle E',l',m'|E,l,m\rangle=\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta(E-E'). \tag{6.4.1}$$

与坐标空间波函数类似，我们可猜测角度的依赖关系：

$$\langle\mathbf{k}|E,l,m\rangle=g_{lE}(k)Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}), \tag{6.4.2}$$

其中函数 $g_{lE}(k)$ 将在后面考虑. 为严格证明这一点，如下进行. 首先，考虑动量本征右矢$|k\hat{\mathbf{z}}\rangle$，即一个平面波态，它的传播方向沿着正 z 轴. 这个态的一个重要性质是它没有 z 方向上的轨道角动量：

$$L_z|k\hat{\mathbf{z}}\rangle=(xp_y-yp_x)|k_x=0,k_y=0,k_z=k\rangle=0. \tag{6.4.3}$$

事实上，从经典考虑这似乎是有道理的. 角动量的分量在传播方向必须为零，因为 $\mathbf{L}\cdot\mathbf{p}=(\mathbf{x}\times\mathbf{p})\cdot\mathbf{p}=0$. 由于（6.4.3）式——并因为对 $m'\neq0$，$\langle E',l',m'|k\hat{\mathbf{z}}\rangle=0$——$|k\hat{\mathbf{z}}\rangle$ 一定能够展开如下

$$|k\hat{\mathbf{z}}\rangle=\sum_{l'}\int dE'|E',l',m'=0\rangle\langle E',l',m'=0|k\hat{\mathbf{z}}\rangle. \tag{6.4.4}$$

注意到不存在对 m' 的求和；m' 一直为零. 通过把适当的转动算符作用于 $|k\hat{\mathbf{z}}\rangle$，得到最普遍的动量本征右矢［见图 3.3 和（3.6.47）式］：

$$|\mathbf{k}\rangle = \mathcal{D}(\alpha=\phi,\beta=\theta,\gamma=0)|k\hat{\mathbf{z}}\rangle, \tag{6.4.5}$$

其中 $\mathbf{k}$ 的方向由 θ 和 ϕ 确定. 用 $\langle E,l,m|$ 左乘这个方程，可得到

$$\begin{aligned}\langle E,l,m|\mathbf{k}\rangle &= \sum_{l'}\int dE'\langle E,l,m|\mathcal{D}(\alpha=\phi,\beta=\theta,\gamma=0)|E',l',m'=0\rangle \\ &\quad\times\langle E',l',m'=0|k\hat{\mathbf{z}}\rangle \\ &= \sum_{l'}\int dE'\,\mathcal{D}^{(l')}_{m0}(\alpha=\phi,\beta=\theta,\gamma=0) \\ &\quad\times\delta_{ll'}\delta(E-E')\langle E',l',m'=0|k\hat{\mathbf{z}}\rangle \\ &= \mathcal{D}^{(l)}_{m0}(\alpha=\phi,\beta=\theta,\gamma=0)\langle E,l,m=0|k\hat{\mathbf{z}}\rangle.\end{aligned} \tag{6.4.6}$$

现在，$\langle E,l,m=0|k\hat{\mathbf{z}}\rangle$ 与 $\mathbf{k}$ 的方向无关，即不依赖于 θ 和 ϕ，把它记为 $\sqrt{\dfrac{2l+1}{4\pi}}g_{lE}(k)$ 这样，使用（3.6.51）式，就能写出

$$\langle\mathbf{k}|E,l,m\rangle = g_{lE}(k)Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}). \tag{6.4.7}$$

下面来确定 $g_{lE}(k)$. 首先，我们知道

$$(H_0-E)|E,l,m\rangle = 0. \tag{6.4.8}$$

但如下所示，让 H_0-E 作用到一个动量本征左矢 $\langle\mathbf{k}|$ 上

$$\langle\mathbf{k}|(H_0-E) = \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-E\right)\langle\mathbf{k}|. \tag{6.4.9}$$

用 $|E,l,m\rangle$ 右乘（6.4.9）式，得到

$$\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-E\right)\langle\mathbf{k}|E,l,m\rangle = 0. \tag{6.4.10}$$

这意味着仅当 $E=\hbar^2k^2/2m$ 时，$\langle\mathbf{k}|E,l,m\rangle$ 能有非零值，这样一定能够把 $g_{lE}(k)$ 写为

$$g_{lE}(k) = N\delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-E\right). \tag{6.4.11}$$

为确定 N，回到归一化约定（6.4.1）式. 得到

$$\begin{aligned}\langle E',l'm'|E,l,m\rangle &= \int d^3k''\langle E',l',m'|\mathbf{k}''\rangle\langle\mathbf{k}''|E,l,m\rangle \\ &= \int k''^2dk''\int d\Omega_{\mathbf{k}''}|N|^2\delta\left(\frac{\hbar^2k''^2}{2m}-E'\right) \\ &\quad\times\delta\left(\frac{\hbar^2k''^2}{2m}-E\right)Y_{l'}^{m'*}(\hat{\mathbf{k}}'')Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}'') \\ &= \int\frac{k''^2dE''}{dE''/dk''}\int d\Omega_{\mathbf{k}''}|N|^2\delta\left(\frac{\hbar^2k''^2}{2m}-E'\right)\delta\left(\frac{\hbar^2k''^2}{2m}-E\right) \\ &\quad\times Y_{l'}^{m'*}(\hat{\mathbf{k}}'')Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}'') \\ &= |N|^2\frac{mk'}{\hbar^2}\delta(E-E')\delta_{ll'}\delta_{mm'},\end{aligned} \tag{6.4.12}$$

其中，定义 $E''=\hbar^2k''^2/2m$ 以把 k'' 积分变成了 E'' 积分. 将它与（6.4.1）式比较，可以看到 $N=\hbar/\sqrt{mk}$ 将满足要求. 所以，最终写出

$$g_{lE}(k) = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-E\right); \tag{6.4.13}$$

因此

$$\langle \mathbf{k}|E,l,m\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-E\right)Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}). \tag{6.4.14}$$

由（6.4.14）式，我们推断平面波态$|\mathbf{k}\rangle$能被表示为具有所有可能l值的自由球面波态的叠加，特别是，

$$\begin{aligned}|\mathbf{k}\rangle &= \sum_l\sum_m\int dE\,|E,l,m\rangle\langle E,l,m|\mathbf{k}\rangle \\ &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}|E,l,m\rangle\Big|_{E=\hbar^2k^2/2m}\left(\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}})\right).\end{aligned} \tag{6.4.15}$$

因为平面波的横向尺度无限大，所以预期平面波一定包含所有可能的碰撞参数b的值.（半经典的情况下，碰撞参数为$b\simeq l\hbar/p$.）基于这个观点，当采用球面波态进行分析时，动量本征态$|\mathbf{k}\rangle$包含所有可能的l值就不奇怪了.

我们已经推导了$|E,l,m\rangle$态在动量空间的波函数. 下一步，考虑相应的坐标空间的波函数. 由波动力学，读者应该熟悉自由球面波的波函数是$j_l(kr)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})$，其中的$j_l(kr)$是$l$阶的球贝塞尔函数［参见（3.7.20a）式和附录B］. 尽管第二个解$n_l(kr)$满足合适的微分方程，但它是不可接受的，因为它在原点是奇异的. 这样，我们能写出

$$\langle \mathbf{x}|E,l,m\rangle = c_l j_l(kr)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}). \tag{6.4.16}$$

为确定c_l，我们所必须做的是比较

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}} &= \sum_l\sum_m\int dE\langle \mathbf{x}|E,l,m\rangle\langle E,l,m|\mathbf{k}\rangle \\ &= \sum_l\sum_m\int dE\,c_l j_l(kr)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\delta\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) \\ &= \sum_l\frac{(2l+1)}{4\pi}P_l(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{r}})\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}c_l j_l(kr),\end{aligned} \tag{6.4.17}$$

其中最后一步中使用了加法定理

$$\sum\nolimits_m Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) = [(2l+1)/4\pi]P_l(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{r}}).$$

现在$\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}/(2\pi)^{3/2}$还能写成

$$\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_l(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{r}}), \tag{6.4.18}$$

它能通过利用下面$j_l(kr)$的积分表示

$$j_l(kr) = \frac{1}{2i^l}\int_{-1}^{+1}e^{ikr\cos\theta}P_l(\cos\theta)d(\cos\theta) \tag{6.4.19}$$

得到证明. 比较（6.4.17）式和（6.4.18）式，有

$$c_l = \frac{i^l}{\hbar}\sqrt{\frac{2mk}{\pi}}. \tag{6.4.20}$$

概括起来，有

$$\langle \mathbf{k}|E,l,m\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\delta\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}) \tag{6.4.21a}$$

$$\langle \mathbf{x}|E,l,m\rangle = \frac{j_l}{\hbar}\sqrt{\frac{2mk}{\pi}}j_l(kr)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}). \tag{6.4.21b}$$

这些表达式在发展分波展开方法时是非常有用的.

通过把（6.4.21a）式应用于衰变过程来结束本节. 假设一个自旋为 j 的母粒子分裂成两个自旋为零的粒子：A（自旋 j）$\to B$（自旋 0）$+C$（自旋 0）. 一般说来，对这样的一个衰变过程负责的基本哈密顿量是非常复杂的. 然而，角动量确实是守恒的，因为这个基本的哈密顿量必须是转动不变的. 所以，末态的动量空间波函数必须是（6.4.21a）式的形式，其 l 值由母粒子的自旋确定. 这使得我们能够马上计算衰变产物的角分布，因为动量空间的波函数不外乎是找到衰变产物具有相对动量方向 $\mathbf{k}$ 的概率振幅.

作为一个来自于核物理的具体的例子，考虑一个激发的原子核，Ne^{20*} 的衰变：

$$Ne^{20*} \to O^{16} + He^{4}. \tag{6.4.22}$$

大家都知道 O^{16} 和 He^{4} 都是无自旋粒子. 假定母原子核相对于某方向 z 的磁量子数是 ± 1. 于是衰变产物的角分布正比于 $|Y_1^{\pm 1}(\theta,\phi)|^2 = (3/8\pi)\sin^2\theta$，这里 (θ,ϕ) 是定义衰变产物相对方向 $\mathbf{k}$ 的极角. 另一方面，如果一个自旋为 1 的母原子核的磁量子数是 0，衰变的角分布则按照 $|Y_1^0(\theta,\phi)|^2 = (3/4\pi)\cos^2\theta$ 变化.

对于一个一般的自旋取向，得到

$$\sum_{m=-l}^{1} w(m)|Y_{l=1}^{m}|^2. \tag{6.4.23}$$

对一个无极化的核，各种各样的 $w(m)$ 均相等，且得到一个各向同性的分布. 这并不令人吃惊，因为如果母粒子是无极化的，就不存在任何优先方向.

对一个高自旋的物体，衰变的角分布更为复杂；母粒子衰变系统的自旋越高，衰变产物的角分布就越复杂. 通常，通过衰变产物角分布的研究，就可能确定母原子核的自旋.

分波展开

现在回到 $V\neq 0$ 的情况. 假定势是球对称的，即是三维转动不变的. 于是，（6.3.2）式给出的跃迁算符 T 与 $\mathbf{L}^2$ 和 $\mathbf{L}$ 对易. 换句话说，T 是一个标量算符.

现在采用球面波基是有用的，因为将维格纳-埃卡特定理［见（3.11.38）］用于一个标量算符，可马上给出

$$\langle E',l',m'|T|E,l,m\rangle = T_l(E)\delta_{ll'}\delta_{mm'}. \tag{6.4.24}$$

换句话说，T 对 l 和 m 来说都是对角的；此外，（非零）对角元依赖于 E 和 l，而不依赖于 m. 就像马上就要看到的，这导致了极大的简化.

现在来看看散射振幅（6.2.22）：

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) &= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}L^3\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle \\ &\to -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\sum_l\sum_m\sum_{l'}\sum_{m'}\int dE\int dE'\langle\mathbf{k}'|E'l'm'\rangle \\ &\quad\times\langle E'l'm'|T|Elm\rangle\langle Elm|\mathbf{k}\rangle \\ &= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\frac{\hbar^2}{mk}\sum_l\sum_m T_l(E)\Big|_{E=\hbar^2k^2/2m}Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}')Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) \\ &= -\frac{4\pi^2}{k}\sum_l\sum_m T_l(E)\Big|_{E=\hbar^2k^2/2m}Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}')Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}). \end{aligned} \tag{6.4.25}$$

为得到散射振幅的角度依赖性，让我们这样选择坐标系，像往常一样，取 $\mathbf{k}$ 沿正 z 方向. 于是有［见（3.6.50）式］

$$Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m0}, \tag{6.4.26}$$

其中，用到了 $P_l(1)=1$，因此只有 $m=0$ 的项有贡献. 取 θ 为 $\mathbf{k}'$ 和 $\mathbf{k}$ 之间的夹角，可以写出

$$Y_l^0(\hat{\mathbf{k}}') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta). \tag{6.4.27}$$

这里，通常把**分波振幅** $f_l(k)$ 定义为

$$f_l(k) \equiv -\frac{\pi T_l(E)}{k}. \tag{6.4.28}$$

于是对（6.4.25）式，有

$$f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)f_l(k)P_l(\cos\theta), \tag{6.4.29}$$

这里 $f(\theta)$ 仍然依赖于 k（或者入射能量），尽管没有把 k 标出来.

为了解 $f_l(k)$ 的物理意义，研究由（6.2.21）式给出的波函数 $\langle\mathbf{x}|\psi^{(+)}\rangle$ 的大距离行为. 使用一个基于球面波［（6.4.18）式］展开的平面波和注意到（附录B）

$$j_l(kr) \xrightarrow{\text{大}\,r} \frac{e^{i(kr-(l\pi/2))} - e^{-i(kr-(l\pi/2))}}{2ikr}, (i^l = e^{i(\pi/2)l}) \tag{6.4.30}$$

及由（6.4.29）式给出的 $f(\theta)$，有

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{x}|\psi^{(+)}\rangle &\xrightarrow{\text{大}\,r} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]\\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[\sum_l(2l+1)P_l(\cos\theta)\left(\frac{e^{ikr}-e^{-i(kr-l\pi)}}{2ikr}\right)\right.\\ &\quad\left.+\sum_l(2l+1)f_l(k)P_l(\cos\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]\\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_l(2l+1)\frac{P_l}{2ik}\left[[1+2ikf_l(k)]\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r}\right].\end{aligned} \tag{6.4.31}$$

散射的物理现在清楚了. 当散射体不存在时，把平面波分解为一个按 e^{ikr}/r 行为的球面出射波和一个对每个 l 都按 $-e^{-i(kr-l\pi)}/r$ 行为的球面入射波的和. 散射体的出现仅使出射波系数有如下改变

$$1 \to 1+2ikf_l(k). \tag{6.4.32}$$

而入射波完全没有受到影响.

幺正性和相移

现在考察概率守恒，或者幺正性的后果. 在时间无关的公式中，概率流密度 $\mathbf{j}$ 必须满足

$$\nabla\cdot\mathbf{j} = -\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} = 0. \tag{6.4.33}$$

现在考虑一个半径非常大的球面. 由高斯定理，一定有

$$\int_{\text{球面}}\mathbf{j}\cdot d\mathbf{S} = 0. \tag{6.4.34}$$

从物理上看，（6.4.33）式和（6.4.34）式意味着没有粒子的源或漏. 出射流必须等于入射流. 此外，由于角动量守恒，每一个分波的流守恒都必须分别成立. 换句话说，e^{ikr}/r

系数的大小必须与 e^{-ikr}/r 系数的大小相同. 把 $S_l(k)$ 定义为

$$S_l(k) \equiv 1 + 2ikf_l(k), \tag{6.4.35}$$

这意味着 [从 (6.4.32) 式]

$$|S_l(k)| = 1; \tag{6.4.36}$$

即最可能发生的是出射波相位的改变. 方程 (6.4.36) 被称为第 l 分波的**幺正性关系**. 在更高级的散射处理中，$S_l(k)$ 可视为 S 算符的第 l 对角元，而作为概率守恒的结果 S 必须是幺正的.

这样，我们看到作为散射的结果，在大距离处波函数唯一的改变是出射波相位的改变. 把这个相位称为 $2\delta_l$ (这里因子 2 是约定)，能够写出

$$S_l = e^{2i\delta_l}, \tag{6.4.37}$$

其中 δ_l 是实的. 当然这里的 δ_l 是 k 的函数，尽管没有把 δ_l 明确地写成 $\delta_l(k)$. 回到 f_l，有 [从 (6.4.35) 式]

$$f_l = \frac{(S_l - 1)}{2ik} \tag{6.4.38}$$

或明确地采用 δ_l，

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k} = \frac{1}{k\cot\delta_l - ik}, \tag{6.4.39}$$

无论哪个都是方便的. 对全散射振幅，有

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_{l=0}(2l+1)\left(\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik}\right)P_l(\cos\theta) \\ &= \frac{1}{k}\sum_{l=0}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \end{aligned} \tag{6.4.40}$$

其中 δ_l 是实的. 这个 $f(\theta)$ 的表达式依赖于**旋转不变和概率守恒**两个原理. 在很多关于波动力学的书中，(6.4.40) 式是通过具体求解具有实的、球对称势的薛定谔方程得到的；对 (6.4.40) 式的推导可能令人感兴趣，因为它能被推广到在非相对论量子力学范畴内描述的势可能失效的情况.

只要取 (6.4.40) 式的模方就可得到微分截面 $d\sigma/d\Omega$. 为得到总截面，可进行如下操作

$$\begin{aligned} \sigma_{总} &= \int |f(\theta)|^2 d\Omega \\ &= \frac{1}{k^2}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) \\ &\quad \times e^{i\delta_l}\sin\delta_l e^{-i\delta_{l'}}\sin\delta_{l'} P_l P_{l'} \\ &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l. \end{aligned} \tag{6.4.41}$$

可以核对一下光学定理 (6.2.24)，它是早些时候使用一个更为普遍的论据得到的. 由 (6.4.40) 式，所需做的是指出

$$\begin{aligned} \mathrm{Im} f(\theta = 0) &= \sum_l \frac{(2l+1)\mathrm{Im}[e^{i\delta_l}\sin\delta_l]}{k} P_l(\cos\theta)\Big|_{\theta=0} \\ &= \sum_l \frac{(2l+1)}{k}\sin^2\delta_l, \end{aligned} \tag{6.4.42}$$

除去一个 $4\pi/k$ 的因子，它与 (6.4.41) 式是一样的.

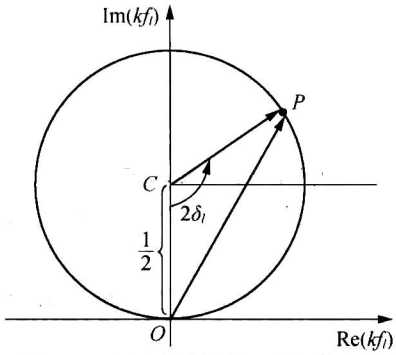


图 6.8 kf_l 的亚根图. OP 是 kf_l 的大小，CO 和 CP 均为单位圆上长度为 1/2 的半径；角 $OCP=2\delta_l$.

作为一个能量的函数，δ_l 是要变化的，因此，$f_l(k)$ 也要变化.（6.4.36）式的幺正性关系是对 f_l 所能变化方式的限制. 通过画出 kf_l 的亚根（Argand）图能很容易地看到这点. 在一个复平面上画 kf_l，如图 6.8 所示，如果从（6.4.39）式注意到

$$kf_l = \frac{i}{2} + \frac{1}{2}e^{-(i\pi/2)+2i\delta_l} \tag{6.4.43}$$

该图就是不言自明了. 注意存在一个半径为 1/2 的圆，称之为**幺正圆**，kf_l 一定处在这个圆上.

从图 6.8 能够看到很多重要的特性. 假如 δ_l 很小，于是 f_l 一定处于圆的底部附近. 它可能是正的或负的，但 f_l 几乎是纯实的：

$$f_l = \frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k} \simeq \frac{(1+i\delta_l)\delta_l}{k} \simeq \frac{\delta_l}{k} \tag{6.4.44}$$

另一方面，如果 δ_l 是在 $\pi/2$ 附近，kf_l 几乎是纯虚的，且 kf_l 的大小取极大值. 在这种条件下，l 分波可能是处于共振，这是一个将要在 6.7 节较为详细地讨论的概念. 注意当 $\sin^2\delta_l=1$ 时，可达到极大的分截面

$$\sigma_{\text{极大}}^{(l)} = 4\pi\lambda^2(2l+1) \tag{6.4.45}$$

[见（6.4.41）式].

相移的确定

现在来考虑对一个给定势 V 如何能实际地确定相移. 假定在 $r>R$ 时，V 为零，这里 R 是势的力程. 在外部（即 $r>R$），波函数一定是自由的球面波. 不管怎么样，这时没有理由排除 $n_l(r)$，因为原点被排除在我们的考虑之外. 因此，波函数是 $j_l(kr)P_l(\cos\theta)$ 和 $n_l(kr)P_l(\cos\theta)$ 的线性组合；或等价的，$h_l^{(1)}P_l$ 和 $h_l^{(2)}P_l$，其中 $h_l^{(1)}$ 和 $h_l^{(2)}$ 为球汉克尔（Hankel）函数，由

$$h_l^{(1)} = j_l + in_l, \quad h_l^{(2)} = j_l - in_l \tag{6.4.46}$$

定义，这些函数有如下渐近行为（参见附录 A）

$$h_l^{(1)} \xrightarrow{r\text{ 大}} \frac{e^{i(kr-(l\pi/2))}}{ikr}, \quad h_l^{(2)} \xrightarrow{r\text{ 大}} \frac{e^{-i(kr-(l\pi/2))}}{ikr}. \tag{6.4.47}$$

那时，在任意 r 处完全的波函数可写为

$$\langle \mathbf{x}|\psi^{(+)}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum i^l(2l+1)A_l(r)P_l(\cos\theta) \quad (r>R) \tag{6.4.48}$$

在 $r>R$ 处，有（对径向波函数）

$$A_l = c_l^{(1)}h_l^{(1)}(kr) + c_l^{(2)}h_l^{(2)}(kr), \tag{6.4.49}$$

其中（6.4.48）式中与 A_l 相乘的系数是这样选择的：在 $V=0$ 时，$A_l(r)$ 与 $j_l(kr)$ 处处一致.［见（6.4.18）式.］使用（6.4.47）式，就可将（6.4.48）式和（6.4.49）式给出的大 r 处波函数的行为与

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_l(2l+1)P_l\left[\frac{e^{2i\delta_l}e^{ikr}}{2ikr} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{2ikr}\right] \tag{6.4.50}$$

相比较. 显然，一定会有

$$c_l^{(1)} = \frac{1}{2}e^{2i\delta_l}, \quad c_l^{(2)} = \frac{1}{2}. \tag{6.4.51}$$

所以现在 $r>R$ 处的径向波函数可写为

$$A_l(r) = e^{i\delta_l}[\cos\delta_l j_l(kr) - \sin\delta_l n_l(kr)]. \tag{6.4.52}$$

用它就可计算在 $r=R$ 处（即刚刚在势的力程之外）的对数微商如下：

$$\begin{aligned}\beta_l &\equiv \left(\frac{r}{A_l}\frac{dA_l}{dr}\right)_{r=R} \\ &= kR\left[\frac{j_l'(kR)\cos\delta_l - n_l'(kR)\sin\delta_l}{j_l(kR)\cos\delta_l - n_l(kR)\sin\delta_l}\right],\end{aligned} \tag{6.4.53}$$

其中 $j_l'(kR)$ 是 j_l 对 kr 的导数在 $kr=kR$ 点的值. 相反地，知道了在 R 点的对数导数，就可得到如下的相移：

$$\tan\delta_l = \frac{kRj_l'(kR) - \beta_l j_l(kR)}{kRn_l'(kR) - \beta_l n_l(kR)}. \tag{6.4.54}$$

这样，确定相移的问题就约化成求 β_l 的问题.

现在来看一下薛定谔方程在 $r<R$ 处的解，即在势的力程之内. 对一个球对称的势，求解三维的薛定谔方程可化为求解等价的一维方程

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_l = 0, \tag{6.4.55}$$

其中

$$u_l = rA_l(r) \tag{6.4.56}$$

遵从边界条件

$$u_l|_{r=0} = 0 \tag{6.4.57}$$

从 $r=0$ 开始积分这个一维薛定谔方程——如果必要，可数值求积分——直到 $r=R$. 这样就得到了 R 点的对数微商. 通过连续性条件，一定能够在 $r=R$ 点使内部和外部的对数微商相匹配：

$$\beta_l|_{\text{内部解}} = \beta_l|_{\text{外部解}}, \tag{6.4.58}$$

其中，左边是通过积分薛定谔方程到 $r=R$ 得到，右边可用描绘波函数大距离行为的相移表示. 这意味着只要把内部解的 β_l 代入 $\tan\delta_l$[(6.4.54)] 就可得到相移. 一个可替换的处理方法是，可以推导一个 $A_l(r)$ 的积分方程，由该方程可得到相移（见本章习题6.9).

硬球散射

让我们来求解一个具体的例子. 考虑在一个硬球，或刚性球，

$$V = \begin{cases}\infty & \text{对} \quad r<R \\ 0 & \text{对} \quad r>R.\end{cases} \tag{6.4.59}$$

上的散射. 在这个问题中，甚至不需要计算 β_l（实际上它为∞). 我们所需要知道的一切就是波函数在 $r=R$ 处必须为零，因为这个球是不可穿透的. 因此，

$$A_l(r)|_{r=R} = 0 \tag{6.4.60}$$

或从 (6.4.52) 式，

$$j_l(kR)\cos\delta_l - n_l(kR)\sin\delta_l = 0 \tag{6.4.61}$$

或

$$\tan\delta_l = \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)}. \tag{6.4.62}$$

这样，任意 l 的相移就知道了. 注意，到现在为止，还没有做任何近似.

为理解相移的物理意义，让具体考虑 $l=0$ 的情形（S 波散射）. 对 $l=0$，方程（6.4.62）变成

$$\tan\delta_0 = \frac{\sin kR/kR}{-\cos kR/kR} = -\tan kR, \tag{6.4.63}$$

或 $\delta_0=-kR$. 忽略掉 $e^{i\delta_0}$ 的径向波函数（6.4.52）式按

$$A_{l=0}(r) \propto \frac{\sin kr}{kr}\cos\delta_0 + \frac{\cos kr}{kr}\sin\delta_0 = \frac{1}{kr}\sin(kr+\delta_0) \tag{6.4.64}$$

变化. 因此，如果画出作为距离 r 的函数的 $rA_{l=0}(r)$，我们就得到一个正弦波，与自由正弦波相比它被平移了大小为 R 的量，见图 6.9.

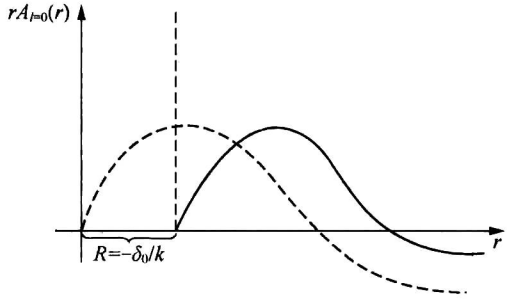


图 6.9 $rA_{l=0}(r)$ 对 r 的图（因子 $e^{i\delta_0}$ 被去掉了）. $V=0$ 时的虚线行为如同 $\sin kr$. 实线是 S 波硬球散射的结果，与 $V=0$ 时的情况比较，它被平移了 $R=-\delta_0/k$.

现在研究 $\tan\delta_l$ 的低能和高能极限. 低能的意思是 kR 很小，$kR\ll 1$. 那么，能够利用*

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\simeq \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} \\ n_l(kr) &\simeq -\frac{(2l-1)!!}{(kr)^{l+1}} \end{aligned} \tag{6.4.65}$$

求得

$$\tan\delta_l = \frac{-(kR)^{2l+1}}{\{(2l+1)[(2l-1)!!]^2\}}. \tag{6.4.66}$$

因此，忽略 $l\neq 0$ 时的 δ_l 是可以的. 换句话说，只要 S 波散射，实际上可预期对几乎任意有限力程势在低能时都是这样的. 因为不管 k 是大还是小都有 $\delta_0=-kR$，得到

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sin^2\delta_0}{k^2} \simeq R^2 \quad \text{对 } kR \ll 1. \tag{6.4.67}$$

有趣的是，由

$$\sigma_{总} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = 4\pi R^2 \tag{6.4.68}$$

给出的总截面是几何截面 πR^2 的 4 倍. 几何截面的意思是指半径为 R 的圆盘的面积，该圆盘挡住了平面波的传播（并且具有与硬球相同的的截面面积）. 当然，低能散射意思是一个很长的波长的散射，不必期待结果是经典合理的. 在下一节讨论程函近似时，将考虑在

---

* 注意 $(2n+1)!! \equiv (2n+1)(2n-1)(2n-3)\cdots 1$.

高能极限下发生了什么.

6.5　程函近似

这个近似将涵盖一种情况，在那里 $V(\mathbf{x})$ 在波长 λ（此处原文有明显打印错误，现已订正. ——译者注）（可被视为“小”量）的量级的跨度上只有微小的变化. 注意，只要 $E\gg|V|$，V 自身不必很弱；因此在这里有效性的范畴与玻恩近似不同. 在这些条件下，半经典的路径概念成为可用的，因而我们用半经典波函数［见（2.4.18）式和（2.4.22）式］替换精确的波函数 $\psi^{(+)}$，即，

$$\psi^{(+)}\sim e^{iS(\mathbf{x})/\hbar}. \tag{6.5.1}$$

这导致了 2.4 节曾讨论的 S 的哈密顿-雅可比方程

$$\frac{(\nabla S)^2}{2m}+V=E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}. \tag{6.5.2}$$

通过取经典轨迹为一条直线路径的进一步近似，我们建议用（6.5.2）式计算 S，这样做对高能时的微小偏离应该是满意的*. 考虑在图 6.10 中描绘的情况，在那里直线轨迹沿着 z 方向. 积分（6.5.2）式，有

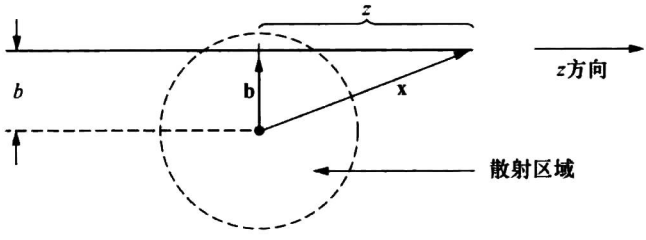


图 6.10　程函近似散射的示意图，其中经典直线轨迹沿着 z 方向，$|\mathbf{x}|=r$，而 $b=|\mathbf{b}|$ 是碰撞参数

$$\frac{S}{\hbar}=\int_{-\infty}^{z}\left[k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V\left(\sqrt{b^2+z'^2}\right)\right]^{1/2}dz'+\text{常数}. \tag{6.5.3}$$

附加的常数是依照

$$\frac{S}{\hbar}\to kz\quad\text{当 }V\to 0 \tag{6.5.4}$$

来选择，使得（6.5.1）式的平面波在零势能的极限下能被重新产生. 然后，能把方程（6.5.3）写成

$$\begin{aligned}\frac{S}{\hbar}&=kz+\int_{-\infty}^{z}\left[\sqrt{k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V\left(\sqrt{b^2+z'^2}\right)}-k\right]dz'\\&\cong kz-\frac{m}{\hbar^2k}\int_{-\infty}^{z}V\left(\sqrt{b^2+z'^2}\right)dz'.\end{aligned} \tag{6.5.5}$$

其中对 $E\gg V$ 的情况，在高的能量 $E=\hbar^2k^2/2m$ 时，用到了

$$\sqrt{k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V\left(\sqrt{b^2+z'^2}\right)}\sim k-\frac{mV}{\hbar^2k}.$$

---

* 不用说，求解（6.5.2）以确定经典轨迹，一般说来，将是一个可怕的任务.

所以

$$\psi^{(+)}(\mathbf{x}) = \psi^{(+)}(\mathbf{b}+z\hat{\mathbf{z}}) \simeq \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikz} \exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} V\left(\sqrt{b^2+z'^2}\right)dz'\right]. \quad (6.5.6)$$

尽管（6.5.6）式不具有对入射波加上出射球面波系统合适的正确渐近形式（即，它不是 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}+f(\theta)(e^{ikr}/r)$ 的形式，并且的确仅仅涉及沿初始方向的运动），不过它还是被用于（6.2.22）式求得 $f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ 的一个近似表达式，这就是说*

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} V\left(\sqrt{b^2+z'^2}\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'} \\ \times \exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z'} V\left(\sqrt{b^2+z''^2}\right)dz''\right]. \end{aligned} \quad (6.5.7)$$

注意，没有最后面的 exp［…］因子，（6.5.7）式就像（6.3.3）式中的一级玻恩振幅一样. 通过引入柱坐标 $d^3x' = b\,db\,d\phi_b\,dz'$（见图 6.10）对（6.5.7）式进行三维（$d^3x'$）积分，并注意到

$$(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}' = (\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{b}+z'\hat{\mathbf{z}}) \simeq -\mathbf{k}'\cdot\mathbf{b}, \quad (6.5.8)$$

其中使用了 $\mathbf{k}\perp\mathbf{b}$ 和 $(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\hat{\mathbf{z}}\sim O(\theta^2)$，对微小偏离 θ 后者可以被忽略. 不失一般性，可选择散射发生在 xz 平面，并写出

$$\mathbf{k}'\cdot\mathbf{b} = (k\sin\theta\,\hat{\mathbf{x}} + k\cos\theta\,\hat{\mathbf{z}})\cdot(b\cos\phi_b\hat{\mathbf{x}} + b\sin\phi_b\hat{\mathbf{y}}) \simeq kb\theta\cos\phi_b. \quad (6.5.9)$$

这样 $f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ 的表达式就变成

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty b\,db\int_0^{2\pi} d\phi_b e^{-ikb\theta\cos\phi_b} \\ \times\int_{-\infty}^{+\infty} dz V \exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} V\,dz'\right]. \end{aligned} \quad (6.5.10)$$

接着，使用下面的等式

$$\int_0^{2\pi} d\phi_b e^{-ikb\theta\cos\phi_b} = 2\pi J_0(kb\theta) \quad (6.5.11)$$

和

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz V \exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} V\,dz'\right] = \frac{i\hbar^2 k}{m}\exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} V\,dz'\right]\Bigg|_{z=-\infty}^{z=+\infty}. \quad (6.5.12)$$

当然，（6.5.12）式右边的表达式在 $z=-\infty$ 时的贡献按指数趋向于零. 所以最后

$$f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -ik\int_0^\infty dbbJ_0(kb\theta)[e^{2i\Delta(b)}-1], \quad (6.5.13)$$

其中

$$\Delta(b) \equiv \frac{-m}{2k\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty} V\left(\sqrt{b^2+z^2}\right)dz. \quad (6.5.14)$$

在（6.5.14）式中，固定碰撞参数 b 并沿图 6.10 中的直线路径 z 积分. 如果 b 大于 V 的力程，（6.5.13）式中的 $[e^{2i\Delta(b)}-1]$ 没有贡献.

可用一个直接的方式证明，程函近似满足光学定理（6.2.24）. 这个证明加上某些有趣的应用，例如，当 V 是一个高斯型势时，$\Delta(b)$ 就变成 b 空间的高斯型函数，已在文献（Gottfried 1966）中讨论过. 对 V 是汤川型位势的情况，见本章习题 6.8.

---

* 假定连续归一化，可扔掉“大盒子”写出 $f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$

分波和程函近似

程函近似在高能（$\lambda \ll$ 力程 R）时是适用的，因此很多分波会有贡献. 我们可把 l 看成是一个连续变量. 顺便提一句，我们注意到半经典的说法 $l=bk$（因为 $l\hbar=bp$ 是角动量，其中 b 是碰撞参数，$p=\hbar k$ 是动量）. 取

$$l_{\text{极大}} = kR; \tag{6.5.15}$$

然后，在（6.4.40）式的表达式中做如下替换：

$$\begin{aligned} &\sum_{l}^{l_{\text{极大}}=kR} \to k\int db, \quad P_l(\cos\theta) \overset{\substack{\text{大}l\\ \text{小}\theta}}{\simeq} J_0(l\theta) = J_0(kb\theta), \\ &\delta_l \to \Delta(b)|_{b=l/k}, \end{aligned} \tag{6.5.16}$$

其中 $l_{\text{极大}}=kR$ 意味着

$$e^{2i\delta_l} - 1 = e^{2i\Delta(b)} - 1 = 0 \quad \text{当 } l > l_{\text{极大}} \tag{6.5.17}$$

有

$$\begin{aligned} f(\theta) &\to k\int db\, \frac{2kb}{2ik}(e^{2i\Delta(b)} - 1)J_0(kb\theta) \\ &= -ik\int dbbJ_0(kb\theta)[e^{2i\Delta(b)} - 1]. \end{aligned} \tag{6.5.18}$$

使用（6.5.14）式中的 $\Delta(b)$ 的显示式，能够完成 δ_l 的计算（见本章习题 6.8）.

现在回想上一节对分波的讨论和“硬球”的例子. 在那里，我们发现在低能（长波长）极限下，总截面是几何截面的 4 倍. 然而，人们或许会猜测对于高能散射的截面，预期为几何截面是合理的，因为高能区的情形或许看上去与半经典的情形很相似.

在高能区，很多 l 值会有贡献，直到 $l_{\text{极大}} \simeq kR$，这是一个合理的假设. 因此总截面由

$$\sigma_{\text{总}} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{l\simeq kR}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{6.5.19}$$

给出. 但使用（6.4.62）式，有

$$\sin^2\delta_l = \frac{\tan^2\delta_l}{1+\tan^2\delta_l} = \frac{[j_l(kR)]^2}{[j_l(kR)]^2[n_l(kR)]^2} \simeq \sin^2\left(kR - \frac{\pi l}{2}\right). \tag{6.5.20}$$

其中，用到了

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\sim \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \\ n_l(kr) &\sim -\frac{1}{kr}\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \end{aligned} \tag{6.5.21}$$

我们看到 l 每增加一个单位，δ_l 就减小 90°. 这样，对相邻的一对分波，$\sin^2\delta_l + \sin^2\delta_{l+1} = \sin^2\delta_l + \sin^2(\delta_l - \pi/2) = \sin^2\delta_l + \cos^2\delta_l = 1$，并且随着这么多 l 值贡献到（6.5.19）式，用 $\sin^2\delta_l$ 的平均值 $\frac{1}{2}$ 替换它是合理的. 在 l 求和中的项数大致上是 kR，它与 $2l+1$ 的平均值是一样的. 把所有的因素放在一起，（6.5.19）式变成

$$\sigma_{\text{总}} = \frac{4\pi}{k^2}(kR)^2\,\frac{1}{2} = 2\pi R^2, \tag{6.5.22}$$

它也不是几何截面 πR^2！为看到因子 2 的来源，把（6.4.40）式分成两个部分：

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1)e^{2i\delta_l}P_l(\cos\theta)+\frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1)P_l(\cos\theta)$$
$$=f_{\text{反射}}+f_{\text{阴影}}, \tag{6.5.23}$$

在计算 $\int|f_{\text{反射}}|^2d\Omega$ 时，$P_l(\cos\theta)$ 的正交性保证了不同 l 项的贡献之间没有任何相干，于是得到了分波贡献平方之和：

$$\int|f_{\text{反射}}|^2d\Omega=\frac{2\pi}{4k^2}\sum_{l=0}^{l_{\text{极大}}}\int_{-1}^{+1}(2l+1)^2[P_l(\cos\theta)]^2d(\cos\theta)=\frac{\pi l_{\text{极大}}^2}{k^2}=\pi R^2. \tag{6.5.24}$$

把注意力转到 $f_{\text{阴影}}$，我们看到它是纯虚的. 因为在 $\theta=0$ 时 $P_l(\cos\theta)=1$，它在向前方向特别的强，并且来自各个 l 值的贡献都是相干地相加的，即在我们的例子中它们有相同的位相，且是纯虚的和正的. 对 P_l 使用小角度近似，可得

$$f_{\text{阴影}}\simeq\frac{i}{2k}\sum(2l+1)J_0(l\theta)$$
$$\simeq ik\int_0^R bdbJ_0(kb\theta) \tag{6.5.25}$$
$$=\frac{iRJ_1(kR\theta)}{\theta}.$$

而这正是光学中的夫琅和费（Fraunhofer）衍射公式，在 $\theta\simeq0$ 附近有一个很强的峰. 令 $\xi=kR\theta$，则 $d\xi/\xi=d\theta/\theta$，可算出

$$\int|f_{\text{阴影}}|^2d\Omega=2\pi\int_{-1}^{+1}\frac{R^2[J_1(kR\theta)]^2}{\theta^2}d(\cos\theta)$$
$$\simeq 2\pi R^2\int_0^{\infty}\frac{[J_1(\xi)]^2}{\xi}d\xi$$
$$\simeq\pi R^2. \tag{6.5.26}$$

最后，$f_{\text{阴影}}$ 和 $f_{\text{反射}}$ 间的干涉项为零：

$$\text{Re}(f_{\text{阴影}}^*f_{\text{反射}})\simeq0 \tag{6.5.27}$$

因为 $f_{\text{反射}}$ 的位相是振荡的（$2\delta_{l+1}=2\delta_l-\pi$），平均起来近似为零，与此同时，$f_{\text{阴影}}$ 是纯虚的. 这样

$$\sigma_{\text{总}}=\underset{\uparrow}{\pi R^2}+\underset{\uparrow}{\pi R^2}$$
$$\sigma_{\text{反射}}\quad\sigma_{\text{阴影}} \tag{6.5.28}$$

第二项（在向前方向的相干贡献）被称为阴影（shadow），因为对高能硬球散射，小于 R 的碰撞参数的波一定被反射掉. 所以，正好在散射体后面找到粒子的概率一定为零，于是一定会产生阴影. 按波动力学的话说，这个阴影是由于初始波（即使散射体不存在时它也在那儿）和新散射波间的相消干涉. 这样，为产生一个阴影，我们需要散射. 从（6.4.31）式回想起，对第 l 分波 $e^{ikr}/2ikr$ 的系数按 $1+2ikf_l(k)$ 变化，在那里即使没有散射体，1 也应该出现，通过它有可能看到阴影的振幅必须是纯虚的，因此在 f_l 中必须存在一个正虚项去抵消它. 事实上，这就给出了光学定理的物理解释，它能被明确地检验. 首先注意

$$\frac{4\pi}{k}\text{Im}f(0)\simeq\frac{4\pi}{k}\text{Im}[f_{\text{阴影}}(0)] \tag{6.5.29}$$

因为由于振荡的相位，$\text{Im}[f_{\text{反射}}(0)]$ 平均为零. 使用（6.5.23）式，得到

$$\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f_{\text{阴影}}(0)=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\left[\frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1)P_l(1)\right]=2\pi R^2, \tag{6.5.30}$$

它确实等于 $\sigma_{\text{总}}$.

6.6　低能散射和束缚态

在低能区——或更精确地说，当 $\lambda=1/k$ 与力程 R 可比或更大——更高 l 的分波，一般来说是不重要的. 这点从经典上说可能是显然的，因为粒子不能穿透中心势垒，结果里面的势没有影响. 按照量子力学，对第 l 分波的有效势由

$$V_{\text{有效}}=V(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} \tag{6.6.1}$$

给出. 除非势是强到足够容纳 $E\simeq 0$ 附近的 $l\neq 0$ 的束缚态，径向波函数的行为在很大程度上是由中心势垒项决定的，这意味着它必须看起来像 $j_l(kr)$. 更为定量地说，可使用下列的分波积分方程估算相移的行为（见本章的习题 6.9）：

$$\frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k}=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{\infty}j_l(kr)V(r)A_l(r)r^2dr. \tag{6.6.2}$$

如果 $A_l(r)$ 与 $j_l(kr)$ 相差不太大并且 $1/k$ 远大于势的力程，则上式的右边按 k^{2l} 变化；对较小的 δ_l，上式的左边一定按照 δ_l/k 变化. 因此，当 k 很小时，相移 δ_l（译者注：原文为 k，显然有误.）按照

$$\delta_l\sim k^{2l+1} \tag{6.6.3}$$

的规律趋于零. 这就是所谓的**阈行为**.

因此很清楚，在具有有限力程势的低能区，S 波散射是重要的.

方势阱或势垒

具体地说，用

$$V=\begin{cases}V_0=\text{常数} & \text{对 } r<R \\ 0 & \text{否则}\end{cases}\qquad\begin{cases}V_0>0 & \text{排斥} \\ V_0<0 & \text{吸引}\end{cases} \tag{6.6.4}$$

来考虑 S 波散射.

在这里得到的很多特性是在更为复杂的有限力程势的情况中共有的. 已经看到外部波函数［见（6.4.52）和（6.4.64）式］的行为一定像

$$e^{i\delta_0}[j_0(kr)\cos\delta_0-n_0(kr)\sin\delta_0]\simeq\frac{e^{i\delta_0}\sin(kr+\delta_0)}{kr}. \tag{6.6.5}$$

当 V_0 为常数，内部解也很容易得到：

$$u\equiv rA_{l=0}(r)\propto\sin k'r, \tag{6.6.6}$$

其中 k' 由

$$E-V_0=\frac{\hbar^2k'^2}{2m} \tag{6.6.7}$$

确定，其中使用了边界条件：在 $r=0$ 处，$u=0$. 换句话说，只要 $E>V_0$，内部波函数也是正弦曲线. 正弦波的曲率与自由粒子情况中的曲率不同；结果，波函数是被推进去（$\delta_0>0$）还是被拉出来（$\delta_0<0$）取决于 $V_0<0$（吸引力）还是 $V_0>0$（排斥力），见图

6.11. 还要注意到，即使 $V_0>E$，(6.6.6) 式和 (6.6.7) 式仍成立，倘若把 sin 理解为意味着 sinh（双曲正弦），即波函数的行为如同

$$u(r)\propto \sinh[\kappa r], \tag{6.6.6'}$$

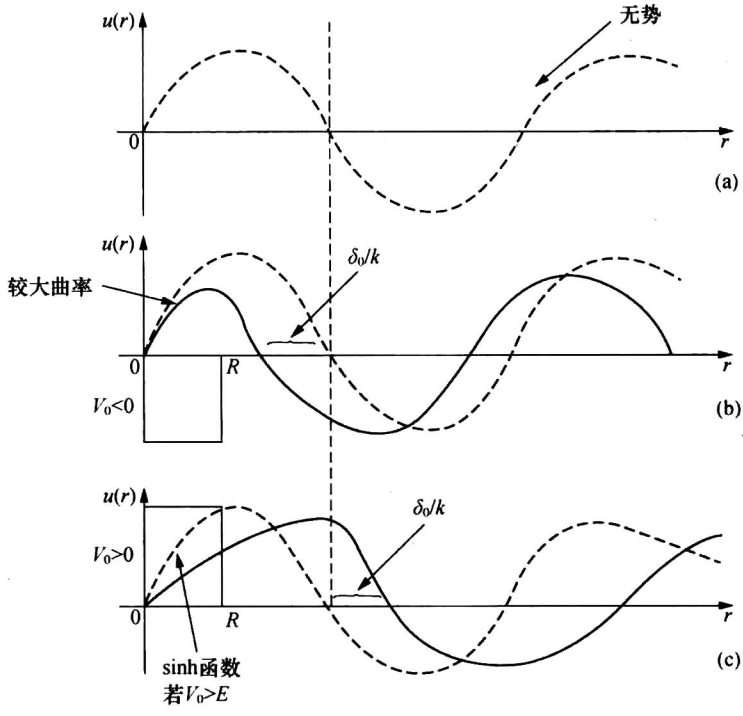


图 6.11 $u(r)$ 随 r 变化的曲线．(a) 对于 $V=0$（虚线）．(b) 对 $V_0<0$，$\delta_0>0$，此时波函数（实线）被推进去．(c) 对 $V_0>0$，$\delta_0<0$，此时波函数（实线）被拉出来．

其中

$$\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}=(V_0-E). \tag{6.6.7'}$$

现在将精力集中于吸引的情况，并想象 V_0 的大小增大了．加大的吸引将造成一个较大曲率的波函数．假设吸引力使得间隔 $[0,R]$ 正好可容纳四分之一周期的正弦波．引进低能极限 $kR\ll 1$，此时相移是 $\delta_0=\pi/2$，对一个给定 k，它导致了一个极大的 S 波截面，因为 $\sin^2\delta_0$ 是 1．现在进一步加深阱的深度 V_0．最终，吸引强到使半个周期的正弦波被容纳在势的力程之内．此时的相移 δ_0 是 π，换句话说，R 之外的波函数与自由粒子的波函数相比有 180°的反位相．引人注目的是尽管势的吸引非常强，而分波截面却为零（$\sin^2\delta_0=0$），

$$\sigma_{l=0}=0. \tag{6.6.8}$$

此外，如果能量低到 $l\neq 0$ 的分波仍然是不重要的，则就有一个几乎完美的入射波的穿透．这种情况，称之为**冉绍尔-汤森（Ramsauer-Townsend）效应**，事实上已通过电子被诸如氩、氪和氙等稀有气体的散射实验观测到了．这种效应被首次观测到是在 1923 年波动力学诞生之前，并被看作为一个极大的奥秘．注意，对量级为 0.1eV 的电子动能，这里的典型参数为 $R\sim 2\times 10^{-8}$cm，它导致了 $kR\sim 0.324$．

零能散射和束缚态

让我们考虑在极端低能（$k\simeq 0$）情况下的散射. 对 $r>R$ 和 $l=0$，外部径向波函数满足

$$\frac{d^2u}{dr^2}=0. \tag{6.6.9}$$

这个方程显而易见的解是

$$u(r)=\text{常数}(r-a), \tag{6.6.10}$$

它正是一条直线！它能被理解成：通常的外部波函数表达式在无穷大波长时的极限［见（6.4.56）和（6.4.64）式］

$$\lim_{k\to 0}\sin(kr+\delta_0)=\lim_{k\to 0}\sin\left[k\left(r+\frac{\delta_0}{k}\right)\right], \tag{6.6.11}$$

它看起来很像（6.6.10）式. 有

$$\frac{u'}{u}=k\cot\left[k\left(r+\frac{\delta_0}{k}\right)\right]\xrightarrow{k\to 0}\frac{1}{r-a}. \tag{6.6.12}$$

令 $r=0$［尽管在 $r=0$ 时，（6.6.10）式不是真实的波函数］，得到

$$\lim_{k\to 0}k\cot\delta_0\xrightarrow{k\to 0}-\frac{1}{a}. \tag{6.6.13}$$

物理量 a 被称为**散射长度**. $k\to 0$ 时总截面的极限由［见（6.4.39）式］

$$\sigma_{\text{总}}=\sigma_{l=0}=4\pi\lim_{k\to 0}\left|\frac{1}{k\cot\delta_0-ik}\right|^2=4\pi a^2 \tag{6.6.14}$$

给出.

即使 a 具有与势的力程 R 相同的量纲，a 和 R 可能有量级上的不同. 特别是，对一个吸引势，散射长度的大小可能会远大于势的力程. 为了解 a 的物理意义，我们指出 a 不过是外部波函数的截距. 如同在图 6.12a 中看到的，对一个排斥势，$a>0$ 且约为 R 的量级. 然而，对一个吸引势，截距处于负的 r 轴（图 6.12b）. 如果增强吸引力，外部波函数能够再次与正的 r 轴相交（图 6.12c）.

增强吸引造成的符号改变与束缚态的生成相关. 为定量地了解这点，我们从图 6.12c 中注意到，当 a 是非常大的正数，$r>R$ 处的波函数基本上是平坦的. 但是，a 非常大的（6.6.10）式与 κ 基本为零的 $e^{-\kappa r}$ 没有太多的不同. 于是，$\kappa\simeq 0$ 的 $e^{-\kappa r}$ 正是一个其能量 E 为无穷小负数、在 $r>R$ 处的束缚态波函数. 对 $E=0_+$ 情况（零动能散射）和 $E=0_-$ 情况（具有无穷小束缚能的束缚态），内部波函数（$r<R$）基本上是相同的，因为在这两种情况下，在 $\sin k'r$ 中的 k'［（6.6.6）式］均由

$$\frac{\hbar^2k'^2}{2m}=E-V_0\simeq|V_0| \tag{6.6.15}$$

确定，其中 E 为无穷小（正数或负数）.

由于内部波函数对这两种物理情况（$E=0_+$ 和 $E=0_-$）是相同的，我们能使束缚态波函数的对数微商与涉及零动能散射解的对数微商相等，

$$-\left.\frac{\kappa e^{-\kappa r}}{e^{-\kappa r}}\right|_{r=R}=\left.\left(\frac{1}{r-a}\right)\right|_{r=R}, \tag{6.6.16}$$

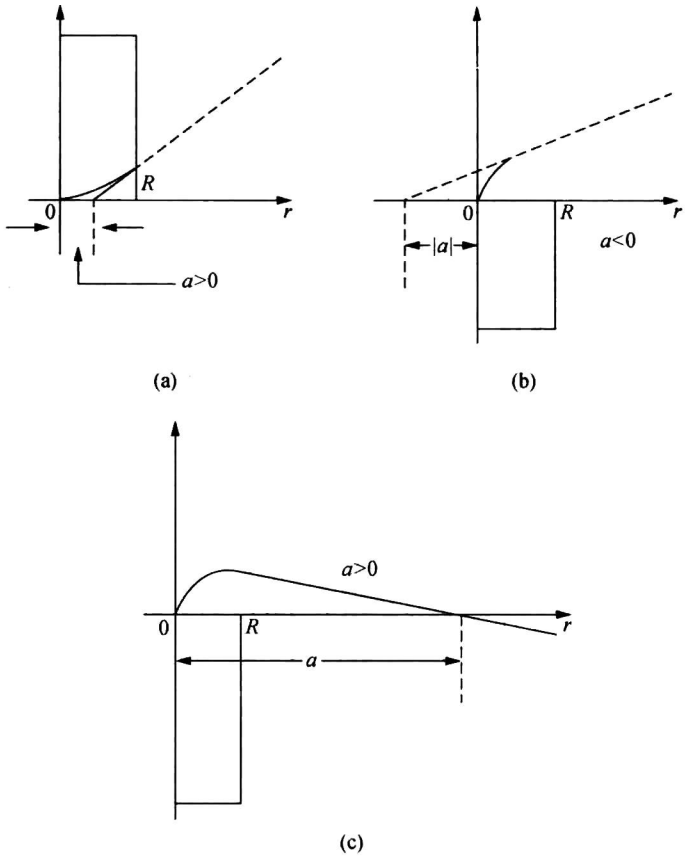


图 6.12 $u(r)$ 随 r 变化的曲线．(a) 排斥势，(b) 吸引势，(c) 更深的吸引．对每种情况都显示了零能外部波函数在 r 轴上的截距．

或，如果 $R \ll a$，则

$$\kappa \simeq \frac{1}{a}. \tag{6.6.17}$$

束缚能满足

$$E_{\mathrm{BE}} = -E_{\text{束缚态}} = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2}, \tag{6.6.18}$$

且得到散射长度和束缚态能量之间的一个关系．这是值得注意的结果．那就是说，如果存在一个松散的束缚态，能通过做接近零动能的散射实验，倘若测出的 a 比势的力程 R 要大，则能推断出它的束缚能．散射长度与束缚态能量的这个联系首先被维格纳指出，他试图把（6.6.18）式应用于 np 散射．

实验上，np 系统的 $^3S_1$ 态有一个束缚态，即束缚能为

$$E_{BE} = 2.22\mathrm{MeV} \tag{6.6.19}$$

的氘核．测量的散射长度为

$$a_{\text{三重态}} = 5.4 \times 10^{-13}\,\mathrm{cm}, \tag{6.6.20}$$

它导致了束缚能的预言

$$\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} = \frac{\hbar^2}{m_N a^2} = m_N c^2 \left(\frac{\hbar}{m_N c a}\right)^2$$

$$= (938\text{MeV})\left(\frac{2.1\times10^{-14}\text{cm}}{5.4\times10^{-13}\text{cm}}\right)^2 = 1.4\text{MeV}, \tag{6.6.21}$$

其中，μ 是约化质量，近似为 $m_{n,p}/2$. 实验和预言之间的符合不太令人满意. 这个差异是由于内部波函数不严格相同，并且对于氘核来说 $a_{\text{三重态}} \gg R$ 确实不是一个很好的近似. 但可通过下述方法得到更好的结果，即保留 $k\cot\delta$ 作为 k 的函数展开式中的下一项，

$$k\cot\delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_0k^2, \tag{6.6.22}$$

其中 r_0 被称为有效力程（例如，参见 Preston 1962，23）.

束缚态作为 $S_l(k)$ 的极点

通过研究 $l=0$ 的振幅 $S_l(k)$ 的解析性质来结束本章. 回到（6.4.31）和（6.4.35）式，$l=0$ 的径向波函数在大距离处正比于

$$S_{l=0}(k)\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r}. \tag{6.6.23}$$

将其与束缚态在远处的波函数

$$\frac{e^{-\kappa r}}{r}, \tag{6.6.24}$$

相比较. 束缚态的存在暗示着 $E<0$ 时薛定谔方程的非平庸解仅仅在 κ 取特殊（分立）值时存在. 可以论证 $e^{-\kappa r}/r$ 就像 e^{ikr}/r 一样，除了现在 k 是纯虚的. 撇开 k 是虚的，(6.6.23) 式和 (6.6.24) 式间的重要区别是：在束缚态的情况下，即使没有类似的入射波，$e^{-\kappa r}/r$ 也会出现. 通常，人们仅仅对 e^{ikr}/r 和 e^{-ikr}/r 的系数之比有物理兴趣，这个比是由 $S_l(k)$ 给出的. 在束缚态的情况下，即使没有类似的入射波，也能够维持这个出射波（具有虚的 k）. 所以这个比值是∞，它意味着作为复变量 k 的函数的 $S_{l=0}(k)$ 在 $k=i\kappa$ 处有一个极点. 这样，一个束缚态意味着在复 k 平面的正虚轴上有一个极点（可证明它是一个一阶极点），见图 6.13. 当 k 是正实数时，有物理散射区. 这里，必须要求［与（6.4.37）式比较］

$$S_{l=0} = e^{2i\delta_0} \tag{6.6.25}$$

其中 δ_0 是实的. 此外，当 $k\to0$ 时，$k\cot\delta_0$ 具有一个有限的极限值 $-1/a$（6.6.13）式，所以 δ_0 必须有如下行为：

$$\delta_0 \to 0, \pm\pi, \cdots \tag{6.6.26}$$

因此，当 $k\to0$ 时，$S_{l=0}=e^{2i\delta_0}\to1$.

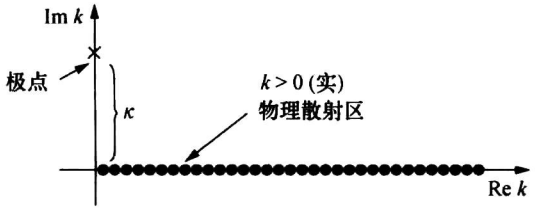


图 6.13　$k=+i\kappa$ 处具有束缚态极点的复 k 平面

现在，试着去构建一个简单的函数，它满足：

1. 在 $k=i\kappa$ 处有极点(存在束缚态).
2. 对实 $k>0$ 有 $|S_{l=0}|=1$(幺正性). (6.6.27)
3. 在 $k=0$ 处有 $S_{l=0}=1$(阈行为).

满足（6.6.27）式所有三个条件的最简单的函数是

$$S_{l=0}(k)=\frac{-k-i\kappa}{k-i\kappa}. \tag{6.6.28}$$

[编者注：选择方程（6.6.28）只是为了简单，而不是作为真实的物理例子. 对合理的势（不是硬球!），相移在 $k\to\infty$ 时为零.]

隐含在选择这个形式中的假设是不存在除束缚态极点之外的其他重要奇点. 那么，对 $f_{l=0}(k)$，能用（6.4.38）式求得

$$f_{l=0}=\frac{S_{l=0}-1}{2ik}=\frac{1}{-\kappa-ik}. \tag{6.6.29}$$

将它与（6.4.39）式

$$f_{l=0}=\frac{1}{k\cot\delta_0-ik} \tag{6.6.30}$$

相比较，我们看到

$$\lim_{k\to 0}k\cot\delta_0=-\frac{1}{a}=-\kappa, \tag{6.6.31}$$

它正好就是束缚态和散射长度的关系式（6.6.17）式.

由此看来，通过揭示 $S_l(k)$ 在 k 平面的幺正性和解析性，就能得到由明确地求解薛定谔方程才能够获得的那类信息. 这种技术在势的细节未知的问题中可能是非常有用的.

6.7 共振散射

在原子、原子核和粒子物理中，常常遇到一种情况，在那里一个给定分波的散射截面显示一个明显的峰. 这一节将关注这样一个**共振**的动力学.

我们继续考虑一个有限力程势 $V(r)$. 对 l 分波径向波函数适用的等效势是 $V(r)$ 加上由（6.6.1）式给出的中心势垒项. 假定 $V(r)$ 自身是吸引的. 由于这个第二项，

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2},$$

是排斥的，就有了一种情况，在那里等效势有一个吸引的势阱，紧跟着一个在较远距离处的排斥势垒，如图 6.14 所示.

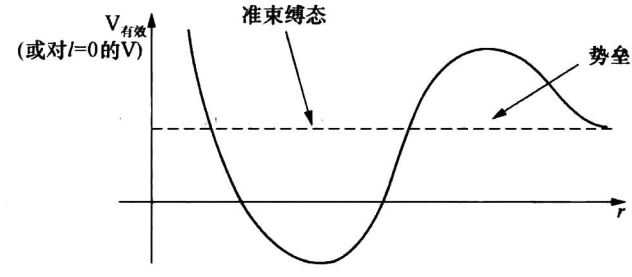


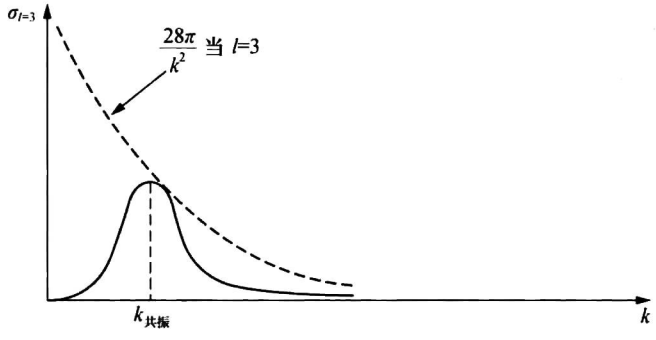
图 6.14 $V_{有效}=V(r)+(\hbar^2/2m)[l(l+1)/r^2]$ 随 r 变化的曲线. 对 $l\neq 0$，势垒是由 $(\hbar^2/2m)[l(l+1)/r^2]$ 引起的；对 $l=0$，势垒一定是来自于 V 本身.

假定该势垒无限高. 那么粒子就会有可能被困在里面，这是预期有能量 $E>0$ 的束缚态的另一种说法. 在它们都是具有确定 E 值的哈密顿量本征态的意义上来说，它们是真实的束缚态. 换句话说，它们是具有无限长寿命的定态.

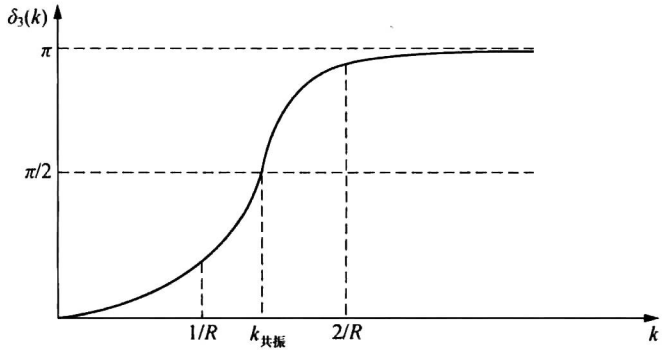
在一个更为现实的有限势垒的情况下，粒子能被困在里面，但不能永远地被困在那里. 作为量子力学隧道穿透的后果，这样一个被俘获的态有一个有限的寿命. 换句话说，一个粒子通过势垒泄露到外部区域. 把这样的态称为**准束缚态**，因为如果势垒是无限高，这个态将会是一个实实在在的束缚态.

当入射能量加大超过准束缚态的能量，相应的散射相移 δ_l 也提高通过 $\pi/2$，与此同时，相应的分波截面通过它可能的极大值 $4\pi(2l+1)/k^2$. （在时间相关的薛定谔方程中，这样的一个急剧上升的相移与被俘获粒子出现的一种滞后相联系，而不是像一个急剧下降通过 $\pi/2$ 那样的非物理的提前. ——编者注）

对某些已知的势，用一些明确的计算证明这点是有益的. 数值计算结果显示：在一个球势阱的情况下，共振行为事实上是对于 $l\neq0$ 的情况才可能发生. 具体地说，图 6.15 中展示了一个具有 $2mV_0R^2/\hbar^2=5.5$ 的球势阱，且 $l=3$ 时的结果. 在极低能时很小的相移（图 6.15b），开始很快地增长，经过 $k=1/R$，并在 $k=1.3/R$ 附近通过 $\pi/2$.



(a)



(b)

图 6.15　(a) $\sigma_{l=3}$ 随 k 变化的曲线，在共振点，$\delta_3(k_{共振})=\pi/2$，并且 $\sigma_{l=3}=(4\pi/k_{共振}^2)\times 7=28\pi/k_{共振}^2$，而 (b) $\delta_3(k)$ 随 k 变化的曲线. 这些曲线对应于 $2mV_0R^2/\hbar^2=5.5$ 的一个球势阱. [原图 (b) 纵轴标注为 $\delta_3(k)$，显然与图注不符，现已订正为 $\delta_3(k)$. ——译者注]

另一个非常有启发的例子是一个精确可解的、排斥的 δ 壳形位势（见本章习题 6.10）：

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(r) = \gamma\delta(r-R). \tag{6.7.1}$$

在这里，$l=0$ 的共振是可能的，因为 δ 壳形位势本身就能把粒子限制在 $0<r<R$ 的区域. 对 $\gamma=\infty$ 的情况，在 $r<R$ 的区域，预期存在一系列具有

$$kR = \pi, 2\pi, \cdots \tag{6.7.2}$$

的束缚态；这是因为在这种情况下，$l=0$ 的径向波函数不仅在 $r=0$ 处，而且在 $r=R-$ 处也必须为零. 在 $r>R$ 的区域，一定会有具有 S 波相移

$$\delta_0 = -kR \tag{6.7.3}$$

的硬球散射. 在 $\gamma=\infty$ 的情况下，在这两个问题之间没有任何联系，因为 $r=R$ 处的壁不能被穿透.

就像我们能够明显地展示的，具有有限势垒的情况可能更有趣. 每当

$$E_{\text{入射}} \simeq E_{\text{准束缚态}} \tag{6.7.4}$$

散射相移展示出一个共振行为. 此外，γ 越大，共振峰就越尖锐. 然而，离开了共振，δ_0 就非常像硬球散射相移. 这样，我们有了一种情况，在那里一个共振行为被叠加在一个平滑行为的背景散射上. 这可以作为一个中子-原子核散射模型，在那里，在一个平滑变化截面的顶部观测到一系列尖锐的共振峰.

回到一般的共振散射的讨论，我们要问散射振幅在共振能量附近如何变化. 就像上面讨论的，只要有大 σ_l 和准束缚态之间的任何联系，δ_l 一定从下面通过 $\pi/2$（或 $3\pi/2, \cdots$）. 换句话说，δ_l 一定由上面穿过零. 假设 $\cot\delta_l$ 在共振附近平滑地变化，即，

$$E \simeq E_r, \tag{6.7.5}$$

可尝试将 δ_l 展开如下：

$$\cot\delta_l = \underbrace{\cot\delta_l|_{E=E_r}}_{0} - c(E-E_r) + 0[(E-E_r)^2]. \tag{6.7.6}$$

这导致了

$$\begin{aligned} f_l(k) &= \frac{1}{k\cot\delta_l - ik} = \frac{1}{k}\frac{1}{[-c(E-E_r)-i]} \\ &= -\frac{\Gamma/2}{k\left[(E-E_r)+\dfrac{i\Gamma}{2}\right]}, \end{aligned} \tag{6.7.7}$$

其中，用

$$\left.\frac{d(\cot\delta_l)}{dE}\right|_{E=E_r} = -c \equiv -\frac{2}{\Gamma}. \tag{6.7.8}$$

定义了宽度 Γ. 注意，如果 $\cot\delta_l$ 变化很快，则 Γ 非常小. 如果一个单一的共振主宰了第 l 分波的截面，得到一个单能级共振公式［布赖特-维格纳（Breit-Wigner）公式］：

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}\frac{(2l+1)(\Gamma/2)^2}{(E-E_r)^2+\Gamma^2/4} \tag{6.7.9}$$

所以，倘若共振相当的窄以致 $1/k^2$ 的变化能被忽略，则把 Γ 看作在半极大值处的全宽度是合理的.

6.8　散射中对称性的考虑

考虑两个无自旋带电全同粒子经由某个中心势场，比如库仑势，的散射*. 现在，波函数的空间部分必须是对称的，所以渐近的波函数一定像

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}+e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}+[f(\theta)+f(\pi-\theta)]\frac{e^{ikr}}{r}, \tag{6.8.1}$$

其中 $\mathbf{x}=\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2$ 是两个粒子 1 和 2 间的相对位置矢量. 它导致了一个微分截面

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega}&=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2\\&=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+2\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi-\theta)],\end{aligned} \tag{6.8.2}$$

通过在 $\theta\simeq\pi/2$ 处的相长干涉，截面增加了.

相反，对使用非极化束流且 V 不依赖于自旋的自旋$\frac{1}{2}$-自旋$\frac{1}{2}$粒子的散射，我们有与空间对称波函数相配的自旋单态散射和与空间反对称波函数相配的自旋三重态散射（见 7.3 节）. 如果初始束流是非极化的，我们有自旋单态的统计贡献$\frac{1}{4}$和自旋三重态的统计贡献$\frac{3}{4}$，因此

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega}&=\frac{1}{4}|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2+\frac{3}{4}|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2\\&=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2-\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi-\theta)].\end{aligned} \tag{6.8.3}$$

换句话说，我们预期在 $\theta\simeq\pi/2$ 处的相消干涉. 实际上，这现象已经被观测到了.

现在考虑不同于交换对称性的其他对称性. 假设 V 和 H_0 在某些对称性操作下都是不变的. 也许要问：这对于 T 的矩阵元或散射振幅 $f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ 意味着什么.

如果对称性算符是幺正的（例如，转动和宇称），一切都十分简单. 利用诸如 (6.1.32) 式给出的 T 的显式表达式，看到

$$UH_0U^\dagger=H_0,\quad UVU^\dagger=V \tag{6.8.4}$$

意味着 T 在 U 变换下也是不变的. 即，

$$UTU^\dagger=T. \tag{6.8.5}$$

定义

$$|\tilde{\mathbf{k}}\rangle\equiv U|\mathbf{k}\rangle,\quad |\tilde{\mathbf{k}}'\rangle\equiv U|\mathbf{k}'\rangle. \tag{6.8.6}$$

则

$$\begin{aligned}\langle\tilde{\mathbf{k}}'|T|\tilde{\mathbf{k}}\rangle&=\langle\mathbf{k}'|U^\dagger UTU^\dagger U|\mathbf{k}\rangle\\&=\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle.\end{aligned} \tag{6.8.7}$$

作为一个例子，考虑 U 是宇称算符

$$\pi|\mathbf{k}\rangle=|-\mathbf{k}\rangle,\quad \pi|-\mathbf{k}\rangle=|\mathbf{k}\rangle \tag{6.8.8}$$

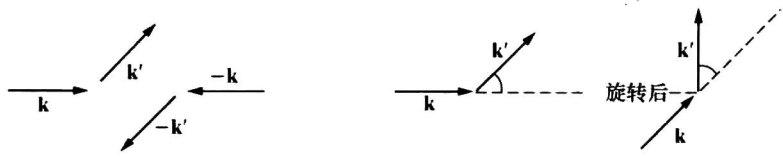
的具体情况. 这样，H_0 和 V 在宇称变换下不变就意味着

$$\langle-\mathbf{k}'|T|-\mathbf{k}\rangle=\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle. \tag{6.8.9}$$

---

* 对全同粒子的交换对称原理不熟悉的同学应参看本书的第 7 章.

这种情况如图 6.16a 所示.



(a) (b)

图 6.16 （a）在 $\mathbf{k}\to\mathbf{k}'$ 和 $-\mathbf{k}\to-\mathbf{k}'$ 之间 T 矩阵元间相等.（b）转动下的 T 矩阵元相等.

发展分波法的时候，揭示了角动量守恒的后果. T 在 $|Elm\rangle$ 表象中是对角化的事实是 T 在转动下不变的直接结果. 也要注意 $\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle$ 只依赖于 $\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{k}'$ 的相对取向，如图 6.16b 所示.

当对称性操作是反幺正的时候（像在时间反演中那样），必须更为小心. 首先，我们知道 V 和 H_0 在时间反演中不变性要求

$$\Theta T\Theta^{-1}=T^{\dagger}. \tag{6.8.10}$$

这是因为反幺正算符把在（6.1.32）中的

$$\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}\text{ 变成}\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon}. \tag{6.8.11}$$

再回忆对反幺正算符有［见（4.4.11）式］

$$\langle\beta|\alpha\rangle=\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\rangle, \tag{6.8.12}$$

其中

$$|\tilde{\alpha}\rangle\equiv\Theta|\alpha\rangle\quad\text{和}\quad|\tilde{\beta}\rangle\equiv\Theta|\beta\rangle. \tag{6.8.13}$$

考虑

$$|\alpha\rangle=T|\mathbf{k}\rangle,\quad\langle\beta|=\langle\mathbf{k}'|; \tag{6.8.14}$$

于是

$$\begin{aligned}|\tilde{\alpha}\rangle&=\Theta T|\mathbf{k}\rangle=\Theta T\Theta^{-1}\Theta|\mathbf{k}\rangle=T^{\dagger}|-\mathbf{k}\rangle\\ |\tilde{\beta}\rangle&=\Theta|\mathbf{k}'\rangle=|-\mathbf{k}'\rangle.\end{aligned} \tag{6.8.15}$$

结果，(6.8.12) 式变成

$$\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle=\langle-\mathbf{k}|T|-\mathbf{k}'\rangle. \tag{6.8.16}$$

注意，除动量的方向已被翻转之外，初始和最终动量也相互交换了.

把时间反演（6.8.16）式和宇称（6.8.9）式结合起来会很有意思：

$$\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle\overset{\text{在}\Theta\text{下}}{=}\langle-\mathbf{k}|T|-\mathbf{k}'\rangle\overset{\text{在}\pi\text{下}}{=}\langle\mathbf{k}|T|\mathbf{k}'\rangle; \tag{6.8.17}$$

即，由（6.2.22）式和（6.3.1）式，有

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}')=f(\mathbf{k}',\mathbf{k}), \tag{6.8.18}$$

它导致

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k}\to\mathbf{k}')=\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k}'\to\mathbf{k}). \tag{6.8.19}$$

方程（6.8.19）被称为**细致平衡**.

有了自旋，就会更有兴趣去查看与（6.8.17）式类似的东西. 在这里可用 $|\mathbf{k},m_s\rangle$ 描述初始自由粒子的右矢，并且把（4.4.79）式用到时间反演部分：

$$\langle\mathbf{k}',m_s'|T|\mathbf{k},m_s\rangle=i^{-2m_s+2m_s'}\langle-\mathbf{k},-m_s|T|-\mathbf{k}',-m_s'\rangle$$

$$= i^{-2m_s+2m_s'}\langle \mathbf{k}, -m_s | T | \mathbf{k}', -m_s' \rangle \tag{6.8.20}$$

若初态是非极化的，应对初态自旋求和并除以 $(2s+1)$；如果不观测末态极化，必须对末态求和. 于是得到了下述形式的细致平衡

$$\overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}}(\mathbf{k} \to \mathbf{k}') = \overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}}(\mathbf{k}' \to \mathbf{k}), \tag{6.8.21}$$

该式中 $d\sigma/d\Omega$ 上的横线意味着对初态自旋求平均和对末态自旋求和.

6.9　电子-原子非弹性散射

考虑电子束流与假定处于基态的原子的相互作用. 入射的电子可能被弹性地散射且末态原子未被激发：

$$e^- + \text{原子(基态)} \to e^- + \text{原子(基态)}. \tag{6.9.1}$$

这是一个弹性散射的例子. 在原子能被看作无限重的范围内，电子的动能不改变. 靶原子也可能被激发：

$$e^- + \text{原子(基态)} \to e^- + \text{原子(激发态)}. \tag{6.9.2}$$

这种情况称为**非弹性散射**，因为现在末态出射电子的动能小于初态入射电子的动能，其差值被用来激发靶原子.

电子加原子体系的初态右矢可写为

$$|\mathbf{k}, 0\rangle. \tag{6.9.3}$$

其中 $\mathbf{k}$ 是入射电子的波矢，0 表示原子的基态. 严格地说，(6.9.3) 式应被理解为入射电子右矢 $|\mathbf{k}\rangle$ 和基态原子右矢 $|0\rangle$ 的直积. 相应的波函数是

$$\frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi_0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_z), \tag{6.9.4}$$

其中利用了平面波的箱归一化.

我们可能对一个有确定波矢 $\mathbf{k}'$ 的末态电子感兴趣. 末态右矢和相应的波函数是

$$|\mathbf{k}', n\rangle \quad \text{和} \quad \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \psi_n(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_z), \tag{6.9.5}$$

其中对弹性散射 $n=0$，对非弹性散射 $n \neq 0$.

假定时间相关微扰论是适用的，就能像在前一节中一样马上写出微分截面：

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \to n) &= \frac{1}{(\hbar k / m_e L^3)} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' n | V | \mathbf{k} 0 \rangle|^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{k' m_e}{\hbar^2}\right) \\ &= \left(\frac{k'}{k}\right) L^6 \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m_e}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle \right|^2. \end{aligned} \tag{6.9.6}$$

一切都是相似的，包括如 L^3 类似项的抵消，但有一个重要的例外：非弹性散射的 $k' \equiv |\mathbf{k}'|$ 一般不等于 $k \equiv |\mathbf{k}|$.

下一个问题是：什么样的 V 适合于这个问题？入射电子能与假定位于原点的原子核相互作用，也能与每个原子电子相互作用. 所以，V 被写成

$$V = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|}. \tag{6.9.7}$$

这里，由于入射电子与原子电子中的一个的全同性导致了问题的复杂性；严格地处理这个问题是一个非平庸的任务. 幸运的是，对相对快速的电子，可合理地忽略全同性问题；这

是因为在动量空间中的束缚态电子和入射电子只有很小的重叠. 我们必须估算矩阵元 $\langle \mathbf{k}', n|V|\mathbf{k}0\rangle$，它能明确地写为

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}'n|V|\mathbf{k}0\rangle &= \frac{1}{L^3}\int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\langle n|-\frac{Ze^2}{r}+\sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|}|0\rangle \\ &= \frac{1}{L^3}\int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\prod_i^z\int d^3x_i\psi_n^*(\mathbf{x}_1,\cdots,\mathbf{x}_z)\left[-\frac{Ze^2}{r}+\sum_i\frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|}\right] \\ &\times\psi_0(\mathbf{x}_1,\cdots,\mathbf{x}_z)\end{aligned} \tag{6.9.8}$$

其中 $\mathbf{q}\equiv\mathbf{k}-\mathbf{k}'$.

现在看一下如何估算第一项 $-Ze^2/r$ 的矩阵元，其中的 r 实际上意味着 $|\mathbf{x}|$. 首先要指出这个势是入射电子和原子核之间的势，它与原子内电子的坐标无关. 所以，它能被拿到(6.9.8)式中的积分

$$\prod_i^z\int d^3x_i$$

之外，对余下的部分简单地得到

$$\langle n|0\rangle = \delta_{n0}. \tag{6.9.9}$$

换句话说，该项仅对弹性散射情况有贡献，在那里靶原子保持不激发. 在弹性散射情况，仍然需要将 $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}/r$ 对 $\mathbf{x}$ 积分，它意味着做库仑势的傅里叶变换. 这是很容易做到的，因为已经估算过汤川势的傅里叶变换；见(6.3.9)式. 因此

$$\int d^3x\frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{r}=\lim_{\mu\to0}\int\frac{d^3xe^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}-\mu r}}{r}=\frac{4\pi}{q^2}. \tag{6.9.10}$$

至于(6.9.8)式中的第二项，可以估算 $1/|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|$ 的傅里叶变换. 可通过把坐标变量平移 $\mathbf{x}\to\mathbf{x}+\mathbf{x}_i$ 来完成：(译者注：原文中该式第二个等式的分子部分有明显错误，已订正.)

$$\sum_i\int\frac{d^3xe^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|}=\sum_i\int\frac{d^3xe^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}+\mathbf{x}_i)}}{|\mathbf{x}|}=\frac{4\pi}{q^2}\sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i}. \tag{6.9.11}$$

注意：这正是库仑势的傅里叶变换乘以由于原子的电子位于 $\mathbf{x}_i$ 导致的电子密度

$$\rho_{\text{原子}}(\mathbf{x})=\sum_i\delta^{(3)}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i). \tag{6.9.12}$$

的傅里叶变换. 我们习惯将 $|0\rangle$ 激发到 $|n\rangle$ 的**形状因子** $F_n(\mathbf{q})$ 定义如下：

$$ZF_n(\mathbf{q})\equiv\langle n|\sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i}|0\rangle. \tag{6.9.13}$$

它是由来自各个电子的相干——在确定的相位关系的意义上——贡献构成的. 注意：当 $q\to0$ 时，对 $n=0$ 的情况，有

$$\frac{1}{Z}\langle n|\sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i}|0\rangle\to1;$$

因此，在弹性散射情况下形状因子趋于1. 对 $n\neq0$（非弹性散射）的情况，当 $\mathbf{q}\to0$ 时，基于 $|n\rangle$ 和 $|0\rangle$ 的正交性 $F_n(\mathbf{q})\to0$. 于是，我们能写出(6.9.8)式中的矩阵元

$$\int d^3xe^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\langle n|\left(-\frac{Ze^2}{r}+\sum_i\frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|}\right)|0\rangle=\frac{4\pi Ze^2}{q^2}[-\delta_{n0}+F_n(\mathbf{q})]. \tag{6.9.14}$$

最终可写出电子被原子非弹性（或弹性）散射的微分截面：

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega}(0\to n)&=\left(\frac{k'}{k}\right)\left|\frac{1}{4\pi}\frac{2m_e}{\hbar^2}\frac{4\pi Ze^2}{q^2}[-\delta_{n0}+F_n(\mathbf{q})]\right|^2 \\ &=\frac{4m_e^2}{\hbar^4}\frac{(Ze^2)^2}{q^4}\left(\frac{k'}{k}\right)|-\delta_{n0}+F_n(\mathbf{q})|^2.\end{aligned} \tag{6.9.15}$$

对非弹性散射，δ_{n0}项没有贡献，并且习惯用波尔半径，

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e}, \tag{6.9.16}$$

写出如下微分散射截面

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \to n) = 4Z^2 a_0^2 \left(\frac{k'}{k}\right) \frac{1}{(qa_0)^4} |F_n(\mathbf{q})|^2. \tag{6.9.17}$$

通常用 $d\sigma/dq$ 替代 $d\sigma/d\Omega$，使用

$$q^2 = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 = k^2 + k'^2 - 2kk'\cos\theta, \tag{6.9.18}$$

和 $dq = -d(\cos\theta)kk'/q$，能够写出

$$\frac{d\sigma}{dq} = \frac{2\pi q}{kk'} \frac{d\sigma}{d\Omega}. \tag{6.9.19}$$

得到的非弹性截面可用来讨论阻止本领——一个带电粒子通过物质时的能量丢失. 很多人，包括贝特（H. A. Bethe）和布洛赫，都曾从非弹性散射截面的观点讨论过阻止本领的量子力学推导. 我们对一个带电粒子在入射带电粒子穿过的单位长度上的能量丢失感兴趣. 每单位长度上的碰撞率是 $N\sigma$，其中 N 是每单位体积中的原子数. 在每一次碰撞过程中，带电粒子的能量丢失是 $E_n - E_0$. 所以，dE/dx 能写为

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dx} &= N\sum_n (E_n - E_0) \int \frac{d\sigma}{dq}(0 \to n) dq \\ &= N\sum_n (E_n - E_0) \frac{4Z^2}{a_0^2} \int_{q_{极小}}^{q_{极大}} \frac{k'}{k} \frac{1}{q^4} \frac{2\pi q}{kk'} |F_n(\mathbf{q})|^2 dq \\ &= \frac{8\pi N}{k^2 a_0^2} \sum_n (E_n - E_0) \int_{q_{极小}}^{q_{极大}} \left| \langle n | \sum_{i=1}^{z} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i} | 0 \rangle \right|^2 \frac{dq}{q^3}. \end{aligned} \tag{6.9.20}$$

很多文章已经给出如何去估算（6.9.20）式中的求和.* 这一切的关键结果就是用量子力学证明波尔对于阻止本领在 1913 年给出的公式，

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi N Z e^4}{m_e v^2} \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right), \tag{6.9.21}$$

其中 I 是一个与平均激发能 $\langle E_n - E_0 \rangle$ 相关的半经验参数. 如果带电粒子具有电荷 $\pm ze$，只需将 Ze^4 换成 $z^2 Ze^4$ 即可. 同样重要的是要注意：即使入射的带电粒子不是电子，出现在（6.9.21）式中的 m_e 仍是电子的质量，而不是带电粒子的质量. 所以，能量损失依赖于入射粒子的电荷和速度，但与其质量无关. 它对于探测带电粒子有重要的应用.

从量子力学的角度，我们把一个带电粒子的能量损失看成是一系列非弹性散射的过程. 在每一次带电粒子与一个原子相互作用时，可以想象为对带电粒子的位置进行了一次“测量”. 我们想知道为什么粒子在云雾室和核乳胶一类媒质中的径迹几乎是直的. 原因是微分截面（6.9.17）式在小 q 处有尖锐的峰；在绝大多数的碰撞中，由于大 q 处 q^{-4} 和 $F_n(\mathbf{q})$ 的迅速减小，最终的动量方向几乎与入射电子的动量方向一样.

核形状因子

在 $q \sim 10^9\,\mathrm{cm}^{-1}$ 到 $10^{10}\,\mathrm{cm}^{-1}$ 的区间，由于非弹性散射导致的原子激发是重要的. 如果 q 过大，$F_0(\mathbf{q})$ 或 $F_n(\mathbf{q})$ 导致的贡献减小得非常快. 在极高的 q 处，在那里 q 在 $1/R_{原子核} \sim$

* 相对初等的讨论可参见 K. Gottfried (1966) 及 H. A. Bethe 和 R. W. Jackiw (1968).

10^{12}cm^{-1}的量级．原子核的结构变得很重要．这时，由于点原子核引起的库仑势必须用由一个广延物体引起的库仑势来替换，

$$-\frac{Ze^2}{r}\to -Ze^2\int\frac{d^3x'N(r')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}, \tag{6.9.22}$$

其中 $N(r)$ 是原子核电荷分布，它按下式归一化

$$\int d^3x'N(r')=1. \tag{6.9.23}$$

现在，类点原子核可被视为一个具有

$$N(r')=\delta^{(3)}(r') \tag{6.9.24}$$

的特例．类似于（6.9.10）式，可估算（6.9.22）式右边的傅里叶变换：

$$\begin{aligned}Ze^2\int d^3x\int\frac{d^3x'e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}N(r')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}&=Ze^2\int d^3x'e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'}N(r')\int\frac{d^3xe^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{r}\\&=Ze^2\frac{4\pi}{q^2}F_{\text{原子核}}(\mathbf{q})\end{aligned} \tag{6.9.25}$$

在那里，第一步已经对坐标进行了平移 $\mathbf{x}\to\mathbf{x}+\mathbf{x}'$，并且取

$$F_{\text{原子核}}\equiv\int d^3xe^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}N(r). \tag{6.9.26}$$

这样，我们求得了由于原子核的有限尺度而导致的与卢瑟福公式的偏差，

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{卢瑟福}}|F(\mathbf{q})|^2, \tag{6.9.27}$$

其中 $(d\sigma/d\Omega)_{\text{卢瑟福}}$ 是电子被电荷为 $Z|e|$ 的类点原子核的电散射的微分截面．对小的 q，有

$$\begin{aligned}F_{\text{原子核}}(\mathbf{q})&=\int d^3x\left(1+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}-\frac{1}{2}q^2r^2(\hat{\mathbf{q}}\cdot\hat{\mathbf{r}})^2+\cdots\right)N(r)\\&=1-\frac{1}{6}q^2\langle r^2\rangle_{\text{原子核}}+\cdots.\end{aligned} \tag{6.9.28}$$

由于球对称性，$\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}$ 项为零，并且在 q^2 项中用到了 $\cos^2\theta$（这里 θ 是 $\hat{\mathbf{q}}$ 和 $\hat{\mathbf{r}}$ 之间的夹角）的角平均值恰好是 1/3 的事实：

$$\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}d(\cos\theta)\cos^2\theta=\frac{1}{3}. \tag{6.9.29}$$

物理量 $\langle r^2\rangle_{\text{原子核}}$ 被称为原子核的均方半径．用这种方法有可能“测量”原子核的大小，也可测量质子的大小，就像霍夫斯塔特（R. Hofstadter）和他的合作者所做的那样．在质子的情况中，自旋（磁矩）效应也是重要的．

习题

6.1 李普曼-施温格形式也能用于仅当 $0<|x|<a$ 时 $V(x)\neq 0$ 的一个有限力程势的一维透射-反射问题．

(a) 假定有一个来自左边的入射波：$\langle x|\phi\rangle=e^{ikx}/\sqrt{2\pi}$．如果想要只在 $x>a$ 的区域有一个透射波，在 $x<-a$ 的区域有一个反射波和原始的波，必须如何处理奇异的 $1/(E-H_0)$ 算符？$E\to E+i\varepsilon$ 的做法是否仍然正确？求一个恰当的格林函数表达式，并且写出 $\langle x|\psi^{(+)}\rangle$ 的一个积分方程．

(b) 考虑一个吸引的 δ 函数的特例，

$$V=-\left(\frac{\gamma\hbar^2}{2m}\right)\delta(x)\quad(\gamma>0).$$

求解这个积分方程以得到透射和反射振幅．检查该结果是否与 Gottfried 1966，52 页的相符合．

(c) 有着 $\gamma>0$ 的一维 δ 函数势，对 γ 取任意值，都允许一个（且仅一个）束缚态. 当 k 被看作是一个复变量时，证明你算出的透射和反射振幅在预期的位置具有束缚态的极点.

6.2 分别采用下列的每一种方式，证明

$$\sigma_{总} \simeq \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\int d^3x\int d^3x' V(r)V(r')\,\frac{\sin^2 k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}{k^2|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}$$

(a) 对用一级玻恩近似计算得到的微分截面求积分；

(b) 把光学定理用于二级玻恩近似中的向前散射振幅. [注意，假如使用一级玻恩近似，$f(0)$ 是实的.]

6.3 由图 6.6 中的数据估计 ^{40}Ca 核的半径，并与经验值 $\approx 1.4A^{1/3}$ fm 所预期的结果做比较，其中 A 是原子核的质量数. 检查对这些数据使用一级玻恩近似的合理性.

6.4 考虑一个势

$$V=0 \quad \text{对 } r>R. \qquad V=V_0=\text{常数} \quad \text{对 } r<R.$$

其中的 V_0 可能是正的或负的. 采用分波法，证明对 $|V_0|\ll E=\hbar^2k^2/2m$ 和 $kR\ll 1$，微分截面是各向同性的，并且总截面由

$$\sigma_{总}=\left(\frac{16\pi}{9}\right)\frac{m^2V_0^2R^6}{\hbar^4}$$

给出. 假定能量稍稍增加. 证明角分布能被写成

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=A+B\cos\theta.$$

求 B/A 的一个近似表达式.

6.5 一个无自旋粒子被一个微弱的汤川势

$$V=\frac{V_0e^{-\mu r}}{\mu r}$$

散射，其中 $\mu>0$ 但 V_0 可正可负. 在正文中曾经证明一级玻恩振幅由

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2\mu}\frac{1}{[2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2]}$$

给出.

(a) 使用 $f^{(1)}(\theta)$ 和假定 $|\delta_l|\ll 1$，基于第二类勒让德函数

$$Q_l(\zeta) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{P_l(\zeta')}{\zeta-\zeta'}d\zeta'$$

求 δ_l 的表达式.

(b) 使用展开公式

$$\begin{aligned}Q_l(\zeta)=&\frac{l!}{1\cdot 3\cdot 5\cdots(2l+1)}\\&\times\left\{\frac{1}{\zeta^{l+1}}+\frac{(l+1)(l+2)}{2(2l+3)}\frac{1}{\zeta^{l+3}}\right.\\&\left.+\frac{(l+1)(l+2)(l+3)(l+4)}{2\cdot 4\cdot(2l+3)(2l+5)}\frac{1}{\zeta^{l+5}}+\cdots\right\}\quad(|\zeta|>1)\end{aligned}$$

证明下列每种说法

(i) 当势是排斥的（吸引的）时，δ_l 是负的（正的）.

(ii) 当德布罗意波长远大于势的力程时，δ_l 正比于 k^{2l+1}. 求比例常数.

6.6 对一个禁闭在硬球内部粒子的基态，明确地检查 $x-p_x$ 不确定度关系，该硬球满足：对 $r>a$ 有 $V=\infty$；对 $r<a$ 有 $V=0$. (提示：利用球对称.)

6.7 考虑一个粒子被一个不能穿透的球

$$V(r) = \begin{cases}0 & \text{对 } r>a\\ \infty & \text{对 } r<a.\end{cases}$$

散射

(a) 推导 s 波（$l=0$）相移的表达式.（求解这个简单的问题，你不需要知道球贝塞尔函数的详细性质!）

(b) 在极端低能极限 $k\to 0$ 下，总截面 $\sigma[\sigma=\int(d\sigma/d\Omega)d\Omega]$ 是什么？将你的答案与几何截面 πa^2 相比较. 可以不必证明而假设：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)|^2,$$

$$f(\theta)=\left(\frac{1}{k}\right)\sum_{l=0}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta).$$

6.8 通过下列的位势，用 $\delta_l=\Delta(b)|_{b=lk}$ 求高能散射的相移，(a) 高斯型势，$V=V_0\exp(-r^2/a^2)$，(b) 汤川势，$V=V_0\exp(-\mu r)/\mu r$. 证明这样的一种说法的正确性：在 $l\gg kR$ 时，随 l（k 固定）增加，δ_l 非常迅速地趋于零，其中 R 为势的“力程”. [$\Delta(b)$ 的公式在（6.5.14）式中给出.]

6.9 (a) 证明

$$\frac{\hbar^2}{2m}\langle\mathbf{x}|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}|\mathbf{x}'\rangle=-ik\sum_l\sum_m Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{r}}')j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>),$$

其中 $r_<$（$r_>$）表示 r 和 r' 中比较小（比较大）的那个.

(b) 对球对称势，李普曼-施温格方程能用球面波写成：

$$|Elm(+)\rangle=|Elm\rangle+\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V|Elm(+)\rangle.$$

利用 (a)，证明在 $\mathbf{x}$ 表象写出这个方程时，导致径向函数 $A_l(k;r)$ 满足一个如下的方程：

$$A_l(k;r)=j_l(kr)-\frac{2mik}{\hbar^2}\times\int_0 j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)V(r')A_l(k;r')r'^2dr'.$$

通过取 r 很大，还可得到

$$f_l(k)=e^{i\delta_l}\frac{\sin\delta_l}{k}=-\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\int_0 j_l(kr)A_l(k;r)V(r)r^2dr.$$

6.10 考虑被一个排斥的 δ 壳形势

$$\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)V(r)=\gamma\delta(r-R),\qquad(\gamma>0)$$

的散射.

(a) 建立一个方程，确定作为 k（$E=\hbar^2k^2/2m$）的函数的 s 波相移 δ_0.

(b) 现在假定 γ 非常大，

$$\gamma\gg\frac{1}{R},k.$$

证明：如果 $\tan(kR)$ 不靠近零，所得到的 s 波相移就像正文中讨论的硬球散射的结果. 还要证明当 $\tan(kR)$ 接近于零（但不精确为零），就可能有共振行为；即，随 k 增大，$\cot\delta_0$ 从正的一边通过零. 保留 $1/\gamma$ 量级的项，近似地确定共振的位置；将它们与这样的一个粒子的束缚态能量比较，该粒子被禁闭在一个相同半径的球势阱

$$V=0,\quad r<R;\qquad V=\infty,\quad r>R$$

的内部. 还要求一个由

$$\Gamma=\frac{-2}{[d(\cot\delta_0)/dE]|_{E=E_r}}$$

定义的共振宽度 Γ 的近似表达式，特别要注意，当 γ 变得很大的时候，共振就变得非常的尖锐.（注意：对这个问题的一种不同且更为精致的做法请见 Gottfried 1966，131～141 页，其中讨论了由 A_l

$=j_l/D_l$ 定义的 D_l 函数的解析性质.)

6.11 一个无自旋的粒子被一个时间相关势

$$V(\mathbf{r},t)=V(\mathbf{r})\cos\omega t$$

散射. 证明如果该势被用来对于跃迁振幅作第一级处理，则被散射粒子的能量增加或减少了 $\hbar\omega$. 求出 $d\sigma/d\Omega$. 定性地讨论如果考虑更高阶的项会发生什么.

6.12 证明一个快速电子被基态的氢原子散射的微分截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{4m^2e^4}{\hbar^4q^4}\right)\left\{1-\frac{16}{[4+(qa_0)^2]^2}\right\}^2.$$

(忽略全同性效应.)

6.13 设在中心势场中运动的一个粒子的能量为 $E(J_1J_2J_3)$，其中 $(J_1J_2J_3)$ 是三个作用变量. E 的这种函数形式是如何专门用于库仑势的？使用作用角方法的处理方案，比较中心力场问题的简并度和库仑势问题的简并度，并将其与矢量 **A** 关联起来.

如果哈密顿量是

$$H=\frac{p^2}{2\mu}+V(r)+F(\mathbf{A}^2),$$

这些说法怎样改变？

采用通常的量子数 (n,l,m) 及采用量子数 (k,m,n) 描述量子理论中相应的中心力场问题和库仑势问题的简并度. 这里第二组量子数 (k,m,n) 标记波函数 $\mathcal{D}^k_{mn}(\alpha\beta\gamma)$.

波函数 $\mathcal{D}^k_{mn}(\alpha\beta\gamma)$ 与拉盖尔函数乘以球谐函数有怎样的关系？

第 7 章　全同粒子

本章致力于讨论由粒子的全同性引起的一些引人注目的量子力学效应. 首先介绍一个自然界处理看上去是一个任选问题的恰当的形式体系和方法. 然后考虑将它应用于一些比氢或类氢原子更为复杂的一些原子. 接下去，我们将发展一个处理多个全同粒子系统的形式体系，这是处理量子场论的方法之一. 最后，作为多粒子量子力学系统的例子，我们概述了一种量子化电磁场的途径.

7.1　置换对称性

在经典物理中，跟踪各个单独的粒子是可能的，尽管它们看起来可能都相同. 当我们有被视为一个系统的粒子 1 和粒子 2 时，原则上，在每一瞬时都可以分别跟踪 1 和 2 的径迹. 为了标记，可以把其中的一个涂成蓝色，而另一个涂成红色，然后考查，随时间推移红色粒子如何运动以及蓝色粒子如何运动.

然而在量子力学中，全同粒子是真正无法分辨的. 这是因为对每个粒子，都不能规定一个以上的对易可观测量完备集；特别是，无法通过把粒子涂成蓝色来标记它. 我们也不能跟踪径迹，因为在每一瞬间都将需要位置的测量，而这必然会扰动这个系统；特别是图 7.1 所示的两个情况（a）和（b），甚至在原则上也无法分辨.

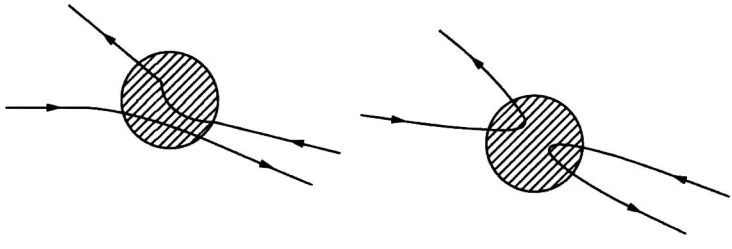


图 7.1　例如，两电子系统的两条不同的路径（a）和（b），即使在原则上，也不能断言电子通过哪条路径.

为简单起见，只考虑两个粒子. 假定其中的一个粒子，称其为粒子 1，用$|k'\rangle$描述，这里k'是对一个可观测量完备集的集合指标. 同样地，把剩下的那个粒子的右矢记为$|k''\rangle$. 两粒子的态右矢可以写成乘积形式，

$$|k'\rangle|k''\rangle. \tag{7.1.1}$$

这里可以理解为第一个右矢指粒子 1，第二个右矢指粒子 2. 还能考虑

$$|k''\rangle|k'\rangle. \tag{7.1.2}$$

其中粒子 1 由$|k''\rangle$描述，粒子 2 由$|k'\rangle$描述. 尽管这两个粒子是不可区分的，但值得注意的是，从数学上讲（7.1.1）式和（7.1.2）式是$k'\neq k''$的可区分的右矢. 事实上，当

$k'\neq k''$ 时，它们是相互正交的.

假定对这个两电子系统进行测量. 可能对一个粒子得到 k' 对另一个电子得到 k''. 然而，无法预先知道态右矢是 $|k'\rangle|k''\rangle$，还是 $|k''\rangle|k'\rangle$，或就此而言，两者的任意线性组合. 换句话说，测量时，所有具有

$$c_1|k'\rangle|k''\rangle+c_2|k''\rangle|k'\rangle \tag{7.1.3}$$

形式的右矢都将导致完全相同的本征值集合. 这就是所谓的**交换简并**. 交换简并展示了一个困难，因为与单粒子情况不同，一个可观测量完备集本征值的规定不能完全确定这个态右矢. 自然界避免这个困难的方法是十分巧妙的. 但在继续进行之前，来建立交换对称性的数学.

用

$$P_{12}|k'\rangle|k''\rangle=|k''\rangle|k'\rangle \tag{7.1.4}$$

定义交换算符 P_{12}. 很显然，

$$P_{21}=P_{12}\qquad 且\qquad P_{12}^2=1. \tag{7.1.5}$$

在 P_{12} 作用下，具有 k' 的电子1变成具有 k'' 的电子1；具有 k'' 的电子2变成具有 k' 的电子2. 换句话说，它具有交换1和2的效果.

在实际工作中，常常会遇到具有粒子标记的可观测量. 例如，在一个两电子系统中的 $\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$，$\mathbf{S}_1(\mathbf{S}_2)$ 代表粒子1(2)的自旋算符. 为简单起见，考虑一个具体的情况，在这里这个两粒子态的右矢由每个粒子的单一可观测量 A 的本征值完全确定：

$$A_1|a'\rangle|a''\rangle=a'|a'\rangle|a''\rangle \tag{7.1.6a}$$

和

$$A_2|a'\rangle|a''\rangle=a''|a'\rangle|a''\rangle, \tag{7.1.6b}$$

其中 A 的下角标表示粒子的标号，这样，A_1 和 A_2 就分别是粒子1和2的可观测量 A. 将 P_{12} 作用于（7.1.6a）式的两边，并且插入 $1=P_{12}^{-1}P_{12}$，有

$$\begin{aligned}P_{12}A_1P_{12}^{-1}P_{12}|a'\rangle|a''\rangle&=a'P_{12}|a'\rangle|a''\rangle\\ P_{12}A_1P_{12}^{-1}|a''\rangle|a'\rangle&=a'|a''\rangle|a'\rangle.\end{aligned} \tag{7.1.7}$$

这个结果仅当

$$P_{12}A_1P_{12}^{-1}=A_2 \tag{7.1.8}$$

时与（7.1.6b）式一致. 由此可知，P_{12} 一定会交换可观测量的粒子标号.

现在考虑两个全同粒子系统的哈密顿量. 可观测量，如动量算符和位置算符，在哈密顿量中必然对称地出现，例如，

$$H=\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}+\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}+V_{对}(|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|)+V_{外部}(\mathbf{x}_1)+V_{外部}(\mathbf{x}_2) \tag{7.1.9}$$

这里，已从它们与其他外部势的相互作用中分离出了两个粒子间的相互作用.（$V_{对}$ 表示粒子对相互作用，$V_{外部}$ 表示每一个粒子受到的外部相互作用. ——译者注）很清楚，对于由两个全同粒子的可观测量构成的 H，有

$$P_{12}HP_{12}^{-1}=H. \tag{7.1.10}$$

因为 P_{12} 与 H 对易，可以说 P_{12} 是一个运动常数. 由于（7.1.5）式，P_{12} 允许的本征值是 $+1$ 和 -1. 因此可以断定，如果两粒子态右矢开始是对称的（反对称的），它将永远保持不变.

如果坚持求 P_{12} 的本征右矢，可选择两种特别的线性组合：

$$|k'k''\rangle_+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle) \tag{7.1.11a}$$

和

$$|k'k''\rangle_- \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle). \tag{7.1.11b}$$

把对称化算子和反对称化算子定义如下：

$$S_{12} \equiv \frac{1}{2}(1+P_{12}), \qquad A_{12} \equiv \frac{1}{2}(1-P_{12}). \tag{7.1.12}$$

我们能把这种形式体系扩展到包含多于两个全同粒子的态. 由（7.1.12）式，如果将 S_{12}（A_{12}）作用于一个 $|k'\rangle|k''\rangle$ 和 $|k''\rangle|k'\rangle$ 的任意线性组合，得到的右矢一定是对称的（反对称的）. 这可从下式很容易地看到：（该式中原文漏掉了一个等号，现已更正. ——译者注）

$$\begin{Bmatrix} S_{12} \\ A_{12} \end{Bmatrix}[c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle]$$

$$= \frac{1}{2}(c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle) \pm \frac{1}{2}(c_1|k''\rangle|k'\rangle + c_2|k'\rangle|k''\rangle)$$

$$= \frac{c_1 \pm c_2}{2}(|k'\rangle|k''\rangle \pm |k''\rangle|k'\rangle). \tag{7.1.13}$$

在 7.5 节将建立在这种方法的基础上.

在结束本节之前，我们稍作停顿以指出忽略交换对称性所带来的后果可能是引人注目的. 图 7.2 展示了在分析中忽略交换对称性带来的误差被修正前后的两个实验比较的结果.

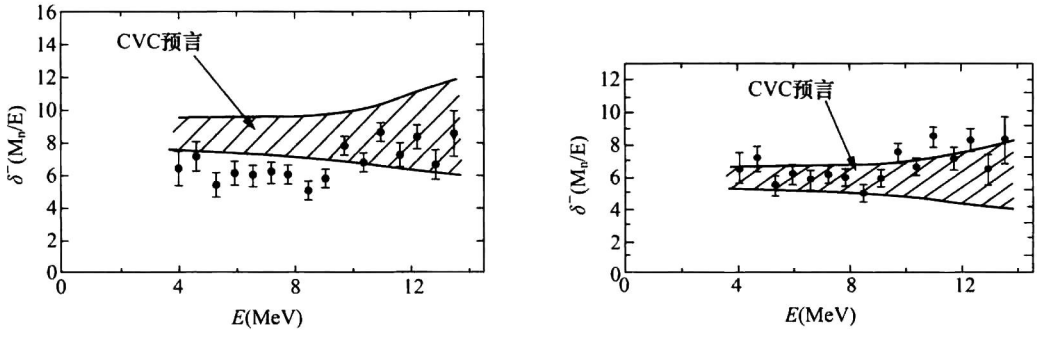


图 7.2　忽略交换对称性引起引人注目的后果. 数据点取自 R. D. McKeown et al.，*Phys. Rev.* **C22**（1980）738，他们检测了矢量流守恒假说的预言. $\beta^\pm-\alpha$ 关联 δ^- 随 $\beta^\pm$ 能量的变化画在图中. 预言取自以前的一个不同的实验，它起初忽略了交换对称性. 修正后的图画在右边，取自 R. D. McKeown et al.，*Phys. Rev.* **C26**（1982）2336，在那里 CVC 预言小了一个因子 $\sqrt{2}$.

这组实验的目标是检验被称之为矢量流守恒（CVC，Conserved Vector Current）的假说，它是基于一个电磁和弱相互作用之间密切相关的假设*. CVC 假说的确认或否定曾是一件优先级最高的事，而且该实验曾是最精确的检验之一. 显示在图 7.2 左图的初步结果不太清晰. 右图的修正结果曾是一个 CVC 的决定性的确认.

---

* CVC 假说在现今称之为标准模型的电磁和弱相互作用统一之前就出现了.

图7.2中的数据点，在左右图中是一样的，来自于^{8}Li和^{8}B的β衰变的测量，这两个核中的每一个都将通过一个^{8}Be的激发态衰变到一个具有两个（全同）α粒子的末态. 这就是，

$$^8\mathrm{Li}\to{}^8\mathrm{Be}^* + e^- + \hat{\nu}_e \tag{7.1.14a}$$

和

$$^8\mathrm{B}\to{}^8\mathrm{Be}^* + e^+ + \nu_e \tag{7.1.14b}$$

接着

$$^8\mathrm{Be}^*\to\alpha+\alpha. \tag{7.1.14c}$$

实验确定了作为$e^\pm$能量的函数δ^-，即在双β衰变中$e^\pm$方向和α方向间的关联. 这个测量的结果发表在R. D. McKeown et al., *Phys. Rev.* C22 (1980) 738.

阴影区显示了从早些时候的实验中推导出的CVC预言，发表在T. J. Bowles and G. T. Garvey, *Phys. Rev.* C18 (1978) 1447. 这项工作测量了这一关联

$$\alpha+\alpha\to{}^8\mathrm{Be}^* \tag{7.1.15a}$$

接着

$$^8\mathrm{Be}^*\to{}^8\mathrm{Be}+\gamma. \tag{7.1.15b}$$

更确切地说，这个过程是(7.1.14)式中过程的逆过程，它们通过电磁相互作用而不是弱相互作用来进行. 从这个结果推导CVC预言要求$\alpha\alpha$波函数是对称化的，但这点起初曾被忽略了，如图7.2左边的图所示. 不久之后，这个丢失了因子$\sqrt{2}$的错误被修正了，并发表了图7.2右边的图，显示预言与测量更为一致.

7.2 对称化假定

至此，还没有讨论过是否大自然充分利用了全对称态或全反对称态. 结果证明*：包含N个全同粒子的系统在交换任意一对粒子时不是全对称的就是全反对称的，在前一种情况粒子满足**玻色-爱因斯坦（Bose-Einstein, B-E）统计**，并因此被称之为**玻色子**；而在后一种情况粒子满足**费米-狄拉克（Fermi-Dirac, F-D）统计**，故被称为**费米子**. 这样

$$P_{ij}|N\text{个全同玻色子}\rangle = +|N\text{个全同玻色子}\rangle \tag{7.2.1a}$$

$$P_{ij}|N\text{个全同费米子}\rangle = -|N\text{个全同费米子}\rangle \tag{7.2.1b}$$

这里P_{ij}是交换算符，它交换第i个和第j个粒子，其中i和j是任意的. 混合对称性不会发生是一个经验事实.

甚至更为引人注目的是，粒子自旋和它所遵从的统计规律之间存在着一种联系：

$$\text{半奇数自旋的粒子是费米子；} \tag{7.2.2a}$$

$$\text{整数自旋的粒子是玻色子} \tag{7.2.2b}$$

这里，粒子可以是复合粒子. 例如，一个^{3}He原子核是一个费米子，就像e^-或质子一样；而一个^{4}He原子核是一个玻色子，就像π介子或Z^0规范玻色子一样.

据我们所知，这个自旋-统计联系是自然界的一个精确的规律，无任何已知的例外. 在非相对论量子力学的框架下，这个原理必须作为经验的假设. 然而，在相对论量子理论

---

* 肯定的是，这样一个重要的精妙法则的存在依赖于我们生活在三维空间. 如果粒子都被约束在两个空间维度之中，就可能存在被称之为任意子（anyons）的客体，它具有跨越费米子和玻色子之间的、连续的统计性质. 这方面的文献是令人着迷但又零散的. 读者可参考两篇早期的文章：F. Wilczek, *Quantum Mechanics of Fractional-Spin Particles*, *Phys. Rev. Lett.* **49** (1982) 957 和 M. V. N. Murthy, J. Law, M. Brack, and R. K. Bhaduri, *Quantum Spectrum of Three Anyons in an Oscillator Potential*, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991) 817.

中，可证明半奇数自旋粒子不可能是玻色子，而整数自旋粒子不可能是费米子.

电子是费米子的一个直接后果是，电子必须满足**泡利不相容原理**，它是说两个电子不可能占据相同的态. 其所以有这个结果是由于像$|k'\rangle|k'\rangle$这样的态必然是对称的，而它对费米子是不可能的. 众所周知，泡利不相容原理是原子和分子物理，以及整个化学的基石. 为阐明费米子和玻色子之间巨大的差别，来考虑两个粒子，其中每个粒子只能占据两个态，它们分别由k'和k''描述. 对一个双费米子系统，没有任何可选的余地，只有一种可能性：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle-|k''\rangle|k'\rangle). \tag{7.2.3}$$

对玻色子，有三个可能的态

$$|k'\rangle|k'\rangle,\qquad |k''\rangle|k''\rangle,\qquad \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle+|k''\rangle|k'\rangle). \tag{7.2.4}$$

相反，对满足**麦克斯韦-玻尔兹曼（Maxwell-Boltzmann，M-B）统计**的“经典”粒子，没有任何对称性的限制，一共有四个独立的态：

$$|k'\rangle|k''\rangle,\qquad |k''\rangle|k'\rangle,\qquad |k'\rangle|k'\rangle,\qquad |k''\rangle|k''\rangle. \tag{7.2.5}$$

我们看到在费米子的情况中，两个粒子同时占据相同的态是不可能的. 但在玻色子的情况中，对三个允许右矢当中的两个右矢，两个粒子均占据着相同的态. 在经典（M-B）统计情况中，对四个允许右矢当中的两个右矢，两个粒子均占据着相同的态. 在这种意义上，费米子最不善于交际，它们相互躲避以确保它们不会处在相同的态；相反，玻色子最善于交际，它们确实喜欢待在相同的态，甚至超过遵守 M-B 统计的经典粒子.

费米子和玻色子之间的差别最明显地显示在低温；一个由玻色子构成的系统，如液体^{4}He，在极低温时呈现出所有粒子都落到相同基态的趋势.* 这被称为**玻色-爱因斯坦凝聚**，是一个没有被费米子构成的系统所共享的特性.

7.3　双电子系统

具体考虑一个双电子系统. 交换算符的本征值一定是-1. 假设使用的基右矢可以用$\mathbf{x}_1$，$\mathbf{x}_2$，m_{s1}和m_{s2}来具体确定，其中m_{s1}和m_{s2}分别是电子 1 和电子 2 的自旋-磁量子数.

我们能用具有$\mathbf{x}_1$，$\mathbf{x}_2$，m_{s1}和m_{s2}的本征左矢把一个双电子系统的波函数表示成一系列态的线性组合

$$\psi=\sum_{m_{s1}}\sum_{m_{s2}}C(m_{s1},m_{s2})\langle\mathbf{x}_1,m_{s1};\mathbf{x}_2,m_{s2}|\alpha\rangle. \tag{7.3.1}$$

如果哈密顿量与$\mathbf{S}_{总}^2$（下脚标表明，该量为总自旋平方. ——译者注）对易，

$$[\mathbf{S}_{总}^2,H]=0, \tag{7.3.2}$$

那时预期能量本征函数是$\mathbf{S}_{总}^2$的一个本征函数，而如果把ψ写成

$$\psi=\phi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\chi, \tag{7.3.3}$$

则自旋波函数χ是下述函数中的一个：

---

* 当液氦被冷却超过临界温度时，它的可视行为是惊人的. 各种各样的录像资料能在网站 http://www.youtube.com/上看到，包括一个经典物理示范的电影，莱特纳（A. Leitner）发布于 1963 年的《液氦 II：超流》. 也可参见网站 http://alfredleitner.com/.

$$\chi(m_{s1},m_{s2})=\begin{cases}\chi_{++}\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-}+\chi_{-+})\\ \chi_{--}\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-}-\chi_{-+})\end{cases}\begin{matrix}\left.\begin{matrix}\\ \\ \\ \end{matrix}\right\}\text{三重态(对称的)}\\ \text{单态(反对称的)},\end{matrix}\tag{7.3.4}$$

其中 χ_{+-} 对应于 $\chi(m_{s1}=1/2,\ m_{s2}=-1/2)$. 注意三重态的自旋波函数都是对称的，这是合理的. 因为阶梯算符 $S_{1-}+S_{2-}$ 与 P_{12} 对易，且在 P_{12} 作用下 $|+\rangle|+\rangle$ 态是偶的.

注意到

$$\langle\mathbf{x}_1,m_{s1};\mathbf{x}_2,m_{s2}|P_{12}|\alpha\rangle=\langle\mathbf{x}_2,m_{s2};\mathbf{x}_1,m_{s1}|\alpha\rangle.\tag{7.3.5}$$

于是费米-狄拉克统计要求

$$\langle\mathbf{x}_1,m_{s1};\mathbf{x}_2,m_{s2}|\alpha\rangle=-\langle\mathbf{x}_2,m_{s2};\mathbf{x}_1,m_{s1}|\alpha\rangle.\tag{7.3.6}$$

很清楚，P_{12} 可被写成

$$P_{12}=P_{12}^{(\text{空间})}P_{12}^{(\text{自旋})}\tag{7.3.7}$$

其中 $P_{12}^{(\text{空间})}$ 只交换位置坐标，而 $P_{12}^{(\text{自旋})}$ 交换自旋态. 有趣的是，可以把 $P_{12}^{(\text{自旋})}$ 写成

$$P_{12}^{(\text{自旋})}=\frac{1}{2}\left(1+\frac{4}{\hbar^2}\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2\right),\tag{7.3.8}$$

这是因为

$$\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2=\begin{cases}\dfrac{\hbar^2}{4} & (\text{三重态})\\ \dfrac{-3\hbar^2}{4} & (\text{单态}).\end{cases}\tag{7.3.9}$$

由 (**7.3.3**) 式可见，令

$$|\alpha\rangle\to P_{12}|\alpha\rangle\tag{7.3.10}$$

等同于

$$\phi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\to\phi(\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_1),\qquad\chi(m_{s1},m_{s2})\to\chi(m_{s2},m_{s1}).\tag{7.3.11}$$

它与 (**7.3.6**) 式一起暗示着如果波函数的空间部分是对称的（反对称的），自旋部分则必须是反对称的（对称的）. 结果，自旋三重态不得不与反对称的空间函数结合，而自旋单态必须与对称的空间函数结合.

波函数的空间部分 $\phi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 提供了通常的概率解释. 在中心位于 $\mathbf{x}_1$ 附近的体积元 d^3x_1 中找到电子 **1**，并在中心位于 $\mathbf{x}_2$ 附近的体积元 d^3x_2 中找到电子 **2** 的概率是

$$|\phi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)|^2d^3x_1d^3x_2.\tag{7.3.12}$$

为了将它的含义看得更清楚，让我们考虑具体的情况，在那里两个电子间的相互作用［例如 $V_{\text{对}}(|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|)$，$\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$］可被忽略. 如果不存在自旋的依赖，则能量本征函数 ψ 的波动方程［见 (**7.1.9**) 式］，

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2+V_{\text{外部}}(\mathbf{x}_1)+V_{\text{外部}}(\mathbf{x}_2)\right]\psi=E\psi,\tag{7.3.13}$$

现在是可分离的. 我们有一个形式为 $\omega_A(\mathbf{x}_1)\omega_B(\mathbf{x}_2)$ 的解乘以自旋函数. 由于没有自旋依赖性，$S_{\text{总}}^2$ 必定（且平庸地）与 H 对易，所以自旋部分必须是一个三重态或一个单态，它们中的每一个态在 $P_{12}^{(\text{自旋})}$ 作用下都具有一定的对称性质. 于是空间的部分就一定能写成一

个 $\omega_A(\mathbf{x}_1)\omega_B(\mathbf{x}_2)$ 和 $\omega_A(\mathbf{x}_2)\omega_B(\mathbf{x}_1)$ 的对称和反对称的组合：

$$\phi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\omega_A(\mathbf{x}_1)\omega_B(\mathbf{x}_2)\pm\omega_A(\mathbf{x}_2)\omega_B(\mathbf{x}_1)], \tag{7.3.14}$$

其中，上面的符号对应自旋单态，下面的符号对应自旋三重态. 在中心位于 $\mathbf{x}_1$ 附近的体积元 d^3x_1 中观测到电子 **1** 和在中心位于 $\mathbf{x}_2$ 附近的体积元 d^3x_2 中观测到电子 **2** 的概率由

$$\frac{1}{2}\{|\omega_A(\mathbf{x}_1)|^2|\omega_B(\mathbf{x}_2)|^2+|\omega_A(\mathbf{x}_2)|^2|\omega_B(\mathbf{x}_1)|^2 \pm 2\mathrm{Re}[\omega_A(\mathbf{x}_1)\omega_B(\mathbf{x}_2)\omega_A^*(\mathbf{x}_2)\omega_B^*(\mathbf{x}_1)]\}d^3x_1d^3x_2 , \tag{7.3.15}$$

给出. 大括号内的最后一项称为**交换密度**.

马上可以看到当电子处于一个自旋三重态时，在空间相同的点找到第二个电子的概率为零. 换句话说，当它们的自旋处于三重态时，电子趋于相互躲避. 相反，当它们的自旋处于单态时，因为交换密度的出现，在空间相同点找到它们的概率加强了.

很清楚，仅当交换密度不可忽略时或函数 ω_A 和函数 ω_B 之间有相当大的重叠度时，全同性的问题是重要的. 为清楚地看到这点，考虑这样的极端情况，其中 $|\omega_A(\mathbf{x})|^2$（其中 $\mathbf{x}$ 可以是 $\mathbf{x}_1$ 或 $\mathbf{x}_2$）仅在区域 A 很大，而 $|\omega_B(\mathbf{x})|^2$ 仅在区域 B 很大，而这两个区域又是远远分开的. 现在，在区域 A 中选取 d^3x_1，在区域 B 中选取 d^3x_2，见图 **7.3**. 那么，唯一重要的项是（**7.3.15**）式中的第一项，

$$|\omega_A(\mathbf{x}_1)|^2|\omega_B(\mathbf{x}_2)|^2. \tag{7.3.16}$$

它无非是所预期的经典粒子的联合概率密度. 在这一点上，可回想一下经典粒子必定是很好定域化的，且全同性问题根本不会产生. 这样，如果区域 A 和 B 不重叠，交换密度项是不重要的. 如果这些电子相距都很远，且重叠可以忽略，就不需要去做反对称化. 这是十分令人满意的. 我们从来没有担忧 **100** 亿个电子的反对称化问题，也没有必要考虑把一个在纽约的电子和一个在北京的电子反对称化.

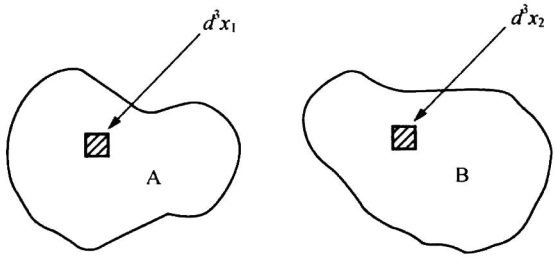


图 7.3　使用两个远离的区域 A 和 B；$|\omega_A(\mathbf{x})|^2$ 在区域 A 很大，而 $|\omega_B(\mathbf{x})|^2$ 在区域 B 很大.

7.4　氦原子

氦原子的研究因为下面几个原因而极其有益. 首先，它是最简单的真实的问题，在那里全同性问题（在 7.3 节曾碰到的）起着一种重要的作用. 其次，尽管它是一个简单的系统，但这个两粒子的薛定谔方程却无法解析地求解；因此，这是一个说明微扰论以及变分法用处的很好的地方.

基本的哈密顿量由

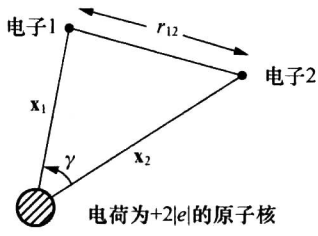


图 7.4 氦原子的示意图

$$H=\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}+\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}} \tag{7.4.1}$$

给出，在那里 $r_1\equiv|\mathbf{x}_1|$，$r_2\equiv|\mathbf{x}_2|$，$r_{12}\equiv|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|$；见图 7.4. 假定 e^2/r_{12} 项不存在. 于是，在全同性问题被忽略的情况下，波函数将会只是把 $Z=1$ 变成 $Z=2$ 的两个氢原子波函数的乘积. 总自旋是一个运动常数，所以自旋态或者是单态或者是三重态. 在其中的一个电子处于基态而另一个处于用 (nlm) 描述的激发态的重要情况中，波函数的空间部分是

$$\phi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{100}(\mathbf{x}_1)\psi_{nlm}(\mathbf{x}_2)\pm\psi_{100}(\mathbf{x}_2)\psi_{nlm}(\mathbf{x}_1)], \tag{7.4.2}$$

其中上面（下面）的符号是对自旋单态（三重态）的. 以后将回到这个激发态的一般形式.

对于基态，需要有一个特殊的处理. 这里，组态由 $(1s)^2$ 描述，即这两个电子都处在 $n=1$，$l=0$ 的态.

那么，空间函数必定是对称的，且只有自旋单态函数是允许的. 所以有

$$\psi_{100}(\mathbf{x}_1)\psi_{100}(\mathbf{x}_2)\chi_{\text{单态}}=\frac{Z^3}{\pi a_0^3}e^{-Z(r_1+r_2)/a_0}\chi_{\text{单态}} \tag{7.4.3}$$

其中 $Z=2$. 不足为奇的是，这个“无微扰”的波函数给出基态能量

$$E=2\times 4\left(-\frac{e^2}{2a_0}\right)=-108.8\text{eV}, \tag{7.4.4}$$

它大约比实验值大 30%.

这正是研究的起点，因为在求得上述（7.4.3）式的形式时完全忽略了（7.4.1）式中描写两个电子间相互作用的最后一项. 一种求得更好能量值问题的处理方法是：把（7.4.3）式作为无微扰波函数和 e^2/r_{12} 作为微扰，应用一级微扰论. 得到

$$\Delta_{(1s)^2}=\left\langle\frac{e^2}{r_{12}}\right\rangle_{(1s)^2}=\iint\frac{Z^6}{\pi^2a_0^6}e^{-2Z(r_1+r_2)/a_0}\frac{e^2}{r_{12}}d^3x_1d^3x_2. \tag{7.4.5}$$

为了算出该式的积分，首先注意

$$\frac{1}{r_{12}}=\frac{1}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\gamma}}=\sum_{l=0}\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}P_l(\cos\gamma), \tag{7.4.6}$$

其中 $r_>$（$r_<$）是 r_1 和 r_2 中较大（较小）的值，γ 是 $\mathbf{x}_1$ 和 $\mathbf{x}_2$ 之间的夹角. 使用球谐函数的加法定理，用 $Y_l^m(\theta_1,\phi_1)$ 和 $Y_l^m(\theta_2,\phi_2)$ 把 $P_l(\cos\gamma)$ 表示出来，则角度积分可以很容易地进行.（例如参见 Arfken 和 Weber（1995）的 12.8 节.）有

$$P_l(\cos\gamma)=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}Y_l^{m*}(\theta_1,\phi_1)Y_l^m(\theta_2,\phi_2). \tag{7.4.7}$$

此时角积分是平凡的

$$\int Y_l^m(\theta_i,\phi_i)d\Omega_i=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}(4\pi)\delta_{l0}\delta_{m0}. \tag{7.4.8}$$

径向积分是基本的（但包括繁琐的代数！）；它导致

$$\int_0^\infty\left[\int_0^{r_1}\frac{1}{r_1}e^{-(2Z/a_0)(r_1+r_2)}r_2^2dr_2+\int_{r_1}^\infty\frac{1}{r_2}e^{-(2Z/a_0)(r_1+r_2)}r_2^2dr_2\right]r_1^2dr_1$$

$$= \frac{5}{128}\frac{a_0^5}{Z^5}. \tag{7.4.9}$$

把所有的这些结果放在一起，有（对 $Z=2$）

$$\Delta_{(1s)^2} = \left(\frac{Z^6 e^2}{\pi^2 a_0^6}\right) 4\pi (\sqrt{4\pi})^2 \left(\frac{5}{128}\right)\left(\frac{a_0^5}{Z^5}\right) = \left(\frac{5}{2}\right)\left(\frac{e^2}{2a_0}\right). \tag{7.4.10}$$

把这个能量移动加到（7.4.4）式，有

$$E_{\text{计算}} = \left(-8+\frac{5}{2}\right)\left(\frac{e^2}{2a_0}\right) \simeq -74.8\text{eV}. \tag{7.4.11}$$

这个结果将与实验结果

$$E_{\text{实验}} = -78.8\text{eV} \tag{7.4.12}$$

相比较.

结果并不坏，但我们能做得更好！我们建议采用变分法，用 Z，我们称其为 $Z_{\text{有效}}$，作为一个变分参数，这种选择的物理原因是被其中之一的电子看到的有效 Z 小于 2，因为在原点的 2 个单位的正电荷（见图 7.4）被另一个电子的负电荷云所“屏蔽”；换句话说，这个另外的的电子趋于中和位于中心的氦原子核的正电荷. 对于归一化的试探波函数，用

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \tilde{0} \rangle = \left(\frac{Z_{\text{有效}}^3}{\pi a_0^3}\right) e^{-Z_{\text{有效}}(r_1+r_2)/a_0}. \tag{7.4.13}$$

由此可得

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \left\langle \tilde{0} \left| \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} \right| \tilde{0} \right\rangle - \left\langle \tilde{0} \left| \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{Ze^2}{r_2} \right| \tilde{0} \right\rangle + \left\langle \tilde{0} \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \tilde{0} \right\rangle \\ &= \left(2\frac{Z_{\text{有效}}^2}{2} - 2ZZ_{\text{有效}} + \frac{5}{8}Z_{\text{有效}}\right)\left(\frac{e^2}{a_0}\right). \end{aligned} \tag{7.4.14}$$

很容易看到 $\bar{H}$ 的极小值处于

$$Z_{\text{有效}} = 2 - \frac{5}{16} = 1.6875. \tag{7.4.15}$$

如所预期，此数小于 2. 使用这个 $Z_{\text{有效}}$ 值，得到

$$E_{\text{计算}} = -77.5\text{eV}, \tag{7.4.16}$$

考虑到试探波函数的粗糙度，这个数值已经非常接近实验值了.

历史上，这个成果被认为是薛定谔波动力学走对了路的最早的信号之一. 我们不能通过纯代数（算符）的方法得到这样的数字. 氦的计算最初是由翁泽尔德（A. Unsöld）在 1927 年做的.*

现在简明扼要地考虑激发态. 从阐明全同性引起量子力学效应的角度上看，这更有兴趣. 仅仅考虑 $(1s)(nl)$，把这个态的能量写为

$$E = E_{100} + E_{nlm} + \Delta E. \tag{7.4.17}$$

在一级微扰论中，ΔE 是通过计算 e^2/r_{12} 的期待值得到的. 把它写为

$$\left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle = I \pm J. \tag{7.4.18}$$

其中 I 和 J 被分别称为直接积分和交换积分，它们由

---

* A. Unsöld, *Ann. Phys.* **82** (1927) 355.

$$I=\int d^3x_1\int d^3x_2\,|\psi_{100}(\mathbf{x}_1)|^2\,|\psi_{nlm}(\mathbf{x}_2)|^2\,\frac{e^2}{r_{12}}. \tag{7.4.19a}$$

$$J=\int d^3x_1\int d^3x_2\,\psi_{100}(\mathbf{x}_1)\psi_{nlm}(\mathbf{x}_2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\psi^*_{100}(\mathbf{x}_2)\psi^*_{nlm}(\mathbf{x}_1). \tag{7.4.19b}$$

给出. 在（7.4.18）式中，上面的（下面的）符号对应于自旋单态（三重态）. 显然，I 是正的，也可以证明 J 是正的. 所以最后的结果是这样的：对相同的组态，自旋单态处于较高的位置，如图 **7.5** 所示.

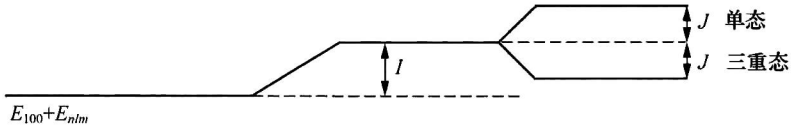


图 7.5 氦原子 $(1s)(nl)$ 态能级劈裂的示意图

它的物理解释如下：在自旋单态情况，空间函数是对称的，这两个电子有相互靠拢的趋势. 因此，静电排斥的效应就更厉害，于是就导致了较高的能量. 在三重态情况，空间函数是反对称的，这两个电子趋于相互避开. 自旋单态的氦被称为**仲氦**，而自旋三重态的氦被称为**正氦**. 每个组态都劈裂成仲态和正态，且仲态处于更高的位置. 对基态，只有仲氦是可能的. 氦原子的能级示意图见图 **7.6**.

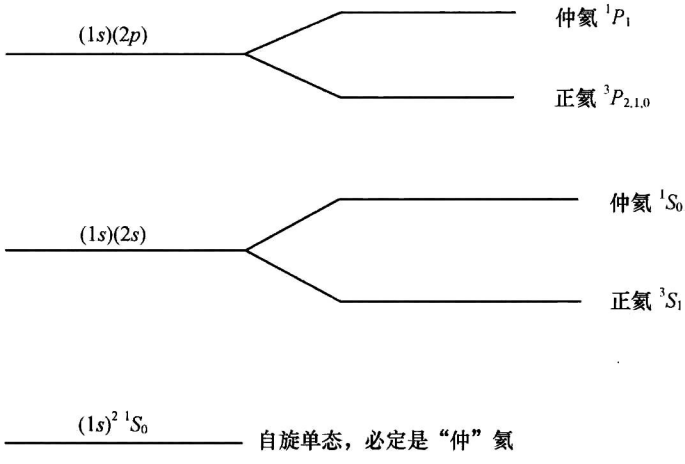


图 7.6 氦原子的低位组态能级示意图

非常重要的是回顾一下，因为势只是由三个库仑项构成的，故原始哈密顿量是自旋无关的. 不存在任何 $\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$ 项. 然而却存在一个自旋相关的效应——具有平行自旋的两个电子有较低的能量——它是由费米-狄拉克统计引起的.

我们把氦原子能级自旋依赖性明确的解释归功于海森伯. 铁磁性的物理根源——延伸到微观距离的电子自旋的整齐排列——被认为本质上是一样的，但铁磁体的性质很难从第一原理做定量计算.

7.5 多粒子态

我们的形式体系能被扩展到一个由多个全同粒子组成的系统. 回顾（7.1.13）式，定义

$$P_{ij}|k'\rangle|k''\rangle\cdots|k^i\rangle|k^{i+1}\rangle\cdots|k^j\rangle\cdots = |k'\rangle|k''\rangle\cdots|k^j\rangle|k^{i+1}\rangle\cdots|k^i\rangle\cdots. \tag{7.5.1}$$

显然，正像以前一样

$$P_{ij}^2 = 1, \tag{7.5.2}$$

因此所允许的 P_{ij} 的本征值是 $+1$ 和 -1. 然而值得注意的是，一般说来，

$$[P_{ij}, P_{kl}] \neq 0. \tag{7.5.3}$$

很值得明显地求解三个全同粒子系统的问题. 首先存在 $3! = 6$ 种形式为

$$|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle \tag{7.5.4}$$

的可能右矢，其中的 k',k''和 k'''是各不相同的. 这样就存在六重交换简并. 但是如果我们坚持态是全对称的或全反对称的，则对每个情况只能形成一种线性组合. 具体地说，有

$$\begin{aligned}|k'k''k'''\rangle_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{6}}\{&|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle \pm |k''\rangle|k'\rangle|k'''\rangle \\ &+|k''\rangle|k'''\rangle|k'\rangle \pm |k'''\rangle|k''\rangle|k'\rangle \\ &+|k'''\rangle|k'\rangle|k''\rangle \pm |k'\rangle|k'''\rangle|k''\rangle\}\end{aligned} \tag{7.5.5}$$

它们都是 P_{12}，P_{23}，P_{13}的共同本征右矢. 我们说过一共存在六个独立的态右矢. 因而可知还存在四个独立的右矢，它们既不是全对称的也不是全反对称的. 通过定义

$$P_{123}(|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle) = |k''\rangle|k'''\rangle|k'\rangle \tag{7.5.6}$$

引入 P_{123}算符. 注意 $P_{123} = P_{12}P_{13}$，因为

$$P_{12}P_{13}(|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle) = P_{12}(|k'''\rangle|k''\rangle|k'\rangle) = |k''\rangle|k'''\rangle|k'\rangle. \tag{7.5.7}$$

在写出（7.5.5）式时，假定 k'，k''，k'''是各不相同的. 如果三个指标中的两个一样，就不可能有一个全反对称的态. 而全对称的态为

$$|k'k'k''\rangle_{+} = \frac{1}{\sqrt{3}}(|k'\rangle|k'\rangle|k''\rangle + |k'\rangle|k''\rangle|k'\rangle + |k''\rangle|k'\rangle|k'\rangle), \tag{7.5.8}$$

其中归一化因子被理解为 $\sqrt{2!/3!}$. 在更普遍的形式中，归一化因子为

$$\sqrt{\frac{N_1!N_2!\cdots N_n!}{N!}}, \tag{7.5.9}$$

其中 N 是总粒子数，而 N_i 是 $|k^{(i)}\rangle$ 出现的次数.

二次量子化

一个追踪多粒子态的不同方法，实际上开始为量子场论奠定基础，并重新审视我们定义态矢量的方式. 这一方法被称为**二次量子化**.*

把一个多粒子态矢量定义为

$$|n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots\rangle, \tag{7.5.10}$$

其中 n_i 规定了具有某些算符本征值 k_i 的粒子数. 尽管我们把它作为一个完全合理的态矢量的命名法，但它是新的一类矢量空间中的一员，该空间称为“福克空间”，在此空间中需要建立必要的置换对称性.

下面要谨慎当心. 对于态矢量的福克空间（或“占有数”空间）记号自身做了一个重

---

* 二次量子化的术语显然是在早年企图把量子力学扩展到量子场论时创造出来的. 这个想法是把波函数转换成算符，它们转而服从其自身的正则量子化规则. 因此，量子化“第二”次被强迫进行了. 例如，参见 Heitler (1954) 书中的第 III. 12. 1 节.

要的假设，即确实存在一组无相互作用态的基．其实，粒子间的相互作用原则上会影响它们的基本性质．从这个假设出发，我们是否能建立一个自身能精确地描述自然的自洽的理论，只能通过实验来检验．参见 Landau（1996）和 Merzbacher（1998）的书．然而，将把这个问题放在一边，全力向前推进．

现在使用在福克空间的态，建立一个多粒子系统理论的框架．通过认识 Fock 空间态的两种特殊情况，开始这项工作．其中第一种情况是

$$|0,0,\cdots,0,\cdots\rangle \equiv |\mathbf{0}\rangle, \tag{7.5.11}$$

在那里任何一个单粒子态上都没有粒子．这个态称之为“真空”，并像通常一样归一化到1．第二种特殊情况是

$$|0,0,\cdots,n_i=1,\cdots\rangle \equiv |k_i\rangle, \tag{7.5.12}$$

它是这样的一个态，其中恰好只有处于本征值 k_i 态的一个粒子．当然，这正是在本章之前一直主导我们的量子力学讨论的单粒子态．

现在需要学会如何构建多粒子态，然后确认这个构建过程遵从交换对称性．在明确认同在2.3节第一次遇到的产生和湮灭算符的基础上，我们定义一个“场算符” $a_i^\dagger$，它使本征值为 k_i 的态上的粒子数增加了一个，即

$$a_i^\dagger |n_1,n_2,\cdots,n_i,\cdots\rangle \propto |n_1,n_2,\cdots,n_i+1,\cdots\rangle, \tag{7.5.13}$$

其中的比例常数稍后将使用归一化准则确定．假设粒子产生算符 $a_i^\dagger$ 作用于真空产生了一个正确归一化了的单粒子态，即

$$a_i^\dagger |\mathbf{0}\rangle = |k_i\rangle, \tag{7.5.14}$$

它使我们能够写出

$$\begin{aligned} 1 = \langle k_i|k_i\rangle &= [\langle \mathbf{0}|a_i][a_i^\dagger|\mathbf{0}\rangle] \\ &= \langle \mathbf{0}|[a_i a_i^\dagger|\mathbf{0}\rangle] = \langle \mathbf{0}|a_i|k_i\rangle, \end{aligned} \tag{7.5.15}$$

它意味着

$$a_i|k_i\rangle = |\mathbf{0}\rangle \tag{7.5.16}$$

所以 a_i 起到了一个粒子湮灭算符的作用．可用下述一些假定总结一下粒子湮灭算符：

$$a_i|n_1,n_2,\cdots,n_i,\cdots\rangle \propto |n_1,n_2,\cdots,n_i-1\cdots\rangle \tag{7.5.17}$$

$$a_i|\mathbf{0}\rangle = 0 \tag{7.5.18}$$

$$a_i|k_j\rangle = 0 \quad \text{如果 } i\neq j, \tag{7.5.19}$$

在那里，一个简洁的记号可把（7.5.16）和（7.5.19）结合成

$$a_i|k_j\rangle = \delta_{ij}|\mathbf{0}\rangle. \tag{7.5.20}$$

要完全定义场算符 a_i，这些已经是足够的假设了，但实际上还缺少交换对称性的纳入．

置换两个粒子，即一个换另一个，的作用最容易通过下述操作看到：把“第一个”粒子放在态 $|k_i\rangle$ 上，接着把“第二个”粒子放在态 $|k_j\rangle$ 上，然后与我们以相反的顺序占据这些态时所发生的情况相比较．即，对一个两粒子态我们预期

$$a_i^\dagger a_j^\dagger|\mathbf{0}\rangle = \pm a_j^\dagger a_i^\dagger|\mathbf{0}\rangle, \tag{7.5.21}$$

其中，+(−) 号是对玻色子（费米子）的．把这一相同的逻辑应用于多粒子系统的粒子交换，得到

$$a_i^\dagger a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i^\dagger = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \qquad \text{玻色子} \tag{7.5.22a}$$

$$a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \qquad \text{费米子} \tag{7.5.22b}$$

其中，使用了“反对易子” $\{A,B\} \equiv AB+BA$．对这些方程简单地取共轭，得到

$$[a_i, a_j] = 0 \qquad \text{玻色子} \tag{7.5.23a}$$

$$\{a_i, a_j\} = 0 \qquad \text{费米子} \tag{7.5.23b}$$

注意，泡利不相容原理被自动地构建在我们的形式体系中，因为（7.5.22b）式暗示对某个单粒子态$|k_i\rangle$，有 $a_i^\dagger a_i^\dagger = 0$.

现在，a_i 和 $a_j^\dagger$ 的对易关系是什么样的呢？定义一个“粒子数算符” $N_i = a_i^\dagger a_i$，它可以对处于单粒子态$|k_i\rangle$ 的粒子数进行计数. 2.3 节中的经验表明：如果有 $[a_i, a_i^\dagger] = 1$，这将是可能的. 事实上，正是用这种方法，通过用反对易子替换对易子，就可以构建一个对玻色子和费米子都适用的自洽的图像. 其完整的代数被汇总在表 7.1 中. 对玻色子和费米子这二者，可以定义算符

$$N = \sum_i a_i^\dagger a_i, \tag{7.5.24}$$

它计数全同粒子的总数.（见本章末的习题 7.7.）

表 7.1　在二次量子化中全同粒子的代数

玻色子	费米子
$a_i^\dagger a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i^\dagger = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$	$a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0$
$a_i a_j - a_j a_i = [a_i, a_j] = 0$	$a_i a_j + a_j a_i = \{a_i, a_j\} = 0$
$a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i = [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$	$a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}$

我们用了一个非常特别的方式给出了表 7.1 中的代数，有点与本书的基调相反. 事实上，在这方面我们或许能做得更好一些，例如，通过假定某些物理量，如总粒子数，在一个从单粒子态$|k_i\rangle$ 到不同的态$|l_j\rangle$ 的基变换下不变，而这种基变换是通过幺正变换联系起来.* 然而，在没有发展相对论量子场论的情况下，做一个完全自洽的处理以使特殊的假设做到极小化是不可能的，而这不是我们在这里的使命.

二次量子化中的动力学变量

如何构建二次量子化中比简单的粒子计数功能更强的算符呢？答案很简单，但用目前的方法仍然必须再一次做一些特殊的假设.

假定单粒子态$|k_i\rangle$ 是某个“可加的”单粒子算符 K 的本征态. 例子可能包括动量和动能. 在某个多粒子态

$$|\Psi\rangle = |n_1, n_2, \cdots n_i, \cdots\rangle, \tag{7.5.25}$$

预期多粒子算符$\mathcal{K}$的本征值是$\sum_i n_i k_i$. 如果我们写出

$$\mathcal{K} = \sum_i k_i N_i = \sum_i k_i a_i^\dagger a_i, \tag{7.5.26}$$

这是很容易完成的.

现在假定确定单粒子态的基与最容易用的基是不同的. 比如，我们毕竟习惯使用坐标基中的动量算符. 如果使用完备性写成

$$|k_i\rangle = \sum_j |l_j\rangle\langle l_j|k_i\rangle, \tag{7.5.27}$$

则假定

---

* 这种方法，有时称之为幺正对称性原理，是被 Merzbacher（1998）发现的.

$$a_i^\dagger = \sum_j b_j^\dagger \langle l_j | k_i \rangle \tag{7.5.28a}$$

是有意义的，它隐含着

$$a_i = \sum_j \langle k_i | l_j \rangle b_j , \tag{7.5.28b}$$

其中算符 $b_j^\dagger$ 和 b_j 在单粒子态 $|l_j\rangle$ 上产生和湮灭粒子. 有了这些规定，用（7.5.28a）式作用于真空态（7.5.11）式即可得到（7.5.27）式.

方程（7.5.28）给出：针对动力学单粒子算符，需要对基做改变. 有

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &= \sum_i k_i \sum_{mn} b_m^\dagger \langle l_m | k_i \rangle \langle k_i | l_n \rangle b_n \\ &= \sum_{mn} b_m^\dagger b_n \sum_i \langle l_m | k_i \rangle k_i \langle k_i | l_n \rangle \\ &= \sum_{mn} b_m^\dagger b_n \langle l_n | \Big[K \sum_i | k_i \rangle \langle k_i | \Big] | l_n \rangle \\ \text{或} \qquad \mathcal{K} &= \sum_{mn} b_m^\dagger b_n \langle l_m | K | l_n \rangle . \end{aligned} \tag{7.5.29}$$

这个普遍的形式对写出任意可加单粒子算符的二次量子化版本都是适用的. 其例子不仅包括动量和动能，也包括单独作用于每个粒子的任意“外部”势能函数. 最重要的是粒子彼此不发生相互作用. 在玻色子的情况，可发现只要温度足够的低，所有的粒子基本上都处于这样一个势阱的最低能级.（实验上，这个现象称之为玻色-爱因斯坦凝聚.）

然而，费米子将有不同行为. 泡利不相容原理将强使粒子越来越多地填充势阱中的更高能级. 对于一个有大量费米子的系统，基态总能量可能是巨大的. 这个最高填充的能级（称为“费米能量”）可能轻易地远大于热能 $\sim kT$. 一个经典的例子是白矮星，一个基本上由碳原子组成的非常致密的物体. 作为一个很好的近似，白矮星中的电子束缚在一个势阱里. 费米能级非常高，其能量远大于几千万开尔文度（10^7 K）的热能.

然而，多粒子系统显现出一种新的情况，即粒子间实际上不可避免地有相互作用的可能性. 再次假定一个可加的算符，即把各个两粒子相互作用独立地相加的算符. 设对称实矩阵 V_{ij} 确定处于单粒子态 $|k_i\rangle$ 和 $|k_j\rangle$ 的两个粒子之间相互作用的本征值. 那么，这个算符的二次量子化版本变成

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} N_i N_j + \frac{1}{2} \sum_i V_{ii} N_i (N_i - 1). \tag{7.5.30}$$

该式的第一项将所有两粒子相互作用加在一起，其中 1/2 的因子是必需的，因为这个形式对于相互作用对的数目做了双重计数. 第二项计入所有处于相同态的粒子间的“自相互作用”；每次从 n 个东西中取出两个，有 $n(n-1)/2$ 种方法. 要求 V_{ij} 是实的确保了 $\mathcal{V}$ 是厄米的.

（7.5.30）式中含有 N_i^2 的那些自能项的部分精确地描述了第一项求和中通过 $i \neq j$ 已除去的那些项. 因此，能把它更为简洁地整合成

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} (N_i N_j - N_i \delta_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} \Pi_{ij} , \tag{7.5.31}$$

其中，$\Pi_{ij} \equiv N_i N_j - N_i \delta_{ij}$ 称为对分布算符. 进一步使用表 7.1 写出

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} &= a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij} \\ &= a_i^\dagger (\delta_{ij} \pm a_j^\dagger a_i) a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij} \\ &= \pm a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j \end{aligned}$$

或　　$$\Pi_{ij}=(\pm)(\pm)a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \tag{7.5.32}$$

其中使用了（7.5.23）式反转最后两个因子的顺序. 这样能把（7.5.30）式重写为

$$\mathcal{V}=\frac{1}{2}\sum_{ij}V_{ij}a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i. \tag{7.5.33}$$

这个产生和湮灭算符的序列——第一个粒子被湮灭，然后另一个粒子被湮灭，接着它们按相反的顺序被产生——被称为“正规序”. 注意，从（7.5.22b）或（7.5.23b）式明显地看到对费米子来说，V 的对角元没有贡献.

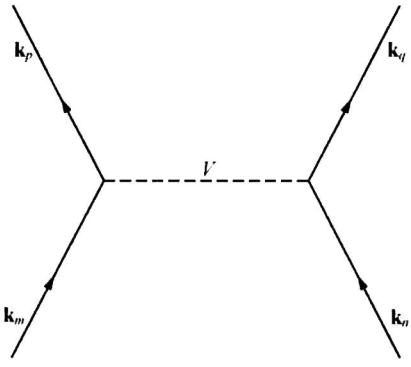


图 7.7　“动量空间矩阵元”$\langle mn|V|pq\rangle$ 的图形表示

可以用（7.5.28）式在不同的基中重写（7.5.33）式. 有

$$\mathcal{V}=\frac{1}{2}\sum_{mnpq}\langle mn|V|pq\rangle b_m^\dagger b_n^\dagger b_q b_p, \tag{7.5.34}$$

其中

$$\langle mn|V|pq\rangle\equiv\sum_{ij}V_{ij}\langle l_m|k_i\rangle\langle k_i|l_p\rangle\langle l_n|k_j\rangle\langle k_j|l_q\rangle. \tag{7.5.35}$$

这个结果使我们对这种形式体系的物理意义有了一些深入的了解. 例如，假定$|k_i\rangle$ 是坐标基的态$|\mathbf{x}\rangle$，而$|l_i\rangle$ 是动量基的态$|\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}\rangle$. 那么 V_{ij} 将表示一个位于 $\mathbf{x}$ 而另一个位于 $\mathbf{x}'$ 的两个粒子间的相互作用. 一个自然的例子是一群粒子，其中每个粒子具有电荷 $q=-e$，在这个情况下可写出，

$$V_{ij}\to V(\mathbf{x},\mathbf{x}')=\frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \tag{7.5.36}$$

和　　$$\sum_{ij}\to\int d^3x\int d^3x'. \tag{7.5.37}$$

但粒子间的任何相互作用都将用相同的方法处理. 因此，物理量$\langle mn|V|pq\rangle$ 代表一个动量空间版的相互作用，这里 m 和 p 是对一个粒子，n 和 q 是对另一个粒子.（很容易证明 $\langle mn|V|pq\rangle=\langle nm|V|qp\rangle$，但只在一边进行交换而在另一边不进行交换，其结果将依赖于粒子是玻色子还是费米子.）（7.5.35）式中的四个内积导致了一个因子

$$e^{i(\mathbf{k}_m-\mathbf{k}_p)\cdot\mathbf{x}+i(\mathbf{k}_n-\mathbf{k}_q)\cdot\mathbf{x}'},$$

对（7.5.36）式积分之后，它导致了一个动量守恒的 δ 函数. 人们可以用图 7.7 所示的图形表示两粒子相互作用.

很清楚，我们正以自己的方式发展一个非相对论版的量子场论. 作为一个具体的例子，将马上处理量子力学版的无相互作用电磁场. 然而，将不会延伸到超越这一点的普遍

的情况，因为它超出了本书的范围，而在一些其他几本书中的任何一本都得到了很好的处理. 例如可参见 Merzbacher (1998)，Landau (1996) 及 Fetter 和 Walecka (2003a).

例：简并电子气

对本节讨论过的原理，一个极好例子是简并电子气. 这是通过彼此之间的库仑斥力相互作用的大量的电子，束缚在一些带正电的背景介质中. 物理例子包括高温等离子体，甚至在一定的近似下的大部分金属.

这个问题在 Fetter 和 Walecka (2003a) 专著的第1章第3节已经彻底地处理过. 在这里，提出这个问题并概述它的解，有兴趣的读者可参见原始文献以充实细节.

现在的任务是找到 N 个电子系统哈密顿量

$$H = H_{\text{电子}} + H_{\text{背景}} + H_{\text{电子-背景}} \tag{7.5.38}$$

的本征值. 电子本身之间按照

$$H_{\text{电子}} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}e^2 \sum_i \sum_{j\neq i} \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|}}{|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|} \tag{7.5.39}$$

相互作用，这里使用了一个“屏蔽的”库仑势，但在结束计算之前将令 $\mu\to 0$. 正电背景的能量是

$$H_{\text{背景}} = \frac{1}{2}e^2 \int d^3x' \int d^3x'' \rho(\mathbf{x}')\rho(\mathbf{x}'') \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}'-\mathbf{x}''|}}{|\mathbf{x}'-\mathbf{x}''|}, \tag{7.5.40}$$

其中 $\rho(\mathbf{x})$ 是在背景粒子处的粒子数密度. 我们将假定，对一个体积为 $V=L^3$ 的系统，有一个 $\rho(\mathbf{x}) = N/V$ 的均匀背景. 那么，转换成变量 $\mathbf{x}\equiv\mathbf{x}'-\mathbf{x}''$，则 (7.5.40) 式变成

$$H_{\text{背景}} = \frac{1}{2}e^2\left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d^3x' \int d^3x \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|} = \frac{1}{2}e^2 \frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}. \tag{7.5.41}$$

这样，$H_{\text{背景}}$ 对能量的贡献只是一个可加的常数. 正如马上就要看到的，当 $\mu\to 0$ 时这个常数无限增长的这一事实将不是一个问题. 电子与这个常数背景的相互作用是

$$\begin{aligned} H_{\text{电子-背景}} &= -e^2 \sum_i \int d^3x \rho(\mathbf{x}) \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|} \\ &= -e^2 \frac{N}{V} \sum_i \int d^3x \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|} = -e^2 \frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}. \end{aligned} \tag{7.5.42}$$

因此，(7.5.38) 式变成

$$H = -\frac{1}{2}e^2 \frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} + \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}e^2 \sum_i \sum_{j\neq i} \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|}}{|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|}. \tag{7.5.43}$$

这个方程中的第一项只是一个数. 第二项是个单体算符，我们将用动量空间二次量子化的算符简单地表示. 第三项是一个两体算符，它将需要更多一些的工作才能把它写成二次量子化的形式.

把 (7.5.43) 式中的动能项写出来就是要重写 (7.5.29) 式，那里的 K 就是动量算符 $\mathbf{p}$，而 $|l_n\rangle$ 就是动量基的态. 单粒子态用 $i=\{\mathbf{k},\lambda\}$ 描述，其中 $\lambda=\pm$ 表示电子自旋. 我们知道

$$\langle \mathbf{k}'\lambda'|\mathbf{p}|\mathbf{k}\lambda\rangle = \hbar\mathbf{k}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}, \tag{7.5.44}$$

所以有

$$\sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} \Rightarrow \mathcal{K} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} a^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda}. \tag{7.5.45}$$

现在，我们使用（7.5.34）式和（7.5.35）式把（7.5.43）式中势能项写成二次量子化形式. 注意到（7.5.36）式和（7.5.37）式. 有

$$\mathcal{V}=\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}_1\lambda_1}\sum_{\mathbf{k}_2\lambda_2}\sum_{\mathbf{k}_3\lambda_3}\sum_{\mathbf{k}_4\lambda_4}\langle\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2|V|\mathbf{k}_3\lambda_3\mathbf{k}_4\lambda_4\rangle a^{\dagger}_{\mathbf{k}_1\lambda_1}a^{\dagger}_{\mathbf{k}_2\lambda_2}a_{\mathbf{k}_4\lambda_4}a_{\mathbf{k}_3\lambda_3}, \tag{7.5.46}$$

其中

$$\begin{aligned}
&\langle\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2|V|\mathbf{k}_4\lambda_4\mathbf{k}_3\lambda_3\rangle\\
&=\int d^3x'\int d^3x''V(\mathbf{x}',\mathbf{x}'')\langle\mathbf{k}_1\lambda_1|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\mathbf{k}_3\lambda_3\rangle\langle\mathbf{k}_2\lambda_2|\mathbf{x}''\rangle\langle\mathbf{x}''|\mathbf{k}_4\lambda_4\rangle\\
&=\frac{e^2}{V^2}\int d^3x'\int d^3x''\frac{e^{-\mu|\mathbf{x}'-\mathbf{x}''|}}{|\mathbf{x}'-\mathbf{x}''|}e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x}'}\chi^{\dagger}_{\lambda_1}e^{i\mathbf{k}_3\cdot\mathbf{x}'}\chi_{\lambda_3}e^{-i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{x}''}\chi^{\dagger}_{\lambda_2}e^{i\mathbf{k}_4\cdot\mathbf{x}''}\chi_{\lambda_4}\\
&=\frac{e^2}{V^2}\int d^3x\int d^3y\,\frac{e^{-\mu y}}{y}e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x}'}\delta_{\lambda_1\lambda_3}d^{i\mathbf{k}_3\cdot\mathbf{x}'}e^{-i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{x}''}\delta_{\lambda_2\lambda_4}e^{i\mathbf{k}_4\cdot\mathbf{x}''}\\
&=\frac{e^2}{V^2}\delta_{\lambda_1\lambda_4}\delta_{\lambda_2\lambda_3}\int d^3xe^{-i(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{x}}\int d^3y\,\frac{e^{-\mu y}}{y}e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{y}}\\
&=\frac{e^2}{V}\delta_{\lambda_1\lambda_4}\delta_{\lambda_2\lambda_3}\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}\int d^3y\,\frac{e^{-\mu y}}{y}e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{y}}
\end{aligned}\tag{7.5.47}$$

在那里使用了变量替换 $\mathbf{x}=\mathbf{x}''$ 和 $\mathbf{y}=\mathbf{x}'-\mathbf{x}''$. 最后定义动量转移 $\mathbf{q}\equiv\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3$ 并且发现

$$\langle\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2|V|\mathbf{k}_3\lambda_3\mathbf{k}_4\lambda_4\rangle=\frac{e^2}{V}\delta_{\lambda_1\lambda_4}\delta_{\lambda_2\lambda_3}\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}\frac{4\pi}{\mathbf{q}^2+\mu^2}. \tag{7.5.48}$$

自旋中的克罗内克 δ 符号确保了自旋不会被这种相互作用翻转，这是我们所期待的，因为相互作用是自旋无关的. 在波数中的克罗内克 δ 确保了动量守恒. 这样，使用自旋守恒的克罗内克 δ 约化求和之后，（7.5.46）式就变成

$$\mathcal{V}=\frac{e^2}{2V}\sum_{\mathbf{k}_1\lambda_1}\sum_{\mathbf{k}_2\lambda_2}\sum_{\mathbf{k}_3}\sum_{\mathbf{k}_4}\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}\frac{4\pi}{\mathbf{q}^2+\mu^2}a^{\dagger}_{\mathbf{k}_1\lambda_1}a^{\dagger}_{\mathbf{k}_2\lambda_2}a_{\mathbf{k}_4\lambda_2}a_{\mathbf{k}_3\lambda_1}. \tag{7.5.49}$$

如果最初重新定义 $\mathbf{k}_3\equiv\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{k}_4\equiv\mathbf{p}$，则（7.5.49）式的一个重要特性就更明显了. 那时，（7.5.49）式中 $\mathbf{q}=0$ 的项变成

$$\begin{aligned}
\frac{e^2}{2V}\sum_{\mathbf{kp}}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{\mu^2}a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda_1}a^{\dagger}_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{k}\lambda_1}&=\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}\sum_{\mathbf{k}\lambda_1}\sum_{\mathbf{p}\lambda_2}a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda_1}a_{\mathbf{k}\lambda_1}(a^{\dagger}_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{p}\lambda_2}-\delta_{\mathbf{kp}}\delta_{\lambda_1\lambda_2})\\
&=\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}(N^2-N),
\end{aligned}\tag{7.5.50}$$

其中用到了费米子的反对易关系和粒子数算符的定义. 这个关系式中的第一项正好抵销了（7.5.43）式中的第一项. 第二项表示每粒子的能量为 $-2\pi e^2/\mu^2V$，但这个能量在 $V=L^3\to\infty$ 极限同时一直保持 $\mu\gg1/L$ 时将为零. 这样 $\mathbf{q}=0$ 的项没有贡献，它们抵消了哈密顿量中迅速发散的项. 的确，这最终允许我们设置屏蔽参数 $\mu=0$，并且把二次量子化的哈密顿量写成

$$H=H_0+H_1, \tag{7.5.51a}$$

其中

$$H_0=\sum_{\mathbf{k}\lambda}\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda} \tag{7.5.51b}$$

和

$$H_1=\frac{e^2}{2V}{\sum_{\mathbf{kpq}}}'\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2}a^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a^{\dagger}_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2}a_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{k}\lambda_1}, \tag{7.5.51c}$$

其中，记号 $\sum'$ 表示 $\mathbf{q}=0$ 的项被忽略掉了. 注意，在我们取的极限下，隐含地假设了一个

有限的密度 $n=N/V$.

寻找（7.5.51）式的本征值是一个困难的问题，尽管可能有解. 我们的方法将是首先通过把第二项看作是对于第一项的微扰，找到基态的能量. 尽管对为什么这应是一个很好的近似可以给出一些合理的论据（见 Fetter 和 Walecka 的专著），那些论据仅在一个特定的密度区域成立. 幸运的是那个密度区域与物理系统，如金属，有关，所以我们的方法的确有实用价值.

现在是引入一些标度变量的好时刻. 密度由原子间的间隔 r_0 确定，即

$$n=\frac{N}{V}=\frac{4\pi}{3}r_0^3, \tag{7.5.52}$$

（译者注：该式明显有误. 量纲显然不对. 第二个等式右边的结果应该取逆，即 $n=\frac{N}{V}=\left[\left(\frac{4\pi}{3}\right)r_0^3\right]^{-1}$. （7.5.54）式可以作为佐证.）而 r_0 的自然标度是波尔半径（3.7.55）式，即 $a_0=\hbar^2/me^2$. 我们定义一个无量纲距离标度 $r_s=r_0/a_0$. 我们的基态能量计算将是 r_s 的函数.

作为对算符 H_0 在基态上的期待值 $E^{(0)}$ 计算的介绍，将讨论费米能量的概念.（回想在464页上的讨论.）因为泡利不相容原理，电子将填充空着的能级直到某极大的波数 k_F. 能通过把 $k\leqslant k_F$ 的态加在一起，将 k_F 与总电子数关联起来：

$$\begin{aligned}N&=\sum_{\mathbf{k}\lambda}\theta(k-k_F)\\&\to\frac{V}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda}\int d^3k\,\theta(k_F-k)=\frac{V}{3\pi^2}k_F^3,\end{aligned} \tag{7.5.53}$$

其中在 $x>0$ 的区域 $\theta(x)=0$，否则为 1. 这暗示着

$$k_F=\left(\frac{3\pi^2N}{V}\right)^{1/3}=\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{1}{r_0}, \tag{7.5.54}$$

它表明 k_F 大约与粒子之间间隔倒数一样大.

现在使用相同的方法计算无微扰的能量 $E^{(0)}$. 把基态记为 $|F\rangle$，有

$$\begin{aligned}E^{(0)}&=\langle F|H_0|F\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\mathbf{k}\lambda}k^2\theta(k-k_F)\\&\to\frac{\hbar^2}{2m}\frac{V}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda}\int d^3k\,k^2\theta(k_F-k)=\frac{e^2}{2a_0}N\,\frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{1}{r_s^2}.\end{aligned} \tag{7.5.55}$$

注意，$e^2/2a_0\approx 13.6\text{eV}$ 是氢原子基态的能量.

对基态能量的一级修正是

$$\begin{aligned}E^{(1)}&=\langle F|H_1|F\rangle\\&=\frac{e^2}{2V}\sum_{\mathbf{kpq}}{}'\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2}\langle F|a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2}a_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{k}\lambda_1}|F\rangle.\end{aligned} \tag{7.5.56}$$

求和很容易约简，因为 $|F\rangle$ 是一个占据数不是 0 就是 1 的单粒子态的集合.（7.5.56）式中的矩阵元非零的唯一方法是湮灭和产生算符是否恰当地配成了对. 因为在求和中 $\mathbf{q}\neq 0$，唯一的算符配对方法是令 $\{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2\}=\{\mathbf{k},\lambda_1\}$ 和 $\{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1\}=\{\mathbf{p},\lambda_2\}$. 因此

$$E^{(1)}=\frac{e^2}{2V}\sum_{\lambda_1}\sum_{\mathbf{kq}}{}'\frac{4\pi}{q^2}\langle F|a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a^\dagger_{\mathbf{k},\lambda_1}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a_{\mathbf{k},\lambda_1}|F\rangle$$

$$=-\frac{e^2}{2V}\sum_{\lambda_1}\sum_{\mathbf{kq}}{}'\frac{4\pi}{q^2}\langle F|\left(a^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}\right)\left(a^{\dagger}_{\mathbf{k},\lambda_1}a_{\mathbf{k},\lambda_1}\right)|F\rangle$$

$$=-\frac{e^2}{2V}2\frac{V^2}{(2\pi)^6}\int d^3k\int d^3q\,\frac{4\pi}{q^2}\theta(k_F-|\mathbf{k}+\mathbf{q}|)\theta(k_F-k) \tag{7.5.57}$$

$$=-e^2\frac{4\pi V}{(2\pi)^6}\int d^3q\,\frac{1}{q^2}\int d^3P\,\theta\left(k_F-\left|\mathbf{P}+\frac{1}{2}\mathbf{q}\right|\right)\theta\left(k_F-\left|\mathbf{P}-\frac{1}{2}\mathbf{q}\right|\right).$$

对 $\mathbf{P}$ 的积分正是半径为 k_F、中心距离为 $\mathbf{q}$ 的两个球的交集，它是很容易计算的. 其结果是

$$E^{(1)}=-\frac{e^2}{2a_0}N\frac{3}{2\pi}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{1}{r_s}. \tag{7.5.58}$$

因此，至一级的基态能量由

$$\frac{E}{N}=\frac{e^2}{2a_0}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\left(\frac{3}{5}\frac{1}{r_s^2}-\frac{3}{2\pi}\frac{1}{r_s}\right) \tag{7.5.59}$$

给出. 它们被画在图 7.8 中. 当 $r_s\to 0$ 时，无微扰的能量单调地递增（译者注：原文为“减”是错的!），但一级修正是一个减小得较慢的吸引项. 结果在 $r_s=4.83$ 处有一个极小值 $E/N=-0.095e^2/2a_0=-1.29$ eV. 模型是粗糙的，解仅仅是近似的，但是与实验惊人地吻合. 对金属钠，在 $r_s=3.96$ 处有 $E/N=-1.13$ eV.

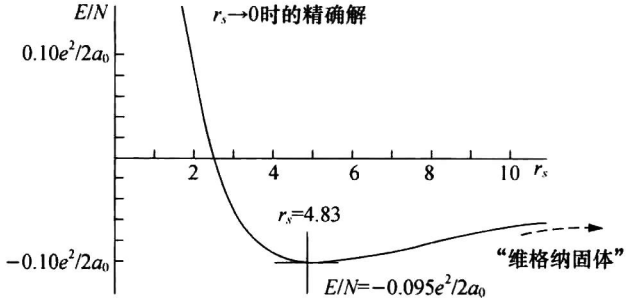


图 7.8　在一个均匀带正电的背景中，N 个电子的系统至一级微扰的基态能量. 单位电子的能量作为以波尔半径为单位的粒子间间隔的函数画在图中. 取自 Fetter 和 Walecka (2003a).

7.6　电磁场的量子化

麦克斯韦方程形成自由空间非相互作用电场和磁场的完全经典描述. 把量子力学应用到这一描述是一件很困难的事，但是可用几种方法做到. 在这一节，基于在本章建立起来的多粒子形式体系，我们再次采用“凭直觉”的方法于这个问题. 当然，粒子是光子，它的产生和湮灭算符遵从玻色-爱因斯坦对易关系.

由麦克斯韦方程的简要小结开始，建立我们的记号和它们基于电磁波的解. 接着，我们推导能量，并将其与用玻色子产生和湮灭算符构建的哈密顿量的本征值联系起来.

通过把自旋 1/2 的带电电子包含进来并纳入与电磁场相互作用是量子电动力学的课题. 对于它，本书中不去追求. （有关把电磁场相互作用应用到原子系统的更为特别的方法的讨论见 5.8 节.）然而，有一个用自由电磁场可以观测到的迷人的量子力学效应，卡西米尔效应，用对它的计算和实验数据的描述结束这一节.

在这里的处理或多或少是按照 Loudon (2000) 书中的第 4 章的方法，尽管这个方法

已经相当标准了. 例如参见 Merzbacher（1998）书中的第23章.

自由空间的麦克斯韦方程

在不存在任何电荷和电流的情况下，麦克斯韦方程（高斯单位制；见附录A）有如下形式

$$\nabla\cdot\mathbf{E}=0 \tag{7.6.1a}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{B}=0 \tag{7.6.1b}$$

$$\nabla\times\mathbf{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}=0 \tag{7.6.1c}$$

$$\nabla\times\mathbf{B}-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}=0. \tag{7.6.1d}$$

遵照标准程序，假定一个矢量势 $\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$ 满足

$$\mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A}, \tag{7.6.2}$$

它意味着直接满足了（7.6.1b）式. 如果强行加入进一步的条件

$$\nabla\cdot\mathbf{A}=0 \tag{7.6.3}$$

（它被称为“选取库仑规范”），那么

$$\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \tag{7.6.4}$$

意味着（7.6.1a）和（7.6.1c）也被满足. 因此，确定 $\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$ 等价于确定 $\mathbf{E}(\mathbf{x},t)$ 和 $\mathbf{B}(\mathbf{x},t)$. 得到一个 $\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$ 的解是显然的，不过通过考察看到，（7.6.1d）式直接导致

$$\nabla^2\mathbf{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2}=0, \tag{7.6.5}$$

这就是说，正像我们可能猜到的，$\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$ 满足波速为 c 的波动方程.

（7.6.5）式的解的集合自然地写成

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},t)=\mathbf{A}(\mathbf{k})e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}e^{\pm i\omega t}, \tag{7.6.6}$$

为使这些解是合理的，其中 $\omega=\omega_k\equiv|\mathbf{k}|c=kc$. 库仑规范条件（7.6.3）暗示 $\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x},t)=0$，或

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{k})=0. \tag{7.6.7}$$

换句话说，$\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$ 垂直于传播方向 $\mathbf{k}$. 为此，库仑规范常常被称为“横规范”. 这使我们能把（7.6.5）式的通解写成（此处及以下各处原文中关于符号 $\mathbf{A}$ 的黑体还是白体有多处错误，现已改正. ——译者注）

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},t)=\sum_{\mathbf{k},\lambda}\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k},\lambda}A_{\mathbf{k},\lambda}(\mathbf{x},t), \tag{7.6.8}$$

其中 $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$ 是垂直于 $\mathbf{k}$ 的两个单位矢量（相应于两个 λ 值），且其中的

$$A_{\mathbf{k},\lambda}(\mathbf{x},t)=A_{\mathbf{k},\lambda}e^{-i(\omega_k t-\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})}+A^*_{\mathbf{k},\lambda}e^{+i(\omega_k t-\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})}. \tag{7.6.9}$$

注意，在（7.6.9）式中，方程右边写成 $A_{\mathbf{k},\lambda}$ 的量是数值系数，它们既不是位置也不是时间的函数. 还要注意，$\mathbf{k}$ 和 $-\mathbf{k}$ 表示求和中的不同的项. 把叠加（7.6.8）式写成一个和，而不是一个积分，是因为我们想象量子化电磁场可在一个“大盒子”中进行，最终该“大盒子”的尺度可无限增长.

使用（7.6.9）式的形式以确保 $A_{\mathbf{k},\lambda}(\mathbf{x},t)$ 是实的. 当量子化电磁场时，$A_{\mathbf{k},\lambda}(\mathbf{x},t)$ 将变成厄米算符. 系数 $A^*_{\mathbf{k},\lambda}$ 和 $A_{\mathbf{k},\lambda}$ 将变成产生和湮灭算符.

正如稍后将要看到的，取单位矢量 $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}$ 作为圆极化而不是线极化的方向，是很有用的. 即，如果 $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(1)}$ 和 $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(2)}$ 是垂直于 $\mathbf{k}$ 的线性单位矢量，则

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\pm} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(1)} \pm i\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(2)}), \tag{7.6.10}$$

其中 $\lambda=\pm$ 表示极化态. 使用这种定义，很容易证明

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}^{*} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\pm\mathbf{k}\lambda'} = \pm\delta_{\lambda\lambda'} \tag{7.6.11a}$$

和

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}^{*} \times \hat{\mathbf{e}}_{\pm\mathbf{k}\lambda'} = \pm i\lambda\delta_{\lambda\lambda'}\hat{\mathbf{k}}, \tag{7.6.11b}$$

其中 $\hat{\mathbf{k}}$ 是一个沿 $\mathbf{k}$ 方向的单位矢量. 现在可由 (7.6.4) 式写出电场 $\mathbf{E}(\mathbf{x},t)$. 而使用 (7.6.2) 式，可类似地写出磁场 $\mathbf{B}(\mathbf{x},t)$.

电磁场中的能量 $\mathcal{E}$ 通过对能量密度在全空间积分

$$\mathcal{E} = \frac{1}{8\pi}\int_V [|\mathbf{E}(\mathbf{x},t)|^2 + |\mathbf{B}(\mathbf{x},t)|^2]d^3x. \tag{7.6.12}$$

给出，其中，如同早些时候讨论过的，“全空间”是一个具有周期性边界条件的有限体积 $V=L^3$. 换句话说，我们工作在一个具有导电壁的电磁腔内. 这意味着

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z), \tag{7.6.13}$$

其中 n_x，n_y，n_z 都是整数.

首先考虑 (7.6.12) 式中依赖于电场的项. 与 (7.6.8) 式和 (7.6.9) 式一起使用 (7.6.4) 式，就有

$$\mathbf{E} = \frac{i}{c}\sum_{\mathbf{k},\lambda}\omega_k [\mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}e^{-i(\omega_k t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} - \mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}^{*}e^{+i(\omega_k t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})}]\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \tag{7.6.14a}$$

和

$$\mathbf{E}^{*} = -\frac{i}{c}\sum_{\mathbf{k}',\lambda'}\omega_{k'} [\mathbf{A}_{\mathbf{k}',\lambda'}^{*}e^{+i(\omega_{k'} t - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{x})} - \mathbf{A}_{\mathbf{k}',\lambda'}e^{-i(\omega_{k'} t - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{x})}]\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'\lambda'}^{*}. \tag{7.6.14b}$$

因为我们已经建议将 $\mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}^{*}$ 和 $\mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}$ 变成产生和湮灭算符，我们需要小心并保持它们的顺序原样不变.

这些都导致了 $|\mathbf{E}|^2=\mathbf{E}^{*}\cdot\mathbf{E}$ 的笨重的表示式——需对 $\mathbf{k}$，λ，$\mathbf{k}'$ 和 λ' 求和，在求和号内有四项. 然而，对空间体积的积分带来了一个重要的简化. 求和中的每一项都把它对于坐标的依赖性放到一个指数上，以致体积分具有形式

$$\int_V e^{i(\mathbf{k}\mp\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}}d^3x = V\delta_{\mathbf{k},\pm\mathbf{k}'}. \tag{7.6.15}$$

把这些与 (7.6.11a) 式结合起来，人们发现

$$\begin{aligned}\int_V |\mathbf{E}(\mathbf{x},t)|^2 d^3x = \sum_{\mathbf{k},\lambda}\frac{\omega_k^2}{c^2}V[&\mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}^{*}\mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda} + \mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}\mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}^{*} \\ &+ \mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}^{*}\mathbf{A}_{-\mathbf{k},\lambda}^{*}e^{2i\omega_k t} + \mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}\mathbf{A}_{-\mathbf{k},\lambda}e^{-2i\omega_k t}.]\end{aligned} \tag{7.6.16}$$

从 (7.6.2) 式出发，$|\mathbf{B}|^2=\mathbf{B}^{*}\cdot\mathbf{B}$ 的计算也非常相似. 旋度带来了 $\mathbf{k}\times\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}$ 一类的因子而不是含电场的计算中的 ω_k/c 因子，但是由于 $\mathbf{k}^2=\omega_k^2/c^2$，计算结果几乎完全一样. 尽管关键的区别是：在 $\mathbf{k}\to-\mathbf{k}$ 变换下，$\mathbf{k}\times\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}$ 一类的项不变号. 这意味着与 (7.6.16) 式中第三项和第四项类似的项将以同样的方式出现，但是符号不同. 因此，当计算 (7.6.12) 式时，它们相消. 其结果是

$$\mathcal{E} = \frac{1}{4\pi}V\sum_{\mathbf{k},\lambda}\frac{\omega_k^2}{c^2}[\mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}^{*}\mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda} + \mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}\mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}^{*}]. \tag{7.6.17}$$

光子和能量量子化

现在的目标是把（7.6.17）式与哈密顿量算符的本征值联系起来. 我们将通过假设量子化的电磁场是由一群称作光子的全同粒子组成来做这件事. 算符 $a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})$ 产生一个极化度为 λ 和动量为 $\hbar\mathbf{k}$ 的光子，而 $a_\lambda(\mathbf{k})$ 湮灭这个光子. 光子的能量是 $\hbar\omega_k=\hbar ck$，所以将按照（7.5.26）式构建哈密顿量算符并写出

$$\mathscr{H}=\sum_{\mathbf{k},\lambda}\hbar\omega_k a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})a_\lambda(\mathbf{k}). \tag{7.6.18}$$

不必考虑像（7.5.33）式的那些项，因为根据最初的假设，我们正在构建一个无相互作用的电磁场.

我们现在面对着一个重要问题. 光子是玻色子还是费米子？即光子的“自旋”是什么？为了知道产生和湮灭算符服从哪类代数，我们需要知道它是整数还是半奇数. 光子场的完全相对论处理证明光子的自旋为1，因此它是一个玻色子，但当面对实际情况时有足够的准备吗？

是的，我们已经有了足够的准备. 由第3章我们知道（例如）绕 z 轴转动一个 ϕ 角是通过算符 $\exp(-iJ_z\phi/\hbar)$ 实现的. 如果旋转的态碰巧是 J_z 的一个本征态，则 J_z 的可能本征值 m 就明显地出现了，它带来了一个相因子 $\exp(-im\phi)$. ［当一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的态转了 2π 角，这就导致了“著名的”负号. 回顾（3.2.15）式.］

那么，看一下如果绕光子的方向 $\mathbf{k}$ 旋转一个角度 ϕ，则右手或左手圆极化的电磁波会发生什么呢？其极化方向是（7.6.10）式给出的单位矢量 $\hat{\boldsymbol{e}}_{\mathbf{k}\pm}$ 的方向. 旋转等价于变换

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(1)}\to\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(1)'}=\cos\phi\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(1)}-\sin\phi\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(2)} \tag{7.6.19a}$$

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(2)}\to\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(2)'}=\sin\phi\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(1)}+\cos\phi\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}^{(2)}, \tag{7.6.19b}$$

它意味着旋转对 $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\pm}$ 引入了一个相位改变 $\exp(\mp i\phi)$. 显然，右旋和左旋光子对应于 J_z 本征值 $\pm1\hbar$. 看来，光子有自旋为1.

因此，在光子是玻色子的假设下继续做下去. 把（7.6.18）式稍加修改成为

$$\begin{aligned}\mathscr{H}&=\sum_{\mathbf{k},\lambda}\frac{1}{2}\hbar\omega_k[a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})a_\lambda(\mathbf{k})+a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})a_\lambda(\mathbf{k})]\\&=\sum_{\mathbf{k},\lambda}\frac{1}{2}\hbar\omega_k[a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})a_\lambda(\mathbf{k})+a_\lambda(\mathbf{k})a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})+1],\end{aligned} \tag{7.6.20}$$

随同算符

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}=(4\pi\hbar c^2)^{1/2}\frac{1}{\sqrt{V}}\frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}a_\lambda(\mathbf{k}) \tag{7.6.21}$$

的定义意识到（7.6.20）式中的“额外项”意味着光子场中全部的能量是相对于“零点能”

$$E_0=\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\lambda}\hbar\omega_k=\sum_{\mathbf{k}}\hbar\omega_k \tag{7.6.22}$$

测得的，就能重新得到经典能量（7.6.17）式. 在存在零光子时，这个零点能就是电磁场中的能量；有时被称为**真空能量**. 它是一个无穷大的数，然而它却是一个常数. 更重要的是，它具有可观测的后果.

卡西米尔效应

电磁场的真空能量有很多物理后果，但也许最引人注目的是它在导电表面之间施加一

个宏观力的能力. 这被称为卡西米尔效应，它已经被精确地测量并与计算结果做了比较. S. Lamoreaux 曾发表了细致的解释，包括一篇在 *Physics Today*，February 2007 上的通俗文章和在 *Reports on Progress in Physics*，**68**（2005）201 上更为技术性的综述文章. 也可参见 *Fluctuating About Zero*，*Taking Nothing's Measure*（M. Fortun），*Zeroing In on the Year* 2000：*The Final Edition*（George E. Marcus，editor，University of Chicago Press，2000）.

卡西米尔的计算只基于真空能量（7.6.22）式的假设. 在这里，按照拉默利奥克斯（Lamoreaux）的技术综述文章重新做一次.* 两个很大的平行导电板分开的间隔为 d. 定义一个坐标系，它的 (x,y) 平面平行于导电板的表面，所以 z 度量离开一个表面的垂直距离. 这使我们能写出一个势能函数

$$U(d) = E_0(d) - E_0(\infty), \tag{7.6.23}$$

它给出了具有有限间距和无限间距的平板的真空能量之差. 把（7.6.22）式和（7.6.13）式结合起来（并且将正整数和负整数值结合在一起），有

$$E_0(d) = \hbar \sum_{k_x,k_y,n} \omega_k = \hbar c \sum_{k_x,k_y,n} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + \left(\frac{n\pi}{d}\right)^2}. \tag{7.6.24}$$

[其实这个方程在 $n=0$ 项上丢掉了一个 1/2 的“丢失”因子. 这是因为对 $n=0$，由于 $k_z=0$ 时只存在一种纯的横向模式，在（7.6.22）式中只有一种极化态应被计入. 我们将在下面恢复这个因子.] 现在假定方形平板 x 和 y 边的边长 $L \gg d$. 因为 L 很大，可以用积分替换对 k_x 和 k_y 的求和，并写出

$$E_0(d) = \hbar c \left(\frac{L}{\pi}\right)^2 \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \sum_n \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + \left(\frac{n\pi}{d}\right)^2}. \tag{7.6.25}$$

在 $d \to \infty$ 的极限，还可以用积分替换对 n 的求和. 这些给了计算（7.6.23）式必需的所有要素.

然而不幸的是，（7.6.23）式是两个无穷大的数之间的差. 似乎可以合理地认为这个差值是有限的，因为对任意特定的 d 值，n 足够大的那些项对不同的 d 值都将给出相同的结果. 这就是说，在（7.6.23）式中的这两项应该倾向以同样地方式趋于无穷，当取其差时，这些部分将相互抵消.

这启发我们可通过在（7.6.25）式的被积函数上乘以一个函数 $f(k)$ 来处置这个无穷大，其中 $k \to 0$ 时 $f(k) \to 1$，而 $k \to \infty$ 时 $f(k) \to 0$. 这个函数在被积函数变得太大之前将其“截断”，但它对于（7.6.23）式的两项都以相同的方式处置，结果使来自大 k 的贡献仍然相消.** 引入极坐标 $\rho = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ 也很有帮助，其中 $dk_x dk_y = 2\pi\rho\, d\rho$. 注意，在（7.6.25）式中的积分限对应于 (k_x, k_y) 平面的 1/4. 于是（7.6.23）式变成

$$U(d) = 2\pi\hbar c \left(\frac{L}{\pi}\right)^2 \frac{1}{4} \int_0^\infty \rho\, d\rho \left[\sum_n f\left(\sqrt{\rho^2 + \left(\frac{n\pi}{d}\right)^2}\right) \sqrt{\rho^2 + \left(\frac{n\pi}{d}\right)^2} \right. \tag{7.6.26}$$

---

* 注意拉默利奥克斯的推导与 Itzykson 和 Zuber(1980) 书的 3-2-4 节无异. 也可参见在 Holstein（1992）专著中，稍有不同的方法及伴随的讨论，特别是物理的观点.

** 为什么在非常高的频率处应该有截断，我们可以想出很多物理原因. 一般说来，我们预期主要的贡献来源于 $k \sim 1/d$ 的值，但存在一些更具体的例子，如金属中的电子对甚高能光子的响应. 在任何情况下，甚至在不存在截断频率时，研究是否能推导出最终的结果，仍然是一个有趣的问题.

$$-\frac{d}{\pi}\int_0^\infty dk_z f\left(\sqrt{\rho^2+k_z^2}\right)\sqrt{\rho^2+k_z^2}\Big]. \tag{7.6.27}$$

现在把函数 $F(\kappa)$ 定义为

$$F(\kappa)=\int_0^\infty dx f\left(\frac{\pi}{d}\sqrt{x+\kappa^2}\right)\sqrt{x+\kappa^2} \tag{7.6.28a}$$

$$=\int_\kappa^\infty 2y^2 f\left(\frac{\pi}{d}y\right)dy. \tag{7.6.28b}$$

令 $\rho^2=(\pi/d)^2x$ 和 $k_z=(\pi/d)\kappa$ 可使我们能恢复丢失的因子2，并更为简洁地把势能写为

$$U(d)=\frac{\pi^2\hbar c}{4d^3}L^2\left[\frac{1}{2}F(0)+\sum_{n=1}^{\infty}F(n)-\int_0^\infty F(\kappa)d\kappa\right]. \tag{7.6.29}$$

所以，我们就剩下了计算一个积分和一个求和之间的差，它们两者都是彼此的合理近似. 的确，如果在 $0\leqslant x\leqslant N$ 范围内定义的函数 $F(x)$ 是在整数点 $x=i$ 处计算的，那时这种近似方案称为梯形规则. 它是说

$$\int_0^N F(x)dx\approx\frac{F(0)+F(N)}{2}+\sum_{i=1}^{N}F(i). \tag{7.6.30}$$

在这种情况中，由于截断函数 $f(k)$，$N\to\infty$ 时 $F(N)\to 0$，我们要做的就是要寻找（7.6.30）式左边和右边的差别.

幸运的是，有一个计算这个差值的定理. 它被称为欧拉-麦克劳林（Euler-Maclaurin）求和公式，并被写成

$$\frac{F(0)}{2}+\sum_{i=1}^{\infty}F(i)-\int_0^\infty F(x)dx=-\frac{1}{12}F'(0)+\frac{1}{720}F'''(0)+\cdots. \tag{7.6.31}$$

其中的导数可使用（7.6.28b）式计算. 因为当 $x\to\infty$ 时 $F(x)\to 0$，有

$$F'(y)=-2y^2 f\left(\frac{\pi}{d}y\right), \tag{7.6.32}$$

它给出 $F'(0)=0$. 如果对截断函数 $f(k)$ 做进一步但自然的假设，即当 $k\to 0$ 时它所有的导数都趋于零，则仅有（7.6.31）式中的三阶导数留了下来. 实际上，$F'''(0)=-4$，并且

$$U(d)=\frac{\pi^2\hbar c}{4d^3}L^2\left[\frac{-4}{720}\right]=-\frac{\pi^2\hbar c}{720d^3}L^2. \tag{7.6.33}$$

所以，最后导出的（每单位面积）卡西米尔力为

$$\mathcal{F}(d)=\frac{1}{L^2}\left(-\frac{dU}{dd}\right)=-\frac{\pi^2\hbar c}{240d^4}. \tag{7.6.34}$$

这样，由于在量子化的电磁场中真空能量的重新配置，在平板之间就存在一个吸引力，它随距离倒数的四次方变化.

这是自然界中在宏观系统中表现出一种纯量子力学效应的例子之一. 的确，导体间的卡西米尔力已经被精确地测量过，并且其结果与理论吻合得极好，见图7.9. 这个实验使用了“原子力显微镜”的概念，它基于微观悬臂梁受到靠得很近的表面之间的微力驱使而弯曲. 由于这个原因，使用在悬臂上悬挂一个小导电球并测量球和一个平面间的力的装置，给出了 $-(\pi^3R/360)(\hbar c/d^3)$，其中 R 是球的半径. 这个力使悬臂弯曲，并用一个从球面反射的激光束探测这个运动. 测量的力作为距离 d 的函数显示为图中的数据点，将它们与理论的预言进行了比较.

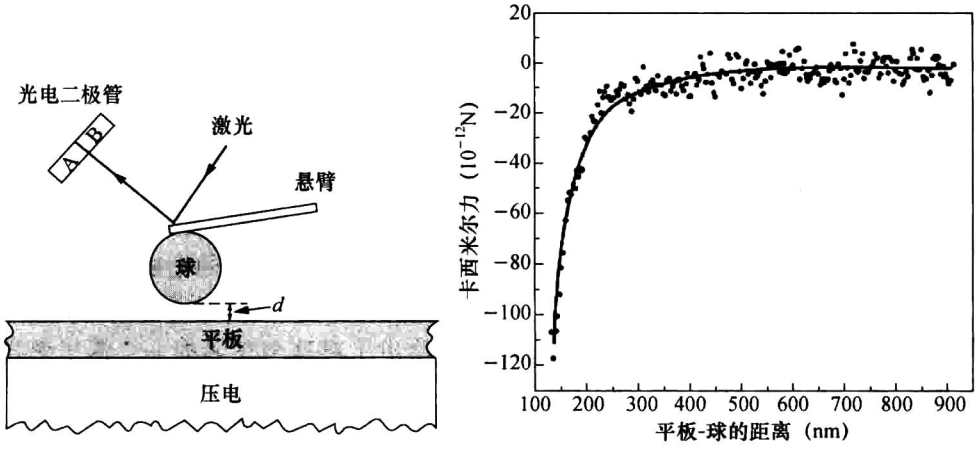


图 7.9　卡西米尔效应的实验验证．取自 U. Mohideen 和 Anushree Roy，*Phys. Rev. Lett.* **81**（1998）4549．由于实验的原因，测量的是一个金属球和一个平面间的力，而不是两个平面间的力．一束激光精确地测量微小的偏转，由它可抽取出这个力．这个力（以 10^{-12} N 为单位测得的）是随球和平面间距离的函数变化，与预言吻合得极好，穿过数据点的曲线是基于量子化的电磁场得到的．

平行导电面间的卡西米尔效应实验上也观测到了．例如参见 G. Bressi et al.，*Phys. Rev. Lett.* **88**（2002）041804．

如果卡西米尔效应是由于电磁场的存在，并且这些场只与电荷相互作用，那么，为什么电荷 e 不在（7.6.34）式出现呢？答案就在于我们计算的出发点，在那里假设了导电板的边界条件．它们起源于金属中与电磁场相互作用的电子的相对迁移率．实际上，我们使用了截断频率，它的物理基础在于短波长电磁辐射的穿透性．的确，如果对所有的波长都存在这种穿透性，就不会有卡西米尔效应了．

近年来，看到了对卡西米尔效应重新燃起的兴趣，不仅有对它在纳米机械装置中的潜在应用，而且还有使用基本的量子场理论原理的计算和解释*．在基于路径积分的公式框架下，卡西米尔能量能用具有适当边界条件的自由场传播子写出．而边界条件由所考虑的对象直接定义．基于自由场在客体上的 T 矩阵散射振幅和以自然方式表示每个客体对其他的客体的几何形态的变换矩阵，结果是一个漂亮的卡西米尔能量的表达式．这种方法适宜用于很多更深刻的见解．首先，它使我们能够计算任何基于这种有约束的传播子表示的场，如标量场或费米子场的卡西米尔能量．其次，它也显然适用于任意数量的几何体，远远超出简单的平行板系统．

结束语

在离开本章之前，应指出：本节中的处理仅仅暗示了有很多量子化电磁场的应用．现在有了表达式（7.6.21）式（以及它的伴随式），它是一个消灭（或产生）特定波长和极化的光子的算符，我们就能以任意多种方式把它包括进来．

---

* 有很多近期的文献．我推荐有兴趣的读者从下述文献开始：T. Emig and R. L. Jaffe，*J. Phys. A* **41**（2008）；T. Emig，N. Graham，R. L. Jaffe，and M. Kardar，*Phys. Rev. Lett.* **99**（2007）170403；和 R. L. Jaffe，*Phys. Rev. D* **72**（2005）021301．

例如，在（2.7.23）式中已经看到，我们能怎样把电磁场加入到共轭动量中. 这些被构建到（2.7.26）式的哈密顿量里. 使用量子化版的 **A**，就有了一个特别的、能够产生或消灭光子的哈密顿量. 那么，正比于 **A**•**p** 的项能作为时间相关的微扰来处理. 这样，我们能让一个原子吸收一个光子（光电效应）或一个原子的激发态自发衰变并发射出一个光子.

当然，这些应用也可以沿用于核物理或凝聚态物理所涵盖的系统. 在各种各样的书中都包括有这些题目，其中的一些是一般的量子力学方面的书，但也有很多涉及具体的研究领域.

一个特别迷人的方向是**量子光学**，实际上它包含了无相互作用的电磁场. 这是一个在过去几十年内就已逐渐成熟的领域，它部分地受到了激光技术的进展和对量子计算及量子信息兴趣增长的推动. 格劳伯在诺贝尔奖讲演中给出了对这个领域的一个深思熟虑的看法，发表在 *Reviews of Modern Physics* **78**（2006）1267. 在本节剩余的部分，我们对这个很大的主题给出一个简明扼要的概述.

量子光学的丰富多彩马上就可以显现. 凭借（7.6.21）式，电场矢量（7.6.14a）变成一个产生和消灭光子的算符. 这个算符的期待值在任何一个具有确定数目光子的态$|\Psi\rangle$，即

$$|\Psi\rangle = |\cdots, n_{\mathbf{k}\lambda}, \cdots\rangle, \tag{7.6.35}$$

上为零. 因为（7.6.14a）式改变了光子数 $n_{\mathbf{k}\lambda}$，在那个情况下 $\langle\Psi|\mathbf{E}|\Psi\rangle$ 就变成了正交态间的内积. 因此，任意一个物理态需要是不同数目光子态的一个叠加. 如果可以巧妙地处理这个叠加，具有不同性质的各种各样的物理态原则上就可以实现. 正是实施这种操作的能力，促使了量子光学的诞生. 第2章的习题2.19建议了一种导致所谓相干态的可能操作. 相干态是湮灭算符 a 的本征态，因此可作为 **E** 的正频或负频部分的本征态.

让我们探索一个按照 Loudon（2000）著作第5章给出的对于单模电场算符的这样类型的处理. 对一个给定的线性极化方向，电场由

$$E(\chi) = E^{+}(\chi) + E^{-}(\chi) = \frac{1}{2}ae^{-i\chi} + \frac{1}{2}a^{\dagger}e^{i\chi} \tag{7.6.36}$$

给出，其中 $\chi \equiv \omega t - kz - \pi/2$. [把因子 $-(8\pi\hbar\omega_k/V)^{1/2}$ 吸收到电场的定义中.] 相角 χ 能在实验中调整. 而且，一般具有不同相角的场不对易. 由（2.3.3）式，很容易证明

$$[E(\chi_1), E(\chi_2)] = -\frac{i}{2}\sin(\chi_1 - \chi_2). \tag{7.6.37}$$

因此，不确定度关系（1.4.53）意味着

$$\Delta E(\chi_1)\Delta E(\chi_2) \geq \frac{1}{4}|\sin(\chi_1 - \chi_2)|, \tag{7.6.38}$$

其中电场的方差 $(\Delta E(\chi))^2$ 按通常的方式定义为：

$$\begin{aligned}(\Delta E(\chi))^2 &= \left\langle (E(\chi))^2 \right\rangle - \langle E(\chi)\rangle^2 \\ &= \left\langle (E(\chi))^2 \right\rangle\end{aligned} \tag{7.6.39}$$

因为对具有一个单模的态 $\langle E(\chi)\rangle = 0$. 一个满足

$$0 \leqslant (\Delta E(\chi))^2 < \frac{1}{4} \tag{7.6.40}$$

的态$|\zeta\rangle$ 被称为**正交压缩态**. 可以把$|\zeta\rangle$ 写成一个幺正算符作用于真空：

$$|\zeta\rangle = \exp\left(\frac{1}{2}\zeta^{*}a^{2} - \frac{1}{2}\zeta(a^{\dagger})^{2}\right)|0\rangle, \tag{7.6.41}$$

（原书该式明显有误，丢失了真空态$|0\rangle$. ——译者注）其中$\zeta=s^{i\theta}$称为压缩参数. 在这个态上，电场的方差是

$$(\Delta E(\chi))^2=\frac{1}{4}\left\{e^{2s}\sin^2\left(\chi-\frac{1}{2}\theta\right)+e^{-2s}\cos^2\left(\chi-\frac{1}{2}\theta\right)\right\}. \tag{7.6.42}$$

这样，人们可以得到$\Delta E(\chi)$的一个极小值

$$\Delta E_{\text{极小}}=\frac{1}{2}e^{-s}\qquad \text{对}\ \chi=\frac{\theta}{2}+m\pi, \tag{7.6.43}$$

其中的m是个整数，以及一个极大值

$$\Delta E_{\text{极大}}=\frac{1}{2}e^{s}\qquad \text{对}\ \chi=\frac{\theta}{2}+\left(m+\frac{1}{2}\right)\pi. \tag{7.6.44}$$

作为结果的的不确定度关系是

$$\Delta E_{\text{极小}}\Delta E_{\text{极大}}=\frac{1}{4}, \tag{7.6.45}$$

它满足作为一个等式的（7.6.38）式.

压缩光的观测极具挑战性，然而这样的测量已经被完成了. 参见图 7.10. 压缩态是使用一个叫作参数下转换的光学技术制备的，它允许选择不同大小的ζ. 每个点都是扫描相位χ并测量电场的噪音谱的结果.

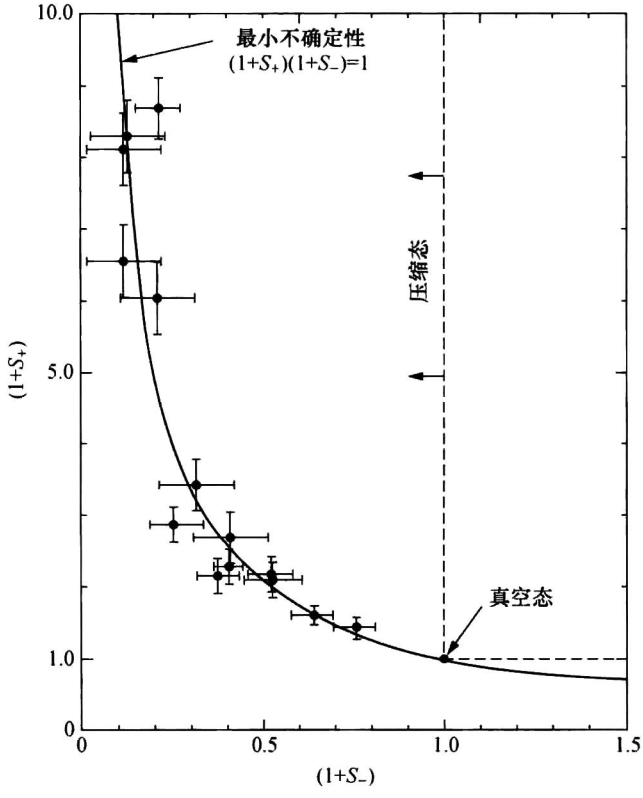


图 7.10　“压缩光”态的观测，取自 L.-A. Wu, M. Xiao, and H. J. Kimble, *Jour. Opt. Soc. Am.* **4**（1987）1465.［还可参见 *Loudon*（2000）的第 5 章.］数据是通过测量对相位角χ不同扫描的电场方差（即噪音）得到的. 不同的点对应于不同的压缩态，它们是通过选择不同的压缩参数ζ的 s 值构成的. 穿过点的实线由（7.6.45）式给出.

习题

7.1 当被冷却到相变温度 $T = 2.17\text{K}$ 时，液氦转变为一个宏观量子流体，称为超流氦．计算氦原子具有在这个温度的平均能量时的德布罗意波长 $\lambda = h/p$，并将其与原子自身的大小相比较．用它预言其他惰性气体的超流转变温度，并解释为什么它们都不能形成超流．（你将需要查找这些元素的一些经验数据．）

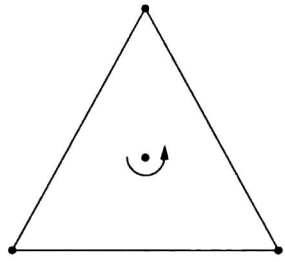
7.2 (a) N 个自旋为 1/2 的全同粒子受到一个一维简谐振子势的作用．忽略粒子之间所有的相互作用．基态的能量是什么？费米能量是什么？

(b) 如果忽略了粒子间的相互作用并假定 N 非常大，基态能量和费米能量又是什么？

7.3 两个无轨道角动量的（即两个粒子都在 s 态）自旋为 1 的非全同粒子显然能够形成 $j=0$，$j=1$ 和 $j=2$ 的态．然而，假定这两个粒子是全同的．得到什么限制？

7.4 讨论如果氦原子的电子是无自旋的玻色子，氦原子的能级会发生什么变化．尽你所能做定量的讨论．

7.5 三个自旋为 0 的粒子位于一个等边三角形的顶点（见附图）．定义 z 轴穿过中心且方向垂直于三角形的平面．整个系统能自由地绕 z 轴转动．基于统计学考虑，求对与 J_z 对应的磁量子数的限制．



7.6 考虑三个微弱地相互作用、自旋为 1 的全同粒子．

(a) 假定态矢量的空间部分在交换任意一对粒子时都是对称的．使用记号 $|+\rangle|0\rangle|+\rangle$ 表示粒子 1 在 $m_s=+1$ 态，粒子 2 在 $m_s=0$ 态，粒子 3 在 $m_s=+1$ 态等等．在下面三种情况下，构建归一化的自旋态：

(i) 这三个粒子都在 $|+\rangle$ 态．

(ii) 它们之中的两个粒子在 $|+\rangle$ 态，一个粒子在 $|0\rangle$ 态．

(iii) 三个粒子分别在不同的自旋态．

每种情况的总自旋是多少？

(b) 在任意一对粒子的交换下空间部分都是反对称时，尝试求解相同的问题．

7.7 证明一个算符 a 和它的共轭算符遵从反对易关系 $\{a,a^\dagger\} = aa^\dagger + a^\dagger a = 1$，则算符 $N = a^\dagger a$ 具有本征值为 0 和 1 的本征态．

7.8 假定电子是遵从费米-狄拉克统计的自旋为 3/2 的粒子．写出由这样的“电子”组成的假想的氖（Ne，$Z=10$）原子的组态［即类似于 $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$］．证明这个组态是高度简并的．当交换分裂和自旋-轨道分裂都被考虑时，利用光谱符号（$^{2S+1}L_J$，其中 S，L 和 J 分别表示总自旋，总轨道角动量，和总角动量）表示，这个假想的氖原子基态（最低的项）是什么？

7.9 两个自旋为 1/2 的全同费米子在无限深势阱影响下做一维运动，该势阱为：在 $x<0$ 和 $x>L$ 时 $V=\infty$，在 $0\leqslant x\leqslant L$ 时 $V=0$．

(a) 当这两个粒子被束缚成一个自旋三重态（正态）时，写出其基态波函数和基态能量．

(b) 当它们处于自旋单态（仲态）时，重复 (a) 中的步骤．

(c) 现在假设这两个粒子通过一个非常短程的吸引势相互作用，这个势可用

$$V=-\lambda\delta(x_1-x_2) \qquad (\lambda>0)$$

近似描述. 假设甚至在这样一个奇异势的情况下微扰论也是适用的，半定量地讨论在 (a) 和 (b) 中得到的能级发生什么样的变化.

7.10 证明关系式 (7.6.11)，然后进行计算以推导 (7.6.17) 式.

第 8 章　相对论量子力学

最后的这一章将简要地浏览人们如何构建与狭义相对论自洽的单粒子波动方程.

可以肯定的是，这种努力最终是注定要失败的. 狭义相对论使得从能量产生粒子变得可能，但量子力学很多发展都是基于概率守恒，所以不可能期待完全的成功. 处理这个问题的正确方法是，从量子力学的假设和构建一个与相对论自洽的场的多体理论开始. 然而，在与所涉及的质量相比能量较低时，我们能预期单粒子量子力学是对自然的一个非常好的近似. 此外，这是建立一个相对论场论的专用术语和数学的自然方法.

从构成自由粒子相对论波动方程的一般问题开始. 这或多或少直观地导致了克莱因-戈尔登（Klein-Gordon）方程，我们将较细致地讨论它. 沿着这条路，我们引入并继续使用自然单位的概念和相对论性的协变符号. 然后，详细考察狄拉克寻找对时空的导数为线性而不是二次的相对论波动方程采用的方法. 介绍了狄拉克方程对称性的研究. 最后以单电子原子问题的求解及与数据的比较结束本章.

当然很多其他作者也都曾涉足于这些内容. 当相对论量子场论从相对论量子力学的年代脱颖而出时，有一篇很好的参考文献，是 *Elementary Relativistic Wave Mechanics of Spin 0 and Spin 1/2 Particles*（Herman Feshbach and Felix Villars），*Rev. Mod. Phys.* **30**（1958）24.

8.1　通向相对论量子力学之路

二十世纪早期目睹了相对论和量子力学几乎同步的发展. 因此，获悉早期发展波动力学的尝试产生了相对论波动方程，这并不令人感到奇怪.* 尽管现在弄清了困惑早年的那些先驱们的很多陷阱，但理清这些头绪花费了几十年的时间.

首先关注哈密顿量算符，这个（厄米的）时间平移生成元曾把我们引导到一个对于态的时间演化的薛定谔方程（2.1.25）. 即一个态 $|\psi(t)\rangle$ 按照方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \tag{8.1.1}$$

随时间演化. 我们理所当然地把哈密顿量的本征值解释为系统的允许能量. 这正是开始整合狭义相对论的地方.

自然单位

对于渐渐使用所谓的自然单位，即 $\hbar=c=1$ 的单位，这是一个最佳的时候. 大多数人第一次看到它时都十分困惑，但实际上它非常简单而且有用.

首先考虑令 $c=1$ 的后果. 那么，用长度单位，比如：米或厘米，测量时间（=距离/c）.（如果你确实想要知道以秒为单位的时间，只要除以 $c=3\times10^{10}\,\mathrm{cm/sec}$ 即可.）速度变成一

---

* 见 Weinberg（1995）专著第 1 卷第 1.1 节.

个无量纲的数，通常记为 β.

令 $c=1$ 意味着测量动量和测量质量两者也都要用能量单位，如：eV 或 MeV. 人们常常把 c 明确地放进去，并把动量单位写成 MeV/c，而把质量单位写成 MeV/c^2. 例如，大多数物理学家都知道电子质量是 0.511MeV/c^2，但极少有人不经转换运算就知道以千克为单位的这个数值！如果有人告诉你这个质量是 0.511MeV 且扔掉 c^2 时，不要感到惊讶.

现在考虑当同样地设 $\hbar=1$ 时会发生什么. 它把长度单位和能量单位联系在一起. 例如，动量算符和位置算符的正则对易关系说明它们的乘积与 $\hbar$ 的单位相同. 因此，用 MeV^{-1} 或一些其他的能量单位的逆作为单位测量位置.

记住，如果你需要回到老的行事方式，总是可以在正确的地方把 $\hbar$ 和 c 放回去. 这样做并不罕见，例如，你正试图评估一些实验的结果. 记住，在一个很好的近似下，对于做这些转换取 $\hbar c=200\mathrm{MeV}$ 是很方便的.

作为最后一个注记，我们指出在统计力学的教科书中，人们也会“自然地”取玻尔兹曼常数 $k=1$. 这就是说，温度也将用能量单位测量.

一个自由相对论粒子的能量

考虑一个动量为 $p=|\mathbf{p}|$ 和质量为 m 的自由粒子的能量，即，

$$E_p=+\sqrt{p^2+m^2}, \tag{8.1.2}$$

需要想出一个哈密顿量，它对于动量本征值为 $\mathbf{p}$ 的一个态 $|\mathbf{p}\rangle$ 得到这个能量本征值. 然而，这个值是个平方根，这就使早期提出相对论波动方程的努力受到了困扰，在这里必须弄清楚该如何应对它.

以前已经遇到过算符的超越函数，如：$U(t)=\exp(-iHt)$，把它们用泰勒展开来解释. 在这里，或许可以采用相同的方法，因而写出

$$\begin{aligned} H&=\sqrt{p^2+m^2}=m\left[1+\frac{p^2}{m^2}\right]^{1/2}\\ &=m+\frac{p^2}{2m}-\frac{p^4}{8m^3}+\frac{p^6}{16m^5}+\cdots. \end{aligned} \tag{8.1.3}$$

事实上，这也许是一个继续做下去的可行方法，但是它有一些严重的缺点. 举个例说，它使人们不可能用公式表示一个“协变的”波动方程. 这就是说，如果我们构成了坐标表象（或动量表象）的一个态矢量 $|\psi\rangle$ 的表示，作为结果的波动方程将会有一阶时间导数和一个来自动量算符的、阶数不断增加的空间导数的无穷级数. 这将无法“平等对待”时间和空间.

这个做法实际上导致了一个更为重要的问题. 继续进行并试着构建这个波动方程. 由（8.1.1）式有

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle&=\int d^3p\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\boldsymbol{H}|\psi(t)\rangle\\ &=\int d^3x'\int d^3p\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|E_p|\psi(t)\rangle\\ &=\int d^3x'\int d^3p\,\frac{e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}}{(2\pi)^3}\langle\mathbf{x}'|E_p|\psi(t)\rangle, \end{aligned} \tag{8.1.4}$$

并且（8.1.3）式意味着 $\langle\mathbf{x}'|E_p|\psi(t)\rangle$ 变成一个导数的阶数越来越高的无穷级数，见

(1.7.20) 式. 这使得该波动方程变成非定域的，因为为了计算时间导数，它必须越来越远地离开 $\mathbf{x}'$ 附近的区域. 最终，对任意的空间定域化的波函数 $\langle \mathbf{x}|\psi(t)\rangle$，因果关系将被破坏. 而协变性的丢失的确使我们花费了很大的代价.

我们放弃这个方法，采用哈密顿量平方而不是哈密顿量自身进行工作. 这种做法消除了平方根问题以及所有附带的问题，但它将引入一个不同的问题. 这个波动方程将有一些负能解；这些解对形成基态的一个完备集是必需的，但它们却没有明显的物理意义. 尽管如此，这个方法比我们现在刚刚离开的方法更有用.

克莱因-戈尔登方程

从 (8.1.1) 式开始，再次对时间求导. 即，

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2}|\psi(t)\rangle = i\frac{\partial}{\partial t}H|\psi(t)\rangle = H^2|\psi(t)\rangle. \tag{8.1.5}$$

现在对 $\Psi(\mathbf{x},t) \equiv \langle \mathbf{x}|\psi(t)\rangle$ 能够写出一个简单的波动方程. 取 $H^2 = p^2 + m^2$ 并利用 $\langle \mathbf{x}|p^2|\psi(t)\rangle = -\nabla^2\Psi(\mathbf{x},t)$，我们得到

$$\left[\frac{\partial}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2\right]\Psi(\mathbf{x},t) = 0. \tag{8.1.6}$$

方程 (8.1.6) 被称为*克莱因-戈尔登方程*. 除去 m^2 项之外，该方程看起来非常像经典的波动方程. 把 $\hbar$ 和 c 放回原位之后，我们看到这个 m^2 项引入了一个长度标度 $\hbar/mc$，称之为康普顿波长.

克莱因-戈尔登方程具有一个相对论波动方程的几乎所有令人满意的特点. 首先，它是相对论协变的. 可以看到，这是因为洛伦兹变换保持时空间隔的平方 $ds^2 = dt^2 - d\mathbf{x}^2$ 不变. 因此，如果把坐标系从 $(\mathbf{x},t)$ 变换到 $(\mathbf{x}',t')$，(8.1.6) 式中导数的组合是相同的. 换句话说，同公式 (8.1.6) $\Psi(\mathbf{x}',t')$ 求解的方程与 $\Psi(\mathbf{x},t)$ 求解的方程是一样的.

假如人们使用相对论协变的记号，相对论协变性更容易看到. 将使用一种已经成为标准的记号. 这就是希腊指标取 0，1，2，3，而拉丁指标取 1，2，3. 不管什么时候，如果一个指标在一个表达式中重复出现，就隐含着要对这个指标求和. 一个逆变四矢量 $a^\mu \equiv (a^0,\mathbf{a})$ 具有一个对偶的协变矢量 $a_\mu = \eta_{\mu\nu}a^\nu$，其中 $\eta_{00} = +1$，$\eta_{11} = \eta_{22} = \eta_{33} = -1$，其他的元素均为零. 这样，$a_\mu = (a^0,-\mathbf{a})$. 四矢量的内积只能在一个逆变矢量和一个协变矢量之间取，例如：$a^\mu b_\mu = a^0b^0 - \mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$. 特别是，$a^\mu a_\mu = (a^0)^2 - \mathbf{a}^2$.

洛伦兹变换的关键之处是四矢量的内积不变. 这就是说，在任意参考系中，$a^\mu b_\mu$ 都将具有相同的值. 这就是为什么协变记号对展示一个确定表达式的协变性是非常有用的原因.

时空位置四矢量是 $x^\mu = (t,\mathbf{x})$. 这给出了四梯度

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial t},\nabla\right) \equiv \partial_\mu, \tag{8.1.7}$$

它是一个协变的矢量算符，尽管在类空部分的前面是正号. 现在 (8.1.6) 式的协变性是绝对清晰的. 克莱因-戈尔登方程变成

$$[\partial_\mu\partial^\mu + m^2]\Psi(\mathbf{x},t) = 0. \tag{8.1.8}$$

有时，利用写成 $\partial^2 \equiv \partial_\mu\partial^\mu$，就可得到一个甚至更为简洁的记号.

克莱因-戈尔登方程的另一个令人满意的性质是：它有一些解，它们实际上就是所期待的质量为 m 的、自由的相对论粒子的解. 我们期待其时间的依赖性就像 $\exp(-iEt)$ 一样，其中 E 是哈密顿量的本征值. 还期待其空间依赖性如同一个平面波的一样，即对动量 $\mathbf{p}$ 有 $\exp(+i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x})$. 换句话说，解应该是

$$\Psi(\mathbf{x},t) = Ne^{-i(Et-\mathbf{p}\cdot\mathbf{x})} = Ne^{-ip^\mu x_\mu}, \tag{8.1.9}$$

其中 $p^\mu=(E,\mathbf{p})$. 的确，(8.1.9) 式是 (8.1.8) 式的解，只要

$$-p^\mu p_\mu + m^2 = -E^2 + \mathbf{p}^2 + m^2 = 0, \tag{8.1.10}$$

或 $E^2=E_p^2$. 这样，内含了能量本征值 $E=+E_p$，就像应该是的那样. 另一方面，负能本征值 $E=-E_p$ 也被包含了进来. 在相对论量子力学的发展历史中，这曾是一个严重的障碍，但很快将给出它的一个实用性的解释.

非相对论薛定谔波动方程有一个非常重要的性质，即它意味着概率是守恒的. (2.4.14) 式的概率密度 $\rho(\mathbf{x},t)=\psi^*\psi$ 是一个正定的量，并且 (2.4.16) 式的概率流遵从一个连续性方程 (2.4.15)，它证明了概率密度只能受到流入或流出一个确定区域的流的影响.

人们想用克莱因-戈尔登方程识别出一些类似的表达式，以便可以同样地解释波函数 $\Psi(\mathbf{x},t)$. 连续性方程的形式强烈地建议构建一个四矢量流 j^μ，它具有 $\partial_\mu j^\mu=0$ 的性质，且概率密度 $\rho\equiv j^0$. 事实上，如果遵照 (2.4.16) 式写出

$$j^\mu = \frac{i}{2m}[\Psi^*\partial^\mu\Psi - (\partial^\mu\Psi)^*\Psi] \tag{8.1.11}$$

那么，很容易证明 $\partial_\mu j^\mu=0$. 然后，可计算密度

$$\rho(\mathbf{x},t) = j^0(\mathbf{x},t) = \frac{i}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)^*\Psi\right] \tag{8.1.12}$$

尽管这个密度是守恒的，但它不是正定的！这在相对论量子力学的发展中曾是一个极大的问题，因为它使波函数的标准概率解释成为不可能了. 最终，一个自洽的物理解释被找到了. 不过，在讨论这个解释之前，需要在相对论框架的范围内考虑电磁相互作用效应.

克莱因-戈尔登方程明显的协变特性使我们能在哈密顿量中直接添加电磁相互作用. 参见 2.7 节，特别是 (2.7.23) 式和 (2.7.26) 式. 像以前一样，假定粒子有一个 $e<0$ 的电荷. 在一个经典的哈密顿量中，人们可做简单的替换*：$E\to E-e\Phi$ 和 $\mathbf{p}\to\mathbf{p}-e\mathbf{A}$，其中 Φ 是“标量”电势，$\mathbf{A}$ 是矢量势. 在协变形式中，这变成

$$p^\mu \to p^\mu - eA^\mu, \tag{8.1.13}$$

其中 $A^\mu=(\Phi,\mathbf{A})$，所以 $A_\mu=(\Phi,-\mathbf{A})$. 这一切都等同于把 (8.1.8) 式重写为

$$[D_\mu D^\mu + m^2]\Psi(\mathbf{x},t) = 0, \tag{8.1.14}$$

其中，$D_\mu\equiv\partial_\mu - ieA_\mu$. D_μ 称之为协变导数.

与非相对论薛定谔波动方程不同，克莱因-戈尔登方程对时间是二阶导数，而不是一

---

* 值得花费一些时间并回顾这些替换的来源. 构建一个拉格朗日量 L，它产生洛伦兹力定律，$\mathbf{F}=e[\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B}/c]$. 对坐标 x_i，正则动量是 $p_i\equiv\partial L/\partial\dot{x}_i=m\dot{x}_i+eA_i$. 因此，动能使用了“运动学动量” $m\dot{x}_i=p_i-eA_i$. 更多的细节可参见 Taylor (2005) 的 7.9 节. 将其扩展到相对论运动学是相对直接的. 用四动量 $p^\mu-eA^\mu$ 代替四动量 p^μ，见 Jackson (1998) 的 12.1A 节. 当用坐标空间工作时，(协变矢量) $p_\mu=(E,-\mathbf{p})$ 的量子力学算符是 $i\partial_\mu=(i\partial_t,i\nabla)$. 因此，为纳入电磁学，用 $i\partial_\mu-eA_\mu=i(\partial_\mu+ieA_\mu)\equiv iD_\mu$ 替换 $i\partial_\mu$.

阶导数. 这意味着，对于它的解人们不仅必须规定 $\Psi(\mathbf{x},t)|_{t=0}$，还要规定 $\partial\Psi(\mathbf{x},t)/\partial t|_{t=0}$. 于是，与最初可能预期基于非相对论量子力学的经验所相比，更多的信息是必需的. 实际上，这额外的“自由度”显示为粒子电荷的符号. 注意到，若 $\Psi(\mathbf{x},t)$ 是 (8.1.14) 式的解，则 $\Psi^*(\mathbf{x},t)$ 也是同一方程的解，但是需要取 $e\to -e$.

更明确地说，我们能把这个二阶的克莱因-戈尔登方程约化成两个一阶方程，然后基于电荷的符号解释这个结果. 使用一个相当明确的记号 $D_\mu D^\mu = D_t^2 - \mathbf{D}^2$，定义两个新的函数

$$\phi(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2}\left[\Psi(\mathbf{x},t) + \frac{i}{m}D_t\Psi(\mathbf{x},t)\right] \tag{8.1.15a}$$

$$\chi(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2}\left[\Psi(\mathbf{x},t) - \frac{i}{m}D_t\Psi(\mathbf{x},t)\right] \tag{8.1.15b}$$

很容易就能把 (8.1.14) 式写成两个方程，每个方程对时间都是一阶的，结果是替代规定 $\Psi(\mathbf{x},t)|_{t=0}$ 和 $\partial\Psi(\mathbf{x},t)/\partial t|_{t=0}$，可以规定 $\phi(\mathbf{x},t)|_{t=0}$ 和 $\chi(\mathbf{x},t)|_{t=0}$. 而且，$\phi(\mathbf{x},t)$ 和 $\chi(\mathbf{x},t)$ 满足耦合方程

$$iD_t\phi = -\frac{1}{2m}\mathbf{D}^2(\phi+\chi) + m\phi \tag{8.1.16a}$$

$$iD_t\chi = +\frac{1}{2m}\mathbf{D}^2(\phi+\chi) - m\chi, \tag{8.1.16b}$$

它们与非相对论薛定谔方程惊人地相似. 基于 $\phi(\mathbf{x},t)$ 和 $\chi(\mathbf{x},t)$ 这两个函数并使用泡利矩阵 (3.2.32) 式，通过定义一个二分量函数 $\Upsilon(\mathbf{x},t)$，我们能更漂亮地展示这种相似之处. 也就是说，对满足 (8.1.16) 式的 $\phi(\mathbf{x},t)$ 和 $\chi(\mathbf{x},t)$，定义一个列矢量函数

$$\Upsilon(\mathbf{x},t) \equiv \begin{bmatrix}\phi(\mathbf{x},t)\\ \chi(\mathbf{x},t)\end{bmatrix}. \tag{8.1.17}$$

可把克莱因-戈尔登方程写成

$$iD_t\Upsilon = \left[-\frac{1}{2m}\mathbf{D}^2(\tau_3 + i\tau_2) + m\tau_3\right]\Upsilon. \tag{8.1.18}$$

(注意，使用 τ 而不是 σ 表示泡利矩阵，以避免与自旋概念的任何混淆.) 方程 (8.1.18) 完全等价于在 (8.1.14) 式中的公式框架，但它是一个对时间的一阶微分方程. 我们把额外自由度“隐藏”在 $\Upsilon(\mathbf{x},t)$ 的二分量的性质之中了.

现在回到概率流密度问题. 既然我们已经用协变导数把克莱因-戈尔登方程改写为 (8.1.14) 式，则守恒流的正确形式是

$$j^\mu = \frac{i}{2m}[\Psi^* D^\mu\Psi - (D^\mu\Psi)^*\Psi] \tag{8.1.19}$$

因此，“概率”密度 (8.1.12) 式变成

$$\begin{aligned}\rho = j^0 &= \frac{i}{2m}[\Psi^* D_t\Psi - (D_t\Psi)^*\Psi]\\ &= \phi^*\phi - \chi^*\chi = \Upsilon^\dagger\tau_3\Upsilon.\end{aligned} \tag{8.1.20}$$

借助于 $\phi(\mathbf{x},t)$ 和 $\chi(\mathbf{x},t)$，使用 (8.1.15) 式写出 $\Psi(\mathbf{x},t)$ 和 $D_t\Psi$，很容易看到这一点.

因此，我们被引导到把 ρ 解释为一个概率电荷密度，其中 $\phi(\mathbf{x},t)$ 是一个正粒子的波函数，而 $\chi(\mathbf{x},t)$ 是一个负粒子的波函数. 也就是说，克莱因-戈尔登方程把一个有确定电荷的粒子和一个有相反电荷但行为完全相同的粒子所同时具有的自由度潜藏在里面了. 在把这些称为“粒子”和“反粒子”之前，我们应该返回并考虑负能解的

解释.

负能解的一个解释

首先考虑自由粒子，在那个情况下 $D_\mu=\partial_\mu$，并且对于它 $\Upsilon(\mathbf{x},t)\propto\exp[-i(Et-\mathbf{p}\cdot\mathbf{x})]$. 将它代入（8.1.18）式，当然就如同它应该的那样，产生了本征值 $E=\pm E_p$. 我们发现本征函数

$$\Upsilon(\mathbf{x},t)=\frac{1}{2(mE_p)^{1/2}}\begin{pmatrix}E_p+m\\ m-E_p\end{pmatrix}e^{-iE_pt+i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}\quad\text{对 } E=+E_p \tag{8.1.21a}$$

和

$$\Upsilon(\mathbf{x},t)=\frac{1}{2(mE_p)^{1/2}}\begin{pmatrix}m-E_p\\ E_p+m\end{pmatrix}e^{+iE_pt+i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}\quad\text{对 } E=-E_p \tag{8.1.21b}$$

它们的归一化导致 $E=\pm E_p$ 的电荷密度为 $\rho=\pm 1$. 也就是说，强加了一个条件：一个带负电荷的自由粒子被关联到一个具有负的总能量的粒子. 而且，对一个静止的粒子，$E_p=m$ 并且正能解（8.1.21a）只有上分量（即 $\chi(\mathbf{x},t)=0$），同时负能解（8.1.21b）只有下分量（即 $\phi(\mathbf{x},t)=0$）. 这对 $p\ll E_p$ 的非相对论情况仍然成立，并且正能解由 $\phi(\mathbf{x},t)$ 主导，而负能解由 $\chi(\mathbf{x},t)$ 主导.

对负能解意义的更深刻的理解来自于考虑概率流密度 $\mathbf{j}$. 使用（3.2.34）式，（3.2.35）式和（8.1.18）式，有

$$\begin{aligned}\partial_t\rho&=\partial_t(\Upsilon^\dagger\tau_3\Upsilon)=(\partial_t\Upsilon^\dagger)\tau_3\Upsilon+\Upsilon^\dagger\tau_3(\partial_t\Upsilon)\\&=\frac{1}{2im}[(\nabla^2\Upsilon^\dagger)(1+\tau_1)\Upsilon-\Upsilon^\dagger(1+\tau_1)(\nabla^2\Upsilon)]\\&=-\nabla\cdot\mathbf{j},\end{aligned}$$

其中

$$\mathbf{j}=\frac{1}{2im}[\Upsilon^\dagger(1+\tau_1)(\nabla\Upsilon)-(\nabla\Upsilon^\dagger)(1+\tau_1)\Upsilon]. \tag{8.1.22}$$

在一个自由粒子情况下，对正能量或负能量，这个概率流密度简化成

$$\mathbf{j}=\frac{\mathbf{p}}{m}\Upsilon^\dagger(1+\tau_1)\Upsilon=\frac{\mathbf{p}}{E_p}. \tag{8.1.23}$$

现在，这个结果显得十分奇怪. 使用分别把正电荷和负电荷强加于正能解和负能解这样的归一化，结果得到一个同样不管电荷及能量符号的电荷流密度. 一种“修复”这个问题的方法是承认（8.1.21b）式中动量矢量 $\mathbf{p}$ 的符号是“错误的”，因为我们想要指数具有 $ip_\mu x^\mu$ 的形式从而使其是相对论性不变的. 因此对负能解，也许要反转 $\mathbf{p}$ 的符号，在那种情况下，（8.1.23）式将会带着“正确的”符号解释粒子的电荷. 另一种“修复”这个问题的方法是说负能粒子是“在时间上向后”运动的. 这不仅反转了 $\mathbf{p}$ 的符号，而且也让（8.1.21b）式指数中的能量成为正的！我们已经与粒子和反粒子的通俗知识有了一些联系.

如果我们高兴，能正式地把正能解 $\Psi_{E>0}(\mathbf{x},t)$ 关联到对“粒子”的克莱因-戈尔登方程，而把负能解的复共轭 $\Psi^*_{E<0}(\mathbf{x},t)$ 关联到“反粒子”. 在这种情况下，（8.1.14）式产生了两个方程

$$[(\partial_\mu-ieA_\mu)(\partial^\mu-ieA_\mu)+m^2]\Psi_{\text{粒子}}(\mathbf{x},t)=0 \tag{8.1.24a}$$

$$[(\partial_\mu + ieA_\mu)(\partial^\mu + ieA_\mu) + m^2]\Psi_{\text{反粒子}}(\mathbf{x},t) = 0. \tag{8.1.24b}$$

这使我们清楚地知道如何将克莱因-戈尔登方程的解分裂成两个解，它们单独地对应着具有电荷为$\pm e$的粒子.

现在是一个很好的机会，从克莱因-戈尔登方程退后一步. 一直向前走，只要我们足够努力，就已经能够提出一个具有自由粒子解的相对论波动方程，该解能基于电荷符号相反的粒子和反粒子的观点解释. 这两个实体以分立的自由度出现在二分量波函数$\Upsilon(\mathbf{x},t)$中. 甚至可以走得更远，求解对于一个原子系统的克莱因-戈尔登方程，只要沿轨道运动的带电粒子没有自旋，其结果能很好地吻合实验. （参见本章末尾的习题 8.7.）

确实，任何自旋自由度的缺失，对氢原子的精细结构给出了错误的答案，在相对论量子力学的发展过程中克莱因-戈尔登方程注定要被撇在一边. 这些，以及（当时——译者注）还没有人曾看到过任何反粒子证据的事实，意味着有太多的事情需要被编造出来以解释负能解所有的古怪特性. 创建一个在空间和时间的导数是线性的波动方程吸引了狄拉克，激起他的信仰飞跃，给我们指出了一个富有成效的方向.

8.2　狄拉克方程

解释克莱因-戈尔登方程结果的很多困难源于这样一个事实：它是一个对时间的二阶微分方程. 这些困难包括一个非正定的概率密度和一个额外的自由度，尽管在某种程度上它们都可以被确认为粒子和它们带相反电荷的反粒子. 即便如此，狄拉克还是找到了一种方法写出一个对时间是一阶的波动方程. 在这个过程中，他发现了自然界中需要角动量为$j=1/2$的态. 这也适用于一个特别有用的负能态的解释.

我们所寻找的线性微分方程能被写成

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\Psi(\mathbf{x},t) = 0, \tag{8.2.1}$$

其中γ^μ还需确定.（当然，还必须确定常数m，但结果将证明它是质量.）仍需强调，要能够得到自由粒子（8.1.9）的正确的能量本征值（8.1.10），就像在（8.1.8）式中所做的那样. 只要将$-i\gamma^\nu\partial_\nu - m$作用于（8.2.1）式而得到，

$$(\gamma^\nu\partial_\nu\gamma^\mu\partial_\mu + m^2)\Psi(\mathbf{x},t) = 0 \tag{8.2.2}$$

然后强加条件$\gamma^\nu\gamma^\mu\partial_\nu\partial_\mu = \partial^\mu\partial_\mu = \eta^{\mu\nu}\partial_\nu\partial_\mu$，就能简单地把（8.2.1）式变成（8.1.8）式. 通过调换哑指标来对称化

$$\frac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu) \equiv \frac{1}{2}\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\} = \eta^{\mu\nu} \tag{8.2.3}$$

这个条件能简便地写出来. 这样四个量γ^μ，$\mu=0$，1，2，3，不简单地是复数，而更确切地是遵从一种所谓的克利福德（Clifford）代数的实体. 显然，这个代数意味着

$$(\gamma^0)^2 = 1 \tag{8.2.4a}$$

$$(\gamma^i)^2 = -1 \qquad i = 1,2,3 \tag{8.2.4b}$$

和

$$\gamma^\mu\gamma^\nu = -\gamma^\nu\gamma^\mu \quad \text{如果 } \mu \neq \nu. \tag{8.2.4c}$$

注意γ^μ的反对易性意味着这些矩阵中的每一个都是无迹的.

现在，把自由粒子解（8.1.9）代入（8.2.1）式发现

$$\gamma^{\mu}p_{\mu}-m=0, \tag{8.2.5}$$

由它可重新获得自由粒子能量本征值 E. 把（8.2.5）式写成类时和类空的两部分，然后整体乘以 γ^0，得到

$$E=\gamma^0\boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{p}+\gamma^0 m. \tag{8.2.6}$$

这导致一个按照传统形式写出的狄拉克哈密顿量. 定义

$$\alpha_i\equiv\gamma^0\gamma^i \quad 和\ \beta\equiv\gamma^0, \tag{8.2.7}$$

得到

$$H=\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}+\beta m. \tag{8.2.8}$$

注意，如果通过把（8.1.13）式代入（8.2.5）式，然后令 $\mathbf{A}=0$ 和 $A_0=\Phi$，把电磁场添加进来，有

$$H=\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}+\beta m+e\Phi, \tag{8.2.9}$$

它控制着一个带电粒子在静电势 Φ 中的运动. 在8.4节求解相对论性单电子原子时，我们将用到它.

使用哪种形式的狄拉克方程，是具有（8.2.8）或（8.2.9）式的（8.1.1）式，还是或许代入了（8.1.13）式的协变形式（8.2.1），取决于具体的问题. 例如，当求解包含动力学和狄拉克方程的问题时，有时使用（8.2.8）式更容易些，然而讨论狄拉克方程的对称性时，使用有 γ^{μ} 的协变形式更方便.

代数（8.2.4）可用方矩阵实现，只要它们至少是4×4的. 我们知道，2×2矩阵不够大，例如因为泡利矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 与单位矩阵一起形成一组完备基. 然而 $\{\sigma_k,1\}=2\sigma_k$，所以这组基不够大到足以实现克利福德代数. 因此，（8.2.1）式中的 $\Psi(\mathbf{x},t)$ 将是一个四维列矢量. 为了保持一个与态和算符的矩阵表示自洽的约定，坚持 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 均为厄米矩阵. 注意，这意味着 γ^0 是厄米的，而 $\boldsymbol{\gamma}$ 是反厄米的.

选用2×2泡利自旋矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$（3.2.32）式，并写出

$$\boldsymbol{\alpha}=\begin{bmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{bmatrix} \quad 和 \quad \beta=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}. \tag{8.2.10}$$

也就是说，把这些4×4矩阵写成2×2矩阵的2×2矩阵.

守恒流

狄拉克方程马上解决了概率密度的正定性问题. 用通常的方法定义 $\Psi^{\dagger}$，即相应于列矢量 Ψ 的行矢量的复共轭，我们能证明量 $\rho=\Psi^{\dagger}\Psi$ 实际上可解释为一个概率密度. 首先，作为 $\Psi(\mathbf{x},t)$ 的所有四分量大小的平方之和，它是正定的.

历史上，狄拉克方程能提供一个正定的概率流（原文如此，疑为概率密度. ——译者注）的能力曾是该方程被采纳为相对论量子力学的正确方向的主要原因之一. 其自由粒子解的考察导致了一个负能的引人注目的解释，并实际上导致了正电子的发现.

其次，它满足连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{j}=0, \tag{8.2.11}$$

其中 $\mathbf{j}=\Psi^{\dagger}\boldsymbol{\alpha}\Psi$. [这很容易证明. 就用薛定谔（原文肯定有误，应为狄拉克. ——译者注）方程和它的伴随方程即可. 参见本章末尾的习题8.10.] 这意味着 ρ 仅在一个流流入或流

出所感兴趣的中间区域的基础上才能改变，因此它是一个守恒量.

在构成概率密度和概率流时，人们通常用 $\overline{\Psi}=\Psi^{\dagger}\beta=\Psi^{\dagger}\gamma^{0}$，而不用 $\Psi^{\dagger}$. 在这个情况下，$\rho=\Psi^{\dagger}\Psi=\Psi^{\dagger}\gamma^{0}\gamma^{0}\Psi=\overline{\Psi}\gamma^{0}\Psi$ 和 $\mathbf{j}=\Psi^{\dagger}\gamma^{0}\gamma^{0}\alpha\Psi=\overline{\Psi}\gamma^{0}\alpha\Psi$. 因为由 (8.2.7) 式有 $\gamma^{0}\alpha=\gamma$，有

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\Psi}\gamma^{0}\Psi)+\nabla\cdot(\overline{\Psi}\gamma\Psi)=\partial_{\mu}j^{\mu}=0, \tag{8.2.12}$$

其中

$$j^{\mu}=\overline{\Psi}\gamma^{\mu}\Psi \tag{8.2.13}$$

是一个四矢量流. 基于四动量，把 (8.2.1) 式重写为

$$(\gamma^{\mu}p_{\mu}-m)\Psi(\mathbf{x},t)=0, \tag{8.2.14}$$

并且还可取这个方程的伴随方程，并用 (8.2.4) 式插入一个 γ^{0} 的因子，

$$\overline{\Psi}(\mathbf{x},t)(\gamma^{\mu}p_{\mu}-m)=0 \tag{8.2.15}$$

得到对于一个自由粒子的守恒流的意义深刻的解释. 写出

$$\begin{aligned}j^{\mu}&=\frac{1}{2}\{[\overline{\Psi}\gamma^{\mu}]\Psi+\overline{\Psi}[\gamma^{\mu}\Psi]\}\\&=\frac{1}{2m}\{[\overline{\Psi}\gamma^{\mu}]\}\gamma^{\nu}p_{\nu}\Psi+\overline{\Psi}\gamma^{\nu}p_{\nu}[\gamma^{\mu}\Psi]\}\\&=\frac{1}{2m}\overline{\Psi}[\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}+\gamma^{\nu}\gamma^{\mu}]p_{\nu}\Psi\\&=\frac{p^{\mu}}{m}\overline{\Psi}\Psi.\end{aligned} \tag{8.2.16}$$

这样，把通常的洛伦兹收缩因子写成 γ，就得到了

$$j^{0}=\frac{E}{m}\overline{\Psi}\Psi=\gamma[\Psi_{\text{上}}^{\dagger}\ \Psi_{\text{上}}-\Psi_{\text{下}}^{\dagger}\Psi_{\text{下}}] \tag{8.2.17}$$

和

$$\mathbf{j}=\frac{\mathbf{p}}{m}\overline{\Psi}\ \Psi=\gamma\mathbf{v}[\Psi_{\text{上}}^{\dagger}\ \Psi_{\text{上}}-\Psi_{\text{下}}^{\dagger}\Psi_{\text{下}}]. \tag{8.2.18}$$

因为沿运动方向上体积元 $d^{3}x$ 的洛伦兹收缩，因子 γ 是预期的（延伸讨论请参见 Holstein 1992）. 在研究了自由粒子的特解后，上下分量相对负号的意义就变得更清楚了.

自由粒子解

现在需要研究狄拉克方程的解和它们的对称性性质了. 然而我们已经注意到，波函数 $\Psi(\mathbf{x},t)$ 有四个分量，而克莱因-戈尔登方程波函数 $\Upsilon(\mathbf{x},t)$ 只有两个分量. 我们将看到狄拉克方程中的这个额外的自由度就是本书开始时称为“自旋 1/2”的相同的量. 这个四分量的实体 $\Psi(\mathbf{x},t)$ 被称为旋量.

仅仅通过考虑静止的自由粒子（$\mathbf{p}=\mathbf{0}$），我们马上就可以深刻理解狄拉克方程解的本质. 在这种情况下，狄拉克方程就只是 $i\partial_{t}\Psi=\beta m\Psi$. 给定对角形式的 β (8.2.10) 式，我们看到 $\Psi(\mathbf{x},t)$ 有四个独立的解. 这些解是

$$\Psi_{1}=e^{-imt}\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}\quad\Psi_{2}=e^{-imt}\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}\quad\Psi_{3}=e^{+imt}\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}\quad\Psi_{4}=e^{+imt}\begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}. \tag{8.2.19}$$

正像克莱因-戈尔登方程的情况，波函数的下半部分对应着负能，稍后将需要处理这些方程的解释．然而狄拉克波函数的上半部分和下半部分都有一个很容易让我们称为“自旋向上”的分量，和另一个称为“自旋向下”的分量．实际上，这个解释是正确的，但在我们能充满信心地说这些之前，我们需要有点更高的期望．

让我们继续考虑具有非零动量 $\mathbf{p}=p\hat{\mathbf{z}}$ 的自由粒子解，即一个沿 z 方向自由运动的粒子．在这种情况下，我们想要求解 $H=\alpha_z p+\beta m$ 的本征值问题 $H\Psi=E\Psi$，这个哈密顿量在旋量空间不再是对角的了．这个本征值方程变成

$$\begin{bmatrix} m & 0 & p & 0 \\ 0 & m & 0 & -p \\ p & 0 & -m & 0 \\ 0 & -p & 0 & -m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix}=E\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix}. \tag{8.2.20}$$

注意，u_1 和 u_3 的方程是耦合在一起的，u_2 和 u_4 分量的方程也一样，但是这些分量与前两个分量是相互独立的．这使得寻找本征值和本征函数的工作变简单了．细节将留作练习．（参见本章末尾的习题8.11.）从耦合 u_1 和 u_3 的两个方程，我们发现 $E=\pm E_p$．对耦合 u_2 和 u_4 的两个方程，我们发现了相同的结果．我们又一次发现了预期的“正确”的正能本征值，而且也发现了“伪”负能解．然而在狄拉克方程的情况下，一个相对满意的解释即将来到，正如马上就要看到的．

然而，首先回到自旋问题．继续构建自由粒子的旋量．对 $E=+E_p$，可令 $u_1=1$（并且 $u_2=u_4=0$），那么 $u_3=+p/(E_p+m)$，或者 $u_2=1$（并且 $u_1=u_3=0$），那么 $u_4=-p/(E_p+m)$．正如对于克莱因-戈尔登方程那样，在非相对论情况下，这两个情况的上分量都是处于主导地位的．同样，对 $E=-E_p$，非零分量是 $u_3=1$ 和 $u_1=-p/(E_p+m)$，或者 $u_4=1$ 和 $u_2=p/(E_p+m)$，并且在非相对论情况下，下分量是起主导作用的．

现在考虑算符 $\mathbf{\Sigma}\cdot\hat{\mathbf{p}}=\Sigma_z$ 的行为，其中 $\mathbf{\Sigma}$ 是 4×4 的矩阵

$$\mathbf{\Sigma}\equiv\begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{bmatrix}. \tag{8.2.21}$$

我们预期这个算符能把自旋投影得到沿动量方向的分量．的确，很容易看到，对于 $u_1\neq0$（$u_2\neq0$）的正能解自旋算符 $\mathbf{S}=\frac{h}{2}\mathbf{\Sigma}$ 投影得到正（负）螺旋度．我们发现对负能解有类似的结果．换句话说，自由粒子解的行为确实适当地与我们所推测的自旋向上/向下的那种配置相符．

将这些整合到一起，可把正能解写成

$$u_R^{(+)}(p)=\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{p}{E_p+m} \\ 0 \end{bmatrix}\qquad u_L^{(+)}(p)=\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dfrac{-p}{E_p+m} \end{bmatrix}\qquad \text{对}\quad E=+E_p, \tag{8.2.22a}$$

其中，下角标 R（L）表示右（左）手性，即正（负）螺旋度．对负能解，我们有

$$u_R^{(-)}(p)=\begin{bmatrix} \dfrac{-p}{E_p+m} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}\qquad u_L^{(-)}(p)=\begin{bmatrix} 0 \\ \dfrac{p}{E_p+m} \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}\qquad \text{对}\quad E=-E_p. \tag{8.2.22b}$$

这些旋量归一化到因子 $2E_p/(E_p+m)$. 把归一化以及因子 $\exp(-ip_\mu x^\mu)$ 都包括进来，就构成了自由粒子的波函数.

负能的解释

为了解释负能解，狄拉克使用了泡利不相容原理. 人们猜想有一个充满了电子的“负能海”，如图 8.1 所示. (它代表了一个无穷大能量和无穷大电荷的“背景”，但可以想象，我们对这两者都不会敏感.) 由于这已填满了所有的负能态，不可能再允许正能电子掉进负能态. 然而一个高能光子有可能把一个电子从海中提升到正能，在那里它能被观测到. 在海中遗留的“空穴”也将可能被观测到，它作为一个实体具有一个电子所有的性质，但携带正电荷.

图 8.1 也展示了安德森 (Carl Anderson)，在 1933 年最先发现的正电子. 在这个发现之后，狄拉克方程变成了相对论量子力学的标准处理方法，它解释了自旋$\frac{1}{2}$的电子 (如同我们将要看到的) 以及它的电磁相互作用.

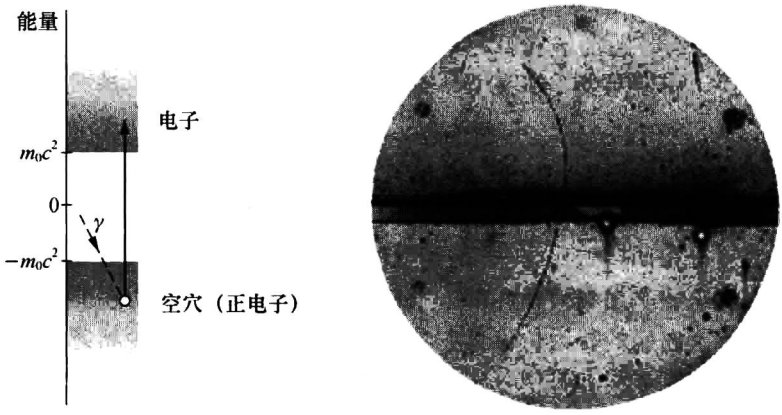


图 8.1　左图显示了狄拉克对负能态的解释，包括一个负能电子被激发到正能并留下一个正电荷的空穴，或一个“正电子”，的可能性. 右边的图中，云室的照片记录了安德森发现的正电子，取自 *Physical Review* **43** (1933) 491. 它展示了一条被已知磁场弯曲而向上运动的粒子径迹. 由于粒子穿越铅板时丢失了能量，因而在铅板上方的曲率大于下方的曲率，粒子运动的方向就被确定了. 丢失的能量数值与具有这个动量的质子不一致，但与一个具有电子质量的粒子吻合.

电磁相互作用

我们利用曾对克莱因-戈尔登方程用过的同样方法在狄拉克方程中引入电磁相互作用，即通过使用

$$\tilde{\mathbf{p}} \equiv \mathbf{p} - e\mathbf{A} \tag{8.2.23}$$

和在 2×2 矩阵形式中，狄拉克方程为

$$\begin{bmatrix} m & \boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}} & -m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = E\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \text{其中 } \Psi = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}. \tag{8.2.24}$$

在非相对论（正）能量 $E=K+m$ 时，动能 $K\ll m$，因而上式中靠下的方程变成

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}}u=(E+m)v\approx 2mv, \tag{8.2.25}$$

它使我们能把靠上的方程写成

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}})}{2m}u=\left[\frac{\tilde{\mathbf{p}}^2}{2m}+\frac{i\boldsymbol{\sigma}}{2m}\cdot(\tilde{\mathbf{p}}\times\tilde{\mathbf{p}})\right]u=Ku, \tag{8.2.26}$$

其中，用到了（3.2.39）式. 现在，在坐标表象有

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{p}}\times\tilde{\mathbf{p}}u&=(i\nabla+e\mathbf{A})\times(i\nabla u+e\mathbf{A}u)\\&=ie[\nabla\times(\mathbf{A}u)+\mathbf{A}\times\nabla u]\\&=ie(\nabla\times\mathbf{A})u=ie\mathbf{B}u,\end{aligned} \tag{8.2.27}$$

其中 $\mathbf{B}$ 是与矢势 $\mathbf{A}$ 相关的磁场. 因此，(8.2.26) 式变成

$$\left[\frac{\tilde{\mathbf{p}}^2}{2m}-\mu\cdot\mathbf{B}\right]u=Ku, \tag{8.2.28}$$

其中

$$\mu=g\frac{e}{2m}\mathbf{S} \tag{8.2.29}$$

且

$$\mathbf{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{8.2.30}$$

及

$$g=2. \tag{8.2.31}$$

换句话说，在非相对论情况下，具有磁场的狄拉克方程约化成（8.2.28）式，该方程正是对一个处于外磁场中磁矩为 $\boldsymbol{\mu}$ 的粒子的时间无关（具有能量本征值 K）的薛定谔方程. 这个磁矩是从自旋算符在回转磁比 $g=2$ 的情况下推导出来的.

这让我们走过了一个完整的循环. 本书由讨论具有磁矩的粒子在非均匀磁场中的行为开始，在那里显示了它们的行为仿佛具有量子化的自旋投影到两种状态中的一个. 现在我们看到，对遵从狄拉克方程的粒子，这些现象源于相对论和量子力学的考虑.

8.3 狄拉克方程的对称性

现在考察狄拉克方程中一些内在的对称性. 我们将考虑这样的情况，一个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子位于某外部势中，即方程

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x},t)=H\Psi(\mathbf{x},t)=E\Psi(\mathbf{x},t) \tag{8.3.1}$$

的解，其中对于某势能函数 $V(\mathbf{x})$，H 为

$$H=\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}+\beta m+V(\mathbf{x}). \tag{8.3.2}$$

当然，这个形式破坏了我们写出一个协变方程的能力，但是如果我们想要谈及势能，这是一个必然的惩罚. 不过，注意到在电磁相互作用的情况下，如果选择一个矢势 $\mathbf{A}=0$ 的参考架，能由协变方程最终严格地得到这个形式.

角动量

关于三维波动力学的转动不变性的讨论集中于轨道角动量算符 $\mathbf{L}=\mathbf{x}\times\mathbf{p}$ 与具有“中心

势”的哈密顿量对易的事实. 这反过来取决于 $\mathbf{L}$ 与 $\mathbf{p}^2$ 对易，因此也与动能算符及 $\mathbf{x}^2$ 对易的这样的事实. [参见 (3.7.2) 式.]

现在首先考虑对于自由的狄拉克哈密顿量 (8.2.8) 式的对易子 $[H,\mathbf{L}]$. 显然，$[\beta,\mathbf{L}]=0$，所以需要考虑对易子

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p},L_i]&=[\alpha_l p_l,\epsilon_{ijk}x_j p_k]\\&=\epsilon_{ijk}\alpha_l[p_l,x_j]p_k\\&=-i\epsilon_{ijk}\alpha_j p_k\neq 0.\end{aligned}\tag{8.3.3}$$

(回顾重复指标求和的约定.) 换句话说，轨道角动量算符与狄拉克哈密顿量不对易！因此，无论是对自由的还是对束缚在中心势中的自旋$\frac{1}{2}$的粒子，$\mathbf{L}$ 都将不是一个守恒量.

然而，考虑自旋算符 (8.2.21) 式以及它与哈密顿量的对易子. 很容易证明 $\beta\Sigma_i=\Sigma_i\beta$. 利用 (3.2.35) 式也很容易证明 $[\alpha_i,\Sigma_j]=2i\epsilon_{ijk}\alpha_k$. 因此，需要计算

$$[\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p},\Sigma_j]=[\alpha_i,\Sigma_j]p_i=2i\epsilon_{ijk}\alpha_k p_i,\tag{8.3.4}$$

这样，我们看到 (暂时把 $\hbar$ 放回去)，尽管 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 都不与自由狄拉克哈密顿量对易，但组合的矢量算符

$$\mathbf{J}\equiv\mathbf{L}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{L}+\mathbf{S}\tag{8.3.5}$$

确实与该哈密顿量对易. 也就是说，狄拉克哈密顿量使总角动量守恒，但轨道角动量或自旋角动量单独都不守恒.

宇称

在 $V(\mathbf{x})=V(|\mathbf{x}|)$ 的情况下，期望解是宇称对称的. 也就是说，应该有 $\Psi(-x)=\pm\Psi(\mathbf{x})$. 然而，看来情况并非如此，因为假如 $\mathbf{x}\to-\mathbf{x}$，则在 (8.3.2) 式中 $\mathbf{p}\to-\mathbf{p}$，并且哈密顿量的形式也变了. 但这简单的一瞥并没有考虑到旋量的宇称变换.

的确，在 4.2 节中讨论过的宇称变换算符 π 仅涉及坐标反射. 也就是说，π 是一个幺正 (而且也是厄米的) 算符，它具有

$$\pi^\dagger\mathbf{x}\pi=-\mathbf{x}\tag{8.3.6a}$$

$$\pi^\dagger\mathbf{p}\pi=-\mathbf{p}\tag{8.3.6b}$$

的性质. (见方程 (4.2.3) 和 (4.2.10) 式.)全宇称算符，称其为$\mathcal{P}$，需要扩充一个幺正算符 U_P，该算符在旋量空间为 4×4 矩阵，它确保了哈密顿量 (8.3.2) 式在宇称变换下的不变性. 也就是说，

$$\mathcal{P}\equiv\pi U_P,\tag{8.3.7}$$

其中矩阵 U_P 必须有下述性质：

$$U_P\boldsymbol{\alpha}U_P^\dagger=-\boldsymbol{\alpha}\tag{8.3.8a}$$

和

$$U_P\beta U_P^\dagger=\beta\tag{8.3.8b}$$

以及

$$U_P^2=1.\tag{8.3.8c}$$

显然，$U_P=\beta=\beta^\dagger$ 与这些要求相吻合. 因此，一个对狄拉克哈密顿量的宇称变换是由 $\mathbf{x}\to-\mathbf{x}$ 并左乘和右乘 β 构成的. 一个旋量 $\Psi(\mathbf{x})$ 的变换，给出了 $\beta\Psi(-\mathbf{x})$.

因此，在 $V(\mathbf{x})=V(|\mathbf{x}|)$ 的情况下，我们期望找到狄拉克哈密顿量和宇称、$\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的

共同本征态. 幸运的是，我们已经构建了这些本征函数的角度和旋量部分. 它们是(3.8.64)式中定义的二分量**自旋-角**函数$\mathcal{Y}_l^{j=l\pm1/2,m}(\theta,\phi)$. 当着手对8.4节中该形式的具体势能函数求解狄拉克方程时，会用到这些函数.

电荷共轭

在（8.1.24）式中可以看到：对克莱因-戈尔登方程，基于如下关系

$$\Psi_{\text{粒子}}(\mathbf{x},t)\equiv\Psi_{E>0}(\mathbf{x},t) \tag{8.3.9a}$$

$$\Psi_{\text{反粒子}}(\mathbf{x},t)\equiv\Psi^*_{E<0}(\mathbf{x},t), \tag{8.3.9b}$$

能把正能解和负能解分裂成“粒子”解和“反粒子”解. 对狄拉克方程，力求建立一种类似的关系，并探索把这两个解联系起来的一个对称性算符.

对于我们的目的，反粒子应是一个其波函数行为恰如一个粒子一样的实体，但携带相反的电荷. 所以，回到狄拉克方程的协变形式（8.2.1），并按照通常的方案（8.1.13）加入电磁场. 有

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu-e\gamma^\mu A_\mu-m)\Psi(\mathbf{x},t)=0. \tag{8.3.10}$$

寻求一个方程，其中$e\to-e$而且将新的波函数与$\Psi(\mathbf{x},t)$联系起来. 关键是（8.3.10）式中的算符有三项，其中只有两项含有γ^μ，并且这两项中只有一项带有i. 所以取这个方程的复共轭，得到

$$[-i(\gamma^\mu)^*\partial_\mu-e(\gamma^\mu)^*A_\mu-m]\Psi^*(\mathbf{x},t)=0. \tag{8.3.11}$$

且前两项的相对符号改变了. 如果现在我们能确认一个矩阵$\tilde{C}$，使得

$$\tilde{C}(\gamma^\mu)^*\tilde{C}^{-1}=-\gamma^\mu. \tag{8.3.12}$$

我们就可以在（8.3.11）式的波函数前面插入$1=\tilde{C}^{-1}\tilde{C}$，并在方程左面乘以$\tilde{C}$. 其结果是

$$[i\gamma^\mu\partial_\mu+e\gamma^\mu A_\mu-m]\tilde{C}\Psi^*(\mathbf{x},t)=0. \tag{8.3.13}$$

因此，波函数$\tilde{C}\Psi^*(\mathbf{x},t)$满足“正电子”方程（8.3.13），而$\Psi(\mathbf{x},t)$满足“电子”方程(8.3.10).

现在需要确定矩阵$\tilde{C}$. 由（8.2.7）和（8.2.10）式，可以看到γ^0，γ^1，γ^3是实矩阵，但$(\gamma^2)^*=-\gamma^2$. 若有

$$\tilde{C}=i\gamma^2 \tag{8.3.14}$$

(8.3.12)式就可以成立. 所以对应于$\Psi(\mathbf{x},t)$的“正电子波”函数就是$i\gamma^2\Psi^*(\mathbf{x},t)$. 事实证明用$\bar{\Psi}=\Psi^\dagger\gamma^0=(\Psi*)^T\gamma^0$写这个波函数可能更方便.（上角标$T$表示“转置”.）这意味着“正电子”波函数能被写成

$$\tilde{C}\Psi^*(\mathbf{x},t)=i\gamma^2(\bar{\Psi}\gamma^0)^T=U_C(\bar{\Psi})^T, \tag{8.3.15}$$

其中

$$U_C\equiv i\gamma^2\gamma^0. \tag{8.3.16}$$

所以，电荷共轭算符是$\mathcal{C}$，它满足

$$\mathcal{C}\Psi(\mathbf{x},t)=U_C(\bar{\Psi})^T. \tag{8.3.17}$$

注意，由于$\mathcal{C}$等效于取$\mathbf{x}\to-\mathbf{x}$和$t\to-t$，所以使得自由粒子波函数$\Psi(\mathbf{x},t)$时空部分的变化$\propto\exp(-ip^\mu x_\mu)$，

时间反演

现在把 4.4 节的想法应用于狄拉克方程. 首先做一个简单扼要的回顾. 这个讨论依靠 (4.4.14) 式定义的一个反幺正算符 θ,

$$\theta = UK, \tag{8.3.18}$$

其中 U 是一个幺正算符，K 是对其后的任何复数取复共轭的一个算符. 显然，K 不会影响到右边的右矢，且 $K^2=1$.

基于这点，定义一个反幺正算符 Θ，它将一个任意态 $|\alpha\rangle$ 变换到它的时间反演（或更恰当地说是一个运动反演）态 $|\tilde{\alpha}\rangle$，即

$$\Theta|\alpha\rangle = |\tilde{\alpha}\rangle. \tag{8.3.19}$$

对 Θ 强加两个合理的要求，即 (4.4.45) 和 (4.4.47) 式，也就是说，

$$\Theta \mathbf{p} \Theta^{-1} = -\mathbf{p} \tag{8.3.20a}$$

$$\Theta \mathbf{x} \Theta^{-1} = \mathbf{x} \tag{8.3.20b}$$

所以

$$\Theta \mathbf{J} \Theta^{-1} = -\mathbf{J}. \tag{8.3.20c}$$

对于与 Θ 对易的哈密顿量，我们曾给出 (4.4.59) 式的重要的观察结果：能量本征态 $|n\rangle$ 与它对应的时间反演态 $\Theta|n\rangle$ 具有相同的能量本征值. 我们进一步知道将 Θ 对一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的态作用两次会得到 $\Theta^2=-1$，因为形如 (4.4.65) 式的二分量旋量表明

$$\Theta = -i\sigma_y K. \tag{8.3.21}$$

换句话说，在 (8.3.18) 式中，$U=-i\sigma_y$. 的确，在这种情况下，

$$\Theta^2 = -i\sigma_y K(-i\sigma_y K) = \sigma_y \sigma_y^* K^2 = -1. \tag{8.3.22}$$

把时间反演用到现在讨论的狄拉克方程将看到类似的事情.

回到使用狄拉克哈密顿量 (8.2.7) 式的薛定谔方程 (8.1.1)，但用 γ 矩阵代替 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β，有

$$i\partial_t \Psi(\mathbf{x},t) = [-i\gamma^0 \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla + \gamma^0 m]\Psi(\mathbf{x},t), \tag{8.3.23}$$

沿用本节开始时的框架，把时间反演算符写为 $\mathcal{T}$ 而不是 Θ，这里

$$\mathcal{T} = U_T K \tag{8.3.24}$$

且 U_T 是一个要确定的幺正矩阵. 像以前一样，在方程左边和右边的波函数前插入 $\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}$ 并整体左乘 $\mathcal{T}$. 方程 (8.3.23) 的左边就变成

$$\begin{aligned}\mathcal{T}(i\partial_t)\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}\Psi(\mathbf{x},t) &= U_T K(i\partial_t)KU_T^{-1}U_T\Psi^*(\mathbf{x},t)\\ &= -i\partial_t U_T\Psi^*(\mathbf{x},t) = i\partial_{-t}[U_T\Psi^*(\mathbf{x},t)],\end{aligned} \tag{8.3.25}$$

在最后一步改变了导数中 t 的符号，这正是我们所需要的. 为了使 $[U_T\Psi^*(\mathbf{x},t)]$ 满足 (8.3.23) 式的时间反演形式，必须强调

$$\mathcal{T}(i\gamma^0\boldsymbol{\gamma})\mathcal{T}^{-1} = i\gamma^0\boldsymbol{\gamma} \tag{8.3.26a}$$

和

$$\mathcal{T}(\gamma^0)\mathcal{T}^{-1} = \gamma^0. \tag{8.3.26b}$$

这些式子很容易转换成为更方便的形式，以使我们能确定 U_T. 首先把 $\mathcal{T}^{-1}$ 作用于左边，把 $\mathcal{T}$ 作用于右边. 接着，将 K 作用于左边和右边. 最后，在 (8.3.26a) 式的 γ 矩阵间插入 $U_T U_T^{-1}$，然后使用 (8.3.26b) 式的结果. 这两个结果变成了

$$U_T^{-1}(\boldsymbol{\gamma})U_T = -(\boldsymbol{\gamma})^* \tag{8.3.27a}$$

和

$$U_T^{-1}(\gamma^0)U_T = (\gamma^0)^*. \tag{8.3.27b}$$

现在具体化到对 γ 矩阵的选择，与（8.2.7）式一起的（8.2.10）式. 在这个表示中，只有 γ^2 是虚的. 因此，如果想要用 γ 矩阵构建一个 U_T，则（8.3.27）式说明，我们需要一个混合矩阵，它与 γ^0 和 γ^2 对易时不改变符号，而与 γ^1 和 γ^3 对易时确需改变符号. 很明显，这最多在差一个任意相因子的情况下，可通过

$$U_T = \gamma^1\gamma^3 \tag{8.3.28}$$

实现. 的确，这个做法等价于（8.3.21）式中 $U=i\sigma_y$ 的结果. 见本章末尾的习题 8.13.

CPT

我们以简要地概述组合算符 $\mathcal{CPT}$ 作为结束. 给出了上述的讨论之后，这个组合算符对一个狄拉克波函数 $\Psi(\mathbf{x},t)$ 的作用就可直接求出来. 也就是说，

$$\begin{aligned}\mathcal{CPT}\Psi(\mathbf{x},t) &= i\gamma^2[\mathcal{PT}\Psi(\mathbf{x},t)]^* \\ &= i\gamma^2\gamma^0[\mathcal{T}\Psi(-\mathbf{x},t)]^* \\ &= i\gamma^2\gamma^0\gamma^1\gamma^3\Psi(-\mathbf{x},t) = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\Psi(-\mathbf{x},t).\end{aligned} \tag{8.3.29}$$

γ 矩阵的这个组合是众所周知的，事实上它被赋予了一个特殊的名字. 定义

$$\gamma^5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3. \tag{8.3.30}$$

在基（8.2.10）式中，再次把 4×4 矩阵写成 2×2 矩阵的 2×2 矩阵，发现

$$\gamma^5 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{8.3.31}$$

也就是说，γ^5（因此 $\mathcal{CPT}$ 也）翻转了狄拉克波函数中的上面的和下面的二分量旋量. 事实上，$\mathcal{CPT}$ 作用在一个自由电子波函数上的净效应是把它转换成“正电子”波函数. 见本章末尾的习题 8.14.

这是对相对论量子场论中一个深奥概念看到的“冰山一角”. 只要人们对所有潜在的末态积分，则 $\mathcal{CPT}$ 不变性的概念等价于物质和反物质的一个总对称性. 例如，它预言了任意粒子的质量一定等于相应反粒子的质量.

确实，尽管远非直接，但人们可以证明，任何洛伦兹不变的量子场论在 $\mathcal{CPT}$ 变换下是不变的. 特别是在当今这个时代，当弦理论提供了洛伦兹不变性在接近普朗克质量的距离上被破坏的可能性时，这个意义是深远的. 对更多的细节，读者可参考大量高级教材中的任何一部，还有当前的文献.

8.4 求解中心势问题

我们的目标是求解本征值问题

$$H\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}), \tag{8.4.1}$$

其中

$$H = \boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \beta m + V(r), \tag{8.4.2}$$

并且用两个二分量波函数 $\psi_1(\mathbf{x})$ 和 $\psi_2(\mathbf{x})$ 把四分量波函数 $\Psi(\mathbf{x})$ 写成

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \end{bmatrix}. \tag{8.4.3}$$

基于已经讨论过的狄拉克方程的对称性，期待 $\Psi(\mathbf{x})$ 是宇称、$\mathbf{J}^2$ 和 J_z 的本征函数.

宇称守恒意味着 $\beta\Psi(-\mathbf{x}) = \pm\Psi(\mathbf{x})$. 给定 β 的形式（8.2.10）式，这就意味着

$$\begin{bmatrix} \psi_1(-\mathbf{x}) \\ -\psi_2(-\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \pm \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \end{bmatrix}. \tag{8.4.4}$$

这为我们留下了两个选择：

$$\psi_1(-\mathbf{x}) = +\psi_1(\mathbf{x}) \text{ 和 } \psi_2(-\mathbf{x}) = -\psi_2(\mathbf{x}) \tag{8.4.5a}$$

或

$$\psi_1(-\mathbf{x}) = -\psi_1(\mathbf{x}) \text{ 和 } \psi_2(-\mathbf{x}) = +\psi_2(\mathbf{x}). \tag{8.4.5b}$$

这些条件由（3.8.64）式定义的旋量函数 $\mathcal{Y}_l^{jm}(\theta,\phi)$ 巧妙地实现了，在那里 $l = j \pm (1/2)$. 对一个给定的 j 值，一个可能的 l 值是偶的，而另一个是奇的. 因为任何一个给定 Y_l^m 的宇称是 $(-1)^l$，我们给出了条件（8.4.5）式的角动量和旋量依赖关系的两种自然选择. 当 $j-1/2$ 为偶（奇）数时，偶（奇）宇称解可写为

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Psi_A(\mathbf{x}) \equiv \begin{bmatrix} u_A(r)\,\mathcal{Y}_{j-1/2}^{jm}(\theta,\phi) \\ -iv_A(r)\,\mathcal{Y}_{j+1/2}^{jm}(\theta,\phi) \end{bmatrix}. \tag{8.4.6a}$$

或者当 $j-1/2$ 为偶（奇）数时，奇（偶）宇称解可写为

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Psi_B(\mathbf{x}) \equiv \begin{bmatrix} u_B(r)\,\mathcal{Y}_{j+1/2}^{jm}(\theta,\phi) \\ -iv_B(r)\,\mathcal{Y}_{j-1/2}^{jm}(\theta,\phi) \end{bmatrix}. \tag{8.4.6b}$$

（为了以后方便，在下旋量中包含了一个 $-i$ 的因子.）注意，尽管 $\Psi_A(\mathbf{x})$ 和 $\Psi_B(\mathbf{x})$ 两者都具有确定的宇称和量子数 j 和 m，但它们混合了 l 的值. 当我们考虑狄拉克方程中的中心势时，轨道角动量不再是好量子数.

现在已经准备好把（8.4.1）式变成函数 $u_{A(B)}(r)$ 和 $v_{A(B)}(r)$ 的关于 r 的微分方程. 首先，重新把狄拉克方程写成两个旋量 $\psi_1(\mathbf{x})$ 和 $\psi_2(\mathbf{x})$ 的耦合的方程. 这样

$$[E - m - V(r)]\psi_1(\mathbf{x}) - (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\psi_2(\mathbf{x}) = 0 \tag{8.4.7a}$$

$$[E + m - V(r)]\psi_2(\mathbf{x}) - (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\psi_1(\mathbf{x}) = 0 \tag{8.4.7b}$$

现在使用（3.2.39）式和（3.2.41）式写出

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} &= \frac{1}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{x})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{x})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}) \\ &= \frac{1}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{x})[\mathbf{x}\cdot\mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{x}\times\mathbf{p})] \\ &= (\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{r}})\left[\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\mathbf{L}}{r}\right]. \end{aligned} \tag{8.4.8}$$

在坐标空间工作，有

$$\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{p} \to \hat{\mathbf{r}}\cdot(-i\nabla) = -i\frac{\partial}{\partial r}. \tag{8.4.9}$$

它将只作用在波函数的径向部分. 我们还知道

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{L} = 2\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2, \tag{8.4.10}$$

所以，能写出

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{L})\,\mathcal{Y}_l^{jm} &= \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\mathcal{Y}_l^{jm} \\ &\equiv \kappa(j,l)\,\mathcal{Y}_l^{jm}, \end{aligned} \tag{8.4.11}$$

其中

$$\kappa = -j - \frac{3}{2} = -(\lambda + 1) \quad 对 \quad l = j + \frac{1}{2} \tag{8.4.12a}$$

和

$$\kappa = j - \frac{1}{2} = +(\lambda - 1) \quad 对 \quad l = j - \frac{1}{2}, \tag{8.4.12b}$$

其中

$$\lambda \equiv j + \frac{1}{2}. \tag{8.4.13}$$

计算矩阵因子

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \begin{bmatrix} \cos\theta & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta \end{bmatrix} \tag{8.4.14}$$

在旋量波函数上的效应，是更加棘手的. 原则上，我们能将其作用于（3.8.64）式定义的 $\mathcal{Y}_l^{jm}$，然后使用定义（3.6.37）去估算结果. 然而，有一个更容易的方法.

我们预期 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{r}}$ 在转动之下的行为如同一个（赝）标量，这样如果在一个特定的 $\hat{\mathbf{r}}$ 方向估算了它的效应，那么在所有的 $\hat{\mathbf{r}}$ 方向上也应有这样的行为. 选择 $\hat{\mathbf{r}}=\hat{\mathbf{z}}$，即 $\theta=0$. 因为任何一个 $Y_l^m(\theta,\phi)$ 的 θ 相关部分都含有一个因子 $[\sin\theta]^{|m|}$，使用（3.6.39）式写出

$$Y_l^m(\theta=0,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m0}, \tag{8.4.15}$$

在这种情况下，

$$\mathcal{Y}_l^{j=l\pm1/2,m}(\theta=0,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{bmatrix} \pm\sqrt{l\pm m+1/2}\,Y_l^{m-1/2}(0,\phi) \\ \sqrt{l\mp m+1/2}\,Y_l^{m+1/2}(0,\phi) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{bmatrix} \pm\sqrt{l\pm m+1/2}\,\delta_{m,1/2} \\ \sqrt{l\mp m+1/2}\,\delta_{m,-1/2} \end{bmatrix}$$

或

$$\mathcal{Y}_{l=j\mp1/2}^{j,m}(\theta=0,\phi) = \sqrt{\frac{j+1/2}{4\pi}} \begin{bmatrix} \pm\delta_{m,1/2} \\ \delta_{m,-1/2} \end{bmatrix}. \tag{8.4.16}$$

所以，

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{z}})\,\mathcal{Y}_{l=j\mp1/2}^{j,m}(\theta=0,\phi) = -\sqrt{\frac{j+1/2}{4\pi}} \begin{bmatrix} \mp\delta_{m,1/2} \\ \delta_{m,-1/2} \end{bmatrix} = -\mathcal{Y}_{l=j\pm1/2}^{j,m}(\theta=0,\phi), \tag{8.4.17}$$

于是，因为我们已经论证这个结果不依赖 θ 和 ϕ，有

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{r}})\,\mathcal{Y}_{l=j\pm1/2}^{j,m}(\theta,\phi) = -\mathcal{Y}_{l=j\mp1/2}^{j,m}(\theta=0,\phi), \tag{8.4.18}$$

其中使用了 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{r}})^2=1$ 的事实. 换句话说，对一组给定的 j 和 m，$\mathcal{Y}_{l=j\pm1/2}^{j,m}(\theta,\phi)$ 是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{r}}$ 的本征值为 -1 的本征态（算符赝标特性的一个结果）并且把 l 变成另一个允许值，它自然就有相反的宇称.

现在回到具有形为（8.4.6）式解的耦合方程（8.4.7）. 对 $\psi_1(\mathbf{x})$ 和 $\psi_2(\mathbf{x})$［原文两个均为 $\psi_1(\mathbf{x})$ 是错的. ——译者注］我们有两种选择，即“选择 A”

$$\psi_1(\mathbf{x}) = u_A(r)\,\mathcal{Y}_{j-1/2}^{jm}(\theta,\phi) \quad 和 \quad \psi_2(\mathbf{x}) = -iv_A(r)\,\mathcal{Y}_{j+1/2}^{jm}(\theta,\phi). \tag{8.4.19}$$

或“选择 B”

$$\psi_1(\mathbf{x}) = u_B(r)\,\mathcal{Y}_{j+1/2}^{jm}(\theta,\phi) \quad 和 \quad \psi_2(\mathbf{x}) = -iv_B(r)\,\mathcal{Y}_{j-1/2}^{jm}(\theta,\phi). \tag{8.4.20}$$

注意，这两种选择中无论取哪种，作为（8.4.7）中 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}$ 的一部分，因子 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{r}}$ 的效应是在角旋量 $\mathcal{Y}_l^{jm}$ 中把 $l=j\pm1/2$ 换成 $l=j\mp1/2$——即，在（8.4.7）的每一个式子中交换第二项的角旋量因子，这样它就与第一项一样了. 换句话说，丢掉角因子，就只剩下了径向方程.

把这些结合在一起，对“选择 A”，(8.4.7) 式最后变成

$$[E-m-V(r)]u_A(r)-\left[\frac{d}{dr}+\frac{\lambda+1}{r}\right]v_A(r)=0 \tag{8.4.21a}$$

$$[E+m-V(r)]v_A(r)-\left[\frac{d}{dr}-\frac{\lambda-1}{r}\right]u_A(r)=0 \tag{8.4.21b}$$

而对“选择 B”变成

$$[E-m-V(r)]u_B(r)-\left[\frac{d}{dr}-\frac{\lambda-1}{r}\right]v_B(r)=0 \tag{8.4.22a}$$

$$[E+m-V(r)]v_B(r)-\left[\frac{d}{dr}+\frac{\lambda+1}{r}\right]u_B(r)=0. \tag{8.4.22b}$$

然而，从形式上看，交换 $\lambda\leftrightarrow-\lambda$，方程（8.4.21）就变成为方程（8.4.22）. 因此，我们能集中精力于方程（8.4.21）的解，并且丢掉脚标 A.

方程（8.4.21）是求解 $u(r)$ 和 $v(r)$ 的耦合的一阶常微分方程，并满足可给出本征值 E 的确定的边界条件（如可归一性）. 这个解至少可以通过数值求解得到，这在很多情况下是可行的. 不过，我们还是用一个能解析求解的例子来结束本章.

单电子原子

现在考虑势能函数为

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r} \tag{8.4.23}$$

的单电子原子. 我们期望，在 5.3 节中曾用微扰论研究过的氢原子“精细结构”，利用狄拉克方程求解应该能够自然地出现.

通过用重新标度的变量，即

$$\epsilon\equiv\frac{E}{m} \tag{8.4.24}$$

和

$$x\equiv mr, \tag{8.4.25}$$

并回忆曾采用的 $\alpha\equiv e^2(/\hbar c)\approx1/137$，重写（8.4.21）式开始. 这给出

$$\left[\epsilon-1+\frac{Z\alpha}{x}\right]u(x)-\left[\frac{d}{dx}+\frac{\lambda+1}{x}\right]v(x)=0 \tag{8.4.26a}$$

$$\left[\epsilon+1+\frac{Z\alpha}{x}\right]v(x)+\left[\frac{d}{dx}-\frac{\lambda-1}{x}\right]u(x)=0. \tag{8.4.26b}$$

接着，考虑 $x\to\infty$ 时解的行为. 方程（8.4.26a）变成

$$(\epsilon-1)u-\frac{dv}{dx}=0 \tag{8.4.27}$$

所以（8.4.26b）式暗示

$$(\epsilon+1)v+\frac{du}{dx}=(\epsilon+1)v+\frac{1}{\epsilon-1}\frac{d^2v}{dx^2}=0. \tag{8.4.28}$$

它导致

$$\frac{d^2v}{dx^2}=(1-\varepsilon^2)v. \tag{8.4.29}$$

注意，从经典上讲，束缚态要求在某一距离 r 处动能有 $E-m-V(r)=0$，并且由于处处有 $V(r)<0$，所以 $E-m<0$ 和 $\varepsilon=E/m<1$. 因此，$1-\varepsilon^2$ 保证是正的，且（8.4.29）式意味着

$$v(x)=\exp[-1(1-\varepsilon^2)^{1/2}x] \qquad 对 \qquad x\to\infty. \tag{8.4.30}$$

其中，要求在 $x\to\infty$ 时 $v(x)$ 是可归一化的，但我们暂时忽略归一化常数. 同样地，(8.4.27) 式也意味着

$$u(x)=\exp[-(1-\varepsilon^2)^{(1/2)}x] \qquad 对 \qquad x\to\infty \tag{8.4.31}$$

现在把 $u(x)$ 和 $v(x)$ 写成有各自展开系数的幂级数，并寻找与微分方程自洽的关系. 用

$$u(x)=e^{-(1-\varepsilon^2)^{1/2}x}x^{\gamma}\sum_{i=0}^{\infty}a_ix^i \tag{8.4.32}$$

和

$$v(x)=e^{-(1-\varepsilon^2)^{1/2}x}x^{\gamma}\sum_{i=0}^{\infty}b_ix^i \tag{8.4.33}$$

隐含假定，对 $u(x)$ 和 $v(x)$ 二者我们能够找到具有相同总幂次 γ 的级数解. 确实，把这些表达式代入（8.4.26）式，并首先考虑正比于 $x^{\gamma-1}$ 的项，经过稍稍的重新整理，我们发现

$$(Z\alpha)a_0-(\gamma+\lambda+1)b_0=0 \tag{8.4.34a}$$

$$(\gamma-\lambda+1)a_0+(Z\alpha)b_0=0. \tag{8.4.34b}$$

我们的方法很快就能产生系数 a_i 和 b_i 的递推关系. 这意味着需要避免 $a_0=0$ 和 $b_0=0$，而做到这一点的唯一途径是要求（8.4.34）式的行列式为零. 也就是说，

$$(Z\alpha)^2+(\gamma+1+\lambda)(\gamma+1-\lambda)=0 \tag{8.4.35}$$

或解出 γ，

$$\gamma=-1\pm[\lambda^2-(Z\alpha)^2]^{1/2} \tag{8.4.36}$$

首先注意到 $\lambda=j+1/2$ 是1的量级，所以如果 $Z\alpha\sim1$，该解就不成立了. 在 $Z\approx137$ 的强库仑场中，自发 e^+e^- 产生将会发生，这时不能期待狄拉克方程的单粒子的特征占优势. 在我们感兴趣的情况中确实存在 $Z\alpha\ll1$. 这也意味着在（8.4.36）式括号内的表达式是1的量级. 对“$-$”号，它给出 $\gamma\sim-2$，它在原点会过分奇异. 结果我们选择“$+$”号，这样就有

$$\gamma=-1+\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-(Z\alpha)^2\right]^{1/2}. \tag{8.4.37}$$

注意，对 $j=1/2$，由于 $\gamma<0$，在原点我们仍然有一个奇点，但这个奇点非常弱，并且是对空间可积的.

从归一化确定的 a_0 值以及 $b_0=a_0(Z\alpha)/(\gamma+\lambda+1)$ 开始，通过回到把（8.4.32）式和(8.4.33）式代入（8.4.26）式得到的结果，就能够找到其他的 a_i 和 b_i. 把 x^{γ} 及更高阶幂次的项收集到一起，得到

$$(1-\varepsilon)a_{i-1}-Z\alpha a_i-(1-\varepsilon^2)^{1/2}b_{i-1}+(\lambda+1+\gamma+i)b_i=0 \tag{8.4.38a}$$

$$(1+\varepsilon)b_{i-1}+Z\alpha b_i-(1-\varepsilon^2)^{1/2}a_{i-1}-(\lambda-1-\gamma-i)a_i=0. \tag{8.4.38b}$$

用 $(1+\varepsilon)^{1/2}$ 乘（8.4.38a）式及用 $(1-\varepsilon)^{1/2}$ 乘（8.4.38b）式，然后把它们加起来. 这就导致了系数 a_i 和 b_i 间的一个关系，即

$$\frac{b_i}{a_i}=\frac{Z\alpha(1+\varepsilon)^{1/2}+(\lambda-1-\gamma-i)(1-\varepsilon)^{1/2}}{Z\alpha(1-\varepsilon)^{1/2}+(\lambda+1+\gamma+i)(1+\varepsilon)^{(1/2)}}. \tag{8.4.39}$$

这个关系表明，对较大的 x 值，在那里有较大 i 值的项起主导作用，则 a_i 和 b_i 相互成正比. 此外，(8.4.38) 式也意味着对大 i 值，$a_i/a_{i-1}\sim 1/i$. (参见本章末尾的习题 8.15.) 换句话说，级数 (8.4.32) 和 (8.4.33) 式将按指数规律增长，且不能归一化，除非我们强令级数中断.

那么，如果假设对 $i=n'+1$ 有 $a_i=b_i=0$，则

$$(1-\varepsilon)a_{n'}-(1-\varepsilon^2)^{1/2}b_{n'}=0 \tag{8.4.40a}$$

$$(1+\varepsilon)b_{n'}-(1-\varepsilon^2)^{1/2}a_{n'}=0. \tag{8.4.40b}$$

上述任何一个公式都会导致这些中断系数之比的条件相同，即

$$\frac{b_{n'}}{a_{n'}}=\left[\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}\right]^{1/2}. \tag{8.4.41}$$

把 (8.4.39) 式和 (8.4.40) 式结合起来，就有

$$(1+\gamma+n')(1-\varepsilon^2)^{1/2}=Z\alpha\varepsilon \tag{8.4.42}$$

最终，求解它得到 ε. 把 c 放回原处，就确定了能量本征值

$$E=\frac{mc^2}{\left[1+\dfrac{(Z\alpha)^2}{\left[\sqrt{(j+1/2)^2-(Z\alpha)^2}+n'\right]^2}\right]^{1/2}} \tag{8.4.43}$$

我们强调，对任意给定的量子数 n'，能量本征值依赖于总角动量 j. 也就是说，比如对 $j=\frac{1}{2}$，不管它来自于 $l=0$ 还是来自于 $l=1$ 与自旋$\frac{1}{2}$的耦合，能量将是一样的.

到 $Z\alpha$ 的最低阶，(8.4.43) 式变成

$$E=mc^2-\frac{1}{2}\frac{mc^2(Z\alpha)^2}{n^2}, \tag{8.4.44}$$

其中 $n\equiv j+1/2+n'$. 与 (3.7.53) 式的比较表明：这就是加上了静止质量能量的熟悉的巴耳末公式，这里的 n 是主量子数. 包含 $Z\alpha$ 的高阶项将给出众所周知的动能的相对论修正表达式 (5.3.10) 式和自旋轨道相互作用的相对论修正表达式 (5.3.31) 式.

图 8.2 展示了氢原子的能级以及进行这些测量的实验. 为得到这些结果，设计了很多独创的技术，包括联系“禁戒”跃迁的双光子吸收. 所谓的“精细结构”是清楚的，即相对论效应导致了 $n=2$ 态的 S 和 P 能级的分裂，以及 $n=3$ 态的 S，P 和 D 能级的分裂. 本章末尾的习题 8.16 表明，完整的相对论能级给出了与微扰论结果相同的能级分裂.

当然，图 8.2 中的能级与我们推导出的能量本征值的结果 (8.4.43) 式之间存在着意义深远的差异. 按照 (8.4.43) 式，能量只能依赖于 n 和 j. 然而，例如在 $2P_{1/2}$ 和 $2S_{1/2}$ 态间存在一个小的分裂. 这个分裂，以其发现者的名字命名，称为兰姆位移，它在阐明相对论量子场论在原子结构中的重要性上起到了重要作用. 有关兰姆位移的历史以及它的大小的正式的和凭“物理直觉”的推导的讨论，请参见 Holstein (1992).

本章末尾的习题 8.17 将 (8.4.43) 式预言的能级与可使用的高精度数据进行了比较.

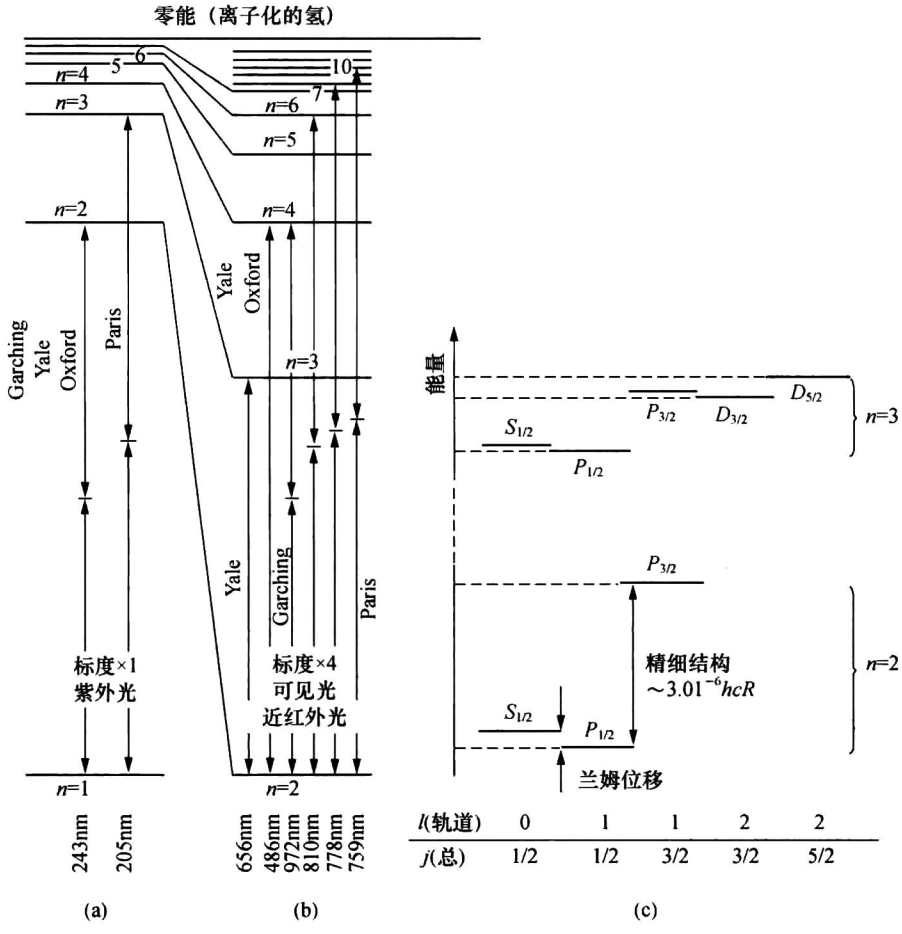


图 8.2 氢原子的能级与很多测量它们之间电磁跃迁的高精度实验的文献. 取自 *Hydrogen Metrology: Up to What Limit?* by B. Cagnac, *Physica Scripta* **T70** (1997) 24. (a) 完整的能级图，(b) 能量标度乘以4，(c) $n=2$ 和 $n=3$ 能级的精细结构，量子数 l 和 j 细致的行为.

8.5 相对论量子场论

现在来结束这本《现代量子力学》的全部内容. 本书概述的框架仍然是我们理解物理世界最基本的基础. 尽管测量概念的概率解释在某些方面令人不安，但面对实验它总是无往不胜.

剩下的不足之处，例如在兰姆位移方面，不是基础的量子力学公理中有问题的结果. 相反，它们是我们试图发展与相对论自洽的量子力学波动方程时所做的必要近似的结果. 产生和消灭粒子的能力与我们写出量子力学动力学所用“单粒子”的做法是不自洽的. 取而代之的是，为了处理这些问题，我们需要重新考察本书大部分内容所赖以建立的哈密顿量形式体系.

量子场论是一般地处理相对论量子力学和多粒子量子力学的正确框架. 基本上有两种着手处理量子场论的方法，在本书中，它们中的任何一种都没有被展开. 我们提及它们只

是为了使读者有兴趣更进一步研习.

一种途径是通过“二次量子化”方法，在那里引入了产生和消灭粒子的算符. 如果它们具有整数自旋，则这些算符相互对易，而对半奇数自旋，它们相互反对易. 为了建立相对论协变性，还需要做一些工作，但这是相对简单的. 然而，如果问题不值得做，它也不是必需的. 例如，在凝聚态物理的大量迷人问题中，情况正是如此.

在本书的 7.5 节中讨论了二次量子化. 其他的一些例子请参见 *Quantum Mechanics*, 3*rd ed*.(Eugen Merzbacher) 和 *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Alexander L. Fetter, John Dirk Walecka).

第二条途径是凭借路径积分方法通向量子力学，著名开创性的工作始于费曼的博士论文. 这个概念上诱人的形式体系是从粒子的量子力学直接扩展到量子场论. 然而，直到人们把它与最终成为二次量子化的“正则”形式联系起来之前，使用这种形式体系计算典型的问题并不简单. 不过，对于那些想对导向量子多体问题的原理有更深理解的学生，这是一个有价值的课题.

对很多关于量子场论的书，路径积分都不是基础，但是徐一鸿 (Anthony Zee) 所著的 *Quantum Field Theory in a Nutshell* 一书中，出色地利用了它们.

习题

8.1 这些练习是给你使用自然单位的一些实践机会.

(a) 把质子质量 $m_p=1.67262158\times10^{-27}\,\mathrm{kg}$ 用 GeV 单位表示.

(b) 假定一个具有可忽略质量的粒子被禁闭在一个质子大小，大约 $1\mathrm{fm}=10^{-15}\,\mathrm{m}$，的盒子中. 使用不确定性原理估算这个被禁闭粒子的能量. 你或许会有兴趣知道，π 介子，最轻的强相互作用粒子，其质量以自然单位表示为 $m_\pi=135\mathrm{MeV}$.

(c) 弦理论关注把引力、相对论和量子力学组合在一起的标度上的物理. 用量纲分析求“普朗克质量” M_P，它是由 G，$\hbar$ 和 c 构成的，并且把结果以 GeV 为单位表示.

8.2 证明与本章使用的度规张量 $\eta_{\mu\nu}$ 具有相同矩阵元的矩阵 $\eta^{\mu\nu}$ 具有性质：$\eta^{\mu\nu}\eta_{\lambda\nu}=\delta^\mu_\lambda$，是个单位矩阵. 从而证明，在这样的定义情况下，事实上成立自然的关系式 $\eta^{\mu\nu}=\eta^{\mu\nu}\eta^{\nu\sigma}\eta_{\lambda\sigma}$. 也要证明对两个四矢量 a^μ 和 b^μ，有 $a^\mu b_\mu=a_\mu b^\mu$.

8.3 证明当 $\Psi(\mathbf{x},t)$ 满足克莱因-戈尔登方程时，(8.1.11) 式事实上是一个守恒流.

8.4 证明由 (8.1.8) 式可得到 (8.1.14) 式.

8.5 推导 (8.1.16a)、(8.1.16b) 和 (8.1.18) 式.

8.6 证明 (8.1.18) 式的自由粒子能量本征值是 $E=\pm E_p$，其本征函数的确由 (8.1.21) 式给出，且遵从对 $E=\pm E_p$ 的归一化 $\Upsilon^\dagger\tau_3\Upsilon=\pm1$.

8.7 这个问题取自 *Quantum Mechanics II: A Second Course in Quantum Theory*, 2nd ed. (Rubin H. Landau, 1996). 一个无自旋的电子被库仑势 $V(r)=-Ze^2/r$ 束缚在一个总能量为 $E\leqslant m$ 的定态上. 你可以通过使用具有 $V=-e\Phi$ 和 $\mathbf{A}=0$ 的协变导数，把这个相互作用纳入克莱因-戈尔登方程.

(a) 假定方程的径向和角向部分可分离，并且波函数能写成 $e^{-iEt}[u_l(r)/r]Y_{lm}(\theta,\phi)$. 证明径向方程变成

$$\frac{d^2u}{d\rho^2}+\left[\frac{2EZ\alpha}{\gamma\rho}-\frac{1}{4}-\frac{l(l+1)-(Z\alpha)^2}{\rho^2}\right]u_l(\rho)=0.$$

其中 $\alpha=e^2$，$\gamma^2=4(m^2-E^2)$ 和 $\rho=kr$.

(b) 假定这个方程具有一个这样的解，它是一个通常的幂级数乘以 $\rho\to\infty$ 和 $\rho\to0$ 时的解形式，即

$$u_l(\rho)=\rho^k(1+c_1\rho+c_2\rho^2+\cdots)e^{-\rho/2}.$$

证明

$$k=k_{\pm}=\frac{1}{2}\pm\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-(Z\alpha)^2},$$

且仅对 k_+ 其动能的期待值是有限的，并且这个解具有与薛定谔方程解一致的非相对论极限.

(c) 确定为使它成为克莱因-戈尔登方程解的那些 c_i 之间的递推关系，并且证明除非这个幂级数被截断，否则波函数将有一个不正确的渐近形式.

(d) 在级数中断的情况下，证明对于 k_+ 解的能量本征值是

$$E=\frac{m}{\left(1+(Z\alpha)^2\left[n-l-\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-(Z\alpha)^2}\right]^{-2}\right)^{1/2}},$$

其中 n 是主量子数.

(e) 将 E 按 $(Z\alpha)^2$ 的幂次展开，证明一阶项产生波尔公式. 建立高阶项与相对论修正的联系，并讨论 l 简并被解除的程度.

Jenkins 和 Kunselman 在 *Phys. Rev. Lett.* **17** (1966) 1148 中报道了大量大 Z 原子核中的 π^- 原子的跃迁能量的测量. 将其中的一些与计算的能量比较，讨论预言的精确度. (例如，考虑 ^{59}Co 中的 $3d\to 2p$ 的跃迁，它放射出一个能量为 384.6±1.0keV 的光子.) 你也许需要使用计算机去完成足够高精度的能量差计算，要不然展开到更高的 $(Z\alpha)^2$ 的幂次.

8.8 证明 γ^μ，$\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 的迹均为零.

8.9 (a) 从 (8.2.10) 式推导矩阵 γ^μ，并证明它们满足克利福德代数 (8.2.4) 式.

(b) 证明

$$\gamma^0=\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}=I\otimes\tau_3$$

和

$$\gamma^i=\begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}=\sigma^i\otimes i\tau_2,$$

其中 I 是 2×2 单位矩阵，σ^i 和 τ_i 是泡利矩阵. (⊗记号是一个把 4×4 矩阵写成 2×2 矩阵的 2×2 矩阵的正规方法.)

8.10 证明狄拉克方程的连续性方程 (8.2.11).

8.11 求自由粒子狄拉克方程 (8.2.20) 的本征值.

8.12 把来自 (8.2.22) 式的四个解 $u_{k\perp}^{(\pm)}(p)$ 中的一个代入四矢量概率流 (8.2.13) 式中，并解释这个结果.

8.13 利用习题 8.9 证明，由 (8.3.28) 式定义的 U_T 正是 $\sigma^2\otimes I$，最多差一个相因子.

8.14 写出正螺旋度、正能自由粒子狄拉克旋量波函数 $\Psi(x,t)$.

(a) 构建旋量 $\mathcal{P}\Psi$，$\mathcal{C}\Psi$，$\mathcal{T}\Psi$.

(b) 构建旋量 $\mathcal{CPT}\Psi$，并用狄拉克方程负能解的讨论解释它.

8.15 证明如果级数 (8.4.32) 和 (8.4.33) 不被截断的话，(8.4.38) 式意味着 $u(x)$ 和 $v(x)$ 按指数规律增长.

8.16 把 (8.4.43) 式给出的能量本征值按照 $Z\alpha$ 的幂次展开，并证明该结果等价于包含对单电子原子的非相对论能量本征值 (8.4.44) 式的动能相对论修正 (5.3.10) 式，以及自旋-轨道相互作用的相对论修正 (5.3.31) 式.

8.17 国家标准与技术研究院 (NIST) 用最新的、高精度的氢和氘的原子能级数据维护着一个网站：

http://physics.nist.gov/PhysRefData/HDEl/data.html

下面所附的数据表就是从那个网站获得的. 它给出了在 $(n,l,j)=(1,0,1/2)$ 能级与由左边几列指定的能级之间跃迁的能量. (括号中的数字是针对所引用值的最后一个数字的标准不确定度的数字值.) 将这些值与那些由 (8.4.43) 式预言的值比较 (可能要用习题 8.16). 特别是：

(a) 把 $n=2$，$j=1/2$ 与 $n=2$，$j=3/2$ 态之间的精细结构分裂与 (8.4.43) 式比较.

(b) 把 $n=4$，$j=5/2$ 与 $n=4$，$j=7/2$ 态之间的精细结构分裂与 (8.4.43) 式比较.

(c) 把 $1S\rightarrow 2S$ 跃迁能量与表中第一行比较. 在基本常数的数值中必须使用尽可能多的有效数字，在标准不确定度之内比较这些结果.

(d) 在这个表中展示了多少兰姆位移的例子？在表顶附近指出一个和在表底附近指出另一个例子，并比较它们的值.

n	l	j	$[E(n,l,j)-E(1,0,1/2)]/hc(\mathrm{cm}^{-1})$
2	0	1/2	82 258.954 399 2832(15)
2	1	1/2	82 258.919 113 406(80)
2	1	3/2	82 259.285 001 249(80)
3	0	1/2	97 492.221 724 658(46)
3	1	1/2	97 492.211 221 463(24)
3	1	3/2	97 492.319 632 775(24)
3	2	3/2	97 492.319 454 928(23)
3	2	5/2	97 492.355 591 167(23)
4	0	1/2	102 823.853 020 867(68)
4	1	1/2	102 823.848 581 881(58)
4	1	3/2	102 823.894 317 849(58)
4	2	3/2	102 823.894 241 542(58)
4	2	5/2	102 823.909 486 535(58)
4	3	5/2	102 823.909 459 541(58)
4	3	7/2	102 823.917 081 991(58)

附录 A　电磁单位

在二十世纪中建立了两种不同的单位制. 一种单位制，称之为 SI 制（源于法语 *le Système international d'unités* 国际单位制），源自实验室. 它获得了工程界的喜爱，并且构成了绝大多数大学本科课程的基础. 另外一种单位制，称之为高斯制，从审美学看更为简洁，备受理论物理界青睐. 在本书中，如同在大多数研究生水平物理教科书中采用的一样，我们使用高斯单位.

SI 制也称为 *MKSA* 制（即：米、千克、秒、安培单位制），而高斯制称为 *CGS* 制（即，厘米、克、秒单位制）. 对于力学中的问题，其区别微不足道，只是 10 的一些幂次. 然而当把电磁学容纳进来，困难就产生了，比如在这两种单位制中的电荷实际上具有不同的量纲.

这个附录试图就电磁学而言对比这两种单位制. 给出了一些公式以使读者容易跟随在本书和其他研究生水平教科书中的讨论.

A.1　库仑定律、电荷和电流

库仑定律是实验观测的结果，是说两个电荷 Q_1 和 Q_2 以正比于电荷乘积、反比于它们之间距离 r 的平方的一个力 F_Q，相互吸引或排斥. 最自然地把它写成

$$F_Q = \frac{Q_1 Q_2}{r^2} \qquad \text{高斯制.} \tag{A.1.1}$$

这事实上是定义高斯制的起点. 电荷的单位被称为静库仑，并且相距一厘米的两个各自携带一个静库仑的电荷间的力是一达因.

很容易看到为什么这样的一个令人愉快的简单公式在物理学界广为流行. 不过，不幸的是它很难在实验中实现. 在实验室设置一个电流源要容易得多——也许用一个电池驱动一个具有可变电阻的电路即可. 而且测量在长导线间的磁力是很容易的. 因此，SI 制来自于安培的如下定义：

> 一安培是这样的一个稳恒电流，当它呈现于两个距离 d 为一米的平行导体中的每一条上时，引起它们之间产生一个每米长度为 F_I/L 的力，其数值等于
>
> $$2 \times 10^{-7}\,\mathrm{N/m}.$$

类似于高斯制的库仑定律，对两条分别具有（以安培为单位测量的）电流 I_1 和 I_2 的导线，SI 制的简单的力的公式是

$$\frac{F_I}{L} = \frac{\mu_0}{2\pi}\frac{I_1 I_2}{d} \qquad \text{SI.} \tag{A.1.2}$$

尽管（A.1.2）式没有被赋予一个流行的名字，但它就像高斯制中的库仑定律（A.1.1）式一样，是 SI 单位制的基础.

基于安培的定义，一定有

$$\mu_0 \equiv 4\pi \times 10^{-7}\,\mathrm{N/A^2}. \tag{A.1.3}$$

4π 因子常常出现在电磁学的公式框架中，因为人们总是要在单位球面上求积分. 是在一开始就把它们拿掉，还是在整个计算中留着它们，只是一种偏好——而现在是一种约定.

如果人们把一个称为库仑的一个电荷单位定义为：一秒钟内在带有一安培电流的导线上流过的电荷，则库仑定律就变成

$$F_Q = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q_1 Q_2}{r^2} \qquad \text{SI.} \tag{A.1.4}$$

使用比例常数的这个定义，人们最终证明电磁波在自由空间的速度是

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}. \tag{A.1.5}$$

在目前的标准单位中，光速 c 是一个定义的量. 因此，ε_0 也被定义取一个精确的值.

当然，一个像（A.1.5）式的关系式并不稀奇. 电场和磁场通过洛伦兹变换相互关联，所以，比例常数 ε_0 和 μ_0 应通过 c 相关联. 在高斯单位制中没有类似的 ε_0 或 μ_0，但代替它们，c 明显地出现了.

A.2 制式间的转换

可从（A.1.1）或（A.1.4）式入手发展电磁学，并将狭义相对论纳入. 例如，对电场 $\mathbf{E}(\mathbf{x})$，人们首先把高斯定律写成

$$\nabla\cdot\mathbf{E} = \rho(\mathbf{x})/\varepsilon_0 \qquad \text{SI} \tag{A.2.1a}$$

或

$$\nabla\cdot\mathbf{E} = 4\pi\rho(\mathbf{x}) \qquad \text{高斯制} \tag{A.2.1b}$$

然后，其余的麦克斯韦方程就都被确定了. 表 A.1 展示了在真空中，两种单位制的麦克斯韦方程组，也展示了洛伦兹力定律. 由此，其他的一切都可以接下去做，人们能使用一套单位或另一套单位推导电磁学中所有的结果.

表 A.1 无介质时的麦克斯韦方程

	高斯单位制	SI 单位制
高斯定律（电）	$\nabla\cdot\mathbf{E}=4\pi\rho(\mathbf{x})$	$\nabla\cdot\mathbf{E}=\frac{1}{\varepsilon_0}\rho(\mathbf{x})$
高斯定律（磁）	$\nabla\cdot\mathbf{B}=0$	$\nabla\cdot\mathbf{B}=0$
安培定律	$\nabla\times\mathbf{B}-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}=\frac{4\pi}{c}\mathbf{J}$	$\nabla\times\mathbf{B}-(\varepsilon_0\mu_0)\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}=\mu_0\mathbf{J}$
法拉第定律	$\nabla\times\mathbf{E}+\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}=0$	$\nabla\times\mathbf{E}+\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}=0$
洛伦兹力定律	$\mathbf{F}=Q\left(\mathbf{E}+\frac{\mathbf{v}}{c}\times\mathbf{B}\right)$	$\mathbf{F}=Q(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})$

当然，最方便的方法是取一组推导，事后把它们转换到另外一种单位制. 例如，（A.1.1）和（A.1.4）告诉我们要对高斯定律做转换

$$\text{高斯} \to \text{SI} \tag{A.2.2}$$

只要做下述改变

$$Q \to \frac{1}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0}}Q. \tag{A.2.3}$$

然后参考表 A.1 中的洛伦兹力定律，看到

$$\mathbf{E} \to \sqrt{4\pi\epsilon_0}\,\mathbf{E} \tag{A.2.4}$$

和

$$\mathbf{B} \to c\sqrt{4\pi\epsilon_0}\,\mathbf{B} = \sqrt{\frac{4\pi}{\mu_0}}\,\mathbf{B}. \tag{A.2.5}$$

如果你曾经困惑过，那么你总可以尝试把事情联系到一个纯的力学量，如力或能量. 例如，磁场中一个磁矩的势能是

$$U = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}. \tag{A.2.6}$$

它与使用哪个单位制无关. 因此，使用（A.2.5）式，有

$$\boldsymbol{\mu} \to \sqrt{\frac{\mu_0}{4\pi}}\,\boldsymbol{\mu}, \tag{A.2.7}$$

因此，参考本书的起始点，具有角动量 $\mathbf{L}$ 的一个沿环形流动的电荷 Q 的磁矩是

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{Q}{2mc}\mathbf{L} \quad \text{高斯制}$$

$$\to \sqrt{\frac{\mu_0}{4\pi}}\,\boldsymbol{\mu} = \frac{Q}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}\,\frac{1}{2mc}\mathbf{L} \tag{A.2.8}$$

或

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{Q}{2m}\mathbf{L} \qquad \text{SI.} \tag{A.2.9}$$

记住在高斯制中诸如物理量 Q^2 具有能量×长度的量纲是有用的. 这些已经足够普遍，以致你永远不必担心“静库仑”到底是什么.

附录 B　薛定谔波动方程基本解的简要概述

这里，我们汇总多种可解势问题的薛定谔波动方程的简单解.

B.1　自由粒子（$V=0$）

平面波，或动量的本征函数是

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega t}, \tag{B.1.1}$$

其中

$$\mathbf{k}=\frac{\mathbf{p}}{\hbar},\omega=\frac{E}{\hbar}=\frac{\mathbf{p}^2}{2m\hbar}=\frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}. \tag{B.1.2}$$

而我们的归一化是

$$\int\psi_{\mathbf{k}}^{*}\psi_{\mathbf{k}}d^3x=\delta^{(3)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \tag{B.1.3}$$

平面波的叠加导致波包描述. 在一维情况下，

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dkA(k)e^{i(kx-\omega t)}\left(\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}\right). \tag{B.1.4}$$

对在 $k\simeq k_0$ 附近有尖锐峰的 $|A(k)|$，波包以一个群速度

$$v_g\simeq\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}=\frac{\hbar k_0}{m} \tag{B.1.5}$$

运动. 一个最小波包的时间演化能用

$$\psi(x,t)=\left[\frac{(\Delta x)_0^2}{2\pi^3}\right]^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(\Delta x)_0^2(k-k_0)^2+ikx-i\omega(k)t}dk,\quad \omega(k)=\frac{\hbar k^2}{2m} \tag{B.1.6}$$

描述. 其中

$$\begin{aligned}|\psi(x,t)|^2=&\left\{\frac{1}{2\pi(\Delta x)_0^2\left[1+(\hbar^2t^2/4m^2)(\Delta x)_0^{-4}\right]}\right\}^{\frac{1}{2}}\\&\times\exp\left\{-\frac{(x-\hbar k_0t/m)^2}{2(\Delta x)_0^2\left[1+(\hbar^2t^2/4m^2)(\Delta x)_0^{-4}\right]}\right\}\end{aligned} \tag{B.1.7}$$

所以，波包的宽度扩展为

$$(\Delta x)_0\text{ 在 }t=0\to(\Delta x)_0\left[1+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2}(\Delta x)_0^{-4}\right]^{\frac{1}{2}}\text{ 在 }t>0 \tag{B.1.8}$$

B.2　一维分段常数势

基本的解是

$$E>V=V_0:\quad \psi_E(x)=c_+e^{ikx}+c_-e^{-ikx},k=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}. \tag{B.2.1}$$

$E<V=V_0$（经典禁戒区）：

$$\psi_E(x)=c_+e^{\kappa x}+c_-e^{-\kappa x},\quad \kappa=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} \tag{B.2.2}$$

（如果 $x=\pm\infty$ 被包含在所讨论的域中，则 $c_\pm$ 必须相应地被置为零.）（译者注：$x=+\infty$，则 c_+ 为零，$x=-\infty$，则 c_- 为零，故译者添加了“相应地”一词.）

刚性壁势（一维盒子）

这里

$$V=\begin{cases}0 & \text{对 } 0<x<L.\\ \infty & \text{其他}\end{cases} \tag{B.2.3}$$

波函数和能量本征值（译者注：原文为本征态是错的.）是

$$\begin{aligned}\psi_E(x)&=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right).\ n=1,2,3\cdots,\\ E&=\frac{\hbar^2n^2\pi^2}{2mL^2}.\end{aligned} \tag{B.2.4}$$

方势阱

势 V 是

$$V=\begin{cases}0 & \text{对}|x|>a\\ -V_0 & \text{对}|x|<a\quad (V_0>0).\end{cases} \tag{B.2.5}$$

束缚态（$E<0$）解是

$$\psi_E\sim\begin{cases}e^{-\kappa|x|} & \text{对}|x|>a,\\ \left.\begin{matrix}\cos kx\quad(\text{偶宇称})\\ \sin kx\quad(\text{奇宇称})\end{matrix}\right\} & \text{对}|x|<a,\end{cases} \tag{B.2.6}$$

其中

$$k=\sqrt{\frac{2m(-|E|+V_0)}{\hbar^2}},\quad \kappa=\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \tag{B.2.7}$$

允许的分立能量值 $E=-\hbar^2\kappa^2/2m$ 将通过求解

$$\begin{aligned}ka\tan ka&=\kappa a\qquad(\text{偶宇称})\\ ka\cot ka&=-\kappa a\qquad(\text{奇宇称}),\end{aligned} \tag{B.2.8}$$

确定. 还要注意 κ 和 k 的关系为

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}=(k^2+\kappa^2)a^2, \tag{B.2.9}$$

B.3 透射-反射问题

在这个讨论中，我们定义透射系数 T 为透射波概率流与入射波概率流之比. 考虑下述简单的例子.

方势阱（在 $|x|>a$ 时，$V=0$；在 $|x|<a$ 时，$V=-V_0$.）

$$T=\frac{1}{\{1+[(k'^2-k^2)^2/4k^2k'^2]\sin^2 2k'a\}}$$
$$=\frac{1}{\{1+[V_0^2/4E(E+V_0)]\sin^2(2a\sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2})\}}. \tag{B.3.1}$$

其中

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\quad k'=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}. \tag{B.3.2}$$

注意，每当

$$2a\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}=n\pi,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{B.3.3}$$

就会出现共振.

势垒（$|x|>a$ 时，$V=0$；$|x|<a$ 时，$V=V_0>0$）

情况 1：$E<V_0$.

$$T=\frac{1}{\{1+[(k^2+\kappa^2)^2/4k^2\kappa^2]\sinh^2 2\kappa a\}}$$
$$=\frac{1}{\{1+[V_0^2/4E(V_0-E)]\sinh^2(2a\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2})\}}. \tag{B.3.4}$$

情况 2：$E>V_0$. 这种情况与 V_0 换成了 $-V_0$ 的方势阱情况一样.

阶梯势（$x<0$ 时，$V=0$；$x>0$ 时，$V=V_0$，且 $E>V_0$.）

$$T=\frac{4kk'}{(k+k')^2}=\frac{4\sqrt{(E-V_0)E}}{(\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0})^2} \tag{B.3.5}$$

其中

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\quad k'=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}. \tag{B.3.6}$$

更一般的势垒｛$a<x<b$ 时，$V(x)>E$；在 $[a,b]$ 区域之外，$V(x)<E$.｝

T 的 JWKB 近似解是

$$T\simeq\exp\left\{-2\int_a^b dx\sqrt{\frac{2m[V(x)-E]}{\hbar^2}}\right\}, \tag{B.3.7}$$

其中 a 和 b 是经典转折点.*

B.4　简谐振子

这里位势是

$$V(x)=\frac{m\omega^2x^2}{2}, \tag{B.4.1}$$

* JWKB 是指 Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin.

引入一个无量纲变量

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x. \tag{B.4.2}$$

能量本征函数是

$$\psi_E = (2^n n!)^{-1/2}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \tag{B.4.3}$$

而能级是

$$E = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{B.4.4}$$

厄米多项式有下列性质：

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}e^{-\xi^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_{n'}(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}d\xi = \pi^{1/2}2^n n!\delta_{nn'}$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2}H_n - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0 \tag{B.4.5}$$

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12.$$

B.5 中心力问题［球对称势 $V=V(r)$］

这里基本的微分方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi_E}{\partial r}\right)\right.$$
$$\left.+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi_E}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi_E}{\partial\phi^2}\right]+V(r)\psi_E = E\psi_E, \tag{B.5.1}$$

其中球对称势 $V(r)$ 满足

$$\lim_{r\to 0} r^2V(r) \to 0. \tag{B.5.2}$$

分离变量法，

$$\Psi_E(\mathbf{x}) = R(\tilde{x})Y_l^m(\theta,\phi), \tag{B.5.3}$$

导致了角方程

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y_l^m = l(l+1)Y_l^m, \tag{B.5.4}$$

其中球谐函数

$$Y_l^m(\theta,\phi), \quad l = 0,1,2,\cdots, m = -l, -l+1,\cdots, +l \tag{B.5.5}$$

满足

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m = mY_l^m, \tag{B.5.6}$$

且 $Y_l^m(\theta,\phi)$ 具有下列性质：

$$Y_l^m(\theta,\phi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \text{ 对于 } m \geqslant 0$$

$$Y_l^m(\theta,\phi)=(-1)^{|m|}Y_l^{|m|*}(\theta,\phi)\qquad \text{对于 } m<0$$

$$P_l^m(\cos\theta)=(1-\cos^2\theta)^{m/2}\frac{d^m}{d(\cos\theta)^m}P_l(\cos\theta)\qquad \text{对于 } m\geqslant 0$$

$$P_l(\cos\theta)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\frac{d^l(1-\cos^2\theta)^l}{d(\cos\theta)^l}$$

$$Y_0^0=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},\qquad Y_1^0=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_1^{\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(\sin\theta)e^{\pm i\phi}\tag{B.5.7}$$

$$Y_2^0=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)$$

$$Y_2^{\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}(\sin\theta\cos\theta)e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^{\pm2}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}(\sin^2\theta)e^{\pm 2i\phi}$$

$$\int Y_{l'}^{m'*}(\theta,\phi)Y_l^m(\theta,\phi)d\Omega=\delta_{ll'}\delta_{mm'}\left[\int d\Omega=\int_0^{2\pi}d\phi\int_{-1}^{+1}d(\cos\theta)\right].$$

对 (B.5.3)* 式的径向部分，定义

$$u_E(r)=rR(r).\tag{B.5.8}$$

然后，径向方程约化到一个等价的一维问题，即，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_E}{dr^2}+\left[V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]u_E=Eu_E$$

服从边界条件

$$u_E(r)|_{r=0}=0.\tag{B.5.9}$$

对自由粒子的情况 $[V(r)=0]$，在球坐标系中：

$$R(r)=c_1j_l(\rho)+c_2n_l(\rho)\qquad (\text{原点的 } c_2=0 \text{ 包含在内})\tag{B.5.10}$$

其中 ρ 是一个无量纲变量

$$\rho\equiv kr,\quad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.\tag{B.5.11}$$

我们需要列出常用的贝塞尔函数、球贝塞尔函数和汉克函数的性质. 球贝塞尔函数是[其中的$n_l(\rho)$ 为球诺依曼函数. ——译者注]

$$j_l(\rho)=\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2}J_{l+1/2}(\rho)$$

$$n_l(\rho)=(-1)^{l+1}\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2}J_{-l-1/2}(\rho)$$

$$j_0(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho},\quad n_0(\rho)=-\frac{\cos\rho}{\rho}$$

$$j_1(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho^2}-\frac{\cos\rho}{\rho},\quad n_1(\rho)=-\frac{\cos\rho}{\rho^2}-\frac{\sin\rho}{\rho}$$

---

* 原文为 (A.5.3) 式是错的，这里改了过来. 需要指出的是，类似错误在这个附录 B 中多处出现. 原因是第 2 版的作者把第一版的附录 A 拷贝成这里的附录 B，只改了整行公式的标号，没有改文本中引用的公式标号. 下面我们完成了相应的修改，但不再逐一指出. ——译者注

$$j_2(\rho)=\left(\frac{3}{\rho^3}-\frac{1}{\rho}\right)\sin\rho-\frac{3}{\rho^2}\cos\rho$$
$$n_2(\rho)=-\left(\frac{3}{\rho^3}-\frac{1}{\rho}\right)\cos\rho-\frac{3}{\rho^2}\sin\rho. \tag{B.5.12}$$

$\rho\to 0$ 时的领头项是

$$j_l(\rho)\xrightarrow[\rho\to 0]{}\frac{\rho^l}{(2l+1)!!},\qquad n_l(\rho)\xrightarrow[\rho\to 0]{}-\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}, \tag{B.5.13}$$

其中

$$(2l+1)!!\equiv(2l+1)(2l-1)\cdots 5\cdot 3\cdot 1. \tag{B.5.14}$$

在大 ρ 渐近极限下，有

$$j_l(\rho)\xrightarrow[\rho\to\infty]{}\frac{1}{\rho}\cos\left[\rho-\frac{(l+1)\pi}{2}\right],$$
$$n_l(\rho)\xrightarrow[\rho\to\infty]{}\frac{1}{\rho}\sin\left[\rho-\frac{(l+1)\pi}{2}\right]. \tag{B.5.15}$$

由于（B.5.8）式和（B.5.9）式的约束，在 $r=0$ 处，$R(r)$ 必须是有限的；因此从（B.5.10）式和（B.5.13）式，我们看到由于 $n_l(\rho)$ 项在 $\rho\to 0$ 时的奇异行为，该项必须被删除. 这样，$R(r)=c_l j_l(\rho)$ [或者，在第 6 章第 6.4 节的记号中，$A_l(r)=R(r)=c_l j_l(\rho)$]. 对一个三维方势阱，在 $r<R$ 时 $V=V_0$（其中 $V_0>0$），期望的解是

$$R(r)=A_l(r)=\text{常数}\ j_l(\alpha r), \tag{B.5.16}$$

其中

$$\alpha=\left[\frac{2m(V_0-|E|)}{\hbar^2}\right]^{1/2},\qquad r<R. \tag{B.5.17}$$

如同在（7.6.30）式中讨论的，对 $r>R$ 时 $V=0$ 的情况，外部的解可写成球汉克函数的线性组合. 它们定义如下：

$$h_l^{(1)}(\rho)=j_l(\rho)+in_l(\rho)$$
$$h_l^{(1)*}(\rho)=h_l^{(2)}(\rho)=j_l(\rho)-in_l(\rho). \tag{B.5.18}$$

由（B.5.15）式，$\rho\to\infty$ 时它具有如下的渐近形式

$$h_l^{(1)}(\rho)\xrightarrow[\rho\to\infty]{}\frac{1}{\rho}e^{i[\rho-(l+1)\pi/2]}$$
$$h_l^{(1)*}(\rho)=h_l^{(2)}(\rho)\xrightarrow[\rho\to\infty]{}\frac{1}{\rho}e^{-i[\rho-(l+1)\pi/2]}, \tag{B.5.19}$$

如果对三维方势阱，即在 $r>R$ 时 $V(r)=0$，的束缚态能级感兴趣，有

$$u_l(r)=rA_l(r)=\text{常数}\ e^{-\kappa r}f\left(\frac{1}{\kappa r}\right)$$
$$\kappa=\left(\frac{2m|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2}. \tag{B.5.20}$$

在一定程度上，渐近展开，其中的（B.5.19）只给出了领头项，不包含具有与它所给定的项有着相反符号的指数的那些项，对 $r>R$，我们有来自（B.5.20）式的预期的解：

$$A_l(r)=\text{常数}\ h_l^{(1)}(i\kappa r)=\text{常数}[j_l(i\kappa r)+in_l(i\kappa r)], \tag{B.5.21}$$

其中，这些函数中的前三个是

$$h_0^{(1)}(i\kappa r)=-\frac{1}{\kappa r}e^{-\kappa r}$$

$$h_1^{(1)}(i\kappa r)=i\left(\frac{1}{\kappa r}+\frac{1}{\kappa^2 r^2}\right)e^{-\kappa r}$$
$$h_2^{(1)}(i\kappa r)=\left(\frac{1}{\kappa r}+\frac{3}{\kappa^2 r^2}+\frac{3}{\kappa^3 r^3}\right)e^{-\kappa r}. \tag{B.5.22}$$

最后，我们注意到在考虑从自由粒子［$V(r)=0$］到常数势 $V(r)=V_0$ 情况的转移时，我们只需要把自由粒子解［见（B.5.10）和（B.5.11）式］中的 E 换成 $E-V_0$. 然而要注意，如果 $E<V_0$，则将使用 $h_l^{(1,2)}(i\kappa r)$，其中 $\kappa=\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$.

B.6　氢原子

这里位势是

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r} \tag{B.6.1}$$

我们引入无量纲变量

$$\rho=\left(\frac{8m_e|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2}r. \tag{B.6.2}$$

能量本征函数和本征值（能级）是

$$\psi_{nlm}=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$$
$$R_{nl}(r)=-\left\{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2}e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$
$$E_n=\frac{-Z^2e^2}{2n^2a_0}\qquad(\text{不依赖于 } l \text{ 和 } m) \tag{B.6.3}$$
$$a_0=\text{波尔半径}=\frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$
$$n\geq l+1,\qquad \rho=\frac{2Zr}{ma_0}.$$

缔合拉盖尔多项式定义如下

$$L_p^q(\rho)=\frac{d^q}{d\rho^q}L_p(\rho), \tag{B.6.4}$$

其中特别是，

$$L_p(\rho)=e^\rho\frac{d\rho}{d\rho^p}(\rho^p e^{-\rho}) \tag{B.6.5}$$

且归一化积分满足

$$\int e^{-\rho}\rho^{2l}[L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2\rho^2 d\rho=\frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!}. \tag{B.6.6}$$

对于几个小的 n，径向函数为

$$R_{10}(r)=\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}2e^{-Zr/a_0}$$
$$R_{20}(r)=\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}(2-Zr/a_0)e^{-Zr/2a_0} \tag{B.6.7}$$
$$R_{21}(r)=\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{\sqrt{3}a_0}e^{-Zr/2a_0}.$$

径向积分为

$$
\begin{aligned}
\langle r^k\rangle &\equiv \int_0^{\infty} dr\, r^{2+k}[R_{nl}(r)]^2 \\
\langle r\rangle &= \left(\frac{a_0}{2Z}\right)[3n^2 - l(l+1)] \\
\langle r^2\rangle &= \left(\frac{a_0^2 n^2}{2Z^2}\right)[5n^2 + 1 - 3l(l+1)] \\
\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle &= \frac{Z}{n^2 a_0} \\
\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle &= \frac{Z^2}{[n^3 a_0^2 (l+\frac{1}{2})]}.
\end{aligned}
\tag{B.6.8}
$$

附录 C　方程（3.8.38）给出的角动量加法规则的证明

从量子力学观点讨论角动量加法规则是有益的. 让我们暂时这样标记角动量，即取 $j_1 \geqslant j_2$. 我们总可以做到这一点. 从方程（3.8.35），m 的极大值，$m^{极大}$ 是

$$m^{极大} = m_1^{极大} + m_2^{极大} = j_1 + j_2. \tag{C.1.1}$$

不管是用 $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ 还是用 $|j_1 j_2; jm\rangle$ 来描述，都只存在一个对应着本征值 $m^{极大}$ 的右矢. 换句话说，选择相因子为 1，有

$$|j_1 j_2; j_1 j_2\rangle = |j_1 j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle. \tag{C.1.2}$$

在 $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ 基中，存在两个对应着 m 本征值为 $m^{极大} - 1$ 的右矢，即，一个右矢具有 $m_1 = m_1^{极大} - 1$ 和 $m_2 = m_2^{极大}$，而另一个右矢具有 $m_1 = m_1^{极大}$ 和 $m_2^{极大} = m_2^{极大} - 1$. 这样，在这个基中，存在两重简并；因此，在 $|j_1 j_2; jm\rangle$ 中也必然有一个两重简并. 它可能从什么地方来呢？显然，对 $j = j_1 + j_2$，$m^{极大} - 1$ 是一个可能的 m 值. 而对 $j = j_1 + j_2 - 1$，它也是一个可能 m 值，事实上，对这个 j，这是最大的 m 值. 所以，j_1，j_2 能够相加得到 $j_1 + j_2$ 和 $j_1 + j_2 - 1$ 的 j.

我们能继续这么做，但很清楚简并不能无限地增加. 的确，对 $m^{极小} = -j_1 - j_2$，再次存在一个单一右矢. 如同从表 C.1 明显可见的，最大的简并度是 $(2j_2 + 1)$ 重. 表 C.1 是对于两个特殊的例子构建的：$j_1 = 2$，$j_2 = 1$ 和 $j_1 = 2$，$j_2 = \frac{1}{2}$. 这 $(2j_2 + 1)$ 重简并一定与 $2j_2 + 1$ 个态的 j

$$j_1 + j_2, \quad j_1 + j_2 - 1, \cdots, \quad j_1 - j_2. \tag{C.1.3}$$

联系在一起. 如果解除对 $j_1 \geqslant j_2$ 的限制，我们就可得到（3.8.38）式.

表 C.1　对 $j_1 = 2$，$j_2 = 1$ 和 $j_1 = 2$，$j_2 = \frac{1}{2}$ 两种情况，m，m_1 和 m_2 值的特殊示例

$j_1 = 2$，$j_2 = 1$							
m	3	2	1	0	−1	−2	−3
(m_1, m_2)	(2, 1)	(1, 1) (2, 0)	(0, 1) (1, 0) (2, −1)	(−1, 1) (0, 0) (1, −1)	(−2, 1) (−1, 0) (0, −1)	(−2, 0) (−1, −1)	(−2, −1)
态的数目	1	2	3	3	3	2	1
$j_1 = 2$，$j_2 = \frac{1}{2}$							
m	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{5}{2}$	
(m_1, m_2)	$(2, \frac{1}{2})$	$(1, \frac{1}{2})$ $(2, -\frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2})$ $(1, -\frac{1}{2})$	$(-1, \frac{1}{2})$ $(0, -\frac{1}{2})$	$(-2, \frac{1}{2})$ $(-1, -\frac{1}{2})$	$(-2, -\frac{1}{2})$	
态的数目	1	2	2	2	2	1	

第 2 版新增参考书目

Arfken, G. B. and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 4th ed., New York: Academic Press, 1995.

Byron, F. W. and R. W. Fuller. *Mathematics of Classical and Quantum Physics*, Mineola, NY: Dover, 1992.

Fetter, A. L. and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, Mineola, NY: Dover, 2003a.

Fetter, A. L. and J. D. Walecka. *Theoretical Mechanics of Particles and Continua*, Mineola, NY: Dover, 2003b.

Goldstein, H., C. Poole, and J. Safko. *Classical Mechanics*, 3rd ed., Reading, MA: Addison-Wesley, 2002.

Gottfried, K. and T-M. Yan. *Quantum Mechanics: Fundamentals*, 2nd ed., New York: Springer-Verlag, 2003.

Griffiths, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd ed., Upper Saddle River, NJ: Pearson, 2005.

Heitler, W. The *Quantum Theory of Radiation*, 3rd ed., Oxford (1954).

Holstein, B. R. *Topics in Advanced Quantum Mechanics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1992.

Itzykson, C. and J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory*, New York: McGraw-Hill, 1980.

Jackson, J. D. *Classical Electrodynamics*, 3rd ed., New York: Wiley, 1998.

Landau, R. H. *Quantum Mechanics* Ⅱ: *A Second Course in Quantum Theory*, *New* York: Wiley, 1996.

Loudon, R. *The Quantum Theory of Light*, 3rd ed., London: Oxford Science Publications, 2000.

Merzbacher, E. *Quantum Mechanics*, 3rd ed., New York: Wiley, 1998.

Shankar, *R. Principles of Quantum Mechanics*, 2nd ed., New York: Plenum, 1994.

Taylor, J. R. *Classical Mechanics*, Herndon, VA: University Science Books, 2005.

Townsend, J. S. *A Modern Approach to Quantum Mechanics*, Herndon, VA: University Science Books, 2000.

Weinberg, S. *The Quantum Theory of Fields*, New York: Cambridge University Press, 1995.

Zee, A. *Quantum Field Theory in a Nutshell*, 2nd ed., Princeton, NJ: Princeton University Press, 2010.

以前版本中的参考书目

Baym, G. *Lectures on Quantum Mechanics*, New York: W. A. Benjamin. 1969.

Bethe, H. A. and R. W. Jackiw. *Intermediate Quantum Mechanics*, 2nd ed., New York: W. A. Benjamin, 1968.

Biedenharn, L. C. and H. Van Dam, editors. *Quantum Theory of Angular Momentum*, New York: Academic Press, 1965.

Dirac, P. A. M. *Quantum Mechanics*, 4th ed., London: Oxford University Press, 1958.

Edmonds, A. R. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton, NJ: Princeton University Press, 1960.

Feynman, R. P. and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*, New York: McGraw-Hill, 1965.

Finkelstein, R. J. *Nonrelativistic Mechanics*, Reading, MA: W. A. Benjamin, 1973.

Frauenfelder, H. and E. M. Henley. *Subatomic Physics*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1974.

French, A. P. and E. F. Taylor. *An Introduction to Quantum Physics*, New York: W. W. Norton, 1978.

Goldberger, M. L. and K. M. Watson, *Collision Theory*, New York: Wiley, 1964.

Gottfried, K. *Quantum Mechanics*, vol. I, New York: W. A. Benjamin. 1966.

Jackson, J. D. *Classical Electrodynamics*, 2nd ed., New York: Wiley, 1975.

Merzbacher, E. *Quantum Mechanics*, 2nd ed., New York: Wiley, 1970.

Morse, P. M. and H. Feshbach. *Methods of Theoretical Physics* (2 vols.), New York: McGraw-Hill, 1953.

Newton, R. G. *Scattering Theory of Waves and Particles*, 2nd ed., New York: McGraw Hill, 1982.

Preston, M. *Physics of the Nucleus*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1962.

Sargent Ⅲ, M., M. O. Scully, and W. E. Lamb, Jr. *Laser Physics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1974.

Saxon, D. S. *Elementary Quantum Mechanics*. San Francisco: Holden-Day, 1968.

Schiff, L. *Quantum Mechanics*, 3rd ed., New York: McGraw-Hill, 1968.

作者简介

第一作者樱井纯（Jun John Sakurai, 1933 年 1 月—1982 年 11 月），日裔美籍著名理论物理学家。1933 年出生于东京，1949 年以高中生的身份来到美国。1955 年取得哈佛大学学士学位，1958 年在康奈尔大学获得博士学位。之后担任芝加哥大学物理系助理教授，并于 1964 年成为教授，1970 年转到加州大学洛杉矶分校担任教授。1982 年在日内瓦欧洲核子研究中心（CERN）做访问教授期间不幸遭遇车祸，英年早逝。

本书是樱井纯的一部遗作，他只完成了三章，剩余手稿由夏威夷大学的段三复教授整理续写完成。该书自第 1 版问世至今，相继被世界各地的多所高校用作量子力学和高等量子力学的研究生教材，广受好评。

第二作者 J. 拿波里塔诺（Jim Napolitano），1977 年在伦斯勒理工学院获得物理学学士学位，1982 年在斯坦福大学获得物理学博士学位，现为伦斯勒理工学院的教授、核物理与粒子物理实验家。多年来，他一直采用樱井纯的 *Modern Quantum Mechanics* 作为大学生和研究生量子力学课程的教材。受 Addison-Wesley 出版社的委托，他修订和撰写了该书的第 2 版，于 2011 年出版。



世界图书出版公司
北京公司网站

上架建议：物理学
ISBN 978-7-5100-6099-1
9 787510 060991 >

定价：99.00 元