普通高等教育"十一五"国家级规划教材

北京大学物理学丛书

高等量子力学

第三版

杨泽森 著

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

《北京大学物理学丛书》
第二届编委会名单

主　　任：高崇寿

副 主 任：（按姓氏笔画排，下同）

刘寄星　陈晓林　周月梅　夏建白

聂玉昕　阎守胜　黄　涛

编　　委：冯世平　田光善　孙昌璞　朱　星

朱邦芬　宋菲君　肖　佐　邹振隆

林宗涵　欧阳钟灿　俞允强　胡　岗

闻海虎　顾卫宇　韩汝珊　解思深

普通高等教育“十一五”国家级规划教材

北京大学物理学丛书

高等量子力学

第三版

杨泽森　著

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

高等量子力学/杨泽森著. —3 版. —北京:北京大学出版社,2007.5

(北京大学物理学丛书)

ISBN 978-7-301-02922-0

Ⅰ. 高… Ⅱ. 杨… Ⅲ. 量子力学 Ⅳ. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 057895 号

书　　名:**高等量子力学(第三版)**

著作责任者:杨泽森　著

责 任 编 辑:顾卫宇

标 准 书 号:ISBN 978-7-301-02922-0/O·0364

出 版 发 行:北京大学出版社

地　　址:北京市海淀区成府路 205 号　100871

网　　址:http://www.pup.cn　电子邮箱:zpup@pup.pku.edu.cn

电　　话:邮购部 62752015　发行部 62750672　理科编辑部 62752021

出版部 62754962

印　刷　者:北京大学印刷厂

经　销　者:新华书店

850 mm×1168 mm　32 开本　20.75 印张　530 千字

1991 年 7 月第 1 版

2007 年 5 月第 3 版　2007 年 5 月第 1 次印刷

印　　数:0001—5000 册

定　　价:33.00 元

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,侵权必究

举报电话:010-62752024　电子邮箱:fd@pup.pku.edu.cn

内 容 简 介

本书旨在帮助学完大学量子力学课程的读者加强理论基础和掌握基本方法. 前八章中的基本部分从 1962 年在北京大学物理系开设高等量子力学课程以来, 即以讲义形式被许多院校采用. 作者根据长期教学实践的经验和学科的发展, 对书稿进行了多次修改, 内容和章节也有所增加, 本版又增加了量子电动力学一章. 全书共十一章, 内容充实, 立论严谨. 对于原理、概念和方法的讲解都特别注重准确性和系统性, 对于量子化理论, 从最基本的内容直到 Dirac 方法和路径积分, 作了系统的讲解, 阐明其一般原则以及在粒子系统和场中的具体运用.

物理类研究生、理论物理青年科学研究人员和量子力学教师均可用本书作为学习量子力学、量子电动力学或进修提高的参考书. 第一至第八章的基本部分可作为高等量子力学课程的教材.

前　言

物理学是自然科学的基础，是探讨物质结构和运动基本规律的前沿学科.几十年来，在生产技术发展的要求和推动下，人们对物理现象和物理学规律的探索研究不断取得新的突破.物理学的各分支学科有着突飞猛进的发展，丰富了人们对物质世界物理运动基本规律的认识和掌握，促进了许多和物理学紧密相关的交叉学科和技术学科的进步.物理学的发展是许多新兴学科、交叉学科和新技术学科产生、成长和发展的基础和前导.

为适应现代化建设的需要，为推动国内物理学的研究、提高物理教学水平，我们决定推出《北京大学物理学丛书》，请在物理学前沿进行科学研究和教学工作的著名物理学家和教授对现代物理学各分支领域的前沿发展做系统、全面的介绍，为广大物理学工作者和物理系的学生进一步开展物理学各分支领域的探索研究和学习，开展与物理学紧密相关的交叉学科和技术学科的研究和学习提供研究参考书、教学参考书和教材.

本丛书分两个层次.第一个层次是物理系本科生的基础课教材，这一教材系列，将几十年来几代教师，特别是在北京大学教师的教学实践和教学经验积累的基础上，力求深入浅出、删繁就简，以适于全国大多数院校的物理系使用.它既吸收以往经典的物理教材的精华，尽可

能系统地、完整地、准确地讲解有关的物理学基本知识、基本概念、基本规律、基本方法；同时又注入科技发展的新观点和方法，介绍物理学的现代发展，使学生不仅能掌握物理学的基础知识，还能了解本学科的前沿课题和研究动向，提高学生的科学素质. 第二个层次是研究生教材、研究生教学参考书和专题学术著作. 这一系列将集中于一些发展迅速、已有开拓性进展、国际上活跃的学科方向和专题，介绍该学科方向的基本内容，力求充分反映该学科方向国内外前沿最新进展和研究成果. 学术专著首先着眼于物理学的各分支学科，然后再扩展到与物理学紧密相关的交叉学科.

愿这套丛书的出版既能使国内著名物理学家和教授有机会将他们的累累硕果奉献给广大读者，又能对物理的教学和科学研究起到促进和推动作用.

《北京大学物理学丛书》编辑委员会

1997 年 3 月

第 三 版 前 言

本版增加了篇幅较大的第十一章，同时对第一至第十章的内容作了一些修改，并且重新进行了校对．以前采用的的几率一词已改为概率．在第二版前言中已经说明，本书在阐述量子力学的原理和概念时，是以 P.A.M.Dirac 的《量子力学原理》为依据的，但从教学的观点考虑，在第一至第三章中，关于状态的描述采取了从位形空间的波函数到态矢量空间的途径；关于波函数的统计诠释、叠加原理和力学量的算符等方面，在讲法上着重参考了 L.D.Landau 和 E.M.Lifshitz 合著的《量子力学》．

第十一章的主题是针对电子场 – 电磁场系统讲述电动力学理论的量子化和重整化的方法和概念．我们根据 Bogoliubov-Parasiuk 定理论证理论的可重整性．在构造散射矩阵方面，也着重参考了 Bogoliubov 及其合作者的著作，但是仍然以原始的拉氏函数和量子化方法为依据，以及在表达方式上顾及通常的习惯．在理论方法和基本工具的讲解以及实际演算的各个有关部分还参考了 Lifshitz-Pitaevskii 、C.Itzkson-J.B.Zuber 、J.D.Bjorken-D.Drell 、朱洪元、杨炳麟、戴元本等人的场论著作以及一些作者原来的论文．关于基本论点的选择，在正文中有明确的陈述，该章的引言也有扼要的说明，这里略提如下一事：为了便于采用适当的重整化的场函数作为基本变量来定义散射过程的初末态和构造散射矩阵，从而也不求助于传统的渐近理论的某些假设，我们阐明了如何利用“重整化”格林函数生成泛函的路径积分来构成一种以重整化的场函数作为基本变量的算符描述，其中重整化场函数的算符满足通常的等时对易 – 反对易关系式，而且相应的哈密顿量算符保证重整化场函数的海森伯算符的时序积在真空态的平

均值代表“重整化”的格林函数. 此外，要用算符方法进行重整化，也宜于采用以重整化的场函数作为基本变量的算符描述. 需要注意，代表重整化场函数的算符和以未重整化场函数为基本变量的算符描述中的场算符，不满足未重整化场函数与重整化场函数之间的比例关系，而且这两类描述中的算符作用于不同的态矢量空间. 在基于质壳减除的重整化方案下，我们根据以重整化场函数为基本变量的算符描述确定的总哈密顿量算符 H 和自由哈密顿量 H_0 以及相应的相互作用绘景的时间演化算符 $U(t,t_0)$ 构造散射矩阵。即是用 H_0 的物理本征态描述初 $-$ 末态粒子，而散射矩阵实质上是算符 $U(\infty,-\infty)$ 在由 H_0 的物理本征态形成的基下的矩阵.

本版仍然用 LaTeX系统排版， Feynman 图的 Tex 文件是用作图软件 AXODRAW 编写的. 作者的同事邓卫真、吴崇试、程檀生、朱世琳、程希有以及本版责任编辑顾卫宇女士给予了多方面的帮助，使此项工作顺利完成. 理论物理专业博士生未微、王丰林为本书第二版进行了比较细致的勘误工作，使本版避免了这些错误. 作者在此一并致谢. 还要再次感谢第二版的责任编辑周月梅老师和参与排版的同事们，这次对第一至第十章的修改正是借助该版的 CTX 文件完成的.

杨 泽 森

2007 年 2 月于北京大学

第 二 版 前 言

这是作者的《高等量子力学》一书的修订和扩充. 读者对象主要是物理教师、青年科学研究人员和研究生. 第一至第八章可作为研究生课程的教材. 北京大学物理系从 1962 年起为六年制理论物理学生开设高等量子力学, 这八章中最基本的内容即包含在作者当时为本课程编写的讲义中. 随着开设本门课程的兄弟院校的不断增多, 该讲义被十分广泛地用作教材和参考书, 并从中得到改进. 从 1978 年以来又作了多次修改和扩充. 本书在内容选择上, 旨在帮助学完了大学量子力学课程的读者加强理论基础和掌握基本方法. 在讲课和初次自学时, 宜于在前八章内进行选择, 可根据教学或自学的要求, 删除较困难的部分, 集中精力于基本内容. 由于认定读者已经具备量子力学的一般基础知识, 所选应用范例比较少, 应根据正文动手运算和多加思考.

本书在阐述量子力学的原理和概念时, 是以 P.A.M.Dirac 的《量子力学原理》为依据的, 但从教学的观点改变了某些内容的表达形式, 这种作法在 L.D.Landau 和 E.M.Lifshitz 合著的《量子力学》中已有很好的范例. 在本书第一至第三章中, 关于状态的描述采取了从位形空间的波函数到态矢量空间的途径; 在讲述波函数的统计诠释, 叠加原理和力学量的算符等方面, 着重参考了 L.D.Landau 和 E.M.Lifshitz 的上述著作.

本书对于量子化的一般原则和方法有比较系统的讲解, 针对粒子系统和场的情形, 对于通常的正则量子化的基本内容和处理受约束系统的狄拉克方法以及路径积分方法, 作了充分的阐述.

本版是在责任编辑周月梅女士负责下由作者的同事和助手们用 LaTeX系统进行排版的, 作者本人也参加了一部分工作, 并

且校阅了全书的源文件. 这样既节省了时间, 又能够使公式和符号准确和美观. 在此谨向周月梅女士和担任排版工作的王玉成博士, 卢兰春博士等多位朋友, 朱世琳等博士研究生以及帮助作者完成加工和整理等项工作的周治宁, 邓卫真, 张建玮等同事们表示诚挚的感谢. 本书用 LaTeX系统进行排版, 是作者的女儿杨槟和她的同事张玉志博士积极建议的结果, 他们还在工作条件和汉字自动录入等方面提供了重要的帮助, 使此项工作能够顺利完成. 中国科学院科技期刊编辑培训部承担了胶片的制作. 作者也在此一并致谢.

根据全国自然科学名词审定委员会公布的物理名词的译名, 本书暂且把刁矢量和刃矢量改成左矢量和右矢量. 关于几率一词, 不作改动, 可与概率并用. 至于测不准关系一词, 本来很合适, 而且多年来已广泛采用, 故在本书中也不改动. 至于在公式中频繁出现的符号, 除了作特别处理的以外, 一般都遵守用 LaTeX系统排版的物理杂志《 The Physical Review 》中的规则.

杨 泽 森

1995 年 4 月于北京大学

目　录

第一章　波函数的统计诠释和叠加原理 ····· 1

§1　状态与波函数. 波函数的统计诠释 ····· 1

§2　叠加原理 ····· 4

§3　力学量的算符和本征值方程 ····· 9

§4　相容力学量及其完整组 ····· 13

§5　坐标作为完整力学量 ····· 18

§6　分立谱和连续谱本征函数的归一化.
波函数概念的扩充 ····· 19

参考文献 ····· 22

第二章　态矢量空间 ····· 23

§1　态矢量空间和它的对偶空间 ····· 23

§2　力学量的线性算符 ····· 25

§3　表象及表象变换 ····· 30

参考文献 ····· 32

第三章　运动方程和量子条件 ····· 33

§1　运动方程 ····· 33

§2　在笛卡儿坐标下的动量算符和量子条件 ····· 36

§3　角动量、自旋和哈密顿量算符 ····· 42

§4　坐标动量测不准关系和能量测不准关系 ····· 51

§5　由算符 $\{a_j^\dagger a_j\}$ 代表的完整力学量 ····· 57

§6　量子条件的一般形式 (一)(正则变量对应于态
矢量空间的算符的情形) ····· 63

§7　量子条件的一般形式 (二)(坐标是连续实变量
时的动量算子) ····· 68

§8 量子化中的广义协变性条件. 位形空间弯曲
情形的哈密顿量算符 ····· 77
§9 海森伯绘景和相互作用绘景 ····· 84
§10 混合态的统计算符和运动方程 ····· 89
§11 向经典力学极限的过渡 ····· 98
参考文献 ····· 104
第四章 玻色统计法与费米统计法. 二次量子化理论 ····· 105
§1 玻色统计法与费米统计法 ····· 105
§2 相同玻色子系统的二次量子化理论 ····· 108
§3 相同费米子系统的二次量子化理论 ····· 123
§4 波场量子化的观点 ····· 135
参考文献 ····· 141
第五章 时空对称性 ····· 142
§1 逆过程和 Wigner 定理 ····· 142
§2 时间平移, 空间平移和空间转动 ····· 150
§3 空间反射 ····· 155
§4 时间反演 ····· 160
参考文献 ····· 169
第六章 角动量理论 ····· 170
§1 角动量算符的本征值和本征态. $\mathcal{D}^j(g)$ 矩阵 ····· 170
§2 两个角动量的耦合. Clebsch-Gordan 系数 ····· 177
§3 $\mathcal{D}^j(g)$ 矩阵的性质 ····· 186
§4 三个角动量的耦合. Racah 系数 ····· 207
§5 不可约张量 ····· 213
参考文献 ····· 224
第七章 形式散射理论 ····· 225
§1 散射问题的初值方法. 波算符 ····· 225
§2 散射截面公式 ····· 231

§3 散射矩阵 ····· 235
参考文献 ····· 243
第八章 Dirac 方程 ····· 244
§1 Klein-Gordon 方程与 Dirac 方程 ····· 244
§2 Dirac 方程在正常洛伦兹变换下的协变性 ····· 250
§3 空间轴的转动与 Dirac 粒子的自旋 ····· 258
§4 空间反射 ····· 260
§5 由 $\psi(x), \bar{\psi}(x)$ 及 γ^μ 组成的张量 ····· 262
§6 时间反演 ····· 263
§7 平面波解. 库仑中心场中的电子态.
负能态问题 ····· 267
§8 电荷共轭 (正反粒子共轭) ····· 278
§9 低能近似 ····· 279
§10 标量场的量子化 ····· 285
§11 Dirac 场的量子化 ····· 295
参考文献 ····· 305
第九章 具有奇异拉格朗日函数的系统的正则方程及其量子化 ····· 306
§1 约束条件. 从拉格朗日方程到正则方程的过渡 ····· 306
§2 Dirac 括号 ····· 313
§3 量子化 ····· 315
§4 具有奇异拉格朗日函数的场 ····· 318
§5 Dirac 方法对自由电磁场的应用 ····· 324
§6 Dirac 方法对 SU_3 规范场的应用 ····· 335
§7 将 Dirac 方法用于光前坐标下的 Dirac 场 ····· 345
参考文献 ····· 353
第十章 路径积分 ····· 354
§1 在有限维位形空间的路径积分. 虚时间方法 ····· 355

§2 在有限维相空间的路径积分 ····· 382
§3 在 a^* 表象的路径积分 ····· 389
§4 在非相对论二次量子化理论中的玻色 Φ
场的路径积分 ····· 403
§5 对 C 数费米变量的积分 ····· 405
§6 相同费米子系统的 b^* 表象 ····· 410
§7 在非相对论二次量子化理论中的费米 Φ
场的路径积分 ····· 414
§8 自由电子场格林函数生成泛函的路径积分 ····· 418
§9 自由电磁场格林函数生成泛函的路径积分 ····· 423
§10 旋量电动力学格林函数生成泛函的路径积分 ····· 432
§11 色动力学格林函数生成泛函的路径积分 ····· 436
参考文献 ····· 447
第十一章 量子电动力学 ····· 448
§1 有效拉氏函数. 经典场的能量动量和角动量 ····· 451
§2 正则动量与量子条件 ····· 459
§3 格林函数 ····· 463
§4 Feynman 图 ····· 480
§5 正规图形和正规顶角函数 ····· 496
§6 重整化 ····· 518
§7 Pauli-Villars 正规化和维数正规化 ····· 554
§8 散射矩阵 ····· 581
§9 表示散射矩阵元的 Feynman 图 ····· 588
§10 场算符和态矢量的 $\mathscr{C}$, $\mathscr{P}$, $\mathscr{T}$ 变换 ····· 600
§11 电子的反常磁矩 ····· 610
§12 红外发散的消除 ····· 615
§13 类氢原子能级的 Lamb 移位 ····· 624
§14 重整化群简述 ····· 629
参考文献 ····· 644

第一章　波函数的统计诠释和叠加原理

§1　状态与波函数. 波函数的统计诠释

本书前七章以及后面的部分内容属于非相对论量子力学的范围. 非相对论性条件是指光速可看成无限大的速度，因此粒子之间的相互作用可认为是瞬时传播的，而且相互作用不引起粒子的消失或新粒子的产生，故在描述粒子系统的运动时，只涉及该系统的力学量. 不过，描述微观现象的量子力学包含着特有的原理和观念，使力学量和状态的概念具有与经典力学不同的含义.

考虑含有 N 个粒子的系统，暂假定各粒子只有空间自由度并且是互不相同的. 按照经典力学，每个粒子在一定时刻总是处在一定的地点和具有一定的动量，系统中全部粒子的坐标和动量是描述其状态的一组完整力学量. 系统在一初始时刻的坐标动量值既决定了它在该时刻所有力学量的值，也决定了在自然发展中达到的其他时刻的坐标和动量值. 任何一组与坐标动量有一一对应关系的力学量，也构成一组完整力学量. 在系统的一定状态下进行坐标、动量以及其他力学量的测量时，所获结果总是代表各力学量在该状态下的值. 由一组这样的完整力学量来描述状态的方式称为纯力学描述. 除了纯力学描述，还有所谓统计描述. 在这种描述中，说到系统处在一定状态，意思是处在这样一组物理条件之下，根据这组物理条件通常不足以确定全部粒子的坐标和动量. 因此在这样的状态下重复测量一个力学量时，各次获得的结果可能很不一致，当然重复测量多次获得各种结果的分布是确定的，这取决于所说的物理条件. 这种状态是用分布函数代表的，系统在一初始时刻的分布函数也决定在自然发展中达到的其

他时刻的分布函数.

在量子力学中假定可以借助遵从叠加原理的波函数给出状态的完整描述. 为了叙述的方便, 这里首先说明状态和波函数的含义, 在引用叠加原理时, 暂不作解释. 不论描述方式上有何特点, 一种状态总是可以通过控制一组物理条件来实现, 一种力学量总是 (至少在理论上说来) 可以通过测量而获得它的各种值 (实数). 以粒子的坐标为例, 如果重复地在一个状态下测量某个坐标每次都得到同一个值 x_0, 就说这个状态是该坐标具有确定值 x_0 的状态. 由于系统在一定时刻的不同波函数叠加之后仍然代表在该时刻可以实现的状态 (见下节), 可以推知, 不是每个状态都是坐标具有确定值的状态. 所以在一般的状态下重复测量某个坐标时 (每次测量都在该状态下进行), 一般不是得出同一种值. 能够作为某个坐标的测量结果的每个值都称为该坐标的一个允许值, 一个坐标的允许值的集合称为该坐标的值谱. 显然, 在一个不是坐标具有确定值的状态下测量坐标时, 每次获得的结果都不能认为是原状态的坐标值, 只有重复测量多次所得出的各种允许值的分布才与原来的状态有密切的联系. 从经典对应的考虑, 一个系统也应具有像动量、角动量和能量等力学量, 此外还可以具有经典力学中没有的力学量, 每一种力学量都可按上述观点来解释. 如果在系统的某个状态下重复测量力学量 F 时, 每次都得出同一种值 f_0, 就说这个状态是 F 具有确定值 f_0 的状态. 由叠加原理可推知, 不是每一个状态都是 F 具有确定值的状态. 所以在一般的状态下重复测量 F 时, 各次得到的结果可以很不一致. 能够作为 F 的测量结果的每个值都称为 F 的一个允许值, F 的允许值的集合称为 F 的值谱. 在一个不是 F 具有确定值的状态下测量 F 时, 每次获得的结果都不能认为是原状态的 F 值, 只有重复测量多次所得的各种允许值的分布 (简称为 F 值的分布) 才与原来的状态有密切的联系. 所以, 系统的一定状态不是表明它的各种力学量都有一定的值, 而是意味着在重复测量下应该得

到的各种力学量的允许值的一定分布. 所谓可以借助波函数给出状态的完整描述, 意思就是可根据波函数决定在该状态下重复测量每一种力学量时应该得出的允许值分布.

由一定波函数代表的状态称为纯粹态, 使力学量 F 取确定值的纯粹态将称为 F 的本征态, F 在它的一个本征态下的值也称为在该状态的本征值. 使一组力学量中每一个都取确定值的纯粹态称为这组力学量的共同本征态. 从完整描述的意义上说, 纯粹态的概念对应着经典力学中纯力学状态的概念, 不过由叠加原理知道, 系统在一定时刻不一定处在某个纯粹态. 是否对应于每个力学量的每一个允许值, 都存在使该力学量确定地取这个值的纯粹态? 在量子力学中假定如此. 关于坐标, 还有进一步的假定: 每个笛卡儿坐标的值谱都是全体实数, 而且对于任何 $3N$ 个实数, 都存在使全体笛卡儿坐标具有这组值的纯粹态. 与经典力学的统计描述中的状态概念相应, 在量子力学中有混合态的概念. 所谓系统处在一定的混合态, 即是处在一组通常不足以确定一个纯粹态的物理条件之下, 因此在一定混合态下重复测量一个力学量获得各种结果的分布虽然也是确定的 (取决于所说的物理条件), 但是一般都不能用系统的一个波函数表示出来. 一定的混合态可以看成一组适当的纯粹态的一定分布, 并且引用类似于分布函数的量来描写. 纯粹态是混合态的特殊形式. 这个关于纯粹态的分布的概念与经典统计物理中分布函数的概念是相似的, 都是对应着一组就所属的力学而言可以实现而一般是不完整的物理条件, 但必须注意不同的力学造成的差别. 特别是, 在使用纯粹态的一定分布这个术语时, 需要确切地规定它的含义. 混合态的表述及其遵从的运动方程将在第三章 §10 给出. 在本书中用到状态这一术语时, 除了无须注明或可从上下文看出是何种状态的情形, 都是指纯粹态.

波函数的概念来源于德布罗意的物质波概念, 对于它的物理意义的诠释 (玻恩统计诠释) 是量子力学的基本原理之一. 对

于用粒子的笛卡儿坐标 $(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$ 作为自变量的波函数 (简称为位形空间的波函数), 统计诠释的内容可陈述如下：波函数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$ 是一种概率幅，其模平方代表位形空间中的概率密度，即 $|\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_N$ 是在状态 Ψ 下发现系统的位形处在点 $(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$ 附近的体元 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_N$ 的相对概率. 其次，在状态 Ψ 下测量任一力学量获得各种结果的概率都可由 Ψ 与 Ψ^* 构成的双线性型表示出来. 本书将经常把位形空间的波函数写成 $\Psi(q)$, 其中 (q) 代表全部粒子的笛卡儿坐标. 显然，当 $\Psi(q)$ 乘以非零常数时，仍然代表原来的状态 (每种力学量取值的分布都不受影响), 因此，当它的模平方在整个位形空间的积分有限而且不为零时，总是可以调节常数因子而成为归一的：

$$\int |\Psi(q)|^2 \mathrm{d}q = \int |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_N = 1. \quad (1)$$

这时，$|\Psi(q)|^2$ 代表发现系统处在位形点 (q) 的绝对概率密度. 在归一条件的限制下，波函数的任意常因子只能是模为 1 的复常数. 不可归一的 (非零) 波函数只能表示相对概率，它的任意常因子可用适当选定的标准条件加以限制. 由不可归一波函数代表的状态实际上是不能严格实现的，但在理论描述中应当承认其存在. 这种状态总是从属于一个连续区域，而且将其波函数在一狭小邻域中适当进行积分，就变成可归一的 (见 §6), 因此可以按照适当的极限观点，借助可归一的波函数来处理涉及不可归一波函数的问题.

§2 叠加原理

叠加原理的内容可叙述如下 (见本章末所引 Dirac 和 Landau-Lifshitz 的著作)：在一个系统某一时刻的一切可能波函数的集合中，任意两个波函数 Ψ_A 与 Ψ_B 的线性组合 (以复常数为组合系数) 都属于该集合，而在叠加波函数代表的状态下测量任一力学量的

值时，只可能获得在 Ψ_A 或 Ψ_B 下该测量能够获得的结果. 反之，对应于在 Ψ 下测量任一力学量能够获得的每一种值，Ψ 中有一个确定的叠加成分代表该力学量只可能取这种值的状态. 其次，如果系统在一初始时刻处在纯粹态，那么在其自然发展中的每一时刻都处在纯粹态，而且波函数之间的线性关系不随时间改变.

这个叙述的最后部分指出了波函数随时间的变化应满足的条件：如果 $\Psi_1(t)$ 及 $\Psi_2(t)$ 随时间 t 的变化都代表系统可能的运动过程，则它们的任意线性组合 $a_1\Psi_1(t)+a_2\Psi_2(t)$ (a_1, a_2 与 t 无关) 也代表该系统可能的运动过程. 关于这一点，以后再作进一步的讨论，在本节将着重解释前两部分的内容和引出若干重要结论.

一个系统在一定时刻的一切可以实现的纯粹态的波函数，连同恒等于零的“波函数”，必定构成复数域上的线性空间，我们将把这个空间称为波函数空间. 恒等于零的波函数可以作为叠加成分或叠加结果出现，理解为不代表任何状态的波函数即可. 用非零常数去乘一个波函数是一种特殊的叠加，结果代表原来的状态. 显然，在一个系统的波函数空间中只有一些特别的波函数才表示某个子系统也处在一定的纯粹态，因为这种波函数应该以所说的子系统的波函数为一个相乘因子，而一般的波函数并不具有这种形式. 其次，每个系统都可以看作更大的系统的子系统，可见一个系统在一定时刻可以不处在一定的纯粹态.

由于在叠加波函数代表的状态下不能发现在各分项都不能发现的结果，可以肯定，把 F 的属于同一本征值的两个不同本征态的波函数作任意的叠加，只要不恒等于零，就仍然代表 F 的属于这个本征值的本征态. 另一方面，对于 F 的属于不同本征值 f_1 及 f_2 的两个本征态，以非零的组合系数把它们的波函数 Ψ_1 与 Ψ_2 叠加之后，不再代表 F 的本征态. 因为在 $\Psi_{12}=a_1\Psi_1+a_2\Psi_2$ 下测量 F 只能发现 f_1 或 f_2，如果 Ψ_{12} 代表 F 的本征态，则相应的本征值是 f_1 与 f_2 中之一，设为 f_1，那么 $\Psi_{12}-a_1\Psi_1$ 也代表 F 的属于本征值 f_1 本征态，这当然是不对的，即 Ψ_{12} 不代表 F 的本征

态. 由此可见, 只要 F 有两个或更多的不同允许值, 就必定存在使 F 不具有确定值的纯粹态. 现在求在 Ψ_{12} 下测量 F 而发现某个值的概率. 假定 Ψ_1 与 Ψ_2 是可归一的, $W_{f_1}(F,\Psi_{12})$ 及 $W_{f_2}(F,\Psi_{12})$ 分别表示发现 F 为 f_1 和 f_2 的相对概率, 根据上节, 它们可由 Ψ_{12} 与 Ψ_{12}^* 的双线性型表示出来, 故

$$W_{f_1}(F,\Psi_{12}) = A_{11}a_1^*a_1 + A_{12}a_1^*a_2 + A_{12}^*a_2^*a_1 + A_{22}a_2^*a_2\,,$$

$$W_{f_2}(F,\Psi_{12}) = B_{11}a_1^*a_1 + B_{12}a_1^*a_2 + B_{12}^*a_2^*a_1 + B_{22}a_2^*a_2\,,$$

其中各个系数与 a_1, a_2 无关. 当 a_1 等于零时, W_{f_1} 应该是零, 可见 $A_{22}=0$, 同理有 $B_{11}=0$, 由此以及概率的非负性质知道 $A_{12}=B_{12}=0$, 而且 A_{11} 及 B_{22} 是正实数. 这两项概率的和应该等于 Ψ_{12} 的归一积分, 故

$$\begin{aligned} &A_{11}a_1^*a_1 + B_{22}a_2^*a_2 \\ &\quad = a_1^*a_1\int\Psi_1^*(q)\Psi_1(q)\mathrm{d}q + a_2^*a_2\int\Psi_2^*(q)\Psi_2(q)\mathrm{d}q \\ &\quad + a_1^*a_2\int\Psi_1^*(q)\Psi_2(q)\mathrm{d}q + a_2^*a_1\int\Psi_2^*(q)\Psi_1(q)\mathrm{d}q\,. \end{aligned}$$

由于 a_1 与 a_2 的任意性, 得

$$W_{f_1}(F,\Psi_{12}) = \int\{a_1\Psi_1(q)\}^*\{a_1\Psi_1(q)\}\mathrm{d}q, \tag{2}$$

$$W_{f_2}(F,\Psi_{12}) = \int\{a_2\Psi_2(q)\}^*\{a_2\Psi_2(q)\}\mathrm{d}q, \tag{3}$$

$$\int\Psi_1^*(q)\Psi_2(q)\mathrm{d}q = 0. \tag{4}$$

波函数 $\Psi_A(q)$ 与 $\Psi_B(q)$ 的重叠积分 $\int\Psi_A^*(q)\Psi_B(q)\mathrm{d}q$ 称为两者的内积, 记为

$$(\Psi_A,\Psi_B) = \int\Psi_A^*(q)\Psi_B(q)\mathrm{d}q\,. \tag{5}$$

当两个波函数的内积为零时, 就说它们是互相正交的, 也说它们所代表的状态是互相正交的. (2)—(4) 式表明, 同一力学量的

属于不同本征值的两个本征态是互相正交的，在由两个这样的可归一波函数叠加成的 $\Psi_{12}=a_1\Psi_1+a_2\Psi_2$ 下，发现 F 取其在 Ψ_1 的值的相对概率是 $(a_1\Psi_1,a_1\Psi_1)$，F 取其在 Ψ_2 的值的相对概率是 $(a_2\Psi_2,a_2\Psi_2)$. 当 Ψ_{12} 是归一波函数时，这些量就是绝对概率.

下面讨论波函数按任一力学量的本征态的分解并建立一般的概率公式. 设 $\{f_0\}$ 及 $\{f'\}$ 分别代表 F 的值谱中的分立部分和连续部分，如果在 Ψ 下测量 F 时能够发现分立值 f_0，那么 Ψ 中有一个确定的叠加成分 Ψ_{f_0}，它代表 F 只取这个值的状态，而在 $(\Psi-\Psi_{f_0})$ 代表的状态下测量 F, 就不可能发现 f_0. 考虑一个力学量 $\delta(f_0,F)$，它是 F 的函数，其定义按如下方式给出：每一次发现 F 值为 f_0 的测量都理解为发现 $\delta(f_0,F)$ 值为 1 的测量，每一次发现 F 取其它值的测量都理解为发现 $\delta(f_0,F)$ 为 0 的测量. 因此 Ψ_{f_0}，及 $(\Psi-\Psi_{f_0})$ 都代表 $\delta(f_0,F)$ 的本征态，相应的本征值分别为 1 及 0. 在 Ψ 下发现 F 值为 f_0 的概率 $W_{f_0}(F,\Psi)$ 也即是发现 $\delta(f_0,F)$ 值为 1 的概率，根据 (2) 式及 (4) 式可得

$$W_{f_0}(F,\Psi)=(\Psi_{f_0},\Psi_{f_0}), \tag{6}$$

$$(\Psi_{f_0},\Psi-\Psi_{f_0})=0. \tag{7}$$

借助 (7) 式又可把 (6) 式写成

$$W_{f_0}(F,\Psi)=(\Psi_{f_0},\Psi)=(\Psi,\Psi_{f_0}). \tag{8}$$

对于连续谱的情形也可作类似的讨论. 如果在 Ψ 下测量 F 时能够发现某个间隔 Δf_s 内所有的 f' 值，那么 Ψ 中有一确定的叠加成分 $\Psi_s=\int_{\Delta f_s}\Psi_{f'}\mathrm{d}f'$，它代表 F 取这个间隔内的值的状态，$\Psi_{f'}$ 代表 F 取确定值 f' 的状态，在 $(\Psi-\Psi_s)$ 下测量 F 则不可能发现处于这个间隔内的值. 与 (6),(7) 式相似，有

$$W_{\Delta f_s}(F,\Psi)=(\Psi_s,\Psi_s), \tag{9}$$

$$(\Psi_s,\Psi-\Psi_s)=0. \tag{10}$$

由此又得出

$$W_{\Delta f_s}(F,\Psi)=(\Psi_s,\Psi)=(\Psi,\Psi_s), \tag{11}$$

$W_{\Delta f_s}(F,\Psi)$ 表示在 Ψ 下发现 F 值处于 Δf_s 内的相对概率. 在不同点 f_0 与 f_0' 之间，不相交的间隔 Δf_s 与 $\Delta f_s'$ 之间 (记为 $s\neq s'$)，f_0 与间隔 Δf_s 之间，也存在 (4) 式的正交关系：

$$(\Psi_{f_0},\Psi_{f_0'})=0. \quad \text{当 } f_0\neq f_0'; \tag{12}$$

$$(\Psi_s,\Psi_{s'})=0, \quad \text{当 } s\neq s'; \tag{13}$$

$$(\Psi_s,\Psi_{f_0})=0. \tag{14}$$

由 (7),(10) 以及 (12)—(14) 式有

$$\left(\sum_{f_0}\Psi_{f_0}+\sum_{s}\Psi_s\,,\Psi-\sum_{f_0}\Psi_{f_0}-\sum_{s}\Psi_s\right)=0. \tag{15}$$

再由 (8) 式及 (11) 式对 f_0 及间隔 Δf_s 求和，可把 Ψ 的归一积分表示为 $(\Psi,\Psi)=\left(\Psi,\sum_{f_0}\Psi_{f_0}+\sum_s\Psi_s\right)$, 故

$$\left(\Psi,\Psi-\sum_{f_0}\Psi_{f_0}-\sum_{s}\Psi_s\right)=0.$$

由此与 (15) 式相减看出，$\Psi-\sum_{f_0}\Psi_{f_0}-\sum_s\Psi_s$ 是恒等于零的波函数，可见

$$\Psi=\sum_{f_0}\Psi_{f_0}+\sum_{s}\Psi_s=\sum_{f_0}\Psi_{f_0}+\int\Psi_{f'}\mathrm{d}f', \tag{16}$$

这就是任意波函数按 F 的本征态分解的公式. 根据 (6) 及 (9) 式，当 Ψ 写成这种形式时，Ψ_{f_0} 的归一积分代表在 Ψ 下测量 F 获得 f_0 的相对概率，$\int_{\Delta f}\Psi_{f'}\mathrm{d}f'$ 的归一积分代表发现 F 值处在连续谱的一个间隔 Δf 内的相对概率. 在下节将说明，这些量又可分别看成是原来处在状态 Ψ 的系统被发现处在 Ψ_{f_0} 和 $\int_{\Delta f}\Psi_{f'}\mathrm{d}f'$ 的相对概率.

既然每个波函数都可以表示为公式 (16) 的叠加形式，也就表明，任何一个力学量的全体本征态的独立波函数都构成波函数空间的完备组. 叠加原理的这个推论 (或者说是统计诠释和叠加原理的推论)，代表着力学量的一个基本性质. 在以上的讨论中，把 Ψ 设想为可归一的 (因而 Ψ_{f_0} 与 Ψ_s 也是可归一的)，在它归一之后，(6) 及 (9) 式就表示绝对概率. 对于不可归一的 Ψ，可借助适当的取极限的手续求出上述分解公式、概率公式和正交关系，只是各项概率都是相对的.

为了便于引用 (12)—(14) 中的正交关系，需要改变一下它们的形式. 设 Ψ_{f_0} 及 $\Psi_{f_0'}$ 代表 F 取分立值 f_0 及 f_0' 的本征态而 $f_0 \neq f_0'$，它们的和自动地具有 (16) 的形式，所以两者是互相正交的. 再设 $\Psi_{f'}$ 及 $\Psi_{f''}$ 代表 F 值为连续谱中 f' 与 f'' 的本征态，而 $f' \neq f''$，考虑 $\Psi_{f'}$ 及 $\Psi_{f''}$ 所属的邻域并作 $\int_{\Delta_1} \Psi_{f'} \mathrm{d}f'$ 与 $\int_{\Delta_2} \Psi_{f''} \mathrm{d}f''$，在保持这两个邻域不相交时，这两项积分的和也具有 (16) 式的形式，因而两者是互相正交的，在极限观点下，$\Psi_{f'}$ 与 $\Psi_{f''}$ 是互相正交的. 同样，Ψ_{f_0} 与 $\Psi_{f'}$ 也互相正交，最后得到

$$(\Psi_{f_0}, \Psi_{f_0'}) = 0, \quad \text{当 } f_0 \neq f_0'; \tag{17}$$

$$(\Psi_{f'}, \Psi_{f''}) = 0, \quad \text{当 } f' \neq f''; \tag{18}$$

$$(\Psi_{f_0}, \Psi_{f'}) = 0. \tag{19}$$

§3 力学量的算符和本征值方程

作用于波函数空间的线性算符 $\hat{L}$ 是指符合如下两个条件的算符：(1) $\hat{L}$ 作用于任何波函数的结果，仍然是原来空间的波函数. (2) $\hat{L}$ 作用于波函数 Ψ_A 与 Ψ_B 的线性组合 $a\Psi_A + b\Psi_B$ 时，结果等于 $a\hat{L}\Psi_A + b\hat{L}\Psi_B$. 对作用于波函数空间的任一个线性算符 $\hat{L}$，都可以这样来定义它的厄米共轭算符 $\hat{L}^\dagger$：它本身也是作用于这

个空间的线性算符，并且对任意的波函数 Ψ_A 与 Ψ_B，下式都成立

$$(\Psi_A, \widehat{L}^{\dagger}\Psi_B) = (\widehat{L}\Psi_A, \Psi_B). \tag{20}$$

内积 $(\Psi_A, \widehat{L}\Psi_B)$ 也称为算符 $\widehat{L}$ 关于 Ψ_A 与 Ψ_B 的矩阵元，常记为 L_{AB}，因此条件 (20) 可用矩阵元表示为

$$(\widehat{L}^{\dagger})_{AB} = (L_{BA})^*. \tag{21}$$

当一个线性算符与它的厄米共轭相同时就称为厄米算符. 因此，线性算符 $\widehat{H}$ 为厄米算符意味着下式对于任意波函数 Ψ_A 与 Ψ_B 都成立

$$(\Psi_A, \widehat{H}\Psi_B) = (\widehat{H}\Psi_A, \Psi_B). \tag{22}$$

上节 (16) 式中的 Ψ_{f_0} 与 $\Psi_{f'}$ 被 Ψ 和力学量 F 以及相应的本征值决定，并且线性地依赖于 Ψ，因此必定存在不依赖 Ψ 的线性算符 $\widehat{\delta}(f_0, F)$ 和 $\widehat{\delta}(\Delta f, F)$，使得

$$\Psi_{f_0}(q) = \widehat{\delta}(f_0, F)\Psi(q), \tag{23}$$

$$\int_{\Delta f} \Psi_{f'}(q)\mathrm{d}f' = \widehat{\delta}(\Delta f, F)\Psi(q). \tag{24}$$

根据同样的理由知道，存在不依赖 Ψ 的线性算符 $\widehat{F}$，使得

$$\sum_{f_0} f_0\Psi_{f_0}(q) + \int f'\Psi_{f'}(q)\mathrm{d}f' = \widehat{F}\Psi(q). \tag{25}$$

可以验证，这些算符是唯一确定的，而且是厄米的. 我们来证明一下 $\widehat{F}$ 的厄米性质，设 Ψ_A 与 Ψ_B 写成 (16) 式的形式时为

$$\Psi_A = \sum_{f_0} \Psi_{(A)f_0} + \int \Psi_{(A)f'}\mathrm{d}f',$$

$$\Psi_B = \sum_{f_0} \Psi_{(B)f_0} + \int \Psi_{(B)f'}\mathrm{d}f'.$$

于是由 (25) 式及正交关系得

$$F_{AB}-(F_{BA})^{*}=\int\int(\Psi_{(A)f'},\Psi_{(B)f''})(f''-f')\mathrm{d}f'\mathrm{d}f''=0,$$

即

$$\widehat{F}^{\dagger}=\widehat{F}.$$

算符 $\widehat{F}$ 称为力学量 F 的算符. 根据 (25) 式容易证明, $\widehat{F}\Psi$ 与 Ψ 的内积就是在状态 Ψ 下测量 F 的结果按相对概率构成的平均值. 用 $\overline{F}$ 代表这样的平均值, 则

$$\overline{F}=\sum_{f_0}f_0W_{f_0}(F,\Psi)+\int f'\rho_{f'}(F,\Psi)\mathrm{d}f',$$

其中 $W_{f_0}(F,\Psi)$ 是在 Ψ 下发现 F 值为 f_0 的相对概率, $\rho_{f'}(F,\Psi)\mathrm{d}f'$ 是发现 F 取值于 f' 附近一个无穷小间隔 $\mathrm{d}f'$ 的相对概率. 由上节 (8) 及 (11) 式有

$$\overline{F}=\left(\Psi,\sum_{f_0}f_0\Psi_{f_0}+\int f'\Psi_{f'}\mathrm{d}f'\right),$$

或

$$\overline{F}=(\Psi,\widehat{F}\Psi).\tag{26}$$

我们将不管 Ψ 是否已经归一或者能否归一, 而把 $\overline{F}$ 称为 F 或算符 $\widehat{F}$ 在 Ψ 下的平均值, 当然它只在 Ψ 为归一波函数时才是真正的平均值. 在量子力学中已经抛弃了每种力学量在每个状态都有一定值的经典观念, 与力学量的经典值对应的量就是它的平均值或者说它的算符的平均值.

借助力学量的算符还可以建立它的本征值方程. 设 Ψ_f 代表力学量 F 的本征态, 本征值为 f. 如果 f 属于分立谱, 那么从 (25) 式直接看出 $\widehat{F}\Psi_f$ 等于 $f\Psi_f$, 当 f 属于连续谱时, 在 Ψ_f 的一个狭小邻域作 $\int_{\Delta}\Psi_{f'}\mathrm{d}f'$, 则

$$\widehat{F}\int_{\Delta}\Psi_{f'}\mathrm{d}f'=\int_{\Delta}f'\Psi_{f'}\mathrm{d}f'.$$

由此仍然得到 $\widehat{F}\Psi_f = f\Psi_f$. 反之，如果已知 Ψ_f 是满足这个条件的波函数，那么 $(\widehat{F}-f)^2$ 在 Ψ_f 下的平均值等于零，即是说在 Ψ_f 下 F 值的分布集中于 f. 这样就证明了，波函数 Ψ_f 代表力学量 F 的属于本征值 f 的本征态的必要和充分条件是

$$\widehat{F}\Psi_f = f\Psi_f\,. \tag{27}$$

因此，如果用一定方法确定了力学量 F 的算符，就可以把条件 (27) 当作寻找它的本征值和本征态的方程式，这种方程式称为力学量 F 或算符 $\widehat{F}$ 的本征值方程. 算符 $\widehat{F}$ 的厄米性保证不出现复数的本征值，还保证属于它的不同本征值的波函数互相正交. 本来对于力学量的算符，只关心它作用于波函数时的性质 ((25) 式只给出算符作用于波函数的含义)，但是在给定了它的一种表达式之后，就可能有更广的定义域，使得它的本征值方程可以有一些不是波函数的本征函数，与此相应的本征值当然也不是该力学量的许可值，在这种情况下需要根据物理上的考虑来挑选属于波函数空间的解.

在上节曾经引用力学量 F 的函数 $\delta(f_0,F)$, 它在 F 值为 f_0 的态下等于 1，在 F 的其它本征态下等于零. 显然，$\widehat{\delta}(f_0,F)$ 正是这个力学量的算符. 类似地，$\widehat{\delta}(\Delta f,F)$ 是这样的力学量的算符：在 F 值属于连续谱的区间 Δf 的每个本征态下，其值为 1, 在 F 的其它本征态下其值为零. 这些力学量的平均值正是 $W_{f_0}(F,\Psi)$ 与 $W_{\Delta f}(F,\Psi)$，即

$$W_{f_0}(F,\Psi) = (\Psi,\widehat{\delta}(f_0,F)\Psi), \tag{28}$$

$$W_{\Delta f}(F,\Psi) = \int_{\Delta f}\rho_{f'}(F,\Psi)\mathrm{d}f' = (\Psi,\widehat{\delta}(\Delta f,F)\Psi). \tag{29}$$

算符 $\widehat{\delta}(f_0,F)$ 和 $\widehat{\delta}(\Delta f,F)$ 分别是从波函数空间中挑选 F 值为 f_0 的子空间和 F 值处于间隔 Δf 的子空间的投影算符. 任意给定可归一波函数 Ψ，都可以定义挑选这个态的投影算符 $\widehat{P}_\Psi$: 它作用

于 Ψ 的结果仍然是 Ψ，而作用于与 Ψ 正交的任何波函数时，结果都是零. 这样的 $\widehat{P}_\Psi$ 显然是厄米算符，而且具有构成波函数空间完备组的本征函数，因此是某一个力学量 P_Ψ 的算符 (见下节的说明). 任意波函数 Φ 可作如下的正交分解

$$\Phi = \widehat{P}_\Psi \Phi + (1 - \widehat{P}_\Psi)\Phi,$$

其中 $\widehat{P}_\Psi \Phi = a\Psi$, 系数 a 满足 $a(\Psi, \Psi) = (\Psi, \Phi)$. 可见，$(\Phi, \widehat{P}_\Psi \Phi)$ 就是在状态 Φ 下发现 P_Ψ 值是 1 的相对概率，而发现 P_Ψ 值是 1 也即是发现系统处在状态 Ψ，因此，这个量即是原来处在状态 Φ 的系统被发现处在 Ψ 的相对概率. 同样，$W_{f_0}(F, \Psi)$ 即是原来处在 Ψ 的系统被发现处在 Ψ_{f_0} 的相对概率，$W_{\Delta f}(F, \Psi)$ 是系统被发现处在 $\int_{\Delta f} \Psi_{f'} \mathrm{d}f'$ 的相对概率.

借助一些基本原理和辅助论据来确定各种重要力学量的算符，对于量子力学理论的表述和实际应用都是十分重要的. 考虑到算符的平均值对应着力学量的经典值，在量子力学中一般地假定，一个力学量的算符作为一些基本力学量的算符的函数，与经典力学中的形式相同. 所谓确定一个力学量的算符，通常就是选定一组具有已知算符的基本力学量，并根据经典力学的函数形式把该力学量的算符表示成这组基本力学量的算符的函数. 不过，由于算符之间一般是不可对易的，借助经典力学量的函数关系，经常是不能完全确定它们的算符的函数关系. 此外，在给定一个算符之后，也常常难于检验是否具有构成波函数空间的完备组的本征函数，所以在确定稍为复杂的算符时就可能含有假定的因素.

§4 相容力学量及其完整组

力学量的一种最普遍的性质是具有构成波函数空间的完备组的本征函数，借助于这个性质，就能够自相一致地建立关于它

的测量结果的分布这一概念. 因此, 作用于波函数空间的一个线性厄米算符, 只要具有构成波函数完备组的本征函数, 就认为它是某个力学量的算符. 一组力学量如果具有构成波函数完备组的共同本征函数, 就称为相容的. 与此等价的说法是它们的算符两两可对易, 现在对两个力学量的情形给出证明. 用记号 $[\widehat{F},\widehat{G}]$ 代表 $(\widehat{F}\widehat{G}-\widehat{G}\widehat{F})$, 称为算符 $\widehat{F}$ 与 $\widehat{G}$ 的对易关系式, 它也是一个线性算符, 当 $[\widehat{F},\widehat{G}]=0$ 时就说 $\widehat{F}$ 与 $\widehat{G}$ 可对易. 如果力学量 F 与 G 具有构成波函数完备组的共同本征函数, 那么它们的算符的对易关系式 $[\widehat{F},\widehat{G}]$ 作用于这个完备组中每个波函数的结果都等于 0, 因此作用于任何波函数时都是如此, 可见 $\widehat{F}$ 与 $\widehat{G}$ 可对易. 反之, 设力学量 F 与 G 的算符 $\widehat{F}$ 与 $\widehat{G}$ 是可对易的, 把 F 的本征函数 Ψ_f(属于本征值 f) 表示为 G 的本征函数的叠加

$$\Psi_f=\sum_{g_0}\Psi_{(f)g_0}+\int\Psi_{(f)g'}\mathrm{d}g',$$

其中 $\Psi_{(f)g_0}$ 及 $\Psi_{(f)g'}$ 代表 G 的本征态, 分别属于分立谱的本征值 g_0 和连续谱的本征值 g', 以 $(\widehat{F}-f)$ 作用于此式两边有

$$\sum_{g_0}(\widehat{F}-f)\Psi_{(f)g_0}+\int\mathrm{d}g'(\widehat{F}-f)\Psi_{(f)g'}=0.$$

由于 $\widehat{F}$ 与 $\widehat{G}$ 可对易, $(\widehat{F}-f)\Psi_{(f)g_0}$ 及 $(\widehat{F}-f)\Psi_{(f)g'}$ 也是 G 的本征函数, 分别属于本征值 g_0 及 g', 因此只当它们都是恒等于零的波函数时才存在线性关系, 可见 $\Psi_{(f)g_0}$ 和 $\Psi_{(f)g'}$ 也是 F 的本征函数 (属于本征值 f). 既然如此, F 的每一个本征态的波函数都可表示为 (F,G) 的共同本征态的波函数的叠加. 由于 F 的全体本征态的波函数是完备的, 所以 (F,G) 的全体共同本征态的波函数也是完备的. 显然以上的证明也适用于多个相容力学量. 我们将把一组相容力学量在一个共同本征态下的值看作一点 (一组实数), 并把这种点的集合称为这组力学量的值谱.

对于一组相容力学量，可以建立关于全组力学量的测量结果的分布的概念. 以两个相容力学量 F 与 G 为例，任意波函数可按它们的共同本征态分解

$$\Psi = \sum_{f_0 g_0} \Psi_{f_0 g_0} + \sum_{f_0} \int \Psi_{f_0 g'} \mathrm{d}g' + \sum_{g_0} \int \Psi_{f' g_0} \mathrm{d}f' + \int \Psi_{f' g'} \mathrm{d}f' \mathrm{d}g' , \tag{30}$$

其中 $\Psi_{f_0 g_0}$, $\Psi_{f_0 g'}$, $\Psi_{f' g_0}$, $\Psi_{f' g'}$ 都代表 F 和 G 的共同本征态，下标中的 f_0 与 g_0 是属于各自的分立谱的本征值，f' 与 g' 是属于各自的连续谱的本征值. (30) 式是与 (16) 式相似的分解公式，它的不同项是互相正交的. 定义这样的力学量 $\delta(f_0, g_0, F, G)$: 在 (F, G) 值为 (f_0, g_0) 的状态下其值为 1，在 (F, G) 的其他共同本征态下其值为零. 于是 $\Psi_{f_0 g_0}$ 和 $(\Psi - \Psi_{f_0 g_0})$ 都代表 $\delta(f_0, g_0, F, G)$ 的本征态，本征值分别是 1 和 0，因此在这两个波函数的和 (即 Ψ) 代表的状态下发现 $\delta(f_0, g_0, F, G)$ 值为 1 的相对概率是 $(\Psi_{f_0 g_0}, \Psi_{f_0 g_0})$，这当然就是在 Ψ 下发现 (F, G) 值为 (f_0, g_0) 的相对概率，即，

$$W_{f_0 g_0}(F, G, \Psi) = (\Psi_{f_0 g_0}, \Psi_{f_0 g_0}) = (\Psi, \Psi_{f_0 g_0}),$$

这又可以看成是原来处在状态 Ψ 的系统被发现处在 $\Psi_{f_0 g_0}$ 的相对概率. 力学量 $\delta(f_0, g_0, F, G)$ 的算符即是如下的 $\widehat{\delta}(f_0, g_0, F, G)$

$$\widehat{\delta}(f_0, g_0, F, G)\Psi = \Psi_{f_0 g_0},$$

故

$$W_{f_0 g_0}(F, G, \Psi) = (\Psi, \widehat{\delta}(f_0, g_0, F, G)\Psi).$$

涉及连续谱的概率公式也可用类似的方法求出. 所以，关于一组相容力学量的测量值的分布的概念与单个力学量的情形是相似的，这正是因为相容力学量具有构成波函数空间完备组的本征函数. 一组不是相容的力学量也可能具有一些共同本征态，但这部

分状态的波函数不足以构成波函数空间的完备组，因此不能建立关于全组力学量测量结果的分布的概念. 相容力学量又称为可同时测量的，一组不是相容的力学量则称为不可同时测量的.

一个系统的一组相容并且互相独立的力学量，如果它们在每一个共同本征态的值都决定了该状态，就称为一组完整力学量. 因此波函数空间的一组互相独立的线性厄米算符，如果具有构成波函数完备组的共同本征函数，而且其中每个本征函数都被相应的本征值决定 (不计任意的常系数)，则它们是一组完整力学量的算符. 显然，一组完整力学量的共同本征态可用相应的本征值来标记，两个不同的共同本征态至少使这组力学量中的一个取不同值，因此是互相正交的. 设 $\{\alpha\}$ 是一组完整力学量，用一个分立指标 n 标记其值谱中的分立点，与一定 n 相应的本征态用波函数 Ψ_n 代表. $\{\alpha\}$ 的值谱可以含有连续区域，这意味着有若干个力学量 (至少有一个) 的值可连续改变. 我们用一个分立指标 m 以及 r 个连续参量 $(\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_r)$ 标记连续谱中的点 (r 的值随 m 而定)，与这种点相应的本征态用波函数 $\Psi_{m\beta_1\beta_2\cdots\beta_r}$ 代表，或简记为 $\Psi_{m\beta}$. 于是全体独立的 $\{\Psi_s, \Psi_{m\beta}\}$ 构成系统的波函数空间的正交完备组，正交性条件如下

$$(\Psi_n, \Psi_{n'}) = 0, \quad \text{当} n \neq n', \tag{31}$$

$$(\Psi_{m\beta}, \Psi_{m'\beta'}) = 0, \quad \text{当} (m, \beta) \neq (m', \beta'), \tag{32}$$

$$(\Psi_n, \Psi_{m\beta}) = 0. \tag{33}$$

任一波函数 Ψ 可以表示为

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n + \sum_m \int a_{m\beta} \Psi_{m\beta} \mathrm{d}\beta, \tag{34}$$

其中 $\mathrm{d}\beta$ 代表 $\mathrm{d}\beta_1 \mathrm{d}\beta_2 \cdots \mathrm{d}\beta_r$. 这是与 (16) 和 (30) 式相似的分解公式，当 Ψ_n 和 $\Psi_{m\beta}$ 的归一常数选定之后，一定的 Ψ 具有唯一确定的系数 $(a_n, a_{m\beta})$. 重复前面的方法即可建立全组力学量取值的分

布的概念，相应的概率公式如下

$$W_n(\alpha,\Psi) = (a_n\Psi_n, a_n\Psi_n) = (\Psi, a_n\Psi_n), \tag{35}$$

$$W_{m\Delta\beta}(\alpha,\Psi) = \left(\Psi, \int_{\Delta\beta} a_{m\beta'}\Psi_{m\beta'}\mathrm{d}\beta'\right), \tag{36}$$

$$\rho_{m\beta}(\alpha,\Psi)\mathrm{d}\beta = (\Psi, a_{m\beta}\Psi_{m\beta})\mathrm{d}\beta, \tag{37}$$

其中，(35) 式代表在 Ψ 下发现 $\{\alpha\}$ 取其值谱中分立点 n 的值的相对概率，(36) 式是发现 $\{\alpha\}$ 取值于由点 (m,β') 形成的一个间隔 $\Delta\beta$ 的相对概率，(37) 式是发现 $\{\alpha\}$ 值处于点 (m,β) 附近一个无限小间隔 $\mathrm{d}\beta$ 的相对概率. (35) 及 (36) 式也可写成

$$W_n(\alpha,\Psi) = (\Psi, \widehat{\delta}(n,\alpha)\Psi), \tag{38}$$

$$W_{m\Delta\beta}(\alpha,\Psi) = (\Psi, \widehat{\delta}(m,\Delta\beta,\alpha)\Psi), \tag{39}$$

其中，$\widehat{\delta}(n,\alpha)$ 和 $\widehat{\delta}(m,\Delta\beta,\alpha)$ 是如下的算符

$$\delta(n,\alpha)\Psi = a_n\Psi_n, \tag{40}$$

$$\widehat{\delta}(m,\Delta\beta,\alpha)\Psi = \int_{\Delta\beta} a_{m\beta'}\Psi_{m\beta'}\mathrm{d}\beta'. \tag{41}$$

按照完整力学量的定义，如果力学量 F 与一组完整力学量 $\{\alpha\}$ 相容，则 F 与 $\{\alpha\}$ 的每一个共同本征态都被 $\{\alpha\}$ 在该状态的值决定，因此 F 的值也被决定了，这表明与一组完整力学量相容的力学量必定是这组力学量的若干个成员的函数. 这可以说成，一组完整力学量构成一个极大相容集. 反过来，构成极大相容集的一组独立力学量必定是完整的，这要求证明，它们的每个共同本征态都被相应的本征值所决定. 假定 $\{\alpha\}$ 是一组构成极大相容集力学量，而它们有两个不同的共同本征态属于同一种本征值 (α')，设这两个态的波函数分别是 $\Psi_{a'}^{(1)}$ 和 $\Psi_{a'}^{(2)}$，它们当然线性无关，可选为互相正交的. 现在定义一个厄米算符 $\widehat{F}$，它使 $\widehat{F}\Psi_{a'}^{(1)}$ 等于 $\Psi_{a'}^{(2)}$，$\widehat{F}\Psi_{a'}^{(2)}$ 等于 $\Psi_{a'}^{(1)}$，而每个与 $\Psi_{a'}^{(1)}$ 及 $\Psi_{a'}^{(2)}$ 都正交的波函

数在 $\widehat{F}$ 作用后都变为零. 显然 $\widehat{F}$ 是某个力学量 F 的算符而又与 $\{\alpha\}$ 的每个算符都可对易，因此与 $\{\alpha\}$ 是相容的，但 $\{\alpha\}$ 是极大相容集，故 F 是 $\{\alpha\}$ 的若干个成员的函数，这表明 $\Psi_{a'}^{(1)}$ 与 $\Psi_{a'}^{(2)}$ 也是 F 的本征函数，从而违反原来的假定，可见 $\{\alpha\}$ 是一组完整力学量.

全部粒子的笛卡儿坐标，或者相应的全部正则动量，是描述系统的空间运动的具有连续谱的完整力学量的范例 (见下节和第三章 §2). 在第三章 §5 举出的 $\{a_j^\dagger a_j\}$ 则可看作描述空间运动的具有分立谱的完整力学量的范例.

§5 坐标作为完整力学量

为了便于书写，我们把系统中全部粒子的笛卡儿坐标写成 $(x_1, x_2, \cdots, x_s)$, 用 $\widehat{x}_j$ 代表第 j 号坐标的算符. 按照 §3 (25) 式有

$$\widehat{x}_j\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_s) = \int x'_j\Psi_{x'_j}(x_1, x_2, \cdots, x_s)\mathrm{d}x'_j, \tag{42}$$

其中 $\Psi_{x'_j}$ 是 $\widehat{x}_j$ 的本征值为 x'_j 的本征态，并由下式给出 Ψ 的分解

$$\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_s) = \int \Psi_{x'_j}(x_1, x_2, \cdots, x_s)\mathrm{d}x'_j,$$

因此， $\Psi_{x'_j}(x_1, x_2, \cdots, x_s) = \Psi(x_1, x_2, \cdots, x_s)\delta(x'_j - x_j)$. 代回 (42) 式得出

$$\widehat{x}_j\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_s) = x_j\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_s), \tag{43}$$

这是确定坐标算符的基本公式，它表明 $\widehat{x}_j$ 作用于任意波函数 $\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_s)$ 时，结果是波函数 $x_j\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_s)$.

$(\widehat{x}_1, \cdots, \widehat{x}_s)$ 当然是互相独立和可对易的线性厄米算符，现在来证明，它们的每一个共同本征态都被相应的本征值决定，而且全体共同本征态的波函数构成完备组. 设 $\Psi_{x'_1x'_2\cdots x'_s}(x_1, \cdots, x_s)$ 代表一个共同本征态， x'_j 是 $\widehat{x}_j$ 的本征值，于是

$$\widehat{x}_j\Psi_{x'_1x'_2\cdots x'_s}(x_1, x_2, \cdots, x_s) = x'_j\Psi_{x'_1x'_2\cdots x'_s}(x_1, x_2, \cdots, x_s),$$

(43) 式表明，此式右边等于 $x_j\Psi_{x'_1x'_2\cdots x'_s}(x_1,x_2,\cdots,x_s)$，因此

$$x_j\Psi_{x'_1x'_2\cdots x'_s}(x_1,x_2,\cdots,x_s)=x'_j\Psi_{x'_1x'_2\cdots x'_s}(x_1,x_2,\cdots,x_s),$$

$$\begin{aligned}&\Psi_{x'_1x'_2\cdots x'_s}(x_1,x_2,\cdots,x_s)\\&\qquad=\int\Psi_{x'_1x'_2\cdots x'_s}(x''_1,x_2,\cdots,x_s)\delta(x''_1-x_1)\mathrm{d}x''_1\\&\qquad=\delta(x'_1-x_1)\int\Psi_{x'_1x'_2\cdots x'_s}(x''_1,x_2,\cdots,x_s)\mathrm{d}x''_1.\end{aligned}$$

对每个坐标都作这样的处理. 最后得到 s 个 δ 函数与一个不依赖于坐标的因子的积，约定这个因子为 1 就得到

$$\Psi_{x'_1x'_2\cdots x'_s}(x_1,x_2,\cdots,x_s)=\prod_j\delta(x'_j-x_j).\tag{44}$$

显然每个这样的波函数都被本征值 $(x'_1,x'_2,\cdots,x'_s)$ 决定，而且当每个 x'_j 都遍及全体实数时，这些波函数构成完备组. 因此全部粒子的笛卡儿坐标构成描述空间运动的一组完整力学量. 只由坐标 (不顾动量) 就构成一组完整力学量，这是波函数的统计诠释和叠加原理导致的一个与经典力学相抵触的重要结果.

当粒子有自旋时，波函数是空间态部分与自旋态部分的积的叠加，可以把全部坐标与描写自旋态的完整力学量合并起来，作为一组完整力学量.

§6 分立谱和连续谱本征函数的归一化. 波函数概念的扩充

考虑到粒子的自旋，用 (ξ) 代表全部粒子的笛卡儿坐标 (q) 以及描写自旋态的指标 (σ), (ξ) 的一种值就是包括坐标自旋的完整力学量的值谱中的一点，$|\Psi(\xi)|^2\mathrm{d}q$ 代表在 Ψ 下发现系统处在 (ξ)

附近一个范围 $\mathrm{d}q$ 内的相对概率. 波函数的内积仍然写成

$$(\Psi_A, \Psi_B) = \int \Psi_A^*(\xi)\Psi_B(\xi)\mathrm{d}\xi\,, \tag{45}$$

其中积分记号包括对于 (q) 的积分以及对于取分立值的 (σ) 的求和.

再设 $\{\alpha\}$ 是系统的任一组完整力学量，沿用以前的记号，用 $\{\Psi_n(\xi), \Psi_{m\beta}(\xi)\}$ 代表这组力学量的全体本征态，(n) 代表其值谱中的分立点，$(m\beta)$ 代表连续区域中的点，(β) 是一组连续参量. 这些波函数构成波函数空间的正交完备组，正交性条件为

$$(\Psi_n, \Psi_{n'}) = 0, \quad \text{当 } n \neq n';$$

$$(\Psi_{m\beta}, \Psi_{m'\beta'}) = 0, \quad \text{当 } (m\beta) \neq (m'\beta');$$

$$(\Psi_n, \Psi_{m\beta}) = 0.$$

$\{\alpha\}$ 的值谱中的分立点能够与周围的点区别开来，因此对任何状态都可以确定发现 $\{\alpha\}$ 取一点的值的相对概率. 被分立点 n 决定的状态还可以说是 $\{\alpha\}$ 取值于点 n 的绝对概率等于 1 的态，这个概率正比于 (Ψ_n, Ψ_n)，所以 Ψ_n 应该可以归一. 连续谱中的点 (m, β) 只是理论上能与周围的点区别开来，实际上不能严格实现由 $\Psi_{m\beta}$ 描述的状态，因此不宜采用 $\{\alpha\}$ 取值于一个单独点 (m, β) 的绝对或相对概率的概念. 如果在每个 m 下都把 (m, β) 的连续参量的区域分割成体积不为零的小块，那么在一个小块 $\Delta\beta_s$ 内经积分而成的波函数 $\int_{\Delta\beta_s} \Psi_{m\beta'}\mathrm{d}\beta'$ 应该像 Ψ_n 那样是可归一的. 即是说，当体元 $\Delta\beta_s$ 有限且不为零时，如下的量也有限而且不为零

$$\int_{\Delta\beta_s}\int_{\Delta\beta_s} (\Psi_{m\beta'}, \Psi_{m\beta''})\mathrm{d}\beta'\mathrm{d}\beta'',$$

这要求 $\int_{\Delta\beta_s}(\Psi_{m\beta'}, \Psi_{m\beta''})\mathrm{d}\beta''$ 保持有限而且不为零，由此以及正交性条件可以看出，适当选择 $\Psi_{m\beta}$ 的常系数，可使 $(\Psi_{m\beta'}, \Psi_{m\beta''})$ 为

$\delta(\beta'-\beta'')$. 这个记号代表关于 $\beta_1,\cdots,\beta_r$ 的 r 个 δ 函数的积. 综上所述，可把 $\{\Psi_n,\Psi_{m\beta}\}$ 的标准正交归一条件规定如下

$$(\Psi_n,\Psi_{n'})=\delta_{nn'}\,, \tag{46}$$

$$(\Psi_{m\beta},\Psi_{m'\beta'})=\delta_{mm'}\delta(\beta-\beta')\,, \tag{47}$$

$$(\Psi_n,\Psi_{m\beta})=0. \tag{48}$$

当 $\Psi_{m\beta}$ 满足条件 (47) 时，$\frac{1}{\sqrt{\Delta\beta_s}}\int_{\Delta\beta_s}\Psi_{m\beta'}\mathrm{d}\beta'$ 是归一波函数. 因此，取 $\delta\beta$ 为点 (m,β) 附近一个无穷小体积元时 (保持体积不为零)，就可以借助如下的可归一波函数 $\Psi_{m\beta,(\delta\beta)}$ 来处理涉及不可归一的 $\Psi_{m\beta}$ 的问题

$$\Psi_{m\beta,(\delta\beta)}=\frac{1}{\sqrt{\delta\beta}}\int_{(\beta,\delta\beta)}\Psi_{m\beta'}\mathrm{d}\beta'. \tag{49}$$

在 (46)—(48) 的正交归一条件之下，波函数的分解公式以及概率公式如下

$$\Psi=\sum_n a_n\Psi_n+\sum_m\int a_{m\beta}\Psi_{m\beta}\mathrm{d}\beta, \tag{50}$$

$$a_n=(\Psi_n,\Psi), \tag{51}$$

$$a_{m\beta}=(\Psi_{m\beta},\Psi), \tag{52}$$

$$W_n(\alpha,\Psi)=a_n^*a_n=(\Psi,\Psi_n)(\Psi_n,\Psi), \tag{53}$$

$$W_{m,\Delta\beta}(\alpha,\Psi)=\int_{\Delta\beta}\rho_{m\beta'}(\alpha,\Psi)\mathrm{d}\beta'=\int_{\Delta\beta}a^*_{m\beta'}a_{m\beta'}\mathrm{d}\beta'\,,$$

或

$$W_{m,\Delta\beta}(\alpha,\Psi)=\int_{\Delta\beta}(\Psi,\Psi_{m\beta'})(\Psi_{m\beta'},\Psi)\mathrm{d}\beta'\,. \tag{54}$$

$$\rho_{m\beta}(\alpha,\Psi)\mathrm{d}\beta=a^*_{m\beta}a_{m\beta}\mathrm{d}\beta=(\Psi,\Psi_{m\beta})(\Psi_{m\beta},\Psi)\mathrm{d}\beta. \tag{55}$$

借助 (49) 式中的归一波函数也可把 (55) 式写成 (53) 式的形式：

$$\rho_{m\beta}(\alpha,\Psi)\mathrm{d}\beta=(\Psi,\Psi_{m\beta,(\mathrm{d}\beta)})(\Psi_{m\beta,(\mathrm{d}\beta)},\Psi). \tag{56}$$

这些量的意义已在前面说明，$W_n(\alpha,\Psi)$ 是在状态 Ψ 下发现 $\{\alpha\}$ 取点 n 的值，亦即发现系统处在 Ψ_n 的相对概率，$\rho_{m\beta}(\alpha,\Psi)\mathrm{d}\beta$ 是发现 $\{\alpha\}$ 值在点 (m,β) 附近一个无穷小间隔 $\mathrm{d}\beta$，或者说发现系统处在状态 $\Psi_{m\beta,(\mathrm{d}\beta)}$ 的相对概率. (50),(51) 及 (52) 式还表明，正交归一和完备的波函数组 $\{\Psi_n,\Psi_{m\beta}\}$ 符合下面的条件

$$\sum_n\Psi_n(\xi)\Psi_n^*(\xi')+\sum_m\int\mathrm{d}\beta\Psi_{m\beta}(\xi)\Psi_{m\beta}^*(\xi')=\delta(\xi-\xi'), \tag{57}$$

其中记号 $\delta(\xi-\xi')$ 代表 $\delta_{\sigma\sigma'}\delta(q-q')$. 反过来，根据这个条件以及波函数组 $\{\Psi_n,\Psi_{m\beta}\}$ 的线性独立性质，可推出其正交归一和完备性.

概率幅 a_n 和 $a_{m\beta}$ 作为 $\{\alpha\}$ 的值谱中的点的函数，称为 Ψ 所代表的状态在 α 表象的波函数 (关于表象的一般概念见第二章). 我们将常把 $\{\Psi_n,\Psi_{m\beta}\}$ 称为 α 表象的基本波函数，由于它们符合标准的正交归一条件，这种表象属于正交表象.

$\Psi(\xi)$ 即是 ξ 表象的波函数，这个表象也是正交的，其基本波函数为

$$\Psi_{\xi'}(\xi)=\delta(\xi-\xi').$$

当各粒子都只有空间自由度时，(ξ) 即是坐标 (q). 以前用 $\Psi(q)$ 代表的即是坐标表象的波函数，这个表象的基本波函数是 $\Psi_{q'}(q)=\delta(q'-q)$, 即是 §5 (44) 式给出的波函数.

参 考 文 献

[1] Dirac P A M. The Principle of Quantum Mechanics (4ed). London: Oxford University Press, 1958.

[2] Landau L D, Lifshitz E M. Quantum Mechanics (3rd, revised edition). Oxford: Pergamon Press, 1977.

第二章　态矢量空间

§1　态矢量空间和它的对偶空间

由一个系统在同一时刻的可能波函数的全体构成的波函数空间，是无穷维并且包含着按 δ 函数归一的元素的 Hilbert 空间. 现在把这个空间看成是抽象的态矢量空间的一个实现，即认为态矢量空间与波函数空间之间存在着保持线性运算和内积的一一对应关系，并以此为依据而用态矢量空间的元素 (态矢量) 来代表状态. 按照 Dirac 的记号，态矢量用右半括号 $|A\rangle$，$|B\rangle$，$|\Psi\rangle$ 等代表，称为 ket 矢量或右矢量. 设 $|\Psi_1\rangle$, 与 $|\Psi_2\rangle$ 分别是对应于波函数 $\Psi_1(\xi)$ 与 $\Psi_2(\xi)$ 的右矢量，则线性组合 $C_1|\Psi_1\rangle + C_2|\Psi_2\rangle$ 对应着波函数 $C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2$，$|\Psi_1\rangle$ 与 $|\Psi_2\rangle$ 的内积就是指 (Ψ_1, Ψ_2), 记为

$$C_1|\Psi_1\rangle + C_2|\Psi_2\rangle \longleftrightarrow C_1\Psi_1(\xi) + C_2\Psi_2(\xi)\,, \tag{1}$$

$$(|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle) = (\Psi_1, \Psi_2)\,, \tag{2}$$

这两个式子规定了态矢量空间中的线性运算和内积定义. 当态矢量乘一个非零复常数后，其波函数也乘以同一复数，因此代表原来的状态. 如果适当选定 $|\Psi\rangle$ 的常系数可使 $(|\Psi\rangle, |\Psi\rangle)$ 的值等于 1, 就说 $|\Psi\rangle$ 是可归一的，$\sqrt{(|\Psi\rangle, |\Psi\rangle)}$ 也称为 $|\Psi\rangle$ 的长度. 对于不能真正归一的态矢量，可以像波函数一样选定标准的正交归一条件.

设 $\{\Psi_\alpha(\xi)\}$ 是一组正交归一和完备的波函数，即

$$(\Psi_\alpha, \Psi_{\alpha'}) = \delta(\alpha, \alpha')\,, \tag{3}$$

$$\sum_\alpha \Psi_\alpha^*(\xi)\Psi_\alpha(\xi') = \delta(\xi - \xi')\,, \tag{4}$$

其中 α 是一组指标的简写，当它含有连续参量时，(4) 式中的求和包含对于连续参量的积分. $\delta(\alpha,\alpha')$ 与 $\delta(\xi-\xi')$ 都代表关于分立指标的 δ 符号和关于连续参量的 δ 函数的积. 任意波函数 $\Psi(\xi)$ 按 $\Psi_\alpha(\xi)$ 分解的公式如下

$$\Psi(\xi)=\sum_\alpha \Psi_\alpha(\xi)(\Psi_\alpha,\Psi)\,. \tag{5}$$

用 $|\Psi_\alpha\rangle$ 和 $|\Psi\rangle$ 分别代表与 $\Psi_\alpha(\xi)$,$\Psi(\xi)$ 相应的右矢量，则由 (1)—(3) 及 (5) 式有

$$(|\Psi_\alpha\rangle,|\Psi_{\alpha'}\rangle)=\delta(\alpha,\alpha')\,, \tag{6}$$

$$|\Psi\rangle=\sum_\alpha |\Psi_\alpha\rangle(|\Psi_\alpha\rangle,|\Psi\rangle)\,, \tag{7}$$

这说明，与一组正交归一和完备的波函数相应的右矢量构成态矢量空间的正交归一完备组.

将一个线性空间的矢量对应于复数的线性映射，称为该空间上的线性型. 一个线性空间上的全体线性型也构成一个线性空间，称为原来空间的对偶空间. 按照 Dirac 的记号，此对偶空间的元素 (即态矢量空间上的线性型) 用左半括号 $\langle\phi_1|,\langle\phi_2|$ 等来代表，并称为 bra 矢量或左矢量. 其次，用 $\langle\phi|\cdot|A\rangle$ 或 $\langle\phi|A\rangle$ 代表右矢量 $|A\rangle$ 在映射 $\langle\phi|$ 下变成的复数，也称为 $\langle\phi|$ 与 $|A\rangle$ 的数量积. 按定义，这个量显然线性依赖于 $|A\rangle$.

借助态矢量空间的内积运算，可以按照如下的条件建立左矢量 $\langle\phi|$ 与右矢量 $|\phi\rangle$ 之间的一一对应关系

$$\langle\phi|A\rangle=(|\phi\rangle,|A\rangle)\,. \tag{8}$$

首先对给定的右矢量 $|\phi\rangle$, 把 $(|\phi\rangle,|A\rangle)$ 看作 $|A\rangle$ 的函数，显然决定一个线性型，将这个线性型看作 $\langle\phi|$, 则 (8) 式成立. 其次对任意给定的左矢量 $\langle\phi|$, 用一组正交归一和完备的 $\{|\Psi_\alpha\rangle\}$ 构成右矢量

$$|\phi\rangle\equiv\sum_\alpha |\Psi_\alpha\rangle\langle\phi|\Psi_\alpha\rangle^*, \tag{9}$$

那么

$$(|\phi\rangle, |A\rangle) = \sum_{\alpha} \langle\phi|\Psi_\alpha\rangle(|\Psi_\alpha\rangle, |A\rangle) = \langle\phi| \cdot \left\{ \sum_{\alpha} |\Psi_\alpha\rangle(|\Psi_\alpha\rangle, |A\rangle) \right\}.$$

由 (7) 式知道上式右边花括号中的右矢量是 $|A\rangle$, 所以按照 (9) 式定义的 $|\phi\rangle$ 满足条件 (8). 为了证明只有一个这样的右矢量，设 $|\phi_1\rangle$ 也满足条件 (8)，于是 $(|\phi_1\rangle - |\phi\rangle, |A\rangle) = 0$, 由于 $|A\rangle$ 是任意右矢量，故 $|\phi_1\rangle - |\phi\rangle = 0$ 即 $|\phi_1\rangle = |\phi\rangle$. 由条件 (8) 刻画的右矢量 $|\phi\rangle$ 与左矢量 $\langle\phi|$ 之间的对应关系称为共轭关系，并用记号 $\overline{|\Psi\rangle}$ 代表 $|\Psi\rangle$ 的共轭，$\overline{\langle\phi|}$ 代表 $\langle\phi|$ 的共轭. 于是

$$\overline{|\Psi\rangle} = \langle\Psi|, \tag{10}$$

$$\overline{\langle\phi|} = |\phi\rangle, \tag{11}$$

$$\overline{\overline{|\Psi\rangle}} = |\Psi\rangle, \tag{12}$$

$$\overline{\overline{\langle\phi|}} = \langle\phi|. \tag{13}$$

根据条件 (8) 可把 $\langle B|A\rangle$ 直接理解为 $|B\rangle$ 与 $|A\rangle$ 的内积，它与 $\langle B| \cdot |A\rangle$, $\overline{|B\rangle} \cdot |A\rangle$, $\overline{|B\rangle} \cdot \overline{\langle A|}$ 是相同的量. 再把复数 a 的共轭 a^* 也记为 $\bar{a}$, 于是共轭运算满足如下的规则

$$\overline{\langle B|A\rangle} = \langle A|B\rangle = \overline{|A\rangle} \cdot \overline{\langle B|}, \tag{14}$$

$$\overline{a|A\rangle} = a^*\langle A| = \overline{|A\rangle} \cdot \bar{a}, \tag{15}$$

$$\overline{a \cdot \langle A|} = a^*|A\rangle = \overline{\langle A|} \cdot \bar{a}. \tag{16}$$

§2 力学量的线性算符

当状态由右矢量代表时，力学量的算符就是作用于态矢量空间的线性算符，即把右矢量对应于右矢量的线性映射. 设 L 是

这样的线性算符，$L|\Psi\rangle$ 代表右矢量 $|\Psi\rangle$ 在映射 L 下变成的右矢量，于是对任意复数 C_1, C_2 和任意右矢量 $|\Psi_1\rangle$,$|\Psi_2\rangle$, 下式都成立

$$L\{C_1|\Psi_1\rangle + C_2|\Psi_2\rangle\} = C_1 L|\Psi_1\rangle + C_2 L|\Psi_2\rangle\,. \tag{17}$$

其次，右矢量 $|\Psi_1\rangle$ 与 $L|\Psi_2\rangle$ 的内积 $\langle\Psi_1|\cdot\{L|\Psi_2\rangle\}$ 线性依赖于 $|\Psi_2\rangle$, 把这个量看作 $|\Psi_2\rangle$ 的函数，就决定一个线性型，它就是使下式对于任意 $|\Psi_2\rangle$ 都成立的左矢量 $\langle\phi_1|$,

$$\langle\phi_1|\Psi_2\rangle = \langle\Psi_1|\cdot\{L|\Psi_2\rangle\}\,. \tag{18}$$

再把 $\langle\phi_1|$ 看作 L 作用于 $\langle\Psi_1|$ 所得出的左矢量，就规定了 L 作为作用于态矢量空间的对偶空间的线性算符的定义. 按照 Dirac 的符号，这个左矢量记为 $\langle\Psi_1|L$ ，故 $\langle\Psi_1|L = \langle\phi_1|$. 即是说，可以把下式看成左矢量 $\langle\Psi_1|L$ 的定义

$$\{\langle\Psi_1|L\}\cdot|\Psi_2\rangle = \langle\Psi_1|\cdot\{L|\Psi_2\rangle\}\,. \tag{19}$$

这样，作用于态矢量空间的线性算符又同时是作用于它的对偶空间的线性算符，其线性性质意味着

$$\{C_1\langle\Psi_1| + C_2\langle\Psi_2|\}L = C_1\langle\Psi_1|L + C_2\langle\Psi_2|L\,. \tag{20}$$

根据 (8) 式和 (19) 式，可以用一个简单的记号 $\langle\Psi_1|L|\Psi_2\rangle$ 代表 $\{\langle\Psi_1|L\}\cdot|\Psi_2\rangle$ 和 $\langle\Psi_1|\cdot\{L|\Psi_2\rangle\}$ ，也即是算符 L 关于 $|\Psi_1\rangle$ 与 $|\Psi_2\rangle$ 的矩阵元，或者称为 L 关于 $\langle\Psi_1|$ 与 $|\Psi_2\rangle$ 的矩阵元.

在第一章已经在波函数空间给出线性算符的厄米共轭的定义，即一个线性算符的厄米共轭关于状态 Ψ_1 与 Ψ_2 的矩阵元等于原来的算符关于 Ψ_2 与 Ψ_1 的矩阵元的复共轭. 对于态矢量空间，线性算符的厄米共轭的定义也是这样，即 L 的厄米共轭关于 $\langle\Psi_1|$ 与 $|\Psi_2\rangle$ 的矩阵元等于 L 关于 $\langle\Psi_2|$ 与 $|\Psi_1\rangle$ 的矩阵元的复共轭：

$$\langle\Psi_1|\overline{L}|\Psi_2\rangle = \overline{\langle\Psi_2|L|\Psi_1\rangle}\,, \tag{21}$$

其中 $\overline{L}$ 代表 L 的厄米共轭，也常记为 $L^\dagger$. 由此可推知

$$\overline{L_1 L_2} = \overline{L_2}\,\overline{L_1}\,, \tag{22}$$

$$\overline{L|\Psi\rangle} = \langle\Psi|\overline{L} = (|\overline{\Psi}\rangle)\overline{L}\,, \tag{23}$$

$$\overline{\langle\Psi|L} = \overline{L}|\Psi\rangle = \overline{L}\,\overline{\langle\Psi|}, \tag{24}$$

$$\overline{\langle\Psi_1|L|\Psi_2\rangle} = \overline{|\Psi_2\rangle}\,\overline{\langle\Psi_1|L} = \overline{L|\Psi_2\rangle}\,\overline{\langle\Psi_1|} = \overline{|\Psi_2\rangle}\,\overline{L}\,\overline{\langle\Psi_1|}\,. \tag{25}$$

在上一章也说明了，线性算符 L 如果与它的厄米共轭相同，就称为厄米的. 厄米算符 L 在态矢量空间及其对偶空间的本征值方程分别为

$$L|\Psi_{L'}\rangle = L'|\Psi_{L'}\rangle\,, \tag{26}$$

$$\langle\Psi_{L'}|L = L'\langle\Psi_{L'}|\,. \tag{27}$$

由右矢量与左矢量构成的并矢 $|A\rangle\langle B|$ 可按如下的规定而看作作用于态矢量空间的线性算符

$$|A\rangle\langle B|\{|\Psi\rangle\} = |A\rangle\langle B|\Psi\rangle\,. \tag{28}$$

当 $|B\rangle$ 不可归一时，算符 $|A\rangle\langle B|$ 当然不能作用于单独的右矢 $|B\rangle$, 但这不造成困难. 实际上不可归一的态矢量总是从属于它的一个连续的邻域，借助于 δ 函数可以把 $|A\rangle\langle B|$ 作用于与 $|B\rangle$ 无限接近的右矢，也可以用无限接近 $|A\rangle\langle B|$ 的算符作用于 $|B\rangle$. 例如，由单粒子坐标本征右矢及其共轭形成的 $|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|$，虽然不能作用于孤立的右矢 $|\boldsymbol{r}\rangle$，但是作用于 $|\boldsymbol{r}'\rangle$ 却有确切的含义

$$|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = |\boldsymbol{r}\rangle\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,.$$

也可以用 $|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}'|$ 作用于任何 $|\boldsymbol{r}''\rangle$. 借助 (19) 式又可把 $|A\rangle\langle B|$ 看作作用于态矢量空间的对偶空间的线性算符，它向左作用于左矢量 $\langle\Psi|$ 时，结果为 $\langle\Psi|A\rangle\langle B|$，记为

$$\{\langle\Psi|\}\cdot|A\rangle\langle B| = \langle\Psi|A\rangle\langle B|\,. \tag{29}$$

根据 (21) 式可证明，$|A\rangle\langle B|$ 的厄米共轭是 $|B\rangle\langle A|$，故

$$\overline{|A\rangle\langle B|} = |B\rangle\langle A| = (\overline{\langle B|})(\overline{|A\rangle}), \tag{30}$$

$$\overline{|A\rangle\langle B|\Psi\rangle} = \langle\Psi|B\rangle\langle A| = \overline{\langle B|\Psi\rangle}\ \overline{|A\rangle} = (\overline{|\Psi\rangle})\overline{|A\rangle\langle B|}, \tag{31}$$

$$\overline{\langle\Psi|A\rangle\langle B|} = |B\rangle\langle A|\Psi\rangle = \overline{\langle B|}(\overline{\langle\Psi|A\rangle}) = \overline{|A\rangle\langle B|}(\overline{\langle\Psi|}). \tag{32}$$

从 (30)—(32) 式以及前面 (14)—(16) 式和 (22)—(25) 式看到，由右矢量，左矢量和线性算符 (包括常数) 构成的积，都遵从 (22) 式中所示的规则.

由于并矢是线性算符，公式 (7) 的右边可看成是 $|\Psi\rangle$ 被算符 $\sum\limits_{\alpha}|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|$ 作用的结果，故

$$|\Psi\rangle = \Big\{\sum_{\alpha}|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|\Big\}|\Psi\rangle, \tag{33}$$

这表明，只要 $\{|\Psi_\alpha\rangle\}$ 是一组完备和符合 (6) 式中的正交归一条件的右矢量，则并矢 $|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|$ 的和是作用于右矢量空间的单位算符，当然也是作用于左矢量空间的单位算符. 即

$$\sum_{\alpha}|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha| = 1, \tag{34}$$

也可以证明，这个条件又是线性独立的 $\{|\Psi_\alpha\rangle\}$ 构成符合 (6) 式的完备组的充分条件. 实际上，把 (34) 式作用于任意 $|\Psi\rangle$ 时得出 (33) 式，这说明满足条件 (34) 的 $\{|\Psi_\alpha\rangle\}$ 构成态矢量空间的完备组. 其次，对于任意一个 $|\Psi_{\alpha'}\rangle$，都有

$$|\Psi_{\alpha'}\rangle = \sum_{\alpha}|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|\Psi_{\alpha'}\rangle.$$

由于 $\{|\Psi_\alpha\rangle\}$ 是线性独立的，这个等式表明

$$\langle\Psi_\alpha|\Psi_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha,\alpha'). \tag{35}$$

利用 (34) 式又可把线性算符 L 表示为

$$L=\sum_{\alpha\alpha'}|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|L|\Psi_{\alpha'}\rangle\langle\Psi_{\alpha'}|$$
$$=\sum_{\alpha\alpha'}|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_{\alpha'}|L_{\alpha\alpha'}\,, \tag{36}$$

其中

$$L_{\alpha\alpha'}=\langle\Psi_\alpha|L|\Psi_{\alpha'}\rangle\,. \tag{37}$$

即是说，任何线性算符都可以表示为并矢 $|\Psi\rangle\langle\Psi_{\alpha'}|$ 的线性组合，而组合系数就是这个算符关于 $\langle\Psi_\alpha|$ 与 $|\Psi_{\alpha'}\rangle$ 的矩阵元. 如果 $|\Psi_\alpha\rangle$ 是 L 的本征右矢，而本征值为 L_α, 则

$$L=L\sum_\alpha|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|=\sum_\alpha|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|L_\alpha\,. \tag{38}$$

当 $\{|\Psi_\alpha\rangle\}$ 是一组完整力学量 $\{\alpha\}$ 的本征右矢时，用第一章的记号写出它们在 ξ 表象的波函数就是 $\{\Psi_n(\xi),\Psi_{n\beta}(\xi)\}$, (33)—(35) 式应写成

$$|\Psi\rangle=\sum_n|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle+\sum_m\int\mathrm{d}\beta|\Psi_{m\beta}\rangle\langle\Psi_{m\beta}|\Psi\rangle\,, \tag{39}$$

$$\sum_n|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|+\sum_m\int\mathrm{d}\beta|\Psi_{m\beta}\rangle\langle\Psi_{m\beta}|=1\,, \tag{40}$$

$$\langle\Psi_n|\Psi_{n'}\rangle=\delta_{nn'}\,, \tag{41a}$$

$$\langle\Psi_{m\beta}|\Psi_{m'\beta'}\rangle=\delta_{mm'}\delta(\beta-\beta')\,, \tag{41b}$$

$$\langle\Psi_n|\Psi_{m\beta}\rangle=0\,, \tag{41c}$$

(41a)—(41c) 式即是第一章的 (46)—(48) 式. (39) 和 (40) 式分别相当于第一章的 (50) 和 (57) 式. 算符 $|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$ 与 $\int_{\Delta\beta}|\Psi_{m\beta'}\rangle\langle\Psi_{m\beta'}|\mathrm{d}\beta'$ 相当于第一章的 (40) 和 (41) 式中的 $\widehat{\delta}(n,\alpha)$ 及 $\widehat{\delta}(m,\Delta\beta,\alpha)$. 这里说 “相当”, 是因为第一章的算符是波函数空间上的线性映射，而现在的算符则是态矢量空间上的线性映射.

§3　表象及表象变换

与通常的线性空间的情形相似，在态矢量空间中选定一种基将右矢量表示成这种基的右矢的线性组合，则一定的组合系数代表一定的右矢量，相应地，一个线性算符可用一个矩阵来代表．像这样将右矢量和线性算符表示为数组的方法，称为采用一定的表象将右矢量和线性算符表示为数组．构成态空间的一种基的右矢量则称为这种基的基本右矢，或称为由这种基形成的表象的基本右矢．基本右矢满足正交归一条件的基称为正交标准基，相应的表象称为正交表象．通常情形都是选取正交表象，但有时采用非正交表象更为方便．不同的表象在理论上是等效的，在处理特定问题时，当然应尽量选取便利的表象．

任何一组完整力学量 $\{\alpha\}$ 的全部独立的共同本征右矢，都可用来构成态矢量空间的一种正交标准基，由此形成的表象称为 α 表象．仍然用 (n) 和 $(m\beta)$ 分别代表 $\{\alpha\}$ 的分立谱和连续谱中的点，设 $\{|\Psi_n\rangle, |\Psi_{m\beta}\rangle\}$ 是 α 表象的基本右矢，它们当然是互相独立的，因此公式 (40) 概括了它们的正交归一和完备性质，由此可直接写出态矢量和算符的展开式．如果把 (n),$(m\beta)$ 写成 (α), 则 (33)—(36) 式就是 α 表象的基本公式，现在重写在下面

$$\sum_{\alpha} |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha| = 1\,,$$

$$\langle\Psi_\alpha|\Psi_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha,\alpha')\,,$$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|\Psi\rangle\,,$$

$$L = \sum_{\alpha\alpha'} |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_{\alpha'}|L_{\alpha\alpha'}\,,$$

$$L_{\alpha\alpha'} = \langle\Psi_\alpha|L|\Psi_{\alpha'}\rangle\,.$$

$|\Psi\rangle$ 按 $|\Psi_\alpha\rangle$ 的展开式中的系数 $\langle\Psi_\alpha|\Psi\rangle$ 给出了 $|\Psi\rangle$ 在 α 表象下的表示，这个量作为 α 的函数就是 $|\Psi\rangle$ 所代表的状态在 α 表象的波函数 (见第一章 §6)，或称为态矢量 $|\Psi\rangle$ 在 α 表象的波函数. 算符 L 按 $|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_{\alpha'}|$ 的展开式的系数 $L_{\alpha\alpha'}$ 给出了 L 在 α 表象下的表示，以 (α,α') 为行列指标的矩阵 $(L_{\alpha\alpha'})$ 称为 L 在 α 表象的矩阵. 态矢量的内积，算符对右矢和左矢的作用，以及算符积可借助 α 表象的波函数和矩阵表示如下：

$$\langle\Psi_A|\Psi_B\rangle=\sum_\alpha\langle\Psi_A|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|\Psi\rangle\,, \tag{42}$$

$$\langle\Psi_\alpha|L|\Psi\rangle=\sum_\alpha\langle\Psi_\alpha|L|\Psi_{\alpha'}\rangle\langle\Psi_{\alpha'}|\Psi\rangle\,, \tag{43}$$

$$\langle\Psi|L|\Psi_\alpha\rangle=\sum_{\alpha'}\langle\Psi|\Psi_{\alpha'}\rangle\langle\Psi_{\alpha'}|L|\Psi_\alpha\rangle\,, \tag{44}$$

$$\langle\Psi_\alpha|RL|\Psi_{\alpha''}\rangle=\sum_{\alpha'}\langle\Psi_\alpha|R|\Psi_{\alpha'}\rangle\langle\Psi_{\alpha'}|L|\Psi_{\alpha''}\rangle\,, \tag{45}$$

这些公式中的每一个求和都相当于引入单位算符 $\sum\limits_\alpha|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|$. (45) 式表明，两个算符的积对应着它们的矩阵按相同次序构成的矩阵积. 如果设想用波函数的值排成的单列阵来代表右矢量，并且把内积也写成矩阵积的形式，则左矢应该用相应的右矢的单列阵的转置复共轭来代表 (因此是单行阵). 在这种理解下，(42)—(45) 式可看作矩阵方程.

表象变换公式也可借助这样的单位算符直接写出. 设 $\{|\phi_\lambda\rangle\}$ 是另一组完整力学量 $\{\lambda\}$ 的共同本征右矢形成的正交标准基，于是

$$\sum_\lambda|\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda|=1\,, \tag{46}$$

$$\langle\phi_\lambda|\phi_{\lambda'}\rangle=\delta(\lambda,\lambda')\,, \tag{47}$$

$$|\Psi\rangle=\sum_\lambda|\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda|\Psi\rangle\,, \tag{48}$$

$$L=\sum_{\lambda\lambda'}|\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda|L|\phi_{\lambda'}\rangle\langle\phi_{\lambda'}|\,. \tag{49}$$

$\langle\phi_\lambda|\Psi\rangle$ 及 $\langle\phi_\lambda|L|\phi_{\lambda'}\rangle$ 分别代表 $|\Psi\rangle$ 和 L 在 λ 表象的波函数和矩阵，它们的表象变换公式如下

$$\langle\phi_\lambda|\Psi\rangle=\sum_\alpha\langle\phi_\lambda|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|\Psi\rangle\,, \tag{50}$$

$$\langle\phi_\lambda|L|\phi_{\lambda'}\rangle=\sum_{\alpha\alpha'}\langle\phi_\lambda|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|L|\Psi_{\alpha'}\rangle\langle\Psi_{\alpha'}|\phi_{\lambda'}\rangle\,, \tag{51}$$

$$\langle\Psi_\alpha|\Psi\rangle=\sum_\lambda\langle\Psi_\alpha|\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda|\Psi\rangle\,, \tag{52}$$

$$\langle\Psi_\alpha|L|\Psi_{\alpha'}\rangle=\sum_{\lambda\lambda'}\langle\Psi_\alpha|\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda|L|\phi_{\lambda'}\rangle\langle\phi_{\lambda'}|\Psi_{\alpha'}\rangle\,. \tag{53}$$

如果知道了 α 表象和 λ 表象的所有基本矢量之间的内积，就可以实现这两种表象之间的变换.

参 考 文 献

[1] Dirac P A M. The Principle of Quantum Mechanics (4ed). London: Oxford University Press, 1958.

第三章　运动方程和量子条件

§1　运 动 方 程

系统在一定时刻的态矢量是对该时刻的状态的完整描述，当然意味着它也决定了在自然发展中到达的其他时刻的状态. 按照叠加原理，态矢量之间的线性关系在时间变化过程中保持不变，因此系统在不受干扰的条件下的运动过程可以用一个线性算符 $T(t,t_0)$ 来描写

$$\Psi(t)=T(t,t_0)\Psi(t_0)\,, \tag{1}$$

其中 $\Psi(t_0)$ 与 $\Psi(t)$ 分别为时刻 t_0 和 t 的态矢量 (以后简单说到态矢量 Ψ 即是指右矢 $|\Psi\rangle$), 算符 $T(t,t_0)$ 与 $\Psi(t_0)$ 无关，与 $T(t_0,t)$ 互逆，并满足

$$T(t,t)=1\,, \tag{2}$$

$$T(t,t_1)T(t_1,t_0)=T(t,t_0)\,, \tag{3}$$

其次为了保证概率守恒，又应满足

$$\big(T(t,t_0)\big)^{\dagger}T(t,t_0)=1\,. \tag{4}$$

由于 $T(t,t_0)$ 有逆，这个条件表明它又是幺正算符，即

$$\big(T(t,t_0)\big)^{\dagger}=\big(T(t,t_0)\big)^{-1}=T(t_0,t)\,. \tag{5}$$

如果用 $K(\xi t,\xi_0 t_0)$ 代表 $T(t,t_0)$ 在 ξ 表象的矩阵元 $\langle\xi|T(t,t_0)|\xi_0\rangle$, 则 (1) 式变为

$$\Psi(\xi,t)=\int K(\xi t,\xi_0 t_0)\Psi(\xi_0,t_0)\mathrm{d}\xi_0\,. \tag{6}$$

函数 $K(\xi t, \xi_0 t_0)$ 就是系统从时刻 t_0 和位形点 (ξ_0) 发展到时刻 t 而被发现处于位形点 (ξ) 一个单位体元的概率幅. 当它为已知函数时，就可以用 (6) 式描写波函数随时间的变化.

根据 (1) 式和 (3) 式可得

$$\frac{\partial \Psi(t')}{\partial t'} = \frac{\partial T(t', t)}{\partial t'} \Psi(t) .$$

令 $t' \to t$ 有

$$\mathrm{i} \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \widehat{M}(t) \Psi(t) , \tag{7}$$

其中

$$\widehat{M}(t) = \mathrm{i} \left[\frac{\partial T(t', t)}{\partial t'} \right]_{t' \to t} , \tag{8}$$

显然 $\widehat{M}(t)$ 是厄米算符

$$\left(\widehat{M}(t) \right)^{\dagger} = \widehat{M}(t) . \tag{9}$$

具有已知算符 $\widehat{M}(t)$ 的方程 (7) 可以当作系统的运动方程 (所谓已知的算符，即是知道它作用于态矢量时如何导致新的态矢量). 值得注意，运动方程是态矢量关于时间的一阶微分方程，这正是由于一定时刻的态矢量代表系统在该时刻的状态，因而也决定了它在该时刻的时间导数. 算符 $\widehat{M}(t)$ 的线性性质和 $T(t, t_0)$ 一样来自叠加原理，它的厄米性则是 $T(t, t_0)$ 的幺正性的必要条件，也是概率守恒的必要和充分条件.

确定一个算符可以有多种方法，通常最为习惯的方法是将它表示为一组能够表达各种力学量的已知基本算符的函数. 前面已经指出，按照经典对应的精神，假定每个力学量的算符作为基本力学量的算符的函数，与经典力学的函数关系相同. 因此，为了确定算符 $\widehat{M}$，首先要弄清楚什么是与 $\widehat{M}$ 对应的经典力学量. 这个问题的答案要由一个基本原理来给出，现在作一引导性说明. 设 $\Psi(t)$ 随时间 t 的变化代表系统的一个可能运动过程. 即是说

$\Psi(t)$ 代表时刻 t 的状态而且随 t 的变化满足由正确的 $\widehat{M}(t)$ 决定的方程 (7). 当 t 改变一个无穷小量 Δ 时，有

$$\Psi(t-\Delta)\approx\Psi(t)+\mathrm{i}\Delta\widehat{M}(t)\Psi(t)\,,$$

$$\langle\Psi(t)|\Psi(t-\Delta)\rangle\approx\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle + \mathrm{i}\Delta\langle\Psi(t)\widehat{M}(t)|\Psi(t)\rangle+\cdots\,.$$

如果系统具有时间平移不变性 (即: 只要态矢量 $\Psi(t)$ 满足方程 (7)，则 $\Psi(t)\equiv\Psi(t-\Delta)$ 也满足)，那么此式右边也与 t 无关，从而 $\langle\Psi(t)|\widehat{M}(t)|\Psi(t)\rangle$ 与时间无关，即 $\widehat{M}$ 是一个守恒量的算符 (所谓守恒量，是指它的平均值与时间无关). 由于 $T(t,t_0)$ 是相乘性算符，因此 $\widehat{M}$ 是相加性的，而经典力学的一个相加性物理量，如果只要系统具有时间平移不变性就是守恒量，则它必定是哈密顿量 (不计常数因子)，可见与 $\widehat{M}$ 对应的经典量在表示为正则变量的函数时，应正比于哈密顿量.

在量子力学中，正是一般地假定，$\widehat{M}$ 是哈密顿量算符 $\widehat{H}$ 与一个常数因子的积，用 $\hbar$ 代表这个因子，则运动方程如下

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t)=\widehat{H}(t)\Psi(t)\,,\tag{10}$$

其中 $\hbar$ 要根据理论与实验结果的比较来确定 (见下节)，这种形式的运动方程称为薛定谔绘景的运动方程或薛定谔方程. 所谓薛定谔绘景，意思是用波函数或态矢量随时间的变化表达系统的运动过程，在 §9 还将谈到其他绘景. 实际上一种量子理论总是由经典理论转变或者说是量子化而成的，通常形式的量子化的第一个步骤是借助经典理论求出哈密顿量和其他重要力学量的表达式，把它们表示为一组正则变量的函数. 第二个步骤是确定这些正则变量的算符，从而确定各种力学量的算符，并借助哈密顿量算符建立运动方程. 像这样借助正则变量的算符实现从经典理论到量子理论的转变的方法称为正则量子化. 正则变量的算符满足

一组称为量子条件的关系式，它们代表量子力学的另一个基本原理，不过可以指出，建立量子条件所依据的原则是保证能够从量子力学的运动方程推导出与经典运动方程类似的关系式，特别是基本正则变量的算符的运动方程应当与相应的经典正则方程的形式一致.

正则量子化当然也可以借助其他合理的变量来实现，为此要确定 H 的表达式，把它以及其他力学量表示为一组基本变量的函数，同时给出关于这组基本变量的量子条件，以保证可以从薛定谔方程推导出与经典运动方程类似的关系式. 就这种较广泛的观点而言，无论是对粒子系统还是玻色场和费米场的情形，量子化的方法是相同的. 不过牛顿力学中的正则变量或者其他基本变量只是描写粒子的空间运动，而相应的量子理论却需要考虑自旋自由度，因此要根据实验资料直接确定自旋算符和哈密顿量中依赖于自旋的成分，同时根据自旋值来确定粒子遵从玻色统计或费米统计. 在场论的情形 (基本变量是场函数)，则能够在经典理论中顾及各种自由度，并且量子条件本身就包含着统计法 (参看第五章).

实现量子化的另一种重要方法，是所谓路径积分方法. 对于粒子系统，这就是通过对位形空间或相空间中的路径积分来决定 (6) 式中的函数 $K(\xi t, \xi_0 t_0)$. 对于场的情形，只是要把 (ξ) 换成场的位形坐标，由位形空间或相空间中的路径积分决定态矢量的时间变化的方法仍然和粒子的情形相同. 在第十章将讲述这种方法.

§2 在笛卡儿坐标下的动量算符和量子条件

笛卡儿坐标是非相对论量子力学中最基本的坐标，现在来确定这种坐标的正则动量的算符. 首先说明一下态矢量的空间平移的概念，这可从对应的经典观念来理解. 设有一个质点在无穷短的时间 Δt 内从点 r 移动到点 $r + \Delta r$，再设想这个运动过程经受

一个空间平移，而平移的距离是 $\boldsymbol{\delta}$，于是被平移后的运动过程变成从点 $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}$ 经过 Δt 时间到达点 $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}+\Delta\boldsymbol{r}$. 这两个过程的位移相同，因此平均速度也相同，令 $\Delta t\to 0$ 即可看出两个过程的起始状态有相同的动量，所以质点的状态 $(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 在空间平移 $\boldsymbol{\delta}$ 时变为 $(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta},\boldsymbol{p})$. 由此可给出量子力学中的空间平移概念的含义，即态矢量 $|\Psi\rangle$ 在空间平移 $\boldsymbol{\delta}$ 时变为符合如下条件的态矢量 $|\Psi^{\delta}\rangle$

$$\langle\Psi^{\delta}|\Psi^{\delta}\rangle=\langle\Psi|\Psi\rangle\,, \tag{11}$$

$$\langle\Psi^{\delta}|\hat{\boldsymbol{r}}_k|\Psi^{\delta}\rangle=\langle\Psi|\hat{\boldsymbol{r}}_k+\boldsymbol{\delta}|\Psi\rangle\,, \tag{12}$$

$$\langle\Psi^{\delta}|\hat{\boldsymbol{p}}_k|\Psi^{\delta}\rangle=\langle\Psi|\hat{\boldsymbol{p}}_k|\Psi\rangle\,, \tag{13}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{r}}_k$ 及 $\hat{\boldsymbol{p}}_k$ 分别为第 k 号粒子的坐标和正则动量的算符. 可以规定当 $\boldsymbol{\delta}=0$ 时 $|\Psi^{\delta}\rangle$ 即是 $|\Psi\rangle$，还可以证明 (见第五章)，$|\Psi^{\delta}\rangle$ 与 $|\Psi\rangle$ 可用幺正变换联系起来，即存在如下的算符 $U(\boldsymbol{\delta})$(称为空间平移算符)

$$|\Psi^{\delta}\rangle=U(\boldsymbol{\delta})|\Psi\rangle\,, \tag{14}$$

$$U(\boldsymbol{\delta})^{\dagger}U(\boldsymbol{\delta})=U(\boldsymbol{\delta})U(\boldsymbol{\delta})^{\dagger}=1\,, \tag{15}$$

$$U(0)=1\,, \tag{16}$$

条件 (11) 已包含于 (15) 式，而 (12)—(15) 式给出

$$U(\boldsymbol{\delta})^{\dagger}\hat{\boldsymbol{r}}_kU(\boldsymbol{\delta})=\hat{\boldsymbol{r}}_k+\boldsymbol{\delta}\,, \tag{17}$$

$$U(\boldsymbol{\delta})^{\dagger}\hat{\boldsymbol{p}}_kU(\boldsymbol{\delta})=\hat{\boldsymbol{p}}_k\,. \tag{18}$$

如果算符 $U_1(\boldsymbol{\delta})$ 和 $U_2(\boldsymbol{\delta})$ 都满足 (15)—(18) 式，则 $U_1(\boldsymbol{\delta})\cdot U_2(\boldsymbol{\delta})^{-1}$ 与每个 $\hat{\boldsymbol{r}}_k$ 及 $\hat{\boldsymbol{p}}_k$ 都可互相对易，而自旋本来不受空间平移的影响，所以 $U_1(\boldsymbol{\delta})U(\boldsymbol{\delta})^{-1}$ 与任何力学量的算符都可互相对易，因而是一个常数. 再由 (15) 式可看出，这个常数的模是 1. 即是说，根据 (15)—(18) 式可在一个任意相因子的限度内决定算符 $U(\boldsymbol{\delta})$. 为了引入补充的规定，选取一种特定的基，其基本右矢 $|\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\cdots(\sigma)\rangle$

是由坐标和自旋算符组成的完整力学量的共同本征右矢，可简记为 $|\xi\rangle$. 于是由 (17) 式有

$$\hat{r}_k U(\delta)|r_1 r_2 \cdots (\sigma)\rangle = (r_k + \delta) U(\delta)|r_1 r_2 \cdots (\sigma)\rangle ,$$

$U(\delta)$ 与自旋算符可互相对易，故 $U(\delta)|r_1 r_2 \cdots (\sigma)\rangle$ 与 $|r_1+\delta, r_2+\delta_1, \cdots (\sigma)\rangle$ 代表相同的状态，可选择 $U(\delta)$ 的相因子，使

$$U(\delta)|r_1 r_2 \cdots (\sigma)\rangle = |r_1 + \delta, r_2 + \delta, \cdots (\sigma)\rangle. \tag{19}$$

现在借助空间平移来寻找动量算符. 假定 $\Psi(t)$ 随时间的变化代表系统的一种可能的运动过程，设想这个过程中每一时刻的态矢量都经受同一空间平移 $U(\delta)$, 当平移参量 δ 为无穷小时有

$$U(\delta)|\Psi(t)\rangle \approx |\Psi(t)\rangle + \delta \cdot \left(\frac{\partial U(\delta)}{\partial \delta}\right)_0 |\Psi(t)\rangle,$$

$$\langle \Psi(t)|U(\delta)|\Psi(t)\rangle \approx \langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle + \delta \cdot \langle \Psi(t)|\left(\frac{\partial U(\delta)}{\partial \delta}\right)_0 |\Psi(t)\rangle.$$

由此看出，如果系统是空间平移不变的 (意思是只要 $|\Psi(t)\rangle$ 代表系统的可能运动过程，$U(\delta)|\Psi(t)\rangle$ 也代表可能的运动过程)，则厄米算符 $-\mathrm{i}(\partial U(\delta)/\partial\delta)_0$ 是一个守恒量的算符. 一个相加性的 (U 是相乘性的) 而且只要系统具有空间平移不变性就保持守恒的量，应当是系统的总动量 (不计常数因子)，可见 $-\mathrm{i}(\partial U(\delta)/\partial\delta)_0$ 正比于总动量算符 $\hat{P}$. 即

$$\hat{P} = \mathrm{i}C\left(\frac{\partial U(\delta)}{\partial \delta}\right)_0 .$$

后面即将指出，常数 C 应该是出现在运动方程中的 $\hbar$. 故

$$\hat{p}|r_1 r_2 \cdots (\sigma)\rangle = \mathrm{i}\hbar \sum_k \nabla_k |r_1 r_2 \cdots (\sigma)\rangle .$$

用 $\widehat{\boldsymbol{p}}_k$ 代表第 k 号粒子的动量算符，则

$$\widehat{\boldsymbol{p}}_k|\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\cdots(\sigma)\rangle = \mathrm{i}\hbar\nabla_k|\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\cdots(\sigma)\rangle,$$

$$\langle\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\cdots(\sigma)|\widehat{\boldsymbol{p}}_k|\Psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\nabla_k\Psi(\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\cdots(\sigma)). \tag{20}$$

(20) 式是借助坐标表象表达动量算符的基本公式. 即是说，算符 $\widehat{\boldsymbol{p}}_k$ 的作用于波函数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\cdots(\sigma))$ 的微分算子是 $(-\mathrm{i}\hbar\nabla_k)$. 用动量算符和平移参量表示出空间平移算符 $U(\delta)$，就有

$$U(\boldsymbol{\delta}) = \exp\left\{-\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{\delta}}{\hbar}\cdot\sum_k\widehat{\boldsymbol{p}}_k\right\}. \tag{21}$$

用 $(x_1, x_2, \cdots, x_s)$ 和 $(p_1, p_2, \cdots, p_s)$ 代表全部笛卡儿坐标和相应的正则动量，$(\widehat{x}_1, \widehat{x}_2, \cdots, \widehat{x}_s)$ 和 $(\widehat{p}_1, \cdots, \widehat{p}_s)$ 代表它们的算符，则 (20) 式变为

$$\langle x_1x_2\cdots x_s(\sigma)|\widehat{p}_j|\Psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\Psi(x_1, x_2, \cdots, (\sigma)). \tag{22}$$

对于坐标算符 (见第一章 (43) 式) 有

$$\langle x_1x_2\cdots x_s(\sigma)|\widehat{x}_j|\Psi\rangle = x_j\Psi(x_1, x_2, \cdots, (\sigma)). \tag{23}$$

由此可求出坐标动量算符满足的量子条件，这就是

$$\widehat{x}_j^\dagger = \widehat{x}_j, \quad \widehat{p}_j^\dagger = \widehat{p}_j, \tag{24}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{x}_j = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{p}_j = 0, \tag{25}$$

$$[\widehat{x}_j, \widehat{x}_k] = [\widehat{p}_j, \widehat{p}_k] = 0,$$

$$[\widehat{x}_i, \widehat{p}_k] = \mathrm{i}\hbar\delta_{jk}, \tag{26}$$

$\widehat{x}_j$ 是已知的算符，所以由量子条件可在不计一个保持 $\widehat{x}_j$ 不变的幺正变换的限度内确定动量算符.

如果上面的常数 C 暂不选定，则 (26) 式要求它是实数，而且由 (24)—(26) 式以及方程 (10) 可求得

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\widehat{x}_j|\Psi(t)\rangle = \left(\dfrac{C}{\hbar}\right)\langle\Psi(t)|\dfrac{\partial\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p},t)}{\partial\widehat{p}_j}|\Psi(t)\rangle, \\ \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\widehat{p}_j|\Psi(t)\rangle = -\left(\dfrac{C}{\hbar}\right)\langle\Psi(t)|\dfrac{\partial\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p},t)}{\partial\widehat{x}_j}|\Psi(t)\rangle, \end{cases} \tag{27}$$

其中 $\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p},t)$ 是系统的哈密顿量算符. 算符微商的含义与通常的函数微商相似，即当 $\widehat{x}_j$ 及 $\widehat{p}_j$ 分别加上一个无穷小实数 δx_j 及 δp_j 时，$\widehat{H}$ 的一级改变为

$$\delta\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p},t) \approx \sum_j \delta x_j \frac{\partial\widehat{H}}{\partial\widehat{x}_j} + \sum_j \delta p_j \frac{\partial\widehat{H}}{\partial\widehat{p}_j},$$

所以，必须令 $C=\hbar$ 才能使关系式 (27) 与经典运动方程类似 (这里也说明了上节所说的类似性的确切含义). 从这个对比也看出，按照 (20)(即 (22)) 式确定的算符 $\widehat{p}_j$ 是正则动量的算符，只有当没有磁场存在时它才代表普通的动量.

以上的讨论基于笛卡儿坐标的直接含义以及 (27) 式和经典运动方程的类似性，后面还将根据这种类似性来引导出一般情形的量子条件. 不过要再强调一下，量子条件是量子力学的基本原理之一，(24)—(26) 式是这一原理在笛卡儿坐标下的形式. 由于算符 $(\widehat{x}_j,\widehat{p}_k)$ 与时间无关，一切表达为它们的函数的算符只要不显含时间就是与时间无关的，系统的运动过程完全表现为波函数或态矢量随时间的变化. 前面已经指出，像这样来描述运动过程的方式称为薛定谔绘景，薛定谔方程即是薛定谔绘景的运动方程，(24)—(26) 式即薛定谔绘景的量子条件.

坐标表象的单粒子动量的本征值方程如下

$$-\mathrm{i}\hbar\nabla\Psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{p}\Psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}), \tag{28}$$

因此

$$\Psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}, \tag{29}$$

其中 $\boldsymbol{p}$ 是动量本征值，它的三个分量都可以取任何实数，(29) 式中的常系数是按照下式选取的

$$\int \Psi^*_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\Psi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}').$$

德布罗意最初提出粒子的波动性观念时 (1923 年)，就假定动量为 $\boldsymbol{p}$ 的粒子的物质波以 (29) 式的 $\Psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ 为空间因子，其中 $\hbar$ 是约化普朗克常数 ($\hbar = h/2\pi$). 虽然在量子力学中不再采用早期的物质波观念，但是关于粒子的动量与波矢的德布罗意关系 (即波矢 $= \boldsymbol{p}/\hbar$) 是与实验事实相符的，所以出现在量子条件和运动方程中的 $\hbar$ 就选定为约化普朗克常数.

从 (29) 式可看出，一个粒子的动量本征态的波函数构成空间运动波函数的完备组，而且每个动量本征态的波函数都被动量值决定，所以三个动量分量构成空间运动的完整力学量. 同样，动量的一个分量是一维运动的完整力学量. 既然 $\widehat{p}_1, \widehat{p}_2, \cdots, \widehat{p}_s$ 是一组互相独立和可对易的算符，而且每一个都代表一维运动的完整力学量，全部动量就构成整个系统的空间运动的一组完整力学量，它们的共同本征态的波函数为

$$\Psi_{p_1p_2\cdots p_s}(x_1, x_2, \cdots, x_s) = \prod_{j=1}^{s} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}p_jx_j/\hbar}. \tag{30}$$

由于 p_j 的值谱也是连续的，当用动量表象的波函数描述状态时，坐标的算符可以表示为波函数空间上的微分算子. 设 $|p_1p_2\cdots(\sigma)\rangle$ 是动量表象的基本右矢，也即是由动量和自旋构成的一组完整力学量的共同本征右矢，于是

$$\widehat{p}_j|p_1p_2\cdots(\sigma)\rangle = p_j|p_1p_2\cdots(\sigma)\rangle,$$

$$\langle p_1 p_2 \cdots (\sigma) | p_1' p_2' \cdots (\sigma') \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(p_1 - p_1') \cdots \delta(p_s - p_s'),$$

$$\sum_{\sigma} \int \mathrm{d}p_1 \mathrm{d}p_2 \cdots \mathrm{d}p_s |p_1 p_2 \cdots (\sigma)\rangle\langle p_1 p_2 \cdots (\sigma)| = 1.$$

用 $\Psi(p_1, p_2, \cdots, (\sigma))$ 代表态矢量 $|\Psi\rangle$ 在动量表象的波函数，它即是 $\langle p_1 p_2 \cdots (\sigma)|\Psi\rangle$，注意

$$\langle p_1 p_2 \cdots (\sigma) | \widehat{x}_j | x_1 x_2 \cdots (\sigma)' \rangle = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \langle p_1 p_2 \cdots (\sigma) || x_1 x_2 \cdots (\sigma)' \rangle,$$

可见借助动量表象表达坐标和动量算符的基本公式如下：

$$\langle p_1 p_2 \cdots (\sigma) | \widehat{x}_j | \Psi \rangle = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \Psi(p_1, p_2, \cdots, (\sigma)), \tag{31}$$

$$\langle p_1 p_2 \cdots (\sigma) | \widehat{p}_j | \Psi \rangle = p_j \Psi(p_1, p_2, \cdots, (\sigma)), \tag{32}$$

由 (31) 式看到，$\widehat{x}_j$ 的作用于动量表象波函数的微分算子是 $\mathrm{i}\hbar\partial/\partial p_j$. (22) 及 (31) 式也意味着：

$$\langle x_1 x_2 \cdots (\sigma) | \widehat{p}_j = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle x_1 x_2 \cdots (\sigma)|,$$

$$\langle p_1 p_2 \cdots (\sigma) | \widehat{x}_j = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \langle p_1 p_2 \cdots (\sigma)|,$$

$$\widehat{p}_j |x_1 x_2 \cdots (\sigma)\rangle = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} |x_1 x_2 \cdots (\sigma)\rangle, \tag{22'}$$

$$\widehat{x}_j |p_1 p_2 \cdots (\sigma)\rangle = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} |p_1 p_2 \cdots (\sigma)\rangle. \tag{31'}$$

§3 角动量、自旋和哈密顿量算符

3.1 角动量算符，自旋算符和转动算符

借助粒子的坐标算符和动量算符，可以确定空间运动的角动量算符，也称为轨道角动量算符，对于单个粒子，有

$$\widehat{\boldsymbol{l}} = \widehat{\boldsymbol{r}} \times \widehat{\boldsymbol{p}} = -\widehat{\boldsymbol{p}} \times \widehat{\boldsymbol{r}}, \tag{33}$$

这是形式上的写法，实际上是指角动量的三个分量具有如下的表达式

$$\left.\begin{aligned}\hat{l}_x &= \widehat{yp}_z - \widehat{zp}_y\,,\\ \hat{l}_y &= \widehat{zp}_x - \widehat{xp}_z\,,\\ \hat{l}_z &= \widehat{xp}_y - \widehat{yp}_x\,,\end{aligned}\right\} \tag{34}$$

在右边每项中的两个因子都是可对易的，因此可按任意次序排列，正是因为这样，公式 (33) 中的两种写法才没有区别. 根据坐标动量的量子条件直接验证可知

$$\hat{l}_z^{\dagger} = \hat{l}_z, \quad \hat{l}_y^{\dagger} = \hat{l}_y, \quad \hat{l}_x^{\dagger} = \hat{l}_x, \tag{35}$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = \mathrm{i}\hbar\hat{l}_z, \quad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = \mathrm{i}\hbar\hat{l}_x, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = \mathrm{i}\hbar\hat{l}_y, \tag{36}$$

系统的总轨道角动量算符是各粒子的轨道角动量之和

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \sum_k \hat{\boldsymbol{l}}_k, \tag{37}$$

它的三个分量也满足 (35) 及 (36) 式. 已经指出，算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 只是在没有磁场时才代表通常的动量，这里的角动量算符也是在这种情形下才代表通常的角动量. 根据角动量算符的厄米性和对易关系式可以证明，它的每个分量的允许值都只能是 $\hbar$ 的整数倍或半整数倍 (见第六章)，但是对于轨道角动量来说只能是整数倍 (见本章 §5)，这样也保证空间运动的波函数是粒子位置的单值函数.

实验表明，自旋是内禀角动量，当粒子具有自旋时，系统的总角动量是总轨道角动量与总自旋之和. 自旋算符是空间平移不变的，在空间转动、反射及时间反演下的行为可仿照轨道角动量的性质来确定，而且它决定了自旋态的转动性质. 实际上每一类角动量都决定相应的自由度的转动算符，关于这一点，在弄清楚转动算符与总角动量的关系之后就会明白.

为了说明态矢量的空间转动的概念，也可以从相应的经典概念出发. 设有一个作经典运动的质点在无穷短的时间 Δt 内从点

$\boldsymbol{r}$ 移动到 $\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r}$, 并设想这个运动过程经受一个空间转动，假定转动轴 $\boldsymbol{n}$ 通过坐标原点，转动角为 θ, 转动的结果使矢径为 $\boldsymbol{r}$ 的点落到 $\boldsymbol{r}'$ 的位置，于是

$$\boldsymbol{r}' = g(\boldsymbol{n},\theta)\boldsymbol{r}\,,$$

即

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = g(\boldsymbol{n},\theta)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \tag{38}$$

其中 $g(\boldsymbol{n},\theta)$ 代表转动，我们将把它等同于一个 3×3 的幺模实正交矩阵. 显然，转动后的运动过程是从点 $g\boldsymbol{r}$ 经过 Δt 时间到达点 $(g\boldsymbol{r}+g\Delta\boldsymbol{r})$，这个过程与原过程的矢径和平均速度都相差转动 g. 令 Δt 趋于 0 就可以看出，两个过程的初始矢径和动量都是相差转动 g. 所以，质点的状态 $(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 在空间转动 g 时变为 $(g\boldsymbol{r},g\boldsymbol{p})$. 相应地，量子力学的态矢量 $|\Psi\rangle$ 在空间转动 g 时变为符合如下条件的态矢量 $|\Psi^g\rangle$

$$\langle\Psi^g|\Psi^g\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle, \tag{39}$$

$$\langle\Psi^g|\hat{\boldsymbol{r}}_k|\Psi^g\rangle = \langle\Psi|g\hat{\boldsymbol{r}}_k|\Psi\rangle, \tag{40}$$

$$\langle\Psi^g|\hat{\boldsymbol{p}}_k|\Psi^g\rangle = \langle\Psi|g\hat{\boldsymbol{p}}_k|\Psi\rangle. \tag{41}$$

再设 $\hat{\boldsymbol{s}}_k$ 是第 k 号粒子的自旋算符，它与空间自由度的每个算符都是可对易的，而且在空间转动下的性质应该与轨道角动量相同. 注意

$$\begin{aligned}\langle\Psi^g|\hat{\boldsymbol{r}}_k\times\hat{\boldsymbol{p}}_k|\Psi^g\rangle &= \langle\Psi|(g\hat{\boldsymbol{r}}_k)\times(g\hat{\boldsymbol{p}}_k)|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|g(\hat{\boldsymbol{r}}_k\times\hat{\boldsymbol{p}}_k)|\Psi\rangle,\end{aligned}$$

应要求

$$\langle\Psi^g|\hat{\boldsymbol{s}}_k|\Psi^g\rangle = \langle\Psi|g\hat{\boldsymbol{s}}_k|\Psi\rangle. \tag{42}$$

与空间平移的情形相似，可以规定当转角 $\theta=0$ 时，$|\Psi^g\rangle$ 就是 $|\Psi\rangle$. 而且也可以证明 (参看第五章)，$|\Psi^g\rangle$ 与 $|\Psi\rangle$ 可用幺正变换联系起来，即存在如下的算符 $D(g)$(称为空间转动算符)

$$|\Psi^g\rangle = D(g)|\Psi\rangle, \tag{43}$$

$$D(g(\boldsymbol{n},0)) = 1, \tag{44}$$

$$D(g)^\dagger D(g) = D(g)D(g)^\dagger = 1, \tag{45}$$

$$D(g)^\dagger \hat{\boldsymbol{r}}_k D(g) = g\hat{\boldsymbol{r}}_k, \tag{46}$$

$$D(g)^\dagger \hat{\boldsymbol{p}}_k D(g) = g\hat{\boldsymbol{p}}_k, \tag{47}$$

$$D(g)^\dagger \hat{\boldsymbol{s}}_k D(g) = g\hat{\boldsymbol{s}}_k. \tag{48}$$

如果算符 $D_1(g)$ 与 $D_2(g)$ 都满足 (43) — (48) 式，则 $D_1(g)D_2(g)^{-1}$ 与任何力学量的算符都可对易，因此它只能是一个模为 1 的常数，可见 (43) — (48) 式已在一个相因子的限度内决定了算符 $D(g)$. 由此又可知，$D(g_1g_2)$ 与 $D(g_1)D(g_2)$ 只能有相因子的差别，因此可再补充一个条件

$$D(g_1g_2) = D(g_1)D(g_2). \tag{49}$$

现在从空间转动来研究角动量算符的性质. 假定 $|\Psi(t)\rangle$ 随时间的变化代表系统的一种可能的运动过程，设想这个过程中各时刻的态经受同一个空间转动，当转角 θ 趋于 0 时有

$$D(g)|\Psi(t)\rangle \approx |\Psi(t)\rangle + \theta\Big(\frac{\partial D(\boldsymbol{n},\theta')}{\partial\theta'}\Big)_0|\Psi(t)\rangle, \tag{50}$$

$$\langle\Psi(t)|D(g)|\Psi(t)\rangle \approx \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle + \theta\langle\Psi(t)|\Big(\frac{\partial D(\boldsymbol{n},\theta')}{\partial\theta'}\Big)_0|\Psi(t)\rangle.$$

由此看出，如果系统对于空间绕 $\boldsymbol{n}$ 轴的转动是不变的 (即是只要 $|\Psi(t)\rangle$ 代表系统的可能运动过程，则 $D(\boldsymbol{n},\theta)|\Psi(t)\rangle$ 也代表可能的运动过程)，则厄米算符 $-\mathrm{i}(\partial D(\boldsymbol{n},\theta)/\partial\theta)_0$ 代表守恒量. 这个相加

性的而且只要系统在空间绕 $\boldsymbol{n}$ 转动下不变就保持守恒的量，应当是系统的总角动量沿 $\boldsymbol{n}$ 的投影 (不计常因子), 故

$$\left(\frac{\partial D(\boldsymbol{n},\theta')}{\partial\theta'}\right)_0 = \mathrm{i}\alpha\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}, \tag{51}$$

其中 α 是实常数，$\hat{\boldsymbol{J}}$ 是总角动量算符，即

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}}, \tag{52}$$

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \sum_k \hat{\boldsymbol{s}}_k\,. \tag{53}$$

在 (46) 式两边对 θ 求微商，由 (51) 式得出

$$(-\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}})\hat{\boldsymbol{r}}_k + \hat{\boldsymbol{r}}_k(\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}) = \left(\frac{\partial g(\boldsymbol{n},\theta)}{\partial\theta'}\right)_0\hat{\boldsymbol{r}}_k,$$

即

$$\mathrm{i}\alpha[\hat{\boldsymbol{r}}_k, \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}_k] = \left(\frac{\partial g(\boldsymbol{n},\theta)}{\partial\theta'}\right)_0\hat{\boldsymbol{r}}_k,$$

取 $\boldsymbol{n}$ 沿坐标轴的方向，根据 (34) 式直接计算得出

$$\alpha = -\frac{1}{\hbar}. \tag{54}$$

再对 (48) 式求 $\theta = 0$ 处的微商，即可求得自旋算符的对易关系，结果与轨道角动量算符满足的对易关系相同，因此 (35) 与 (36) 式也适用于自旋算符，即

$$\hat{S}_x^\dagger = \hat{S}_x, \quad \hat{S}_y^\dagger = \hat{S}_y, \quad \hat{S}_z^\dagger = \hat{S}_z, \tag{55}$$

$$\left.\begin{aligned}
[\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= \mathrm{i}\hbar\hat{S}_z\,,\\
[\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= \mathrm{i}\hbar\hat{S}_x\,,\\
[\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= \mathrm{i}\hbar\hat{S}_y\,.
\end{aligned}\right\} \tag{56}$$

这也适用于系统的总角动量或单个粒子的角动量.

根据 (44),(49),(51) 及 (54) 式，转动算符可写成

$$D(\boldsymbol{n},\theta)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar}. \tag{57}$$

各种不同自由度的转动算符当然互相可对易，因此 $D(\boldsymbol{n},\theta)$ 可以看作空间因子与自旋因子之积，或者看作系统中各个粒子的转动算符之积. 所以无论是轨道角动量或自旋，也无论是单粒子或多粒子角动量，其最基本的特点就是通过转动算符决定态矢量中相应因子的空间转动.

最后，我们特别给出自旋为 1/2 的粒子的自旋态和自旋算符的表示. 所谓粒子的自旋是 1/2，即是每个自旋投影都只取 $\pm\hbar/2$ 的值，电子、中子和质子等就是这种粒子. 由于 $\hat{s}_x^2,\hat{s}_y^2,\hat{s}_z^2$ 都等于 $\hbar^2/4$，故

$$\hat{s}_x^2+\hat{s}_y^2+\hat{s}_z^2=\frac{3}{4}\hbar^2. \tag{58}$$

令 $\boldsymbol{\sigma}\equiv 2\hat{\boldsymbol{s}}/\hbar$, 则

$$\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=1\,, \tag{59}$$

$$\sigma_x^\dagger=\sigma_x,\quad \sigma_y^\dagger=\sigma_y,\quad \sigma_z^\dagger=\sigma_z\,. \tag{60}$$

$$\left.\begin{aligned}\sigma_x\sigma_y-\sigma_y\sigma_x&=2\mathrm{i}\sigma_z\,,\\ \sigma_y\sigma_z-\sigma_z\sigma_y&=2\mathrm{i}\sigma_x\,,\\ \sigma_z\sigma_x-\sigma_x\sigma_z&=2\mathrm{i}\sigma_y\,.\end{aligned}\right\} \tag{61}$$

分别用 σ_x 左乘和右乘 (61) 式中第一式并相加，可看出 σ_x 与 σ_z 是互相反对易的，类似地，σ_x 与 σ_y, σ_y 与 σ_z 也是反对易的，故

$$\left.\begin{aligned}\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x&=0\,,\\ \sigma_y\sigma_z+\sigma_z\sigma_y&=0\,,\\ \sigma_z\sigma_x+\sigma_x\sigma_z&=0\,.\end{aligned}\right\} \tag{62}$$

由 (61) 及 (62) 式又有

$$\sigma_x\sigma_y=\mathrm{i}\sigma_z\,,\quad \sigma_y\sigma_z=\mathrm{i}\sigma_x\,,\quad \sigma_z\sigma_x=\mathrm{i}\sigma_y\,. \tag{63}$$

设 $|\chi_+\rangle$ 及 $|\chi_-\rangle$ 分别代表 σ_z 值为 1 和 -1 的自旋态，即

$$\sigma_z|\chi_\pm\rangle = \pm|\chi_\pm\rangle. \tag{64}$$

适当选择 $|\chi_\pm\rangle$ 的常系数可使如下的关系式成立

$$(\sigma_x \pm \mathrm{i}\sigma_y)|\chi_\pm\rangle = 0, \tag{65}$$

$$(\sigma_x \mp \mathrm{i}\sigma_y)|\chi_\mp\rangle = 2|\chi_\pm\rangle,$$

$$\langle\chi_+|\chi_+\rangle = \langle\chi_-|\chi_-\rangle = 1, \tag{66}$$

以这样的 $|\chi_\pm\rangle$ 为基时，基矢和 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 的矩阵为

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{67}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{68}$$

这里我们同时用 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 来代表矩阵，它们常称为泡利矩阵.

对于自旋为 1/2 的单粒子，根据 (57) 式可把自旋态的转动算符表示为 $D_s(\boldsymbol{n}, \theta) = \cos\theta/2 - (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\sin\theta/2$.

习题 1 根据转动算符的表达式证明，单粒子的坐标本征态 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 在空间转动 g 时变为 $|g\boldsymbol{r}\rangle$.

解 用转轴 $\boldsymbol{n}$ 和转角 θ 代表 g，选取以 $\boldsymbol{n}$ 为 Z 轴正向的坐标系，把 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 写成 $|x, y, z\rangle$ 则

$$|g\boldsymbol{r}\rangle = |u, v, z\rangle,$$

其中 $u = x\cos\theta - y\sin\theta, v = x\sin\theta + y\cos\theta$. 故

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}|u, v, z\rangle &= \Big(\frac{\partial u}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial v}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial v}\Big)|u, v, z\rangle \\ &= \Big(-v\frac{\partial}{\partial u} + u\frac{\partial}{\partial v}\Big)|u, v, z\rangle. \end{aligned}$$

实际上 $\left(-v\frac{\partial}{\partial u}+u\frac{\partial}{\partial v}\right)$ 与 θ 无关，因此得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}|u,v,z\rangle=\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)|u,v,z\rangle\,,$$

$$|u,v,z\rangle=\exp\left\{\theta\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right\}|x,y,z\rangle\,.$$

由 $\hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{r}\rangle=\mathrm{i}\hbar\nabla|\boldsymbol{r}\rangle$, 有

$$\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)|\boldsymbol{r}\rangle=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}|\boldsymbol{r}\rangle\,,$$

故

$$|g\boldsymbol{r}\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}/\hbar}|\boldsymbol{r}\rangle\,.$$

习题 2 根据转动算符的表达式证明，单粒子的动量本征态 $|\boldsymbol{p}\rangle$ 在空间转动 g 时变为 $|g\boldsymbol{p}\rangle$.

解 由 $(\langle\boldsymbol{r}|)^g\cdot(|\boldsymbol{p}\rangle)^g=\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle$, 有 $\langle g\boldsymbol{r}|\cdot(|\boldsymbol{p}\rangle)^g=\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle$, 由于 $\boldsymbol{r}$ 的任意性，得

$$\langle\boldsymbol{r}|\cdot(|\boldsymbol{p}\rangle)^g=\langle g^{-1}\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle=\langle\boldsymbol{r}|g\boldsymbol{p}\rangle\,,$$

可见 $(|\boldsymbol{p}\rangle)^g=|g\boldsymbol{p}\rangle$.

3.2 哈密顿量算符

在许多重要情形，粒子系统的拉格朗日函数和哈密顿量具有如下的形式

$$L(x,\dot{x},t)=\frac{1}{2}\sum_k m_k(\dot{\boldsymbol{r}}_k)^2-V(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,t),\tag{69}$$

$$H_c(x,p,t)=\sum_k\frac{p_k^2}{2m_k}+V(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,t).\tag{70}$$

将 H_c 中的坐标和动量换成它们的算符就得到哈密顿量算符

$$\hat{H}(\hat{x},\hat{p},t)=\sum_k\frac{\hat{p}_k^2}{2m_k}+V(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,t).\tag{71}$$

对于在电磁场中运动的带电粒子，拉格朗日量含有 $\dot{\boldsymbol{r}}$ 的一次项，$m\dot{\boldsymbol{r}}$ 不再是正则动量. 考虑单粒子情形，设拉格朗日量为

$$L(x,\dot{x},t)=\frac{m}{2}(\dot{\boldsymbol{r}})^2+\frac{q}{c}\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)-q\phi(\boldsymbol{r},t), \tag{72}$$

其中 c 为光速，q 是粒子的电荷，$\boldsymbol{A}$ 和 ϕ 是电磁场的势函数. 与 x_j 相应的正则动量为

$$p_j=\frac{\partial L(x,\dot{x},t)}{\partial\dot{x}_j}=m\dot{x}_j+\frac{q}{c}A_j\,. \tag{73}$$

因此

$$H_c(x,p,t)=\sum_j p_j\dot{x}_j-L=\frac{1}{2m}\sum_j\left(p_j-\frac{e}{c}A_j\right)^2+e\phi(\boldsymbol{r},t)\,, \tag{74}$$

$$\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p},t)=\frac{1}{2m}\sum_j\left(\widehat{p}_j-\frac{q}{c}A_j(\widehat{\boldsymbol{r}},t)\right)^2+q\phi(\widehat{\boldsymbol{r}},t)\,. \tag{75}$$

对于在电磁场中运动的电子，还要考虑它的固有磁矩与磁场的作用能

$$-\frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\vec{\mathcal{H}})=-\boldsymbol{\mu}_s\cdot\vec{\mathcal{H}}\,, \tag{76}$$

$$\boldsymbol{\mu}_s=\frac{e}{mc}\widehat{\boldsymbol{s}}, \tag{77}$$

$\widehat{\boldsymbol{s}}$ 是电子的自旋算符，$\vec{\mathcal{H}}$ 是作用于电子的磁场，e 是电子的电荷 (电子的 e 是负的)，$\boldsymbol{\mu}_s$ 是固有磁矩. 这样的作用能以及电子的自旋和固有磁矩最初是唯象地引进的. 而 $\widehat{\boldsymbol{s}}$ 的投影只取 $\pm\hbar/2$ 两种值，以及 (77) 式中的比例系数是 e/mc, 都是根据实验来确定的 (比例系数 e/mc 是轨道角动量情形的两倍). 由 (75) 和 (76) 式，得到如下的哈密顿量算符

$$\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p},t)=\frac{1}{2m}\sum_j\left(\widehat{p}_j-\frac{e}{c}A_j(\widehat{\boldsymbol{r}},t)\right)^2+e\phi(\widehat{\boldsymbol{r}},t)-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\vec{\mathcal{H}}. \tag{78}$$

由于 $\vec{\mathcal{H}} = \mathrm{rot}\boldsymbol{A}$，又可以改写成

$$\hat{H}(\hat{x},\hat{p},t) = \frac{1}{2m}\Big\{\sum_j \sigma_j\Big(\hat{p}_j - \frac{e}{c}A_j(\hat{\boldsymbol{r}},t)\Big)\Big\}^2 + e\phi(\hat{\boldsymbol{r}},t)\,. \tag{79}$$

用这样的哈密顿量算符确定的薛定谔方程又称为泡利方程.

§4 坐标动量测不准关系和能量测不准关系

4.1 坐标动量测不准关系

和前面一样，用 $(x_1,x_2,\cdots,x_s)$ 及 $(p_1,p_2,\cdots,p_s)$ 代表系统的笛卡儿坐标和相应的正则动量，这里只考虑空间运动，假定各粒子都只有空间自由度，此外为了不涉及与相同粒子的不可分辨性有关的问题，再假定粒子是各不相同的. 根据 (29) 式，第一号动量取确定值 p_1 的状态的波函数具有如下的形式

$$\Psi_{(p_1)}(x_1,x_2,\cdots,x_s) = \Psi_{p_1}(x_1)\phi(x_2,x_3,\cdots,x_s)\,,$$
$$\Psi_{p_1}(x_1) \propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}p_1x_1/\hbar}\,.$$

不管 p_1 的值如何，这样的态显然不能使第一号坐标也具有确定值，而且重复测量 $\hat{x}_1$，将会得到一个均匀的分布，由此可看到互为正则共轭的变量的一个极为突出的特点：一般的不相容力学量虽然不具有构成完备组的共同本征态，但或许具有一些共同本征态，而像 $\hat{x}_j$ 与 $\hat{p}_j$ 这样一对量则不具有任何共同本征态. 这当然是量子条件的必然结果，但是我们知道，依据叠加原理和统计诠释，加上一些来自经典力学的一般考虑，就能够把坐标动量的对易关系式确定到一个常系数的程度，而且这个常系数不会等于零. 因此可以说，造成 $\hat{x}_j$ 和 $\hat{p}_j$ 不具有共同本征态的根本因素是叠加原理和统计诠释.

设 $\bar{x}_j$ 与 $\bar{p}_j$ 代表真正的平均值，即

$$\bar{x}_j\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{x}_j|\Psi\rangle\,,\quad \bar{p}_j\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{p}_j|\Psi\rangle\,.$$

在本节的讨论中凡是在有必要的地方都假定 $|\Psi\rangle$ 是可归一的，我们已经知道这不带来实质性的限制. 根据以上所述，不存在使 $(\hat{x}_j-\bar{x}_j)^2$ 及 $(\hat{p}_j-\bar{p}_j)^2$ 的平均值同时为零的状态，所以这两个平均值的积永远不等于零，为了估计这个积的量级，可以从 $\{\lambda(\hat{x}_j-\bar{x}_j)+\mathrm{i}(\hat{p}_j-\bar{p}_j)\}|\Psi\rangle$ 的长度 $I(\lambda)$ 为正数出发，设 λ 为实数，于是

$$I(\lambda)=\lambda^2\langle\Psi|(\hat{x}_j-\bar{x}_j)^2|\Psi\rangle+\langle\Psi|(\hat{p}_j-\bar{p}_j)^2|\Psi\rangle-\lambda\hbar\langle\Psi|\Psi\rangle$$

$$=\langle\Psi|(\hat{x}_j-\bar{x}_j)^2|\Psi\rangle\left(\lambda-\frac{\hbar}{2}\frac{\langle\Psi|\Psi\rangle}{\langle\Psi|(\hat{x}_j-\bar{x}_j)^2|\Psi\rangle}\right)^2$$

$$+\langle\Psi|(\hat{p}_j-\bar{p}_j)^2|\Psi\rangle-\frac{\hbar^2}{4}\frac{\langle\Psi|\Psi\rangle}{\langle\Psi|(\hat{x}_j-\bar{x}_j)^2|\Psi\rangle}\geq 0\,,$$

故

$$\langle\Psi|(\hat{x}_j-\bar{x}_j)^2|\Psi\rangle\langle\Psi|(\hat{p}_j-\bar{p}_j)^2|\Psi\rangle\geq\frac{\hbar^2}{4}\langle\Psi|\Psi\rangle\,,\tag{80}$$

或

$$\Delta x_j\Delta p_j\geq\frac{\hbar}{2}\,,\tag{81}$$

其中

$$\Delta x_j\equiv\sqrt{\langle\Psi|(\hat{x}_j-\bar{x}_j)^2|\Psi\rangle/\langle\Psi|\Psi\rangle}\,,\tag{82}$$

$$\Delta p_j\equiv\sqrt{\langle\Psi|(\hat{p}_j-\bar{p}_j)^2|\Psi\rangle/\langle\Psi|\Psi\rangle}\,.\tag{83}$$

不等式 (81) 就是坐标动量测不准关系的标准形式. Δx_j 的值表现出在 $|\Psi\rangle$ 下重复测量坐标 x_j 得出的结果的分布的集中或分散程度 (对平均值的偏离), Δp_j 的值表现出在 $|\Psi\rangle$ 下重复测量动量 p_j 得出的结果的分布的集中或分散程度. (81) 式表明 Δx_j 与 Δp_j 的积不能小于常数 $\hbar/2$，如果在某个状态下 Δx_j 非常小，那么 Δp_j 就非常大，反过来也是这样. 只有当 $\hbar$ 能够看成可忽略的小量时，才能实现 x_j 与 p_j 都近似地具有确定值的状态.

(81) 式只是强调 Δx_j 与 Δp_j 的积有一个确定的下限，当然允许一些状态使两者都非常大. 另外，可能在某状态下动量 p_j 的分布范围实际上是很狭小的，但这个分布函数随 $|p_j - \overline{p}_j|$ 的增大下降不够急速，使得按 (83) 式计算的 Δp_j 非常大，在这种情形下，Δp_j 当然不能很好地代表 p_j 值的分布范围. 同样，当坐标 x_j 的分布范围很狭小但分布函数随 $|x_j - \overline{x}_j|$ 的增大下降不够急速时，按 (81) 式计算的 Δx_j 也不能代表 x_j 的分布范围. 还要注意，公式 (81) 也不能按照量子条件的形式随意搬用，而应该弄清楚是否具备在它的推导过程中所要求的条件. 实际上从 (81) 式本身也可以看出一些局限性. 例如对于角度坐标 φ 来说，它的值永远是有限的，所以在它的正则动量的本征态下也不会出现无限大的偏差，可见，至少对于 Δp_φ 相当小的态，(81) 式不能成立. 关于这个问题，可从 §7 获得进一步的了解.

我们也可以从其他的观点引进类似于 Δx 与 Δp 的量并对它们的积作出量级估计. 注意 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widehat{p}_j S/\hbar}$ 是关于第 j 号坐标的移动算符，如果在 $|\Psi\rangle$ 下 x_j 值的分布局限在某个范围之内，那么当 S 的值达到这个范围的大小时，在 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widehat{p}_j S/\hbar}|\Psi\rangle$ 下发现系统处在 $|\Psi\rangle$ 的概率 $|\langle\Psi|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widehat{p}_j S/\hbar}|\Psi\rangle|^2/\langle\Psi|\Psi\rangle^2$ 就非常小. 当然 $|\Psi\rangle$ 越接近于 $\widehat{p}_j$ 的本征态，这个分布范围就越大. 我们可以用如下的参量 ΔS 代表在 $|\Psi\rangle$ 下 x_j 值分布范围的量级

$$\Delta S = \int_0^\infty \left| \frac{\langle\Psi|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widehat{p}_j S/\hbar}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \right|^2 \mathrm{d}S\,, \tag{84}$$

代入

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widehat{p}_j S/\hbar} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \mathrm{e}^{-\mathrm{i}pS/\hbar} \delta(p - \widehat{p}_j)\,,$$

得到

$$\Delta S = \pi\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \left|\langle\psi|\delta(p - \widehat{p}_j)|\psi\rangle\right|^2\,, \tag{85}$$

其中 $|\psi\rangle$ 是 $|\Psi\rangle$ 的归一形式. $\langle\psi|\delta(p - \widehat{p}_j)|\psi\rangle$ 即是在 $|\Psi\rangle$ 下发现 $\widehat{p}_j$

值在 p 附近的概率密度. 这里的积分变量 p 是一个参量, 真正有贡献的只是使 $\langle\psi|\delta(p-\widehat{p}_j)|\psi\rangle$ 明显不为零的区域, (85) 式中的积分就是平均的概率密度, 其倒数应当代表 $\langle\psi|\delta(p-\widehat{p}_j)|\psi\rangle$ 明显不为零的区域的长度的总和. 故

$$\Delta S\Delta p\sim\hbar\,. \tag{86}$$

这里的 Δp 代表在状态 $|\Psi\rangle$ 下 p_j 值的分布的主要区域长度总和的量级, 当动量分布函数随 $|p_j-\overline{p}_j|$ 的增大急速下降时, 它就与 (83) 式表示的量同量级.

最后我们分析一下这样的问题: 如果系统本来处在一个几乎是 $\widehat{p}_1$ 的严格本征态的 $|\Psi\rangle$, 要通过在第一个坐标的一个有限范围 ΔS_1 内进行的测量来发现 $\widehat{p}_1$ 的值, 试问能够达到何种精确度? 由于测量被限制在 ΔS_1 内进行, 无法获得超出波函数在这个范围的值所能提供的知识, 而借助波函数在这个范围的值无法推知它在外面的情况, 如果在外面波函数等于零, 则动量 p_1 的不确定性具有 $\hbar/\Delta S_1$ 的量级. 这即是测量值的理想精度的量级.

习题 对如下的波函数 (已归一) 计算 ΔS 及 $\overline{(\widehat{x}-\overline{x})^2}$:

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2k}}\int_{-k}^{k}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p\quad(k>0)\,.$$

解

$$\Delta S=\int_0^\infty|\langle\Psi|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pS/\hbar}|\Psi\rangle|^2\mathrm{d}S$$

$$=\pi\hbar\int_{-k}^{k}|\langle\Psi|\delta(p-\widehat{p})|\Psi\rangle|^2\mathrm{d}p=\frac{\pi\hbar}{(2k)^2}\int_{-k}^{k}\mathrm{d}p\,,$$

即 $\Delta S=\pi\hbar/2k$, 而按照公式

$$\overline{(\widehat{x}-\bar{x})^2}=\int_{-\infty}^{\infty}x^2|\Psi(x)|^2\mathrm{d}x\,,$$

代入

$$|\psi(x)|^2 = \frac{\hbar}{k\pi}\left\{\frac{\sin(kx/\hbar)}{x}\right\}^2,$$

得

$$\overline{(\widehat{x}-\bar{x})^2} = \infty\,.$$

4.2 能量测不准关系

实际上时间不是力学量，所谓能量测不准关系并不是坐标动量之间那种测不准关系，但是根据薛定谔方程，哈密顿量算符决定态矢量的时间变化的方式，与动量算符决定态矢量的空间移动的方式是相似的，所以也存在与 (86) 相似的关系式. 设哈密顿量算符 $\widehat{H}$ 作为坐标动量算符的函数不含时间，因此系统从状态 $|\Psi\rangle$ 出发，经过时间 t 就处在状态 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widehat{H}t/\hbar}|\Psi\rangle$，如果当 t 达到某个有限值以后，系统的态矢量几乎与原来的态矢量 $|\Psi\rangle$ 正交，就可以说系统在状态 $|\Psi\rangle$ 逗留了一段有限的时间，当然，$|\Psi\rangle$ 越接近 $\widehat{H}$ 的本征态，逗留时间就越长. 我们可以用如下的参量 Δt 代表逗留时间的量级

$$\Delta t = \int_0^\infty \left|\frac{\langle\Psi|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widehat{H}t/\hbar}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}\right|^2 \mathrm{d}t, \tag{87}$$

代入

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widehat{H}t/\hbar} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\delta(E-\widehat{H}), \tag{88}$$

有

$$\Delta t = \pi\hbar\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E|\langle\psi|\delta(E-\widehat{H})|\psi\rangle|^2\,. \tag{89}$$

与 (85) 式相似，$|\psi\rangle$ 是 $|\Psi\rangle$ 的归一形式，积分变量 E 也是一个参量，真正有贡献的只是使 $\langle\psi|\delta(E-\widehat{H})|\psi\rangle$ 明显不为零的区域，$\widehat{H}$ 的值谱可能比较复杂，但仍然可从平均的观点把 (89) 式中的积

分看成是在 $|\psi\rangle$ 下发现 $\hat{H}$ 值的平均概率密度，将其倒数的量级记为 ΔE 就有

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar, \tag{90}$$

这里的 ΔE 代表在状态 $|\Psi\rangle$ 下能量分布的主要区域的总长度的量级，(90) 式就是所谓能量测不准关系．对于能级有一定宽度 Γ 的似稳态，可根据此式估计它的寿命 τ 与 Γ 的积的量级．即

$$\Gamma \tau \sim \hbar. \tag{91}$$

让我们讨论一下两个系统由于碰撞引起的能量改变的问题．设 $|\Phi_0\rangle$, E_0 分别代表两个系统在初始时刻 t_0 的态矢量和能量，它们是不含相互作用项的哈密顿量 H_0 的本征态和本征值，E_0 即是两个系统的初始能量之和．用 V 代表相互作用势，于是在碰撞后态矢量为

$$|\Psi\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(H_0+V)(t-t_0)/\hbar}|\Phi_0\rangle,$$

散射波为

$$|u(t)\rangle = |\Psi(t)\rangle - |\Phi(t)\rangle,$$

其中 $|\Phi(t)\rangle$ 是相互作用项不存在情形的 $|\Psi(t)\rangle$．我们需要知道的是在 $|u(t)\rangle$ 下测量 H_0 获得各种值的分布范围．设微扰项 V 很弱，而 $|\Phi_n\rangle$ 是 H_0 的本征值为 E_n 的本征态，取到最低级有

$$|\langle\Phi_n|u(t)\rangle|^2 \approx 4|V_{n0}|^2 \frac{1}{(E_n-E_0)^2} \sin^2\left[\frac{(t-t_0)(E_n-E_0)}{2\hbar}\right],$$

其中 V_{n0} 是 V 关于 $\langle\Phi_n|$ 与 $|\Phi_0\rangle$ 的矩阵元．可见，E_n 主要是分布在 E_0 附近 $\hbar/(t-t_0)$ 的范围内．即

$$\Delta E \sim \frac{\hbar}{t-t_0}. \tag{92}$$

从能量测不准关系的观点来说，这个式子表明，把散射波 $u(t)$ 当作无相互作用系统在时刻 t 的态矢量看待时，逗留时间的量级正

是它在形成过程中经历的时间 (在 $t > t_0$ 以后才出现散射波). 随着 $t - t_0$ 的增大，$|u(t)\rangle$ 中使 H_0 的本征值明显偏离 E_0 的成分将迅速消失，碰撞后两个系统的能量之和随 $(t - t_0)$ 的增大而趋于初始值 E_0. 如果要估计只经历有限时间 Δt 的相互作用过程造成的能量和的变化，则精确度受到 $\hbar/\Delta t$ 的限制.

§5 由算符 $\{a_j^\dagger a_j\}$ 代表的完整力学量

一个系统的全部笛卡儿坐标或全部动量，都是描述空间运动的完整力学量，它们的值谱都是全体实数. 现在讨论另一种有普遍意义的完整力学量，它们由 $\{a_j^\dagger a_j\}$ 代表，其中 a_j 及 $a_j^\dagger$ 是如下的算符

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta_j \widehat{x}_j + \frac{\mathrm{i}}{\hbar\beta_j}\widehat{p}_j\right), \tag{93}$$

$$a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta_j \widehat{x}_j - \frac{\mathrm{i}}{\hbar\beta_j}\widehat{p}_j\right), \tag{94}$$

β_j 是具有坐标倒数量纲的正常数，$\{a_j^\dagger a_j\}$ 显然是一组互相独立和互相可对易的厄米算符，由坐标动量之间的对易关系可得出

$$[a_j, a_k] = 0, \quad [a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}. \tag{95}$$

既然如此，只要讨论一个自由度的 $a^\dagger a$ 就可以了解全组 $\{a_j^\dagger a_j\}$. 现在选定一个坐标 $\widehat{x}$ 和相应的正则动量 $\widehat{p}$，于是

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta\widehat{x} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar\beta}\widehat{p}\right), \tag{96}$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta\widehat{x} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar\beta}\widehat{p}\right), \tag{97}$$

$$aa^\dagger - a^\dagger a = 1. \tag{98}$$

设 $|n\rangle$ 代表 $a^\dagger a$ 的本征右矢，本征值为 n，于是

$$a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle, \tag{99}$$

由此及 (98) 式有

$$aa^\dagger|n\rangle = (n+1)|n\rangle\,, \tag{100}$$

$$a^\dagger a(a^\dagger|n\rangle) = (n+1)a^\dagger|n\rangle\,, \tag{101}$$

$$a^\dagger a(a|n\rangle) = (n-1)a|n\rangle\,. \tag{102}$$

从 (102) 式看到，只要 $a|n\rangle$ 不是零矢量，它就仍然是 $a^\dagger a$ 的本征右矢，本征值等于 $(n-1)$. 由于 $a^\dagger a$ 不能有负的本征值，应存在非负整数 k, 使得 $a^k|n\rangle \neq 0$，而 $a^{k+1}|n\rangle = 0$. 这表明 $a^k|n\rangle$ 是 $a^\dagger a$ 的本征值为零的本征右矢，因而又有 $n = k$. 可见，$a^\dagger a$ 具有零本征值，而且非零本征值只能是正整数. $a^\dagger|0\rangle$ 显然不是零 (根据 (101) 式)，因此是 $a^\dagger a$ 的本征值为 1 的本征右矢，继续以 $a^\dagger$ 作用即可推知：$a^\dagger a$ 的值谱是全部非负整数，$(a^\dagger)^n|0\rangle$ 属于本征值 n. 右矢 $|0\rangle$ 当然符合如下的条件

$$a|0\rangle = |0\rangle. \tag{103}$$

设 $\psi_0(x)$ 是 $|0\rangle$ 在坐标表象的波函数. 借助 (96) 式可把条件 (103) 写成如下的微分方程

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + \beta^2 x\right)\psi_0(x) = 0,$$

其解为

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2\right\}, \tag{104}$$

这是已经归一的波函数. 再设 $|0\rangle$ 也是归一的，即

$$\langle 0|0\rangle = 1, \tag{105}$$

由于 $n = 0$ 的独立右矢量只有一个，它必定正比于 $a^n|n\rangle$，可知 n 为任何正整数的右矢 $|n\rangle$ 也只有一个，即 $(a^\dagger)^n|0\rangle$，其归一形式可选为

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle, \tag{106}$$

由此有

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle\,, \tag{107}$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle\,, \tag{108}$$

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}\,. \tag{109}$$

可以直接证明，$\{|n\rangle\}$ 构成一维运动的完备组. 对任意右矢量 $|\Psi\rangle$, 令

$$|R_m\rangle = |\Psi\rangle - \sum_{n=0}^{m} |n\rangle\langle n|\Psi\rangle,$$

显然它与 $|0\rangle, |1\rangle, \cdots, |m\rangle$ 都正交，在这样的右矢量张成的子空间中，$a^\dagger a$ 在归一右矢量下的平均值不会小于 $m+1$，因此

$$\langle R_m|a^\dagger a|R_m\rangle \geq (m+1)\langle R_m|R_m\rangle,$$

其中等号只对于 $|R_m\rangle \propto |m+1\rangle$ 才成立. 另外由 $|R_m\rangle$ 的表达式以及 (99), (109) 式有

$$\langle R_m|a^\dagger a|R_m\rangle = \langle\Psi|a^\dagger a|\Psi\rangle - \sum_{n=0}^{m} n|\langle n|\Psi\rangle|^2,$$

得到

$$\langle\Psi|a^\dagger a|\Psi\rangle \geq (m+1)\langle R_m|R_m\rangle,$$

即

$$\langle R_m|R_m\rangle \leq \frac{1}{m+1}\langle\Psi|a^\dagger a|\Psi\rangle,$$

故

$$\lim_{m\to\infty}\langle R_m|R_m\rangle = 0,$$

这即是 $\{|n\rangle\}$ 的完备性. 这也表明，$a^\dagger a$ 确是代表一维运动的完整力学量.

现在求 $|n\rangle$ 在坐标表象和动量表象的波函数 $\psi_n(x)$. 根据 (97) 和 (106) 式有

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x-\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial x}\right)\right\}^n\psi_0(x)\,,$$

由

$$\frac{\partial}{\partial x}\left\{\mathrm{e}^{-\beta^2x^2/2}f(x)\right\}=\left(-\beta^2xf(x)+\frac{\partial f}{\partial x}\right)\mathrm{e}^{-\beta^2x^2/2},$$

得

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x-\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial x}\right)f(x)=\mathrm{e}^{\beta^2x^2/2}\left(\frac{-1}{\sqrt{2}\beta}\frac{\partial}{\partial x}\right)\mathrm{e}^{-\beta^2x^2/2}f(x),$$

$$\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x-\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial x}\right)\right\}^n f(x)$$

$$=\mathrm{e}^{\beta^2x^2/2}\left(\frac{-1}{\sqrt{2}\beta}\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\mathrm{e}^{-\beta^2x^2/2}f(x)\,. \tag{110}$$

因此

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{\beta^2x^2/2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}\beta}\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\psi_0(x)\mathrm{e}^{-\beta^2x^2/2}\,. \tag{111}$$

类似地, 设 $|n\rangle$ 在动量表象的波函数是 $\phi_n(p)$, 由 (97) 和 (106) 式有

$$\phi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}\hbar\beta\frac{\partial}{\partial p}-\mathrm{i}\frac{1}{\hbar\beta}p\right)\right\}^n\phi_0(p)$$

$$=\frac{(-\mathrm{i})^n}{\sqrt{n!}}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha p-\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial p}\right)\right\}^n\phi_0(p)\,,$$

其中

$$\alpha=\frac{1}{\hbar\beta}, \tag{112}$$

或

$$\phi_n(p)=\frac{(-\mathrm{i})^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{\alpha^2p^2/2}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\phi_0(p)\mathrm{e}^{-\alpha^2p^2/2}, \tag{113}$$

$\phi_0(p)$ 也可由条件 (103) 求出，即

$$\phi_0(p)=C\mathrm{e}^{-\alpha^2p^2/2},$$

常数因子 C 的绝对值为 $(\alpha/\sqrt{\pi})^{1/2}$，其相角因子应与下式一致

$$\phi_0(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_p^*(x)\psi_0(x)\mathrm{d}x\,.$$

由此和习惯采用的 $\psi_p^*(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}xp/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$, 得

$$C=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(x)\mathrm{d}x=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}.$$

故

$$\phi_0(p)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\alpha^2p^2/2}. \tag{114}$$

把 (113), (114) 式与 (111), (104) 式比较可看出，将 $\psi_n(x)$ 的表达式乘 $(-\mathrm{i})^n$ 再将其中的 x 及 β 分别换为 p 及 α, 就是 $\phi_n(p)$.

利用算符 $\{a_j\}$ 也可以构成其他的与 $\{a_j^\dagger a_j\}$ 类似的完整力学量. 下面借助类似于 $\{a_x^\dagger a_x, a_y^\dagger a_y, a_z^\dagger a_z\}$ 的描述单粒子的空间运动状态的完整力学量，说明轨道角动量投影的本征值集合由零和 $\hbar$

的正、负整倍数构成. 令

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta\hat{x} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar\beta}\hat{p}_x\right),$$

$$a_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta\hat{y} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar\beta}\hat{p}_y\right),$$

$$a_z = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta\hat{z} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar\beta}\hat{p}_z\right),$$

$$A_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - \mathrm{i}a_y),$$

$$A_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + \mathrm{i}a_y), \quad A_0 = a_z,$$

容易证实

$$[A_\mu, A_\nu] = 0, \quad [A_\mu, A_\nu^\dagger] = \delta_{\mu\nu}, \quad (\mu, \nu = 0, \pm 1)$$

$$[A_1^\dagger A_1, A_{-1}^\dagger A_{-1}] = [A_0^\dagger A_0, A_{\pm 1}^\dagger A_{\pm}1] = 0,$$

$$L_z = \hbar(A_1^\dagger A_1 - A_{-1}^\dagger A_{-1}).$$

显然, $(A_1^\dagger A_1, A_0^\dagger A_0, A_{-1}^\dagger A_{-1})$ 的本征值 (n_1, n_0, n_{-1}) 是非负整数, 而且这三个量可以代替 $(a_x^\dagger a_x, a_y^\dagger a_y, a_z^\dagger a_z)$ 作为单粒子轨道运动的完整力学量, 所以它们的独立的共同本征态的全体 $\{|n_1, n_0, n_{-1}\rangle\}$ 构成轨道运动状态的完备组. 由前面的结果又知道:

$$|n_1, n_0, n_{-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_0! n_{-1}!}}(A_1^\dagger)^{n_1}(A_0^\dagger)^{n_0}(A_{-1}^\dagger)^{n_{-1}}|0,0,0\rangle,$$

其中, $|0,0,0\rangle$ 也是 $(a_x^\dagger a_x, a_y^\dagger a_y, a_z^\dagger a_z)$ 的共同本征态, 本征值是 $(0,0,0)$, 相应的波函数是

$$\psi_{000}(x,y,z) = \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}\right)^{3/2}\exp\left\{-\frac{1}{2}\beta^2 r^2\right\}.$$

由于 L_z 在 $\{|n_1, n_0, n_{-1}\rangle\}$ 下的本征值是 $(n_1 - n_{-1})\hbar$, 而这种态构成轨道运动状态的完备组, 也就说明 L_z 的本征值只能是 $\hbar$ 的

正、负整倍数或零，并且，每个这样的数都是 L_z 的本征值. $\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 的不同分量当然具有相同的本征值集合.

习题 求 $\hat{x}^2$ 及 $\hat{p}^2$ 在 $|n\rangle$ 下的平均值.

解 由

$$\hat{x}=\frac{1}{\sqrt{2}\beta}(a+a^{\dagger}),$$

$$\hat{p}=\frac{-\mathrm{i}\hbar\beta}{\sqrt{2}}(a-a^{\dagger}),$$

得

$$\langle n|\hat{x}^2|n\rangle=\frac{1}{2\beta^2}(2n+1),$$

$$\langle n|\hat{p}^2|n\rangle=\frac{1}{2\alpha^2}(2n+1).$$

§6 量子条件的一般形式 (一)

正则变量对应于态矢量空间的算符的情形

经典力学中的正则变量是一种很广泛的概念，其中有些虽然可以用来表达各种力学量和实现量子化，但可能不是每个坐标或动量都能够看作量子力学中的力学量，这或者是由于不具有构成态矢量空间的完备组的本征矢量，或者甚至不能用作用于态矢量空间的算符与之对应. 在本节和下一节将讲述两类典型的量子条件，本节考虑基本正则变量中每一个都具有相应的量子力学算符的情形，下一节则考虑坐标是连续实数并且可以用作波函数自变量的情形. 现在的问题不涉及粒子的自旋，在这两节都假定粒子是没有自旋的.

设 $(q_1,q_2,\cdots,q_s)$ 和 $(p_1,p_2,\cdots,p_s)$ 是系统的一组正则变量，p_j 是相应于 q_j 的正则动量，于是经典正则方程为

$$\dot{q}_j=\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial q_j}=[q_j,H_c]_c\,,$$

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j} = [p_j, H_c]_c\,,$$

其中 $H_c(q,p,t)$ 是经典哈密顿量，带下标 c 的方括号是经典泊松括号，即

$$[F_c, G_c] = \sum_j \left\{ \frac{\partial F}{\partial q_j}\frac{\partial G}{\partial p_j} - \frac{\partial F}{\partial p_j}\frac{\partial G}{\partial q_j} \right\}.$$

我们再用简单的记号 $(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \cdots, \hat{q}_s)$ 及 $(\hat{p}_1, \hat{p}_2, \cdots, \hat{p}_s)$ 代表坐标和动量的量子力学算符 (以后只当有可能发生混淆时，才用其他记号代表 $(\hat{x}_j, \hat{p}_k)$). 哈密顿量算符记为 $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t)$, 于是由量子力学的运动方程的一般形式可求得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\hat{q}_j|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t)|\frac{\mathrm{d}\hat{q}_j}{\mathrm{d}t}|\Psi(t)\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\Psi(t)|(\hat{q}_j\hat{H} - \hat{H}\hat{q}_j)|\Psi(t)\rangle, \tag{115}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\hat{p}_j|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t)|\frac{\mathrm{d}\hat{p}_j}{\mathrm{d}t}|\Psi(t)\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\Psi(t)|(\hat{p}_j\hat{H} - \hat{H}\hat{p}_j)|\Psi(t)\rangle. \tag{116}$$

§1 中所说的建立量子条件的原则，在现在的情形就是保证 (115), (116) 式与经典正则方程相似，也即要求 $\hat{q}_j, \hat{p}_j$ 是与时间无关的厄米算符，而且

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{q}_j\hat{H} - \hat{H}\hat{q}_j) = \frac{\partial\hat{H}(\hat{q},\hat{p},t)}{\partial\hat{p}_j}\,,$$

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{p}_j\hat{H} - \hat{H}\hat{p}_j) = -\frac{\partial H(\hat{q},\hat{p},t)}{\partial\hat{q}_j}\,.$$

既然如此，$\hat{H}$ 与 $\hat{p}_j$ 不可对易的原因就在于含有 $\hat{q}_j$, 与 $\hat{q}_j$ 不可对易的原因则在于含有 $\hat{p}_j$，这允许两种可能性：(1) 所有 $\hat{q}_j$ 互相可对易，所有 $\hat{p}_j$ 互相可对易，而且 $\hat{q}_j$ 与 $\hat{p}_k$ 在 $j \neq k$ 时互相可对易. (2) 所有 $\hat{q}_j$ 互相反对易，所有 $\hat{p}_j$ 互相反对易，而且 $\hat{q}_j$ 与

$\hat{p}_k$ 在 $j \neq k$ 时互相反对易，还要求经典哈密顿量与全部 q_j 和 p_k 互相可对易．在现在的情形，(q,p) 在量子化之前不是互相反对易的量，第二种情况必须排除，所以在正则变量的算符之间，除了属于同一自由度的 $\hat{q}_j$ 与 $\hat{p}_j$ 之外，都是互相可对易的．再考虑到 $(\hat{q}_j\hat{H}-\hat{H}\hat{q}_j)/(\mathrm{i}\hbar)$ 和 $(\hat{p}_j\hat{H}-\hat{H}\hat{p}_j)/(\mathrm{i}\hbar)$ 化为基本量的对易关系的普遍规则与经典泊松括号的相应规则相同，应当使 $[\hat{q}_j,\hat{q}_k]/(\mathrm{i}\hbar)$, $[\hat{p}_j,\hat{p}_k]/(\mathrm{i}\hbar)$ 及 $[\hat{q}_j,\hat{p}_k]/(\mathrm{i}\hbar)$ 分别等于 $[q_j,q_k]_c$, $[p_j,p_k]_c$ 及 $[q_j,p_k]_c$ 的算符．综上所述，算符 $\hat{q}_j$ 与 $\hat{p}_k$ 应满足如下的条件：

$$\frac{\mathrm{d}\hat{q}_j}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}\hat{p}_j}{\mathrm{d}t}=0, \tag{117}$$

$$\hat{q}_j^\dagger=\hat{q}_j,\quad \hat{p}_j^\dagger=\hat{p}_j, \tag{118}$$

$$\hat{q}_j\hat{q}_k-\hat{q}_k\hat{q}_j=0, \tag{119}$$

$$\hat{p}_j\hat{p}_k-\hat{p}_k\hat{p}_j=0, \tag{120}$$

$$\hat{q}_j\hat{p}_k-\hat{p}_k\hat{q}_j=\mathrm{i}\hbar\delta_{jk}, \tag{121}$$

这就是薛定谔绘景下的量子条件，其形式仍与笛卡儿坐标的情形相同．

上面提到的算符微商可以仿照通常函数的微商来定义，即当 $\hat{q}_j$ 有一无穷小实增量 ϵ_j 以及 $\hat{p}_k$ 有一无穷小实增量 η_k 时，算符 $F(\hat{q},\hat{p},t)$ 的一级改变如下：

$$\delta F(\hat{q},\hat{p},t)=\sum_j\epsilon_j\frac{\partial F(\hat{q},\hat{p},t)}{\partial\hat{q}_j}+\sum_k\eta_k\frac{\partial F(\hat{q},\hat{p},t)}{\partial\hat{p}_k},$$

这里 ϵ_j 和 η_k 可以说是与所有 $\hat{q}_j$ 及 $\hat{p}_k$ 都可对易的厄米算符．由此及 (119)—(121) 式可得出

$$\hat{q}_jF-F\hat{q}_j=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F(\hat{q},\hat{p},t)}{\partial\hat{p}_j},$$

$$\hat{p}_jF-F\hat{p}_j=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F(\hat{q},\hat{p},t)}{\partial\hat{q}_j}.$$

因此可把 (115) 及 (116) 式写成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\widehat{q}_j|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t)|\frac{\partial\widehat{H}}{\partial\widehat{p}_j}|\Psi(t)\rangle, \tag{122}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\widehat{p}_j|\Psi(t)\rangle = -\langle\Psi(t)|\frac{\partial\widehat{H}}{\partial\widehat{q}_j}|\Psi(t)\rangle. \tag{123}$$

量子条件只是给出一组基本变量的算符之间的关系. 但是当哈密顿量和各种力学量通过这组变量表达的函数为已知时, 这组变量的含义也就确定了, 因此根据这些函数关系和量子条件, 原则上可以确定所有力学量的算符 (算符的排列次序问题可能引起一些不确定性, 另外还允许各算符以及各态矢量经受共同的幺正变换).

有时候, 采用复变量代替实的正则变量更为方便. 最常用的一类复变量是上一节讨论过的 a_j. 现在对于一般的正则变量, 令

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta_j q_j + \frac{\mathrm{i}}{\hbar\beta_j}p_j\right), \tag{124}$$

$$a_j^* = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta_j q_j - \frac{\mathrm{i}}{\hbar\beta_j}p_j\right), \tag{125}$$

其中 q_j 及 p_j 分别为实坐标和正则动量, β_j 是正常数并且使 $\beta_j q_j$ 没有量纲. 经典运动方程可写成如下的两种形式之一:

$$\dot{a}_j = [a_j, H_c]_c, \tag{126}$$

$$\dot{a}_j^* = [a_j^*, H_c]_c, \tag{127}$$

这两组互为复共轭的方程式又可写成

$$\mathrm{i}\hbar\dot{a}_j = \frac{\partial H_c(a^*, a, t)}{\partial a_j^*}, \tag{126'}$$

$$\mathrm{i}\hbar\dot{a}_j^* = -\frac{\partial H_c(a^*, a, t)}{\partial a_j}, \tag{127'}$$

其中对复变量的微商理解为

$$\delta F(a^*,a,t)=\sum_j \delta a_j \frac{\partial F(a^*,a,t)}{\partial a_j}+\sum_j \delta a_j^* \frac{\partial F(a^*,a,t)}{\partial a_j^*}\,.$$

例如，

$$\frac{\partial a_k^*}{\partial a_j}=0\,,\quad \frac{\partial a_k}{\partial a_j^*}=0\,,$$

$$\frac{\partial a_k}{\partial a_j}=\delta_{jk}\,,\quad \frac{\partial a_k^*}{\partial a_j^*}=\delta_{jk}\,.$$

由于 a_j 同时代表了 (q_j,p_j)，方程组 (126′) 已经包含着方程组 (127′), 不应该说 a_j 是坐标而 $\mathrm{i}\hbar a_j^*$ 是动量. 不过，仍然可以从这种形式的运动方程出发，按照前面所说的 “类似” 原则引导出量子条件. 设 $\hat{a}_j$ 及 $\hat{a}_j^*$ 分别是 a_j 及 a_j^* 的算符，于是由薛定谔方程的一般形式求得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\hat{a}_j|\Psi(t)\rangle=\langle\Psi(t)|\frac{\mathrm{d}\hat{a}_j}{\mathrm{d}t}|\Psi(t)\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\Psi(t)|(\hat{a}_j\hat{H}-\hat{H}\hat{a}_j)|\Psi(t)\rangle,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\hat{a}_j^*|\Psi(t)\rangle=\langle\Psi(t)|\frac{\mathrm{d}\hat{a}_j^*}{\mathrm{d}t}|\Psi(t)\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\Psi(t)|(\hat{a}_j^*\hat{H}-\hat{H}\hat{a}_j^*)|\Psi(t)\rangle.$$

显然 $\langle\Psi(t)|\hat{a}_j^*|\Psi(t)\rangle$ 应等于 $\langle\Psi(t)|\hat{a}_j|\Psi(t)\rangle^*$, 故 $\hat{a}_j^*$ 等于 $\hat{a}_j^\dagger$，由于 a_j 与 a_k^* 在量子化之前是普通的复数，按照和前面相同的论据，最后得到

$$a_j\to\hat{a}_j,\quad a_j^*\to\hat{a}_j^\dagger, \tag{128}$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{a}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}\hat{a}^\dagger}{\mathrm{d}t}=0, \tag{129}$$

$$\hat{a}_j\hat{a}_k-\hat{a}_k\hat{a}_j=0, \tag{130}$$

$$\hat{a}_j\hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_k^\dagger\hat{a}_j = \delta_{jk}, \tag{131}$$

这即是 $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ 表达的量子化条件，其正确性也可根据 (117)—(121) 式来验证.

算符 $F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t)$ 对于 $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ 的微商也与通常的微商相似：当 $\hat{a}_j$ 有一无穷小复增量 δa_j 时 (因而 $\hat{a}_j^\dagger$ 有增量 $\delta a_j^* = (\delta a_j)^*$)，$F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t)$ 的一级改变为

$$\delta F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t) = \sum_j \delta a_j \frac{\partial F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t)}{\partial \hat{a}_j} + \sum_k \delta a_k^* \frac{\partial F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t)}{\partial \hat{a}_k^\dagger}, \tag{132}$$

其中 δa_j 及 δa_k^* 也可以说是与所有 $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ 都可对易的算符. 由此及 (130), (131) 式有

$$\hat{a}_j F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t) - F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t)\hat{a}_j = \frac{\partial F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t)}{\partial \hat{a}_j^\dagger},$$

$$\hat{a}_j^\dagger F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t) - F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t)\hat{a}_j^\dagger = -\frac{\partial F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t)}{\partial \hat{a}_j}.$$

因此，表达 $\hat{a}_j$ 及 $\hat{a}_j^\dagger$ 的平均值随时间的变化的公式也可写成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\hat{a}_j|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t)|\frac{\partial \hat{H}(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t)}{\partial \hat{a}_j^\dagger}|\Psi(t)\rangle, \tag{133}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\hat{a}_j^\dagger|\Psi(t)\rangle = -\langle\Psi(t)|\frac{\partial \hat{H}(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t)}{\partial \hat{a}_j}|\Psi(t)\rangle. \tag{134}$$

§7 量子条件的一般形式 (二)

坐标是连续实变量时的动量算子

现在考虑坐标 $(q_1, q_2, \cdots, q_s)$ 是连续实数的情形. 用这样的坐标作为波函数的自变量时，正则动量和各种力学量可以用坐标

和坐标的微分算子来表达. 对于以笛卡儿坐标为自变量的波函数，在构成内积和归一积分时，我们没有引用权重函数，但是对任何坐标都坚持这样做，有时并不方便. 现在引入一个权重函数 $W(q_1,\cdots,q_s,t)$ (它应当是平滑的和恒正的)，使得时刻 t 的波函数的内积和归一积分的体积元为

$$\mathrm{d}\tau = W(q_1,q_2,\cdots,t)\mathrm{d}q_1\mathrm{d}q_2\cdots\mathrm{d}q_s\,,$$

或简写为

$$\mathrm{d}\tau = W(q,t)\mathrm{d}q\,.$$

即是说，在时刻 t 的由波函数 $\Phi(q,t)$ 代表的状态下发现系统的坐标值在 (q) 附近 $\mathrm{d}q$ 内的相对概率为

$$|\Phi(q,t)|^2 W(q,t)\mathrm{d}q\,,$$

权重函数 $W(q,t)$ 的形式可以相当任意地选取. 如果 $(q_1,q_2,\cdots,q_s)$ 可以看成是由一组笛卡儿坐标 $(x_1,x_2,\cdots)$ 变换而来的，则按照下式选取 $W_M(q,t)$ 作为权重函数比较自然

$$W_M(q,t)\mathrm{d}q = \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_s\,. \tag{135}$$

当然其他的选法也是允许的. 波函数和动量的微分算子的表达式都是相对于一定的权重函数而言的，而且当 $W(q,t)$ 确是依赖于 t 时，描写波函数随时间变化的运动方程的形式也受到影响.

首先研究由一组笛卡儿坐标 $(x_1,x_2,\cdots,x_s)$ 经过点变换而来的坐标. 设经典拉格朗日函数为

$$L(x,\dot{x},t) = \frac{1}{2}\sum_k m_k\dot{x}_k^2 - V(x,t)\,, \tag{136}$$

坐标变换可以依赖于时间

$$\left.\begin{aligned} x_k &= f_k(q_1,q_2,\cdots,q_s,t)\,,\\ q_j &= g_j(x_1,x_2,\cdots,x_s,t)\,, \end{aligned}\right\} \tag{137}$$

于是

$$\dot{x}_k = \sum_j \frac{\partial f_k}{\partial q_j}\dot{q}_j + \frac{\partial f_k}{\partial t}\,. \tag{138}$$

相应于 q_j 的正则动量 p_j 为

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_k}\frac{\partial \dot{x}_k}{\partial \dot{q}_j} = \sum_k (m_k \dot{x}_k)\frac{\partial x_k}{\partial q_j}\,. \tag{139}$$

试问 p_j 的微分算子是什么？如果选取 (135) 式中的 $W_M(q,t)$ 作为权重函数 (这意味着用 $\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_s$ 作为波函数内积和归一积分中的体积元), 则由后面的一般论证知道 p_j 的算子是

$$\begin{aligned}\widehat{p}_j^{(M)} &= [W_M(q,t)]^{-1/2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_j}\right)[W_M(q,t)]^{1/2} \\ &= -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_j} - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\frac{1}{W_M(q,t)}\frac{\partial W_M(q,t)}{\partial q_j}\,,\end{aligned} \tag{140}$$

或

$$\widehat{p}_j^{(M)} = \sum_k \frac{1}{2}\left\{\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_k}\right)\frac{\partial x_k}{\partial q_j} + \frac{\partial x_k}{\partial q_j}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_k}\right)\right\}\,. \tag{141}$$

由这种表达式可以直接看出 $\widehat{p}_j^{(M)}$ 是作用于波函数空间上的厄米算子，用新坐标来表达这个厄米性条件就是：对于系统在时刻 t 的任意波函数 $\Phi_A^{(M)}(q)$ 与 $\Phi_B^{(M)}(q)$, 下式成立

$$\begin{aligned}&\int W_M(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^{(M)*}(q)\,\widehat{p}_j^{(M)}\,\Phi_B^{(M)}(q) \\ &= \int W_M(q,t)\mathrm{d}q\left\{\widehat{p}_j^{(M)}\Phi_A^{(M)}(q)\right\}^*\Phi_B^{(M)}(q)\,.\end{aligned} \tag{142}$$

这里要注意，当 $\Phi_A^{(M)}(q)$ 或 $\Phi_B^{(M)}(q)$ 不是系统在时刻 t 的可能波函数时，就没有理由要求这个式子成立.

另一个重要问题是： $-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j$ 和 $\widehat{p}_j^{(M)}$ 是否代表作用于波函数空间的算符？亦即问，它们作用于波函数的结果是否仍然是波

函数？设 $\Phi^{(M)}(q)$ 与 $\Psi(x_1,x_2,\cdots,x_s)$ 是同一状态的波函数，由于以 $W_M(q,t)$ 作为权重函数，有 $\Phi^{(M)}(q)=\Psi(x_1,x_2,\cdots)$. 当 q_j 发生无穷小变动时有

$$\delta\Phi^{(M)}(q)=\sum_j \varepsilon_j \frac{\partial}{\partial x_j}\Psi(x_1,x_2,\cdots,x_s)\,,$$

这表明 $\partial\Phi^{(M)}(q)/\partial q_j$ 是可能的波函数，因此 $-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j$ 确是代表作用于波函数空间中的算符. 既然如此，$-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j$ 的算符就有唯一的厄米共轭，因此又可以表示为一个厄米算符和反厄米算符的和，其中的厄米算符的微分算子就是 $\widehat{p}_j^{(M)}$. 这样就证明了，$\widehat{p}_j^{(M)}$ 也代表作用于波函数空间中的算符.

当选择另一种权重函数 $W(q,t)$ 时，p_j 的微分算子可借 $\widehat{p}_j^{(M)}$ 作简单的变换而得出. 在原来的权重函数 $W(q,t)$ 下波函数为 $\Phi^{(M)}(q)$ 的状态 (时刻 t), 现在由如下的波函数 $\Phi(q,t)$ 代表

$$\Phi(q,t)\sqrt{W(q,t)}=C\Phi^{(M)}\sqrt{W_M(q,t)}\,, \tag{143}$$

其中 C 是常数因子，取它的模为 1 就有

$$\int W_M(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^{(M)*}(q)\,\Phi_B^{(M)}(q)$$

$$=\int W(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^*(q,t)\,\Phi_B(q,t)\,, \tag{144}$$

$$\int W_M(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^{(M)*}(q)\,\widehat{p}_j^{(M)}\,\Phi_B^{(M)}(q)$$

$$=\int W(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^*(q,t)\left(\sqrt{\frac{W_M(q,t)}{W(q,t)}}\,\widehat{p}_j^{(M)}\sqrt{\frac{W(q,t)}{W_M(q,t)}}\right)\Phi_B(q,t)\,. \tag{145}$$

这表明 p_j 的微分算子为

$$\sqrt{\frac{W_M(q,t)}{W(q,t)}}\,\widehat{p}_j^{(M)}\sqrt{\frac{W(q,t)}{W_M(q,t)}}$$

$$=[W(q,t)]^{-1/2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_j}\right)[W(q,t)]^{1/2}. \tag{146}$$

这是关于权重函数 $W(q,t)$ 的厄米算子，并且代表作用于波函数空间中的算符. 一种重要的特殊情形是 $W(q,t)\equiv 1$. 这时 p_j 的微分算子是 $-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j$.

下面讨论一般情形，即不假定 $(q_1,q_2,\cdots,q_s)$ 可由某一组独立的笛卡儿坐标变换而成. 权重函数的转换是简单的事，先选定它恒等于 1, 这时应直接认为 $(-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j)$ 是厄米算子并且代表作用于波函数空间的算符 (以此作为波函数的一种自然条件). 还要进一步说明，应该选取它作为 p_j 的微分算子. 由于权重函数恒等于 1，按照概率守恒的要求，运动方程可用厄米算子 $\widehat{H}^{(1)}$ 表示为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi^{(1)}(q,t)=\widehat{H}^{(1)}\Phi^{(1)}(q,t). \tag{147}$$

算子 $\widehat{H}^{(1)}$ 当然可以表示为 $(q_j,\partial/\partial q_k)$ 的函数，把 $(-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j)$ 记为 $\widehat{p}_j^{(1)}$, 于是 $\widehat{H}^{(1)}$ 是 $(q_j,\widehat{p}_k^{(1)})$ 的函数. 定义算子 $\widehat{Q}$ 的平均值如下

$$\overline{\widehat{Q}}=\int \mathrm{d}q\,\Phi^{(1)*}(q,t)\,\widehat{Q}\,\Phi^{(1)}(q,t),$$

则根据 (147) 式求 $\overline{q}_j$ 及 $\overline{\widehat{p}_j^{(1)}}$ 的时间微商可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{q_j}=\overline{\left(\frac{\partial\widehat{H}^{(1)}(q,\widehat{p}^{(1)},t)}{\partial\widehat{p}_j^{(1)}}\right)}, \tag{148}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\widehat{p}_j^{(1)}}=-\overline{\left(\frac{\partial\widehat{H}^{(1)}(q,\widehat{p}^{(1)},t)}{\partial\widehat{q}_j^{(1)}}\right)}, \tag{149}$$

其中对算子微商的定义和上节的算符微商一样，把这些式子与前节 (112), (123) 式比较可以看出，应选取 $\widehat{p}_j^{(1)}$ 作为 p_j 的微分算

子，而 $\widehat{H}^{(1)}(q,\widehat{p}^{(1)},t)$ 则是经典哈密顿量随 p_j 换为 $\widehat{p}_j^{(1)}$ 而成的厄米算子.

在一般的权重函数 $W(q,t)$ 下，由原来的 $\Phi^{(1)}(q,t)$ 代表的状态应具有如下的波函数 $\Phi(q,t)$

$$\Phi(q,t)=\frac{C}{\sqrt{W(q,t)}}\Phi^{(1)}(q,t)\,, \tag{150}$$

其中 C 为常数因子. 令 C 的模等于 1，于是

$$\int \mathrm{d}q\,\Phi_A^{(1)*}(q,t)\,\Phi_B^{(1)}(q,t)=\int W(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^*(q,t)\,\Phi_B(q,t)\,,$$

$$\int \mathrm{d}q\,\Phi_A^{(1)*}(q,t)\,(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_j})\Phi_B^{(1)}(q,t)$$

$$=\int W(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^*(q,t)\left\{W^{-1/2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_j}\right)W^{1/2}\right\}\Phi_B(q,t)\,.$$

所以 p_j 的微分算子是

$$\widehat{p}_j=[W(q,t)]^{-1/2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_j}\right)[W(q,t)]^{1/2} \tag{151}$$

$$=\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_j}\right)-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2W(q,t)}\frac{\partial W(q,t)}{\partial q_j}\,, \tag{151'}$$

这是关于权重函数 $W(q,t)$ 的厄米算子，并且代表作用于波函数空间的算符. 既然如此，在坐标是连续实数的正则变量中，只有坐标才有可能不代表作用于波函数空间的线性算符.

算子 $\widehat{p}_j$ 的厄米性的含义是：对于系统在时刻 t 的任意波函数 $\Phi_A(q,t)$ $\Phi_B(q,t)$, 下式成立

$$\int W(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^*(q,t)\,\widehat{p}_j\,\Phi_B(q,t)$$

$$=\int W(q,t)\mathrm{d}q\,\{\widehat{p}_j\,\Phi_A(q,t)\}^*\,\Phi_B(q,t)\,. \tag{152}$$

借助 (151′) 式又可把此式改写为

$$\int W(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^*(q,t)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_j}\Big)\Phi_B(q,t)$$

$$=\int W(q,t)\mathrm{d}q\Big\{-\mathrm{i}\hbar[W(q,t)]^{-1}\frac{\partial\left(W(q,t)\,\Phi_A(q,t)\right)}{\partial q_j}\Big\}^*\Phi_B(q,t)\,. \quad (153)$$

应该记住，只当 $\Phi_A(q,t)$ 及 $\Phi_B(q,t)$ 都是系统在时刻 t 的可能波函数时，才能保证 (152) 及 (153) 式成立．这时 (153) 式给出算子 $-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q$ 向左施行作用的规则．还要注意，如果选择了适当的 $W(q,t)$，使得 $[W(q,t)]^{-1}\cdot\partial W(q,t)/\partial q_j$ 乘以时刻 t 的波函数后仍然是时刻 t 的波函数，则 $-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial t$ 作用于时刻 t 的波函数也是如此，只在这种情况下才能定义 $-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j$ 的厄米共轭算子，它就是 $[W(q,t)]^{-1}(-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j)W(q,t)$. 反之，如果 $[W(q,t)]^{-1}\partial W(q,t)/\partial q_j$ 乘以时刻 t 的波函数的结果不是时刻 t 的波函数，则 $-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j$ 作用于时刻 t 的波函数也是如此，这时就不能定义 $-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j$ 的厄米共轭算子，当然也就不应说它的厄米共轭是 $[W(q,t)]^{-1}(-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_j)W(q,t)$.

$\Phi(q,t)$ 的运动方程可根据 (147) 及 (150) 式求出，即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\sqrt{W(q,t)}\,\Phi(q,t)\right)=\widehat{H}^{(1)}(q,\widehat{p}^{(1)},t)\left(\sqrt{W(q,t)}\,\Phi(q,t)\right). \quad (154)$$

又可作如下的改写

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\sqrt{W(q,t)}\Phi(q,t)\right)=\sqrt{W(q,t)}\widehat{H}(q,t)\Phi(q,t)\,, \quad (155)$$

或

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(q,t)=\widehat{h}(q,\widehat{p},t)\Phi(q,t)\,, \quad (156)$$

其中

$$\widehat{H}(q,\widehat{p},t)=[W(q,t)]^{-1/2}\widehat{H}^{(1)}(q,\widehat{p}^{(1)},t)[W(q,t)]^{1/2}\,, \quad (157)$$

$$\widehat{h}(q,\widehat{p},t)=\widehat{H}(q,\widehat{p},t)-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2W(q,t)}\frac{\partial W(q,t)}{\partial t}\,. \quad (158)$$

(151) 式及 (154)—(156) 式分别表示出在一般 $W(q,t)$ 下的动量算子和运动方程. 从 (157) 及 (151) 式知道, 算子 $\widehat{H}(q,\widehat{p},t)$ 即是在 $\widehat{H}^{(1)}(q,\widehat{p}^{(1)},t)$ 中把 $\widehat{p}_j^{(1)}$ 换为 (151) 式的 $\widehat{p}_j$ 的结果, 但 $\widehat{H}^{(1)}(q,\widehat{p}^{(1)},t)$ 是由经典哈密顿量 $H_c(q,p,t)$ 随 p_j 换为 $\widehat{p}_j^{(1)}$ 而成的, 因此 $\widehat{H}(q,\widehat{p},t)$ 是 $H_c(q,p,t)$ 随 p_j 换为 $\widehat{p}_j$ 而成的算子, 也即是以 $W(q,t)$ 为权重函数时的哈密顿量算子. 既然如此, 如果 $W(q,t)$ 确是依赖于时间, 则 $\widehat{h}(q,\widehat{p},t)$ 就不是系统的哈密顿量算子. 此外, 已知 $\widehat{H}^{(1)}(q,\widehat{p}^{(1)},t)$ 是关于恒为 1 的权重函数的厄米算子, 因此哈密顿量算子 $\widehat{H}(q,\widehat{p},t)$ 是关于权重函数 $W(q,t)$ 的厄米算子. 由此又知道, 当 $W(q,t)$ 确是依赖于 t 时, $\widehat{h}(q,\widehat{p},t)$ 就不是厄米算子. 以上各点, 在表达系统的运动方程时要特别注意. 至于要从经典哈密顿量中把 p_j 换成 $\widehat{p}_j$, 当然会遇到不确定的问题 (这是量子化中有普遍性的问题), 所以在给定了系统的经典拉格朗日量和求出各种力学量的经典表达式, 并且选定权重函数 $W(q,t)$ 之后, 哈密顿量算符 (以及其他较复杂的量的算符) 仍然有不确定性. 在下节将针对一类特殊情形来处理这个问题.

波函数和动量算子、哈密顿量算子, 都具有对应的态矢量和作用于态矢量空间的算符, 这种对应关系可表示如下

$$\begin{aligned}\langle\Phi_A(t)|\Phi_B(t)\rangle &= \int W(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^*(q,t)\,\Phi_B(q,t)\\ &= \int \mathrm{d}q\,\Phi_A^{(1)*}(q,t)\,\Phi_B^{(1)}(q,t)\,,\end{aligned}\tag{159}$$

$$\begin{aligned}\langle\Phi_A(t)|\widehat{p}_j|\Phi_B(t)\rangle &= \int W(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^*(q,t)\,\widehat{p}_j\,\Phi_B(q,t)\\ &= \int \mathrm{d}q\,\Phi_A^{(1)*}(q,t)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_j}\right)\Phi_B^{(1)}(q,t)\,,\end{aligned}\tag{160}$$

$$\begin{aligned}\langle\Phi_A(t)|\widehat{\boldsymbol{H}}|\Phi_B(t)\rangle &= \int W(q,t)\mathrm{d}q\,\Phi_A^*(q,t)\,\widehat{H}(q,\widehat{p},t)\,\Phi_B(q,t)\\ &= \int \mathrm{d}q\,\Phi_A^{(1)*}(q,t)\,\widehat{H}^{(1)}(q,p,t)\,\Phi_B^{(1)}(q,t)\,,\end{aligned}\tag{161}$$

$$\langle \Phi_A(t)| \left\{ \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi_B(t)\rangle \right\} = \int \mathrm{d}q\, \Phi_A^{(1)*}(q,t)(\mathrm{i}\hbar)\frac{\partial}{\partial t}\Phi_B^{(1)}(q,t)\,, \qquad (162)$$

其中 $\Phi_A(q,t)$, $\Phi_A^{(1)}(q,t)$ 是同一状态在权重函数为 $W(q,t)$ 以及恒等于 1 时的波函数，$|\Phi_A(t)\rangle$ 是相应的态矢量. $\Phi_B(q,t)$, $\Phi_B^{(1)}(q,t)$ 与 $|\Phi_B(t)\rangle$ 的关系也是这样. $\widehat{\boldsymbol{p}}_j$ 及 $\widehat{\boldsymbol{H}}$ 分别是动量 p_j 和哈密顿量的作用于态矢量空间的算符，根据 (159)—(162) 式可由波函数决定相应的态矢量，由算子 $\widehat{p}_j, \widehat{H}$ 决定 $\widehat{\boldsymbol{p}}_j, \widehat{\boldsymbol{H}}$. 从 (160) 式可推知算符 $\widehat{\boldsymbol{p}}_j$ 是不依赖于时间的. 另外由 (162) 式可得出 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}|\Phi_B(t)\rangle$ 等于 $\widehat{\boldsymbol{H}}|\Phi_B(t)\rangle$.

最后特别讨论一下坐标. 形式上也可以引用一个记号 $\widetilde{q}_j$ 代表坐标 q_j 的“线性算子”，其定义是 $\widetilde{q}_j\Phi(q)$ 等于 $q_j\Phi(q)$. 如果 q_j 乘于任何时刻的波函数时，结果仍然是该时刻的波函数，则 $\widetilde{q}_j$ 代表作用于波函数空间的算符，问题在于，有些坐标可能不具有这种性质. 如果 q_j 乘于波函数时，结果不是波函数，那么用坐标和正则动量算子表示作用于波函数空间的各种算子时，$\widetilde{q}_j$ 只能出现在适当的函数中. 在这种理解下，形式上可以把 $\widetilde{q}_j$ 说成是“线性厄米算子”，但始终要记住，$\widetilde{q}_j$ 在其他情形不代表作用于波函数空间的算符，因此，它与其他算子的积一般也不遵从算符积的厄米共轭规则. 为了确切地了解这点，让我们用刚体绕固定轴转动的例子作一说明，并以此结束本节的讨论. 取方位角 φ 为坐标，则拉氏函数为 $L = I\dot{\varphi}^2/2$, 正则动量 p_φ 即是角动量沿转动轴方向的投影，取 $\mathrm{d}\varphi$ 作为波函数内积的积分元，于是 p_φ 的微分算子是

$$\widehat{p}_\varphi = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\,,$$

它代表作用于波函数空间的算符，其允许值是 $\hbar$ 的整数倍，属于本征值 $m\hbar$ 的本征态由如下的波函数代表 (m 是整数),

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\,.$$

显然 $\varphi\Phi_m(\varphi)$ 不是波函数 (因为当 φ 趋于 0 和 2π 时具有不同的值), 所以 $\widetilde{\varphi}$ 不代表作用于波函数空间的算符. 当它通过像 $\sin\widetilde{\varphi}$, $\cos\widetilde{\varphi}$ 这类函数出现时, 可以形式地看作 "厄米算子". 但是不能无限制地把它看成厄米算子. 例如, 根据 $\widetilde{\varphi}\widehat{p}_\varphi - \widehat{p}_\varphi\widetilde{\varphi} = \mathrm{i}\hbar$, 有

$$\mathrm{i}\hbar = m\hbar\int_0^{2\pi}\Phi_m^*(\varphi)\varphi\Phi_m(\varphi)\mathrm{d}\varphi - \int_0^{2\pi}\Phi_m^*(\varphi)\widehat{p}_\varphi\varphi\Phi_m(\varphi)\mathrm{d}\varphi\,.$$

这时如果让末项中的 $\widehat{p}_\varphi$ 向左作用并采用厄米算子向左作用的规则, 就会导致错误结果. 原因在于 $\widehat{p}_\varphi$ 作为厄米算子是对于波函数空间来说的, 现在 $\varphi\Phi_m(\varphi)$ 不是波函数, 要让 $\widehat{p}_\varphi$ 向左施行作用, 只能按分部积分的规则处理.

§8 量子化中的广义协变性条件. 位形空间弯曲情形的哈密顿量算符

8.1 量子化中的广义协变性条件

当系统的经典哈密顿量比较复杂时, 通常难以确定哈密顿量算符, 而且各种比较复杂的力学量的算符一般说来也依赖于哈密顿量的结构. 只考虑坐标动量的排列次序, 无法找到适当的规则或者建立合理的条件. 本节将扼要阐述广义协变性条件的重要作用, 并指出, 在经典哈密顿量是动量的二次式时, 即使其二次项的系数矩阵是坐标的复杂函数, 也能够借助于广义协变性条件和其他标准条件, 确定哈密顿量算符以及用动量的二次式表示的各种力学量的算符 (详细的论证见文献 [4]).

量子力学理论, 当然也要保证物理内容与坐标的选择无关, 力学量的算符的选取必须符合这一要求, 从而导致这里所说的量子化中的广义协变性条件: 一个给定力学量的算符在给定状态下的矩阵元与坐标的选择无关, 亦即在任意坐标变换下保持不变.

沿用上节的记号，设系统的经典拉氏函数和哈密顿量为 $L(q,\dot{q},t)$ 及 $H(q,p,t)$，其中 q，p 代表广义坐标 q_1，q_2，$\cdots q_s$ 和正则动量 p_1，p_2，$\cdots p_s$. 在坐标变换

$$q_k \to q'_k(q_1,q_2,\cdots,q_s,t)$$

之下，新的正则动量和哈密顿量为

$$p'_l = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_l} = \sum_k \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{q}'_l}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \sum_k \frac{\partial q_k}{\partial q'_l} p_k\,, \tag{163}$$

$$\begin{aligned} H'(q',p',t) &= H(q,p,t) - \sum_k \dot{q}_k p_k + \sum_l \dot{q}'_l p'_l \\ &= H(q,p,t) + \sum_l \frac{\partial q'_l(q,t)}{\partial t} p'_l\,. \end{aligned} \tag{164}$$

从 (163) 式看到，经典正则动量构成协变向量. 再将哈密顿量按动量的幂次展开，用 H_n 代表 n 次项，则由 (164) 得

$$H'_n(q',p',t) = H_n(q,p,t) \quad (n \neq 1)\,.$$

即是说，哈密顿量中的 $n \neq 1$ 的部分是标量. 当只考虑不含时间的坐标变换时，H_1 也是标量.

如果某力学量在坐标 (q) 下由函数 $F(q,p)$ 表示，那么在坐标 (q') 下由如下的函数 $F'(q',p')$ 表示：

$$F'\big(q'(q),p'(q,p)\big) = F(q,p)\,.$$

可见，一个力学量总是由标量函数表示的. 例如，设一个力学量在坐标 (q) 下由 p_1 表示，那么它的一般表达式是标量函数

$$\sum_l f'^{l}_{(1)}(q')p'_l\,.$$

其中 $f'^{l}_{(1)}(q')$ 构成逆变向量，它在坐标 (q) 下等于 $\delta_{1,l}$. 现在假设力学量 F 由标量函数 $F(q,p,t)$ 表示， $\widehat{F}(q,\widehat{p},t)$ 是相应的算符，于是广义协变性条件意味着，对于任意的状态 A 与 B, 都有

$$\int W'(q',t)\mathrm{d}q'\Phi'^{*}_{A}(q',t)\widehat{F}'(q',\widehat{p}',t)\Phi'_{B}(q',t)$$

$$= \int W(q,t)\mathrm{d}q\Phi^{*}_{A}(q,t)\widehat{F}(q,\widehat{p},t)\Phi_{B}(q,t)\,,$$

其中，$\Phi'_{A}(q',t)$，$\Phi'_{B}(q',t)$ 和 $\widehat{F}'(q',\widehat{p}',t)$ 是在坐标 (q') 和权重函数 $W'(q',t)$ 下的波函数和算符. 显然，广义协变性条件又可说成：在限制 $W(q,t)\mathrm{d}q$ 为不变的积分体元时，被积函数

$$\Phi^{*}_{A}(q,t)\widehat{F}(q,\widehat{p},t)\Phi_{B}(q,t)$$

是标量函数. 这时波函数是标量函数，因此要求力学量的算符作用于波函数的结果仍然是标量函数.

作为说明广义协变性条件的作用的简单例子，现在来求由正则动量的齐次线性式

$$F_1(q,p)=\sum_{k} f^{k}(q)p_{k}$$

代表的力学量的算符. 将所求的算符记作 $\widehat{F}_1$. 由于系数 $f^{k}(q)$ 和权重函数 $W(q,t)$ 是实的，虚数 i 只能通过 $\{-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_l\}$ 出现在 $\widehat{F}_1$ 中，可见 $\widehat{F}_1$ 正比于 $-\mathrm{i}\hbar$. 在不变的积分体元 $W(q,t)\mathrm{d}q$ 下，标量函数 $\widehat{F}_1\Phi$ 只能由 $\partial\Phi/\partial q_k$ 与向量耦合或者用标量函数乘 Φ 来构成，而包含 $\partial\Phi/\partial q_k$ 的项必须是

$$\sum_{k} f^{k}(q)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big)\Phi\,.$$

因此有

$$\widehat{F}_1\Phi=\sum_{k} f^{k}(q)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big)\Phi-\mathrm{i}\hbar B(q)\Phi\,,$$

其中 $B(q)$ 是实的标量函数. 考虑到 $\widehat{F}_1$ 的厄米性，最后得到

$$\widehat{F}_1 = \frac{1}{2}\sum_k f^k(q)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big) + \frac{1}{2}\sum_k f^k(q)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big)^\dagger .$$

由于这种公式的特殊结构，它适用于任意的积分体元.

8.2 位形空间弯曲情形的哈密顿量算符

现在研究具有如下的经典拉氏函数的系统

$$L(q,\dot{q},t) = \frac{1}{2}\sum_{kl} M_{kl}(q,t)\dot{q}_k\dot{q}_l + \sum_l G_l(q,t)\dot{q}_l - V(q,t)\,, \tag{165}$$

其中 $V(q,t)$ 是势能函数，矩阵 (M) 是对称和正定的，$G_l(q,t)$ 是实函数. 正则动量 p_l 和哈密顿量 $H_c(q,p,t)$ 为

$$p_l = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} = \sum_k M_{kl}(q,t)\dot{q}_k + G_l(q,t)\,, \tag{166}$$

$$H_c(q,p,t) = \frac{1}{2}\sum_{kl}(M^{-1})_{kl}(p_k - G_k)(p_l - G_l) + V(q,t)\,, \tag{167}$$

其中 $(M^{-1})_{kl}$ 表示 M^{-1} 的元素. 按 p_k 的方幂写出 $H_c(q,p,t)$ 得

$$H_c(q,p,t) = H_2(q,p,t) + H_1(q,p,t) + V(q,t) + \frac{1}{2}\sum_{kl}(M^{-1})_{kl}G_kG_l\,. \tag{168}$$

$$H_1(q,p,t) = -\sum_{kl}(M^{-1})_{kl}G_kp_l\,,$$

$$H_2(q,p,t) = \frac{1}{2}\sum_{kl}(M^{-1})_{kl}\,p_kp_l\,.$$

不含 p_l 的项的算符当然保持经典函数的形式，$\hat{H}_1$ 的算符是

$$\hat{H}_1(q,\hat{p},t)=-\frac{1}{2}\Big\{\sum_{kl}(M^{-1})_{kl}G_k\hat{p}_l+\sum_{kl}\hat{p}_l(M^{-1})_{kl}G_k\Big\},$$

我们的问题归结为求哈密顿量中的二次项 $H_2(q,p,t)$ 的算符．将 $(M^{-1})_{kl}$ 记为 g^{kl}，于是

$$H_2(q,p,t)=\frac{1}{2}\sum_{kl}g^{kl}p_kp_l\,.$$

记住，H_2 是标量，系数 g^{kl} 构成逆变对称张量．我们所说的位形空间弯曲情形意思是不存在使 $g^{kl}=\delta_{kl}$ 的坐标，确切地说，以 M_{kl} 为测度张量的黎曼空间是弯曲的．实际上，需要把求 H_2 的算符的问题与求用任意二次齐次式表示的力学量的算符的问题结合起来研究，才能有效地运用各种标准条件．后一种表达式可写成

$$F_2(q,p,t)=\frac{1}{2}\sum_{kl}f^{kl}(q,p,t)p_kp_l\,,$$

其中 f^{kl} 也构成逆变对称张量，但其矩阵不限制为非异的．

下面将需要用到的各项标准条件列举出来：

(1) 力学量的量子力学算符是厄米的．

(2) 加法原则：两个力学量的和的算符等于两者的算符的和．

(3) 广义协变性条件．

(4) 对于具有如下的经典哈密顿量的自由粒子

$$H_2=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right),$$

$(l_z)^2$ 的算符等于 l_z 的算符的平方，其中 l_z 是角动量沿 Z 轴方向的投影．

(5) 对于一个限制在固定球面上运动的“自由粒子”，其动能算符与 $(l_z)^2$ 的算符对易．这里 l_z 是在以球心为原点的坐标系的角动量沿 Z 轴方向的投影．

为了方便，我们选定 $|M(q,t)|^{1/2}$ 作为权重函数，这里 $|M(q,t)|$ 代表矩阵 (M) 的行列式. 于是积分体元 $|M(q,t)|^{1/2}\mathrm{d}q$ 在坐标变换下不变，波函数是标量函数，广义协变性条件要求算符 $\widehat{F}_2$ 和 $\widehat{H}_2$ 作用于波函数的结果仍然是标量函数. 由于系数 f^{kl} 和权重函数是实的，虚数 i 只能通过 $\{-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_l\}$ 出现在力学量的算符中，可见 $\widehat{F}_2$ 和 $\widehat{H}_2$ 正比于 $(-\mathrm{i}\hbar)^2$. 首先考虑 $\widehat{F}_2\Phi$, 它包含 Φ 的微商不高于二次，而二次微商项必须是

$$\frac{(-\mathrm{i}\hbar)^2}{2}\sum_{kl}f^{kl}(q,t)\frac{\partial^2}{\partial q_k\partial q_l}\,.$$

因此有

$$\begin{aligned}\widehat{F}_2\Phi=\frac{(-\mathrm{i}\hbar)^2}{2}\sum_{kl}f^{kl}(q,t)\frac{\partial^2}{\partial q_k\partial q_l}\Phi\\+(-\mathrm{i}\hbar)\sum_k A_k(q,t)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big)\Phi\\+(-\mathrm{i}\hbar)^2B_0(f)\Phi\,,\end{aligned}$$

其中 $A_k(q,t)$ 和 $B_0(f)$ 是实函数. 根据 $\widehat{F}_2$ 的厄米性，可将此式改写为

$$\begin{aligned}\widehat{F}_2\Phi=\frac{1}{2}\sum_{kl}\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big)^{\dagger}f^{kl}(q,t)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_l}\Big)\Phi\\+(-\mathrm{i}\hbar)^2B_0(f)\Phi\,,\end{aligned}\tag{169}$$

其中

$$\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big)^{\dagger}=|M(q,t)|^{-1/2}\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big)|M(q,t)|^{1/2}\,.$$

为了符合广义协变性条件和加法原则，$B_0(f)$ 必须是标量函数并且线性地依赖于 f^{kl}. 其次，由于 F_2 是动量的二次齐次式，$B_0(f)$ 是由关于 $q_1, q_2,\cdots,q_s$ 的微商的二次项构成的.

将 (169) 式用于 H_2 得到

$$\widehat{H}_2\Phi=\frac{1}{2}\sum_{kl}\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big)^{\dagger}g^{kl}(q,t)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_l}\Big)\Phi$$
$$+(-\mathrm{i}\hbar)^2B_0(g)\Phi\,. \tag{170}$$

当以 M_{kl} 为测度张量的黎曼空间不弯曲时，$B_0(g)$ 恒等零，在普遍情形，$B_0(g)$ 由此测度张量及其不高于二阶的微商构成并且是 Riemann-Christoffel 张量的齐次函数. 这样的标量函数是唯一的. 即是空间的标量曲率. 用 R 来代表，就得到

$$B_0(g)=\alpha R\,,$$

其中 α 是待定的数值常数. 用 R_{kl} 代表二阶曲率张量，则标量曲率 R 可以表示为

$$R=\sum_{kl}g^{kl}R_{kl}\,,$$

$B_0(f)$ 可以用张量 f^{kl} 及其协变微商和张量 M_{kl}, R_{kl} 来构成. 其一般形式为

$$B_0(f)=\alpha\sum_{kl}f^{kl}R_{kl}+\beta\sum_{kl}(f^{kl})_{;l;k}\,,$$

其中 β 也是待定的数值常数. $(f^{kl})_{;l';k'}$ 代表 f^{kl} 在以 M_{kl} 为测度张量的黎曼空间的协变微商. 在文献 [4] 中，还借助上面列出的第 (4) 及第 (5) 项标准条件证明，α 和 β 都等于 0, 因此最后得到

$$\widehat{H}_2\Phi=\frac{1}{2}\sum_{kl}\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big)^{\dagger}g^{kl}(q,t)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_l}\Big)\Phi\,, \tag{171}$$

$$\widehat{F}_2\Phi=\frac{1}{2}\sum_{kl}\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\Big)^{\dagger}f^{kl}(q,t)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_l}\Big)\Phi\,. \tag{172}$$

用 $\widehat{p}_k^{(M)}$ 代表正则动量 p_k 在权重函数为 $|M(q,t)|^{1/2}$ 时的算子，即

$$\widehat{p}_k^{(M)}\Phi(q,t)$$
$$=\Big\{-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}|M(q,t)|^{-1/2}\frac{\partial|M(q,t)|^{-1/2}}{\partial q_k}\Big\}\Phi(q,t)\,,$$

就有

$$\widehat{H}_2^{(M)}(q,\widehat{p}^{(M)},t)$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{kl}|M|^{-1/4}\widehat{p}_k^{(M)}|M|^{1/2}(M^{-1})_{kl}\,\widehat{p}_l^{(M)}|M|^{-1/4}, \tag{173}$$

$$\widehat{F}_2^{(M)}(q,\widehat{p}^{(M)},t)$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{kl}|M|^{-1/4}\widehat{p}_k^{(M)}|M|^{1/2}f^{kl}\widehat{p}_l^{(M)}|M|^{-1/4}, \tag{174}$$

相应于 (167) 式的哈密顿量算符如下

$$\widehat{H}^{(M)}(q,\widehat{p}^{(M)},t)$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{kl}|M|^{-1/4}(\widehat{p}_k^{(M)}-G_k)|M|^{1/2}$$
$$\times(M^{-1})_{kl}(\widehat{p}_l^{(M)}-G_l)|M|^{(-1/4)}+V(q,t). \tag{175}$$

为了使 $\widehat{F}_2$ 和 $\widehat{H}^{(M)}$ 真正代表作用于波函数空间的算符，还要求 $f^{kl}(q,t)$, $M_{kl}(q,t)$ 以及 $G_k(q,t)$ 乘于以 $|M(q,t)|^{1/2}$ 为权重函数的波函数 $\Phi(q,t)$ 后，结果仍然是时刻 t 的关于这个权重函数的波函数. 也只是在这种条件下，$\widehat{F}_2$, $\widehat{H}_2$ 和 $\widehat{H}_1$ 才是厄米的，而且 $(-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_k)$ 本身也代表作用于波函数空间的算符. 其次，如果要采用其他的权重函数，只需按照 (151) 式把 (173)—(175) 式中的 $\widehat{p}_k^{(M)}$ 换成相应的 $\widehat{p}_k$. 还要记住，只要权重函数真正依赖于时间，则波函数的运动方程具有上节 (154)—(156) 式的形式.

§9 海森伯绘景和相互作用绘景

一种绘景是指描述系统的运动过程的一种方式，前面采用了薛定谔绘景，即是把运动过程完全表示为态矢量随时间的变化，

运动方程是指描写态矢量随时间变化的薛定谔方程，基本正则变量在态矢量空间的算符是与时间无关的，一种力学量如果表达为基本正则变量的函数时不显含时间，其算符就是与时间无关的. 实际上，只有力学量的平均值或者各种特定测量值的概率才能与实验结果比较 (力学量的允许值以及发现各种值的概率也可以看作平均值)，因此，能够与薛定谔绘景等价地表达力学量的平均值和概率的其他绘景原则上也是允许的.

设 $|\Psi^{(s)}(t)\rangle$ 是时刻 t 的薛定谔态矢量，于是力学量的平均值或者相对概率可借助相应的算符表示为算符的平均值

$$\overline{F^{(s)}} = \langle \Psi^{(s)}(t)|\widehat{F}^{(s)}|\Psi^{(s)}(t)\rangle. \tag{176}$$

这里也不管 $|\Psi^{(s)}(t)\rangle$ 是否为归一态矢量. 力学量 F 在薛定谔绘景的算符，简单地记为 $\widehat{F}^{(s)}$(只要不发生混淆，就不使用特别的记号). 所谓海森伯绘景就是把系统的运动过程完全表示为各种力学量的算符随时间的变化，而把态矢量固定为一特定时刻的薛定谔态矢量. 现在把这个时刻选为 t_1, 于是

$$|\Psi^{(h)}\rangle = |\Psi^{(s)}(t_1)\rangle. \tag{177}$$

借助本章 §1 中的算符 $T(t,t_0)$, 可将薛定谔态矢量 $|\Psi^{(s)}(t_1)\rangle$ 表示为

$$|\Psi^{(s)}(t_1)\rangle = T(t_1,t)|\Psi^{(s)}(t)\rangle,$$

因此，

$$|\Psi^{(h)}\rangle = T(t_1,t)|\Psi^{(s)}(t)\rangle\,. \tag{178}$$

用这样的态矢量来写出 (176) 式中的平均值就有

$$\langle \Psi^{(s)}(t)|\widehat{F}^{(s)}|\Psi^{(s)}(t)\rangle = \langle \Psi^{(h)}|\widehat{F}^{(h)}(t)|\Psi^{(h)}\rangle,$$

其中

$$\widehat{F}^{(h)}(t) = T(t_1,t)\widehat{F}^{(s)}T(t,t_1)\,. \tag{179}$$

(178) 及 (179) 式就是海森伯绘景的态矢量和算符与薛定谔绘景的态矢量和算符的对应关系，它实际上保证了对应的矩阵元完全相同，即

$$\langle \Psi_A^{(h)} | \widehat{F}^{(h)}(t) | \Psi_B^{(h)} \rangle = \langle \Psi_A^{(s)}(t) | \widehat{F}^{(s)} | \Psi_B^{(s)}(t) \rangle . \tag{180}$$

在海森伯绘景下，系统的运动方程是指各种海森伯算符随时间变化所遵守的方程式. 根据 (179) 式求时间微商，注意

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial T(t,t_1)}{\partial t} = \widehat{H}(t) T(t,t_1),$$

得出

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \widehat{F}^{(h)}(t) = T(t_1,t) \frac{\partial \widehat{F}^{(s)}}{\partial t} T(t,t_1) + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} [\widehat{F}^{(h)}(t), \widehat{H}^{(h)}(t)], \tag{180'}$$

这里 $\widehat{H}(t)$ 和 $\widehat{H}^{(h)}(t)$ 分别是薛定谔绘景和海森伯绘景的哈密顿量算符. 显然，当 $\widehat{F}^{(s)}$ 是一组基本正则变量 $(\widehat{q}_j, \widehat{p}_k)$ 的函数时，$\widehat{F}^{(h)}(t)$ 是对应的海森伯算符 $(\widehat{q}_j^{(h)}, \widehat{p}_k^{(h)})$ 的同样的函数，即

$$\widehat{F}^{(h)}(\widehat{q}^{(h)}, \widehat{p}^{(h)}, t) = \left[\widehat{F}^{(s)}(\widehat{q}, \widehat{p}, t) \right]_{\substack{\widehat{q} \to \widehat{q}^{(h)} \\ \widehat{p} \to \widehat{p}^{(h)}}} .$$

因此

$$T(t_1,t) \frac{\partial \widehat{F}^{(s)}}{\partial t} T(t,t_1) = \frac{\partial}{\partial t} \widehat{F}^{(h)}(\widehat{q}^{(h)}, \widehat{p}^{(h)}, t),$$

其中 $\widehat{q}_j^{(h)}(t)$, $\widehat{q}_k^{(h)}(t)$ 与 $\widehat{q}_j$, $\widehat{p}_k$ 符合 (179) 式的一般关系

$$\widehat{q}_j^{(h)}(t) = T(t_1,t) \widehat{q}_j T(t,t_1),$$

$$\widehat{p}_j^{(h)}(t) = T(t_1,t) \widehat{p}_j T(t,t_1).$$

(180′) 式可写成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \widehat{F}^{(h)}(t) = \frac{\partial}{\partial t} \widehat{F}^{(h)}(\widehat{q}^{(h)}, \widehat{p}^{(h)}, t) + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} [\widehat{F}^{(h)}(t), \widehat{H}^{(h)}(t)], \tag{181}$$

这就是海森伯绘景的运动方程，简称为海森伯方程. 对于正则变量的算符，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{q}_j^{(h)}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\widehat{q}_j^{(h)}(t),\widehat{H}^{(h)}(t)], \tag{182}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{p}_j^{(h)}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\widehat{p}_j^{(h)}(t),\widehat{H}^{(h)}(t)]. \tag{183}$$

显然海森伯绘景的基本算符 $\widehat{q}_j^{(h)},\widehat{p}_k^{(h)}$ 也是厄米的，并且它们之间的等时对易关系式与薛定谔绘景的对易关系式相同，即

$$\widehat{q}_j^{(h)\dagger}=\widehat{q}_j^{(h)},\quad \widehat{p}_j^{(h)\dagger}=\widehat{p}_j^{(h)}, \tag{184}$$

$$[\widehat{q}_j^{(h)}(t),\widehat{q}_k^{(h)}(t)]=[\widehat{p}_j^{(h)}(t),\widehat{p}_k^{(h)}(t)]=0, \tag{185}$$

$$[\widehat{q}_j^{(h)}(t),\widehat{p}_k^{(h)}(t)]=\mathrm{i}\hbar\delta_{jk}. \tag{186}$$

由此可把方程 (182),(183) 写成与经典正则方程类似的形式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{q}_j^{(h)}(t)=\frac{\partial}{\partial\widehat{p}_j^{(h)}}\widehat{H}^{(h)}(\widehat{q}^{(h)},\widehat{p}^{(h)},t), \tag{187a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{p}_j^{(h)}(t)=-\frac{\partial}{\partial\widehat{q}_j^{(h)}}\widehat{H}^{(h)}(\widehat{q}^{(h)},\widehat{p}^{(h)},t), \tag{187b}$$

其中算符微商的含义与本章 (122),(123) 式的情形相同.

除了薛定谔绘景与海森伯绘景外，另一类重要的绘景是所谓相互作用绘景，其特点扼要地说就是使哈密顿量 $\widehat{H}$ 中某个相互作用项 V 决定态矢量随时间的变化，而 $H_0=\widehat{H}-V$ 则决定力学量的算符随时间的变化. 为了方便，假定 H_0 不依赖于时间，用 $|\psi^{(I)}(t)\rangle$ 及 $\widehat{F}^{(I)}(t)$ 分别代表在这种绘景下时刻 t 的态矢量和算符，它们与对应的薛定谔绘景的态矢量和算符的关系定义如下：

$$|\psi^{(I)}(t)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar}|\Psi^{(s)}(t)\rangle, \tag{188}$$

$$\widehat{F}^{(I)}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar}\widehat{F}^{(s)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar}. \tag{189}$$

(188) 式表明，如果从 t_1 到 t 不存在相互作用，则 $|\psi^{(I)}(t)\rangle$ 保持为 $|\Psi^{(s)}(t_1)\rangle$. (189) 式表明，相互作用不影响 $\widehat{F}^{(I)}(t)$ 随时间的变化. 此两式保证了对应的矩阵元完全相同，即

$$\langle\psi_A^{(I)}(t)|\widehat{F}^{(I)}(t)|\psi_B^{(I)}(t)\rangle = \langle\Psi_A^{(s)}(t)|\widehat{F}^{(s)}|\Psi_B^{(s)}(t)\rangle.$$

相互作用绘景的运动方程包括态矢量随时间变化以及力学量的算符随时间变化遵从的方程式. 从 (189) 式可知，$\widehat{F}^{(I)}(t)$ 随时间的变化与海森伯算符相似，只是哈密顿量被 H_0 所代替. 即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{F}^{(I)}(t) = \frac{\partial\widehat{F}^{(I)}(t)}{\partial t} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\widehat{F}^{(I)}(t), H_0\right], \tag{190}$$

这是算符的运动方程，其中 $\frac{\partial\widehat{F}^{(I)}(t)}{\partial t}$ 的意思是把 $\widehat{F}^{(I)}(t)$ 看成是 $\widehat{q}_j^{(I)}$, $\widehat{p}_k^{(I)}$ 及 t 的函数而对 t 求偏微商. $\widehat{q}_j^{(I)}, \widehat{p}_j^{(I)}$ 与 $\widehat{q}_j, \widehat{p}_j$ 之间符合 (189) 式的一般关系

$$\widehat{q}_j^{(I)}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar}\widehat{q}_j\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar},$$

$$\widehat{p}_j^{(I)}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar}\widehat{p}_j\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar}.$$

这些算符也是厄米的，满足 (185),(186) 式中的等时对易关系，并且它们的运动方程可以写成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{q}_j^{(I)}(t) = \frac{\partial}{\partial\widehat{p}_j^{(I)}}H_0(\widehat{q}^{(I)}, \widehat{p}^{(I)}),$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{p}_j^{(I)}(t) = -\frac{\partial}{\partial\widehat{q}_j^{(I)}}H_0(\widehat{q}^{(I)}, \widehat{p}^{(I)}).$$

$|\psi^{(I)}(t)\rangle$ 的运动方程可由 (188) 式求时间微商得出，结果为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi^{(I)}(t)\rangle = V^{(I)}(t)|\psi^{(I)}(t)\rangle, \tag{191}$$

$$V^{(I)}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar}V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar}. \tag{192}$$

$|\psi^{(I)}(t)\rangle$ 随时间的变化也可表示为

$$|\psi^{(I)}(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi^{(I)}(t_0)\rangle\,, \tag{193}$$

$$U(t,t_0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar}T(t,t_0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0(t_0-t_1)/\hbar}\,. \tag{194}$$

由此及 $T(t,t_0)$ 的性质可求得，

$$U(t,t) = 1, \tag{195}$$

$$U(t_1,t_2)U(t_2,t_3) = U(t_1,t_3), \tag{196}$$

$$U(t,t_0)^\dagger = U(t,t_0)^{-1} = U(t_0,t). \tag{197}$$

$U(t,t_0)$ 随 t 及 t_0 的变化满足如下的微分方程和积分方程

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) &= V^{(I)}(t)U(t,t_0)\,, \\ -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) &= U(t,t_0)V^{(I)}(t_0)\,, \end{aligned}\right\} \tag{198}$$

$$\left.\begin{aligned} U(t,t_0) &= 1 + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} V^{(I)}(t')U(t',t_0)\mathrm{d}t'\,, \\ U(t,t_0) &= 1 + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} U(t,t_0')V^{(I)}(t_0')\mathrm{d}t_0'\,. \end{aligned}\right\} \tag{199}$$

如果 $\hat{H}$ 也与时间无关，则 $T(t,t_0)$ 与 $U(t,t_0)$ 可形式地写成

$$T(t,t_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\,, \tag{200}$$

$$U(t,t_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0(t-t_1)/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0(t_0-t_1)/\hbar}. \tag{201}$$

在本书的非相对论部分基本上是采用薛定谔绘景. 海森伯绘景和相互作用绘景在相对论场论中较为常用.

§ 10　混合态的统计算符和运动方程

第一章已经提到，在一种不足以确定一个纯粹态的物理条件下对系统作重复测量发现各种力学量的值的分布，不能用一

个单独的波函数而要用适当的波函数的分布 (或者说纯粹态的分布) 来描写，一种这样的分布就代表一定的混合态. 这种分布的概念与经典统计物理中分布函数的概念是相似的，不过按照经典力学，如果作为测量结果发现系统处在某个纯力学状态，那就表明系统本来处在该状态，因此在经典统计物理中与一定物理条件相应的分布函数既是关于系统本来处在何种纯力学状态的概率性信息 (系统在一定时刻总是处在某个纯力学状态)，又是关于系统将被发现处在何种状态的概率性判断. 按照量子力学，由系统在某次测量中被发现所在的状态，并不能推知它在该测量之前所在的状态，所谓用纯粹态的一定分布来代表一定的混合态，是把这个分布看作关于系统本来所在状态的概率性信息 (系统在一定时刻可以不处在任何纯粹态)，由此当然可以计算系统将被发现处在各种状态的概率. 让我们首先用一个例子加以说明. 设在某时刻系统处在这样的混合态：它表明系统“本来”以概率 ρ_1 处在纯粹态 $|\Psi_1\rangle$, 以概率 ρ_2 处在纯粹态 $|\Psi_2\rangle$, 其中 $|\Psi_1\rangle$ 与 $|\Psi_2\rangle$ 是可归一的态矢量，而 $\rho_1+\rho_2=1$. 这段陈述完全刻画了该混合态. 由此可计算任何测量结果的概率. 例如，发现系统处在任一可归一的纯粹态 $|\Psi\rangle$ 的概率是

$$\rho_1\frac{|\langle\Psi|\Psi_1\rangle|^2}{\langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle}+\rho_2\frac{|\langle\Psi|\Psi_2\rangle|^2}{\langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Psi_2|\Psi_2\rangle}\,. \tag{202}$$

类似地，发现力学量 F 的值为 f_0 的概率是

$$\rho_1\frac{W_{f_0}(F,\Psi_1)}{\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle}+\rho_2\frac{W_{f_0}(F,\Psi_2)}{\langle\Psi_2|\Psi_2\rangle}\,. \tag{203}$$

这些式子表达了混合态的概率公式的构成方法，即任何一种测量结果的概率都是由 $|\Psi_1\rangle$ 及 $|\Psi_2\rangle$ 分别决定的概率以 ρ_1 和 ρ_2 为权重构成的和，绝不出现同时依赖于 $|\Psi_1\rangle$ 与 $|\Psi_2\rangle$ 的干涉项. 应该注意，为了使上面的陈述不致自相矛盾，$|\Psi_1\rangle$ 与 $|\Psi_2\rangle$ 必须是互相正交的，只要在 (202) 式中把 $|\Psi\rangle$ 取为 $|\Psi_1\rangle$ 或 $|\Psi_2\rangle$ 即可看出这点. 其

次，根据 (202) 式，在这个混合态下发现系统处在与 $|\Psi_1\rangle$ 及 $|\Psi_2\rangle$ 都正交的态的概率等于零.

仿照这个例子可以表示出更复杂的混合态，不过用统计算符来代表混合态更为方便. 设 $\{|\alpha\rangle\}$ 代表态矢量空间的正交标准基，即

$$\langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta(\alpha,\alpha')\,,$$

$$\sum_{\alpha}|\alpha\rangle\langle\alpha| = 1\,.$$

和以前的习惯一样，这里 α 是一个简写符号，当它含有连续参量时，对它的求和就包括对连续参量的积分，而且 $\delta(\alpha,\alpha')$ 含有这些连续参量的 δ 函数. 根据第一章 (28) 式，在 $|\Psi_1\rangle$ 下发现 F 值为 f_0 的相对概率为

$$\begin{aligned} W_{f_0}(F,\Psi_1) &= \langle\Psi_1|\widehat{\delta}(f_0,F)|\Psi_1\rangle \\ &= \sum_{\alpha}\langle\Psi_1|\alpha\rangle\langle\alpha|\widehat{\delta}(f_0,F)|\Psi_1\rangle \\ &= \mathrm{Sp}\left\{\widehat{\delta}(f_0,F)|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1|\right\}\,, \end{aligned} \tag{204}$$

其中 $\widehat{\delta}(f_0,F)$ 是从态空间中挑选 F 值为 f_0 的子空间的投影算符，记号 Sp 表示对算符的对角矩阵元求和，结果与表象无关. 因此 (203) 式中的概率可写成

$$\begin{aligned} &\rho_1 W_{f_0}(F,\psi_1) + \rho_2 W_{f_0}(F,\psi_2) \\ &= \mathrm{Sp}\left\{\widehat{\delta}(f_0,F)\left(\rho_1|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \rho_2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\right)\right\}\,, \end{aligned} \tag{205}$$

其中 $|\psi_1\rangle$ 及 $|\psi_2\rangle$ 分别是把 $|\Psi_1\rangle$ 与 $|\Psi_2\rangle$ 归一而成的态矢量. 在概率公式 (204) 及 (205) 中，算符 $\widehat{\delta}(f_0,F)$ 取决于被测量的力学量 F 和测量结果 f_0，算符 $|\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ 代表纯粹态 $|\psi_1\rangle$ 的性质，称为该状态的统计算符. $\rho_1|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \rho_2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ 代表前面所说的混合态的

性质，称为这个混合态的统计算符. 统计算符能够表达各种测量结果的概率，因此可以用来代表状态本身，这是量子力学中描写状态的普遍方法. 一般地，一个系统的态空间的厄米算符 ρ 如果具备如下的条件就可以看作某个状态的统计算符：它具有构成完备组的本征态，而所有本征值都是非负的. 此外，对于可以严格实现的状态，在适当选择统计算符的常系数时可使下面的归一条件成立

$$\mathrm{Sp}(\rho) = 1. \tag{206}$$

在理论上也允许有不可归一的统计算符，例如当 $|\Psi\rangle$ 不可归一时，它的统计算符也是不可归一的，但是与态矢量的情形相似，可以按照适当的极限观点，借助可归一的统计算符来处理涉及不可归一的统计算符的问题. 统计算符的物理意义就表现在按照 (205) 式的方式决定各种概率. 即是说，在状态 ρ 下发现 F 值为 f_0 的相对概率为

$$W_{f_0}(F,\rho) = \mathrm{Sp}\{\delta(f_0, F)\rho\}, \tag{207}$$

发现 F 取值于其连续谱中一个区域 Δf_s 的相对概率为

$$W_{\Delta f_s}(F,\rho) = \mathrm{Sp}\{\widehat{\delta}(\Delta f_s, F)\rho\}\,. \tag{208}$$

发现系统处在一个可归一的纯粹态 $|\Psi\rangle$ 的相对概率为

$$W(\Psi,\rho) = \mathrm{Sp}\{|\psi\rangle\langle\psi|\rho\}, \tag{209}$$

其中 $|\psi\rangle$ 是 $|\Psi\rangle$ 归一而成的态矢量. 由 (207)—(208) 式可求出在状态 ρ 下测量 F 所得结果的平均值公式

$$\overline{F} = \mathrm{Sp}(\widehat{F}\rho)\,. \tag{210}$$

当统计算符满足 (206) 式中的归一条件时，(207)—(209) 式代表绝对概率，(210) 式代表真正的平均值.

在状态 ρ 下测量一组相容力学量获得各种结果的概率也可按照同样的方法决定，这里特别写出一组完整力学量的概率公式. 沿用以前的记号 (第一及第二章)，设 $\{|\Psi_n\rangle, |\Psi_{m\beta}\rangle\}$ 是由一组完整力学量 $\{\alpha\}$ 的共同本征右矢构成的正交标准基，(n) 代表 $\{\alpha\}$ 的值谱中的分立点，$(m\beta)$ 代表连续谱中的点，β 是连续指标，于是在状态 ρ 下发现 $\{\alpha\}$ 取点 n 的值也即发现系统处在 $|\Psi_n\rangle$ 的相对概率为

$$W_n(\alpha,\rho) = \mathrm{Sp}\{|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\rho\} = \langle\Psi_n|\rho|\Psi_n\rangle. \tag{211}$$

类似地，在状态 ρ 下发现系统处在 $|\Psi_{m\beta}\rangle$ 附近一个无穷小间隔 $\mathrm{d}\beta$ 也即发现系统处在状态 $|\Psi_{m\beta(\mathrm{d}\beta)}\rangle$ 的相对概率为

$$\begin{aligned} W_{m\beta}(\alpha,\rho)\mathrm{d}\beta &= \mathrm{Sp}\{|\Psi_{m\beta(\mathrm{d}\beta)}\rangle\langle\Psi_{m\beta(\mathrm{d}\beta)}|\rho\} \\ &= \langle\Psi_{m\beta(\mathrm{d}\beta)}|\rho|\Psi_{m\beta(\mathrm{d}\beta)}\rangle \\ &= \langle\Psi_{m\beta}|\rho|\Psi_{m\beta}\rangle\mathrm{d}\beta\,, \end{aligned} \tag{212}$$

其中 $|\Psi_{m\beta(\mathrm{d}\beta)}\rangle$ 是如下的归一态矢量 (见第一章 §6):

$$|\Psi_{m\beta(\mathrm{d}\beta)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{d}\beta}}\int_{(\beta,\mathrm{d}\beta)}\Psi_{m\beta'}\mathrm{d}\beta'\,.$$

(211) 及 (212) 都属于 (209) 式的类型，它们表明，当 ρ 及 $|\Psi\rangle$ 均已归一时，ρ 在 $|\Psi\rangle$ 下的平均值就是在状态 ρ 下发现系统处在状态 $|\psi\rangle$ 的概率，ρ 在一个不可归一的态下的平均值则正比于一种概率密度. 例如当 $|q\rangle$ 代表只有空间自由度的系统的笛卡儿坐标的本征态时，$\langle q|\rho|q\rangle$ 代表在状态 ρ 下发现系统处在位形点 (ρ) 附近的相对概率密度.

对于态矢量空间的任意正交标准基 $\{|\alpha\rangle\}$，统计算符可表示为

$$\rho = \sum_{\alpha\alpha'}|\alpha\rangle\langle\alpha'|\rho_{\alpha\alpha'}\,, \tag{213}$$

$$\rho_{\alpha\alpha'} = \langle\alpha|\rho|\alpha'\rangle. \tag{214}$$

矩阵 $(\rho_{\alpha\alpha'})$ 通常称为在基 $\{|\alpha\rangle\}$ 下的密度矩阵. 如果 $\{|\psi_\lambda\rangle\}$ 是使密度矩阵对角化的正交标准基, 则

$$\rho|\psi_\lambda\rangle = \rho_\lambda|\psi_\lambda\rangle\,, \tag{215}$$

$$\rho = \sum_\lambda \rho_\lambda|\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda|. \tag{216}$$

只有对于这样的 $\{|\psi_\lambda\rangle\}$(严格说来还要求 $|\psi_\lambda\rangle$ 和 ρ 都已经真正归一), 才可以按照 (202), (203) 式的方法计算概率, 也只有在这种情况下, 才可以说系统 "本来" 以概率 ρ_λ 处在状态 $|\psi_\lambda\rangle$. 对于密度矩阵不是对角化的基 $\{|\alpha\rangle\}$, 当 $\{|\alpha\rangle\}$ 及 ρ 都归一时, $\rho_{\alpha\alpha}$ 不是系统 "本来" 处在 $|\alpha\rangle$ 的概率, 而只是系统被发现处在 $|\alpha\rangle$ 的概率, 在这种基下计算 (207)—(212) 式中各个量时, 不能抛弃密度矩阵的非对角元素的贡献.

混合态也可以有一种比较直观的理解. 为此把要研究的系统 S 看成一个大系统 $S\oplus\overline{S}$ 的子系统, 当 $S\oplus\overline{S}$ 处在一定的纯粹态 $|\Phi(S\overline{S})\rangle\!\rangle$ 时, 重复测量 S 的任何力学量获得各种结果的概率都是确定的, 这意味着 S 处在一定的混合态. 设 $|\psi\rangle$ 是 S 的归一态矢量, 于是在 $|\Phi(S\overline{S})\rangle\!\rangle$ 下发现 S 处在 $|\psi\rangle$ 的相对概率是

$$\langle\!\langle\Phi(S\overline{S})|\psi\rangle\langle\psi|\Phi(S\bar{S})\rangle\!\rangle\,.$$

借助 S 的态矢量空间中的正交标准基 $\{|\alpha\rangle\}$, 可把 $|\Phi(S\overline{S})\rangle\!\rangle$ 分解为

$$|\Phi(S\overline{S})\rangle\!\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle|\phi_\alpha(\overline{S})\rangle\,, \tag{217}$$

其中 $|\phi_\alpha(\overline{S})\rangle$ 是 $\overline{S}$ 的态矢量. 因此上述概率可表示为

$$\begin{aligned}&\langle\!\langle\Phi(S\overline{S})|\psi\rangle\langle\psi|\Phi(S\overline{S})\rangle\!\rangle\\ &\quad= \mathrm{Sp}\Big\{|\psi\rangle\langle\psi|\Big(\sum_{\alpha\alpha'}|\alpha\rangle\langle\alpha'|\langle\phi_{\alpha'}(\overline{S})|\phi_\alpha(\overline{S})\rangle\Big)\Big\}\,,\end{aligned}$$

即是说，当 $S\oplus\overline{S}$ 处在 $|\Phi(S\overline{S})\rangle\rangle$ 时，S 处在由如下的统计算符描述的状态：

$$\sum_{\alpha,\alpha'}|\alpha\rangle\langle\alpha'|\langle\phi_{\alpha'}(\overline{S})|\phi_{\alpha}(\overline{S})\rangle\,. \tag{218}$$

反过来，S 的任何混合态都可以看成它在一个大系统 $S\oplus\overline{S}$ 的纯粹态下所处的状态. 设 S 处在混合态 ρ, 选取使 ρ 对角化的正交标准基，则

$$\rho=\sum_{\lambda}|\psi_{\lambda}\rangle\langle\psi_{\lambda}|\rho_{\lambda}\,.$$

只要 $\overline{S}$ 是一个足够复杂的系统，就具有一组满足如下的正交归一条件的态矢量 $|\varphi_{\lambda}(\overline{S})\rangle$, 即

$$\langle\varphi_{\lambda}(\overline{S})|\varphi_{\lambda'}(\overline{S})\rangle=\langle\psi_{\lambda}|\psi_{\lambda'}\rangle=\delta(\lambda,\lambda')\,,$$

利用这样的 $|\varphi_{\lambda}(\overline{S})\rangle$ 构成 $S\oplus\overline{S}$ 的如下态矢量

$$|\Phi(S\overline{S})\rangle\rangle=\sum_{\lambda}|\psi_{\lambda}\rangle|\varphi_{\lambda}(\overline{S})\rangle\sqrt{\rho_{\lambda}}\,,$$

那么，当 $S\oplus\overline{S}$ 处在 $|\Phi(S\overline{S})\rangle\rangle$ 时，S 就处在由 ρ 描述的混合态，因为这时发现 S 处在 $|\psi\rangle$ 的相对概率是

$$\langle\langle\Phi(S\overline{S})|\psi\rangle\langle\psi|\Phi(S\overline{S})\rangle\rangle=\mathrm{Sp}(|\psi\rangle\langle\psi|\rho)\,.$$

现在我们借助这种观点来引导出混合态的运动方程，即在系统的自然发展中统计算符随时间变化所遵守的方程式. 设系统 S 在初始时刻 t_0 的统计算符是 ρ_0, 把这个混合态设想为 S 在大系统 $S\oplus\overline{S}$ 的纯粹态 $|\Phi_0(S\overline{S})\rangle\rangle$ 下所处的状态，并假定在 t_0 以后的时间，系统 $S\oplus\overline{S}$ 以及 S 都是自然发展的 (这意味着在 $t>t_0$ 以后 S 与 $\overline{S}$ 之间不存在相互作用)，故系统 $S\oplus\overline{S}$ 在时刻 t 的态矢量为

$$|\Phi_t(S\overline{S})\rangle\rangle=T(t,t_0)T_{\overline{S}}(t,t_0)|\Phi_0(S\overline{S})\rangle\rangle\quad(t>t_0)\,,$$

其中 $T(t,t_0)$ 及 $T_{\overline{S}}(t,t_0)$ 分别是描写 S 及 $\overline{S}$ 的态矢量随时间自然发展的算符. 在 $|\Phi_t(S\overline{S})\rangle\!\rangle$ 下, S 所处的状态就是它从时刻 t_0 自然地发展到时刻 t 的状态. 根据 (217) 及 (218) 式, 这个状态的统计算符是

$$\rho(t)=\sum_{\alpha,\alpha'}|\alpha\rangle\langle\alpha'|\langle\phi_{\alpha'}(\overline{S},t)|\phi_\alpha(\overline{S},t)\rangle\,, \tag{219}$$

其中 $\phi_\alpha(\overline{S},t)$ 由下式决定

$$|\Phi_t(S\overline{S})\rangle\!\rangle=\sum_\alpha|\alpha\rangle|\phi_\alpha(\overline{S},t)\rangle\,. \tag{220}$$

在初始时刻, (219) 及 (220) 式为

$$\rho_0=\sum_{\alpha,\alpha'}|\alpha\rangle\langle\alpha'|\langle\phi_{\alpha'}(\overline{S})|\phi_\alpha(\overline{S})\rangle\,,$$

$$|\Phi_0(S\overline{S})\rangle\!\rangle=\sum_\alpha|\alpha\rangle|\phi_\alpha(\overline{S})\rangle\,,$$

因此, 按照 (220) 式有

$$T(t,t_0)T_{\overline{S}}(t,t_0)\sum_\alpha|\alpha\rangle|\phi_\alpha(\overline{S})\rangle=\sum_\alpha|\alpha\rangle|\phi_\alpha(\overline{S},t)\rangle\,,$$

故

$$|\phi_\alpha(\overline{S},t)\rangle=\sum_{\alpha'}T_{\overline{S}}(t,t_0)|\phi_{\alpha'}(\overline{S})\rangle\langle\alpha|T(t,t_0)|\alpha'\rangle\,,$$

$$\langle\phi_{\alpha'}(\overline{S},t)|\phi_\alpha(\overline{S},t)\rangle$$

$$=\sum_{\alpha''\alpha'''}\langle\alpha|T(t,t_0)|\alpha''\rangle\langle\alpha'''|\big(T(t,t_0)\big)^\dagger|\alpha'\rangle\langle\phi_{\alpha'''}(\overline{S})|\phi_{\alpha''}(\overline{S})\rangle$$

$$=\langle\alpha|T(t,t_0)\rho_0\big(T(t,t_0)\big)^\dagger|\alpha'\rangle\,.$$

由此及 (219) 式得出

$$\rho(t)=T(t,t_0)\rho_0\big(T(t,t_0)\big)^\dagger\,, \tag{221}$$

求时间微商并利用 $T(t,t_0)$ 的微分方程有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(t)=\widehat{H}(t)\rho(t)-\rho(t)\widehat{H}(t)\,, \tag{222}$$

其中 $\widehat{H}(t)$ 是系统 S 的哈密顿量算符. 这个方程式就是统计算符的运动方程, 它是与刘维方程相应的量子力学方程式.

习题 设系统处在由如下的统计算符 ρ 的状态:

$$\rho=a|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|+b|\Psi_\beta\rangle\langle\Psi_\beta|\,,$$

其中 a 与 b 都是正数并且 $a+b=1$, $|\Psi_\alpha\rangle$ 与 $|\Psi_\beta\rangle$ 是两个线性无关并且归一的态矢量, 但不是互相正交的. (1) 求在 ρ 下发现系统处在 $|\Psi_\alpha\rangle$ 的概率. (2) 把 ρ 表示为本节正文 (216) 式的形式.

解 (1) 由于 $\mathrm{Sp}(\rho)=a\mathrm{Sp}(|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|+b\mathrm{Sp}(|\Psi_\beta\rangle\langle\Psi_\beta|)=1$, 故发现系统处在 $|\Psi_\alpha\rangle$ 的概率为

$$W_\alpha=\mathrm{Sp}(|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|\rho)=a+(1-a)|\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle|^2\,.$$

类似地, 发现系统处在 $|\Psi_\beta\rangle$ 的概率是

$$W_\beta=b+(1-b)|\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle|^2\,.$$

由于 $\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle\neq 0$, 当系统处在 $|\Psi_\alpha\rangle$ 时有一定的概率被发现处在 $|\Psi_\beta\rangle$, 而当它处在 $|\Psi_\beta\rangle$ 时也有一定的概率被发现处在 $|\Psi_\alpha\rangle$, 这导致 $W_\alpha+W_\beta$ 大于 1.

(2) 为了把 ρ 表示为正文 (216) 式的形式, 应对 $|\Psi_\alpha\rangle$ 及 $|\Psi_\beta\rangle$ 作线性组合, 以构成 ρ 的正交归一的本征右矢 $|\Psi_1\rangle$ 与 $|\Psi_2\rangle$, 结果得到

$$\rho=\rho_1|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1|+\rho_2|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2|\,,$$

其中

$$\rho_1=\frac{1}{2}+\frac{(a-b)}{2}\sqrt{1+\frac{4ab}{(a-b)^2}|\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle|^2}\,,$$

$$\rho_2 = 1 - \rho_1 ,$$

$$|\Psi_1\rangle = x_\alpha |\Psi_\alpha\rangle + x_\beta |\Psi_\beta\rangle ,$$

$$|\Psi_2\rangle = y_\alpha |\Psi_\alpha\rangle + y_\beta |\Psi_\beta\rangle ,$$

$$\frac{1}{x_\alpha} = \sqrt{1 + \Big(\frac{b}{\rho_1 - b}\Big)^2 |\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle|^2} ,$$

$$x_\beta = x_\alpha \Big(\frac{b}{\rho_1 - b}\Big) \langle\Psi_\beta|\Psi_\alpha\rangle ,$$

$$y_\alpha = y_\beta \Big(\frac{a}{\rho_2 - a}\Big) \langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle ,$$

$$\frac{1}{y_\beta} = \sqrt{1 + \Big(\frac{a}{\rho_2 - a}\Big)^2 |\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle|^2} .$$

§ 11　向经典力学极限的过渡

虽然量子力学的观念和原理与经典力学极不相同，但是运动方程和量子条件以及构成力学量的算符的原则又体现着经典对应的精神，当 $\hbar$ 可以看作可忽略的小量时，有可能用坐标动量都近似地具有确定值的波函数即经典波包来描写粒子按经典轨道的运动. 这就要求薛定谔方程保证，当 $\hbar$ 趋于零时，经典波包随时间的变化保持为经典波包，而且坐标动量值近似地满足经典运动方程. 现在来证明这一点.

现在只需要考虑空间自由度 (自旋随 $\hbar \to 0$ 而消失)，设 $(q_1, q_2, \cdots, q_s)$ 是独立的坐标，$\Phi(q_1, \cdots, t)$ 和 $W(q_1, \cdots, t)$ 分别代表系统在时刻 t 的波函数和权重函数，于是 $|\Phi(q,t)|^2 W(q,t)\mathrm{d}q$ 代表在时刻 t(在状态 $\Phi(q,t)$ 下) 发现坐标值在 $q_1, q_2, \cdots$ 附近 $\mathrm{d}q$ 的相对概率. 根据 §7，薛定谔方程和正则动量的算子应该写成

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \{W(q,t)^{1/2} \Phi(q,t)\} = W(q,t)^{1/2} \widehat{H}(q, \widehat{p}, t) \Phi(q,t) , \qquad (223)$$

$$\widehat{p}_j = [W(q,t)]^{-1/2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_j}\right)[W(q,t)]^{1/2}\,. \tag{224}$$

在 (223) 式中的 $\widehat{H}(q,\widehat{p},t)$ 是系统的哈密顿量算子，要记住它是厄米的. 设 $W(q,t)^{1/2}\Phi(q,t)$ 的模和相角分别是 $A(q,t)$ 和 $S(q,t)/\hbar$, 则

$$W(q,t)^{1/2}\Phi(q,t) = A(q,t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}S(q,t)/\hbar}\,, \tag{225}$$

$$\widehat{p}_j\Phi(q,t) = \Phi(q,t)\left\{-\frac{\mathrm{i}\hbar}{A}\frac{\partial A}{\partial q_j}+\frac{\partial S}{\partial q_j}\right\}, \tag{226}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\{W(q,t)^{1/2}\Phi(q,t)\right\}$$

$$= W(q,t)^{1/2}\Phi(q,t)\left\{\frac{\mathrm{i}\hbar}{A}\frac{\partial A}{\partial t}-\frac{\partial S}{\partial t}\right\}. \tag{227}$$

故 (223) 式变为

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{A}\frac{\partial A}{\partial t}-\frac{\partial S}{\partial t} = \Phi(q,t)^{-1}\widehat{H}(q,\widehat{p},t)\Phi(q,t)\,. \tag{228}$$

现在假定 $\hbar$ 可以看作极为微小的量，而且如下的条件成立：$\left|\frac{\hbar}{A}\frac{\partial A}{\partial q_j}\right| << \left|\frac{\partial S(q,t)}{\partial q_j}\right|$，或者

$$\left|\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial q_j}\right| << \frac{1}{\hbar}\left|\frac{\partial S(q,t)}{\partial q_j}\right|\,. \tag{229}$$

这时由 (226) 式可知，$\Phi(q,t)$ 被 $\widehat{p}_j$ 作用的结果近似地等于被 $\partial S/\partial q_j$ 乘，把算子 $\widehat{H}(q,\widehat{p},t)$ 按 $(\widehat{p}_j-\partial S/\partial q_j)$ 的方幂展开，注意它的厄米性，保留到一次项时有

$$\widehat{H}(q,\widehat{p},t)\Phi(q,t) \approx H_c(q,p,t)\Phi(q,t)$$
$$+\frac{1}{2}\sum_j\left\{(\widehat{p}_j-p_j)\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j}+\mathrm{h.c.}\right\}\Phi(q,t)\,, \tag{230}$$

其中

$$p_l \equiv \frac{\partial S}{\partial q_l}\,. \tag{231}$$

$H_c(q,p,t)$ 即是哈密顿量算子 $\widehat{H}(q,\widehat{p},t)$ 随各个 $\widehat{p}_j$ 换为 p_j 而成的函数，因此它作为 (q_j,p_i) 的函数正是系统的经典哈密顿量 (如果仍然含有 $\hbar$, 就在其中令 $\hbar$ 为零). (230) 式的最末项可改写为

$$\frac{1}{2}\sum_j\left\{\left[(\widehat{p}_j-p_j),\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j}\right]\right\}\Phi(q,t)$$

$$+\sum_j\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j}\left(-\frac{\mathrm{i}\hbar}{A}\frac{\partial A}{\partial q_j}\right)\Phi(q,t)$$

$$=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2A^2}\Phi(q,t)\sum_j\left\{A^2\frac{\partial}{\partial q_j}\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j}+\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j}\frac{\partial A^2}{\partial q_j}\right\}$$

$$=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2A^2}\Phi(q,t)\sum_j\frac{\partial}{\partial q_j}\left\{A^2\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j}\right\}.$$

因此在准到 $\hbar$ 的一次项时，(228) 式给出

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{A}\frac{\partial A}{\partial t}-\frac{\partial S}{\partial t}=H_c(q,p,t)$$

$$-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2A^2}\sum_j\frac{\partial}{\partial q_j}\left\{A^2\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j}\right\}. \qquad (232)$$

由此比较实虚部可求得 S 和 A^2 遵守的方程式，即

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=H_c\Big(q,\frac{\partial S}{\partial q},t\Big), \qquad (233)$$

$$\frac{\partial A^2}{\partial t}=-\sum_j\frac{\partial}{\partial q_j}\left\{A^2\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j}\right\}_{p_l=\partial S/\partial q_l}. \qquad (234)$$

(233) 式是经典力学中的哈密顿－雅可比方程，$S(q,t)$ 是系统的作用量函数. 按照经典力学，概率分布 ρ 的连续性方程是

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\sum_j\frac{\partial}{\partial q_j}(\rho\dot{q}_j),$$

其中 $\dot{q}_j$ 是广义速度，它作为 (q,t) 的函数正是 $\left(\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j}\right)_{p_l=\partial S/\partial q_l}$. 所以 (234) 式表明概率分布遵从经典力学的定律. 上面从薛定谔方

程推导 (233), (234) 式时，引用了 (229) 式的条件，这是要求 $A(q,t)$ 随 q 的变化足够缓慢，即当 q_j 改变一个“波长” $\hbar/p_j$ 时，A 的改变甚小于它本身的值，或者说，当 A 随 q 显示出一些改变时 (也是相对它本身的值而言)，作用量 S 的改变甚大于 $\hbar$. 在这样的条件下，薛定谔方程就可用式 (233) 和 (234) 来代替，它的解 $A\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}$ 或者相应的 $\Phi(q,t)$ 称为类经典波函数.

类经典波函数的经典性质正是在于：由它确定的坐标值的分布随时间的变化遵守经典定律，这一般都不意味着经典轨道运动，有些类经典波函数甚至代表薛定谔方程的精确解，自由粒子的德布罗意波就是这种例子. 要用 (233) 和 (234) 式描述经典轨道运动，必须挑选它们的经典波包解. 如果在某个初始时刻实现了一个经典波包，那么由方程 (233) 及 (234) 可证明，该波包在 (229) 式成立的时间内仍然是经典波包，而且坐标和动量值满足经典正则方程. 假定在初始波包中 A^2 只在一个足够狭小的区域不为零，而且动量值的分布也足够集中，随着时间的变化只要条件 (229) 式仍然成立，则 (234) 式表明 A^2 只在一个运动的狭小区域内不为零. 系统在时刻 t 的坐标和动量值可表示为 (设波函数已归一)

$$
\begin{aligned}
q_j(t) &= \int W(q',t)\mathrm{d}q'|\Phi(q',t)|^2 q'_j = \int q'_j A^2(q',t)\mathrm{d}q' \,, \\
p_j(t) &= \int W(q',t)\mathrm{d}q'\Phi^*(q',t)\widehat{p}_j\Phi(q',t) \\
&\approx \int \frac{\partial S(q',t)}{\partial q'_j} A^2(q',t)\mathrm{d}q' = \frac{\partial S(q,t)}{\partial q_j} \,,
\end{aligned}
$$

求 $q_j(t)$ 的时间微商有

$$
\begin{aligned}
\dot{q}_j(t) = &-\sum_l \int q'_j \mathrm{d}q' \frac{\partial}{\partial q'_l} \\
&\times \left\{ A^2(q',t)\left(\frac{\partial H_c(q',p',t)}{\partial p'_l}\right)_{p'=\partial S(q',t)/\partial q'} \right\} \,,
\end{aligned}
$$

即

$$\dot{q}_j(t) = \frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_j}\,, \tag{235}$$

其中各个 p_l 即是 $\partial S(q,t)/\partial q_l$. 再用这个结果求 p_j 的时间微商得

$$\begin{aligned}\dot{p}_j(t) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial S(q,t)}{\partial q_j} = \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial S(q,t)}{\partial q_j} + \sum_l \frac{\partial^2 S(q,t)}{\partial q_l \partial q_j}\dot{q}_l \\ &= -\frac{\partial H_c(q,\partial S/\partial q,t)}{\partial q_j} + \sum_l \frac{\partial^2 S(q,t)}{\partial q_l \partial q_j}\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial p_l} \\ &= -\frac{\partial H_c(q,p,t)}{\partial q_j}\,,\end{aligned} \tag{236}$$

最后一行的量是在确定的 $(p_1,p_2,\cdots,p_s)$ 下对于 q_j 的偏微商.

在以上的讨论中认定系统的状态是纯粹态，实际上也可从混合态的观点得出同样的结果. 我们可以按照 §10 的方法把研究的系统的混合态看成是它在一个扩大系统的一定纯粹态下所处的状态，对于大系统仍然按照以上的方法处理，于是得到适合于大系统的哈密顿－雅可比方程和概率分布的运动方程，以及关系式 (231). 由于从初始时刻以后，我们所研究的系统与扩大的部分没有相互作用，所以总的作用量是这两个部分的作用量之和，并且各自遵从其相应的哈密顿－雅可比方程. 概率分布是这两个部分的概率分布之积，并且各自遵从由相应的作用量函数确定的方程 (234)，两个部分的正则动量和作用量函数之间的关系也和 (231) 式相同，唯一要改变的是把方程 (234) 中的 A^2 直接换成概率分布函数. 推导 (235), (236) 式的方法也不变，只是要用特殊的统计算符代替经典波包来描写经典轨道运动.

习题 证明算子 $\widehat{F}(q,\hat{p},t)$ 与 $\widehat{G}(q,\hat{p},t)$ 的对易关系式在经典波包下的平均值按 $\hbar$ 的方幂展开时，最低次项等于经典泊松括号乘以 $\mathrm{i}\hbar$.

解 设 $\Phi(q,t)$ 是经典波包 (已经归一)，用 q_j^c, p_j^c 代表坐标、动量在时刻 t 的平均值

$$q_j^c(t) = \int q_j A^2(q,t)\mathrm{d}q\,,$$

$$p_j^c(t) = \int W(q,t)\Phi^*(q,t)\widehat{p}_j\Phi(q,t)\mathrm{d}q\,,$$

由于 $\Phi(q,t)$ 是经典波包，它表示系统以 (q^c,p^c) 为坐标、动量的近似确定值. 把 $W(q,t)^{1/2}\Phi(q,t)$ 写成 $A(q,t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}S(q,t)/\hbar}$ (即 (225) 式的形式)，令 $p_j \equiv \partial S(q,t)/\partial q_j$, 则

$$(\widehat{p}_j - p_j)\Phi(q,t) = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{A}\frac{\partial A}{\partial q_j}\Phi(q,t)\,.$$

因此为了把 $[\widehat{F},\widehat{G}]$ 的平均值计算到 $\hbar$ 的一次项，把 $\widehat{F}$ 及 $\widehat{G}$ 按 $(\widehat{p}_j - p_j)$ 的方幂展开保留到一次项即可. 故

$$\widehat{F}(q,\widehat{p},t) \approx F_c(q,p,t)$$

$$+\frac{1}{2}\sum_j\left\{(\widehat{p}_j - p_j)\frac{\partial F_c(q,p,t)}{\partial p_j} + \frac{\partial F_c(q,p,t)}{\partial p_j}(\widehat{p}_j - p_j)\right\}\,,$$

$$\widehat{G}(q,\widehat{p},t) \approx G_c(q,p,t)$$

$$+\frac{1}{2}\sum_j\left\{(\widehat{p}_j - p_j)\frac{\partial G_c(q,p,t)}{\partial p_j} + \frac{\partial G_c(q,p,t)}{\partial p_j}(\widehat{p}_j - p_j)\right\}\,,$$

以及

$$[\widehat{F}(q,\widehat{p},t),\widehat{G}(q,\widehat{p},t)]$$

$$\approx \mathrm{i}\hbar\sum_j\left\{\frac{\partial F_c(q,p,t)}{\partial q_j}\frac{\partial G_c(q,p,t)}{\partial p_j} - \frac{\partial F_c(q,p,t)}{\partial p_j}\frac{\partial G_c(q,p,t)}{\partial q_j}\right\}\,.$$

由此求平均值得出

$$\overline{[\widehat{F},\widehat{G}]}=\int W(q,t)\mathrm{d}q\Phi^*(q,t)[\widehat{F}(q,\widehat{p}),\widehat{G}(q,\widehat{p})]\Phi(q,t)$$

$$=\mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}qA^2(q)\sum_j\left\{\frac{\partial F_c(q,p,t)}{\partial q_j}\frac{\partial G_c(q,p,t)}{\partial p_j}\right.$$

$$\left.-\frac{\partial F_c(q,p,t)}{\partial p_j}\frac{\partial G_c(q,p,t)}{\partial q_j}\right\},$$

即

$$\overline{[\widehat{F},\widehat{G}]}\approx\mathrm{i}\hbar\sum_j\left\{\frac{\partial F_c(q^c,p^c,t)}{\partial q_j^c}\frac{\partial G_c(q^c,p^c,t)}{\partial p_j^c}\right.$$

$$\left.-\frac{\partial F_c(q^c,p^c,t)}{\partial p_j^c}\frac{\partial G_c(q^c,p^c,t)}{\partial q_j^c}\right\}.$$

参 考 文 献

[1] Dirac P A M. The Principle of Quantum Mechanics (4ed). London: Oxford University Press, 1958.

[2] Pauli Lectures on Physics: 5. Wave Mechanics. The Massachussets Institute of Technology, 1973.

[3] Landau L D, Lifshitz E M. Quantum Mechanics (3rd, revised edition). Oxford: Pergamon Press, 1977.

[4] Yang Ze-sen, Li Xian-hui, Qi Hui, Deng Wei-zhen (杨泽森，李先卉，齐辉，邓卫真). Phys. Rev., 1993, A47: 2574.

第四章　玻色统计法与费米统计法. 二次量子化理论

§1　玻色统计法与费米统计法

早在 1924 年，玻色就提出了玻色统计法，其中认为，相同粒子是不可分辨的，而同时处在一个单粒子态上的粒子的数目则不受限制. 所谓不可分辨是指粒子的交换不改变总系统的状态. 1925 年，泡利提出了关于电子的不相容原理，即不能有两个或更多的电子同时处在同一个态. 不久费米 (1926 年) 根据这一原理以及相同粒子的不可分辨性建立了费米统计法. 实验表明，具有整数的自旋值 (以 $\hbar$ 为单位) 的粒子遵从玻色统计，具有半整数自旋的粒子则遵从费米统计，直到现在未曾发现同时违反这两种统计法的微观粒子. 因此，微观粒子按照统计法而分成玻色子和费米子.

相同粒子的不可分辨性与不相容原理都是与经典力学相抵触的，量子力学则可以容纳不可分辨性，并由此自然地得出只有玻色统计和费米统计的结论. 这里要注意，粒子相同当然是不可分辨性的前提，但没有理论上的理由断言相同粒子是不可分辨的，现在要做的事情是把不可分辨性当作原理而考察它对于多粒子系统的波函数产生的限制. 用 $\Psi(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)$ 代表 N 个相同粒子的 (ξ) 表象的波函数，在交换粒子时状态保持不变，因而波函数只能改变一个常数因子，即

$$\Psi(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)=\lambda_{12}\Psi(\xi_2,\xi_1,\cdots,\xi_N),\quad |\lambda_{12}|=1. \tag{1}$$

再交换这对粒子，得出 $\lambda_{12}^2 = 1$, 故

$$\lambda_{12} = \pm 1\,, \tag{2}$$

注意

$$\begin{aligned}\Psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \cdots, \xi_N) &= \lambda_{13}\Psi(\xi_3, \xi_2, \xi_1, \cdots, \xi_N) \\ &= \lambda_{23}\lambda_{12}\lambda_{23}\Psi(\xi_3, \xi_2, \xi_1, \cdots, \xi_N)\,,\end{aligned}$$

可见

$$\lambda_{12} = \lambda_{13} = \lambda_{14} = \cdots \lambda_{1N}\,.$$

同样推下去，可知总波函数只能是全对称或全反对称的. 再由叠加原理推知，对一定系统来说，波函数空间或者只包含全对称波函数，或者只包含全反对称波函数，而且 λ_{ij} 的值与 N 的大小无关. 因此波函数的对称或反对称的性质取决于粒子的类型. 按照粒子的这个性质，可以把它们分成两类，一类粒子的多体波函数是全对称的，另一类粒子的多体波函数是全反对称的.

既然如此，由相同粒子组成的系统的波函数空间的算符，必须对粒子交换保持不变，因为不符合这个要求的算符作用于全对称波函数或全反对称波函数的结果，将不再是全对称或全反对称的. 特别是如果哈密顿量算符在粒子交换下没有不变性，那么全对称或全反对称波函数随着时间的变化将会变成不再是全对称或全反对称的.

由全对称波函数描写的粒子显然不遵从泡利不相容原理. 例如一种最简单的全对称波函数是

$$\psi_a(\xi_1)\psi_a(\xi_2)\cdots\psi_a(\xi_N)\,,$$

这个波函数表示任意 N 个粒子处在同一个单粒子态 ψ_α 上，可见这种类型的粒子是玻色子. 不难看出，表示系统中有两个或多个相同粒子处在同一个单粒子态的波函数对于这些粒子的交换必然是对称的，因此与系统的全反对称波函数正交，即是说，在全

反对称波函数描写的状态下发现两个或多个粒子处于同一个单粒子态的概率等于零. 可见由全反对称波函数描述的粒子遵从泡利不相容原理, 因此是费米子. 总之, 以相同粒子的不可分辨性为依据, 量子力学能够表明, 微观粒子可分成玻色子和费米子两种类型, 由相同玻色子组成的系统用全对称波函数描述, 由相同费米子组成的系统则用全反对称波函数描述. 至于粒子遵从的统计法与自旋值的关系, 在非相对论性量子力学中, 则当作经验事实看待. 当各粒子几乎是按经典轨道运动时, 可不考虑不可分辨性, 无论是玻色统计或费米统计, 都等价于经典统计.

最后, 让我们用单粒子波函数的积来构成较简单的全对称和全反对称波函数. 设 $\psi_1, \psi_2, \cdots$ 是正交归一的单体波函数, 用它们的积可构成一个 N 体函数

$$\{\underbrace{\psi_1(\xi_1)\cdots\psi_1(\xi_{N_1})}_{N_1\text{ 个因子}}\}\{\underbrace{\psi_2(\xi_{N_1+1})\cdots\psi_2(\xi_{N_1+N_2})}_{N_2\text{ 个因子}}\}\cdots\{\underbrace{\psi_k\cdots\psi_k(\xi_N)}_{N_k\text{ 个因子}}\},$$

它表示第 1 至第 N_1 号粒子处在 ψ_1 上, 第 N_1+1 至第 N_1+N_2 号粒子处在 ψ_2 上等等 $(\sum_j N_j = N)$, 它不是全对称的. 交换不同 ψ_j 之间的粒子号码, 可得到 $N!/(N_1!N_2!\cdots N_k!)$ 个正交归一的项, 相加起来就是全对称波函数, 其归一形式为

$$\begin{aligned}&\Psi_{N_1N_2\cdots N_k}(\xi_1\cdots\xi_N)\\&=\left(\frac{N!}{N_1!\cdots N_k!}\right)^{-1/2}\sum_{P_{\mathrm{E}}}P_{\mathrm{E}}\{\psi_1(\xi_1)\cdots\psi_1(\xi_{N_1})\}\\&\quad\times\{\psi_2(\xi_{N_1+1})\cdots\psi_2(\xi_{N_1+N_2})\}\cdots\{\psi_k\cdots\psi_k(\xi_N)\},\end{aligned}\tag{3}$$

其中 P_{E} 是关于不同 ψ_j 上的粒子号码的置换算符. 求和遍及所有这样的置换. 这样的波函数表示有 N_1 个粒子处在 ψ_1, N_2 个粒子处在 $\psi_2, \cdots, N_k$ 个粒子处在 ψ_k. 一般的全对称波函数总是可以表示为这种类型的波函数的叠加.

从 N 个正交归一的单体波函数 $\psi_{i_1},\psi_{i_2},\cdots,\psi_{i_N}$ 作出积

$$\psi_{i_1}(\xi_1)\psi_{i_2}(\xi_2)\cdots\psi_{i_N}(\xi_N),$$

再对 N 个粒子的号码进行置换，可得 $N!$ 个正交归一的积，把由奇置换给出的积乘以 -1, 然后把这 $N!$ 加起来就得到一个全反对称波函数，记为

$$\begin{aligned}&\Psi_{\{1_{i_1}1_{i_2}\cdots1_{i_N}\}}(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)\\&=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P(-1)^{[P]}P\psi_{i_1}(\xi_1)\psi_{i_2}(\xi_2)\cdots\psi_{i_N}(\xi_N),\end{aligned}\tag{4}$$

其中 P 是关于 N 个粒子号码的置换算符，$[P]$ 按照置换的奇偶性而取奇数或偶数，求和遍及一切不同的置换. 一般的全反对称波函数总是可以表示为这种类型的波函数的叠加. 例如

$$\Psi_{\{1_41_51_6\}}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)=\frac{1}{\sqrt{3!}}\sum_P(-1)^{[P]}P\psi_4(\xi_1)\psi_5(\xi_2)\psi_6(\xi_3),$$

$$\begin{aligned}\Psi_{\{1_41_61_5\}}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)&=\frac{1}{\sqrt{3!}}\sum_P(-1)^{[P]}P\psi_4(\xi_1)\psi_6(\xi_2)\psi_5(\xi_3)\\&=-\Psi_{\{1_41_51_6\}}(\xi_1,\xi_2,\xi_3).\end{aligned}$$

§2 相同玻色子系统的二次量子化理论

根据上节所述，对于由相同微观粒子组成的系统，只要选定一组正交归一和完备的单体波函数 $\{\psi_1,\psi_2,\cdots\}$, 并且按照统计法的要求构成如 (3) 式或 (4) 式所示的基本波函数，就可以用它们的叠加表示任意波函数. 这种基本波函数是由处在 $\psi_1,\psi_2,\cdots$ 上的粒子数目 $N_1,N_2,\cdots$ 来表示的，因此有可能建立一种数学形式，使这些数目变成力学量 $\hat{n}_1,\hat{n}_2,\cdots$ 的本征值，这意味着，$\hat{n}_1,\hat{n}_2,\cdots$

的全部不同本征右矢就代表总粒子数取一切值的系统的全部独立态矢量，以它们为基矢的线性空间是一个广义态矢量空间，具有一定总粒子数的系统的态矢量只是形成其中的一个子空间 (总粒子数不同的基矢互相正交). 在这种基矢之间可以通过 $N_1, N_2, \cdots$ 值的增减而相互变换，这种增减又可以用粒子数的产生和消灭算符来描写，因此作用于广义态矢量空间的各种算符都可以用粒子数的产生和消灭算符表示出来. 所谓二次量子化理论就是把粒子数看作力学量并以粒子的产生、消灭算符为基本算符的理论形式. 对于只研究粒子总数守恒的非相对论量子力学来说，二次量子化理论是通常的理论的改写，它对于含有很多相同粒子的系统有十分广泛的应用，在相对论性场论中，由于必须把粒子数当作力学量来处理，这种理论形式变成了场的量子理论的基本形式. 这里只讲非相对论二次量子化理论，本节讲玻色子系统的情形.

2.1 粒子数基矢和广义态矢量空间

设 $\{\psi_i(\xi)\}$ 是一组正交归一和完备的单粒子波函数，其中 ξ 同时代表空间坐标和自旋变数，i 同时代表空间及自旋态的量子数. 为了方便，假设 i 的数值是分立的，并把它们按 $1,2,3\cdots$ 编号. 从这组单体波函数中取出 $\psi_{i_1}, \psi_{i_2}, \cdots, \psi_{i_N}$(允许重复)，经过对称化就可得到 N 体基本波函数. 在固定 N 时，不同的取法给出互相正交的基本波函数. 例如由 ψ_4 与 ψ_4 给出的两体基本波函数是 $\psi_4(\xi_1)\psi_4(\xi_2)$, 表示两个粒子都在 ψ_4. 又如，由 ψ_1, ψ_3 和 ψ_4 给出的三体基本波函数

$$\frac{1}{\sqrt{6}}\{\psi_1(\xi_1)\psi_3(\xi_2)\psi_4(\xi_3)+\psi_1(\xi_1)\psi_3(\xi_3)\psi_4(\xi_2)+\psi_1(\xi_2)\psi_3(\xi_1)\psi_4(\xi_3)$$
$$+\psi_1(\xi_2)\psi_3(\xi_3)\psi_4(\xi_1)+\psi_1(\xi_3)\psi_3(\xi_1)\psi_4(\xi_2)+\psi_1(\xi_3)\psi_3(\xi_2)\psi_4(\xi_1)\}$$

表示 ψ_1,ψ_3 和 ψ_4 各有一粒子. 一般地，只要把各个 ψ_i 出现的次数 N_i 给定了，则相应的基本波函数就确定了. 形式上可认为每

个 ψ_i 都出现，但 N_i 的值可以是 0. 因此基本波函数可写成

$$\Psi_{N_1N_2\cdots}(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)=\sqrt{\frac{N_1!N_2!\cdots}{N!}}\sum_{P_{\mathrm{E}}}P_{\mathrm{E}}\{\underbrace{\psi_1(\xi_1)\cdots\psi_1(\xi_1)}_{N_1\text{ 个}}\}$$

$$\times\{\underbrace{\psi_2(\xi_{N_1+1})\cdots\psi_2}_{N_2\text{ 个}}\}\cdots,$$

其中每个 N_i 的允许值都是包括 0 在内的一切非负整数. 这些量的物理意义是：当系统处在 $\Psi_{N_1N_2\cdots}$ 所代表的状态时，$N_1,N_2,\cdots$ 分别是处在 $\psi_1,\psi_2,\cdots$ 的粒子的数目. 对于特定的 N 体系统来说，满足条件 $\sum_i N_i=N$ 的全部基本波函数 $\Psi_{N_1N_2\cdots}(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)$ 构成波函数空间的正交归一完备组，因此任意 N 体波函数 Ψ 可表示为

$$\Psi(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)=\sum_{N_1N_2\cdots}\Psi_{N_1N_2\cdots}(\xi_1,\cdots,\xi_N)C(N_1,N_2,\cdots),$$

系数 $C(N_1N_2\cdots)$ 本来只在条件 $\sum_i N_i=N$ 下才有定义，但我们认为它对于每个 N_i 的一切允许值都有定义，只是当 $\sum_i N_i$ 不等于 N 时其值为零，即

$$C(N_1,N_2,\cdots)=\begin{cases}(\Psi_{N_1N_2\cdots},\Psi), & \text{当}\sum_i N_i=N;\\ 0, & \text{当}\sum_i N_i\neq N.\end{cases}$$

因此对于上面的展开式中的求和范围不必加以限制. 这样定义的 $C(N_1,N_2,\cdots)$ 可以称为 Ψ 在 $(N_1N_2\cdots)$ 表象的波函数或简单地说是 Ψ 在粒子数表象的波函数，其模平方代表在 Ψ 下发现系统处在 $\Psi_{N_1N_2\cdots}$ 的概率，而且 Ψ_A 与 Ψ_B 的内积可表示为

$$(\Psi_A,\Psi_B)=\sum_{N_1N_2\cdots}C_A^*(N_1,N_2,\cdots)C_B(N_1,N_2,\cdots).$$

值得注意，当 Ψ_A 与 Ψ_B 属于粒子总数不同的系统时，这个内积公式仍然有意义 (这时结果为零)，这正是粒子数表象的波函数的特殊之点 (用 ξ 表象的波函数无法建立这样的内积概念).

显然，基本波函数 $\Psi_{N_1'N_2'\cdots}$ 在粒子数表象的波函数为

$$C_{N_1'N_2'\cdots}(N_1,N_2,\cdots)=\delta_{N_1'N_1}\delta_{N_2'N_2}\delta_{N_3'N_3}\cdots,$$

它们之间的内积是

$$\sum_{N_1N_2\cdots}C^*_{N_1'N_2'\cdots}(N_1,N_2,\cdots)C_{N_1''N_2''\cdots}(N_1,N_2,\cdots)=\delta_{N_1'N_1''}\delta_{N_2'N_2''}\cdots.$$

这些基本波函数的全体代表总粒子数取一切值的系统的全部独立波函数 (空系统的波函数是 $C_{0_10_2\cdots}(N_1,N_2,\cdots)=\delta_{0N_1}\delta_{0N_2}\cdots$. 我们把这些波函数的任意线性组合所成的线性空间称为广义波函数空间 (于是每一个具有一定粒子总数的系统的波函数只形成其中的一个子空间)，其中任何两个广义波函数的内积仍按上面的方法定义. 为了方便，再让广义波函数空间对应于一个广义右矢量空间，对应关系如下

$$\begin{aligned}
&C_{N_1'N_2'\cdots}(N_1,N_2,\cdots)\longleftrightarrow|N_1'N_2'\cdots\rangle,\\
&\alpha C_{N_1'N_2'\cdots}(N_1,N_2,\cdots)+\beta C_{N_1''N_2''\cdots}(N_1,N_2,\cdots)\\
&\quad\longleftrightarrow\alpha|N_1'N_2'\cdots\rangle+\beta|N_1''N_2''\cdots\rangle,\\
&\langle N_1'N_2'\cdots|N_1''N_2''\cdots\rangle\\
&\quad=\sum_{N_1N_2\cdots}C_{N_1'N_2'\cdots}(N_1,N_2,\cdots)C_{N_1''N_2''\cdots}(N_1,N_2,\cdots)\\
&\quad=\delta_{N_1'N_1''}\delta_{N_2'N_2''}\cdots.
\end{aligned}\tag{5}$$

由于符合条件 $\sum_i N_i=N$ 的全部 $|N_1N_2\cdots\rangle$ 对于总粒子数为 N 的态矢量是完备的，故当 $N_1,N_2,\cdots$ 取一切非负整数时，全体 $|N_1N_2\cdots\rangle$ 构成广义态矢量空间的完备组，所以有

$$\sum_{N_1N_2\cdots}|N_1N_2\cdots\rangle\langle N_1N_2\cdots|=1.\tag{6}$$

基本右矢 $|N_1N_2\cdots\rangle$ 就是广义态矢量的粒子数表象的基矢，可简称为粒子数基矢. 一个任意态矢量 $|\Psi\rangle$ 在粒子数表象的波函数可表示为

$$C(N_1,N_2,\cdots)=\langle N_1N_2\cdots|\Psi\rangle\,. \tag{7}$$

从不同的单体正交完备波函数出发，当然会得到不同的粒子数基矢，它们之间的关系由相应的单体波函数之间的关系决定 (见下小节).

2.2 产生和消灭算符

由于 $(N_1N_2\cdots)$ 的全部允许值决定一组正交归一和完备的基本右矢 $|N_1N_2\cdots\rangle$, 这组右矢可以看作广义态矢量空间的一组算符的共同本征右矢，而 $N_1N_2\cdots$ 是各个算符的本征值. 设 $\hat{n}_1,\hat{n}_2,\cdots$ 是这样的算符，于是

$$\hat{n}_i|N_1N_2\cdots\rangle=N_i|N_1N_2\cdots\rangle\,.$$

利用 (6) 式得

$$\hat{n}_i=\sum_{N_1N_2\cdots}N_i|N_1N_2\cdots\rangle\langle N_1N_2\cdots|\,, \tag{8}$$

它称为处在 ψ_i 上的粒子数算符. 容易证明，这是一组厄米和互相对易的算符，即

$$\hat{n}_i^\dagger=\hat{n}_i\,,$$

$$[\hat{n}_i,\hat{n}_j]=0\,.$$

这正是各个 ψ_i 上的粒子数目构成完整力学量的所必需具有的性质.

(8) 式又可写成

$$\hat{n}_i=a_i^\dagger a_i\,, \tag{9}$$

其中

$$a_i = \sum_{N_1 N_2 \cdots} \sqrt{N_i} |N_1 N_2 \cdots (N_i - 1) \cdots\rangle\langle N_1 N_2 \cdots N_i \cdots|, \tag{10}$$

$$a_i^\dagger = \sum_{N_1 N_2 \cdots} \sqrt{N_i} |N_1 N_2 \cdots N_i \cdots\rangle\langle N_1 N_2 \cdots (N_i - 1) \cdots|$$

$$= \sum_{N_1 N_2 \cdots} \sqrt{N_i + 1} |N_1 N_2 \cdots (N_i + 1) \cdots\rangle\langle N_1 N_2 \cdots N_i \cdots|. \tag{11}$$

这些算符的意义是十分显然的，a_i 是消灭一个处在 ψ_i 上的粒子的算符，即是说，如果被它作用的态是 $\hat{n}_i$ 的本征态，属于本征值 N_i'，那么受作用之后，仍然是 $\hat{n}_i$ 的本征态，属于本征值 $N_i' - 1$，即是在 ψ_i 上的粒子数目减少了 1. 类似地，$a_i^\dagger$ 是产生出一个处在 ψ_i 上的粒子的算符. (10) 及 (11) 式也可写成

$$a_i |N_1 N_2 \cdots N_i \cdots\rangle = \sqrt{N_i} |N_1 N_2 \cdots (N_i - 1) \cdots\rangle, \tag{10'}$$

$$a_i^\dagger |N_1 N_2 \cdots N_i \cdots\rangle = \sqrt{N_i + 1} |N_1 N_2 \cdots (N_i + 1) \cdots\rangle, \tag{11'}$$

产生及消灭算符所遵循的对易关系，可从 (10),(11) 式或 (10′),(11′) 式直接推导出来：

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}\,, \tag{12}$$

$$[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0\,. \tag{13}$$

这些对易关系具有非常基本的意义.

利用公式 (11′), 可把基本态矢量写成

$$|N_1 N_2 \cdots\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{N_1}}{\sqrt{N_1!}} \frac{(a_2^\dagger)^{N_2}}{\sqrt{N_2!}} \cdots |0\rangle\,, \tag{14}$$

其中，$|0\rangle$ 是 $|0_1 0_2 \cdots 0_i \cdots\rangle$ 的简写，表示任何一个 ψ_i 上都没有粒子.

现在我们来证明，可以通过产生及消灭算符来表达基本算符

$$|N_1 N_2 \cdots\rangle\langle N_1' N_2' \cdots|,$$

因之可以表达任何算符. 为此, 只需考虑一个特殊的基本算符 $|0\rangle\langle 0|$ (由 (14) 式即可看出这点). 把 $|0\rangle\langle 0|$ 作用于任意的基矢, 有

$$\begin{aligned}|0\rangle\langle 0|N_1N_2\cdots\rangle &= |0\rangle\delta_{0N_1}\delta_{0N_2}\cdots\delta_{0N_i}\cdots \\ &= |N_1N_2\cdots\rangle\delta_{0N_1}\delta_{0N_2}\cdots\delta_{0N_i}\cdots \\ &= \delta_{0\hat{n}_1}\delta_{0\hat{n}_2}\cdots\delta_{0\hat{n}_i}\cdots|N_1N_2\cdots\rangle\,,\end{aligned}$$

故

$$|0\rangle\langle 0| = \delta_{0\hat{n}_1}\delta_{0\hat{n}_2}\cdots\delta_{0\hat{n}_i}\cdots\,,$$

其中, $\hat{n}_1,\hat{n}_2,\cdots$ 是粒子数算符.

以上的描述, 对于任何一套 $\psi_i(\xi)$ 而言都同样是正确的. 当然, 从不同的完备组出发, 将会得到不同的产生算符和消灭算符, 但是容易证明, $\sum_i \psi_i(\xi)a_i$ 或者它的共轭 $\sum_i \psi_i^*(\xi)a_i^\dagger$ 是与完备组的选择无关的, 而且分别是消灭和产生一个处在 ξ 点的粒子的算符. 令

$$\Phi(\xi) = \sum_i \psi_i(\xi)a_i\,,$$

于是

$$\Phi(\xi)^\dagger = \sum_i \psi_i^*(\xi)a_i^\dagger\,. \tag{15}$$

把 $\Phi(\xi_0)^\dagger|0\rangle$ 在 ξ 表象的波函数写出来, 就是

$$\sum_i \psi_i^*(\xi_0)\psi_i(\xi) = \delta(\xi_0-\xi)\,,$$

这是空间坐标的 δ 函数与自旋变数的 δ 符号的乘积. 可见 $\Phi(\xi_0)^\dagger$ 是在 ξ_0 点产生出一个粒子的算符. 相应地, $\Phi(\xi_0)$ 是在 ξ_0 点消灭一个粒子的算符, $\Phi(\xi)^\dagger\Phi(\xi)$ 代表 ξ 点的数密度算符. 与 (12),(13) 式相当的对易关系是

$$[\Phi(\xi),\Phi(\xi')^\dagger] = \delta(\xi-\xi')\,,$$

$$[\Phi(\xi),\Phi(\xi')]=[\Phi(\xi)^\dagger,\Phi(\xi')^\dagger]=0\,. \tag{16}$$

现在来求产生和消灭算符随单体完备组的变换公式. 设从一个新的正交归一完备组 $\varphi_j(\xi)$ 出发得到的产生及消灭算符为 $b_j^\dagger$ 及 b_j, 由于

$$\sum_j \varphi_j(\xi)b_j=\sum_i \psi_i(\xi)a_i\,,$$

以 φ_j^* 遍乘, 并对 ξ 中的坐标变数积分且对其自旋变数求和, 即得

$$b_j=\sum_i\langle\varphi_j|\psi_i\rangle a_i\,,\quad b_j^\dagger=\sum_i\langle\psi_i|\varphi_j\rangle a_i^\dagger\,, \tag{17}$$

这就是所需要的关系式.

2.3 各类算符的表达式. 广义薛定谔方程

下面给出各类算符通过产生及消灭算符表达的公式.

(1)"单体" 型算符

设

$$F=\sum_{p=1}^{N} f(p)\,, \tag{18}$$

其中, $f(p)$ 只涉及第 p 号粒子的变数, 各个 f 对于所属粒子的变数的依赖关系完全相同. 我们来证明 F 可表示成

$$\widehat{F}=\sum_{ik}\langle i|f|k\rangle a_i^\dagger a_k\,, \tag{19}$$

其中, $\langle i|f|k\rangle$ 代表 $\int \mathrm{d}\xi\psi_i^*(\xi)f\psi_k(\xi)$.

先考虑一种最简单的情形. 设 f 是厄米算符, 而且 ψ_k 是 f 的本征态, 使得

$$f\psi_k=f_k\psi_k\,,$$

于是 $\widehat{F}|N_1N_2\cdots\rangle$ 等于

$$(N_1f_1+N_2f_2+\cdots)|N_1N_2\cdots\rangle=\left(\sum_k f_k\widehat{n}_k\right)|N_1N_2\cdots\rangle\,.$$

所以 $\widehat{F}=\sum_k f_k a_k^\dagger a_k$, 这是公式 (19) 的一个特例. 再考虑 ψ_k 不是 f 的本征态的情形, 仍假定 f 是厄米算符, 因之总存在一个正交归一完备组 φ_j, 它们是 f 的本征态, 使得 $f\varphi_j=f'_j\varphi_j$, 于是 $\widehat{F}=\sum_j f'_j b_j^\dagger b_j$, 把公式 (17) 代进来就得到公式 (19). 如果 f 不是厄米算符, 它总是可以看成两个厄米算符的线性组合, 这样就普遍地证明了 (19) 式.

根据公式 (15), 可以把 (19) 写成与单体完备组的选择无关的形式,

$$\widehat{F}=\int \mathrm{d}\xi\Phi(\xi)^\dagger f\Phi(\xi)\,. \tag{20}$$

(2) "两体" 型算符

设

$$G=\sum_{p<q}^{N}g(p,q)=\frac{1}{2}\sum_{p\neq q}^{N}g(p,q)\,,$$

其中 $g(p,q)$ 只依赖于第 p 及第 q 号粒子的变数, 各个 g 对于所属粒子的变数的依赖关系完全相同, 而且 $g(p,q)=g(q,p)$. 直接引用公式 (19) 就可以证明

$$\widehat{G}=\frac{1}{2}\sum_{iklm}\langle ik|g|lm\rangle a_i^\dagger a_k^\dagger a_m a_l\,, \tag{21}$$

其中, $\langle ik|g|lm\rangle$ 代表

$$\int\int \mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\psi_i^*(\xi_1)\psi_k^*(\xi_2)g(1,2)\psi_l(\xi_1)\psi_m(\xi_2)\,.$$

设想将 $g(p,q)$ 按粒子号码 p,q 分离开来, 令

$$g(p,q)=\sum_t u_t(p)v_t(q)+\sum_t u_t(q)v_t(p)\,,$$

于是

$$\widehat{G}=\sum_t \widehat{U}_t\widehat{V}_t-\sum_{q=1}^{N}\sum_t u_t(q)v_t(q)\,, \tag{21'}$$

其中 $\widehat{U}_t=\sum\limits_{p=1}^{N}u_t(p),\widehat{V}_t=\sum\limits_{p=1}^{N}v_t(p)$, 利用 (19) 式及 (12),(13) 式，得

$$\widehat{U}_t\widehat{V}_t=\sum_{im}\langle i|u_tv_t|m\rangle a_i^\dagger a_m$$
$$+\sum_{iklm}\langle i|u_t|l\rangle\langle k|v_t|m\rangle a_i^\dagger a_k^\dagger a_m a_l\,,$$

代回 (21′) 式中，单体项刚好相消，于是

$$\widehat{G}=\sum_{iklm}\sum_t\langle i|u_t|l\rangle\langle k|v_t|m\rangle a_i^\dagger a_k^\dagger a_m a_l\,.$$

把 i 与 k 交换，l 与 m 交换，得到 $\widehat{G}$ 的另一种表达式. 再把两种表达式相加，除以 2，就得出 (21) 式.

写成与单体完备组的选择无关的形式，有

$$\widehat{G}=\int\int \mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\Phi(\xi_1)^\dagger\Phi(\xi_2)^\dagger g(1,2)\Phi(\xi_2)\Phi(\xi_1)\,. \tag{22}$$

在公式 (21) 及 (22) 中，把产生算符与产生算符交换位置，或把消灭算符与消灭算符交换位置，都不引起改变. 现在所选的次序比较容易记忆，而且可以使这些公式与费米子的公式具有相同的形式.

(3)“n 体” 型算符

设 $w(p_1,p_2,\cdots,p_n)$ 是依赖于第 p_1 号，第 p_2 号，$\cdots$ 及第 p_n 号粒子的变数的算符，而且对于这 n 个号码的任何置换都具有对称性，再设

$$W=\sum_{p_1<p_2\cdots<p_n}^{N} w(p_1,p_2,\cdots,p_n)\,,$$

则有

$$\widehat{W}=\frac{1}{n!}\sum_{\substack{i_1 i_2\cdots i_n\\ i'_1 i'_2\cdots i'_n}}\langle i_1 i_2\cdots i_n|w|i'_1 i'_2\cdots i'_n\rangle$$

$$\times a^{\dagger}_{i_1}a^{\dagger}_{i_2}\cdots a^{\dagger}_{i_n}a^{\dagger}_{i'_n}\cdots a_{i'_2}a_{i'_1}\,, \tag{23}$$

或

$$\widehat{W}=\frac{1}{n!}\int\cdots\int \mathrm{d}\xi_1\cdots\mathrm{d}\xi_n$$

$$\times\Phi(\xi_1)^{\dagger}\cdots\Phi(\xi_n)^{\dagger}w(1,2,\cdots,n)\Phi(\xi_n)\cdots\Phi(\xi_1)\,. \tag{24}$$

从公式 (19)—(24) 看到，通常的算符过渡到用产生和消灭算符表达的形式后，适用于含有任何数目粒子的系统. 这很自然，事实上产生及消灭算符的概念本身就是借助于“广义”的态空间而建立起来的. 其次在这些公式中，每一项所包含的产生算符的数目都等于消灭算符的数目，这也是很自然的，因为，在非相对论量子力学中，任何一个力学量的算符作用于系统的任何状态的结果，都属于原来的系统的态空间，因之决不能使粒子数目增加或减少，所以，它过渡到用产生和消灭算符表达的形式后必须与总粒子数算符对易.

借助 (19)—(21) 式可把薛定谔方程和其他方程式过渡到对于含有任何数目的粒子的系统都适用的形式. 设 T 代表单个粒子的动能算符，U 代表势能算符，w 代表两个粒子的相互作用势能的算符，如果多体作用不存在，则总哈密顿量算符可以通过产生及消灭算符表示成

$$H=\sum_{ii'}\langle i|T+U|i'\rangle a^{\dagger}_i a_{i'}+\frac{1}{2}\sum_{iki'k'}\langle ik|w|i'k'\rangle a^{\dagger}_i a^{\dagger}_k a_{k'}a_{i'}\,, \tag{25}$$

或

$$H=\int \mathrm{d}\xi \Phi(\xi)^{\dagger}(T+U)\Phi(\xi)$$

$$+\frac{1}{2}\int\int \mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\Phi(\xi_1)^{\dagger}\Phi(\xi_2)^{\dagger}w(1,2)\Phi(\xi_2)\Phi(\xi_1)\,. \tag{26}$$

薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t)=H\Psi(t)\,. \tag{27}$$

这里，不管粒子总数是多少. 当然，在研究一个特定的系统时，$\Psi(t)$ 就被限制为总粒子数为一定 N 值的状态，即是说，如果 $\Psi(t_0)$ 是某个总粒子数为 N 的系统在 t_0 时刻的态矢量，那么，由 (27) 式确定的 $\Psi(t)$ 也属于这个 N 值 (注意 $\sum\limits_i a_i^{\dagger}a_i$ 与 H 对易).

2.4 二次量子化理论的完整形式

现在要证明，算符表达式 (20),(22),(24) 以及对易关系 (16), 加上量子力学的其他原理，就构成描述相同玻色子系统的完整理论. 它称为玻色子系统的二次量子化理论.

为了方便，仍借助分立的单体完备组 $\{\psi_i\}$ 来进行讨论. 令

$$\left.\begin{aligned} a_i&=\int \psi_i^*(\xi)\Phi(\xi)\mathrm{d}\xi\,,\\ a_i^{\dagger}&=\int \psi_i(\xi)\Phi(\xi)^{\dagger}\mathrm{d}\xi\,,\end{aligned}\right\} \tag{28}$$

则可由 (16) 式推出 (12), (13) 式，并由 (20), (22), (24) 推出 (19), (21) 及 (23) 式. 我们要证明的是：$a_i^{\dagger}a_i$ 是 ψ_i 上的粒子数算符，$a_i^{\dagger}$ 及 a_i 分别是产生及消灭算符，而且，玻色统计法已被 $a_i, a_j^{\dagger}$ 遵守的对易关系概括.

根据 $a_i, a_j^\dagger$ 遵守的对易关系可得出

$$[a_i^\dagger a_i, a_j^\dagger] = a_i^\dagger \delta_{ij}\,, \tag{29}$$

$$[a_i^\dagger a_i, a_j] = -a_i \delta_{ij}\,, \tag{30}$$

$$[a_i^\dagger a_i, a_j^\dagger a_j] = 0\,. \tag{31}$$

(29), (30) 式表明当 $j \neq i$ 时 $a_j, a_j^\dagger$ 都与 $a_i^\dagger a_i$ 可对易. (31) 式表明各个 $a_i^\dagger a_i$ 互相可对易. 从后面说明的 Φ 场的观点应认定, 全部 $a_i^\dagger a_i$ 代表一组完整力学量, 现在求它们的本征值及本征态, 为此可直接搬用第三章 §5 的方法. 用 β_i 代表 $a_i^\dagger a_i$ 的本征值, $|\beta_1\beta_2\cdots\rangle$ 代表全部 $a_i^\dagger a_i$ 的共同本征右矢, 于是

$$a_i^\dagger a_i |\beta_1\beta_2\cdots\rangle = \beta_i |\beta_1\beta_2\cdots\rangle\,, \tag{32}$$

$$a_i a_i^\dagger |\beta_1\beta_2\cdots\rangle = (\beta_i + 1)|\beta_1\beta_2\cdots\rangle\,, \tag{33a}$$

$$a_i^\dagger a_i (a_i^\dagger |\beta_1\beta_2\cdots\rangle) = (\beta_i + 1) a_i^\dagger |\beta_1\beta_2\cdots\rangle\,, \tag{33b}$$

$$a_i^\dagger a_i (a_i |\beta_1\beta_2\cdots\rangle) = (\beta_i - 1) a_i |\beta_1\beta_2\cdots\rangle\,. \tag{33c}$$

由 (33c) 式看出, 只要 $a_i|\beta_1\beta_2\cdots\rangle$ 不是零右矢, 它就仍然是 $a_i^\dagger a_i$ 的本征右矢, 属于本征值 $(\beta_i - 1)$. 由于 $a_i^\dagger a_i$ 不能有负本征值, 应存在非负整数 k, 使得

$$(a_i)^k |\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i)\cdots\rangle \neq 0\,,$$

$$(a_i)^{k+1} |\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i)\cdots\rangle = 0\,,$$

这表明 $(a_i)^k|\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i)\cdots\rangle$ 是 $a_i^\dagger a_i$ 的本征右矢, 第 i 号本征值是 0(其他 $a_j^\dagger a_j$ 的本征值不改变), 因而又说明原来的 β_i 就是 k. 可见 $a_i^\dagger a_i$ 具有零本征值, 而且非零本征值只能是正整数.

$(a_i)^\dagger|\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i=0)\cdots\rangle$ 显然不是零 (根据 (33b) 式), 因此是 $a_i^\dagger a_i$ 的本征右矢，第 i 号本征值是 1，继续以 $a_i^\dagger$ 作用即可推知，$a_i^\dagger a_i$ 的值谱是全部非负整数，$(a_i^\dagger)^{\beta_i}|\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i=0)\cdots\rangle$ 是 $a_i^\dagger a_i$ 的本征值为 β_i 的本征右矢. 所有 $\beta_1,\beta_2,\cdots$ 都是 0 的右矢 $|0\rangle$ 当然满足条件

$$a_i|0\rangle=0\,.$$

当 $|0\rangle$ 归一后，可把归一的 $|\beta_{i_1}\beta_{i_2}\cdots\rangle$ 表示为

$$\frac{(a_{i_1}^\dagger)^{\beta i_1}}{\sqrt{\beta_{i_1}!}}\frac{(a_{i_2}^\dagger)^{\beta_{i_2}}}{\sqrt{\beta_{i_2}!}}\cdots|0\rangle\,.$$

由于 $a_i^\dagger$ 的排列次序可以随意改变，这即是

$$|\beta_1\beta_2\cdots\rangle=\frac{(a_1^\dagger)^{\beta_1}}{\sqrt{\beta_1!}}\frac{(a_2^\dagger)^{\beta_2}}{\sqrt{\beta_2!}}\cdots|0\rangle\,.$$

为了弄清楚 $a_i^\dagger$ 的意义，我们来研究 $a_i^\dagger|0\rangle$. 考虑单体型的力学量的算符

$$F=\sum_{ik}\langle\psi_i|f|\psi_k\rangle a_i^\dagger a_k\,,$$

其中 f 在态 ψ_k 下取确定值 f_k, 于是

$$F=\sum_k f_k a_k^\dagger a_k\,,$$

$$Fa_i^\dagger|0\rangle=f_i a_i^\dagger|0\rangle\,.$$

对于在 ψ_k 下有确定值的任何 f 都是如此，所以 $a_i^\dagger|0\rangle$ 代表有一个粒子处在 ψ_i 的态. 即是说，$a_i^\dagger$ 是产生一个处在 ψ_i 上的粒子的产生算符，因而 a_i 是相应的消灭算符，$a_i^\dagger a_i$ 是处在 ψ_i 上的粒子数算符，由此也了解了 β_i 的物理意义，即：当系统处在状态 $|\beta_1\beta_2\cdots\rangle$ 时，就有 β_i 个粒子处在 ψ_i.

由于各个 ψ_i 上的粒子数确定了系统的状态，可见粒子遵从不可分辨原理. 其次，各个 ψ_i 上的粒子数可以任意多，说明粒子

是玻色子.

现在把由相同的玻色子构成的力学系统的二次量子化描述方法，扼要叙述如下：任意选择一个单体正交归一完备组 ψ_i，使一切算符都借助 (19),(21) 及 (23) 式过渡到由 a_i 及 $a_j^\dagger$ 表达的形式，同时要求 a_i 及 $a_j^\dagger$ 遵从对易关系 (12) 及 (13) (这与公式 (20), (22), (24) 及对易关系 (16) 包含着相同的内容). 这样，$a_i^\dagger a_i$ 的本征值就代表处在 ψ_i 上的粒子数目，$a_i^\dagger$ 及 a_i 分别是产生及消灭一个处在 ψ_i 上的粒子的算符. 粒子遵从玻色统计法的事实已由对易关系 (12) 及 (13) 所保证. 任何一个状态 Ψ 都可以看作 "粒子数" 本征态的叠加，"粒子数表象" 波函数的意义与通常一样按玻恩统计诠释来理解. 状态的时间演化由 (25),(27) 所表达的薛定谔方程来描述. 与量子力学的普通形式比较起来，二次量子化形式除了在实际运用上的优点之外，有两个特点：(1) 在普通形式下，粒子遵从玻色统计法的事实 (波函数的对称性) 不能从方程式的求解中得出，而必须作为独立的条件来处理. 但是，在二次量子化形式下，如上所述，已经被对易关系所概括. (2) 在二次量子化形式下，一切力学量的算符都表示成与系统的总粒子数无关的形式，适用于含有任何数目粒子的系统. 因之，所有的方程式也都如此. 总粒子数不同的系统的差别可完全归结为状态的差别 (再提醒一下，在非相对论范围内，所有力学量的算符都与总粒子数算符对易，不能引起属于不同总粒子数的状态之间的跃迁). 在上述两方面，二次量子化方法扩充了量子力学的数学形式.

二次量子化方法当然也可用粒子数表象的波函数及对这种波函数运算的算符来表述，即状态 Ψ 由其波函数 $C(N_1, N_2, \cdots)$ 表示，产生、消灭算符被表示为作用于 $C(N_1, N_2, \cdots)$ 的算符 $A^\dagger, A$，其定义为

$$\left.\begin{aligned} \langle N_1 N_2 \cdots | a_i^\dagger | \Psi \rangle &= A_i^\dagger \langle N_1 N_2 \cdots | \Psi \rangle, \\ \langle N_1 N_2 \cdots | a_i | \Psi \rangle &= A_i \langle N_1 N_2 \cdots | \Psi \rangle, \end{aligned}\right\} \tag{34}$$

即

$$\left.\begin{aligned} A_i^\dagger C(N_1,\cdots,N_i,\cdots)&=\sqrt{N_i}C(N_1,\cdots,(N_i-1),\cdots),\\ A_iC(N_1,\cdots,N_i,\cdots)&=\sqrt{N_i+1}C(N_1,\cdots,(N_i+1),\cdots).\end{aligned}\right\}\quad(35)$$

应当注意，在 $C(N_1,N_2,\cdots)$ 中的 $N_1,N_2,\cdots$ 是波函数的宗量，所以受算符 $A_i^\dagger$ 作用之后，N_i 减少 1. 受 A_i 作用后，则 N_i 增加 1. 为了把这一点看得更明白些，最好是把 (35) 式应用到特殊的波函数 $C_{N_1'N_2'\cdots}(N_1,N_2,\cdots)$，由 $C_{N_1'N_2'\cdots N_i'\cdots}(N_1,\cdots,(N_i-1),\cdots)=C_{N_1'N_2'\cdots(N_i'+1)\cdots}(N_1,N_2,\cdots)$ 知道，宗量 N_i 减少 1，相当于本征值 N_i' 增加 1. 反之，N_i 增加 1 相当于 N_i' 减 1. 故由 (35) 式有

$$A_i^\dagger C_{N_1'\cdots N_i'\cdots}(N_1,N_2,\cdots)=\sqrt{N_i'+1}C_{N_1'\cdots(N_i'+1)\cdots}(N_1,N_2,\cdots),$$

$$A_iC_{N_1'\cdots N_i'\cdots}(N_1,N_2,\cdots)=\sqrt{N_i'}C_{N_1'\cdots(N_i'-1)\cdots}(N_1,N_2,\cdots).$$

为了使各种算符过渡到对波函数 $C(N_1,N_2,\cdots)$ 实行运算的算符，只需在公式 (19), (23) 及 (15) 中把 a_i 及 $a_i^\dagger$ 换成 A_i 及 $A_j^\dagger$，对易关系也具有 (12),(13) 或 (16) 式的形式.

现在，薛定谔方程 (27) 应表示为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}C(N_1,N_2,\cdots,t)=\mathcal{H}C(N_1,N_2,\cdots,t),\qquad(27')$$

$$\mathcal{H}=\sum_{ii'}\langle i|T+U|i'\rangle A_i^\dagger A_{i'}+\frac{1}{2}\sum_{iki'k'}\langle ik|w|i'k'\rangle A_i^\dagger A_k^\dagger A_{k'}A_{i'}\,.$$

§3 相同费米子系统的二次量子化理论

3.1 粒子数基矢和广义态矢量空间

和 §2 一样，设 $\{\psi_i\}$ 是一组正交归一和完备的单粒子波函数，并把指标 i 的值编号为 $1,2,3,\cdots$. 任取其中 N 个不同的 ψ_i 都

可按 (4) 式构成 N 体的基本反对称波函数. 在标记这种基本波函数时, 既要说明哪些态有粒子, 也要使正负号确定下来. 我们约定 $\Psi_{N_{i_1}N_{i_2}\cdots}(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)$ 代表如下波函数: 下标表明 ψ_i 上有 N_i 个粒子 (N_i 是 1 或 0). 其次, 如果在无限重数组 $(N_{i_1}N_{i_2}\cdots)$ 中抛开取值为零的所有 N_i 后得到的 N 重数组是 $(N_{j_1}N_{j_2}\cdots N_{j_N})$, 则

$$\begin{aligned}&\Psi_{N_{i_1}N_{i_2}\cdots}(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)\\&=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P(-1)^{[P]}P\psi_{j_1}(\xi_1)\psi_{j_2}(\xi_2)\cdots\psi_{j_N}(\xi_N)\,.\end{aligned}$$

例如

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2)-\psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1)\}$$

记为

$$\Psi_{N_1N_2N_3\cdots}(\xi_1,\xi_2)\,,\qquad N_1=N_2=1,N_3=\cdots=0\,,$$

而

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2)-\psi_2(\xi_2)\psi_1(\xi_1)\}$$

记为

$$\Psi_{N_2N_1N_3\cdots}(\xi_1,\xi_2)\,,\qquad N_1=N_2=1,N_3=\cdots=0\,,$$

当变换各个 N_i 在下标中的次序时, 当然有

$$\begin{aligned}&\Psi_{N_1N_2N_3\cdots}(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)\\&\quad=(-1)^{N_lN_{l-1}}\Psi_{N_1N_2\cdots N_lN_{l-1}N_{l+1}\cdots}(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)\\&\quad=(-1)^{N_l\sum_{j=1}^{l-1}N_j}\Psi_{N_1N_2\cdots N_lN_{l-1}N_{l+1}\cdots}(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)\,.\end{aligned}\tag{36}$$

满足条件 $\sum N_i=N$ 的全部基本波函数构成 N 体全反对称波函数的正交归一完备组, 因此, 任意 N 体波函数 $\Psi(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)$ 可表示为

$$\Psi(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)=\sum_{N_1N_2\cdots}\Psi_{N_1N_2\cdots}(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)C(N_1,N_2,\cdots)\,.$$

与玻色子系统的情形相似，可以认为 $C(N_1, N_2, \cdots)$ 对于每个 N_i 的一切值都有定义，只是当 $\sum_i N_i$ 不等于 N 时其值为零，即

$$C(N_1, N_2, \cdots) = \begin{cases} (\Psi_{N_1 N_2 \cdots}, \Psi), & \text{当} \sum_i N_i = N; \\ 0, & \text{当} \sum_i N_i \neq N. \end{cases}$$

这样的 $C(N_1, N_2, \cdots)$ 称为 Ψ 在 $(N_1 N_2 \cdots)$ 表象的波函数或简称为粒子数表象的波函数. 两个波函数的内积可用粒子数表象表示为

$$\sum_{N_1 N_2 \cdots} C_A^*(N_1, N_2, \cdots) C_B(N_1, N_2, \cdots). \tag{37}$$

基本波函数 $\Psi_{N_1' N_2' \cdots}(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N)$ 在粒子数表象的波函数为

$$C_{N_1' N_2' \cdots}(N_1, N_2, \cdots) = \delta_{N_1' N_1} \delta_{N_2' N_2} \cdots .$$

这种波函数的全体代表总粒子数取一切值的系统的全部独立波函数，我们把这些波函数的线性组合所成的线性空间称为广义波函数空间，其中任何两个波函数的内积都按 (37) 式定义. 广义态矢量空间的概念也和前面一样，它和广义波函数空间之间的对应关系如下

$$\begin{aligned} & C_{N_1' N_2' \cdots}(N_1, N_2, \cdots) \longleftrightarrow |N_1' N_2' \cdots\rangle, \\ & \alpha C_{N_1' N_2' \cdots}(N_1, N_2, \cdots) + \beta C_{N_1'' N_2'' \cdots}(N_1, N_2, \cdots) \\ & \quad \longleftrightarrow \alpha |N_1' N_2' \cdots\rangle + \beta |N_1'' N_2'' \cdots\rangle, \\ & \langle N_1' N_2' \cdots | N_1'' N_2'' \cdots \rangle \\ & \quad = \sum_{N_1 N_2 \cdots} C^*_{N_1' N_2' \cdots}(N_1, N_2, \cdots) C_{N_1'' N_2'' \cdots}(N_1, N_2, \cdots) \\ & \quad = \delta_{N_1' N_1''} \delta_{N_2' N_2''} \cdots . \end{aligned} \tag{38}$$

由 (36) 式可知

$$\begin{aligned}&|N_1N_2\cdots N_l\cdots\rangle\\&\quad=(-1)^{N_lN_{l-1}}|N_1N_2\cdots N_lN_{l-1}N_{l+1}\cdots\rangle\\&\quad=(-1)^{N_l\sum\limits_{j=1}^{l-1}N_j}|N_lN_1N_2\cdots N_{l-1}N_{l+1}\cdots\rangle\,.\end{aligned}\tag{39}$$

当各个 N_i 都遍及 0 与 1 时，全体 $|N_1N_2\cdots\rangle$ 构成广义态矢量空间的正交归一完备组，故

$$\sum_{N_1N_2\cdots}=|N_1N_2\cdots\rangle\langle N_1N_2\cdots|=1\,.\tag{40}$$

基本右矢 $|N_1N_2\cdots\rangle$ 就是广义态矢量空间的粒子数表象的基矢或称为粒子数基矢，态矢量 $|\Psi\rangle$ 在粒子数表象的波函数为

$$C(N_1,N_2,\cdots)=\langle N_1N_2\cdots|\Psi\rangle\,.\tag{41}$$

3.2 产生和消灭算符

基本右矢 $|N_1N_2\cdots\rangle$ 可以看作广义态矢量空间的一组算符 $\hat{n}_1,\hat{n}_2,\cdots$ 的共同本征右矢，而 N_i 是 $\hat{n}_i$ 的本征值，即

$$\hat{n}_i|N_1N_2\cdots N_i\cdots\rangle=N_i|N_1N_2\cdots N_i\cdots\rangle\,,\tag{42}$$

故

$$\hat{n}_i=\sum_{N_1N_2\cdots}N_i|N_1N_2\cdots\rangle\langle N_1N_2\cdots|\,.\tag{43}$$

由于各个 N_i 的可能值都是 0 与 1，故 (43) 式又可写成

$$\hat{n}_i=\sum_{N_1N_2\cdots}|N_1N_2\cdots1_i\cdots\rangle\langle N_1N_2\cdots1_i\cdots|\,.\tag{43'}$$

显然，

$$\hat{n}_i^\dagger=\hat{n}_i\,,\qquad[\hat{n}_i,\hat{n}_{i'}]=0\,.\tag{44}$$

为了引入产生及消灭算符，需要注意到公式 (39). 与 §2 的公式 (11′) 相对应，可以用下式作为产生算符的定义

$$a_i^\dagger|N_1N_2\cdots N_{i-1}0_iN_{i+1}\cdots\rangle$$

$$=(-1)^{\sum_{l=1}^{i-1}N_l}|N_1N_2\cdots N_{i-1}1_iN_{i+1}\cdots\rangle\,, \tag{45}$$

$$a_i^\dagger|N_1N_2\cdots 1_i\cdots\rangle=0\,.$$

或借助 (40) 式写成

$$a_i^\dagger=\sum_{N_1N_2\cdots}(-1)^{\sum_{l=1}^{i-1}N_l}|N_1N_2\cdots 1_i\cdots\rangle\langle N_1N_2\cdots 0_i\cdots|\,. \tag{46}$$

对此式取厄米共轭，就得到消灭算符

$$a_i=\sum_{N_1N_2\cdots}(-1)^{\sum_{l=1}^{i-1}N_l}|N_1N_2\cdots 0_i\cdots\rangle\langle N_1N_2\cdots 1_i\cdots|\,. \tag{47}$$

显然，由 (43′) 式看出

$$\widehat{n}_i=a_i^\dagger a_i\,, \tag{48}$$

从 (46), (47) 式可以求出产生、消灭算符满足的反对易关系

$$a_ia_j^\dagger+a_j^\dagger a_i=\delta_{ij}\,,$$

$$a_ia_j+a_ja_i=a_i^\dagger a_j^\dagger+a_j^\dagger a_i^\dagger=0\,.$$

按照习惯用 $[A,B]_+$ 代表 $AB+BA$, 于是

$$[a_i,a_j^\dagger]_+=\delta_{ij}\,, \tag{49}$$

$$[a_i,a_j]_+=[a_i^\dagger,a_j^\dagger]_+=0\,. \tag{50}$$

要特别注意，属于不同 i 的产生算符或消灭算符不是相互对易而是反对易，而且 $(a_i^\dagger)^2$ 或 $(a_i)^2$ 等于 0，这来自费米子系统的总波函数对于粒子交换的反对称性.

以下的处理与玻色子系统的情形完全类似，某些重复性步骤，将被省略.

利用公式 (45) 可把基本态矢量写成

$$|N_1N_2\cdots\rangle = (a_1^\dagger)^{N_1}(a_2^\dagger)^{N_2}\cdots|0\rangle\,. \tag{51}$$

如果改变 $N_1N_2\cdots$ 的安排次序，则有

$$|N_2N_1\cdots\rangle = (a_2^\dagger)^{N_2}(a_1^\dagger)^{N_1}\cdots|0\rangle$$

等等. 任何一个基本算符 $|N_1N_2\cdots\rangle\langle N_1'N_2'\cdots|$ 都可通过产生及消灭算符来表达，因之，任何算符也如此. 再按下式引入 $\Phi(\xi)$ 及其厄米共轭

$$\Phi(\xi) = \sum_i \psi_i(\xi)a_i\,, \qquad \Phi(\xi)^\dagger = \sum_i \psi_i^*(\xi)a_i^\dagger\,. \tag{52}$$

它们与完备组 $\psi_i(\xi)$ 的选择无关，分别是消灭和产生一个处在 ξ 点的粒子的算符. $\Phi(\xi)^\dagger\Phi(\xi)$ 代表 ξ 点的数密度算符. 与 (49),(50) 式相当的反对易关系为

$$\left.\begin{aligned}[\Phi(\xi),\Phi(\xi')^\dagger]_+ &= \delta(\xi-\xi')\,,\\ [\Phi(\xi),\Phi(\xi')]_+ &= [\Phi(\xi)^\dagger,\Phi(\xi')^\dagger]_+ = 0\,.\end{aligned}\right\} \tag{53}$$

如果从一个新的完备组 $\varphi_j(\xi)$ 出发，相应的产生及消灭算符为 $b_j^\dagger$ 及 b_j, 则有

$$\left.\begin{aligned}b_j &= \sum_i \langle\varphi_j|\psi_i\rangle a_i\,,\\ b_j^\dagger &= \sum_i \langle\psi_i|\varphi_j\rangle a_i^\dagger\,.\end{aligned}\right\} \tag{54}$$

3.3 各类算符的表达式. 广义薛定谔方程

下面给出各类算符通过产生及消灭算符来表达的公式.

(1) “单体” 型算符

设

$$F = \sum_{p=1}^{N} f(p)\,,$$

其中 $F(p)$ 只涉及第 p 号粒子的变数，各个 F 对于所属粒子的变数的依赖关系完全相同，则

$$\widehat{F} = \sum_{i,k} \langle i|f|k\rangle a_i^\dagger a_k\,, \tag{55}$$

或

$$\widehat{F} = \int \mathrm{d}\xi \Phi(\xi)^\dagger f \Phi(\xi)\,. \tag{56}$$

在 (55) 式中，$\langle i|f|k\rangle$ 代表 $\int \mathrm{d}\xi \psi_i^*(\xi) f \psi_k(\xi)$.

(2)“两体” 型算符

设

$$G = \sum_{p<q}^{N} g(p,q) = \frac{1}{2}\sum_{p\neq q}^{N} g(p,q)\,,$$

其中 $g(p,q)$ 只依赖于第 p 及第 q 号粒子的变数，各个 g 对于所属粒子的变数的依赖关系完全相同，而且 $g(p,q) = g(q,p)$, 则

$$\widehat{G} = \frac{1}{2}\sum_{iklm} \langle ik|g|lm\rangle a_i^\dagger a_k^\dagger a_m a_l\,, \tag{57}$$

或

$$\widehat{G} = \frac{1}{2}\int\int \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 \Phi(\xi_1)^\dagger \Phi(\xi_2)^\dagger g(1,2) \Phi(\xi_2)\Phi(\xi_1)\,. \tag{58}$$

在 (57) 式中，$\langle ik|g|lm\rangle$ 代表

$$\int\int \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 \psi_i(\xi_1)^* \psi_k(\xi_2)^* g(1,2) \psi_l(\xi_1)\psi_m(\xi_2)\,,$$

如果要在这些公式中改变产生及消灭算符的次序，就要注意它们的反对易规则.

(3)“n 体” 型算符

设 $w(p_1,p_2,\cdots p_n)$ 是依赖于第 p_1 号，第 p_2 号 $\cdots$ 及第 n 号粒子的变数的算符，而且对这 n 个号码的任何置换都是对称的，则

$$W=\sum_{p_1<p_2\cdots<p_n} w(p_1,p_2,\cdots,p_n)\,,$$

而

$$\begin{aligned}\widehat{W}=&\frac{1}{n!}\sum_{\substack{i_1i_2\cdots i_n\\ i'_1i'_2\cdots i'_n}}\langle i_1i_2\cdots i_n|w|i'_1i'_2\cdots i'_n\rangle\\ &\times a^\dagger_{i_1}a^\dagger_{i_2}\cdots a^\dagger_{i_n}a_{i'_n}\cdots a_{i'_2}a_{i'_1} \qquad (59)\\ =&\frac{1}{n!}\int\cdots\int \mathrm{d}\xi_1\cdots\mathrm{d}\xi_n\\ &\times\Phi(\xi_1)^\dagger\cdots\Phi(\xi_n)^\dagger w(1,2,\cdots,n)\Phi(\xi_n)\cdots\Phi(\xi_1)\,. \qquad (60)\end{aligned}$$

我们看到，所有通常的算符过渡到用产生和消灭算符表达的形式时，均不再依赖于粒子总数 N，而且与 $\sum_i a^\dagger_i a_i$ 对易.

借助算符的这种表达式，可把薛定谔方程和其他方程式过渡到对于含有任何数目的粒子的系统都适用的形式. 设 T 代表单个粒子的动能算符，U 代表势能算符，w 代表两个粒子的相互作用势能算符，如果多体作用不存在，则总哈密顿量算符可写成

$$H=\sum_{ii'}\langle i|T+U|i'\rangle a^\dagger_i a_{i'}+\frac{1}{2}\sum_{iki'k'}\langle ik|w|i'k'\rangle a^\dagger_i a^\dagger_k a_{k'}a_{i'} \qquad (61)$$

$$\begin{aligned}=&\int \mathrm{d}\xi\Phi(\xi)^\dagger(T+U)\Phi(\xi)\\ &+\frac{1}{2}\int\int \mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\Phi(\xi_1)^\dagger\Phi(\xi_2)^\dagger w(1,2)\Phi(\xi_2)\Phi(\xi_1)\,. \qquad (62)\end{aligned}$$

薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t)=H\Psi(t)\,. \qquad (63)$$

在研究一个特定的系统时，$\Psi(t)$ 就被限制为总粒子数目为一定 N 值的状态.

3.4 二次量子化理论的完整形式

现在要证明，力学量公式 (56),(58) 等以及反对易关系 (53)，加上量子力学的其他原理，就构成描述相同费米子系统的完整理论. 它称为费米子系统的二次量子化理论. 令

$$\left.\begin{aligned} a_i &= \int \psi_i^*(\xi)\Phi(\xi)\mathrm{d}\xi\,, \\ a_i^\dagger &= \int \psi_i(\xi)\Phi(\xi)^\dagger \mathrm{d}\xi\,, \end{aligned}\right\} \tag{64}$$

则可由 (53) 式推出 (49) 及 (50) 式，并由 (56),(58) 及 (60) 式推出 (55),(57) 及 (59) 式. 我们要证明的是：$a_i^\dagger a_i$ 是处在 ψ_i 的粒子数算符，$a_i^\dagger$ 及 a_i 分别是产生及消灭一个处在 ψ_i 的粒子的算符，而且费米统计法已被 $a_i, a_j^\dagger$ 的反对易关系式概括.

根据 $a_i, a_j^\dagger$ 所遵从的反对易关系式得出

$$[a_i^\dagger a_i, a_j^\dagger] = a_i^\dagger \delta_{ij}, \tag{65}$$

$$[a_i^\dagger a_i, a_j] = -a_i \delta_{ij}, \tag{66}$$

$$[a_i^\dagger a_i, a_j^\dagger a_j] = 0\,. \tag{67}$$

这些不带特别标记的方括号代表通常的对易关系式. (65) 及 (66) 式表明，当 $j \neq i$ 时，$a_j^\dagger$ 及 a_j 都与 $a_i^\dagger a_i$ 对易，(67) 式表明 $a_1^\dagger a_1, a_2^\dagger a_2, \cdots$ 互相对易. 从后面说明的费米 Φ 场的观点应认定，全部 $a_i^\dagger a_i$ 代表一组完整力学量，现在求 $a_i^\dagger a_i$ 的本征值及本征态. 设 $|\beta_1\beta_2\cdots\rangle$ 代表全部 $a_i^\dagger a_i$ 的共同本征态，假定已经归一，其中 β_i 代表 $a_i^\dagger a_i$ 的本征值，于是

$$a_i^\dagger a_i |\beta_1\beta_2\cdots\rangle = \beta_i |\beta_1\beta_2\cdots\rangle\,, \tag{68}$$

$$a_i a_i^\dagger |\beta_1\beta_2\cdots\rangle = (1-\beta_i)|\beta_1\beta_2\cdots\rangle\,. \tag{69}$$

若 $a_i|\beta_1\beta_2\cdots\rangle = 0$, 则 (68) 式表明 $\beta_i = 0$, 若 $a_i|\beta_1\beta_2\cdots\rangle \neq 0$, 则由 $a_i(a_i|\beta_1\beta_2\cdots\rangle) = 0$ 看出 $a_i|\beta_1\beta_2\cdots\rangle$ 是 $a_i^\dagger a_i$ 的本征态而本征值为零，总之存在 $a_i^\dagger a_i$ 的本征值为零的态. 其次，若 $a_i^\dagger|\beta_1\beta_2\cdots\rangle = 0$ 则 (69) 式表明 $\beta_i = 1$, 若 $a_i^\dagger|\beta_1\beta_2\cdots\rangle \neq 0$ 则由 $a_i^\dagger(a_i^\dagger|\beta_1\beta_2\cdots\rangle) = 0$ 看出 $a_i^\dagger|\beta_1\beta_2\cdots\rangle$ 是 $a_i^\dagger a_i$ 的本征态而本征值为 1. 总之存在 $a_i^\dagger a_i$ 的本征值为 1 的态. 再由 $(a_i^\dagger a_i)^2 = a_i^\dagger a_i$ 得出 $\beta_i^2 = \beta_i$, 这表明 $a_i^\dagger a_i$ 不具有 0 和 1 以外的本征值. 综上所述，每个 $a_i^\dagger a_i$ 的本征值都是 0 和 1，并且有

$$\begin{aligned}
&a_i|\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i = 0)\cdots\rangle = 0\,,\\
&a_i|\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i = 1)\cdots\rangle \propto |\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i = 0)\cdots\rangle\,,\\
&a_i^\dagger|\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i = 1)\cdots\rangle = 0\,,\\
&a_i^\dagger|\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i = 0)\cdots\rangle \propto |\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i = 1)\cdots\rangle\,.
\end{aligned}$$

用 $|0\rangle$ 代表所有 β_i 都是 0 的态, 当它归一后, 可把归一的 $|\beta_{i_1}\beta_{i_2}\cdots\rangle$ 表示为

$$(a_{i_1}^\dagger)^{\beta_{i_1}}(a_{i_2}^\dagger)^{\beta_{i_2}}\cdots|0\rangle\,.$$

特别是

$$|\beta_1\beta_2\cdots\rangle = (a_1^\dagger)^{\beta_1}(a_2^\dagger)^{\beta_2}\cdots|0\rangle\,. \tag{70}$$

由于 $a_i^\dagger$ 与 $a_j^\dagger$ 反对易，有

$$|\beta_1\beta_2\cdots\rangle = (-1)^{\beta_i\sum_{l=1}^{i-1}\beta_l}|\beta_i\beta_1\beta_2\cdots\beta_{i-1}\beta_{i+1}\cdots\rangle\,,$$

$$a_i^\dagger|\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i = 0)\cdots\rangle = (-1)^{\sum_{l=1}^{i-1}\beta_l}|\beta_1\beta_2\cdots(\beta_i = 1)\cdots\rangle\,.$$

再考虑到力学量所相应的算符的表达式之后就可知道，当系统处在 $|\beta_1\beta_2\cdots\rangle$ 时， β_i 就代表处在 ψ_i 上的粒子数目. 因此，$a_i^\dagger$ 及 a_i 分别是产生及消灭一个处于 ψ_i 的粒子的算符.

显然，由算符公式 (56),(58) 和 (60) 以及反对易关系式 (53)(或 (55), (57), (59) 及 (49), (50)) 所表征的力学系统是相同的费米子构成的系统. 因为，当各个 ψ_i 上的粒子数给定之后，总系统的状态也已确定 (只是态矢量有一未定符号)，这表明粒子是相同的；其次，各个 ψ_i 上的粒子数只能是 0 或 1，在 (70) 式中变换各个 $(a_i^\dagger)^{\beta_i}$ 的安排次序时，符合公式 (38)，可见粒子是费米子.

现在把由相同的费米子构成的力学系统的二次量子化描述方法扼要叙述如下：任意选择一个单体正交归一完备组 ψ_i，使一切算符都借助 (55), (57), (59) 式过渡到由 a_i 及 $a_i^\dagger$ 表达的形式，同时要求 a_i 及 $a_i^\dagger$ 遵从反对易关系 (49), (50) (如上面所证明的，这与公式 (56), (58), (60) 及反对易关系 (53) 有相同的内容). 这样 $a_i^\dagger a_i$ 的本征值就代表处在 ψ_i 上的粒子数目，$a_i^\dagger$ 及 a_i 分别是产生及消灭一个处在 ψ_i 上的粒子的算符，粒子遵从费米统计法的事实已由反对易关系 (49),(50) 保证. 任意状态 Ψ 可以看作 "粒子数" 本征态的叠加，"粒子数表象" 波函数仍然按玻恩统计诠释来理解. 状态的时间演化由 (61)—(63) 表达的薛定谔方程描述. 二次量子化方法在下述两方面扩充了量子力学的数学形式：(1) 粒子遵从费米统计法的事实被反对易关系所概括；(2) 一切力学量的算符都表示成与系统的总粒子数无关的形式，适用于含有任何数目粒子的系统，因此所有的方程式也都如此.

当然，也可以采用粒子数表象的波函数及对这种波函数运算的算符来表达二次量子化方法. 状态 Ψ 由相应的波函数 $C(N_1,\cdots)$ 表达，产生及消灭算符应表示为对 $C(N_1,\cdots)$ 作用的算符，用 $A^\dagger$ 及 A 代表之，则

$$\langle N_1 N_2 \cdots | a_i^\dagger | \Psi \rangle = A_i^\dagger \langle N_1 N_2 \cdots | \Psi \rangle \,, \tag{71a}$$

以及

$$\langle N_1 N_2 \cdots | a_i | \Psi \rangle = A_i \langle N_1 N_2 \cdots | \Psi \rangle \,, \tag{71b}$$

即

$$A_i^\dagger C(N_1, N_2, \cdots, N_i, \cdots)$$

$$= \begin{cases} (-1)^{\sum_{l=1}^{i-1} N_l} C(N_1, N_2, \cdots, 0_i, \cdots), & \text{当} N_i = 1; \\ 0, & \text{当} N_i = 0. \end{cases}$$

$$A_i C(N_1, N_2, \cdots, N_i, \cdots)$$

$$= \begin{cases} 0, & \text{当} N_i = 1; \\ (-1)^{\sum_{l=1}^{i-1} N_l} C(N_1, N_2, \cdots, 1_i, \cdots), & \text{当} N_i = 0. \end{cases}$$

或

$$A_i^\dagger C(N_1, N_2, \cdots, N_i, \cdots)$$

$$= \delta_{1N_i} (-1)^{\sum_{l=1}^{i-1} N_l} C(N_1, N_2, \cdots, (N_i - 1), \cdots), \qquad (72a)$$

$$A_i C(N_1, N_2, \cdots, N_i, \cdots)$$

$$= \delta_{0N_i} (-1)^{\sum_{l=1}^{i-1} N_l} C(N_1, N_2, \cdots, (N_i + 1), \cdots). \qquad (72b)$$

在 (55), (57), (59) 以及 (49), (50) 式中把 a_i 及 $a_j^\dagger$ 换成 A_i 及 $A_j^\dagger$, 就得到在这种描述下力学量的公式以及基本反对易关系式.

现在薛定谔方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(N_1, N_2, \cdots, t) = \mathcal{H} C(N_1, N_2, \cdots, t), \qquad (63')$$

其中

$$\mathcal{H} = \sum_{ii'} \langle i|T + U|i'\rangle A_i^\dagger A_{i'}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{iki'k'} \langle ik|w|i'k'\rangle A_i^\dagger A_k^\dagger A_{k'} A_{i'} .$$

§4　波场量子化的观点

已经说明，$\Phi(\xi)$ 和 $\Phi^\dagger(\xi)$ 分别是消灭和产生一个处在点 ξ 的粒子的算符，在本节中我们要把 Φ 看作波场的场函数经过量子化而成的算符，并指出可以从这种途径来建立二次量子化理论.

4.1　玻色 Φ 场的量子化

现在要说明，可把算符 Φ 看成是经典场函数 $\Phi_c(\xi,t)$ 经过量子化而成的算符并由此建立玻色子系统的二次量子化理论. $\Phi_c(\xi,t)$ 可以按照 ξ 中的自旋变量的值看作时空点 (r,t) 的一组函数，为了方便，把一定的 ξ 值说成场中的一点，各个点代表场的各种自由度. 将 $\Phi_c(\xi,t)$ 按一组单体正交归一完备的波函数展开为

$$\Phi_c(\xi,t)=\sum_j a_j(t)\psi_j(\xi)\,, \tag{73}$$

又可把 $a_j(t)$ 看作描述场的基本变量，而各种 j 值则标记各种自由度. 假定 $\Phi_c(\xi,t)$ 完整地描述了场在时刻 t 的状态，则运动方程只含它的一级时间微商，因此 $a_j(t)$ 同时代表了坐标和动量，运动方程可以写成如下的形式 (见第三章 §6)

$$\mathrm{i}\hbar\dot{a}_j=\frac{\partial E(a^*,a)}{\partial a_j^*}\,, \tag{74}$$

其中 $E(a^*,a,t)$ 是 (a_k^*,a_j) 的某个实函数，微商记号的定义是：当 a_j 改变一个无穷小量 δa_j 时，$F(a^*,a)$ 的一级改变量为

$$\delta F(a^*,a,t)=\sum_j \delta a_j^*\frac{\partial F(a^*,a,t)}{\partial a_j^*}+\sum_j \delta a_j\frac{\partial F(a^*,a,t)}{\partial a_j}\,. \tag{75}$$

借助这个定义可把运动方程写成修正的哈密顿原理的形式

$$\left.\begin{aligned}&\delta\int_{t_1}^{t_2}\left\{\mathrm{i}\hbar\sum_j a_j^*\dot{a}_j-E(a^*,a)\right\}\mathrm{d}t=0\\&(\delta a_j(t_1)=\delta a_j(t_2)=0)\,.\end{aligned}\right\} \tag{76}$$

在变分时，$a(t_1)$ 及 $a(t_2)$ 是固定的，而且它们必须代表一条真实路径的两个端点. 用 Φ_c, Φ_c^* 表示出来就是

$$\left.\begin{aligned} &\delta\int_{t_1}^{t_2} L(\Phi^*,\Phi,\dot{\Phi}^*,\dot{\Phi})\mathrm{d}t=0\\ &(\delta\Phi_c(\xi,t_1)=\delta\Phi_c(\xi,t_2)=0)\,,\end{aligned}\right\} \tag{76'}$$

其中

$$L(\Phi^*,\Phi,\dot{\Phi}^*,\dot{\Phi})=\mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}\xi\Phi_c^*(\xi,t)\dot{\Phi}_c(\xi,t)-E(\Phi^*,\Phi)\,.$$

我们已经知道，方程组 (74) 实际上是用变量 a_j^*, a_k 表示的正则方程，$E(a^*,a)$ 即是把哈密顿量表示为这组变量的函数的结果. 从这样的方程组出发进行量子化的方法也在第三章 §6 说明了，结果为

$$a_j\to\widehat{a}_j\,,\quad a_j^*\to\widehat{a}_j^\dagger\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{a}_j=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{a}_j^\dagger=0\,,$$

$$[\widehat{a}_j,\widehat{a}_k]=[\widehat{a}_j^\dagger,\widehat{a}_k^\dagger]=0\,,$$

$$[\widehat{a}_j,\widehat{a}_k^\dagger]=\delta_{ij}\,,$$

$$\Phi_c(\xi,t)\to\sum_j\widehat{a}_j\psi_j(\xi)\,,$$

$$E(a^*,a)\to E(\widehat{a}^\dagger,\widehat{a})\quad(\text{厄米算符})\,.$$

算符 $E(\widehat{a}^\dagger,\widehat{a})$ 是 Φ 场的哈密顿量算符，仿照第三章 (132) 式定义算符微商，可由 Φ 场的薛定谔方程求得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\widehat{a}_j|\Psi(t)\rangle=\langle\Psi(t)|\frac{\partial E(\widehat{a}^\dagger,\widehat{a})}{\partial\widehat{a}_j^\dagger}|\Psi(t)\rangle\,. \tag{77}$$

为了能够把 $E(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ 看成是前面所说的广义哈密顿量算符，应该将 $E(a^*, a)$ 选为

$$E(a^*,a)=\int \Phi_c^*(\xi,t)(T+U)\Phi_c(\xi,t)\mathrm{d}\xi$$
$$+\frac{1}{2}\int\int \Phi_c^*(\xi_1,t)\Phi_c^*(\xi_2,t)w(1,2)$$
$$\times\Phi_c(\xi_2,t)\Phi_c(\xi_1,t)\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\,. \tag{78}$$

这是广义哈密顿量算符随 $\Phi(\xi)$ 换成经典场函数 $\Phi_c(\xi,t)$ 的结果. 所谓把粒子系统的二次量子化理论看成是 Φ 场的量子理论，就是按照这种方法确定 Φ 场的哈密顿量以及其他力学量的表达式，相应地把 Φ 场的薛定谔方程理解为粒子系统的广义薛定谔方程，把场的态矢量空间理解为前面所说的广义态矢量空间. 因此 Φ 场的存在一个属于第 i 类自由度量子的状态，现在表示一个处在 ψ_i 的粒子. 量子的产生、消灭算符即是粒子的产生、消灭算符. 当然，玻色统计法已经被 $\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger$ 的对易关系所概括. 特别提一下，既然经典变量 $\{a_j(t)\}$ 是描述 Φ 场的完整变量，亦即代表了全部坐标和动量，算符集 $\{a_j^\dagger a_j^\dagger\}$ 就代表 Φ 场的量子理论的一组完整变量. 这在 2.4 小节的论述中已经用到.

值得注意，为了从 $E(a^*,a)$ 的表达式 (78) 求出正确的哈密顿量算符，可以遵循如下的规则：把 (78) 式的各项整理成标准形式，使 a_j^* 处在 a_j 的左方. 因此，这个规则也应该看成是 Φ 场量子化方法的组成部分. 显然，在改变函数组 $\{\psi_i(\xi)\}$ 时，这个规则不受影响. 另一方面，对于粒子系统采用通常的坐标和动量进行量子化时，即使变换到第三章 §6 的复变量，也不存在这样的规则.

4.2 费米 Φ 场的量子化

设 $\Phi_c(\xi,t)$ 完整地描写一个费米场在时刻 t 的状态，按单体

正交归一完备波函数 $\{\psi_j(\xi)\}$ 展开

$$\Phi_c(\xi,t)=\sum_j a_j(t)\psi_j(\xi)\,,$$

则 $\{a_j(t)\}$ 可作为场的基本变量，j 的各种值代表场的各种自由度，场的“经典”运动方程仍然可写成 (74) 式的形式

$$\mathrm{i}\hbar\dot{a}_j=\frac{\partial E(a^*,a)}{\partial a_j^*}\,, \tag{79}$$

其中 $E(a^*,a)$ 是 (a_j^*,a_k) 的某个函数，满足

$$(E(a^*,a))^*=E(a^*,a)\,. \tag{80}$$

为了在量子化后得出费米子系统的理论，需要再假定 a_j 与 a_k^* 在量子化之前不是普通的数，而是互相反对易的量，或者说是 Grassmann 代数的生成元，这种量被非零复数乘后仍然是原来类型的量，但被 0 乘后变为 0，而且它们的偶次积是复数，$a_j^*a_j$ 是实数 (不一定是正数). 由于 $a_j^*a_j=-a_ja_j^*$, 要求如下的规则成立

$$(a_j^*a_k)^*=a_k^*a_j\,. \tag{81}$$

一般的规则是

$$(F(a^*,a)G(a^*,a))^*=(G(a^*,a))^*(F(a^*,a))^*\,. \tag{82}$$

(79) 式中的微商符号的定义仍然与以前相似，即当 a_j 改变一个无限小量 δa_j 时，$F(a,a^*)$ 的一级改变量为

$$\delta F(a^*,a)=\sum_j\delta a_j^*\frac{\partial F(a^*,a)}{\partial a_j^*}+\sum_j\delta a_j\frac{\partial F(a^*,a)}{\partial a_j}\,. \tag{83}$$

但现在的 δa_j, δa_j^* 是与 a_j, a_j^* 同类的量，因此它们互相对易而且和 a_k, a_k^* 反对易，例如

$$\frac{\partial a_j}{\partial a_k^*}=\frac{\partial a_k^*}{\partial a_j}=0\,,$$

$$\frac{\partial a_j}{\partial a_j} = \frac{\partial a_j^*}{\partial a_j^*} = 1\,,$$

$$\frac{\partial (a_j a_k)}{\partial a_j} = -\frac{\partial (a_k a_j)}{\partial a_j} = a_k\,,$$

$$\frac{\partial (a_j^* a_k)}{\partial a_k} = -a_j^*\,, \quad \frac{\partial (a_k a_j^*)}{\partial a_j^*} = -a_k\,.$$

由此仍然可把运动方程 (81) 写成 (76) 和 (76′) 的形式，即

$$\left.\begin{aligned} &\delta \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \mathrm{i}\hbar \sum_j a_j^* \dot{a}_j - E(a^*, a) \right\} \mathrm{d}t = 0 \\ &(\delta a_j(t_1) = \delta a_j(t_2) = 0)\,. \end{aligned}\right\} \tag{84}$$

或

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(\Phi^*, \Phi, \dot{\Phi}^*, \dot{\Phi}) \mathrm{d}t = 0$$

$$(\delta \Phi_c(\xi, t_1) = \delta \Phi_c(\xi, t_2) = 0)\,,$$

其中

$$L(\Phi^*, \Phi, \dot{\Phi}^*, \dot{\Phi}) = \mathrm{i}\hbar \int \mathrm{d}\xi \Phi_c^*(\xi, t) \dot{\Phi}_c(\xi, t) - E(\Phi^*, \Phi)\,.$$

方程组 (79) 与 (74) 同型，可以直接进行量子化，考虑到“经典”变量不是普通的复数. 这里作稍为详细的叙述. 设 $\hat{a}_j$ 及 $\hat{a}_j^*$ 分别是 a_j 及 a_j^* 的算符，为了保证 $\langle \Psi | \hat{a}_j^* | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{a}_j | \Psi \rangle^*$，要求 $\hat{a}_j^* = \hat{a}_j^\dagger$. 哈密顿量算符由 $E(a^*, a)$ 随 (a_j, a_k^*) 换为 $(\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger)$ 而成，记为 $E(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$，于是由薛定谔方程得出

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \Psi(t) | \hat{a}_j | \Psi(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | \frac{\mathrm{d}\hat{a}_j}{\mathrm{d}t} | \Psi(t) \rangle \\ &+ \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \langle \Psi(t) | \hat{a}_j E(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) - E(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) \hat{a}_j \ | \Psi(t) \rangle\,. \end{aligned} \tag{85}$$

它应与方程组 (79) 相似，因此 $\hat{a}_j$ 与时间无关，且 $\{\hat{a}_j E(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) - E(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) \hat{a}_j\}$ 应该是 $\partial E(a^*, a)/\partial a_j^*$ 的算符. 为了使 $E(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ 在不含

$\hat{a}_j^\dagger$ 时能够与 $\hat{a}_j$ 对易，只有两种可能性，一种是所有 $\hat{a}_j$ 互相可对易，而且当 $j \neq k$ 时 $\hat{a}_j$ 与 $\hat{a}_k^\dagger$ 互相可对易，这不符合经典量 a_j, a_j^* 的性质，只能考虑另一种可能性：所有的互相反对易，当 $j \neq k$ 时 $\hat{a}_j$ 与 $\hat{a}_k^\dagger$ 互相反对易，而且经典量 $E(a^*, a)$ 必须与所有 a_j^*, a_k 都可对易. 因此

$$\hat{a}_j\hat{a}_k + \hat{a}_k\hat{a}_j = \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger\hat{a}_j^\dagger = 0\,,$$

$$\hat{a}_j\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger\hat{a}_j = 0\,. \quad \text{当 } j \neq k,$$

由此又有

$$(\hat{a}_j\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j)\hat{a}_k = \hat{a}_k(\hat{a}_j\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j)\,,$$

$$(\hat{a}_j\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j)\hat{a}_k^\dagger = \hat{a}_k^\dagger(\hat{a}_j\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j)\,,$$

可见 $(\hat{a}_j\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j)$ 与所有算符都可对易，因此是常数，把 $a_j^*a_j$ 看作特殊的 $E(a^*, a)$ 可推知这个常数是 1. 综上所述，要从反对易的量 (a_j^*, a_k) 和运动方程 (79) 出发进行量子化，$E(a^*, a)$ 除满足 (80) 式之外，应与 (a_j^*, a_k) 都可对易，这时量子化导致如下的结果：

$$a_j \to \hat{a}_j\,, \quad a_j^* \to \hat{a}_j^\dagger\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{a}_j = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{a}_j^\dagger = 0\,,$$

$$\hat{a}_j\hat{a}_k + \hat{a}_k\hat{a}_j = \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger\hat{a}_j^\dagger = 0\,,$$

$$\hat{a}_j\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger\hat{a}_j = \delta_{ij}\,,$$

$$\Phi_c(\xi, t) \to \sum_j \hat{a}_j\psi_j(\xi)\,,$$

$$E(a^*, a) \to E(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) \quad \text{(厄米算符)}\,.$$

仿照 (83) 式可定义算符微商，即

$$\delta F(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) = \sum_j \delta\hat{a}_j^\dagger \frac{\partial F(\hat{a}^\dagger, \hat{a})}{\partial \hat{a}_j^\dagger} + \sum_j \delta\hat{a}_j \frac{\partial F(\hat{a}^\dagger, \hat{a})}{\partial \hat{a}_j}\,, \tag{86}$$

其中 $\delta\hat{a}_j$ 与 $\delta\hat{a}_j^\dagger$ 互相反对易而且与各个 $\hat{a}_j$ 及 $\hat{a}_j^\dagger$ 也互相反对易. 由此可把 (85) 式写成 (77) 式的形式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\hat{a}_j|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t)|\frac{\partial E(\hat{a}^\dagger,\hat{a})}{\partial\hat{a}_j^\dagger}|\Psi(t)\rangle\,. \tag{87}$$

为了把二次量子化理论看成 Φ 场的量子理论，应该按照与玻色场情形类似的方法构成场的力学量. $E(a^*,a)$ 应选为

$$\begin{aligned} E(a^*,a) = &\int \Phi_c^*(\xi,t)(T+U)\Phi_c(\xi,t)\mathrm{d}\xi \\ &+\frac{1}{2}\int\int \Phi_c^*(\xi_1,t)\Phi_c^*(\xi_2,t)w(1,2) \\ &\times\Phi_c(\xi_2,t)\Phi_c(\xi_1,t)\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\,. \end{aligned} \tag{88}$$

Φ 场的薛定谔方程应理解为粒子系统的广义薛定谔方程，场的态矢量空间理解为前面所说的广义态矢量空间. Φ 场量子的产生、消灭算符即是粒子的产生、消灭算符. 费米统计法已经被 $\hat{a}_i$, $\hat{a}_j^\dagger$ 的反对易关系所概括. 与玻色场情形类似，由于经典变量 $\{a_j(t)\}$ 是描述 Φ 场的完整变量，算符集 $\{a_j^\dagger a_j^\dagger\}$ 就代表 Φ 场的量子理论的一组完整变量. 这在 3.4 小节的论述中已经用到.

要从 (88) 式求出正确的哈密顿量算符，可遵循如下的规则：根据 a_j, a_k^* 之间的反对易性把 (88) 式中各项整理成标准形式，使 a_i^* 处在 a_j 的左方，然后把 a_j^* 及 a_j 分别换成算符 $\hat{a}_j^\dagger$ 及 $\hat{a}_j$. 这个规则也应该看成是 Φ 场量子化方法的组成部分.

参 考 文 献

[1] Landau L D, Lifshitz E M. Quantum Mechanics (3rd, revised edition). Oxford: Pergamon Press, 1977.

第五章　时空对称性

各类对称性原则，经常可用来直接推导重要的物理结论，建立或改进理论模型，或寻求未知的相互作用．因此关于各类对称性及近似对称性的探求和运用，是物理学研究中极为重要的方面．时空对称性是最普遍的对称性，它相当于不同惯性参考系在表达物理规律上的等价性．当限于静止的惯性参考系时，这即是时间的均匀性，空间的均匀性和各向同性，其扩充含义还包括时间正反方向对称性和空间左右对称性．在一般情形，惯性参考系之间的等价性意味着物理规律的表述对洛伦兹变换或伽利略变换的不变性．这个关于时空性质的原理，在非相对论量子力学的情形用于孤立系统时，可归结为薛定谔方程对伽利略变换 (包括各类特殊的时空变换) 的不变性．如果系统不是孤立的，则不变性的范围受到外场的限制，当外场对某一类时空变换保持不变时，运动方程也保持相应的不变性．其次，从经典力学已经知道，在许多重要情形，运动方程的一定不变性导致相应的守恒定律，在量子力学中也有对应的内容．

虽然时空对称性原理在经典力学中早已知道，但在量子力学中，它与新的概念和原理相结合，成了运用于微观领域的量子力学原理．本章的基本内容是就非相对论量子力学情形给出这一原理及其结果的表述．

§1　逆过程和 Wigner 定理

在本章的讨论中，一律采用笛卡儿坐标，设 $\Psi(x,t)$ 是用原来选定的参考系表达的系统在时刻 t 的波函数 (薛定谔绘景)，它随

时间的变化描述一种可能的运动过程 (满足薛定谔方程). 这里 (x) 代表系统的位形点对此参考系的全部笛卡儿坐标, 即所有粒子的 (x,y,z), 当粒子还有内部自由度时, Ψ 是时空部分与其他部分的积的叠加. 再考虑一个新的惯性参考系, 它与旧参考系之间的时空坐标变换如下

$$(x,y,z,t) \xrightarrow{A} (x',y',z',t'), \tag{1}$$

这是同一事件在两个参考系中的时空坐标之间的关系. 对于含有多个粒子的系统, 每个粒子在两种参考系中的时空坐标都满足此式. 在新参考系中描写上面所说的运动过程的波函数可借助旧的波函数来确定

$$\Psi'(x',t') = \Lambda\Psi(x,t), \tag{2}$$

这式子表示出由于参考系的变换而导致的波函数的变换. 其中 (x') 与 (x) 是系统的相同位形点对新旧参考系的空间坐标, t' 与 t 是相同时刻在这两个参考系中的时间坐标. Λ 描写除时空坐标的替换以外的其他变动, 包括波函数中代表内部自由度部分的变动, 并且带有不定相因子. 当变换 A 不是连续变换时, 也不应事先假定 Λ 是线性算符.

$\Psi'(x',t')$ 随 t' 的变化满足在新参考系中写出的薛定谔方程. 如果系统是孤立的, 则新旧参考系中的薛定谔方程完全相同. 因此, 对于孤立系统来说, 我们又可以把 $\Psi'(x',t')$ 看作旧参考系中薛定谔方程的另一个解, 它代表系统的另一种可能的运动过程对于旧的参考系而言的波函数. 这时, (x',t') 是被当作相对于旧参考系的时空坐标看待的, 新的运动过程可称为旧的运动过程的 (A) 变换. 这种把从 $\Psi(x,t)$ 到 $\Psi'(x',t')$ 的变换看作是运动过程的替换的观点 (参考系不变), 称为主动观点, 而原来的即波函数的变换来自参考系的变换 (运动过程不变) 的观点, 则称为被动观点. 从主动观点看待 (2) 式时, (x',t') 与 (x,t) 都是对旧参考系来说的, 当然不再代表相同的位形点和相同的时间, 而是代表在一

种时空变换 (由 (1) 式确定) 下各粒子的新旧位置和时间. 对于非孤立系统, 仍然可以采用主动观点, 即按相同的方法定义运动方程的 (A) 变换, 但这时要注意, 一种可能的运动方程经过 (A) 变换之后, 一般都不再代表原系统的可能运动方程, 换成被动观点的说法, 就是非孤立系统的运动方程会因参考系的不同而改变形式. 在后面各节, 我们将采用主动观点来叙述.

利用 (1) 式确定 t 以及各粒子的 (x,y,z) 作为 (x',y',z',t') 的函数, 可把 $\Psi(x,t)$ 表示为 $\Psi(x(x',t'),t(t'))$, 于是

$$\Psi'(x',t')=\Lambda\Psi(x(x',t'),t(t'))\,. \tag{3}$$

如果变换 (A) 不改变时间的方向, 通常就把这个关系式表示为

$$\Psi'(x',t')=\overline{U}_{(A)}\Psi(x',t'),$$

其中 $\overline{U}_{(A)}$ 是由变换 (A) 决定的算符. 在主动观点下 (x',t') 已被解释为相对于原参考系的时空坐标, 把这个关系式写成 $\Psi'(x,t)=\overline{U}_{(A)}\Psi(x,t)$ 更为自然. 这是原来的运动方程和它的 (A) 变换过程在时刻 t 的波函数之间的关系, 用态矢量的形式来表示, 有

$$|\Psi'(t)\rangle=U_A|\Psi(t)\rangle\,. \tag{4}$$

由 $U_{(A)}|\Psi(t)\rangle$ 代表的状态可称为 $|\Psi(t)\rangle$ 的 (A) 变换态. 如果算符 $U_{(A)}$ 与时间有关, 可在给定的时刻 t(任一时刻), 把态空间中任一态矢量 $|\Phi\rangle$ 设想为一定运动过程中的 $|\Psi(t)\rangle$(在此时刻以后和过去时间的态矢量被薛定谔方程所决定), 这样, 就可确定 $|\Phi\rangle$ 的 (A) 变换态, 即 $\overline{U}_{(A)}(t)|\Phi\rangle$. 当 $U_{(A)}$ 与时间无关时, 不必指明被它作用的态矢量所属的时间, 可直接说 $\overline{U}_{(A)}|\Phi\rangle$ 是 $|\Phi\rangle$ 的 (A) 变换态.

当 (A) 变换是单纯的时间反演时 $(t'=-t,\ x'=x)$, 通常把 (3) 式表示的态矢量之间的关系 (主动观点) 写成

$$.\ |\Psi'(t)\rangle=T|\Psi(-t)\rangle\,,$$

或

$$|\Psi'(t')\rangle = T|\Psi(t)\rangle\,. \tag{5}$$

$|\Psi'(t)\rangle$ 所代表的运动过程与 $|\Psi(t)\rangle$ 所代表的过程是互逆的，其中一个称为另一个的时间反演. T 称为时间反演算符. 显然 $(T)^2$ 与单位算符只能有一个相因子的差别. 对于任意的态矢量 $|\Phi\rangle$ 都说它与 $T|\Phi\rangle$ 互为时间反演态.

这里应该注意到时间反演变换的特殊之处. 如上所述，如果 (A) 变换不包含时间反演，则一个运动过程的变换归结为各时刻的状态 $|\Psi(t)\rangle$ 换成 $U_{(A)}|\Psi(t)\rangle$. 但是当 (A) 是时间反演变换时，如果只把一个运动过程的各状态换成其时间反演态而不把时间的进行方向也反转过来，就不能形成一个运动过程，这与经典力学中的情形是相似的. 一个经典质点在时间 Δt 内的运动过程及其逆过程，在 Δt 趋于零时变成两个互为时间反演的状态，这是位置相同而动量相反的两个状态. 如果设想把质点在一个经典运动过程中各个位置上的动量反号，却不改变时间进行方向，则当然不能形成一个新的运动过程，因为这是要求质点沿着与其速度相反的方向移动.

对于一些简单情形，确定变换算符是容易的. 但是要顾及广泛的应用，就需要给出较普遍的论述. 为此，让我们预先阐明一个一般性的定理 (Wigner,1932 年), 其内容是：保持态矢量内积绝对值的可逆变换，实质上只能是幺正的或反幺正的. 更详细地说，对于任何一个满足这种条件的变换，总是可以找出一个幺正或反幺正的新变换，使得每一态矢量在新旧变换下而成的两种态矢量，只有相因子的差别. 现在给出这个定理的证明. 假设给定了一个作用于一定系统的态空间的可逆变换，它保证任何两个态矢量 Ψ, Φ 的内积和变换后的态矢量 Ψ', Φ' 的内积具有相同的绝对值，即

$$|\langle\Psi'|\Phi'\rangle| = |\langle\Psi|\Phi\rangle|\,. \tag{6}$$

任意选取一组正交归一和完备的基矢 $\{\psi_1, \psi_2, \psi_3, \cdots\}$, 在所说的变换下, 显然得到一组对应的正交归一和完备的基矢 $\{\psi_1', \psi_2', \psi_3', \cdots\}$. 由条件 (6) 可知, $\psi_1 + \psi_m (m = 2, 3, \cdots)$ 在变换之后, 不可能含有 ψ_1' 与 ψ_m' 以外的成分, 故

$$(\psi_1 + \psi_m)' = \alpha_1 \psi_1' + \alpha_m \psi_m' ,$$

其中

$$\alpha_1 = \langle \psi_1' | (\psi_1 + \psi_m)' \rangle, \quad \alpha_m = \langle \psi_m' | (\psi_1 + \psi_m)' \rangle .$$

再次利用条件 (6) 可知 $|\alpha_m| = |\alpha_1| = 1$, 把 α_m/α_1 看作相因子而吸收到 ψ_m' 中就有

$$(\psi_1 + \psi_m)' = \alpha_1 (\psi_1'' + \psi_m'') , \tag{7}$$

其中

$$\psi_n'' \equiv \frac{\alpha_n}{\alpha_1} \psi_n' \quad (n = 1, 2, \cdots) . \tag{8}$$

由此确定的 $\{\psi_1'', \psi_2'', \psi_3'', \cdots\}$ 也是正交归一和完备的, 因此构成新的基矢.

对于任意 l 与 m , $(\psi_l + \psi_m)'$ 也不含 ψ_l' 与 ψ_m' 以外的成分, 因此是 ψ_l' 与 ψ_m' 的组合, 按照 (8) 式, 也是 ψ_l'' 与 ψ_m'' 的组合, 即

$$(\psi_l + \psi_m)' = d_l \psi_l'' + d_m \psi_m'' .$$

我们要进一步证明 $d_m = d_l$. 当 $l = 1$ 或 $m = 1$ 时, 已有 (7) 式, $l = m$ 的情形也无需考虑, 可约定 $l > 1$ 和 $m > 1$ 而 $l \neq m$. 由

$$\begin{aligned} (\psi_1 + \psi_l + \psi_m)' &= a(\psi_1 + \psi_l)' + b\psi_m'' \\ &= c(\psi_1 + \psi_m)' + d\psi_l'' = e(\psi_l + \psi_m)' + f\psi_1'' . \end{aligned}$$

有

$$\begin{aligned} a\alpha_1(\psi_1'' + \psi_l'') + b\psi_m'' &= c\alpha_1'(\psi_1'' + \psi_m'') + d\psi_l'' \\ &= e(d_l\psi_l'' + d_m\psi_m'') + f\psi_1'' . \end{aligned}$$

按约定，$1, l, m$ 是互不相同的指标，因此

$$ed_l = d = a\alpha_1, \quad ed_m = c\alpha_1' = b, \quad f = c\alpha_1' = a\alpha_1 .$$

这表明 d_l 与 d_m 相等，即对任意的 l, m 都有

$$(\psi_l + \psi_m)' = d_l(\psi_l'' + \psi_m'') . \tag{9}$$

实际上，还同时证明了，当 $1, l, m$ 互不相同时，有

$$(\psi_1 + \psi_l + \psi_m)' = f(\psi_1'' + \psi_l'' + \psi_m'') .$$

考虑任一个态矢量 Ψ，设

$$\Psi = x_1\psi_1 + x_2\psi_2 + x_3\psi_3 + \cdots , \tag{10}$$

于是

$$\Psi' = x_1'\psi_1'' + x_2'\psi_2'' + x_3'\psi_3'' + \cdots . \tag{11}$$

而 $|x_m'| = |x_m|$，求 (11) 与 (9) 式的内积并取绝对值. 由 (6) 式可知

$$|x_l + x_m| = |x_l' + x_m'| ,$$

或

$$x_l^* x_m + x_m^* x_l = x_l'^* x_m' + x_m'^* x_l' ,$$

用 $x_l'x_m'$ 遍乘此式，再把 $x_l'^* x_l'$, $x_m'^* x_m'$ 分别换成 $x_l^* x_l$ 及 $x_m^* x_m$，得出

$$(x_l x_m' - x_l' x_m)(x_l^* x_m' - x_l' x_m^*) = 0 .$$

由此引出两种可能的关系式

(i) $x_l x_m' = x_l' x_m$;

(ii) $x_l^* x_m' = x_l' x_m^*$.

可以进一步断定，对于不为零的复系数 $x_l, x_m, x_n, \cdots$，只要 $x_l', x_m', x_n', \cdots$ 中有一对满足 (i) 中的关系式，其余每一对也满足

此式. 我们用反证法，假定 (x'_m, x'_l) 满足 (i) 而 (x'_n, x'_l) 满足 (ii)，于是

$$\frac{x_m}{x'_m} = \frac{x_l}{x'_l}, \tag{A_1}$$

$$\frac{x^*_n}{x'_n} = \frac{x^*_l}{x'_l}. \tag{B_1}$$

注意 (x'_n, x'_m) 也只能是或者满足 (i) 式或者满足 (ii) 式，如果满足 (i)，即 $(x_n/x'_n) = (x_m/x'_m)$，利用 (A_1) 式消去 (x_m, x'_m)，得到与 (B_1) 式矛盾的结果. 如果 (x'_n, x'_m) 满足 (ii)，即 $(x_m/x'_m) = (x_n/x'_n)$，利用 (B_1) 式消去 (x^*_n, x'_n)，得到与 (A_1) 式矛盾的结果，即是说，(A_1) 与 (B_1) 不相容，原假设不能成立，所以，只能是 (x'_m, x'_l) 与 (x'_n, x'_l) 或者同时满足 (i)，或者同时满足 (ii). 这又导致全体非零 $x'_l, x'_m, x'_n, \cdots$ 应满足下列两类关系式之一

$$(\mathrm{i}') \quad \frac{x_l}{x'_l} = \frac{x_m}{x'_m} = \frac{x_n}{x'_n} = \cdots = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha},$$

$$(\mathrm{ii}') \quad \frac{x^*_l}{x'_l} = \frac{x^*_m}{x'_m} = \frac{x^*_n}{x'_n} = \cdots = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta},$$

其中 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}$ 与标号 l, m, n 无关. 在变换给定之后，复系数 $x_l, x_m, x_n, \cdots$ 的改变 (代表 Ψ 的更换) 不可能引起 (i′) 与 (ii′) 所示的两类关系式之间的过渡，因此这两类关系式代表着两类变换，现在分别进行讨论.

(i′) 在第一种情形，有 $x'_m = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} x_m$ ，故 (11) 式变为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\Psi' = x_1\psi''_1 + x_2\psi''_2 + x_3\psi''_3 + \cdots. \tag{12}$$

按下式定义变换算符 U

$$U\Psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\Psi', \tag{13}$$

对于 ψ_m，由 $\psi'_m = x'_m\psi''_m$ 以及 $x_m = 1$ 有

$$U\psi_m = \psi''_m.$$

因此 (10) 式和 (12) 式给出

$$U\sum_n x_n\psi_n = \sum_n x_n U\psi_n\,.$$

对任意态矢量 $\Psi_A = \sum_n a_n\psi_n$ 和 $\Psi_B = \sum_n b_n\psi_n$, 显然有

$$\begin{aligned} U(a\Psi_A + b\Psi_B) &= \sum_n (aa_n + bb_n)U\psi_n \\ &= aU\Psi_A + bU\Psi_B\,, \end{aligned} \tag{14}$$

这表明 U 是线性算符. 注意 $\langle\psi_l''|\psi_n''\rangle = \delta_{ln}$, 可求得

$$\langle U\Psi_A|U\Psi_B\rangle = \sum_n a_n^* b_n = \langle\Psi_A|\Psi_B\rangle\,. \tag{15}$$

这里, 用记号 $\langle U\Psi_a|$ 代表 $\overline{U|\Psi_A\rangle}$. 我们看到 , U 是幺正算符, 即是说, 变换 $\Psi \to \Psi'$ 实质上是幺正的.

(ii′) 在第二种情形, 有 $x'_m = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta}x_m^*$, 故

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\Psi' = x_1^*\psi_1'' + x_2^*\psi_2'' + x_3^*\psi_3'' + \cdots\,. \tag{16}$$

定义如下的算符 R

$$R\Psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\Psi'\,, \tag{17}$$

则

$$R\psi_n = \psi_n''\,, \tag{18}$$

$$R\sum_n x_n\psi_n = \sum_n x_n^* R\psi_n\,. \tag{19}$$

由此可证明, 对于任意的矢量 Ψ_A, Ψ_B 和任意常数 a, b , 有

$$R(a\Psi_A + b\Psi_B) = a^* R\Psi_A + b^* R\Psi_B\,,$$

具有这种性质的算符 R 称为反线性算符. 求 $R\Psi_A$ 与 $R\Psi_b$ 的内积, 用 $\langle R\Psi_A|$ 代表 $\overline{R|\Psi_A\rangle}$ 有

$$\langle R\Psi_A|R\Psi_B\rangle = \langle\Psi_A|\Psi_B\rangle^*\,, \tag{20}$$

具有这种性质并且有逆的反线性算符 R，称为反幺正的. 因此变换 $\Psi \to \Psi'$ 实质上是反幺正的. 综合以上两种情形，就证明了所说的定理.

我们所说的 (A) 变换是符合条件 (6) 的. 首先考虑不含时间反演的 (A) 变换，把 Ψ 与 Φ 设想为系统在两个运动过程中在特定时刻 t 所处的状态，于是 $|\langle\Psi|\Phi\rangle|^2$ 代表 t 时刻在状态 Φ 下作某一测量获得某一结果的概率，$|\langle U_{(A)}(t)\Psi|U_{(A)}(t)\Phi\rangle|^2$ 则可看作在另一惯性参考系中写出的同一个量的表达式，这样的量应当是伽利略不变的，因此 $|\langle\Psi|\Phi\rangle|$ 等于 $|\langle U_{(A)}(t)\Psi|U_{(A)}(t)\Phi\rangle|$，虽然算符 $U_{(A)}(t)$ 中出现了时间 t，但新参考系中的薛定谔方程保证 $|\langle U_{(A)}(t)\Psi|U_{(A)}(t)\Phi\rangle|$ 与 t 无关，故可简写为 $\langle\Psi'|\Phi'\rangle$，因此有 $|\langle\Psi|\Phi\rangle| = |\langle\Psi'|\Phi'\rangle|$. 改用主动观点来叙述这个结果就是：对任一状态进行任一种观察，与对变换后的状态进行对应的观察，结果相同. 这正是条件 (6) 的含义. 类似地，对于时间反演变换，把 Ψ 与 Φ 设想为系统的两个运动过程在时刻 t 的状态，也有

$$|\langle\Psi|\Phi\rangle| = |\langle\Psi'(t')|\Phi'(t')\rangle| = |\langle T\Psi|T\Phi\rangle|,$$

这里，$\langle T\Psi|$ 代表 $\overline{|T\Psi\rangle}$，即是与 $T|\Psi\rangle$ 对应的左矢量. 因此，由算符 T 决定的变换也符合条件 (6). 可见，由伽利略变换 (包括各类特殊的空间变换) 和时间反演引起的态矢量的变换本质上只能是幺正的或者是反幺正的.

§2 时间平移，空间平移和空间转动

2.1 时间平移

用 $H(t)$ 代表系统的哈密顿量算符，假设 $|\Psi(t)\rangle$ 是在时刻 t 的态矢量，并且随 t 的变化描写一种可能的运动过程，于是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle\,. \tag{21}$$

设想这个过程各状态出现的时间整体地推迟了一个间隔 Δ，这个设想的“运动过程”不一定代表原系统的可能运动过程，它称为原来运动过程的时间平移，而时刻 t 的态矢量是

$$|\Psi_\Delta(t)\rangle = |\Psi(t-\Delta)\rangle = T(t-\Delta,t)|\Psi(t)\rangle\,. \tag{22}$$

态矢量 $|\Psi_\Delta(t)\rangle$ 又称为 $|\Psi(t)\rangle$ 在时间平移 Δ 下变成的态矢量，算符 $T(t,t_0)$ 是第三章 §1 引进的时间演化算符.

由于 $T(t,t_0)$ 是幺正算符，所以决定时间平移的算符是幺正的. 鉴于这个性质的重要性，再把第三章讲过的论据重述如下：(1) 根据叠加原理，$T(t,t_0)$ 是线性算符；(2) 按照 $T(t,t_0)$ 的含义，它是有逆的 (当 t 及 t_0 都取有限值时)；(3) 概率守恒的要求导致 $(T(t,t_0))^\dagger T(t,t_0)$ 恒等于 1 . 如果从本章 §1 的一般定理来考虑，关键之点在于 $T(t,t_0)$ 不是反线性的. 对于其他的变换也要处理类似的问题，在后面采用的论证变换算符的幺正性的方法也都适用于时间平移的情形.

如果系统不受外界作用，或者外场是与时间无关的，则时间的均匀性要求运动方程具有时间平移不变性，即是说，只要 $|\Psi(t)\rangle$ 满足 (21) 式，则 $|\Psi_\Delta(t)\rangle$ 也满足. 这时，如第三章已经指出的，系统的能量是守恒量，即 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|H(t)|\Psi(t)\rangle = 0$, 这又相当于

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = 0\,.$$

现在采用的是薛定谔绘景，坐标和动量的算符不含时间，所以此式意味着，孤立的或者只受到与时间无关的外场作用的系统，哈密顿量算符作为坐标和动量算符的函数与时间无关. 这时 $T(t-\Delta,t)$ 可写成 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}H\Delta/\hbar}$.

2.2 空间平移

在第三章已经从经典对应的观点说明了态矢量的空间平移

的概念. 态矢量 $|\Psi\rangle$ 在空间平移 δ 时变成的态矢量 $|\Psi^\delta\rangle$ 可表示为

$$|\Psi^\delta\rangle = U(\delta)|\Psi\rangle\,,$$

这种变换符合上节一般定理的条件, 因此实质上或者是幺正的或者是反幺正的, 但借助连续参量 δ 很容易排除反幺正性. 试假定 $U(\delta)$ 是反线性算符, 于是当 δ 是无限小量时仍然是反线性算符, 因而当 $\delta=0$ 时也是如此. 但 $U(0)$ 实际上是一个常数, 所以原假定不能成立, 因此可适当选择常数因子使 $U(\delta)$ 是幺正算符. 在第三章已经事先利用了 $U(\delta)$ 的幺正性质, 并且求出了如下的公式:

$$U(\delta)^\dagger \hat{r}_k U(\delta) = \hat{r}_k + \delta\,, \tag{23}$$

$$U(\delta)^\dagger \hat{p}_k U(\delta) = \hat{p}_k\,, \tag{24}$$

其中 $\hat{r}_k$, $\hat{p}_k$ 分别是第 k 号粒子的坐标和动量算符. 用 $\hat{s}_k$ 代表第 k 号粒子的自旋算符, 由于自旋是内禀角动量, 不受空间平移的影响, 故

$$U(\delta)^{-1} \hat{s}_k U(\delta) = \hat{s}_k\,, \tag{25}$$

这些条件以及在第三章引入的补充规定唯一地决定了 $U(\delta)$, 即

$$U(\delta) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{\delta}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}/\hbar}\,, \tag{26}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{P}}$ 是系统的总动量算符.

现在说明力学量的算符的空间平移的概念. 力学量 F 的算符 $\hat{F}$ 在空间平移 δ 时变成的算符 $\hat{F}^\delta$ 由下式定义

$$\hat{F}^\delta|\Psi^\delta\rangle = (\hat{F}|\Psi\rangle)^\delta\,, \tag{27}$$

或

$$\hat{F}^\delta U(\delta) = U(\delta)\hat{F}\,,$$

故

$$\widehat{F}^{\delta} = U(\delta)\widehat{F}U(\delta)^{\dagger}\,. \tag{28}$$

这种定义又可用矩阵元的关系式表示为

$$\langle \Psi_A^{\delta}|\widehat{F}^{\delta}|\Psi_B^{\delta}\rangle = \langle \Psi_A|\widehat{F}|\Psi_B\rangle\,. \tag{29}$$

由 (23)—(25) 及 (28) 式得到

$$\widehat{\boldsymbol{r}}_k^{\delta} = \widehat{\boldsymbol{r}}_k - \boldsymbol{\delta}\,. \tag{30a}$$

$$\widehat{\boldsymbol{p}}_k^{\delta} = \widehat{\boldsymbol{p}}_k\,, \tag{30b}$$

$$\widehat{\boldsymbol{s}}_k^{\delta} = \widehat{\boldsymbol{s}}_k\,. \tag{30c}$$

对于 $(\widehat{\boldsymbol{r}}_k,\ \widehat{\boldsymbol{p}}_k,\ \widehat{\boldsymbol{s}}_k)$ 的函数 $F(\widehat{\boldsymbol{r}},\ \widehat{\boldsymbol{p}},\ \widehat{\boldsymbol{s}})$，有

$$F^{\delta} = F(\widehat{\boldsymbol{r}}^{\delta}, \widehat{\boldsymbol{p}}^{\delta}, \widehat{\boldsymbol{s}}^{\delta})\,. \tag{31}$$

设 $|\Psi(t)\rangle$ 代表系统在时刻 t 的态矢量，并且随 t 的变化描写一种可能的运动过程，它的空间平移是指一个设想的以 $|\Psi^{\delta}(t)\rangle$ 即 $U(\delta)|\Psi(t)\rangle$ 为时刻 t 的态矢量的“运动方程”，它不一定代表原系统的可能运动过程. 如果系统不受外界作用，则空间的均匀性要求运动方程具有空间平移不变性，即任何一个可能的运动过程的空间平移都是原来系统的可能运动过程. 在这个条件下，如第三章已经指出的，系统的总动量是守恒量，即 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\widehat{\boldsymbol{P}}|\Psi(t)\rangle = 0$. 这相当于

$$[\widehat{\boldsymbol{P}}, H] = 0\,,$$

即是说，孤立系统的 H 应该是空间平移不变的.

2.3 空间转动

这里只需要考虑空间绕原点的转动. 以 $\boldsymbol{n}$ 代表转轴，θ 代表转角，$g(\boldsymbol{n},\theta)\boldsymbol{r}$ 代表位置矢量 $\boldsymbol{r}$ 在空间转动 $(\boldsymbol{n},\theta)$ 时变成的新矢

量. 如果把 $\boldsymbol{r}$ 表示为三行单列阵, 则 $g(\boldsymbol{n},\theta)$ 可用 3×3 的幺模实正交矩阵代表. 这时用同样的记号 $g(\boldsymbol{n},\theta)$ 代表相应的矩阵. 例如表示空间绕坐标轴转动的 $g(\boldsymbol{j},\beta)$ 及 $g(\boldsymbol{k},\varphi)$ 的矩阵如下:

$$g(\boldsymbol{j},\beta)=\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix},$$

$$g(\boldsymbol{k},\varphi)=\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi & 0\\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

在第三章已经从经典对应的观点说明了态矢量的空间转动的概念, 态矢量 $|\Psi\rangle$ 在空间转动 g 时变成的态矢量可表示为

$$|\Psi^g\rangle=D(g)|\Psi\rangle\,.$$

这种变换也符合第一节的一般定理的条件, 因此实质上或者是幺正的或者是反幺正的. 和空间平移的情形相似, 可以借助转动参量的连续性证明 $D(g)$ 不是反线性算符, 因此适当选择常因子可使它是幺正算符. 在第三章已经事先利用 $D(g)$ 的幺正性并求出了如下的表达式:

$$D(g)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\boldsymbol{n}\cdot\widehat{\boldsymbol{J}}/\hbar}, \tag{32}$$

其中 $\widehat{\boldsymbol{J}}$ 是系统的总角动量算符.

现在说明力学量的算符的空间转动的概念. 力学量 F 的算符 $\widehat{F}$ 在空间转动 g 时变成的算符 $\widehat{F}^g$ 由下式定义

$$\widehat{F}^g|\Psi^g\rangle=(\widehat{F}|\Psi\rangle)^g\,, \tag{33}$$

即

$$\widehat{F}^g=D(g)\widehat{F}\big(D(g)\big)^\dagger. \tag{34}$$

这种定义又可以用矩阵元的关系式表示为

$$\langle \Psi_A^g | \widehat{F}^g | \Psi_B^g \rangle = \langle \Psi_A | \widehat{F} | \Psi_B \rangle . \tag{35}$$

由 (34) 式及第三章 (46)—(48) 式得出

$$\widehat{\boldsymbol{r}}_k^g = g^{-1} \widehat{\boldsymbol{r}}_k , \tag{36}$$

$$\widehat{\boldsymbol{p}}_k^g = g^{-1} \widehat{\boldsymbol{p}}_k , \tag{37}$$

$$\widehat{\boldsymbol{s}}_k^g = g^{-1} \widehat{\boldsymbol{s}}_k . \tag{38}$$

对于 $(\widehat{\boldsymbol{r}}_k, \widehat{\boldsymbol{p}}_k, \widehat{\boldsymbol{s}}_k)$ 的函数 $F(\widehat{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{p}}, \widehat{\boldsymbol{s}})$，有

$$F^g = F(g^{-1}\widehat{\boldsymbol{r}}, g^{-1}\widehat{\boldsymbol{p}}, g^{-1}\widehat{\boldsymbol{s}}) . \tag{39}$$

设 $|\Psi(t)\rangle$ 代表系统在时刻 t 的态矢量，并且随时间 t 的变化描写一种可能的运动过程，它的空间转动过程是指一个设想的以 $D(g)|\Psi(t)\rangle$ 为时刻 t 的态矢量的“运动过程”，它不一定代表原系统的可能运动过程. 如果系统不受外界作用或者外场对于空间绕原点的转动是不变的，则空间的各向同性的性质要求运动方程具有空间转动不变性，即任何一个可能的运动过程的空间转动都是原来系统的可能运动过程，在这种条件下，如第三章已经指出的，系统的总角动量是守恒量，即 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \Psi(t)|\widehat{\boldsymbol{J}}|\Psi(t)\rangle = 0$. 这相当于

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

即是说，孤立系统或只受转动不变的外场作用的系统，哈密顿量算符应该是转动不变的.

§3 空 间 反 射

3.1 态矢量及算符在空间反射下的变换

设有一个作经典运动的质点在无限短时间 Δt 内从点 r 移动到 $r + \Delta r$, 如果这个位置变动过程经受一个对于坐标原点的

空间反射，就变成另一过程：质点在 Δt 时间内从点 $-\boldsymbol{r}$ 移动到 $-\boldsymbol{r}-\Delta\boldsymbol{r}$. 令 $\Delta t\to 0$ 就可看出，质点的状态 $(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 在空间反射下变为 $(-\boldsymbol{r},-\boldsymbol{p})$. 由此也给出了量子力学中空间反射概念的含义. 为了简化记号，在本节中把态矢量 $|\Psi\rangle$ 在空间对坐标原点反射下变成的态矢量记作 $|\widehat{\Psi}\rangle$, 其基本性质是：

$$\langle\widehat{\Psi}|\widehat{\Psi}\rangle=\langle\Psi|\Psi\rangle\,,$$

$$\langle\widehat{\Psi}|\widehat{\boldsymbol{r}}_k|\widehat{\Psi}\rangle=-\langle\Psi|\widehat{\boldsymbol{r}}_k|\Psi\rangle\,,$$

$$\langle\widehat{\Psi}|\widehat{\boldsymbol{p}}_k|\widehat{\Psi}\rangle=-\langle\Psi|\widehat{\boldsymbol{p}}_k|\Psi\rangle\,,$$

$$\langle\widehat{\Psi}|\widehat{\boldsymbol{s}}_k|\widehat{\Psi}\rangle=\langle\Psi|\widehat{\boldsymbol{s}}_k|\Psi\rangle\,,$$

其中关于自旋的条件是仿照 $\widehat{\boldsymbol{r}}\times\widehat{\boldsymbol{p}}$ 的性质给出的. $|\widehat{\Psi}\rangle$ 可以写成 $P|\Psi\rangle$, 其中 P 是幺正或反幺正算符，因此由这些条件可得

$$P^{-1}\widehat{\boldsymbol{r}}_kP=-\widehat{\boldsymbol{r}}_k\,,\tag{40}$$

$$P^{-1}\widehat{\boldsymbol{p}}_kP=-\widehat{\boldsymbol{p}}_k\,,\tag{41}$$

$$P^{-1}\widehat{\boldsymbol{s}}_kP=\widehat{\boldsymbol{s}}_k\,.\tag{42}$$

由 (40) 与 (41) 式计算坐标、动量的对易关系以及由 (42) 式计算自旋投影的对易关系都得到 $P^{-1}(\mathrm{i})P=\mathrm{i}$. 这表明 P 不是反线性算符，因此可选定为幺正算符，即

$$P^\dagger=P^{-1}\,.\tag{43}$$

由于粒子还可以有其他自由度，根据条件 (40)—(42) 以及 (43) 式还不能确定空间反射算符 P. 按照本来的理解，一个态矢量经过空间反射之后，还是代表原系统的一种状态，但是粒子可能具有受空间反射影响的内禀性质. 所谓内禀宇称就是用来描写粒子的内禀态的空间反射性质的物理量. 关于这个物理量的有效范围和取值，需要针对各类粒子和根据有关的实验资料来作出判断.

力学量的算符 $\hat{F}$ 在空间反射下变成的算符 $\hat{F}^{(p)}$ 按下式定义

$$P\hat{F} = \hat{F}^{(p)}P\,,$$

故

$$\hat{F}^{(p)} = P\hat{F}P^{\dagger}\,. \tag{44}$$

与此等效的矩阵元关系式为

$$\langle\hat{\Psi}_A|\hat{F}^{(p)}|\hat{\Psi}_B\rangle = \langle\Psi_A|\hat{F}|\Psi_B\rangle.$$

在非相对论量子力学范围内，各种力学量的算符都可以表示为坐标、动量及自旋算符的函数 (在引入同位旋来描写中子和质子时，力学量也可以依赖于同位旋)，在这些基本算符中，只有与轨道运动有关的坐标和动量受到空间反射的影响．我们用 Π 代表描写轨道自由度的空间反射的算符，这时有

$$\Pi^{\dagger}\Pi = \Pi\Pi^{\dagger} = 1\,, \tag{45}$$

$$\Pi^{\dagger}\hat{\boldsymbol{r}}_k\Pi = -\hat{\boldsymbol{r}}_k\,, \tag{46}$$

$$\Pi^{\dagger}\hat{\boldsymbol{p}}_k\Pi = -\hat{\boldsymbol{p}}_k\,, \tag{47}$$

$$\Pi^{\dagger}\hat{\boldsymbol{s}}_k\Pi = \hat{\boldsymbol{s}}_k\,, \tag{48}$$

$$\Pi\Pi = 1\,. \tag{49}$$

Π 称为轨道运动的宇称算符，由 (45)—(49) 式可在一个不定正负号的限度内确定它．我们借助坐标算符的本征态规定

$$\Pi|\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2\cdots\rangle = |-\boldsymbol{r}_1, -\boldsymbol{r}_2\cdots\rangle\,, \tag{50}$$

这意味着

$$\langle\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\cdots|\Pi\Psi\rangle = \Psi(-\boldsymbol{r}_1, -\boldsymbol{r}_2, \cdots)\,. \tag{51}$$

对于由 $(\hat{r}_k, \hat{p}_k, \hat{s}_k)$ 构成的算符 F，有

$$\begin{aligned} \Pi F(\hat{r}_k, \hat{p}_k, \hat{s}_k)\Pi^\dagger &= PF(\hat{r}_k, \hat{p}_k, \hat{s}_k)P^\dagger \\ &= F(-\hat{r}_k, -\hat{p}_k, \hat{s}_k)\,. \end{aligned} \tag{52}$$

3.2 宇称守恒定律

宇称作为守恒量，最初是从原子能级跃迁的所谓 Laporte 选择定则中认识到的，Laporte 选择定则来源于原子的薛定谔方程在空间反射下的不变性 (Wigner, 1927 年)，这种不变性实际上是原子中电子轨道运动的 Π 与哈密顿量对易的结果. 由于 $\Pi^2 = 1$, Π 只有两种本征值，即 $\Pi' = \pm 1$. 因此原子的能级可分为偶宇称 $(\Pi' = +1)$ 及奇宇称 $(\Pi' = -1)$ 两类.

后来，宇称守恒被逐渐接受为普遍的定律. 即认为，不管相互作用的类型如何，孤立系统的哈密顿量总是与空间反射算符对易的. 特别是对于相互作用尚不了解的情形，总是把宇称守恒定律当作寻求相互作用规律的指导原则之一.

在宇称守恒的前提之下，还可以借助实验上观察到的各种跃迁过程来推断出粒子的内禀宇称. 我们来看看质子、中子和 π 介子. 质子、中子的自旋是 1/2，π 介子的自旋是 0. 通常约定，质子的内禀宇称为 $\Pi_{\mathrm{p}} = +1$. 再根据中子质子的相似性规定两者的内禀宇称相同，即 $\Pi_{\mathrm{n}} = \Pi_{\mathrm{p}} = +1$. 再来看 π^- 介子，当 π^- 介子被氘核捕获形成 π^- 介原子时，通过发射光子很快就转入 S 轨道，然后衰变为两个中子. 现在分析这个衰变过程 $(\mathrm{d}\pi^- \to \mathrm{nn})$ 来推断 π^- 介子的内禀宇称 (对 $\mathrm{d}\pi^-$ 质心坐标系用角动量及宇称守恒定律). 在初态中，π^- 介原子的总角动量等于氘核的自旋，故 $I = 1$. 而 π^- 对于氘核的轨道运动宇称是偶的. 而且氘核中的质子中子相对运动的宇称也是偶的，因此总宇称是 $\Pi_{\mathrm{p}}\Pi_{\mathrm{n}}\Pi_{\pi} = \Pi_{\pi^-}$. 在末态中，为了满足泡利原理并保证角动量等于 1，排除了两个中子自旋反平行的可能性 (因为这时泡利原理要求相对运动的 $l' =$ 偶

数，而角动量守恒要求 $l'=1$)，可见两个中子自旋是平行的，泡利原理要求 $l'=$ 奇数，因此根据宇称守恒要求推知 $\Pi_{\pi^-}=-1$. 类似的分析表明 π^0 及 π^+ 介子的宇称也是 -1 .

但是到了 1955 年，人们从 θ^+ 及 τ^+ 粒子的性质看到了宇称不守恒的可能性. 这两种粒子有不同的衰变方式

$$\theta^+ \longrightarrow \pi^+ + \pi^0 ,$$

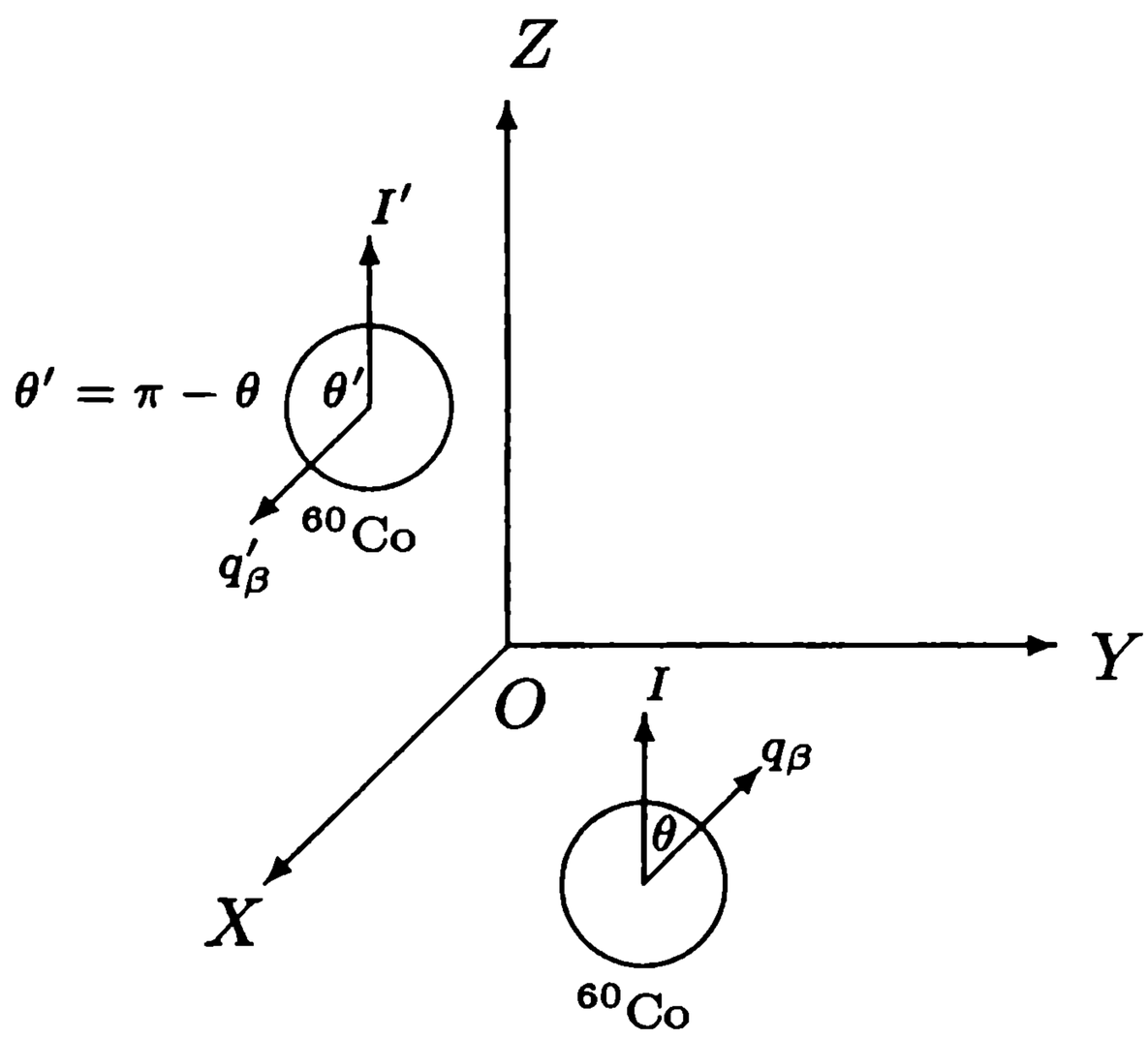
$$\tau^+ \longrightarrow \pi^+ + \pi^+ + \pi^- ,$$

其余各方面都表现出它们是相同的粒子. 可是如果按照宇称守恒的原则来推断它们的内禀宇称，就会得到 $\Pi_{\theta^+}=-\Pi_{\tau^+}$. 鉴于这种情形，李政道、杨振宁 (1956 年) 重新分析了原子物理和核物理中有关宇称守恒的实验证据，发现在电磁作用和核作用领域，宇称守恒原则是以很高的精确度成立的. 但是在弱作用领域，并不存在这种证据，他们提出，θ^+ 和 τ^+ 是相同的粒子 (后来称为 K^+ 介子)，而宇称守恒原则在弱作用领域是不成立的. 他们还建议用若干类实验来作出判断. 吴健雄等人 (1957 年) 用极化钴源所作的 β 衰变实验，第一次证实了李 - 杨关于弱作用领域宇称不守恒的论点.

在本节末所附示图中，I 代表极化钴源中母核自旋的取向，q_β 代表放出的 β 粒子的运动方向. 如果认为在空间反射下，β 粒子变为 β 粒子 (只是运动方向相反)，钴核变为钴核，那么空间的反射对称性就意味着在相对核自旋取向为 θ 角处射出的 β 粒子流的强度与在 $\pi-\theta$ 角处射出的强度相等，然而实际上却观察到很大的向前与向后不对称性. 这就毫无怀疑地证实 β 衰变过程是破坏宇称守恒原则的.

宇称守恒原则虽然只是在弱作用领域失效，但引起了一个带普遍性的问题：空间“本身”是否不具有左右对称性？ (左右对称性等价于反射对称性.) 这里值得特别注意的是，过去已预先认定，在空间反射下某些物理量改变了，但是每一种粒子仍然保

持为原来的粒子，系统的状态在空间反射下仍然变成原系统的状态. 如果这种想法本来就不正确，那就不能从宇称不守恒断定空间是左右不对称的. 例如，如果在空间反射下，钴核和 β 粒子不保持为钴核和 β 粒子，那么即使空间具有左右对称性，也无从断言 θ 角处的 β 粒子流的强度与 $\pi-\theta$ 处的强度相同. 朗道曾提出，每一种粒子在空间反射下应变为它的反粒子，因此空间的左右对称性表现为物理规律在联合反演下的不变性，所谓联合反演，是由宇称变换与粒子 — 反粒子变换的积来代表的. 从 K^0 的衰变的分析中已经找到破坏联合反演不变性以及时间反演不变性的证据.



§4 时 间 反 演

4.1 态矢量及算符在时间反演下的变换

设有一个作经典运动的质点在无限短时间 Δt 内从点 $\boldsymbol{r}$ 移动到 $\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r}$, 这个位置变动过程的逆过程是：质点在 Δt 时间内从点

$\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r}$ 移动到 $\boldsymbol{r}$，令 $\Delta t\to 0$，则这两个过程的起始状态就是互为时间反演的态，所以质点的状态 $(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 在时间反演下变为 $(\boldsymbol{r},-\boldsymbol{p})$. 由此也给出了量子力学中时间反演概念的含义. 在本节中，把态矢量 $|\Psi\rangle$ 在时间反演下变成的态矢量记作 $|\widehat{\Psi}\rangle$，其基本性质是

$$\langle\widehat{\Psi}|\widehat{\Psi}\rangle=\langle\Psi|\Psi\rangle\,,$$

$$\langle\widehat{\Psi}|\widehat{\boldsymbol{r}}_k|\widehat{\Psi}\rangle=\langle\Psi|\widehat{\boldsymbol{r}}_k|\Psi\rangle\,,$$

$$\langle\widehat{\Psi}|\widehat{\boldsymbol{p}}_k|\widehat{\Psi}\rangle=-\langle\Psi|\widehat{\boldsymbol{p}}_k|\Psi\rangle\,,$$

$$\langle\widehat{\Psi}|\widehat{\boldsymbol{s}}_k|\widehat{\Psi}\rangle=-\langle\Psi|\widehat{\boldsymbol{s}}_k|\Psi\rangle\,,$$

其中关于自旋的条件是仿照 $\widehat{\boldsymbol{r}}\times\widehat{\boldsymbol{p}}$ 的性质给出的. 可以将 $|\widehat{\Psi}\rangle$ 写成 $T|\Psi\rangle$，而 T 是幺正或反幺正算符，因此由这些条件得出

$$T^{-1}\widehat{\boldsymbol{r}}_kT=\widehat{\boldsymbol{r}}_k\,,\tag{53}$$

$$T^{-1}\widehat{\boldsymbol{p}}_kT=-\widehat{\boldsymbol{p}}_k\,,\tag{54}$$

$$T^{-1}\widehat{\boldsymbol{s}}_kT=-\widehat{\boldsymbol{s}}_k\,.\tag{55}$$

根据 (53) 与 (54) 式计算坐标、动量的对易关系以及根据 (55) 式计算自旋投影的对易关系可知，T 作用于空间态或自旋态时都是反线性算符，因此可选定为反幺正的，即

$$\langle T\Psi_A|T\Psi_B\rangle=\langle\Psi_A|\Psi_B\rangle^*\,,\tag{56}$$

其中记号 $\langle T\Psi_A|$ 的意义已经在前面解释过，即代表 $T|\Psi_A\rangle$ 的共轭.

在这里我们遇到了实际的反线性算符. 这种算符与被它作用的态矢量中的复常数因子是不可对易的. 或者说，这样的复常数变成了与反线性算符不可对易的算符 (态矢量的加法关系仍然保持着). 不用说，从属于不同自由度的算符，永远是可互相对易的，同样，从属于一定自由度的时间反演算符与被当作从属于别

的自由度的算符的复常数是互相对易的，那么，当一个含有多类自由度的态矢量被乘上一个复常数时，怎么知道这个复常数是从属于哪一部分自由度的？其实答案是简单的，如果不涉及反线性算符的作用，可以完全不谈这种从属关系，也可随便指定一种从属关系. 当涉及反线性算符的作用时就不可不谈了，但还是可以随便指定一种从属关系. 举例说，一个粒子的时间反演算符总是可以看作两个因子的积 T_0T_s, 其中 T_0 只作用于轨道自由度，因此对于自旋自由度不具有反线性特点，T_s 只作用于自旋态，对于空间自由度不具有反线性特点. 假定 a 是当作这个粒子的态空间中的算符看待的复常数，于是 $T_0T_sa = a^*T_0T_s$, 如果要分别说出 T_0 及 T_s 对 a 的影响，就应事先指定 a 与两类自由度之间的关系. 可以指定 a 属于轨道自由度 (这时它与 T_s 对易)，也可以指定它属于自旋自由度 (这时它与 T_0 对易)，还可以指定 a 的一个因子属于轨道自由度，另一个因子属于自旋自由度. 类似地，多粒子系统的时间反演算符可以看作由各个粒子的时间反演算符构成的积，当系统的态矢量被乘上一个复数时，可以把这个复数看成是其中任一个粒子的算符，也可以把它分解为若干个因子，而把每个因子都看作某个粒子的算符.

与空间反射的情形相似，(53)—(55) 式没有涉及时间反演对于更加复杂的物理量的影响. 按照本来的理解，一个状态经过时间反演之后，还是代表原系统的一种可能状态. 在非相对论性量子力学领域内，只有坐标、动量、自旋是基本力学量 (或者再扩充到包括中子质子的同位旋), 其他力学量都可以用这些基本力学量表示出来. 如果假定 T 只描写空间 – 自旋自由度的时间反演性质，则由 (53)—(56) 式可在一个未定相因子的限度内确定算符 T.

对于由 $(\hat{\boldsymbol{r}}_k, \hat{\boldsymbol{p}}_k, \hat{\boldsymbol{s}}_k)$ 构成的算符 F, 有

$$TF(\hat{\boldsymbol{r}}_k, \hat{\boldsymbol{p}}_k, \hat{\boldsymbol{s}}_k, \mathrm{i})T^{-1} = F(\hat{\boldsymbol{r}}_k, -\hat{\boldsymbol{p}}_k, -\hat{\boldsymbol{s}}_k, -\mathrm{i}), \tag{57}$$

显然 T^2 是一个与任何 F 都对易的幺正算符. 按假定 T 只涉及空

间－自旋自由度，因此 T^2 是常数. 而且 $(T^2)^2 = T(T^2)T = T^2(T^2)^*$，即 T^2 等于 $(T^2)^*$. 再由 (56) 式有

$$\langle T^2\Psi_A|T^2\Psi_B\rangle = \langle T\Psi_A|T\Psi_B\rangle^* = \langle\Psi_A|\Psi_B\rangle,$$

即 T^2 与 $(T^2)^*$ 的积等于 1. 可见 $T^2 = \pm 1$，这与 T 本身的未定相因子的选择没有关系. 其次，由叠加原理知道，对于一定的系统，T^2 只能取一种值. 先看看无自旋的单个粒子的 T^2 值等于什么. 这时可以用 r 的本征态 $|r\rangle$ 作为完备组，在 T 变换下有

$$|\widehat{r}\rangle = C|r\rangle, \quad |C| = 1,$$

再变一次得

$$|\widehat{\widehat{r}}\rangle = C^*C|r\rangle = |r\rangle\ .$$

这说明对于没有自旋的粒子，$T^2 = 1$. 当粒子有自旋时，可以用 $|nljm\rangle$ 作为完备组，其中 l 是轨道角动量平方 l^2 的量子数，jm 是总角动量平方 j^2 及投影 j_z 的量子数，n 为径向量子数. nl 及 j 值都不受空间转动和 T 变换的影响. 为了与以后的记号相一致，假定已对一定 nlj 下的 $2j+1$ 个基矢规定了相对相因子 (参看第六章)，使下式成立

$$j_\pm|nljm\rangle = |nljm \pm 1\rangle\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}, \tag{58}$$

其中

$$j_\pm = j_x \pm \mathrm{i}j_y.$$

设 $D(y,\pi)$ 是空间绕 Y 轴转动 180° 时的转动算符. 根据角动量的转动和时间反演性质有

$$D(y,\pi)\boldsymbol{j} = g(y,-\pi)\boldsymbol{j}D(y,\pi), \tag{59}$$

$$T\boldsymbol{j} = -\boldsymbol{j}T. \tag{60}$$

由此可以证明，$D(y,\pi)T$ 是与 $j_\pm$ 对易的，因此 $|nljm\rangle$ 被 $D(y,\pi)T$ 作用之后，仍然满足 (58) 式，故

$$D(y,\pi)T|nljm\rangle = a|nljm\rangle\,, \tag{61}$$

$$|a| = 1. \tag{62}$$

再用 $D(y,\pi)T$ 作用于 (61) 式两边，注意 T 与 $D(y,\pi)T$ 对易有

$$D(y,\pi)T^2|nljm\rangle = a^*a|nljm\rangle = |nljm\rangle\,,$$

即

$$T^2|nljm\rangle = D(y,2\pi)|nljm\rangle\,. \tag{63}$$

当空间绕某一轴转动 2π 时，角动量量子数 j 为整数的态矢量保持不变，j 为半奇数的态矢量则改变其正负号，而 j 是整数或半奇数是由自旋来决定的. 结论是：当粒子的自旋为整数时，T^2 等于 1; 当自旋为半奇数时，T^2 等于 -1 . 把这个结论用于多粒子系统是直截了当的. 总系统的 T 算符是各个粒子的 T 算符的积，每个粒子的 T 算符又是轨道自由度与自旋自由度的 T 算符的积，轨道自由度的 T^2 永远等于 1，自旋为 s 的粒子的 T^2 则等于 $(-1)^{2s}$. 由此可见，总系统的 T^2 等于 $(-1)^{2\sum_i s_i}$.

为了实际使用的方便，让我们针对几类最重要的基本波函数的相因子作一些规定，借此实现对 T 算符的相因子的适当限制，使这些基本波函数和相应的基矢在 T 变换下的行为比较简单一些. 此外，还希望以此作为示例，阐明处理这个问题的方法. 首先考虑单个粒子，我们要讨论的最基本的基矢包括 $|\boldsymbol{r}\rangle$, $|\boldsymbol{p}\rangle$, $|nlm\rangle$, χ_{sm_s} ，其中 $|nlm\rangle$ 是 $\boldsymbol{l}^2$ 及 l_z 的本征态，n 是转动不变的量子数. 其余三类基矢曾多次用到，不再说明.

关于基矢 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 及 $|\boldsymbol{p}\rangle$, 我们要求内积 $\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle$ 的表达式为

$$\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\,. \tag{64}$$

这是对相因子的一种规定 (把常因子取为负的也行，为了确定起见，这里取为正的). (64) 式符合如下的归一条件

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,, \tag{65}$$

$$\langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}'\rangle = \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\,. \tag{66}$$

以 T_0 作用于 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 及 $|\boldsymbol{p}\rangle$ 有

$$|\hat{\boldsymbol{r}}\rangle = T_0|\boldsymbol{r}\rangle = \alpha(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}\rangle\,,$$

$$|\hat{\boldsymbol{p}}\rangle = T_0|\boldsymbol{p}\rangle = \beta(\boldsymbol{p})|-\boldsymbol{p}\rangle\,,$$

其中 α 和 β 的模都是 1. 分别与 $\langle \boldsymbol{r}|$ 及 $\langle \boldsymbol{p}|$ 作内积，得

$$\langle \boldsymbol{p}|\hat{\boldsymbol{r}}\rangle = \alpha(\boldsymbol{r})\langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{r}\rangle\,,$$

$$\langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{p}}\rangle = \beta(\boldsymbol{r})\langle \boldsymbol{r}|-\boldsymbol{p}\rangle\,,$$

由于 $T_0^2=1$, 故 $\langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{p}}\rangle = \langle \hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{p}\rangle^* = \langle \boldsymbol{p}|\hat{\boldsymbol{r}}\rangle$. 由此推知 $\alpha(\boldsymbol{r})=\beta(\boldsymbol{p})$，这又说明它们是与 $\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}$ 无关的. 把这个常数吸收到 T_0 的定义中，有

$$T_0|\boldsymbol{r}\rangle = |\boldsymbol{r}\rangle\,, \tag{67}$$

$$T_0|\boldsymbol{p}\rangle = |-\boldsymbol{p}\rangle\,, \tag{68}$$

这是在 (64) 式的基础上加入的对于 T_0 的相因子的一种限制.

有了以上的规定之后，可以通过 $\langle \boldsymbol{r}|nljm\rangle$ 的相因子选择使 $T_0|nlm\rangle$ 符合较简单的相因子规则，因为

$$T_0|nlm\rangle = T_0\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}|nlm\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}|nlm\rangle^*\,. \tag{69}$$

关于 $\langle \boldsymbol{r}|nljm\rangle$ 的相因子选择，一直有数种不同的习惯，这里我们规定取如下的形式

$$\langle \boldsymbol{r}|nlm\rangle = R_{nl}(r)(\mathrm{i})^l \mathrm{Y}_{lm}(\theta,\psi)\,, \tag{70}$$

其中

$$R_{n\ l}(r) = R^*_{n\ l}(r)\,, \tag{71}$$

假定已正交归一化

$$\int \langle \boldsymbol{r}|nlm\rangle^* \langle \boldsymbol{r}|n'l'm'\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\,. \tag{72}$$

由 (70) 式及 (71) 式，有

$$\langle \boldsymbol{r}|nlm\rangle^* = \langle \boldsymbol{r}|nl-m\rangle(-1)^{l+m}\,, \tag{73}$$

代回 (69) 式中，有

$$T_0|nlm\rangle = |nl-m\rangle(-1)^{l+m}\,. \tag{74}$$

现在讨论自旋自由度，关于自旋态的基矢 χ_{sm_s}，和通常一样只要求它们的相对相角符合如下的关系

$$s_\pm \chi_{sm_s} = \chi_{sm_s\pm 1}\sqrt{(s\mp m_s)(s\pm m_s+1)}\,. \tag{75}$$

和前面的情形一样，$D_s(y,\pi)T_s$ 是与算符 $s_\pm$ 对易的，因此

$$D_s(y,\pi)T_s\chi_{sm_s} = r\chi_{sm_s}$$

其中系数 r 与 m_s 无关，而且其模为 1，因此可以把它吸收到 T_s 的定义中，这样就有

$$T_s\chi_{sm_s} = D_s(y,-\pi)\chi_{sm_s}\,, \tag{76}$$

这是在 (75) 式的基础上加入的对于 T_s 的相因子的一种限制.

借助以上结果可以处理更为普遍的角动量基矢，为此，注意 $|nl-m\rangle(-1)^{l+m}$ 就是 $D_0(y,-\pi)|nlm\rangle$, 因此 (74) 式也可写成

$$T_0|nlm\rangle = D_0(y,-\pi)|nlm\rangle\,. \tag{77}$$

由 (76) 和 (77) 式又有

$$T(|nlm\rangle\chi_{sm_s}) = D(y,-\pi)|nlm\rangle\chi_{sm_s}\,. \tag{78}$$

由此可见，对于由 $|nlm_l\rangle\chi_{sm_s}$ 作通常的角动量耦合构成基矢 $|nljm\rangle$ 之后 (耦合系数是实的)，其 T 变换性质如下

$$\begin{aligned} T|nljm\rangle &= D(y,-\pi)|nljm\rangle \\ &= |nlj-m\rangle(-1)^{j+m}\,. \end{aligned} \tag{79}$$

这个式子比前面的 (61) 式少了一个相因子 a，这就是以上规定导致的结果.

最后，假定在条件 (78) 或 (79) 式得到满足的情况下借助实系数构成多粒子的角动量本征态 $|\alpha IM\rangle$，其中 α 代表转动不变量的量子数，而且在 $J_\pm = J_x \pm \mathrm{i}J_y$ 的作用下满足如下的关系

$$J_\pm|\alpha IM\rangle = |\alpha IM\pm 1\rangle\sqrt{(I\mp M)(I\pm M+1)}\,, \tag{80}$$

那么，$|\alpha IM\rangle$ 的 T 变换公式为

$$T|\alpha IM\rangle = D(y,-\pi)|\alpha IM\rangle = |\alpha I-M\rangle(-1)^{I+M}\,. \tag{81}$$

具有这样的时间反演性质的角动量本征态有一些特殊的优点. 例如说，一个时间反演不变及转动不变的算符 W 在这种态矢量间的矩阵元永远是实的，这可从下面的两个等式看出：

$$\begin{aligned} &\langle\widehat{\alpha IM}|W|\widehat{\alpha' IM}\rangle = \langle\alpha I-M|W|\alpha' I-M\rangle = \langle\alpha IM|W|\alpha' IM\rangle\,, \\ &\langle\widehat{\alpha IM}|W|\widehat{\alpha' IM}\rangle = \langle\widehat{\alpha IM}|T\,W|\alpha' IM\rangle = \big(\langle\alpha IM|W|\alpha' IM\rangle\big)^*\,. \end{aligned}$$

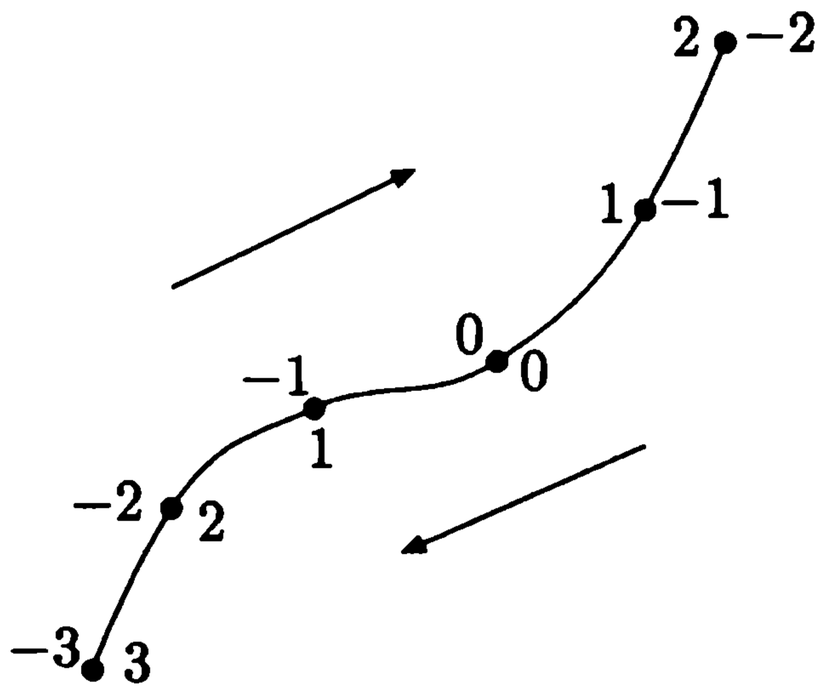
顺便提醒一下，由于 T 是反线性算符 (而不是线性的)，不要根据诸如 (79),(81) 之类的关系式把 T 与 $D(y,-\pi)$ 混同，或者根据 (67) 式把 T_0 与单位算符混同. 换一种说法就是 T 与算符 $|A\rangle\langle B|$

不能按通常的规则相乘，即

$$T(|A\rangle\langle B|) \neq (T|A\rangle)\langle B|\,,$$
$$T(|A\rangle\langle B|)|C\rangle = T(|A\rangle\langle B|C\rangle) = (T|A\rangle)\langle B|C\rangle^*\,.$$

(这里当然认为 T 与 $|A\rangle, |B\rangle$ 从属于相同的自由度.)

4.2 时间反演不变性



(图中各点旁边所示的数字代表质点达到该点的时间)

设 $\boldsymbol{r}(t)$ 随 t 的变化代表一质点的经典运动的一种可能的运动过程，即满足牛顿运动方程. 如果我们把这个过程的所有状态都作时间反演，而且把所属的时间变号，则得到反演态的一种时间依赖关系，可表达为

$$\boldsymbol{r}'(t) = \boldsymbol{r}(-t), \quad \boldsymbol{p}'(t) = -\boldsymbol{p}(-t)\,.$$

类似地，设 $\Psi(t)$ 随 t 的变化代表系统的一种可能的运动过程，即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = H\Psi(t).$$

设想把这个过程的所有状态都换成其时间反演态并把所属的时间反号 (根据 §1 公式 (5))，就得到反演态的一种时间依赖关系

$T\Psi(-t)$，我们要问，如果系统是孤立的，是否 $\Psi'(t)\equiv T\Psi(-t)$ 代表它的一种可能的运动过程？对 $\Psi'(t)$ 直接求时间微商有

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi'(t)&=\mathrm{i}\hbar T\frac{\partial}{\partial t}\Psi(-t)=T\left\{(-\mathrm{i}\hbar)\frac{\partial}{\partial t}\Psi(-t)\right\}\\&=T\{H\Psi(-t)\}.\end{aligned}$$

所以上面的问题变为：哈密顿量 H 是否具有 T 不变性 (也即 TH 是否等于 HT).

在通常的量子力学范围内，孤立系统的薛定谔方程是 T 不变的，这可以从相互作用的表达式中直接看出来，在核物理中，关于核力的知识还不够完善，T 不变性对于寻求核力位势和分析核态性质以及分析反应过程等起着十分广泛的作用 (由于 T 不是线性算符，T 不变性的物理推论不是用守恒量表达的).

自从发现弱作用破坏宇称守恒原则之后，关于 T 不变性对于各类基本相互作用的有效性问题受到了注意. 如前节提到的，已从 K^0 介子的衰变中发现破坏这种不变性的证据.

参 考 文 献

[1] Dirac P A M. Quantum Mechanics (4ed). London: Oxford University Press, 1958.

[2] Landau L D, Lifshitz E M. Quantum Mechanics (3rd, revised edition). Oxford: Pergamon Press, 1977.

[3] Wigner E P. Got. Nachr.(Math. Naturwiss. K1asse), 1932, 31: 546.

[4] Lee T D, Yang C N. Phys. Rev., 1956, 104: 254.

[5] Wu C S et al. Phys. Rev., 1957, 105: 1413.

[6] Christensen J H et al. Phys. Rev. Lett., 1964, 13: 138.

第六章　角动量理论

§1　角动量算符的本征值和本征态．$D^j(g)$ 矩阵

这里只是一般地讨论角动量的本征值以及按照这些值把态矢量分类的问题．我们用 J_x, J_y 及 J_z 代表角动量算符沿着不动坐标系的三个坐标轴方向的分量 (以 $\hbar$ 为单位), 由它们决定的矢量则记为 $\boldsymbol{J}$, 可以设想为单粒子的轨道角动量、自旋角动量、总角动量或者许多粒子的这类算符之和，但是在一般性讨论中只涉及角动量算符的厄米性及其遵从的对易关系：

$$J_x^\dagger = J_x,\quad J_y^\dagger = J_y,\quad J_z^\dagger = J_z\,,$$

$$[J_x,\ J_y] = \mathrm{i}J_z\,,\quad [J_y,\ J_z] = \mathrm{i}J_x\,,\quad [j_z,\ J_x] = \mathrm{i}J_y\,. \tag{1}$$

由于角动量沿不同方向的分量互不对易，所以一般都不能同时取确定值，只能分别地考虑各分量的本征态．但容易证明，$\boldsymbol{J}^2$ 与任一分量都对易，这个算符可以认为是 $\boldsymbol{J}$ 沿任何三个正交方向的分量的平方和，特别是

$$\boldsymbol{J}^2 = (J_x)^2 + (J_y)^2 + (J_z)^2\,. \tag{2}$$

我们可以研究 $\boldsymbol{J}^2$ 与 $\boldsymbol{J}$ 的一个分量的共同本征态，为确定起见，下面选定 z 分量 J_z，由于不同方向只差一个空间转动，所以 J_z 的每个本征值也都是其他分量的本征值，而且任何一个分量的本征态都可以由 J_z 的本征态经受空间转动得出．

设 $\psi(J^2m)$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 及 J_z 的一个共同本征态，J^2 及 m 为相应的本征值，即

$$\boldsymbol{J}^2\psi(J^2m) = J^2\psi(J^2m)\,,$$

$$J_z^2\psi(J^2m) = m\psi(J^2m)\,.$$

由 (2) 式看出，

$$J^2 \geq m^2\,, \tag{3}$$

这是非零的共同本征态必须满足的条件. 令

$$J_\pm = J_x \pm \mathrm{i}J_y\,, \tag{4}$$

$$J_\pm^\dagger = J_\mp\,, \tag{5}$$

则

$$[\boldsymbol{J}^2,\ J_\pm] = 0\,,$$

$$[J_z,\ J_\pm] = \pm J_\pm\,, \tag{6}$$

$$\boldsymbol{J}^2 = J_-J_+ + J_z(J_z+1)\,, \tag{7}$$

$$\boldsymbol{J}^2 = J_+J_- + J_z(J_z-1)\,. \tag{8}$$

由 (6) 式可得

$$\boldsymbol{J}^2J_\pm\psi(J^2m) = J^2J_\pm\psi(J^2m)\,,$$

$$J_zJ_\pm\psi(J^2m) = (m\pm1)J_\pm\psi(J^2m)\,,$$

可见，$J_+\psi(J^2m)$ 或 $J_-\psi(J^2m)$ 如果不是零，则也是 $\boldsymbol{J}^2$ 及 J_z 的共同本征态，分别属于本征值 $(J^2, m+1)$ 和 $(J^2, m-1)$. 递推下去，如果 $J_+^k\psi(J^2m)$ 不是零，则仍是这类本征态，属于本征值 $(J^2, m+k)$. 类似地，若 $(J_-)^\sigma\psi(J^2m)$ 不是零，就属于本征值 $(J^2, m-\sigma)$. 由于 (3) 式的限制，对于每个 $\psi(J^2m)$ 都存在非负整数 $\bar{k}$ 及 $\underline{k}$ 使得

$$\left.\begin{aligned}(J_+)^{\bar{k}}\psi(J^2m) \neq 0\,,\quad J_+(J_+)^{\bar{k}}\psi(J^2m) = 0\,,\\ (J_-)^{\underline{k}}\psi(J^2m) \neq 0\,,\quad J_-(J_-)^{\underline{k}}\psi(J^2m) = 0\,.\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

即是说，$\psi(J^2m)$ 在 J_+, J_- 的作用下形成属于同一个 J^2 值的一列非零态矢量

$$(J_-)^{\underline{k}}\psi(J^2m),\ \cdots\ J_-\psi(J^2m)\,,$$
$$\psi(J^2m),\ J_+\psi(J^2m),\ \cdots\ (J_+)^{\overline{k}}\psi(J^2m)\,, \qquad (10)$$

它们的 J_z 值如下

$$(m-\underline{k}),\cdots,(m-1),m,m+1,\cdots,(m+\overline{k})\,, \qquad (11)$$

其中 $(m-\underline{k})$ 和 $(m+\overline{k})$ 由下列条件决定

$$J^2-(m-\underline{k})(m-\underline{k}-1)=0\,,$$

$$J^2-(m+\overline{k})(m+\overline{k}+1)=0\,,$$

可见 $(m+\overline{k})$ 与 $(m-\underline{k})$ 都取决于 J^2 而与 m 无关. 把这两个式子相减得出

$$(\overline{k}+\underline{k}+1)[(m+\overline{k})+(m-\underline{k})]=0\,,$$

故

$$(m-\underline{k})=-(m+\overline{k})\,. \qquad (12)$$

这表明 $2m$ 是整数，而且 $2(m+\overline{k})+1$ 是 (10) 式中的非零态矢量的数目. 通常习惯把 $m+\overline{k}$ 写成 j, 于是 $j-m=\overline{k}$, $J^2=j(j+1)$. 我们将把 j 称为 J^2 的量子数，并将 $\psi(J^2m)$ 写成 $\psi(jm)$, 于是 (10) 式中所列的即是如下的 $(2j+1)$ 个态矢量

$$(J_-)^{j+m}\psi(jm),\cdots,J_-\psi(jm),$$
$$\psi(jm),J_+\psi(jm),\cdots,(J+)^{j-m}\psi(jm)\,, \qquad (13)$$

它们的 J_z 值为

$$-j,\cdots,(m-1),m,(m+1),\cdots,j\,. \qquad (14)$$

综上所述，得到如下的结论：(i) 违反条件 $2m=$ 整数的 J_z 本征态，或者违反条件 $2j+1=$ 正整数的 $\boldsymbol{J}^2$ 本征态，或者违反条件 $j-m=$ 非负整数的 $\boldsymbol{J}^2, J_z$ 本征态，都不能存在；(ii) $\boldsymbol{J}^2, J_z$ 的每一个 (共同) 本征矢量 $\psi(jm)$ 在 J_+, J_- 的作用下都形成 (13) 式的 $2j+1$ 个非零态矢量. 如果对于某个 j 值，确是存在 $J^2=j(j+1)$ 的 $\boldsymbol{J}^2$ 本征态，就说这个 j 值是 $\boldsymbol{J}^2$ 的量子数的真正允许值. 这时必定存在 $J^2=j(j+1)$ 的 $\boldsymbol{J}^2, J_z$ 本征态 (否则，就表明在这样的 $\boldsymbol{J}^2$ 本征态下发现任何 $\boldsymbol{J}^2, J_z$ 本征态的概率都是零，这与 $\boldsymbol{J}^2, J_z$ 本征态的完备性相抵触). 所以第 (ii) 项意味着，当 j 是 $\boldsymbol{J}^2$ 的量子数的真正允许值时，存在 J_z 取 (14) 式中的每一种值的 $\boldsymbol{J}^2, J_z$ 本征态. 以上的讨论只涉及 J_x, J_y, J_z 的厄米性和它们的对易关系式，在讨论特定的角动量时，应该根据进一步的知识弄清楚 $\boldsymbol{J}^2$ 的量子数的真正允许值. 例如，对于粒子的轨道角动量，j 不能是半整数，但所有非负整数都是允许的. 对于电子自旋，j 的允许值是 1/2 .

在以下的讨论中，我们经常引用一组与 $\boldsymbol{J}^2$ 及 J_z 一起构成完整组的算符，并假定这些算符是转动不变的 (只是为了方便)，它们的量子数简记为 η，属于一定 ηjm 的归一化本征态记为 $|\eta jm\rangle$. 由于 J_+ 不改变 η 和 j, 故有

$$J_\pm|\eta jm\rangle = C_\pm|\eta jm\pm 1\rangle\ ,$$

其中 $C_\pm$ 是常数，为了使 $|\eta jm\pm 1\rangle$ 与 $|\eta jm\rangle$ 有相同的长度，应令

$$|C_\pm|^2 = j(j+1)-m(m\pm 1)\ ,$$

关于 $C_\pm$ 的不定相因子，大家都已经习惯采用 Condon-Shortly 的规定，使 $C_\pm$ 总是正数，即

$$C_\pm = \sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)} = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\ , \tag{15}$$

故

$$J_\pm|\eta jm\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\ |\eta jm\pm 1\rangle\ . \tag{16}$$

由此，对于真正归一的基矢 $|\eta jm\rangle$，可直接写出 $J_\pm$ 的非零矩阵元，即

$$\langle \eta jm+1|J_+|\eta jm\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,, \tag{17}$$

$$\langle \eta jm-1|J_-|\eta jm\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,, \tag{18}$$

应当注意，这些矩阵元是与 η 无关的．从 (16) 式还可得出

$$|\eta jm\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}}(J_-)^{j-m}|\eta jj\rangle\,, \tag{19}$$

及

$$|\eta jm\rangle = \sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}}(J_+)^{j+m}|\eta j-j\rangle\,. \tag{20}$$

可以证明，任何一个转动不变的算符 K 在 ηjm 表象中的非零矩阵元，均与 m 无关．因为，按假设有 $[K,\ \boldsymbol{J}]=0$，而

$$\langle \eta jm\pm1|K|\eta' jm\pm1\rangle = \frac{\langle \eta jm|J_\mp K|\eta' jm\pm1\rangle}{\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}}$$

$$= \frac{\langle \eta jm|KJ_\mp|\eta' jm\pm1\rangle}{\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}} = \langle \eta jm|K|\eta' jm\rangle\,. \tag{21}$$

用完全相同的方法可证明，如果 $\{\psi_{jm}\}$ 及 $\{\Phi_{jm}\}$ 代表 $\boldsymbol{J}^2$ 及 J_z 的两组本征态，分别满足公式 (16)，那么，由 ψ 与 Φ 构成的非零内积与 m 无关，即

$$\langle \psi_{jm}|\Phi_{jm}\rangle = \langle \psi_{jm\pm1}|\Phi_{jm\pm1}\rangle\,. \tag{22}$$

下面讨论角动量本征态的空间转动性质．如第五章所述，当空间绕原点作转动 $g(\boldsymbol{n},\theta)$ 时，原来由态矢量 Ψ 代表的状态，变成由新矢量 Ψ^g 代表的状态：$\Psi^g = D(g)\Psi$，而 $D(g)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\theta}$，$\boldsymbol{J}$ 为系统的总角动量．所以 Ψ 变为 Ψ^g 是通过 $\boldsymbol{J}$ 的作用来达到的．

设 $\{\psi_{jm}\}_{m=-j,\cdots,j}$ 是 J^2 及 J_z 的本征态，并满足公式 (16):

$$J_{\pm}\psi_{jm} = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\,\psi_{jm\pm 1}\,. \tag{23}$$

这些矢量张成的 $2j+1$ 维空间 R_j 显然是转动不变的，而且它的任何更小的子空间都不再是转动不变的. 因为 R_j 内的矢量在 J_x，J_y 或 J_z 作用后仍在 R_j 内，所以是转动不变的. 其次，从 R_j 的任何一个矢量出发，都可以经过 J_+ 及 J_- 的若干次作用而得到 $2j+1$ 个 ψ_{jm}，所以在 R_j 内不存在更小的转动不变子空间.

还可以反过来说，一个 f 维转动不变的空间 R 如果不具有更小的转动不变子空间，则必属于一定 j 值，$j=(f-1)/2$，并总是可以建立一组满足 (16) 式的基矢 $\{\psi_{jm}\}$, 其中 m 为 J_z 的量子数. 假设在空间 R 中可以找到两种不同的 j 值 j_1 与 j_2，那么，从两个分别属于 j_1 及 j_2 的右矢 ψ_{j_1} 及 Φ_{j_2} 出发，经过 J_+ 及 J_- 的若干次作用，就可以找到两组满足 (16) 式的右矢 $\{\psi_{j_1m_1}\}$ 和 $\{\Phi_{j_2m_2}\}$, 其中 m_1 及 m_2 为 J_z 的量子数，这两组矢量各自张成 R 的一个转动不变子空间，由于 R 并不具有更小的转动不变子空间，故只能有一种 j 值. 由于同样的原因，j 不能小于 $(f-1)/2$，此外，从维数的考虑知道 $j=(f-1)/2$.

现在写出 J^2, J_z 的本征右矢 ψ_{jm} 在空间转动下的变换公式. 利用 $J_{\pm}$ 的作用构成一组满足 (16) 式的 $\psi_{jm'}$，则它们张成转动不变的子空间，故

$$\psi^g_{jm} = \sum_{m'} \psi_{jm'} \mathcal{D}^j_{m'm}(g)\,, \tag{24}$$

系数 $\mathcal{D}^j_{mm'}(g)$ 只与 $jm'm$ 和 $g(\boldsymbol{n},\theta)$ 有关而不依赖于 ψ_{jm} 的更多的性质. 按一定的次序以 m' 为行指标，m 为列指标把 $\mathcal{D}^j_{m'm}(g)$ 排成的 $(2j+1)\times(2j+1)$ 矩阵，称为 $\mathcal{D}^j(g)$ 矩阵或转动矩阵，例如采用 m, m' 值下降的次序，则与第 n 行第 n' 列对应的 (m,m') 值为 $m=j+1-n, m'=j+1-n'$.

反之，可以证明，如果 $\{\Phi_{jm}\}_{m=-j,\cdots,j}$ 在空间转动下按转动

矩阵变换，即

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\theta}\Phi_{jm}=\sum_{m'}\Phi_{jm'}\mathcal{D}^{j}_{m'm}(g)\,, \tag{25}$$

那么，Φ_{jm} 必定是 $\boldsymbol{J}^2, J_z$ 的本征矢量，jm 为相应的量子数，而且符合 (16) 式的关系．为此，对 (25) 式求 θ 微商，再令 $\theta\to 0$ 得出

$$-\mathrm{i}J_n\Phi_{jm}=\sum_{m'}\Phi_{jm'}\left(\frac{\partial\mathcal{D}^{j}_{m'm}(g)}{\partial\theta}\right)_{\theta=0}\,, \tag{26}$$

故

$$J_+\Phi_{jm}$$

$$=\sum_{m'}\Phi_{jm'}\left\{\mathrm{i}\left(\frac{\partial\mathcal{D}^{j}_{m'm}(\boldsymbol{i},\theta)}{\partial\theta}\right)_{\theta=0}-\left(\frac{\partial\mathcal{D}^{j}_{m'm}(\boldsymbol{j},\theta)}{\partial\theta}\right)_{\theta=0}\right\}\,, \tag{27}$$

$$J_-\Phi_{jm}$$

$$=\sum_{m'}\Phi_{jm'}\left\{\mathrm{i}\left(\frac{\partial\mathcal{D}^{j}_{m'm}(\boldsymbol{i},\theta)}{\partial\theta}\right)_{\theta=0}+\left(\frac{\partial\mathcal{D}^{j}_{m'm}(\boldsymbol{j},\theta)}{\partial\theta}\right)_{\theta=0}\right\}\,. \tag{28}$$

借助定义 $\mathcal{D}^{j}(g)$ 矩阵的 (24) 式可求得

$$\mathrm{i}\left(\frac{\partial\mathcal{D}^{j}_{m'm}(\boldsymbol{i},\theta)}{\partial\theta}\right)_{\theta=0}-\left(\frac{\partial\mathcal{D}^{j}_{m'm}(\boldsymbol{j},\theta)}{\partial\theta}\right)_{\theta=0}$$

$$=\delta_{m',m+1}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,, \tag{29}$$

$$\mathrm{i}\left(\frac{\partial\mathcal{D}^{j}_{m'm}(\boldsymbol{i},\theta)}{\partial\theta}\right)_{\theta=0}+\left(\frac{\partial\mathcal{D}^{j}_{m'm}(\boldsymbol{j},\theta)}{\partial\theta}\right)_{\theta=0}$$

$$=\delta_{m',m-1}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,, \tag{30}$$

代回上面 (27),(28) 式得出

$$J_+\Phi_{jm}=\Phi_{jm+1}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,, \tag{31}$$

$$J_-\Phi_{jm}=\Phi_{jm-1}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,, \tag{32}$$

即是说，Φ_{jm} 满足 (16) 式的关系，因此是 $\boldsymbol{J}^2, J_z$ 的本征矢量，jm 是相应的量子数.

§2 两个角动量的耦合. Clebsch-Gordan 系数

设 $\boldsymbol{J}_1$ 及 $\boldsymbol{J}_2$ 是两个互相可对易的角动量算符，例如，两个系统的角动量或者同一系统的轨道角动量和自旋角动量等. 以 $\boldsymbol{J}$ 代表 $\boldsymbol{J}_1$ 与 $\boldsymbol{J}_2$ 之和，即

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2,\quad [\boldsymbol{J}_1,\ \boldsymbol{J}_2]=0\,. \tag{33}$$

要想知道 $\boldsymbol{J}_1$ 及 $\boldsymbol{J}_2$ 的大小和方向都给定后，$\boldsymbol{J}$ 的大小和方向如何，就属于角动量耦合问题，即是要弄清楚在 $\boldsymbol{J}_1^2J_{1z}\boldsymbol{J}_2^2J_{2z}$ 的本征态 $\Phi^{(1)}_{j_1m_1^0}\Phi^{(2)}_{j_2m_2^0}$ 下能够发现的 $\boldsymbol{J}^2J_z$ 值以及相应的概率幅. 我们用 J 代表 $\boldsymbol{J}^2$ 的量子数，M 代表 J_z 的本征值，于是在 $\Phi^{(1)}_{j_1m_1^0}$ 与 $\Phi^{(2)}_{j_2m_2^0}$ 的积代表的态下，$M=m_1^0+m_2^0$, J 一般有若干种值. 更广泛一点的角动量耦合问题是问在 $\boldsymbol{J}_1$ 及 $\boldsymbol{J}_2$ 的大小给定后 JM 值如何，也即是决定在状态 $\Phi^{(1)g}_{j_1m_1^0}\times\Phi^{(2)g'}_{j_2m_2^0}$ 下能够发现的 JM 值和相应的概率幅，其中 $\Phi^{(1)g}_{j_1m_1^0}$ 及 $\Phi^{(2)g'}_{j_2m_2^0}$ 分别是 $\Phi^{(1)}_{j_1m_1^0}$ 和 $\Phi^{(2)}_{j_2m_2^0}$ 经受任意的转动 g, g' 后变成的态矢量. 这又相当于对 $(2j_1+1)\times(2j_2+1)$ 个 $\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}$ 来决定能够发现的 $\boldsymbol{J}^2J_z$ 值和概率幅，其中 $\Phi^{(1)}_{j_1m_1}$ 代表满足 (16) 式的 $2j_1+1$ 个 $\boldsymbol{J}_1^2J_{1z}$ 本征态，$\Phi^{(2)}_{j_2m_2}$ 代表满足 (16) 式的 $2j_2+1$ 个 $\boldsymbol{J}_2^2J_{2z}$ 本征态，在一定 j_1, j_2 下的 $\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}$ 张成一个 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 维转动不变子空间 $R^{j_1j_2}$, 它们也称为 $R^{j_1j_2}$ 的非耦合基矢或旧基矢，需要解决的问题是构成 $R^{j_1j_2}$ 的一组代

表 J^2J_z 的本征态的新基矢 (也称为耦合基矢), 新旧基矢之间的变换矩阵的元素就是所要求的概率幅. 又可以说, J_1 与 J_2 耦合的问题可归结为把 $R^{j_1j_2}$ 分解为不可约的转动不变子空间的直和, 并且在各个不可约不变子空间中建立 J_z 有确定值的基矢. 为了方便, 这里不考虑相同粒子系统的统计法带来的限制, 并且假定 $\Phi^{(1)}_{j_1m_1}$ 及 $\Phi^{(2)}_{j_2m_2}$ 可以真正归一而且已经归一.

用 $\overline{j}$ 代表 j_1, j_2 中的较大者, $\underline{j}$ 代表较小者, 并把 $M = m_1 + m_2$ 的值排成 $2\underline{j}+1$ 行 $2\overline{j}+1$ 列的表, 在每行中自左而右依次写上 $\overline{j}, \overline{j}-1, \cdots$, 再在每列中自上而下依次加入 $\underline{j}, \underline{j}-1, \cdots$, 如下表所示. 我们看到, $R^{j_1j_2}$ 中最大的 M 值是 $\overline{J} = j_1 + j_2$. 其次 $M = \overline{J}$ 的旧基矢数目是 1, 因而新基矢数目也是 1, $M = \overline{J} - 1$ 的旧基矢和新基矢的数目都是 2, 递推下去可知, 当 S 是不大于 $2\underline{j}$ 的非负整数时, $M = \overline{J} - S$ 的旧基矢和新基矢的数目都是 $S+1$, 而 $M = \overline{J} - 2\underline{j}$(即 $\overline{j} - \underline{j}$) 的旧基矢和新基矢的数目都是 $2\underline{j}+1$.

$M=J$	$M=J-1$	$M=J-2$		
$\overline{j}+\underline{j}$	$\overline{j}-1+\underline{j}$	$\overline{j}-2+\underline{j}$	$\cdots$	$-\overline{j}+\underline{j}$
$\overline{j}+\underline{j}-1$	$\overline{j}-1+\underline{j}-1$	$\overline{j}-2+\underline{j}-1$	$\cdots$	$-\overline{j}+\underline{j}-1$
$\overline{j}+\underline{j}-2$	$\overline{j}-1+\underline{j}-2$	$\overline{j}-2+\underline{j}-2$	$\cdots$	$-\overline{j}+\underline{j}-2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
$\overline{j}-\underline{j}$	$\overline{j}-1-\underline{j}$	$\overline{j}-2-\underline{j}$	$\cdots$	$-\overline{j}-\underline{j}$

根据这种表格可以弄清楚 $R^{j_1j_2}$ 中有哪些 J 值以及每个 J 值的不可约不变子空间有多少个, 为此只要注意表中 M 值为非负数的部分就够了. 由于 $R^{j_1j_2}$ 是转动不变的, 表中的最大 M 值即是 $R^{j_1j_2}$ 中的最大 J 值, 因此 $M = \overline{J}$ 的一个唯一的新基矢属于

$J=\overline{J}$, 故 $R^{j_1j_2}$ 中 J 值为 $\overline{J}$ 的转动不变子空间 $R^{j_1j_2\overline{J}}$ 的数目是 1. 既如此, $M=\overline{J}-1$ 的两个新基矢当然属于 $J=\overline{J}$ 及 $J=\overline{J}-1$, 可见 $M=\overline{J}-1$ 而 $J=\overline{J}-1$ 的新基矢只有一个, 因此存在一个 $R^{j_1j_2\overline{J}-1}$. 递推下去可知当 S 是不大于 $2\underline{j}$ 的非负整数时, $M=\overline{J}-S$ 的 $S+1$ 个新基矢分别属于 $J=\overline{J},\overline{J}-1,\cdots,\overline{J}-S$. 这说明 $M=\overline{J}-S$ 而 $J=\overline{J}-S$ 的新基矢只有一个, 因此存在一个 $R^{j_1j_2\overline{J}-S}$. 这样就知道, $R^{j_1j_2}$ 中属于 $J=\overline{J},\overline{J}-1,\cdots,\overline{J}-2\underline{j}$ 的转动不变子空间是存在的, 而且对于其中每种 J 值都只有一个这样的子空间, 即

$$R^{j_1j_2}=R^{j_1j_2\overline{J}}\oplus R^{j_1j_2\overline{J}-1}\oplus\cdots\oplus R^{j_1j_2\overline{J}-2\underline{j}}\oplus\cdots .$$

从新基矢的数目可以推知, $R^{j_1j_2}$ 中不存在比 $\overline{J}-2\underline{j}$ (即 $|j_1-j_2|$) 更小的 J 值, 即

$$\sum_{J=\overline{j}-\underline{j}}^{\overline{J}}(2J+1)=(2\overline{j}+1)(2\underline{j}+1)\,, \tag{34}$$

因此, $R^{j_1j_2}$ 不含有比 $R^{j_1j_2\overline{J}-2\underline{j}}$ 的维数更小的转动不变子空间, 最后得到

$$R^{j_1j_2}=R^{j_1j_2\overline{J}}\oplus R^{j_1j_2\overline{J}-1}\oplus\cdots\oplus R^{j_1j_2\overline{J}-2\underline{j}}\,. \tag{35}$$

既然属于每种 JM 值的基矢只有一个, 可把它记为 $\Phi^{(12)}_{j_1j_2JM}$ 并用旧基矢表示为

$$\Phi^{(12)}_{j_1j_2JM}=\sum_{m_1m_2}\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2JM\rangle\,, \tag{36}$$

每个 J 下的 $2J+1$ 个 $\Phi^{(12)}_{j_1j_2JM}$ 都满足 (16) 式的关系. 组合系数 $\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2JM\rangle$ 就是新旧基矢之间的变换矩阵的元素. 为了完全确定这些组合系数, 规定它们是实数, 并且引入如下的补充条件:

$$\text{(i)}\quad \Phi^{(12)}_{j_1j_2\overline{J}\,\overline{J}}=\Phi^{(1)}_{j_1j_1}\Phi^{(2)}_{j_2j_2}\qquad (\text{即 }\langle j_1j_1j_2j_2|j_1j_2\overline{J}\,\overline{J}\rangle=1). \tag{37}$$

(ii) 当$J'=J\pm1$时, $\langle\Phi^{(12)}_{j_1j_2J'M}|J_{1z}|\Phi^{(12)}_{j_1j_2JM}\rangle\geq0$. (38)

根据 (i), $\Phi^{(12)}_{j_1j_2\overline{J}\,\overline{J}}$ 是确定的，再利用 (16) 式可将全部 $\Phi^{(12)}_{j_1j_2\overline{J}M}$ 求出，于是 $\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2\overline{J}M\rangle$ 完全确定. 为了求出 $J=\overline{J}-1$ 的新基矢，可先求 $\Phi^{(12)}_{j_1j_2\overline{J}-1\overline{J}-1}$, 这时由 $J_+\Phi^{(12)}_{j_1j_2\overline{J}-1\overline{J}-1}=0$ 和归一条件可把 $\Phi^{(12)}_{j_1j_2\overline{J}-1\overline{J}-1}$ 确定到只差正负号的程度，再借助补充条件 (ii) 即可把它完全确定. $J=\overline{J}-1$ 的其余基矢可由 (16) 式推出. 照这样继续做下去，所有新的基矢都能够求出.

新旧基矢之间的变换矩阵的元素又称为 Clebsch-Gordan 系数 (C-G 系数), 在文献或书籍中，这系数的写法颇多，以下我们用 $\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle$ 来代表 $\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2JM\rangle$. 后面将会遇到 C-G 系数的广泛运用. 根据式 (36), 在两个角动量耦合的问题中，$|\langle j_1j_2JM|\,m_1m_2\rangle|^2$ 就是在 $\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}$ 下发现总角动量平方及 z 分量的量子数为 JM 的概率. C-G 系数又称为向量耦合系数，它还有另一种常用记法叫做 $3j$ 系数，其定义如下

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

$$=(-1)^{j_1-j_2-m_3}\frac{1}{\sqrt{2j_3+1}}\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j_3-m_3\rangle\,. \qquad (39)$$

现在，把 Clebsch-Gordan 系数的若干重要性质列举出来.

(1) 非零必要条件

(i) 由于 $\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}$ 是 J_z 的本征态，属于本征值 m_1+m_2, 故当 $M\neq m_1+m_2$ 时，$\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle=0$.

(ii) 在 $\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}$ 下不可能发现比 $|m_1+m_2|$ 更小的 J 值 (因为 M 值已等于 m_1+m_2), 故

当 $J\leq|m_1+m_2|$ 时，$\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle=0$.

(iii) 由 j_1 及 j_2 耦合成的 J 值只能是 $(j_1+j_2),\cdots,|j_1-j_2|$, 故当 j_1j_2J 不满足这个三角形条件时, $\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle=0$, 通常用记号 $\delta(j_1j_2J)=1$ 代表 j_1j_2J 满足三角形条件, $\delta(j_1j_2J)=0$ 代表不满足三角条件, 因此

$$\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle=\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle\delta(j_1j_2J)$$

(注意 $\delta(j_1j_2J)=\delta(j_2j_1J)=\delta(Jj_1j_2)$).

(2) 实数和幺正性质

$$\begin{aligned}\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle&=\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle^*\\&=\langle m_1m_2|j_1j_2JM\rangle\ ,\end{aligned}\tag{40}$$

$$\sum_{J,M}\langle j_1j_2JM|m_1'm_2'\rangle\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle=\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}\ ,\tag{41}$$

$$\sum_{m_1,m_2}\langle j_1j_2J'M'|m_1m_2\rangle\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle=\delta_{JJ'}\delta_{MM'}\ .\tag{42}$$

(3) 递推性质

分别以 $J_\pm=J_{1\pm}+J_{2\pm}$ 作用于 (36) 式, 注意公式 (16) 得出

$$\begin{aligned}&\sqrt{(J-M)(J+M+1)}\langle j_1j_2JM+1|m_1m_2\rangle\\&=\sqrt{(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)}\langle j_1j_2JM|m_1-1m_2\rangle\\&\quad+\sqrt{(j_2+m_2)(j_2-m_2+1)}\langle j_1j_2JM|m_1m_2-1\rangle\ ,\end{aligned}\tag{43}$$

和

$$\begin{aligned}&\sqrt{(J+M)(J-M+1)}\langle j_1j_2JM-1|m_1m_2\rangle\\&=\sqrt{(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)}\langle j_1j_2JM|m_1+1m_2\rangle\\&\quad+\sqrt{(j_2-m_2)(j_2+m_2+1)}\langle j_1j_2JM|m_1m_2+1\rangle\ .\end{aligned}\tag{44}$$

(43) 及 (44) 式都是属于同一个 J 的 Clebsch-Gordan 系数之间的递推关系. 下面给出一个关于不同 J 的递推公式. 为此, 考虑下式

$$J_{1z}\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}=m_1\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}\ ,$$

根据 (36) 式有

$$\sum_{J',M'} J_{1z}\Phi_{j_1j_2J'M'}\langle j_1j_2J'M'|m_1m_2\rangle$$
$$= m_1\sum_{J'M'}\langle j_1j_2J'M'|m_1m_2\rangle\Phi_{j_1j_2J'M'}\ ,$$

以 $\Phi_{j_1m_1JM}$ "左乘" 之，有

$$\sum_{J'}\langle\Phi_{j_1j_2JM}|J_{1z}|\Phi_{j_1j_2J'M}\rangle\langle j_1j_2J'M|m_1m_2\rangle$$
$$= m_1\langle\Phi_{j_1j_2JM}|\Phi_{j_1j_2JM}\rangle\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle\ .$$

可以证明，只当 $J'=J, J\pm1$ 时 J_{1z} 的矩阵元才不为零，因此

$$\left\{\frac{\langle\Phi_{j_1j_2JM}|J_{1z}|\Phi_{j_1j_2(J-1)M}\rangle}{\langle\Phi_{j_1j_2JM}|\Phi_{j_1j_2JM}\rangle}\right\}\langle j_1j_2J-1M|m_1m_2\rangle$$
$$=\left\{m_1-\frac{\langle\Phi_{j_1j_2JM}|J_{1z}|\Phi_{j_1j_2JM}\rangle}{\langle\Phi_{j_1j_2JM}|\Phi_{j_1j_2JM}\rangle}\right\}\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle$$
$$-\left\{\frac{\langle\Phi_{j_1j_2JM}|J_{1z}|\Phi_{j_1j_2(J+1)M}\rangle}{\langle\Phi_{j_1j_2JM}|\Phi_{j_1j_2JM}\rangle}\right\}\langle j_1j_2J+1M|m_1m_2\rangle\ ,\quad(45)$$

这就是我们所需要的公式，其中，左边的因子 $\frac{\langle J|J_{1z}|J-1\rangle}{\langle J|J\rangle}$ 及右边的因子 $\frac{\langle J|J_{1z}|J+1\rangle}{\langle J|J\rangle}$ 可以在符号不定的限度内直接计算出来，结果只与角动量的量子数有关，再利用补充条件 (38) 就可确定其符号. 右端的另一个因子 $\langle J|J_{1z}|J\rangle/\langle J|J\rangle$ 则可完全确定地计算出来 (公式 (45) 所涉及的证明和计算可以应用本章 §5 的方法处理).

应该注意到，借助递推公式 (44),(45) 以及补充条件 (37), (38) 即可把所有的 Clebsch-Gordan 系数计算出来. 因为利用 (37) 式作为出发点，借助 (44) 式可得出 $J=j_1+j_2$ 的各个系数，然后借助 (45) 式 (在 (38) 式的帮助下) 即可得出较小的 J 的各个系数.

(4) Clebsch-Gordan 系数的对称性

(i) 如果作为出发点的基矢写成 $\Phi^{(2)}_{j_2m_2}\Phi^{(1)}_{j_1m_1}$，则按上面的方

法，新基矢表达为

$$\Phi^{(21)}_{j_2 j_1 JM} = \sum_{m_2 m_1} \langle j_2 j_1 JM | m_2 m_1 \rangle \Phi^{(2)}_{j_2 m_2} \Phi^{(1)}_{j_1 m_1} , \tag{46}$$

它与前面的 $\Phi^{(12)}_{j_1 j_2 JM}$ 都是由同一套旧基矢做成的，而且属于 $\boldsymbol{J}_1^2$, $\boldsymbol{J}_2^2$, $\boldsymbol{J}^2$, J_z 的同样的量子数，唯一性要求两者只能差一个常系数. 事实上，在构成新基矢的步骤中，除了补充条件 (38) 以外，第一类和第二类自由度总是处在对称的地位，所以只能是由于 (38) 而使 $\Phi^{(21)}_{j_2 j_1 JM}$ 与 $\Phi^{(12)}_{j_1 j_2 JM}$ 可能有不同的相因子，在按照 (46) 式构成 $\Phi^{(21)}_{j_2 j_1 JM}$ 时，显然应当把补充条件 (38) 换成

$$\langle \Phi^{(21)}_{j_2 j_1 J'M} | J_{2z} | \Phi_{j_2 j_1 JM} \rangle_{J'=J\pm 1} \geq 0 ,$$

注意 J_z 在 $J' \neq J$ 时的矩阵元为零，这就导致

$$\langle \Phi^{(21)}_{j_2 j_1 \bar{J}\bar{J}} | J_{1z} | \Phi_{j_2 j_1 JM} \rangle_{J'=\bar{J}\pm 1} \leq 0 . \tag{38'}$$

显然 $\Phi^{(21)}_{j_2 j_1 \bar{J}\bar{J}} = \Phi^{(12)}_{j_1 j_2 \bar{J}\bar{J}}$, 考虑 J_- 接连施行作用得出 $\Phi^{(21)}_{j_2 j_1 \bar{J}M}$ 等于 $\Phi^{(12)}_{j_1 j_2 \bar{J}M}$, 因此，(38′) 要求 $\Phi^{(21)}_{j_2 j_1 \bar{J}-1M} = -\Phi^{(12)}_{j_1 j_2 \bar{J}-1M}$, 继续下去，就有 $\Phi^{(21)}_{j_2 j_1 \bar{J}-kM} = (-1)^k \Phi^{(12)}_{j_1 j_2 \bar{J}-kM}$, 于是，最后得到

$$\Phi^{(12)}_{j_1 j_2 JM} = (-1)^{j_1+j_2-J} \Phi^{(21)}_{j_2 j_1 JM} , \tag{47}$$

$$\langle j_1 j_2 JM | m_1 m_2 \rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} \langle j_2 j_1 JM | m_2 m_1 \rangle . \tag{48}$$

(ii) 由于 $(-1)^{j_2+m_2} \langle j_2 J j_1 m_1 | -m_2 M \rangle$ 与 $\langle j_1 j_2 JM | m_1 m_2 \rangle$ 满足同样的递推公式 (43) 或 (44), 故两者只能相差一个与 m_1, m_2, M 无关的系数，即

$$\langle j_1 j_2 JM | m_1 m_2 \rangle = C(-1)^{j_2+m_2} \langle j_2 J j_1 m_1 | -m_2 M \rangle . \tag{49}$$

两边自乘后对 m_1, m_2, M 求和，得 $|C|^2 = (2J+1)/(2j_1+1)$, 再利用 (48) 及补充条件 (38), 知道 $C > 0$ (本章末所注明的 Edmonds 的

书中第 42 页有详细的推导). 用类似的方法还可以得到其他关系式，于是

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

$$= (-1)^{j_2+m_2}\left(\frac{2J+1}{2j_1+1}\right)^{1/2}\langle j_2 J j_1 m_1|-m_2 M\rangle$$

$$= (-1)^{j_1-m_1}\left(\frac{2J+1}{2j_2+1}\right)^{1/2}\langle J j_1 j_2 m_2|M-m_1\rangle\,. \tag{50}$$

把 (49) 式连用三次，即得

$$\langle j_1 j_2 JM|m_1 m_2\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J}\langle j_1 j_2 J-M|-m_1-m_2\rangle\,. \tag{51}$$

由此及 (48),(49) 式又有

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

$$= (-1)^{j_2+m_2}\left(\frac{2J+1}{2j_1+1}\right)^{1/2}\langle J j_2 j_1 -m_1|-M m_2\rangle\,. \tag{52}$$

如果 j_1, j_2 中有一个为 0，例如 $j_2=0$，则 $\Phi^{(12)}_{j_1 0 j_1 j}=\Phi^{(1)}_{j_1 j_1}\Phi^{(2)}_{00}$，于是 $\Phi^{(12)}_{j_1 0 j_1 M}=\Phi^{(1)}_{j_1 M}\Phi^{(2)}_{00}$. 故

$$\langle j_1 0 JM|m_1 0\rangle = \langle 0 j_1 JM|0 m_1\rangle = \delta_{J j_1}\delta_{M m_1}\,. \tag{53}$$

于是，由 (49) 式又有

$$\langle j_1 j_2 00|m_1 m_2\rangle = (-1)^{j_2+m_2}\left(\frac{1}{2j_1+1}\right)^{1/2}\delta_{j_1 j_2}\delta_{m_1 -m_2}$$

$$= (-1)^{j_1-m_1}\left(\frac{1}{2j_1+1}\right)^{1/2}\delta_{j_1 j_2}\delta_{m_1 -m_2}\,. \tag{54}$$

采用 $3j$ 系数的记号比较容易记住对称关系：

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix},$$

$$(-1)^{j_1+j_2+j_3}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} .$$

下面给出 Clebsch-Gordan 系数的表达式，由于推导过程颇长，只写出最后结果

$$\langle j_1 j_2 JM|m_1 m_2\rangle = \delta_{m,m_1+m_2}\sqrt{\frac{(J+M)!(J-M)!(2J+1)}{(J+j_1+j_2+1)!}}$$

$$\times\sqrt{\frac{(J+j_1-j_2)!(J-j_1+j_2)!(j_1+j_2-J)!}{(j_1-m_1)!(j_1+m_1)!(j_2-m_2)!(j_2+m_2)!}}$$

$$\times\sum_K \frac{(-1)^{K+j_2+m_2}(J+j_2+m_1-K)!(j_1-m_1+K)!}{(J-j_1+j_2-K)!(J+M-K)!K!(K+j_1-j_2-M)!} . \qquad (55)$$

这个公式是 Wigner 在 1931 年利用 $\mathcal{D}$ 矩阵的直积的分解公式推导出来的. 在对 K 求和时，需要保持每一个阶乘符号内的数目为正整数或零. Racah 在 1942 年以及后来其他人利用递推公式推导出形式上更为对称的表达式，这里不一一列举了. 这样复杂的表达式不便于在人工计算中使用，对于寻找一些关系式或借助程序进行计算则十分有用. 文献中有一些数值表，也有一些适用于特别场合的比较简单的公式.

小结: 两个给定大小的角动量耦合的问题的基本内容是把 $R^{j_1 j_2}$ 分解为一系列基本的转动不变子空间 $R_j^{j_1 j_2}$，并建立新基矢 $\{\Phi^{(12)}_{j_1 j_2 JM}\}$, Clebsch-Gordan 系数是处理这个问题的基本工具.

§3 $\mathcal{D}^j(g)$ 矩阵的性质

3.1 $\mathcal{D}^j(g)$ 作为转动群 (O_3^+) 的表示

一个集合形成一个群的意思是: (i) 有一种叫做乘法的运算, 使得任何两个元素的积也是集合中的元素; (ii) 集合中存在单位元素, 使得任何元素被单位元素左乘或右乘时都不变; (iii) 每个元素都有逆元素, 使得任何元素与自己的逆元素的积都等于单位元素; (iv) 乘法满足结合律.

所谓某个群 A(元素为 a) 的一个 n 维表示, 是指从群 A 到一个以 $n\times n$ 矩阵为元素的群的一种对应 $a\to M(a)$, 这个对应需符合如下的条件: (1) 对于 A 的单位元素 a_0, $M(a_0)$ 是一个单位矩阵; (2)A 中任两个元素的积 a_1a_2 所对应的矩阵 $M(a_1a_2)$ 等于 $M(a_1)$ 与 $M(a_2)$ 按同样次序作成的矩阵积, 即 $M(a_1a_2)=M(a_1)M(a_2)$. 这里条件 (2) 加上 $M(A)$ 是群的条件包含着 (1), 反之, 条件 (1) 及 (2) 包含 $M(A)$ 是群的条件. 如果对于每个 a, $M(a)$ 都是幺正矩阵, 就说表示是幺正的. 如果 $a\to M(a)$ 与 $a\to N(a)$ 构成群 A 的两个同阶表示, 而且存在一个与 a 无关的非异矩阵 Q, 使得对于每个 a 都有 $QM(a)Q^{-1}=N(a)$, 就说这两个表示是等阶的.

我们已经知道, 空间的转动是矢量空间中一个特殊的正交变换, 前面用过的 $g(n,\theta)$ 就是这种正交变换的矩阵. 每一个 g 都是行列式为 1 的实正交矩阵. 反之, 每一个行列式为 1 的实正交矩阵 (O_3^+ 矩阵) 都代表一个转动. 另外, 两个 O_3^+ 矩阵的积仍然是一个 O_3^+ 矩阵. 这不过是说, 两次接连施行的转动的结果可以用一次转动来达到. 如果考察全体 O_3^+ 矩阵的集合, 那么, 这个集合在矩阵乘法下构成一个群, 称为转动群 (通常记为 O_3^+ 群或 R_3 群. 群的单位元素是一个 3×3 单位矩阵, 每个元素的逆都是它自己的逆矩阵). 转动群的元素可用参量 (n,θ) 来确定, 也可以用三个欧拉角作为新的参量, 所以转动群是含有三个参量的连续群.

在 §1 中，我们用 $\mathcal{D}^j(g)$ 矩阵来描写角动量本征态的转动性质，在那里已经着重指出，一组符合条件 (16) 的角动量本征态的转动性质取决于角动量量子数，因此 $\mathcal{D}^j(g)$ 矩阵取决于 g 及 j. 现在要进一步指出，在每一个 j 值下 (严格地说在每个整数的 j 值下) 从转动群到 $\mathcal{D}^j$ 矩阵集的对应

$$g \longrightarrow \mathcal{D}^j(g)\,, \tag{56}$$

都构成转动群的 $2j+1$ 维表示. 我们来检查一下是否合乎群表示的条件. 当 j 为整数时，$\mathcal{D}^j(g)$ 的矩阵元是 (n,θ) 的单值函数，$\mathcal{D}^j(g(n,0))$ 是 $2j+1$ 行 $2j+1$ 列的单位矩阵，另外，根据

$$D(g_1g_2) = D(g_1)D(g_2)\,,$$

有

$$\mathcal{D}^j_{mm'}(g_1g_2) = \sum_{m''} \mathcal{D}^j_{mm''}(g_1)\mathcal{D}^j_{m''m'}(g_2)\,, \tag{57}$$

或

$$\mathcal{D}^j(g_1g_2) = \mathcal{D}^j(g_1)\mathcal{D}^j(g_2)\,. \tag{58}$$

所以，群表示的条件是得到满足的.

上面的讨论形式上也可用到 j 为半奇数的情形，不过这时 $\mathcal{D}^j(n,\theta)$ 的矩阵元是 (n,θ) 的双值函数，例如 $\mathcal{D}^j_{mm}(z,0) = 1$ 而 $\mathcal{D}^j_{mm}(z,2\pi)$ 的值是 $(-1)^{2j} = -1$, 但 $g(n,2\pi)$ 本来与 $g(n,0)$ 是一样的，既然如此，对于任意的 (n,θ), $\mathcal{D}^j_{mm}(n,\theta)$ 都有两个值，两者只有正负号的差别. 严格说来，当 j 为半奇数时，对应 (56) 已不是转动群的表示，通常称为转动群的双值表示.

3.2 幺正性. 不可约性

从 $D(g)$ 算符的幺正性可直接看出 $\mathcal{D}^j(g)$ 是幺正矩阵. 若

$|nljm\rangle$ 是真正归一的基本右矢，则

$$\left[\mathcal{D}^j(g)^\dagger\right]_{mm'} = \mathcal{D}^{j*}_{m'm}(g) = \langle \eta jm'|D(g)|\eta jm\rangle^*$$
$$= \langle \eta jm|D(g)^\dagger|\eta jm'\rangle \ ,$$

$$\left[\mathcal{D}^j(g)^\dagger \mathcal{D}^j(g)\right]_{mm''} = \sum_{m'} \langle \eta jm|D(g)^\dagger|\eta jm'\rangle\langle \eta jm'|D(g)|\eta jm''\rangle$$
$$= \langle \eta jm|D(g)^\dagger D(g)|\eta jm''\rangle = \delta_{mm''} \ ,$$

故

$$\mathcal{D}^j(g)^\dagger \mathcal{D}^j(g) = \mathcal{D}^j(g)\mathcal{D}^j(g)^\dagger = 1 \ . \tag{59}$$

即是说，在每个 g 下，$\mathcal{D}^j(g)$ 都是幺正矩阵，所以 (56) 式所表达的对应给出了转动群的幺正表示.

不可约性是指 (56) 式所给出的表示的不可约性. 这是矩阵集 $\mathcal{D}^j(O_3^+)$ 的性质，不是对个别矩阵来说的. 让我们提及一下群表示可约不可约性的一般定义. 设从群 A 到某矩阵群的对应 $a \to M(a)$ 构成群 A 的 k 维表示，每个矩阵可看成是作用于一个 k 维线性空间 R 上的一个线性变换 $G(a)$，被它作用的“向量”是单列阵 (这个线性空间称为表示空间). 如果存在维数小于 k 的在 $M(A)$ 作用下不变的子空间 h，就说表示是可约的，否则称为不可约的. (所谓 h 在 $M(A)$ 作用下不变，意思是说，h 中任一个单列阵，被 $M(A)$ 中任一矩阵作用之后，结果仍是 h 中的单列阵，这样的 h 又称为该表示的不变子空间.) 如果表示是可约的，即是说存在上述不变子空间 h，设其维数 $l < k$, 那么在 h 中选好基之后，就可以用一个 $l \times l$ 矩阵 $N(a)$ 来代表线性变换 $G(a)$，容易证明 $a \to N(a)$ 也给出群 A 的一个表示. 这是由原表示在不变子空间 h 上诱导出来的. 如果原来的表示是幺正的，就可以把 $M(a)$ 看成幺正变换 $G(a)$ 在正交归一基中的矩阵. 当找到一个 $M(a)$ 不变子空间 h 时，可以把 R 分解成 h 与一个正交于 h 的子空间 h':$R = h \oplus h'$ 且 $h \perp h'$. 这时 h' 也是一个 $M(a)$ 不变子空间，因此原来的表示在 h'

上也诱导出一个表示 $a \to N'(a)$, 这时我们说表示 $a \to M(a)$ 分解成两个表示的直和. 显然 h 及 h' 中的基总是可以选成正交归一的, 这样 $N(a)$ 及 $N'(a)$ 都是幺正矩阵, 再把 h 中的基与 h' 中的基合并起来, 作为 R 中的新基, 那么 $G(a)$ 在新基中的矩阵是准对角形式的幺正矩阵

$$\begin{pmatrix} N(a) & 0 \\ 0 & N'(a) \end{pmatrix} . \tag{60}$$

另一方面, 按照假设, $N(a)$ 是 $G(a)$ 在原来的正交归一基中的矩阵. 我们知道, 新基和老基之间可用幺正变换联系起来, 而这个变换也就给出了矩阵 $M(a)$ 与上述准对角矩阵之间的联系. 因此, 用纯粹的矩阵形式来表达时, 一个幺正表示 $a \to M(a)$ 的可约性意味着, 存在与 a 无关的幺正矩阵 U, 使得矩阵集 $M(A)$ 中的每个矩阵都变成如 (60) 所示的准对角形式, 即

$$UM(a)U^{-1} = \begin{pmatrix} N(a) & 0 \\ 0 & N'(a) \end{pmatrix} . \tag{61}$$

现在回到 (56) 式所示的转动群的表示, 我们要证明这是一个不可约表示. 为此, 我们把 $\mathcal{D}^j(g)$ 看成是作用于一个 $2j+1$ 维复欧氏空间 R 中的幺正变换, 然后证明它在这个空间中的不变子空间也是 $2j+1$ 维的. 即是说不存在更小的不变子空间. 令

$$I_n = \mathrm{i}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\mathcal{D}^j(\boldsymbol{n},\theta)\right]_{\theta=0} ,$$

于是

$$\mathcal{D}^j(\boldsymbol{n},\theta) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}I_n\theta} \quad (I_n^\dagger = I_n) .$$

从 $\mathcal{D}^j(g)$ 的定义可以看出

$$(I_n)_{mm'} = \langle \eta j m | J_n | \eta j m' \rangle .$$

由此可见，I_x, I_y, I_z 之间遵守角动量的对易关系．定义

$$I_\pm = I_x \pm \mathrm{i} I_y\,, \quad \boldsymbol{I}^2 = (I_x)^2 + (I_y)^2 + (I_z)^2\,,$$

则

$$(I_\pm)_{mm'} = \langle \eta j m | I_\pm | \eta j m' \rangle = \delta_{mm'\pm 1}\sqrt{(j \mp m')(j \pm m' + 1)}\,.$$

$$(I_z)_{mm'} = m\delta_{mm'}\,,$$

$$(\boldsymbol{I}^2)_{mm'} = j(j+1)\delta_{mm'}\,.$$

仿照本章 §1 的办法，可构成 $\boldsymbol{I}^2 I_z$ 的共同本征向量 (写成单列阵)，现在 $\boldsymbol{I}^2$ 的量子数已被固定为 j, 因此，共有 $2j+1$ 个本征向量 e_m, $m = -j, -j+1, \cdots, j$, 它们可以归一化，并通过相因子的选择使下式成立

$$I_\pm e_m = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\, e_{m\pm 1}\,. \tag{16'}$$

由于 e_m 的独立个数与空间 R 的维数一样，故它们可作为 R 的基，设 e 是一个任意的单列阵，用 e_m 的线性组合写成

$$e = \sum_m f_m e_m\,.$$

以 I_+ 及 I_- 重复地作用于 e，构成 I_+e, I_-e, $I_+^2 e$, I_+I_-e, $I_-^2 e$, $\cdots$ 由 (16′) 式可知，只要原来的 e 不是 0 向量，总是可以用这种办法找到 $2j+1$ 个线性无关的向量，这意味着，在 R 中不存在维数更低的能在 (I_x, I_y, I_z) 作用下保持不变的子空间．这也就表明 R 是 $\mathcal{D}^j(g)$ 的最小的不变子空间，因此，$g \to \mathcal{D}^j(g)$ 构成 O_3^+ 的一个 $2j+1$ 维不可约表示．

最后，讲一下转动群的一般表示分解为不可约表示的问题，需要强调的是，分解的结果总是得出若干种由 $\mathcal{D}^j(g)$ 构成的不可约表示．为了方便，假定表示是幺正的．设 $g \to \Gamma(g)$ 构成 O_3^+ 的 k 维幺正表示，于是

$$\Gamma(\boldsymbol{n}, \theta) = 1_k\,, \tag{62}$$

$$\Gamma(g)^\dagger\Gamma(g)=\Gamma(g)\Gamma(g)^\dagger=1_k\ , \tag{63}$$

$$\Gamma(g_1)\Gamma(g_2)=\Gamma(g_1g_2)\ , \tag{64}$$

其中 1_k 是 $k\times k$ 单位矩阵. 令

$$I_n\doteq \mathrm{i}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\Gamma(\boldsymbol{n},\theta)\right]_{\theta=0}\ , \tag{65}$$

则

$$\Gamma(\boldsymbol{n},\theta)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}I_n\theta}\ , \tag{66}$$

I_n 是 $k\times k$ 厄米矩阵. 根据 (64), (66) 式可以知道 I_x,I_y,I_z 遵守角动量的对易关系. 令

$$I_\pm=I_x\pm\mathrm{i}I_y\ ,$$

$$\boldsymbol{I}^2=(I_x)^2+(I_y)^2+(I_z)^2\ .$$

我们把 $\Gamma(g)$ 看成是作用于一个 k 维复欧氏空间 Q 中的幺正变换 $G(g)$, 仿照本章 §1 的办法, 可构成 $\boldsymbol{I}^2,I_z$ 的共同本征向量 $e(\alpha jm)$, 其中 α 用来区别具有相同 jm 值的不同本征向量, 假定它不受 $I_\pm$ 作用的影响, 并假定相角条件 (16) 及正交归一条件均已得到满足 (这些假定都是允许的)

$$I_\pm e(\alpha jm)=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,e(\alpha jm\pm1)\ ,$$

$$e(\alpha' jm)^\dagger e(\alpha jm)=\delta_{\alpha\alpha'}\ ,$$

其中 $e(\alpha' jm)^\dagger$ 代表 $e(\alpha' jm)$ 的厄米共轭, 因此是单行阵. 根据 I_x,I_y,I_z 的对易关系, 只能说 j 的许可值是 $0,1/2,1,3/2,2,\cdots$, 至于 j 的实际取值范围以及在给定的 j 下有多少个 α 值, 后面还要提到, 现在要指出, 对于任何实际出现的 j 及 α 值, 都有

$$e(\alpha jm)^\dagger\Gamma(g)e(\alpha jm)=\mathcal{D}^j_{mm'}(g)\ .$$

即是说，当我们考虑到一切实际出现的 (αj) 值，把 $\{e(\alpha jm)\}$ 作为空间 Q 的正交归一基时，幺正变换 $G(\alpha)$ 的矩阵是由各种 j 值的 $\mathcal{D}^j(g)$ 矩阵构成的准对角形式. 我们把准对角形式的矩阵写成

$$\Big[\underbrace{\mathcal{D}^0\mathcal{D}^0\cdots}_{s_0\text{个}}\ \underbrace{\mathcal{D}^{1/2}\mathcal{D}^{1/2}\cdots}_{s_{1/2}\text{个}}\ \underbrace{\mathcal{D}^j\mathcal{D}^j\cdots}_{s_j\text{个}}\Big], \tag{67}$$

其中每个 $\mathcal{D}^j$ 都可能有重复，(67) 式中用 s_j 代表明 $\mathcal{D}^j$ 的重复的次数，也就是在实际出现的一定 j 下的 α 值的个数. 对于实际上不出现的 j 值，应取相应的 s_j 为零. 由于 (67) 式与原来的 $\Gamma(g)$ 可以看作幺正变换 $G(g)$ 在不同基中的矩阵，因此又可以说，存在一个与 g 无关的 $k\times k$ 幺正矩阵 C，使得

$$C\,\Gamma(g)\,C^\dagger=\Big[\underbrace{\mathcal{D}^0(g)\cdots}_{s_0\text{个}},\ \underbrace{\mathcal{D}^{1/2}(g)\cdots}_{s_{1/2}\text{个}},\ \underbrace{\mathcal{D}^j(g)\cdots}_{s_j\text{个}},\cdots\Big], \tag{68}$$

对两边取对角和可得

$$\operatorname{tr}\Gamma(g)=\sum_j s_j\operatorname{tr}\mathcal{D}^j(g)\,.$$

由于 $\operatorname{tr}\mathcal{D}^j(g)$ 作为群 O_3^+ 上的函数对于不同 j 值有正交性 (参看后面)，只要知道了 $\Gamma(g)$ 就能够唯一地确定 s_j.

由 (68) 式可以看到，当 $g\to\Gamma(g)$ 是 O_3^+ 的不可约的幺正表示时，存在一个与 g 无关的幺正矩阵，使 $C\Gamma(g)C^\dagger$ 就是 $\mathcal{D}^j(g)$, j 由表示的维数决定.

3.3 $\mathcal{D}^j(g)$ 矩阵直积的分解

用 $\Gamma^{j_1j_2}(g)$ 代表两个 $\mathcal{D}^j(g)$ 矩阵的直积

$$\Gamma^{j_1j_2}(g)=\mathcal{D}^{j_1}(g)\otimes\mathcal{D}^{j_1}(g)\,,$$

容易验证，$g \to \Gamma^{j_1 j_2}(g)$ 构成转动群的一个 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 维表示，除了有一个 j 等于零的情形，这个表示是可约的. 现在我们要把它分解为由若干种 $\mathcal{D}^j(g)$ 构成的不可约表示，即求出公式 (68) 中的各个 s_j 以及幺正矩阵 C. 在前面讨论 $\Gamma(g)$ 的分解时，我们利用了 $I^2 I_z$ 的共同本征向量 $e(\alpha jm)$，对于现在的 $\Gamma^{j_1 j_2}(g)$ 而言，上节中的耦合基矢 $\Phi_{j_1 j_2 JM}$ 就是这样的本征向量，它们与非耦合基矢的关系已经知道了，因此直接采用上节的结果就可以得出答案.

保持上节的记号，设 $\boldsymbol{J}$ 代表两个互相对易的角动量 $\boldsymbol{J}_1$ 与 $\boldsymbol{J}_2$ 的和，$\Phi^{(1)}_{j_1 m_1}$ 是 $\boldsymbol{J}_1^2 J_{1z}$ 的本征态，$\Phi^{(2)}_{j_2 m_2}$ 是 $\boldsymbol{J}_2^2 J_{2z}$ 的本征态，分别满足如下的相角条件

$$J_{1\pm}\Phi^{(1)}_{j_1 m_1} = \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)}\,\Phi^{(1)}_{j_1 m_1 \pm 1}\,,$$

$$J_{2\pm}\Phi^{(2)}_{j_2 m_2} = \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)}\,\Phi^{(2)}_{j_2 m_2 \pm 1}\,,$$

利用 Clebsch-Gordan 系数构成耦合基矢

$$\Phi_{j_1 j_2 JM} = \sum_{m_1 m_2} \Phi^{(1)}_{j_1 m_1}\Phi^{(2)}_{j_2 m_2}\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 JM\rangle\,. \tag{69}$$

它们也符合同样的相角条件

$$J_{\pm}\Phi_{j_1 j_2 JM} = \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}\Phi_{j_1 j_2 JM\pm 1}\,.$$

(69) 式的逆是

$$\Phi^{(1)}_{j_1 m_1}\Phi^{(2)}_{j_2 m_2} = \sum_{JM} \Phi_{j_1 j_2 JM}\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 JM\rangle\,.$$

在转动 g 时，有

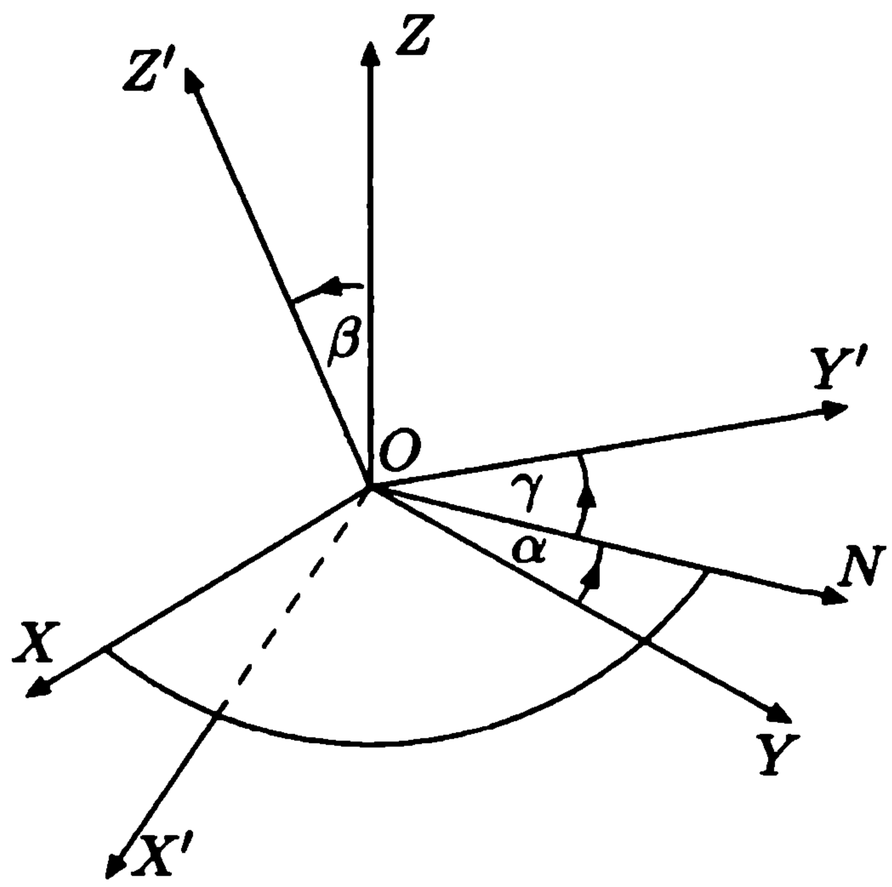
$$\sum_{m_1' m_2'} \Phi^{(1)}_{j_1 m_1'}\Phi^{(2)}_{j_2 m_2'}\mathcal{D}^{j_1}_{m_1' m_1}(g)\mathcal{D}^{j_2}_{m_2' m_2}(g)$$
$$= \sum_{JM'M} \Phi_{j_1 j_2 JM'}\mathcal{D}^{J}_{M'M}(g)\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 JM\rangle\,,$$

再把 (69) 代进来，比较两边的系数有

$$\mathcal{D}^{j_1}_{m_1m_1'}(g)\mathcal{D}^{j_2}_{m_2m_2'}(g) = \sum_{JMM'} \langle j_1m_1j_2m_2|JM\rangle \mathcal{D}^{J}_{MM'}(g)\langle j_1m_1'j_2m_2'|JM'\rangle \ .$$

这就是我们要求的分解公式，J 代表由 j_1, j_2 耦合而成的角动量. 即 $J = |j_1 - j_2|,\ |j_1 - j_2| + 1,\ \cdots, j_1 + j_2$，对于这个范围内的每个 J 值，$\mathcal{D}^J(g)$ 都出现一次.

3.4 $\mathcal{D}(g)$ 函数的正交性



现在用欧拉角来描述空间转动，当空间转动 g 时，如果跟随空间一起转动的坐标架从 $OXYZ$ 的方位变到 $OX'Y'Z'$ 的方位，则如上图所示的 (α, β, γ) 称为 g 的欧拉角 (图中 ON 在 XY 平面与 $X'Y'$ 平面的交线上). 这一转动可以看作将坐标架按以下次序施行的三次转动的总结果

(i) 绕 Z 轴转 α 角；

(ii) 绕新 Y 轴转 β 角；

(iii) 再绕新 Z 轴转 γ 角.

相应地可把欧拉角为 (α,β,γ) 的转动表示成

$$g(\alpha,\beta,\gamma)=g(\boldsymbol{k}_{新},\gamma)g(\boldsymbol{j}_{新},\beta)g(\boldsymbol{k},\alpha)$$

$$=g(\boldsymbol{k},\alpha)g(\boldsymbol{j},\beta)g(\boldsymbol{k},\gamma)\ . \tag{70}$$

后一行表明，$g(\alpha,\beta,\gamma)$ 又可以看作另外三次转动的总结果：先绕 Z 轴转 γ 角，再绕 Y 轴转 β 角，再绕 Z 轴转 α 角.

$g(\boldsymbol{j},\theta)$ 及 $g(\boldsymbol{k},\theta)$ 的矩阵已在前一章写出，即

$$g(\boldsymbol{j},\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta & 0 & \sin\theta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta\end{pmatrix},$$

$$g(\boldsymbol{k},\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta & 0\\ \sin\theta & \cos\theta & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

借助 (70) 式，可把 D 算符及 $\mathcal{D}^j$ 矩阵写成

$$D(g)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}J_z\alpha}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}J_y\beta}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}J_z\gamma}\ , \tag{71}$$

$$\mathcal{D}^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\alpha}\,d^j_{m'm}(\beta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\gamma}\ , \tag{72}$$

其中 $d^j_{m'm}(\beta)$ 可利用归一基矢 $|\eta jm\rangle$ 表示为

$$d^j_{m'm}(\beta)=\langle\eta jm'|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}J_y\beta}|\eta jm\rangle\ . \tag{73}$$

$\mathrm{i}J_y$ 在 $|\eta jm\rangle$ 表象中的矩阵元是实数，因此 $d^j_{m'm}(\beta)$ 是 β 的实函数，即

$$d^{j*}_{m'm}(\beta)=d^j_{m'm}(\beta)\ . \tag{74}$$

由此又得到

$$d^j_{m'm}(-\beta)=d^j_{mm'}(\beta)\ . \tag{75}$$

下面证明 $\mathcal{D}^{j}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ 函数的正交性. 我们把在 g 的欧拉角 (α,β,γ) 附近的体积元 $\sin\beta \mathrm{d}\beta \mathrm{d}\alpha d\gamma$ 简单地记为 $\mathrm{d}g$, 用 $f(g)$ 代表 $g(\alpha,\beta,\gamma)$ 的函数, $\int f(g)\mathrm{d}g$ 代表 $\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\mathrm{d}\beta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\gamma f(g)\sin\beta$, 可以证明

$$\int f(g,g_0)\mathrm{d}g=\int f(gg_0)\mathrm{d}g=\int f(g)\mathrm{d}g\,, \tag{76}$$

其中 g_0 是任何一个转动.

按照 $\mathcal{D}^{j}_{m'm}(g)$ 的定义, 对于归一的基矢 $|\eta jm\rangle$, 有

$$\mathcal{D}^{j_1}_{m'_1m_1}(g)=\langle\eta_1 j_1 m'_1|D(g)|\eta_1 j_1 m_1\rangle\,,$$

$$\mathcal{D}^{j_2}_{m'_2m_2}(g)=\langle\eta_2 j_2 m'_2|D(g)|\eta_2 j_2 m_2\rangle\,.$$

故

$$\int \mathcal{D}^{j_1*}_{m'_1m_1}(g)\mathcal{D}^{j_2}_{m'_2m_2}(g)\mathrm{d}g$$

$$=\langle\eta_1 j_1 m_1|P|\eta_2 j_2 m_2\rangle=\langle\eta_2 j_2 m'_2|Q|\eta_1 j_1 m'_1\rangle\,,$$

其中

$$P=\int \mathrm{d}g D(g)^{\dagger}|\eta_1 j_1 m'_1\rangle\langle\eta_2 j_2 m'_2|D(g)\,,$$

$$Q=\int \mathrm{d}g D(g)|\eta_2 j_2 m_2\rangle\langle\eta_1 j_1 m_1|D(g)^{\dagger}\,.$$

利用 (76) 式可证明, 算符 P 及 Q 是转动不变的, 故

$$\langle\eta_1 j_1 m_1|P|\eta_2 j_2 m_2\rangle=\delta_{j_1j_2}\delta_{m_1m_2}\langle\eta_1 j_1 j_1|P|\eta_2 j_1 j_1\rangle\,,$$

$$\langle\eta_2 j_2 m'_2|Q|\eta_1 j_1 m'_1\rangle=\delta_{j_1j_2}\delta_{m'_1m'_2}\langle\eta_2 j_1 j_1|Q|\eta_1 j_1 j_1\rangle\,,$$

因此

$$\int \mathcal{D}^{j_1*}_{m'_1m_1}(g)\mathcal{D}^{j_2}_{m'_2m_2}(g)\mathrm{d}g=C(j_1)\delta_{j_1j_2}\delta_{m'_1m'_2}\delta_{m_1m_2}\,,$$

其中 $C(j_1)$ 与 m_1, m_2, m_1', m_2' 无关 (也与 $\eta_1\eta_2$ 无关). 故

$$\begin{aligned} C(j_1) &= \int \mathcal{D}^{j_1*}_{m_1'm_1}(g)\mathcal{D}^{j_1}_{m_1'm_1}(g)\mathrm{d}g \\ &= \frac{1}{2j_1+1}\sum_{m_1}\int \mathcal{D}^{j_1*}_{m_1'm_1}(g)\mathcal{D}^{j_1}_{m_1'm_1}(g)\mathrm{d}g \\ &= \frac{1}{2j_1+1}\int \mathrm{d}g = \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\ . \end{aligned}$$

代入上式，得

$$\int \mathcal{D}^{j_1*}_{m_1'm_1}(g)\mathcal{D}^{j_2}_{m_2'm_2}(g)\mathrm{d}g = \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{j_1j_2}\delta_{m_1'm_2'}\delta_{m_1m_2}\ , \tag{77}$$

这是 $\mathcal{D}$ 函数的正交归一公式.

令 $m_1' = m_1$, $m_2' = m_2$, 再对 m_1 及 m_2 求和，则

$$\int \left\{\mathrm{tr}\,\mathcal{D}^j(g)\right\}^* \left\{\mathrm{tr}\,\mathcal{D}^j(g)\right\}\mathrm{d}g = 8\pi^2\delta_{j'j}\ , \tag{78}$$

这是 $\mathrm{tr}\,\mathcal{D}^j(g)$ 的正交归一公式.

3.5 $\mathcal{D}^j(g)$ 的表达式

在用欧拉角 α, β, γ 表达空间转动时，$\mathcal{D}^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的 α, γ 部分是非常简单的因子，需要求的是 β 部分的因子 $d^j_{m'm}(\beta)$. 在有关书籍中可以查到各种不同的方法，我们在这里用的是比较简单的代数方法.

设 $a_1^\dagger$, $a_2^\dagger$ 是两个互相对易的产生算符，a_1, a_2 及 $|0\rangle$ 为相应的消灭算符和“真空态”，即是说，

$$a_1|0\rangle = a_2|0\rangle = 0\ , \tag{79}$$

$$a_ia_j^\dagger - a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}\ , \tag{80}$$

$$a_ia_j - a_ja_i = a_i^\dagger a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i^\dagger = 0\ . \tag{81}$$

由此构成如下的算符 J_x, J_y, J_z:

$$\left.\begin{aligned} J_x &= \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1) = J_x^\dagger\,, \\ J_y &= \frac{1}{2\mathrm{i}}(a_1^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1) = J_y^\dagger\,, \\ J_z &= \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2) = J_z^\dagger\,. \end{aligned}\right\} \tag{82}$$

再令 $J_\pm = J_x \pm \mathrm{i}J_y$，又有

$$J_+ = a_1^\dagger a_2\,, \quad J_- = a_2^\dagger a_1\,, \tag{83}$$

和

$$\left.\begin{aligned} [J_+,\ a_1^\dagger] &= 0\,, \quad [J_+,\ a_2^\dagger] = a_1^\dagger\,, \\ [J_-,\ a_1^\dagger] &= a_2^\dagger\,, \quad [J_-,\ a_2^\dagger] = 0\,. \end{aligned}\right\} \tag{84}$$

顺便说明一下，如果愿意，我们可以从任一个实际的含有相同玻色子的系统的产生算符中，取两个作为 $a_1^\dagger$ 及 $a_2^\dagger$，把满足 (79) 式的任一个状态取作 $|0\rangle$. 也可以从一个两维或三维谐振子中，选取 x 方向的振动量子的产生消灭算符作为 $a_1^\dagger$ 及 a_1, 取 y 方向的振动量子的算符作为 $a_2^\dagger$ 及 a_2，而以零点振动态作为 $|0\rangle$. 我们所重视的是由 (82) 式定义的三个厄米算符的对易关系以及它们与 $a_1^\dagger, a_2^\dagger$ 之间的对易关系.

借助 (79),(80),(81) 式以及写出的对易关系，很容易构成 J^2, J_z 的共同本征态

$$|jm\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{j+m}(a_2^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle\,. \tag{85}$$

利用 (83),(84) 式作直接验证可知，同一个 j 下的各个态满足下列关系

$$J_\pm|jm\rangle = |jm \pm 1\rangle\sqrt{(j \mp 1)(j \pm m + 1)}\,, \tag{86}$$

这样就可以知道 $|jm\rangle$ 在 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}J_y\beta}$ 作用下，必然是按 $d^j(\beta)$ 变换的，即

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}J_y\beta}|jm\rangle = \sum_{m'} |jm'\rangle d^j_{m'm}(\beta) \ . \tag{87}$$

借此可以方便地求出 $d^j_{m'm}(\beta)$. 由 (85) 式，有

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}J_y\beta}|jm\rangle = \frac{(a'^{\dagger}_1)^{j+m}(a'^{\dagger}_2)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle \ , \tag{88}$$

其中

$$a'^{\dagger}_1 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}J_y\beta}a^{\dagger}_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}J_y\beta} \ , \quad a'^{\dagger}_2 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}J_y\beta}a^{\dagger}_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}J_y\beta} \ , \tag{89}$$

对 β 求微商，利用 (84) 式，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}a'^{\dagger}_1 = \frac{1}{2}a'^{\dagger}_2, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}a'^{\dagger}_2 = -\frac{1}{2}a'^{\dagger}_1 .$$

由此及 $\beta = 0$ 时的初条件可求得

$$a'^{\dagger}_1 = a^{\dagger}_1\cos\frac{\beta}{2} + a^{\dagger}_2\sin\frac{\beta}{2} \ ,$$

$$a'^{\dagger}_2 = -a^{\dagger}_1\sin\frac{\beta}{2} + a^{\dagger}_2\cos\frac{\beta}{2} \ ,$$

代回 (88) 式并与 (87) 式比较，即得到

$$\begin{aligned} d^j_{m'm}(\beta) = {} & \sqrt{\frac{(j+m')!(j-m')!}{(j+m)!(j-m)!}} \\ & \times \sum_{\sigma} \begin{pmatrix} j+m \\ j-m'-\sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j-m \\ \sigma \end{pmatrix} (-1)^{j-m-\sigma} \\ & \times \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2\sigma+m'+m} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2\sigma-m'-m} \ . \end{aligned} \tag{90}$$

有时，把 $d^j_{m'm}(\beta)$ 写成下面的形式也有方便之处

$$d^j_{m'm}(\beta) = \frac{(-1)^{j-m}}{(\sqrt{2})^{2j}(j-m')!}\sqrt{\frac{(j-m')!(j+m')!}{(j+m)!(j-m)!}}$$

$$\times(1-\mu)^{\frac{m-m'}{2}}(1+\mu)^{-\frac{m'+m}{2}}$$

$$\times\frac{\mathrm{d}^{j-m'}}{\mathrm{d}\mu^{j-m'}}\left[(1-\mu)^{j-m}(1+\mu)^{j+m}\right] \tag{91a}$$

$$=\sqrt{\frac{(j+m')!(j-m')!}{(j+m)!(j-m)!}}(-1)^{m'-m}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m'-m}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{m+m'}$$

$$\times\mathrm{P}^{(m'-m,m'+m)}_{j-m'}(\mu) \qquad (\mu=\cos\beta)\,, \tag{91b}$$

式中的 $\mathrm{P}^{(\alpha,\beta)}_n$ 是雅可比 (Jacobi) 多项式，表达式为

$$\mathrm{P}^{(\alpha,\beta)}_n(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}$$

$$\times[(1-x)^{\alpha+n}(1+x)^{\beta+n}] \tag{92}$$

$$=2^{-n}\sum_{\nu=0}^{n}\binom{n+\alpha}{\nu}\binom{n+\beta}{n-\nu}(x-1)^{n-\nu}(x+1)^{\nu}\,. \tag{93}$$

当 $x=1$ 时有 $\mathrm{P}^{(\alpha,\beta)}_n(1)=\binom{n+\alpha}{n}$，在 x 变号时，有

$$\mathrm{P}^{(\alpha,\beta)}_n(-x) = (-1)^n\mathrm{P}^{(\beta,\alpha)}_n(x)\,.$$

广义勒让德 (Legendre) 多项式可借助雅可比多项式表示为

$$\mathrm{P}^m_l(x) = \frac{(l+m)!}{2^m l!}(1-x^2)^{m/2}\mathrm{P}^{(m,m)}_{l-m}(x)\,.$$

由式 (90) 和 (91) 看出

$$d^j_{m'm}(\beta) = (-1)^{m'-m}d^j_{mm'}(\beta)\,, \tag{94}$$

$$d^j_{m'm}(\pi) = (-1)^{j-m}\delta_{m'-m}\,, \tag{95a}$$

$$d^j_{m'm}(-\pi) = (-1)^{j+m}\delta_{m'-m}\ . \tag{95b}$$

利用 (95a) 得出 $d^j_{m'm}(\beta+2\pi) = (-1)^{2j}d^j_{m'm}(\beta)$, 所以当 j 为半奇数时, $d^j_{m'm}(\beta)$ 是 β 的双值函数, 两个数值相差一个负号. 类似地, $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}$ 是 α 的双值函数, $\mathcal{D}^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ 也是 (α,β,γ) 的双值函数.

由 (94), (95) 式又有

$$d^j_{m'm}(\pi+\beta) = \sum_{m''} d^j_{m'm''}(\pi)d^j_{m''m}(\beta) = (-1)^{j+m'}d^j_{-m'm}(\beta)\ , \tag{96a}$$

$$d^j_{m'm}(\pi-\beta) = (-1)^{j+m'}d^j_{-m'm}(-\beta) = (-1)^{j+m'}d^j_{m\,-m'}(\beta)\ , \tag{96b}$$

$$\begin{aligned} d^j_{m'm}(\beta) &= \sum_{m''} d^j_{m'm''}(\beta+\pi)d^j_{m''m}(-\pi) \\ &= (-)^{j+m}d^j_{m'-m}(\beta+\pi) = (-)^{m'-m}d^j_{-m'-m}(\beta)\ . \end{aligned} \tag{96c}$$

由以上关系, 可得出 $\mathcal{D}^j_{m'm}$ 的各种对称性, 例如, 由 (96a) 及 (96b) 有

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^j_{m'm}(\alpha,\beta+\pi,\gamma) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\alpha}d^j_{m'm}(\beta+\pi)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\gamma} \\ &= (-1)^{j+m'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\alpha}d^j_{-m'm}(\beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\gamma} \\ &= (-1)^{j+m'}\mathcal{D}^j_{-m'm}(-\alpha,\beta,\gamma)\ . \end{aligned} \tag{97}$$

由 (96c) 有

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{j*}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\alpha}d^j_{m'm}(\beta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\gamma} \\ &= (-1)^{m'-m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\alpha}d^j_{-m'-m}(\beta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\gamma} \\ &= (-1)^{m'-m}\mathcal{D}^j_{-m'-m}(\alpha,\beta,\gamma)\ . \end{aligned} \tag{98}$$

当 j 为整数, m' 或 m 为零时, 由 (91) 式有

$$d^l_{0m}(\beta) = \left[\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{P}^m_l(\cos\beta)\ , \tag{99}$$

$$\mathcal{D}^{j}_{00}(\alpha,\beta,\gamma)=d^{l}_{00}(\beta)=\mathrm{P}_{l}(\cos\beta)\,, \tag{100}$$

$$\mathcal{D}^{j}_{0m}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\gamma}d^{l}_{0m}(\beta)=(-1)^{m}\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{1/2}\mathrm{Y}^{*}_{lm}(\beta,\gamma)\,. \tag{101}$$

由此及 (94) 式又得

$$\mathcal{D}^{l}_{m0}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}d^{l}_{m0}(\beta)=\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{1/2}\mathrm{Y}^{*}_{lm}(\beta,\alpha)\,. \tag{102}$$

可见，(57) 式在 $j=$ 整数及 $m'=m=0$ 时变为通常的球函数叠加公式，而公式

$$\mathcal{D}^{j_1}_{m'_1m_1}(g)\mathcal{D}^{j_2}_{m'_2m_2}(g)$$

$$=\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{M'M}\langle j_1j_2JM'|m'_1m'_2\rangle\mathcal{D}^{J}_{M'M}(g)\langle j_1j_2JM|m_1m_2\rangle$$

在 $m'_1=m'_2=0$ 或 $m_1=m_2=0$ 时化为球函数的积的分解公式.

3.6 $\mathcal{D}$ 函数作为转动波函数

考虑物体绕坐标原点的转动，并且采用本体坐标架的三个欧拉角作为描写转动的力学变数. 如果所有粒子都没有自旋，则它们的波函数可以看成欧拉角 α,β,γ 以及一些转动不变量 S 的函数 $\Psi(g(\alpha,\beta,\gamma),S)$，这里 $g(\alpha,\beta,\gamma)$ 用来表明本体坐标架的方位 $\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3$ 与固定坐标架的 $\boldsymbol{i}_1,\boldsymbol{i}_2,\boldsymbol{i}_3$ 之间的关系：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}_1&=g(\alpha,\beta,\gamma)\boldsymbol{i}_1\,,\\ \boldsymbol{e}_2&=g(\alpha,\beta,\gamma)\boldsymbol{i}_2\,,\\ \boldsymbol{e}_3&=g(\alpha,\beta,\gamma)\boldsymbol{i}_2\,.\end{aligned} \tag{103}$$

当系统含有自旋自由度时，可以在特定的含义下使用这种描写方法. 按照 (103) 可把 $\Psi(g(\alpha,\beta,\gamma),S)$ 设想为 $\Psi(\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3,S)$，由

此容易看出它在空间转动下的变换性质. 平常的波函数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 在空间转动 $(\boldsymbol{n},\theta)$ 时变成 $\Psi(g(\boldsymbol{n},-\theta)\boldsymbol{r})$, 把 $\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3$ 比作 $\boldsymbol{r}$, 可知 $\Psi(g(\alpha,\beta,\gamma),S)$ 在空间转动 $(\boldsymbol{n},\theta)$ 时变为 $\Psi(g(\boldsymbol{n},-\theta)g(\alpha,\beta,\gamma),S)$, 即是说

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{I}}\Psi(g(\alpha,\beta,\gamma),S)=\Psi(g(\boldsymbol{n},-\theta)g(\alpha,\beta,\gamma),S)\,, \tag{104}$$

其中 $\boldsymbol{I}$ 是系统的角动量算符, 它的各个分量被表示为关于 α,β,γ 的微分算子.

现在看看角动量的本征函数对于 (α,β,γ) 的依赖关系. 假设 $\Psi_{IM}(g(\alpha,\beta,\gamma),S)$ 是 $\boldsymbol{I}^2I_z$ 的本征函数, 对不同 M 值符合如下条件

$$\begin{aligned}&I_{\pm}\Psi_{IM}(g(\alpha,\beta,\gamma),S)\\&\quad=\Psi_{IM\pm1}(g(\alpha,\beta,\gamma),S)\sqrt{(I\mp M)(I\pm M+1)}\,,\end{aligned} \tag{105}$$

于是

$$\begin{aligned}&\Psi_{IM}(g(\boldsymbol{n},-\theta)g(\alpha,\beta,\gamma),S)\\&\quad=\sum_{M'}\Psi_{IM'}(g(\alpha,\beta,\gamma),S)\mathcal{D}^{I}_{M'M}(\boldsymbol{n},\theta)\,,\end{aligned} \tag{106}$$

这里不再出现微分算子, 直接令 $g(\boldsymbol{n},\theta)$ 趋于 $g(\alpha,\beta,\gamma)$ 有

$$\Psi_{IM}(0,S)=\sum_{M'}\Psi_{IM'}(g(\alpha,\beta,\gamma),S)\mathcal{D}^{I}_{M'M}(\alpha,\beta,\gamma)\,, \tag{107}$$

这里的 $\Psi_{IM'}(0,S)$ 描写与转动无关的“内部”性质. 借助 $\mathcal{D}$ 矩阵的幺正性得出

$$\Psi_{IM}(g(\alpha,\beta,\gamma),S)=\sum_{K}\mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma)\Psi_{IK}(0,S)\,. \tag{108}$$

由此可见, $\mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma)$ 就是具有确定角动量 IM 的转动态的波函数. 关于 K , 下面即将指出, 它是 $\boldsymbol{e}_3\cdot\boldsymbol{I}$ 的量子数, 这个量涉及系统的内部性质, 一般不是守恒量.

下面特别讨论一下 $\boldsymbol{I}$ 沿三个本体坐标轴 $\boldsymbol{e}_k$ 的投影 Q_k:

$$Q_k \equiv \boldsymbol{e}_k \cdot \boldsymbol{I} = e_{kx} I_x + e_{ky} I_y + e_{kz} I_z \ . \tag{109}$$

由于 α, β, γ 是力学变数，这些算符已不是普通的角动量算符. 不过，仍可借助 I_x, I_y, I_z 来研究它们. 根据前面的讨论可知

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{I}} \mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_{M'} \mathcal{D}^{I^*}_{M'K}(\alpha,\beta,\gamma) \mathcal{D}^{I}_{M'M}(\boldsymbol{n},\theta) \ , \tag{110}$$

$$I_n \mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_{M'} \mathcal{D}^{I^*}_{M'K}(\alpha,\beta,\gamma) \langle \eta I M' | J_n | \eta I M \rangle \ , \tag{111}$$

其中第二式右边的因子是已知的，现在随意地借用一组基矢 $|\eta I M\rangle$ 及相应的角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 来表达. 分别取 $\boldsymbol{n}$ 为 X, Y, Z 轴的方向，结合 (109) 式，可从 (111) 得

$$Q_k \mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_{M'} \mathcal{D}^{I^*}_{M'K}(\alpha,\beta,\gamma) \langle \eta I M' | \{ g(\alpha,\beta,\gamma) \boldsymbol{i}_k \} \cdot \boldsymbol{J} | \eta I M \rangle \ .$$

这可改写为

$$Q_k \mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_{K'} \mathcal{D}^{I^*}_{MK'}(\alpha,\beta,\gamma) \langle \eta I K | J_k | \eta I K' \rangle \ , \tag{112}$$

其中

$$J_k = \boldsymbol{i}_k \cdot \boldsymbol{J} \ .$$

利用 (111) 及 (112) 式可以证明

$$[I_n, \ Q_k] = 0 \ , \tag{113}$$

即是说由于 α, β, γ 是力学变量，Q_k 是转动不变的算符. 由 (112) 式还可证明

$$[Q_1, Q_2] = -\mathrm{i} Q_3 \ , \quad [Q_2, Q_3] = -\mathrm{i} Q_1 \ , \quad [Q_3, Q_1] = -\mathrm{i} Q_2 \ , \tag{114}$$

$$Q_3 \mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma) = K \mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma) \ , \tag{115}$$

$$Q_{\mp}\mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathcal{D}^{I^*}_{MK\pm1}(\alpha,\beta,\gamma)\sqrt{(I\mp K)(I\pm K+1)}\,, \quad (116)$$

其中

$$Q_{\pm}=Q_1\pm \mathrm{i}Q_2\,. \quad (117)$$

我们看到，$\mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma)$ 中的 K 是 Q_3 的量子数，Q_1, Q_2, Q_3 之间的对易关系与角动量投影之间的对易关系有点相似，但有重要差别. 还看到，Q_+ 的作用不是使 K 值上升 1，而是下降 1，反之，Q_- 则使 K 值上升 1，不过我们可以借助如下的简单变换把对易关系改造成角动量算符的对易关系，令

$$P_1=Q_1,\quad P_2=-Q_2,\quad P_3=Q_3\,, \quad (118)$$

$$P_{\pm}\equiv P_1\pm \mathrm{i}P_2\,, \quad (119)$$

于是 (113)—(116) 式就给出

$$[I_n,\ P_k]=0\,, \quad (120)$$

$$[P_1,\ P_2]=\mathrm{i}P_3\,,\quad [P_2,\ P_3]=\mathrm{i}P_1\,,\quad [P_3,\ P_1]=\mathrm{i}P_2\,, \quad (121)$$

$$P_3\mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma)=K\mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma)\,, \quad (122)$$

$$P_{\mp}\mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathcal{D}^{I^*}_{MK\pm1}(\alpha,\beta,\gamma)\sqrt{(I\mp K)(I\pm K+1)}\,. \quad (123)$$

所以，P_1, P_2, P_3 是一个转动群的无穷小算子，(122) 及 (123) 式还表明，$\mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma)$ 是 P^2 及 P_3 的本征态，量子数为 I,K，而 $P^2=P_1^2+P_2^2+P_3^2$. 这又说明 P^2 与 I^2 相同. 这些结果可概括为变换式

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}}\mathcal{D}^{I^*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma)=\sum_{K'}\mathcal{D}^{I^*}_{MK'}(\alpha,\beta,\gamma)\mathcal{D}^{I}_{K'K}(\boldsymbol{n},\theta)\,, \quad (124)$$

其中

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}\equiv n_xP_1+n_yP_2+n_zP_3\,. \quad (125)$$

让我们小结一下. 作为转动波函数的 $\mathcal{D}^{I*}_{MK}(\alpha,\beta,\gamma)$ 是 $\boldsymbol{I}^2(=Q^2)$, I_z 及 Q_3 的共同本征函数, 量子数分别为 I,M,K, 在空间转动下按 (110) 式变换, 在 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}}$ 作用下按 (124) 式变换.

最后, 我们来求出微分算子 I_x, I_y, I_z 及 Q_1, Q_2, Q_3 的明显形式, 按下式定义 $\alpha'',\beta'',\gamma''$:

$$g(\alpha'',\beta'',\gamma'')=g(\boldsymbol{n},-\theta)g(\alpha,\beta,\gamma)\ , \tag{126}$$

固定 $\boldsymbol{n}$ 及 α,β,γ, 在 (104) 式两边对 θ 微商, 再令 $\theta\to 0$, 得

$$-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{I}=\left(\frac{\partial\alpha''}{\partial\theta}\right)_0\frac{\partial}{\partial\alpha}+\left(\frac{\partial\beta''}{\partial\theta}\right)_0\frac{\partial}{\partial\beta}+\left(\frac{\partial\gamma''}{\partial\theta}\right)_0\frac{\partial}{\partial\gamma}\ . \tag{127}$$

类似地, 对 (126) 式两边求微商有

$$\begin{aligned}\left[\frac{\partial g(\boldsymbol{n},-\theta)}{\partial\theta}\right]_0 g(\alpha,\beta,\gamma)&=\left(\frac{\partial\alpha''}{\partial\theta}\right)_0\frac{\partial}{\partial\alpha}g(\alpha,\beta,\gamma)\\&+\left(\frac{\partial\beta''}{\partial\theta}\right)_0\frac{\partial}{\partial\beta}g(\alpha,\beta,\gamma)+\left(\frac{\partial\gamma''}{\partial\theta}\right)_0\frac{\partial}{\partial\gamma}g(\alpha,\beta,\gamma)\ .\end{aligned} \tag{128}$$

由此可对任何 $\boldsymbol{n}$ 求出各个系数 $\left(\frac{\partial\alpha''}{\partial\theta}\right)_0$, $\left(\frac{\partial\beta''}{\partial\theta}\right)_0$, $\left(\frac{\partial\gamma''}{\partial\theta}\right)_0$. 下表列出 $\boldsymbol{n}$ 沿三个坐标轴时的系数, 把这些系数代到 (127) 式可求出 I_x, I_y, I_z. 再利用 (109) 式即可求出 Q_1, Q_2, Q_3.

$\boldsymbol{n}$	$\left(\frac{\partial\alpha''}{\partial\theta}\right)_0$	$\left(\frac{\partial\beta''}{\partial\theta}\right)_0$	$\left(\frac{\partial\gamma''}{\partial\theta}\right)_0$
$\boldsymbol{i}_1$	$\cos\alpha\ \cot\beta$	$\sin\alpha$	$-\frac{\cos\alpha}{\sin\beta}$
$\boldsymbol{i}_2$	$\sin\alpha\ \cot\beta$	$-\cos\beta$	$-\frac{\sin\alpha}{\sin\beta}$
$\boldsymbol{i}_3$	-1	0	0

$$L_x=-\mathrm{i}\left\{-\cos\alpha\,\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}-\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\cos\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right\}\ , \tag{129}$$

$$L_y=-\mathrm{i}\left\{-\sin\alpha\,\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}+\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right\}\ , \tag{130}$$

$$L_z = -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\alpha}\,, \tag{131}$$

$$Q_1 = -\mathrm{i}\left\{-\frac{\cos\gamma}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha} + \sin\gamma\frac{\partial}{\partial\beta} + \cot\beta\cos\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\right\}, \tag{132}$$

$$Q_2 = -\mathrm{i}\left\{\frac{\sin\gamma}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha} + \cos\gamma\frac{\partial}{\partial\beta} - \cot\beta\sin\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\right\}, \tag{133}$$

$$Q_3 = -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\gamma}\,. \tag{134}$$

§4 三个角动量的耦合. Racach 系数

这小节简略地讲述一下三个角动量耦合的问题. 设 $\boldsymbol{J}_1, \boldsymbol{J}_2$ 及 $\boldsymbol{J}_3$ 是两两对易的角动量算符, 属于三类不相关的自由度. 以 $\boldsymbol{J}$ 代表它们的和

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2 + \boldsymbol{J}_3\,. \tag{135}$$

与前面一样, 设 $\{\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\}$ 是 $\boldsymbol{J}_1^2 J_{1z}$ 的 $(2j_1+1)$ 个本征矢量, j_1m_1 为相应的量子数, 它们之间满足关系式 (16), 即

$$J_{1\pm}\Phi^{(1)}_{j_1m_1} = \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)}\,\Phi^{(1)}_{j_1m_1\pm1}\,. \tag{136}$$

同样, 设 $\{\Phi^{(2)}_{j_2m_2}\}$ 及 $\{\Phi^{(3)}_{j_3m_3}\}$ 代表类似的矢量. 以

$$\{\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}\Phi^{(3)}_{j_3m_3}\}$$

为基矢张成一个 $(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)$ 维空间, 我们要构成这个空间的新基矢, 使之是 $\boldsymbol{J}^2 J_z$ 的本征矢量. 显然, 直接用两个角动量耦合的方法就可以解决这个问题. 这里要注意, 把三个角动量耦合问题化成两个角动量耦合问题的方式有三种.

(1) 可按 $\boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2 = \boldsymbol{J}_{12}$, $\boldsymbol{J}_{12} + \boldsymbol{J}_3 = \boldsymbol{J}$ 的方式进行. 即是说, 先由 $\{\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}\}$ 组成 $\{\Phi^{(12)}_{j_1j_2J_{12}M_{12}}\}$, 然后由 $\{\Phi^{(12)}_{j_1j_2J_{12}M_{12}}\}$

与 $\{\Phi^{(3)}_{j_3m_3}\}$ 组成 $\{\Phi^{(12)3}_{j_1j_2(J_{12})j_3JM}\}$，其中

$$\Phi^{(12)}_{j_1j_2J_{12}M_{12}}=\sum_{m_1m_2}\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(2)}_{j_2m_2}\langle j_1j_2J_{12}M_{12}|m_1m_2\rangle\,, \tag{137}$$

$$\Phi^{(12)3}_{j_1j_2(J_{12})j_3JM}=\sum_{M_{12}m_3}\Phi^{(12)}_{j_1j_2J_{12}M_{12}}\Phi^{(3)}_{j_3m_3}\langle J_{12}j_3JM|M_{12}m_3\rangle\,. \tag{138}$$

在 (138) 式右边，我们把 J_{12} 放在圆括号内，表示它由其前面的 j_1,j_2 耦合出来再与 j_3 耦合. 此式表示出所需要的新基矢，它是 $\boldsymbol{J}_1^2,\boldsymbol{J}_2^2,\boldsymbol{J}_3^2,\boldsymbol{J}_{12}^2$ 及 $\boldsymbol{J}^2J_z$ 的共同本征矢量. 在一定的 $j_1j_2J_{12}j_3J$ 下的 $(2J+1)$ 个基矢满足 (16) 式. 在固定的 j_1j_2 下，$J_{12}=j_1+j_2,\ j_1+j_2-1,\ \cdots,\ |j_1-j_2|$, 在固定的 J_{12} 及 j_3 下，$J=J_{12}+j_3,\ J_{12}+j_3-1,\ \cdots,\ |J_{12}-j_3|$. 容易证明，在固定的 j_1j_2 及 j_3 下，由 (138) 式得到的矢量，刚好是 $(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)$ 个.

(2) 也可按 $\boldsymbol{J}_2+\boldsymbol{J}_3=\boldsymbol{J}_{23},\ \boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_{23}=\boldsymbol{J}$ 的方式进行耦合，由此组成的新基矢为

$$\Phi^{1(23)}_{j_1,j_2j_3(J_{23})JM}=\sum_{m_1M_{23}}\langle j_1J_{23}JM|m_1M_{23}\rangle\Phi^{(1)}_{j_1m_1}\Phi^{(23)}_{j_2j_3J_{23}M_{23}}\,, \tag{139}$$

其中

$$\Phi^{(23)}_{j_2j_3J_{23}M_{23}}=\sum_{m_2m_3}\langle j_2j_3J_{23}M_{23}|m_2m_3\rangle\Phi^{(2)}_{j_2m_2}\Phi^{(3)}_{j_3m_3}\,. \tag{140}$$

由 (139) 式也得到 $(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)$ 个基矢，它们是 $\boldsymbol{J}_1^2,\boldsymbol{J}_2^2,\boldsymbol{J}_3^2,\boldsymbol{J}_{23}^2$ 及 $\boldsymbol{J}^2,J_z$ 的共同本征矢量，满足 (16) 式.

(3) 又可按 $\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_3=\boldsymbol{J}_{13},\ \boldsymbol{J}_{13}+\boldsymbol{J}_2=\boldsymbol{J}$ 的方式进行耦合，这与上面的情形类似.

这样，无论按哪一种方式进行，都可直接利用 Clebsch-Gordan 系数来完成. 剩下的问题是要研究不同耦合方式的基矢之间的变换. 不同的耦合方式的基矢之间的变换矩阵是幺正的，也是实的，因为每种耦合基矢与旧基矢之间的变换矩阵都是如此. 对于上述第一和第二种方式有

$$\Phi^{1(23)}_{j_1,j_2j_3(J_{23})JM}$$

$$= \sum_{J_{12}} \Phi^{(12)3}_{j_1j_2(J_{12})j_3JM} \langle j_1j_2(J_{12})j_3J|j_1,j_2j_3(J_{23})J\rangle \ , \tag{141}$$

$$\Phi^{(12)3}_{j_1j_2(J_{12})j_3JM}$$

$$= \sum_{J_{23}} \Phi^{1(23)}_{j_1,j_2j_3(J_{23})JM} \langle j_1,j_2j_3(J_{23})J|j_1j_2(J_{12})j_3J\rangle \ . \tag{142}$$

在变换系数中没有写上 M, 因为两类基矢都满足 (16) 式, 变换系数与 M 无关. 由于这些系数是实数, 故 $\langle j_1j_2(J_{12})j_3J|j_1,j_2j_3(J_{23})J\rangle$ 等于 $\langle j_1,j_2j_3(J_{23})J|j_1j_2(J_{12})j_3J\rangle$. Racah 引入一种所谓 W 系数, 被称为 Racah 系数, 其定义为

$$\langle j_1j_2(J_{12}),j_3J|j_1,j_2j_3(J_{23})J\rangle$$

$$= \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}W(j_1j_2JJ_3;J_{12}J_{23}) \ . \tag{143}$$

更方便的记号是 Wigner 的 “ $6j$ ” 符号, 其定义为

$$\langle j_1j_2(J_{12}),j_3J|j_1,j_2j_3(J_{23})J\rangle$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j_3+J}\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}$$

$$\times \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{Bmatrix} . \tag{144}$$

即

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{Bmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3+J}W(j_1j_2Jj_3;J_{12}J_{23}) \ . \tag{145}$$

由定义 (141) 可得出 Racah 系数通过 Clebsch-Gordan 系数的表达式

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{Bmatrix}$$

$$= \frac{(-1)^{j_1+j_2+j_3+J}}{\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}} \sum_{m_1m_2m_3} \sum_{M_{12}M_{23}} \langle j_1 j_2 J_{12} M_{12} | m_1 m_2 \rangle$$

$$\times \langle J_{12} j_3 J M | M_{12} m_3 \rangle \langle j_2 j_3 J_{23} M_{23} | m_2 m_3 \rangle \langle j_1 J_{23} J M | m_1 M_{23} \rangle \,. \quad (146)$$

在这个表达式中，涉及了对各个角动量投影及 Clebsch-Gordan 系数的求和，而 Racah 系数本身是不依赖于任何一个投影的. 在实际问题中计算的许多量都只与所涉及的角动量的大小有关，而与角动量投影无关，或者能够把依赖于投影的因子简单地分离出来，结果常常遇到 Racah 系数以及由之构成的另一些系数，因此应当直接研究这些系数，而不应总是还原为 Clebsch-Gordan 系数.

下面把 Racah 系数的若干重要性质列举出来.

(1) 非零必要条件

由 (144) 或 (146) 式可以看出，必须满足四种三角形条件. 和 §2 一样，我们用 $\delta(j_1 j_2 J_{12}) = 1$ 或 0 来表示 (j_1, j_2, J_{12}) 满足或不满足角动量耦合的三角形条件，于是

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{Bmatrix} = \delta(j_1 j_2 J_{12}) \delta(J_{12} j_3 J) \delta(j_2 j_3 J_{23}) \delta(j_1 j_{23} J)$$

$$\times \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{Bmatrix}. \quad (147)$$

(2) 正交性

由变换矩阵 $\langle j_1 j_2 (J_{12}), j_3 J | j_1, j_2 j_3 (J_{23}) J \rangle$ 的实正交性质有

$$\sum_j (2j+1)(2j''+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j'' \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix} = \delta_{j'j''} \,. \quad (148)$$

(3) 对称性 (由 (146) 及 Clebsch-Gordan 系数的对称性得出)

(i) 在 {|||} 的三列之间的任何对换都不改变 $6j$ 符号的数值.

即

$$\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} j_2 & j_1 & j_3 \\ j_5 & j_4 & j_6 \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_3 & j_2 \\ j_4 & j_6 & j_5 \end{array}\right\}$$

$$= \left\{\begin{array}{ccc} j_3 & j_2 & j_1 \\ j_6 & j_5 & j_4 \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} j_2 & j_3 & j_1 \\ j_5 & j_6 & j_4 \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} j_3 & j_1 & j_2 \\ j_6 & j_4 & j_5 \end{array}\right\}. \tag{149}$$

(ii) 对换其中两列的上下位置，不影响 $6j$ 符号的值，如：

$$\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_5 & j_6 \\ j_4 & j_2 & j_3 \end{array}\right\}. \tag{150}$$

(4) Racah 系数与 Clebsch-Gordan 系数的关系的其他形式

(i) $\langle j_1 j_2 J_{12}, m_1+m_2 | m_1 m_2\rangle \langle J_{12} j_3 JM | m_1+m_2, M-m_1-m_2\rangle$

$$= \sum_{J_{23}} (-1)^{j_1+j_2+j_3+J} \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}$$

$$\times \left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{array}\right\} \langle j_1 J_{23} JM | m_1, M-m_1\rangle$$

$$\times \langle j_2 j_3 J_{23} M-m_1 | m_2, M-m_1-m_2\rangle . \tag{151}$$

(ii) $(-1)^{j_1+j_2+j_3+J} \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}$

$$\times \left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{array}\right\} \langle j_1 J_{23} JM | m_1, M-m_1\rangle$$

$$= \sum_{m_2} \langle j_1 j_2 J_{12} m_1+m_2 | m_1, m_2\rangle$$

$$\times \langle J_{12} j_3 JM | m_1+m_2, M-m_1-m_2\rangle$$

$$\times \langle j_2 j_3 J_{23} M-m_1 | m_2, M-m_1-m_2\rangle . \tag{152}$$

(5) 求和规则

(i) 由

$$\langle j_1 j_2 (J_{12}) j_3 J | j_2, j_3 j_1 (J_{31}) J \rangle$$

$$= \sum_{J_{23}} \langle j_1 j_2 J_{12} j_3 J | j_1, j_2 j_3 (J_{23}) J \rangle$$

$$\times \langle j_1, j_2 j_3 (J_{23}) J | j_2, j_3 j_1 (J_{31}) J \rangle ,$$

得出

$$\sum_{J_{23}} (-1)^{J_{23}+J_{31}+J_{12}} (2J_{23}+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{Bmatrix}$$

$$\times \begin{Bmatrix} j_2 & j_3 & J_{23} \\ j_1 & J & J_{31} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_3 & j_1 & J_{31} \\ j_2 & J & J_{12} \end{Bmatrix} . \tag{153}$$

(ii) 对四个角动量耦合的变换系数作类似的考虑有

$$\sum_{J_{124}} (-1)^{j_1+j_2+j_{12}+j_3+j_{23}+j_4+j_{14}+j_{123}+J+J_{124}}$$

$$\times (2J_{124}+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ J_{124} & j_4 & j_{14} \end{Bmatrix}$$

$$\times \begin{Bmatrix} j_2 & j_3 & j_{23} \\ J & j_{14} & J_{124} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_{12} & j_3 & j_{123} \\ J & j_4 & J_{124} \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_{123} & j_{23} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_{23} & j_1 & j_{123} \\ j_4 & J & j_{14} \end{Bmatrix} . \tag{154}$$

当 $6j$ 系数的 6 个角动量中有一个为零时，有如下的结果

$$\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & 0 \\ j_3 & J & J_{23} \end{array}\right\} = \delta_{j_1 j_2}\delta_{j_3 J}\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_1 & 0 \\ J & J & J_{23} \end{array}\right\}$$

$$= \frac{(-1)^{J_{23}+j_2+j_3}}{\sqrt{(2j_2+1)(2j_3+1)}}\delta_{j_1 j_2}\delta_{j_3 J}\,. \tag{155}$$

Racah 曾在 1942 年从 (146) 式及 Clebsch-Gordan 系数的表达式出发推导出 Racah 系数的明显表达式， Schwinger 又在 1952 年用另外的方法推导过. 结果为

$$\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{array}\right\} = \sum_k \frac{(-1)^k (k+1)!}{(k-j_1-j_2-j_3)!(k-j_1-l_2-l_3)!}$$

$$\times \frac{1}{(k-l_1-j_2-l_3)!(k-l_1-l_2-j_3)!(j_1+j_2+l_1+l_2-k)!}$$

$$\times \frac{\Delta(j_1 j_2 j_3)\Delta(j_1 l_2 l_3)\Delta(l_1 j_2 l_3)\Delta(l_1 l_2 j_3)}{(j_2+j_3+l_2+l_3-k)!(j_3+j_1+l_3+l_1-k)!}\,, \tag{156}$$

其中

$$\Delta(abc) = \sqrt{\frac{(a+b-c)!(a-b+c)!(-a+b+c)!}{(a+b+c+1)!}}\,. \tag{157}$$

在一些文献和书籍中，可以查到 Racah 系数数值表和适用于特殊场合的表达式.

§5 不可约张量

角动量的投影密切地联系着空间取向，所以算符在角动量表象中的矩阵元对于角动量投影的依赖关系具有几何特性，可根据算符的转动性质来确定. Racah 已建立了处理这个问题的系统方

法. 角动量表象十分常用，而且许多重要的物理量本来不依赖于角动量投影，或者依赖关系比较简单，所以 Racah 方法是很有用的. 本节讲述这种方法的基础.

定义：设有 $(2k+1)$ 个算符 $\{T(kq)\}, q=-k,\cdots,k$，如果在空间转动下按照 $\mathcal{D}^k$ 矩阵变换，即

$$D(g)T(kq)D(g)^\dagger=\sum_{q'}T(kq')\mathcal{D}^k_{q'q}(g)\,, \tag{158}$$

则说这组算符构成转动群的 k 秩不可约张量. $T(kq)$ 为张量的 q 分量. 显然，以坐标算符为宗量的 l 阶立体球函数构成 l 秩不可约张量，因为

$$\begin{aligned}D(g)\mathcal{Y}_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})D(g)^\dagger&=\mathcal{Y}_{lm}(g^{-1}\hat{\boldsymbol{r}})\\&=\sum_{m'}\mathcal{Y}_{lm'}(\hat{\boldsymbol{r}})\mathcal{D}^l_{m'm}(g)\,.\end{aligned} \tag{159}$$

当 $l=1$ 时，得到由坐标算符构成的 1 秩不可约张量 $\{r(1m)\}, m=1,0,-1$. $r(1m)$ 与 $\mathcal{Y}_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})$ 有一常系数的差别，表达式为

$$r(1\pm1)=\mp\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}\pm\mathrm{i}\hat{y})\,,\quad r(10)=\hat{z}\,, \tag{160}$$

一般地，如果算符 A_x, A_y, A_z 构成笛卡儿矢量，则有相应的 1 秩不可约张量

$$A(1\pm1)=\mp\frac{1}{\sqrt{2}}(A_x\pm\mathrm{i}A_y)\,,\quad A(10)=A_z\,. \tag{161}$$

任何一个量子力学算符 f 都可看作由不可约张量算符的分量组合而成. 取一组完备的态矢量 $|\eta jm\rangle$(假设已正交归一)，则

$$f=\sum_{\eta'j'm'}\sum_{\eta jm}\langle\eta'j'm'|f|\eta jm\rangle|\eta'j'm'\rangle\langle\eta jm|\,. \tag{162}$$

而基本算符 $|\eta' j' m'\rangle\langle \eta j m|$ 的变换式为

$$D(g)|\eta' j' m'\rangle\langle \eta j m|D(g)^{\dagger} = \sum_{m_1' m_1} |\eta' j' m_1'\rangle\langle \eta j m_1| \mathcal{D}^{j'}_{m_1' m'}(g)\mathcal{D}^{j*}_{m_1 m}(g)\,,$$

即

$$\begin{aligned} D(g)|\eta' j' m'\rangle\langle \eta j m|D(g)^{\dagger} &= \sum_{m_1' m_1} |\eta' j' m_1'\rangle\langle \eta j m_1| \\ &\times \mathcal{D}^{j'}_{m_1' m'}(g)\mathcal{D}^{j}_{-m_1 -m}(g)(-1)^{m_1 - m}\,. \end{aligned} \tag{163}$$

由此可见，利用 Clebsch-Gordan 系数可组合出 J 秩不可约张量

$$u^{\eta'\eta}(j' j J M) = \sum_{m' m} |\eta' j' m'\rangle\langle \eta j m|(-1)^{j-m}\langle j' j J M|m' - m\rangle\,. \tag{164}$$

逆过来得

$$|\eta' j' m'\rangle\langle \eta j m| = \sum_{JM} u^{\eta'\eta}(j' j J M)(-1)^{j-m}\langle j' j J M|m' - m\rangle\,. \tag{165}$$

这就完成了证明．在这里，我们遇到了 Clebsch-Gordan 系数的另一类基本应用，即经由 (164) 式构成不可约张量以及经由 (165) 式把 $|\eta' j' m'\rangle\langle \eta j m|$ 按不可约张量来分解．

定义不可约张量的 (158) 式可以表达为另一种形式．对转动角 θ 微分，再令它趋于零，则有

$$[J_n,\ T(kq)] = \sum_{q'} T(kq')\langle \alpha k q'|I_n|\alpha k q\rangle\,. \tag{158'}$$

这里 $|\alpha kq\rangle$ 及 $\boldsymbol{I}$ 是随意借用的角动量基矢及相应的角动量算符. 和以前一样，令 $J_{\pm} = J_x \pm \mathrm{i}J_y$, 有

$$[J_{\pm},\ T(kq)] = T(kq \pm 1)\sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)}\ , \tag{166}$$

以及

$$[J_z,\ T(kq)] = qT(kq)\ . \tag{167}$$

Racah 原来就是用 (166) 及 (167) 式 (相当于 (158′) 式) 来定义不可约张量算符的. 要证明这两种定义方法的等价性，只需从 (158′) 推出 (158) 式. 令

$$T'(kq) = D(g)T(kq)D(g)^{\dagger}\ ,$$

于是

$$\frac{\partial}{\partial\theta}T'(kq) = D(g)[-\mathrm{i}J_n,\ T(kq)]\,D(g)^{\dagger}\ ,$$

利用 (158′) 式可把右边化为

$$\sum_{q'} T'(kq')\langle\alpha kq'| - \mathrm{i}I_n|\alpha kq\rangle\ .$$

重复下去，可得出

$$\left[\frac{\partial^m T'(kq)}{\partial\theta^m}\right]_{\theta=0} = \sum_{q'} T(kq')\langle\alpha kq'|(-\mathrm{i}I_n)^m|\alpha kq\rangle\ .$$

可见

$$T'(kq) = \sum_{q'} T(kq')\langle\alpha kq'|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}I_n\theta}|\alpha kq\rangle = \sum_{q'} T(kq')\mathcal{D}^{k}_{q'q}(g)\ .$$

现在看看不可约张量算符对被作用的态矢量的角动量的影响. 把 $T(kq)$ 作用于角动量为 0 的态 $|\eta 00\rangle$, 如果结果不为 0, 那么就得出角动量为 k 投影为 q 的态. 可见 $T(kq)$ 把一个“长度”为 k

投影为 q 的角动量传递给被它作用的态. 对于 $|\eta jm\rangle$, 由 (167) 式看出

$$J_z T(kq)|\eta jm\rangle = (m+q)T(kq)|\eta jm\rangle \ . \tag{168}$$

根据 (158) 式有

$$\begin{aligned} D(g)T(kq)|\eta jm\rangle &= \sum_{q'} T(kq')\mathcal{D}^k_{q'q}(g)D(g)|\eta jm\rangle \\ &= \sum_{q'm'} T(kq')|\eta jm'\rangle \mathcal{D}^k_{q'q}(g)\mathcal{D}^j_{m'm}(g) \ . \end{aligned} \tag{169}$$

由此并注意 $\mathcal{D}$ 矩阵的直积的分解规则可知，在 $T(kq)|\eta jm\rangle$ 中有可能发现的 J^2 的量子数 j' 的取值范围，由 (kjj') 的三角形条件以及 $j' \geq |m+q|$ 的条件决定. 用 Clebsch-Gordan 系数进行组合，可构成具有一定 $j'm'$ 的态矢量

$$(T\eta)j'm'\rangle = \sum_{qm} T(kq)|\eta jm\rangle\langle kjj'm'|kqjm\rangle \ . \tag{170}$$

对于 $|(T\eta)j'm'\rangle \neq 0$ 的每个 j', 由 $m' = -j', \cdots, j'$ 给出 $2j'+1$ 个非零态矢量，它们满足关系式 (16)

$$J_\pm|(T\eta)j'm'\rangle = |(T\eta)j'm' \pm 1\rangle\sqrt{(j' \mp m')(j' \pm m' + 1)} \ . \tag{171}$$

把 (170) 式逆过来有

$$T(kq)|\eta jm\rangle = \sum_{j'm'} |(T\eta)j'm'\rangle\langle kqjm|j'm'\rangle \ . \tag{172}$$

这里我们又遇到了 Clebsch-Gordan 系数的一类新的基本应用，即经由 (170) 式把 $T(kq)|\eta jm\rangle$ 组合成角动量的本征态以及经由 (172) 式而把 $T(kq)|\eta jm\rangle$ 按角动量的的本征态分解.

借助 (172) 式，可把 $T(kq)$ 的矩阵元表示为

$$\langle\eta' j'm'|T(kq)|\eta jm\rangle = \langle\eta' j'm'|(T\eta)j'm'\rangle\langle kqjm|j'm'\rangle \ .$$

由于 $|\eta' j' m'\rangle$ 及 $|(T\eta)j'm'\rangle$ 都满足 (16) 式 (也即 (171) 式)，所以 $\langle\eta' j' m'|(T\eta)j'm'\rangle$ 与 m' 无关，因此上式可写成

$$\langle\eta' j' m'|T(kq)|\eta jm\rangle = \frac{(\eta' j'||T(k)||\eta j)}{\sqrt{2j'+1}}\langle jmkq|j'm'\rangle\,. \tag{173}$$

这样引进的因子 $(\eta' j'||T(k)||\eta j)$ 称为不可约张量 $T(kq)$ 在 ηjm 表象的约化矩阵元. 这个公式称为 Wigner-Eckart 定理，它把 $T(kq)$ 的矩阵元对于 $m'qm$ 的依赖关系分离出来，由一个 Clebsch-Gordan 系数描写. 按照这个结果，我们只要对一定的 $(m'qm)$ 值求出一个非零矩阵元，就知道了一切 $(m'qm)$ 值下的非零矩阵元. 这里说明一下，关于约化矩阵元 $(\eta' j'||T(k)||\eta j)$，我们采用了 Bohr-Mottelson(1969) 的定义，这可以使 (173) 式便于记忆. Racah 原来定义的约化矩阵元与这里的定义相差一个相因子 $(-1)^{2k}$. 在本章末所引的 Edmonds(1957) 的书中，用的是 Racah 的定义.

按照 (173) 式，矩阵元 $\langle\eta' j' m'|T(kq)|\eta jm\rangle$ 的角动量选择定则 (三角形条件及投影条件) 已包含在 Clebsch-Gordan 系数中. 当然满足选择定则的某些 j' 值也可能并不出现. 特别是，总角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 永远不能改变量子数 j，因此由它组成的任何不可约张量都是如此 (这种张量作用于角动量为 0 的态时，结果总是零).

现在讨论把两类不可约张量的积分解为不可约张量的问题. 设 $\{T(k_1q_1)\}$ 及 $\{U(k_2q_2)\}$ 分别代表 k_1 及 k_2 秩不可约张量. 它们的积给出 $(2k_1+1)(2k_2+1)$ 个算符 $\{T(k_1q_1)U(k_2q_2)\}$. 在空间转动下，这组算符显然是按 $\mathcal{D}^{k_1}$ 与 $\mathcal{D}^{k_2}$ 的直积变换的，借助 Clebsch-Gordan 系数进行组合，就可以把它按照不可约张量来分解. 由

$$\begin{aligned} &D(g)T(k_1q_1)U(k_2q_2)D(g)^\dagger \\ &\quad = D(g)T(k_1q_1)D(g)^\dagger D(g)U(k_2q_2)D(g)^\dagger \\ &\quad = \sum_{q_1'q_2'} T(k_1q_1')U(k_2q_2')\mathcal{D}^{k_1}_{q_1'q_1}(g)\mathcal{D}^{k_2}_{q_2'q_2}(g)\,, \end{aligned}$$

可知对于满足三角形条件 $\delta(k_1k_2k)=1$ 的每个 k 值，都可按照下

式组成 k 秩不可约张量

$$[T(k_1)\times U(k_2)]^k_q=\sum_{q_1q_2}T(k_1q_1)U(k_2q_2)\langle k_1q_1k_2q_2|kq\rangle\,,\quad(174)$$

它们满足

$$D(g)[T(k_1)\times U(k_2)]^k_qD(g)^\dagger=\sum_{q'}[T(k_1)\times U(k_2)]^k_{q'}\mathcal{D}^k_{q'q}(g)\,.$$

把 (174) 式逆过来有

$$T(k_1q_1)U(k_2q_2)=\sum_{kq}[T(k_1)\times U(k_2)]^k_q\langle k_1q_1k_2q_2|kq\rangle\,.\qquad(175)$$

在这里，我们又遇到了 Clebsch-Gordan 系数的一类新的基本应用，即经由 (174) 式把 $T(k_1q_1)U(k_2q_2)$ 组成各种积张量，以及经由 (175) 式把 $T(k_1q_1)U(k_2q_2)$ 分解为不可约张量. 这与两个角动量耦合问题中旧基矢与新基矢之间的变换是完全相似的. 不过要注意，$[T(k_1)\times U(k_2)]^k_q$ 一般都与 $[U(k_2)\times T(k_1)]^k_q$ 有很大的差别，只当 $T(k_1)$ 与 $U(k_2)$ 对易时，两者才有简单的关系. 即

$$[T(k_1)\times U(k_2)]^k_q=(-1)^{k-k_1-k_2}[U(k_2)\times T(k_1)]^k_q\qquad(176)$$

$$(\text{当}[T(k_1q_1),\ U(k_2q_2)]=0)\,.$$

对于两个同秩不可约张量 $T(kq_1)$ 与 $U(kq_2)$，最低秩的积张量是零秩. 在 (174) 中代入 $\langle kq_1kq_2|00\rangle$ 的值，得出

$$[T(k)\times U(k)]^0_0=\frac{1}{\sqrt{2k+1}}\sum_q(-1)^{k-q}T(kq)U(k-q)\,,\qquad(177)$$

不用说它是转动不变的. 关于这种零秩张量，有若干种不同的记号，有的书上把 k 为整数时的 $\sum_q(-1)^qT(kq)U(k-q)$ 叫做 $T(k)$ 与 $U(k)$ 的标量积，又有的书上把 $\sum_q(-1)^qT(kq)U(k-q)$ 叫做内积，为简便起见可直接采用 (177) 式，而不再引用新的名称和记法.

现在举一个关于张量积的分解的简单例子. 设 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 是可对易矢量, 于是 $\{A_iB_j\}$ 构成一个笛卡儿张量, 要把它分解为不可约张量, 可先把 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 换成不可约张量 $\{A(1q_1)\}$ 及 $\{B(1q_2)\}$, 然后按上述方法处理. 由 (174) 式, 得出三类不可约张量

$$[A(1)\times B(1)]^2_q=\sum_{q_1q_2}A(1q_1)B(1q_2)\langle 1q_1 1q_2|2q\rangle\ , \tag{178a}$$

$$[A(1)\times B(1)]^1_q=\sum_{q_1q_2}A(1q_1)B(1q_2)\langle 1q_1 1q_2|1q\rangle\ , \tag{178b}$$

$$[A(1)\times B(1)]^0_0=\frac{-1}{\sqrt{3}}\sum_q(-1)^qA(1q)B(1-q)\ , \tag{178c}$$

其中 0 秩张量相当于 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}$, 即

$$[A(1)\times B(1)]^0_0=\frac{-1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}\ . \tag{179}$$

1 秩张量正比于 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$, 2 秩张量相当于 $\{A_iB_j\}$ 中的对称无迹部分. 如果在 (178a) 中令 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\hat{\boldsymbol{r}}$, 则结果正比于 $\mathcal{Y}_{2q}(\hat{\boldsymbol{r}})$.

下面写出 (174) 式的约化矩阵元. 根据 (173) 式, 并利用 Racah 系数与 Clebsch-Gordan 系数的关系可求得

$$\begin{aligned}(\eta'j'||[T(k_1)\times U(k_2)]^k||\eta j)&=(-1)^{k+j+j'}\sqrt{2k+1}\\&\times\sum_{\eta''j''}\begin{Bmatrix}k_1&k_2&k\\j&j'&j''\end{Bmatrix}(\eta'j'||T(k_1)||\eta''j'')(\eta''j''||U(k_2)||\eta j)\ .\end{aligned} \tag{180}$$

用于 (177) 式有

$$\begin{aligned}(\eta'j'||[T(k)\times U(k)]^0||\eta j)&=\delta_{j'j}\frac{1}{\sqrt{(2k+1)(2j+1)}}\\&\times\sum_{\eta''j''}(-1)^{k+j''-j}(\eta'j'||T(k)||\eta''j'')(\eta''j''||U(k)||\eta j)\ .\end{aligned} \tag{181}$$

在实际应用中，经常遇到 T 与 U 从属于两部分不同自由度的情形. 设 $T(k_1)$ 只作用于基矢 $|\eta_1 j_1 \eta_2 j_2 JM\rangle$ 中 $\eta_1 j_1$ 所属的自由度，$U(k_2)$ 只作用于另一部分自由度，则有如下的公式 (推导方法可参看本章末所引的 Edmonds 书第 110 页)

$$(\eta_1' j_1' \eta_2' j_2' J||[T(k_1)\times U(k_2)]^k||\eta_1 j_1 \eta_2 j_2 J)$$

$$=\sqrt{(2J'+1)(2J+1)(2k+1)}\begin{Bmatrix} j_1' & j_1 & k_1 \\ j_2' & j_2 & k_2 \\ J' & J & k \end{Bmatrix}$$

$$\times(\eta_1' j_1'||T(k_1)||\eta_1 j_1)(\eta_2' j_2'||U(k_2)||\eta_2 j_2)\,, \tag{182}$$

这里的 “ $9j$ ” 符号可由 Racah 系数表示. 即

$$\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix}=\sum_k(-1)^{2k}(2k+1)\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ j_{32} & j_{33} & k \end{Bmatrix}$$

$$\times\begin{Bmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ j_{21} & k & j_{23} \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ k & j_{11} & j_{12} \end{Bmatrix}. \tag{183}$$

它具有如下的对称性:

$$\begin{Bmatrix} a & b & e \\ c & d & e' \\ f & f' & g \end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} a & c & f \\ b & d & f' \\ e & e' & g \end{Bmatrix}$$

$$=(-1)^\sigma\begin{Bmatrix} c & d & e' \\ a & b & e \\ f & f' & g \end{Bmatrix}=(-1)^\sigma\begin{Bmatrix} f & f' & g \\ c & d & e' \\ a & b & e \end{Bmatrix}, \tag{184}$$

其中 $\sigma=a+b+c+d+e+e'+f+f'+g$. 当 9 个 j 中有一个为 0

时，$\{9j\}$ 简化为一个 $\{6j\}$. 这时下面的九种写法没有差别：

$$\left\{\begin{array}{ccc} a & b & e \\ c & d & e \\ f & f & 0 \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} 0 & e & e \\ f & d & b \\ f & c & a \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} e & 0 & e \\ c & f & a \\ d & f & b \end{array}\right\}$$

$$= \left\{\begin{array}{ccc} f & f & 0 \\ d & c & e \\ b & a & e \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} f & b & d \\ 0 & e & e \\ f & a & c \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} a & f & c \\ e & 0 & e \\ b & f & d \end{array}\right\}$$

$$= \left\{\begin{array}{ccc} b & a & e \\ f & f & 0 \\ d & c & e \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} e & d & c \\ e & b & a \\ 0 & f & f \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} c & e & d \\ a & e & b \\ f & 0 & f \end{array}\right\},$$

所以只需要写出一个公式：

$$\left\{\begin{array}{ccc} a & b & e \\ c & d & e \\ f & f & 0 \end{array}\right\} = \frac{(-1)^{b+c+e+f}}{\sqrt{(2e+1)(2f+1)}} \left\{\begin{array}{ccc} a & b & e \\ d & c & f \end{array}\right\}.$$

在 (182) 式中取 k 为零得

$$(\eta_1' j_1' \eta_2 j_2 J' || T(k) || \eta_1 j_1 \eta_2 j_2 J)$$

$$= \delta_{J'J}(-1)^{j_1+j_2'+J+k}\sqrt{\frac{2J+1}{2k+1}} \left\{\begin{array}{ccc} j_1' & j_2' & J \\ j_2 & j_1 & k \end{array}\right\}$$

$$\times (\eta_1' j_1' || T(k) || \eta_1 j_1)(\eta_2' j_2' || U(k) || \eta_2 j_2)\,. \tag{185}$$

把 (182) 式分别用于 $U \equiv 1$ 及 $T \equiv 1$ 的情形，则

$$(\eta_1' j_1' \eta_2 j_2 J' || T(k) || \eta_1 j_1 \eta_2 j_2 J)$$

$$= (-1)^{j_1'+j_2+J+k} \sqrt{(2J'+1)(2J+1)}$$

$$\times \left\{ \begin{array}{ccc} j_1' & J' & j_2 \\ J & j_1 & k \end{array} \right\} (\eta_1' j_1' || T(k) || \eta_1 j_1) \ , \tag{186}$$

$$(\eta_1 j_1 \eta_2' j_2' J' || U(k) || \eta_1 j_1 \eta_2 j_2 J)$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+J'+k} \sqrt{(2J'+1)(2J+1)}$$

$$\times \left\{ \begin{array}{ccc} j_2' & J' & j_1 \\ J & j_2 & k \end{array} \right\} (\eta_2' j_2' || U(k) || \eta_2 j_2) \ . \tag{187}$$

在原子物理和分子物理方面的工作中，常采用所谓等效算符方法，其依据就是算符的张量性质. 设我们要计算 1 秩张量 $A(1,q)$ 的 $j = j'$ 的矩阵元，由 Wigner-Eckart 定理有

$$\langle \eta' j m' | A(1q) | \eta j m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} (\eta' j || A(1) || \eta j) \langle j m 1 q | j m' \rangle \ ,$$

另一方面，对于由角动量 $\boldsymbol{J}$ 形成的 $J(1q)$，有

$$\langle \eta j m' | J(1q) | \eta j m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} (\eta j || J(1) || \eta j) \langle j m 1 q | j m' \rangle \ ,$$

故

$$\langle \eta' j m' | A(1q) | \eta j m \rangle = \frac{(\eta' j || A(1) || \eta j)}{(\eta j || J(1) || \eta j)} \langle \eta j m' | J(1q) | \eta j m \rangle \ .$$

由 (181) 式有

$$\langle \eta' j' m' || [J(1) \times A(1)]_0^0 | \eta j m \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} (\eta' j || [J(1) \times A(1)]^0 || \eta j)$$

$$= \frac{-1}{(2j+1)\sqrt{3}} (\eta' j || J(1) || \eta' j) (\eta' j || A(1) || \eta j) \ ,$$

这给出

$$(\eta j||J(1)||\eta j)^2 = -\sqrt{3}(2j+1)\langle \eta jm|[J(1)\times J(1)]^0_0|\eta jm\rangle$$
$$= (2j+1)(j(j+1))\ ,$$

$$\frac{(\eta' j||A(1)||\eta j)}{(\eta j||J(1)||\eta j)} = -\sqrt{3}\frac{\langle \eta' jm|[J(1)\times A(1)]^0_0|\eta jm\rangle}{j(j+1)}$$
$$= \frac{\langle \eta' jm|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}|\eta jm\rangle}{j(j+1)}\ ,$$

最后得到

$$\langle \eta' jm'|A(1q)|\eta jm\rangle = \frac{\langle \eta' jj|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}|\eta jj\rangle}{j(j+1)}\langle \eta jm'|J(1q)|\eta jm\rangle\ , \qquad (188)$$

或

$$\langle \eta' jm'|\boldsymbol{A}|\eta jm\rangle = \frac{\langle \eta' jj|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}|\eta jj\rangle}{j(j+1)}\langle \eta jm'|\boldsymbol{J}|\eta jm\rangle\ . \qquad (189)$$

即是说，在计算这类矩阵元时，可把算符 $\boldsymbol{A}$ 换成

$$\frac{\langle \eta' jj|\mathbf{J}\cdot\mathbf{A}|\eta jj\rangle}{j(j+1)}\boldsymbol{J}\ .$$

参 考 文 献

[1] Condon E U, Shortley G H. The Theory of Atomic Spectra. London: Cambridge University Press, 1957. Chapter 3, §1, §2, §3, §6, §8.

[2] Edmonds A R. Angular Momentum in Quantum Mechanics. Princeton NJ: Princeton University Press, 1960.

[3] Bohr A, Mottelson B R. Nuclear Structure. New York: W. A. Benjamin, INC. 1969. Vol.I, Appendix of Chapter 1.

第七章　形式散射理论

§1　散射问题的初值方法. 波算符

假定入射粒子流不太强而且靶物质的厚度充分小，因而可把散射过程看成是独立发生的两体碰撞过程，此外假定碰撞过程不导致粒子的内部激发. 我们一律采用质心坐标系进行讨论，设 μ 代表约化质量，V 是相互作用势，$\hat{\boldsymbol{p}}$ 是相对运动的动量算符，于是描述相对运动的薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t)=H\Psi(t), \tag{1}$$

其中

$$H=H_0+V, \tag{2}$$

$$H_0=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}. \tag{3}$$

所谓初值方法就是根据方程 (1) 和适当的初始条件来确定碰撞问题的解. 由于初始波包（碰撞之前）具有几乎确定的动量值，散射解几乎是 H 的精确本征态，因此又可以把问题归结为在适当边条件下求 H 的本征态. 这两类方法分别称为时间相关和时间无关方法，这里讲的是时间相关方法也即初值方法，由此确定了正确解之后当然也确定了时间无关方法的边条件.

现在说明如何引入适当的初始条件. 为了简便，假定 V 是短程势，即是说，当两个粒子尚未充分接近或碰撞后离开很远时，V 都等于零. 如果设想 V 本来不存在，则 $\Psi(t)$ 应该是具有很确

切的动量的自由运动的波包，其空间部分为

$$\phi_0(\boldsymbol{r},t)=\int C(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}_0,\Delta\boldsymbol{p}_0)\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E(p)t)/\hbar\}\mathrm{d}\boldsymbol{p}\,,\quad(4)$$

它满足

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_0(\boldsymbol{r},t)=H_0\phi_0(\boldsymbol{r},t)\,.\qquad(5)$$

在 (4) 式中，$E(p)=p^2/2\mu$，而 $p=|\boldsymbol{p}|$. $C(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}_0,\Delta\boldsymbol{p}_0)$ 只当 $\boldsymbol{p}$ 处在 $\boldsymbol{p}_0$ 附近一个很小范围 $\Delta\boldsymbol{p}_0$ 之内时才明显地不为零，并随 $\Delta\boldsymbol{p}_0\to 0$ 而趋于极限 $\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0)$，这时 (4) 就变为德布罗意波，由于 $\Delta\boldsymbol{p}_0$ 很小，在不引起含糊时总是可以令它趋于 0，因此波包的细节是无关重要的，这里只用到它的某些普遍性质，即它具有有限的空间范围，其中心以 $\boldsymbol{p}_0/\mu$ 的速度移动，$t=0$ 时中心到达 $\boldsymbol{r}=0$ 处. 我们想象地追溯到很远的过去，在某个负时刻 T 以前，其中心在 r 很大的地方，表示两粒子还没有接近到 V 的作用范围，这时 $\phi_0(\tau)$ 就是 $\Psi(\tau)$ 的空间部分，即

$$\Psi(\tau)=\phi_0(\tau)\chi_\nu\qquad(\tau\le T)\,.\qquad(6)$$

如果以 T 作为起始时刻，则初条件是 $\Psi(T)=\phi_0(T)\chi_\nu$ (χ_ν 代表初始自旋态)，因此可把 $\Psi(t)$ 表示为

$$\Psi(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-T)/\hbar}\phi_0(T)\chi_\nu\,.\qquad(7)$$

实际上不必让 T 明显地出现，因为从更早的时刻 τ 到时刻 T 的状态变化既可以说是由 H_0 决定，也可以说是由 H 决定，所以 $\phi_0(T)\chi_\nu$ 也可表示为 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(\tau-T)/\hbar}\Psi(\tau)$，故 (7) 式又可以写作

$$\Psi(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-\tau)/\hbar}\phi_0(\tau)\chi_\nu\qquad(\tau\le T)\,.\qquad(8)$$

现在可令 $\tau\to-\infty$，于是

$$\Psi(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\Psi(0)\,,\qquad(9)$$

而

$$\begin{aligned}\Psi(0) &= \lim_{\tau\to-\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}H\tau/\hbar}\phi_0(\tau)\chi_\nu \\ &= \lim_{\tau\to-\infty} U(0,\tau)\phi_0(0)\chi_\nu,\end{aligned} \tag{10}$$

其中

$$U(0,\tau) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H\tau/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0\tau/\hbar}. \tag{11}$$

这即是在相互作用为 V 的相互作用绘景下将 τ 时刻态矢量变为 0 时刻态矢量的算符. 由

$$U(0,\tau) = 1 + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_\tau^0 \mathrm{d}t_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht_1/\hbar}V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t_1/\hbar}, \tag{12}$$

得

$$U(0,-\infty) = 1 + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^0 \mathrm{d}t_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht_1/\hbar}V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t_1/\hbar}. \tag{13}$$

令

$$\xi(t) = \begin{cases} 0, & \text{当 } t > 0; \\ 1, & \text{当 } t < 0, \end{cases} \tag{14}$$

则

$$U(0,-\infty) = 1 + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}t_1\xi(t_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht_1/\hbar}V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t_1/\hbar}, \tag{15}$$

利用

$$\xi(t_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht_1/\hbar} = \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\lim_{\varepsilon\to0^+}\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}E\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et_1/\hbar}}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}, \tag{16}$$

有

$$U(0,-\infty) = 1 + \lim_{\varepsilon\to0^+}\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}E\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}V\delta(E-H_0),$$

即

$$U(0,-\infty) = \int \mathrm{d}E\Omega(E)\delta(E-H_0), \tag{17}$$

其中

$$\Omega(E)=\lim_{\varepsilon\to 0^+}\Omega_\varepsilon(E)\,. \tag{18}$$

而

$$\Omega_\varepsilon(E)=1+\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}V\,, \tag{19}$$

把 (17) 及 (4) 式代回 (10) 式得到

$$\Psi(0)=\int \mathrm{d}\boldsymbol{p}C(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}_0,\Delta\boldsymbol{p}_0)\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\,, \tag{20}$$

其中

$$\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}=U(0,-\infty)|\boldsymbol{p}\rangle\chi_\nu=\Omega(E(p))|\boldsymbol{p}\rangle\chi_\nu\,. \tag{21}$$

当 $\Delta\boldsymbol{p}_0\to 0$ 时得到 (20) 式的极限形式

$$\Psi(0)\to\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\,. \tag{22}$$

以上借助于过去时刻的初条件确定了描写实际的散射过程的解 $U(0,-\infty)\Psi_0(0)$，其极限形式是 $U(0,-\infty)\mid\boldsymbol{p}\rangle\chi_\nu$. 从下节还可以看到，作为纯粹方法，也可以采用由将来时刻的“初条件”确定的解

$$\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}\nu}=U(0,\infty)|\boldsymbol{p}\rangle\chi_\nu\,, \tag{23}$$

算符 $U(0,\infty)$ 也可按前面的方法表示为

$$U(0,\infty)=\int \mathrm{d}E\widehat{\Omega}(E)\delta(E-H_0)\,, \tag{24}$$

其中

$$\widehat{\Omega}(E)=\lim_{\varepsilon\to 0^+}\widehat{\Omega}_\varepsilon(E)\,, \tag{25}$$

$$\widehat{\Omega}_\varepsilon(E)=1+\frac{1}{E-H-\mathrm{i}\varepsilon}V\,. \tag{26}$$

故

$$\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(-)} = \widehat{\Omega}_{\epsilon}(E(p))|\boldsymbol{p}\rangle\chi_{\nu}\,. \tag{27}$$

算符 $U(0,-\infty)$ 与 $U(0,\infty)$ 称为 Mϕller 波算符.

从 (18), (19) 以及 (25), (26) 式看出，$\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(+)}$ 及 $\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(-)}$ 都是 H 的本征态，能量为 $E(p)=p^2/2\mu$，即

$$H\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(+)} = E(p)\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(+)}\,, \tag{28}$$

$$H\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(-)} = E(p)\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(-)}\,. \tag{29}$$

这两类本征态在相对距离 r 很大时有不同的渐近式，$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(p)t/\hbar}\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(+)}$ 是平面波加扩张球面波（参看下节），而 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(p)t/\hbar}\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(-)}$ 则有平面波加收缩球面波的形式. 即

$$\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(+)}(\boldsymbol{r}) \xrightarrow{r\text{甚大}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\chi_{\nu} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\sum_{\nu'} f_{\nu'\nu}(\theta,\varphi)\chi_{\nu'}\right), \tag{30}$$

$$\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(-)}(\boldsymbol{r}) \xrightarrow{r\text{甚大}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\chi_{\nu} + \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}\sum_{\nu'} g_{\nu'\nu}(\theta,\varphi)\chi_{\nu'}\right), \tag{31}$$

其中 $k=p/\hbar$. 因此，$\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(+)}$ 及 $\psi_{\boldsymbol{p}\nu}^{(-)}$ 又常称为“射出”及“射入”本征态. 通常处理散射问题采用的时间无关方法或定态方法，就是以 $|\boldsymbol{p}_0\rangle\chi_{\nu}$ 为入射波，以 (30) 式中的渐近形式为边条件，通过求解不含时间的薛定谔方程 (28) 来确定散射振幅 $f_{\nu'\nu}(\theta,\phi)$.

把 (21) 及 (23) 式代入 (28) 及 (29) 式中，注意 $E(p)$ 是 H_0 在状态 $|\boldsymbol{p}\rangle\chi_{\nu}$ 的本征值，可得到

$$HU(0,\pm\infty) = U(0,\pm\infty)H_0\,. \tag{32}$$

现在来证明由 (21) 及 (23) 式定义的射出、射入本征态是正交归一的. 为此，考虑两个入射波包 $\phi(T)\chi_{\nu}$ 和 $\phi'(T)\chi_{\nu'}$，按照 (7) 式有

$$\langle\Psi'(0)|\Psi(0)\rangle = \langle\phi'(0)\chi_{\nu'}|\phi(0)\chi_{\nu}\rangle\,. \tag{33}$$

令 $\phi(0)\chi_\nu$ 及 $\phi'(0)\chi_{\nu'}$ 趋于极限 $|\boldsymbol{p}\nu\rangle$ 及 $|\boldsymbol{p}'\nu'\rangle$, 得出

$$\langle\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}'\nu'}|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\rangle = \langle\boldsymbol{p}'\nu'|\boldsymbol{p}\nu\rangle = \delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\delta_{\nu'\nu}\,. \tag{34}$$

用波算符来表示就是

$$U(-\infty,0)U(0,-\infty) = 1\,.$$

类似地有

$$\langle\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}'\nu'}|\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}\nu}\rangle = \langle\boldsymbol{p}'\nu'|\boldsymbol{p}\nu\rangle = \delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\delta_{\nu'\nu}\,, \tag{35}$$

或

$$U(\infty,0)U(0,\infty) = 1\,.$$

设波包 ϕ 代表 H_0 的近似本征态，以之作为相互作用绘景在 $-\infty$ 时刻的态矢量，就可以借助时间演化算符求得 t 时刻的态矢量 $U(t,-\infty)\phi$. 另一方面，可用 $U(\infty,-\infty)\phi$ 作为 ∞ 时刻的态矢量求出同样的结果. 即

$$U(t,-\infty)\,\phi = U(t,\infty)U(\infty,-\infty)\,\phi\,. \tag{36}$$

再设波包 φ 代表 H_0 的近似本征态，以之作为相互作用绘景在 ∞ 时刻的态矢量，可借助时间演化算符求得 t 时刻的态矢量 $U(t,\infty)\,\varphi$, 又可用 $U(-\infty,\infty)\,\varphi$ 作为 $-\infty$ 时刻的态矢量求出同样的结果. 即

$$U(t,\infty)\,\phi = U(t,-\infty)U(-\infty,\infty)\,\phi\,. \tag{37}$$

在 (36) 和 (37) 式中令 t 等于零可以看出，任一射出本征态都可以表示为射入本征态的线性组合，任一射入本征态都可以表示为射出本征态的线性组合. 由此以及 (34),(35) 式知道，射出本征态集 $\{\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\}$ 或射入本征态集 $\{\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}\nu}\}$ 都代表 H 的散射态的正交归一完备组，故有

$$\sum_\nu \int \mathrm{d}\boldsymbol{p}|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\rangle\langle\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}| = \sum_\nu \int \mathrm{d}\boldsymbol{p}|\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}\nu}\rangle\langle\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}\nu}|\,, \tag{38}$$

即

$$U(0,-\infty)U(-\infty,0)=U(0,\infty)U(\infty,0)\,. \tag{39}$$

应当注意，虽然$U(0,t)$是幺正算符，并且$U(0,\pm\infty)^{\dagger}U(0,\pm\infty)$是单位算符，但不应由此断言波算符是幺正的．实际上，H除了有散射本征态之外，还可能存在束缚本征态，在这种情况下，$\{\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\}$和$\{\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}\nu}\}$都不真正是完备的，(38)和(39)式两边的量不是单位算符，这时波算符不是幺正的．

§2　散射截面公式

从(9)及(20)式出发，可以从跃迁概率的观点求出截面公式，为此应在有关的时间微分完成之后，再令$\Delta\boldsymbol{p}_0\to 0$．

$\Psi(t)$可以写作

$$\Psi(t)=\Psi_0(t)+u(t)\,, \tag{40}$$

其中$\Psi_0(t)$代表未经散射的入射波包，$u(t)$代表散射波．$\Psi_0(t)$的极限形式为

$$\Psi_0(t)\to \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0t/\hbar}|\boldsymbol{p}_0\rangle\chi_\nu\,, \tag{41}$$

其中

$$E_0=\frac{p_0^2}{2\mu}\,. \tag{42}$$

在t时刻附近每单位时间内散射到自旋态$\chi_{\nu'}$而动量在$\boldsymbol{p}$与$\boldsymbol{p}+\mathrm{d}\boldsymbol{p}$之间的状态的(相对)概率为

$$w_{\boldsymbol{p}\nu'}\mathrm{d}\boldsymbol{p}=\frac{\partial}{\partial t}|\langle\boldsymbol{p}\nu'|u(t)\rangle|^2\mathrm{d}\boldsymbol{p}\,. \tag{43}$$

相应的有效散射截面为

$$\sigma_{\nu\nu'}(\theta,\phi)\mathrm{d}\Omega=\frac{(2\pi\hbar)^3}{v_0}\mathrm{d}\Omega\int_0^\infty w_{\boldsymbol{p}\nu'}p^2\mathrm{d}p\,, \tag{44}$$

其中 (θ,φ) 代表 $\boldsymbol{p}$ 的方向，v_0 即 $|p_0|/\mu$.

由 (40) 式有

$$\dot{u}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\Big\{H\Psi(t)-H_0\Psi_0(t)\Big\}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\Big\{V\Psi(t)+H_0u(t)\Big\}\,, \tag{45}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}|\langle\boldsymbol{p}\nu'|u(t)\rangle|^2&=\langle u(t)|\boldsymbol{p}\nu'\rangle\langle\boldsymbol{p}\nu'|\dot{u}(t)\rangle+\text{C.C.}\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle u(t)|\boldsymbol{p}\nu'\rangle\langle\boldsymbol{p}\nu'|V\Psi(t)\rangle+\text{C.C.}\,,\end{aligned}$$

其中用“C.C.”表示复数共轭. 令 $\Delta\boldsymbol{p}_0\to 0$, 即 $\Psi_0(t)$ 采取 (41) 中的极限形式，得出

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}|\langle\boldsymbol{p}\nu'|u(t)\rangle|^2\longrightarrow\\&\quad\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\boldsymbol{p}_0\nu|\{\Omega(E_0)^\dagger-1\}|\boldsymbol{p}\nu'\rangle\langle\boldsymbol{p}\nu'|V|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}\rangle+\text{C.C.}\,.\end{aligned} \tag{46}$$

根据 (19) 式，有

$$\Omega_\varepsilon(E_0)=1+\frac{1}{E_0-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}V\Omega_\varepsilon(E_0)\,, \tag{47}$$

注意

$$\lim_{\varepsilon\to 0+}\frac{1}{E_0-H_0\pm\mathrm{i}\varepsilon}=\frac{\mathcal{P}}{E_0-H_0}\mp\mathrm{i}\pi\delta(E_0-H_0)\,, \tag{48}$$

其中记号 $\mathcal{P}$ 表示在积分中取主值. 因此

$$\begin{aligned}&\langle\boldsymbol{p}_0\nu|\{\Omega(E_0)^\dagger-1\}|\boldsymbol{p}\nu'\rangle\\&=\langle\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}|V|\boldsymbol{p}\nu'\rangle\left\{\frac{\mathcal{P}}{E_0-E(p)}+\mathrm{i}\pi\delta(E_0-E(p))\right\}\,,\end{aligned} \tag{49}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}|\langle\boldsymbol{p}\nu'|u(t)\rangle|^2\to\frac{2\pi}{\hbar}|\langle\boldsymbol{p}\nu'|V|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}\rangle|^2\delta(E_0-E(p))\,. \tag{50}$$

即

$$w_{\boldsymbol{p}_0\nu,\boldsymbol{p}\nu'}\mathrm{d}\boldsymbol{p}=\frac{2\pi}{\hbar}|\langle\boldsymbol{p}\nu'|V|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}\rangle|^2\delta(E_0-E(p))\mathrm{d}\boldsymbol{p}\,. \tag{51}$$

代回 (34) 式得

$$\sigma_{\nu\nu'}(\theta,\varphi)=16\pi^4\mu^2\hbar^2\left|\langle \boldsymbol{p}\nu'|V|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}\rangle\right|^2_{p=p_0}. \tag{52}$$

求截面公式的另一种方法，是根据射出本征态 $\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}$ 的渐近式确定散射振幅 $f_{\nu'\nu}(\theta,\varphi)$(这时把入射波取为极限形式 $|\boldsymbol{p}_0\rangle\chi_\nu$), $\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}$ 可以写成

$$\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}=\lim_{\varepsilon\to 0+}\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}(\varepsilon)\,. \tag{53}$$

由 (19) 式得到

$$\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}(\varepsilon)=|\boldsymbol{p}_0\rangle\chi_\nu+\frac{1}{E_0-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}V\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}(\varepsilon)\,, \tag{54}$$

这个方程式称为 Lippmann-Schwinger 方程. 变到坐标表象就是

$$\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}(\varepsilon,\boldsymbol{r})=\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}_0\rangle\chi_\nu$$

$$+\int\langle \boldsymbol{r}|\frac{1}{E_0-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}|\boldsymbol{r}'\rangle V(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}(\varepsilon,\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\,, \tag{55}$$

其中 $\langle \boldsymbol{r}|(E_0-H_0+\mathrm{i}\varepsilon)^{-1}|\boldsymbol{r}'\rangle$ 在 $\varepsilon\to 0^+$ 时即是自由粒子的格林函数:

$$\lim_{\epsilon\to 0^+}\langle \boldsymbol{r}|\frac{1}{E_0-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}|\boldsymbol{r}'\rangle=\frac{-\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,, \tag{56}$$

其中 $k_0=|\boldsymbol{p}_0|/\hbar$. 因此 (55) 式给出

$$\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}(\boldsymbol{r})=\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}_0\rangle\chi_\nu$$

$$-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\,. \tag{57}$$

对 $\boldsymbol{r}'$ 积分的范围受到 $V(\boldsymbol{r}')$ 的短程性的限制，因此当 r 充分大时可把指数函数中的 $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ 换成 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}^0\cdot\boldsymbol{r}'$，而且把 $(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)^{-1}$ 换

成 $1/r$, 故

$$\begin{aligned}
&\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}(\boldsymbol{r}) - \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}_0\rangle\chi_\nu \\
&\quad \xrightarrow{r\text{甚大}} -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 r}}{r}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0\boldsymbol{r}^0\cdot\boldsymbol{r}'}V(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \\
&\quad = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 r}}{r} \\
&\quad \times\left\{-4\pi^2\hbar\mu\sum_{\nu'}\chi_{\nu'}\langle \boldsymbol{p}\nu'|V|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}\rangle\Big|_{p=p_0,\,\boldsymbol{p}^0=\boldsymbol{r}^0}\right\}. \qquad (58)
\end{aligned}$$

由此可见

$$f_{\nu'\nu}(\theta,\varphi) = -4\pi^2\hbar\mu\langle \boldsymbol{p}\nu'|V|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}\rangle_{p=p_0}\,, \qquad (59)$$

其中 (θ,φ) 代表 $\boldsymbol{p}$ 的方向. 在定义 (θ,φ) 时通常是以 $\boldsymbol{p}_0$ 的方向为 Z 轴方向, 由 (59) 式以及 $|f_{\nu'\nu}(\theta,\varphi)|^2 = \sigma_{\nu\nu'}(\theta,\varphi)$, 当然也得出 (52) 式. 从 $\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}$ 与 $\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}\nu}$ 的定义看出

$$\langle \boldsymbol{p}'\nu'|V|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\rangle_{p'=p} = \langle \psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}'\nu'}|V|\boldsymbol{p}\nu\rangle_{p'=p}\,, \qquad (60)$$

因此又有

$$f_{\nu'\nu}(\theta,\varphi) = -4\pi^2\hbar\mu\langle \psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}\nu'}|V|\boldsymbol{p}_0\nu\rangle_{p=p_0}\,. \qquad (61)$$

最后, 我们来证明向前弹性振幅与总截面之间的一个简单关系. 类似于 (43), (44) 式, 由 $|\boldsymbol{p}_0\rangle\chi_\nu$ 入射 (求解定态方程时的入射波) 的总截面为

$$\sigma_T = \frac{(2\pi\hbar)^3}{v_0}\frac{\partial}{\partial t}\langle u(t)|u(t)\rangle\,, \qquad (62)$$

而

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle u(t)|u(t)\rangle = \langle u(t)|\dot{u}(t)\rangle + \text{C.C.}$$
$$= \frac{\langle u(t)|V\Psi(t) + H_0|u(t)\rangle}{\mathrm{i}\hbar} + \text{C.C.}$$
$$= \frac{\langle u(t)|V|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{i}\hbar} + \text{C.C.}$$
$$= \frac{\mathrm{i}}{h}\langle \Psi_0(t)|V|\Psi(t)\rangle + \text{C.C.}.$$

取极限有

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle u(t)|u(t)\rangle \to -\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}\langle \boldsymbol{p}_0\nu|V|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\nu}\rangle\,, \tag{63}$$

其中 Im 代表取虚部. 把这个结果代回 (62) 式, 得

$$\sigma_T = \frac{4\pi}{k_0}\mathrm{Im}f_{\nu\nu}(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_0)\,, \tag{64}$$

其中 $f_{\nu\nu}(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_0)$ 是散射角为零 (向前) 的弹性振幅, 这个结果被称为光学定理.

§3 散 射 矩 阵

3.1 相互作用绘景回顾

在第三章已经说明了描写系统的运动过程的几种不同方式, 即薛定谔绘景、海森伯绘景和相互作用绘景, 通常也称为薛定谔表象、海森伯表象和相互作用表象. 薛定谔绘景的特点是: 作用于态矢量空间的坐标和正则动量的算符与时间无关. 因此, 任何力学量, 如果在经典力学中作为坐标和动量的函数是不显含时间的, 则相应的作用于态矢量空间的量子力学算符与时间无关. 如果用波函数代表状态, 就只有选择与时间无关的权重函数, 才能使动量算子与时间无关, 为了方便, 现在采用态矢量的形式. 再

假定在薛定谔绘景下的哈密顿量算符 H 和相互作用项 V 是与时间无关的，并把相互作用绘景的态矢量 $\Phi(t)$ 与相应的薛定谔态矢量 $\Psi(t)$ 的关系规定如下 (即在第三章 (188) 式中令 $t_1=0$)

$$\Phi(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}\Psi(t)\,, \tag{65}$$

其中

$$H_0\equiv H-V\,. \tag{66}$$

与薛定谔绘景的算符 L 相应的相互作用绘景的算符 L_I 则为

$$L_I(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}L\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t/\hbar}\,. \tag{67}$$

$\Psi(t)$ 与 $\Psi(t_0)$ 的关系由算符 $T(t,t_0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-t_0)/\hbar}$ 决定，由此及 (65) 式知道， $\Phi(t)$ 与 $\Phi(t_0)$ 的关系如下

$$\Phi(t)=U(t,t_0)\Phi(t_0)\,, \tag{68}$$

其中

$$U(t,t_0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-t_0)/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t_0/\hbar}\,, \tag{69}$$

它有如下的性质

$$U(t,t)=1\,, \tag{70}$$

$$U(t,t_1)U(t_1,t_0)=U(t,t_0)\,, \tag{71}$$

$$U(t,t_0)^\dagger=U(t_0,t)=U(t,t_0)^{-1}\,, \tag{72}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)=V_I(t)U(t,t_0)\,, \tag{73}$$

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t_0}U(t,t_0)=U(t,t_0)V_I(t_0)\,, \tag{74}$$

$$U(t,t_0)=1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'V_I(t')U(t',t_0)\,, \tag{75}$$

$$U(t,t_0)=1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'U(t,t')V_I(t')\,, \tag{76}$$

$$V_I(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t/\hbar} V \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t/\hbar} . \tag{77}$$

3.2 散射矩阵

(1) 定义

散射矩阵或散射算符，是指 $U(t, t_0)$ 算符的如下极限

$$S = U(\infty, -\infty) = \lim_{t \to +\infty} \left(\lim_{t_0 \to -\infty} U(t, t_0) \right) . \tag{78}$$

利用波算符，又可写作

$$S = U(\infty, 0) U(0, -\infty) . \tag{79}$$

为了便于了解这样定义的散射算符的意义，可以再看看 § 1 的 (8) 式与 (10) 式

$$\Psi(0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H\tau/\hbar} \phi_0(\tau) \chi_\nu , \tag{80}$$

$$\Psi(0) = U(0, -\infty) \phi_0(0) \chi_\nu . \tag{81}$$

(80) 式说明，从薛定谔绘景看来，$\Psi(0)$ 是由很远的过去时刻 ($\tau < T$) 的中心在很远处的波包 $\phi_0(\tau)\chi_\nu$ 按薛定谔方程所描写的时间演化而形成的；(81) 式则说明，从相互作用绘景看来，$\Psi(0)$ 是由 $-\infty$ 时刻的中心在 $r = 0$ 处的波包 $\phi_0(0)\chi_\nu$ 按方程 (73) 所描写的时间演化而形成的. 后一种观点不涉及时间 τ，比较方便. 而且如前面已经指出的，在求 $\Psi(0)$ 或在其他不引起含混的情形，可在 (81) 式中直接令 $\phi_0(0)\chi_\nu$ 趋于它的极限形式 $|\boldsymbol{p}_0\rangle\chi_\nu$. 现在进一步考察向将来时间的发展. 薛定谔绘景的情形由 (8) 式代表，即

$$\Psi(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-\tau)/\hbar} \phi_0(\tau) \chi_\nu . \tag{82}$$

在相互作用绘景则是

$$\Phi(t) = U(t, -\infty) \phi_0(0) \chi_\nu . \tag{83}$$

t 取充分大正值时，$\Psi(t)$ 又代表中心在很远处的波包，短程的相互作用势 V 又不发生作用了，$\Psi(t)$ 再往后随时间的变化，实质上是由 H_0 决定的，这一性质用 (82) 式表达不甚方便，但是转到相互作用绘景 (83) 式后，就可以说，当 t 充分大时，如果不对 t 求微商，就只需研究 $t \to \infty$ 时的极限

$$\Phi(\infty) = U(\infty, -\infty)\phi_0(0)\chi_\nu \,.$$

从这个简单的说明可以了解，散射算符包含着散射问题的全部知识.

(2) 散射矩阵的对称性

(i) 转动不变性 (来自 H 的转动不变性).

(ii) 时间反演性质.

由于 $U(0, \pm\infty)$ 在时间反演下变为 $U(0, \mp\infty)$，有

$$TS = TU(\infty, 0)U(0, -\infty) = U(-\infty, 0)U(0, \infty)T \,,$$

即

$$TST^{-1} = S^\dagger \qquad (T\text{为时间反演算符}). \tag{84}$$

(iii) 与 H_0 的对易关系.

由 (32) 有

$$H_0 S = U(\infty, 0)HU(0, -\infty) = U(\infty, 0)U(0, -\infty)H_0 \,,$$

即

$$H_0 S = S H_0 \,. \tag{85}$$

(iv) 幺正性.

由 S 算符的定义有

$$S^\dagger S = U(-\infty, 0)U(0, \infty)U(\infty, 0)U(0, -\infty) \,, \tag{86}$$

$$S S^\dagger = U(\infty, 0)U(0, -\infty)U(-\infty, 0)U(0, \infty) \,. \tag{87}$$

把 (86) 式中的 $U(0,\infty)U(\infty,0)$ 与 (87) 式中的 $U(0,-\infty)\,U(-\infty,0)$ 交换 (根据 (39) 式), 得

$$SS^{\dagger}=S^{\dagger}S=1\,. \tag{88}$$

在 (36) 式中令 t 趋于 $-\infty$ 以及在 (37) 式中令 t 趋于 ∞, 也得出这样的结果.

(3) 散射矩阵元与散射振幅的关系

按照 (79) 与 (21),(23) 式, 有

$$\langle \boldsymbol{p}'\nu'|S|\boldsymbol{p}\nu\rangle=\langle\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}'\nu'}|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\rangle\,. \tag{89}$$

注意

$$\begin{aligned}
&|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\rangle-|\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}\nu}\rangle\\
&\quad=\lim_{\epsilon\to 0^{+}}\left(\frac{1}{E(p)-H+\mathrm{i}\epsilon}-\frac{1}{E(p)-H-\mathrm{i}\epsilon}\right)V|\boldsymbol{p}\nu\rangle\\
&\quad=-2\pi\mathrm{i}\delta(E(p)-H)V|\boldsymbol{p}\nu\rangle\,,
\end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned}
&\langle \boldsymbol{p}'\nu'|S|\boldsymbol{p}\nu\rangle\\
&\quad=\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\delta_{\nu'\nu}-2\pi\mathrm{i}\langle \boldsymbol{p}'\nu'|V|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\rangle\delta(E(p')-E(p))\\
&\quad=\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\delta_{\nu'\nu}-2\pi\mathrm{i}\langle\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}'\nu'}|V|\boldsymbol{p}\nu\rangle\delta(E(p')-E(p))\,,
\end{aligned}$$

或

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{p}'\nu'|(S-1)|\boldsymbol{p}\nu\rangle&=-2\pi\mathrm{i}\langle \boldsymbol{p}'\nu'|V|\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}\nu}\rangle\delta(E(p')-E(p))\\
&=-2\pi\mathrm{i}\langle\psi^{(-)}_{\boldsymbol{p}'\nu'}|V|\boldsymbol{p}\nu\rangle\delta(E(p')-E(p))\,.
\end{aligned}$$

与前节散射振幅的公式 (59) 比较得到

$$\langle \boldsymbol{p}\nu'|(S-1)|\boldsymbol{p}_0\nu\rangle=\frac{\mathrm{i}}{2\pi\hbar\mu}f_{\nu'\nu}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}_0)\delta(E(p)-E_0)\,. \tag{90}$$

(4) 互逆定理

把 $|\boldsymbol{p}\nu\rangle$ 的时间反演态 $T|\boldsymbol{p}\nu\rangle$ 记作 $|\widehat{\boldsymbol{p}\nu}\rangle$, 由 (84) 式有

$$\langle \boldsymbol{p}'\nu'|S|\boldsymbol{p}\nu\rangle = \langle \boldsymbol{p}'\nu'|T^{-1}S^{\dagger}T|\boldsymbol{p}\nu\rangle = \langle \widehat{\boldsymbol{p}'\nu'}|S^{\dagger}|\widehat{\boldsymbol{p}\nu}\rangle^{*} ,$$

即

$$\langle \boldsymbol{p}'\nu'|S|\boldsymbol{p}\nu\rangle = \langle \widehat{\boldsymbol{p}\nu}|S|\widehat{\boldsymbol{p}'\nu'}\rangle . \tag{91}$$

这个结果称为互逆定理，它表明从 $\boldsymbol{p}\nu$ 到 $\boldsymbol{p}'\nu'$ 的过程与从 $\widehat{\boldsymbol{p}'\nu'}$ 到 $\widehat{\boldsymbol{p}\nu}$ 的过程具有相同的概率幅，即

$$[f_{\nu'\nu}(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p})]_{p'=p} = [f_{\widetilde{\nu}\widetilde{\nu}'}(\widehat{\boldsymbol{p}},\widehat{\boldsymbol{p}'})]_{p'=p} . \tag{92}$$

(5) 角动量表象中的散射矩阵 (无自旋情形)

在粒子没有自旋的情形，$\boldsymbol{l}^2$ 及 l_z 是守恒量，因此可按确定的 lm 值研究分波的散射. 角动量表象的基矢可选为

$$|klm\rangle = k(\hbar)^{3/2}(-\mathrm{i})^{l}\int \mathrm{d}\Omega_p|\boldsymbol{p}\rangle \mathrm{Y}_{lm}(\boldsymbol{p}^0) . \tag{93}$$

这是 $H_0,\boldsymbol{l}^2,l_z$ 的共同本征态，本征值分别为 $E(p),l(l+1)$ 及 m ，这种基矢的正交归一条件如下

$$\langle k'l'm'|klm\rangle = \delta(k'-k)\delta_{l'l}\delta_{m'm} . \tag{94}$$

把 (93) 逆过来得出

$$|\boldsymbol{p}\rangle = (\hbar)^{-3/2}\frac{1}{k}\sum_{lm}(\mathrm{i})^{l}\mathrm{Y}^{*}_{lm}(\boldsymbol{p}^0)|klm\rangle . \tag{95}$$

算符 S 与 $H_0,\boldsymbol{l}^2,l_z$ 都对易，因此 $|klm\rangle$ 是 S 的本征态：

$$S|klm\rangle = S_l(k)|klm\rangle . \tag{96}$$

在定态方法中所说的散射矩阵，是对一定的能量和总角动量建立的，在无自旋的情形，就是 S 算符的一个本征值 $S_l(k)$.

下面求出散射振幅通过 $S_l(k)$ 表达的公式. 设 $|\boldsymbol{p}_0\rangle$ 为定态方程中的入射平面波, 于是散射振幅为

$$[f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}_0)]_{p=p_0}=-2\pi\hbar\mu\mathrm{i}\int\langle\boldsymbol{p}|(S-1)|\boldsymbol{p}_0\rangle\mathrm{d}E(p)\,. \tag{97}$$

注意

$$\mathrm{Y}_{lm}(0,0)=\delta_{m0}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,,$$

以 $\boldsymbol{p}_0$ 的方向为 Z 轴方向时, 由 (95) 式得出

$$|\dot{\boldsymbol{p}_0}\rangle=(\hbar)^{-3/2}\frac{1}{k_0}\sum_l|k_0l0\rangle(\mathrm{i})^l\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,. \tag{98}$$

把 (95), (96) 及 (98) 代入 (97) 式中得到

$$f(\theta)=\frac{1}{2\mathrm{i}k_0}\sum_l(2l+1)(S_l(k_0)-1)\mathrm{P}_l(\cos\theta)\,, \tag{99}$$

其中 θ 是散射角.

如果把 (99) 式代回 $\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{r})$ 的渐近式中 (见 (30) 式), 就可以看出, $S_l(k_0)$ 描写 l 分波在相互作用下的相角移动, 即

$$\begin{aligned}\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{r})\xrightarrow{r\text{ 甚大}}&\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\sum_l(\mathrm{i})^l\sqrt{2l+1}\frac{1}{2k\mathrm{i}r}\\&\times\left\{S_l(k_0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\pi/2)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\pi/2)}\right\}\mathrm{P}_l(\cos\theta)\,.\end{aligned} \tag{100}$$

这说明 $S_l(k_0)$ 与 l 分波的相移 $\delta_l(k_0)$ 有如下的关系

$$S_l(k_0)=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l(k_0)}\,,$$

S 算符的幺正性意味着 δ_l 为实数. 如果 $S_l(k)$ 恒等于 1, 则 (100) 式变为 $\langle r|\boldsymbol{p}_0\rangle$ 的渐近式, $f(\theta)$ 恒等于零. 对于短程势 V, 只有某个 l 值以下的分波受到相互作用的影响 (l 的截止值与入射能有

关). 因此只有这些分波对 (99) 式中的求和有实际贡献. 特别是当入射能量很低时，只需计及 l 值很低的分波.

(6) 角动量表象的散射矩阵 (有自旋情形)

设 $|\boldsymbol{p}_0\rangle\chi_{\sigma q}$ (也简写作 $|\boldsymbol{p}_0\sigma q\rangle$) 代表定态方法中的入射波，其中 σ 是两个碰撞粒子的耦合自旋，q 是 $\boldsymbol{\sigma}$ 的投影的量子数. $\boldsymbol{l}$ 或 $\boldsymbol{\sigma}$ 一般不是守恒量，但 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{\sigma}$ 是守恒量，因此可按确定的 JM 值 ($\boldsymbol{J}^2$ 及 J_z 的量子数) 研究分波的散射. 角动量表象的基矢可选为

$$|kl\sigma JM\rangle=\sum_{mq}|klm\rangle\chi_{\sigma q}\langle lm\sigma q|l\sigma JM\rangle\,.$$

于是

$$\langle k'l'\sigma' I'M'|kl\sigma JM\rangle=\delta(k'-k)\delta_{l'l}\delta_{\sigma'\sigma}\delta_{J'J}\delta_{M'M}\,.$$

算符 S 与 $\boldsymbol{J}$ 及 H_0 都对易，因此有

$$S|kl\sigma JM\rangle=\sum_{l'\sigma'}|kl'\sigma' JM\rangle S^J_{l'\sigma',l\sigma}(k)\,.$$

定态方法中所说的散射矩阵，就是在一定的 (k,J) 下由 $S^J_{l'\sigma',l\sigma}(k)$ 构成的矩阵 (以 $l'\sigma'$ 为行指标，$l\sigma$ 为列指标). 当 V 包含非有心成分时，l 不再是对角指标，但是 H 的反射不变性导致一种关于 l 的选择定则，即只当 $\Delta l=$ 偶数时，$S^J_{l'\sigma',l\sigma}(k)$ 才可能不为零.

为了求出散射振幅与 $S^J_{l'\sigma',l\sigma}$ 的关系，只需把 (90) 式中的 $|\boldsymbol{p}\nu\rangle$ 表达成如下的形式

$$|\boldsymbol{p}\sigma q\rangle=(\hbar)^{-3/2}\frac{1}{k}\sum_{JM}\sum_{lm}(\mathrm{i})^l\mathrm{Y}^*_{lm}(\boldsymbol{p}^0)\langle lm\sigma q|l\sigma JM\rangle|kl\sigma JM\rangle\,.$$

结果为

$$\begin{aligned}f_{\sigma'q',\sigma q}(\theta,\varphi)&=-2\pi\hbar\mu\mathrm{i}\int\langle\boldsymbol{p}\sigma'q'|(S-1)|\boldsymbol{p}^0\sigma q\rangle\mathrm{d}E(p)\\&=\frac{\sqrt{\pi}}{2k}\sum_{JM}\sum_{ll'm'}\times(\mathrm{i})^{l'-l}\sqrt{2l+1}\langle l0\sigma q|JM\rangle\\&\quad\times\langle l'm'\sigma'q'|JM\rangle(S^J_{l'\sigma',l\sigma}(k_0)-\delta_{l'l}\delta_{\sigma'\sigma})\mathrm{Y}_{l'm'}(\theta,\phi)\,.\end{aligned}$$

这里仍以 $\boldsymbol{p}_0$ 方向为 Z 轴方向，(θ,φ) 代表散射方向.

和前面类似，把这种表达式代回 $\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\sigma q}(\boldsymbol{r})$ 的渐近式中 ((30)式) 就可以看出，$S^J_{l'\sigma',l\sigma}(k_0)$ 描写相互作用对于 $l\sigma JM$ 分波中扩张球面波的影响，即

$$\psi^{(+)}_{\boldsymbol{p}_0\sigma q}(\boldsymbol{r}) \xrightarrow{r\text{甚大}}$$
$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\mathrm{i}k_0 r}\right)\sum_{JM}\sum_{l}(\mathrm{i})^l\sqrt{2l+1}\langle l0\sigma q|JM\rangle$$
$$\times\left\{\sum_{l'\sigma'}S^J_{l'\sigma',l\sigma}(k_0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_0r-\frac{l'\pi}{2})}\mathcal{Y}_{l'\sigma'JM}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_0r-\frac{l\pi}{2})}\mathcal{Y}_{l\sigma JM}\right\}.$$

其中

$$\mathcal{Y}_{l\sigma JM}=\sum_{mq}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\chi_{\sigma q}\langle lm\sigma q|JM\rangle\,.$$

参 考 文 献

[1] Landau D, Lifshitz E M. Quantum Mechanics (3rd, revised edition). Oxford: Pergamon Press, 1977.

[2] Lippmann B A, Schwinger J. Phys. Rev., 1950, 79: 469.

[3] Gell-Mann M, Goldberger M L. Phys. Rev., 1953, 91: 398.

[4] Messiah A. Quantum Mechanics (Vol.2). Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1962.

[5] Schiff L J. Quantum Mechanics (3rd). New York: McGraw-Hill, 1968.

第八章　Dirac 方程

Dirac 方程最初是作为单电子的相对论性薛定谔方程而建立的，但由此不能构成自身完全一致的理论. 后来发展了量子场论，Dirac 方程被当作量子化前的 Dirac 场的运动方程. 在这里我们首先按早期的观点来讲述 Dirac 方程，然后扼要讲一下自由 Klein–Gordon 场和 Dirac 场的量子化.

§ 1　Klein-Gordon 方程与 Dirac 方程

1.1　Klein–Gordon 方程

现在试着按早期的观点寻找单粒子的相对论性薛定谔方程. 首先考虑自由粒子，假定具有一定动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 $E(p)$ 的粒子的波函数仍然是德布罗意平面波

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x},t)=u(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar-\mathrm{i}E(p)t/\hbar}\,, \tag{1}$$

这里把 $u(\boldsymbol{p})$ 理解为一个单列阵，暂不管它应当包含多少行. 需要注意的是，能量 $E(p)$ 不能再用牛顿力学中的表达式，而应当用相对论公式

$$E(p)=\sqrt{c^2\boldsymbol{p}^2+m^2c^4}\,, \tag{2}$$

其中 m 是粒子的静止质量，这意味着代表动量算符的微分算子仍然是

$$\widehat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla\,.$$

关于哈密顿量，根据 (1), (2) 式可以试用

$$\sqrt{c^2(-\mathrm{i}\hbar\nabla)^2+m^2c^4}\,.$$

由此得出自由粒子的薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=\sqrt{c^2(-\mathrm{i}\hbar\nabla)^2+m^2c^4}\;\psi(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{3}$$

但是在这样的方程式中，关于空间和时间的微分算子处在不对等的地位，这使它不具有明显洛伦兹不变的形式. 如果再求一次时间微商就得到

$$\left\{\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\nabla^2+\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right\}\psi(\boldsymbol{x},t)=0\,. \tag{4}$$

这正是薛定谔在发展非相对论薛定谔方程时提出的相对论方程，后来习惯称为 Klein– Gordon 方程. 由于时间和空间的微分算子处在对等地位，Klein–Gordon 方程能够写成明显的洛伦兹不变形式，但是由于包含 ψ 的二阶时间微商，由一定初始时刻的 ψ 不足以决定另一时刻的 ψ, 所以它不能当作相对论薛定谔方程，而在后来已被当作自由 Klein– Gordon 场的经典运动方程.

1.2 Dirac 方程

为了建立只含一阶时间微商和具有明显洛伦兹不变形式的单粒子方程，Dirac 提出，空间微商也应当是一阶的，因此可把方程式写成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=\left\{\sum_{k=1}^{3}c\alpha^k\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x^k}\Big)+mc^2\beta\right\}\psi(\boldsymbol{x},t)\,, \tag{5}$$

其中 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 理解为 N 行单列阵，$\alpha^1,\alpha^2,\alpha^3$ 及 β 是与 $(\boldsymbol{x},t)$ 无关的 $N\times N$ 矩阵，(x^1,x^2,x^3) 即是 (x,y,z), 这意味着采用如下的哈密顿量算子

$$H=\sum_{k}c\alpha^k\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x^k}\Big)+mc^2\beta\,. \tag{6}$$

为了保证具有 (1) 式和符合条件 (2) 的解，H 应满足如下的条件

$$H\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x},t)=\sqrt{c^2(-\mathrm{i}\hbar\nabla)^2+m^2c^4}\;\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x},t).$$

现在不能保证 $\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x},t)$ 构成 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 的完备组，因为 $E(p)$ 是由开平方得到的，其中负值已被抛弃 (见 (2) 式)，因此这个条件不意味着 $\sqrt{c^2(-\mathrm{i}\hbar\nabla)^2+m^2c^4}$ 就是 H. 而如果不事先抛弃负的 $E(p)$ 值，就不会发生不完备的问题，即 H^2 必须满足如下的条件

$$H^2=c^2(-\mathrm{i}\hbar\nabla)^2+m^2c^4.$$

换句话说，方程 (5) 的解必需满足 Klein–Gordon 方程 (作为必要条件看待)，由此可求出矩阵 α^k,β 应当满足的条件

$$\begin{aligned}
&c^2(-\mathrm{i}\hbar\nabla)^2+m^2c^4\\
&\quad=\sum_{kk'}c^2\alpha^k\alpha^{k'}\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x^k}\Big)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x^{k'}}\Big)+m^2c^4\beta^2\\
&\qquad+mc^3\sum_k(\alpha^k\beta+\beta\alpha^k)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x^k}\Big)\\
&\quad=\frac{1}{2}\sum_{kk'}c^2(\alpha^k\alpha^{k'}+\alpha^{k'}\alpha^k)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x^k}\Big)\\
&\qquad\times\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x^{k'}}\Big)+m^2c^4\beta^2\\
&\qquad+mc^3\sum_k(\alpha^k\beta+\beta\alpha^k)\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x^k}\Big).
\end{aligned}$$

由此得到

$$\begin{aligned}
&\alpha^k\alpha^{k'}+\alpha^{k'}\alpha^k=2\delta_{kk'},\\
&\alpha^k\beta+\beta\alpha^k=0,\\
&\beta^2=1.
\end{aligned}\tag{7}$$

另外，为了保证 H 是厄米的，要求 α^k 及 β 是厄米矩阵，即

$$(\alpha^k)^\dagger=\alpha^k,\quad \beta^\dagger=\beta.\tag{8}$$

由满足条件 (7)，(8) 的矩阵 $\alpha^1,\alpha^2,\alpha^3,\beta$ 决定的方程 (5) 称为自由粒子的 Dirac 方程. 把它当作单粒子的相对论性薛定谔方程时，

采用了如下的概率密度和概率流密度公式

$$\rho(x)=\widetilde{\psi}^*(x)\psi(x)=\sum_{\alpha}\psi^*_{\alpha}\psi_{\alpha}, \tag{9}$$

$$j^k(x)=c\widetilde{\psi}^*(x)\alpha^k\psi(x), \tag{10}$$

式中的记号 $\widetilde{\psi}^*$ 表示对 N 行单列阵 ψ 取转置复共轭，亦即厄米共轭，得到的是单行 N 列阵. (ρ, j^k) 是满足连续性方程的，即

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_k\frac{\partial}{\partial x^k}j^k=0.$$

在后面将看到 (§5), $c\rho$ 和 j^k 组成洛伦兹矢量. 把 Dirac 方程当作单电子薛定谔方程的观点获得了很大的成功，也遇到原则性困难，这在后面还要讲到.

1.3 α^k, β 及 γ^μ 矩阵

矩阵 α^k 及 β 可以用如下的 γ^μ 来代替

$$\gamma^0=\beta, \tag{11}$$

$$\gamma^k=\beta\alpha^k \quad (k=1,2,3), \tag{12}$$

显然 γ^0 是厄米的，γ^k 是反厄米的，并且

$$(\gamma^\mu)^\dagger=\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0,$$

$$\gamma^\mu\gamma^\nu+\gamma^\nu\gamma^\mu=2g^{\mu\nu}, \tag{13}$$

其中 $g^{\mu\nu}$ 是闵可夫斯基空间的度规张量的逆变分量，非零的分量为

$$g^{00}=1, \quad g^{kk'}=-\delta_{kk'}. \tag{14}$$

由 $\gamma^0,\gamma^1,\gamma^2,\gamma^3$ 可以做成 16 种线性独立的积

最高重积： $\gamma_5=\mathrm{i}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$,

三重积： $\gamma_5\gamma^\mu \quad (\mu=0,1,2,3)$,

二重积： $\gamma^\mu\gamma^\nu \quad (\mu\neq\nu)$,

一重积： γ^μ,

零重积： $1 \quad ((\gamma^0)^2=-(\gamma^k)^2=1)$.

这 16 个矩阵的线性组合张成一个 16 维线性空间，而且在矩阵乘法下构成一个代数. 这个代数的不可约表示 (在等价意义下只有一种) 是 4×4 矩阵表示. 在以后的讨论中，我们将用 γ^μ 在这个不可约表示下的矩阵来代表它自身，并保持同样的记号. 等价表示的矩阵只确定到一个相似变换，我们把 γ^k 及 β 选为如下的厄米矩阵

$$\alpha=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I} & 0\\ 0 & -\boldsymbol{I}\end{pmatrix}, \tag{15}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}$ 是 $\alpha^1,\alpha^2,\alpha^3$ 的简写， $\boldsymbol{\sigma}$ 代表三个 2×2 泡利矩阵

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix},\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}. \tag{16}$$

(15) 式中的 $\boldsymbol{I}$ 是 2×2 单位矩阵. 这时 $\gamma^1,\gamma^2,\gamma^3$ 可简写成

$$\boldsymbol{\gamma}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ -\boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix}, \tag{17}$$

由于指定了 $N=4$, ψ 是四分量波函数：

$$\psi(x)=\begin{pmatrix}\psi_1(x)\\ \psi_2(x)\\ \psi_3(x)\\ \psi_4(x)\end{pmatrix}, \tag{18}$$

其厄米共轭为

$$\widetilde{\psi}^*(x)=(\psi_1^*(x),\psi_2^*(x),\psi_3^*(x),\psi_4^*(x))\,. \tag{19}$$

再用 x^0 代表 ct, 于是 $(x^0, \boldsymbol{x})$ 组成一个洛伦兹矢量 x^μ, 其协变分量为 $x_\mu \equiv g_{\mu\nu}x^\nu = (x^0, -\boldsymbol{x})$, 协变矢量 $\partial/\partial x^\mu$ 将简记为 ∂_μ , 即

$$\partial_\mu \equiv \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right),$$

相应的逆变分量是

$$\partial^\mu \equiv \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right).$$

利用这种记号可把 Dirac 方程写成

$$\left(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi(x) = 0\,, \tag{20}$$

其厄米共轭给出

$$\mathrm{i}\partial_\mu\widetilde{\psi}^*\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 + \frac{mc}{\hbar}\widetilde{\psi}^* = 0\,,$$

即

$$\mathrm{i}\partial_\mu\overline{\psi}(x)\gamma^\mu + \frac{mc}{\hbar}\overline{\psi}(x) = 0\,, \tag{21}$$

其中

$$\overline{\psi}(x) \equiv \widetilde{\psi}^*(x)\gamma^0\,. \tag{22}$$

(20) 式和 (21) 式都是 Dirac 方程的常用形式.

1.4 有电磁场时的 Dirac 方程

为了写出有电磁场时的 Dirac 方程, 试看相对论经典力学中带电粒子的哈密顿量的表达式

无电磁场情形: $H_c = \sqrt{c^2\boldsymbol{p}^2 + m^2c^4}$,

有电磁场情形: $H_c = \sqrt{c^2(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A})^2 + m^2c^4} + e\Phi$,

其中 $(\Phi, \boldsymbol{A})$ 是电磁场的标势和矢势, e 是粒子的电荷 (对于电子来说, 等于 $-|e|$, $\boldsymbol{p}$ 是相应于 $\boldsymbol{r}$ 的正则动量. 因此在有电磁场时, 应把 (6) 式中的哈密顿量算子换成

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) + mc^2\beta + e\Phi\,. \tag{23}$$

即是说，Dirac 方程应为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x)=\left\{c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)+mc^2\beta+e\Phi\right\}\psi(x)\,. \tag{24}$$

用 $A^\mu(x)$ 代表 $(\Phi(x),\boldsymbol{A}(x))$，它是一个洛伦兹矢量，相应的协变分量是 $A_\mu(x)=(\Phi(x),-\boldsymbol{A}(x))$. 于是 (24) 式可改写成

$$\left\{\mathrm{i}\gamma^\mu\left(\partial_\mu+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_\mu(x)\right)-\frac{mc}{\hbar}\right\}\psi(x)=0\,. \tag{25}$$

即是说，只要把无电磁场情形的 Dirac 方程中的 ∂_μ 换成

$$\partial_\mu+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_\mu(x)\,,$$

就得出有电磁场时的 Dirac 方程，(25) 式的厄米共轭给出：

$$\mathrm{i}\left(\partial_\mu-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_\mu(x)\right)\overline{\psi}(x)\gamma^\mu+\frac{mc}{\hbar}\overline{\psi}(x)=0\,. \tag{26}$$

§2 Dirac 方程在正常洛伦兹变换下的协变性

2.1 正常和非正常洛伦兹变换

按照相对论原理，不同惯性参考系在表述物理规律上是等价的，惯性参考系之间的变换是洛伦兹变换，所以自由粒子的 Dirac 方程在洛伦兹变换下应保持原有的形式，在有电磁场时应当是洛伦兹协变的，现在来看看这个要求是否得到满足.

设在惯性参考系 K 中，时空点的坐标为 $x^\mu=(ct,\boldsymbol{x})$，所谓正常洛伦兹变换由下列两个条件表征：

(i) 保持 $c^2(\Delta t)^2-(\Delta x)^2-(\Delta y)^2-(\Delta z)^2$ 不变；

(ii) 能够连续过渡到恒等变换.

当说到更为广泛的洛伦兹变换时就意味着只符合条件 (i). 用实矩

阵 Λ 描写坐标变换，则

$$\begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b^0 \\ b^1 \\ b^2 \\ b^3 \end{pmatrix}, \tag{27}$$

这表示，在参考系 K 中坐标为 x^μ 的点相对于参考系 K' 的坐标为 x'^μ. 条件 (i) 相当于

$$\tilde{\Lambda} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{28}$$

其中 $\tilde{\Lambda}$ 代表 Λ 的转置矩阵. 对此式两边取行列式得

$$(\det \Lambda)^2 = 1. \tag{29}$$

如果按照 $\det \Lambda = 1$ 或 -1 把变换 (27) 分成两类，则这两类变换之间不能连续过渡. 此外，对 (28) 式取矩阵指标为 (0,0) 的元素，可得

$$(\Lambda_0^0)^2 - \sum_k (\Lambda_0^k)^2 = 1,$$

即

$$(\Lambda_0^0)^2 = 1 + \sum_k (\Lambda_0^k)^2, \tag{30}$$

其中 Λ_0^k 是矩阵 Λ 的 $(k,0)$ 元素 (即第 $k+1$ 行第一列的元素). (30) 式表明 $\Lambda_0^0 \geq 1$ 或者 $\Lambda_0^0 \leq -1$. 以此为标准又可把变换 (27) 分成另外的两类，它们之间也不能连续过渡. 因此，按照 $\det \Lambda$ 的正负号与 Λ_0^0 的正负号可把满足条件 (i) 的变换分为四片互不连接的变换，只有 $\det \Lambda = 1$ 而且 $\Lambda_0^0 \geq 1$ 的情形代表正常洛伦兹变换.

只满足 (i) 的一般洛伦兹变换可以看作由下列三种基本变换中若干个变换做成的积变换.

第一种，正常洛伦兹变换：

$$\det\Lambda = 1, \quad \Lambda_0^0 \geq 1. \tag{31}$$

第二种，空间轴反向：

$$t' = t, \quad x' = -x, \quad y' = -y, \quad z' = -z$$

$$(\det\Lambda = -1, \quad \Lambda_0^0 = 1). \tag{32}$$

第三种，时间轴反向：

$$t' = -t, \; x' = x, \; y' = y, \; z' = z$$

$$(\det\Lambda = -1, \; \Lambda_0^0 = -1). \tag{33}$$

一个洛伦兹变换如果不合乎 $\det\Lambda$ 及 Λ_0^0 都取正号的条件，就称为非正常的. 全部正常洛伦兹变换构成正常洛伦兹群，把它扩大到包括空间反射变换时，仍然构成一个群，全部的洛伦兹变换 (只满足条件 (i)) 当然也构成一个群. 下面将证明 Dirac 方程对于正常洛伦兹变换是协变的，稍后还要讨论它对于非正常洛伦兹变换的协变性.

2.2 在正常洛伦兹变换下的协变性

完整的讨论应当包括四维坐标原点的平移，为了简便，这里只讨论齐次变换，即 (27) 式中的 b^0, b^1, b^2, b^3 等于零. 因此 (27) 式变为

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} \, . \tag{34}$$

前面的条件 (i) 变为

$$ct'^2 - x'^2 - y'^2 - z'^2 = ct^2 - x^2 - y^2 - z^2, \tag{35}$$

条件 (28) 及 (31) 则保持原样. 现在设想从惯性参考系 K 变换到 K'，假定在 K 中由 ψ 代表的运动过程在 K' 中由 ψ' 代表，于是 $\psi'(x')$ 与 $\psi(x)$ 应当有如下的关系

$$\psi'(x') = S\psi(x), \tag{36}$$

其中 x' 与 x 是同一时空点在两个参考系中的坐标，S 是依赖于变换 Λ 的 4×4 矩阵. 如果 S 永远是单位矩阵，那就表明粒子或者没有内部自由度，或者这种自由度的力学变数与四维坐标架的取向无关. 如果 S 不恒为单位矩阵，就说明粒子有内部自由度，而且其力学变数与坐标架的取向有关. Dirac 方程的协变性意味着，借助变换 (36) 能够从原参考系 (K) 中的 Dirac 方程变换到新参考系 (K') 中的 Dirac 方程. 反之，如果不存在符合这种要求的 S，那就表明该方程没有所要求的协变性.

只要 S 存在，它必然有逆矩阵，因此由 (25) 及 (36) 式得到

$$\left\{\mathrm{i}\gamma^{\mu}\left(\partial_{\mu}+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{\mu}(x)\right)-\frac{mc}{\hbar}\right\}S^{-1}\psi'(x')=0\,.$$

以 S 乘之得

$$\left\{\mathrm{i}S\gamma^{\nu}S^{-1}\left(\partial_{\nu}+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{\nu}(x)\right)-\frac{mc}{\hbar}\right\}\psi'(x')=0\,.$$

注意

$$\partial_{\nu}=\frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\nu}}\partial'_{\mu}=\Lambda^{\mu}_{\nu}\partial'_{\mu},$$

$$A_{\nu}(x)=\Lambda^{\mu}_{\nu}A'_{\mu}(x'),$$

可得

$$\left\{\mathrm{i}S\gamma^{\nu}S^{-1}\Lambda^{\mu}_{\nu}\left(\partial'_{\mu}+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A'_{\mu}(x')\right)-\frac{mc}{\hbar}\right\}\psi'(x')=0\,,$$

可见，S 应当满足如下的条件

$$\Lambda^{\mu}_{\nu}S\gamma^{\nu}S^{-1}=\gamma^{\mu}\,, \tag{37}$$

即

$$S^{-1}\gamma^{\mu}S=\Lambda^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu}\,. \tag{38}$$

那么，符合这种条件的 S 是否存在，能够确定到什么程度？

令

$$\Gamma^{\mu}(\Lambda)\equiv\Lambda^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu},$$

则

$$\Gamma^{\mu}(\Lambda)\Gamma^{\mu'}(\Lambda)+\Gamma^{\mu'}(\Lambda)\Gamma^{\mu}(\Lambda)=2\Lambda^{\mu}_{\nu}\Lambda^{\mu'}_{\nu'}g^{\nu\nu'}\,.$$

由条件 (28) 有

$$\Lambda\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}\tilde{\Lambda}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}, \tag{39}$$

取此式两边的 (μ,μ') 元素得

$$\Lambda^{\mu}_{\nu}\Lambda^{\mu'}_{\nu'}g^{\nu\nu'}=g^{\mu\mu'},$$

故

$$\Gamma^{\mu}(\Lambda)\Gamma^{\mu'}(\Lambda)+\Gamma^{\mu'}(\Lambda)\Gamma^{\mu}(\Lambda)=2g^{\mu\mu'}. \tag{40}$$

这说明 $\gamma^{\mu}\to\Gamma^{\mu}(\Lambda)$ 构成前面所说的由 γ^{μ} 的 16 种积形成的代数的一个表示. 由于 Γ^{μ} 也是 4 行 4 列矩阵，这个表示是不可约的，因此与前面给出的表示等价，所以使 γ^{μ} 变为 $\Gamma^{\mu}(\Lambda)$ 的相似变换是存在的，这样就证明了符合条件 (38) 的 $S(\Lambda)$ 是存在的，它决定 ψ 在洛伦兹变换下的性质，ψ 的这种变换性质表明，它是与张量不同的协变量，有时称为“ Dirac 旋量”，或“四分量旋量”.

显然，在给定 Λ 后，根据 (38) 式只能在一个任意系数的限度内确定 S, 现在对这个系数的选择作一些约定. 取 (38) 式的厄米共轭，有

$$S^{\dagger}\gamma^{0}\gamma^{\mu}\gamma^{0}(S^{\dagger})^{-1}=\Lambda^{\mu}_{\nu}\gamma^{0}\gamma^{\nu}\gamma^{0}.$$

利用 $(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0$ 及 $(\gamma^0)^2 = 1$, 可改写为

$$(\gamma^0 S^\dagger \gamma^0)\gamma^\mu(\gamma^0 S^\dagger \gamma^0)^{-1} = \Lambda^\mu_\nu \gamma^\nu.$$

由于 (38) 把 $S(\Lambda)$ 确定到一个任意系数，故

$$\gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = bS^{-1},$$

或

$$S^\dagger = b\gamma^0 S^{-1}\gamma^0,$$

其中 b 是常数，而且由 $b\gamma^0 = S^\dagger\gamma^0 S$ 还可看出它是实数. 又由于

$$S^\dagger S = b\gamma^0 S^{-1}\gamma^0 S = b\gamma^0\Lambda^0_\nu\gamma^\nu$$

$$= b\Lambda^0_0 + b\gamma^0\sum_k \Lambda^0_k\gamma^k, \tag{41}$$

在两边取矩阵迹 (注意 $\gamma^0\gamma^k$ 是无迹的) 得 $b\Lambda^0_0 > 0$. 所以当 Λ^0_k 等于零时，就能够通过选择 S 的系数使之成为幺正矩阵. 对于一般的正常洛伦兹变换，Λ^0_k 不等于零，但是 b 是正数，可把 $S/\sqrt{b}$ 定义为新的 S，这时有

$$S^\dagger = \gamma^0 S^{-1}\gamma^0. \tag{42}$$

这可以作为 S 的补充条件，由它和 (38) 式能够把 $S(\Lambda)$ 确定到一个任意相因子. 在这个条件下，(41) 式变为

$$S^\dagger S = \Lambda^0_0 + \gamma^0\sum\Lambda^0_k\gamma^k.$$

由于 $(\Lambda^0_0)^2 = 1 + \sum_k(\Lambda^0_k)^2$，所以 $\Lambda^0_k = 0$ 的正常洛伦兹变换的 S 是幺正矩阵.

关于 S 的相因子，还可以加以限制. 对 (38) 式取复共轭得

$$(S^*)^{-1}(\gamma^\mu)^* S^* = \Lambda^\mu_\nu(\gamma^\nu)^*, \tag{43}$$

由于 $(\gamma^\mu)^*$ 也满足 (13) 式，必有非异矩阵 B 使得

$$(\gamma^\mu)^* = B\gamma^\mu B^{-1}. \tag{44}$$

因为 γ^0 及 γ^k 分别是厄米和反厄米的，所以 $(\gamma^0)^*$ 及 $(\gamma^k)^*$ 分别是厄米和反厄米的，因此可限制 B 是幺正的，即

$$B^\dagger = B^{-1}. \tag{45}$$

由 (44),(45) 式能够把 B 确定到一个与 γ^μ 无关的任意相因子，故

$$B = \lambda\gamma^0\gamma^1\gamma^3, \quad |\lambda| = 1. \tag{46}$$

利用 (44) 可把 (43) 式改写为

$$(B^{-1}S^*B)^{-1}\gamma^\mu(B^{-1}S^*B) = \Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu.$$

这说明，$(B^{-1}S^*B)$ 与 S 只差一个常系数，利用 (42) 及 (44) 式改写矩阵 $(B^{-1}S^*B)$ 的厄米共轭可得

$$\begin{aligned}(B^{-1}S^*B)^\dagger &= B^{-1}(\gamma^0S^{-1}\gamma^0)^*B \\ &= \gamma^0B^{-1}(S^*)^{-1}B\gamma^0 = \gamma^0(B^{-1}S^*B)^{-1}\gamma^0.\end{aligned}$$

可见，当 S 满足补充条件 (42) 时，$B^{-1}S^*B$ 也满足 (42)，这时 $B^{-1}S^*B$ 与 S 只差一个相因子，即

$$B^{-1}S^*B = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}S.$$

因此，把 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}S$ 看作新的 S 就有

$$B^{-1}S^*B = S, \tag{47}$$

或

$$S^* = \gamma^0\gamma^1\gamma^3S\gamma^3\gamma^1\gamma^0. \tag{47'}$$

这也可以作为 S 的补充条件. 方程式 (38) 以及补充条件 (42), (47) 能够在一个不定正负号的限度内确定 $S(\Lambda)$, 它们也保证了对应于全体正常洛伦兹变换的 S 的集合构成一个群. 顺便指出, 当 Λ 连续过渡到单位矩阵时, 条件 (42) 和 (47) 都可以保持下来.

由 ψ 的变换规则, 可决定 $\overline{\psi}(x)$ 的变换规则. 按照 (22) 式, 有

$$\overline{\psi'}(x') = \widetilde{\psi'}^{*}(x')\gamma^0 = \widetilde{\psi}^{*}(x)S^{\dagger}\gamma^0 = \overline{\psi}(x)\gamma^0 S^{\dagger}\gamma^0.$$

由此及 (42) 式得出

$$\overline{\psi'}(x') = \overline{\psi}(x)S^{-1}\,. \tag{48}$$

下面求出无穷小正常洛伦兹变换的 $S(\Lambda)$ (任意正常洛伦兹变换都可由一系列无穷小变换来达到). 在无穷小洛伦兹变换下有

$$x'^{\mu} \approx x^{\mu} + \varepsilon^{\mu}_{\nu}x^{\nu}, \tag{49}$$

其中, ε^{μ}_{ν} 是无穷小量. 由条件 (35) 得出

$$g_{\mu\lambda}\varepsilon^{\lambda}_{\nu} + g_{\nu\lambda}\varepsilon^{\lambda}_{\mu} = 0, \tag{50}$$

其中 $g_{\mu\lambda}$ 是度规张量的 $\mu\lambda$ 分量. 令

$$\varepsilon_{\mu\nu} \equiv g_{\mu\lambda}\varepsilon^{\lambda}_{\nu}, \tag{51}$$

于是 (50) 式变为

$$\varepsilon_{\mu\nu} + \varepsilon_{\nu\mu} = 0, \tag{52}$$

所以 $\varepsilon_{\mu\nu}$ 代表 6 个 参量. 规定 $S(\Lambda)$ 在 $\varepsilon_{\mu\nu} = 0$ 时是单位矩阵, 得

$$S(\Lambda) \approx 1 + T(\varepsilon)\,, \quad S^{-1}(\Lambda) \approx 1 - T(\varepsilon)\,, \tag{53}$$

其中 $T(\varepsilon)$ 的矩阵元是一级无穷小量, 把 (53) 式代到 (38) 式得出

$$\begin{aligned}(1 - T(\varepsilon))\gamma^{\mu}(1 + T(\varepsilon)) &\approx \gamma^{\mu} + \varepsilon^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu}\,,\\ \gamma^{\mu}T(\varepsilon) - T(\varepsilon)\gamma^{\mu} &= \varepsilon^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu}\,.\end{aligned} \tag{54}$$

方程式 (54) 把 $T(\varepsilon)$ 决定到一个与 γ^μ 无关的相加常数，其解为

$$T(\varepsilon)=\frac{1}{8}\varepsilon_{\mu\nu}(\gamma^\mu\gamma^\nu-\gamma^\nu\gamma^\mu)+d(\text{常数}).$$

补充条件 (42) 给出 $T^\dagger(\varepsilon)=-\gamma^0T(\varepsilon)\gamma^0$，从而要求

$$d^*=-d.$$

补充条件 (47′) 给出 $T^*(\varepsilon)=\gamma^0\gamma^1\gamma^3T(\varepsilon)\gamma^3\gamma^1\gamma^0$，即要求

$$d^*=d.$$

可见 $d=0$，最后得到

$$T(\varepsilon)=\frac{1}{8}\varepsilon_{\mu\nu}(\gamma^\mu\gamma^\nu-\gamma^\nu\gamma^\mu), \tag{55}$$

$$S(\Lambda)\approx 1+\frac{1}{8}\varepsilon_{\mu\nu}(\gamma^\mu\gamma^\nu-\gamma^\nu\gamma^\mu). \tag{56}$$

§3 空间轴的转动与 Dirac 粒子的自旋

根据 Dirac 波函数在空间坐标架转动下的变换性质，可以证明遵守 Dirac 方程的粒子具有 1/2 的自旋. 空间坐标架的转动 (时间轴不动) 属于正常洛伦兹变换的特殊情况，即

$$\Lambda=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&&&\\0&&R&\\0&&&\end{pmatrix}, \tag{57}$$

其中 R 是 3×3 的幺模实正交矩阵，如果 R 表示坐标架以某个方向 $\boldsymbol{n}$ 为转动轴旋转一个无穷小角度 $-\Delta\theta$，则

$$R=\begin{pmatrix}1&\varepsilon_2^1&\varepsilon_3^1\\\varepsilon_1^2&1&\varepsilon_3^2\\\varepsilon_1^3&\varepsilon_2^3&1\end{pmatrix}, \tag{58}$$

其中

$$\left.\begin{aligned}\varepsilon_2^1 &= -\varepsilon_1^2 = -\Delta\theta n_z,\\ \varepsilon_3^2 &= -\varepsilon_2^3 = -\Delta\theta n_x,\\ \varepsilon_1^3 &= -\varepsilon_3^1 = -\Delta\theta n_y,\end{aligned}\right\} \tag{59}$$

或

$$\left.\begin{aligned}\varepsilon_{12} &= -\varepsilon_{21} = g_{11}\varepsilon_2^1 = \Delta\theta n_z,\\ \varepsilon_{23} &= -\varepsilon_{32} = \Delta\theta n_x,\\ \varepsilon_{31} &= -\varepsilon_{13} = \Delta\theta n_y,\end{aligned}\right\} \tag{60}$$

故

$$S \approx 1 + \frac{1}{4}\varepsilon_{kj}\gamma^k\gamma^j = 1 - \frac{\mathrm{i}}{2}\Delta\theta\boldsymbol{n}\cdot\vec{\Sigma}\,, \tag{61}$$

其中

$$\Sigma_x = \mathrm{i}\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix}\sigma_x & 0\\ 0 & \sigma_x\end{pmatrix}, \tag{62}$$

$$\Sigma_y = \mathrm{i}\gamma^3\gamma^1 = \begin{pmatrix}\sigma_y & 0\\ 0 & \sigma_y\end{pmatrix}, \tag{63}$$

$$\Sigma_z = \mathrm{i}\gamma^1\gamma^2 = \begin{pmatrix}\sigma_z & 0\\ 0 & \sigma_z\end{pmatrix}, \tag{64}$$

即

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix}. \tag{65}$$

这样就证明了当空间坐标架绕 $\boldsymbol{n}$ 轴转 $-\Delta\theta$ 角时，Dirac 波函数按下式变换

$$\psi'(\boldsymbol{x}',t) \approx \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{2}\Delta\theta\boldsymbol{n}\cdot\vec{\Sigma}\right)\psi(R^{-1}\boldsymbol{x}',t)\,. \tag{66}$$

这说明 $\frac{1}{2}\Sigma_x, \frac{1}{2}\Sigma_y$ 及 $\frac{1}{2}\Sigma_z$ 就是粒子的自旋算符的三个分量的矩阵，它们是满足角动量的对易关系的厄米矩阵，并且

$$\Sigma_x^2 = \Sigma_y^2 = \Sigma_z^2 = 1, \tag{67}$$

$$\left(\frac{1}{2}\vec{\Sigma}\right)^2 = \frac{3}{4}. \tag{68}$$

因此遵守 Dirac 方程的粒子具有 1/2 的自旋. 在非相对论量子力学中，虽然根据实验事实知道电子、质子等具有 1/2 的自旋，但无法给出理论解释.

当空间坐标架转动有限的 $-\theta$ 角时，由 (66) 式得出

$$\psi'(\boldsymbol{x}', t) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\mathrm{i}\theta \boldsymbol{n}\cdot\vec{\Sigma}}\psi(R^{-1}\boldsymbol{x}', t) \tag{69}$$

$$= \left(\cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\vec{\Sigma}\sin\frac{\theta}{2}\right)\psi(R^{-1}\boldsymbol{x}', t)\,. \tag{70}$$

如果 $\theta = 2\pi$ 就有 $\psi'(\boldsymbol{x}', t) = -\psi(\boldsymbol{x}, t)$.

§4 空间反射

空间反射是只将参考系的三个空间轴反向的变换 (使右 (左) 手坐标架变成左 (右) 手坐标架), 于是在参考系 K 中坐标为 x 的点相对于由空间反射而成的参考系 K' 的坐标是如下的 x'

$$x'^0 = x^0, \quad x'^k = -x^k, \tag{71}$$

即

$$\Lambda_0^0 = 1, \ \Lambda_k^j = -\delta_{jk}, \ \Lambda_k^0 = \Lambda_0^k = 0. \tag{72}$$

再设在 K 中由 ψ 描写的运动过程在 K' 中由 ψ' 描写，则相同时空点的 $\psi'(x')$ 与 $\psi(x)$ 的关系如下

$$\psi'(x') = S_p\psi(x), \tag{73}$$

与正常洛伦兹变换的情形相似，为了保证 Dirac 方程对于空间反射的协变性，S_p 应满足如下的方程式

$$S_p^{-1}\gamma^\mu S_p = \Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu . \tag{74}$$

把 (72) 式代进来得

$$S_p^{-1}\gamma^0 S_p = \gamma^0 , \quad S_p^{-1}\gamma^k S_p = -\gamma^k . \tag{75}$$

由此能够把 S_p 确定到一个任意系数

$$S_p = \eta_p \gamma^0, \tag{76}$$

其中 η_p 与 γ^μ 无关，把这个系数限制为相因子就可以使 S_p 是幺正矩阵，即

$$\eta_p^* \eta_p = 1, \tag{77}$$

$$S_p^\dagger = S_p^{-1}. \tag{78}$$

其次，取 (76) 式的复共轭，有

$$S_p^* = \eta_p^* (\gamma^0)^* = \eta_p^* B \gamma^0 B^{-1} ,$$

故

$$B^{-1} S_p^* B = \eta_p^* \eta_p^{-1} S_p . \tag{79}$$

这表明，再引入像 (47) 式那样的补充条件也是允许的 (这将把 η_p 限制为 ± 1)，不过现在的 Λ 是固定的，S_p 满足的方程式及补充条件都不存在向恒等洛伦兹变换的情形连续过渡的问题，所以也允许引入不同于 (47) 式的补充条件，这里不作进一步的讨论.

在空间反射下，$\overline{\psi}(x)$ 的变换规则如下

$$\overline{\psi'}(x') = \widetilde{\psi'}^*(x')\gamma^0 = \widetilde{\psi}^* S_p^\dagger \gamma^0,$$

即

$$\overline{\psi'}(x') = \overline{\psi}(x) S_p^{-1}. \tag{80}$$

§5　由 $\psi(x), \overline{\psi}(x)$ 及 γ^μ 组成的张量

对应于 γ^μ 的 16 种线性独立的积，可做成如下的五类张量：

标量 (S)：　$\overline{\psi}(x)\psi(x)$.

矢量 (V)：　$\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$.

反对称张量 (T)：$\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\gamma^\nu\psi(x)$　　$(\mu \neq \nu)$.

赝标量 (P)：　$\overline{\psi}(x)\gamma_5\psi(x)$ $(\gamma_5 = \mathrm{i}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3)$.

赝矢量 (A)：　$\overline{\psi}(x)\gamma_5\gamma^\mu\psi(x)$.

这些量在正常洛伦兹变换下和空间反射下的性质如下：

$$\overline{\psi'}(x')\psi'(x') = \overline{\psi}(x)\psi(x), \tag{81}$$

$$\overline{\psi'}(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \Lambda^\mu_\nu\overline{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x), \tag{82}$$

$$\overline{\psi'}(x')\gamma^\mu\gamma^\nu\psi'(x') = \Lambda^\mu_\lambda\Lambda^\nu_\sigma\overline{\psi}(x)\gamma^\lambda\gamma^\sigma\psi(x) \quad (\mu \neq \nu), \tag{83}$$

$$\overline{\psi'}(x')\gamma_5\psi'(x') = (\det\Lambda)\overline{\psi}(x)\gamma_5\psi(x), \tag{84}$$

$$\overline{\psi'}(x')\gamma_5\gamma^\mu\psi'(x') = (\det\Lambda)\Lambda^\mu_\nu\overline{\psi}(x)\gamma_5\gamma^\nu\psi(x), \tag{85}$$

其中 x' 表示 $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$. (81) 及 (82) 式是显然的，下面来证明其他变换式. 由 (38) 式有 $S(\Lambda)^{-1}\gamma^\mu\gamma^\nu S(\Lambda) = \Lambda^\mu_\lambda\Lambda^\nu_\sigma\gamma^\lambda\gamma^\sigma$. 而右边的 λ, σ 相同的项为 (根据 (28) 式)

$$\sum_\lambda \Lambda^\mu_\lambda\Lambda^\nu_\lambda g^{\lambda\lambda} = \Lambda^\mu_\lambda\Lambda^\nu_\sigma g^{\lambda\sigma} = g^{\mu\nu},$$

可见，$\mu \neq \nu$ 的 $\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\gamma^\nu\psi(x)$ 组成反对称张量. 为了明显地剔除 $\mu = \nu$ 的成分，可将此张量改写为

$$\overline{\psi}(x)\frac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu)\psi(x)\,.$$

其次，考虑下式：

$$S(\Lambda)^{-1}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 S(\Lambda) = \Lambda^0_\mu\Lambda^1_\nu\Lambda^2_\lambda\Lambda^3_\sigma\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\lambda\gamma^\sigma,$$

这里不必考虑等号右边的指标 $\mu\nu\lambda\sigma$ 发生重复的项，例如，当 $\mu\nu$ 重复时，就出现一个因子 $\Lambda^0_\mu\Lambda^1_\nu g^{\mu\nu}$，它显然等于零，因此每个有贡献的项中的 $\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\lambda\gamma^\sigma$ 经过重排之后都是 $\pm\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$. 计及重排引起的正负号就有

$$\Lambda^0_\mu\Lambda^1_\nu\Lambda^2_\lambda\Lambda^3_\sigma\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\lambda\gamma^\sigma = \gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3(\det\Lambda),$$

故

$$S(\Lambda)^{-1}\gamma_5 S(\Lambda) = \gamma_5(\det\Lambda). \tag{86}$$

由此可得出 (84) 式. 对于正常洛伦兹变换，Λ 的行列式是 1，这时 $\overline{\psi}(x)\gamma_5\psi(x)$ 像标量一样地变换，但是在空间反射下，$\det\Lambda$ 是 -1，因此 $\overline{\psi}(x)\gamma_5\psi(x)$ 被称为赝标量. 其次，从 (86) 式还可直接看出 (85) 式. 也是根据变换式中的因子 $\det\Lambda$, $\overline{\psi}(x)\gamma_5\gamma^\mu\psi(x)$ 被称为赝矢量.

§6 时 间 反 演

对于原来的参考系 K 而言坐标为 x 的点，在经时间轴反向而成的参考系 K' 中的坐标是如下的 x'

$$x'^0 = -x^0, \quad x'^k = x^k. \tag{87}$$

相应的 Λ 矩阵为

$$\Lambda^0_0 = -1, \quad \Lambda^j_k = \delta_{jk}, \quad \Lambda^0_k = \Lambda^k_0 = 0. \tag{88}$$

设在 K 中由 ψ 描写的物理过程在 K' 中由 ψ' 描写，而相同时空点的 $\psi'(x')$ 与 $\psi(x)$ 的关系为

$$\psi'(x') = T\psi(x). \tag{89}$$

这相当于

$$\psi'(\boldsymbol{x},t)=T\psi(\boldsymbol{x},-t). \tag{90}$$

由于 T 代表反线性变换，我们把它写成一个特殊的反线性算符 θ 与另一个矩阵 U 的积

$$T=\theta U, \tag{91}$$

其中 θ 作用于 ψ 时，等于对 ψ 取复共轭，即

$$\theta\psi=\psi^*, \tag{92}$$

故

$$T\psi=U^*\psi^*, \tag{93}$$

$$\theta^2=1. \tag{94}$$

由 (89) 及 (90) 式有

$$\psi(x)=T^{-1}\psi'(x')=U^{-1}\theta\psi'(x'),$$

代入 (25) 式得出

$$\left\{\mathrm{i}\gamma^\mu\left(\partial_\mu+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_\mu(x)\right)-\frac{mc}{\hbar}\right\}U^{-1}\theta\psi'(x')=0\,,$$

或

$$\left\{-\mathrm{i}\theta U\gamma^\mu\left(\partial_\mu+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_\mu(x)\right)U^{-1}\theta-\frac{mc}{\hbar}\right\}\psi'(x')=0\,.$$

可见，为了保证 Dirac 方程在时间反演下是协变的，矩阵 U 应满足如下的条件

$$\theta U\gamma^\mu\left(\partial_\mu+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_\mu(x)\right)U^{-1}\theta=-\gamma^\mu\left(\partial'_\mu+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A'_\mu(x')\right).$$

注意 $(\Phi,\boldsymbol{A})$ 在时间反演下的变换式是

$$\Phi'(x')=\Phi(x),\quad \boldsymbol{A}'(x')=-\boldsymbol{A}(x),$$

得

$$\theta U\gamma^{\mu}\Big(\partial_{\mu}+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{\mu}(x)\Big)U^{-1}\theta$$

$$=-\gamma^{0}\Big(-\partial_{0}+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{0}(x)\Big)-\sum_{k}\gamma^{k}\Big(\partial_{k}-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{k}(x)\Big)\,.$$

故

$$U\gamma^{\mu}\Big(\partial_{\mu}+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{\mu}(x)\Big)U^{-1}$$

$$=-(\gamma^{0})^{*}\Big(-\partial_{0}-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{0}(x)\Big)-\sum_{k}(\gamma^{k})^{*}\Big(\partial_{k}+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{k}(x)\Big)\,.$$

这要求

$$U\gamma^{0}U^{-1}=(\gamma^{0})^{*},\quad U\gamma^{k}U^{-1}=-(\gamma^{k})^{*},$$

即

$$(U\gamma^{0})\gamma^{\mu}(U\gamma_{0})^{-1}=(\gamma^{\mu})^{*}. \tag{95}$$

由此能够把 U 确定到一个与 γ^{μ} 无关的任意系数，故

$$U\propto B\gamma^{0}. \tag{96}$$

因此可以把 U 限制为幺正矩阵，这时有

$$U=\lambda_{u}\gamma^{1}\gamma^{3},\quad |\lambda_{u}|=1, \tag{97}$$

$$T=\theta U=\lambda_{u}^{*}(\gamma^{1})^{*}(\gamma^{3})^{*}\theta=\lambda_{u}^{*}\gamma^{1}\gamma^{3}\theta. \tag{98}$$

由此有

$$T^{2}=\gamma^{1}\gamma^{3}\theta\theta\gamma^{1}\gamma^{3}=\gamma^{1}\gamma^{3}\gamma^{1}\gamma^{3}=-1. \tag{99}$$

借助 U 的转置可决定 $\overline{\psi}$ 的变换式. 由

$$\overline{\psi'}(x')=\widetilde{\psi'}^{*}(x')\gamma^{0}\,,$$

及

$$\psi'(x') = U^* \psi^*(x)\,,$$

得

$$\overline{\psi'}(x') = (\widetilde{\psi}^*(x)\widetilde{U}^*)^* \gamma^0\,,$$

即

$$\overline{\psi'}(x') = \widetilde{\psi}(x)\widetilde{U}\gamma^0\,. \tag{100}$$

现在举例说明如何求出前面的五类张量在时间反演下的变换规则. 由 (89) 及 (100) 式有

$$\overline{\psi'}(x')\psi'(x') = \widetilde{\psi}(x)\widetilde{U}\gamma^0\theta U\psi(x) = \widetilde{\psi}(x)\theta U^{-1}(\gamma^0)^* U\psi(x)$$

$$= (\widetilde{\psi}^*(x)U^{-1}(\gamma^0)^* U\psi(x))^*\,.$$

借助矩阵的厄米共轭运算有

$$(\widetilde{\psi}^*(x)U^{-1}(\gamma^0)^* U\psi(x))^* = \widetilde{\psi}^*(x)U^{-1}(\gamma^{0\dagger})^* U\psi(x)$$

$$= \widetilde{\psi}^*(x)U^{-1}(\gamma^0)^* U\psi(x)\,.$$

由于 U 与 $B\gamma^0$ 只差一个常系数，故

$$U^{-1}(\gamma^0)^* U = \gamma^0 B^{-1}(\gamma^0)^* B\gamma^0 = \gamma^0\gamma^0\gamma^0 = \gamma^0,$$

$$\overline{\psi'}(x')\psi'(x') = \overline{\psi}(x)\psi(x). \tag{101}$$

类似地， $\overline{\psi'}(x')\gamma^\mu\psi'(x')$ 可表示为

$$\begin{aligned}\widetilde{\psi}\widetilde{U}\gamma^0\gamma^\mu\theta U\psi(x) &= \widetilde{\psi}(x)\theta U^{-1}(\gamma^0\gamma^\mu)^* U\psi(x)\\ &= (\widetilde{\psi}^*(x)U^{-1}(\gamma^0\gamma^\mu)^* U\psi(x))^*\\ &= \widetilde{\psi}^*(x)U^{-1}(\gamma^{\mu\dagger}\gamma^0)^* U\psi(x)\\ &= \widetilde{\psi}^*(x)U^{-1}(\gamma^0\gamma^\mu)^* U\psi(x),\end{aligned}$$

其中的 UU^{-1} 可以换成 $B\gamma^0$ 及 $\gamma^0 B^{-1}$，故

$$U^{-1}(\gamma^0\gamma^\mu)^* U = \gamma^0 B^{-1}(\gamma^0\gamma^\mu)^* B\gamma^0 = \gamma^0(\gamma^0\gamma^\mu)\gamma^0,$$

$$\overline{\psi'}(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \overline{\psi}(x)\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0\psi(x). \tag{102}$$

其他量的变换式也可按同样的方法求出，下面列出结果：

$$\begin{aligned}
\overline{\psi'}(x')\psi'(x') &= \overline{\psi}(x)\psi(x),\\
\overline{\psi'}(x')\gamma^0\psi'(x') &= \overline{\psi}(x)\gamma^0\psi(x),\\
\overline{\psi'}(x')\gamma^k\psi'(x') &= -\overline{\psi}(x)\gamma^k\psi(x),\\
\overline{\psi'}(x')\gamma^0\gamma^k\psi'(x') &= \overline{\psi}(x)\gamma^0\gamma^k\psi(x),\\
\overline{\psi'}(x')\gamma^j\gamma^k\psi'(x') &= -\overline{\psi}(x)\gamma^j\gamma^k\psi(x),\\
\overline{\psi'}(x')\gamma_5\psi'(x') &= -\psi(x)\gamma_5\psi(x),\\
\overline{\psi'}(x')\gamma_5\gamma^0\psi'(x') &= \psi(x)\gamma_5\gamma^0\psi(x),\\
\overline{\psi'}(x')\gamma_5\gamma^k\psi'(x') &= -\psi(x)\gamma_5\gamma^k\psi(x).
\end{aligned}$$

这里提醒一下，本书在本章 §11 之前，Dirac 波函数的分量是当作普通函数看待的，其时间反演变换式不能直接过渡到量子场论的算符公式. 例如说，如果将 (89), (100) 看成是算符公式，就无法得出 (101) 和 (102) 式.

§7 平面波解. 库仑中心场中的电子态. 负能态问题

7.1 平面波解

自由粒子具有一定动量和能量的 Dirac 波函数是如 (1) 式所示的四分量波函数：

$$\psi(x) = u(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)/\hbar}, \tag{103}$$

能量 E 是哈密顿量 H 的本征值，即

$$H\psi(x) = E\psi(x), \tag{104}$$

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + mc^2\beta, \tag{105}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 是动量算子. 把 $\boldsymbol{\alpha}$ 矩阵的表达式 (14) 代入，有

$$H = \begin{pmatrix} mc^2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & -mc^2 \end{pmatrix}. \tag{106}$$

由于 Dirac 粒子有半个单位的自旋，所以在一定的动量及能量之下，有两个独立状态，我们可以用自旋在动量方向的投影来标记这两个状态. 这是因为 $\vec{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$ 与 $\hat{\boldsymbol{p}}$, H 都是对易的. 为了证明这一点，把 $\vec{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$ 写成

$$\vec{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \end{pmatrix}. \tag{107}$$

由此有

$$H(\vec{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) = (\vec{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})H = \begin{pmatrix} mc^2\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & c\hat{\boldsymbol{p}}^2 \\ c\hat{\boldsymbol{p}}^2 & -mc^2\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \end{pmatrix}.$$

(103) 式中 $\psi(x)$ 的形式已保证了它是 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的本征函数，它同时又是 H 及 $\vec{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$ 的本征函数就意味着

$$\begin{pmatrix} mc^2 - E & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & -mc^2 - E \end{pmatrix} u(\boldsymbol{p}) = 0\,, \tag{108}$$

$$\Sigma_e u(\boldsymbol{p}) = \pm u(\boldsymbol{p}), \tag{109}$$

其中

$$\Sigma_e = \vec{\Sigma}\cdot\boldsymbol{e}\,, \tag{110}$$

$$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{p}/|\boldsymbol{p}|\,. \tag{111}$$

能量本征值 E 由方程组 (108) 有非零解的条件给出，即

$$\det\begin{pmatrix} mc^2-E & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & -mc^2-E \end{pmatrix}=0,$$

或

$$(m^2c^4+c^2|\boldsymbol{p}|^2-E^2)^2=0.$$

对于一定的 $\boldsymbol{p}$, 有两种 E 值，即 $|E|$ 与 $-|E|$，而

$$|E|=\sqrt{m^2c^4+c^2|\boldsymbol{p}|^2}, \tag{112}$$

对于一定的 $\boldsymbol{p}$,E, 有两种 Σ_e 值，即 1 与 -1. 因此在一定 $\boldsymbol{p}$ 下有四个独立状态. 关于负能态在物理上引起什么问题，在后面再讨论.

由 Σ_e 的两种值标记的正能量的两个态 ψ_{I} 和 ψ_{II} 以及负能量的两个态 ψ_{III} 和 ψ_{IV} 的性质如下表所示.

	ψ_{I}	ψ_{II}	ψ_{III}	ψ_{IV}
$\boldsymbol{p}$	$\boldsymbol{p}$	$\boldsymbol{p}$	$\boldsymbol{p}$	$\boldsymbol{p}$
H	$\|E\|$	$\|E\|$	$-\|E\|$	$-\|E\|$
Σ_e	$+1$	-1	$+1$	-1

为了便于写出 $u_{\text{I}}(\boldsymbol{p}),u_{\text{II}}(\boldsymbol{p}),u_{\text{III}}(\boldsymbol{p}),u_{\text{IV}}(\boldsymbol{p})$ 的表达式，用 (θ,φ) 描写 $\boldsymbol{p}$ 的方向，即

$$\left.\begin{aligned} p_x &= |\boldsymbol{p}|\sin\theta\cos\varphi\,, \\ p_y &= |\boldsymbol{p}|\sin\theta\sin\varphi\,, \\ p_z &= |\boldsymbol{p}|\cos\theta\,. \end{aligned}\right\} \tag{113}$$

于是

$$\sigma_e=D(g_0)\sigma_zD(g_0)^{\dagger}\,, \tag{114}$$

其中

$$g_0 = g(z,\varphi)g(y,\theta), \tag{115}$$

$$D(g_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sigma_z\frac{\varphi}{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sigma_y\frac{\theta}{2}}. \tag{116}$$

这个 g_0 即是把 z 轴方向变到 e 方向的一个转动：

$$\boldsymbol{e} = g_0\,\boldsymbol{z}^0. \tag{117}$$

由 (114) 式有

$$\Sigma_e = \begin{pmatrix} D(g_0)\sigma_z D(g_0)^\dagger & 0 \\ 0 & D(g_0)\sigma_z D(g_0)^\dagger \end{pmatrix}. \tag{118}$$

因此，(109) 式的两类解的一般形式为

$$u\uparrow(\boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} A\chi_+ \\ B\chi_+ \end{pmatrix} \quad (\Sigma_e \to +1), \tag{119}$$

$$u\downarrow(\boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} A'\chi_- \\ B'\chi_- \end{pmatrix} \quad (\Sigma_e \to -1), \tag{120}$$

其中 A, B, A', B' 是任意常数，$\chi_\pm$ 的定义是

$$\chi_+(\boldsymbol{p}) = D(g_0)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{121a}$$

$$\chi_-(\boldsymbol{p}) = D(g_0)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{121b}$$

显然

$$\sigma_e\chi_\pm(\boldsymbol{p}) = \pm\chi_\pm(\boldsymbol{p}), \tag{122}$$

把 (119), (120) 代回 (108) 式中有

$$\text{(i)}\quad (c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})A_1\chi_+ - (mc^2 + |E|)B_1\chi_+ = 0,$$

$$\text{(ii)}\quad (c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})A_2\chi_- - (mc^2+|E|)B_2\chi_- = 0,$$

$$\text{(iii)}\quad (mc^2+|E|)A_3\chi_+ + (c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})B_3\chi_+ = 0,$$

$$\text{(iv)}\quad (mc^2+|E|)A_4\chi_- + (c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})B_4\chi_- = 0.$$

利用 (122) 式化简，并按 $u(\boldsymbol{p})^\dagger u(\boldsymbol{p}) = 1$ 归一，最后得到

$$u_{\text{I}}(\boldsymbol{p}) = \sqrt{\frac{mc^2+|E|}{2|E|}}\begin{pmatrix} \chi_+(\boldsymbol{p}) \\ \frac{c|\boldsymbol{p}|}{mc^2+|E|}\chi_+(\boldsymbol{p}) \end{pmatrix}, \tag{123}$$

$$u_{\text{II}}(\boldsymbol{p}) = \sqrt{\frac{mc^2+|E|}{2|E|}}\begin{pmatrix} \chi_-(\boldsymbol{p}) \\ \frac{-c|\boldsymbol{p}|}{mc^2+|E|}\chi_-(\boldsymbol{p}) \end{pmatrix}, \tag{124}$$

$$u_{\text{III}}(\boldsymbol{p}) = \sqrt{\frac{mc^2+|E|}{2|E|}}\begin{pmatrix} \frac{-c|\boldsymbol{p}|}{mc^2+|E|}\chi_+(\boldsymbol{p}) \\ \chi_+(\boldsymbol{p}) \end{pmatrix}, \tag{125}$$

$$u_{\text{IV}}(\boldsymbol{p}) = \sqrt{\frac{mc^2+|E|}{2|E|}}\begin{pmatrix} \frac{c|\boldsymbol{p}|}{mc^2+|E|}\chi_-(\boldsymbol{p}) \\ \chi_-(\boldsymbol{p}) \end{pmatrix}. \tag{126}$$

利用 $D(g_0)$ 的矩阵，可将 $\chi_\pm(\boldsymbol{p})$ 表示为

$$\chi_+(\boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{1}{2}\theta \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix},$$

$$\chi_-(\boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{1}{2}\theta \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}.$$

7.2 库仑中心场中的电子态

电子在正的点电荷 $Z|e|$ 产生的库仑场中运动的哈密顿量为

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + mc^2\beta + V(r), \tag{127}$$

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \tag{128}$$

求这种哈密顿量的本征态，相当于假定原子核固定于坐标原点而求类氢原子的本征态. 这个假定造成一定的误差，但可以把电子质量 m 换成相应的折合质量而使误差大为缩小.

对于哈密顿量 (127)，总角动量及宇称都是守恒量，这些量的算符是

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \frac{1}{2}\vec{\Sigma}, \tag{129}$$

$$\mathcal{P} = \beta\Pi, \tag{130}$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 及 Π 代表电子轨道运动的角动量和宇称算符.

$\widehat{\mathcal{P}}$, $\boldsymbol{J}^2$ 及 J_z 的共同本征函数可写成

$$\psi_{P'JM} = \begin{pmatrix} \frac{F(r)}{r}\mathscr{Y}_{lJM} \\ \\ \frac{\mathrm{i}G(r)}{r}\mathscr{Y}_{l'JM} \end{pmatrix}, \tag{131}$$

其中

$$\begin{cases} l = J \pm 1/2, \\ l' = J + (J - l) = 2J - l\,, \end{cases} \tag{132}$$

$$\mathscr{Y}_{lJM} = \sum_{mm_s} \mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\chi_{m_s}\langle lm\tfrac{1}{2}m_s|JM\rangle, \tag{133}$$

χ_{m_s} 是 σ_z 的两分量本征“函数”，即

$$\sigma_z\chi_{m_s} = 2m_s\chi_{m_s} \quad (m_s = \pm 1/2)\,. \tag{134}$$

以 $\widehat{\mathcal{P}}$ 作用于 (131) 式，有

$$\widehat{\mathcal{P}}\psi_{P'JM} = \beta \begin{pmatrix} (-1)^l\frac{F(r)}{r}\mathscr{Y}_{lJM} \\ \\ (-1)^{l'}\frac{\mathrm{i}G(r)}{r}\mathscr{Y}_{l'JM} \end{pmatrix},$$

即

$$\widehat{\mathcal{P}}\psi_{P'JM}=\begin{pmatrix}(-1)^{l}\dfrac{F(r)}{r}\mathscr{Y}_{lJM}\\ \\ (-1)^{l'+1}\dfrac{\mathrm{i}G(r)}{r}\mathscr{Y}_{l'JM}\end{pmatrix}.$$

由于 $2J+1$ 是偶数，故 $(-1)^{l'+1}=(-1)^{l}$，即

$$\widehat{\mathcal{P}}\psi_{P'JM}=P'\psi_{P'JM}, \tag{135}$$

$$P'=(-1)^{l}.$$

把 (131) 式中的 l 写成 $J+\frac{\lambda}{2}$，并把 $\psi_{P'JM}$ 写成 $\psi_{\lambda JM}$，则以上各式变为

$$\psi_{\lambda JM}=\begin{pmatrix}\dfrac{F(r)}{r}\mathscr{Y}_{lJM}\\ \\ \dfrac{\mathrm{i}G(r)}{r}\mathscr{Y}_{l'JM}\end{pmatrix}, \tag{136}$$

$$\left.\begin{aligned}l&=J+\frac{\lambda}{2}\quad(\lambda=\pm1),\\ l'&=J-\frac{\lambda}{2},\end{aligned}\right\} \tag{137}$$

$$\widehat{\mathcal{P}}\psi_{\lambda JM}=(-1)^{J+\frac{\lambda}{2}}\psi_{\lambda JM}. \tag{138}$$

径向函数 $F(r)$, $G(r)$ 以及能量本征值由 H 的本征值方程决定

$$H\psi_{\lambda JM}=E\psi_{\lambda JM}. \tag{139}$$

关于 H 中的 $\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}}$ 可用如下的方法处理：

$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})=(\vec{\Sigma}\cdot\boldsymbol{r})(\vec{\Sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})=\boldsymbol{r}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}}+\mathrm{i}\hbar\vec{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}.$$

令

$$\alpha_r=\frac{\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}}{r},$$

有

$$r\alpha_r(\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})=\hbar r\Big(-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial r}\Big)+\mathrm{i}\hbar\vec{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L},$$

或

$$(\alpha\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=\alpha_r\hbar\Big(-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\mathrm{i}}{r}\vec{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}\Big). \tag{140}$$

利用

$$\vec{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}=J(J+1)-\frac{3}{4}-\boldsymbol{L}^2$$

及 (137) 式，可求得

$$(\vec{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L})\psi_{\lambda JM}=-\psi_{\lambda JM}-\frac{\lambda}{2}(2J+1)\beta\psi_{\lambda JM}. \tag{141}$$

把 (140) 及 (141) 代回 (139) 式得到

$$\Big[\hbar c\Big(-\frac{\mathrm{i}}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\mathrm{i}\lambda}{r}\Big(J+\frac{1}{2}\Big)\beta\Big)\alpha_r+mc^2\beta+V(r)\Big]\psi_{\lambda JM}=E\psi_{\lambda JM}. \tag{142}$$

为了作进一步的化简，需要求出 $\alpha_r\psi_{\lambda JM}$ ，由 α_r 的定义有

$$\alpha_r\psi_{\lambda JM}=\begin{pmatrix}\frac{\mathrm{i}G(r)}{r}\sigma_r\mathscr{Y}_{l'JM}\\ \\ \frac{F(r)}{r}\sigma_r\mathscr{Y}_{lJM}\end{pmatrix}, \tag{143}$$

其中 l 与 l' 由 (137) 式决定，由于 α_r 与 β 反对易又与 Π 反对易，因而与 $\hat{\mathcal{P}}$ 是对易的，故

$$\hat{\mathcal{P}}\alpha_r\psi_{\lambda JM}=(-1)^{J+\frac{\lambda}{2}}\alpha_r\psi_{\lambda JM}. \tag{144}$$

这表明

$$\sigma_r\mathscr{Y}_{l'JM}=A\mathscr{Y}_{lJM}, \tag{145}$$

$$\sigma_r\mathscr{Y}_{lJM}=B\mathscr{Y}_{l'JM}, \tag{146}$$

其中 A 与 B 是与 θ,φ,M 无关的系数，可表示为

$$A=\int\mathscr{Y}^{\dagger}_{lJM}\sigma_r\mathscr{Y}_{l'JM}\mathrm{d}\Omega,$$

$$B=\int\mathscr{Y}^{\dagger}_{l'JM}\sigma_r\mathscr{Y}_{lJM}\mathrm{d}\Omega.$$

由 $\mathscr{Y}_{lJM}$ 的定义知道，A 与 B 都是实数，因此又有 $A=B$，如果再以 σ_r 作用于 (145) 式的两边，还可以看出 $AB=1$，可见 $A^2=1$，为了完全确定 A，可以在 (145) 式中令 $\theta=0$(这时 $\sigma_r\to\sigma_z$)，由此得出

$$A=B=-1. \tag{147}$$

因此 (143) 式给出

$$\alpha_r\psi_{\lambda JM}=\begin{pmatrix} -\frac{\mathrm{i}G(r)}{r}\mathscr{Y}_{lJM} \\ \\ -\frac{F(r)}{r}\mathscr{Y}_{l'JM} \end{pmatrix}. \tag{148}$$

代入 (142) 中，即得 $F(r)$ 与 $G(r)$ 满足的耦合微分方程

$$\Big[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\lambda(J+1/2)}{r}\Big]G(r)+\frac{1}{\hbar c}(mc^2-E+V(r))F(r)=0, \tag{149}$$

$$\Big[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\lambda(J+1/2)}{r}\Big]F(r)+\frac{1}{\hbar c}(-mc^2-E+V(r))G(r)=0. \tag{150}$$

对于非束缚态，能量 E 可取大于 mc^2 或小于 $-mc^2$ 的任意值. 对于束缚态，能量本征值可表示为

$$E(nJ)=\frac{mc^2}{\sqrt{1+\frac{Z^2(e^2/\hbar c)^2}{(n-\varepsilon_J)^2}}}, \tag{151}$$

其中

$$\varepsilon_J=\Big(J+\frac{1}{2}\Big)-\sqrt{\Big(J+\frac{1}{2}\Big)^2-Z^2\Big(\frac{e^2}{\hbar c}\Big)^2}, \tag{152}$$

$$n=1,2,3,\cdots \tag{153}$$

$$J=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\cdots,\Big(n-\frac{1}{2}\Big), \tag{154}$$

$$\lambda=\begin{cases} \pm1, & \text{当}J<n-\frac{1}{2}; \\ -1, & \text{当}J=n-\frac{1}{2}. \end{cases} \tag{155}$$

用于描写类氢原子的能级时，把电子质量换成折合质量 μ，变为

$$E(nJ)=\frac{\mu c^2}{\sqrt{1+\frac{Z^2(e^2/\hbar c)^2}{(n-\epsilon_J)^2}}}. \tag{156}$$

在非相对论量子力学中，类氢原子的能级完全由 n 决定，现在由一定 n 值标志的能级则随角动量 J 的值有所不同，这个现象叫做能级的精细结构，它是一种相对论效应，$(e^2/\hbar c)\approx 1/137$ 称为精细结构常数. 对于 $Z^2\ll(137)^2$ 的类氢原子，近似地有

$$E(nJ)\approx\mu c^2\left\{1-\frac{Z^2(e^2/\hbar c)^2}{2n^2}-\frac{Z^4(e^2/\hbar c)^4}{2n^4}\left(\frac{n}{J+1/2}-\frac{3}{4}\right)+\cdots\right\}, \tag{157}$$

其中第一项来自静止质量，第二项描写非相对论极限下类氢原子的能级 (与 c 无关)，第三项是描写精细结构的主要项. 这个结果与类氢原子的实验能级符合得很好.

不过，随着实验精确度的提高，又发现了这种理论结果与实验数据之间的差异. 这种差异在氢原子 $n=2$ 能级的精细结构上表现得非常明显. 在非相对论性理论中，氢原子的 $n=2$ 的三个能级 $2S_{1/2},2P_{1/2},2P_{3/2}$ 是重合的，根据由 Dirac 方程得出的上述公式，$J=3/2$ 的能级比 $J=1/2$ 的两个能级高一些，至于 $J=1/2$ 的两个能级则仍然是重合的. 但 Lamb 等人 (1947 年) 的实验结果指出，这两个能级之间有一定的距离，即 $2P_{1/2}$ 能级略低于 $2S_{1/2}$ 能级，这个现象称为兰姆移位 (Lamb shift). 它的理论解释已在量子电动力学中给出.

7.3 负能态问题

我们已经看到，自由电子除了具有能量高于 mc^2 的正能状态之外，还有低于 $-mc^2$ 的负能态. 在库仑中心场 $-Ze^2/r$ 中的电子，也具有低于 $-mc^2$ 的负能态. 这种负能态的存在引起物理

解释上的严重困难. 例如, 在电磁场干扰下, 电子可以向负能态跃迁. 由于能量没有最小值, 向较低态的跃迁将是无止境的. 这样, 稳定或准稳定的态都无法存在. 由于负能态引起的这一类困难称为负能困难, Dirac(1931 年) 为了避免这种困难, 提出了电子海的观念, 即假定物理上的真空状态相当于所有负能态都已按照泡利原理而全部填满, 正能态则完全空着. 这样的电子海不贡献能量、动量、电荷、引力作用等. 相应地物理上的单电子意味着除所有负能态均已填满之外, 有一个电子处在正能态, 能量、电荷、动量等都是由这个电子贡献的. 而且由于泡利原理的限制, 这个电子不会向负能态跃迁.

按照这样的电子海观念, 如果负能态中有一个态空着, 则这个空穴贡献一定的正能量、正电荷以及一些其他物理量. 例如, 当 ψ_{III} 态空着时, 效果上等于存在一个带正电的所谓正电子, 其能量为 $+|E|$, 电荷为 $+|e|$, 动量为 $-\boldsymbol{p}$, 等等. 一般地, 对于遵守 Dirac 方程的任何粒子而言, 空着的负能态就意味着反粒子. 如果由于相互作用使负能态中埋没着的粒子跃迁到正能态, 那就意味着正反粒子对的产生. 反之, 当正能态的粒子跃迁到某个空着的负能态时, 就发生正反粒子对的湮没. 在 Dirac 提出上述假定之后不久, 确实发现了正电子. 随后, 电子 - 正电子对的产生和湮没现象也在实验上观察到了, 这是物理学上的重大进展 (目前已经观察到多种反粒子).

在电子海的观念中, 电子是正面描述的对象, 而正电子则处于空穴的地位, 显得不十分自然. 不过我们也可以从正电子的 Dirac 方程出发, 把电子置于空穴的地位. 这样把两种描述方法合起来看, 电子与正电子的地位还是对等的.

然而, 电子海的观念本身就与 Dirac 方程作为单电子的薛定谔方程的观点不相符, 所以不应把这种理论结构推得太远. 但是, 它对于建立进一步的理论有极重要的指导作用.

§8 电荷共轭 (正反粒子共轭)

已经指出，把 Dirac 方程看作粒子的薛定谔方程时，相应的反粒子处在空穴的地位，也可以对反粒子作正面的描述而使粒子处在空穴的地位. 假设粒子是带电的，电荷为 e, 于是相应的反粒子的电荷是 $-e$，设 $\varphi(x)$ 是反粒子的 Dirac 波函数，故运动方程为

$$\left\{\mathrm{i}\gamma^{\mu}\left(\partial_{\mu}-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{\mu}(x)\right)-\frac{mc}{\hbar}\right\}\varphi(x)=0\,. \tag{158}$$

现在要建立一种联系正反粒子波函数的变换. 设 $\psi(x)$ 是粒子的波函数，而 $\psi^*(x)$ 被某矩阵 Γ 作用后变为反粒子的波函数，记为

$$\psi'(x)=\Gamma\psi^*(x), \tag{159}$$

把 $\psi(x)=(\Gamma^*)^{-1}\psi^{*\prime}(x)$ 代到方程 (25) 中得到

$$\left\{\mathrm{i}\gamma^{\mu}\left(\partial_{\mu}+\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{\mu}(x)\right)-\frac{mc}{\hbar}\right\}(\Gamma^*)^{-1}\psi^{*\prime}(x)=0,$$

取复共轭并用 Γ 乘后得出

$$\left\{-\mathrm{i}\Gamma(\gamma^{\mu})^*\Gamma^{-1}\left(\partial_{\mu}-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_{\mu}(x)\right)-\frac{mc}{\hbar}\right\}\psi'(x)=0\,.$$

为了变成 (158) 式的形式，Γ 必须满足

$$\Gamma(\gamma^{\mu})^*\Gamma^{-1}=-\gamma^{\mu},$$

即

$$\Gamma^{-1}\gamma^{\mu}\Gamma=-(\gamma^{\mu})^*. \tag{160}$$

这样的 Γ 是存在的并且能够确定到一个与 γ^{μ} 无关的系数. 注意 γ_5 与 γ^{μ} 反对易而且 $\gamma_5=\gamma_5^{-1}$，有

$$(\gamma^5\Gamma)^{-1}\gamma^{\mu}(\gamma^5\Gamma)=(\gamma^{\mu})^*,$$

可见 $\Gamma \propto \gamma_5 B^{-1} \propto \gamma^2$. 适当限制 Γ 的常系数可以使它是幺正矩阵，按习惯写成

$$\Gamma = \mathrm{i}\eta_c \gamma^2, \quad |\eta_c| = 1,$$

粒子的波函数 $\psi(x)$ 与反粒子波函数 $\Gamma\psi^*(x)$ 之间的变换称为电荷共轭或正反粒子共轭. 通常把 (159) 式写作

$$\psi'(x) = \eta_c C \widetilde{\overline{\psi}}(x), \tag{161}$$

其中

$$C = \mathrm{i}\gamma^2\gamma^0 . \tag{162}$$

容易证明，(161) 式的逆变换也是有同样的形式. 取 (161) 式的复共轭，注意 $(\gamma^2)^* = -\gamma^2$ 得出

$$\psi^{*\prime}(x) = (\mathrm{i}\eta_c \gamma^2 \psi^*(x))^* = \mathrm{i}\eta_c^* \gamma^2 \psi(x),$$

故

$$\psi(x) = \mathrm{i}\eta_c \gamma^2 \psi^{*\prime}(x) = \eta_c C \widetilde{\overline{\psi'}}(x). \tag{163}$$

§9 低 能 近 似

9.1 Dirac 波函数在低能极限下的大分量和小分量

这里讨论 Dirac 方程的正能解在低能极限下的性质. 先看平面波解，其一般形式是本章 § 7 中的 $\psi_{\mathrm{I}}(x)$ 与 $\psi_{\mathrm{II}}(x)$ 的叠加，因而可写成

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(x) = N \begin{pmatrix} \chi \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{mc^2+|E|}\chi \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-|E|t)/\hbar},$$

其中 χ 是两行单列阵，当能量接近于静止能量 mc^2 时，$c|\boldsymbol{p}| \ll mc^2$，所以 $\psi_{\boldsymbol{p}}(x)$ 的前两个分量是大分量，后两个分量是小分量.

在有电磁场时，哈密顿量为

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) + mc^2\beta + e\Phi\,,$$

即

$$H = \begin{bmatrix} mc^2 + e\Phi & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) & -mc^2 + e\Phi \end{bmatrix}.$$

令

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \Psi_a(x) \\ \Psi_b(x) \end{pmatrix}, \tag{164}$$

其中 $\Psi_a(x)$ 代表 $\psi(x)$ 的前两个分量，$\Psi_b(x)$ 代表后两个分量. 为了简便，考虑静止场的能量本征值方程

$$(mc^2 + e\Phi)\Psi_a + c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\Psi_b = E\Psi_a\,, \tag{165}$$

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\Psi_a - (mc^2 - e\Phi)\Psi_b = E\Psi_b\,. \tag{166}$$

令

$$W = E - mc^2,$$

则

$$e\Phi\Psi_a + c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\Psi_b = W\Psi_a\,, \tag{167}$$

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\Psi_a = (2mc^2 + W - e\Phi)\Psi_b\,, \tag{168}$$

由 (168) 式可把 Ψ_b 写成

$$\Psi_b = \frac{1}{2mc^2 + W - e\Phi}c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\Psi_a\,. \tag{169}$$

在低能极限下，$W, e\Phi, eA^k$ 以及 $c|\boldsymbol{p}|$ 都甚小于静止能量，因此 Ψ_a 是大分量，Ψ_b 是小分量. 如果在 (169) 式分母中只保留 $2mc^2$ 项，则

$$\Psi_b \approx \frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\Psi_a\,. \tag{170}$$

9.2 泡利方程. 电子的磁矩

利用近似公式 (170) 消去 (167) 中的小分量 Ψ_b, 可得大分量 Ψ_a 所遵从的本征值方程

$$\left\{\frac{1}{2mc}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2+e\Phi\right\}\Psi_a=W\Psi_a\,. \tag{171}$$

大括号内的算符是厄米的, 而且在现在的近似级别下 Ψ_a 的归一积分等于 $\int \mathrm{d}^3x\widetilde{\psi^*}(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)$, 与时间无关, 因此 (171) 式即是非相对论极限下的能量本征值方程, 哈密顿量算子可写成

$$H_{NR}=\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\Phi-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\vec{\mathcal{H}}\,, \tag{172}$$

其中 $\vec{\mathcal{H}}$ 代表 $\nabla\times\boldsymbol{A}$, 即由 $\boldsymbol{A}$ 决定的磁场强度. (172) 式正是泡利二分量理论中的哈密顿量, 方程式 (171) 就是泡利方程. 这里要强调的是, 这种结果是作为 Dirac 方程的极限推导出来的.

(172) 式的末项代表粒子的自旋磁矩与磁场的作用能, 这表明粒子的自旋磁矩算符是

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{s}}=\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}. \tag{173}$$

即是说, 带电的 Dirac 粒子的自旋磁矩与自旋角动量的比值等于轨道运动的磁矩与轨道角动量的比值的两倍, 磁矩值正好是一个玻尔磁子, 与电子及 μ 介子的实验值符合得很好. 这也是 Dirac 方程的重要成果之一. 电子和 μ 介子的磁矩的实验值分别是 $(1+a_{\mathrm{e}})\frac{e\hbar}{2mc}$ 和 $(1+a_{\mu})\frac{e\hbar}{2m'c}$, 其中

$$a_{\mathrm{e}}=1159652359(282)\times10^{-12},$$

$$a_{\mu}=1165922(9)\times10^{-9},$$

括号中的数字表示不确定部分, $a_{\mathrm{e}}\cdot e\hbar/2mc$ 及 $a_{\mu}\cdot e\hbar/2m'c$ 称为反常磁矩. 根据量子电动力学能够非常精确地计算出 a_{e} 及 a_{μ} 的

值. 但是质子磁矩的实验值近似地等于 $2.79\cdot|e|\hbar/2Mc$, 而且不带电的中子也具有 $\approx -1.91\cdot|e|\hbar/2Mc$ 的磁矩 (实验值), 这当然是由于这些粒子的内部结构造成的.

在非相对论极限下计算各种物理量时, 都是在适当阶段消去波函数中的小分量, 而用大分量和作用于大分量的算符来表示.

9.3 原子哈密顿量中的核自旋项

现在求出原子中一个电子与核自旋的作用项. 用 $\vec{\mathcal{M}}$ 代表核自旋的磁矩, 并假定原子核固定于坐标原点, 于是与 $\vec{\mathcal{M}}$ 相应的矢势是

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{N}}=\frac{\vec{\mathcal{M}}\times\boldsymbol{r}}{r^3}, \tag{174}$$

这使 (172) 式的哈密顿量含有如下两个附加项 (略去 $\vec{\mathcal{M}}$ 的二次项)

$$\begin{aligned}\Delta a&=-\frac{e}{2mc}(\widehat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}_{\mathrm{N}}+\boldsymbol{A}_{\mathrm{N}}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})\\&=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}_{\mathrm{N}}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}}=-\frac{e\hbar}{mc}\frac{\vec{\mathcal{M}}\cdot\boldsymbol{L}}{r^3},\end{aligned} \tag{175}$$

$$\Delta b=-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\vec{\mathcal{H}}_{\mathrm{N}}=-\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{s}}\cdot\vec{\mathcal{H}}_{\mathrm{N}}, \tag{176}$$

其中 $\vec{\mathcal{H}}_{\mathrm{N}}$ 代表 $\vec{\mathcal{M}}$ 产生的磁场的强度

$$\vec{\mathcal{H}}_{\mathrm{N}}=\nabla\times\boldsymbol{A}_{\mathrm{N}}, \tag{177}$$

以此代入 (176) 式化简后得出

$$\Delta b=-\frac{8\pi}{3}(\vec{\mathcal{M}}\cdot\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{s}})\delta(\boldsymbol{r})-\frac{1}{r^3}\{3(\vec{\mathcal{M}}\cdot\boldsymbol{r}^0)(\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{s}}\cdot\boldsymbol{r}^0)-\vec{\mathcal{M}}\cdot\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{s}}\}, \tag{178}$$

Δa 及 Δb 是原子的非相对论哈密顿量中描写能级的超精细结构的主要项.

9.4 在静电场中的自旋轨道耦合项和类 Darwin 项

在静电场情形，泡利哈密顿量变为不含自旋的哈密顿量

$$H_{NR} = \frac{\widehat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V, \tag{179}$$

$$V = e\Phi. \tag{180}$$

为了求出相对论修正，需要对 (169) 式作更精确的处理．令

$$\Psi_b \approx \frac{1}{2mc}\Big(1 + \frac{V-W}{2mc^2}\Big)\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}}\Psi_a\,, \tag{181}$$

以此代入 (167) 中得

$$\Big\{\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})^2 + \frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})(V-W)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}}) + V\Big\}\Psi_a = W\Psi_a\,. \tag{182}$$

这个方程不能直接看成修正形式的泡利方程，因为左边仍然含有 W，而在现在的近似级别下，不能忽略 Ψ_b 对 $\int \mathrm{d}^3x\widetilde{\psi}^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)$ 的贡献，所以 Ψ_a 的归一积分不是与时间无关的．准到 $(mc)^{-2}$ 项，有

$$\int \mathrm{d}^3x\widetilde{\psi}^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)$$

$$= \int \mathrm{d}^3x\widetilde{\Psi}_a^*(\boldsymbol{x},t)\Psi_a(\boldsymbol{x},t) + (2mc)^{-2}\int \mathrm{d}^3x\widetilde{\Psi}_a^*(\boldsymbol{x},t)\widehat{\boldsymbol{p}}^2\Psi_a(\boldsymbol{x},t).$$

因此，如下的 Ψ_s 具有与时间无关的归一积分

$$\Psi_s \propto \Big(1 + \frac{1}{8m^2c^2}\widehat{\boldsymbol{p}}^2\Big)\Psi_a\,. \tag{183}$$

利用

$$\Psi_a \propto \Big(1 - \frac{1}{8m^2c^2}\widehat{\boldsymbol{p}}^2\Big)\Psi_s\,, \tag{184}$$

可把 (182) 写成

$$\left\{\frac{1}{2m}\widehat{\boldsymbol{p}}^2+\frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})(V-W)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})+V\right\}\left(1-\frac{1}{8m^2c^2}\widehat{\boldsymbol{p}}^2\right)\Psi_s$$

$$=W\left(1-\frac{1}{8m^2c^2}\widehat{\boldsymbol{p}}^2\right)\Psi_s.$$

用 $\left(1-\widehat{\boldsymbol{p}}^2/(8m^2c^2)\right)$ 乘后变为

$$\left\{\frac{1}{2m}\widehat{\boldsymbol{p}}^2-\frac{1}{8m^3c^2}\widehat{\boldsymbol{p}}^4+\frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})(V-W)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})\right.$$

$$\left.+V-\frac{1}{8m^2c^2}\left(V\widehat{\boldsymbol{p}}^2+\widehat{\boldsymbol{p}}^2V\right)\right\}\Psi_s=W\left(1-\frac{1}{4m^2c^2}\widehat{\boldsymbol{p}}^2\right)\Psi_s\,,$$

即

$$\left\{\frac{1}{2m}\widehat{\boldsymbol{p}}^2-\frac{1}{8m^3c^2}\widehat{\boldsymbol{p}}^4+\frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})V(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})\right.$$

$$\left.+V-\frac{1}{8m^2c^2}\left(V\widehat{\boldsymbol{p}}^2+\widehat{\boldsymbol{p}}^2V\right)\right\}\Psi_s=W\Psi_s\,. \tag{185}$$

这就是修正的定态泡利方程，大括号内的算符是修正的哈密顿量. 即

$$H'_{NR}=H_{NR}-\frac{1}{8m^3c^2}\widehat{\boldsymbol{p}}^4+\frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})V(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})$$

$$-\frac{1}{8m^2c^2}\left(V\widehat{\boldsymbol{p}}^2+\widehat{\boldsymbol{p}}^2V\right).$$

利用

$$\left[V,\widehat{\boldsymbol{p}}^2\right]=\hbar^2(\Delta V)+2\mathrm{i}\hbar(\nabla V)\cdot\widehat{\boldsymbol{p}},$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})V=V(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})+\boldsymbol{\sigma}\cdot[\widehat{\boldsymbol{p}},V],$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})V(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\boldsymbol{p}})=V\widehat{\boldsymbol{p}}^2-\mathrm{i}\hbar(\nabla V)\cdot\widehat{\boldsymbol{p}}+\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla V)\times\widehat{\boldsymbol{p}},$$

得到

$$H'_{NR}-H_{NR}=-\frac{1}{8m^3c^2}\widehat{\boldsymbol{p}}^4+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla V)\times\widehat{\boldsymbol{p}}+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V\,, \tag{186}$$

此式显示出三个修正项，第一项是对动能 $\widehat{\boldsymbol{p}}^2/2m$ 的修正，第二项是自旋轨道耦合项，即是运动的磁矩与电场的作用能，最末项只对于存在产生场 Φ 的电荷的点才不为零. 例如在点电荷 $Z|e|$ 产生的库仑场下，$\Delta V = 4\pi Ze^2\delta^3(\boldsymbol{r})$(C.G.Darwin, 1928 年).

对于中心场，代入

$$\nabla V(r) = \boldsymbol{r}^0 \frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r},$$

(186) 式变为

$$H'_{NR} = H_{NR} - \frac{1}{8m^3c^2}\widehat{\boldsymbol{p}}^4 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V, \quad (187)$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 是以 $\hbar$ 为单位的轨道角动量算符，即

$$\boldsymbol{L} = -\mathrm{i}\boldsymbol{r}\times\nabla.$$

上面假定了 $|W-V| \ll 2mc^2$，而把 $(1+(W-V)/2mc^2)^{-1}$ 展开，实际上在原子的 S 态，电子有较大的机会接近原子核从而破坏这个条件. 本来 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ 对 S 态没有贡献，但是当电子接近核时，$V(r)$ 具有 $-Ze^2/r$ 的形式，故 $V'(r)|\Psi|^2/r$ 的积分是发散的. 这时只要注意 $V'(r)$ 来自 $(1+(W-V)/2mc^2)^{-1}$ 的微商，而后一微商是有限的，就仍然可以保持自旋轨道耦合项的形式，同时规定它对原子的 S 态没有贡献.

§ 10　标量场的量子化

把相对论性场论量子化，意味着把粒子描写为场的量子而建立能够描述微观现象和处理粒子在相互作用中产生和消灭的理论. 本节和下一节只讨论自由标量场以及 Dirac 场的量子化.

所谓标量场除了指场函数在正常洛伦兹变换下保持不变之外，在通常情形还意味着，自由场的每个实分量 $\phi(x)$ 都有如下的

拉氏函数

$$L(\phi,\dot{\phi})=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\{\dot{\phi}^2(\boldsymbol{x},t)-c^2(\nabla\phi(\boldsymbol{x},t))^2-c^2\mu^2\phi^2(\boldsymbol{x},t)\}\,, \quad (188)$$

其中 μ 是取正值的参量，c 为光速. 如果场函数在空间反射下变号就称为赝标量场，下面将不作这样的区分. 首先讨论场函数只有一个实分量 $\phi(\boldsymbol{x},t)$ 的情形，这时称为实标量场，根据拉氏函数 (188), $\phi(\boldsymbol{x},t)$ 的值必定是普通的数而不能是互相反对易的量，所以它代表玻色场. 由这个拉氏函数求得的运动方程即是 Klein–Gordon 方程

$$\ddot{\phi}(\boldsymbol{x},t)=(c^2\nabla^2-c^2\mu^2)\phi(\boldsymbol{x},t), \quad (189)$$

定义与 ϕ 相应的正则动量

$$\Pi(\boldsymbol{x},t)\equiv\frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(\boldsymbol{x},t)}=\dot{\phi}(\boldsymbol{x},t)\,, \quad (190)$$

即可写出正则形式的运动方程

$$\dot{\phi}(\boldsymbol{x},t)=\frac{\delta H_c(\phi,\Pi)}{\delta\Pi(\boldsymbol{x},t)}\,, \quad (191a)$$

$$\dot{\Pi}(\boldsymbol{x},t)=-\frac{\delta H_c(\phi,\Pi)}{\delta\phi(\boldsymbol{x},t)}\,, \quad (191b)$$

其中哈密顿量 $H_c(\phi,\Pi)$ 为

$$H_c(\phi,\Pi)=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\{\Pi^2(\boldsymbol{x},t)+c^2(\nabla\phi(\boldsymbol{x},t))^2+c^2\mu^2\phi^2(\boldsymbol{x},t)\}\,. \quad (192)$$

在 (190) 及 (191) 式中的微商记号表示泛函微商，例如

$$\frac{\delta\phi(\boldsymbol{x}',t)}{\delta\phi(\boldsymbol{x},t)}=\delta(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}),$$

$$\frac{\delta\nabla'\phi(\boldsymbol{x}',t)}{\delta\phi(\boldsymbol{x},t)}=\nabla'\delta(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}).$$

为了便于与非相对论的二次量子化理论对比，再引入如下的复变量

$$\Phi(\boldsymbol{x},t)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\{(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{1/4}\phi(\boldsymbol{x},t)+\mathrm{i}(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{-1/4}\Pi(\boldsymbol{x},t)\}, \quad (193)$$

其中 $(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{1/4}$ 等算子的定义可借助平面波来给定，例如

$$(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{1/4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}=(c^2\mu^2+c^2k^2)^{1/4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}.$$

在本节和下一节，我们用 k 代表三维矢量 $\boldsymbol{k}$ 的长度 $|\boldsymbol{k}|$. (193) 式的复共轭给出

$$\Phi^*(\boldsymbol{x},t)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\{(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{1/4}\phi(\boldsymbol{x},t)-\mathrm{i}(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{-1/4}\Pi(\boldsymbol{x},t)\}, \quad (193')$$

ϕ 和 Π 可用 Φ 及 Φ^* 表示为

$$\phi(\boldsymbol{x},t)=\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{-1/4}\{\Phi^*(\boldsymbol{x},t)+\Phi(\boldsymbol{x},t)\}, \quad (194)$$

$$\Pi(\boldsymbol{x},t)=\mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{1/4}\{\Phi^*(\boldsymbol{x},t)-\Phi(\boldsymbol{x},t)\}. \quad (195)$$

由此可把 H_c 也看作 Φ^*,Φ 的泛函，故

$$\frac{\delta H_c(\Phi^*,\Phi)}{\delta\Phi^*(\boldsymbol{x},t)}$$

$$=\int \mathrm{d}^3x'\left\{\frac{\delta H_c(\phi,\Pi)}{\delta\phi(\boldsymbol{x}',t)}\frac{\delta\phi(\boldsymbol{x}',t)}{\delta\Phi^*(\boldsymbol{x},t)}+\int\frac{\delta H_c(\phi,\Pi)}{\delta\Pi(\boldsymbol{x}',t)}\frac{\delta\Pi(\boldsymbol{x}',t)}{\delta\Phi^*(\boldsymbol{x},t)}\right\}$$

$$=-\int \mathrm{d}^3x'\dot{\Pi}(\boldsymbol{x}',t)\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(c^2\mu^2-c^2\nabla'^2)^{-1/4}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

$$+\int \mathrm{d}^3x'\dot{\phi}(\boldsymbol{x}',t)\mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(c^2\mu^2-c^2\nabla'^2)^{1/4}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\mathrm{i}\hbar\dot{\Phi}(\boldsymbol{x},t)\,.$$

因此

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\Phi}(\boldsymbol{x},t)=\frac{\delta H_c(\Phi^*,\Phi)}{\delta\Phi^*(\boldsymbol{x},t)}, \tag{196}$$

而

$$H_c(\Phi^*,\Phi)=\int \mathrm{d}^3x\Phi^*(\boldsymbol{x},t)\big(\hbar\sqrt{c^2\mu^2-c^2\nabla^2}\big)\Phi(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{197}$$

(196) 式实际上是用复变量 $\Phi(\boldsymbol{x},t)$ 表示的正则方程，$\Phi(\boldsymbol{x},t)$ 同时代表了场的坐标和动量 (参看第三章 § 6 及第四章 §4), 在薛定谔绘景的量子条件和哈密顿量算符如下

$$\Phi(\boldsymbol{x})\to\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x})\,, \tag{198}$$

$$\Phi^*(\boldsymbol{x})\to\widehat{\Phi}^\dagger(\boldsymbol{x})\,, \tag{199}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x})=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{\Phi}^\dagger(\boldsymbol{x})=0\,, \tag{200}$$

$$\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x})\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x}')-\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x}')\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x})=0\,, \tag{201}$$

$$\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x})\widehat{\Phi}^\dagger(\boldsymbol{x}')-\widehat{\Phi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x})=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,, \tag{202}$$

$$\widehat{H}(\widehat{\Phi}^\dagger,\widehat{\Phi})=\int \mathrm{d}^3x\widehat{\Phi}^\dagger(\boldsymbol{x})\big(\hbar\sqrt{c^2\mu^2-c^2\nabla^2}\big)\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x})\,. \tag{203}$$

用 ϕ 和 Π 表示的量子条件则是

$$\widehat{\phi}(\boldsymbol{x})\widehat{\phi}(\boldsymbol{x}')-\widehat{\phi}(\boldsymbol{x}')\widehat{\phi}(\boldsymbol{x})=0, \tag{204}$$

$$\widehat{\Pi}(\boldsymbol{x})\widehat{\Pi}(\boldsymbol{x}')-\widehat{\Pi}(\boldsymbol{x}')\widehat{\Pi}(\boldsymbol{x})=0, \tag{205}$$

$$\widehat{\phi}(\boldsymbol{x})\widehat{\Pi}(\boldsymbol{x}')-\widehat{\Pi}(\boldsymbol{x}')\widehat{\phi}(\boldsymbol{x})=\mathrm{i}\hbar\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'), \tag{206}$$

$$\widehat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{x})=\widehat{\phi}(\boldsymbol{x}), \tag{207}$$

$$\widehat{\Pi}^\dagger(\boldsymbol{x})=\widehat{\Pi}(\boldsymbol{x}). \tag{208}$$

场的动量和角动量的经典表达式可借助时空对称性求出，结果可写成

$$\boldsymbol{P}=\int \mathrm{d}^3x\Phi^*(\boldsymbol{x},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\Phi(\boldsymbol{x},t), \tag{209}$$

$$\boldsymbol{G}=\int \mathrm{d}^3x\Phi^*(\boldsymbol{x},t)(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla)\Phi(\boldsymbol{x},t). \tag{210}$$

因此相应的算符是

$$\widehat{\boldsymbol{P}}=\int \mathrm{d}^3x\widehat{\Phi}^\dagger(\boldsymbol{x},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x},t), \tag{211}$$

$$\widehat{\boldsymbol{G}}=\int \mathrm{d}^3x\widehat{\Phi}^\dagger(\boldsymbol{x},t)(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla)\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x},t). \tag{212}$$

我们看到，借助 Φ 给出的力学量的表达式与量子条件都与自由玻色子的非相对论二次量子化理论相似 (参看第四章 §4)，只是代表非相对论情形的粒子动能的算符现在被算子 $\hbar\sqrt{c^2\mu^2-c^2\nabla^2}$ 代替，所以 $\widehat{\Phi}^\dagger(\boldsymbol{x},t)$ 是产生一个处在点 $\boldsymbol{x}$ 的量子的算符，$\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x},t)$ 是相应的消灭算符，场的量子是静止质量为 $\mu\hbar/c$ 的玻色子，单个量子在非二次量子化理论中的动量算子仍然是 $-\mathrm{i}\hbar\nabla$. (212) 式还表明，场的角动量完全来自量子的轨道运动，所以这种量子是自旋为零的粒子.

如果把 $\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x},t)$ 作傅里叶展开写成

$$\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3k\widehat{a}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{213}$$

则

$$\widehat{\Phi}^\dagger(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3k\widehat{a}^\dagger(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{213'}$$

$$\widehat{\phi}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3k\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}}\left(\widehat{a}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+\widehat{a}^\dagger(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right), \tag{214}$$

$$\widehat{\Pi}(\boldsymbol{x})=\frac{-\mathrm{i}}{(2\pi)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3k\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}}\left(\widehat{a}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+\widehat{a}^\dagger(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right), \tag{215}$$

其中

$$\omega_k = \sqrt{\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2 + (ck)^2}, \tag{216}$$

$$m = \frac{\mu\hbar}{c}. \tag{217}$$

量子条件和算符 $\widehat{H}, \widehat{\boldsymbol{P}}, \widehat{\boldsymbol{G}}$ 的表达式为

$$\left[\widehat{a}(\boldsymbol{k})\ ,\ \widehat{a}(\boldsymbol{k}')\right] = \left[\widehat{a}^{\dagger}(\boldsymbol{k})\ ,\ \widehat{a}^{\dagger}(\boldsymbol{k}')\right] = 0, \tag{218}$$

$$\left[\widehat{a}(\boldsymbol{k})\ ,\ \widehat{a}^{\dagger}(\boldsymbol{k}')\right] = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'), \tag{219}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{a}(\boldsymbol{k}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{a}^{\dagger}(\boldsymbol{k}) = 0, \tag{220}$$

$$\widehat{H} = \int \mathrm{d}^3k\left(\hbar\omega_k \widehat{a}^{\dagger}(\boldsymbol{k})\widehat{a}(\boldsymbol{k})\right), \tag{221}$$

$$\widehat{\boldsymbol{P}} = \int \mathrm{d}^3k\left(\hbar\boldsymbol{k}\ \widehat{a}^{\dagger}(\boldsymbol{k})\widehat{a}(\boldsymbol{k})\right), \tag{222}$$

$$\widehat{\boldsymbol{G}} = \int \mathrm{d}^3k\mathrm{d}^3k'\boldsymbol{G}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}')\widehat{a}^{\dagger}(\boldsymbol{k})\widehat{a}(\boldsymbol{k}')\,, \tag{223}$$

其中

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{224}$$

所以 $\widehat{a}^{\dagger}(\boldsymbol{k})$ 是产生一个能量为 $\hbar\omega_k$, 动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$ 的量子的算符，$\widehat{a}(\boldsymbol{k})$ 是相应的消灭算符.

借助算符 $\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x}), \widehat{a}^{\dagger}(\boldsymbol{k})$ 和 $\widehat{H}$ 可以把具有一定动量和能量的单个粒子在时刻 t 的薛定谔波函数表示为

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}, t) = \langle 0|\widehat{\Phi}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\widehat{H}t/\hbar}\widehat{a}^{\dagger}(\boldsymbol{k})|0\rangle,$$

其中 $|0\rangle$ 是没有粒子的态，满足 $\widehat{a}(\boldsymbol{k})|0\rangle = 0$，假定它是归一的，于是

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \omega_k t\right)}.$$

这是按 $\delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')$ 归一的波函数，它是 Klein–Gordon 方程的正频解. 负频解不解释为薛定谔波函数. 在以上的量子化方法中，时

间处在特殊地位，但是可以验证，由此形成的理论是与惯性参考系的选择无关的.

再来扼要讨论一下复标量场，这时场函数含有两个具有相同 μ 的实标量函数 $\phi_1(\boldsymbol{x},t)$ 及 $\phi_2(\boldsymbol{x},t)$，而且在自由场情形的拉氏函数是场 ϕ_1 与 ϕ_2 的拉氏函数之和，即场函数和拉氏函数可写成

$$\phi(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\phi_1(\boldsymbol{x},t)+\mathrm{i}\phi_2(\boldsymbol{x},t)\}, \tag{225}$$

$$\begin{aligned} &L(\phi,\dot{\phi}) \\ &=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\{\dot{\phi}_1^2(\boldsymbol{x},t)-c^2(\nabla\phi_1(\boldsymbol{x},t))^2-c^2\mu^2\phi_1^2(\boldsymbol{x},t)\} \\ &\quad+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\{\dot{\phi}_2^2(\boldsymbol{x},t)-c^2(\nabla\phi_2(\boldsymbol{x},t))^2-c^2\mu^2\phi_2^2(\boldsymbol{x},t)\}\,. \end{aligned} \tag{226}$$

显然 ϕ 也是玻色场，其运动方程也是 Klein–Gordon 方程

$$\ddot{\phi}(\boldsymbol{x},t)=(c^2\nabla^2-c^2\mu^2)\phi(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{227}$$

哈密顿量是场 ϕ_1 与 ϕ_2 的哈密顿量之和

$$\begin{aligned} &H_c(\phi_1,\phi_2,\Pi_1,\Pi_2) \\ &\quad=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\{\Pi_1^2(\boldsymbol{x},t)+c^2(\nabla\phi_1(\boldsymbol{x},t))^2+c^2\mu^2\phi_1^2(\boldsymbol{x},t)\} \\ &\qquad+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\{\Pi_2^2(\boldsymbol{x},t)+c^2(\nabla\phi_2(\boldsymbol{x},t))^2+c^2\mu^2\phi_2^2(\boldsymbol{x},t)\}\,, \end{aligned} \tag{228}$$

其中

$$\Pi_1(\boldsymbol{x},t)=\frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}_1(\boldsymbol{x},t)}=\phi_1(\boldsymbol{x},t)\,,$$

$$\Pi_2(\boldsymbol{x},t)=\frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}_2(\boldsymbol{x},t)}=\phi_2(\boldsymbol{x},t)\,.$$

量子化可以对两种场分别进行，令

$$\begin{aligned}&\Phi_1(\boldsymbol{x},t)\\&\quad=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left\{(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{1/4}\phi_1(\boldsymbol{x},t)+\mathrm{i}(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{-1/4}\Pi_1(\boldsymbol{x},t)\right\},\\&\Phi_2(\boldsymbol{x},t)\\&\quad=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left\{(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{1/4}\phi_2(\boldsymbol{x},t)+\mathrm{i}(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{-1/4}\Pi_2(\boldsymbol{x},t)\right\},\end{aligned}$$

则运动方程可以写成

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\Phi}_1(\boldsymbol{x},t)=\frac{\delta H_c(\Phi_1^*,\Phi_2^*,\Phi_1,\Phi_2)}{\delta\Phi_1^*(\boldsymbol{x},t)},$$

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\Phi}_2(\boldsymbol{x},t)=\frac{\delta H_c(\Phi_1^*,\Phi_2^*,\Phi_1,\Phi_2)}{\delta\Phi_2^*(\boldsymbol{x},t)}.$$

而

$$\begin{aligned}&H_c(\Phi_1^*,\Phi_2^*,\Phi_1,\Phi_2)\\&\quad=\int\mathrm{d}^3x\Phi_1^*(\boldsymbol{x},t)\left(\hbar\sqrt{c^2\mu^2-c^2\nabla^2}\right)\Phi_1(\boldsymbol{x},t)\\&\qquad+\int\mathrm{d}^3x\Phi_2^*(\boldsymbol{x},t)\left(\hbar\sqrt{c^2\mu^2-c^2\nabla^2}\right)\Phi_2(\boldsymbol{x},t).\end{aligned}$$

动量和角动量的表达式是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}&=\int\mathrm{d}^3x\Phi_1^*(\boldsymbol{x},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\Phi_1(\boldsymbol{x},t)\\&\quad+\int\mathrm{d}^3x\Phi_2^*(\boldsymbol{x},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\Phi_2(\boldsymbol{x},t),\\\boldsymbol{G}&=\int\mathrm{d}^3x\Phi_1^*(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{x}\times(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\Phi_1(\boldsymbol{x},t)\\&\quad+\int\mathrm{d}^3x\Phi_2^*(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{x}\times(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\Phi_2(\boldsymbol{x},t).\end{aligned}$$

在量子化之后，Φ_1^* 及 Φ_2^* 的算符 $\hat{\Phi}_1^\dagger(\boldsymbol{x}), \hat{\Phi}_2^\dagger(\boldsymbol{x})$ 分别是场 ϕ_1 及 ϕ_2 的产生一个处在点 $\boldsymbol{x}$ 的量子的算符，这两种场的量子都是质量为 $\mu\hbar/c$，自旋为 0 的玻色子.

当复场 $\phi(\boldsymbol{x},t)$ 作为一个整体经受 $U(1)$ 或 $O(2)$ 交换时，拉氏函数密度保持不变，这个变换可表示为

$$\phi(\boldsymbol{x},t) \to \phi'(\boldsymbol{x},t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\theta}\phi(\boldsymbol{x},t),$$

或

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \phi_1' \\ \phi_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix},$$

其中 θ 是与 $(\boldsymbol{x},t)$ 无关的任意角度. 相应于这个不变性，存在如下的连续方程 (也可根据运动方程来验证)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{x},t) + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0,$$

其中

$$\rho = \mathrm{i}\hbar\{\phi^*\dot{\phi} - \dot{\phi}\phi^*\},$$

$$\boldsymbol{j} = -\mathrm{i}\hbar c^2\{\phi^*\nabla\phi - (\nabla\phi^*)\phi\}.$$

因此 $\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\rho(\boldsymbol{x},t)$ 是守恒荷，它可表示为

$$Q = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\big\{(\Phi_1 + \mathrm{i}\Phi_2)^*(\Phi_1 + \mathrm{i}\Phi_2) - (\Phi_1 - \mathrm{i}\Phi_2)^*(\Phi_1 - \mathrm{i}\Phi_2)\big\}.$$

设 q 取 $+1$ 与 -1 两种值，并令

$$\Phi(q,\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\Phi_1(\boldsymbol{x},t) + \mathrm{i}q\Phi_2(\boldsymbol{x},t)\},$$

则

$$Q = \sum_q \int \mathrm{d}^3x\{q\Phi^*(q,\boldsymbol{x},t)\Phi(q,\boldsymbol{x},t)\},$$

$$H_c=\sum_q\int \mathrm{d}^3x\Phi^*(q,\boldsymbol{x},t)(\hbar\sqrt{c^2\mu^2-c^2\nabla^2})\Phi(q,\boldsymbol{x},t),$$

$$\boldsymbol{P}=\sum_q\int \mathrm{d}^3x\Phi^*(q,\boldsymbol{x},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\Phi(q,\boldsymbol{x},t),$$

$$\boldsymbol{G}=\sum_q\int \mathrm{d}^3x\Phi^*(q,\boldsymbol{x},t)(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla)\Phi(q,\boldsymbol{x},t),$$

$$\Phi(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(c^2\mu^2-c^2\nabla^2)^{-1/4}\{\Phi(1,\boldsymbol{x},t)+\Phi^*(-1,\boldsymbol{x},t)\},$$

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\Phi}(q,\boldsymbol{x},t)=\frac{\delta H_c(\Phi^*,\Phi)}{\delta\Phi^*(q,\boldsymbol{x},t)}.$$

量子条件可用 $\Phi(q,\boldsymbol{x},t)$ 及 $\Phi^*(q,\boldsymbol{x},t)$ 的算符表示为

$$\Phi(q,\boldsymbol{x},t)\to\hat{\Phi}(q,\boldsymbol{x}),$$

$$\Phi^*(q,\boldsymbol{x},t)\to\hat{\Phi}^\dagger(q,\boldsymbol{x}),$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\Phi}(q,\boldsymbol{x})=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\Phi}^\dagger(q,\boldsymbol{x})=0,$$

$$\hat{\Phi}(q,\boldsymbol{x})\hat{\Phi}(q',\boldsymbol{x}')-\hat{\Phi}(q',\boldsymbol{x}')\hat{\Phi}(q,\boldsymbol{x})=0,$$

$$\hat{\Phi}(q,\boldsymbol{x})\hat{\Phi}^\dagger(q',\boldsymbol{x}')-\hat{\Phi}^\dagger(q',\boldsymbol{x}')\hat{\Phi}(q,\boldsymbol{x})=\delta_{qq'}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}').$$

$\hat{\Phi}^\dagger(q,\boldsymbol{x})$ 是产生 ϕ 场的一个处在点 $\boldsymbol{x}$ 并且 Q 值等于 q 的量子的算符，$\hat{\Phi}(q,\boldsymbol{x})$ 是相应的消灭算符.

两种只以守恒荷的相反值相区别的粒子称为相反的粒子. 所以由两个具有相同 μ 的实场组成的复标量场的量子按照 q 值区分为相反的粒子，它们的质量为 $\mu\hbar/c$, 自旋为零. 例如 π^+ 与 π^- 介子就是这样的正反粒子，它们以相反的电荷相区别，$\overline{\mathrm{K}^0}$ 与 K^0(不带电) 也互为正反粒子，它们具有相反的奇异荷.

把 $\hat{\Phi}(q,\boldsymbol{x})$ 作傅氏展开得

$$\hat{\Phi}(q,\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3k\hat{a}_q(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}},$$

$$\hat{\Phi}^\dagger(q,\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3k\hat{a}_q^\dagger(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}},$$

$$\widehat{\phi}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3k\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}}\left(\widehat{a}_q(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+\widehat{a}_q^{\dagger}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right),$$

$$\left[\widehat{a}_q(\boldsymbol{k}),\widehat{a}_{q'}(\boldsymbol{k}')\right]=0,$$

$$\left[\widehat{a}_q(\boldsymbol{k}),\widehat{a}_{q'}^{\dagger}(\boldsymbol{k}')\right]=\delta_{qq'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'),$$

$$\widehat{Q}=\sum_q\int \mathrm{d}^3k q\widehat{a}_q^{\dagger}(\boldsymbol{k})\widehat{a}_q(\boldsymbol{k}),$$

$$\widehat{H}=\sum_q\int \mathrm{d}^3k\hbar\omega_k\widehat{a}_q^{\dagger}(\boldsymbol{k})\widehat{a}_q(\boldsymbol{k}),$$

$$\widehat{\boldsymbol{P}}=\sum_q\int \mathrm{d}^3k\hbar\boldsymbol{k}\ \widehat{a}_q^{\dagger}(\boldsymbol{k})\widehat{a}_q(\boldsymbol{k}),$$

$$\widehat{\boldsymbol{G}}=\sum_q\int \mathrm{d}^3k\int \mathrm{d}^3k'\boldsymbol{G}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\widehat{a}_q^{\dagger}(\boldsymbol{k})\widehat{a}_q(\boldsymbol{k}').$$

所以 $\widehat{a}_q^{\dagger}(\boldsymbol{k})$ 就是产生一个能量为 $\hbar\omega_k$，动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$，Q 值为 q 的量子的算符，$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\widehat{a}_q^{\dagger}(\boldsymbol{k})|0\rangle$ 的薛定谔波函数为 (按 $\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$ 归一)

$$\phi_{\boldsymbol{k}1}(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega_k t\right)},$$

$$\phi_{\boldsymbol{k}-1}(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega_k t\right)}.$$

由于没有相互作用，反粒子的波函数也是方程 (189) 的解 (正能解).

单个的实场的量子没有正反之分，但也可以采用正反粒子的概念同时认定反粒子也即是正粒子.

§ 11　Dirac 场的量子化

Dirac 场的场函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 是一种四分量旋量，自由场的运动方程即是 Dirac 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=(-\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla+mc^2\beta)\psi(\boldsymbol{x},t),\tag{229}$$

其中 m 是正数，当作参量看待，c 是光速，α 及 β 即是前面说明过的 4×4 矩阵. 在洛伦兹变换之下，ψ 的变换式为

$$\psi'(x')=S(\Lambda)\psi(x)\,,$$
$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^{\mu}S(\Lambda)=\Lambda^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu}\,.$$
$$(x'^{\mu}=\Lambda^{\mu}_{\nu}x^{\nu})$$

由于运动方程只含 ψ 的一阶时间微商，$\psi(\boldsymbol{x},t)$ 的初值决定了以后时刻的值，所以它的 4 个分量 $\psi_1(\boldsymbol{x},t),\psi_2(\boldsymbol{x},t),\psi_3(\boldsymbol{x},t),\psi_4(\boldsymbol{x},t)$ 不只是代表场的坐标，而是同时起着坐标和动量的作用，不过这里不事先假定它们的值是通常的数. 用分量 $\psi_s(\boldsymbol{x},t)$ 表达的正则方程为 (与第四章 §4 比较)

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\psi}_s(\boldsymbol{x},t)=\frac{\delta H}{\delta\psi^*_s(\boldsymbol{x},t)},\tag{230}$$

$$H=\int\mathrm{d}^3x\tilde{\psi}^*(\boldsymbol{x},t)\{-\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla+mc^2\beta\}\psi(\boldsymbol{x},t).\tag{231}$$

H 即是场的“经典”哈密顿量，记号 $\tilde{\psi}^*(\boldsymbol{x},t)$ 仍然代表四行单列阵 ψ 的转置复共轭. 运动方程也可用如下的作用量推导出来

$$I=\int_{t_1}^{t_2}\left\{\int\mathrm{d}^3x\,\mathrm{i}\hbar\tilde{\psi}^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)-H\right\}\mathrm{d}t\,.\tag{232}$$

场的动量和角动量的表达式可借助时空对称性求出，结果为

$$\boldsymbol{P}=\int\mathrm{d}^3x\tilde{\psi}^*(\boldsymbol{x},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(\boldsymbol{x},t),\tag{233}$$

$$\boldsymbol{G}=\int\mathrm{d}^3x\tilde{\psi}^*(\boldsymbol{x},t)\Big(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla+\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}\Big)\psi(\boldsymbol{x},t)\,,\tag{234}$$

其中

$$\vec{\Sigma}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma}&0\\0&\boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix}.$$

此外我们知道，存在如下的连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0, \tag{235}$$

$$\rho(\boldsymbol{x}, t) = \widetilde{\psi}^*(\boldsymbol{x}, t)\psi(\boldsymbol{x}, t), \tag{236}$$

$$\boldsymbol{j} = c\widetilde{\psi}^*(\boldsymbol{x}, t)\boldsymbol{\alpha}\psi(\boldsymbol{x}, t). \tag{237}$$

前面已经指出，把 Dirac 方程看成单粒子薛定谔方程 (于是 ρ 解释为发现粒子的概率密度)，结果不能完全自相一致. 现在的 ψ 是场函数，(235) 是一种荷的连续性方程，总荷为

$$Q = \int \mathrm{d}^3x\, \widetilde{\psi}^*(\boldsymbol{x}, t)\psi(\boldsymbol{x}, t). \tag{238}$$

根据方程组 (230) 和构造量子条件的原则 (保证海森伯方程具有与经典运动方程相似的形式)，应该将薛定谔绘景的量子条件表示为：

$$\widehat{\psi}_s(\boldsymbol{x})\widehat{\psi}^\dagger_{s'}(\boldsymbol{y}) + \widehat{\psi}^\dagger_{s'}(\boldsymbol{y})\widehat{\psi}_s(\boldsymbol{x}) = \delta_{ss'}\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}), \tag{239a}$$

$$\widehat{\psi}_s(\boldsymbol{x})\widehat{\psi}_{s'}(\boldsymbol{y}) + \widehat{\psi}_{s'}(\boldsymbol{y})\widehat{\psi}_s(\boldsymbol{x}) = 0, \tag{239b}$$

这种场算符与场量子的产生、消灭算符的关系稍后就明白.

为了方便，我们用 §7 求出的 Dirac 方程的平面波解来构成场函数的完备组. 不过现在对参量 m 及算子 $(-\mathrm{i}\hbar\nabla)$ 等都未作物理解释，某些记号要重新约定. 设 g 是把 Z 轴的单位矢量 $\boldsymbol{z}^0$ 变为 $\boldsymbol{k}$ 方向的转动

$$g\boldsymbol{z}^0 = \boldsymbol{k}/|\boldsymbol{k}|.$$

用 (θ, φ) 代表 $\boldsymbol{k}$ 的方向，并令

$$D(g) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\sigma_z\varphi/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\sigma_y\theta/2},$$

或

$$D(g) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos(\theta/2) & -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\sin(\theta/2) \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\sin(\theta/2) & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\cos(\theta/2) \end{pmatrix},$$

则

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}=kD(g)\sigma_z D(g)^{-1}\,. \tag{240}$$

定义 $\chi_\lambda(\boldsymbol{z}^0)$ 及 $\chi_\lambda(\boldsymbol{k})$ 为如下的两行单列阵

$$\chi_{+1}(\boldsymbol{z}^0)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \chi_{-1}(\boldsymbol{z}^0)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, \tag{241}$$

$$\chi_\lambda(\boldsymbol{k})=D(g)\chi_\lambda(\boldsymbol{z}^0)\quad(\lambda=\pm1). \tag{242}$$

即

$$\chi_{+1}(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos(\theta/2)\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\sin(\theta/2)\end{pmatrix},\quad \chi_{-1}(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\sin(\theta/2)\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\cos(\theta/2)\end{pmatrix},$$

根据 (240) 式知道

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\chi_\lambda(\boldsymbol{k})=\lambda|\boldsymbol{k}|\chi_\lambda(\boldsymbol{k}). \tag{243}$$

再对 $q=\pm1$ 定义如下的四行单列阵 $\psi_{\boldsymbol{k}\,q\lambda}(\boldsymbol{x})$ 和 $u_{q\lambda}(\boldsymbol{k})$：

$$\psi_{\boldsymbol{k}\,q\lambda}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}u_{q\lambda}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{244}$$

$$u_{1\lambda}(\boldsymbol{k})=\frac{1}{\sqrt{2\omega_k(\mu c+\omega_k)}}\begin{pmatrix}(\mu c+\omega_k)\,\chi_\lambda(\boldsymbol{k})\\ \\ c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\;\chi_\lambda(\boldsymbol{k})\end{pmatrix}, \tag{245}$$

$$u_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})=\frac{1}{\sqrt{2\omega_k(\mu c+\omega_k)}}\begin{pmatrix}-c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\,\chi_\lambda(\boldsymbol{k})\\ \\ (\mu c+\omega_k)\;\chi_\lambda(\boldsymbol{k})\end{pmatrix}, \tag{246}$$

其中

$$\omega_k=\sqrt{\mu^2c^2+c^2|\boldsymbol{k}|^2}, \tag{247}$$

$$\mu=\frac{mc}{\hbar}. \tag{248}$$

于是有

$$\{c\boldsymbol{\alpha}\cdot(-\mathrm{i}\hbar\nabla)+mc^2\beta\}\psi_{\boldsymbol{k}q\lambda}(\boldsymbol{x})=q\hbar\omega_k\psi_{\boldsymbol{k}q\lambda}(\boldsymbol{x})\,, \tag{249}$$

$$\Big(\frac{\vec{\Sigma}\cdot\boldsymbol{k}}{|\boldsymbol{k}|}\Big)u_{q\lambda}(\boldsymbol{k})=\lambda u_{q\lambda}(\boldsymbol{k}), \tag{250}$$

$$\widetilde{u}^*_{q\lambda}(\boldsymbol{k})u_{q'\lambda'}(\boldsymbol{k})=\delta_{qq'}\delta_{\lambda\lambda'}, \tag{251}$$

$$\int \mathrm{d}^3x\ \widetilde{\psi}^*_{\boldsymbol{k}q\lambda}(\boldsymbol{x})\psi_{\boldsymbol{k}'q'\lambda'}(\boldsymbol{x})=\delta_{qq'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,. \tag{252}$$

$\psi_{\boldsymbol{k}q\lambda}(\boldsymbol{x})$ 可以作为 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 的完备组，把 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 按这个完备组展开得到

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\sum_{q\lambda}\int \mathrm{d}^3k\ a_{q\lambda}(\boldsymbol{k},t)\psi_{\boldsymbol{k}q\lambda}(\boldsymbol{x}), \tag{253}$$

$$H=\sum_{\lambda}\int \mathrm{d}^3k\ \hbar\omega_k\{a^*_{1\lambda}(\boldsymbol{k},t)a_{1\lambda}(\boldsymbol{k},t) - a^*_{-1\lambda}(\boldsymbol{k},t)a_{-1\lambda}(\boldsymbol{k},t)\}. \tag{254}$$

由于花括号中第二项的负号，如果按玻色场来量子化就会出现负能量的量子，这是不行的，Dirac 场只能按费米场来进行量子化，即 $a_{q\lambda}(\boldsymbol{k},t)$, $a^*_{q\lambda}(\boldsymbol{k},t)$ 在量子化之前是互相反对易的量．这样就可以把 (254) 式写成

$$H=\sum_{\lambda}\int \mathrm{d}^3k\ \hbar\omega_k\{a^*_{1\lambda}(\boldsymbol{k},t)a_{1\lambda}(\boldsymbol{k},t) + a_{-1\lambda}(\boldsymbol{k},t)a^*_{-1\lambda}(\boldsymbol{k},t)\}. \tag{255}$$

用 $a_{q\lambda}$, $a^*_{q\lambda}$ 表示的运动方程为

$$\mathrm{i}\hbar\dot{a}_{q\lambda}(\boldsymbol{k},t)=\frac{\delta H}{\delta a^*_{q\lambda}(\boldsymbol{k},t)}. \tag{256}$$

根据这种形式的运动方程，以及要求量子力学中的海森伯方程应该具有与经典运动方程相似的形式 (也见第四章 §4 关于费米场

的量子化的说明), 又可把薛定谔绘景的量子条件表示为

$$a_{q\lambda}(\boldsymbol{k}) \to \widehat{a}_{q\lambda}(\boldsymbol{k}), \tag{257}$$

$$a^*_{q\lambda}(\boldsymbol{k}) \to \widehat{a}^\dagger_{q\lambda}(\boldsymbol{k}), \tag{258}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{a}_{q\lambda}(\boldsymbol{k}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{a}^\dagger_{q\lambda}(\boldsymbol{k}) = 0, \tag{259}$$

$$\widehat{a}_{q\lambda}(\boldsymbol{k})\widehat{a}_{q'\lambda'}(\boldsymbol{k}') + \widehat{a}_{q'\lambda'}(\boldsymbol{k}')\widehat{a}_{q\lambda}(\boldsymbol{k}) = 0, \tag{260}$$

$$\widehat{a}_{q\lambda}(\boldsymbol{k})\widehat{a}^\dagger_{q'\lambda'}(\boldsymbol{k}') + \widehat{a}^\dagger_{q'\lambda'}(\boldsymbol{k}')\widehat{a}_{q\lambda}(\boldsymbol{k}) = \delta_{qq'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'). \tag{261}$$

为了弄清楚以上得到的结果的物理含义, 应当分析力学量的表达式. 从 (255) 式得出哈密顿量算符如下

$$\widehat{H} = \sum_\lambda \int \mathrm{d}^3k\ \hbar\omega_k\{\widehat{a}^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{k})\widehat{a}_{1\lambda}(\boldsymbol{k}) + \widehat{a}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})\widehat{a}^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})\}. \tag{262}$$

可见 $\widehat{a}^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{k})|0\rangle$ 是一个能量值为 $\hbar\omega_k$ 的单量子态. 这里, $|0\rangle$ 满足

$$\widehat{a}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})|0\rangle = \widehat{a}^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})|0\rangle = 0\,.$$

$\widehat{a}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})|0\rangle$ 也是一个能量为 $\hbar\omega_k$ 的单量子态.所以 $\widehat{a}^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{k})$ 和 $\widehat{a}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})$ 都是产生一个能量为 $\hbar\omega_k$ 的量子的算符, $\widehat{a}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})$ 和 $\widehat{a}^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})$ 是相应的消灭算符. q 和 $\boldsymbol{k}$ 的意义可用 (238) 及 (233) 式来说明, 这些式子可写成 (省写时间参量 t)

$$Q = \sum_\lambda \int \mathrm{d}^3k\ \{a^*_{1\lambda}(\boldsymbol{k})a_{1\lambda}(\boldsymbol{k}) - a_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})a^*_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})\}, \tag{263}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P} &= \sum_\lambda \int \mathrm{d}^3k\ \hbar\boldsymbol{k}\{a^*_{1\lambda}(\boldsymbol{k})a_{1\lambda}(\boldsymbol{k}) - a_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})a^*_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})\} \\ &= \sum_\lambda \int \mathrm{d}^3k\ \hbar\boldsymbol{k}\{a^*_{1\lambda}(\boldsymbol{k})a_{1\lambda}(\boldsymbol{k}) + a_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})a^*_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})\}.\end{aligned} \tag{264}$$

相应的算符是

$$\widehat{Q}=\sum_{\lambda}\int \mathrm{d}^3k\ \{\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})\widehat{a}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})-\widehat{a}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})\widehat{a}^{\dagger}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})\}, \tag{265}$$

$$\widehat{\boldsymbol{P}}=\sum_{\lambda}\int \mathrm{d}^3k\ \hbar\boldsymbol{k}\{\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})\widehat{a}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})+\widehat{a}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})\widehat{a}^{\dagger}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})\}, \tag{266}$$

(265) 式表明，Dirac 场的量子按其携带的 Q 荷分成两种相反的粒子，由 $\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}$ 产生的量子携带 $+1$ 的 Q 荷，由 $\widehat{a}_{-1\lambda}$ 产生的量子则携带 -1 的 Q 荷. 如果约定 Q 值为正的量子是正粒子，则 Q 值为负的粒子是反粒子，这时 (266) 式表明，$\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})$ 产生一个动量为 $\hbar k$ 的正粒子，$\widehat{a}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})$ 产生一个动量为 $\hbar k$ 的反粒子. 由此及 ω_k 的表达式又知道，m 是一个量子的静止质量.

由 (234) 式看到，角动量是由场的量子的轨道运动和自旋共同贡献的，这两部分的算符可分别写成

$$\begin{aligned}\widehat{\boldsymbol{G}}_0=&\sum_{\lambda\lambda'}\int \mathrm{d}^3k\int \mathrm{d}^3k'\ \widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})\widehat{a}_{1\lambda'}(\boldsymbol{k}')\\ &\times\int \mathrm{d}^3x\ \widetilde{\psi}^{*}_{\boldsymbol{k}1\lambda}(\boldsymbol{x})(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla)\psi_{\boldsymbol{k}'1\lambda'}(\boldsymbol{x})\\ &-\sum_{\lambda\lambda'}\int \mathrm{d}^3k\int \mathrm{d}^3k'\ \widehat{a}_{-1\lambda'}(\boldsymbol{k}')\widehat{a}^{\dagger}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})\\ &\times\int \mathrm{d}^3x\ \widetilde{\psi}^{*}_{\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x})(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla)\psi_{\boldsymbol{k}'-1\lambda'}(\boldsymbol{x}),\end{aligned} \tag{267}$$

$$\begin{aligned}\widehat{\boldsymbol{G}}_s=&\sum_{\lambda\lambda'}\int \mathrm{d}^3k\int \mathrm{d}^3k'\ \widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})\widehat{a}_{1\lambda'}(\boldsymbol{k}')\\ &\times\int \mathrm{d}^3x\ \widetilde{\psi}^{*}_{\boldsymbol{k}1\lambda}(\boldsymbol{x})\frac{\hbar}{2}\overrightarrow{\Sigma}\psi_{\boldsymbol{k}'1\lambda'}(\boldsymbol{x})\\ &-\sum_{\lambda\lambda'}\int \mathrm{d}^3k\int \mathrm{d}^3k'\ \widehat{a}_{-1\lambda'}(\boldsymbol{k}')\widehat{a}^{\dagger}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})\\ &\times\int \mathrm{d}^3x\ \widetilde{\psi}^{*}_{\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x})\frac{\hbar}{2}\overrightarrow{\Sigma}\psi_{\boldsymbol{k}'-1\lambda'}(\boldsymbol{x})\,.\end{aligned} \tag{268}$$

以 $\widehat{\boldsymbol{G}}\cdot\widehat{\boldsymbol{P}}$ 作用于单量子态 $\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})|0\rangle$，注意 $\widehat{\boldsymbol{G}}_0$ 没有贡献，得出

$$\begin{aligned}
&\widehat{\boldsymbol{G}}\cdot\widehat{\boldsymbol{P}}\,\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})|0\rangle\\
&\quad=\widehat{\boldsymbol{G}}_s\cdot\hbar\boldsymbol{k}\,\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})|0\rangle\\
&\quad=\sum_{\lambda'}\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda'}(\boldsymbol{k})|0\rangle\widetilde{u}^{*}_{1\lambda'}(\boldsymbol{k})\frac{\hbar^2}{2}\vec{\Sigma}\cdot\boldsymbol{k}\,u_{1\lambda}(\boldsymbol{k})\,,
\end{aligned}$$

即

$$\left(\frac{\widehat{\boldsymbol{G}}\cdot\widehat{\boldsymbol{P}}}{\hbar|\boldsymbol{k}|}\right)\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})|0\rangle=\lambda\frac{\hbar}{2}\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})|0\rangle\,,\tag{269}$$

类似地，

$$\begin{aligned}
&\widehat{\boldsymbol{G}}\cdot\widehat{\boldsymbol{P}}\,\widehat{a}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})|0\rangle\\
&\quad=-\sum_{\lambda_1\lambda'}\int\mathrm{d}^3k'\;\widehat{a}_{-1\lambda'}(-\boldsymbol{k}')\widehat{a}^{\dagger}_{-1\lambda_1}(-\boldsymbol{k}')\\
&\qquad\times\widetilde{u}^{*}_{-1\lambda_1}(-\boldsymbol{k}')\frac{\hbar^2}{2}\vec{\Sigma}\cdot\boldsymbol{k}\;u_{-1\lambda'}(-\boldsymbol{k}')\widehat{a}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})|0\rangle\\
&\quad=\sum_{\lambda'}\widehat{a}_{-1\lambda'}(-\boldsymbol{k})|0\rangle\;\widetilde{u}^{*}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})\frac{\hbar^2}{2}\vec{\Sigma}\cdot(-\boldsymbol{k})\;u_{-1\lambda'}(-\boldsymbol{k}).
\end{aligned}$$

(250) 式意味着

$$\left(\frac{\vec{\Sigma}\cdot(-\boldsymbol{k})}{|\boldsymbol{k}|}\right)u_{q\lambda}(-\boldsymbol{k})=\lambda u_{q\lambda}(-\boldsymbol{k})\,,$$

故

$$\left(\frac{\widehat{\boldsymbol{G}}\cdot\widehat{\boldsymbol{P}}}{\hbar|\boldsymbol{k}|}\right)\widehat{a}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})|0\rangle=\lambda\frac{\hbar}{2}\widehat{a}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})|0\rangle\,.\tag{270}$$

可见，$\lambda\hbar/2$ 就是由 $\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})$ 产生的粒子或由 $\widehat{a}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})$ 产生的反粒子的自旋沿其动量方向的投影，这也说明 Dirac 场的量子的自旋是 1/2. λ 称为单量子态 $\widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})|0\rangle$ 或 $\widehat{a}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})|0\rangle$ 的螺旋性.

为了符合通常的习惯，再把产生消灭算符的记号改一下．令

$$\widehat{b}_{1\lambda}(\boldsymbol{k}) \equiv \widehat{a}_{1\lambda}(\boldsymbol{k}), \tag{271}$$

$$\widehat{b}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k}) \equiv \widehat{a}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k}), \tag{272}$$

于是

$$\widehat{b}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k}) = \widehat{a}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k}), \tag{273}$$

$$\widehat{b}^{\dagger}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k}) = \widehat{a}^{\dagger}_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})\,. \tag{274}$$

因此 $\widehat{b}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k}), \widehat{b}^{\dagger}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})$ 分别是产生能量为 $\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}$，动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$，螺旋性为 λ 的正粒子和反粒子的产生算符，$\widehat{b}_{q\lambda}(\boldsymbol{k})$ 为相应的消灭算符，它们服从的反对易关系和通常一样

$$\widehat{b}_{q\lambda}(\boldsymbol{k})\widehat{b}_{q'\lambda'}(\boldsymbol{k}') + \widehat{b}_{q'\lambda'}(\boldsymbol{k}')\widehat{b}_{q\lambda}(\boldsymbol{k}) = 0, \tag{275}$$

$$\widehat{b}_{q\lambda}(\boldsymbol{k})\widehat{b}^{\dagger}_{q'\lambda'}(\boldsymbol{k}') + \widehat{b}^{\dagger}_{q'\lambda'}(\boldsymbol{k}')\widehat{b}_{q\lambda}(\boldsymbol{k}) = \delta_{qq'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'), \tag{276}$$

场函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 的算符是

$$\widehat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\lambda}\int \mathrm{d}^3k\{\widehat{b}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})\psi_{\boldsymbol{k}1\lambda}(\boldsymbol{x}) + \widehat{b}^{\dagger}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})\psi_{-\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x})\}. \tag{277}$$

其中第二项含有 $\chi_\lambda(-\boldsymbol{k})$，它理解为在 $\chi_\lambda(\boldsymbol{k})$ 的表达式中将 θ,φ 换为 $\pi-\theta,\pi+\varphi$ 的结果，由此得到

$$\chi_{\pm}(-\boldsymbol{k}) = \mathrm{i}\chi_{\mp}(\boldsymbol{k})\,.$$

用 $\psi'_{\boldsymbol{k}q\lambda}(\boldsymbol{x})$ 代表 $\psi_{\boldsymbol{k}q\lambda}(\boldsymbol{x})$ 的电荷共轭（按 §8 的定义），即

$$\psi'_{\boldsymbol{k}q\lambda}(\boldsymbol{x}) = \varGamma\psi^{*}_{\boldsymbol{k}q\lambda}(\boldsymbol{x}), \quad \varGamma = \mathrm{i}\eta_c\gamma^2\,, \tag{278}$$

于是

$$\int \mathrm{d}^3x\widetilde{\psi}'^{*}_{\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x})\psi'_{\boldsymbol{k}'-1\lambda'}(\boldsymbol{x}) = \int \mathrm{d}^3x\widetilde{\psi}^{*}_{\boldsymbol{k}'-1\lambda'}(\boldsymbol{x})\psi_{\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x}), \tag{279}$$

$$\int \mathrm{d}^3x\widetilde{\psi}'^{*}_{\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x})(\mathrm{i}\nabla)\psi'_{\boldsymbol{k}'-1\lambda'}(\boldsymbol{x})$$

$$= -\int \mathrm{d}^3x\widetilde{\psi}^{*}_{\boldsymbol{k}'-1\lambda'}(\boldsymbol{x})(\mathrm{i}\nabla)\psi_{\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x}), \tag{280}$$

$$\int \mathrm{d}^3x\widetilde{\psi}'^{*}_{\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x})\vec{\Sigma}\psi'_{\boldsymbol{k}'-1\lambda'}(\boldsymbol{x})$$

$$= -\int \mathrm{d}^3x\widetilde{\psi}^{*}_{\boldsymbol{k}'-1\lambda'}(\boldsymbol{x})\vec{\Sigma}\psi_{\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x})\,. \tag{281}$$

由此可把上述几种力学量的算符写成

$$\widehat{H} = \sum_q \int \mathrm{d}^3x\widehat{\Phi}^{\dagger}_q(\boldsymbol{x})\sqrt{(mc^2)^2 + c^2(-\mathrm{i}\hbar\nabla)^2}\Phi_q(\boldsymbol{x}), \tag{282}$$

$$\widehat{Q} = \sum_q \int \mathrm{d}^3xq\widehat{\Phi}^{\dagger}_q(\boldsymbol{x})\widehat{\Phi}_q(\boldsymbol{x}), \tag{283}$$

$$\widehat{\boldsymbol{P}} = \sum_q \int \mathrm{d}^3x\widehat{\Phi}^{\dagger}_q(\boldsymbol{x})(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\widehat{\Phi}_q(\boldsymbol{x}), \tag{284}$$

$$\widehat{\boldsymbol{G}}_0 = \sum_q \int \mathrm{d}^3x\widehat{\Phi}^{\dagger}_q(\boldsymbol{x})(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla)\widehat{\Phi}_q(\boldsymbol{x}), \tag{285}$$

$$\widehat{\boldsymbol{G}}_s = \sum_q \int \mathrm{d}^3x\widehat{\Phi}^{\dagger}_q(\boldsymbol{x})\left(\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}\right)\widehat{\Phi}_q(\boldsymbol{x})\,, \tag{286}$$

其中

$$\widehat{\Phi}_1(\boldsymbol{x}) \equiv \sum_\lambda \int \mathrm{d}^3k\widehat{b}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})\psi_{\boldsymbol{k}1\lambda}(\boldsymbol{x}), \tag{287}$$

$$\widehat{\Phi}_{-1}(\boldsymbol{x}) \equiv \sum_\lambda \int \mathrm{d}^3k\widehat{b}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})\Gamma\psi^{*}_{-\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x}). \tag{288}$$

$\widehat{\Phi}^{\dagger}_q(\boldsymbol{x})$ 包括对其中的算符取厄米共轭以及对矩阵 $\psi_{\boldsymbol{k}q\lambda}(\boldsymbol{x})$ 和 Γ 取厄米共轭，即

$$\widehat{\Phi}^{\dagger}_1(\boldsymbol{x}) \equiv \sum_\lambda \int \mathrm{d}^3k\widehat{b}^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{k})\widetilde{\psi}^{*}_{\boldsymbol{k}1\lambda}(\boldsymbol{x}), \tag{289}$$

$$\widehat{\Phi}^{\dagger}_{-1}(\boldsymbol{x}) \equiv \sum_\lambda \int \mathrm{d}^3k\widehat{b}^{\dagger}_{-1\lambda}(\boldsymbol{k})\widetilde{\psi}_{-\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x})\Gamma^{-1}. \tag{290}$$

从这些表达式可以看出，单个的具有能量 $\hbar\omega_k$, 动量 $\hbar\boldsymbol{k}$ 和螺旋性为 λ 的正粒子和反粒子的薛定谔波函数分别是

$$\psi_{\boldsymbol{k}1\lambda}(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}u_{1\lambda}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega_k t\right)}, \tag{291}$$

$$\Gamma\psi^*_{-\boldsymbol{k}-1\lambda}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t}=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\Gamma u^*_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega_k t\right)}. \tag{292}$$

由于没有相互作用，波函数 (291) 和 (292) 是同一个 Dirac 方程的解 (当然都是正频解). (292) 式可改写成

$$\Gamma\left\{u_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}+\omega_k t\right)}\right\}^*, \tag{292'}$$

这是负频解 $u_{-1\lambda}(-\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}+\omega_k t\right)}$ 的电荷共轭.

参 考 文 献

[1] Dirac P A M. The Principle of Quantum Mechanics (4ed). London: Oxford University Press, 1958.

[2] Messiah A. Quantum Mechanics (Vol.2). Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1962.

[3] Berestetskii V B, Lifshitz E M, Pitaevskii L P. Relativistic Quantum Theory (Part 1). Oxford: Pergamon Press, 1971.

[4] Itzykson C, Zuber J-B. Quantum Field Theory. McGraw-Hill, 1980.

第九章　具有奇异拉格朗日函数的系统的正则方程及其量子化

本章讲述关于建立具有奇异拉氏函数的系统的正则方程和进行量子化的一般方法. 所谓奇异的拉氏函数, 意思是根据它所定义的正则动量不能唯一地确定广义速度作为动量和坐标的函数, 因此不能按照通常的方法使拉格朗日形式的运动方程过渡到正则形式和进行量子化. 电磁场、引力场和非阿贝尔规范场都是具有奇异拉氏函数的典型系统. 为了便于叙述, 我们将借助于假设的具有有限自由度和奇异拉氏函数的系统来讲述方法的要点, 然后推广到具有连续无限自由度的场, 并以电磁场和 SU_3 规范场作为范例, 说明方法的实际运用.

§1　约束条件. 从拉格朗日方程到正则方程的过渡

为了简便, 假定拉氏函数 $L(q,\dot{q})$ 不显含时间, 记号 q 代表坐标 $(q_1,q_2,\cdots,q_s)$, $\dot{q}$ 代表相应的广义速度, 它们的值是普通的数. 拉氏形式的运动方程为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}=\frac{\partial L}{\partial q_j}\quad (j=1,2,\cdots,s), \tag{1}$$

正则动量 $(p_1,p_2,\cdots,p_s)$ 和通常一样定义

$$p_j=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}, \tag{2}$$

现在假定从方程组 (2) 不能唯一地确定广义速度作为 (q,p) 的函数, 即假定 L 是奇异的. 在现在所考虑的自由度数有限的情形, 这

意味着由它的二级微商 $\partial^2 L/\partial\dot{q}_j\partial\dot{q}_k$ 构成的 s 阶矩阵是奇异的，因此可以从方程 (2) 中求出若干个只含 (q,p) 的条件. 设共有 M 个独立的条件

$$\phi_m(q,p)=0, \quad m=1,2,\cdots,M, \tag{3}$$

它们是从正则动量的定义产生的 (未涉及运动方程)，被称为初约束条件，习惯上也把表达约束条件的 $\phi_m(q,p)$ 称为约束.

定义如下的 H_c(以下约定，指标重复时暗含求和):

$$H_c=p_j\dot{q}_j-L(q,\dot{q}), \tag{4}$$

于是

$$\delta H_c=\delta p_j\dot{q}_j+p_j\delta\dot{q}_j-\frac{\partial L}{\partial q_j}\delta q_j-\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_j}\delta\dot{q}_j, \tag{5}$$

其中含 $\delta\dot{q}_j$ 的项相消了 (根据方程组 (2)). 可见能够把 H_c 表示为 (q,p) 的函数，但是初约束的存在使这种表达式不是唯一的. 一个 $H_c(q,p)$ 加上 $\phi_m(q,p)$ 的任意线性式，都可作为新的 $H_c(q,p)$，它作为 (q,p) 的函数的变分为

$$\delta H_c(q,p)=\frac{\partial H_c}{\partial q_j}\delta q_j+\frac{\partial H_c}{\partial p_j}\delta p_j,$$

由此以及 (1), (2), (3) 和 (5) 式得到

$$\left.\begin{aligned}&\left(\frac{\partial H_c}{\partial q_j}+\dot{p}_j\right)\delta q_j+\left(\frac{\partial H_c}{\partial p_j}-\dot{q}_j\right)\delta p_j=0,\\&\phi_m(q,p)\approx 0, \quad m=1,2,\cdots,M.\end{aligned}\right\} \tag{6}$$

在求 H_c 对于 (q,p) 的偏微商时，是把 (q,p) 当作“独立”变量看待的，没有顾及约束条件的限制，而约束条件中的等号则稍加变形. 后面还会将这样的等号用于所有依赖于约束条件的方程式.

引入拉氏乘子 u_m 可把运动方程写成

$$\left.\begin{aligned} \dot{q}_j &= \frac{\partial H_c(q,p)}{\partial p_j} + u_m \frac{\partial \phi_m}{\partial p_j}, \\ -\dot{p}_j &= \frac{\partial H_c(q,p)}{\partial q_j} + u_m \frac{\partial \phi_m}{\partial q_j}, \\ \phi_{m'}(q,p) &\approx 0, \qquad m' = 1,2,\cdots,M. \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

如果用 M 个函数 $C_m(q,p)$ 构成 $\widetilde{H}_c = H_c + C_m(q,p)\phi_m$, 以之作为新的 H_c, 则运动方程可写成

$$\begin{aligned} \dot{q}_j &= \frac{\partial \widetilde{H}_c}{\partial p_j} + \tilde{u}_m \frac{\partial \phi_m}{\partial p_j}, \\ -\dot{p}_j &= \frac{\partial \widetilde{H}_c}{\partial q_j} + \tilde{u}_m \frac{\partial \phi_m}{\partial q_j}, \\ \phi_{m'} &\approx 0. \end{aligned}$$

拉氏乘子所受的限制取决于运动方程本身，所以这个方程组与 (7) 没有差别.

把 (q,p) 看作基本变量时的泊松括号像通常一样定义

$$[f(q,p), g(q,p)]_c = \frac{\partial f}{\partial q_j}\frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j}\frac{\partial g}{\partial q_j}. \tag{8}$$

由于 ϕ_m 是约束，对 $u_m\phi_m$ 求偏微商时，u_m 像是常数一样，因此方程组 (7) 又可写成

$$\left.\begin{aligned} \dot{q}_j &= [q_j, H_c + u_m\phi_m]_c, \\ \dot{p}_j &= [p_j, H_c + u_m\phi_m]_c, \\ \phi_{m'} &\approx 0. \end{aligned}\right\} \tag{9}$$

用 (q,p) 的函数 $g(q,p)$ 表示的运动方程为 (假定 g 不显含时间)

$$\left.\begin{aligned} \dot{g} &= [g, H_c]_c + u_m[g, \phi_m]_c, \\ \phi_{m'} &\approx 0. \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

由于这里的泊松括号是把 (q,p) 看作基本变量而建立的，凡是依赖于约束条件而成立的等式都不应在泊松括号下引用. 不能在泊松括号下引用的方程式将称为弱方程，在必要时就把弱方程中的等号写成“$\approx$”，或称为弱等号. 约束条件本身当然是弱方程. 可以在泊松括号下引用的方程将称为强方程.

把初约束条件和运动方程结合起来，有可能产生新的约束条件，这种新条件称为次约束条件. 约束条件在全部时间都成立，所以每个约束 ϕ 的时间微商都应该等于零，由此得出所谓自洽条件

$$[\phi_{m'}, H_c + u_m\phi_m]_c = 0,$$

如果这种自洽条件又产生只含 (q,p) 的方程，那么又给出约束条件，照这样重复下去，就能够产生全部约束条件. 假设共有 L 个独立的次约束条件

$$\Phi_l \approx 0, \quad l = 1, 2, \cdots, L, \tag{11}$$

于是全部约束及其满足的自洽性条件如下

$$[\phi_{m'}, H_c + u_m\phi_m]_c = 0, \tag{12a}$$

$$[\Phi_{l'}, H_c + u_m\phi_m]_c = 0, \tag{12b}$$

$$\phi_{m'} \approx 0, \quad m' = 1, 2, \cdots, M, \tag{12c}$$

$$\Phi_{l'} \approx 0, \quad l' = 1, 2, \cdots, L. \tag{12d}$$

在全部约束条件 (12c) 及 (12d) 之下，(12a) 及 (12b) 式中代表约束条件的方程式已经变成自动成立的等式，其余 (不能归结为约束条件的) 方程式则是对于系数 u_m 的限制，符合这种要求的 u_m 当然是存在的，否则就会表明 $L(q,\dot{q})$ 不能作为拉氏函数，而这种情况应预先排除.

在找出全部约束之后，当然可以把它们都当作 (6) 式中的附

加条件而把运动方程重写为

$$\left.\begin{aligned} \dot{q_j} &= [q_j, H_c + v_m\phi_m + w_l\Phi_l]_c\,, \\ \dot{p_j} &= [p_j, H_c + v_m\phi_m + w_l\Phi_l]_c\,, \\ \phi_{m'} &\approx 0, \qquad \Phi_{l'} \approx 0\,, \end{aligned}\right\} \tag{13}$$

其中 ν_m 及 w_l 都是拉氏乘子. 这时自洽条件为

$$\left.\begin{aligned} &[\phi_{m'}, H_c + v_m\phi_m + w_l\Phi_l]_c = 0\,, \\ &[\Phi_{l'}, H_c + v_m\phi_m + w_l\Phi_l]_c = 0\,, \\ &\phi_{m'} \approx 0, \qquad \Phi_{l'} \approx 0\,. \end{aligned}\right\} \tag{14}$$

次约束也可以根据初约束和拉氏运动方程来找到, 由此得出全部独立的约束之后, 即可直接写出 (13) 和 (14) 式 (不需要经过方程组 (7)) . 当把运动方程写成 (13) 式时, H_c 的选择允许有更大的任意性, 即可以加上 ϕ_m, Φ_l 的任意线性式.

为了便于作进一步的讨论, 需要按照 Dirac 的方法把表达为 (q,p) 的函数的力学量区分为两类. 与每个约束的泊松括号都弱等于零的量称为第一类量, 不属第一类的量就称为第二类量. 对于约束也作这种分类, 一个约束同时是第一类量时称为第一类约束, 否则称为第二类约束. 一组第二类约束的齐次线性式可能变成第一类约束. 当我们知道了全部独立的约束之后, 如果发现有第二类约束存在, 可以用它们的独立的齐次线性式来代替, 使尽可能多的约束归入第一类, 而只让不能归入第一类的独立的齐次线性式保留为第二类. 现在假定 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_{L+M}$ 代表全部独立的约束, 而且其中第二类约束的任何齐次线性式都不会变成第一类约束, 于是运动方程和自洽性条件可写成

$$\left.\begin{aligned} \dot{g}(q,p) &= [g(q,p), H_c + \lambda_n\psi_n]_c\,, \\ \psi_{n'} &\approx 0\,, \end{aligned}\right\} \tag{13'}$$

$$\left.\begin{aligned} &[\psi_{n'}, H_c + \lambda_n \psi_n]_c = 0\,, \\ &\psi_{n'} \approx 0\,. \end{aligned}\right\} \tag{14'}$$

设 $\psi_\alpha^{(1)}$ 及 $\psi_\beta^{(2)}$ 分别代表 $\{\psi_n\}$ 中的第一类和第二类约束，于是 (14′) 式对于 $H_c + \sum_n \lambda_n \psi_n$ 中 $\psi_\alpha^{(1)}$ 的系数没有限制，用 $\lambda_\beta^{(1)}$ 代表这些系数. $\psi_\beta^{(2)}$ 的系数 $\lambda_\beta^{(2)}$ 所受的限制归结为

$$\left.\begin{aligned} &[\psi_\alpha^{(1)}, H_c]_c = 0\,, \\ &\sum_{\beta'} [\psi_\beta^{(2)}, \psi_{\beta'}^{(2)}]_c \lambda_{\beta'}^{(2)} + [\psi_\beta^{(2)}, H_c]_c = 0\,, \\ &\psi_n \approx 0, \end{aligned}\right\} \tag{15}$$

其中第一行必定是在约束条件下自动成立的等式，可以抛弃，第二行则是 $\lambda_{\beta'}^{(2)}$ 满足的方程组. 按假定，$\{\psi_\beta^{(2)}\}$ 的任何齐次线性式都不能变为第一类约束，而且代表了全部的第二类约束. 这时可以引用 Dirac 证明的如下定理：$\psi_\beta^{(2)}$ 之间的泊松括号构成一个非异矩阵. 令

$$C_{\beta\beta'} = [\psi_\beta^{(2)}, \psi_{\beta'}^{(2)}]_c, \tag{16}$$

由 $C_{\beta\beta'}$ 构成的矩阵 C 是反对称的，而反对称非异矩阵的阶数必为偶数，即是说 $\psi_\beta^{(2)}$ 的个数是偶数. 既然 C 是非异矩阵，当 H_c 以及 $\{\psi_n\}$ 给定之后，系数 $\lambda_\beta^{(2)}$ 是唯一确定的，即

$$\lambda_\beta^{(2)} = (C^{-1})_{\beta'\beta} [\psi_{\beta'}^{(2)}, H_c]_c\,. \tag{17}$$

综上所述，正则方程的一般形式如下

$$\left.\begin{aligned} &\dot{g}(q,p) = [g, H]_c\,, \\ &\psi_n \approx 0\,, \end{aligned}\right\} \tag{18}$$

$$H = H_c + \lambda_\beta^{(2)} \psi_\beta^{(2)} + \lambda_\alpha^{(1)} \psi_\alpha^{(1)}\,. \tag{19}$$

方程组 (18) 就是广义的正则方程，H 是广义哈密顿量，$\lambda_\beta^{(2)}$ 由 (17) 式确定，$\lambda_\alpha^{(1)}$ 是任意的系数. 如果把 $\psi_\alpha^{(1)}$ 和 $\psi_\beta^{(2)}$ 的线性式 $\mu_\alpha^{(1)}\psi_\alpha^{(1)}+\mu_\alpha^{(2)}\psi_\alpha^{(2}$ 加到 H_c 中构成 H_c'，那么以它作为新的 H_c 构成 (19) 式的哈密顿量时有

$$H'=H_c'+\lambda_\beta'^{(2)}\psi_\beta^{(2)}+\lambda_\alpha'^{(1)}\psi_\alpha^{(1)},$$

其中

$$\lambda_\beta'^{(2)}=(C^{-1})_{\beta'\beta}[\psi_{\beta'}^{(2)},H_c']_c=\lambda_\beta^{(2)}-\mu_\beta^{(2)}.$$

故

$$H_c'+\lambda_\beta'^{(2)}\psi_\beta^{(2)}=H_c+\lambda_\beta^{(2)}\psi_\beta^{(2)}+\mu_\alpha^{(1)}\psi_\alpha^{(1)},$$
$$H'=H_c+\lambda_\beta^{(2)}\psi_\beta^{(2)}+(\lambda_\alpha'^{(1)}+\mu_\alpha^{(1)})\psi_\alpha^{(1)}.$$

即是说，用不同的 H_c 构造 (19) 式的哈密顿量，相当于把任意项 $\lambda_\alpha^{(1)}\psi_\alpha^{(1)}$ 换成同一形式的任意项，所以只当存在第一类约束时，正则方程才具有不确定性. 如果只有 $2K$ 个独立的第二类约束而没有第一类约束，就表明系统的自由度数等于 $s-K$，或者说有 K 对坐标动量是其余 $(s-K)$ 对的函数，这时，从全部 (q,p) 在某一时刻的初值出发 (当然应与约束条件一致)，能够借助运动方程确定以后时刻的全部 (q,p) 值. 另一方面，如果存在第一类约束，则由于运动方程含有任意项，从全部 (q,p) 的一定初值出发，根据运动方程无法确定以后时刻的 (q,p). 在这种情况下，如果额外补充一些适当的约束条件，以保证对于包括原有的约束和这些外加约束的全部约束而言，不再存在第一类约束，那就像是只存在第二类约束的情形一样了. 关于这点，规范场提供了重要的范例. 规范不变性导致第一类约束 (参看 §5, §6)，而通常的规范条件加上相应的自洽性条件就构成所需要的外加约束条件.

如果在构造 (19) 式的哈密顿量时，H_c 是一个第一类量 H_c'，那么由 (17) 式知道相应的 $\chi_\beta^{(2)}$ 等于零，因此广义哈密顿量为

$$H=H_c'+\chi_\alpha^{(1)}\psi_\alpha^{(1)}. \tag{20}$$

如果本来没有第二类约束，则由 (4) 式和初约束条件选出的每一个 H_c 都是第一类量. 在一般情形，这样求出的任一个 H_c 都可以加上初约束的适当线性式而变成第一类量 (根据 (12a) 及 (12b) 式).

§2 Dirac 括号

Dirac 引进了一种修正的泊松括号，被称为 Dirac 括号，(q,p) 的任意函数 $\xi(q,p),\eta(q,p)$ 之间的 Dirac 括号记为 $[\xi,\eta]_D$, 其定义如下

$$[\xi,\eta]_D=[\xi,\eta]_c-[\xi,\psi_\beta^{(2)}]_c(C^{-1})_{\beta\beta'}[\psi_{\beta'}^{(2)},\eta]_c, \tag{21}$$

其中 $[\xi,\ \eta]_c$ 等是上节说明的泊松括号，$\psi_\beta^{(2)}$ 是第二类约束，C 是以 $[\psi_\beta^{(2)},\ \psi_{\beta'}^{(2)}]_c$ 为元素的矩阵. 要特别注意关于 $\psi_\beta^{(2)}$ 的规定，即它们的任意线性式都不会变成第一类约束，因此 C 的逆矩阵是存在的. 下面把这种修正的泊松括号的若干重要性质列举出来.

(i) $[\xi,\eta]_D=-[\eta,\xi]_D$. (22)

(ii) $[\xi,a_1\eta_1+a_2\eta_2]_D=a_1[\xi,\eta_1]_D+a_2[\xi,\eta_2]_D$. (23)

(a_1,a_2为常数)

(iii) $[[\eta_1,\eta_2]_D,\eta_3]_D+[[\eta_2,\eta_3]_D,\eta_1]_D+[[\eta_3,\eta_1]_D,\eta_2]_D=0$. (24)

(iv) $[\xi,\eta_1\eta_2]_D=[\xi,\eta_1]_D\eta_2+\eta_1[\xi,\eta_2]_D$. (25)

(v) 当不存在第二类约束时，$[\xi,\eta]_D=[\xi,\eta]_c$.

(vi) $[g(q,p),\psi_\beta^{(2)}]_D=0$. (26)

(vii) 当 $f(q,p)$ 是第一类量时，$[f,\ g]_D\approx[f,\ g]_c$.

(viii) 当 $\{\psi_\beta^{(2)}\}$ 被它们的全部独立线性式 $\{\varphi_\beta^{(2)}\}$ 取代时，借助 $\{\varphi_\beta^{(2)}\}$ 建立的 Dirac 括号与原来的 Dirac 括号弱相等.

以上 (i),(ii) 及 (iv),(v) 各项性质可直接看出，第 (iii) 项也容

易验证. 下面给出 (vi)—(viii) 的证明. 对于任意 $g(q,p)$ 有

$$[g,\psi_\beta^{(2)}]_D=[g,\psi_\beta^{(2)}]_c-[g,\psi_{\beta_1}^{(2)}]_c(C^{-1})_{\beta_1\beta'}C_{\beta'\beta}$$
$$=[g,\phi_\beta^{(2)}]_c-[g,\phi_\beta^{(2)}]_c=0.$$

当 $f(q,p)$ 是第一类量时，有

$$[g,f]_D=[g,f]_c-[g,\psi_\beta^{(2)}]_c(C^{-1})_{\beta\beta'}[\psi_{\beta'}^{(2)},f]_c\approx[g,f]_c.$$

为了证明第 (viii) 项，把 $\varphi_\beta^{(2)}$ 写成

$$\varphi_\beta^{(2)}=\Gamma_{\beta\beta'}(q,p)\psi_{\beta'}^{(2)},$$

由 $\Gamma_{\beta\beta'}$ 构成的矩阵 Γ 当然是非异的. 令

$$(C_\varphi)_{\beta\beta'}\equiv[\varphi_\beta^{(2)},\varphi_{\beta'}^{(2)}]_c, \tag{27}$$

于是

$$(C_\varphi)_{\beta\beta'}\approx\Gamma_{\beta\beta_1'}C_{\beta_1\beta_1'}\Gamma_{\beta_1'\beta'},$$

即

$$C_\varphi\approx\Gamma C\tilde{\Gamma}.$$

故

$$[\xi,\varphi_\beta^{(2)}]_c(C_\varphi^{-1})_{\beta\beta'}[\varphi_{\beta'}^{(2)},\eta]_c$$
$$\approx[\xi,\psi_\beta^{(2)}]_c(\tilde{\Gamma}C_\varphi^{-1}\Gamma)_{\beta\beta'}[\eta,\psi_{\beta'}^{(2)}]_c$$
$$\approx[\xi,\psi_\beta^{(2)}]_c(C^{-1})_{\beta\beta'}[\eta,\psi_{\beta'}^{(2)}]_c. \tag{28}$$

这表明，用 $\{\psi_\beta^{(2)}\}$ 定义的 $\{\xi,\eta\}_D$ 弱等于用 $\{\varphi_\beta^{(2)}\}$ 定义的 $[\xi,\eta]_D$. 值得强调一下，(26) 式表明，在 Dirac 括号下可直接引用第二类约束条件，或者说，第二类约束条件可看作强方程.

根据 (26) 式可把方程组 (19) 改写为

$$\left.\begin{aligned} &\dot{g} = [g, H_c + \lambda_\alpha^{(1)}\psi_\alpha^{(1)}]_D, \\ &\psi_\alpha^{(1)} \approx 0, \\ &\psi_\beta^{(2)} = 0. \end{aligned}\right\} \tag{29}$$

这是用 Dirac 括号表示的广义正则方程.

§3 量 子 化

3.1 只存在第一类约束的情形

当只有第一类约束而没有第二类约束时, 可以采用挑选物理态的方法进行量子化, 其要点是: 抛开约束条件, 把 (q,p) 当作独立变量进行量子化, q_j, p_k 的算符的对易关系式和通常一样, 但要求态矢量被每种约束的算符作用后都变为零, 合乎这种要求的态矢量称为物理的态矢量. 由于两个约束之间的泊松括号弱等于零, 所以强等于约束的线性式. 既然如此, 各个约束的算符作用于物理态矢量时是互相可对易的, 因此关于物理态矢量的定义是自相一致的, 全部物理态矢量的集合构成一个物理态子空间. H 和 H_c 的算符 $\hat{H}$ 和 $\hat{H}_c$ 作用于物理态子空间时, 结果相同, 所以 $\hat{H}_c$ 即是哈密顿量算符. 由于 H_c 是第一类量, 所以约束是守恒量, 物理态子空间在时间演化过程中保持为物理态子空间.

另一类途径是加入额外的约束条件, 使得在原来的约束条件以及外加的约束条件之下, 所有约束都是第二类的, 然后按下面叙述的方法处理.

3.2 只存在第二类约束的情形

再考虑没有第一类约束而存在 $2K$ 个独立的第二类约束的情

形，用 $\psi_\beta^{(2)}$ 代表约束，运动方程可用 Dirac 括号表示为

$$\dot{g} = [g, H_c]_D, \tag{30a}$$

$$\psi_\beta^{(2)}(q,p) = 0, \quad \beta = 1, 2, \cdots, 2K. \tag{30b}$$

这时独立自由度数是 $(s-K)$，假设 $x_1, x_2 \cdots$ 及 $y_1, y_2 \cdots$ 是一组独立的正则坐标和动量，于是 q_j 及 p_k 可表示为 (x,y) 的函数

$$q_j = q_j(x,y),$$

$$p_j = p_j(x,y).$$

约束条件已经满足，所以 (30a) 给出通常形式的正则方程，这说明 $[g,\ H_c]_D$ 等于用独立的正则变量定义的普通泊松括号，即

$$[g, H_c]_D = \frac{\partial g}{\partial x_j}\frac{\partial H_c}{\partial y_j} - \frac{\partial g}{\partial y_j}\frac{\partial H_c}{\partial x_j},$$

$H_c(x,y)$ 就是系统的哈密顿量. 既然如此，在过渡到量子理论时，$[g,H_c]_D$ 的算符就是 $\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{g}\hat{H}_c - \hat{H}_c\hat{g})$，即

$$\{[g,H_c]_D\}_{QM} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{g}\hat{H}_c - \hat{H}_c\hat{g}), \tag{31}$$

其中 $\hat{g}$ 及 $\hat{H}_c$ 分别代表 g 与 H_c 的量子力学算符，左边代表 $[g,H_c]_D$ 的算符. 关系式 (31) 是按照以前多次说明的原则来建立的，这个原则相当于：使量子力学的海森伯方程与经典力学的正则方程具有相似的形式.（以上假定由约束条件定义的流形具有全局性坐标，实际上可以借助局部坐标来进行讨论.）

如果真是选出了独立的正则变量，那么量子化方法就和通常一样，但是实际上常常需要借助原来的 (q,p) 进行量子化. 由于把 $[g,H_c]_D$ 化简为 q_j, p_k 以及它们的 Dirac 括号的规则和化简 $[\hat{q},\hat{H}_c]$ 的规则相同，而且 (q,p) 在量子化之前是普通的数，所以用 (q,p) 表达的量子条件如下 (薛定谔绘景)：

$$q_j \longrightarrow \hat{q}_j, \quad p_j \longrightarrow \hat{p}_j\,, \tag{32}$$

$$\hat{q}_j^\dagger = \hat{q}_j, \quad \hat{p}_j^\dagger = \hat{p}_j\,, \tag{33}$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{q}_j}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\hat{p}_j}{\mathrm{d}t} = 0\,, \tag{34}$$

$$[\hat{q}_j, \hat{q}_k] = \mathrm{i}\hbar\big\{[q_j, q_k]_D\big\}_{QM}\,, \tag{35}$$

$$[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = \mathrm{i}\hbar\big\{[p_j, p_k]_D\big\}_{QM}\,, \tag{36}$$

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k] = \mathrm{i}\hbar\big\{[q_j, p_k]_D\big\}_{QM}\,. \tag{37}$$

如果 q, p 之间的 Dirac 括号仍然依赖于 (q, p)，则这样的量子条件一般是难于使用的 (见本章 §6).

3.3 存在第一类及第二类约束的情形

这时，如果引用适当的外加约束条件，使得对于全部约束条件而言不再存在第一类约束，则问题归结为 3.2 小节处理过的没有第一类约束的情形.

如果保留一些第一类约束，而用第二类约束建立 C 矩阵和 Dirac 括号，就只有第二类约束条件可以当作强方程看待，这时可以借助第二类约束条件 (假设共有 $2K$ 个) 引进 $2(s-K)$ 个正则变量 (x, y), 使得

$$q_j = q_j(x, y)\,, \quad p_j = p_j(x, y)\,,$$

于是运动方程可表示为

$$\dot{g}(x, y) = \frac{\partial g}{\partial x_j}\frac{\partial H}{\partial y_j} - \frac{\partial g}{\partial y_j}\frac{\partial H}{\partial x_j}, \tag{38}$$

$$\psi_\alpha^{(1)}(x, y) \approx 0, \tag{39}$$

其中

$$H = H_c(x, y) + \lambda_\alpha^{(1)}\psi_\alpha^{(1)}(x, y). \tag{40}$$

(38) 式右边即是以 (x, y) 为基本变量的普通泊松括号，但这些新变量受到第一类约束条件 (39) 的限制，所以问题归结为 3.1 小节讨论过的只有第一类约束的情形.

§4 具有奇异拉格朗日函数的场

4.1 约束条件和正则方程

现在转到相对论性场论，本章从本节起 (以及本书从第十章 §8 起), 按照场论著作的习惯采用 $c=\hbar=1$ 的单位制. 设场函数为 $\phi_a(\boldsymbol{x},t)$，其中 a 取若干种分立值，它们相当于有限自由度系统的坐标 $q_j(t)$, 即是说，$(a,\boldsymbol{x})$ 起着自由度标号的作用. 拉氏函数是 $\phi_a(\boldsymbol{x},t)$ 和 $\partial_\mu\phi_a(\boldsymbol{x},t)$ 的泛函，这里再假定它不显含时间，于是 $L(\phi(t),\partial\phi(t))=\int \mathrm{d}^3x\mathcal{L}(\phi(\boldsymbol{x},t),\partial\phi(\boldsymbol{x},t))$. 其中 $\mathcal{L}$ 是拉氏函数密度. 拉氏运动方程可写成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}_a(\boldsymbol{x},t)}=\frac{\delta L}{\delta\phi_a(\boldsymbol{x},t)}, \tag{41}$$

或

$$\partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_a(x))}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_a(x)}\,. \tag{41'}$$

能量动量张量为

$$T_{\mathrm{c}}^{\mu\nu}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_a(x))}\partial^\nu\phi_a(x)-g^{\mu\nu}\mathcal{L}\,, \tag{42}$$

相应于 $\phi_a(\boldsymbol{x},t)$ 的正则动量 $\Pi^a(\boldsymbol{x},t)$ 由下式定义

$$\Pi^a(\boldsymbol{x},t)=\frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}_a(\boldsymbol{x},t)}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_a(\boldsymbol{x},t)}\,. \tag{43}$$

与 (4) 式相当的 H_c 由 T_c^{00} 的积分给出

$$H_c(\phi,\Pi)=\int\mathrm{d}^3xT_c^{00}=\int\mathrm{d}^3x''\Pi^a(\boldsymbol{x}'',t)\dot{\phi}_a(\boldsymbol{x}'',t)-L. \tag{44}$$

按假定，拉氏函数是奇异的，即根据方程组 (43) 不能唯一地用 ϕ,Π 及 $\nabla\phi$, $\nabla\Pi$ 表示出 $\dot{\phi}_a$，这意味着这个方程组含有初约束条

件. 设全部独立的初约束条件可表示为

$$F_m\big(\phi(x),\Pi(x),\nabla\phi(x),\nabla\Pi(x)\big)\approx 0,\quad m=1,2,\cdots,M. \tag{45}$$

对于每种 x 值，都有 M 个条件，所以 (45) 式代表 $3M$ 重连续无限多的约束条件.

根据 (41) 及 (44) 式有

$$\begin{aligned}
&\delta H_c(\phi(t),\Pi(t))\\
&=\int \mathrm{d}^3x''\{\delta\Pi^a(\boldsymbol{x}'',t)\dot{\phi}_a(\boldsymbol{x}'',t)-\delta\phi_a(\boldsymbol{x}'',t)\dot{\Pi}^a(\boldsymbol{x}'',t)\}\\
&=\int \mathrm{d}^3x''\left\{\delta\Pi^a(\boldsymbol{x}'',t)\frac{\delta H_c(\phi(t),\Pi(t))}{\delta\Pi^a(\boldsymbol{x}'',t)}\right\}\\
&\quad+\int \mathrm{d}^3x''\left\{\delta\phi_a(\boldsymbol{x}'',t)\frac{\delta H_c(\phi(t),\Pi(t))}{\delta\phi_a(\boldsymbol{x}'',t)}\right\}.
\end{aligned}$$

借助拉氏乘子法考虑 (5) 式中的约束条件，可把运动方程表示成

$$\dot{\phi}_a(\boldsymbol{x},t)=[\phi_a(\boldsymbol{x},t),H_c(t)]_c$$
$$+\int \mathrm{d}^3x' u_m(\boldsymbol{x}',t)[\phi_a(\boldsymbol{x},t),F_m(\boldsymbol{x}',t)]_c\,, \tag{46a}$$

$$\dot{\Pi}^a(\boldsymbol{x},t)=[\Pi^a(\boldsymbol{x},t),H_c(t)]_c$$
$$+\int \mathrm{d}^3x' u_m(\boldsymbol{x}',t)[\Pi^a(\boldsymbol{x},t),F_m(\boldsymbol{x}',t)]_c\,, \tag{46b}$$

$$F_m\big(\phi(\boldsymbol{x},t),\Pi(\boldsymbol{x},t),\nabla\phi(\boldsymbol{x},t),\nabla\Pi(\boldsymbol{x},t)\big)\approx 0\,, \tag{46c}$$

其中 $u_m(\boldsymbol{x},t)$ 是拉氏乘子，带有下标“ c ”的方括号代表以 (ϕ,Π) 作为基本变量按下式定义的泊松括号：

$$\begin{aligned}
&[F(\phi(t),\Pi(t)),G(\phi(t),\Pi(t))]_c\\
&\equiv\int \mathrm{d}^3x''\left\{\frac{\delta F(t)}{\delta\phi_a(\boldsymbol{x}'',t)}\frac{\delta G(t)}{\delta\Pi^a(\boldsymbol{x}'',t)}-\frac{\delta F(t)}{\delta\Pi^a(\boldsymbol{x}'',t)}\frac{\delta G(t)}{\delta\phi_a(\boldsymbol{x}'',t)}\right\}.
\end{aligned} \tag{47}$$

这里 $F(t)$ 与 $G(t)$ 是当作 (ϕ,Π) 的泛函看待的，例如对于 ϕ_a 与 Π^b 有

$$[\phi_a(\boldsymbol{x},t),\Pi^b(\boldsymbol{x}',t)]_c$$

$$=\int \mathrm{d}^3x''\left\{\frac{\delta\phi_a(\boldsymbol{x},t)}{\delta\phi_c(\boldsymbol{x}'',t)}\frac{\delta\Pi^b(\boldsymbol{x},t)}{\delta\Pi^c(\boldsymbol{x}'',t)}\right\}$$

$$=\int \mathrm{d}^3x''\delta_{ca}\delta_{cb}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')\delta(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}'')\,.$$

因此 ϕ, Π 之间的泊松括号为

$$[\phi_a(\boldsymbol{x},t),\Pi^b(\boldsymbol{x}',t)]_c=\delta_{ab}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),\tag{48}$$

$$[\phi_a(\boldsymbol{x},t),\phi_b(\boldsymbol{x}',t)]_c=0,\tag{49}$$

$$[\Pi^a(\boldsymbol{x},t),\Pi^b(\boldsymbol{x}',t)]_c=0.\tag{50}$$

把初约束条件与运动方程结合起来，注意每个约束都有相应的自洽性条件，可找出所有次约束，设全部独立的次约束条件可表示为

$$G_l\big(\phi(\boldsymbol{x},t),\Pi(\boldsymbol{x},t),\nabla\phi(\boldsymbol{x},t),\nabla\Pi(\boldsymbol{x},t)\big)\approx 0,\quad l=1,2,\cdots,L,\tag{51}$$

于是 (45) 及 (51) 代表全部独立的约束条件. 第一类量和第二类量可以和有限自由度的情形一样地定义：与每个约束构成的泊松括号都弱等于零的量称为第一类的，否则称为第二类的. 相应地，一个约束如果又是第一类量就称为第一类约束，否则称为第二类约束. 如果 (45) 及 (51) 中的第二类约束的某些线性组合能够变成第一类，则用独立的线性式代替它们，使尽可能多的约束归到第一类，于是剩下的第二类约束的独立线性式就不会变成第一类. 现在把经过这样的整理之后的全部独立的约束条件记为

$$\psi_a^{(1)}\big(\phi(\boldsymbol{x},t),\Pi(\boldsymbol{x},t),\nabla\phi(\boldsymbol{x},t),\nabla\Pi(\boldsymbol{x},t)\big)\approx 0,\quad \alpha=1,2,\cdots,I\,,\tag{52}$$

$$\psi_\beta^{(2)}\big(\phi(\boldsymbol{x},t),\Pi(\boldsymbol{x},t),\nabla\phi(\boldsymbol{x},t),\nabla\Pi(\boldsymbol{x},t)\big)\approx 0,\quad \beta=1,2,\cdots,K\,,\tag{53}$$

其中 $\psi_\alpha^{(1)}$ 代表第一类约束，$\psi_\beta^{(2)}$ 代表第二类约束.

在从拉氏方程过渡到正则方程时，可以把全部约束当作附加条件，由此得到相当于 (18) 的广义正则方程如下：

$$\dot{\phi}_a(\boldsymbol{x},t)=[\phi_a(\boldsymbol{x},t),H(t)]_c, \tag{54a}$$

$$\dot{\Pi}^a(\boldsymbol{x},t)=[\Pi^a(\boldsymbol{x},t),H(t)]_c, \tag{54b}$$

$$\psi_\alpha^{(1)}\big(\phi(\boldsymbol{x},t),\Pi(\boldsymbol{x},t),\nabla\phi(\boldsymbol{x},t),\nabla\Pi(\boldsymbol{x},t)\big)\approx 0, \tag{54c}$$

$$\psi_\beta^{(2)}\big(\phi(\boldsymbol{x},t),\Pi(\boldsymbol{x},t),\nabla\phi(\boldsymbol{x},t),\nabla\Pi(\boldsymbol{x},t)\big)\approx 0, \tag{54d}$$

其中 $H(t)$ 是广义哈密顿量

$$\begin{aligned}H(t)=H_c(t)&+\int \mathrm{d}^3x\lambda_\alpha^{(1)}(\boldsymbol{x},t)\psi_\alpha^{(1)}\big(\phi(\boldsymbol{x},t),\Pi(\boldsymbol{x},t),\nabla\phi(\boldsymbol{x},t),\cdots\big)\\&+\int \mathrm{d}^3x\lambda_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x},t)\psi_\beta^{(2)}\big(\phi(\boldsymbol{x},t),\Pi(\boldsymbol{x},t),\nabla\phi(\boldsymbol{x},t),\cdots\big),\end{aligned} \tag{55}$$

$\lambda_\alpha^{(1)}$ 及 $\lambda_\beta^{(2)}$ 是拉氏乘子，前者是任意的，后者满足条件

$$\begin{aligned}&[\psi_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x},t),H_c(t)]_c\\&\quad+\int \mathrm{d}^3x'\lambda_{\beta'}^{(2)}(\boldsymbol{x}',t)[\psi_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x},t),\psi_{\beta'}^{(2)}(\boldsymbol{x}',t)]_c=0\,,\end{aligned} \tag{56}$$

其中 $\psi_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x},t)$ 代表

$$\psi_\beta^{(2)}\big(\phi(\boldsymbol{x},t),\Pi(\boldsymbol{x},t),\nabla\phi(\boldsymbol{x},t),\nabla\Pi(\boldsymbol{x},t)\big)\,.$$

按下式定义以 $(\beta\boldsymbol{x})$ 为行列指标的矩阵 C

$$C_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)\equiv[\psi_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x},t),\psi_{\beta'}^{(2)}(\boldsymbol{x}',t)]_c, \tag{57}$$

则方程组 (56) 变为

$$\int \mathrm{d}^3x'C_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)\lambda_{\beta'}^{(2)}(\boldsymbol{x}',t)+[\psi_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x},t),H_c(t)]_c=0\,, \tag{58}$$

由此求 $\lambda_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x},t)$ 的问题可归结为求矩阵 C 的逆. 把 C^{-1} 的 $(\beta\boldsymbol{x},\beta'\boldsymbol{x}')$ 元素写成 $C^{-1}_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)$，则

$$\int \mathrm{d}^3x_1 C_{\beta\beta_1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_1,t)C^{-1}_{\beta_1\beta'}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}',t)=\delta_{\beta\beta'}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,. \tag{59}$$

$C_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)$ 对于 $(\beta\boldsymbol{x})$ 与 $(\beta'\boldsymbol{x}')$ 的交换是反对称的，所以 (59) 式也包含着

$$\int \mathrm{d}^3x_1 C^{-1}_{\beta\beta_1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_1,t)C_{\beta_1\beta'}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}',t)=\delta_{\beta\beta'}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,. \tag{60}$$

根据 Dirac 证明的前面所说的定理，$C^{-1}_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)$ 是存在的，不过与有限自由度数的情形有一重要差别，即从方程组 (59) 或 (60) 求 $C^{-1}_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)$ 时，除反对称条件外，还需要给出正确的边条件.

在确定了 $C^{-1}_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)$ 之后，$\lambda_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x},t)$ 可表示为

$$\lambda_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x},t)=\int \mathrm{d}^3x' C^{-1}_{\beta'\beta}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)[\psi^{(2)}_{\beta'}(\boldsymbol{x}',t),H_c(t)]_c\,, \tag{61}$$

这是与 (17) 式相当的公式.

4.2 Dirac 括号

与有限自由度数的情形相似，借助 $C^{-1}_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)$ 以及普通的泊松括号可以定义 Dirac 括号. 设 $A(\boldsymbol{x},t)$ 及 $B(\boldsymbol{x},t)$ 是由 $\phi(\boldsymbol{x},t)$，$\Pi(\boldsymbol{x},t)$ 及它们的空间微商构成的量，则它们之间的 Dirac 括号为

$$\begin{aligned}[A(\boldsymbol{x},t),B(\boldsymbol{x}',t)]_D \equiv{}& [A(\boldsymbol{x},t),B(\boldsymbol{x}',t)]_c\\ &-\int \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2[A(\boldsymbol{x},t),\psi^{(2)}_{\beta_1}(\boldsymbol{x}_1,t)]_c\\ &\times C^{-1}_{\beta_1\beta_2}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,t)[\psi^{(2)}_{\beta_2}(\boldsymbol{x}_2,t),B(\boldsymbol{x}',t)]_c\,.\end{aligned} \tag{62}$$

其中的 $(\boldsymbol{x},t)$ 是 $\{\phi(\boldsymbol{x},t),\Pi(\boldsymbol{x},t),\nabla\phi(\boldsymbol{x},t),\nabla\Pi(\boldsymbol{x},t)\}$ 的简写. 这样定义的 Dirac 括号仍然具有在 §2 中列举的各项性质. 特别是

$$[g(\boldsymbol{x},t),\psi_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x}',t)]_D=0, \tag{63}$$

其中 $g(\boldsymbol{x},t)$ 是由 $\phi_a(\boldsymbol{x},t)$, $\Pi^b(\boldsymbol{x},t)$ 和它们的空间微商构成的任意量, 即是说, 在 Dirac 括号下可把第二类约束条件看作强方程. 当两个量 g,f 中有一个是第一类量时, 它们之间的 Dirac 括号弱等于普通的泊松括号. 由此及 (63) 式, 可从方程组 (54) 得出

$$\dot{g}(\boldsymbol{x},t)=\left[g(\boldsymbol{x},t),\ H_c(t)+\int \mathrm{d}^3x'\lambda_\alpha^{(1)}(\boldsymbol{x}',t)\psi_\alpha^{(1)}(\boldsymbol{x}',t)\right]_D, \tag{64a}$$

$$\psi_\alpha^{(1)}(\boldsymbol{x},t)\approx 0, \tag{64b}$$

$$\psi_\beta^{(2)}(\boldsymbol{x},t)=0, \tag{64c}$$

这是用 Dirac 括号表示的正则方程.

4.3 量子化

上一节说明的方法可直接推广到场的情形. 如果存在第一类约束, 原则上可以变为只有第一类约束的问题来处理, 或者直接引入补充条件变为只有第二类约束的问题来处理. 当只存在第二类约束, 或变为只有第二类约束的问题处理时, 原则上可根据约束条件引进独立的正则变量, 这时 H_c 是用独立变量表示的哈密顿量. Dirac 括号 $[g(\boldsymbol{x},t),H_c(t)]_D$ 等于用独立变量定义的泊松括号, 因此不管是否选出了独立变量, 都能够肯定它在薛定谔绘景的量子力学算符等于 g 与 H_c(t) 的算符的对易关系式除以 i(已经令 $\hbar=1$) :

$$\{[g(\boldsymbol{x},t),H_c(t)]_D\}_{QM}=\frac{1}{\mathrm{i}}\big(\hat{g}(\boldsymbol{x})\hat{H}_c-\hat{H}_c\hat{g}(\boldsymbol{x})\big). \tag{65}$$

每个实的量的算符当然都是厄米的, ϕ_a 与 Π^b 在薛定谔绘景的算

符与时间无关，并且满足如下的对易关系

$$[\widehat{\phi}_a(\boldsymbol{x}), \widehat{\phi}_b(\boldsymbol{x}')] = \mathrm{i}\{[\phi_a(\boldsymbol{x},t), \phi_b(\boldsymbol{x}',t)]_D\}_{QM}\,, \tag{66}$$

$$[\widehat{\Pi}^a(\boldsymbol{x}), \widehat{\Pi}^b(\boldsymbol{x}')] = \mathrm{i}\{[\Pi^a(\boldsymbol{x},t), \Pi^b(\boldsymbol{x}',t)]_D\}_{QM}\,, \tag{67}$$

$$[\widehat{\phi}_a(\boldsymbol{x}), \widehat{\Pi}^b(\boldsymbol{x}')] = \mathrm{i}\{[\phi_a(\boldsymbol{x},t), \Pi^b(\boldsymbol{x}',t)]_D\}_{QM}\,. \tag{68}$$

如果这些式子的右边含有场算符，则它们一般是不便于使用的. 例如，在 §6 讨论在库仑规范下将非阿贝尔规范场量子化的问题时就会遇到这种类型的对易关系.

§ 5　Dirac 方法对自由电磁场的应用

5.1　规范不变性与约束条件

电磁场的拉氏函数当矢量势 $A^\mu(x)$ 作任意规范变换时保持不变，所以在 A^μ 及 $\dot{A}^\mu$ 的一定初值下，根据运动方程只能把 $A^\mu(x)$ 决定到一个在初始时刻为恒等变换的任意规范变换，这说明拉氏函数是奇异的而且会产生第一类约束，各种非阿贝尔规范场也是这样. 本节说明 Dirac 方法对电磁场的应用.

电磁场的拉氏函数可写成

$$L = \int \mathrm{d}^3x\mathcal{L}\,, \tag{69}$$

其中

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\,, \tag{70}$$

$$F^{\mu\nu} \equiv \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu\,. \tag{71}$$

拉氏方程为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{A}_\nu} + \partial_k\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_k A_\nu)} = 0\,. \tag{72}$$

由 (70) 式得

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu A_\nu)} = -F^{\mu\nu} \,, \tag{73}$$

故 (72) 式给出

$$\dot{F}^{0\nu} + \partial_k F^{k\nu} = 0 \,. \tag{74}$$

用 $A^0(\boldsymbol{x},t)$ 及 $A(\boldsymbol{x},t)$ 写出来就是

$$\nabla \cdot (\nabla A^0 + \dot{\boldsymbol{A}}\,) = 0 \,, \tag{75}$$

$$\ddot{\boldsymbol{A}}\, - \nabla^2 \boldsymbol{A} + \nabla(\dot{A}^0 + \nabla \cdot \boldsymbol{A}) = 0 \,. \tag{76}$$

(75) 式即是拉氏方程组包含的约束条件.

用 $\Pi^\mu(x,t)$ 代表相应于 $A_\mu(x,t)$ 的正则动量，则

$$\Pi^\mu(x,t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_\mu(\boldsymbol{x},t)} = -F^{0\mu} \,. \tag{77}$$

即

$$\Pi^0(\boldsymbol{x},t) = 0 \,, \tag{78}$$

$$\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t) = -(\nabla A^0 + \dot{\boldsymbol{A}}\,) \,. \tag{79}$$

(78) 式代表 Dirac 方法中的初约束条件，它的自洽性要求与 (74) 式结合产生如下的次约束条件

$$\nabla \cdot \vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t) = 0 \,, \tag{80}$$

这正是 (75) 式，它和 (78) 代表了由拉氏函数自动产生的全部约束条件. 以 A^μ, Π^μ 为基本变量的泊松括号可借助如下的基本括号确定

$$[A^\mu(\boldsymbol{x},t),\ A^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_c = 0 \,,$$

$$[\Pi^\mu(\boldsymbol{x},t),\ \Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_c = 0 \,,$$

$$[A^\mu(\boldsymbol{x},t),\ \Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_c = \delta_{\mu\nu}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\ .$$

由此计算约束之间的泊松括号可得

$$[\Pi^0(\boldsymbol{x},t),\ \Pi^0(\boldsymbol{x}',t)]_c = 0\ ,$$

$$[\Pi^0(\boldsymbol{x},t),\ \nabla'\cdot\vec{\Pi}(\boldsymbol{x}',t)]_c = \nabla'\cdot[\Pi^0(\boldsymbol{x},t),\ \vec{\Pi}(\boldsymbol{x}',t)]_c = 0\ ,$$

$$[\nabla\cdot\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t),\ \nabla'\cdot\vec{\Pi}(\boldsymbol{x}',t)]_c = 0\ .$$

这说明只存在第一类约束.

由能量动量张量的表达式得出

$$\begin{aligned} &H_c(A,\Pi)\\ &\quad=\int \mathrm{d}^3x\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{A}_\mu}\dot{A}_\mu(\boldsymbol{x},t)-L\\ &\quad=\int \mathrm{d}^3x\left\{\frac{1}{2}\vec{\Pi}\cdot\vec{\Pi}+\frac{1}{4}F^{kl}F_{kl}-A^0\nabla\cdot\vec{\Pi}\right\}. \end{aligned}\tag{81}$$

容易验证, $H_c(A,\Pi)$ 与每个约束的泊松括号都弱等于零, 因此它是第一类量. 正则方程可表示为

$$\dot{A}^\mu(\boldsymbol{x},t) = [A^\mu(\boldsymbol{x},t), H(t)]_c,\tag{82a}$$

$$\dot{\Pi}^\mu(\boldsymbol{x},t) = [\Pi^\mu(\boldsymbol{x},t), H(t)]_c,\tag{82b}$$

$$\Pi^0(\boldsymbol{x},t)\approx 0,\tag{82c}$$

$$\nabla\cdot\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t)\approx 0,\tag{82d}$$

其中哈密顿量 H 为

$$\begin{aligned} H(t) =& h(t)+\int \mathrm{d}^3x u(\boldsymbol{x},t)\Pi^0(\boldsymbol{x},t)\\ &+\int \mathrm{d}^3x v(\boldsymbol{x},t)\nabla\cdot\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t), \end{aligned}\tag{83}$$

其中

$$h(t)=\int \mathrm{d}^3x\left\{\frac{1}{2}\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t)\cdot\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t)+\frac{1}{4}F^{kl}(\boldsymbol{x},t)F_{kl}(\boldsymbol{x},t)\right\}.\tag{84}$$

h 是第一类量，$u(\boldsymbol{x},t)$ 及 $v(\boldsymbol{x},t)$ 都是完全任意的量.

5.2 在库仑规范下的正则方程和量子化

(1) 补充约束条件

现在选取库仑规范进行讨论. 规范条件为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0\,, \tag{85}$$

这种外加的约束条件与运动方程是相容的，而且在规定 A^{μ} 在无穷远处足够快地趋于零后，由规范变换造成的任意性已经完全被消除，(85) 式所要求的自洽性条件如下：

$$\nabla\cdot\dot{\boldsymbol{A}}\ =0\,,$$

由此及 (79) 和 (80) 式得出

$$\nabla^2 A^0(\boldsymbol{x},t)=0\,,$$

这个方程式和上述边条件确定了 $A^0(\boldsymbol{x},t)$, 即

$$A^0(\boldsymbol{x},t)=0\,. \tag{86}$$

(85) 及 (86) 式代表在库仑规范下的全部补充约束条件，把它们和 (78),(80) 式合并起来，得到四组约束条件

$$\psi_1(\boldsymbol{x},t)\equiv\Pi^0(\boldsymbol{x},t)\approx 0, \tag{87a}$$

$$\psi_2(\boldsymbol{x},t)\equiv\nabla\cdot\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t)\approx 0, \tag{87b}$$

$$\psi_3(\boldsymbol{x},t)\equiv A^0(\boldsymbol{x},t)\approx 0, \tag{87c}$$

$$\psi_4(\boldsymbol{x},t)\equiv\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)\approx 0. \tag{87d}$$

对于 (87) 式中的全部约束而言，不再存在第一类约束，这些约束的线性式也不会变成第一类，因此由 $[\psi_\beta(\boldsymbol{x},t),\ \psi_{\beta'}(\boldsymbol{x}',t)]_c$ 形

成的矩阵是非异的，同时，H_c 和 h 也不再是第一类量，正则方程可以表示为

$$\dot{A}^{\mu}(\boldsymbol{x},t)=[A^{\mu}(\boldsymbol{x},t),H'(t)]_c, \tag{88a}$$

$$\dot{\Pi}^{\mu}(\boldsymbol{x},t)=[\Pi^{\mu}(\boldsymbol{x},t)H'(t)]_c, \tag{88b}$$

$$\psi_{\beta}(\boldsymbol{x},t)\approx 0, \tag{88c}$$

其中

$$H'(t)=h(t)+\int \mathrm{d}^3x\lambda_{\beta}(\boldsymbol{x},t)\psi_{\beta}(\boldsymbol{x},t), \tag{89}$$

$$\lambda_{\beta}(\boldsymbol{x},t)=\int \mathrm{d}^3x' C^{-1}_{\beta'\beta}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},t)[\psi_{\beta'}(\boldsymbol{x}',t),h(t)]_c. \tag{90}$$

式中的 $C^{-1}_{\beta'\beta}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},t)$ 是矩阵 C 的逆矩阵的 $(\beta'\boldsymbol{x}',\beta\boldsymbol{x})$ 元素，而 C 的 $(\beta\boldsymbol{x},\beta'\boldsymbol{x}')$ 元素由下式定义

$$C_{\beta'\beta}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)\equiv[\psi_{\beta}(\boldsymbol{x},t),\psi_{\beta'}(\boldsymbol{x}',t)]_c. \tag{91}$$

(2) Dirac 括号

由于 $C_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)$ 对于双指标 $(\beta\boldsymbol{x})$ 与 $(\beta'\boldsymbol{x})$ 的交换是反对称的，并且 C_{12}, C_{14}, C_{23} 及 C_{34} 显然等于零，按 (β,β') 把矩阵 C 划分成 16 个子矩阵有

$$C=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}C_{13} & 0\\ 0 & C_{24}\end{pmatrix}, \tag{92}$$

其中 C_{13} 及 C_{24} 由 C 的如下元素构成

$$C_{13}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)=[\Pi^0(\boldsymbol{x},t),A^0(\boldsymbol{x}',t)]_c=-\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'), \tag{93}$$

$$\begin{aligned}C_{24}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)&=[\nabla\cdot\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t),\nabla'\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}',t)]_c\\&=-\nabla^2\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,.\end{aligned} \tag{94}$$

可见，$C_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)$ 与 t 无关，它是 $(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$ 的偶函数. $C^{-1}_{\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)$ 也应该如此，并且 C^{-1} 也具有 (92) 式的形式

$$C^{-1}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}C_{13}^{-1} & 0\\ 0 & C_{24}^{-1}\end{pmatrix}. \tag{95}$$

其中 C_{13}^{-1} 及 C_{24}^{-1} 分别是由 C^{-1} 的元素 $C_{13}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'),C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ 构成的矩阵，这些元素满足如下的条件

$$\int \mathrm{d}^3x''C_{13}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'')C_{13}(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}')=-\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),$$

$$\int \mathrm{d}^3x''C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'')C_{24}(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}')=-\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}').$$

由此和 (93),(94) 式得出

$$C_{13}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'), \tag{96}$$

$$\nabla^2C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'). \tag{97}$$

实际上为了决定 Dirac 括号，不需要完全知道 $C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$. 根据 (62) 式，$\xi(\boldsymbol{x},t)$, $\eta(\boldsymbol{x}',t)$ 之间的 Dirac 括号为

$$\begin{aligned}[\xi(\boldsymbol{x},t),\eta(\boldsymbol{x}',t)]_D=&[\xi(\boldsymbol{x},t),\eta(\boldsymbol{x}',t)]_c\\ &-\int \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2[\xi(\boldsymbol{x},t),\psi_{\beta_1}(\boldsymbol{x}_1,t)]_c\\ &\times C^{-1}_{\beta_1\beta_2}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)[\psi_{\beta_2}(\boldsymbol{x}_2,t),\eta(\boldsymbol{x}',t)]_c\,.\end{aligned}$$

对于 $A^\mu(\boldsymbol{x},t),\Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)$ 有

$$[A^\mu(\boldsymbol{x},t),A^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_D=0\,,$$

$$[\Pi^\mu(\boldsymbol{x},t),\Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_D=0\,,$$

$$
\begin{aligned}
&[A_\mu(\boldsymbol{x},t),\Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_D \\
&\quad=\delta_{\mu\nu}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\
&\qquad-\int \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2[A_\mu(\boldsymbol{x},t),\Pi^0(\boldsymbol{x}_1,t)]_c C_{13}^{-1}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2) \\
&\qquad\times[A_0(\boldsymbol{x}_2,t),\Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_c \\
&\qquad-\int \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2[A_\mu(\boldsymbol{x},t),\nabla_1\cdot\boldsymbol{\Pi}(\boldsymbol{x}_1,t)]_c C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2) \\
&\qquad\times[\nabla_2\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_2,t),\Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_c\,.
\end{aligned}
$$

最后的式子化简后为

$$
\begin{aligned}
&[A_\mu(\boldsymbol{x},t),\Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_D \\
&\quad=\delta_{\mu\nu}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\
&\qquad-\delta_{\mu0}\delta_{\nu0}C_{13}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')+\delta_{l\mu}\delta_{j\nu}\partial_l\partial'_j C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,,
\end{aligned}
\tag{98}
$$

其中 ∂_l 及 ∂'_j 分别代表对 $\boldsymbol{x}$ 及 $\boldsymbol{x}'$ 的微商. 由于 A_0 及 Π^0 都是约束, 在 Dirac 括号下可直接看作零, 因此在 (98) 式中只要 μ 或 ν 是零, 结果就等于零, 由此可导出 (96) 式. 已知 $C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ 是 $(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$ 的函数, 故 (98) 式给出

$$
\begin{aligned}
&[A_\mu(\boldsymbol{x},t),\Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_D \\
&\quad=(\delta_{\mu\nu}-\delta_{\mu0}\delta_{\nu0})\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')-\delta_{l\mu}\delta_{j\nu}\partial_l\partial_j C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,.
\end{aligned}
\tag{98'}
$$

这说明, 只要知道 $\partial_l\partial_j C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ 的表达式就完全决定了 Dirac 括号. 这个量的方程式也可从 (98′) 式求出, 或者从 (97) 式求出:

$$
\nabla^2\partial_l\partial_j C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\partial_l\partial_j\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}').
\tag{99}
$$

现在只需要提出 $\partial_i\partial_j C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ 的边条件, 考虑到它在 (98′) 式中的地位, 我们要求它可表示为

$$
\partial_l\partial_j C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\int \mathrm{d}^3k f_{lj}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}.
$$

于是

$$
\begin{aligned}
f_{lj}(\boldsymbol{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3x \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\partial_l\partial_j C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x}) \\
&= \frac{-1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3x \frac{1}{k^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\nabla^2\partial_l\partial_j C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x}) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{k_l k_j}{k^2}\,,
\end{aligned}
$$

其中 k 代表 $\boldsymbol{k}$ 的长度，因此

$$
\begin{aligned}
\partial_l\partial_j C_{24}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k \frac{k_l k_j}{k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} \\
&= -\partial_l\partial_j \int \mathrm{d}^3k \frac{1}{k^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} \\
&= \partial_l\partial_j \frac{1}{\nabla^2}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,. \qquad (100)
\end{aligned}
$$

这里约定：算子 $1/\nabla^2$ 的意义借助被其作用的量的傅氏展开来确定，最后得到 A^μ, Π^ν 之间的 Dirac 括号的表达式如下

$$
[A^\mu(\boldsymbol{x},t), A^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_D = 0, \qquad (101)
$$

$$
[\Pi^\mu(\boldsymbol{x},t), \Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_D = 0, \qquad (102)
$$

$$
\begin{aligned}
[A_\mu(\boldsymbol{x},t), \Pi^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_D &= (\delta_{\mu\nu} - \delta_{\mu 0}\delta_{\nu 0})\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\
&\quad - \delta_{\mu l}\delta_{\nu j}\partial_l\partial_j \frac{1}{(\nabla^2)}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,. \qquad (103)
\end{aligned}
$$

借助 Dirac 括号可把运动方程表达为

$$
\dot{A}^\mu(\boldsymbol{x},t) = [A^\mu(\boldsymbol{x},t), h(t)]_D, \qquad (104a)
$$

$$
\dot{\Pi}^\mu(\boldsymbol{x},t) = [\Pi^\mu(\boldsymbol{x},t), h(t)]_D, \qquad (104b)
$$

$$
\psi_\beta(\boldsymbol{x},t) = 0, \qquad (104c)
$$

其中 (104c) 当作强方程看待.

(3) 用 A, Π 表达的量子条件

根据方程组 (104), h 就是系统的哈密顿量, A^μ 及 Π^ν 的算符 (在薛定谔绘景) 满足如下的条件

$$\widehat{A}^\mu(\boldsymbol{x})^\dagger = \widehat{A}^\mu(\boldsymbol{x}), \tag{105}$$

$$\widehat{\Pi}^\mu(\boldsymbol{x})^\dagger = \widehat{\Pi}^\mu(\boldsymbol{x}), \tag{106}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{A}^\mu(\boldsymbol{x}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{\Pi}^\mu(\boldsymbol{x}) = 0, \tag{107}$$

$$[\widehat{A}^\mu(\boldsymbol{x}), \widehat{A}^\nu(\boldsymbol{x}')] = 0, \tag{108a}$$

$$[\widehat{\Pi}^\mu(\boldsymbol{x}), \widehat{\Pi}^\nu(\boldsymbol{x}')] = 0, \tag{108b}$$

$$\begin{aligned}[\widehat{A}_\mu(\boldsymbol{x}), \widehat{\Pi}^\nu(\boldsymbol{x}')] =& \mathrm{i}(\delta_{\mu\nu} - \delta_{\mu 0}\delta_{\nu 0})\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\ & - \mathrm{i}\delta_{\mu l}\delta_{\nu j}\partial_l\partial_j\frac{1}{(\nabla^2)}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,,\end{aligned} \tag{109}$$

$$\widehat{\Pi}^0(\boldsymbol{x}) = 0, \tag{110a}$$

$$\nabla\cdot\left(\vec{\Pi}(\boldsymbol{x})\right)_{QM} = 0, \tag{110b}$$

$$\widehat{A}^0(\boldsymbol{x}) = 0, \tag{110c}$$

$$\nabla\cdot\widehat{A}(\boldsymbol{x}) = 0. \tag{110d}$$

$\widehat{A}^0(\boldsymbol{x})$ 及 $\widehat{\Pi}^0(\boldsymbol{x})$ 可根据约束条件从对易关系和各种物理量的表达式中取消, 剩下的 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ 及 $\vec{\Pi}(\boldsymbol{x})$ 的算符满足如下的条件

$$[\widehat{A}^l(\boldsymbol{x}), \widehat{A}^j(\boldsymbol{x}')] = 0\,, \tag{111a}$$

$$[\widehat{\Pi}^l(\boldsymbol{x}), \widehat{\Pi}^j(\boldsymbol{x}')] = 0, \tag{111b}$$

$$\begin{aligned}[\widehat{A}^l(\boldsymbol{x}), \widehat{\Pi}^j(\boldsymbol{x}')] =& \mathrm{i}\delta_{lj}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\ & - \mathrm{i}\partial_l\partial_j\frac{1}{(\nabla^2)}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),\end{aligned} \tag{111c}$$

$$\nabla \cdot \widehat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x}) = 0, \tag{112a}$$

$$\nabla \cdot \left(\vec{\Pi}(\boldsymbol{x})\right)_{QM} = 0. \tag{112b}$$

(4) 引用独立变量的方法

为了便于与通常的方法对比，再引用一种独立变量作简略的讨论. 回到方程组 (104)，按照约束条件把 A^0, Π^0 取消后得到

$$\dot{\boldsymbol{A}}\,(\boldsymbol{x},t) = [\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t), h(t)]_D, \tag{113a}$$

$$\dot{\vec{\Pi}}(\boldsymbol{x},t) = [\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t), h(t)]_D, \tag{113b}$$

$$\nabla \cdot \vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t) = 0, \tag{113c}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t) = 0. \tag{113d}$$

定义如下的复变量 $\vec{\Phi}(\boldsymbol{x},t)$:

$$\vec{\Phi}(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{(-\nabla^2)^{1/4}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t) - \mathrm{i}(-\nabla^2)^{-1/4}\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t)\right\}, \tag{114}$$

则

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\nabla^2)^{-1/4}\left\{\vec{\Phi}(\boldsymbol{x},t) + \vec{\Phi}^*(\boldsymbol{x},t)\right\}, \tag{115}$$

$$\vec{\Pi}(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\nabla^2)^{1/4}\left\{\vec{\Phi}(\boldsymbol{x},t) - \vec{\Phi}^*(\boldsymbol{x},t)\right\}, \tag{116}$$

$\vec{\Phi}(\boldsymbol{x},t)$, $\vec{\Phi}^*(\boldsymbol{x},t)$ 之间的 Dirac 括号可借助 (101)—(103) 式求出：

$$[\Phi^j(\boldsymbol{x},t), \Phi^l(\boldsymbol{x}',t)]_D = 0\,, \tag{117}$$

$$[\Phi^j(\boldsymbol{x},t), \Phi^{l*}(\boldsymbol{x}',t)]_D = -\mathrm{i}\delta_{lj}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') + \mathrm{i}\partial_l\partial_j\frac{1}{(\nabla^2)}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,. \tag{118}$$

考虑了条件 (113c) 及 (113d) 之后，可把 $\vec{\Phi}(\boldsymbol{x},t)$ 表示为

$$\vec{\Phi}(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3k\,\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\lambda)a_\lambda(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,,. \tag{119}$$

其中 $\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\lambda)$ 代表两个互相正交的横向单位矢量，并且约定

$$\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},1)\times\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},2)=\boldsymbol{k}/k\,,$$
$$\vec{\varepsilon}(-\boldsymbol{k},1)=-\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},1)\,,$$
$$\vec{\varepsilon}(-\boldsymbol{k},2)=-\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},2)\,.$$

因此 (119) 式的逆变换给出

$$a_\lambda(\boldsymbol{k},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\vec{\boldsymbol{\Phi}}(\boldsymbol{x},t)\cdot\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\lambda)\,. \tag{120}$$

由此及 (117),(118) 可求出 $a_\lambda(\boldsymbol{k},t)$, $a^*_\lambda(\boldsymbol{k}',t)$ 之间的 Dirac 括号

$$[a_\lambda(\boldsymbol{k},t),a_{\lambda'}(\boldsymbol{k}',t)]_D=0, \tag{121}$$

$$[a_\lambda(\boldsymbol{k},t),a^*_{\lambda'}(\boldsymbol{k}',t)]_D=-\mathrm{i}\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,, \tag{122}$$

借助 $a_\lambda(\boldsymbol{k},t)$, $a^*_\lambda(\boldsymbol{k}',t)$ 表示的运动方程可写成如下的形式

$$\dot{a}_\lambda(\boldsymbol{k},t)=[a_\lambda(\boldsymbol{k},t),h(a^*(t),a(t)]_D, \tag{123}$$

其中

$$h(a^*(t),a(t))=\int \mathrm{d}^3k\{ka^*_\lambda(\boldsymbol{k},t)a_\lambda(\boldsymbol{k},t)\}. \tag{124}$$

借助 (121) 及 (122) 式又可把 (123) 式重写成

$$\mathrm{i}\dot{a}_\lambda(\boldsymbol{k},t)=\frac{\delta h(a^*(t),a(t))}{\delta a^*_\lambda(\boldsymbol{k},t)}. \tag{125}$$

这是我们已经熟悉的正则形式的运动方程，根据 (121)—(123) 式建立量子条件的方法当然就与通常的方法没有差别了. 薛定谔绘

景的量子条件和哈密顿量算符为

$$a_\lambda(\boldsymbol{k}) \to \widehat{a}_\lambda(\boldsymbol{k}),$$

$$a^*_\lambda(\boldsymbol{k}) \to \widehat{a}^\dagger_\lambda(\boldsymbol{k}),$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{a}_\lambda(\boldsymbol{k}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{a}^\dagger_\lambda(\boldsymbol{k}) = 0,$$

$$[\widehat{a}_\lambda(\boldsymbol{k}), \widehat{a}_{\lambda'}(\boldsymbol{k}')] = 0,$$

$$[\widehat{a}_\lambda(\boldsymbol{k}), \widehat{a}^\dagger_{\lambda'}(\boldsymbol{k}')] = \delta_{\lambda\lambda'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'),$$

$$\widehat{h} = \int \mathrm{d}^3k\, k\, \widehat{a}^\dagger_\lambda(\boldsymbol{k})\widehat{a}_\lambda(\boldsymbol{k}),$$

其中 $\widehat{a}^\dagger_\lambda(\boldsymbol{k})$ 即是产生一个能量为 k 的光子的算符，$\widehat{a}_\lambda(\boldsymbol{k})$ 是相应的消灭算符. 再求出动量和角动量算符，则可看出，由 $a^\dagger_\lambda(\boldsymbol{k})$ 产生的光子的动量为 $\boldsymbol{k}$，极化状态为 λ.

§ 6 Dirac 方法对 SU_3 规范场的应用

6.1 SU_3 规范场的拉氏函数及正则方程

SU_3 规范场是有重要作用的非阿贝尔规范场. 非阿贝尔规范场的理论是推广电磁场的理论而构成的，电磁场的势函数 $A_\mu(x)$ 是一个洛伦兹矢量，其运动方程对于如下的规范变换保持不变：

$$A_\mu(x) \to A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \frac{1}{e}\partial_\mu\theta(x),$$

其中 $\theta(x)$ 是可微实函数. 这个变换也可表示为

$$\mathrm{i}eA_\mu(x) \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(x)}\mathrm{i}eA_\mu(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta(x)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(x)}\partial_\mu\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta(x)}. \tag{126}$$

在每个时空点 x，全体 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(x)}$ 构成 $U(1)$ 群，$\theta(x)$ 是群参量. 由于变换 (126) 允许 $\theta(x)$ 是任意可微的实函数，它被称为局域 $U(1)$ 变

换，属于阿贝尔规范变换，电磁场是阿贝尔规范场．所谓 SU_3 规范场包含 8 种洛伦兹矢量场，其势函数为

$$A_{a\mu}(x),\quad a=1,2,\cdots,8\,.$$

在每种 a 值下，$A_{a\mu}(x)$ 代表一个洛伦兹矢量场，它们的运动方程对于如下的局域规范变换保持不变

$$A_{a\mu}(x)t_a\longrightarrow$$

$$A'_{a\mu}(x)t_a=\Omega(x)A_{a\mu}(x)t_a\Omega^{-1}(x)+\frac{1}{\mathrm{i}g}\Omega(x)\partial_\mu\Omega^{-1}(x)\,,\qquad(127)$$

其中 g 是实常量，它取代了 (126) 式中的 e．$\Omega(x)$ 是 3×3 幺模幺正矩阵．在每个时空点 x，全体 $\Omega(x)$ 构成 SU_3 群的基础表示，$(t_1,t_2,\cdots,t_8)$ 是这个表示的生成元．借助这些矩阵可把 $\Omega(x)$ 写成

$$\Omega(x)=\exp\{\theta_a(x)t_a\}\,,\qquad(128)$$

其中 $(\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_8)$ 代表群参量．由于变换 (127) 允许 $\theta_a(x)$ 是任意可微实函数，被称为局域 SU_3 变换．我们把 t_a 选定为

$$t_a=\frac{\mathrm{i}}{2}\lambda_a\ \ (a=1,2,\cdots,8)\,,\qquad(129)$$

其中 λ_a 代表 8 个 Gell-Mann 矩阵

$$\lambda_{1,2,3}=\left(\begin{array}{cc|c}&&0\\ &\boldsymbol{\sigma}&0\\ \hline 0&0&0\end{array}\right),\quad\lambda_4=\left(\begin{array}{cc|c}0&0&1\\ 0&0&0\\ \hline 1&0&0\end{array}\right),\quad\lambda_5=\left(\begin{array}{cc|c}0&0&-\mathrm{i}\\ 0&0&0\\ \hline \mathrm{i}&0&0\end{array}\right),$$

$$\lambda_6=\left(\begin{array}{cc|c}0&0&0\\ 0&0&1\\ \hline 0&1&0\end{array}\right),\quad\lambda_7=\left(\begin{array}{cc|c}0&0&0\\ 0&0&-\mathrm{i}\\ \hline 0&\mathrm{i}&0\end{array}\right),\quad\lambda_8=\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\begin{array}{cc|c}&&0\\ &\boldsymbol{I}&0\\ \hline 0&0&-2\end{array}\right),$$

在矩阵 λ_8 的表达式中的 $\boldsymbol{I}$ 代表 2×2 单位矩阵．各个 t_a 都是反厄米无迹矩阵，并且满足

$$\mathrm{tr}\,(t_at_b)=-\frac{1}{2}\delta_{ab}\,,\qquad(130)$$

$$[t_a, t_b] = C_{abc} t_c \,, \tag{131}$$

$$C_{abc} = -2\mathrm{tr}\left([t_a, t_b] t_c\right). \tag{132}$$

C_{abc} 是实数，对于 a, b, c 是全反对称的，其基本分量的值如下

abc	123	147	156	246	257	345	367	458	678
C_{abc}	-1	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$

场的拉氏函数是由 $A_{a\mu}$ 和它们的不高于两次微商构成的局域 SU_3 不变的洛伦兹标量，其表达式是

$$L = \int \mathrm{d}^3 x \, \mathcal{L}, \tag{133}$$

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}\right), \tag{134}$$

其中

$$\begin{aligned} F^{\mu\nu}(x) = & \partial^\mu \mathcal{A}^\nu(x) - \partial^\nu \mathcal{A}^\mu(x) \\ & + \mathrm{i}g\left\{\mathcal{A}^\mu(x)\mathcal{A}^\nu(x) - \mathcal{A}^\nu(x)\mathcal{A}^\mu(x)\right\}, \end{aligned} \tag{135}$$

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu}(x) = & \partial_\mu \mathcal{A}_\nu(x) - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu(x) \\ & + \mathrm{i}g\left\{\mathcal{A}_\mu(x)\mathcal{A}_\nu(x) - \mathcal{A}_\nu(x)\mathcal{A}_\mu(x)\right\}, \end{aligned} \tag{136}$$

$$\mathcal{A}^\mu(x) \equiv A_a^\mu(x)\frac{1}{2}\lambda_a \,, \tag{137}$$

$$\mathcal{A}_\mu(x) \equiv A_{a\mu}(x)\frac{1}{2}\lambda_a \,, \tag{138}$$

$$A_{a\mu}(x) = g_{\mu\nu} A_a^\nu(x) \,. \tag{139}$$

(139) 式中的 $g_{\mu\nu}$ 是闵可夫斯基空间的度规张量 ($g_{00} = 1$, $g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1$). 利用 (131) 可以把 (135) 式及 (136) 式写成

$$F^{\mu\nu}(x) = F_a^{\mu\nu}(x)\frac{1}{2}\lambda_a \,, \tag{140}$$

$$F_{\mu\nu}(x) = F_{a\mu\nu}(x)\frac{1}{2}\lambda_a \,, \tag{141}$$

其中

$$F_a^{\mu\nu}(x) = \partial^\mu A_a^\nu(x) - \partial^\nu A_a^\mu(x) - gC_{abc}A_b^\nu(x)A_c^\mu(x)\,, \tag{142}$$

$$F_{a\mu\nu}(x) = \partial_\mu A_{a\nu}(x) - \partial_\nu A_{a\mu}(x) - gC_{abc}A_{b\nu}(x)A_{c\mu}(x)\,. \tag{143}$$

由此可把 (134) 式表示为

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_a^{\mu\nu}(x)F_{a\mu\nu}(x)\,. \tag{144}$$

当 A_μ 按 (127) 式变换时，$F^{\mu\nu}$ 具有如下的简单变换性质：

$$F_a'^{\mu\nu}(x)\frac{1}{2}\lambda_a = \Omega(x)F_a^{\mu\nu}\frac{1}{2}\lambda_a\Omega^{-1}(x), \tag{145}$$

$$F'_{a\mu\nu}(x)\frac{1}{2}\lambda_a = \Omega(x)F_{a\mu\nu}\frac{1}{2}\lambda_a\Omega^{-1}(x), \tag{146}$$

左边的 $F_a'^{\mu\nu}(x)$ 及 $F'_{a\mu\nu}(x)$ 即是在 $F_a^{\mu\nu}(x)$ 及 $F_{a\mu\nu}(x)$ 中把各个 $A_{a\mu}(x)$ 换成 $A'_{a\mu}(x)$ 的结果. 由此看到，$\mathcal{L}$ 确是局域 SU_3 不变量 (当然是洛伦兹标量) . 拉氏函数的局域 SU_3 不变性意味着它是奇异的，而且由于 $F^{\mu\nu}$ 含有 A 的二次项，导致规范场的自作用. 非阿贝尔规范场的动力学的各种特点都与这种自作用有关.

下面我们按照 Dirac 的方法建立 SU_3 规范场的正则方程. 根据 (144) 式有

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu A_{a\mu\nu})} = -F_a^{\mu\nu}\,, \tag{147}$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial A_{a\nu}} = gC_{abc}F_b^{\nu\nu'}A_{c\nu'}\,. \tag{148}$$

故拉氏方程可写成

$$\dot{F}_a^{0\nu} + \partial_k F_a^{k\nu} + gC_{abc}F^{\nu\nu'}A_{c\nu'} = 0\,. \tag{149}$$

按 $\nu = 0$ 及 $\nu = 1,2,3$ 写出就是

$$\partial_k F_a^{k0} + gC_{abc}F_b^{0k}A_{ck} = 0\,, \tag{150a}$$

$$\dot{F}_a^{0j} + \partial_k F_a^{kj} + gC_{abc}F_b^{j\nu'}A_{c\nu'} = 0\,. \tag{150b}$$

(150a) 式是在拉氏方程中包含的约束条件.

用 $\Pi_a^\mu(\boldsymbol{x},t)$ 代表相应于 $A_{a\mu}(\boldsymbol{x},t)$ 的正则动量，则

$$\Pi_a^\mu(\boldsymbol{x},t)=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{A}_{a\mu}(\boldsymbol{x},t)}=-F^{0\mu}\,, \tag{151}$$

即

$$\Pi_a^0(\boldsymbol{x},t)=0\,, \tag{152}$$

$$\Pi_a^k(\boldsymbol{x},t)=-F_a^{0k}\,. \tag{153}$$

(152) 式即是 Dirac 方法中的初约束条件，把它的自洽性要求与 (149) 式结合起来得出如下的次约束条件

$$\partial_k\Pi_a^k-gC_{abc}\Pi_b^kA_{ck}=0\,. \tag{154}$$

这即是 (150a) 式，它和 (152) 式代表了由拉氏函数产生的全部约束条件，记为

$$\psi_{(a)1}(\boldsymbol{x},t)\equiv\Pi_a^0(\boldsymbol{x},t)=0\,, \tag{155a}$$

$$\psi_{(a)2}(\boldsymbol{x},t)\equiv\partial_k\Pi_a^k(\boldsymbol{x},t)-gC_{abc}\Pi_b^k(\boldsymbol{x},t)A_{ck}(\boldsymbol{x},t)=0\,. \tag{155b}$$

以 A_a^μ, Π_b^ν 作为基本变量的泊松括号可借助如下的基本括号求出

$$[A_a^\mu(\boldsymbol{x},t),A_b^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_c=0\,, \tag{156a}$$

$$[\Pi_a^\mu(\boldsymbol{x},t),\Pi_b^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_c=0\,, \tag{156b}$$

$$[A_{a\mu}(\boldsymbol{x},t),\Pi_b^\nu(\boldsymbol{x}',t)]_c=\delta_{ab}\delta_{\mu\nu}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,. \tag{156c}$$

由此得出

$$[\psi_{(a)1}(\boldsymbol{x},t),\psi_{(b)1}(\boldsymbol{x}',t)]_c=0, \tag{157a}$$

$$[\psi_{(a)1}(\boldsymbol{x},t),\psi_{(b)2}(\boldsymbol{x}',t)]_c=0, \tag{157b}$$

$$[\psi_{(a)2}(\boldsymbol{x},t),\psi_{(b)2}(\boldsymbol{x}',t)]_c=gC_{abc}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\psi_{(c)2}(\boldsymbol{x})\,. \tag{157c}$$

所以约束之间的泊松括号弱等于零，即不存在第二类约束.

能量动量张量的表达式是

$$T_{\mathrm{c}}^{\mu\nu}(x)=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu A_{a\rho}(x))}\partial^\nu A_{a\rho}(x)-g^{\mu\nu}\mathcal{L}$$

$$=-F_a^{\mu\rho}\partial^\nu A_{a\rho}(x)-g^{\mu\nu}\mathcal{L}\,, \tag{158}$$

故

$$H_c=\int \mathrm{d}^3x T_c^{00}(\boldsymbol{x},t)$$

$$=\int \mathrm{d}^3x\Big\{\Pi_a^k(\boldsymbol{x},t)\dot{A}_{ak}(\boldsymbol{x},t)+\frac{1}{4}F_a^{\mu\nu}(\boldsymbol{x},t)F_{a\mu\nu}(\boldsymbol{x},t)\Big\}$$

$$=\int \mathrm{d}^3x\Big\{\frac{1}{2}\vec{\Pi}_a(\boldsymbol{x},t)\cdot\vec{\Pi}_a(\boldsymbol{x},t)+\frac{1}{4}F_a^{kl}F_{akl}-A_a^0\psi_{(a)2}(\boldsymbol{x},t)\Big\}\,,$$

即

$$H_c=h(\boldsymbol{A},\vec{\Pi})-\int \mathrm{d}^3x A_a^0(\boldsymbol{x},t)\psi_{(a)2}(\boldsymbol{x},t), \tag{159}$$

$$h(\boldsymbol{A},\vec{\Pi})=\int \mathrm{d}^3x\Big\{\frac{1}{2}\vec{\Pi}_a(\boldsymbol{x},t)\cdot\vec{\Pi}_a(\boldsymbol{x},t)+\frac{1}{4}F_a^{kl}F_{akl}\Big\}. \tag{160}$$

容易验证，$h(\boldsymbol{A},\vec{\Pi})$ 与 (155a) 及 (155b) 中每个约束的泊松括号都弱等于 0，即它是第一类量. 正则方程可表示为

$$\dot{A}_a^\mu(\boldsymbol{x},t)=[A_a^\mu(\boldsymbol{x},t),H(t)]_c, \tag{161a}$$

$$\dot{\Pi}_a^\mu(\boldsymbol{x},t)=[\Pi_a^\mu(\boldsymbol{x},t),H(t)]_c, \tag{161b}$$

$$\psi_{(a)1}(\boldsymbol{x},t)\approx 0, \tag{161c}$$

$$\psi_{(b)2}\approx 0, \tag{161d}$$

其中

$$H(t)=h(\boldsymbol{A}(t),\vec{\Pi}(t))+\int \mathrm{d}^3x u_a(\boldsymbol{x},t)\psi_{(a)1}(\boldsymbol{x},t)$$

$$+\int \mathrm{d}^3x v_a(\boldsymbol{x},t)\psi_{(a)2}(\boldsymbol{x},t)\,, \tag{162}$$

式中的拉氏乘子 u_a 及 v_a 是完全任意的.

6.2 在库仑规范下的量子化 (略述)

对于非阿贝尔规范场，选取轴规范 ($A_a^3 = 0$) 比库仑规范更容易按照 Dirac 的方法进行量子化，不过库仑规范更为直观，这里将采用库仑规范进行扼要的讨论但不作完全的处理，在下章再用路径积分方法来处理 SU_3 规范场的量子化.

在加入规范条件 $\nabla \cdot \boldsymbol{A}_a = 0$ 后，应保证相应的自洽性条件 $\nabla \cdot \dot{\boldsymbol{A}}_a = 0$ 成立. 因此 (153) 式的散度给出

$$\partial_k \Pi_a^k = \partial_k \partial^k A_a^0 - g C_{abc} \partial_k (A_b^0 A_c^k),$$

利用 (155b) 式消去 $\partial_k \Pi_a^k$，得

$$\nabla^2 A_a^0 + g C_{abc} (\nabla A_b^0) \cdot \boldsymbol{A}_c - g C_{abc} \vec{\Pi}_b \cdot \boldsymbol{A}_c = 0. \tag{163}$$

由此可用 $\boldsymbol{A}$ 及 $\vec{\Pi}$ 表示出 A_a^0:

$$A_a^0 = f_a(\boldsymbol{A}, \vec{\Pi}). \tag{164}$$

这组新的约束条件和规范条件一起组成全部的外加约束条件

$$\psi_{(a)3} \equiv A_a^0 - f_a(\boldsymbol{A}, \vec{\Pi}) \approx 0, \tag{165}$$

$$\psi_{(a)4} \equiv \nabla \cdot \boldsymbol{A}_a \approx 0. \tag{166}$$

$\psi_{(a)1}$, $\psi_{(a)2}$, $\psi_{(a)3}$, $\psi_{(a)4}$ 代表全部独立的第二类约束 (不再存在第一类约束), 借此可建立 Dirac 括号，从而将方程组 (161) 表示为

$$\dot{A}_b^\mu(\boldsymbol{x}, t) = [A_b^\mu(\boldsymbol{x}, t), h(\boldsymbol{A}, \vec{\Pi})]_D, \tag{167a}$$

$$\dot{\Pi}_b^\mu(\boldsymbol{x}, t) = [\Pi_b^\mu(\boldsymbol{x}, t), h(\boldsymbol{A}, \vec{\Pi})]_D, \tag{167b}$$

$$\psi_{(b)\beta} = 0, \quad \beta = 1, 2, 3, 4. \tag{167c}$$

这时所有约束条件都可看作强方程. 由于全部动力学变量都包含在 $\{\boldsymbol{A},\ \vec{\boldsymbol{\Pi}}\}$ 中，运动方程可归结为

$$\dot{\boldsymbol{A}}_b(\boldsymbol{x},t)=[\boldsymbol{A}_b(\boldsymbol{x},t),h(\boldsymbol{A},\vec{\boldsymbol{\Pi}})]_D, \tag{168a}$$

$$\dot{\vec{\boldsymbol{\Pi}}}_b(\boldsymbol{x},t)=[\vec{\boldsymbol{\Pi}}_b(\boldsymbol{x},t),h(\boldsymbol{A},\vec{\boldsymbol{\Pi}})]_D, \tag{168b}$$

$$\nabla\cdot\vec{\boldsymbol{\Pi}}_a(\boldsymbol{x},t)+gC_{abc}\vec{\boldsymbol{\Pi}}_b(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{A}_c(\boldsymbol{x},t)=0, \tag{168c}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}_a(\boldsymbol{x},t)=0. \tag{168d}$$

定义如下的复变量

$$\vec{\boldsymbol{\Phi}}_b(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\{(-\nabla^2)^{1/4}\boldsymbol{A}_b(\boldsymbol{x},t)-\mathrm{i}(-\nabla^2)^{-1/4}\vec{\boldsymbol{\Pi}}_b(\boldsymbol{x},t)\}, \tag{169}$$

于是

$$\boldsymbol{A}_b(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{\sqrt{2}}(-\nabla^2)^{-1/4}\{\vec{\boldsymbol{\Phi}}_b(\boldsymbol{x},t)+\vec{\boldsymbol{\Phi}}_b^*(\boldsymbol{x},t)\}, \tag{170}$$

$$\vec{\boldsymbol{\Pi}}_b(\boldsymbol{x},t)=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(-\nabla^2)^{-1/4}\{\vec{\boldsymbol{\Phi}}_b(\boldsymbol{x},t)-\vec{\boldsymbol{\Phi}}_b^*(\boldsymbol{x},t)\}. \tag{171}$$

设 $\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\ 1)$ 及 $\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\ 2)$ 是上节说明过的横向单位矢量，而 $\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\ 3)$ 是纵向单位矢量，即

$$\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},3)=\boldsymbol{k}/k, \tag{172}$$

$$\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},1)\times\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},2)=\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},3), \tag{173}$$

$$\vec{\varepsilon}(-\boldsymbol{k},\lambda)=(-1)^{\lambda}\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\lambda)\quad(\lambda=1,2,3)\,. \tag{174}$$

借助 $\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\ \lambda)$ 可把 $\vec{\boldsymbol{\Phi}}_b(\boldsymbol{x},t)$ 的傅氏展开式写成

$$\vec{\boldsymbol{\Phi}}_b(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int\mathrm{d}^3k\,a_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,, \tag{175}$$

因此

$$\boldsymbol{A}_b(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int \mathrm{d}^3k\frac{1}{\sqrt{2k}}\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\lambda)$$

$$\times\left\{a_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+a^*_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right\}, \tag{176}$$

$$\vec{\Pi}_b(\boldsymbol{x},t)=\frac{\mathrm{i}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int \mathrm{d}^3k\sqrt{\frac{k}{2}}\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},\lambda)$$

$$\times\left\{a_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-a^*_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right\}. \tag{177}$$

借助 (a,a^*) 可以引入如下的实变量 (q,p) 来代替变量 $(\boldsymbol{A},\vec{\Pi})$，

$$q_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)=\frac{1}{\sqrt{2k}}\{a^*_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)+a_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)\},$$

$$p_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)=\mathrm{i}\sqrt{\frac{k}{2}}\{a^*_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)-a_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)\},$$

根据 (156a)—(156c)，这些量的泊松括号为

$$[q_{(a)\lambda}(\boldsymbol{k},t),q_{(b)\lambda'}(\boldsymbol{k}',t)]_c=0,\quad [p_{(a)\lambda}(\boldsymbol{k},t),p_{(b)\lambda'}(\boldsymbol{k}',t)]_c=0,$$

$$[q_{(a)\lambda}(\boldsymbol{k},t),p_{(b)\lambda'}(\boldsymbol{k}',t)]_c=\delta_{ab}\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}').$$

现在把 $\lambda=1$ 及 $\lambda=2$ 时的 (q,p) 看作真正的独立变量，把由这些量和约束条件 (168c),(168d) 确定的 $\lambda=3$ 的 (q,p) 记为 $q^0_{(b)3}(\boldsymbol{k},t)$, $p^0_{(b)3}(\boldsymbol{k},t)$, 令

$$\phi^0_b(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int \mathrm{d}^3k\frac{1}{\sqrt{2k}}\left\{a^0_{(b)3}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+a^{0*}_{(b)3}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right\},$$

$$G^0_b(\boldsymbol{x},t)=\frac{\mathrm{i}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int \mathrm{d}^3k\sqrt{\frac{k}{2}}\left\{a^0_{(b)3}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-a^{0*}_{(b)3}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right\},$$

于是

$$G^0_b(\boldsymbol{x},t)=\nabla\cdot\boldsymbol{A}_b(\boldsymbol{x},t)=0,\quad \nabla\phi^0_b(\boldsymbol{x},t)=\vec{\Pi}_{b(L)}(\boldsymbol{x},t),$$

$$\boldsymbol{A}_b(\boldsymbol{x},t)=\boldsymbol{A}_b^{(T)}(\boldsymbol{x},t)+\frac{1}{(\nabla^2)}\nabla G_b^0(\boldsymbol{x},t)=\boldsymbol{A}_b^{(T)}(\boldsymbol{x},t),$$

其中的记号 (L) 及 (T) 分别代表横向分量及纵向分量. 条件 (168c) 可看作 $\phi_b^0(\boldsymbol{x},t)$ 的微分方程组

$$\nabla^2\phi_a^0(\boldsymbol{x},t)+gC_{abc}(\nabla\phi_b^0(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{A}_c^{(T)}(\boldsymbol{x},t)$$

$$+gC_{abc}\vec{\Pi}_{b(T)}(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{A}_c^{(T)}(\boldsymbol{x},t)=0\,.$$

因此, $\vec{\Pi}_{(L)}(\boldsymbol{x},t)$ 被 $(\boldsymbol{A}^{(T)},\vec{\Pi}_{(T)})$ 决定, 运动方程可归结为横变量的方程

$$\dot{\boldsymbol{A}}_b^{(T)}(\boldsymbol{x},t)=\left[\boldsymbol{A}_b^{(T)}(\boldsymbol{x},t),h^{(*)}\left(\boldsymbol{A}^{(T)}(t),\vec{\Pi}_{(T)}(t)\right)\right]_D,\quad(178a)$$

$$\dot{\vec{\Pi}}_{b(T)}(\boldsymbol{x},t)=\left[\vec{\Pi}_{b(T)}(\boldsymbol{x},t),h^{(*)}\left(\boldsymbol{A}^{(T)}(t),\vec{\Pi}_{(T)}(t)\right)\right]_D,\quad(178b)$$

其中 $h^{(*)}(\boldsymbol{A}^{(T)}(t),\vec{\Pi}_{(T)}(t))$ 是在 $h(\boldsymbol{A}(t),\vec{\Pi}(t))$ 中把 $\boldsymbol{A}_a$ 及 $\vec{\Pi}_{a(L)}$ 分别换为 $\boldsymbol{A}_a^{(T)}$ 及 $\nabla\phi_a^0$ 的结果. 用独立的 (q,p) 表示出方程组 (178) 得到

$$\dot{q}_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)=[q_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t),h^{(*)}(q,p)]_D\quad(\lambda=1,2)\,,\quad(179a)$$

$$\dot{p}_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)=[p_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t),h^{(*)}(q,p)]_D\quad(\lambda=1,2)\,.\quad(179b)$$

由直接计算可证明, 独立变量之间的 Dirac 括号如下:

$$[q_{(a)\lambda}(\boldsymbol{k},t),q_{(b)\lambda'}(\boldsymbol{k}',t)]_D=0,\quad(180a)$$

$$[p_{(a)\lambda}(\boldsymbol{k},t),p_{(b)\lambda'}(\boldsymbol{k}',t)]_D=0,\quad(180b)$$

$$[q_{(a)\lambda}(\boldsymbol{k},t),p_{(b)\lambda'}(\boldsymbol{k}',t)]_D=\delta_{ab}\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}').\quad(180c)$$

可见, (179) 即是通常形式的正则方程

$$\dot{q}_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)=\frac{\delta h^{(*)}(q,p)}{\delta p_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)},\quad\dot{p}_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)=-\frac{\delta h^{(*)}(q,p)}{\delta q_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)},$$

其中 $h^{(*)}(q,p)$ 即是表示成 (q,p) 的函数的 $h^{(*)}(\boldsymbol{A}^{(T)},\vec{\Pi}_{(T)})$, 这个方程组也可用复变量 $a_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t),a^*_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)$ 重写为

$$\mathrm{i}\dot{a}_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)=\frac{\delta h^{(*)}(a^*,a)}{\delta a^*_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k},t)}\,.$$

因此, 过渡到量子理论 (薛定谔绘景) 就得到

$$a_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k})\to\widehat{a}_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k})\,,$$

$$a^*_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k})\to\widehat{a}^\dagger_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k})\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}\widehat{a}_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k})}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}\widehat{a}^\dagger_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k})}{\mathrm{d}t}=0\,,$$

$$[\widehat{a}_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k}),\,\widehat{a}_{(c)\lambda'}(\boldsymbol{k}')]=0\,,$$

$$[\widehat{a}_{(b)\lambda}(\boldsymbol{k}),\,\widehat{a}^\dagger_{(c)\lambda'}(\boldsymbol{k}')]=\delta_{bc}\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,,$$

$$h^{(*)}(a^*,a)\to h^{(*)}(\widehat{a}^\dagger,\widehat{a})\,.$$

为了真正实现在库仑规范下的量子化, 需要求出 $h^{(*)}(a^*,a)$, 这里不作进一步的讨论. 另外, 在选择规范条件时会遇到所谓 Gribov 不定性问题, 但这只发生在场的值很大的情形, 对于建立微扰论没有影响.

§7 将 Dirac 方法用于光前坐标下的 Dirac 场

Dirac 量子化方法原来只用于受约束的玻色场和粒子系统, 而不是用于费米场. 在光前坐标下的 Dirac 场是受约束费米场的重要实例, 通常的处理方法见文献 [5,6]. 本节将依照文献 [7] 的论述, 将 Dirac 方法用于光前坐标下的 Dirac 场. 即是针对自由 Dirac 场, 把场函数的独立的和非独立的分量设想为广义坐标, 并引进相应的共轭动量, 证明所有的约束都是第二类的. 进一步

通过消除多余的变量，用场函数的独立分量表示出哈密顿量和运动方程．最后，借助于这种形式的运动方程构成量子条件．在通常时空坐标下的 Dirac 场被看成场的坐标时，也可以理解为受约束的费米场，这种情形比较简单，除在下面顺便提及外，不必特别研究．

自由 Dirac 场的拉氏函数是

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \overline{\psi}\big(\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m\big)\psi \\ &= \mathrm{i}\psi^{*}_{\lambda}\dot{\psi}_{\lambda} + \overline{\psi}\big(\mathrm{i}\gamma^{k}\partial_{k} - m\big)\psi\,,\end{aligned}$$

其中 ψ_{λ} 代表四个分量．在通常的时空坐标下的 Dirac 方程为

$$\big(\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m\big)\psi = 0\,,$$

如第八章所说，由于它是线性地依赖于时间的一次微商的运动方程，场函数 $\{\psi_{\alpha}\}$ 构成了描述状态的完整变量，相当于包含了广义坐标以及广义动量．既然如此，如果又将场函数设想为广义坐标，而定义相应的共轭动量

$$\Pi_{\lambda} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}^{*}_{\lambda}} = -\mathrm{i}\psi^{*}_{\lambda}\,,$$

就出现多余的变量．这时可以按照 Dirac 方法引入并消除初级约束，而剩下原来的变量，并返回到原来的运动方程，在文献中被说成是兜了一个圈子．不过在这样的理解下设想 Dirac 场函数为坐标是行得通的．

在光前坐标下，可将拉氏函数表示成

$$\begin{aligned}\mathcal{L} \;=\; & \frac{1}{\sqrt{2}}\big\{\psi^{*}_{+(\alpha)}\mathrm{i}\dot{\psi}_{+(\alpha)} - \dot{\psi}^{*}_{+(\alpha)}\mathrm{i}\psi_{+(\alpha)}\big\} + \sqrt{2}\psi^{*}_{-(\beta)}\mathrm{i}\partial_{-}\psi_{-(\beta)} \\ & + \overline{\psi}\big(\mathrm{i}\gamma^{1}\partial_{1} + \mathrm{i}\gamma^{2}\partial_{2} - m\big)\psi\,, \qquad (181)\end{aligned}$$

其中 $\dot{\psi}_+$ 代表 $\partial_+\psi_+$，而光前时间和其他量的定义是：

$$
\begin{aligned}
x^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x^0 + x^3\right), \\
x^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x^0 - x^3\right), \\
x^\perp &= \left(x^1, x^2\right), \\
\partial_+ &= \frac{\partial}{\partial x^+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial x^0} + \frac{\partial}{\partial x^3}\right), \\
\partial_- &= \frac{\partial}{\partial x^-} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial x^0} - \frac{\partial}{\partial x^3}\right), \\
\gamma^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\gamma^0 + \gamma^3\right), \\
\gamma^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\gamma^0 - \gamma^3\right), \\
\psi_\pm &= \Lambda_\pm \psi, \qquad \Lambda_\pm = \frac{1}{2}\gamma^\mp\gamma^\pm .
\end{aligned}
$$

为了方便，选取矩阵 γ^μ 的如下表示：

$$
\gamma^1 = \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\sigma^1 & 0 \\ 0 & \mathrm{i}\sigma^1 \end{pmatrix}, \quad
\gamma^2 = \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\sigma^2 & 0 \\ 0 & \mathrm{i}\sigma^2 \end{pmatrix},
$$

$$
\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad
\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix},
$$

其中每一个矩阵元本身是 2×2 矩阵，而 σ^1, σ^2 代表泡利矩阵.

因此 Λ_+ 和 Λ_- 的矩阵是

$$
\Lambda_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad
\Lambda_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.
$$

可见 ψ_+ 只含前两个分量 ψ_1, ψ_2，而 ψ_- 只含后两个分量 ψ_3, ψ_4.

现在将场函数设想为广义坐标，它们的共轭定义如下：

$$\mathcal{P}_{+(\alpha)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_{+(\alpha)}} = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\psi^*_{+(\alpha)} \quad (\alpha = 1, 2)\,, \tag{182}$$

$$\mathit{\Pi}_{+(\alpha)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*_{+(\alpha)}} = -\mathcal{P}^*_{+(\alpha)} = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\psi_{+(\alpha)}\,, \tag{183}$$

$$\mathcal{P}_{-(\beta)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_{-(\beta)}} = 0 \quad (\beta = 3, 4)\,, \tag{184}$$

$$\mathit{\Pi}_{-(\beta)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*_{-(\beta)}} = 0\,. \tag{185}$$

这些是初始约束条件，哈密顿量可以表示为：

$$\begin{aligned} H = h &+ \int \mathrm{d}x^- \mathrm{d}x^\perp \big(u^{(1)}_\alpha \varPhi^{(1)}_\alpha + u^{(2)}_\alpha \varPhi^{(2)}_\alpha\big) \\ &+ \int \mathrm{d}x^- \mathrm{d}x^\perp \big(u^{(3)}_\beta \varPhi^{(3)}_\beta + u^{(4)}_\beta \varPhi^{(4)}_\beta\big)\,, \end{aligned} \tag{186}$$

$$\begin{aligned} h = &- \int \mathrm{d}x^- \mathrm{d}x^\perp \big\{\sqrt{2}\psi^*_{-(\beta)} \mathrm{i}\partial_- \psi_{-(\beta)}\big) \\ &- \int \mathrm{d}x^- \mathrm{d}x^\perp \big\{\overline{\psi}\big(\mathrm{i}\gamma^1\partial_1 + \mathrm{i}\gamma^2\partial_2 - m\big)\psi\big\}\,, \end{aligned} \tag{187}$$

其中 $u^{(1)}_\alpha, u^{(2)}_\alpha, u^{(3)}_\beta$ 和 $u^{(4)}_\beta$ 是拉氏乘子．运动方程是

$$\dot{\psi}_{+(\alpha)} = -\frac{\delta H}{\delta \mathcal{P}_{+(\alpha)}}\,, \tag{188}$$

$$\dot{\mathcal{P}}_{+(\alpha)} = -\frac{\delta H}{\delta \psi_{+(\alpha)}}\,, \tag{189}$$

$$\dot{\psi}^*_{+(\alpha)} = -\frac{\delta H}{\delta \mathit{\Pi}_{+(\alpha)}}\,, \tag{190}$$

$$\dot{\mathit{\Pi}}_{+(\alpha)} = -\frac{\delta H}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}}\,, \tag{191}$$

$$\dot{\psi}_{-(\beta)} = -\frac{\delta H}{\delta \mathcal{P}_{-(\beta)}}\,, \tag{192}$$

$$\dot{\mathcal{P}}_{-(\beta)} = -\frac{\delta H}{\delta \psi_{-(\beta)}}\,, \tag{193}$$

$$\dot{\psi}^*_{-(\beta)} = -\frac{\delta H}{\delta \Pi_{-(\beta)}}\,, \tag{194}$$

$$\dot{\Pi}_{-(\beta)} = -\frac{\delta H}{\delta \psi^*_{-(\beta)}}\,, \tag{195}$$

而

$$\Phi^{(1)}_{\alpha} = \mathcal{P}_{+(\alpha)} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\psi^*_{+(\alpha)} \approx 0\,, \tag{196}$$

$$\Phi^{(2)}_{\alpha} = -\Phi^{(1)*}_{\alpha} = \Pi_{+(\alpha)} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\psi_{+(\alpha)} \approx 0\,, \tag{197}$$

$$\Phi^{(3)}_{\beta} = \mathcal{P}_{-(\beta)} \approx 0\,, \tag{198}$$

$$\Phi^{(4)}_{\beta} = -\Phi^{(3)*}_{\beta} = \Pi_{-(\beta)} \approx 0\,, \tag{199}$$

其中 $\Phi^{(1)}_{\alpha}, \Phi^{(2)}_{\alpha}$, $\Phi^{(3)}_{\beta}, \Phi^{(4)}_{\beta}$ 代表初始约束. 记号 $\approx$ 表明方程式是弱的. 为了保证 H 是实的量, 我们规定

$$u^{(2)}_{\alpha} = u^{(1)*}_{\alpha}\,, \quad u^{(4)}_{\beta} = u^{(3)*}_{\beta}\,.$$

运动方程必须保证各约束的时间微商弱等于零 (自洽条件), 即

$$\dot{\Phi}^{(1)}_{\alpha} = \dot{\mathcal{P}}_{+(\alpha)} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\dot{\psi}^*_{+(\alpha)} \approx 0\,, \tag{200}$$

$$\dot{\Phi}^{(2)}_{\alpha} = \dot{\Pi}_{+(\alpha)} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\dot{\psi}_{+(\alpha)} \approx 0\,, \tag{201}$$

以及

$$\dot{\Phi}^{(3)}_{\beta} = \dot{\mathcal{P}}_{-(\beta)} \approx 0\,, \tag{202}$$

$$\dot{\Phi}^{(4)}_{\beta} = \dot{\Pi}_{-(\beta)} \approx 0\,. \tag{203}$$

如 Dirac 所阐明的，如果自洽性方程不是已知约束和运动方程的推论，则它们或者提供拉氏乘子所满足的条件，或者给出新的约束 (次级约束). 如果新的约束确实存在，我们就应该重复上面的步骤，要求这些新的约束在任何时间都成立. 如此继续进行下去，直到找出所有独立的约束，以及拉氏乘子所满足的全部条件. 现在，方程式 (22) 和 (23) 不包含拉氏乘子，并给出如下的次级约束条件：

$$\mathrm{i}\sqrt{2}\partial_-\psi_{-(\beta)} + \big([\mathrm{i}\gamma^0\gamma^1]_{\beta\alpha}\partial_1 + [\mathrm{i}\gamma^0\gamma^2]_{\beta\alpha}\partial_2 - m\gamma^0_{\beta\alpha}\big)\psi_{+(\alpha)} \approx 0\,, \tag{204}$$

$$\mathrm{i}\sqrt{2}\partial_-\psi^*_{-(\beta)} + \big([\mathrm{i}\gamma^0\gamma^1]_{\beta\alpha}\partial_1 - [\mathrm{i}\gamma^0\gamma^2]_{\beta\alpha}\partial_2 - m\gamma^0_{\beta\alpha}\big)\psi^*_{+(\alpha)} \approx 0\,. \tag{205}$$

由于这些约束条件不再通过它们的自洽性方程产生新的约束，它们代表了全部的次级约束条件. 现在假定在适当的边界条件的帮助下，用 $\big(\psi_{+(\alpha)}, \psi^*_{+(\alpha)}\big)$ 表示出 $\big(\psi_{-(\beta)}, \psi^*_{-(\beta)}\big)$：

$$\psi_{-(\beta)}(x) = f_{-(\beta)}\big(\psi_+, x\big)\,, \tag{206}$$

$$\psi^*_{-(\beta)}(x) = g_{-(\beta)}\big(\psi^*_+, x\big)\,. \tag{207}$$

这样就能够将次级约束写成

$$\Phi^{(5)}_\beta = \psi_{-(\beta)} - f_{-(\beta)}\big(\psi_+\big) \approx 0\,, \tag{208}$$

$$\Phi^{(6)}_\beta = -\Phi^{(5)*}_\beta = -\psi^*_{-(\beta)} + g_{-(\beta)}\big(\psi^*_+\big) \approx 0\,. \tag{209}$$

找出了全部的独立约束，就可以在这些约束条件下将运动方程改写为：

$$\dot\psi_{+(\alpha)} = -\frac{\delta\overline{H}}{\delta\mathcal{P}_{+(\alpha)}} = \lambda^{(1)}_\alpha\,, \tag{210}$$

$$\dot{\mathcal{P}}_{+(\alpha)} = -\frac{\delta\overline{H}}{\delta\psi_{+(\alpha)}} = -\frac{\delta h}{\delta\psi_{+(\alpha)}} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\lambda^{(2)}_\alpha - \lambda^{(5)}_\beta\frac{\delta f_\beta}{\delta\psi_{+(\alpha)}}\,, \tag{211}$$

$$\dot{\psi}^*_{+(\alpha)} = -\frac{\delta \overline{H}}{\delta \Pi_{+(\alpha)}} = \lambda^{(2)}_{\alpha}\,, \tag{212}$$

$$\dot{\Pi}_{+(\alpha)} = -\frac{\delta \overline{H}}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}} = -\frac{\delta h}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\lambda^{(1)}_{\alpha} + \lambda^{(6)}_{\beta}\frac{\delta g_\beta}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}}\,, \tag{213}$$

$$\dot{\psi}_{-(\beta)} = -\frac{\delta \overline{H}}{\delta \mathcal{P}_{-(\beta)}} = \lambda^{(3)}_{\beta}\,, \tag{214}$$

$$\dot{\mathcal{P}}_{-(\beta)} = -\frac{\delta \overline{H}}{\delta \psi_{-(\beta)}} = -\frac{\delta h}{\delta \psi_{-(\beta)}} + \lambda^{(5)}_{\beta}\,, \tag{215}$$

$$\dot{\psi}^*_{-(\beta)} = -\frac{\delta \overline{H}}{\delta \Pi_{-(\beta)}} = \lambda^{(4)}_{\beta}\,, \tag{216}$$

$$\dot{\Pi}_{-(\beta)} = -\frac{\delta \overline{H}}{\delta \psi^*_{-(\beta)}} = -\frac{\delta h}{\delta \psi^*_{-(\beta)}} - \lambda^{(6)}_{\beta}\,, \tag{217}$$

而

$$\begin{aligned}\overline{H} = h + \{&\lambda^{(1)}_{\alpha}\Phi^{(1)}_{\alpha} + \lambda^{(2)}_{\alpha}\Phi^{(2)}_{\alpha} + \lambda^{(3)}_{\beta}\Phi^{(3)}_{\beta}\} \\ &+\{\lambda^{(4)}_{\beta}\Phi^{(4)}_{\beta} + \lambda^{(5)}_{\beta}\Phi^{(5)}_{\beta} + \lambda^{(6)}_{\beta}\Phi^{(6)}_{\beta}\}\,,\end{aligned} \tag{218}$$

在上面各式中约定，对于 α 或 β 求和时也包括对于 $(x^-, x^\perp)$ 的积分．$\lambda^{(1)}_{\alpha}, \lambda^{(2)}_{\alpha}, \cdots$ 是拉氏乘子，它们满足：

$$\lambda^{(2)}_{\alpha} = \lambda^{(1)*}_{\alpha}\,, \quad \lambda^{(4)}_{\beta} = \lambda^{(3)*}_{\beta}\,, \quad \lambda^{(6)}_{\beta} = \lambda^{(5)*}_{\beta}\,.$$

下面是约束条件的自洽性方程给出的由拉氏乘子所满足的条件：

$$-\frac{\delta h}{\delta \psi_{+(\alpha)}} + \mathrm{i}\sqrt{2}\lambda^{(2)}_{\alpha} - \lambda^{(5)}_{\beta}\frac{\delta f_\beta}{\delta \psi_{+(\alpha)}} = 0\,,$$

$$-\frac{\delta h}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}} + \mathrm{i}\sqrt{2}\lambda^{(1)}_{\alpha} + \lambda^{(6)}_{\beta}\frac{\delta g_\beta}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}} = 0\,,$$

$$-\frac{\delta h}{\delta \psi_{-(\beta)}} + \lambda^{(5)}_{\beta} = 0\,, \quad \frac{\delta h}{\delta \psi^*_{-(\beta)}} + \lambda^{(6)}_{\beta} = 0\,,$$

$$\lambda^{(3)}_{\beta} - \lambda^{(1)}_{\alpha}\frac{\delta f_\beta}{\delta \psi_{+(\alpha)}} = 0\,, \quad \lambda^{(4)}_{\beta} - \lambda^{(2)}_{\alpha}\frac{\delta g_\beta}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}} = 0\,.$$

由此可得出

$$\mathrm{i}\sqrt{2}\lambda_\alpha^{(1)} = \frac{\delta h}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}} + \frac{\delta h}{\delta \psi^*_{-(\beta)}} \frac{\delta g_\beta}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}}\,, \tag{219}$$

$$\mathrm{i}\sqrt{2}\lambda_\alpha^{(2)} = \frac{\delta h}{\delta \psi_{+(\alpha)}} + \frac{\delta h}{\delta \psi_{-(\beta)}} \frac{\delta f_\beta}{\delta \psi_{+(\alpha)}}\,, \tag{220}$$

$$\lambda_\beta^{(3)} = \lambda_\alpha^{(1)} \frac{\delta f_\beta}{\delta \psi_{+(\alpha)}}\,, \tag{221}$$

$$\lambda_\beta^{(4)} = \lambda_\alpha^{(2)} \frac{\delta g_\beta}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}}\,, \tag{222}$$

$$\lambda_\beta^{(5)} = \frac{\delta h}{\delta \psi_{-(\beta)}}\,, \tag{223}$$

$$\lambda_\beta^{(6)} = -\frac{\delta h}{\delta \psi^*_{-(\beta)}}\,. \tag{224}$$

既然每一个拉氏乘子 $(\lambda_\alpha^{(1)}, \lambda_\alpha^{(2)}, \lambda_\beta^{(3)}, \lambda_\beta^{(4)}, \lambda_\beta^{(5)}, \lambda_\beta^{(6)})$ 都能被确定，也就表明所有的约束都是第二类的. 这样，我们就能够求出独立的变量满足的运动方程，即

$$\mathrm{i}\sqrt{2}\dot{\psi}_{+(\alpha)} = \frac{\delta \overline{h}}{\delta \psi^*_{+(\alpha)}}\,, \tag{225}$$

$$\mathrm{i}\sqrt{2}\dot{\psi}^*_{+(\alpha)} = \frac{\delta \overline{h}}{\delta \psi_{+(\alpha)}}\,, \tag{226}$$

其中 $\overline{h}$ 是在 h 中用 $(f_\beta(\psi_{+(\alpha)}), g_\beta(\psi^*_{+(\alpha)}))$ 代替 $(\psi_{-(\beta)}, \psi^*_{-(\beta)})$ 而得到的. 至此应该认为 $\psi_{+(\alpha)}$ (或者 $\psi^*_{+(\alpha)}$) 代表独立的坐标和动量.

$\overline{h}[\psi_{+(\alpha)}, \psi^*_{+(\alpha)}]$ 即是用独立变量表达的哈密顿量，因此根据方程组 (225),(226) 以及构造量子条件的原则 (量子力学中的海森伯方程应该具有与经典运动方程相似的形式), 可得如下的量子条件，即

$$\{\psi_{+(\alpha)}(x), \psi^\dagger_{+(\alpha')}(y)\}|_{x^+=y^+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\delta_{\alpha\alpha'}\delta(x^- - y^-)\delta^2(x^\perp - y^\perp)\,, \tag{227}$$

以及

$$\{\psi_{+(\alpha)}(x), \psi_{+(\alpha')}(y)\}|_{x^+=y^+} = 0\,. \tag{228}$$

参 考 文 献

[1] Dirac P A M. Phys. Rev., 1948, 73: 1092; Rev. Mod. Phys., 1949, 21: 392; Canad. J. Math., 1950, 2: 129; Canad. J. Math., 1951, 3: 1; Proc. Roy. Soc., 1958, A246: 326.

[2] Dirac P A M. Lectures on Quantum Mechanics. Belfer Graduate school of Science, New York: Yeshiva University, 1964.

[3] Faddeev L D, Slavnov A A. Guage Fields. New York: Benjamin, 1980.

[4] Hanson A H, Regge T, Teitilboim C. Constrained Hamiltonian Systems. Rome: Academia Nazionale dei Lincei, 1976.

[5] Faddeev L, Jackiw R. Phys. Rev. Lett., 1988, 60: 1692.

[6] Wilson K G, Walhout T S, Haarindranath A, Zhang Wei-Min, Perry R J. Phys. Rev., 1994, D49: 6720.

[7] Yang Ze-sen(杨泽森),Liu Peng(刘鹏), Li Xian-hui(李先卉), Zhou Zhi-ning(周治宁). Commun. Theor. Phys., 2002, 37: 55.

第十章　路 径 积 分

量子力学的动力学理论通常是借助态矢量或算符的运动方程来表述的，正则量子化的主要环节是建立基本变量的量子条件，以及用这种变量的算符表示出哈密顿量和其他力学量，以确立运动方程和整个算符描述. 路径积分是另一种重要的表述形式，其基本环节是借助经典作用量经过对于位形空间或相空间中的路径的积分，构成转移概率幅和格林函数生成泛函. 像这样来实现从经典理论到量子理论的过渡的途径，也称为路径积分量子化. 路径积分的观点起源于 P.A.M.Dirac 在 1933 年提出的建议，并由 R.P.Feynman 首先加以发展. 特别是 Feynman 首先沿着这一途径为量子电动力学建立了一种自洽和明显相对论协变的微扰论. 推广到费米子系统的工作是由 A.Beresin 在 1965 年完成的.

路径积分方法直接用经典作用量表述量子理论，容易显示系统原有的对称性，在理论研究和实际应用中都有重要的优点. 实际上，它已被广泛地应用到各个领域. 特别是，L.D.Faddeev 和 V.N.Popov 在 1967 年从路径积分的途径完成了非阿贝尔规范理论的量子化，对于规范场理论的发展发挥了重大的作用. 各种便于贯彻正则量子化的理论可参照正则量子化的结果来建立路径积分表述，两类理论形式互相配合可增强灵活性. 当经典拉氏函数比较复杂，使正则量子化遇到困难时，路径积分量子化的实施需要结合拉氏函数的特点作专门的研究.

本章将比较系统地讲述路径积分的基本内容和方法. 在非相对论理论的情形，基本问题是建立转移概率幅的路径积分. 在场论的情形，则以旋量电动力学和色动力学为例，建立协变形式的格林函数生成泛函的路径积分.

§1 在有限维位形空间的路径积分. 虚时间方法

1.1 转移概率幅的路径积分

设无自旋单粒子的经典拉氏函数为

$$L(x,y,z,\dot{x},\dot{y},\dot{z})=\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)-V(x,y,z)\,. \tag{1}$$

在经典力学中，粒子从 t_0 时刻的位置 x_0,y_0,z_0 到 t_f 时刻的位置 x_f,y_f,z_f 的运动轨道由作用量泛函

$$I[\text{path}]=\int_{t_0}^{t_f}L(\boldsymbol{r}(t),\dot{\boldsymbol{r}}(t))\mathrm{d}t$$

取极小值的条件决定. 这个积分的值取决于函数 $\boldsymbol{r}(t)$, 所以即是路径的泛函. 而经典力学轨道的贡献与邻近所有轨道相比对应于 I 的极小值.

在量子力学中，粒子从 $(t_0,\boldsymbol{r}_0)$ 沿何种轨道到达 $(t_f,\boldsymbol{r}_f)$ 的问题，只在适当的极限情形才有意义. 一般地应将这个问题换成：粒子从 t_0 时刻的状态 $|\boldsymbol{r}_0\rangle$ 出发演化到 t_f 被发现于点 $\boldsymbol{r}_f$ 的概率幅是什么？这个概率幅亦即 t_f 时刻的波函数 $\Psi(\boldsymbol{r},t_f)$ 在点 $\boldsymbol{r}_f$ 的值，而波函数满足初条件 $\Psi(\boldsymbol{r},t_0)=\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$. 这样的 $\Psi(\boldsymbol{r}_f,t_f)$ 又称为从 $(t_0,\boldsymbol{r}_0)$ 到 $(t_f,\boldsymbol{r}_f)$ 的转移概率幅，记为 $K(\boldsymbol{r}_ft_f,\boldsymbol{r}_0t_0)$. 在 t_0 附近的时刻 $t_0+\varepsilon(\varepsilon\to0^+)$ 有

$$\Psi(\boldsymbol{r},t_0+\varepsilon)=K(\boldsymbol{r}t_0+\varepsilon,\boldsymbol{r}_0t_0)\,.$$

这个波函数的值并不集中在一点，而是分布在 $\boldsymbol{r}_0$ 附近一定范围内，这个范围的所有点的值对于下一时刻 $t_0+2\varepsilon$ 的波函数都有贡献，故

$$\Psi(\boldsymbol{r},t_0+2\varepsilon)=\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1K(\boldsymbol{r}t_0+2\varepsilon,\boldsymbol{r}_1,t_0+\varepsilon)\Psi(\boldsymbol{r}_1,t_0+\varepsilon)\,, \tag{2}$$

其中对 r_1 的积分体现着叠加原理，即 $\Psi(r, t_0+2\varepsilon)$ 由空间各点的 $\Psi(r_1, t_0+\varepsilon)$ 产生的贡献叠加而成. 积分遍及全空间，有效范围由 $\Psi(r, t_0+\varepsilon)$ 控制. 一般地从 $t_0+n\varepsilon$ 演化到 $t_0+n\varepsilon+\varepsilon$ 有

$$\Psi(r, t_0+n\varepsilon+\varepsilon) = \int \mathrm{d}r_n K(rt_0+n\varepsilon+\varepsilon, r_n, t_0+n\varepsilon)\Psi(r_n, t_0+n\varepsilon).$$

因此，可以 t_0 时刻的 r_0 及 t_f 时刻的 r_f 为两端作一切路径，而将转移概率幅 $K(r_f t_f, r_0 t_0)$ 看成是所有路径的贡献的叠加. 这里强调所有路径都有贡献. Feynman 提出，每条路径的贡献都由 $I[\mathrm{path}]/\hbar$ 值决定，而且通过 $\exp\{\mathrm{i}I[\mathrm{path}]/\hbar\}$ 出现，即

$$K(r_f t_f, r_0 t_0) \propto \sum_{\mathrm{path}} \exp\{\mathrm{i}I[\mathrm{path}]/\hbar\}\,. \tag{3}$$

以 $I[\mathrm{path}]/\hbar$ 作为基本量是考虑到，经典的和量子的动力学理论实际上都取决于系统的作用量. 对路径求和反映叠加原理. 不同路径是连续过渡的，所以求和理解为对路径的积分. 让 $I[\mathrm{path}]/\hbar$ 出现在相角中，是认为所有路径以相同的概率起作用. 从这种表示来说明经典力学极限是很方便的. 在经典力学极限下，对应于经典路径的极小值 I_c 以及 I_c 与邻近的所有路径的 I 值之差都甚大于 $\hbar$, 对路径进行积分时，除经典路径以及与它无限接近者外，其他路径的贡献相互抵消了.

下面将这种表示写成能够进行运算的公式，并与正则量子化的结果作一对比. 将时间间隔 $t_f - t_0$ 分割成 N 个小间隔，令

$$\varepsilon = \frac{t_f - t_0}{N}, \quad N \to \infty\,,$$

$$t_n = t_0 + n\varepsilon\,, \quad n = 0, 1, 2, \cdots, N \quad (t_N = t_f),$$

于是一定的路径 $r(t)$ 由两个端点 $r(t_0), r(t_N)$ 以及 $N-1$ 个中间点 $r(t_n)$ $(n = 1, 2, \cdots, N-1)$ 代表. 所谓路径积分就看作 $(N-1)\times 3$

重积分在 $N \to \infty$ 时的极限

$$K(\boldsymbol{r}_f t_f, \boldsymbol{r}_0 t_0) \propto \int \prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{\mathrm{d}x_n}{A} \frac{\mathrm{d}y_n}{A} \frac{\mathrm{d}z_n}{A} \right) \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \varepsilon L_n \right\}, \tag{4}$$

其中 A 是具有长度量纲的常数. 于是比例系数具有 $\delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$ 的量纲, 亦即 A^{-3} 的量纲. L_n 是在 $L(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}})$ 中将 $\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}$ 分别换成如下定义的 $\bar{\boldsymbol{r}}_n$ 及 $\boldsymbol{v}_n$ 的结果:

$$\bar{\boldsymbol{r}}_n = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_{n+1} + \boldsymbol{r}_n),$$

$$\boldsymbol{v}_n = \frac{1}{\varepsilon}(\boldsymbol{r}_{n+1} - \boldsymbol{r}_n),$$

其中 $\boldsymbol{r}_n$ 代表 $\boldsymbol{r}(t_n)$. 因此

$$\sum_{n=0}^{N-1} \varepsilon L_n = \sum_{n=0}^{N-1} \varepsilon \left\{ \frac{m}{2} (\boldsymbol{v}_n)^2 - V\left(\frac{\boldsymbol{r}_{n+1} + \boldsymbol{r}}{2} \right) \right\}, \tag{5}$$

而 $(\boldsymbol{v}_n)^2$ 即是

$$\left(\frac{\boldsymbol{r}_{n+1} - \boldsymbol{r}_n}{\varepsilon} \right)^2.$$

如果 L 还显含时间, 则认为 L_n 对应于时间

$$\bar{t}_n = (t_{n+1} + t_n)/2.$$

用 t 代表 $t_0 + n\varepsilon$, 由上式知道波函数从 t 到 $t + \varepsilon$ 的时间演化

$$\begin{aligned}
&\Psi(\boldsymbol{r}, t + \varepsilon) \\
&\quad = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' K(\boldsymbol{r}t + \varepsilon, \boldsymbol{r}', t) \Psi(\boldsymbol{r}', t) \\
&\quad = B \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'}{\varepsilon} \right)^2 - V\left(\frac{\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}'}{2}, t \right) \right] \right\} \Psi(\boldsymbol{r}', t) \\
&\quad = B \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \exp\left\{ -\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar} V\left(\frac{\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}'}{2} \right) \right\} \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\varepsilon} (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')^2 \right\} \Psi(\boldsymbol{r}', t),
\end{aligned}$$

其中 B 是待定常数. 由于 $\varepsilon \to 0^+$, 被积函数中因子

$$\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\varepsilon}[(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^2]\Big\}$$

将 x',y',z' 分别限制在 x,y,z 附近正比于 $\sqrt{\varepsilon}$ 的范围内，式中的 $\varepsilon V(\frac{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}'}{2})$ 可直接换成 $\varepsilon V(\boldsymbol{r},t)$. 将 $\Psi(\boldsymbol{r}',t)$ 在 $\boldsymbol{r}$ 点附近展开，只须取到二阶微商项. 令

$$\eta_1=x'-x\,,\quad \eta_2=y'-y\,,\quad \eta_3=z'-z\,,$$

注意

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\eta\eta\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\epsilon}\eta^2}=0\,,$$

在 $\Psi(\boldsymbol{r}',t)$ 的展开式中，一次项 $\eta_1\frac{\partial}{\partial x}\Psi(\boldsymbol{r},t)$ 及交叉项

$$\eta_1\eta_2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

等对于积分没有贡献，故

$$\begin{aligned}B^{-1}\Psi(\boldsymbol{r},t+\varepsilon)&=\exp\Big\{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(\boldsymbol{r},t)\Big\}\int\int\int\mathrm{d}\eta_1\mathrm{d}\eta_2\mathrm{d}\eta_3\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\epsilon}(\eta_1^2+\eta_2^2+\eta_3^2)}\\&\times\Big\{\Psi(\boldsymbol{r},t)+\frac{1}{2}\Big(\eta_1^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\eta_2^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\eta_3^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)\Psi(\boldsymbol{r},t)\Big\}\,.\end{aligned}$$

令

$$R(\varepsilon)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\eta\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\epsilon}\eta^2}\,,$$

则

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\eta\eta^2\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\epsilon}\eta^2}=\frac{\mathrm{i}\hbar\varepsilon}{m}R(\varepsilon)\,,$$

$$\Psi(\boldsymbol{r},t+\varepsilon)=B\Big\{1-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(\boldsymbol{r},t)\Big\}\big(R(\varepsilon)\big)^3$$

$$\times\Big\{\Psi(\boldsymbol{r},t)+\frac{\mathrm{i}\hbar\varepsilon}{2m}\Big(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)\Psi(\boldsymbol{r},t)\Big\}$$

$$=B\big(R(\varepsilon)\big)^3\Big\{\Psi(\boldsymbol{r},t)-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(\boldsymbol{r},t)\Psi(\boldsymbol{r},t)\Big\}$$

$$+B\big(R(\varepsilon)\big)^3\frac{\mathrm{i}\hbar\varepsilon}{2m}\Big(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)\Psi(\boldsymbol{r},t)\,.$$

可见，应该令 $B(R(\varepsilon))^3$ 等于 1, 因而与正则量子化的结果完全一致. 根据 $B=(R(\varepsilon))^{-3}$ 得出：

$$K(\boldsymbol{r}t+\varepsilon,\boldsymbol{r}'t)$$

$$=\frac{1}{\big(R(\varepsilon)\big)^3}\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\Big[\frac{m}{2}\Big(\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{\varepsilon}\Big)^2-V\Big(\frac{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}'}{2},t\Big)\Big]\Big\}\,. \tag{6}$$

将这个表达式用于每一段无限小时间间隔，注意

$$K(\boldsymbol{r}_f t_f,\boldsymbol{r}_0 t_0)=\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{N-1}\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{N-2}\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 K(\boldsymbol{r}_f t_f,\boldsymbol{r}_{N-1}t_{N-1})$$

$$\times K(\boldsymbol{r}_{N-1}t_{N-1},\boldsymbol{r}_{N-2}t_{N-2})\cdots K(\boldsymbol{r}_1 t_1,\boldsymbol{r}_0 t_0)\,,$$

即得所需的路径积分公式：

$$K(\boldsymbol{r}_f t_f,\boldsymbol{r}_0 t_0)$$

$$=\frac{1}{(R(\varepsilon))^3}\int\prod_{n=1}^{N-1}\Big(\frac{\mathrm{d}x_n}{R(\varepsilon)}\frac{\mathrm{d}y_n}{R(\varepsilon)}\frac{\mathrm{d}z_n}{R(\varepsilon)}\Big)\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f}L(t)\mathrm{d}t\Big\}\,, \tag{7}$$

其中 $N\to\infty$, $\int_{t_0}^{t_f}L(t)\mathrm{d}t$ 代表 $\sum_{n=0}^{N-1}\varepsilon L_n$. 借助这样的路径积分公式，可以用经典作用量表示量子力学理论，这即是路径积分量子化.

根据正则量子化的结果当然也能够推导出转移概率幅的路径积分公式. 按照正则量子化的观点, 转移概率幅即是如下的矩阵元:

$$K(\boldsymbol{r}_f t_f, \boldsymbol{r}_0 t_0) = \langle \boldsymbol{r}_f | Q(t_f, t_0) | \boldsymbol{r}_0 \rangle , \tag{8}$$

其中 $Q(t_f, t_0)$ 是薛定谔绘景的时间演化算符, 满足

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} Q(t, t_0) = HQ(t, t_0) , \quad Q(t_0, t_0) = 1 ,$$

$$Q(t, t_1) Q(t_1, t_0) = Q(t, t_0) ,$$

可以形式地将它表示为

$$Q(t, t_0) = \mathcal{T} \exp\left\{ -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{t_0}^{t} H(t') \mathrm{d}t' \right\} , \tag{9}$$

其中 H 是哈密顿量算符, $\mathcal{T}$ 是时间编序算符 (简称时序算符). 这种表达式对于显含时间的哈密顿量算符也是适用的. 按照从 t_0 到 t_f 的 N 段无限短时间的次序写成 N 个因子的积, 有

$$Q(t_f, t_0) \approx \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon H(\bar{t}_{N-1})} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon H(\bar{t}_{N-2})} \cdots \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon H(\bar{t}_0)} ,$$

其中 $\bar{t}_n$ 代表 $(t_{n+1} + t_n)/2$. 因此

$$\begin{aligned} & K(\boldsymbol{r}_f t_f, \boldsymbol{r}_0 t_0) \\ & \quad = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{N-1} \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{N-2} \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \langle \boldsymbol{r}_f | \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon H(\bar{t}_{N-1})} | \boldsymbol{r}_{N-1} \rangle \\ & \qquad \times \langle \boldsymbol{r}_{N-1} | \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon H(\bar{t}_{N-2})} | \boldsymbol{r}_{N-2} \rangle \cdots \langle \boldsymbol{r}_1 | \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon H(\bar{t}_0)} | \boldsymbol{r}_0 \rangle . \end{aligned}$$

我们来计算从 $t = n\epsilon$ 到 $t + \epsilon$ 的转移概率幅:

$$\begin{aligned} K(\boldsymbol{r}_f t + \epsilon, \boldsymbol{r}' t) &= \langle \boldsymbol{r} | \exp\left\{ -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \epsilon H(\bar{t}) \right\} | \boldsymbol{r}' \rangle \\ &\approx \exp\left\{ -\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar} V\left(\frac{\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}'}{2}, t \right) \right\} \\ &\quad \times \langle \boldsymbol{r} | \exp\left\{ \frac{-\mathrm{i}\epsilon}{2\hbar m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \right\} | \boldsymbol{r}' \rangle . \end{aligned}$$

最右边的因子是

$$\langle \boldsymbol{r}|\exp\left\{\frac{-\mathrm{i}\varepsilon}{2\hbar m}\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2\right)\right\}|\boldsymbol{r}'\rangle$$
$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\int\int \mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{2\hbar m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')/\hbar}.$$

利用

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{a}{2}p^2+\mathrm{i}bp}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{b^2}{2a}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{a}{2}p^2},$$

得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p_x\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{2\hbar m}p_x^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_x(x-x')/\hbar}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{m}{2\hbar\varepsilon}(x-x')^2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{2\hbar m}p^2},$$

故

$$K(\boldsymbol{r}_f t+\varepsilon,\boldsymbol{r}'t)\left(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{2\hbar m}p^2}\right)^{-3}$$
$$=\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{\varepsilon}\right)^2-V\left(\frac{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}'}{2},t\right)\right]\right\}. \tag{10}$$

注意

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{2\hbar m}p^2}=\frac{1}{R(\varepsilon)},$$

即得出前面的结果

$K(\boldsymbol{r}_f t_f,\boldsymbol{r}_0 t_0)$

$$=\frac{1}{(R(\varepsilon))^3}\int\prod_{n=1}^{N-1}\left(\frac{\mathrm{d}x_n}{R(\varepsilon)}\frac{\mathrm{d}y_n}{R(\varepsilon)}\frac{\mathrm{d}z_n}{R(\varepsilon)}\right)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1}\varepsilon L_n\right\}\quad(N\to\infty),$$

其中的积分变量 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_{N-1}$ 的一种值连同端点 $\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_f$ 被看作一条路径 $\boldsymbol{r}(t)$ 上的 $N+1$ 个位置，满足

$$\boldsymbol{r}(t_0+n\varepsilon)=\boldsymbol{r}_n\quad(\boldsymbol{r}_N=\boldsymbol{r}_f).$$

1.2 由拉氏函数描述波函数的时间演化的公式

对于上一小节讨论的单粒子运动的情形，转移概率幅的路径积分公式表明，薛定谔波函数随时间的演化可用下式表示

$$\Psi(\boldsymbol{r},t+\varepsilon)$$

$$\approx \frac{1}{(R(\varepsilon))^3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\Psi(\boldsymbol{r}',t)\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\Big[\frac{m}{2}\Big(\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{2}\Big)^2 - V\Big(\frac{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}'}{2},t\Big)\Big]\Big\}.$$

再考虑稍为复杂一点的拉氏函数，即第三章 §8 讨论过的情形：

$$L(q,\dot{q},t)=\frac{1}{2}\sum_{lj}M_{lj}(q,t)\dot{q}_l\dot{q}_j+\sum_l \dot{q}_l G_l(q,t)-V(q,t)\,, \tag{11}$$

其中 (q) 及 $(\dot{q})$ 分别代表广义坐标和广义速度，与此相应的哈密顿量算符 $\widehat{H}(q,\widehat{p},t)$ 可按第三章的方法求出．为了确定起见，我们选取 $|M(q,t)|^{1/2}$ 作为时刻 t 的权重函数 ($|M(q,t)|$ 是矩阵 $M(q,t)$ 的行列式), 这时能够证明

$$\frac{F(q,t,\varepsilon)}{R(q,t,\varepsilon)}\approx\Psi(q,t)+\frac{\varepsilon}{\mathrm{i}\hbar}\widehat{H}(q,\widehat{p},t)\Psi(q,t)\,, \tag{12}$$

其中

$$F(q,t,\varepsilon)$$

$$=\int |M(q',t)|^{1/2}\mathrm{d}^s q'\Psi(q',t)\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}L\left(\frac{q+q'}{2},\frac{q-q'}{\varepsilon},t\right)\Big\}, \tag{13}$$

$$L\Big(\frac{q+q'}{2},\frac{q-q'}{\varepsilon},t\Big)$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{lj}M_{lj}\Big(\frac{q+q'}{2},t\Big)\Big(\frac{q_l-q'_j}{\varepsilon}\Big)\Big(\frac{q_j-q'_j}{\varepsilon}\Big)$$

$$+\sum_l\Big(\frac{q_l-q'_l}{\varepsilon}\Big)G_l\Big(\frac{q+q'}{2},t\Big)-V\Big(\frac{q+q'}{2},t\Big)\,, \tag{14}$$

$$R(q,t,\varepsilon)=\int|M(q',t)|^{1/2}\mathrm{d}^s q'$$

$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{1}{2}\sum_{lj}M_{lj}\left(\frac{q+q'}{2},t\right)\left(\frac{q_l-q'_l}{\varepsilon}\right)\left(\frac{q_j-q'_j}{\varepsilon}\right)\right]\right\}. \tag{15}$$

当 $|M(q,t)|$ 确是依赖于时间时, $\Psi(q,t)$ 的运动方程为 (第三章 §7)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(|M(q,t)|^{1/4}\Psi(q,t))=\widehat{H}(q,\widehat{p},t)\Psi(q,t)\,,$$

故

$$|M(q,t+\varepsilon)|^{1/4}\Psi(q,t+\varepsilon)$$

$$\approx|M(q,t)|^{1/4}\Psi(q,t)+\frac{\varepsilon}{\mathrm{i}\hbar}\widehat{H}(q,\widehat{p},t)\Psi(q,t)\,.$$

最后得到

$$|M(q,t+\varepsilon)|^{1/4}\Psi(q,t+\varepsilon)$$

$$\approx\frac{|M(q,t)|^{1/4}}{R(q,t,\varepsilon)}\int|M(q',t)|^{1/2}\mathrm{d}^s q'\Psi(q',t)$$

$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}L\left(\frac{q+q'}{2},\frac{q-q'}{\varepsilon},t\right)\right\}. \tag{16}$$

应当记住, 我们选择了 $|M(q,t)|^{1/2}$ 作为时刻 t 的权重函数, 因此时刻 $t+\varepsilon$ 的权重函数是 $|M(q,t+\varepsilon)|^{1/2}$.

例题 设一维运动的拉氏函数为

$$L(x,\dot{x},t)=\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\dot{x}G(x,t)-V(x,t)\,, \tag{17}$$

证明用下式描述波函数的时间演化与正则量子化的结果一致.

$$\psi(x,t+\varepsilon)\approx\frac{1}{R(\varepsilon)}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\psi(x',t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x-x'}{\varepsilon}\right)^2\right.\right.$$

$$\left.\left.+\left(\frac{x-x'}{\varepsilon}\right)G\left(\frac{x+x'}{2},t\right)-V\left(\frac{x+x'}{2},t\right)\right]\right\}, \tag{18}$$

其中 $R(\varepsilon)$ 和前面一样，即

$$R(\varepsilon)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x-x'}{\varepsilon}\right)^2\right]\right\}.$$

证明 令

$$F(x,t,\varepsilon)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\psi(x',t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x-x'}{\varepsilon}\right)^2+\left(\frac{x-x'}{\varepsilon}\right)G\left(\frac{x+x'}{2},t\right)-V\left(\frac{x+x'}{2},t\right)\right]\right\}.$$

当 $\varepsilon\to 0$ 时，此式中的 $\psi(x',t)$ 以及含 G,V 的项只当 x' 取 x 附近一个正比于 $\sqrt{\varepsilon}$ 的小间隔内的值时才对积分有贡献，$\varepsilon V((x+x')/2,t)$ 可直接换成 $\varepsilon V(x,t)$，在 x 处把 $G((x+x')/2,t)$ 及 $\psi(x',t)$ 展开，令

$$\eta=x'-x\,,$$

则

$$\begin{aligned}&\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(x,t)\right\}F(x,t,\varepsilon)\\&\approx\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\eta\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\varepsilon}\eta^2\right\}\left\{1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\eta G\left(x+\frac{\eta}{2}\right)-\frac{1}{2\hbar^2}G^2(x,t)\right\}\\&\quad\times\left\{\psi(x,t)+\eta\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\eta^2}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right\}\\&\approx\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\eta\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\varepsilon}\eta^2\right\}\left\{\psi(x,t)+\frac{\eta^2}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\eta^2G(x,t)\frac{\partial\psi}{\partial x}\right.\\&\quad\left.-\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\eta^2\frac{\partial G}{\partial x}\psi-\frac{\eta^2}{2\hbar^2}G^2\psi\right\},\end{aligned}$$

注意

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\varepsilon}\eta^2}\eta\mathrm{d}\eta = 0\,,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\varepsilon}\eta^2}\eta^2\mathrm{d}\eta = \frac{\mathrm{i}\hbar\varepsilon}{m}R(\varepsilon)\,,$$

得

$$\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(x,t)\Big\}F(x,t,\varepsilon)$$

$$\approx R(\varepsilon)\Big\{\psi(x,t)+\frac{\varepsilon}{\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{2m}\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}-G(x,t)\Big)^2\psi(x,t)\Big\}\,.$$

或

$$\frac{F(x,t,\varepsilon)}{R(\varepsilon)}$$

$$\approx \psi(x,t)+\frac{\varepsilon}{\mathrm{i}\hbar}\Big\{\frac{1}{2m}\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}-G(x,t)\Big)^2+V(x,t)\Big\}\psi(x,t)\,. \quad (19)$$

花括号内的算子正是与 (17) 式的拉氏函数相应的哈密顿量算符 (作用于 $\psi(x,t)$)，所以此式右边即是

$$\psi(x,t)+\varepsilon\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}\approx\psi(x,t+\varepsilon)\,.$$

1.3 $K(xt_f,x_0t_0)$ 的精确计算的简单例子．高斯积分

计算时间演化算符的矩阵元的精确表达式相当于在特定初条件下求薛定谔方程的精确解，这只是在一些很特殊的情形才能做到，这里处理几个对于路径积分方法的运用十分重要的例子．在这些例子中，拉氏函数都是坐标和速度的二次式，因此可以根据路径积分公式进行计算，有兴趣的读者可以试做这种演算，或

者查阅本章末所引的 R.P.Feynman 和 A.R.Hibbs 合著的书《量子力学和路径积分》. 这里则用较简单的方法求出最后结果.

例题 1　一维自由运动

作一维自由运动的粒子的拉氏函数为

$$L(x,\dot{x})=\frac{1}{2}m\dot{x}^2\,,$$

故

$$K(xt_f,x_0t_0)=\int\mathcal{D}[x(t)]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f}\frac{m}{2}\dot{x}(t)^2\mathrm{d}t\right\}.$$

我们可以根据 (7) 式在 $\varepsilon\to 0$ 之前直接计算 $(N-1)$ 重积分，其中每次都是所谓高斯积分，即被积函数是二次式的指数函数. 但是这里将借助稳定路径 (即经典路径) $x_{\mathrm{cl}}(t)$ 来计算. 令

$$x(t)=x_{\mathrm{cl}}(t)+y(t)\,,$$

于是

$$\begin{aligned}I[x(t)]&=\int_{t_0}^{t_f}\frac{1}{2}m(\dot{x}(t))^2\mathrm{d}t\\&=I_{\mathrm{cl}}+\int_{t_0}^{t_f}\frac{1}{2}m(\dot{y}(t))^2\mathrm{d}t+\int_{t_0}^{t_f}m\dot{x}_{\mathrm{cl}}(t)\dot{y}(t)\mathrm{d}t\,,\end{aligned}$$

其中 I_{cl} 即是沿经典路径的作用量. $x_{\mathrm{cl}}(t)$ 代表符合如下的端点条件的等速运动

$$x_{\mathrm{cl}}(t_0)=x_0\,,$$

$$x_{\mathrm{cl}}(t_f)=x\,.$$

因此

$$x_{\mathrm{cl}}(t)=x_0+\frac{x-x_0}{t_f-t_0}(t-t_0)\,.$$

$y(t)$ 的端点条件是 $y(t_0)=y(t_f)=0$，故

$$\int_{t_0}^{t_f} m\dot{x}_{\mathrm{cl}}(t)\dot{y}(t)\mathrm{d}t=-\int_{t_0}^{t_f} m\ddot{x}_{\mathrm{cl}}(t)y(t)\mathrm{d}t\,,$$

$$K(xt_f,x_0t_0)=K(0t_f,0t_0)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}I_{\mathrm{cl}}\right\}. \tag{20}$$

如果粒子在时刻 t_0 的波函数 $\psi(x_0,t_0)$ 是常数，那么它自由地演变到时刻 t 仍然是这个常数，因此

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(xt_f,x_0t_0)\mathrm{d}x_0=1\,,$$

即

$$K(0t_f,0t_0)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}I_{\mathrm{cl}}\right\}\mathrm{d}x_0=1\,.$$

利用 I_{cl} 的表达式

$$I_{\mathrm{cl}}=\frac{m}{2}\int_{t_0}^{t_f}(\dot{x}_{\mathrm{cl}}(t))^2\mathrm{d}t=\frac{m}{2}\left(\frac{x-x_0}{t_f-t_0}\right)^2,$$

最后得到

$$K(xt_f,x_0t_0)=\frac{1}{R(t_f-t_0)}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(x-x_0)^2}{(t_f-t_0)}\right\}, \tag{21}$$

其中

$$\begin{aligned}R(t_f-t_0)&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_0\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(x-x_0)^2}{(t_f-t_0)}\right\}\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\eta\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{\eta^2}{(t_f-t_0)}\right\},\end{aligned}$$

即

$$R(t_f-t_0)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}\sqrt{\dfrac{2\pi\hbar|t_f-t_0|}{m}}, & \text{当 } t_f-t_0>0,\\[2ex] \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}\sqrt{\dfrac{2\pi\hbar|t_f-t_0|}{m}}, & \text{当 } t_f-t_0<0.\end{cases}$$

例题 2　一维简谐振动

拉氏函数为

$$L(x,\dot{x})=\frac{m}{2}\dot{x}^2-\frac{m}{2}\omega^2x^2\,. \tag{22}$$

这时也可以直接按高斯型积分求 $K(xt_f,x_0t_0)$，但是我们仍然借助于稳定路径进行计算，令

$$x(t)=x_{\mathrm{cl}}(t)+y(t)\,,$$

则

$$\begin{aligned}&L(x,\dot{x})\\&=L(x_{\mathrm{cl}},\dot{x}_{\mathrm{cl}})+\left(\frac{\partial L}{\partial x}\right)_{\mathrm{cl}}y+\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right)_{\mathrm{cl}}\dot{y}+\frac{m}{2}\dot{y}^2-\frac{m}{2}\omega^2y^2\,.\end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned}I[x(t_f)]&=I_{\mathrm{cl}}+\int_{t_0}^{t_f}\left(\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{d}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right)_{\mathrm{cl}}y\mathrm{d}t+\int_{t_0}^{t_f}L(y(t),\dot{y}(t))\mathrm{d}t\\&=I_{\mathrm{cl}}+\int_{t_0}^{t_f}L(y(t),\dot{y}(t))\mathrm{d}t\,,\end{aligned}$$

$$K(xt_f,x_0t_0)=F(t_f,t_0)\exp\{\mathrm{i}I_{\mathrm{cl}}/\hbar\}\,, \tag{23}$$

其中

$$\begin{aligned}F(t_f,t_0)&=\int\mathcal{D}[y(t)]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f}\left[\frac{m}{2}(\dot{y}(t))^2-\frac{m}{2}\omega^2(\dot{y}(t))^2\right]\mathrm{d}t\right\}\\&=K(0t_f,0t_0)\,.\end{aligned}$$

具有 (22) 式的拉氏函数的粒子如果在时刻 t_0 的波函数是 (不管归一因子)

$$\exp\Big\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\Big\},$$

那么在时刻 t 的波函数就是

$$\exp\Big\{-\frac{\mathrm{i}}{2}\omega(t-t_0)-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\Big\},$$

因此有

$$\exp\Big\{-\frac{\mathrm{i}}{2}\omega(t-t_0)-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\Big\}$$
$$=F(t,t_0)\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_0\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}I_{\mathrm{cl}}(tx,t_0x_0)-\frac{m\omega}{2\hbar}x_0^2\Big\}.$$

令 $x=0$，则

$$F(t,t_0)=\frac{1}{f(t,t_0)},$$

其中

$$f(t,t_0)$$
$$=\exp\Big\{\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega(t-t_0)\Big\}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_0\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}I_{\mathrm{cl}}(tx,t_0x_0)-\frac{m\omega}{2\hbar}x_0^2\Big\}.$$

由经典解 (用 t 代替 t_f)

$$x_{\mathrm{cl}}(t')=x_0\cos\omega(t'-t_0)+\frac{x-x_0\cos\omega(t-t_0)}{\sin\omega(t-t_0)}\sin\omega(t'-t_0),$$

得

$$I_{\mathrm{cl}}(t)=\frac{m\omega}{2\sin\omega(t-t_0)}\{(x^2+x_0^2)\cos\omega(t-t_0)-2xx_0\},$$

故

$$f(t,t_0)=\exp\left\{\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega(t-t_0)\right\}$$
$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_0\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m\omega\cos\omega(t-t_0)}{2\sin\omega(t-t_0)}x_0^2\right\}\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x_0^2\right\}.$$

求时间微商可得

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}=\frac{\omega}{2}\frac{\cos\omega(t-t_0)}{\sin\omega(t-t_0)}f\,.$$

作变换

$$z=\frac{1}{\omega}\sin\omega(t-t_0),$$

则

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z}=\frac{1}{2z}f\,.$$

注意

$$\frac{\mathrm{d}R(t-t_0)}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{2(t-t_0)}R(t-t_0)\,,$$

$$\lim_{\omega\to0}f(t,t_0)=R(t-t_0)\,,$$

得到

$$f(t,t_0)=R(z)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\eta^2}\mathrm{d}\eta\,,$$

故

$$F(t_f,t_0)=\frac{1}{R\left(\frac{\sin\omega(t_f-t_0)}{\omega}\right)}\,.\tag{24}$$

例题 3 在含时间的外力作用下的振子

设拉氏函数为

$$L(x,\dot{x},t)=\frac{m}{2}\dot{x}^2-\frac{1}{2}m\omega^2x^3-J(t)x\,.$$

这时仍然有

$$K(xt_f, x_0t_0) = K(0t_f, 0t_0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}I_{\mathrm{cl}}/\hbar}\,, \tag{25}$$

其中

$$I_{\mathrm{cl}} = \int_{t_0}^{t_f} \left\{\frac{m}{2}(\dot{x}_{\mathrm{cl}}(t)^2 - J(t)x_{\mathrm{cl}}(t)\right\}\mathrm{d}t\,.$$

$K(0t_f, 0t_0)$ 的计算不像前面那样简单了，但是可以借助例题 2 的结果作简单的变换求出本例的答案. 为此回到公式

$$K(xt_f, x_0t_0) = \langle x|T(t_f, t_0)|x_0\rangle\,,$$

其中 $T(t, t_0)$ 是薛定谔绘景的时间演化算符，相应的哈密顿量算符为

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + J(t)\hat{x}\,,$$

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\,.$$

故

$$T(t, t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0t}U(t, t_0)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0t_0}\,,$$

其中 $U(t, t_0)$ 可以借助编时算符 $\mathcal{T}$ 表示为

$$U(t, t_0) = \mathcal{T}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t'V(t')\right\},$$

而

$$V(t') = J(t')\hat{x}(t')\,,$$

$$\hat{x}(t') = \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0t'\right\}\hat{x}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0t'\right\}$$

$$= \hat{x}\cos\omega t' + \hat{p}\frac{\sin\omega t'}{m\omega}\,.$$

我们暂且假定 $t_f - t_0 > 0$, 令

$$\varepsilon = \frac{t_f - t_0}{N} \quad (N \to \infty),$$

则

$$U(t_f, t_0) \approx U(t_f, t_f - \varepsilon)U(t_f - \varepsilon, t_f - 2\varepsilon)\cdots U(t_0 + \varepsilon, t_0)$$

$$\approx \exp\Big\{ -\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t_0 - N\varepsilon - \varepsilon)\Big\}\exp\Big\{ -\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t_0 - N\varepsilon - 2\varepsilon)\Big\}$$

$$\times\cdots\exp\Big\{ -\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t_0)\Big\}.$$

注意 $[V(t'), V(t'')]$ 是常数, 有

$$\exp\Big\{ -\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t')\Big\}\exp\Big\{ -\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t'')\Big\}$$

$$= \exp\Big\{ -\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}(V(t') + V(t''))\Big\}\exp\Big\{\frac{1}{2}\Big[\frac{-\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t'), \frac{-\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t'')\Big]\Big\},$$

故

$$U(t_f, t_0) \approx \exp\Big\{ -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f} \mathrm{d}t' V(t')\Big\}$$

$$\times \exp\Big\{ -\frac{1}{2}\sum_{k>l=0}^{N-1}\Big[\frac{-\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t'), \frac{-\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t'')\Big]\Big\}$$

$$\longrightarrow \exp\Big\{ -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f} \mathrm{d}t' V(t')\Big\}$$

$$\times \exp\Big\{ -\frac{1}{2\hbar^2}\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t'}\mathrm{d}t''\Big[V(t'), V(t'')\Big]\Big\}$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha/\hbar}\exp\Big\{ -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t' V(t')\Big\},$$

其中

$$\alpha = \frac{1}{2m\omega}\int_{t_0}^{t_f} \mathrm{d}t' \int_{t_0}^{t_f} \mathrm{d}t'' \eta(t'-t'')J(t')J(t'')\sin\omega(t'-t'')\,,$$

$$\eta(t'-t'') = \begin{cases} 1\,, & \text{当 } t'-t''>0\,, \\ 0\,, & \text{当 } t'-t''<0\,. \end{cases}$$

令

$$\begin{aligned}\widehat{x}(t',t_0) &= \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_0(t'-t_0)\right\}\widehat{x}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_0(t'-t_0)\right\} \\ &= \widehat{x}\cos\omega(t'-t_0)+\widehat{p}\frac{\sin\omega(t'-t_0)}{m\omega}\,,\end{aligned}$$

则

$$T(t_f,t_0)$$

$$= \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\alpha}{\hbar}}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\widehat{H}_0(t_f-t_0)\right\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t'\,J(t')\widehat{x}(t',t_0)\right\}$$

$$= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\widehat{H}_0(t_f-t_0)\right\}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\alpha_1}{\hbar}\widehat{p}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\alpha_2}{\hbar}\widehat{x}}\,,$$

其中

$$\alpha_1 = \frac{1}{m\omega}\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t'\,J(t')\sin\omega(t'-t_0),$$

$$\alpha_2 = \int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t'\,J(t')\cos\omega(t'-t_0),$$

而

$$\beta = \frac{1}{2}\alpha_1\alpha_2 - \alpha$$

$$= \frac{1}{m\omega}\int_{t_0}^{t_f}\int_{t_0}^{t_f} \mathrm{d}t'\mathrm{d}t''\eta(t'-t'')J(t')J(t'')\cos\omega(t'-t_0)\sin\omega(t''-t_0)\,.$$

因此，当 $t_f > t_0$ 时有

$$\langle x|T(t_f,t_0)|x_0\rangle = \langle x|\exp\Big\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\widehat{H}_0(t_f-t_0)\Big\}|x_0+\alpha_1\rangle$$

$$\times\exp\Big\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\beta+\alpha_2 x_0)\Big\}\,, \qquad (26)$$

其中第一个因子可从例题 2 的结果中将 x_0 换成 $(x_0+\alpha_1)$ 而求出. 令 x 及 x_0 等于零，得 (当 $t_f > t_0$)

$$K(0t_f,0t_0)$$

$$= \langle x\to 0|\exp\Big\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\widehat{H}_0(t_f-t_0)\Big\}|x_0\to\alpha_1\rangle \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta}$$

$$= F(t_f,t_0)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta}\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}m\omega\alpha_1^2}{2\hbar\sin\omega(t_f-t_0)}\cos\omega(t_f-t_0)\Big\}, \qquad (27)$$

其中 $F(t_f,t_0)$ 即是例题 2 中由同一记号代表的量.

为了求出经典作用量，需要根据如下的拉氏方程和边条件决定经典解 $x_{\mathrm{cl}}(t)$:

$$\ddot{x}_{\mathrm{cl}}(t) = -\omega^2 x_{\mathrm{cl}}(t) - J(t)/m\,,$$

$$x_{\mathrm{cl}}(t_0) = x_0\,, \qquad x_{\mathrm{cl}}(t_f) = x\,.$$

结果可表示为

$$x_{\mathrm{cl}}(t) = x_0 \cos\omega(t-t_0) + B\sin\omega(t-t_0) - \frac{1}{m\omega}\int_{t_0}^{t_f} \mathrm{d}t' J(t')\sin\omega(t-t'),$$

其中

$$B = \frac{1}{\sin\omega(t_f-t_0)}\left\{x - x_0\cos\omega(t_f-t_0) + \frac{1}{m\omega}\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t' J(t')\sin\omega(t_f-t')\right\}.$$

1.4 虚时间方法

前一小节的讨论也适用于 H 显含时间的情形，现在则假定哈密顿量不显含时间，具有最低本征值 E_0. 令 $\overline{H} = H - E_0$，于是 $\overline{H}$ 的本征值是正数或零. 这时 $\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}t/\hbar}$ 当 $t>0$ 时在 α 的右半平面是解析的. 同样，当 $t<0$ 时，在 α 的左半平面是解析的. 因此借助于解析延拓，当 $t>0$ 时，可将 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}t/\hbar}$ 换为 $\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}t/\hbar}$，其中 α 为正实数. 在完成计算后再令 α 趋于 $0^+ + \mathrm{i}$. 类似地，当 $t<0$ 时，也可将 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}t/\hbar}$ 换为 $\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}t/\hbar}$ 而让 α 为负实数. 在完成计算后再令 α 趋于 $0^- + \mathrm{i}$. 在 α 为实数的情况下，用 $\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}t/\hbar}$ 顶替 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}t/\hbar}$，亦即将原来的 t 换成虚时间 $-\mathrm{i}\alpha t$，这只是使用解析函数的一种技巧.（在保持 αt 为正实数时，$\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}t/\hbar}$ 与统计物理中的统计算符具有同样的结构. 因此，虚时间的路径积分方法还可以直接用于统计物理学.）

现在对于 $t_f - t_0 > 0$ 的情形，将 $\langle r_f|\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}(t_f-t_0)/\hbar}|r_0\rangle$ 表示为路径积分. 其中 α 是正常数. 为此，只需求出 $\varepsilon \sim 0^+$ 时 $\langle r|\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}\varepsilon/\hbar}|r'\rangle$

的相应表达式. 与前一小节的情形相似, 有

$$\langle \boldsymbol{r}|\exp\Big\{-\alpha\overline{H}\varepsilon/\hbar\Big\}|\boldsymbol{r}'\rangle$$

$$\approx \exp\Big\{-\frac{\alpha\varepsilon}{\hbar}\overline{V}\Big(\frac{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}'}{2}\Big)\Big\}$$

$$\times\langle \boldsymbol{r}|\exp\Big\{\frac{-\alpha\varepsilon}{2\hbar m}\Big(\widehat{p}_x^2+\widehat{p}_y^2+\widehat{p}_z^2\Big)\Big\}|\boldsymbol{r}'\rangle$$

$$= \exp\Big\{-\frac{\alpha\varepsilon}{\hbar}\overline{V}\Big(\frac{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}'}{2}\Big)\Big\}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\int\int \mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z$$

$$\times\exp\Big\{\frac{-\alpha\varepsilon}{2\hbar m}\Big(p_x^2+p_y^2+p_z^2\Big)+\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')/\hbar\Big\},$$

其中 $\overline{V}=V-E_0$. 利用

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha p^2+\mathrm{i}bp}=\mathrm{e}^{-\frac{b^2}{2\alpha}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha p^2},$$

得

$$\langle \boldsymbol{r}|\exp\Big\{-\alpha\overline{H}\varepsilon/\hbar\Big\}|\boldsymbol{r}'\rangle$$

$$\approx\frac{1}{(R'(\varepsilon))^3}\exp\Big\{-\frac{\alpha\varepsilon}{\hbar}V\Big(\frac{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}'}{2}\Big)+\frac{\varepsilon}{\alpha\hbar}\frac{m}{2}\Big(\frac{\boldsymbol{r}-\mathrm{r}'}{\varepsilon}\Big)^2\Big\},\quad(28)$$

其中

$$\frac{1}{R'(\varepsilon)}=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha\varepsilon}{2\hbar m}p^2}=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon\alpha}}.$$

因此

$$\langle \boldsymbol{r}_f|\exp\Big\{-\alpha\overline{H}(t_f-t_0)/\hbar\Big\}|\boldsymbol{r}_0\rangle$$

$$=\frac{1}{(R'(\varepsilon))^3}\int\prod_{n=1}^{N-1}\Big(\frac{\mathrm{d}x_n}{R'(\varepsilon)}\frac{\mathrm{d}y_n}{R'(\varepsilon)}\frac{\mathrm{d}z_n}{R'(\varepsilon)}\Big)\exp\Big\{\frac{\alpha}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1}\varepsilon L_n(\alpha)\Big\},\qquad(29)$$

而

$$-L_n(\alpha)=\frac{m}{2\alpha^2}(\boldsymbol{v}_n)^2+\overline{V}\Big(\frac{\boldsymbol{r}_{n+1}+\boldsymbol{r}}{2}\Big).$$

将这种表达式延拓到 α 的右半平面, 然后令 α 趋于

$$0^+ + \mathrm{i} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}} ,$$

就得到实时间方法的结果，这是虚时间方法的用法之一. 我们将这种手续简记为

$$\langle \boldsymbol{r}_f | \exp\left\{ -\mathrm{i}\overline{H}(t_f - t_0)/\hbar \right\} | \boldsymbol{r}_0 \rangle$$

$$= \lim_{\alpha \to 0^+ + \mathrm{i}} \frac{1}{(R'(\varepsilon))^3} \int \prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{\mathrm{d}x_n}{R'(\varepsilon)} \frac{\mathrm{d}y_n}{R'(\varepsilon)} \frac{\mathrm{d}z_n}{R'(\varepsilon)} \right)$$

$$\times \exp\left\{ \frac{\alpha}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \varepsilon L_n(\alpha) \right\} . \tag{30}$$

出现在等号两边的因子 $\exp\{\mathrm{i}E_0(t_f - t_0)/\hbar\}$ 可以消去. 这种解析延拓和取极限的手续也包含着计算 $R(\varepsilon)$ 的方法

$$R(\varepsilon) = \lim_{\alpha \to 0^+ + \mathrm{i}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\varepsilon\alpha}{m}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\varepsilon}{m}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{4}} ,$$

即是将函数 $\sqrt{\alpha}$ 延拓到 α 的右半平面，然后令 α 趋于

$$0^+ + \mathrm{i} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}} ,$$

因此 $\sqrt{\alpha}$ 趋于 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}$.

借助虚时间和解析延拓的方法可以使路径积分的数学表述更为明确. 在实际运用中既可直接贯彻这种方法，也可根据这种观点作出适当的约定之后使用实时间的路径积分公式.(见后面)

1.5 格林函数及其生成泛函的路径积分

为了便于后面的参考，我们来求一类特别的格林函数及其生成泛函的路径积分表示. 这类格林函数在正则量子化方法中的定

义如下：

$$G_{n_1n_2n_3}(t_1,t_2,t_3,\cdots)$$

$$=\langle\Psi_0|\mathcal{T}\big(\widehat{x}^h(t_1)\widehat{x}^h(t_2)\cdots\widehat{x}^h(t_{n_1})$$

$$\times\widehat{y}^h(t_{n_1+1})\cdots\widehat{y}^h(t_{n_1+n_2})\widehat{z}^h(t_{n_1+n_2+1})\cdots\widehat{z}^h(t_{n_1+n_2+n_3})\big)|\Psi_0\rangle\,,$$

其中 $\widehat{x}^h(t),\widehat{y}^h(t),\widehat{z}^h(t)$ 是海森伯绘景的坐标算符，Ψ_0 代表基态. n_1,n_2,n_3 分别代表出现在这个被平均的算符积中 $\widehat{x},\widehat{y},\widehat{z}$ 的数目. $\mathcal{T}$ 是时序算符. 下面用 $n_1=n_2=n_3=1$ 的情形来作说明. 设 $\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle$ 等于 1, 当 α 是正实数或在右半平面时，对任意状态 $|\Psi_A\rangle,|\Psi_B\rangle$ 都有：

$$\lim_{t_f\to\infty}\langle\Psi_A|\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}t_f/\hbar}=\langle\Psi_A|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|\,,$$

$$\lim_{t_f\to-\infty}\mathrm{e}^{\alpha\overline{H}t_0/\hbar}|\Psi_B\rangle=|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|\Psi_B\rangle\,,$$

$$\lim_{\substack{t_0\to-\infty\\t_f\to\infty}}\langle\Psi_A|\mathrm{e}^{-(\alpha t_f-\alpha' t_0)\overline{H}/\hbar}|\Psi_B\rangle=\langle\Psi_A|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|\Psi_B\rangle\,,\tag{31}$$

$$\lim_{\substack{t_0\to-\infty\\t_f\to\infty}}\langle\Psi_A|\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}t_f/\hbar}\mathcal{T}\{\widehat{x}^h(t_1)\widehat{y}^h(t_2)\widehat{z}^h(t_3)\}\mathrm{e}^{\alpha'\overline{H}t_0/\hbar}|\Psi_B\rangle$$

$$=\langle\Psi_0|\mathcal{T}\{\widehat{x}^h(t_1)\widehat{y}^h(t_2)\widehat{z}^h(t_3)\}|\Psi_0\rangle\langle\Psi_A|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|\Psi_A\rangle\,.\tag{32}$$

因此， $G_{111}(t_1,t_2,t_3)$ 可以表示为

$$G_{111}(t_1,t_2,t_3)$$

$$=\frac{\lim\limits_{\substack{t_0\to-\infty\\t_f\to\infty}}\langle\Psi_A|\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}t_f/\hbar}\mathcal{T}\{\widehat{x}^h(t_1)\widehat{y}^h(t_2)\widehat{z}^h(t_3)\}\mathrm{e}^{\alpha'\overline{H}t_0/\hbar}|\Psi_B\rangle}{\lim\limits_{\substack{t_0\to-\infty\\t_f\to\infty}}\langle\Psi_A|\mathrm{e}^{-(\alpha t_f-\alpha' t_0)\overline{H}/\hbar}|\Psi_B\rangle}\,.\tag{33}$$

注意最后结果不依赖于 α,α' 的值，也不依赖于 Ψ_A,Ψ_B，为了写成路径积分形式，我们令 $|\Psi_A\rangle$ 及 $|\Psi_B\rangle$ 为 $|r_f\rangle$, $|r_0\rangle$. 首先考虑

$t_1 \geq t_2 \geq t_3$ 的情形. 这时有

$$G_{111}(t_1,t_2,t_3)=\frac{g_{111}(t_1,t_2,t_3)}{\lim\limits_{\substack{t_0\to-\infty\\ t_f\to+\infty}}\langle \boldsymbol{r}_f|\mathrm{e}^{-(\alpha t_f-\alpha' t_0)\overline{H}/\hbar}|\boldsymbol{r}_0\rangle}\,, \tag{34}$$

而

$$\begin{aligned} g_{111}(t_1,t_2,t_3)=\lim_{\substack{t_0\to-\infty\\ t_f\to+\infty}}\langle \boldsymbol{r}_f|\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}t_f/\hbar}\mathrm{e}^{\overline{H}t_1/\hbar}\widehat{x}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}(t_1-t_2)/\hbar}\widehat{y}\\ \times\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}(t_2-t_3)/\hbar}\widehat{z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}t_3/\hbar}\mathrm{e}^{\alpha'\overline{H}t_3/\hbar}|\boldsymbol{r}_0\rangle\,, \end{aligned}$$

其中 $\widehat{x},\widehat{y},\widehat{z}$ 是薛定谔绘景的坐标算符. 在此式中令 α 及 α' 从右半平面趋于 $0^+ + \mathrm{i}$, 可将其改写为

$$\begin{aligned} &g_{111}(t_1,t_2,t_3)\\ &=\lim_{\substack{\alpha\to 0^+ +\mathrm{i}\\ \alpha'\to 0^+ +\mathrm{i}}}\lim_{\substack{t_0\to-\infty\\ t_f\to+\infty}}\langle \boldsymbol{r}_f|\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}(t_f-t_1)/\hbar}\widehat{x}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}(t_1-t_2)/\hbar}\\ &\quad\times\widehat{y}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}(t_2-t_3)/\hbar}\widehat{z}\mathrm{e}^{\alpha'\overline{H}(t_3-t_0)/\hbar}|\boldsymbol{r}_0\rangle\,. \end{aligned}$$

在算符 $\widehat{x},\widehat{y},\widehat{z}$ 的位置分别插入完备组 $\{|\boldsymbol{r}_1\rangle\},\{|\boldsymbol{r}_2\rangle\}$ 及 $\{|\boldsymbol{r}_3\rangle\}$ 并将 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3$ 的一种值看作是路径 $\boldsymbol{r}(t)$ 上对应于时刻 t_1,t_2,t_3 的点, 利用

$$\begin{aligned} \widehat{x}|\boldsymbol{r}_1\rangle&=x(t_1)|\boldsymbol{r}_1\rangle\,,\\ \widehat{y}|\boldsymbol{r}_2\rangle&=y(t_2)|\boldsymbol{r}_2\rangle\,,\\ \widehat{x}|\boldsymbol{r}_3\rangle&=z(t_3)|\boldsymbol{r}_3\rangle\,, \end{aligned}$$

得到

$$\begin{aligned} g_{111}(t_1,t_2,t_3)=\lim_{\substack{\alpha\to 0^+ +\mathrm{i}\\ \alpha'\to 0^+ +\mathrm{i}}}\lim_{\substack{t_0\to-\infty\\ t_f\to+\infty}}\int\int\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3\\ \times\langle \boldsymbol{r}_f|\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}(t_f-t1)/\hbar}|\boldsymbol{r}_1\rangle x(t_1)\langle \boldsymbol{r}_1|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}(t_1-t_2)/\hbar}|\boldsymbol{r}_2\rangle y(t_2)\\ \times\langle \boldsymbol{r}_2|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}(t_2-t_3)/\hbar}|\boldsymbol{r}_3\rangle z(t_3)\langle \boldsymbol{r}_3|\mathrm{e}^{\alpha'\overline{H}(t_3-t_0)/\hbar}|\boldsymbol{r}_0\rangle\,. \end{aligned}$$

如果把其中的 $x(t_1), y(t_2), z(t_3)$ 都换成 1, 就变成 (34) 式中分母的表达式, 即

$$\lim_{\substack{\alpha\to 0^+ +\mathrm{i}\\ \alpha'\to 0^+ +\mathrm{i}}}\ \lim_{\substack{t_0\to-\infty\\ t_f\to+\infty}} \int\int\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3 \langle \boldsymbol{r}_f|\mathrm{e}^{-\alpha\overline{H}(t_f-t_1)/\hbar}|\boldsymbol{r}_1\rangle$$

$$\times\langle \boldsymbol{r}_1|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}(t_1-t_2)/\hbar}|\boldsymbol{r}_2\rangle\langle \boldsymbol{r}_2|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{H}(t_2-t_3)/\hbar}|\boldsymbol{r}_3\rangle\langle \boldsymbol{r}_3|\mathrm{e}^{\alpha'\overline{H}(t_3-t_0)/\hbar}|\boldsymbol{r}_0\rangle\,.$$

将各个因子的路径积分表达式代进 (34) 式, 注意分子、分母中的所有 $R'(\varepsilon)$ 因子都相消了. 由 E_0 引起的因子也相消了, 故

$$G_{111}(t_1,t_2,t_3)$$

$$=\frac{\lim\limits_{\alpha\to 0^+ +\mathrm{i}}\int\mathcal{D}[\boldsymbol{r}]x(t_1)y(t_2)z(t_3)\exp\Big\{\frac{\alpha}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}tL(\boldsymbol{r}(t),\dot{\boldsymbol{r}}(t),\alpha)\Big\}}{\lim\limits_{\alpha\to 0^+ +\mathrm{i}}\int\mathcal{D}[\boldsymbol{r}]\exp\Big\{\frac{\alpha}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}tL(\boldsymbol{r}(t),\dot{\boldsymbol{r}}(t),\alpha)\Big\}}\,. \tag{35}$$

其中 $\mathcal{D}[\boldsymbol{r}]$ 是路径积分元, 它是分割时间间隔 $(t_f-t_1),(t_1-t_2)$ 及 (t_3-t_0) 时形成的分立积分元的积的极限形式, 其中包含着时刻 t_1,t_2,t_3 的积分元 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3$. 通常也将 $\mathcal{D}[\boldsymbol{r}]$ 简写成 $\prod_t \mathrm{d}\boldsymbol{r}(t)$. 由于 E_0 引起的因子已经消去, $L(\boldsymbol{r}(t),\dot{\boldsymbol{r}}(t),\alpha)$ 即是将 $L(\boldsymbol{r}(t),\dot{\boldsymbol{r}}(t))$ 中的 $\dot{\boldsymbol{r}}$ 换成 $\frac{1}{(-\mathrm{i}\alpha)}\dot{\boldsymbol{r}}$ 的结果:

$$L(\boldsymbol{r}(t),\dot{\boldsymbol{r}}(t),\alpha)=L(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}})|_{\dot{\boldsymbol{r}}\to\frac{1}{(-\mathrm{i}\alpha)}\dot{\boldsymbol{r}}}\,. \tag{36}$$

虽然在推导过程中约定了 $t_1\geq t_2\geq t_3$, 实际上所得到的路径积分对于 t_1,t_2,t_3 的其他顺序依然正确. 对于一般的 n_1,n_2,n_3 有

$$G_{n_1n_2n_3}(t_1,t_2,\cdots)$$

$$=\frac{\lim\limits_{\alpha\to 0^+ +\mathrm{i}}\int\mathcal{D}[\boldsymbol{r}]\prod_j x(t_j)\prod_l y(t_l)\prod_s z(t_s)\exp\Big\{\frac{\alpha}{\hbar}I(\alpha)\Big\}}{\lim\limits_{\alpha\to 0^+ +\mathrm{i}}\int\mathcal{D}[\boldsymbol{r}]\exp\Big\{\frac{\alpha}{\hbar}I(\alpha)\Big\}}\,, \tag{37}$$

其中

$$I(\alpha)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}tL(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}},\alpha)\,,$$

$$\prod_{j}(x_j)=\prod_{j=1}^{j=n_1}x(t_j)\,,$$

$$\prod_{l}(y_l)=\prod_{l=n_1+1}^{l=n_1+n_2}y(t_l)\,,$$

$$\prod_{s}(z_s)=\prod_{s=n_1+n_2+1}^{n_1+n_2+n_3}z(t_s)\,.$$

这类格林函数可用如下的生成泛函来产生

$$Z[J]=\frac{\lim\limits_{\alpha\to 0^{+}+\mathrm{i}}\int\mathcal{D}[\boldsymbol{r}]\exp\left\{\frac{\alpha}{\hbar}(I(\alpha)+I_s)\right\}}{\lim\limits_{\alpha\to 0^{+}+\mathrm{i}}\int\mathcal{D}[\boldsymbol{r}]\exp\left\{\frac{\alpha}{\hbar}I(\alpha)\right\}}\,,\tag{38}$$

其中 I_s 是源项贡献的作用量

$$I_s=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t[J_1(t)x(t)+J_2(t)y(t)+J_3(t)z(t)]\,.$$

例如

$$G_{111}(t_1,t_2,t_3)=\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J_1(t_1)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J_2(t_2)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J_3(t_3)}Z[J]|_{J_1=J_2=J_3=0}\,.$$

这里写出的虚时间形式的路径积分表示对于更为复杂的系统也有参考价值. 由于时间演化算符中的 $\mathrm{i}t$ 被换成了 αt, 或者说 t 被换成了 $-\mathrm{i}\alpha t$, 在构成路径积分后，相应于原来实时间方法中伴随着作用量的因子 i 被换成了 α. 而 $L(\boldsymbol{r}(t),\dot{\boldsymbol{r}}(t),\alpha)$ 中的 α 则来源于实时间方法中的 $\frac{\boldsymbol{r}_{n+1}-\boldsymbol{r}_n}{\epsilon}$ 被换成 $\frac{\boldsymbol{r}_{n+1}-\boldsymbol{r}_n}{-\mathrm{i}\alpha\epsilon}$. 顺便指出，将

$L(\boldsymbol{r}(t),\dot{\boldsymbol{r}}(t),\alpha)$ 反号并令其中的 α 等于 1, 结果就是所谓欧氏拉氏函数

$$L^E(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}}) = -L(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}},\alpha)|_{\alpha=1} = -L(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}})|_{\dot{\boldsymbol{r}}\to\frac{1}{(-\mathrm{i})}\dot{\boldsymbol{r}}}\,.$$

通常习惯于记住解析延拓和 $\alpha \to 0^+ + \mathrm{i}$ 的极限过程，而将 $Z[J]$ 及 $G_{n_1n_2n_3}(t_1,t_2,\cdots)$ 的路径积分表达式写成实时间形式

$$Z[J] = \frac{\int \mathcal{D}[\boldsymbol{r}]\exp\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(I+I_s)\}}{\int \mathcal{D}[\boldsymbol{r}]\exp\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}I\}}\,, \tag{39}$$

$$G_{n_1n_2n_3}(t_1,\cdots) = \frac{\int \mathcal{D}[\boldsymbol{r}]\prod_j x(t_j)\prod_l y(t_l)\prod_s z(t_s)\exp\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}I\}}{\int \mathcal{D}[\boldsymbol{r}]\exp\{\frac{i}{\hbar}I\}}\,, \tag{40}$$

其中

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t L(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}}).$$

这种实时间形式也可以用来进行运算，但要有适当的约定. 关于这一点，后面还有说明.

§2 在有限维相空间的路径积分

为了简便，只考虑笛卡儿坐标，并规定构成波函数内积时的权重函数恒等于 1. 设 $\Psi(x,t)$ 和 $\widehat{H}(\hat{x},\hat{p},t)$ 分别是时刻 t 的波函数和哈密顿量算符，于是当时间改变一个无穷小量 ε 时有

$$\Psi(x,t+\varepsilon) \approx \Psi(x,t) + \frac{\varepsilon}{\mathrm{i}\hbar}\widehat{H}(\hat{x},\hat{p},t)\Psi(x,t)\,, \tag{41}$$

用 $\psi_{p_1p_2\cdots p_s}(x_1x_2\cdots x_s)$ 代表动量 $\hat{p}_1,\hat{p}_2,\cdots,\hat{p}_s$ 的共同本征函数，本征值为 $p_1,p_2,\cdots,p_s$, 即

$$\psi_{p_1p_2\cdots p_s}(x) = \prod_l \left(\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_lx_l/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)\,. \tag{42}$$

把 $\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p},t)$ 按照坐标动量的对易关系式改写成 $H_R(\widehat{x},\widehat{p},t)$，使得每一项中的 $\widehat{p}_j$ 都在 $\widehat{x}_j$ 的右方，于是

$$\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p},t)\psi_{p_1p_2\cdots p_s}(x)=H_R(x,p,t)\psi_{p_1p_2\cdots p_s}(x)\,,$$

其中 $H_R(x,p,t)$ 是在 $H_R(\widehat{x},\widehat{p},t)$ 中把 $\widehat{x}_j,\widehat{p}_l$ 直接换成 x_j,p_l 的结果. 把 $\Psi(x,t)$ 写成 (42) 式中的波函数的叠加有

$$\begin{aligned}\Psi(x,t)&=\int \mathrm{d}^s p\psi_{p_1p_2\cdots p_s}(x)\int \mathrm{d}^s x'\psi^*_{p_1p_2\cdots p_s}(x')\Psi(x',t)\,,\\&=\int\frac{\mathrm{d}^s x'\mathrm{d}^s p}{(2\pi\hbar)^s}\exp\left\{\mathrm{i}\sum_l p_l(x_l-x'_l)/\hbar\right\}\Psi(x',t)\,,\end{aligned}$$

因此

$\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p},t)\Psi(x,t)$

$$=\int\frac{\mathrm{d}^s x'\mathrm{d}^s p}{(2\pi\hbar)^s}\exp\left\{\mathrm{i}\sum_l p_l(x_l-x'_l)/\hbar\right\}\times H_R(x',p,t)\Psi(x',t)\,.$$

(41) 式可写成

$$\begin{aligned}\Psi(x,t+\varepsilon)\approx\int\frac{\mathrm{d}^s x'\mathrm{d}^s p}{(2\pi\hbar)^s}&\exp\left\{\mathrm{i}\sum_l p_l(x_l-x'_l)/\hbar\right\}\\&\times\left\{1-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}H_R(x,p,t)\right\}\Psi(x',t)\,,\end{aligned}$$

或

$\Psi(x,t+\varepsilon)$

$$\approx\int\frac{\mathrm{d}^s x'\mathrm{d}^s p}{(2\pi\hbar)^s}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\left[\sum_l p_l\left(\frac{x_l-x'_l}{\varepsilon}\right)-H_R(x,p,t)\right]\right\}\Psi(x',t).\quad(43)$$

对于单个自由度的情形有

$$\Psi(x,t+\varepsilon)$$

$$\approx \int \frac{\mathrm{d}x'\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\Big[p\Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big)-H_R(x,p,t)\Big]\Big\}\Psi(x',t)\,. \tag{44}$$

在曲线坐标下的公式也可用类似的方法求出，这里从略.

如果 $H_R(x,p,t)$ 确是和经典哈密顿量相同，那么只要知道经典哈密顿量或拉氏函数，就可以用 (43) 式描述波函数的时间演化；但是 $H_R(x,p,t)$ 按定义是借助坐标动量之间的对易关系式，把哈密顿量算符加以整理，使各项的 $\hat{p}_l$ 处在 $\hat{x}_l$ 的右方再把 $\hat{x}_l,\hat{p}_l$ 换为 x_l,p_l 而成的，一般不是经典哈密顿量. 如果只知道经典哈密顿量而不知道怎样确定它的算符，就不完全知道 $H_R(x,p,t)$, 因而也就不知道如何完全准确地应用公式 (43).

当拉氏函数不含广义速度的三次项或更高次项时，哈密顿量算符能够完全确定下来. 在这种情况下，在 (43) 式中完成对于 $\{p_l\}$ 的积分后，应该给出前节的用拉氏函数表达的公式. 作为例子，我们回到 (17) 式的拉氏函数来证明这一点，这时哈密顿量算符是

$$\hat{H}(\hat{p},t)=\frac{1}{2m}\big(\hat{p}-G(\hat{x},t)\big)^2+V(\hat{x},t)\,,$$

故

$$H_R(x,p,t)$$

$$=\frac{1}{2m}\Big\{p^2-2G(x,t)p+G^2(x,t)+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial G(x,t)}{\partial x}\Big\}+V(x,t)\,,$$

$$p\Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big)-H_R(x,p,t)$$

$$=-V(x,t)+\frac{m}{2}\Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big)^2+\Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big)G(x,t)$$

$$-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\Big\{\frac{\partial}{\partial x}G(x,t)\Big\}-\frac{1}{2m}(p-p_0)^2\,,$$

其中

$$p_0 = m\Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big) + G(x,t)\,.$$

由此得

$$\int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\Big[p\Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big) - H_R(x,p,t)\Big]\Big\}$$

$$= \frac{1}{R(\varepsilon)}\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\Big[\frac{m}{2}\Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big)^2 - V(x,t)\Big]\Big\}$$

$$\times\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\Big[\Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big)G(x,t) - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial G(x,t)}{\partial t}\Big]\Big\}\,. \qquad (45)$$

这里用到

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\Big\{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{2\hbar m}y^2\Big\}\mathrm{d}y = \frac{2\pi\hbar}{R(\varepsilon)}\,.$$

把 (45) 式代入 (44) 式，得

$$\Psi(x,t+\varepsilon)$$

$$\approx \frac{1}{R(\varepsilon)}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\psi(x',t)\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\Big[\frac{m}{2}\Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big)^2\Big]\Big\}$$

$$\times\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\Big[-V(x,t) + \Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big)G(x,t) - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial G(x,t)}{\partial x}\Big]\Big\}\,.$$

在保留到 ε 的一次项时，此式中的 $V(x,t)$ 可换成 $V(\frac{x+x'}{2},t)$，而 $(1/\varepsilon)(x-x')G(x,t)$ 可换成

$$\frac{x-x'}{\varepsilon}G(\frac{x+x'}{2},t) + \frac{(x-x')^2}{2\varepsilon}\frac{\partial G(x,t)}{\partial x}\,,$$

因此

$$\Psi(x,t+\varepsilon)\approx\frac{1}{R(\varepsilon)}\int \mathrm{d}x'\Psi(x',t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}L\left(\frac{x+x'}{2},\frac{x-x'}{\varepsilon},t\right)\right\}$$
$$\times\exp\left\{\left[\frac{\varepsilon}{2m}+\frac{\mathrm{i}(x-x')^2}{2\hbar}\right]\frac{\partial G(x,t)}{\partial x}\right\}$$
$$\approx\frac{1}{R(\varepsilon)}\int \mathrm{d}x'\Psi(x',t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}L\left(\frac{x+x'}{2},\frac{x-x'}{\varepsilon},t\right)\right\}$$
$$+\frac{1}{R(\varepsilon)}\Psi(x,t)\frac{\partial G(x,t)}{\partial x}$$
$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\varepsilon\hbar}(x-x')^2\right\}\left\{\frac{\varepsilon}{2m}+\frac{\mathrm{i}(x-x')^2}{2\hbar}\right\}.$$

第二项中的积分可以算出，结果等于零，因此得出 (18) 式.

为了用 (44) 式描述波函数经历有限时间 (t_f-t_0) 的演变，应把 t_f-t_0 分割为一系列无穷小的时间间隔，令

$$\varepsilon=\frac{t_f-t_0}{N}\quad(N\to\infty),$$
$$t_n=t_0+n\varepsilon\quad(t_N=t_f).$$

用 (x_n,p_n) 代表按照 (44) 式描述波函数从时刻 t_n 到 $t_n+\varepsilon$ 的演变时采用的积分变量，则

$$\Psi(x,t_f)=\lim_{\varepsilon\to0}\int\frac{\mathrm{d}x_0\mathrm{d}p_0}{2\pi\hbar}\frac{\mathrm{d}x_1\mathrm{d}p_1}{2\pi\hbar}\cdots\frac{\mathrm{d}x_{N-1}\mathrm{d}p_{N-1}}{2\pi\hbar}$$
$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1}\varepsilon\overline{L}_n\right\}\Psi(x_0,t_0),\tag{46}$$

其中

$$\overline{L}_n=p_n\dot{x}_n-H_R(\overline{x}_n,p_n,t_n),$$
$$\overline{x}_n=\frac{1}{2}(x_{n+1}+x_n),$$
$$\dot{x}_n=\frac{1}{\varepsilon}(x_{n+1}-x_n).$$

$H_R(\overline{x}_n, p_n, t_n)$ 即是在 $H_R(x,p,t)$ 中将 (x,p,t) 换成 $(\overline{x}_n, p_n, t_n)$ 的结果. 由 (46) 得到 $K(xt_f, x_0t_0)$ 的如下表达式

$$K(xt_f, x_0t_0) = \lim_{\varepsilon\to 0}\int \frac{\mathrm{d}x_0\mathrm{d}p_0}{2\pi\hbar}\frac{\mathrm{d}x_1\mathrm{d}p_1}{2\pi\hbar}\cdots\frac{\mathrm{d}x_{N-1}\mathrm{d}p_{N-1}}{2\pi\hbar}$$
$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1}\varepsilon\overline{L}_n\right\}. \tag{47}$$

现在把这个公式中的积分变量 $p_0, (x_1,p_1), \cdots, (x_{N-1}, p_{N-1})$ 的每一种值连同 x_0, x 看成相空间中的路径 $(x(t), p(t))$ 上的 x, p 值，使得

$$x(t_n) = x_n \quad (x_N \equiv x),$$
$$p(t_n) = p_n,$$

于是给定一条路径，就决定了作用量 $\sum_{n=0}^{N-1}\varepsilon\overline{L}_n$ 沿这条路径的值

$$\sum_{n=0}^{N-1}\varepsilon\overline{L}_n \longrightarrow \int_{t_0}^{t_f}\{p(t)\dot{x}(t) - H_R(x(t),p(t),t)\mathrm{d}t$$
$$= \overline{I}(xt_f, x_0t_0[x(t)], [p(t)]).$$

这样，(47) 式就可以看作对于具有给定 (x_0, x) 的一切路径的贡献求和，简记为

$$K(xt_f, x_0t_0)$$
$$= \int \mathcal{D}[x(t),p(t)]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\overline{I}(xt_f, x_0t_0, [x(t)], [p(t)])\right\}, \tag{48}$$

这就是 $K(xt_f, x_0t_0)$ 在相空间的路径积分公式，其中 $\mathcal{D}[x,p]$ 代表由

$$\frac{\mathrm{d}p_0}{2\pi\hbar}\sum_{n=0}^{N-1}\left(\frac{\mathrm{d}x_n\mathrm{d}p_n}{2\pi\hbar}\right)$$

形成的路径积分元. 用同样的方法可求出多维情形的相应公式，而且只要把 x,p 理解为 $x_1,x_2,\cdots x_s$ 及 $p_1,p_2,\cdots p_s$，则形式仍然和 (48) 式一样.

下面说明一下，当哈密顿量是 x,p 的二次式时，如何用相空间的经典路径表示 $K(xt_f,x_0t_0)$. 设哈密顿量为 $H(x,p,t)$，考虑如下的运动方程和边条件

$$\dot{x}=\frac{\partial H}{\partial p}\,,$$

$$\dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial x}\,,$$

$$x(t_0)=x_0\,,\quad x(t_f)=x\,.$$

由此唯一地确定相空间中的一条经典路径，记为 $x_{\rm cl}(t),p_{\rm cl}(t)$. 令

$$x(t)=x_{\rm cl}(t)+y(t)\,,$$

$$p(t)=p_{\rm cl}(t)+z(t)\,.$$

由于 $H(x,p,t)$ 是 x,p 的二次式，而且 $y(t_0)=y(t_f)=0$, 有

$$\begin{aligned}\bar{I}(xt_f,x_0t_0,[x(t)],[p(t)])&=\bar{I}_{\rm cl}+\int_{t_0}^{t_f}\left\{-\dot{p}_{\rm cl}(t)-\left(\frac{\partial H}{\partial x}\right)_{\rm cl}\right\}y(t)\mathrm{d}t\\&\quad+\int_{t_0}^{t_f}\left\{\dot{x}_{\rm cl}(t)-\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{\rm cl}\right\}z(t)\mathrm{d}t\\&\quad+\int_{t_0}^{t_f}\{z(t)\dot{y}(t)-H(y,z,t)\}\mathrm{d}t\,,\end{aligned}$$

其中第四项对 $K(xt_f,x_0t_0)$ 贡献一个因子 $K(0t_f,0t_0)$, 第二、第三

项等于零，第一项为

$$\bar{I}_{\mathrm{cl}}(xt_f, x_0t_0) = \int_{t_0}^{t_f} \{p_{\mathrm{cl}}(t)\dot{x}_{\mathrm{cl}}(t) - H(x_{\mathrm{cl}}, p_{\mathrm{cl}}, t)\}\mathrm{d}t\,. \tag{49}$$

因此由 (48) 式得

$$K(xt_f, x_0t_0) = K(0t_f, 0t_0)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\bar{I}_{\mathrm{cl}}\right\}. \tag{50}$$

这就是所需要的公式. 前面的 (20),(23) 和 (25) 式都是这种类型的公式，因为经典轨道保证 $p\dot{x} - H(x,p,t)$ 等于 $L(x,\dot{x},t)$.

§3 在 a^* 表象的路径积分

设 (q_j, p_j) 是正则变量，可以取任意实数值. 已经知道，当它们被复变量 a_j 代替时，正则方程变为

$$\mathrm{i}\hbar\dot{a}_j = \frac{\partial\mathcal{H}_c(a^*, a, t)}{\partial a_j^*}\,, \tag{51}$$

其中

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta_j q_j + \frac{\mathrm{i}}{\beta_j\hbar}p_j\right),$$

$$a_j^* = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta_j q_j - \frac{\mathrm{i}}{\beta_j\hbar}p_j\right).$$

β_j 是使 $\beta_j q_j$ 成为无量纲量的正数，$\mathcal{H}_c(a^*, a, t)$ 是用 (a^*, a) 表示的哈密顿量. 微商记号的意义已在前面说明过，简单地说，就是使 $F(a^*, a)$ 的一级改变量可表示为

$$\delta F(a^*, a) = \sum_j \delta a_j^* \frac{\partial F}{\partial a_j^*} + \sum_j \delta a_j \frac{\partial F}{\partial a_j}\,.$$

由此仍然可以把运动方程表示为所谓修正的哈密顿原理的形式，即

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}\left\{-\mathrm{i}\hbar\sum_j \dot{a}_j^* a_j - \mathcal{H}_c(a^*,a,t)\right\}\mathrm{d}t=0\,. \tag{52}$$

在变分时 $a(t_1)$ 及 $a(t_2)$ 是固定的，而且它们必须代表真实的经典路径的端点. 此式也可写成

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}\left\{\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\sum_j(a_j^*\dot{a}_j-\dot{a}_j^*a_j)-\mathcal{H}_c(a^*,a,t)\right\}\mathrm{d}t=0\,. \tag{53}$$

利用这种复变量可以建立量子力学的一种特别的表象，称为 a^* 表象，意思是以 $\{a_j^*\}$ 作为波函数的自变量. 为此要给出这种波函数的内积的适当定义. 内积 (f_A,f_B) 应当由

$$(f_A(a^*))^* f_B(a^*)$$

经过对于 (q,p) 的积分来构成，即

$$(f_A,f_B)=\int\frac{\mathrm{d}^s q\mathrm{d}^s p}{(2\pi\hbar)^s}W(a^*,a)(f_A(a^*))^* f_B(a^*)\,, \tag{54}$$

其中的常数因子是为了后面的方便而引进的，$W(a^*,a)$ 是权重函数. 根据正则量子化的结果，a_j^*,a_l 的算符满足如下的对易关系

$$\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_l^\dagger-\hat{a}_l^\dagger\hat{a}_j^\dagger=\hat{a}_j\hat{a}_l-\hat{a}_l\hat{a}_j=0\,,$$

$$\hat{a}_j\hat{a}_l^\dagger-\hat{a}_l^\dagger\hat{a}_j=\delta_{jl}\,.$$

系统的态矢量可用 $\{\hat{a}_l^\dagger\}$ 作用于满足如下条件的态矢量 $|0\rangle$ 来构成

$$\hat{a}_j|0\rangle=0\,,\quad \langle 0|0\rangle=1\,..$$

波函数的内积当然必须等于态矢量空间中对应的内积，而且适当选择权重函数，必定能够使波函数为 $f(a^*)$ 的态矢量 $|\Psi_f\rangle$ 被 $\hat{a}_j^\dagger$ 及

$\hat{a}_j$ 作用之后，分别变成波函数是 $\hat{a}_j^* f(a^*)$ 及 $\frac{\partial}{\partial a_j^*} f(a^*)$ 的态矢量. 记为

$$\hat{a}_j^\dagger |\Psi_f\rangle \longleftrightarrow a_j^* f(a^*)\,, \tag{55}$$

$$\hat{a}_j |\Psi_f\rangle \longleftrightarrow \frac{\partial}{\partial a_j^*} f(a^*)\,. \tag{56}$$

即是说，$\hat{a}_j^\dagger$ 及 $\hat{a}_j$ 在 a^* 表象的算子分别是 a_j^* 及 $\partial/\partial a_j^*$. 我们就以此作为选择 $W(a^*, a)$ 的标准条件. 把波函数为 $f_A(a^*)$ 及 $f_B(a^*)$ 的态矢量分别简记为 Ψ_A 及 Ψ_B, 由

$$(\hat{a}_j^\dagger \Psi_A, \Psi_B) = (\Psi_A, \hat{a}_j \Psi_B)\,,$$

及

$$\frac{\partial a_k}{\partial a_j^*} = 0\,,$$

得出

$$\begin{aligned}
&\int \frac{\mathrm{d}^s q \mathrm{d}^s p}{(2\pi\hbar)^s} W(a^*, a)(a_j^* f_A(a^*))^* f_B(a^*) \\
&\quad = \int \frac{\mathrm{d}^s q \mathrm{d}^s p}{(2\pi\hbar)^s} W(a^*, a)(f_A(a^*))^* \frac{\partial}{\partial a_j^*} f_B(a^*) \\
&\quad = -\int \frac{\mathrm{d}^s q \mathrm{d}^s p}{(2\pi\hbar)^s} \frac{\partial W(a^*, a)}{\partial a_j^*} (f_A(a^*))^* f_B(a^*) \\
&\qquad + \int \frac{\mathrm{d}^s q \mathrm{d}^s p}{(2\pi\hbar)^s} \frac{\partial}{\partial a_j^*} \{W(a^*, a)(f_A(a^*))^* f_B(a^*)\}\,,
\end{aligned}$$

其中的最末项应该像通常的内积中的积分一样等于零. 因此

$$\begin{aligned}
&\int \frac{\mathrm{d}^s q \mathrm{d}^s p}{(2\pi\hbar)^s} W(a^*, a)(f_A(a^*))^* \\
&\qquad \times \left\{ a_j + \frac{1}{W(a^*, a)} \frac{\partial W(a^*, a)}{\partial a_j^*} \right\} f_B(a^*) = 0\,.
\end{aligned}$$

这要求

$$\frac{\partial}{\partial a_j^*}W(a^*,a)=-a_jW(a^*,a)\,,$$

其解为

$$W(a^*,a)\propto\exp\left\{-\sum_j a_j^*a_j\right\}.$$

比例因子是正常数，可归并到波函数中，故可把 $W(a^*,a)$ 选为

$$W(a^*,a)=\exp\left\{-\sum_j a_j^*a_j\right\}. \tag{57}$$

这个权重函数确是保证了 a_j^* 与 $\partial/\partial a_j^*$ 是互为厄米共轭的算子.

在 a^* 表象下，$\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j$ 的微分算子是 $a_j^*\,\partial/\partial a_j^*$，$(a_j^*)^n$ 是它的本征函数. 限制 n 为非负整数，用 (57) 式中的权重函数直接计算可知，$\frac{1}{\sqrt{n!}}(a_j^*)^n$ 是归一的，因此 $\{\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j\}$ 在 a^* 表象的共同本征函数为

$$f_{n_1n_2\cdots n_s}(a^*)=\prod_{j=1}^{s}\frac{(a_j^*)^{n_j}}{\sqrt{n_j!}}\,. \tag{58}$$

它们满足如下的正交归一条件

$$(f_{n_1n_2\cdots n_s},f_{n_1'n_2'\cdots n_s'})=\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}\cdots\delta_{n_sn_s'}\,. \tag{59}$$

另一方面，已经知道，$\{\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j\}$ 在态矢量空间的共同本征矢量是

$$|\Psi_{n_1n_2\cdots n_s}\rangle=f_{n_1n_2\cdots n_s}(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\,. \tag{60}$$

它们的内积是

$$(\Psi_{n_1n_2\cdots n_s},\Psi_{n_1'n_2'\cdots n_s'})=\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}\cdots\delta_{n_sn_s'}\,.$$

因此，$f_{n_1n_2\cdots n_s}(a^*)$ 即是态矢量 $|\Psi_{n_1n_2\cdots n_s}\rangle$ 在 a^* 表象的波函数，我们把这种对应关系记为

$$f_{n_1n_2\cdots n_s}(a^*)\longleftrightarrow f_{n_1n_2\cdots n_s}(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\,. \tag{61}$$

由于 $f_{n_1n_2\cdots n_s}(\hat{a}^\dagger)|0\rangle$ 构成态矢量的完备组，故 $f_{n_1n_2\cdots n_s}(a^*)$ 构成 a^* 表象波函数的完备组，可见每个波函数 $f(a^*)$ 都是 $\{a_j^*\}$ 的解析函数，可表示为

$$f(a^*)=\sum_{n_1n_2\cdots n_s} f_{n_1n_2\cdots n_s}(a^*)(f_{n_1n_2\cdots n_s},f)\,. \tag{62}$$

因此，与 $f(a^*)$ 相应的态矢量是

$$|\Psi_f\rangle=\sum_{n_1n_2\cdots n_s} f_{n_1n_2\cdots n_s}(\hat{a}^\dagger)|0\rangle(f_{n_1n_2\cdots n_s},f)=f(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\,, \tag{63}$$

即

$$f(a^*)\longleftrightarrow f(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\,. \tag{64}$$

如果完成 (62) 式中的求和，则给出解析函数 f 的恒等式

$$f(a^*)=\int\frac{\mathrm{d}^sq\mathrm{d}^sp}{(2\pi\hbar)^s}\exp\left\{\sum_l(a_l^*-a_l'^*)a_l'\right\}f(a'^*)\,. \tag{65}$$

在确定了 (64) 式的对应关系之后，(55) 及 (56) 式变成如下的显然结果

$$\hat{a}_j^\dagger f(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\longleftrightarrow a_j^*f(a^*)\,, \tag{66}$$

$$\hat{a}_j f(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\longleftrightarrow\frac{\partial}{\partial\hat{a}_j^*}f(a^*)\,. \tag{67}$$

对于一般的算符 $Q(\hat{a}^\dagger,\hat{a})$，则有

$$Q(\hat{a}^\dagger,\hat{a})f(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\longleftrightarrow Q\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)f(a^*)\,, \tag{68}$$

其中 $Q(a^*,\partial/\partial a^*)$ 是在 $Q(\hat{a}^\dagger,\hat{a})$ 中把各个 $\hat{a}_l^\dagger$ 及 $\hat{a}_j$ 换成 a_l^* 及 $\partial/\partial a_j^*$ 的结果，它就是 $Q(\hat{a}^\dagger,\hat{a})$ 在 a^* 表象的算子．改写 $Q(a^*,\partial/\partial a^*)$ 使

$$Q\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)=Q_R\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)\,.$$

而在 $Q_R(a^*,\partial/\partial a^*)$ 的每一项中，$\partial/\partial a_l^*$ 都处在 a_l^* 的右方，则作用于波函数 $\exp\{\sum_j a_j^* a_j'\}$ 时得到

$$Q\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)\exp\Big\{\sum_j a_j^* a_j'\Big\}$$

$$=Q_R(a^*,a')\exp\Big\{\sum_j a_j^* a_j'\Big\}=Q_K(a^*,a')\,, \tag{69}$$

其中 $Q_K(a^*,a')$ 及 $Q_R(a^*,a')$ 分别称为算子 $Q(a^*,\partial/\partial a^*)$ 或算符 $Q(\hat{a}^\dagger,\hat{a})$ 的核和正规核，它们也可以表示为

$$Q_K(a^*,a')=\langle 0|\exp\Big\{\sum_l a_l^*\hat{a}_l\Big\}Q(\hat{a}^\dagger,\hat{a})\exp\Big\{\sum_j a_j'\hat{a}_j^\dagger\Big\}|0\rangle, \tag{70}$$

$$Q_R(a^*,a')=\frac{Q_K(a^*,a')}{\langle 0|\exp\{\sum_l a_l^*\hat{a}_l\}\exp\{\sum_j a_j'\hat{a}_j^\dagger\}|0\rangle}\,. \tag{71}$$

对于一般的波函数 $f(a^*)$，由 (65), (69) 式有

$$Q\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)f(a^*)$$

$$=\int\frac{\mathrm{d}^s q'\mathrm{d}^s p'}{(2\pi\hbar)^s}\exp\Big\{\sum_l(a_l^*-a_l'^*)a_l'\Big\}Q_R(a^*,a')f(a'^*)\,, \tag{72}$$

或

$$Q\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)f(a^*)$$

$$=\int\frac{\mathrm{d}^s q'\mathrm{d}^s p'}{(2\pi\hbar)^s}\exp\Big\{-\sum_l a_l'^* a_l'\Big\}Q_K(a^*,a')f(a'^*)\,. \tag{73}$$

(69) 式也表明，算子 Q^A,Q^B 的积 Q^AQ^B 的核 $(Q^AQ^B)_K(a^*,a')$ 等于 $Q^A(a^*,\partial/\partial a^*)$ 作用于 $Q_K^B(a^*,a')$ 的结果，故根据 (73) 式得

$$(Q^AQ^B)_K(a^*,a')$$

$$=\int\frac{\mathrm{d}^s q''\mathrm{d}^s p''}{(2\pi\hbar)^s}\exp\Big\{-\sum_l a_l''^* a_l''\Big\}Q_K^A(a^*,a'')Q_K^B(a''^*,a')\,. \tag{74}$$

即是说，Q^AQ^B 的核是 Q^A 的核与 Q^B 的核的卷积.

设系统的哈密顿量算符是 $\mathcal{H}(\hat{a}^\dagger,\hat{a},t)$, 它的正规积表达式是 $\mathcal{H}_R(\hat{a}^\dagger,\hat{a},t)$, 即在 $\mathcal{H}_R(\hat{a}^\dagger,\hat{a},t)$ 的每一项， $\hat{a}_l^\dagger$ 都处在 $\hat{a}_l$ 的左方，而且

$$\mathcal{H}_R(\hat{a}^\dagger,\hat{a},t)=\mathcal{H}(\hat{a}^\dagger,\hat{a},t)\,.$$

当 $\varepsilon\approx 0$ 时，有

$$f(a^*,t+\varepsilon)-f(a^*,t)\approx\frac{\varepsilon}{\mathrm{i}\hbar}\mathcal{H}\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*},t\Big)f(a^*,t)$$

$$=\frac{\varepsilon}{\mathrm{i}\hbar}\int\frac{\mathrm{d}^sq'\mathrm{d}^sp'}{(2\pi\hbar)^s}\exp\Big\{\sum_l(a_l^*-a'^*_l)a'_l\Big\}\mathcal{H}_R(a^*,a',t)f(a'^*,t)\,,$$

即

$$f(a^*,t+\varepsilon)\approx\int\frac{\mathrm{d}^sq'\mathrm{d}^sp'}{(2\pi\hbar)^s}$$

$$\times\exp\Big\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\Big[-\mathrm{i}\hbar\sum_l\Big(\frac{a_l^*-a'^*_l}{\varepsilon}\Big)a'_l-\mathcal{H}_R(a^*,a',t)\Big]\Big\}f(a'^*,t)\,.\qquad(75)$$

这是与上节 (43) 式相似的公式. 如果 $\mathcal{H}_R(a^*,a,t)$ 正好是经典哈密顿量, 那么只要知道经典哈密顿量就可以借助这个公式描述波函数的时间演化; 如果不是这样而又不完全知道如何确定哈密顿量算符，也就不知道如何完全准确地应用这个公式.

以下令自由度数等于 1，以便简化记号. 这时 (75) 式给出

$$f(a^*,t+\varepsilon)$$

$$\approx\int\frac{\mathrm{d}q'\mathrm{d}p'}{2\pi\hbar}\exp\Big\{(a^*-a'^*)a'-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\mathcal{H}_R(a^*,a',t)\Big\}f(a'^*,t)\,.\quad(76)$$

因此波函数从 t_0 到 t_f 的演变由下式决定

$$f(a^*,t_f)=\lim_{\varepsilon\to 0}\int\frac{\mathrm{d}q_0\mathrm{d}p_0}{(2\pi\hbar)}\frac{\mathrm{d}q_1\mathrm{d}p_1}{(2\pi\hbar)}\cdots\frac{\mathrm{d}q_{N-1}\mathrm{d}p_{N-1}}{(2\pi\hbar)}f(a_0^*,t_0)$$

$$\times\exp\left\{\sum_{n=0}^{N-1}\left[(a_{n+1}^*-a_n^*)a_n-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\mathcal{H}_R(a_{n+1}^*,a_n,t_n)\right]\right\},\quad(77)$$

其中

$$\varepsilon=\frac{t_f-t_0}{N}\quad(N\to\infty),$$

$$t_n=t_0+n\varepsilon\quad(t_N=t_f).$$

(q_n,p_n) 是按照 (76) 式描述波函数从时刻 t_n 到 $t_n+\varepsilon$ 的演变时的积分变量，a_n,a_n^* 按下式决定

$$a_n=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta q_n+\frac{\mathrm{i}}{\beta\hbar}p_n\right),$$

$$a_n^*=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta q_n-\frac{\mathrm{i}}{\beta\hbar}p_n\right),$$

$$a_N^*=a^*.$$

设 $T(t,t_0)$ 是系统的时间演化算符，于是由 (73) 式有

$$f(a^*,t_f)=\int\frac{\mathrm{d}q_0\mathrm{d}p_0}{(2\pi\hbar)}\exp\{-a_0^*a_0\}T_K(a^*t_f,a_0t_0)f(a_0^*,t_0),\quad(78)$$

其中 $T_K(a^*t_f,a_0t_0)$ 即是 $T(t_f,t_0)$ 在 a^* 表象的核，根据 (70) 式可把它表示为

$$T_K(a^*t_f,a_0t_0)=\langle 0|\exp\{a^*\hat{a}\}T(t_f,t_0)\exp\{a_0\hat{a}^\dagger\}|0\rangle.\quad(79)$$

比较 (77) 与 (78) 式得到

$$T_K(a^*t_f,a_0t_0)=\lim_{\varepsilon\to 0}\int\frac{\mathrm{d}q_1\mathrm{d}p_1}{(2\pi\hbar)}\frac{\mathrm{d}q_2\mathrm{d}p_2}{(2\pi\hbar)}\cdots\frac{\mathrm{d}q_{N-1}\mathrm{d}p_{N-1}}{(2\pi\hbar)}$$

$$\times\exp\left\{\sum_{n=0}^{N-1}a_{n+1}^*a_n-\sum_{n=0}^{N-1}a_n^*a_n-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1}\mathcal{H}_R(a_{n+1}^*,a_n,t_N)\right\}.\quad(80)$$

又可写成

$$T_K(a^*t_f, a_0t_0) = \lim_{\varepsilon\to 0}\int \frac{\mathrm{d}q_1\mathrm{d}p_1}{(2\pi\hbar)}\cdots\frac{\mathrm{d}q_{N-1}\mathrm{d}p_{N-1}}{(2\pi\hbar)}$$
$$\times\exp\left\{\frac{1}{2}(a^*a + a_0^*a_0)\right\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}I'\right\}, \qquad (81)$$

其中

$$\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}I'\right\} = \exp\left\{\frac{1}{2}\sum_{n=0}^{N-1}[(a_n^* - a_{n-1}^*)a_{n-1} - a_n^*(a_n - a_{n-1})]\right\}$$
$$\times\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1}\mathcal{H}_R(a_{n+1}^*, a_n, t_n)\right\}. \qquad (82)$$

相应的路径积分公式为

$$T_K(a^*t_f, a_0t_0) = \int \mathcal{D}[a^*, a]\exp\left\{\frac{1}{2}(a^*a + a_0^*a_0)\right\}$$
$$\times\exp\left\{\frac{1}{\hbar}I'(t_ft_0, [a(t)])\right\}. \qquad (83)$$

这是对于满足条件 $a(t_0) = a_0, a^*(t_f) = a^*$ 的一切路径 $a(t)$ 的贡献求和，$\mathcal{D}[a^*, a]$ 是由

$$\prod_{n=1}^{N-1}\frac{\mathrm{d}q_n\mathrm{d}p_n}{2\pi\hbar}$$

形成的路径积分元．$I'(t_ft_0, [a(t)])$ 按下式决定

$$I'(t_ft_0, [a(t)])$$
$$= \int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t\left\{\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(a^*(t)a(t) - \dot{a}^*(t)a(t)) - \mathcal{H}_R(a^*(t), a(t), t)\right\}.$$

(83) 式即是 $T_K(a^*t_f, a_0t_0)$ 在 a^* 表象的路径积分公式，多自由度情形的公式可按照同样的方法求出.

下面讨论一些简单例子，并借此显示 a^* 表象的路径积分的某些特点. 首先计算一维简谐振子的 $T_K(a^*t_f, a_0t_0)$. 设哈密顿量算符为

$$H(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}\,,$$

其中

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{\mathrm{i}\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,, \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{\mathrm{i}\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,,$$

$H(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ 的正规核是 $H_R(a^*, a') = \hbar\omega a^*a'$. 故 $T_K(a^*t_f, a_0t_0)$ 的路径积分形式为

$$T_K(a^*t_f, a_0t_0) = \int \mathcal{D}[a^*, a]\exp\left\{\frac{1}{2}(a^*a + a_0^*a_0)\right\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}I'}{\hbar}\right\},$$

$$I'(t_ft_0, [a(t)]) = \int_{t_0}^{t_f}\left\{\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(a^*\dot{a} - \dot{a}^*a) - \hbar\omega a^*a\right\}\mathrm{d}t\,.$$

回到公式 (80) 可直接进行积分计算，因为 $\mathcal{H}_R(a^*, a')$ 是 a^*, a' 的二次式，每一次积分都是高斯积分，所以能够在 $\varepsilon \to 0$ 之前完成积分. 不过也可以作如下的简单运算求出最后结果. 由

$$T_K(a^*t_f, a_0t_0) = \langle 0|\exp\{a^*\hat{a}\}\exp\{-\mathrm{i}\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}(t_f - t_0)\}\exp\{a_0\hat{a}^\dagger\}|0\rangle\,,$$

以及

$$\begin{aligned}
&\exp\{-\mathrm{i}\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}(t_f - t_0)\}\exp\{a_0\hat{a}^\dagger\}|0\rangle \\
&\quad = \exp\{-\mathrm{i}\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}(t_f - t_0)\}\exp\{a_0\hat{a}^\dagger\}\exp\{\mathrm{i}\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}(t_f - t_0)\}|0\rangle \\
&\quad = \exp\{a_0A^\dagger\}|0\rangle\,,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A^\dagger &= \exp\{-\mathrm{i}\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}(t_f - t_0)\}\hat{a}^\dagger\exp\{\mathrm{i}\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}(t_f - t_0)\} \\
&= \exp\{-\mathrm{i}\omega(t_f - t_0)\}\hat{a}^\dagger\,,
\end{aligned}$$

得

$$T_K(a^*t_f, a_0t_0) = \exp\{a^*a_0\exp\{-\mathrm{i}\omega(t_f - t_0)\}\}\,. \tag{84}$$

如果要借助经典路径来计算，就要注意，一条经典路径 $a(t')$ 被运动方程及一个时刻的值完全决定 (因为运动方程是时间的一阶微分方程)，因此一般不能满足在初时刻和末时刻独立给定的两个端点条件. 如果分别地考虑端点条件而决定两条经典路径 $a(t')$ 及 $a'(t')$，设它们满足

$$a^*(t)|_{t'=t} = a^*\,, \quad a'(t')|_{t'=t_0} = a_0\,,$$

那么容易验证，借助这样的路径可把 $T_K(a^*t, a_0t_0)$ 表示为

$$T_K(a^*t, a_0t_0) = \exp\left\{\frac{a^*a'(t) + a^*(t_0)a_0}{2}\right\}$$
$$\times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'\left[\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(a^*\dot{a}' - \dot{a}^*a') - H_R(a^*, a', t')\right]\right\}. \quad (85)$$

由哈密顿量知道，$a(t')$ 及 $a'(t')$ 的时间因子都是 $\exp\{-\mathrm{i}\omega t'\}$, 因此

$$a(t') = a\exp\{-\mathrm{i}\omega(t'-t)\}\,,$$
$$a'(t') = a_0\exp\{-\mathrm{i}\omega(t'-t_0)\}\,,$$
$$a^*(t') = a^*\exp\{-\mathrm{i}\omega(t-t')\}\,,$$

以此代入 (85) 式，并把 t 换为 t_f, 即得出 (84) 式.

再考虑耦合振子的例子. 设哈密顿量算符为

$$H(\hat{a}^\dagger, \hat{a}, t) = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a} - F(t)\hat{a}^\dagger - F^*(t)\hat{a}\,, \quad (86)$$

故

$$H_R(a^*, a', t) = \hbar\omega a^*a' - F(t)a^* - F^*(t)a'\,, \quad (87)$$

$$T_K(a^*t, a_0t_0) = \int \mathcal{D}[a^*, a]\exp\left\{\frac{1}{2}(a^*a + a_0^*a_0)\right\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}I'}{\hbar}\right\}, \quad (88)$$

其中

$$I'(t, t_0[a(t')]) = \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'\left\{\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(a^*\dot{a} - \dot{a}^*a) - H_R(a^*, a, t')\right\}. \quad (89)$$

由于 $H_R(a^*,a',t)$ 仍然是 a^*,a' 的二次式，可以借助高斯积分计算 $T_K(a^*t,a_0t_0)$. 但这里将采用类似于 1.3 小节例题 3 的方法. 记住

$$T(t,t_0)=\exp\{-\mathrm{i}\omega t\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\}\,U(t,t_0)\exp\{\mathrm{i}\omega t_0\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\}\,,$$

$$U(t,t_0)=T\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\,V(t')\right\},$$

而

$$V(t')=\exp\{\mathrm{i}\omega t'\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\}\{-F(t')\hat{a}^\dagger-F^*(t')\hat{a}\}\exp\{-\mathrm{i}\omega t'\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\}$$

$$=-F(t')\exp\{\mathrm{i}\omega t'\}\hat{a}^\dagger-F^*(t')\exp\{-\mathrm{i}\omega t'\}\hat{a}\,. \tag{90}$$

暂且假定 $t_f>t_0$, 令 $\varepsilon=(t-t_0)/N\,(N\to\infty)$, 则

$$\begin{aligned}&U(t,t_0)\\&\approx\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t-\varepsilon)\right\}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t-2\varepsilon)\right\}\cdots\times\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(t_0)\right\}\\&\longrightarrow\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'V(t')\right\}\times\exp\left\{\frac{-1}{2\hbar^2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t''[V(t'),V(t'')]\right\}.\end{aligned} \tag{91}$$

由

$$\begin{aligned}&\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'V(t')\\&=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'F(t')\exp\{\mathrm{i}\omega t'\}\hat{a}^\dagger+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'F^*(t')\exp\{-\mathrm{i}\omega t'\}\hat{a}\,,\end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}[V(t'),V(t'')]=&-F(t')F^*(t'')\exp\{\mathrm{i}\omega(t'-t'')\}\\&+F^*(t')F(t'')\exp\{-\mathrm{i}\omega(t'-t'')\}\,,\end{aligned}$$

有

$$\exp\left\{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'V(t')\right\}$$

$$=\exp\left\{\frac{-1}{2\hbar^2}\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t'}\mathrm{d}t'\mathrm{d}t''F(t')F^*(t'')\exp\{-\mathrm{i}\omega(t'-t'')\}\right\}$$

$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'F(t')\exp\{\mathrm{i}\omega t'\}\hat{a}^\dagger\right\}$$

$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t''F^*(t'')\exp\{-\mathrm{i}\omega t''\}\hat{a}\right\},\tag{92}$$

$$U(t,t_0)=\exp\{f\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'F(t')\exp\{\mathrm{i}\omega t'\}\hat{a}^\dagger\right\}$$

$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t''F^*(t'')\exp\{-\mathrm{i}\omega t''\}\hat{a}\right\},\tag{93}$$

其中

$$f=-\frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t''\eta(t'-t'')F^*(t')F(t'')\exp\{-\mathrm{i}\omega(t'-t'')\}.$$

(93) 式给出了本例中相互作用绘景的时间演化算符 (以 V 为相互作用项) 的正规形式. 因此, 这个算符在 a^* 表象的正规核是

$$U_R(a^*t,a_0t_0)$$

$$=\exp\{f\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'F(t')\exp\{\mathrm{i}\omega t'\}a^*\right\}$$

$$+\exp\{f\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t''F^*(t'')\exp\{-\mathrm{i}\omega t''\}a_0\right\}.\tag{94}$$

将它乘以因子 $\exp(a^*a_0)$, 就得到 $U_K(a^*t, a_0t_0)$. 注意

$$\exp\{\mathrm{i}\omega t_0\hat{a}^\dagger\hat{a}\}\exp\{a_0\hat{a}^\dagger\}|0\rangle = \exp\{a_0\exp\{\mathrm{i}\omega t_0\}\hat{a}^\dagger\}|0\rangle\,, \tag{95}$$

$$\langle 0|\exp\{a^*\hat{a}\}\exp\{-\mathrm{i}\omega t\hat{a}^\dagger\hat{a}\} = \langle 0|\exp\{a^*\exp\{-\mathrm{i}\omega t\}\hat{a}\}\,, \tag{96}$$

可见, 只要在 $U_K(a^*t, a_0t_0)$ 中把 a_0 与 a^* 分别换为 $a_0\exp\{\mathrm{i}\omega t_0\}$ 与 $a^*\exp\{-\mathrm{i}\omega t\}$, 就得到 $T(t, t_0)$ 的核, 即

$$\begin{aligned} &T_K(a^*t, a_0t_0) \\ &\quad = \exp\{f + a^*a_0\exp\{-\mathrm{i}\omega(t-t_0)\}\} \\ &\qquad \times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'F(t')\exp\{-\mathrm{i}\omega(t-t')\}a^*\right\} \\ &\qquad \times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t''F^*(t'')\exp\{-\mathrm{i}\omega(t''-t_0)\}a_0\right\}. \end{aligned} \tag{97}$$

这个结果也可以借助两条经典路径由 (85) 式求出. 这时, 经典路径的方程式及边条件是

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar\dot{a}'(t') = \hbar\omega a'(t') - F(t')\,, \\ a'(t_0) = a_0\,; \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\mathrm{i}\hbar\dot{a}^*(t') = \hbar\omega a^*(t') - F^*(t')\,, \\ a^*(t) = a^*\,. \end{cases}$$

由此得出

$$\begin{aligned} a'(t') &= a_0\exp\{-\mathrm{i}\omega(t'-t_0)\} \\ &\quad + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t'}\mathrm{d}t''F(t'')\exp\{-\mathrm{i}\omega(t'-t'')\}\,, \end{aligned}$$

$$a^*(t') = a^* \exp\{-i\omega(t-t')\}$$
$$+ \frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t} dt'' F^*(t'') \exp\{-i\omega(t''-t')\}.$$

§4 在非相对论二次量子化理论中的玻色 Φ 场的路径积分

沿用第四章 §4 的记号，设 $\Phi_c(\xi,t)$ 是场函数，$\{\phi_j(\xi)\}$ 是一组正交归一和完备的单体波函数. 按下式定义变量 $\{a_j(t)\}$

$$\Phi_c(\xi,t) = \sum_j a_j(t)\psi_j(\xi), \tag{98}$$

则经典运动方程为

$$i\hbar \dot{a}_j = \frac{\partial \mathcal{H}_c(a^*,a)}{\partial a_j^*}, \tag{99}$$

其中

$$\mathcal{H}_c(a^*,a) = \int d\xi \Phi_c^*(\xi,t)(\hat{h})\Phi_c(\xi,t)$$
$$+\frac{1}{2}\int\int d\xi_1 d\xi_2 \Phi_c^*(\xi_1,t)\Phi_c^*(\xi_2,t)w(1,2)\Phi_c(\xi_2,t)\Phi_c(\xi_1,t).$$

$\hat{h}$ 是在通常的理论形式下的单体动能和势场的和，$w(1,2)$ 是两体作用势，微商记号的意义和以前一样.

上节建立 a^* 表象和路径积分的方法可以直接推广到现在的系统 (Φ 场). 波函数之间的内积定义如下

$$(f_A, f_B) = \int \prod_j \frac{dq_j dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\sum_l a_l^* a_l\right\} (f_A(a^*))^* f_B(a^*), \tag{100}$$

其中

$$q_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_j^* + a_j),$$

$$p_j = \frac{\mathrm{i}\hbar}{\sqrt{2}}(a_j^* - a_j).$$

设 $f_{n_1 n_2 \cdots}(a^*)$ 代表如下的多项式波函数 (n_j 是非负整数)

$$f_{n_1 n_2 \cdots}(a^*) = \prod_j \frac{1}{\sqrt{n_j!}}(a_j^*)^{n_j}\,, \tag{101}$$

则

$$(f_{n_1 n_2 \cdots}, f_{n_1' n_2' \cdots}) = \delta_{n_1 n_1'}\delta_{n_2 n_2'} \cdots .$$

这种波函数与由 $\{\hat{a}_j^\dagger\}$ 表达的态矢量之间的对应关系如下

$$f_{n_1 n_2 \cdots}(a^*) \longleftrightarrow f_{n_1 n_2 \cdots}(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\,,$$

其中 $\hat{a}_l^\dagger$ 是 a_l^* 的算符，$|0\rangle$ 满足

$$\hat{a}_l|0\rangle = 0\,, \quad \langle 0|0\rangle = 1\,.$$

一般的波函数 $f(a^*)$ 可以表示为多项式波函数的叠加，并对应于如下的态矢量：

$$|\Psi\rangle = f(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\,. \tag{102}$$

由于 $f(a^*)$ 是解析函数，§3 的恒等式 (65) 可推广为

$$f(a^*) = \int \prod_j \frac{\mathrm{d}q_j' \mathrm{d}p_j'}{2\pi\hbar} \exp\left\{ \sum_l (a_l^* - a_l'^*)a_l' \right\} f(a'^*)\,. \tag{103}$$

算符 $Q(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ 在 a^* 表象的算子是 $Q(a^*, \partial/\partial a^*)$，它是在 $Q(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ 中把 $\hat{a}_l^\dagger, \hat{a}_j$ 分别换成 a_l^* 及 $\partial/\partial a_j^*$ 的结果．§3 中的其他定义和公式也可以相应地转移过来.

值得注意的是，如第四章 §4 指出的，Φ 场的量子化有一个很特别的规则：在经典哈密顿量 $\mathcal{H}_c(a^*,a)$ 的各项中，把 a_j^* 排在 a_j 的左边，再把 a_j^*, a_l 分别换成算符 $\hat{a}_j^\dagger$ 及 $\hat{a}_l$，就得到正确的哈密顿量算符. 因此，用现在的术语来说，$\mathcal{H}_c(a^*,a')$ 是哈密顿量算符在 a^* 表象的正规核. 既然如此，只要 知道 $\mathcal{H}_c(a^*,a)$, 就可以按照如下的公式描述波函数随时间的演变

$$f(a^*,t+\epsilon)\approx\int\prod_j\frac{\mathrm{d}q_j'\mathrm{d}p_j'}{2\pi\hbar}$$

$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}\left[-\mathrm{i}\hbar\sum_l\frac{(a_l^*-a_l'^*)a_l'}{\epsilon}-\mathcal{H}_c(a^*,a')\right]\right\}f(a'^*,t)\,. \quad (104)$$

由此构成时间演化算符 $T(t_f,t_0)$ 的核的路径积分公式，得到

$$T_K(a^*t_f,a_0t_0)$$

$$=\int\mathcal{D}[a^*,a]\exp\left\{\frac{1}{2}\sum_j(a_j^*a_j+a_{(0)j}^*a_{(0)j}\right\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}I'\right\}, \quad (105)$$

$$I'(t_ft_0,[a(t)])$$

$$=\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t\left\{\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\sum_j(a_j^*(t)\dot{a}_j(t)-\dot{a}_j^*(t)a_j(t))-\mathcal{H}_c(a^*(t),a(t))\right\}.$$

在 (105) 式中，$a_{(0)j}$ 及 a_j 是给定的量，路径 $a(t)$ 要满足条件 $a_j(t_0)=a_{(0)j}$ 及 $a_j(t_f)=a_j$, $\mathcal{D}[a^*,a]$ 是由 $\prod_{n=1}^{N-1}\left(\prod_j\frac{\mathrm{d}q_j\mathrm{d}p_j}{2\pi}\right)_n$ 形成的路径积分元.

§5 对 C 数费米变量的积分

所谓 C 数 (C–number) 是相对于量子力学算符 (Q–number) 而言的，包括玻色型和费米型两类. 玻色型 C 数是通常的数. 但费米型 C 数是 Grassmann 代数的生成元，是互相反对易的. 正则量

子化方法中的玻色场和费米场在量子化之前分别是 C 数玻色场和 C 数费米场. 以前用过的源 $J^\nu(x)$ 是玻色 C 数, 而 $\overline{\eta}(x), \eta(x)$ 则是费米 C 数. 在路径积分方法中使用 C 数场函数作为积分变量 (x 是区别变量的指标).

为了方便,这里借助有限维 Grassmann 代数的情形说明对费米变量积分的概念和运算规则. 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 是一个 Grassmann 代数的全体生成元 (代数的维数是 2^n), 满足

$$X_j X_l + X_l X_j = 0\,, \tag{106}$$

算子 $\frac{\partial}{\partial X_1}, \frac{\partial}{\partial X_2}, \cdots, \frac{\partial}{\partial X_n}$ 也是互相反对易的:

$$\frac{\partial}{\partial X_j}\frac{\partial}{\partial X_l} + \frac{\partial}{\partial X_l}\frac{\partial}{\partial X_j} = 0\,. \tag{107}$$

微商规则当然要与反对易规则相一致, 例如

$$\left(\frac{\partial}{\partial X_1} X_1 X_2\right) = X_2\,,$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial X_1} X_2 X_1\right) = -\left(\frac{\partial}{\partial X_1} X_1 X_2\right) = -X_2\,.$$

这里用括号强调 $\frac{\partial}{\partial X_1}$ 只对括号内的量施行作用.

关于积分运算, 规定了如下的规则:

$$\int \mathrm{d}X_j\{1\} = 0\,, \tag{108}$$

$$\int \mathrm{d}X_j\{X_j\} = 1\,, \tag{109}$$

积分元是互相反对易的, $\mathrm{d}X_j$ 与 X_l 也互相反对易. 还承认积分线性依赖于被积函数, (108) 式表示以 1 为被积函数对 $\mathrm{d}X_j$ 积分的结果等于 0. (109) 式表示以 X_j 为被积函数对 $\mathrm{d}X_j$ 积分的结果等于 1. 任何函数 $F(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 含 X_j 的幂次都不超过 1, 所以根据这组规则能够计算任意的积分. 这组规则又可以叙述如

下：任意函数 $F(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 对 $\mathrm{d}X_j$ 积分的结果等于对 X_j 求微商，即

$$\int \mathrm{d}X_j\{F(X_1, X_2, \cdots, X_n)\} = \frac{\partial}{\partial X_j} F(X_1, X_2, \cdots, X_n).$$

应当注意，当变量经受变换时，新的变量也遵从同样的积分规则．这意味着积分元的变换规则与通常 (玻色变量) 情形完全不同．例如，对于新变量

$$Y_l = \sum_{l'} A_{ll'} X_{l'} \quad (A_{ll'}\text{是通常的常数}),$$

由

$$\int \mathrm{d}Y_j\{Y_{j'}\} = \delta_{jj'},$$

有

$$\int \mathrm{d}Y_j\{F(X_1(y), X_2(y), \cdots, X_n(y)\}$$

$$= \frac{\partial}{\partial Y_j} F(X(Y)) = \sum_l \frac{\partial X_l}{\partial Y_j} \frac{\partial}{\partial X_l} F(X) = \sum_l \frac{\partial X_l}{\partial Y_j} \int \mathrm{d}X_l F(X).$$

这表明积分元的变换规则是

$$\mathrm{d}Y_j = \sum_l \frac{\partial X_l}{\partial Y_j} \mathrm{d}X_l. \tag{110}$$

利用

$$X_l = \sum_j (A^{-1})_{lj} Y_j,$$

得

$$\mathrm{d}Y_j = \sum_l (A^{-1})_{lj} \mathrm{d}X_l = \sum_l (\tilde{A}^{-1})_{jl} \mathrm{d}X_l, \tag{111}$$

其中 $\widetilde{A}$ 代表矩阵 A 的转置. 由此又知道，总的积分体元的变换式为

$$\mathrm{d}Y_1\mathrm{d}Y_2\cdots\mathrm{d}Y_n=\frac{1}{\det(A)}\mathrm{d}X_1\mathrm{d}X_2\cdots\mathrm{d}X_n\,. \tag{112}$$

即是说，积分体元的雅可比式 (Jacobian) 正好是玻色变量情形的倒数.

下面做两个例题.

例题 1　设 n 是偶数 $2m$, 用 X'_m 代表 X_{m+l}, 于是 $X_1,\cdots,X_n$ 写作

$$X_1,X_2,\cdots,X_m,X'_1,X'_2,\cdots,X'_m\,.$$

我们来计算

$$\begin{aligned}I(B)&=\int\cdots\int\prod_{l=1}^{m}(\mathrm{d}X'_l\mathrm{d}X_l)\mathrm{e}^{-\sum\limits_{j'j}X'_{j'}B_{j'j}X_j}\\&=\int\cdots\int\prod_{l=1}^{m}(\mathrm{d}X_{l'}\mathrm{d}X_l)\mathrm{e}^{-\widetilde{X'}BX}\,,\end{aligned}$$

其中 B 是非奇异矩阵. 将 B 写成积 $C'\Lambda C$, 其中 C', Λ 及 C 都是非异矩阵，而 Λ 是对角矩阵，于是

$$\widetilde{X'}BX=\widetilde{X'}C'\Lambda CX=\widetilde{Y'}\Lambda Y\,,$$

其中

$$Y=CX\quad,\quad\widetilde{Y'}=\widetilde{X'}C'\,,$$

即

$$Y_l=\sum_j C_{lj}X_j\quad,\quad Y'_l=\sum_{j'}C'_{lj'}X'_{j'}\,.$$

故

$$\prod_{l=1}^{m}\mathrm{d}X_l'\mathrm{d}X_l=\mathrm{d}X_1'\cdots\mathrm{d}X_n'\mathrm{d}X_n\mathrm{d}X_1=\det(C'C)\prod_{l=1}^{m}\mathrm{d}Y_l'\mathrm{d}Y_l\,,$$

$$I(B)=\det(C'C)\int\cdots\int\prod_{l=1}^{m}\mathrm{d}Y_l'\mathrm{d}Y_l\exp\Big\{-\sum_j Y_j'\Lambda_jY_j\Big\}$$

$$=\det(C'C)\prod_{l=1}^{m}\int\int\mathrm{d}Y_l'\mathrm{d}Y_l\mathrm{e}^{Y_l\Lambda_lY_l'}$$

$$=\det(C'C)\prod_{l=1}^{m}\int\int\mathrm{d}Y_l'\mathrm{d}Y_l\{Y_l\Lambda_lY_l'\}$$

$$=\det(C'C)\det\Lambda=\det(B)\,.$$

例题 2　求

$$I(M,\eta',\eta)=\int\cdots\int\prod_{l=1}^{m}(\mathrm{d}X_l'\mathrm{d}X_l)\mathrm{e}^{\mathrm{i}X'MX}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\widetilde{\eta}'X+\widetilde{X}'\eta]}\,,$$

其中 M 是非异矩阵，$(\eta_1,\eta_2,\cdots,\eta_m)$ 及 $(\eta_1',\eta_2',\cdots,\eta_m')$ 是费米 C 数. 令

$$X=Y-M^{-1}\eta,\quad X'=Y'-(\widetilde{M})^{-1}\eta'\,,$$

于是

$$\widetilde{X}'MX=\widetilde{Y}'MY+\widetilde{\eta}'M^{-1}\eta-\widetilde{Y}'\eta-\widetilde{\eta}'Y\,,$$

$$\widetilde{\eta}'X+\widetilde{X}'\eta=\widetilde{\eta}'Y+\widetilde{Y}'\eta-2\widetilde{\eta}'M^{-1}\eta\,,$$

故

$$I(M,\eta',\eta)=\int\cdots\int\prod_{l=1}^{m}(\mathrm{d}X_l'\mathrm{d}X_l)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\widetilde{Y}'MY}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widetilde{\eta}'M^{-1}\eta}$$

$$=\int\cdots\int\prod_{l}(\mathrm{d}Y_l'\mathrm{d}Y_l)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\widetilde{Y}'MY}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widetilde{\eta}'M^{-1}\eta}$$

$$=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\widetilde{\eta}'M^{-1}\eta}I(M,0,0)\,.$$

§6 相同费米子系统的 b^* 表象

对于由相同费米子组成的系统，可以建立一种特别的表象，使得系统的波函数可以表示为 C 数费米变量的多项式．在用这种波函数经过积分来构造内积时，会自然地引出对费米变量积分的规则．现在对此作一说明．

为了方便，设分立的单粒子态 $\{\psi_j\}$ 构成单体正交归一的完备组，$\hat{b}_j^\dagger$ 是产生一个处在状态 ψ_j 的粒子的产生算符，$\hat{b}_j$ 为相应的消灭算符，$|0\rangle$ 为没有粒子的态，它们满足：

$$\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_l^\dagger + \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_j^\dagger = \hat{b}_l \hat{b}_j + \hat{b}_j \hat{b}_l = 0\,, \tag{113}$$

$$\hat{b}_j \hat{b}_l^\dagger + \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_j = \delta_{jl}\,, \tag{114}$$

$$\hat{b}_l |0\rangle = 0\,, \tag{115}$$

$$\langle 0|0\rangle = 1\,. \tag{116}$$

系统的任意状态可以表示为 $f(\hat{b}^\dagger)|0\rangle$，其中 $f(\hat{b}^\dagger)$ 是 $\hat{b}_1^\dagger, \hat{b}_2^\dagger, \cdots$ 的各种积或者这种积的线性组合，$f \equiv 1$ 的情形也包括在内．

所谓 $\hat{b}^*$ 表象，是使态矢量 $f(\hat{b}^\dagger)|0\rangle$ 在此表象的波函数是

$$\Psi_f(b_1^*, b_2^*, \cdots) = \langle 0|\mathrm{e}^{\sum_j b_j^* \hat{b}_j} f(\hat{b}^\dagger)|0\rangle\,. \tag{117}$$

变量 $b_1^*, b_2^*, b_3^*, \cdots$ 以及它们的共轭 $b_1, b_2, b_3, \cdots$ 是 C 数费米变量，满足

$$b_j^* b_l^* + b_l^* b_j^* = b_l b_j + b_j b_l = 0\,,$$

$$b_j b_l^* + b_l^* b_j = 0\,,$$

$$(b_j b_l^*)^* = b_l b_j^*\,,$$

$$(b_j b_j)^* = b_l^* b_j^* ,$$

$$b_j \widehat{b}_l + \widehat{b}_l b_j = b_j \widehat{b}_l^\dagger + \widehat{b}_l^\dagger b_j = 0 ,$$

$$(b_j \widehat{b}_l)^\dagger = \widehat{b}_l^\dagger b_j^* ,$$

$$(b_j^* \widehat{b}_l)^\dagger = \widehat{b}_l^\dagger b_j .$$

根据以上规则直接计算可得

$$\Psi_f(b_1^*, b_2^*, \cdots) = f(\widehat{b}^\dagger)|_{\widehat{b}_l^\dagger \to b_l^*} = f(b^*) . \tag{118}$$

即是说，将 $f(\widehat{b}^\dagger)$ 中的每个算符 $\widehat{b}_l^\dagger$ 都换成 C 数 b_l^* 就得出 $f(\widehat{b}^\dagger)|0\rangle$ 在 b^* 表象的波函数. 由这样的对应关系知道，状态 $\widehat{b}_l^\dagger f(\widehat{b}^\dagger)|0\rangle$ 和 $\widehat{b}_j f(\widehat{b}^\dagger)|0\rangle$ 的波函数分别是 $b_l^* \Psi_f(b^*)$ 和 $\frac{\partial}{\partial b_j^*}\Psi_f(b^*)$. 或者说，在 b^* 表象，算符 $\widehat{b}_l^\dagger$ 及 $\widehat{b}_j$ 分别由 b_l^* 及 $\frac{\partial}{\partial b_j^*}$ 代表，$\widehat{b}_l$ 与 $\widehat{b}_j$ 之间以及 $\widehat{b}_l^\dagger$ 与 $\widehat{b}_j$ 之间的反对易关系则被表示为

$$\frac{\partial}{\partial b_l^*}\frac{\partial}{\partial b_j^*} + \frac{\partial}{\partial b_j^*}\frac{\partial}{\partial b_l^*} = 0 ,$$

$$b_l^* \frac{\partial}{\partial b_j^*} + \frac{\partial}{\partial b_j^*} b_l^* = \delta_{lj} .$$

现在要将 $f_A(\widehat{b}^\dagger)|0\rangle$ 与 $f_B(\widehat{b}^\dagger)|0\rangle$ 的内积表示为 $(f_A(b^*))^* f_B(b^*)$ 对于 $(b_1^*, b_2^*, \cdots, b_1, \cdots)$ 的积分：

$$\langle 0| f_A(\widehat{b}^\dagger)^\dagger f_B(\widehat{b}^\dagger)|0\rangle$$

$$= \int \prod_j (\mathrm{d}b_j^* \mathrm{d}b_j) W(b^*, b)(f_A(b^*))^* f_B(b^*) , \tag{119}$$

其中 $W(b^*, b)$ 是待定的权重函数，它应当是玻色型的量并满足

$$(W(b^*, b))^* = W(b^*, b) ,$$

$$f(b^*)\neq 0 \longrightarrow \int \prod_j (\mathrm{d}b_j^* \mathrm{d}b_j)(f(b^*))^* W(b^*, b) f(b^*) > 0 .$$

由

$$\langle 0|\hat{b}_l^\dagger f_A(\hat{b}^\dagger)^\dagger f_B(\hat{b}^\dagger)|0\rangle = \langle 0| f_A(\hat{b}^\dagger)^\dagger \hat{b}_l f_B(\hat{b}^\dagger)|0\rangle ,$$

有

$$\int \prod_j (\mathrm{d}b_j^* \mathrm{d}b_j) W(b^*, b)(b_l^* f_A(b^*))^* f_B(b^*)$$

$$= \int \prod_j (\mathrm{d}b_j^* \mathrm{d}b_j) W(b^*, b)(f_A(b^*))^* \frac{\partial}{\partial b_l^*} f_B(b^*) .$$

此式等号右边应当像通常内积中的积分一样可以写为 (看作对权重函数的要求)

$$-\int \prod_j (\mathrm{d}b_j^* \mathrm{d}b_j)\left\{\frac{\partial}{\partial b_l^*} W(b^*, b)(f_A(-b^*))^*\right\} f_B(b^*) ,$$

其中 $(f_A(b^*))^*$ 中的 b^* 被换成 $-b^*$, 是因为 $\frac{\partial}{\partial b_l^*}$ 与所有 b_j 都反对易. 注意

$$\frac{\partial b_j}{\partial b_l^*} = 0 ,$$

有

$$\frac{\partial}{\partial b_l^*}\{W(b^*, b)(f_A(-b^*))^*\} = (f_A(b^*))^*\left\{\frac{\partial}{\partial b_l^*} W(b^*, b)\right\} ,$$

这样就得到

$$\int \prod_j (\mathrm{d}b_j^* \mathrm{d}b_j)(f(b^*))^*\left\{b_l W(b^*, b) + \frac{\partial}{\partial b_l^*} W(b^*, b)\right\} f(b^*) = 0 .$$

这对于任意的状态 $f_A(\hat{b}^\dagger)|0\rangle$ 和 $f_B(\hat{b}^\dagger)|0\rangle$ 都成立, 故有

$$\frac{\partial}{\partial b_l^*} W(b^*, b) = -b_l W(b^*, b) , \tag{120}$$

由此求得

$$W(b^*,b)=\mathrm{e}^{\sum_l b_l b_l^*}=\mathrm{e}^{-\sum_l b_l^* b_l}\,. \tag{121}$$

还可以乘上一个正常数因子，但这种因子可以吸收到积分体元中．这样，内积公式就变为

$$\langle 0|f_A(\widehat{b}^\dagger)^\dagger f_B(\widehat{b}^\dagger)|0\rangle=\int\prod_j(\mathrm{d}b_j^*\mathrm{d}b_j)(f_A(b^*))^*\mathrm{e}^{\sum_l b_l b_l^*}f_B(b^*)\,, \tag{122}$$

这当然是依靠适当的积分运算来维持的．由

$$\widehat{b}_1^\dagger\widehat{b}_2^\dagger\cdots\widehat{b}_m^\dagger|0\rangle$$

等的正交归一性有

$$\int\prod_j(\mathrm{d}b_j^*\mathrm{d}b_j)\left\{\mathrm{e}^{\sum_l b_l b_l^*}\right\}=1\,,$$

$$\int\prod_j(\mathrm{d}b_j^*\mathrm{d}b_j)\left\{b_m b_{m-1}\cdots b_1 b_1^*\cdots b_{m'}^*\mathrm{e}^{\sum_l b_l b_l^*}\right\}=\delta_{mm'}\,,$$

其中包含着

$$\int\int\mathrm{d}b_j^*\mathrm{d}b_j\left\{\mathrm{e}^{b_j b_j^*}\right\}=1\,,$$

$$\int\prod_j\left(\mathrm{d}b_j^*\mathrm{d}b_j\mathrm{e}^{b_j b_j^*}\right)b_l b_l^*=1\,,$$

$$\int\prod_j\left(\mathrm{d}b_j^*\mathrm{d}b_j\mathrm{e}^{b_j b_j^*}\right)b_l=0\,,$$

$$\int\prod_j\left(\mathrm{d}b_j^*\mathrm{d}b_j\mathrm{e}^{b_j b_j^*}\right)b_l^*=0\,.$$

注意

$$\mathrm{e}^{b_j b_j^*}=1+b_j b_j^*\,,$$

即可看出这些要求自然地引导到前节所说的规则：

$$\int \mathrm{d}b_j^*\{1\} = \int \mathrm{d}b_j\{1\} = 0\,, \tag{123}$$

$$\int \mathrm{d}b_j^*\{b_j^*\} = \int \mathrm{d}b_j\{b_j\} = 1\,. \tag{124}$$

§7 在非相对论二次量子化理论中的费米 Φ 场的路径积分

仍然采用第四章的记号，由“经典”场函数 $\Phi_c(\xi,t)$ 定义如下的 $a_j(t)$，

$$\Phi_c(\xi,t) = \sum_j a_j(t)\psi_j(\xi)\,, \tag{125}$$

则“经典”运动方程的形式仍可写成与玻色情形相似的形式，即

$$\mathrm{i}\hbar\dot{a}_j = \frac{\partial \mathcal{H}_c(a^*,a)}{\partial a_j^*}\,, \tag{126}$$

其中

$$\mathcal{H}_c(a^*,a) = \int \mathrm{d}\xi \Phi_c^*(\xi,t)(\widehat{h})\Phi_c(\xi,t) + \frac{1}{2}\int\int \mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2 \Phi_c^*(\xi_1,t)\Phi_c^*(\xi_2,t)w(1,2)\Phi_c(\xi_2,t)\Phi_c(\xi_1,t)\,.$$

a_j^*, a_l 是互相反对易的量，关于这种量的微商的含义也在以前说明了，即是使 $F(a^*,a)$ 的一级改变量可表示为

$$\delta F(a^*,a) = \sum_j \delta a_j^* \frac{\partial F}{\partial a_j^*} + \sum_j \delta a_j \frac{\partial F}{\partial a_j}\,, \tag{127}$$

其中 $\delta a_j, \delta a_j^*$ 之间，以及它们与 a_l, a_j^* 之间都是互相反对易的．由此可得出如下的规则：

$$\frac{\partial}{\partial a_j^*}\frac{\partial}{\partial a_l^*} + \frac{\partial}{\partial a_l^*}\frac{\partial}{\partial a_j^*} = 0\,,$$

$$\frac{\partial}{\partial a_j^*}a_l^* + a_l^*\frac{\partial}{\partial a_j^*} = \delta_{lj}\,.$$

还要注意，对 a_l^*, a_j 的函数的积取复共轭时，有

$$(FG)^* = G^*F^*\,.$$

为了建立 a^* 表象的路径积分，可借助对于费米变量的积分运算将波函数之间的内积表示为

$$(f_A, f_B) = \int \prod_j (\mathrm{d}a_j^* \mathrm{d}a_j) \exp\left\{ -\sum_l a_l^* a_l \right\} (f_A(a^*))^* f_B(a^*)\,, \quad (128)$$

或

$$(f_A, f_B) = \int \prod_j (\mathrm{d}a_j^* \mathrm{d}a_j') \exp\left\{ -\sum_l a_l^* a_l' \right\} (f_A(a'^*))^* f_B(a^*)\,. \quad (129)$$

波函数 $f_{n_1 n_2 \cdots}(a^*) = \prod_j (a^*)^{n_j}$ 是归一的，它们是 $\{a_j^* \frac{\partial}{\partial a_j^*}\}$ 的共同本征函数，并对应于如下的态矢量：

$$|\Psi_{n_1 n_2 \cdots}\rangle = f_{n_1 n_2 \cdots}(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\,. \quad (130)$$

一般的波函数 $f(a^*)$ 可表示为 $f_{n_1 n_2 \cdots}(a^*)$ 的叠加，故

$$f(a^*) = \sum_{n_1 n_2 \cdots} f_{n_1 n_2 \cdots}(a^*)(f_{n_1 n_2 \cdots}, f)\,. \quad (131)$$

因此，对应于 $f(a^*)$ 的态矢量是

$$|\Psi_f\rangle = \sum_{n_1 n_2 \cdots} f_{n_1 n_2 \cdots}(\hat{a}^\dagger)|0\rangle (f_{n_1 n_2 \cdots}, f) = f(\hat{a}^\dagger)|0\rangle\,. \quad (132)$$

完成 (131) 式中的求和，又可得到

$$f(a^*) = \int \prod_j (\mathrm{d}a'^*_j \mathrm{d}a'_j) \exp\left\{ \sum_l (a_l^* - a'^*_l) a'_l \right\} f(a'^*)\,. \quad (133)$$

§3 及 §4 的其他公式和定义也可转移过来，由于现在的积分的特殊含义，需要略加重述. 算符 $Q(\hat{a}^\dagger,\hat{a})$ 在 a^* 表象的算子是 $Q(a^*,\partial/\partial a^*)$，它是在 $Q(\hat{a}^\dagger,\hat{a})$ 中把各个 $\hat{a}_l^\dagger$ 及 $\hat{a}_j$ 换成 a_l^* 及 $\partial/\partial a_j^*$ 的结果. 如果改写 $Q(a^*,\partial/\partial a^*)$，使

$$Q\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)=Q_R\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big),$$

而在 $Q_R(a^*,\partial/\partial a^*)$ 的每一项中，$\partial/\partial a_l^*$ 都处在 a_l^* 的右方，则作用于波函数 $\exp\{\sum_j a_j^* a_j'\}$ 时得到

$$\begin{aligned}&Q\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)\exp\Big\{\sum_j a_j^* a_j'\Big\}\\&\quad=Q_R\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)\exp\Big\{\sum_j a_j^* a_j'\Big\}=Q_K(a^*,a'),\end{aligned}\tag{134}$$

其中 $Q_K(a^*,a')$ 及 $Q_R(a^*,a')$ 分别称为算子 $Q(a^*,\partial/\partial a^*)$ 或算符 $Q(\hat{a}^\dagger,\hat{a})$ 的核及正规核，它们可以表示为

$$Q_K(a^*,a')=\langle 0|\exp\Big\{\sum_l a_l^*\hat{a}_l\Big\}Q(\hat{a}^\dagger,\hat{a})\exp\Big\{\sum_j a_j'\hat{a}_j^\dagger\Big\}|0\rangle,\tag{135}$$

$$Q_R(a^*,a')=\frac{Q_K(a^*,a')}{\langle 0|\exp\{\sum_l a_l^*\hat{a}_l\}\exp\{\sum_j a_j'\hat{a}_j^\dagger\}|0\rangle}.\tag{136}$$

对于一般的波函数 $f(a^*)$, 由 (133) 及 (134) 式有

$$\begin{aligned}&Q\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)f(a^*)\\&\quad=\int\prod_j(\mathrm{d}a_j'^*\mathrm{d}a_j')\exp\Big\{\sum_l(a_l^*-a_l'^*)a_l'\Big\}Q_R(a^*,a')f(a'^*),\end{aligned}\tag{137}$$

或

$$\begin{aligned}&Q\Big(a^*,\frac{\partial}{\partial a^*}\Big)f(a^*)\\&\quad=\int\prod_j(\mathrm{d}a_j'^*\mathrm{d}a_j')\exp\Big\{\sum_l -a_l'^* a_l'\Big\}Q_K(a^*,a')f(a'^*).\end{aligned}\tag{138}$$

在第四章 §4 已经指出，费米 Φ 场的量子化也遵守一个特别的规则，用现在的术语来说就是：哈密顿量算符在 a^* 表象的正规核是 $\mathcal{H}_c(a^*,a')$，而 $\mathcal{H}_c(a^*,a)$ 是“经典”哈密顿量. 因此，波函数随时间的变化可用下式描述：

$$f(a^*,t+\epsilon)\approx\int\prod_j(\mathrm{d}a'^*_j\mathrm{d}a'_j)$$
$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}\left[-\mathrm{i}\hbar\sum_l\frac{(a^*_l-a'^*_l)a'_l}{\epsilon}-\mathcal{H}_c(a^*,a')\right]\right\}f(a'^*,t)\,. \quad (139)$$

设 $T(t,t_0)$ 是系统的时间演化算符，则波函数从时刻 t_0 到 t_f 的演变可以表示为

$$f(a^*,t_f)$$
$$=\int\prod_j(\mathrm{d}a'^*_j\mathrm{d}a'_j)\exp\left\{-\sum_l a'^*_l a'_l\right\}T_K(a^*t_f,a't_0)f(a'^*,t_0), \quad (140)$$

其中 $T_K(a^*t_f,a't_0)$ 是 $T(t_f,t_0)$ 在 a^* 表象的核，写成 (135) 式的形式，即是

$$T_K(a^*t_f,a't_0)$$
$$=\langle 0|\exp\left\{\sum_l a^*_l\hat{a}_l\right\}T(t_f,t_0)\exp\left\{\sum_j a'_j\hat{a}^\dagger_j\right\}|0\rangle\,. \quad (141)$$

根据 (140) 式构成 $T_K(a^*t_f,a't_0)$ 的路径积分，得到

$$T_K(a^*t_f,a_0t_0)$$
$$=\int\mathcal{D}[a^*,a]\exp\left\{\frac{1}{2}\sum_j(a^*_ja_j+a^*_{(0)j}a_{(0)j})\right\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}I'\right\}, \quad (142)$$

其中 $I'(t_ft_0,[a(t)])$ 代表

$$\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t\left\{\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\sum_j(a^*_j(t)\dot{a}_j(t)-\dot{a}^*_j(t)a_j(t))-\mathcal{H}_c(a^*(t),a(t))\right\}.$$

在 (142) 式中，$a_{(0)j}$ 及 a_j 是给定的量，路径 $a(t)$ 要满足条件 $a_j(t_0)=a_{(0)j}$ 及 $a_j(t_f)=a_j$, $\mathcal{D}[a^*,a]$ 是由 $\prod\limits_{n=1}^{N-1}\left(\prod\limits_j \mathrm{d}a_j^*\mathrm{d}a_j\right)_n$ 形成的路径积分元.

§8 自由电子场格林函数生成泛函的路径积分

前面说过，本书在本节及往后，一律采用 $c=\hbar=1$ 的单位制.

本节至第十节将讲述旋量电动力学格林函数生成泛函的路径积分，这里首先讨论自由电子场. 拉氏函数 (密度) 如下：

$$\mathcal{L}_e=\overline{\psi}(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi\,, \tag{143}$$

与 Dirac 场有关的记号也见第八章. 在正则量子化方法中，格林函数定义为海森伯场算符的时序积在真空态的平均值. 例如，传播函数为

$$\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)=\langle 0\,|T\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\beta(y)|\,0\rangle\,. \tag{144}$$

若 $y_0<x_0$, 则

$$\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)=\langle 0\,|\psi_\alpha(x)\exp\{-\mathrm{i}H_0(x_0-y_0)\}\overline{\psi}_\beta(y)|\,0\rangle\,, \tag{145}$$

即描述电子的自由演化，H_0 是场的哈密顿量算符. 若 $y_0>x_0$, 则

$$\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)=-\langle 0\,|\overline{\psi}_\beta(y)\exp\{-\mathrm{i}H_0(y_0-x_0)\}\psi_\alpha(x)|\,0\rangle\,, \tag{146}$$

即描述正电子的自由演化. 将由 $\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)$ 排成的矩阵 $\mathrm{i}S(x-y)$ 作四维傅氏展开有

$$\mathrm{i}S(x-y)=\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{i}S(p)\exp\{-\mathrm{i}p(x-y)\}\,, \tag{147}$$

其中的 $\mathrm{i}S(p)$ 称为动量表象的自由传播函数，其宗量 p 是四维傅氏展开中的积分变量，并不限制在质壳上，被理解为所谓虚粒子

的动量. 所以 $\mathrm{i}S(p)$ 描述动量为 p 的虚电子或虚正电子的传播. 利用 ψ 及 $\overline{\psi}$ 的算符表达式可求得

$$\mathrm{i}S(x-y)=\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{i}}{\gamma^\mu p_\mu-m+\mathrm{i}\epsilon}\exp\{-\mathrm{i}p(x-y)\}\,, \tag{148}$$

$$\mathrm{i}S(p)=\frac{\mathrm{i}}{\gamma^\mu p_\mu-m+\mathrm{i}\epsilon}\,. \tag{149}$$

$$(\epsilon=0^+)$$

格林函数生成泛函由下式定义:

$$\mathcal{Z}_e[\overline{\eta},\eta]=\langle 0\,|T\exp\left\{-\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x[\overline{\eta}(x)\psi(x)+\overline{\psi}(x)\eta(x)]\right\}|\,0\,\rangle\,, \tag{150}$$

其中 $\eta(x),\overline{\eta}(x)$ 是费米型源函数, 它们的值是四分量费米 C 数, 并且与场算符 $\psi,\overline{\psi}$ 也互相反对易. 根据

$$\left\{\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x)}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\beta(y)}\mathcal{Z}_e[\overline{\eta},\eta]\right\}_{\overline{\eta}=0,\eta=0}=\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)\,, \tag{151}$$

$$\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x)}\mathcal{Z}_e[\overline{\eta},\eta]=\int\mathrm{d}^4y\langle 0\,|T\psi_\alpha(x)\overline{\psi}(y)|\,0\,\rangle\mathrm{i}\eta(y)\mathcal{Z}_e[\overline{\eta},\eta]\,, \tag{152}$$

可解出

$$\mathcal{Z}_e[\overline{\eta},\eta]=\exp\left\{-\int\int\mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\overline{\eta}(x)\mathrm{i}S(x-y)\eta(y)\right\}. \tag{153}$$

现在来证明, 这个泛函可用虚时间的路径积分公式表示为

$$\mathcal{Z}_e[\overline{\eta},\eta]=\lim_{\alpha\to(0^++\mathrm{i})}\mathcal{Z}_e^{(\alpha)}[\overline{\eta},\eta]\,, \tag{154}$$

$$\mathcal{Z}_e^{(\alpha)}[\overline{\eta},\eta]=\frac{1}{N_e^{(\alpha)}}\int\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]\exp\{\alpha(I_e^{(\alpha)}+I_s^F)\}\,, \tag{155}$$

其中 $\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]$ 代表 $\mathcal{D}[\overline{\psi}]\mathcal{D}[\psi]$, I_s^F 是源项贡献的作用量

$$I_s^F=\int\mathrm{d}^4x[\overline{\eta}(x)\psi(x)+\overline{\psi}(x)\eta(x)]\,,$$

$I_e^{(\alpha)}$ 及 $N_e^{(\alpha)}$ 分别为

$$I_e^{(\alpha)} = \int \mathrm{d}^4 x \mathcal{L}_e(x,\alpha)\,,$$

$$N_e^{(\alpha)} = \int \mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]\exp\{\alpha I_e^{(\alpha)}\}\,.$$

$\mathcal{L}_e(x,\alpha)$ 由下式定义：

$$\mathcal{L}_e(\alpha,x) = \left\{\mathcal{L}_e(x)\right\}_{\psi\to\frac{\mathrm{i}}{\alpha}\psi} = \overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\widetilde{\partial}_\mu - m)\psi(x)\,,$$

记号 $\widetilde{\partial}_\mu$ 与 ∂_μ 的差别只在于 $\widetilde{\partial}_0$ 代表 $\frac{\mathrm{i}}{\alpha}\partial_0$. 上面的极限的意思是在 α 保持为正数时进行计算，然后延拓到 α 的右半平面，再令

$$\alpha \to 0^+ + \mathrm{i}\,.$$

由

$$I_e^{(\alpha)} = \int \mathrm{d}^4 x \int \mathrm{d}^4 y \overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\widetilde{\partial}_\mu - m)\delta^4(x-y)\psi(y)\,,$$

有

$$\begin{aligned}
&\mathcal{Z}_e^{(\alpha)}[\overline{\eta},\eta] \\
&\quad = \frac{1}{\int \mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]\exp\{\alpha\int\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\overline{\psi}(x)\mathcal{M}(x,y,\alpha)\psi(y)\}} \\
&\qquad \times \int \mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]\exp\left\{\alpha\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\overline{\psi}(x)\mathcal{M}(x,y,\alpha)\psi(y)\right. \\
&\qquad \left. + \alpha\int \mathrm{d}^4x[\overline{\eta}(x)\psi(x) + \overline{\psi}(x)\eta(x)]\right\}\,, \qquad (156)
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}(x,y,\alpha) &= (\mathrm{i}\gamma^\mu\widetilde{\partial}_\mu - m)\delta^4(x-y) \\
&= \left\{\int \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\exp\{-\mathrm{i}p(x-y)\}(\gamma^\mu p_\mu - m)\right\}_{p_0\to\frac{\mathrm{i}}{\alpha}p_0}\,.
\end{aligned}$$

作变量变换

$$\psi(x) \to \psi(x) - \int \mathcal{M}^{-1}(x, y, \alpha)\eta(y)\mathrm{d}^4 y\,,$$

$$\overline{\psi}(x) \to \overline{\psi}(x) - \int \mathrm{d}^4 y \overline{\eta}(y)\mathcal{M}^{-1}(y, x, \alpha)\,.$$

其中 $\mathcal{M}^{-1}(x, y, \alpha)$ 满足

$$\int \mathrm{d}^4 z \mathcal{M}(x, z, \alpha)\mathcal{M}^{-1}(z, y, \alpha) = \delta^4(x - y)\,,$$

即可求得

$$\mathcal{Z}_e^{(\alpha)}[\overline{\eta}, \eta] = \exp\left\{ -\alpha \int \mathrm{d}^4 x \mathrm{d}^4 y \overline{\eta}(x)\mathcal{M}^{-1}(x, y, \alpha)\eta(y) \right\}. \qquad (157)$$

作傅氏展开

$$\mathcal{M}^{-1}(x, y, \alpha) = \int \frac{\mathrm{d}^4 p}{(2\pi)^4} \exp\{-\mathrm{i}p(x - y)\}\mathcal{M}^{-1}(p, \alpha)\,,$$

则 $\mathcal{M}^{-1}(p, \alpha)$ 满足

$$(\gamma^\mu \widetilde{p}_\mu - m)\mathcal{M}^{-1}(p, \alpha) = 1\,.$$

故

$$\mathcal{M}^{-1}(p, \alpha) = \frac{1}{\gamma^\mu \widetilde{p}_\mu - m}\,,$$

其中 $\widetilde{p}_\mu$ 与 p_μ 的差别只在于 $\widetilde{p}_0$ 等于 $\frac{\mathrm{i}}{\alpha}p_0$, 因此

$$\mathcal{M}^{-1}(p, \alpha) = \frac{1}{\gamma^0 p_0 \frac{\mathrm{i}}{\alpha} + \gamma^l p_l - m} = \frac{-\mathrm{i}\alpha}{\gamma^0 p_0 - \mathrm{i}\alpha\gamma^l p_l + \mathrm{i}\alpha m}\,.$$

当 $\alpha \to 0^+ + \mathrm{i}$ 时，奇异性由分母中的 $\mathrm{i}0^+$ 控制，故

$$\lim \mathcal{M}^{-1}(p, \alpha) = \frac{1}{\gamma^\mu \widetilde{p}_\mu - m + \mathrm{i}0^+} = S(p)\,,$$

$$\lim \mathcal{M}^{-1}(x, y, \alpha) = S(x - y)\,.$$

可见路径积分公式 (154), (155) 是正确的.

为了将 (154), (155) 式写成实时间形式，我们首先由 (156) 式写出

$$\mathcal{Z}_e[\overline{\eta},\eta]=\frac{1}{\int\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]\exp\{\mathrm{i}\int\int\mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\overline{\psi}(x)\mathcal{M}(x,y)\psi(y)\}}$$

$$\times\int\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\overline{\psi}(x)\mathcal{M}(x,y)\psi(y)\right.$$

$$\left.+\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x[\overline{\eta}(x)\psi(x)+\overline{\psi}(x)\eta(x)]\right\},\tag{158}$$

其中

$$\mathcal{M}(x,y)=S^{-1}(x-y)$$

$$=\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}(\gamma^\mu p_\mu-m+\mathrm{i}\epsilon)\exp\{-\mathrm{i}p(x-y)\}\,.$$

公式 (158) 本身也可直接验证. 将 $\mathcal{M}(x,y)$ 表示为

$$\mathcal{M}(x,y)=(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m+\mathrm{i}\epsilon)\delta^4(x-y)\,,$$

即得

$$\mathcal{Z}_e[\overline{\eta},\eta]=\frac{1}{N_e}\int\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]\exp\{\mathrm{i}(I_e+I_s^F)\}\,,\tag{159}$$

其中 I_e 是作用量泛函

$$\int\mathrm{d}^4x\mathcal{L}_e(x)\,,$$

N_e 为

$$N_e=\int\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]\exp\{\mathrm{i}I_e\}\,.$$

在格林函数生成泛函的这种实时间形式中，按习惯省写了附加到 $\mathcal{L}_e$ 中的 $\mathrm{i}\epsilon\overline{\psi}\psi$.

§9 自由电磁场格林函数生成泛函的路径积分

自由电磁场的拉氏函数是

$$\mathcal{L}_A = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\,,$$

其中

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu\,.$$

自由电磁场理论的阿贝尔规范对称性，是指 $\mathcal{L}_A$ 在如下的规范变换下保持不变：

$$A_\mu(x) \to A_\mu(x) - \frac{1}{e}\partial_\mu\theta(x)\,,$$

其中 $\theta(x)$ 是 x 的实函数. 这里把电子的裸电荷 e (负数) 也写出来，只是为了与下节的符号一致. 这种变换实际上是 U_1 群变换，$\theta(x)$ 是群参量. 将群元写作

$$\Omega(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(x)}\,,$$

可将变换式写成

$$\mathrm{i}eA_\mu(x) \to \mathrm{i}eA_\mu(x) + \Omega(x)\partial_\mu\Omega^{-1}(x)\,.$$

格林函数与规范有关. 根据第九章在库仑规范量子化的结果，可用场算符 $\widehat{A}_j(j=1,2,3)$ 来定义格林函数：

$$\langle 0|\mathcal{T}\widehat{A}_{j_1}(x_1)\widehat{A}_{j_2}(x_2)\cdots|0\rangle\,,$$

传播函数是

$$\mathrm{i}D_{jl}^{(\mathrm{tr})}(x-y)$$

$$= \langle 0|\mathcal{T}A_j(x)A_l(y)|0\rangle = \int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-y)}\mathrm{i}D_{jl}^{(\mathrm{tr})}(k)\,,$$

而

$$\mathrm{i}D_{jl}^{(\mathrm{tr})}(k)=\frac{\mathrm{i}}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\sum_{\lambda=1}^{2}\varepsilon_j(\boldsymbol{k},\lambda)\varepsilon_l(\boldsymbol{k},\lambda)\quad(\epsilon=0^+)\,.$$

$\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},1)$, $\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},2)$ 是以前定义的横向单位矢量，它们与 $\boldsymbol{k}$ 互相垂直，并满足

$$\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},1)\times\vec{\varepsilon}(\boldsymbol{k},2)=\frac{\boldsymbol{k}}{|\boldsymbol{k}|}\,.$$

$\mathrm{i}D_{jl}^{(\mathrm{tr})}(k)$ 即是动量表象的传播函数，描写动量为 (k^0,k^1,k^2,k^3) 的虚光子的自由传播. 容易证明，$\mathrm{i}D_{jl}^{(\mathrm{tr})}(x-y)$ 可写成如下的路径积分形式：

$$\mathrm{i}D_{jl}^{(\mathrm{tr})}(x-y)=\frac{1}{C_A}\int\mathcal{D}[\mathcal{A}]\delta_C(A)A_j(x)A_l(y)\exp\{\mathrm{i}I_A\}\,,\qquad(160)$$

其中 $\mathcal{D}[A]$ 是路径积分元 $\prod_{\boldsymbol{x}}\mathrm{d}A_0\mathrm{d}A_1\mathrm{d}A_2\mathrm{d}A_3$, I_A 是作用量泛函：

$$I_A=\int\mathrm{d}^4x\mathcal{L}_A(x)\,,$$

而

$$\delta_C(A)=\prod_{\boldsymbol{x}}\delta(\nabla\cdot\boldsymbol{A}(x))\,,$$

$$C_A=\int\mathcal{D}[\mathcal{A}]\delta_C(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\}\,.$$

在传播函数的这种表达式中，省写了附加到 $\mathcal{L}_A$ 的 $\mathrm{i}\epsilon$ 项. 计算这种路径积分的方法可以从后面的讨论中找到.

如果规范条件是洛伦兹条件，则不能像第九章那样按 Dirac 方法量子化，因为 $\mathcal{L}_A$ 不含 $\dot{A}_0$, 按 Dirac 方法定义正则动量时，Π^0 等于零，这使洛伦兹条件不能用正则变量表示出来. 要在此规范下进行量子化和保持理论的协变形式，Gupta-Bleuler 的不定度规方法是可行的，但为了现在的目的不一定要首先完成正则量

子化. 我们要从路径积分的观点来构成格林函数生成泛函. 由于拉氏函数所含场的时间微商的二次项具有常数系数, 而且不含时间微商的更高次项, 在位形空间的路径积分与通常形式的差别只能来自理论的规范对称性. 这种对称性要求任何物理结果都是规范不变的, 所以在每个时空点由一切局域规范变换联系起来的场形成一个规范等价类, 当我们选取一种规范时, 就是从每个规范等价类中挑选符合规范条件的场, 只考虑它们的贡献, 这样做不会影响任何物理结果. (160) 式表明, 它与路径积分公式的普遍形式的差别, 在于被积函数中出现了代表规范条件的 δ 函数. 采用洛伦兹规范, 就是从各点场函数的规范等价类中选取符合洛伦兹条件者, 只计它们的贡献, 因此传播函数的路径积分应该是

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(x-y)\\&\quad=\frac{1}{N_0}\int\mathcal{D}[A]\Delta[A]\delta_L(\mathcal{A})A_\mu(x)A_\nu(y)\exp\{\mathrm{i}I_A\}\,,\end{aligned}\tag{161}$$

其中 $\delta_L(\mathcal{A})$ 代表 $\prod_x\delta\left(\partial^\lambda A_\lambda(x)\right)$, 而

$$N_0=\int\mathcal{D}[A]\Delta[A]\delta_L(\mathcal{A})\exp\{\mathrm{i}I_A\}\,,$$

式中 $\Delta[A]$ 是为了正确反映规范条件的作用所需要的因子. 若将式中的 $A_\mu(x)A_\nu(y)$ 换成任意的 $G(\mathcal{A})$, 就得到一般的格林函数的路径积分公式. 既然在 (161) 式以及在一般的格林函数的路径积分公式中, 因子 $\Delta[A]$ $\delta_L(\mathcal{A})$ 的作用是保证只计及每点场的规范等价类中满足规范条件者, $\Delta[A]$ 当然是规范不变量, 而且应当满足如下的要求: 对任何规范不变量 $N(\mathcal{A})$, 都有

$$\begin{aligned}&\int\mathcal{D}[A]\mathcal{N}(\mathcal{A})\exp\{\mathrm{i}I_A\}\\&\quad=\left(\int\prod_y\mathrm{d}\Omega(y)\right)\int\mathcal{D}[A]\Delta[A]\delta_L(\mathcal{A})\mathcal{N}(\mathcal{A})\exp\{\mathrm{i}I_A\}\,,\end{aligned}\tag{162}$$

其中 $\Omega(y)$ 代表在时空点 y 的规范群的元素，$\mathrm{d}\Omega(y)$ 代表 y 处的群积分元. 在此式的左边，对每个时空点的一切场函数都求积分，即包括了所有点的规范等价类中所有场的贡献，每个点都产生一个因子 $\int \mathrm{d}\Omega$(群体积), 故最后含有因子 $\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)$. 此式的意思是要求在被积函数中引入代表规范条件的因子之后，正好将 $\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)$ 分离出来. $\Delta[A]$ 还可以乘其他常数因子，但这无关重要，所以就用 (162) 式来求它. 由于 $\mathcal{D}[A]$, $\Delta[A]$, $\mathcal{N}(A)$ 以及 $\mathcal{L}_A$ 都是规范不变的，对任意 $\Omega(x)$ 都有，

$$\int \mathcal{D}[A]\Delta[A]\left\{\prod_x \delta(\partial^\lambda A_\lambda^\Omega(x))\right\}\mathcal{N}(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\}$$

$$= \int \mathcal{D}[A]\Delta[A]\left\{\prod_x \delta(\partial^\lambda A_\lambda(x))\right\}\mathcal{N}(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\},$$

其中 $A_\lambda^\Omega(x)$ 代表 $A_\lambda(x)$ 经受由 $\Omega(x)$ 确定的规范变换的结果. 因此 (162) 式可改写为

$$\int \mathcal{D}[A]\mathcal{N}(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\}$$

$$= \int \mathcal{D}[A]\Delta[A]\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\left\{\prod_x \delta(\partial^\lambda A_\lambda^\Omega(x))\right\}\mathcal{N}(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\},$$

故

$$\Delta[A]\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\prod_x \delta\left(\partial^\lambda A_\lambda^\Omega(x)\right) = 1. \tag{163}$$

这是求 $\Delta[A]$ 的 Faddeev-Popov 条件的特殊形式. 由此条件求 $\Delta[A]$ 的方法将在以后给出 (本章 §11). 现在只需记住，在电磁场的洛伦兹规范的情形，$\Delta[A]$ 与场函数无关，从格林函数的公式中消失

了，因此有

$$\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(x-y)$$
$$=\frac{1}{N_0'}\int\mathcal{D}[\mathcal{A}]\delta_L(\mathcal{A})A_\mu(x)A_\nu(y)\exp\{\mathrm{i}I_A\}\,,\qquad(164)$$

其中

$$N_0'=\int\mathcal{D}[\mathcal{A}]\delta_L(\mathcal{A})\exp\{\mathrm{i}I_A\}\,.$$

相应的 (完全) 格林函数生成泛函是

$$\mathcal{Z}_0[J]=\frac{1}{N_0'}\int\mathcal{D}[A]\delta_L(A)\exp\{\mathrm{i}(I_A+I_s^A)\}\,,\qquad(165)$$

其中 I_s^A 是如下的源项：

$$I_s^A=\int\mathrm{d}^4xJ^\mu(x)A_\mu(x)\,,\qquad(166)$$

$J^\mu(x)$ 是源函数. 当我们按照这种定义计算规范不变量 $\mathcal{N}(A)$ 的格林函数时，就有

$$\frac{\int\mathcal{D}[A]\delta_L(A)\mathcal{N}(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\}}{\int\mathcal{D}[A]\delta_L(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\}}=\frac{\int\mathcal{D}[A]\mathcal{N}(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\}}{\int\mathcal{D}[A]\exp\{\mathrm{i}I_A\}}\,,$$

这个结果当然是合理的. 这时，似乎无需选择规范或者采取其他类似措施. 问题在于，将右边的表达式放在现在的连续时空理论中进行计算，会引起麻烦.

如果用不依赖于 A_μ 的实函数 $p(x)$ 将规范条件改为所谓推广的洛伦兹条件

$$\partial^\lambda A_\lambda(x)-p(x)=0\,,$$

那么与 (162) 相当的公式变为

$$\int \mathcal{D}[A]\mathcal{N}(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\}$$

$$= \left(\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\right) \int \mathcal{D}[A]\Delta'[A]\delta'_L(A)\mathcal{N}(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\}\,, \tag{167}$$

其中

$$\delta'_L(A) = \prod_x \delta(\partial^\lambda A_\lambda(x) - p(x))\,.$$

故

$$\Delta'[A]\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y) \prod_x \delta(\partial^\lambda A^\Omega_\lambda(x) - p(x)) = 1\,. \tag{168}$$

实际上 $\Delta'[A]$ 与 $\Delta[A]$ 相同. (167) 式等号左右边当然不依赖于 $p(x)$, 如果将此式对 $p(x)$ 作权重平均, 就可以去掉右边的 δ 函数. 通常选取 $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2\xi}p^2(x)}$ 作为权重函数, 其中 ξ 是实参量, 平均后得

$$\int \mathcal{D}[A]\mathcal{N}(A)\exp\{\mathrm{i}I_A\}$$

$$= \frac{\left\{\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\right\}}{\prod_x \int \mathrm{d}p(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2\xi}p^2(x)}} \int \mathcal{D}[A]\Delta[A]\mathcal{N}(A)\exp\{\mathrm{i}I_{A,\mathrm{eff}}\}\,, \tag{169}$$

其中

$$I_{A,\mathrm{eff}} = \int \mathrm{d}^4x \mathcal{L}_{A,\mathrm{eff}}(x)\,,$$

$$\mathcal{L}_{A,\mathrm{eff}}(x) = \mathcal{L}_A(x) + \mathcal{L}_{gf}(x)\,,$$

$$\mathcal{L}_{gf}(x) = -\frac{1}{2\xi}\left(\partial^\lambda A_\lambda(x)\right)^2\,.$$

(169) 式可以看作是对于左边的量的另一种改写方式, 即是在被积函数中引入因子

$$\Delta[A]\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x \mathcal{L}_{gf}(x)\right\}\,,$$

也能够发挥类似于引用规范条件的作用. 当 $\xi \to 0$ 时即回到洛伦兹规范的公式, 当 $\xi \to \infty$ 时, 则等于没有进行改写. 虽然当 ξ 不为 0 时, 这种改写不对应于原来意义下的任何一种规范, 但是改写后的结构可用来构成格林函数的另一种表达式, 即

$$\frac{1}{N_A}\int \mathcal{D}[A]G[A]\exp\{\mathrm{i}I_{A,\mathrm{eff}}\}\,,$$

其中

$$N_A = \int \mathcal{D}[A]\exp\{\mathrm{i}I_{A,\mathrm{eff}}\}\,.$$

这是一种新的定义, 也是最为常用的定义, 有时称为 ξ 规范的格林函数. $\mathcal{L}_{gf}$ 称为拉氏函数中的所谓规范确定项. 相应的格林函数生成泛函为

$$\mathcal{Z}_A^{(\xi)}[J] = \frac{1}{N_A}\int \mathcal{D}[A]\exp\{\mathrm{i}(I_{A,\mathrm{eff}} + I_s^A)\}\,. \tag{170}$$

有一种习惯术语, $\xi \to 0$ 和 $\xi = 1$ 的情形分别称为 Landau 规范和 Feynmann 规范. 注意

$$\lim_{\beta\approx 0} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x^2/\beta} = \begin{cases} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\sqrt{\pi|\beta|}\,\delta(x) & \text{当}\,\beta > 0, \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4}\sqrt{\pi|\beta|}\,\delta(x) & \text{当}\,\beta < 0. \end{cases}$$

有

$$\lim_{\xi\to 0} \mathcal{Z}_A^{(\xi)}[J] = \mathcal{Z}_A[J]\,. \tag{171}$$

下面扼要给出计算 $\mathcal{Z}_A^{(\xi)}[J]$ 的步骤. 我们用前面说明过的虚时间方法. 为此, 引用正参量 α 在 $\mathcal{L}_A$ 和 $\mathcal{L}_{gf}$ 中将 $\dot{A}_\mu$ 换作 $\frac{\mathrm{i}}{\alpha}\dot{A}_\mu$, 定义

$$\mathcal{L}_A(x,\alpha) = -\frac{1}{4}(\tilde{\partial}_\lambda A_\sigma - \tilde{\partial}_\sigma A_\lambda)(\tilde{\partial}^\lambda A^\sigma - \tilde{\partial}^\sigma A^\lambda)\,,$$

$$\mathcal{L}_{gf}(x,\alpha) = -\frac{1}{2\xi}(\widetilde{\partial}^{\lambda}A_{\lambda}(x))^2\,,$$

其中 $\widetilde{\partial}^{\lambda}$ 和 ∂^{λ} 的差别只在于 $\widetilde{\partial}^{0}$ 代表 $\frac{\mathrm{i}}{\alpha}\partial^{0}$, $\widetilde{\partial}^{\lambda}$ 则代表 $g_{\lambda\sigma}\widetilde{\partial}^{\sigma}$. 再令

$$I^{(\alpha)}_{A,\mathrm{eff}} = \int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}_A(x,\alpha) + \int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}_{gf}(x,\alpha)\,,$$

以及

$$\mathcal{Z}^{(\xi,\alpha)}_A[J] = \frac{\int \mathcal{D}[\mathcal{A}]\exp\{\alpha(I^{(\alpha)}_{A,\mathrm{eff}} + I^A_s)\}}{\int \mathcal{D}[\mathcal{A}]\exp\{\alpha I^{(\alpha)}_{A,\mathrm{eff}}\}}\,.$$

将 $\mathcal{Z}^{(\xi,\alpha)}_A[J]$ 延拓到 α 的右半平面，取极限 $\alpha \to 0^+ + \mathrm{i}$ 将得到 $\mathcal{Z}^{(\xi)}_A[J]$. 由

$$\int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}_A(x,\alpha)$$

$$= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4x[A_\mu(x)g^{\mu\nu}\widetilde{\partial}_\lambda\widetilde{\partial}^{\lambda}A_\nu(x) - A_\mu(x)\widetilde{\partial}^{\mu}\widetilde{\partial}^{\nu}A_\nu(x)]\,,$$

及

$$\int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}_{gf}(x,\alpha) = \frac{1}{2\xi}\int \mathrm{d}^4xA_\mu(x)\widetilde{\partial}^{\mu}\widetilde{\partial}^{\nu}A_\nu(x)\,,$$

得

$$\mathcal{Z}^{(\xi,\alpha)}_A[J]$$

$$= \frac{1}{\int \mathcal{D}[\mathcal{A}]\exp\{\frac{\alpha}{2}\int \mathrm{d}^4x\int \mathrm{d}^4yA_\mu(x)M^{\mu\nu}(x-y)A_\nu(y)\}}$$

$$\times \int \mathcal{D}[\mathcal{A}]\exp\left\{\frac{\alpha}{2}\int \mathrm{d}^4x\int \mathrm{d}^4yA_\mu(x)M^{\mu\nu}(x-y)A_\nu(y)\right\}$$

$$\times \exp\left\{\alpha\int \mathrm{d}^4xJ^{\lambda}(x)A_\lambda(x)\right\}\,,$$

其中

$$M^{\mu\nu}(x-y) = g^{\mu\nu}\widetilde{\partial}_\lambda\widetilde{\partial}^{\lambda}\delta^4(x-y) + \left(\frac{1}{\xi}-1\right)\widetilde{\partial}^{\mu}\widetilde{\partial}^{\nu}\delta^4(x-y)\,,$$

微分算子 $\widetilde{\partial}_\lambda$ 等是对于 x 而言的. 仿照有限维积分, 作变量替换

$$A_\mu(x) \to A_\mu - \int \mathrm{d}^4 z M^{-1}_{\mu\nu}(x-z) J^\lambda(z)\,,$$

其中 $M^{-1}_{\mu\lambda}(x-z)$ 由如下条件决定

$$\int \mathrm{d}^4 z M^{-1}_{\mu\lambda}(x-z) M^{\lambda\nu}(z-y) = g^\nu_\mu \delta^4(x-y)\,, \tag{172}$$

则积分的结果是

$$\mathcal{Z}^{(\xi,\alpha)}_A[J] = \exp\left\{ -\frac{\alpha}{2} \int \mathrm{d}^4 x \int \mathrm{d}^4 y J^\mu(x) M^{-1}_{\mu\nu}(x-y) J^\nu(y) \right\}. \tag{173}$$

作傅氏展开

$$\delta^4(x-y) = \int \frac{\mathrm{d}^4 k}{(2\pi)^4} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-y)}\,,$$

$$M^{\mu\nu}(x-y) = \int \frac{\mathrm{d}^4 k}{(2\pi)^4} M^{\mu\nu}(k) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-y)}\,,$$

$$M^{-1}_{\rho\lambda}(x-y) = \int \frac{\mathrm{d}^4 k}{(2\pi)^4} M_{\rho\lambda}(k) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-y)}\,,$$

则方程组 (172) 变为

$$M^{-1}_{\mu\lambda}(k) M^{\lambda\nu}(k) = g^\nu_\mu\,, \tag{174}$$

其中 $\widetilde{k}^\lambda$ 和 k^λ 的差别只在于 $\widetilde{k}^0$ 代表 $\frac{\mathrm{i}}{\alpha}k^0$, $\widetilde{k}_\lambda$ 还是代表 $g^\sigma_\lambda \widetilde{k}^\sigma$. 这里顺便提一下, 如果试令

$$\xi \to \infty\,,$$

而使规范确定项消失, 则 $M^{-1}_{\mu\lambda}(k)$ 不存在. 对有限的 ξ, 从 (174) 式求得

$$M^{-1}_{\mu\nu}(k) = -\frac{1}{\widetilde{k}_\lambda \widetilde{k}^\lambda} g_{\mu\nu} + (1-\xi) \frac{\widetilde{k}_\mu \widetilde{k}_\nu}{(\widetilde{k}_\lambda \widetilde{k}^\lambda)^2}\,.$$

当 α 从右半平面趋于 i 时，分母中的 $\widetilde{k}_\lambda \widetilde{k}^\lambda$ 可换成

$$k^2 + \mathrm{i}\epsilon \quad (\epsilon = 0^+) .$$

因此

$$M^{-1}_{\mu\nu}(k) \longrightarrow \frac{-1}{k^2 + \mathrm{i}\epsilon}\left\{ g_{\mu\nu} + (\xi - 1)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2 + \mathrm{i}\epsilon} \right\} .$$

由 (173) 式看出， $\mathrm{i}M^{-1}_{\mu\nu}(x-y)$ 的极限即是传播函数，故

$$\mathrm{i}D_{\mu\nu}(x-y) = \int \frac{\mathrm{d}^4 k}{(2\pi)^4} \mathrm{i}D_{\mu\nu}(k) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-y)} ,$$

$$\mathrm{i}D_{\mu\nu}(k) = \frac{-\mathrm{i}}{k^2 + \mathrm{i}\epsilon}\left\{ g_{\mu\nu} + (\xi - 1)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2 + \mathrm{i}\epsilon} \right\} .$$

采用 $\mathcal{Z}^{(\xi)}_A[J]$ 作为格林函数生成泛函，等于以 $\mathcal{L}_{A,\mathrm{eff}}$ 代替 $\mathcal{L}_A$ 作为有效拉氏函数，这是理论的阿贝尔规范对称性容许的定义格林函数的一种方法. 如果以 $\mathcal{L}_{A,\mathrm{eff}}$ 为拉氏函数形式地完成量子化，也可以用算符方法计算 $\mathcal{Z}^{(\xi)}_A[J]$，但是要用来描写自由光子，还需要剔除非物理态。

§ 10　旋量电动力学格林函数生成泛函的路径积分

仍用 $\psi, \overline{\psi}$ 及 A_μ 分别代表电子场及电磁场，总拉氏函数为

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \overline{\psi}(\mathrm{i}\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi - e\overline{\psi}\gamma^\mu \psi A_\mu \\ & - \frac{1}{4}(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu)(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) . \end{aligned} \tag{175}$$

其中 m, e 是电子的裸质量和裸电荷 (e 是负数). 理论的规范对称性是指 $\mathcal{L}$ 在下式表示的规范变换下保持不变：

$$\psi(x) \longrightarrow \psi'(x) = \Omega(x)\psi(x), \quad \Omega(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(x)}, \tag{176}$$

$$A_\mu(x) \longrightarrow A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \frac{1}{e}\partial_\mu \theta(x) . \tag{177}$$

这是以 $\Omega(x)$ 为群元的局域 U_1 群变换. 这组变换式可简写为

$$\Omega(x)\left(\partial_\mu + \mathrm{i}eA_\mu(x)\right)\psi(x) = \Omega(x)\left(\partial_\mu + \mathrm{i}eA'_\mu(x)\right)\psi'(x)\,. \qquad (178)$$

我们要解决的问题是构成协变格林函数生成泛函的路径积分. 由于 $\mathcal{L}$ 所含电磁势时间微商的二次项仍然带有常数系数, 也不包含时间微商的更高次项, 电子场的时间微商项与自由场情形相同, 在位形空间的路径积分与通常形式的差别仍然只能来自理论的规范对称性. 这种对称性要求一切物理结果都是规范不变的, 因而允许借助一定的规范, 从各时空点的场函数的规范等价类中挑选符合规范条件者, 只计及它们的贡献. 而规范条件对于路径积分的被积函数的影响应该用相应的 δ 函数表示. 因此, 在洛伦兹规范的电磁场和电子场的完全传播函数应由如下的公式定义:

$$\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(x-y) =$$

$$= \frac{1}{N_1}\int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\Delta[\mathcal{A}]\delta_L(\mathcal{A})A_\mu(x)A_\nu(y)\exp\{\mathrm{i}I\}\,, \quad (179)$$

$$\mathrm{i}\overline{S}(x-y) =$$

$$= \frac{1}{N_1}\int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\Delta[\mathcal{A}]\delta_L(\mathcal{A})\psi(x)\overline{\psi}(y)\exp\{\mathrm{i}I\}\,, \qquad (180)$$

其中 I 是作用量泛函

$$I = \int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}(x)\,, \qquad (181)$$

而

$$N_1 = \int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\Delta[\mathcal{A}]\delta_L(\mathcal{A})\exp\{\mathrm{i}I\}\,,$$

$\delta_L(\mathcal{A})$ 与上节一样, 代表 $\prod_x \delta\left(\partial^\lambda A_\lambda(x)\right)$. 称这些传播函数为完全传播函数是因为已经包括了相互作用. 一般的完全格林函数也按同样的方式定义. 式中 $\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]$ 代表路径积分元 $\mathcal{D}[\mathcal{A}]\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]$.

$\Delta[A]$ 与 δ 函数因子一起描写规范条件的影响. 还有一个附加到 $\mathcal{L}$ 中的 $\mathrm{i}\epsilon$ 项

$$-\frac{\mathrm{i}}{2}\epsilon A_\mu A^\mu + \mathrm{i}\epsilon\overline{\psi}\psi \qquad (\epsilon = 0^+)\,,$$

现在被省写了. 因子 $\Delta[A]\ \delta_L(A)$ 的作用正是从各时空点的场函数的规范等价类中挑选符合洛伦兹条件者, 因此 $\Delta[A]$ 是规范不变的, 而且对于任意的规范不变量 $\mathcal{N}\left(A,\psi,\overline{\psi}\right)$, 应当保证下式成立:

$$\int \mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\mathcal{N}\left(A,\psi,\overline{\psi}\right)\exp\{\mathrm{i}I\}$$

$$= \left(\int\prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\right)\int \mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\Delta[A]\delta_L(A)\mathcal{N}(A,\psi,\overline{\psi})\exp\{\mathrm{i}I\}\,. \quad (182)$$

这是借助洛伦兹规范实现的对左边的积分的一种改写. 建立此式的论据和上节一样, $\Omega(y)$ 也是在点 y 处的规范群的元素, $\mathrm{d}\Omega(y)$ 是 y 处的群积分体元. 由此知道, $\Delta[A]$ 满足与上节一样的 Faddeev–Popov 条件:

$$\Delta[A]\int\prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\prod_x \delta\left(\partial^\lambda A^\Omega_\lambda(x)\right) = 1\,, \quad (183)$$

所以 $\Delta[A]$ 与自由场的情形相同, 不依赖于场函数. 因此 (179),(180) 式化简为

$$\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(x-y) = \frac{1}{N_2}\int \mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\delta_L(A)A_\mu(x)A_\nu(y)\exp\{\mathrm{i}I\}\,, \quad (184)$$

$$\mathrm{i}\overline{S}(x-y) = \frac{1}{N_2}\int \mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\delta_L(A)\psi(x)\overline{\psi}(y)\exp\{\mathrm{i}I\}\,, \quad (185)$$

其中

$$N_2 = \int \mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\delta_L(A)\exp\{\mathrm{i}I\}\,.$$

相应的 (完全) 格林函数生成泛函是

$$\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J] = \frac{1}{N_2}\int \mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\delta_L(A)\exp\{\mathrm{i}(I+I_s)\}\,, \quad (186)$$

其中

$$I_s = \int \mathrm{d}^4 x \mathcal{L}_s(x)\,. \tag{187}$$

$\mathcal{L}_s$ 是如下的源项：

$$\mathcal{L}_s(x) = \overline{\eta}(x)\psi(x) + \overline{\psi}(x)\eta(x) + J^\mu(x)A_\mu(x)\,,$$

$\overline{\eta}(x), \eta(x), J^\mu(x)$ 是源函数.

如果采用广义的洛伦兹条件

$$\partial^\lambda A_\lambda(x) - p(x) = 0\,, \tag{188}$$

那么相应的 $\Delta[A]$ 仍与原来一样，因此下式对于任意的规范不变量 $\mathcal{N}\left(\mathcal{A}, \psi, \overline{\psi}\right)$ 都成立：

$$\int \mathcal{D}[\mathcal{A}, \overline{\psi}, \psi]\mathcal{N}(\mathcal{A}, \psi, \overline{\psi})\exp\{\mathrm{i}I\}$$

$$= \left(\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\right)\int \mathcal{D}[\mathcal{A}, \overline{\psi}, \psi]\Delta[\mathcal{A}]\delta'_L(\mathcal{A})\mathcal{N}\left(\mathcal{A}, \psi, \overline{\psi}\right)\exp\{\mathrm{i}I\}, \tag{189}$$

其中 $\delta'_L(\mathcal{A})$ 也与上节相同，即代表 $\prod_x \delta\left(\partial^\lambda A_\lambda(x) - p(x)\right)$.

像上节一样处理得

$$\int \mathcal{D}[\mathcal{A}, \overline{\psi}, \psi]\mathcal{N}(\mathcal{A}, \psi, \overline{\psi})\exp\{\mathrm{i}I\}$$

$$= \frac{\left(\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\right)}{\int \prod_y \mathrm{d}p(y)\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{2\xi}\int \mathrm{d}^4 x p^2(x)\right\}}$$

$$\times \int \mathcal{D}[\mathcal{A}, \overline{\psi}, \psi]\Delta[\mathcal{A}]\mathcal{N}\left(\mathcal{A}, \psi, \overline{\psi}\right)\exp\{\mathrm{i}(I + I_{gf})\}\,, \tag{190}$$

其中 I_{gf} 是所谓规范确定项 $\mathcal{L}_{gf}$ 贡献的作用量，即

$$I_{gf} = \int \mathrm{d}^4 x \mathcal{L}_{gf}(x)\,,$$

$$\mathcal{L}_{gf}(x) = -\frac{1}{2\xi}\left(\partial^{\lambda}A_{\lambda}(x)\right)^{2}\,.$$

公式 (190) 右边是对于左边积分的另一种改写. 即通过在拉氏函数中加入规范确定项也能够起到类似于引入规范条件的作用. 按照右边的结构可构造格林函数的新定义. 这时, 传播函数为

$$\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(x-y) = \frac{1}{N}\int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]A_{\mu}(x)A_{\nu}(y)\exp\{\mathrm{i}I_{\mathrm{eff}}\}\,, \qquad (191)$$

$$\mathrm{i}\overline{S}(x-y) = \frac{1}{N}\int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\psi(x)\overline{\psi}(y)\exp\{\mathrm{i}I_{\mathrm{eff}}\}\,, \qquad (192)$$

其中 $N = \int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\exp\{\mathrm{i}I_{\mathrm{eff}}\}$, 而

$$I_{\mathrm{eff}} = \int \mathrm{d}^{4}x\mathcal{L}^{(\xi)}_{\mathrm{eff}}(x)\,,$$

$$\mathcal{L}^{(\xi)}_{\mathrm{eff}} = \mathcal{L} + \mathcal{L}_{gf}\,. \qquad (193)$$

相应的格林函数生成泛函是

$$\mathcal{Z}^{(\xi)}[\overline{\eta},\eta,J] = \frac{1}{N}\int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\exp\{\mathrm{i}(I_{\mathrm{eff}}+I_{s})\}\,. \qquad (194)$$

这正是通常广泛采用的形式. 洛伦兹规范的公式对应于 $\xi\to 0$.

采用 $\mathcal{Z}^{(\xi)}[\overline{\eta},\eta,J]$ 作为格林函数生成泛函, 相当于以 $\mathcal{L}^{(\xi)}_{\mathrm{eff}}$ 代替 $\mathcal{L}$ 作为一种有效拉氏函数, 这是理论的阿贝尔规范对称性容许的定义格林函数的一种方法. 但是格林函数只是计算工具, 一般不代表物理观察量. 而且在电动力学理论中存在发散, 必须完成重整化才能构成计算物理观察量的完整方案.

§ 11 色动力学格林函数生成泛函的路径积分

色动力学是以夸克为物质元, 色 SU_3 规范场为媒介的强作用理论. 下面以特别的记号 $SU_c(3)$ 代表色 SU_3 群. 总拉氏函数为

$$\mathcal{L} = \sum_{f}\overline{\psi}_{f}(\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m_{f})\psi_{f} - g\sum_{f}\overline{\psi}_{f}\gamma^{\mu}\frac{\lambda_{a}}{2}\psi_{f}A_{a\mu} + \mathcal{L}_{A}\,, \qquad (195)$$

其中 f 是夸克的味指标，即代表 u,d,s,c,b,t. ψ_f 及 $\overline{\psi}_f$ 是味为 f 的夸克场函数，m_f 是裸夸克质量，g 是裸耦合常数. 夸克场的三个色分量 $\psi_{f1},\psi_{f2},\psi_{f3}$ 构成 $SU_c(3)$ 的基础表示，λ_a 是这个表示的 Gell-Mann 矩阵. 满足

$$\left[\frac{\lambda_a}{2},\frac{\lambda_b}{2}\right]=\mathrm{i}f_{abc}\frac{\lambda_c}{2}\,. \tag{196}$$

f_{abc} 即是第九章 §6 的 $-C_{abc}$, 对于 a,b,c 的交换是反对称的. $\lambda_a\psi_f$ 代表

$$[\lambda_a]\begin{pmatrix}\psi_{f1}\\ \psi_{f2}\\ \psi_{f3}\end{pmatrix},$$

而 $\gamma^\mu\psi_f$ 则理解为

$$\begin{pmatrix}\gamma^\mu\psi_{f1}\\ \gamma^\mu\psi_{f2}\\ \gamma^\mu\psi_{f3}\end{pmatrix}.$$

规范场 (称为胶子场) 共包含八种矢量场，其场函数记作 $A_{a\mu}$. $\mathcal{L}_A$ 是规范场的拉氏函数：

$$\mathcal{L}_A=\frac{1}{4}F_{a\mu\nu}F_a^{\mu\nu}\,, \tag{197}$$

其中

$$F_{a\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu-gf_{abc}A_{b\mu}A_{c\nu}\,. \tag{198}$$

理论的规范对称性是指 $\mathcal{L}$ 在如下的局域 $SU_c(3)$ 群变换下保持不变：

$$\psi_f(x)\longrightarrow\psi'_f(x)=\Omega(x)\psi_f(x)\,, \tag{199}$$

$$A_{a\mu}(x)\frac{\lambda_a}{2}\longrightarrow A'_{a\mu}(x)\frac{\lambda_a}{2}=\Omega(x)A_{a\mu}(x)\frac{\lambda_a}{2}\Omega^{-1}(x)+\frac{1}{\mathrm{i}g}\Omega(x)\partial_\mu\Omega^{-1}(x)\,, \tag{200}$$

其中 $\Omega(x)$ 是群 $SU_c(3)$ 的元素在基础表示中的矩阵，可写成

$$\Omega(x)=\exp\left\{\mathrm{i}\theta_a(x)\frac{\lambda_a}{2}\right\}. \tag{201}$$

$\{\theta_1(x),\theta_2(x),\cdots,\theta_8(x)\}$ 是在点 x 的群参量. 注意，即使在整体 $SU_c(3)$ 变换下 (θ_a 与 x 无关的变换), $A_{a\mu}$ 也要改变. 所以胶子场对于色流是有贡献的 (色流是指 $\mathcal{L}$ 在整体 $SU_c(3)$ 变换下的不变性导致的守恒流), 或者说，胶子是带色的. 变换式 (176), (177) 可以简写为

$$\begin{aligned}&\Omega(x)\left(\partial_\mu+\mathrm{i}gA_{a\mu}(x)\frac{\lambda_a}{2}\right)\psi_f(x)\\&=\Omega(x)\left(\partial_\mu+\mathrm{i}gA'_{a\mu}(x)\frac{\lambda_a}{2}\right)\psi'_f(x),\end{aligned} \tag{202}$$

其中 $\left(\partial_\mu+\mathrm{i}gA_{a\mu}(x)\frac{\lambda_a}{2}\right)\psi_f(x)$ 称为 $\psi_f(x)$ 的协变微商，这个公式即是这种协变微商的规范变换式.

由于非阿贝尔规范场的自作用项含有场函数的时间微商，想要进行正则量子化又保持理论的洛伦兹协变形式是困难的. L.D.Faddeev 和 V.N.Popov 在 1967 年从路径积分的途径完成了非阿贝尔规范理论的量子化，保持理论的协变形式的问题也解决了. 本节的目的是建立色动力学的洛伦兹协变格林函数生成泛函的路径积分. 考虑到本节的内容比较复杂，如果与前两节作详细的对照，则会变得易于掌握. 因此在论证上将不省略与前面相似的部分. $\mathcal{L}$ 所含胶子场时间微商的二次项仍然带有常数系数，也不包含时间微商的更高次项，夸克场的时间微商项与自由场情形相同，因此在位形空间的路径积分与通常形式的差别仍然只能来自理论的规范对称性. 这种对称性要求一切物理结果都是规范不变的，因而允许借助一定的规范，从各时空点的场函数的规范等价类中挑选符合规范条件者，只计及它们的贡献. 在前面两节已经指出，规范条件对于路径积分的被积函数的影响应该用相应的 δ 函数表示. 因此，在洛伦兹规范的胶子场和夸克场的完全传播

函数应由如下的公式定义：

$$\mathrm{i}\overline{D}^{ab}_{\mu\nu}(x-y)$$
$$=\frac{1}{N_\delta}\int\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\Delta_L[\mathcal{A}]\delta_L(\mathcal{A})A_{a\mu}(x)A_{b\nu}(y)\exp\{\mathrm{i}I\}\,, \quad (203)$$

$$\mathrm{i}\overline{S}_f(x-y)$$
$$=\frac{1}{N_\delta}\int\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\Delta_L[\mathcal{A}]\delta_L(\mathcal{A})\psi_f(x)\overline{\psi}_f(y)\exp\{\mathrm{i}I\}\,. \quad (204)$$

一般的格林函数也按同样的方式定义. 式中 $\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]$ 代表路径积分元 $\mathcal{D}[\mathcal{A}]\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]$, I 是作用量：

$$I=\int\mathrm{d}^4x\mathcal{L}(x)\,. \quad (205)$$

$\delta_L(\mathcal{A})$ 和 N_δ 分别是

$$\delta_L(\mathcal{A})=\prod_{c,x}\delta\left(\partial^\lambda A_{c,\lambda}(x)\right)\,,$$

$$N_\delta=\int\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\Delta_L[\mathcal{A}]\delta_L(\mathcal{A})\exp\{\mathrm{i}I\}\,.$$

被省写的附加到 $\mathcal{L}$ 中的 $\mathrm{i}\epsilon$ 项是

$$-\frac{\mathrm{i}}{2}\epsilon A_{a\mu}A^\mu_a+\mathrm{i}\epsilon\sum_f\overline{\psi}_f\psi_f\,.$$

因子 $\Delta_L[\mathcal{A}]\delta_L(\mathcal{A})$ 的作用正是从各时空点的场函数的规范等价类中挑选符合洛伦兹条件者，因此 $\Delta_L[\mathcal{A}]$ 是规范不变的，而且对于任意的规范不变量 $\mathcal{N}\left(\mathcal{A},\psi,\overline{\psi}\right)$, 应保证下式成立：

$$\int\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\mathcal{N}\left(\mathcal{A},\psi,\overline{\psi}\right)\exp\{\mathrm{i}I\}$$
$$=\left(\int\prod_y\mathrm{d}\Omega(y)\right)$$
$$\times\int\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\Delta_L[\mathcal{A}]\delta_L(\mathcal{A})\mathcal{N}\left(\mathcal{A},\psi,\overline{\psi}\right)\exp\{\mathrm{i}I\}\,. \quad (206)$$

这是借助洛伦兹规范实现的对于左边的积分的一种改写. 其中 $\mathrm{d}\Omega(y)$ 是 y 处的群积分体元. 在此式的左方, 对每个时空点的一切场函数都求积分, 即包括了所有点的规范等价类中所有场的贡献. 每个点都产生一个因子 $\int \mathrm{d}\Omega$, 故最后含有因子 $\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)$. 此公式的意思是要求在被积函数中引入代表规范条件的因子之后, 正好将 $\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)$ 分离出来. $\Delta_L[A]$ 还可以乘其他常数因子, 这无关重要. 由于 $\mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi], \Delta_L[A], \mathcal{N}\left(A,\psi,\overline{\psi}\right)$ 以及 $\mathcal{L}$ 都是规范不变的, 对任意 $\Omega(x)$ 都有

$$\int \mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\Delta_L[A]\delta_L(A^\Omega)\mathcal{N}\left(A,\psi,\overline{\psi}\right)\exp\{\mathrm{i}I\}$$

$$= \int \mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\Delta_L[A]\delta_L(A)\mathcal{N}\left(A,\psi,\overline{\psi}\right)\exp\{\mathrm{i}I\}\,, \qquad (207)$$

其中

$$\delta_L(A^\Omega) = \prod_{a,x}\delta\left(\partial^\lambda A^\Omega_{a\lambda}(x)\right)\,,$$

$A^\Omega_{a\lambda}(x)$ 代表 $A_{a\lambda}(x)$ 经受由 $\Omega(x)$ 确定的规范变换的结果. 因此 (206) 式可写作

$$\int \mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\mathcal{N}\left(A,\psi,\overline{\psi}\right)\exp\{\mathrm{i}I\}$$

$$= \int \mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\Delta_L[A]$$

$$\times \int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\delta_L(A^\Omega)\mathcal{N}\left(A,\psi,\overline{\psi}\right)\exp\{\mathrm{i}I\}\,, \qquad (208)$$

故

$$\Delta_L[A]\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\delta_L(A^\Omega) = 1\,. \qquad (209)$$

即

$$\Delta_L[A]\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\prod_{a,x}\delta\left(\partial^\lambda A^\Omega_{a\lambda}(x)\right) = 1\,. \qquad (210)$$

这是在洛伦兹规范下的 $\Delta_L[A]$ 满足的 Faddeev–Popov 条件.

现在计算 $\Delta_L[A]$ 的表达式. 注意群积分体元的不变性, 有

$$\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\delta_L(\mathcal{A}^{\Omega}) = \int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\delta_L\left([\mathcal{A}^{\Omega_1}]^{\Omega}\right).$$

这说明 $\Delta_L[A]$ 等于 $\Delta_L[\mathcal{A}^{\Omega_1}]$, 即是说它的规范不变性自动地包含在条件 (210) 之中. 在计算 $\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\delta_L(\mathcal{A}^{\Omega})$ 时, 可约定 $A_{a\lambda}(x)$ 已经满足洛伦兹条件, 故因子 $\delta_L(\mathcal{A}^{\Omega})$ 将 $A^{\Omega}_{a\lambda}$ 限制为 $A_{a\lambda}$ 的无穷小规范变换. 对于无穷小的群参量 $\theta_a(x)$, 有

$$\Omega(x) \approx 1 + \mathrm{i}\theta_a(x)\frac{\lambda_a}{2}, \tag{211}$$

$$\Omega^{-1}(x) \approx 1 - \mathrm{i}\theta_a(x)\frac{\lambda_a}{2}, \tag{212}$$

$$A^{\Omega}_{a\lambda}(x) \approx A_{a\lambda}(x) - \frac{1}{g}\partial_\lambda\theta_a(x) - f_{abc}\theta_b(x)A_{c\lambda}(x), \tag{213}$$

$$\partial^\lambda A^{\Omega}_{a\lambda}(x) \approx -\frac{1}{g}\partial^\lambda\partial_\lambda\theta_a(x) - f_{abc}\partial^\lambda\{\theta_b(x)A_{c\lambda}(x)\}. \tag{214}$$

故

$$\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\delta_L(\mathcal{A}^{\Omega})$$

$$= \int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y) \prod_{a,x} \delta\left(\frac{1}{g}\partial^\lambda\partial_\lambda\theta_a(x) + f_{abc}\partial^\lambda[\theta_b(x)A_{c\lambda}(x)]\right)$$

$$\propto \int \prod_{c,x'} \mathrm{d}\theta_c(x') \prod_{a,x} \delta\left(\int \mathrm{d}^4y\mathcal{M}_{ab}(x,y)\theta_b(y)\right),$$

这里不必管比例系数. 此式中的 $\prod_y \mathrm{d}\Omega(y)$ 在与 δ 函数相乘时正比于 $\prod_{c,x'} \mathrm{d}\theta_c(x')$, 而 $\mathcal{M}_{ab}(x,y)$ 为

$$\mathcal{M}_{ab}(x,y) = \delta_{ab}\partial^\lambda\partial_\lambda\delta^4(x-y) + gf_{abc}A_{c\lambda}(y)\partial^\lambda\delta^4(x-y). \tag{215}$$

由此看到，对于阿贝尔规范理论来说 (第二项不存在), $\Delta[A]$ 是常数. 这个结论已在前面两节用过. 现在看一个 s 重的积分

$$\int \mathrm{d}\theta_1 \cdots \int \mathrm{d}\theta_s \prod_l \delta\Big(\sum_{j=1}^{s} c_{lj}\theta_j\Big) .$$

令 $t_l = \sum_{j=1}^{s} c_{lj}\theta_j$, 于是 $\mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\cdots\mathrm{d}t_s$ 等于 $|\det(C)|\,\mathrm{d}\theta_1\mathrm{d}\theta_2\cdots\mathrm{d}\theta_s$, 可见积分的结果等于 $|\det(C)|$ 的倒数. 将 $\mathcal{M}_{ab}(x,y)$ 看作矩阵 $\mathcal{M}$ 的 (a,x) 行 (b,y) 列的元素，$\det(\mathcal{M})$ 代表 $\mathcal{M}$ 的行列式，则

$$\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\delta_L(\mathcal{A}^{\Omega}) \propto \frac{1}{|\det(\mathcal{M})|} . \tag{216}$$

即是说，$\Delta_L[A]$ 正比于 $|\det(\mathcal{M})|$. 由此得到，洛伦兹规范的传播函数的路径积分公式为

$$\begin{aligned} &\mathrm{i}\overline{D}^{ab}_{\mu\nu}(x-y) \\ &\quad = \frac{1}{N'_\delta}\int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\det(\mathcal{M})\delta_L(\mathcal{A})A_{a\mu}(x)A_{b\nu}(y)\exp\{\mathrm{i}I\}\,, \end{aligned} \tag{217}$$

$$\begin{aligned} &\mathrm{i}\overline{S}_f(x-y) \\ &\quad = \frac{1}{N'_\delta}\int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\det(\mathcal{M})\delta_L(\mathcal{A})\psi_f(x)\overline{\psi}_f(y)\exp\{\mathrm{i}I\}\,. \end{aligned} \tag{218}$$

其中

$$N'_\delta = \int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\det(\mathcal{M})\delta_L(\mathcal{A})\exp\{\mathrm{i}I\}\,.$$

相应的格林函数生成泛函是

$$\begin{aligned} &\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J] \\ &\quad = \frac{1}{N'_\delta}\int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\det(\mathcal{M})\delta_L(\mathcal{A})\exp\big\{\mathrm{i}(I+I_s^F+I_s^A)\big\}\,, \end{aligned} \tag{219}$$

其中 I_s^F, I_s^A 是源项的贡献

$$I_s^F = \int \mathrm{d}^4x \left[\sum_f \overline{\eta}_f(x)\psi_f(x) + \sum_f \overline{\psi}_f(x)\eta_f(x) \right],$$

$$I_s^A = \int \mathrm{d}^4x [J_a^\mu(x) A_{a\mu}(x)] .$$

如果采用广义的洛伦兹条件

$$\partial^\lambda A_{a\lambda}(x) - p_a(x) = 0 , \tag{220}$$

那么相应的因子 $\Delta'_L[\mathcal{A}]$ 应满足

$$\Delta'_L[\mathcal{A}] \int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y) \prod_{a,x} \delta\left(\partial^\lambda A^\Omega_{a\lambda}(x) - p_a(x)\right) = 1 . \tag{221}$$

重复以上计算将会发现 $\Delta'_L[\mathcal{A}]$ 等于 $\Delta_L[\mathcal{A}]$, 因此类似于 (206) 式, 对于任意规范不变量 $\mathcal{N}\left(\mathcal{A}, \psi, \overline{\psi}\right)$, 有

$$\begin{aligned} &\int \mathcal{D}[\mathcal{A}, \overline{\psi}, \psi] \mathcal{N}\left(\mathcal{A}, \psi, \overline{\psi}\right) \exp\{\mathrm{i}I\} \\ &= \left(\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y) \right) \int \mathcal{D}[\mathcal{A}, \overline{\psi}, \psi] \Delta_L[\mathcal{A}] \\ &\quad \times \prod_{a,x'} \delta\left(\partial^\lambda A_{a\lambda}(x') - p_a(x')\right) \mathcal{N}\left(\mathcal{A}, \psi, \overline{\psi}\right) \exp\{\mathrm{i}I\} . \end{aligned} \tag{222}$$

像以前一样处理，选取 $\exp\{-\frac{\mathrm{i}}{2\xi}\sum_a p_a^2(x)\}$ 作为权重函数将此式对 $p_a(x)$ 作平均得到

$$\begin{aligned} &\int \mathcal{D}[\mathcal{A}, \overline{\psi}, \psi] \mathcal{N}\left(\mathcal{A}, \psi, \overline{\psi}\right) \exp\{\mathrm{i}I\} \\ &= \frac{\left(\int \prod_y \mathrm{d}\Omega(y)\right)}{\int \prod_{by} \mathrm{d}p_b(y) \exp\left\{ -\frac{\mathrm{i}}{2\xi} \int \mathrm{d}^4x \sum_a p_a^2(x) \right\}} \\ &\quad \times \int \mathcal{D}[\mathcal{A}, \overline{\psi}, \psi] \Delta[\mathcal{A}] \mathcal{N}(\mathcal{A}, \psi, \overline{\psi}) \exp\{\mathrm{i}(I + I_{gf})\} , \end{aligned} \tag{223}$$

其中 I_{gf} 是规范确定项 $\mathcal{L}_{gf}$ 的贡献，即

$$I_{gf} = \int \mathrm{d}^4x[\mathcal{L}(x) + \mathcal{L}_{gf}(x)]\,,$$

$$\mathcal{L}_{gf}(x) = -\frac{1}{2\xi}\sum_a \left(\partial^\lambda A_{a\lambda}(x)\right)^2\,.$$

即是说，在公式 (206) 左边积分的被积函数中引入因子 $\Delta[A]$，并在拉氏函数中加入规范确定项也能够起到类似于引入规范条件的作用，由此又可以构成格林函数的一种新定义. 或者说，按下式定义新的格林函数生成泛函

$$\mathcal{Z}^{(\xi)}[\overline{\eta},\eta,J]$$

$$= \frac{1}{N_m}\int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\det(\mathcal{M})\exp\left\{\mathrm{i}\left(I + I_{gf} + I_s^F + I_s^A\right)\right\}, \quad (224)$$

其中

$$N_m = \int \mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi]\det(\mathcal{M})\exp\{\mathrm{i}(I + I_{gf})\}\,. \quad (225)$$

当 $\xi \to 0$ 时，(224) 变为洛伦兹规范的公式 (219).

在前两节的阿贝尔规范理论的情形，将规范确定项 $\mathcal{L}_{gf}$ 加到拉氏函数后，就可以作为计算 ξ 规范格林函数的有效拉氏函数，现在不行. 因为在 $\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J]$ 的路径积分公式 (224) 的被积函数中，还有一个与规范场有关的因子 $\det(\mathcal{M})$, 这相当于要求在有效拉氏函数中引入非局域相互作用. 为了能够采用局域性有效拉氏函数. Faddeev 和 Popov 引入了与规范场相耦合的辅助费米场

$$\omega_a(x),\ \overline{\omega}_a(x),$$

这种费米场却是洛伦兹标量，被称为 Faddeev–Popov 鬼场. 不管常系数，$\det(\mathcal{M})$ 可用费米场的路径积分表示为 (见本章 §5):

$$\int \mathcal{D}[\overline{\omega}_a,\omega_a]\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\,\overline{\omega}_a(x)\mathcal{M}_{ab}(x,y)\omega_b(y)\right\},$$

其中 $\mathcal{D}[\overline{\omega},\omega]$ 是积分元 $\prod_{a,x}\mathrm{d}\overline{\omega}_a(x)\mathrm{d}\omega_a(x)$. 代入 $\mathcal{M}_{ab}(x,y)$ 的表达式，并完成对于 y 的积分得到

$$\det(\mathcal{M})\propto\int\mathcal{D}[\overline{\omega},\omega]\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x\mathcal{L}_\omega(x)\right\}, \tag{226}$$

其中

$$\mathcal{L}_\omega(x)=-\partial^\lambda\overline{\omega}_a(x)\partial_\lambda\omega_a(x)+gf_{abc}(\partial^\lambda\overline{\omega}_a(x))\omega_b(x)A_{c\lambda}(x)\,. \tag{227}$$

这样，就可以用如下的局域性有效拉氏函数来计算 ξ 规范的格林函数：

$$\mathcal{L}_{\mathrm{eff}}=\mathcal{L}+\mathcal{L}_{gf}+\mathcal{L}_\omega(x)\,. \tag{228}$$

$\mathcal{L}_\omega$ 即是鬼场的拉氏函数 (包括鬼场 $-$ 规范场耦合). 由于鬼场被假定为标量场，所以 $\mathcal{L}_{\mathrm{eff}}$ 仍然是洛伦兹不变的. 将路径积分元 $\mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi]\mathcal{D}[\overline{\omega},\omega]$ 简写为

$$\mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi,\overline{\omega},\omega],$$

并且用 I_{eff} 代表如下的有效作用量

$$I_{\mathrm{eff}}=\int\mathrm{d}^4x\mathcal{L}_{\mathrm{eff}}(x)\,, \tag{229}$$

则传播函数的公式是

$$\mathrm{i}\overline{D}^{ab}_{\mu\nu}(x-y)=\frac{1}{N}\int\mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi,\overline{\omega},\omega]A_{a\mu}(x)A_{b\nu}(y)\exp\{\mathrm{i}I_{\mathrm{eff}}\}\,, \tag{230}$$

$$\mathrm{i}\overline{S}_f(x-y)=\frac{1}{N}\int\mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi,\overline{\omega},\omega]\psi_f(x)\overline{\psi}_f(y)\exp\{\mathrm{i}I_{\mathrm{eff}}\}\,. \tag{231}$$

其中

$$N=\int\mathcal{D}[A,\overline{\psi},\psi,\overline{\omega},\omega]\exp\{\mathrm{i}I_{\mathrm{eff}}\}\,.$$

鬼场的传播函数也按同样的方法定义

$$\mathrm{i}\overline{G}_f(x-y)=\frac{1}{N}\int\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi,\overline{\omega},\omega]\omega_a(x)\overline{\omega}_b(y)\exp\{\mathrm{i}I_{\mathrm{eff}}\}\,. \tag{232}$$

为了能够计算涉及鬼场的格林函数，当然要引入相应的源函数将格林函数生成泛函写成

$$\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J,\overline{\lambda},\lambda]=\frac{1}{N}\int\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi,\overline{\omega},\omega]\exp\{\mathrm{i}(I_{\mathrm{eff}}+I_s)\}\,. \tag{233}$$

I_s 代表源项

$$I_s=\int\mathrm{d}^4x[\mathcal{L}_s(x)]\,,$$

其中

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_s(x)=&\sum_f\overline{\eta}_f(x)\psi_f(x)+\sum_f\overline{\psi}_f(x)\eta_f(x)+J_a^\mu(x)A_{a\mu}(x)\\&+\overline{\lambda}_a(x)\omega_a(x)+\overline{\omega}_a(x)\lambda_a(x)\,,\end{aligned} \tag{234}$$

$\overline{\lambda}_a(x)$ 及 $\lambda_a(x)$ 是费米型源函数. 这时，附加到 $\mathcal{L}_{\mathrm{eff}}$ 中的 $\mathrm{i}\epsilon$ 项是

$$-\frac{\mathrm{i}}{2}\epsilon A_{a\mu}A_a^\mu+\mathrm{i}\epsilon\sum_f\overline{\psi}_f\psi_f+\mathrm{i}\epsilon\overline{\omega}_a\omega_a\,.$$

虚时间方法也和以前一样. 即引用正参量 α 将 $\mathcal{L}_{\mathrm{eff}}(x)$ 中所有场函数 (包括鬼场) 的时间微商乘以 $\frac{\mathrm{i}}{\alpha}$ 来构成 $\mathcal{L}_{\mathrm{eff}}(x,\alpha)$, 并定义如下的泛函：

$$\mathcal{Z}^{(\alpha)}[\overline{\eta},\eta,J,\overline{\lambda},\lambda]=\frac{1}{N_\alpha}\int\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi,\overline{\omega},\omega]\exp\Big\{\alpha\big(I_{\mathrm{eff}}^{(\alpha)}+I_s\big)\Big\}, \tag{235}$$

其中 $N_\alpha=\int\mathcal{D}[\mathcal{A},\overline{\psi},\psi,\overline{\omega},\omega]\exp\Big\{\alpha I_{\mathrm{eff}}^{(\alpha)}\Big\}$, 而

$$I_{\mathrm{eff}}^{(\alpha)}=\int\mathrm{d}^4x\big[\mathcal{L}_{\mathrm{eff}}(x,\alpha)\big]\,.$$

将这个泛函延拓到 α 的右半平面，则它在 α 趋于 i 时的极限即是 $\mathcal{Z}[\overline{\eta}, \eta, J, \overline{\lambda}, \lambda]$.

采用 $\mathcal{L}_{\text{eff}}$ 作为有效拉氏函数来定义格林函数，是与理论的非阿贝尔规范对称性相一致的. 正是 Faddeev–Popov 鬼场的引进解决了非阿贝尔规范理论的量子化问题并且促成重整化理论的发展.

参 考 文 献

[1] Dirac P A M. Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion, 1933, 3: 64.

[2] Feynman R P. Rev. Mod. Phys., 1948, 20: 267.

[3] Feynman R P, Hibbs A R. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York: McGraw-Hill, 1965.

[4] Berezin F A. The Method of Second Quantization. New York: Academic Press, 1966.

[5] Faddeev L D, Popov V N. Phys. Lett., 1967, B25: 29.

[6] Faddeev L D, Slavnov A A. Gauge Fields. New York: Benjamin, 1980.

[7] Itzykson C, Zuber J-B. Quantum Field Theory. New York: McGraw-Hill, 1980.

第十一章　量子电动力学

在本书比较靠后的章节，讲到一些自由场以及规范场理论的量子化. 但即便是用量子电动力学进行计算而超越一级微扰论，也要完成所需级别的重整化. 考虑到量子电动力学是场论最成功的部分，又是规范理论最简单的范例，本章将针对电子场 - 电磁场系统讲述这一理论的量子化和重整化的方法和概念. 我们将根据重整化理论中的 Bogoliubov-Parasiuk 定理论证理论的可重整性. 在构造散射矩阵方面，也着重参考 Bogoliubov 及其合作者的著作，但是仍然以原始的拉氏函数和量子化方法为依据，以及在表达方式上顾及通常的习惯.

以原始的场函数作为基本变量时，电磁耦合项不含场函数的时间微商，量子化问题比较简单. 我们将从 ξ 规范的拉氏函数出发进行正则量子化，确定哈密顿量算符，从而定义相应的格林函数及其生成泛函. 然后借助自由场情形的路径积分将一般的格林函数的生成泛函表示为路径积分. 此外，还要需要使用“重整化”格林函数生成泛函的路径积分，以及建立以“重整化”的场函数作为基本变量的算符描述.

已经知道，从数学方法上看，在场论的微扰展开中出现紫外发散，是由于场算符的编时积在时空点相同时缺乏适当的定义，而按照 Bogoliubov 等人在文献 [1]—[4] 中阐明的 Bogoliubov-Parasiuk 定理，能够在相互作用中加入适当的抵消项来弥补这种缺陷以及实现一种 R 减除运算而消除发散. 另一方面，通常所说的重整化意味着，借助于附加到原来的有效拉氏函数中的一些具有很特殊的形式的抵消项消除紫外发散. 试设想在拉氏函数中加入比较复杂的抵消项，一般说来，我们甚至不知道如何进行量子化. 如

果向原来的格林函数生成泛函的路径积分表示中的拉氏函数直接加入这种抵消项，或者在原来的算符描述下将复杂的抵消项添加到定义格林函数的公式中，则不容易看出所得到的公式相应于什么样的拉氏函数. 实际上，在保持明显协变形式的重整化理论中，是要借助于能够从原来的有效拉氏函数的分解中得到的那种形式的抵消项消除紫外发散. 鉴于 Bogoliubov-Parasiuk 定理，问题归结为借助于这种特殊的抵消项实现 R 减除运算. 其次，对于规范理论而言，还要求重整化后仍然具有规范理论的结构. 这正是我们证实量子电动力学的可重整性的依据. 在按习惯将原来的有效拉氏函数分解为基本部分与抵消项之和时，原始场函数不再是基本变量，而是采用正比于原始场函数的所谓重整化的场函数作为新的基本变量. 分解出来的基本部分保持着与原来的有效拉氏函数相同的形式，但是原始的参量已被“重整化”的参量代替. 在非阿贝尔规范场理论的情形，也是照样将用于构成格林函数生成泛函的路径积分的有效拉氏函数分解为基本部分与抵消项之和. 于是用这种新变量定义的“重整化”格林函数正比于原来的格林函数，它们只是在完成了重整化之后才是重整化格林函数. 所谓用这样的抵消项消除理论中的紫外发散，意思是使“重整化”的格林函数在准至任一级别时，都没有紫外发散. 所以，用重整化的场函数作为基本变量可以看成是重整化理论的一个基本观点. 根据原来的格林函数生成泛函的路径积分，经过积分变量的变换，即可构成“重整化”格林函数生成泛函的路径积分，它是用路径积分方法进行重整化的重要工具. 为了便于采用适当的重整化的场函数作为基本变量来定义散射过程的初末态和构造散射矩阵，从而也不求助于传统的渐近理论的某些假设，我们将建立一种以重整化的场函数作为基本变量的算符描述，其中重整化场函数的算符满足通常的等时对易 − 反对易关系式，哈密顿量算符保证重整化场函数的海森伯算符的时序积在真空态的平均值代表“重整化”的格林函数，当“微扰项”被忽略时，这

种平均值代表“重整化”的自由格林函数. 虽然在文献中缺乏现成的资料, 但是借助于所说的重整化格林函数生成泛函的路径积分, 可以方便地构成这样的算符描述 (见 §6). 而且, 我们的方法相当于事先撇开所有的“微扰项” (包括抵消项), 根据有效拉氏函数基本部分的自由项进行正则量子化, 确定自由场的场算符以及自由哈密顿量, 然后将这样的场算符的自由演化看作在相互作用绘景的演化, 并用它们代替“微扰项”中的经典量, 以得出在该绘景的相互作用项以及抵消项的算符. 因此, 要用算符方法进行重整化, 也宜于采用以重整化的场函数作为基本变量的算符描述. 应该注意, 代表重整化场函数的算符和以未重整化场函数为基本变量的算符描述中的场算符之间, 不满足重整化场函数与未重整化场函数之间的比例关系, 而且这两类描述中的算符作用于不同的态矢量空间.

既然在有效拉氏函数的分解中, 基本部分保持着最初的有效拉氏函数的结构, 当然可以认为, 完全的有效拉氏函数是在最初的有效拉氏函数中外加了上述特殊形式的抵消项而成的, 但是所有参量都理解为重整化参量. 算符方法中的的抵消项也相应地看成是外加的. 这在效果上正好是维持着最初的拉氏函数而实行了基本变量的转换, 场算符也就变成了重整化场函数的算符.

在按照质壳减除的方案实现重整化的条件下, 参量 m,e 代表电子的质量和电荷的实验值, 光子没有质量. 借助以重整化场函数为基本变量的算符描述, 由总哈密顿量 H 和自由密顿量 H_0 定义的格林函数分别是这种方案下的重整化的完全格林函数和自由格林函数. 既然如此, 就可以用 H_0 描述散射过程的初 − 末态中的物理粒子的自由运动, 而散射矩阵实质上是 H 和 H_0 所决定的相互作用绘景的时间演化算符 $U(\infty,-\infty)$ 在 H_0 的物理本征态所形成的基下的矩阵. 这正是我们实际采用的构造散射矩阵的方法. 如果要从渐近场算符的观点理解这种方法, 应该认为, 在质壳减除方案下确定的重整化场函数的海森伯算符当 t 的绝对值

非常大时等同于相应的渐近场算符 (比例系数是 1). 所以渐近场算符与重整化场函数 (而不是未重整化场函数) 的海森伯算符作用于相同的态矢量空间，而且自然满足通常的等时对易 − 反对易关系式. 根据这样的要求确定了任意时间的渐近场算符与重整化场的海森伯算符的关系之后，可以用类似于“约化”的步骤构造散射矩阵. 但是不再存在对于散射过程的初末态的“约化”问题. 至于传统的渐近理论，则假定当 t 的绝对值非常大时，未重整化场函数的海森伯算符与渐近场算符之间，符合未重整化场函数与重整化场函数之间的比例关系，而渐近场算符满足通常的等时对易 − 反对易关系式，这样的假定当然是不能直接运用的.

在理论方法和基本工具的讲解以及实际演算的各个有关部分，还参考了 Lifshitz-Pitaevskii,C.Itzkson-J.B.Zuber,J.D.Bjorken-D.Drell, 朱洪元、杨炳麟、戴元本等人的场论著作 [5−10] 以及一些作者原来的论文.

§1 有效拉氏函数. 经典场的能量动量和角动量

设 $\psi_\alpha(x), \psi^*_\beta(x)$ 和 $A^\mu(x)$ 分别代表电子场和电磁场的场函数，于是在习惯约定的 $c=\hbar=1$ 的单位制下，原始的拉氏函数密度为

$$\overline{\psi}(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m - e\gamma^\mu A_\mu)\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\,,$$

其中 e 代表 $-|e|$, 各种记号仍与前面一样.

由于理论是规范不变的，通常都选取一定的规范. 例如可以用广义洛伦兹条件代表简单的协变规范. 对于保持协变形式的量子化而言，更为方便的是采用第十章提到过的所谓 ξ 规范，即是在拉氏函数密度中加入所谓规范确定项

$$\mathcal{L}_{gf} = -\frac{1}{2\xi}(\partial^\mu A_\mu)^2\,,$$

于是得到一个有效拉氏函数

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_A + \mathcal{L}_\psi + \mathcal{L}_{A\psi}\,, \tag{1}$$

其中

$$\mathcal{L}_A = \mathcal{L}_{gf} - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\,, \tag{2}$$

$$\mathcal{L}_\psi = \overline{\psi}(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi\,, \tag{3}$$

$$\mathcal{L}_{A\psi} = -e\psi\gamma^\mu\psi A_\mu\,. \tag{4}$$

加入这样的规范确定项虽然不相当于选定一种通常意义下的规范，但是在阿贝尔规范理论中正如自由电磁场的情形，相当于以一种简单的方式联系着一族广义洛伦兹规范. 应该记住，$\psi_\alpha(x)$ 和 $\psi^*_\beta(x)$ 作为经典场函数看待时 (例如在进行正则量子化之前或者出现在路径积分中) 是费米量. 我们还约定，所有对于费米变量的微商都是左微商.

为了简便，我们常将 $A^\mu(x),\psi_\alpha(x),\psi^*_\beta(x)$ 记为 $\phi_r(x)$，于是经典拉氏运动方程可写成

$$\partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_a(x))} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_a(x)}\,.$$

设参考系作无限小的平移，使坐标为 x^μ 的点相对于新参考系的坐标变为

$$x'^\mu \approx x^\mu + \epsilon^\mu\,,$$

其中 ϵ^μ 为无限小实常数. 由于时空平移不改变场函数 $\phi_r(x)$ 的下标，故对于新参考系而言的场函数 ϕ'_r 满足

$$\phi'_r(x') = \phi_r(x)\,. \tag{5}$$

$\mathcal{L}$ 的时空平移不变性意味着

$$\mathcal{L}\big(\phi'(x'),\partial'\phi'(x')\big) = \mathcal{L}\big(\phi(x),\partial\phi(x)\big)\,.$$

在 x 附近将此式左边展开，取到 ϵ^μ 的一级项，得到

$$\mathcal{L}\big(\phi'(x'),\partial'\phi'(x')\big)\approx\mathcal{L}\big(\phi(x'),\partial\phi(x')\big)+\epsilon^\mu\partial_\mu\mathcal{L}\big(\phi(x'),\partial\phi(x')\big)\,.$$

由 (5) 式有

$$\begin{aligned}\phi'_r(x^\mu+\epsilon^\mu)&=\phi_r(x^\mu)\,,\\ \phi'_r(x)&\approx\phi_r(x)-\epsilon^\mu\partial_\mu\phi_r(x)\,,\\ \partial_\nu\phi'_r(x)&\approx\partial_\nu\phi_r(x)-\epsilon^\mu\partial_\mu\partial_\nu\phi_r(x)\,.\end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned}&\mathcal{L}\big(\phi'(x'),\partial'\phi'(x')\big)\\ &\quad\approx\mathcal{L}\big(\phi(x),\partial\phi(x)\big)+\epsilon^\mu\partial_\mu\mathcal{L}\\ &\qquad-\epsilon^\mu\partial_\mu\phi_r(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_r(x)}-\epsilon^\mu\big(\partial_\mu\partial_\nu\phi_r(x)\big)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi_r(x))}\,.\end{aligned}$$

可见

$$\epsilon^\mu\partial_\mu\phi_r(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_r(x)}+\epsilon^\mu\big(\partial_\mu\partial_\nu\phi_r(x)\big)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi_r(x))}-\epsilon^\mu\partial_\mu\mathcal{L}=0\,.$$

利用运动方程得出

$$\begin{aligned}&\epsilon^\mu\partial_\mu\phi_r(x)\partial_\nu\Big(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi_r(x))}\Big)\\ &\qquad+\epsilon^\mu\partial_\nu\partial_\mu\phi_r(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi_r(x))}-\epsilon^\mu\partial_\mu\mathcal{L}=0\,.\end{aligned}$$

即

$$\epsilon^\mu\partial_\nu\Big(\partial_\mu\phi_r(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi_r(x))}\Big)-\epsilon^\mu\partial_\mu\mathcal{L}=0\,.$$

或

$$\partial_\nu T^{\mu\nu}=0\,,$$

其中

$$T^{\mu\nu} = \partial^{\mu}\phi_r(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^{\nu}\phi_r(x))} - g^{\mu\nu}\mathcal{L}\,, \tag{6}$$

这表明 $\int \mathrm{d}^3x T^{\mu 0}$ 是守恒量，亦即动量 P^{μ}：

$$P^{\mu} = \int \mathrm{d}^3x\Big\{\partial^{\mu}\phi_r(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\dot{\phi}_r(x))} - g^{\mu 0}\mathcal{L}\Big\}\,. \tag{7}$$

由于 $\mathcal{L}$ 不含 $\dot{\psi}^*_{\alpha}$，而 $\dot{A}^{\nu}$ 只出现在 $\mathcal{L}_A$ 中，有

$$P^{l} = \int \mathrm{d}^3x\Big\{\partial^{l}A^{\nu}\frac{\partial\mathcal{L}_A}{\partial(\dot{A}^{\nu})} + \partial^{l}\psi_{\alpha}\frac{\partial\mathcal{L}_{\psi}}{\partial(\dot{\psi}_{\alpha})}\Big\}\,,$$

$$P^{0} = \int \mathrm{d}^3x\Big\{\dot{A}^{\nu}\frac{\partial\mathcal{L}_A}{\partial(\dot{A}^{\nu})} + \dot{\psi}_{\alpha}\frac{\partial\mathcal{L}_{\psi}}{\partial(\dot{\psi}_{\alpha})} - \mathcal{L}\Big\}\,.$$

而

$$\frac{\partial\mathcal{L}_{\psi}}{\partial(\dot{\psi}_{\alpha})} = \frac{\partial}{\partial(\dot{\psi}_{\alpha})}(\psi^*_{\beta}\,\mathrm{i}\,\dot{\psi}_{\beta}) = -\mathrm{i}\,\psi^*_{\alpha}\,.$$

故

$$P^{l} = \int \mathrm{d}^3x\Big\{\partial^{l}A^{\nu}\frac{\partial\mathcal{L}_A}{\partial(\dot{A}^{\nu})} + \psi^*_{\alpha}\,\mathrm{i}\,\partial^{l}\psi_{\alpha}\Big\}\,, \tag{8}$$

$$P^{0} = \int \mathrm{d}^3x\Big\{\dot{A}^{\nu}\frac{\partial\mathcal{L}_A}{\partial(\dot{A}^{\nu})} - \mathcal{L}_A - \mathcal{L}_{A\psi} + \overline{\psi}(-\mathrm{i}\gamma^{l}\partial_{l} + m)\psi\Big\}\,. \tag{9}$$

再设参考系作无限小的齐次洛伦兹变换，使坐标为 x_{μ} 的点相对于新参考系的坐标变为

$$x'_{\mu} \approx x_{\mu} + \epsilon_{\mu\nu}x^{\nu}\,,$$

其中 $\epsilon_{\mu\nu}$ 为无限小实常数，满足 $\epsilon_{\mu\nu} + \epsilon_{\nu\mu} = 0$. 对于新参考系而言

的场函数 $A',\psi',\overline{\psi'}$ 满足

$$A'_\mu(x') \approx A_\mu(x) + \epsilon_{\mu\nu}A^\nu\,,$$
$$A'^\mu(x') \approx A^\mu(x) + \epsilon^\mu_\nu A^\nu\,,$$
$$\psi'(x') = S\psi(x)\,,$$
$$\overline{\psi'}(x') = \overline{\psi}(x)S^{-1}\,,$$

其中

$$\epsilon^\mu_\nu = g^{\mu\lambda}\epsilon_{\lambda\nu}\,,$$
$$S \approx 1 + \frac{1}{8}\epsilon_{\mu\nu}\{\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu\}\,,$$
$$S^{-1} \approx 1 - \frac{1}{8}\epsilon_{\mu\nu}\{\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu\}\,.$$

或

$$\psi'_\alpha(x') = S_{\alpha\beta}\psi_\beta(x)\,, \tag{10}$$
$$\psi'^*_\alpha(x') = S^*_{\alpha\beta}\psi^*_\beta(x)\,. \tag{11}$$

我们将这种变换式简写为

$$\phi'_r(x') = L_{rs}\phi_s(x)\,, \tag{12}$$
$$L_{rs} \approx \delta_{rs} + \frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu}_{rs}\,, \tag{13}$$

其中 $\Sigma^{\mu\nu}_{rs}$ 对于 $\mu\nu$ 的交换是反对称的.

在 x 附近将 $\mathcal{L}\big(\phi'(x'),\partial'\phi'(x')\big)$ 展开，取到 $\epsilon_{\mu\nu}$ 的一级项，得到

$$\mathcal{L}\big(\phi'(x'),\partial'\phi'(x')\big)$$
$$\approx \mathcal{L}\big(\phi(x'),\partial\phi(x')\big) + \epsilon_{\mu\lambda}x^\lambda\partial^\mu\mathcal{L}\big(\phi(x'),\partial\phi(x')\big)\,.$$

由 (12) 式有

$$\phi'_r(x_\mu + \epsilon_{\mu\nu}x^\nu) = L_{rs}\phi_s(x_\mu)\,,$$
$$\phi'_r(x) \approx L_{rs}\phi_s(x) - \epsilon_{\mu\nu}x^\nu L_{rs}\partial^\mu\phi_s(x)\,.$$

因此

$$\phi'_r(x) \approx \phi_r(x) + \frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu}_{rs}\phi_s(x) - \epsilon_{\mu\lambda}x^\lambda\partial^\mu\phi_r(x)\,,$$
$$\partial^\nu\phi'_r(x) \approx \partial^\nu\phi_r(x) + \frac{1}{2}\epsilon_{\mu\lambda}\Sigma^{\mu\lambda}_{rs}\,\partial^\nu\phi_s(x) - \epsilon_{\mu\lambda}\partial^\nu\left(x^\lambda\partial^\mu\phi_r(x)\right).$$

故

$$\mathcal{L}\big(\phi'(x'),\partial'\phi'(x')\big) \approx \mathcal{L}\big(\phi(x),\partial\phi(x)\big) + \epsilon_{\mu\lambda}x^\lambda\partial^\mu\mathcal{L} + \left\{\tfrac{1}{2}\epsilon_{\mu\lambda}\Sigma^{\mu\lambda}_{rs}\phi_s(x) - \epsilon_{\mu\lambda}x^\lambda\partial^\mu\phi_r(x)\right\}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_r(x)} + \left\{\tfrac{1}{2}\epsilon_{\mu\lambda}\Sigma^{\mu\lambda}_{rs}\,\partial^\nu\phi_s(x) - \epsilon_{\mu\lambda}\partial^\nu\left(x^\lambda\partial^\mu\phi_r(x)\right)\right\}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi_r(x))}\,.$$

由此和 $\mathcal{L}$ 的洛伦兹不变性以及利用运动方程可得

$$\partial^\nu\left\{\left(\tfrac{1}{2}\epsilon_{\mu\lambda}\Sigma^{\mu\lambda}_{rs}\phi_s(x) - \epsilon_{\mu\lambda}x^\lambda\partial^\mu\phi_r(x)\right)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi_r(x))}\right\} + \epsilon_{\mu\lambda}x^\lambda\partial^\mu\mathcal{L} = 0\,.$$

注意 $\epsilon_{\mu\lambda}$ 对于 μ,λ 的交换是反对称的，即得

$$\partial_\nu\mathcal{M}^{\nu\mu\lambda} = 0\,, \tag{14}$$

其中

$$\mathcal{M}^{\nu\mu\lambda} = x^\mu T^{\lambda\nu} - x^\lambda T^{\mu\nu} + \Sigma^{\mu\lambda}_{rs}\phi_s(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi_r(x))}\,.$$

(14) 式表明，$\int \mathrm{d}^3x\mathcal{M}^{0\mu\lambda}$ 是守恒量. 当 μ 和 λ 限制为 $1,2,3$ 时，只有三个独立分量，它们即是角动量的分量：

$$M^{kl} = \int \mathrm{d}^3x\left\{x^kT^{l0} - x^lT^{k0} + \Sigma^{kl}_{rs}\phi_s(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\dot{\phi}_r(x))}\right\}. \tag{15}$$

由于 $\mathcal{L}_{A\psi}$ 不含 $\dot{\phi}_r$, M^{kl} 来自 $\mathcal{L}_A$ 和 $\mathcal{L}_\psi$, 可表示为

$$M^{kl} = M_A^{kl} + M_\psi^{kl}\,, \tag{16}$$

$$M_A^{kl} = \int \mathrm{d}^3x \Big\{ \big(x^k\partial^l\phi_r - x^l\partial^k\phi_r + \Sigma_{rs}^{kl}\phi_s\big) \frac{\partial\mathcal{L}_A}{\partial(\dot{\phi}_r(x))} \Big\}\,, \tag{17}$$

$$M_\psi^{kl} = \int \mathrm{d}^3x \Big\{ \big(x^k\partial^l\phi_r - x^l\partial^k\phi_r + \Sigma_{rs}^{kl}\phi_s(x)\big) \frac{\partial\mathcal{L}_\psi}{\partial(\dot{\phi}_r(x))} \Big\}\,. \tag{18}$$

现在来写出这些公式中包含 Σ_{rs}^{kl} 的项. 先看电子场的部分. 在 (15) 式中, 由于 $\mathcal{L}_\psi$ 不含 $\dot{\psi}_\alpha^*$, ϕ_r 只能是 ψ 的分量. 既然如此, ϕ_s 也必定是 ψ 的分量 (因为洛伦兹变换不能使 ψ_β 与 ψ_α^* 混合), 所以 Σ_{rs}^{kl} 应该按 (7) 式决定. 于是 (18) 式右边的最末项可写成

$$\Sigma_{rs}^{kl}\phi_s(x)\frac{\partial\mathcal{L}_\psi}{\partial(\dot{\phi}_r(x))} = \mathrm{i}\,\psi_\alpha^*\,\Sigma_{\alpha\beta}^{kl}\psi_\beta\,,$$

其中

$$\Sigma_{\alpha\beta}^{kl} = \frac{1}{4}(\gamma^k\gamma^l - \gamma^l\gamma^k)_{\alpha\beta}\,. \tag{19}$$

对于电磁场的情形, (12) 式即是

$$A'^\sigma(x') = L_\lambda^\sigma A^\lambda(x) \approx A^\sigma(x) + \epsilon_{\mu\nu}g_\lambda^\nu g^{\sigma\mu}A^\lambda(x)\,.$$

故 (13) 式变为

$$L_\lambda^\sigma = g_\lambda^\sigma + \frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu}\Sigma_\lambda^{\mu\nu\sigma}\,, \tag{20}$$

$$\Sigma_\lambda^{\mu\nu\sigma} = g^{\sigma\mu}g_\lambda^\nu - g^{\sigma\nu}g_\lambda^\mu\,. \tag{21}$$

这样, 由 (17) 和 (18) 式得

$$M_A^{kl} = \int \mathrm{d}^3x \Big\{ \frac{\partial\mathcal{L}_A}{\partial\dot{A}^\lambda}\big(x^k\partial^l A^\sigma - x^l\partial^k A^\sigma + \Sigma_\lambda^{kl\sigma}A^\lambda\big) \Big\}\,, \tag{22}$$

$$M_\psi^{kl} = \int \mathrm{d}^3x \big\{ \psi_\alpha^*\,\mathrm{i}\,\big(x^k\partial^l\psi_\alpha - x^l\partial^k\psi_\alpha\big) + \mathrm{i}\,\psi_\alpha^*\Sigma_{\alpha\beta}^{kl}\psi_\beta \big\}\,. \tag{23}$$

在存在耦合项 $\mathcal{L}_{A\psi}$ 的情形，仍然可以由电子场的运动方程证明电磁流 $j^{\mu}=\overline{\psi}\gamma^{\mu}\psi$ 是守恒流. 实际上其守恒性质来自 $\mathcal{L}$ 对于如下的变换的不变性

$$\psi_{\alpha}(x)\to\psi'_{\alpha}(x)\approx\psi_{\alpha}(x)+\mathrm{i}\delta\phi\psi_{\alpha}(x)\,,$$
$$\psi^{*}_{\beta}(x)\to\psi'^{*}_{\beta}(x)\approx\psi^{*}_{\beta}(x)-\mathrm{i}\delta\phi\psi^{*}_{\beta}(x)\,,$$

其中 $\delta\phi$ 是任意无穷小实数. 由

$$\mathcal{L}\big(A,\partial A,\psi,\partial\psi,\overline{\psi}\big)=\mathcal{L}\big(A,\partial A,\psi',\partial\psi',\overline{\psi'}\big)\,,$$

得

$$\psi_{\alpha}(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_{\alpha}(x)}+\partial_{\mu}\psi_{\alpha}(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_{\mu}\psi_{\alpha}(x))}-\psi^{*}_{\beta}(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi^{*}_{\beta}(x)}=0\,.$$

利用运动方程有

$$\partial_{\mu}\Big(\psi_{\alpha}(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_{\mu}\psi_{\alpha}(x))}\Big)=0\,.$$

或

$$\partial_{\mu}j^{\mu}(x)=0\,.$$

相应的守恒量 $\int\mathrm{d}^3x\,ej^{0}(x)$ 即是电荷：

$$eQ=\int\mathrm{d}^3x\,e\,\psi^{*}_{\alpha}(x)\psi_{\alpha}(x)\,.\tag{24}$$

最后，简略地提一下理论的电荷共轭不变性. 在第八章已经说明，电子场 $\psi(x)$,$\overline{\psi}(x)$ 的电荷共轭变换为

$$\psi(x)\to\psi^{C}(x)=\eta_c C\widetilde{\overline{\psi}}(x)\,,$$
$$\overline{\psi}(x)\to\overline{\psi}^{C}(x)=-\eta^{*}_{c}\,\widetilde{\psi}(x)C^{-1}\,,$$
$$C=\mathrm{i}\gamma^2\gamma^0\,,\quad\ \eta^{*}_{c}\,\eta_c=1\,,$$

注意 $C^{-1}\gamma^\mu C$ 等于 $-\widetilde{\gamma^\mu}$, 有

$$\overline{\psi}^C(x)\psi^C(x) = -\widetilde{\psi}(x)\widetilde{\overline{\psi}}(x) = -\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\alpha(x)\,,$$

$$\begin{aligned}\overline{\psi}^C(x)\gamma^\mu\psi^C(x) &= -\widetilde{\psi}(x)C^{-1}\gamma^\mu C\widetilde{\overline{\psi}}(x)\\ &= \widetilde{\psi}(x)\widetilde{\gamma^\mu}\widetilde{\overline{\psi}}(x) = \psi_\beta(x)\gamma^\mu_{\alpha\beta}\overline{\psi}_\alpha(x)\,,\end{aligned}$$

$$\overline{\psi}^C(x)\gamma^\mu\partial_\mu\psi^C(x) = \psi_\beta(x)\gamma^\mu_{\alpha\beta}\partial_\mu\overline{\psi}_\alpha(x) = -\{\partial_\mu\overline{\psi}(x)\}\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)\,,$$

$$\{\partial_\mu\overline{\psi}^C(x)\}\gamma^\mu\partial_\mu\psi^C(x) = \{\partial_\mu\psi_\alpha(x)\}\widetilde{\gamma^\mu}_{\alpha\beta}\overline{\psi}_\beta(x)\,.$$

由于 Dirac 场函数在量子化之前是非算符的费米量，在电荷共轭变换下 $\overline{\psi}(x)\psi(x)$ 和 $\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x) - \{\partial_\mu\overline{\psi}(x)\}\gamma^\mu\psi(x)$ 保持不变，$\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$ 则反号. 因此拉氏函数的纯电子场部分在不计一个散度项时是电荷共轭不变的，经典电磁流可以表示为

$$j^\mu(x) = \frac{1}{2}\{\overline{\psi}\gamma^\mu\psi - \overline{\psi}^C(x)\gamma^\mu\psi^C(x)\}\,. \tag{25}$$

由此和电磁场的运动方程也看到，$A_\mu(x)$ 在电荷共轭变换下反号. 所以，耦合项 $\mathcal{L}_{A\psi}$ 也是电荷共轭不变的.

§2 正则动量与量子条件

电子场的拉氏运动方程线性地包含场函数的一级时间微商，因此相当于正则方程，不应当再定义共轭于 ψ_α 或 ψ^*_β 的正则动量 (否则会不必要地引进多余的变量和约束条件，例如参看文献 [1]). 电磁场的正则动量为

$$\Pi_\mu(x) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{A}^\mu}\,,$$

其中 $\mathcal{L}$ 的电子场部分和耦合项没有贡献，而抛弃一个散度项可将 $\mathcal{L}_A$ 改为

$$\frac{1}{2}\Big(1-\frac{1}{\xi}\Big)(\partial^\nu A_\nu)^2 - \frac{1}{2}(\partial_\mu A_\nu)(\partial^\mu A^\nu)\,.$$

故

$$\Pi_0 = -\dot{A}_0 + \left(1 - \tfrac{1}{\xi}\right)\partial^\nu A_\nu \,,$$
$$\Pi_l = -\dot{A}_l \,.$$

用 Π^μ 代表 $g^{\mu\nu}\Pi_\nu$ 并解出 $\dot{A}_\mu$ 得

$$\dot{A}_0 = -\xi\Pi_0 + (\xi - 1)\partial^l A_l \,,$$
$$\dot{A}_l = -\Pi_l \,.$$

因此

$$P^l = \int \mathrm{d}^3x \{\Pi_\mu \partial^l A^\mu + \psi^*_\alpha \,\mathrm{i}\,\partial^l \psi_\alpha\} \,, \tag{26}$$
$$H = P^0 = H_\psi + H_{A\psi} + H_A \,, \tag{27}$$
$$H_\psi = \int \mathrm{d}^3x \overline{\psi}(-\mathrm{i}\gamma^l \partial_l + m)\psi \,, \tag{28}$$
$$H_{A\psi} = \int \mathrm{d}^3x \, e \, j^\mu A_\mu \,, \tag{29}$$
$$H_A = \int \mathrm{d}^3x \Big\{ \frac{1}{2}(1-\xi)(\Pi_0 - \partial^l A_l)^2 - \frac{1}{2}\Pi_\mu \Pi^\mu + \frac{1}{2}(\partial_l A_\nu)(\partial^l A^\nu) \Big\} \,. \tag{30}$$

其次，表示电磁场的角动量的 (19) 式可写成

$$M^{kl}_A = \int \mathrm{d}^3x \Pi_\sigma \{x^k \partial^l A^\sigma - x^l \partial^k A^\sigma + \Sigma^{kl\sigma}_\lambda A^\lambda\} \,. \tag{31}$$

将 ψ_α, A^μ, Π_ν 的经典运动方程写成正则形式有

$$\mathrm{i}\,\dot{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}, t) = \frac{\delta}{\delta\psi^*_\alpha(\boldsymbol{x}, t)} H \,, \tag{32}$$
$$\dot{A}^\mu(\boldsymbol{x}, t) = \frac{\delta}{\delta\Pi_\mu(\boldsymbol{x}, t)} H \,, \tag{33}$$
$$\dot{\Pi}_\nu(\boldsymbol{x}, t) = -\frac{\delta}{\delta A^\nu(\boldsymbol{x}, t)} H \,. \tag{34}$$

可见在薛定谔绘景的量子条件应为

$$\{\psi_\alpha(\boldsymbol{x}),\psi^\dagger_\beta(\boldsymbol{y})\}=\delta_{\alpha\beta}\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\,, \tag{35}$$

$$\{\psi_\alpha(\boldsymbol{x}),\psi_\beta(\boldsymbol{y})\}=\{\psi^\dagger_\alpha(\boldsymbol{x}),\psi^\dagger_\beta(\boldsymbol{y})\}=0\,, \tag{36}$$

$$[A^\mu(\boldsymbol{x}),\Pi_\nu(\boldsymbol{y})]=\mathrm{i}\,g^\mu_\nu\,\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\,, \tag{37}$$

$$[A^\mu(\boldsymbol{x}),A^\nu(\boldsymbol{y})]=[\Pi_\mu(\boldsymbol{x}),\Pi_\nu(\boldsymbol{y})]=0\,, \tag{38}$$

其中 ψ_β 的厄米共轭 $\psi^\dagger_\beta$ 即是 ψ^*_β 的算符，而算符 $A_\mu(\boldsymbol{x})$ 和 $\Pi_\mu(\boldsymbol{x})$ 是厄米的：

$$A^\dagger_\mu(\boldsymbol{x})=A_\mu(\boldsymbol{x})\,, \tag{39}$$

$$\Pi^\dagger_\mu(\boldsymbol{x})=\Pi_\mu(\boldsymbol{x})\,. \tag{40}$$

(直接用经典场函数的记号代表相应的算符，不会造成误解.)

在将哈密顿量以及动量、角动量等过渡到算符时，很容易保持理论的电荷共轭不变性. 例如在 $H_{A\psi}$ 中需要保持 $j^\mu(\boldsymbol{x})$ 在电荷共轭下反号，因此应该将其写成

$$\begin{aligned}j^\mu(\boldsymbol{x})&=\frac{1}{2}\{\overline{\psi}(\boldsymbol{x})\gamma^\mu\psi(\boldsymbol{x})-\overline{\psi}^C(\boldsymbol{x})\gamma^\mu\psi^C(x)\}\\&=\frac{1}{2}\{\overline{\psi}(\boldsymbol{x})\gamma^\mu\psi(\boldsymbol{x})-\widetilde{\psi}(\boldsymbol{x})\widetilde{\gamma^\mu}\widetilde{\overline{\psi}}(\boldsymbol{x})\}\,.\end{aligned} \tag{41}$$

现在，$\overline{\psi}(\boldsymbol{x})\equiv\psi^\dagger(\boldsymbol{x})\gamma^0$，它是由 $\psi^\dagger_\alpha(\boldsymbol{x})\gamma^0_{\alpha\beta}$ 排成的 1×4 矩阵. 算符 $-\widetilde{\psi}(\boldsymbol{x})\widetilde{\gamma^\mu}\widetilde{\overline{\psi}}(\boldsymbol{x})$ 和 $\overline{\psi}(\boldsymbol{x})\gamma^\mu\psi(\boldsymbol{x})$ 不相等，而是相差一个非算符项，如果用 $\overline{\psi}(\boldsymbol{x})\gamma^\mu\psi(\boldsymbol{x})$ 代表 $j^\mu(\boldsymbol{x})$，会使哈密顿量差一个算符项. 又如，H_ψ 的算符可写成

$$\int\mathrm{d}^3x\frac{1}{2}\left\{\overline{\psi}(\boldsymbol{x})(-\mathrm{i}\gamma^l\partial_l+m)\psi(\boldsymbol{x})+\overline{\psi}^C(\boldsymbol{x})(-\mathrm{i}\gamma^l\partial_l+m)\psi^C(\boldsymbol{x})\right\}. \tag{42}$$

不作这样的改写而维持 (28) 式，只是使哈密顿量差一个相加的非算符项. 类似地，哈密顿量的其他部分以及动量、角动量等，都实质上是电荷共轭不变的，不必改写.

作为对于量子条件的最简单的检验，可以比较一下 $A_\mu, \Pi_\nu, \psi_\alpha$ 的海森伯运动方程与经典运动方程的形式. 将这些量在薛定谔绘景和海森伯绘景的算符简记为 $\phi_r(\boldsymbol{x})$ 和 $\phi_r^h(x)$, 于是

$$\begin{aligned}
\phi_r^h(x) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}\phi_r(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\,,\\
\dot{\phi}_r^h(x) &= \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}[H,\phi_r(\boldsymbol{x})]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\,.
\end{aligned}$$

利用上面的量子条件将 $[H,\phi_r(\boldsymbol{x})]$ 算出，可证实这些算符满足

$$\begin{aligned}
&\dot{A}_0^h(x) = -\xi\Pi_0^h(x) + (\xi-1)\partial^l A_l^h(x)\,,\\
&\dot{A}_l^h(x) = -\Pi_l^h(x)\,,\\
&\dot{\Pi}_0^h(x) - \partial^l\partial_l A_0^h(x) = -ej_0^h(x)\,,\\
&\dot{\Pi}_l^h(x) - \partial^j\partial_j A_l^h(x)\\
&\qquad\qquad + (1-\xi)\partial_l\big(\Pi_0^h(x) - \partial^j A_j^h(x)\big) = -ej_l^h(x)\,,\\
&\big(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m - e\gamma^\mu A_\mu^h(x)\big)\psi^h(x) = 0\,.
\end{aligned}$$

即是说，这种量子条件确是保证海森伯场算符的运动方程与经典运动方程的形式一致.

由 $\psi^h(x)$ 的方程式取厄米共轭得出

$$\mathrm{i}\partial_\mu\overline{\psi}^h(x)\gamma^\mu + \overline{\psi}^h(x)\big(m + e\gamma^\mu A_\mu^h(x)\big) = 0\,,$$

其中 $\overline{\psi}^h(x)$ 代表 $\big(\overline{\psi}^h(x)\big)^\dagger\gamma^0$, 它也正是 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}\overline{\psi}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}$. 这样也保证了

$$\partial_\mu\big(\overline{\psi}^h(x)\gamma^\mu\psi^h(x)\big) = 0\,.$$

再用 $\psi^{hC}(x)$ 和 $\overline{\psi}^{hC}$ 代表 $\psi^h(x)$ 和 $\overline{\psi}^h$ 的电荷共轭，于是有

$$\begin{aligned}
\psi^{hC}(x) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H^C t}\,\psi^C(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H^C t} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}\,\psi^C(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\,,\\
\overline{\psi}^{hC} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H^C t}\,\overline{\psi}^C(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H^C t} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}\,\overline{\psi}^C(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\,,
\end{aligned}$$

以及

$$
\begin{aligned}
&\left(\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m+e\gamma^{\mu}A_{\mu}^{h}(x)\right)\psi^{hC}(x)=0\,,\\
&\mathrm{i}\,\partial_{\mu}\overline{\psi}^{hC}(x)\gamma^{\mu}+\overline{\psi}^{hC}(x)\left(m-e\gamma^{\mu}A_{\mu}^{h}(x)\right)=0\,,\\
&\partial_{\mu}\left(\overline{\psi}^{hC}(x)\gamma^{\mu}\psi^{hC}(x)\right)=0\,.
\end{aligned}
$$

这也表明，算符 $j^{\mu h}(x)$ 满足

$$
\partial_{\mu}j^{\mu h}(x)=0\,.
$$

还可证实，动量算符和角动量算符符合一些基本要求，即可以表示为厄米算符，动量算符的分量互相对易，角动量算符的分量之间以及它们与动量算符之间满足正确的对易关系，这些算符都与哈密顿量算符对易．而且，将 $[\phi_r(\boldsymbol{x}),P^l]$ 算出，会得到 $\mathrm{i}\partial^l\phi_r(\boldsymbol{x})$, 因此海森伯场算符满足

$$
\partial^{\mu}A_{\nu}^{h}(x)=\mathrm{i}\,[P^{\mu},A_{\nu}^{h}(x)]\,, \tag{43}
$$

$$
\partial^{\mu}\Pi_{\nu}^{h}(x)=\mathrm{i}\,[P^{\mu},\Pi_{\nu}^{h}(x)]\,, \tag{44}
$$

$$
\partial^{\mu}\psi_{\alpha}^{h}(x)=\mathrm{i}\,[P^{\mu},\psi_{\alpha}^{h}(x)]\,. \tag{45}
$$

§3 格 林 函 数

3.1 格林函数和格林函数生成泛函

在原始的理论形式下建立一些工具，有助于进行重整化以及发展可以在重整化后的理论中使用的方法．对于在微扰计算中遇到的发散积分，可以用适当的方法进行正规化．一般的完全格林函数是一组海森伯场算符的时序积在严格真空态的平均值

$$
\begin{aligned}
&G_{\alpha_1\alpha_2\cdots\beta_1\beta_2\cdots\nu_1\nu_2\cdots}(x_1x_2,\cdots,y_1y_2,\cdots,z_1z_2,\cdots)\\
&\quad=\langle\langle 0|T\{\psi_{\alpha_1}^{h}(x_1)\psi_{\alpha_2}^{h}(x_2)\cdots\overline{\psi}_{\beta_1}^{h}(y_1)\\
&\qquad\times\overline{\psi}_{\beta_2}^{h}(y_2)\cdots A_{\nu_1}^{h}(z_1)A_{\nu_2}^{h}(z_2)\cdots\}|0\rangle\rangle\,.
\end{aligned} \tag{46}
$$

其中 $|0\rangle\rangle$ 是归一的，满足 $H|0\rangle\rangle = 0$, T 是时间编序算符. 需记住，在时序积中电磁场算符之间以及它们与电子场算符之间互相可对易，而电子场算符则是互相反对易的. 例如

$$\begin{aligned}
T\big(\psi^h_\alpha(x)\overline{\psi}^h_\beta(y)\big) &= \theta(x^0-y^0)\psi^h_\alpha(x)\overline{\psi}^h_\beta(y) \\
&\quad -\theta(y^0-x^0)\overline{\psi}^h_\beta(y)\psi^h_\alpha(x)\,, \\
T\big(A^h_\mu(x)A^h_\nu(y)\big) &= \theta(x^0-y^0)A^h_\mu(x)A^h_\nu(y) \\
&\quad +\theta(y^0-x^0)A^h_\nu(y)A^h_\mu(x)\,,
\end{aligned}$$

其中 $\theta(t)$ 当 $t>0$ 时等于 1, 当 $t<0$ 时等于 0. 由于在拉氏函数中包含 $-\frac{1}{2\xi}(\partial^\mu A_\mu)^2$ 作为规范确定项，由 (46) 式定义的量称为 ξ 规范的格林函数. 相应的格林函数生成泛函可表示为

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J] = \langle\langle 0|T\exp\Big\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\Big(&\overline{\eta}_\alpha(x)\psi^h_\alpha(x) \\
&+\overline{\psi}^h_\beta(x)\eta_\beta(x)+J^\mu(x)A^h_\mu(x)\Big)\Big\}|0\rangle\rangle\,. \qquad (47)
\end{aligned}$$

以前已经说明过，$\overline{\eta}_\alpha(x),\eta_\beta(x)$ 和 $J^\mu(x)$ 称为源，它们都是非算符函数. $\overline{\eta}(x)$ 和 $\eta(x)$ 是费米型的，$J^\mu(x)$ 是玻色型的. 因此泛函微商算子 $\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}_\alpha}$ 与 $\frac{\delta}{\delta\eta_\beta}$ 之间以及它们与电子场算符之间是互相反对易的. 故

$$\begin{aligned}
\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}_\alpha(x_1)}\int \mathrm{d}^4x\overline{\eta}(x)\psi^h(x) &= \psi^h_\alpha(x_1)\,, \\
\frac{\delta}{\delta\eta_\beta(y)}\int \mathrm{d}^4x\overline{\psi}^h(x)\eta(x) &= -\overline{\psi}^h_\beta(y)\,, \\
\frac{\delta}{\delta J^\nu(z)}\int \mathrm{d}^4xJ^\mu(x)A^h_\mu(x) &= A^h_\mu(z)\,.
\end{aligned}$$

其中 $\overline{\eta}(x)\psi^h(x)$ 和 $\overline{\psi}^h(x)\eta(x)$ 分别代表 $\overline{\eta}_\alpha(x)\psi^h_\alpha(x)$ 和 $\overline{\psi}^h_\alpha(x)\eta_\alpha(x)$,

可见

$$\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x_1)}\exp\left\{\int \mathrm{id}^4x\overline{\eta}(x)\psi^h(x)\right\}$$
$$=\psi^h_\alpha(x_1)\exp\left\{\int \mathrm{id}^4x\overline{\eta}(x)\psi^h(x)\right\},$$
$$\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\beta(y)}\exp\left\{\int \mathrm{id}^4x\overline{\psi}^h(x)\eta(x)\right\}$$
$$=\overline{\psi}^h_\beta(y)\exp\left\{\int \mathrm{id}^4x\overline{\eta}(x)\psi^h(x)\right\},$$
$$\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^\nu(z)}\exp\left\{\int \mathrm{d}^4xJ^\mu(x)A^h_\mu(x)\right\}$$
$$=A^h_\mu(z)\exp\left\{\int \mathrm{d}^4xJ^\mu(x)A^h_\mu(x)\right\}.$$

因此

$$\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha_1}(x_1)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha_2}(x_2)}\cdots\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\beta_1}(y_1)}$$
$$\times\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\beta_2}(y_2)}\cdots\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\nu_1}(z_1)}\cdots\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J]\Big|_{(\overline{\eta},\eta,J)=0}$$
$$=\langle\langle 0|T\{\psi^h_{\alpha_1}(x_1)\psi^h_{\alpha_2}(x_2)\cdots$$
$$\times\overline{\psi}^h_{\beta_1}(y_1)\overline{\psi}^h_{\beta_2}(y_2)\cdots A^h_{\nu_1}(z_1)A^h_{\nu_2}(z_2)\cdots\}|0\rangle\rangle. \tag{48}$$

由于理论的时空平移不变性，按照 (46) 式定义的格林函数可以表示为

$$G_{\alpha_1\alpha_2\cdots\beta_1\beta_2\cdots\nu_1\nu_2\cdots}(x_1x_2,\cdots,y_1y_2,\cdots,z_1z_2,\cdots)$$
$$=\int\frac{\mathrm{d}^4p_1}{(2\pi)^4}\int\frac{\mathrm{d}^4p'_1}{(2\pi)^4}\int\frac{\mathrm{d}^4k_1}{(2\pi)^4}\cdots\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sum_j p_jx_j}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sum_j p'_jy_j}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sum_j k_jz_j}$$
$$\times G_{\alpha_1\alpha_2\cdots\beta_1\beta_2\cdots\nu_1\nu_2\cdots}(p_1,p_2,\cdots,p'_1,p'_2,\cdots,k_1,k_2,\cdots)$$
$$\times(2\pi)^4\delta^4\Big(\sum_j p_j-\sum_j p'_j+\sum_j k_j\Big), \tag{49}$$

在此式右边的坐标因子中，我们特别选取 p_jx_j 和 p'_jy_j 前的正负

号，以便于与微扰展开的 Feynman 图中外电子线的方向相应，$k_j z_j$ 前的正负号 (对应于外光子线方向) 可以有不同的选择. 函数

$$G_{\alpha_1\alpha_2\cdots\beta_1\beta_2\cdots\nu_1\nu_2\cdots}(p_1,p_2,\cdots,p_1',p_2',\cdots,k_1,k_2,\cdots)$$

在向内的外线动量之和等于向外的外线动量之和的条件下代表动量空间的格林函数.

在两点格林函数 (传播函数) 的情形只有一个独立动量，按平面波展开的公式被写成

$$\begin{aligned}&\langle\langle 0|\mathcal{T}\left(\psi_\alpha^h(x)\overline{\psi}_\beta^h(y)\right)|0\rangle\rangle\\&\qquad=\mathrm{i}\,\overline{S}_{\alpha\beta}(x-y)=\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\,\mathrm{i}\,\overline{S}_{\alpha\beta}(p)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p(x-y)}\,,\qquad(50)\\&\langle\langle 0|\mathcal{T}\left(A_\mu^h(x)A_\nu^h(y)\right)|0\rangle\rangle\\&\qquad=\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu\nu}(x-y)=\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\,\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu\nu}(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-y)}\,,\qquad(51)\end{aligned}$$

这样定义的 $\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\beta}(p),\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(k)$ 称为动量空间的完全传播函数.

令 $H_0=H_A+H_\psi$，而 $|0\rangle$ 是 H_0 的基态，满足 $H_0|0\rangle=0$. 再设 $U(t,t_0)$ 是由 H_0 和相互作用项 $H_{A\psi}$ 定义的相互作用绘景的时间演化算符，即

$$U(t,t_0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,H_0t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,H(t-t_0)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,H_0t_0}\,.$$

于是可以用 $U(0,-\infty)|0\rangle$ 作为 $|0\rangle\rangle$. 注意 $U(0,\infty)|0\rangle$ 与 $U(0,-\infty)|0\rangle$ 代表相同的态，有

$$\begin{aligned}&\langle\langle 0|\mathcal{T}\left(\psi_\alpha^h(x)\overline{\psi}_\beta^h(y)\right)|0\rangle\rangle\\&\qquad=\frac{\langle 0|U(\infty,0)\mathcal{T}\left\{\psi_\alpha^h(x)\overline{\psi}_\beta^h(y)\right\}U(0,-\infty)|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,,\qquad(52)\\&\langle\langle 0|\mathcal{T}\left(A_\mu^h(x)A_\nu^h(y)\right)|0\rangle\rangle\\&\qquad=\frac{\langle 0|U(\infty,0)\mathcal{T}\left\{A_\mu^h(x)A_\nu^h(y)\right\}U(0,-\infty)|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,,\qquad(53)\end{aligned}$$

$$\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J]=\langle 0|U(\infty,0)\mathcal{T}\Big(\exp\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\big(\overline{\eta}\psi^h+\overline{\psi}^h\eta$$

$$+J^\mu A_\mu\big)\}\Big)U(0,-\infty)|0\rangle\times\frac{1}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,. \tag{54}$$

设 $\psi_\alpha(x),\overline{\psi}_\beta(x),A_\mu(x)$ 代表此相互作用绘景的场算符，即

$$\psi_\alpha(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}\psi_\alpha(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t}\,,$$

$$\overline{\psi}_\beta(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}\overline{\psi}_\beta(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t}\,,$$

$$A_\mu(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}A_\mu(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t}\,.$$

利用

$$\psi^h_\alpha(x)=U(0,t)\psi_\alpha(x)U(t,0)\,,$$

$$\overline{\psi}^h_\beta(x)=U(0,t)\overline{\psi}_\beta(x)U(t,0)\,,$$

$$A^h_\mu(x)=U(0,t)A_\mu(x)U(t,0)\,.$$

可得出

$$U(\infty,0)\mathcal{T}\big(\psi^h_\alpha(x)\overline{\psi}^h_\beta(y)\big)U(0,-\infty)=\mathcal{T}\big\{U(\infty,-\infty)\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\beta(y)\big\}\,, \tag{55}$$

$$U(\infty,0)\mathcal{T}\big(A^h_\mu(x)A^h_\nu(y)\big)U(0,-\infty)=\mathcal{T}\big\{U(\infty,-\infty)A_\mu(x)A_\nu(y)\big\}\,, \tag{56}$$

$$U(\infty,0)\mathcal{T}\Big(\exp\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\big(\overline{\eta}\psi+\overline{\psi}\eta+J^\mu A_\mu\big)\}\Big)U(0,-\infty)$$

$$=\mathcal{T}\Big(U(\infty,-\infty)\exp\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\big(\overline{\eta}\psi+\overline{\psi}\eta+J^\mu A_\mu\big)\}\Big)\,. \tag{57}$$

故

$$\langle\langle 0|\mathcal{T}\big(\psi^h_\alpha(x)\overline{\psi}^h_\beta(y)\big)|0\rangle\rangle=\frac{\langle 0|\mathcal{T}\big\{U(\infty,-\infty)\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\beta(y)\big\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,, \tag{58}$$

$$\langle\langle 0|T\left(A_\mu^h(x)A_\nu^h(y)\right)|0\rangle\rangle = \frac{\langle 0|T\left\{U(\infty,-\infty)A_\mu(x)A_\nu(y)\right\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}, \tag{59}$$

$$\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J] = \frac{\langle 0|T\left\{U(\infty,-\infty)\exp\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\left(\overline{\eta}\psi+\overline{\psi}\eta+J^\mu A_\mu\right)\}\right\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}. \tag{60}$$

算符 $U(\infty,-\infty)$ 可以表示为

$$\begin{aligned} U(\infty,-\infty) &= T\exp\left\{-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}H_{A\psi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t}\right\} \\ &= T\exp\left\{-\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\, e\, j^\mu(x)A_\mu(x)\right\}. \end{aligned}$$

其中 $j^\mu(x)$ 是相互作用绘景的流算符，即

$$\begin{aligned} j^\mu(x) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}j^\mu(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t} \\ &= \frac{1}{2}\left\{\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)-\widetilde{\psi}(x)\widetilde{\gamma^\mu}\widetilde{\overline{\psi}}(x)\right\} \\ &= \frac{1}{2}\gamma^\mu_{\alpha\beta}\left\{\overline{\psi}_\alpha(x)\psi_\beta(x)-\psi_\beta(x)\overline{\psi}_\alpha(x)\right\}. \end{aligned} \tag{61}$$

将算符 $\overline{\psi}_\alpha$, ψ_β 写成正频部分 (消灭算符) 与负频部分 (产生算符) 的和：

$$\overline{\psi}_\alpha = \overline{\psi}_\alpha^{(+)}+\overline{\psi}_\alpha^{(-)}, \qquad \psi_\beta = \psi_\beta^{(+)}+\psi_\beta^{(-)},$$

并且用记号 $\mathcal{N}\{\overline{\psi}_\alpha\psi_\beta\}$ 表示相对于裸真空态 $|0\rangle$ 的正规积，即是在 $\overline{\psi}_\alpha\psi_\beta$ 的各项中把产生算符移到消灭算符的左边，而在移动时将这些产生、消灭算符当作互相反对易的. 于是

$$\begin{aligned} \mathcal{N}\{\overline{\psi}_\alpha\psi_\beta\} &= \overline{\psi}_\alpha^{(+)}\psi_\beta^{(+)})-\psi_\beta^{(-)}\overline{\psi}_\alpha^{(+)}+\overline{\psi}_\alpha^{(-)}\psi_\beta^{(+)}+\overline{\psi}_\alpha^{(-)}\psi_\beta^{(-)}, \\ \mathcal{N}\{\psi_\beta\overline{\psi}_\alpha\} &= -\mathcal{N}\{\overline{\psi}_\alpha\psi_\beta\}. \end{aligned}$$

由此以及 Dirac 场算符的反对易关系可得

$$j^{\mu}(x)=\gamma^{\mu}_{\alpha\beta}\mathcal{N}\{\overline{\psi}_{\alpha}(x)\psi_{\beta}(x)\}+\langle 0|j^{\mu}(x)|0\rangle\,,$$

容易证实，右边第二项等于零. 这有一个显而易见的理由：理论的电荷共轭不变性意味着 $|0\rangle\!\rangle$ 因而 $|0\rangle$ 是电荷共轭不变的，但是 $j^{\mu}(x)$ 与 $j^{\mu h}(x)$ 一样在电荷共轭下反号，故 $\langle 0|j^{\mu}(x)|0\rangle$ 和 $\langle\!\langle 0|j^{\mu h}|0\rangle\!\rangle$ 都等于零. 于是有

$$j^{\mu}(x)=e\gamma^{\mu}_{\alpha\beta}\mathcal{N}\{\overline{\psi}_{\alpha}(x)\psi_{\beta}(x)\}=\mathcal{N}\{\overline{\psi}(x)e\gamma^{\mu}\psi(x)\}\,, \tag{62}$$

$$U(\infty,-\infty)=\mathcal{T}\exp\Big\{-\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\mathcal{N}\{\overline{\psi}(x)e\gamma^{\mu}\psi(x)\}A_{\mu}(x)\Big\}\,. \tag{63}$$

另一方面，借助下式可以从其他的途径使用 $U(\infty,-\infty)$:

$$\begin{aligned}&\mathcal{T}\Big(U(\infty,-\infty)\exp\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x(\overline{\eta}\psi+\overline{\psi}\eta+J^{\mu}A_{\mu})\}\Big)\\&=\exp\Big\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4z\mathcal{L}_{A\psi}\Big(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}(z)},\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta(z)},\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J(z)}\Big)\Big\}\\&\quad\times\mathcal{T}\exp\Big\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x(\overline{\eta}\psi+\overline{\psi}\eta+J^{\mu}A_{\mu})\Big\}\,,\end{aligned} \tag{64}$$

其中

$$\begin{aligned}&\mathcal{L}_{A\psi}\Big(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}(z)},\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta(z)},\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J(z)}\Big)\\&\qquad=-e\gamma^{\mu}_{\alpha\beta}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\alpha}(z)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\beta}(z)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu}(z)}\,.\end{aligned} \tag{65}$$

即是说，$\mathcal{L}_{A\psi}\Big(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}(z)},\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta(z)},\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J(z)}\Big)$ 是在拉氏函数的耦合项 $\mathcal{L}_{A\psi}(z)$ 中将 $\psi_{\alpha}(z),\overline{\psi}_{\beta}(z),A_{\nu}(z)$ 分别换成 $\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha}(z)},\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\beta}(z)},\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\nu}(z)}$ 的结果. 注意 $\frac{\delta}{\delta\eta_{\alpha}(z)}$ 与 $\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}_{\beta}(z)}$ 是互相反对易的. 由 (64) 式看到

$$\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J]\propto\exp\Big\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4z\mathcal{L}_{A\psi}\Big(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}(z)},\cdots\Big)\Big\}\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,J]\,, \tag{66}$$

其中比例系数是与源无关的常数,并且保证 $\mathcal{Z}[0,0,0]=1$. $\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,J]$ 是不存在耦合项 $\mathcal{L}_{A\psi}$ 时的格林函数生成泛函

$$\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,J]=\langle 0|T\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\left(\overline{\eta}\psi+\overline{\psi}\eta+J^\mu A_\mu\right)\right\}|0\rangle\,,$$

$\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,J]$ 是 $\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,0]$ 与 $\mathcal{Z}_0[0,0,J]$ 的积，在上一章曾经给出用算符方法计算 $\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,0]$ 的结果：

$$\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,0]=\exp\left\{-\iint \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\overline{\eta}_\alpha(x)\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)\eta_\beta(y)\right\},$$

$$\mathrm{i}S(x-y)=\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{i}S(p)\exp\{-\mathrm{i}p(x-y)\},$$

$$\mathrm{i}S(p)=\frac{\mathrm{i}}{\not{p}-m+\mathrm{i}\epsilon}\quad(\epsilon=0^+),$$

其中 $\not{p}$ 代表 $\gamma^\mu p_\mu$, 这种记号以后还会经常使用. 上一章还根据 $\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,0]$ 的表达式证实其路径积分为

$$\begin{aligned}&\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,0]\\&\propto\int\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi]\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x\left(\mathcal{L}_\psi(x)+\overline{\eta}(x)\psi(x)+\overline{\psi}(x)\eta(x)\right)\right\}.\end{aligned}\tag{67}$$

在下一小节，将用算符方法计算 $\mathcal{Z}_0[0,0,J]$, 由此可直接证实在上一章所给出的路径积分

$$\mathcal{Z}_0[0,0,J]\propto\int\mathcal{D}[A]\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x\left(\mathcal{L}_A(x)+J^\mu A_\mu(x)\right)\right\}.\tag{68}$$

将 (67) 与 (68) 代入 (66) 式，即得曾在上一章给出的完全格林函数生成泛函的路径积分

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J]=\frac{1}{\mathcal{N}}\int\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi,A]\exp\Big\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x\big(\mathcal{L}(x)\\+\overline{\eta}(x)\psi(x)+\overline{\psi}(x)\eta(x)+J^\mu(x)A_\mu(x)\big)\Big\}.\end{aligned}\tag{69}$$

由于理论的阿贝尔性质，没有出现 Faddeev-Popov 鬼场自由度. 如果按照 Faddeev-Popov 的方法引进鬼场，则它们不引起耦合，所以是不必要的.

我们的目标是构造描述散射过程的理论和方法，但是在这种包含发散的理论中，并不能从现在的 H_0 的本征态中选取描述散射过程初末态的自由粒子的所谓物理态，以及用 $U(0,\mp\infty)$ 作用于初末态形成实际的散射本征态和构造散射矩阵. 不过本节的方法和工具有助于进行重整化和发展有实际意义的方法.

习题 1 证明

$$T\{\overline{\psi}_\alpha(x)\psi_\beta(y)\} = N\{\overline{\psi}_\alpha(x)\psi_\beta(y)\} + \langle 0|T\{\overline{\psi}_\alpha(x)\psi_\beta(y)\}|0\rangle .$$

解 记住 $\overline{\psi}_\alpha(x), \psi_\beta(y)$ 的正频部分是消灭算符，负频部分是产生算符，于是

$$\begin{aligned} N\{\overline{\psi}_\alpha(x)\psi_\beta(y)\} = {} & \overline{\psi}_\alpha^{(+)}(x)\psi_\beta^{(+)}(y) - \psi_\beta^{(-)}(y)\overline{\psi}_\alpha^{(+)}(x) \\ & + \overline{\psi}_\alpha^{(-)}(x)\psi_\beta^{(+)}(y) + \overline{\psi}_\alpha^{(-)}(x)\psi_\beta^{(-)}(y) . \end{aligned}$$

当 $x^0 > y^0$ 时，有

$$\begin{aligned} T\{\overline{\psi}_\alpha(x)\psi_\beta(y)\} = {} & \overline{\psi}_\alpha^{(+)}(x)\psi_\beta^{(+)}(y) + \overline{\psi}_\alpha^{(+)}(x)\psi_\beta^{(-)}(y) \\ & + \overline{\psi}_\alpha^{(-)}(x)\psi_\beta^{(+)}(y) + \overline{\psi}_\alpha^{(-)}(x)\psi_\beta^{(-)}(y) , \end{aligned}$$

可见，$T\{\overline{\psi}_\alpha(x)\psi_\beta(y)\} - N\{\overline{\psi}_\alpha(x)\psi_\beta(y)\}$ 不再是算符，因而等于 $\langle 0|T\{\overline{\psi}_\alpha(x)\psi_\beta(y)\}|0\rangle$. 当 $x^0 < y^0$ 时，有

$$\begin{aligned} T\{\overline{\psi}_\alpha(x)\psi_\beta(y)\} = {} & \overline{\psi}_\alpha^{(+)}(x)\psi_\beta^{(+)}(y) - \psi_\beta^{(-)}(y)\overline{\psi}_\alpha^{(+)}(x) \\ & - \psi_\beta^{(+)}(y)\overline{\psi}_\alpha^{(-)}(x) + \overline{\psi}_\alpha^{(-)}(x)\psi_\beta^{(-)}(y) , \end{aligned}$$

这一结论仍然正确.

习题 2 用 $N\{A_\mu(x)A_\nu(y)\}$ 表示相对于裸真空态 $|0\rangle$ 的正规积，即是在 $A_\mu(x)A_\nu(y)$ 的各项中把产生算符移到消灭算符的左

边，而在移动时将这些产生、消灭算符当作互相对易的．试证明

$$T\{A_\mu(x)A_\nu(y)\} = N\{A_\mu(x)A_\nu(y)\} + \langle 0|T\{A_\mu(x)A_\nu(y)\}|0\rangle .$$

提示　可以按照类似于习题 1 的方法证明．

3.2　用算符方法计算电磁场在 ξ 规范的自由传播函数

按照上一小节的说明，现在用算符方法计算电磁场在 ξ 规范的自由传播函数．作为一种技巧，我们将在 H_A 中加入一个质量项，将其修改为

$$H_A = \int \mathrm{d}^3x\Big\{\frac{1}{2}(1-\xi)(\Pi_0 - \partial^l A_l)^2 - \frac{1}{2}\Pi_\mu\Pi^\mu + \frac{1}{2}(\partial_l A_\nu)(\partial^l A^\nu) - \frac{1}{2}\Delta^2 A_\mu A^\mu\Big\},$$

再用适当的产生、消灭算符把它表示为对角化形式，算出格林函数后才令 Δ 趋于零．以后还会在考虑了重整化的基础上，借助于重整化的场函数和参量重新定义了自由场的拉氏函数和哈密顿量之后，再次采用这种技巧．

在 Δ 不是零时，可以在每一种动量下定义两个横极化矢量 $\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}1)$, $\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}2)$ 和一个纵极化矢量 $\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}3)$, 它们满足

$$k^\mu\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda) = 0\,, \tag{70}$$

$$g^{\mu\nu}\varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\varepsilon_\nu(\boldsymbol{k}\Lambda') = -\delta_{\Lambda\Lambda'}\,, \tag{71}$$

$$\sum_\Lambda \varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\varepsilon_\nu(\boldsymbol{k}\Lambda) = -g_{\mu\nu} + \frac{k_\mu k_\nu}{\Delta^2}\,, \tag{72}$$

$$k^0 = \omega(k) = \sqrt{\boldsymbol{k}^2 + \Delta^2}\,,$$

可以再约定

$$\varepsilon_\mu(-\boldsymbol{k}\,1) = \varepsilon^\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\,, \quad \varepsilon_\mu(-\boldsymbol{k}\,2) = -\varepsilon^\mu(\boldsymbol{k}\,2)\,.$$

现在引进如下的产生算符 $a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)$, $\beta^\dagger(\boldsymbol{k})$

$$a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda) = -\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a^\dagger_\mu(\boldsymbol{k})\,, \tag{73}$$

$$\beta^\dagger(\boldsymbol{k}) = X\Big(\frac{k^\mu}{2\Delta}\Big)a^\dagger_\mu(\boldsymbol{k}) + Y\Big(\frac{\widetilde{k}^\mu}{2\Delta}\Big)a_\mu(-\boldsymbol{k})\,, \tag{74}$$

和相应的消灭算符

$$a(\boldsymbol{k}\Lambda) = -\varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a_\mu(\boldsymbol{k})\,, \tag{75}$$

$$\beta(\boldsymbol{k}) = X\Big(\frac{k^\mu}{2\Delta}\Big)a_\mu(\boldsymbol{k}) + Y\Big(\frac{\widetilde{k}^\mu}{2\Delta}\Big)a^\dagger_\mu(-\boldsymbol{k})\,, \tag{76}$$

其中

$$a^\dagger_\mu(\boldsymbol{k}) = \int \mathrm{d}^3x \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}}\Big\{\sqrt{\frac{\omega}{2}}A_\mu(x) + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2\omega}}\Pi_\mu(x)\Big\}\,, \tag{77}$$

$$a_\mu(\boldsymbol{k}) = \int \mathrm{d}^3x \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}}\Big\{\sqrt{\frac{\omega}{2}}A_\mu(x) - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2\omega}}\Pi_\mu(x)\Big\}\,, \tag{78}$$

$$X = \frac{1}{2}\Big(\sqrt{\frac{\omega}{\omega_0}} + \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega}}\Big)\,, \quad Y = \frac{1}{2}\Big(\sqrt{\frac{\omega}{\omega_0}} - \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega}}\Big)\,,$$

$$\omega_0(k) = \sqrt{\boldsymbol{k}^2 + \xi\Delta^2}\,, \quad \widetilde{k}^\mu = (k^0, -k^1, -k^2, -k^3)\,.$$

利用 $A_\mu(\boldsymbol{x})$,$\Pi_\nu(\boldsymbol{x})$ 的对易关系可得出

$$[a_\mu(\boldsymbol{k}), a^\dagger_\nu(\boldsymbol{k}')] = -g_{\mu\nu}\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,, \tag{79}$$

$$[a_\mu(\boldsymbol{k}), a_\nu(\boldsymbol{k}')] = [a^\dagger_\mu(\boldsymbol{k}), a^\dagger_\nu(\boldsymbol{k}')] = 0\,. \tag{80}$$

由此以及 (73)—(76) 式可证实

$$[a(\boldsymbol{k}\Lambda), a^\dagger(\boldsymbol{k}'\Lambda')] = \delta_{\Lambda,\Lambda'}\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,, \tag{81}$$

$$[\beta(\boldsymbol{k}), \beta^\dagger(\boldsymbol{k}')] = -\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,, \tag{82}$$

$$[\beta(\boldsymbol{k}), a(\boldsymbol{k}'\Lambda)] = [\beta(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')\Lambda)] = 0\,, \tag{83}$$

$$[a(\boldsymbol{k}\Lambda), a(\boldsymbol{k}'\Lambda')] = [\beta(\boldsymbol{k}), \beta(\boldsymbol{k}')] = 0\,. \tag{84}$$

将 (77),(78) 以及 (73)—(76) 式逆过来得

$$A_\mu(\boldsymbol{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\Big(a_\mu(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + a_\mu^\dagger(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\Big)\,, \tag{85}$$

$$\Pi_\mu(\boldsymbol{x}) = \int \frac{\mathrm{i}\mathrm{d}^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}}\sqrt{\frac{\omega}{2}}\Big(a_\mu(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} - a_\mu^\dagger(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\Big)\,, \tag{86}$$

$$a_\mu(\boldsymbol{k}) = X\Big(\frac{k^\mu}{\Delta}\Big)\beta(\boldsymbol{k}) - Y\Big(\frac{k^\mu}{\Delta}\Big)\beta^\dagger(-\boldsymbol{k}) + \varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a(\boldsymbol{k}\Lambda)\,, \tag{87}$$

$$a_\mu^\dagger(\boldsymbol{k}) = X\Big(\frac{k^\mu}{\Delta}\Big)\beta^\dagger(\boldsymbol{k}) - Y\Big(\frac{k^\mu}{\Delta}\Big)\beta(-\boldsymbol{k}) + \varepsilon_\mu^*(\boldsymbol{k}\Lambda)a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\,, \tag{88}$$

而且不计一个相加常数，H_A 可写成

$$H_A = \int \mathrm{d}^3k\,\Big\{\omega\Big(\sum_\Lambda a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)a(\boldsymbol{k}\Lambda)\Big) - \omega_0\,\beta^\dagger(\boldsymbol{k})\beta(\boldsymbol{k})\Big\}\,. \tag{89}$$

因此，自由电子场 - 电磁场系统的真空态既满足 $H_A|0\rangle = H_\psi|0\rangle = 0$, 也满足

$$a_\mu(\boldsymbol{k})|0\rangle = 0\,,$$
$$\beta(\boldsymbol{k})|0\rangle = 0\,.$$

利用以上结果，可将自由传播函数表示成

$$\begin{aligned}&\langle 0|T\big(A_\mu(x)A_\nu(y)\big)|0\rangle\\ &\quad = \theta(x^0-y^0)\langle 0|A_\mu(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,H_A(x^0-y^0)}A_\nu(\boldsymbol{y})|0\rangle\\ &\quad + \theta(y^0-x^0)\langle 0|A_\nu(\boldsymbol{y})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,H_A(y^0-x^0)}A_\mu(\boldsymbol{x})|0\rangle\,.\end{aligned}$$

在其中代入

$$\theta(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,H_At} = \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et}}{E - H_A + \mathrm{i}\epsilon} \qquad (\epsilon = 0^+)\,,$$

得

$$\langle 0|\mathcal{T}\big(A_\mu(x)A_\nu(y)\big)|0\rangle$$
$$= \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\langle 0|A_\mu(\boldsymbol{x})\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(x^0-y^0)}}{E-H_A+\mathrm{i}\epsilon}A_\nu(\boldsymbol{y})|0\rangle$$
$$+\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\langle 0|A_\nu(\boldsymbol{y})\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(y^0-x^0)}}{E-H_A+\mathrm{i}\epsilon}A_\mu(\boldsymbol{x})|0\rangle\,. \quad (90)$$

注意 $(Xk_\mu - Y\widetilde{k}_\mu) = \sqrt{\frac{\omega}{\omega_0}}k_\mu(0)$, 其中 $k_\mu(0) = (\omega_0, k_1, k_2, k_3)$, 可以利用 (87),(88) 将 (85) 式改写成

$$A_\mu(\boldsymbol{x}) = \int\frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\Big\{\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a_(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + \varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\Big\}$$
$$+\int\frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega_0(2\pi)^3}}\frac{k_\mu(0)}{\Delta}\Big\{\beta(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + \beta^\dagger(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\Big\}\,. \quad (91)$$

故 (90) 式的第一部分等于

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\int\frac{\mathrm{i}\,\mathrm{d}^3k}{2\omega(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(x^0-y^0)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\frac{1}{E-\omega+\mathrm{i}\epsilon}\Big(\frac{k_\mu k_\nu}{\Delta^2}-g_{\mu\nu}\Big)$$
$$-\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\int\frac{\mathrm{i}\,\mathrm{d}^3k}{2\omega_0(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(x^0-y^0)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\frac{1}{E-\omega+\mathrm{i}\epsilon}\Big(\frac{k_\mu(0)k_\nu(0)}{\Delta^2}\Big)$$

在此式第一项的 $k_\mu k_\nu$ 中, 将 k_0 换成积分变量 E, 在第二项的 $k_\mu(0)k_\nu(0)$ 中将 $k_0(0)$ 换成 E, 并且将此积分变量写成 k_0, 得

$$\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(x^0-y^0)}\langle 0|A_\mu(\boldsymbol{x})\frac{1}{E-H_A+\mathrm{i}\epsilon}A_\nu(\boldsymbol{y})|0\rangle$$
$$=\int\frac{\mathrm{i}\,\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-y)}\frac{1}{2\omega}\frac{1}{k_0-\omega+\mathrm{i}\epsilon}\Big(\frac{k_\mu k_\nu}{\Delta^2}-g_{\mu\nu}\Big)$$
$$-\int\frac{\mathrm{i}\,\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-y)}\frac{1}{2\omega_0}\frac{1}{k_0-\omega_0+\mathrm{i}\epsilon}\Big(\frac{k_\mu k_\nu}{\Delta^2}\Big)\,.$$

类似地，(90) 式的第二部分变成

$$\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(y^0-x^0)}\langle 0|A_\nu(\boldsymbol{y})\frac{1}{E-H_A+\mathrm{i}\epsilon}A_\mu(\boldsymbol{x})|0\rangle$$
$$=\int\frac{\mathrm{i}\,\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(y-x)}\frac{1}{2\omega}\frac{1}{k_0-\omega+\mathrm{i}\epsilon}\left(\frac{k_\mu k_\nu}{\Delta^2}-g_{\mu\nu}\right)$$
$$-\int\frac{\mathrm{i}\,\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(y-x)}\frac{1}{2\omega_0}\frac{1}{k_0-\omega_0+\mathrm{i}\epsilon}\left(\frac{k_\mu k_\nu}{\Delta^2}\right).$$

利用

$$\frac{1}{k_0-\omega+\mathrm{i}\epsilon}+\frac{1}{-k_0-\omega+\mathrm{i}\epsilon}=\frac{2\omega}{k_0^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon},$$
$$\frac{1}{k_0-\omega+\mathrm{i}\epsilon}+\frac{1}{-k_0-\omega+\mathrm{i}\epsilon}=\frac{2\omega}{k_0^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon},$$

得

$$\langle 0|\mathcal{T}\big(A_\mu(x)A_\nu(y)\big)|0\rangle$$
$$=\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(y-x)}\frac{\mathrm{i}}{k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}\left(\frac{k_\mu k_\nu}{\Delta^2}-g_{\mu\nu}\right)$$
$$-\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(y-x)}\frac{\mathrm{i}}{k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}\left(\frac{k_\mu k_\nu}{\Delta^2}\right).$$

即

$$\langle 0|\mathcal{T}\big(A_\mu(x)A_\nu(y)\big)|0\rangle=\mathrm{i}D_{\mu\nu}(x-y),\tag{92}$$
$$D_{\mu\nu}(x-y)=\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(y-x)}D_{\mu\nu}(k),\tag{93}$$
$$D_{\mu\nu}(k)=\frac{1}{k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}\left\{-g_{\mu\nu}+(1-\xi)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}\right\}.\tag{94}$$

可见，当 Δ 趋于零时，虽然前面引进的 $\frac{k^\mu}{\Delta},\varepsilon_\mu(k3)$ 会失去意义，传播函数则平滑地过渡到极限形式，从而得到

$$D_{\mu\nu}(k)=\frac{1}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\left\{-g_{\mu\nu}+(1-\xi)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\right\}.\tag{95}$$

以后即使用算符方法将传播函数表示为 $\langle 0|T\big(A_\mu(x)A_\nu(y)\big)|0\rangle$, 也认为 Δ 趋于零. 如果需要保持此参量不是零以便进行某些演算, 则在完成演算后令它趋于零.

至于生成泛函 $Z_0[0,0,J]$, 可以由

$$\frac{\delta}{\mathrm{i}\,\delta J^\mu(x)}Z_0[0,0,J]$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\langle 0|T\Big\{A_\mu(x)\Big(\int \mathrm{i}\,\mathrm{d}^4z J^\lambda(z)A_\lambda(z)\Big)^n\Big\}|0\rangle$$

以及 Wick 定理 (见下节) 求得微分方程组

$$\frac{\delta}{\mathrm{i}\,\delta J^\mu(x)}Z_0[0,0,J]$$

$$=\int \mathrm{d}^4y\langle 0|T\big(A_\mu(x)A_\nu(y)\big)|0\rangle \mathrm{i}\,J^\nu(y)Z_0[0,0,J]\,,$$

或者按照本小节习题的方法由 $Z_0[0,0,J]$ 直接做代数运算得出

$$Z_0[0,0,J]=\exp\Big\{-\frac{1}{2}\iint \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y J^\mu(x)\,\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(x-y)J^\nu(y)\Big\}\,. \tag{96}$$

这当然与以前采用如上一小节 (68) 式所示的路径积分公式算得的结果相同.

习题 1 根据 $Z_0[0,0,J]=\langle 0|T\exp\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x J^\mu A_\mu\}|0\rangle$ 直接做代数运算证明 (96) 式.

解 将算符 $T\exp\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x J^\mu(x)A_\mu(x)\}$ 表示为

$$T\exp\Big\{\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t B(t)\Big\}\qquad (t_0\to-\infty\,,t_f\to\infty)\,,$$

其中

$$B(t)=\mathrm{i}\int \mathrm{d}^3x J^\mu(x)A_\mu(x)\,.$$

令 $\delta t=(t_f-t_0)/N$ 而 $N\to\infty$, 于是

$$\mathcal{T}\exp\left\{\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}tB(t)\right\}\approx\exp\left\{\delta tB(t_0+N\delta t-\delta t)\right\}$$
$$\times\exp\left\{\delta tB(t_0+N\delta t-2\delta t)\right\}\cdots\exp\left\{\delta tB(t_0)\right\}.$$

由于 $[B(t_1),B(t_2)]$ 不再是算符，此式右边即是

$$\exp\left\{\sum_l\delta tB(l)\right\}\exp\left\{\tfrac{1}{2}\sum_{n>l}[\delta tB(n),\delta tB(l)]\right\},$$

其中 $B(l)$ 代表 $B(t_0+l\delta t)$. 可见

$$\mathcal{T}\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4xJ^\mu(x)A_\mu(x)\right\}=\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4xJ^\mu(x)A_\mu(x)\right\}$$
$$\times\exp\left\{-\frac{1}{2}\iint\mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\theta(x^0-y^0)J^\mu(x)[A_\mu(x),A_\nu(y)]J^\nu(y)\right\}$$

设 $A_\mu^{(+)}(x)$ 代表 $A_\mu(x)$ 的正频部分 (消灭算符), $A_\mu^{(-)}(x)$ 是负频部分 (产生算符), 于是有

$$\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4xJ^\mu(x)A_\mu(x)\right\}$$
$$=\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4xJ^\mu(x)A_\mu^{(-)}(x)\right\}\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4xJ^\mu(x)A_\mu^{(+)}(x)\right\}$$
$$\times\exp\left\{-\frac{1}{2}\iint\mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4yJ^\mu(x)[A_\mu^{(+)}(x),A_\nu^{(-)}(y)]J^\nu(y)\right\}.$$

注意 $[A_\mu(x),A_\nu(y)]$ 和 $[A_\mu^{(+)}(x),A_\nu^{(-)}(y)]$ 不再是算符因而等于在 $|0\rangle$ 的平均值，故

$$[A_\mu(x),A_\nu(y)]=\langle0|[A_\mu(x),A_\nu(y)]|0\rangle,$$
$$[A_\mu^{(+)}(x),A_\nu^{(-)}(y)]=\langle0|A_\mu(x)A_\nu(y)|0\rangle,$$
$$\theta(x^0-y^0)[A_\mu(x),A_\nu(y)]+[A_\mu^{(+)}(x),A_\nu^{(-)}(y)]$$
$$=\langle0|\mathcal{T}\big(A_\mu(x)A_\nu(y)\big)|0\rangle.$$

最后得到

$$\mathcal{T}\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x J^\mu(x)A_\mu(x)\right\}$$
$$=\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x J^\mu(x)A_\mu^{(-)}(x)\right\}\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x J^\mu(x)A_\mu^{(+)}(x)\right\}$$
$$\times\exp\left\{-\frac{1}{2}\iint \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y J^\mu(x)\langle 0|\mathcal{T}\big(A_\mu(x)A_\nu(y)\big)|0\rangle J^\nu(y)\right\}.$$

这样，就把算符 $\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x J^\mu(x)A_\mu(x)\right\}$ 的时序积改写成正规积的形式. 求其在裸真空态 $|0\rangle$ 的平均值即得 (96) 式.

习题 2 根据 $\mathcal{Z}_0[\bar\eta,\eta]=\langle 0|\mathcal{T}\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\big(\bar\eta\psi+\overline{\psi}\eta\big)\right\}|0\rangle$ 直接做代数运算求出其表达式.

提示 将算符 $\mathcal{T}\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\big(\bar\eta_\alpha\psi_\alpha+\overline{\psi}_\alpha\eta_\alpha\big)\right\}$ 表示为

$$\mathcal{T}\exp\left\{\int_{t_0}^{t_f}\mathrm{d}t F(t)\right\}\quad(t_0\to-\infty,t_f\to\infty),$$

其中

$$F(t)=\mathrm{i}\int \mathrm{d}^3x\big(\bar\eta_\alpha(x)\psi_\alpha(x)+\overline{\psi}_\alpha(x)\eta_\alpha(x)\big).$$

令 $\delta t=(t_f-t_0)/N$ 而 $N\to\infty$, 由于 $[F(t_1),F(t_2)]$ 等不再是算符，按照类似于习题 1 的方法处理，得到

$$\mathcal{T}\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\big(\bar\eta_\alpha(x)\psi_\alpha(x)+\overline{\psi}_\alpha(x)\eta_\alpha(x)\big)\right\}$$
$$=:\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\big(\bar\eta_\alpha(x)\psi_\alpha(x)+\overline{\psi}_\alpha(x)\eta_\alpha(x)\big)\right\}:$$
$$\times\exp\left\{-\iint \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\bar\eta_\alpha(x)\,\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)\eta_\beta(y)\right\},$$

其中 :: 表示相对于裸真空态 $|0\rangle$ 取正规积. 要记住，在正规积记号下，电子场算符看作是互相反对易的. 它们与源 $\bar\eta_\alpha,\eta_\beta$ 本来就是互相反对易的. 求此式在裸真空态的平均值即得所需要的结果.

§4 Feynman 图

4.1 线段和顶点

Feynman 图方法在微扰理论中有广泛的作用. 这种图一般由线段以及作为若干线段的汇合点的顶点组成. 顶点用于表明相互作用的类型. 特殊的图形可以是一根线段或一个顶点. 只有一端与顶点连接的线段称为外线, 两端都与顶点连接的线段称为内线. 在表示格林函数的微扰展开的图形中, 所有线段都代表自由传播函数, 在其他 Feynman 图中, 内线仍然代表自由传播函数, 但是外线有另外的含义. 例如, 在算符 $U(\infty,-\infty)$ 微扰展开的正规积的图形表示中, 外线代表场算符. 在散射矩阵元的图形中则用外线描述散射过程中初态粒子的消失或者末态粒子的产生. 另外, 在许多重要场合采用的是截腿图, 这时标明外腿只是为了显示顶点的类别. 这些都有明确的规定. 现在还没有提到抵消项, 在 §6 之前也不提及包含这种项的图形, 以后会给出补充说明.

电子场的自由传播函数 $\langle 0|T\big(\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\beta(y)\big)|0\rangle$ 的 Feynman 图是一根有向的实线段:

$$\mathrm{i}\,S_{\alpha\beta}(x-y)=\langle 0|T\big(\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\beta(y)\big)|0\rangle \quad = \quad \begin{array}{ccc} \alpha & & \beta \\ x & \longleftarrow & y \end{array}$$

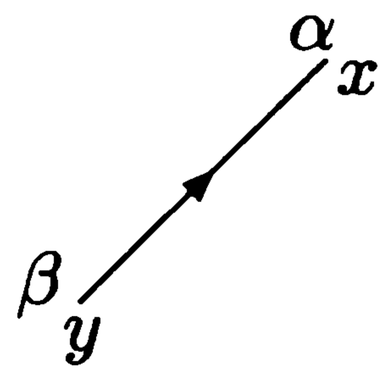
也称为坐标空间的自由传播函数, 线段的方向是从 $\overline{\psi}_\beta$ 指向 $\overline{\psi}_\alpha$. 通常还用 $\mathrm{i}S(x-y)$ 代表以 $\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)$ 为元素的 4×4 矩阵, 记为

$$\mathrm{i}\,S(x-y)=\langle 0|T\big(\psi(x)\overline{\psi}(y)\big)|0\rangle \quad = \quad \begin{array}{ccc} x & & y \\ & \longleftarrow & \end{array}$$

在上一章说明过, 当 $y^0<x^0$ 时, 有

$$\mathrm{i}\,S_{\alpha\beta}(x-y)=\langle 0|\psi_\alpha(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,H_A(x^0-y^0)}\overline{\psi}_\beta(y)|0\rangle\,.$$

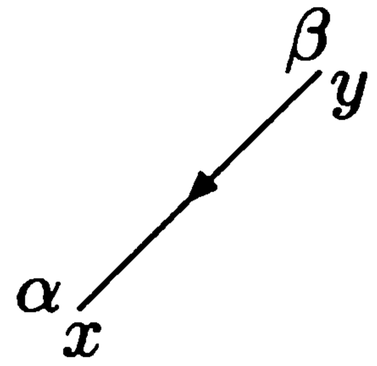
这个量描述电子的自由演化. 如果约定时间的流向是自下而上, 则用图形



表示 $y^0 < x^0$ 时的 $\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)$. 当 $x^0 < y^0$ 时, 有

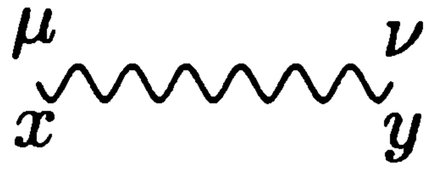
$$\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y) = \langle 0|\overline{\psi}_\beta(y)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_A(y^0-x^0)}\psi_\alpha(x)|0\rangle\,.$$

它描述正电子的自由演化, 顾及所约定的时间流向时, 其图形为

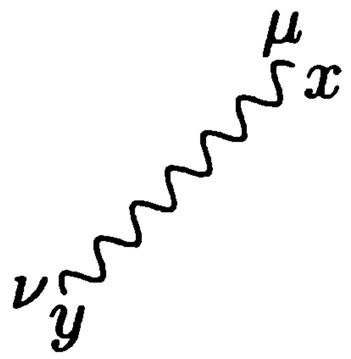


电磁场的自由传播函数用波浪线段表示:

$$\mathrm{i}D_{\mu\nu}(x-y) = \langle 0|T\big(A_\mu(x)A_\nu(y)\big)|0\rangle \quad =$$

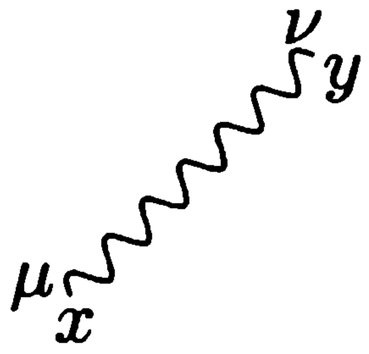


不管 $y^0 < x^0$ 或是 $x^0 < y^0$, 它都描述光子的自由演化. 顾及时间的流向的图形为



$(y^0 < x^0)$

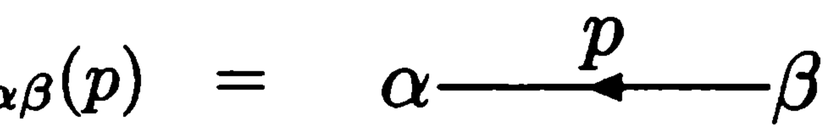
和



$(x^0 < y^0)$

由 $\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)$ 和 $\mathrm{i}D_{\mu\nu}(x-y)$ 的傅氏展开定义的 $\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(p)$ 和 $\mathrm{i}D_{\mu\nu}(k)$ 称为动量空间的自由传播函数. 它们被图示为

$$\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(p) \quad =$$



$$\mathrm{i}D_{\mu\nu}(p) \quad = \quad \mu \overset{k}{\sim\sim\sim} \nu$$

这里的 p 和 k 被理解为所谓虚粒子的动量，它们是 $\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(x-y)$ 和 $\mathrm{i}D_{\mu\nu}(x-y)$ 的傅氏展开的积分变量，并不限制在质壳上. $\mathrm{i}S_{\alpha\beta}(p)$ 描述动量为 p 的虚电子的传播，$\mathrm{i}D_{\mu\nu}(k)$ 描述动量为 k 的虚光子的传播.

由于 $\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,J]$ 被自由传播函数决定，而耦合项被矩阵 $-\mathrm{i}e\gamma^\mu$ 决定，任何格林函数都可以用自由传播函数和 $-\mathrm{i}e\gamma^\mu$ 表示出来. 根据 (66) 式以及泛函微商算子

$$\mathrm{i}\mathcal{L}_{A\psi}\left(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}(z)},\cdots\right)=-\mathrm{i}\,e\gamma^\mu_{\alpha\beta}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\alpha(z)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\beta(z)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^\mu(z)},$$

可以看出，在坐标空间的任何格林函数的微扰展开式中，耦合项总是通过 $-\mathrm{i}e\gamma^\mu$ 将三个自由格林函数连接到一个充当积分变量的时空点. 例如，电子光子三点格林函数

$$\langle\langle 0|\mathcal{T}\{\psi^h_\alpha(x_1)\overline{\psi}^h_\beta(x_2)A^h_\mu(x_3)\}|0\rangle\rangle$$

的一级微扰项是

$$G^{(1)}_{\alpha\beta\mu}(x_1,x_2,x_3)=\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x_1)}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\beta(x_2)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^\mu(x_3)}\times\int\mathrm{i}\mathrm{d}^4z\mathcal{L}_{A\psi}(z)\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,J]\Big|_{(\overline{\eta},\eta,J)=0},$$

亦即

$$-\mathrm{i}\,e\gamma^\nu_{\alpha'\beta'}\int\mathrm{d}^4z\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x_1)}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\alpha'}(z)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\beta'}(z)}\times\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\beta(x_2)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^\mu(x_3)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^\nu(z)}\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,J]\Big|_{(\overline{\eta},\eta,J)=0}.$$

这里不允许由此产生 $S_{\beta'\alpha'}(z-z)$, 因为 $\gamma^{\nu}_{\alpha'\beta'}S_{\beta'\alpha'}(z-z)$ 即是

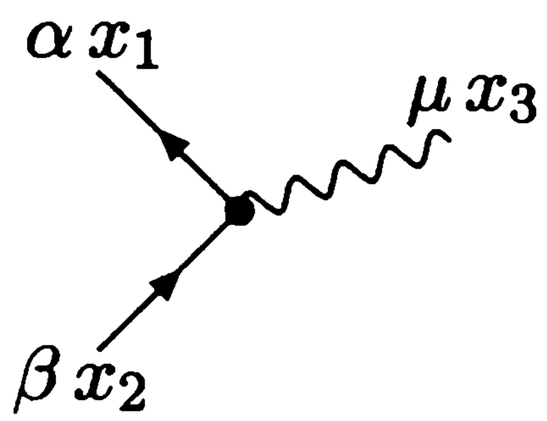
$$\int \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\,\mathrm{tr}\,(\gamma^{\nu}S(p)) = \int \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\,\mathrm{tr}\,(C^{-1}\gamma^{\nu}S(p)C)$$
$$= -\int \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\,\mathrm{tr}\,(\widetilde{\gamma^{\nu}}\widetilde{S}(-p)) = -\int \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\,\mathrm{tr}\,(\gamma^{\nu}S(p)) = 0\,.$$

故

$$G^{(1)}_{\alpha\beta\mu}(x_1,x_2,x_3)$$
$$= \int \mathrm{d}^4z \mathrm{i}S_{\alpha\alpha'}(x_1-z)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}_{\alpha'\beta'}\big)\mathrm{i}\,S_{\beta'\beta}(z-x_2)\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(x_3-z)\,, \tag{97}$$

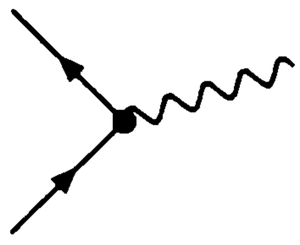
其图形是三根汇合于一点的分别代表这三个传播函数的线段:

$G^{(1)}_{\alpha\beta\mu}(x_1,x_2,x_3)$ =



这种图形的交点代表 $-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}_{\alpha'\beta'}$, 称为电子光子顶点. 两根电子线具有连贯的方向, 是由于耦合项保持电荷守恒. 这种顶点作为图形的一个组件, 记为

$-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}$ =



此时外腿不作贡献, 而是用于表明顶点的性质. 将 $G^{(1)}_{\alpha\beta\mu}(x_1,x_2,x_3)$ 的表达式和它的图形对比, 很容易记住由图形写表达式的规则, 即是逆着电子线的方向依次写出电子线段和顶点的表达式, 接着写光子线段的贡献. 顶点因子中的洛伦兹指标和矩阵指标都是求和指标, 其所在位置的时空坐标是积分变量. 不管一个图形含有多少顶点和线段, 这种写表达式的规则都是适用的. 此外, 当电

子线段形成闭合圈时，还规定每一个这样的闭合圈贡献一个因子 (-1). 而且，在场论中对所有的费米场都采用这样的附加规定.

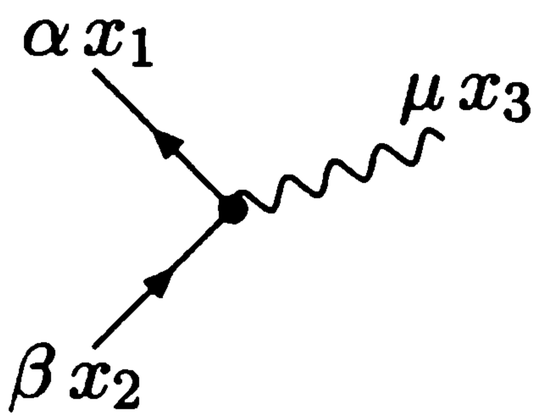
为了写出 (97) 式的傅氏展开，只需将以下式子代入

$$\mathrm{i}\,S_{\alpha\alpha'}(x_1-z)=\int\frac{\mathrm{d}^4p_1}{(2\pi)^4}\mathrm{i}S_{\alpha\alpha'}(p_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_1(x_1-z)}\,,$$

$$\mathrm{i}\,S_{\beta'\beta}(z-x_2)=\int\frac{\mathrm{d}^4p_2}{(2\pi)^4}\mathrm{i}S_{\beta'\beta}(p_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_2(z-x_2)}\,,$$

$$\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(x_3-z)=\int\frac{\mathrm{d}^4p_2}{(2\pi)^4}\mathrm{i}D_{\mu\nu}(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x_3-z)}\,.$$

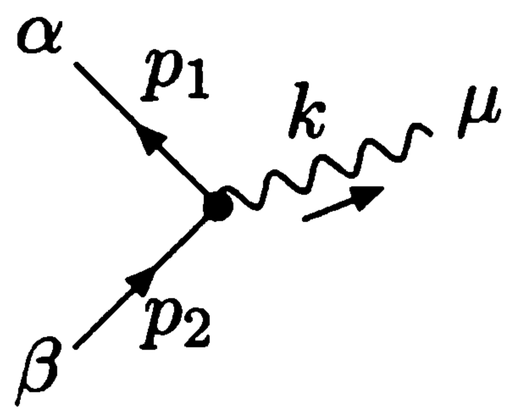
完成对 z 的积分后得



$$=\iiint\frac{\mathrm{d}^4p_1}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4p_2}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_1x_1+\mathrm{i}p_2x_2-\mathrm{i}kx_3}$$

$$\times(2\pi)^4\delta^4(p_1+k-p_2)\Big\{\text{动量空间图形}\Big\}\,,\qquad(98)$$

而动量空间的图形及其表达式是：



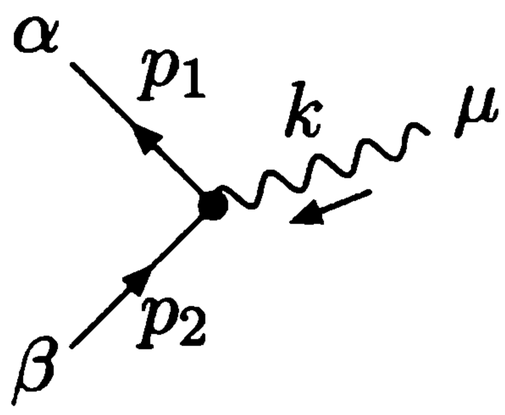
$$=\quad\mathrm{i}\,S_{\alpha\alpha'}(p_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}_{\alpha'\beta'}\big)\mathrm{i}\,S_{\beta'\beta}(p_2)\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(k)\,.$$

(98) 式被积函数中的因子 $(2\pi)^4\delta^4(p_1+k-p_2)$ 来自 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_1-p_2+k)z}$ 对于 z 的积分. 为了便于显示动量守恒条件 $(p_1+k-p_2=0)$, 在动量空间的顶角图中给所有线段都标明方向. 电子线的方向按照坐标空间的图形确定，光子线的方向则用来表明：汇合于一个顶点的离开线段的动量之和等于进入线段的动量之和. 给动量空间的光子线段标出方向的方法其实取决于坐标空间的相应表达

式的傅氏展开的写法. 由于 $\mathrm{i}D_{\mu\nu}(k)$ 是 k 的偶函数, (97) 式中的 $\mathrm{i}D_{\mu\nu}(x_3-z)$ 也可表示成

$$\mathrm{i}D_{\mu\nu}(x_3-z)=\int\frac{\mathrm{d}^4p_2}{(2\pi)^4}\mathrm{i}D_{\mu\nu}(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(z-x_3)}\,.$$

这样就会使 (98) 式的 δ 函数变成 $\delta^4(p_1-k-p_2)$, 而包含外点坐标的因子则变成 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_1x_1+\mathrm{i}p_2x_2+\mathrm{i}kx_3}$, 电子光子三点格林函数在动量空间的最低级图形应该是



$$=\quad \mathrm{i}S_{\alpha\alpha'}(p_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}_{\alpha'\beta'}\big)\mathrm{i}S_{\beta'\beta}(p_2)\mathrm{i}D_{\mu\nu}(k)\,,$$

其中, 光子线变成了进入顶点的线段, 动量守恒条件变成

$$p_1-k-p_2=0\,.$$

在格林函数的微扰展开中, 会遇到各种复杂的 Feynman 图. 如果一个图形含有电子线的闭合圈, 则除了逆着电子线的方向写表达式的规则外, 还要遵循关于这种闭合圈的附加规定, 即每一个圈产生一个负号 (详见 4.2 小节). 如果一个图形含有若干组互不连接的电子线, 写表达式时可先写任何一连接部分的贡献, 再写其余部分的贡献, 次序不论. 当一个图形含有若干互不连接的部分时, 其表达式是各部分的贡献的积. 在动量空间的图形中 (光子线也有确定的方向), 每一个顶点产生一个因子 $(2\pi)^4$ 和一个动量守恒条件: 离开一个顶点的线段的动量之和等于进入该顶点的线段的动量之和. 对内线动量的积分被这种动量守恒条件限制为对于独立的内线动量的积分. 想要将动量空间和坐标空间的表达式联系起来, 可根据外腿的方向确定傅氏展开式中对应于外点的坐标因子. 一般的方法是: 在坐标空间的图形中坐标为 x 的外点如果在动量空间的图形中成为动量为 p 的外腿指着的点, 则在形如

(98) 式的傅氏展开中对应于坐标因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}$. 反之，如果成为与动量为 p 的外腿相背离的点，则对应于坐标因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}$.

4.2 算符 $U(\infty,-\infty)$ 的微扰展开. Wick 定理

算符 $U(\infty,-\infty)$ 在散射理论中的重要性是可想而知的，由于尚未考虑重整化，此处只是扼要讨论其微扰展开的正规积和图形表示. 将 (63) 式作展开，得

$$U(\infty,-\infty)=1+\sum_{n=1}^{\infty}U^{(n)}(\infty,-\infty)\,, \tag{99}$$

$$\begin{aligned}U^{(n)}(\infty,-\infty)=\frac{1}{n!}\int\mathrm{d}^4x_1\int\mathrm{d}^4x_2\cdots\int\mathrm{d}^4x_n\\ \times\mathcal{T}\Big\{(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x_1)(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x_2)\cdots(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x_n)\Big\}\,,\end{aligned} \tag{100}$$

$$\mathcal{H}_I(x)=:\,\{\overline{\psi}(x)e\gamma^{\mu}\psi(x)\}\,:A_{\mu}(x)\,, \tag{101}$$

$U^{(n)}(\infty,-\infty)$ 中的时序积可以借助于 Wick 定理改写为正规积，现在从已经知道的如下公式来阐明这一定理，即

$$\begin{aligned}\mathcal{T}\exp\Big\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4xJ^{\mu}(x)A_{\mu}(x)\Big\}=:\,\exp\Big\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4xJ^{\mu}(x)A_{\mu}(x)\Big\}\,:\\ \times\exp\Big\{-\frac{1}{2}\iint\mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4yJ^{\mu}(x)\langle0|\mathcal{T}\big(A_{\mu}(x)A_{\nu}(y)\big)|0\rangle J^{\nu}(y)\Big\}\,,\end{aligned} \tag{102}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{T}\exp\Big\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x\big(\overline{\eta}_{\alpha}(x)\psi_{\alpha}(x)+\overline{\psi}_{\alpha}(x)\eta_{\alpha}(x)\big)\Big\}\\ =:\,\exp\Big\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x\big(\overline{\eta}_{\alpha}(x)\psi_{\alpha}(x)+\overline{\psi}_{\alpha}(x)\eta_{\alpha}(x)\big)\Big\}\,:\\ \times\exp\Big\{-\iint\mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\overline{\eta}_{\alpha}(x)\langle0|\mathcal{T}\big(\psi_{\alpha}(x)\overline{\psi}_{\beta}(y)\big)|0\rangle\eta_{\beta}(y)\Big\}\,,\end{aligned} \tag{103}$$

$$\mathcal{T}\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\Big(\overline{\eta}_\alpha(x)\psi_\alpha(x)+\overline{\psi}_\alpha(x)\eta_\alpha(x)+J^\mu(x)A_\mu(x)\Big)\right\}$$

$$=:\exp\left\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\Big(\overline{\eta}_\alpha(x)\psi_\alpha(x)+\overline{\psi}_\alpha(x)\eta_\alpha(x)\right.$$

$$\left.+J^\mu(x)A_\mu(x)\Big)\right\}:\mathcal{Z}_0[\overline{\eta},\eta,J]\,, \tag{104}$$

其中 (104) 式可以由 (102) 与 (103) 式相乘得出. 以后将采用 $\mathcal{N}\{\}$ 或者 :: 作为相对于裸真空态 $|0\rangle$ 取正规积的一般记号, 即是在包含 $\overline{\psi}_\alpha$,ψ_β 和 A_μ 的积的各项中把所有产生算符移到所有消灭算符的左边, 而在移动时电子场算符看作是互相反对易的, 它们与源 $\overline{\eta}_\alpha$,η_β 也是互相反对易的. 电磁场算符看作是互相对易的, 它们与电子场算符以及所有的源当然也是互相对易的.

设 $X,Y,Z,\cdots$ 代表场算符 $A_\mu,\psi_\alpha,\overline{\psi}_\alpha$ 或场算符的线性组合, 定义

$$\overset{\bullet}{X}(x_1)\,\overset{\bullet}{Y}(x_2)=\mathcal{T}\big(X(x_1)Y(x_2)\big)-:X(x_1)Y(x_2):\,.$$

这个量 (有时也记为 $\overset{\otimes}{X}(x_1)\,\overset{\otimes}{Y}(x_2)$ 等) 称为 $X(x_1)$ 与 $Y(x_2)$ 的 "收缩". 由 (104) 式, 对于源 $(\eta,\overline{\eta},J^\mu)$ 微商两次后令其趋于零即得

$$\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)=\overset{\bullet}{A}_\nu(y)\,\overset{\bullet}{A}_\mu(x)=\langle 0|\mathcal{T}\big(A_\mu(x)A_\nu(y)\big)|0\rangle\,,$$

$$\overset{\bullet}{\psi}_\alpha(x)\,\overset{\bullet}{\overline{\psi}}_\beta(y)=-\overset{\bullet}{\overline{\psi}}_\beta(y)\,\overset{\bullet}{\psi}_\alpha(x)=\langle 0|\mathcal{T}\big(\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\beta(y)\big)|0\rangle\,,$$

$$\overset{\bullet}{\psi}_\alpha(x)\,\overset{\bullet}{\psi}_\beta(y)=\overset{\bullet}{\overline{\psi}}_\alpha(x)\,\overset{\bullet}{\overline{\psi}}_\beta(y)=0\,,$$

$$\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\bullet}{\psi}_\alpha(y)=\overset{\bullet}{\psi}_\alpha(y)\,\overset{\bullet}{A}_\mu(x)=0\,.$$

所以一对场算符收缩后就变成非算符的玻色量. 此外, 在 $\overset{\bullet}{X}\overset{\bullet}{Y}$ 与其他场算符形成的积中, 也允许移动 $\overset{\bullet}{X}$ 与 $\overset{\bullet}{Y}$, 使它们互相分开, 但是要求 $\overset{\bullet}{X}$ 或 $\overset{\bullet}{Y}$ 中的电磁场场算符与其他的收缩或者未收缩的场算符对易, 而其中的电子场算符与电磁场算符对易, 与电子场

算符反对易. 例如

$$\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)\,\overset{\circ}{\psi}_\alpha(z_1)\,\overline{\overset{\circ}{\psi}}_\beta(z_2)=\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\circ}{\psi}_\alpha(z_1)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)\,\overline{\overset{\circ}{\psi}}_\beta(z_2)$$
$$=\overset{\circ}{\psi}_\alpha(z_1)\,\overline{\overset{\circ}{\psi}}_\beta(z_2)\,\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)=-\,\overline{\overset{\circ}{\psi}}_\beta(z_2)\,\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)\,\overset{\circ}{\psi}_\alpha(z_1)\,,$$

$$\overset{\bullet}{\psi}_\alpha(x)\,\overline{\overset{\bullet}{\psi}}_\beta(y)\,\overset{\circ}{\psi}_{\alpha'}(z_1)\,\overline{\overset{\circ}{\psi}}_{\beta'}(z_2)=-\,\overset{\bullet}{\psi}_\alpha(x)\,\overline{\overset{\circ}{\psi}}_{\alpha'}(z_1)\,\overset{\bullet}{\psi}_\alpha(y)\,\overline{\overset{\circ}{\psi}}_{\beta'}(z_2)\,,$$

$$\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)\psi_\alpha(z_1)\overline{\psi}_\beta(z_2)=\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\psi_\alpha(z_1)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)\overline{\psi}_\beta(z_2)$$
$$=\psi_\alpha(z_1)\overline{\psi}_\beta(z_2)\,\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)\,.$$

再将 (102) 式按源 J^μ 的幂次展开, 取 n 次项得

$$\mathcal{T}\Big\{\int \mathrm{d}^4z J^\mu(z)A_\mu(z)\Big\}^n$$
$$=\sum_{l=0}^{[n/2]}\frac{(n)!(2l-1)!!}{(n-2l)!(2l)!}:\Big\{\int \mathrm{d}^4z J^\mu(z)A_\mu(z)\Big\}^{(n-2l)}:$$
$$\times\Big\{\iint \mathrm{d}^4x\,\mathrm{d}^4y J^\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)J^\nu(y)\Big\}^l,$$

其中 $[n/2]$ 表示 $n/2$ 的整数部分. 注意, 使 $2l$ 重积

$$J^\mu(x_1)A_\mu(x_1)\cdots J^\mu(x_{2l})A_\mu(x_{2l})$$

完全收缩的方式共有 $(2l-1)!!$ 种, 每一种完全收缩都贡献一项

$$\Big\{\iint \mathrm{d}^4x\,\mathrm{d}^4y J^\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)J^\nu(y)\Big\}^l.$$

而 $\frac{(n)!}{(n-2l)!(2l)!}$ 是从 n 个因子取 $2l$ 个的组合数, 因此这个等式又可以写成

$$\int \mathrm{d}^4x_1\cdots\int \mathrm{d}^4x_n\mathcal{T}\big\{J^{\mu_1}(x_1)A_{\mu_1}(x_1)\cdots J^{\mu_n}(x_n)A_\mu(x_n)\big\}$$
$$=\int \mathrm{d}^4x_1\cdots\sum_{l=0}^{[n/2]}:\sum_{l\text{对收缩}}\big\{J^\mu(x_1)A_\mu(x_1)\cdots J^\mu(x_n)A_\mu(x_n)\big\}:$$

这也表明

$$\mathcal{T}\{A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)\cdots A_{\mu_n}(x_n)\}$$
$$=\sum_{l=0}^{[n/2]}:\sum_{l\text{ 对收缩}}\{A_{\mu_1}(x_1)\cdots A_{\mu_n}(x_n)\}:\ . \tag{105}$$

这即是关于电磁场算符的 Wick 定理的最基本的内容.

通常还需要处理含有正规积的时序积，例如，考虑

$$\mathcal{T}\Big\{A_{\mu_1}(x_1)\cdots A_{\mu_n}(x_n):\{A_{\nu_1}(y_1)\cdots A_{\nu_m}(y_m)\}:\Big\}. \tag{106}$$

将 (102) 式看成用时序积表示正规积的公式，有

$$:\exp\Big\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x J^\mu(x)A_\mu(x)\Big\}:$$
$$=\mathcal{T}\exp\Big\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x J^\mu(x)A_\mu(x)\Big\}$$
$$\times\exp\Big\{\frac{1}{2}\iint \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y J^\mu(x)\ \overset{\bullet}{A}_\mu(x)\ \overset{\bullet}{A}_\nu(y)J^\nu(y)\Big\}.$$

按源 J^μ 的幂次展开，取 m 次项得

$$:\Big\{\int \mathrm{d}^4z J^\mu(z)A_\mu(z)\Big)\Big\}^m$$
$$=\sum_{l=0}^{[m/2]}\frac{(m)!(2l-1)!!}{(m-2l)!(2l)!}\mathcal{T}\Big\{\int \mathrm{d}^4z J^\mu(z)A_\mu(z)\Big\}^{(m-2l)}$$
$$\times\Big\{-\iint \mathrm{d}^4x\,\mathrm{d}^4y J^\mu(x)\ \overset{\bullet}{A}_\mu(x)\ \overset{\bullet}{A}_\nu(y)J^\nu(y)\Big\}^l,$$

因此有

$$:\{A_{\nu_1}(y_1)\cdots A_{\nu_m}(y_m)\}:$$
$$=\sum_{l=0}^{[m/2]}(-1)^l\mathcal{T}\sum_{l\text{ 对收缩}}\{A_{\nu_1}(y_1)\cdots A_{\nu_m}(y_m)\}. \tag{107}$$

以此代入 (106) 式即可借助 (105) 式改写成正规积. 最后的结果相当于不管内部的正规积记号写出各项, 但是剔除表示该正规积内的场算符发生收缩的所有项. 我们记之为

$$\begin{aligned} &\mathcal{T}\Big\{A_{\mu_1}(x_1)\cdots A_{\mu_n}(x_n):\Big\{A_{\nu_1}(y_1)\cdots A_{\nu_m}(y_m)\Big\}:\Big\} \\ &=\sum_{l=0}^{[(n+m)/2]}\widetilde{\sum}_{l\text{ 对收缩}}\Big\{A_{\mu_1}(x_1)\cdots A_{\mu_n}(x_n) \\ &\quad\times A_{\nu_1}(y_1)\cdots A_{\nu_m}(y_m)\Big\}:\ . \end{aligned} \tag{108}$$

其中,记号 $\widetilde{\sum}$ 表示选择性求和,即不允许 $A_{\nu_1}(y_1)A_{\nu_2}(y_2)\cdots A_{\nu_m}(y_m)$ 中的任何一对算符发生收缩. 当时序积内含有多个正规积因子时, 仍然可以用这样的方法改写为正规积的和. 即: 按照没有内部正规积因子的情形写出各项, 但是不允许原来属于同一个正规积因子的场算符发生收缩.

对于电子场, 也可以作相应的讨论. 由 (103) 式, 可得

$$\begin{aligned} \mathcal{T}\Big\{\int \mathrm{d}^4z\,F(z)\Big\}^n &= \sum_{l=0}^{[n/2]}\frac{(n)!(2l-1)!!}{(n-2l)!(2l)!}:\Big\{\int \mathrm{d}^4z\,F(z)\Big\}^{(n-2l)}: \\ &\quad\times\Big\{\iint \mathrm{d}^4x\,\mathrm{d}^4y\bar{\eta}_\alpha(x)\,\overset{\bullet}{\psi}_\alpha(x)\,\overset{\bullet}{\bar{\psi}}_\beta(y)\eta_\eta(y)\Big\}^l, \end{aligned}$$

其中

$$F(z)=\bar{\eta}_\alpha(z)\psi_\alpha(z)+\overline{\psi}_\alpha(z)\eta_\alpha(z)\,.$$

由于源 $\eta_\alpha,\bar{\eta}_\beta$ 是费米量, 而电子场算符在时序积或者正规积内互相反对易, 与 (105) 式相应的公式是

$$\begin{aligned} &\mathcal{T}\{\psi_{\alpha_1}(x_1)\cdots\psi_{\alpha_m}(x_m)\overline{\psi}_{\beta_1}(y_1)\cdots\overline{\psi}_{\beta_2}(y_n)\} \\ &=\sum_l\{\pm\}:\sum_{l\text{ 对收缩}}\{\psi_{\alpha_1}(x_1)\cdots\psi_{\alpha_m}(x_m)\overline{\psi}_{\beta_1}(y_1)\cdots\overline{\psi}_{\beta_2}(y_n)\}:, \end{aligned} \tag{109}$$

其中右边每一项的正负号取决于收缩和未收缩的场算符混排的顺序，当排成左边的标准顺序时取正号，$\sum_l$ 表示对于有贡献的所有 l 值求和. 当时序积内含有多个正规积因子时，仍然可以按照没有这种因子的情形写出各项，但是不允许原来属于同一个正规积因子的场算符发生收缩. 即

$$\begin{aligned}&\mathcal{T}\left\{\psi_{\alpha_1}(x_1)\cdots\psi_{\alpha_m}(x_m)\overline{\psi}_{\beta_1}(y_1)\cdots\overline{\psi}_{\beta_2}(y_n)\Big|_{\text{可含正规积因子}}\right\}\\&=\sum_l\{\pm\}:\sum\nolimits_{l\text{对收缩}}\left\{\psi_{\alpha_1}(x_1)\cdots\overline{\psi}_{\beta_1}(y_1)\cdots\overline{\psi}_{\beta_2}(y_n)\right\}:,\end{aligned}\tag{110}$$

其中，记号 $\widetilde{\sum}$ 仍然是表示不允许原来属于同一个正规积的场算符发生收缩.

更加复杂的时序积既含有若干个正规积因子，又兼有电子场和电磁场的场算符. 但是由于这两类场算符本来就是互相对易的，它总是等于两个时序积的积，其中一个只包含电子场算符，另一个只包含电磁场算符. 所以，不管 $X,Y,Z,\cdots W$ 等代表电子场算符或者电磁场算符，可以一般地将 Wick 定理表示为

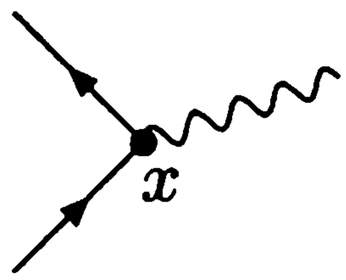
$$\begin{aligned}&\mathcal{T}\left\{X(x_1)Y(x_2)Z(x_3)\cdots W(x_m)\Big|_{\text{可含正规积因子}}\right\}\\&=\sum_{l=0}\{\pm\}:\widetilde{\sum\nolimits}_{l\text{对收缩}}\left\{X(x_1)Y(x_2)Z(x_3)\cdots W(x_m)\right\}:,\end{aligned}\tag{111}$$

其中右边每一项的正负号取决于收缩和未收缩的电子场算符混排的顺序，当排成左边的标准顺序时取正号.

为了用图形表示 $U^{(n)}(\infty,-\infty)$ 中的正规积，除了前面说明过的顶点以及代表自由传播函数的线段外，还规定用外线段代表场算符. 首先看看一级项. 在 $U^{(1)}(\infty,-\infty)$ 中，编时算符不起作用，其被积函数 $(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x)$ 已经是正规积形式. 这种简单的正规

积被图示为

$$:\{\overline{\psi}_\alpha(x)(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha\beta})\psi_\beta(x)\}:A_\mu(x) \quad =$$



此图形包含一个电子光子顶点以及汇合于该顶点的三根外线段，顶点的坐标 x 是 $U^{(1)}(\infty,-\infty)$ 中的积分变量，顶点因子 $(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha\beta})$ 中的指标都是求和指标. 波浪线代表算符 $A_\mu(x)$, 从顶点向外的实线段代表 $\overline{\psi}_\alpha(x)$, 进入顶点的实线段代表 $\psi_\beta(x)$. 从图形写表达式时，逆着电子线的方向写出各因子，再写出波浪线代表的 $A_\mu(x)$ 即可，最后要写上正规积记号.

再看二级项

$$U^{(2)}(\infty,-\infty)=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4x_1\int \mathrm{d}^4x_2 T\left\{(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x_1)(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x_2)\right\}.$$

考虑了所有允许的收缩方式后，知道 $T\left\{(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x_1)(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x_2)\right\}$ 等于八项的和. 不含闭合圈的项是：

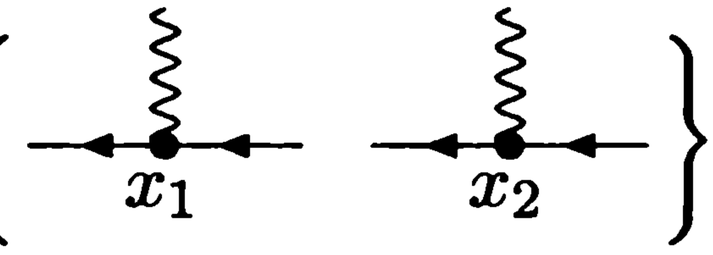
$$\begin{aligned}
(1)\ :\ &\overline{\psi}_\alpha(x_1)(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha\beta})\psi_\beta(x_1)A_\mu(x_1)\\
&\times\overline{\psi}_{\alpha'}(x_2)(-\mathrm{ie}\gamma^\nu_{\alpha'\beta'})\psi_{\beta'}(x_2)A_\nu(x_2)\ :,
\end{aligned}$$

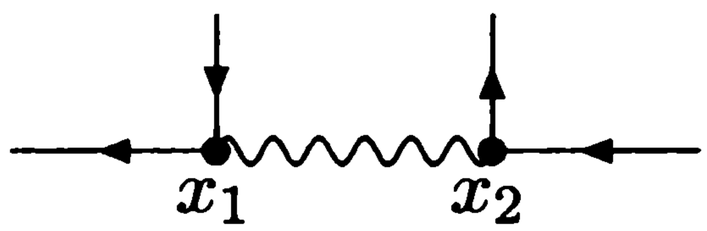
$$\begin{aligned}
(2)\ :\ &\overline{\psi}_\alpha(x_1)(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha\beta})\psi_\beta(x_1)\ \dot{A}_\mu(x_1)\\
&\times\overline{\psi}_{\alpha'}(x_2)(-\mathrm{ie}\gamma^\nu_{\alpha'\beta'})\psi_{\beta'}(x_2)\ \dot{A}_\nu(x_2)\ :\\
=:\ &\overline{\psi}_\alpha(x_1)(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha\beta})\psi_\beta(x_1)\overline{\psi}_{\alpha'}(x_2)\\
&\times(-\mathrm{ie}\gamma^\nu_{\alpha'\beta'})\psi_{\beta'}(x_2)\ :\dot{A}_\mu(x_1)\ \dot{A}_\nu(x_2),
\end{aligned}$$

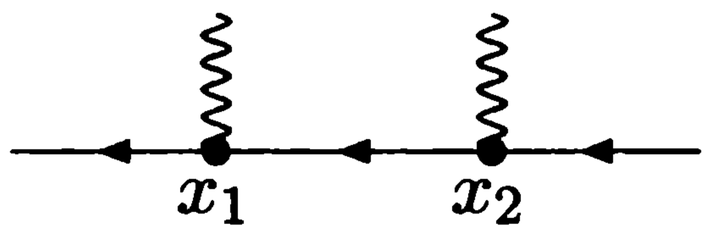
$$\begin{aligned}
(3)\ :\ &\overline{\psi}_\alpha(x_1)(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha\beta})\ \dot{\psi}_\beta(x_1)A_\mu(x_1)\\
&\times\dot{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)(-\mathrm{ie}\gamma^\nu_{\alpha'\beta'})\psi_{\beta'}(x_2)A_\nu(x_2)\ :\\
=:\ &\overline{\psi}_\alpha(x_1)(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha\beta})\ \dot{\psi}_\beta(x_1)\ \dot{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)\\
&\times(-\mathrm{ie}\gamma^\nu_{\alpha'\beta'})\psi_{\beta'}(x_2)A_\mu(x_1)A_\nu(x_2)\ :,
\end{aligned}$$

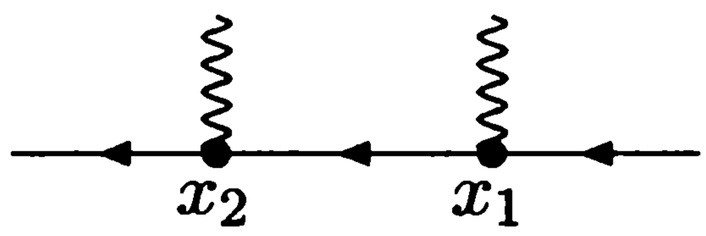
$$(4):\overset{\bullet}{\overline{\psi}}_\alpha(x_1)\big(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha\beta}\big)\psi_\beta(x_1)A_\mu(x_1)$$
$$\times\overline{\psi}_{\alpha'}(x_2)\big(-\mathrm{ie}\gamma^\nu_{\alpha'\beta'}\big)\overset{\bullet}{\psi}_{\beta'}(x_2)A_\nu(x_2):$$
$$=:\overline{\psi}_{\alpha'}(x_2)\big(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha'\beta'}\big)\overset{\bullet}{\psi}_{\beta'}(x_2)\overset{\bullet}{\overline{\psi}}_\alpha(x_1)$$
$$\big(-\mathrm{ie}\gamma^\nu_{\alpha\beta}\big)\psi_\beta(x_1)A_\mu(x_1)A_\nu(x_2):,$$

按照逆着电子线的方向写表达式的规则，它们可以图示如下：

(1) = 

(2) = 

(3) = 

(4) = 

第 (1) 项的图形包含两个不连接的部分，代表两个独立因子的积. 第 (3) 和第 (4) 项的图形在交换两个顶点的序号时互相变成对方，所以它们对于 $U(\infty,-\infty)$ 的贡献相同.

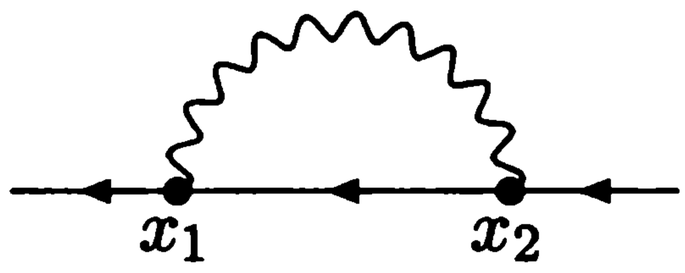
含有闭合圈但不是电子线闭合圈的项为

$$(5):\overline{\psi}_\alpha(x_1)\big(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha\beta}\big)\overset{\otimes}{\psi}_\beta(x_1)\overset{\bullet}{A}_\mu(x_1)$$
$$\times\overset{\otimes}{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)\big(-\mathrm{ie}\gamma^\nu_{\alpha'\beta'}\big)\psi_{\beta'}(x_2)\overset{\bullet}{A}_\nu(x_2):$$
$$=:\overline{\psi}_\alpha(x_1)\big(-\mathrm{ie}\gamma^\mu_{\alpha\beta}\big)\overset{\otimes}{\psi}_\beta(x_1)\overset{\otimes}{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)$$
$$\times\big(-\mathrm{ie}\gamma^\nu_{\alpha'\beta'}\big)\psi_{\beta'}(x_2):\overset{\bullet}{A}_\mu(x_1)\overset{\bullet}{A}_\nu(x_2),$$

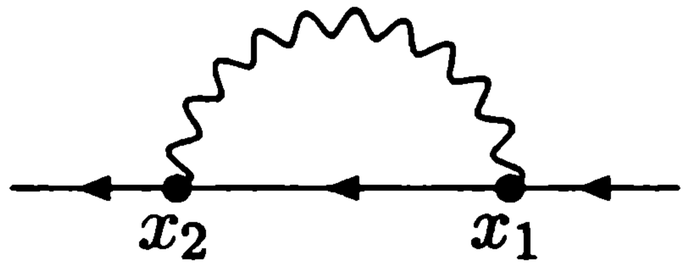
$$(6)\ :\overset{\circ}{\overline{\psi}}_\alpha(x_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^\mu_{\alpha\beta}\big)\psi_\beta(x_1)\ \dot{A}_\mu(x_1)$$
$$\times\overline{\psi}_{\alpha'}(x_2)\big(-\mathrm{i}e\gamma^\nu_{\alpha'\beta'}\big)\ \overset{\circ}{\psi}_{\beta'}(x_2)\ \dot{A}_\nu(x_2)\ :$$
$$=:\ \overline{\psi}_{\alpha'}(x_2)\big(-\mathrm{i}e\gamma^\mu_{\alpha'\beta'}\big)\ \overset{\circ}{\psi}_{\beta'}(x_2)\ \overset{\circ}{\overline{\psi}}_\alpha(x_1)$$
$$\times\big(-\mathrm{i}e\gamma^\nu_{\alpha\beta}\big)\psi_\beta(x_1)\ :\dot{A}_\mu(x_1)\ \dot{A}_\nu(x_2)\,,$$

其图形是：

(5) =



(6) =



这两项的图形在交换两个顶点的序号时互相变成对方，所以它们对于 $U(\infty,-\infty)$ 的贡献相同.

第 (7) 和第 (8) 项是：

$$(7)\ :\overset{\circ}{\overline{\psi}}_\alpha(x_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^\mu_{\alpha\beta}\big)\ \overset{\otimes}{\psi}_\beta(x_1)A_\mu(x_1)$$
$$\times\ \overset{\otimes}{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)\big(-\mathrm{i}e\gamma^\nu_{\alpha'\beta'}\big)\ \overset{\circ}{\psi}_{\beta'}(x_2)A_\nu(x_2)\ :$$
$$=\overset{\circ}{\overline{\psi}}_\alpha(x_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^\mu_{\alpha\beta}\big)\ \overset{\otimes}{\psi}_\beta(x_1)\ \overset{\otimes}{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)$$
$$\times\big(-\mathrm{i}e\gamma^\nu_{\alpha'\beta'}\big)\ \overset{\circ}{\psi}_{\beta'}(x_2)\ :\ A_\mu(x_1)A_\nu(x_2)\ :,$$

$$(8)\ \overset{\circ}{\overline{\psi}}_\alpha(x_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^\mu_{\alpha\beta}\big)\ \overset{\otimes}{\psi}_\beta(x_1)\ \dot{A}_\mu(x_1)$$
$$\times\ \overset{\otimes}{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)\big(-\mathrm{i}e\gamma^\nu_{\alpha'\beta'}\big)\ \overset{\circ}{\psi}_{\beta'}(x_2)\ \dot{A}_\nu(x_2)$$
$$=\overset{\circ}{\overline{\psi}}_\alpha(x_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^\mu_{\alpha\beta}\big)\ \overset{\otimes}{\psi}_\beta(x_1)\ \overset{\otimes}{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)$$
$$\times\big(-\mathrm{i}e\gamma^\nu_{\alpha'\beta'}\big)\ \overset{\circ}{\psi}_{\beta'}(x_2)\ \dot{A}_\mu(x_1)\ \dot{A}_\nu(x_2)\,.$$

现在看看这两项中的

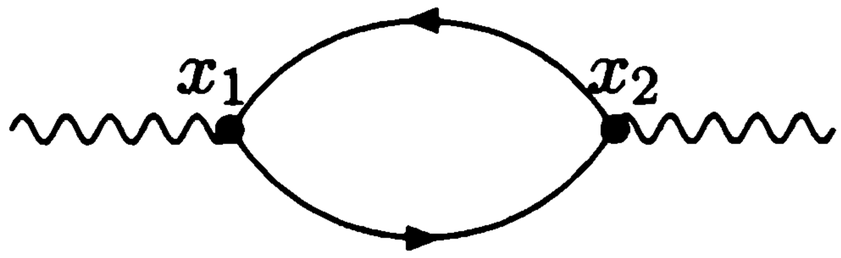
$$\overset{\circ}{\overline{\psi}}_{\alpha}(x_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu}_{\alpha\beta}\big)\overset{\otimes}{\psi}_{\beta}(x_1)\overset{\otimes}{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}_{\alpha'\beta'}\big)\overset{\circ}{\psi}_{\beta'}(x_2)\,, \tag{112}$$

它来自 : $\overline{\psi}_{\alpha}(x_1)(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu}_{\alpha\beta})\psi_{\beta}(x_1)$: 与 : $\overline{\psi}_{\alpha'}(x_2)(-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}_{\alpha'\beta'})\psi_{\beta'}(x_2)$: 的完全收缩. 由于电子场是费米场, 有

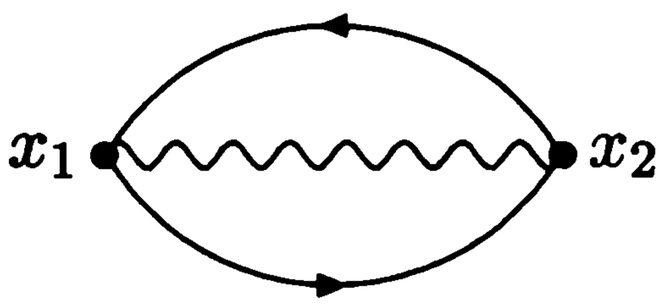
$$\begin{aligned}
&\overset{\circ}{\overline{\psi}}_{\alpha}(x_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu}_{\alpha\beta}\big)\overset{\otimes}{\psi}_{\beta}(x_1)\overset{\otimes}{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}_{\alpha'\beta'}\big)\overset{\circ}{\psi}_{\beta'}(x_2)\\
&\quad=-\overset{\circ}{\psi}_{\beta'}(x_2)\overset{\circ}{\overline{\psi}}_{\alpha}(x_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu}_{\alpha\beta}\big)\overset{\otimes}{\psi}_{\beta}(x_1)\overset{\otimes}{\overline{\psi}}_{\alpha'}(x_2)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}_{\alpha'\beta'}\big)\\
&\quad=-\mathrm{tr}\Big\{\mathrm{i}\,S(x_2-x_1)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu}\big)\mathrm{i}\,S(x_1-x_2)\big(-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}\big)\Big\}\,,
\end{aligned}$$

其中, tr 表示求矩阵迹. 前面说过, 在场论中一般地规定, Feynman 图中的每一个费米子圈都贡献一个负号, 因此第 (7) 项和第 (8) 项就被图示为:

(7) =



(8) =



显然, 第 (1), 第 (2) 以及第 (7), 第 (8) 项的图形在交换两个顶点的序号时, 都是各自变成自己.

$U(\infty,-\infty)$ 的高级项的图示方法也是相似的. 记住: 图形中的内线代表传播函数, 顶点因子是 $(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu})$, 外线代表场算符, 有外线的图形总是代表场算符的正规积. 要逆着电子线的方向写表达式, 一个闭合的电子圈产生一个负号. 如果一个图形在其顶点的序号被置换时能够产生 m 个不同的图形, 则这组图形对于 $U(\infty,-\infty)$ 的贡献等于一个图形的贡献的 m 倍.

实际上，$U(\infty,-\infty)$ 总是以 $U(\infty,-\infty)/\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle$ 的形式出现. 设想在 $U(\infty,-\infty)$ 的微扰展开式中，将零级项和所有由无外线的图形代表的项加起来，当然得到 $\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle$, 被分母除后变成 1. 而且，在展开式中，一个由有外线又包含无外线因子的图形代表的项，将图形的这种独立因子剔除之后仍然代表展开式中的项. 取一个其图形的任何部分都至少与一根外线连通的项作为参考项，将它和所有由它的图形与无外线图形的积代表的项加起来，结果必定等于这个参考项乘 $\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle$, 被分母除后变成该参考项. 所以，在 $U(\infty,-\infty)$ 的微扰展开式中，只保留零级项以及图形的任何部分至少与一根外线连通的项，就得到 $U(\infty,-\infty)/\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle$ 的微扰展开.

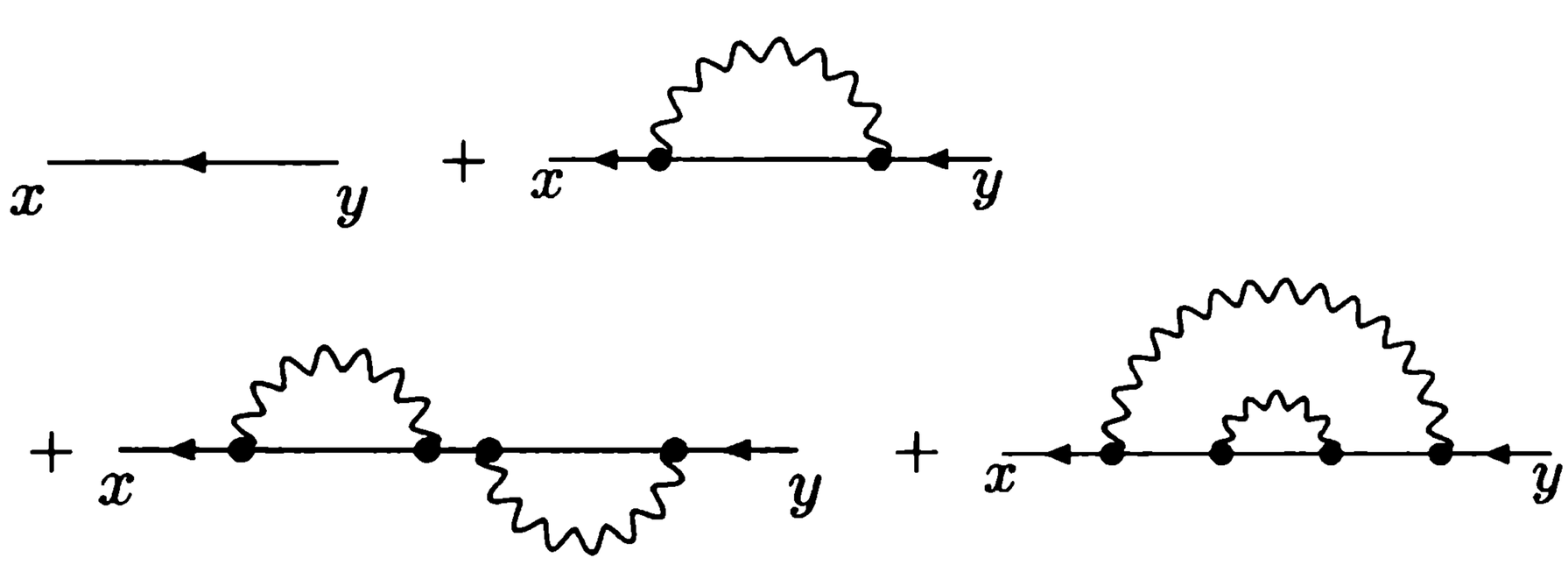
§5 正规图形和正规顶角函数

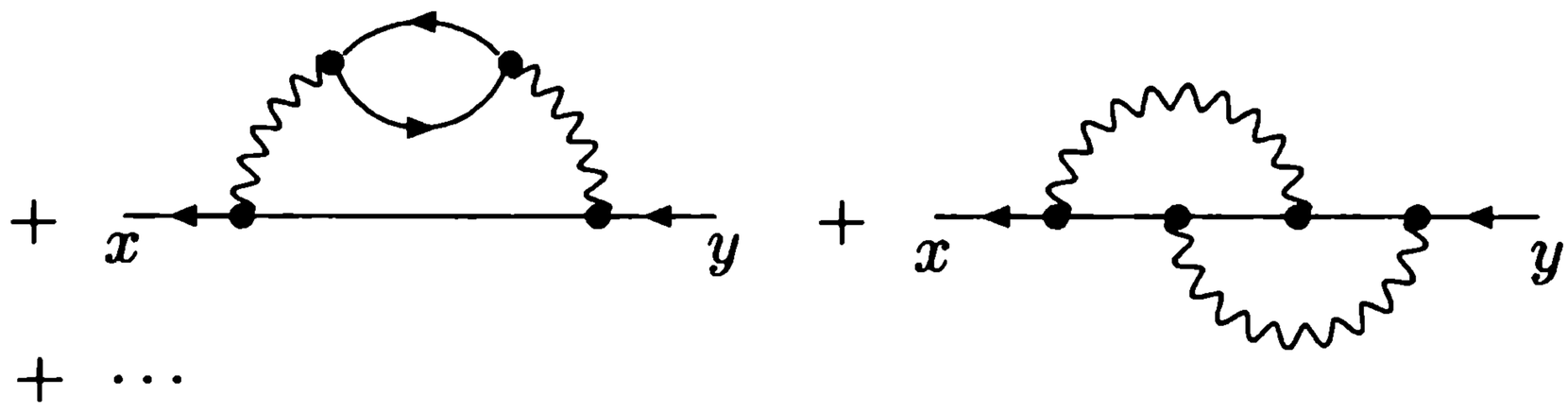
5.1 正规自能函数. 电子光子顶角函数

按照 (58) 式，电子完全传播函数可表示为

$$\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\beta}(x-y)=\frac{\langle 0|T\{U(\infty,-\infty)\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\beta(y)\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}.$$

将 $\{U(\infty,-\infty)/\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle\}$ 的微扰展开代进来, 得出 $\mathrm{i}\overline{S}(x-y)$ 的图形表示：



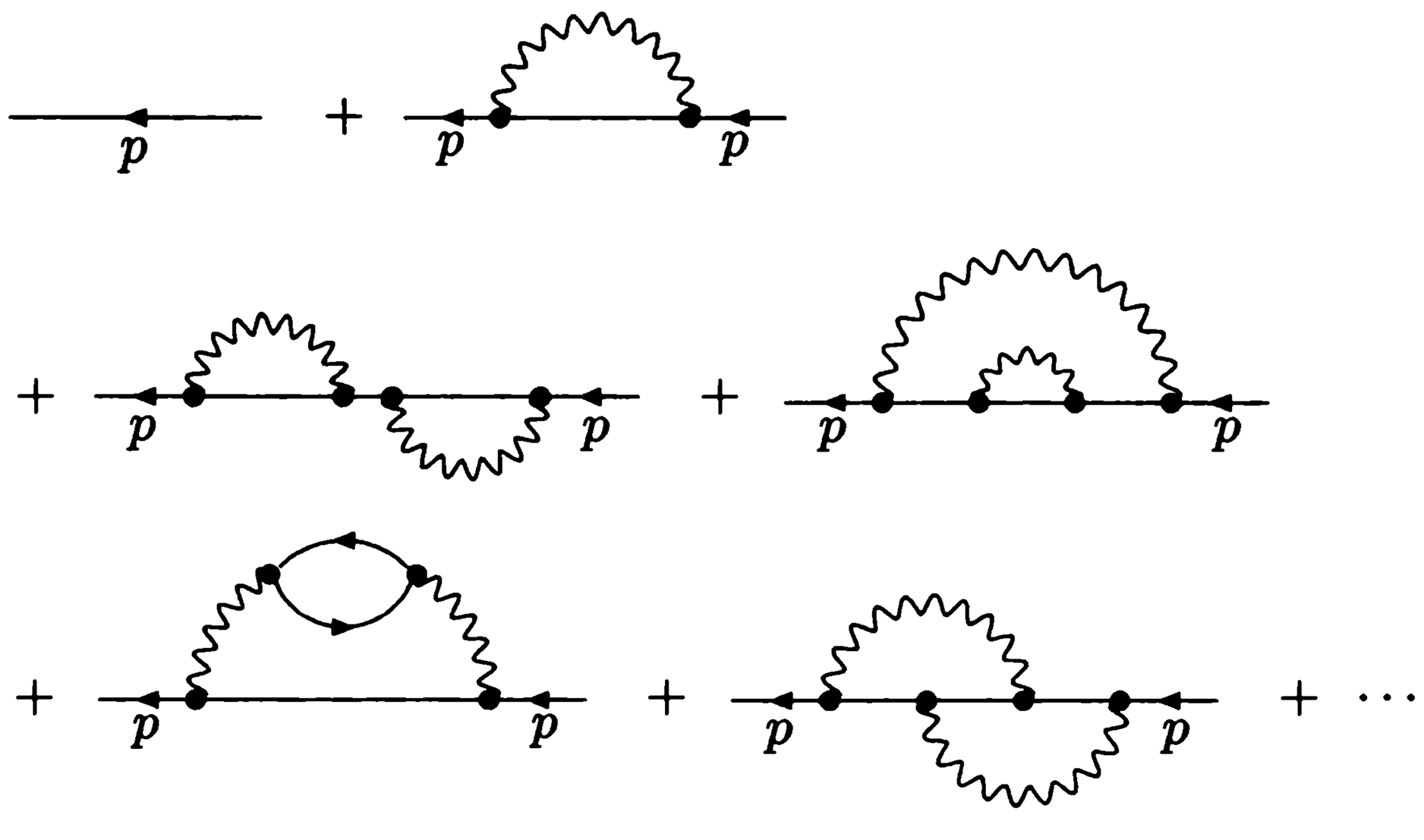


在高阶图中暗含着对于算符 $\{U(\infty,-\infty)/\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle\}$ 的正规积项中所有顶点的坐标的积分.

动量空间的电子完全传播函数 $\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\beta}(p)$ 由下式定义:

$$\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\beta}(x-y)=\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\beta}(p)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p(x-y)}\,. \tag{113}$$

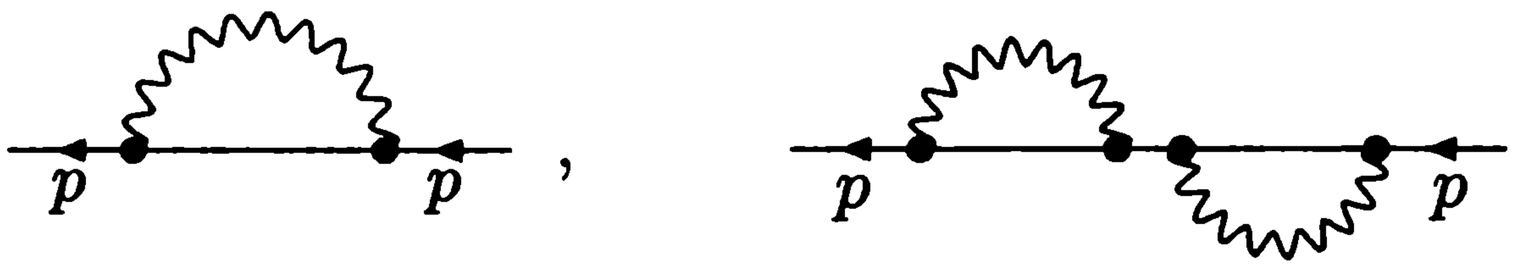
矩阵 $\mathrm{i}\overline{S}(p)$ 的微扰展开为



在高阶图中暗含着对于独立内动量的积分.

只有两根外电子线而没有外光子线的连接 Feynman 图称为电子自能图. 作为复杂图形的一部分出现的自能图称为一个自能部分. 所以电子完全传播函数即是自由传播函数加上对它的一切自能修正. 如果一个连接图在剪断任何一根内线后仍然是一个连

接图，就称为单粒子不可约图或正规图．以下面的两个图为例：

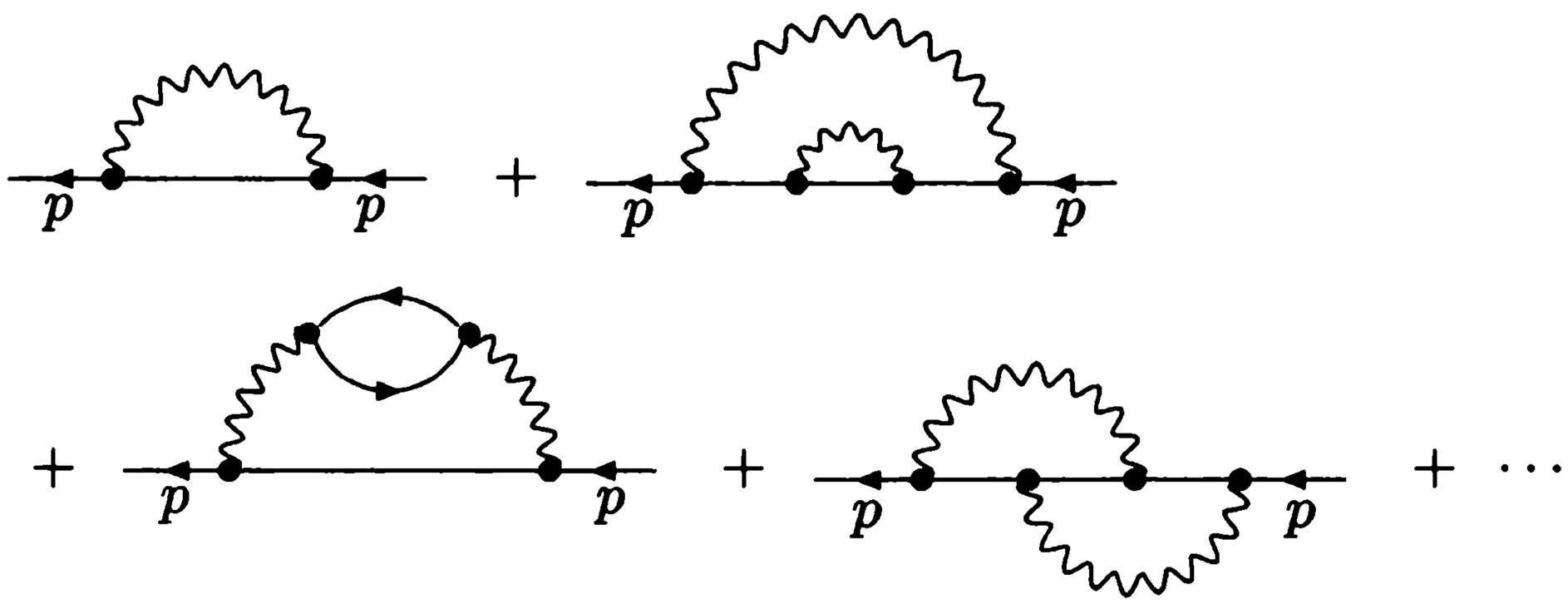


其中的单圈图是单粒子不可约的，另一个图则不是．

$\mathrm{i}\overline{S}(p)$ 的微扰展开中一切单粒子不可约的电子自能图的贡献之和可以写成：

$$\mathrm{i}S(p)\{-\mathrm{i}\Sigma(p)\}\mathrm{i}S(p)\,,$$

其中的 $-\mathrm{i}\Sigma(p)$ 称为电子正规自能函数，可用截腿图形表示为



所谓截腿图形是指外腿不含有自能部分，而且在写表达式时不计外腿的贡献．图中标明“外腿”只是为了表明原来的外腿的方向和动量，$\Sigma(p)$ 也被称为电子的质量算符．设想在 $\mathrm{i}\overline{S}(p)$ 的微扰展开式中，取任何一个由单粒子不可约图表示的项 $\mathrm{i}S(p)\{X\}\mathrm{i}S(p)$ 作为参考，借助图形表示可以直观地看出，将这一项和右端包含它作为因子的所有项加起来，必定等于 $\mathrm{i}\overline{S}(p)\{X\}\mathrm{i}S(p)$．再对来自所有参考项的这种贡献求和，结果只比 $\mathrm{i}\overline{S}(p)$ 少了最低级项 $\mathrm{i}S(p)$．即

$$\mathrm{i}\overline{S}(p)=\mathrm{i}S(p)+\mathrm{i}\overline{S}(p)\{-\mathrm{i}\Sigma(p)\}\mathrm{i}S(p)\,. \tag{114}$$

或

$$\mathrm{i}\overline{S}(p)=\frac{1}{[\mathrm{i}S(p)]^{-1}+\mathrm{i}\Sigma(p)}\,. \tag{115}$$

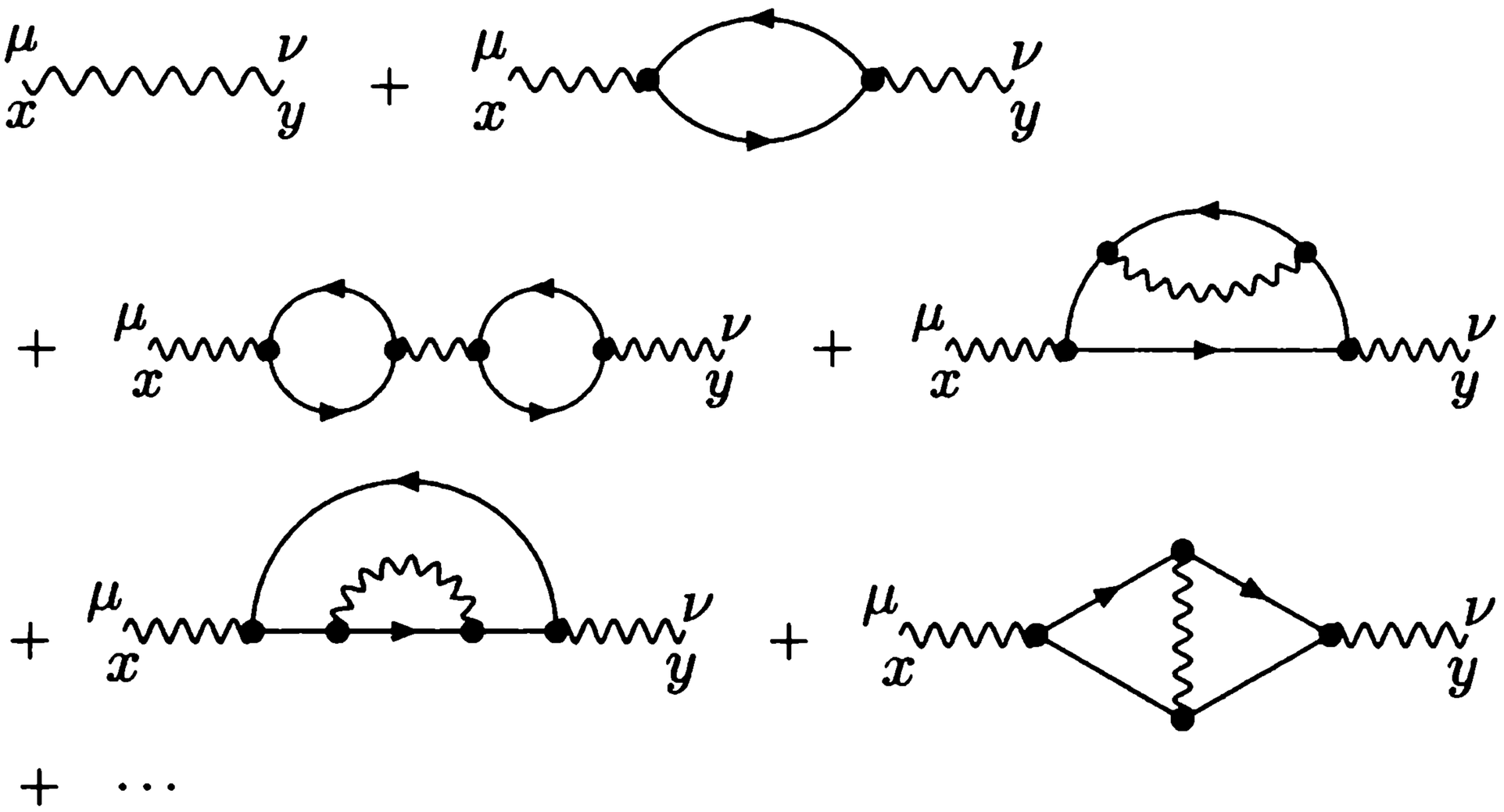
也可以写成

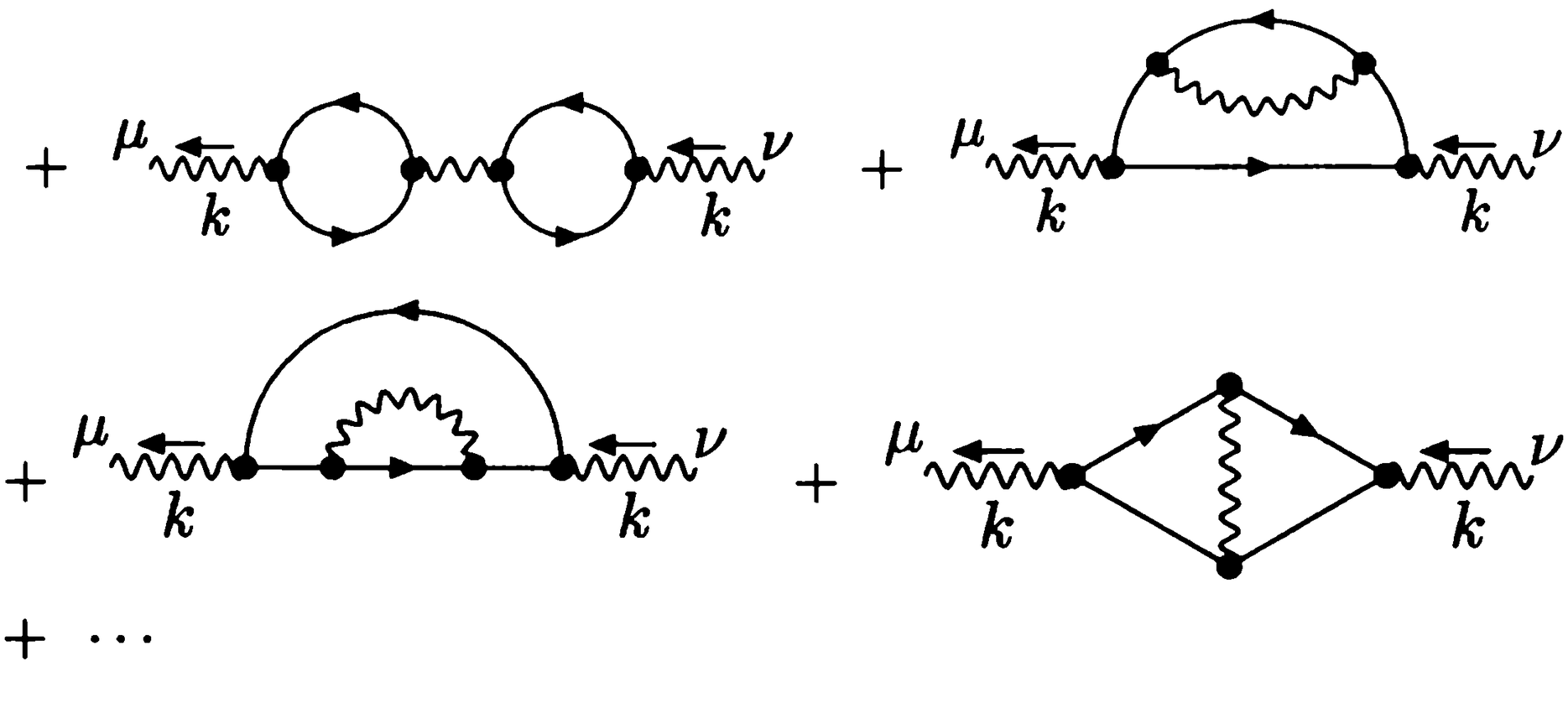
$$\mathrm{i}\overline{S}(p) = \mathrm{i}S(p) + \mathrm{i}S(p)\{-\mathrm{i}\Sigma(p)\}\mathrm{i}S(p) + \mathrm{i}S(p)\{-\mathrm{i}\Sigma(p)\}\mathrm{i}S(p)\{-\mathrm{i}\Sigma(p)\}\mathrm{i}S(p) + \cdots . \quad (116)$$

按照 (59) 式，光子完全传播函数可表示为

$$\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(x-y) = \frac{\langle 0|T\{U(\infty,-\infty)A_\mu(x)A_\nu(y)\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle} .$$

其微扰展开也只包含连接图形的贡献 (也见下面例题中所述的 Furry 定理)：


μ
ν
x
y
+
+
+



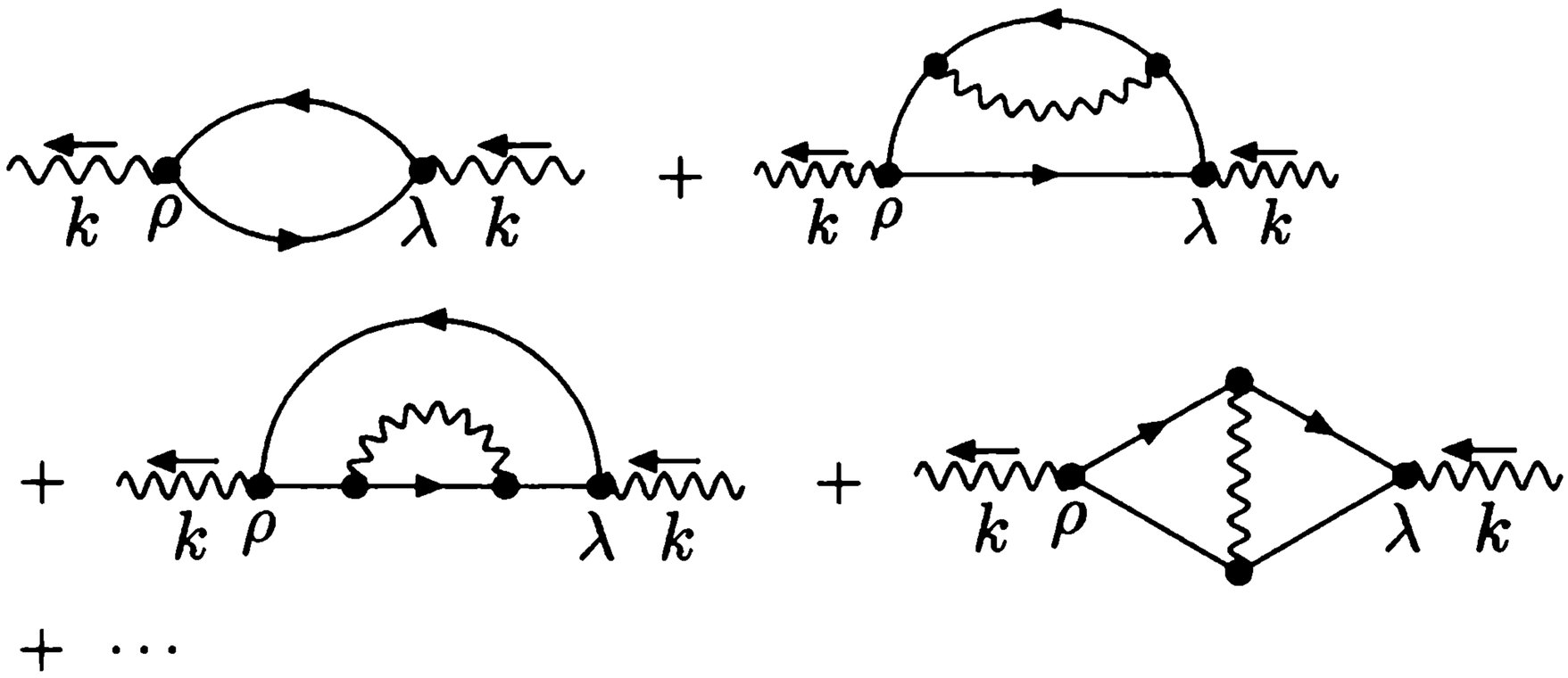
$+ \cdots$

在高阶图中暗含着对于独立内动量的积分.

只有两根外光子线而没有外电子线的连接 Feynman 图称为光子自能图. 作为复杂图形的一部分出现的自能图称为一个自能部分. 光子完全传播函数即是自由传播函数加上对它的一切自能修正. 仍然按上述方法定义单粒子不可约图, 将 $\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(k)$ 的微扰展开中一切单粒子不可约的光子自能图的贡献之和记为:

$$\mathrm{i}D_{\mu\rho}(k)\{\mathrm{i}e^2\Pi^{\rho\lambda}(k)\}\mathrm{i}D_{\lambda\nu}(k)\,,$$

其中的 $\mathrm{i}e^2\Pi^{\rho\lambda}(k)$ 为光子正规自能函数, 可用截腿图形表示为



$+ \cdots$

$\Pi^{\rho\lambda}(k)$ 也被称为真空极化张量.

将 $D_{\mu\nu}(k)$,$\overline{D}_{\mu\nu}(k)$ 和 $\Pi^{\rho\lambda}(k)$ 分别看作矩阵 $\mathcal{D}(k)$, $\overline{\mathcal{D}}(k)$ 和 $\mathcal{P}(k)$

的元素，由 $\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(k)$ 的微扰展开式可得

$$\mathrm{i}\overline{\mathcal{D}}(k) = \mathrm{i}\mathcal{D}(k) + \mathrm{i}\,\mathcal{D}(k)\{\mathrm{i}e^2\mathcal{P}(k)\}\mathrm{i}\,\overline{\mathcal{D}}(k)\,. \tag{118}$$

或

$$\mathrm{i}\,\overline{\mathcal{D}}(k) = \frac{1}{[\mathrm{i}\,\mathcal{D}(k)]^{-1} - \mathrm{i}e^2\mathcal{P}(k)}\,. \tag{119}$$

也可写成

$$\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu\nu}(k) = \mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(k) + \mathrm{i}\,D_{\mu\rho}(k)\{\mathrm{i}e^2\Pi^{\rho\lambda}(k)\}\mathrm{i}\,D_{\lambda\nu}(k) + \cdots\,. \tag{120}$$

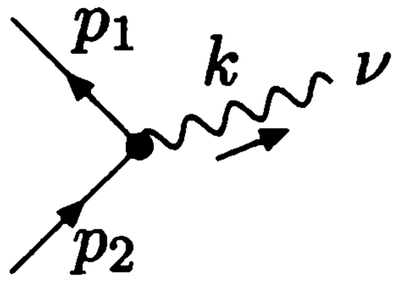
由 Furry 定理，三点格林函数是 $\langle\langle 0|T\left(\psi^h_\alpha(x_1)\overline{\psi}^h_\beta(x_2)A^h_\nu(x_3)\right)|0\rangle\rangle$，它可以表示为

$$G_{\alpha\beta\nu}(x_1,x_2,x_3) = \frac{\langle 0|T\left\{U(\infty,-\infty)\psi^h_\alpha(x_1)\overline{\psi}^h_\beta(x_2)A_\nu(x_3)\right\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,.$$

前面已经写出其最低级微扰项：

$$G^{(1)}_\nu(x_1,x_2,x_3) = \int \mathrm{d}^4z\mathrm{i}\,S(x_1-z)(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\mathrm{i}\,S(z-x_2)\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(x_3-z)\,,$$

在动量空间的表示是



$$= \quad \mathrm{i}\,S(p_1)(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\mathrm{i}\,S(p_2)\mathrm{i}\,D_{\nu\mu}(k)\,.$$

只有两根外电子线和一根外光子线的连接 Feynman 图称为电子光子顶角图，作为复杂图形的一部分出现的顶角图称为一个顶角部分．在 $G_{\alpha\beta\nu}$ 的微扰展开的高级项中，也不出现不连接图形．在计及所有项之后，等于将最低阶图形的三根外线和顶点换成完全传播函数和电子光子三点顶角函数．这种顶角函数即是由

下面公式定义的 $-\mathrm{i}e\Gamma^{\mu}(x_1', x_2', x_3')$ (坐标空间):

$$
\begin{aligned}
&G_{\nu}(x_1, x_2, x_3) \\
&\quad = \iiint \mathrm{d}^4x_1' \mathrm{d}^4x_2' \mathrm{d}^4x_3' \mathrm{i}\,\overline{S}(x_1 - x_1') \\
&\qquad \times(-\mathrm{i}e)\Gamma^{\mu}(x_1', x_2', x_3')\mathrm{i}\,\overline{S}(x_2' - x_2)\mathrm{i}\,\overline{D}_{\nu\mu}(x_3 - x_3')\,. \qquad (121)
\end{aligned}
$$

由于 $\Gamma^{\mu}(x_1', x_2', x_3') = \Gamma^{\mu}(x_1' - x_3', x_2' - x_3', 0)$, 有

$$
\Gamma^{\mu}(x_1', x_2', x_3') = \iint \frac{\mathrm{d}^4p_1}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4p_2}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_1(x_1' - x_3')}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_2(x_2' - x_3')}\Gamma^{\mu}(p_1, p_2)\,, \qquad (122)
$$

$$
\Gamma^{\mu}(p_1, p_2) = \iint \mathrm{d}^4z_1\mathrm{d}^4z_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_1z_1 - \mathrm{i}p_2z_2}\Gamma^{\mu}(z_1, z_2, 0)\,, \qquad (123)
$$

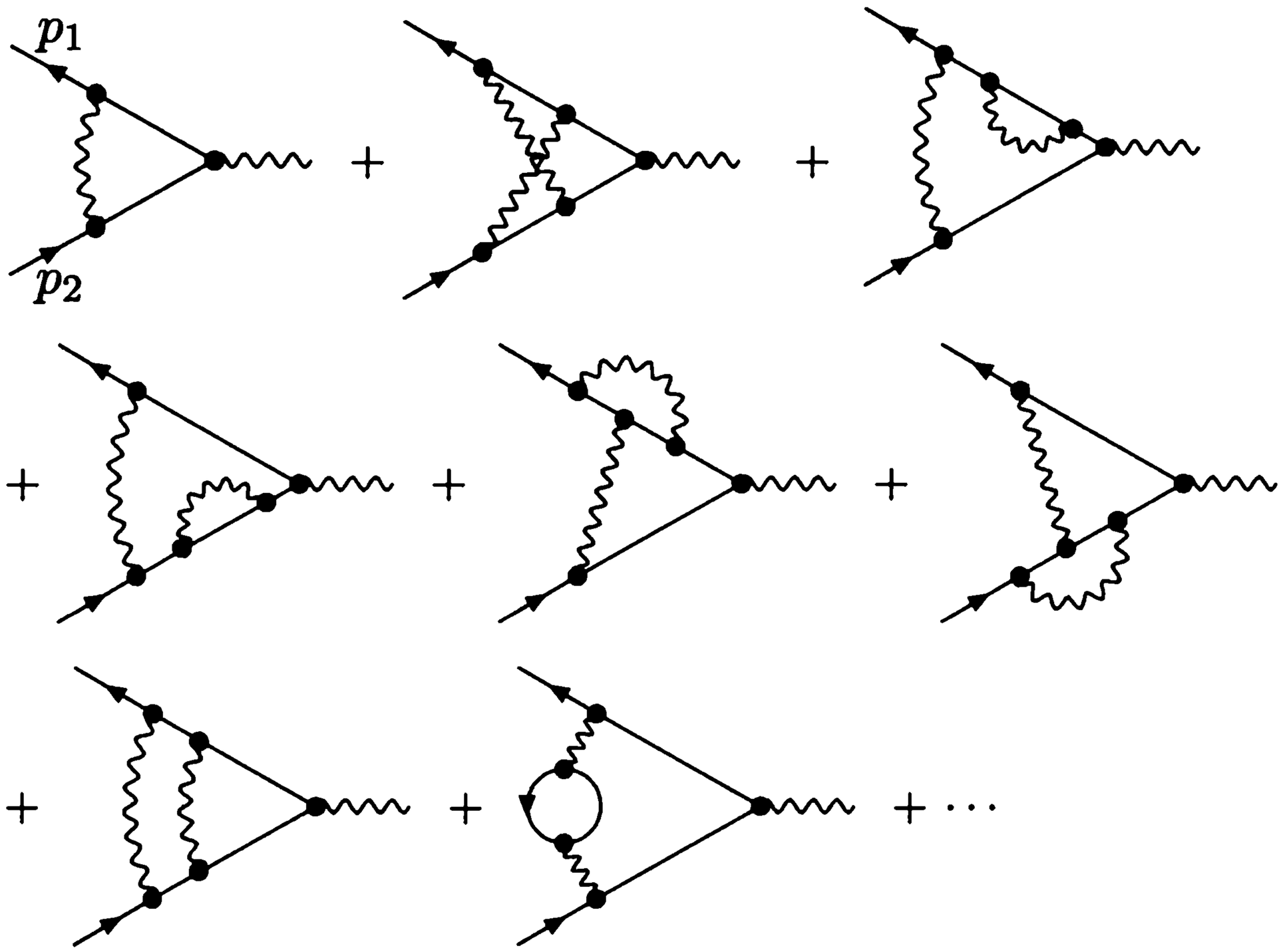
因此,

$$
\begin{aligned}
&G_{\nu}(x_1, x_2, x_3) \\
&\quad = \iiint \frac{\mathrm{d}^4p_1}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4p_2}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_1x_1 + \mathrm{i}p_2x_2 - \mathrm{i}kx_3}\mathrm{i}\,\overline{S}(p_1) \\
&\qquad \times(-\mathrm{i}e)\Gamma^{\mu}(p_1, p_2)\mathrm{i}\,\overline{S}(p_2)\mathrm{i}\,\overline{D}_{\nu\mu}(k)(2\pi)^4\delta^4(p_1 - p_2 + k)\,. \qquad (124)
\end{aligned}
$$

$-\mathrm{i}e\Gamma^{\mu}(p_1, p_2)$ 在 (p_1, p_2, k) 满足的动量守恒条件下代表动量空间的电子光子顶角函数, 其微扰展开是用截腿图形表示的. 由于遵循逆着电子线的方向写表达式的规则, p_1 是离开顶角的电子线的动量, p_2 是进入顶角的电子线的动量. 在公式 (124) 的动量守恒条件意味着 k 是离开顶角的光子线的动量 (如果将此公式中的积分变量 k 反号, 则动量守恒条件意味着 k 是进入顶角的光子线的动量). 按习惯定义如下的 $\Lambda^{\mu}(p_1, p_2)$:

$$
-\mathrm{i}e\Gamma^{\mu}(p_1, p_2) = -\mathrm{i}e\gamma^{\mu} - \mathrm{i}e\Lambda^{\mu}(p_1, p_2)\,, \qquad (125)
$$

则 $-\mathrm{i}e\Lambda^{\mu}(p_1, p_2)$ 的微扰展开只包含截腿的单粒子不可约图形:



例题 Furry 定理

Furry 定理的内容可叙述如下：含有由奇数根电子线形成的闭合电子圈的正规图形，对于任何格林函数都没有贡献. 实际上，由于理论的电荷共轭不变性，含有单根电子线闭合圈的图形 (挂一根光子线) 不出现，含有多根电子线形成的闭合圈的图形，则总是成对地出现在格林函数的微扰展开中，其差别只在于电子线的闭合圈具有顺时针还是逆时针的方向. 当闭合圈中电子线的数目是奇数时，这样的一对图形的 Feynman 积分之和是零. 虽然涉及发散 Feynman 积分的相消，但是可以借助正规化使这种论述成为合理的 (也见文献 [2]).

5.2 连接格林函数、截腿格林函数和一般的顶角函数

格林函数的微扰展开一般都包含着连接图和不连接图的贡献. 将一个完全格林函数的微扰展开中所有不连接图抛弃，只计

及连接图的贡献，就定义了相应的连接格林函数．完全传播函数

$$\langle\langle 0|T\{\psi_\alpha^h(x)\overline{\psi}_\beta^h(y)\}|0\rangle\rangle\,,\quad \langle\langle 0|T\{A_\mu^h(x)A_\mu^h(y)\}|0\rangle\rangle$$

的微扰展开只包含连接图，三点函数 $\langle\langle 0|T\{\psi_\alpha^h(x_1)\overline{\psi}_\beta^h(x_2)A_\mu^h(x_3)\}|0\rangle\rangle$ 也是如此，所以它们本身就是连接格林函数．连接格林函数的生成泛函是按下式定义的 $\mathcal{W}[\overline{\eta},\eta,J]$:

$$\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J]=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\mathcal{W}[\overline{\eta},\eta,J]}\,. \tag{126}$$

即是说 (证明省略)，与

$$\langle\langle 0|T\{\psi^h(x_1)\psi^h(x_2)\cdots\overline{\psi}^h(y_1)\overline{\psi}^h(y_2)\cdots A_{\nu_1}^h(z_1)A_{\nu_2}^h(z_2)\cdots\}|0\rangle\rangle$$

相应的连接格林函数是

$$\begin{aligned}&\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha_1}(x_1)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha_2}(x_2)}\cdots\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\beta_1}(y_1)}\\&\times\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\beta_2}(y_2)}\cdots\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\nu_1}(z_1)}\cdots\mathrm{i}\,\mathcal{W}[\overline{\eta},\eta,J]\Big|_{(\overline{\eta},\eta,J)=0}\,.\end{aligned}$$

例如，对于四光子格林函数，有

$$\begin{aligned}&\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_1}(x_1)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_2}(x_2)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_3}(x_3)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_4}(x_4)}\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J]\Big|_{(\overline{\eta},\eta,J)=0}\\&=\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_1}(x_1)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_2}(x_2)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_3}(x_3)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_4}(x_4)}\mathrm{i}\,\mathcal{W}[\overline{\eta},\eta,J]\Big|_{(\overline{\eta},\eta,J)=0}\\&\quad+\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu_1\mu_2}(x_1-x_2)\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu_3\mu_4}(x_3-x_4)\\&\quad+\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu_1\mu_3}(x_1-x_3)\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu_2\mu_4}(x_2-x_4)\\&\quad+\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu_1\mu_4}(x_1-x_4)\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu_2\mu_3}(x_2-x_3)\,.\end{aligned}$$

右边第一项即是四光子连接格林函数．一般情形与此相似，$\mathcal{Z}[\overline{\eta},\eta,J]$ 对于 $(\overline{\eta}_\alpha,\eta_\beta,J^\mu)$ 的 n 次微商在所有源趋于零时归结为 $\mathcal{W}[\overline{\eta},\eta,J]$ 的微商的极限，其中来自 $\mathcal{W}[\overline{\eta},\eta,J]$ 的 n 次微商的项

给出 n 点连接格林函数，其余项都是外点数较低的连接格林函数的积. 所以关于格林函数的研究可以归结为连接格林函数的研究.

将格林函数

$$\langle\langle 0|T\{\psi^h(x_1)\psi^h(x_2)\cdots\overline{\psi}^h(y_1)\overline{\psi}^h(y_2)\cdots A^h_{\nu_1}(z_1)A^h_{\nu_2}(z_2)\cdots\}|0\rangle\rangle$$

截去所有外腿之后，称为截腿格林函数，记作

$$G^{[\mathrm{trunc}]\nu_1\nu_2\cdots}_{\alpha_1\alpha_2\cdots\beta_1\beta_2\cdots}(x_1x_2\cdots y_1y_2\cdots z_1z_2\cdots),$$

其定义是:

$$\begin{aligned}
&\langle\langle 0|T\{\psi^h(x_1)\psi^h(x_2)\cdots\overline{\psi}^h(y_1)\overline{\psi}^h(y_2)\cdots A^h_{\nu_1}(z_1)A^h_{\nu_2}(z_2)\cdots\}|0\rangle\rangle\\
&\quad=\int\cdots\int \mathrm{d}^4x'_1\mathrm{d}^4x'_2\cdots\mathrm{d}^4y'_1\cdots\mathrm{d}^4z'_1\mathrm{d}^4z'_2\cdots\Big\{\mathrm{i}\,\overline{S}_{\alpha_1\alpha'_1}(x_1-x'_1)\\
&\qquad\times\mathrm{i}\,\overline{S}_{\alpha_2\alpha'_2}(x_2-x'_2)\cdots G^{[\mathrm{trunc}]\nu'_1\nu'_2\cdots}_{\alpha'_1\alpha'_2\cdots\beta'_1\beta'_2\cdots}(x'_1x'_2\cdots y'_1\cdots z'_1z'_2\cdots)\\
&\qquad\times\mathrm{i}\,\overline{S}_{\beta'_1\beta_1}(y'_1-y_1)\mathrm{i}\,\overline{S}_{\beta'_2\beta_2}(y'_2-y_2)\cdots\\
&\qquad\times\mathrm{i}\,\overline{D}_{\nu_1\nu'_1}(z_1-z'_1)\mathrm{i}\,\overline{D}_{\nu_2\nu'_2}(z_2-z'_2)\cdots\Big\}\,.
\end{aligned}\tag{127}$$

对于连接格林函数

$$\begin{aligned}
&\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha_1}(x_1)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha_2}(x_2)}\cdots\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\beta_1}(y_1)}\\
&\qquad\times\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\beta_2}(y_2)}\cdots\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\nu_1}(z_1)}\cdots\mathrm{i}\,\mathcal{W}[\overline{\eta},\eta,J]\Big|_{(\overline{\eta},\eta,J)=0},
\end{aligned}$$

用它代替 (127) 式左边的完全格林函数，也定义了相应的截腿函数. 连接格林函数的截腿函数通称为顶角函数，所以任意多点的连接格林函数都有相应的顶角函数 (通常说到顶角函数时往往是指上一小节所说的电子光子三点格林函数的截腿函数，从前后文的关系可以知道是什么顶角函数). 对于外点数目 n 大于 2 的连接格林函数，其最低阶图形的外腿经过自能修正后变

成 n 个完全传播函数，因此顶角函数的微扰展开用截腿图形表示，即外线没有自能部分，而且在写图形的表达式时不计外线的贡献 (参看上一小节的 $-\mathrm{i}e\Gamma^{\mu}(x_1',x_2',x_3')$, 当下指标为 $(\alpha'\beta')$ 时即是 $G_{\alpha\beta\nu}(x_1,x_2,x_3)$ 的截腿函数 $G^{[\mathrm{trunc}]\mu}_{\alpha'\beta'}(x_1',x_2',x_3')$). 但是两点格林函数本身是一个完全传播函数，因此相应的顶角函数是由完全传播函数组成的矩阵的逆矩阵的元素. 将两点顶角函数记为 $\mathrm{i}\overline{S}^{[\mathrm{trunc}]}_{\alpha'\beta'}(x'-y')$ 和 $\mathrm{i}\overline{D}^{[\mathrm{trunc}]\mu'\nu'}(z_1'-z_2')$, 并像通常一样定义动量空间的表达式 $\mathrm{i}\overline{S}^{[\mathrm{trunc}]}_{\alpha'\beta'}(p)$ 和 $\mathrm{i}\overline{D}^{[\mathrm{trunc}]\mu'\nu'}(k)$:

$$\mathrm{i}\overline{S}^{[\mathrm{trunc}]}_{\alpha'\beta'}(y)=\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{i}\overline{S}^{[\mathrm{trunc}]}_{\alpha'\beta'}(p)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}py}\,,$$

$$\mathrm{i}\overline{D}^{[\mathrm{trunc}]\mu'\nu'}(y)=\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{i}\overline{D}^{[\mathrm{trunc}]\mu'\nu'}(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ky}\,.$$

根据

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\beta}(x-y)=&\int\mathrm{d}^4x'\int\mathrm{d}^4y'\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\alpha'}(x-x')\\&\times\mathrm{i}\overline{S}^{[\mathrm{trunc}]}_{\alpha'\beta'}(x'-y')\mathrm{i}\overline{S}_{\beta'\beta}(y'-y)\,,\\\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(z_1-z_2)=&\int\mathrm{d}^4z_1'\int\mathrm{d}^4z_2'\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\mu'}(z_1-z_1')\\&\times\mathrm{i}\overline{D}^{[\mathrm{trunc}]\mu'\nu'}(z_1'-z_2')\mathrm{i}\overline{D}_{\nu'\nu}(z_2'-z_2)\,.\end{aligned}$$

得

$$\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\alpha'}(p)\mathrm{i}\overline{S}^{[\mathrm{trunc}]}_{\alpha'\beta}(p)=\delta_{\alpha\beta}\,,$$

$$\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\mu'}(k)\mathrm{i}\overline{D}^{[\mathrm{trunc}]\mu'\nu}(k)=g_{\mu}^{\nu}\,.$$

或

$$\mathrm{i}\overline{S}^{[\mathrm{trunc}]}(p)=[\mathrm{i}\overline{S}(p)]^{-1}=[\mathrm{i}S(p)]^{-1}+\mathrm{i}\overline{\Sigma}(p)\,.\tag{128}$$

$$\mathrm{i}\overline{D}^{[\mathrm{trunc}]}(k)=[\mathrm{i}\overline{D}(k)]^{-1}=[\mathrm{i}\mathcal{D}(k)]^{-1}-\mathrm{i}e^2\mathcal{P}(k)\,.\tag{129}$$

已经说过，质量算符 $\Sigma(p)$ 和真空极化张量的微扰展开是用单粒子不可约的截腿图形表示的.

四点和更多点的顶角函数则包含非正规图的贡献. 前面已经说明，一个连接 Feynman 图如果在剪断任何一根内线后都仍然保持为连接的，就称为单粒子不可约的或者正规的图形. 将一个连接格林函数的截腿函数的微扰展开中由非正规图形代表的项抛弃掉，就得到相应的正规顶角函数.

为了叙述的完整性，下面扼要说明如何借助连接格林函数的生成泛函的 Legendre 变换来构成正规顶角函数的生成泛函. 由 $\mathcal{W}[\overline{\eta},\eta,J]$ 定义一组 C 数函数

$$\psi_{\alpha}^{[c]}(x)=\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}_{\alpha}(x)}\mathcal{W}\,, \tag{130}$$

$$\overline{\psi}_{\beta}^{[c]}(x)=-\frac{\delta}{\delta\eta_{\beta}(x)}\mathcal{W}\,, \tag{131}$$

$$A_{\mu}^{[c]}(x)=\frac{\delta}{\delta J^{\mu}(x)}\mathcal{W}\,, \tag{132}$$

它们也被称为“经典场”，这里用带方括号的 c 作为这些函数的上标，以免和其他量混淆. 注意

$$\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}_{\alpha}(x)}\mathcal{W}\Big|_{\overline{\eta}=\eta=J=0}=\langle\langle 0|\overline{\psi}_{\alpha}^{h}(x)|0\rangle\rangle=0\,, \tag{133}$$

$$\frac{\delta}{\delta\eta_{\beta}(x)}\mathcal{W}\Big|_{\overline{\eta}=\eta=J=0}=\langle\langle 0|\psi_{\beta}^{h}(x)|0\rangle\rangle=0\,, \tag{134}$$

$$\frac{\delta}{\delta J^{\nu}(x)}\mathcal{W}\Big|_{\overline{\eta}=\eta=J=0}=\langle\langle 0|A_{\nu}^{h}(x)|0\rangle\rangle=0\,. \tag{135}$$

可见 $(\overline{\eta},\eta,J)=0$ 对应于 $(\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},A^{[c]})=0$. 借助于 (130)—(132) 式将 $(\overline{\eta},\eta,J)$ 看作 $(\psi_{\alpha}^{[c]},\overline{\psi}_{\beta}^{[c]},A_{\mu}^{[c]})$ 的函数，然后定义如下的泛函：

$$\begin{aligned}\Gamma[\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},A^{[c]}]&=\mathcal{W}[\overline{\eta},\eta,J]\\&\quad-\int\mathrm{d}^4x\{\overline{\psi}_{\alpha}^{[c]}(x)\eta_{\alpha}(x)+\overline{\eta}_{\beta}(x)\psi_{\beta}^{[c]}(x)+J^{\mu}(x)A_{\mu}^{[c]}(x)\}\,.\end{aligned} \tag{136}$$

这即是进行泛函形式的 Legendre 变换，相当于利用拉氏函数定义正则动量，从而构成哈密顿量．按照对隐函数求微商的方法 (记住对于费米变量的微商是左微商)，得

$$\frac{\delta}{\delta A_\mu^{[c]}(x)}\Gamma = -J^\mu(x)+\int \mathrm{d}^4z\Big\{\frac{\delta J^\nu(z)}{\delta A_\mu^{[c]}(x)}\frac{\delta\Gamma}{\delta J^\nu(z)}\Big\}$$
$$+\int \mathrm{d}^4z\Big\{\frac{\delta\eta_\alpha(z)}{\delta A_\mu^{[c]}(x)}\frac{\delta\Gamma}{\delta\eta_\alpha(z)}+\frac{\delta\overline{\eta}_\alpha(z)}{\delta A_\mu^{[c]}(x)}\frac{\delta\Gamma}{\delta\overline{\eta}_\alpha(z)}\Big\},$$

其中 $\frac{\delta\Gamma}{\delta J^\nu(z)},\frac{\delta\Gamma}{\delta\eta_\alpha(z)}$ 和 $\frac{\delta\Gamma}{\delta\overline{\eta}_\alpha(z)}$ 等于零，故

$$J^\mu(x)=-\frac{\delta}{\delta A_\mu^{[c]}(x)}\Gamma. \tag{137}$$

类似地有

$$\eta_\alpha(x)=-\frac{\delta}{\delta\overline{\psi}_\alpha^{[c]}(x)}\Gamma,\quad \overline{\eta}_\alpha(x)=\frac{\delta}{\delta\psi_\alpha^{[c]}(x)}\Gamma. \tag{138}$$

$\Gamma[\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},A^{[c]}]$ 作为 $(\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},A^{[c]})$ 的泛函，就是正规顶角函数的生成泛函．即是说，正规顶角函数可用它在 $(\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},A^{[c]})$ 等于零处的微商代表．例如，由

$$\frac{\delta}{\delta J^\mu(x)}J^{\nu'}(y')=-\frac{\delta}{\delta J^\mu(x)}\frac{\delta}{\delta A_{\nu'}^{[c]}(y')}\Gamma,$$
$$\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}_\alpha(x)}\overline{\eta}_{\beta'}(y')=\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}_\alpha(x)}\frac{\delta}{\delta\psi_{\beta'}^{[c]}(y')}\Gamma,$$

有

$$g_\mu^{\nu'}\delta^4(x-y')=-\int \mathrm{d}^4x'\frac{\delta A_{\mu'}^{[c]}(x')}{\delta J^\mu(x)}\frac{\delta}{\delta A_{\mu'}^{[c]}(x')}\frac{\delta}{\delta A_{\nu'}^{[c]}(y')}\Gamma$$
$$-\int \mathrm{d}^4x'\frac{\delta\overline{\psi}_\beta^{[c]}(x')}{\delta J^\mu(x)}\frac{\delta}{\delta\overline{\psi}_\beta^{[c]}(x')}\frac{\delta}{\delta A_{\nu'}^{[c]}(y')}\Gamma$$
$$-\int \mathrm{d}^4x'\frac{\delta\psi_\beta^{[c]}(x')}{\delta J^\mu(x)}\frac{\delta}{\delta\psi_\beta^{[c]}(x')}\frac{\delta}{\delta A_{\nu'}^{[c]}(y')}\Gamma, \tag{137'}$$

$$\delta_{\alpha\beta'}\delta^4(x-y') = \int \mathrm{d}^4x' \frac{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')}{\delta\overline{\eta}_\alpha(x)} \frac{\delta}{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')} \frac{\delta}{\delta\psi^{[c]}_{\beta'}(y')}\Gamma$$
$$+ \int \mathrm{d}^4x' \frac{\delta\psi^{[c]}_{\beta}(x')}{\delta\overline{\eta}_\alpha(x)} \frac{\delta}{\delta\psi^{[c]}_{\beta}(x')} \frac{\delta}{\delta\psi^{[c]}_{\beta'}(y')}\Gamma$$
$$+ \int \mathrm{d}^4x' \frac{\delta A^{[c]}_{\mu'}(x')}{\delta\overline{\eta}_\alpha(x)} \frac{\delta}{\delta A^{[c]}_{\mu'}(x')} \frac{\delta}{\delta\psi^{[c]}_{\beta'}(y')}\Gamma\,. \quad (138')$$

再由 (138′) 式对 $J^\mu(z)$ 求微商，注意

$$\frac{\delta}{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')} \frac{\delta}{\delta\psi^{[c]}_{\beta'}(y')}\Gamma = \frac{\delta\overline{\eta}_{\beta'}(y')}{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')}\,,$$

得

$$\int \mathrm{d}^4x' \Big(\frac{\delta}{\delta J^\mu(z)} \frac{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')}{\delta\overline{\eta}_\alpha(x)}\Big) \frac{\delta\overline{\eta}_{\beta'}(y')}{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')} = -\iint \mathrm{d}^4x'\mathrm{d}^4z' \frac{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')}{\delta\overline{\eta}_\alpha(x)}$$
$$\times \frac{\delta A^{[c]}_{\nu'}(z')}{\delta J^\mu(z)} \Big(\frac{\delta}{\delta A^{[c]}_{\nu'}(z')} \frac{\delta}{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')} \frac{\delta}{\delta\psi^{[c]}_{\beta'}(y')}\Gamma\Big) + \cdots .$$

在右边省略未写的部分随 $(\overline{\eta}, \eta, J)$ 趋于零而消失．此式表明

$$\frac{\delta}{\delta J^\mu(z)} \frac{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\beta}(y)}{\delta\overline{\eta}_\alpha(x)} = -\iiint \mathrm{d}^4x'\mathrm{d}^4y'\mathrm{d}^4z' \frac{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')}{\delta\overline{\eta}_\alpha(x)}$$
$$\times \Big(\frac{\delta}{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')} \frac{\delta}{\delta\psi^{[c]}_{\beta'}(y')} \frac{\delta}{\delta A^{[c]}_{\nu'}(z')}\Gamma\Big) \frac{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\beta}(y)}{\delta\overline{\eta}_{\beta'}(y')} \frac{\delta A^{[c]}_{\nu'}(z')}{\delta J^\mu(z)} + \cdots .$$

当源趋于零时，变成

$$\Big(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x)} \frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\beta(y)} \frac{\delta\,\mathrm{i}W}{\mathrm{i}\delta J^\mu(z)}\Big)\Big|_{(\overline{\eta},\eta,J)=0}$$
$$= \iiint \mathrm{d}^4x'\mathrm{d}^4y'\mathrm{d}^4z'\,\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\alpha'}(x-x')\mathrm{i}\overline{S}_{\beta\beta'}(y'-y)\,\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu'}(z-z')$$
$$\times \Big(-\mathrm{i}\frac{\delta}{\delta\overline{\psi}^{[c]}_{\alpha'}(x')} \frac{\delta}{\delta\psi^{[c]}_{\beta'}(y')} \frac{\delta}{\delta A^{[c]}_{\nu'}(z')}\Gamma\Big)\Big|_{(\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},A^{[c]})=0} .$$

由此以及 (137′),(138′) 式在源趋于零时的极限形式，可知

$$-\mathrm{i}\Big(\frac{\delta}{\delta A_\mu^{[c]}(x)}\frac{\delta}{\delta A_\nu^{[c]}(y)}\Gamma\Big)\Big|_{(\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},\,A^{[c]})=0}=\mathrm{i}\,\overline{D}^{[\mathrm{trunc}]\mu\nu}(x-y)\,,\tag{139}$$

以及

$$\mathrm{i}\Big(\frac{\delta}{\delta\overline{\psi}_\alpha^{[c]}(x)}\frac{\delta}{\delta\psi_\beta^{[c]}(y)}\Gamma\Big)\Big|_{(\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},\,A^{[c]})=0}=\mathrm{i}\,\overline{S}_{\alpha\beta}^{[\mathrm{trunc}]}(x-y)\,,\tag{140}$$

$$-\mathrm{i}\Big(\frac{\delta}{\delta\overline{\psi}_\alpha^{[c]}(x)}\frac{\delta}{\delta\psi_\beta^{[c]}(y)}\frac{\delta}{\delta A_\nu^{[c]}(z)}\Gamma\Big)\Big|_{(\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},\,A^{[c]})=0}=-\mathrm{i}e\Gamma^\mu_{\alpha\beta}(x,y,z)\,.\tag{141}$$

一般的结论是 (证明省略)：任意正规顶角都可由 $\Gamma[\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},A^{[c]}]$ 在 $(\psi^{[c]},\overline{\psi}^{[c]},A^{[c]})$ 等于零处的微商代表.

例题 推导电子光子顶角函数通过四电子连接格林函数表示的公式. 注意当路径积分的被积函数是场函数的微商时，结果等于零. 特别是

$$\int\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi,A]\frac{\delta}{\delta A_\mu(x)}\exp\left\{\mathrm{i}\,I+\mathrm{i}\,I_s\right\}=0\,.$$

即

$$\int\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi,A]\Big(\frac{\delta I}{\delta A_\mu(x)}+J^\mu(x)\Big)\exp\left\{\mathrm{i}\,I+\mathrm{i}\,I_s\right\}=0\,,$$

其中 I 是作用量 $\int\mathrm{d}^4z\mathcal{L}(z)$, I_s 是源项 $\int\mathrm{d}^4z\big(\overline{\eta}\psi+\overline{\psi}\eta+J^\mu A_\mu\big)$. 由

$$\frac{\delta I}{\delta A_\mu(x)}=\partial_\rho F^{\rho\mu}(x)+\frac{1}{\xi}\partial^\mu\partial^\rho A_\mu(x)-e\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\,,$$

得

$$\int\mathcal{D}[\overline{\psi},\psi,A]\exp\left\{\mathrm{i}\,I+\mathrm{i}\,I_s\right\}\times\Big(J^\mu(x)+\partial_\rho F^{\rho\mu}(x)+\frac{1}{\xi}\partial^\mu\partial^\rho A_\mu(x)-e\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\Big)=0\,.$$

在此式中代入

$$\partial_\rho F^{\rho\mu}(x) = \partial_\rho \partial^\rho A^\mu(x) - \partial^\mu \partial_\rho A^\rho(x)\,,$$

将场函数换成对于源 $(\eta, \overline{\eta}, J)$ 的微商，再将这些微商算子向左移到积分号之外，变为

$$\Big\{ J^\mu(x) + \partial_\rho \partial^\rho \frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J_\mu(x)} + \big(\tfrac{1}{\xi} - 1\big)\partial^\mu \partial^\rho \frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^\rho(x)} \Big\} \mathcal{Z}[\eta, \overline{\eta}, J]$$
$$+ e\gamma^\mu_{\alpha\beta} \frac{\delta}{\mathrm{i}\delta \overline{\eta}_\beta(x)} \frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta \eta_\alpha(x)} \mathcal{Z}[\eta, \overline{\eta}, J] = 0\,.$$

注意 $\mathcal{Z}[\eta, \overline{\eta}, J] = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathcal{W}}$，得

$$J^\mu(x) + \partial_\rho \partial^\rho A^{[\mathrm{c}]\mu}(x) + \big(\tfrac{1}{\xi} - 1\big)\partial^\mu \partial^\rho A^{[\mathrm{c}]}_\rho(x)$$
$$+ e\gamma^\mu_{\alpha\beta} \psi^{[\mathrm{c}]}_\beta(x) \overline{\psi}^{[\mathrm{c}]}_\alpha(x) + e\gamma^\mu_{\alpha\beta} \Big(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta \overline{\eta}_\beta(x)} \frac{\delta \mathrm{i}\mathcal{W}}{(-\mathrm{i})\delta \eta_\alpha(x)} \Big) = 0\,.$$

由此，求 $\psi^{[\mathrm{c}]}_\beta$ 和 $\overline{\psi}^{[\mathrm{c}]}_\alpha$ 的微商，给出

$$\frac{\delta}{\delta \overline{\psi}^{[\mathrm{c}]}_\alpha(x)} \frac{\delta}{\delta \psi^{[\mathrm{c}]}_\beta(y)} \frac{\delta}{\delta A^{[\mathrm{c}]}_\mu(z)} = e\gamma^\mu_{\alpha\beta} \delta^4(x - z)\delta^4(y - z)$$
$$+ \frac{\delta}{\delta \overline{\psi}^{[\mathrm{c}]}_\alpha(x)} \frac{\delta}{\delta \psi^{[\mathrm{c}]}_\beta(y)} e\gamma^\mu_{\alpha'\beta'} \Big(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta \overline{\eta}_{\beta'}(z)} \frac{\delta \mathrm{i}\mathcal{W}}{(-\mathrm{i})\delta \eta_{\alpha'}(z)} \Big)\,.$$

利用

$$\frac{\delta}{\delta \psi^{[\mathrm{c}]}_\beta(y)} = \int \mathrm{d}^4 z_1 \Big\{ \frac{\delta \overline{\eta}_\gamma(z_1)}{\delta \psi^{[\mathrm{c}]}_\beta(y)} \frac{\delta}{\delta \overline{\eta}_\gamma(z_1)}$$
$$+ \frac{\delta \eta_\gamma(z_1)}{\delta \psi^{[\mathrm{c}]}_\beta(y)} \frac{\delta}{\delta \eta_\gamma(z_1)} + \frac{\delta J^\rho(z_1)}{\delta \psi^{[\mathrm{c}]}_\beta(y)} \frac{\delta}{\delta J^\rho(z_1)} \Big\}\,,$$

$$\frac{\delta}{\delta \overline{\psi}^{[\mathrm{c}]}_\alpha(x)} = \int \mathrm{d}^4 z_0 \Big\{ \frac{\delta \overline{\eta}_\gamma(z_0)}{\delta \overline{\psi}^{[\mathrm{c}]}_\alpha(x)} \frac{\delta}{\delta \overline{\eta}_\gamma(z_0)}$$
$$+ \frac{\delta \eta_\gamma(z_0)}{\delta \overline{\psi}^{[\mathrm{c}]}_\alpha(x)} \frac{\delta}{\delta \eta_\gamma(z_0)} + \frac{\delta J^\rho(z_0)}{\delta \overline{\psi}^{[\mathrm{c}]}_\alpha(x)} \frac{\delta}{\delta J^\rho(z_0)} \Big\}\,,$$

可以证实，当源趋于零时得出

$$
\begin{aligned}
-\mathrm{i}e\Gamma^{\mu}_{\alpha\beta}(x,y,z) &= -\mathrm{i}e\gamma^{\mu}_{\alpha\beta}\delta^4(x-z)\delta^4(y-z) \\
&\quad -\mathrm{i}e\gamma^{\mu}_{\alpha'\beta'}\int \mathrm{d}^4z_1(-\mathrm{i}e)\Gamma^{\mu}_{\alpha\beta}(x,y,z_1) \\
&\qquad \times\Big(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\beta'}(z)}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\alpha'}(z)}\frac{\delta\mathrm{i}\,\mathcal{W}}{\mathrm{i}\delta J^{\rho}(z_1)}\Big)\Big|_{(\overline{\eta},\eta,J)=0} \\
&\quad +\mathrm{i}e\gamma^{\mu}_{\alpha'\beta'}\int\int \mathrm{d}^4z_0\mathrm{d}^4z_1 G_{\beta'\gamma'\gamma\alpha'(C)}(z,z_0,z_1,z) \\
&\qquad \times\mathrm{i}\,\overline{S}^{[\mathrm{trunc}]}_{\alpha\gamma'}(x-z_0)\mathrm{i}\,\overline{S}^{[\mathrm{trunc}]}_{\gamma\beta}(z_1-y)\,,
\end{aligned}
$$

其中 $G_{\beta'\gamma'\gamma\alpha'(C)}(z,z_0,z_1,z)$ 是由下式定义的四电子连接格林函数：

$$
\begin{aligned}
&G_{\beta'\gamma'\gamma\alpha'(C)}(z,z_0,z_1,z) \\
&\quad =\Big(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\beta'}(z)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\gamma'}(z_0)}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\gamma}(z_1)}\frac{\delta\mathrm{i}\,\mathcal{W}}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\alpha'}(z)}\Big)\Big|_{(\overline{\eta},\eta,J)=0}\,.
\end{aligned}
$$

在 $-\mathrm{i}e\Gamma^{\mu}_{\alpha\beta}(x,y,z)$ 的这种表达式中，第三项除非正规图的贡献外可以写成所谓 K 展开的形式，而来自非正规图的贡献正好被第二项抵消了.

5.3 Ward-Takahashi 恒等式

Ward-Takahashi 恒等式已经成为一个内容十分广泛的术语，这里将推导后面用到的来自电磁流守恒的一些 Ward-Takahashi 恒等式 (简称 W-T 恒等式). 首先计算 $\partial^{\mu}T\{j^h_{\mu}(x)\psi^h_{\alpha}(y)\overline{\psi}^h_{\beta}(z)\}$, 其中 ∂^{μ} 代表 $\frac{\partial}{\partial x_{\mu}}$, $j^h_{\mu}(x)$ 是海森伯绘景的流算符：

$$
j^h_{\mu}(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t}j_{\mu}(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\,.
$$

按照时序积的定义有

$$\begin{aligned}
&\mathcal{T}\{j_\mu^h(x)\psi_\alpha^h(y)\overline{\psi}_\beta^h(z)\} \\
&\qquad = \theta(x_0-y_0)\theta(y_0-z_0)j_\mu^h(x)\psi_\alpha^h(y)\overline{\psi}_\beta^h(z) \\
&\qquad\quad -\theta(x_0-y_0)\theta(z_0-y_0)j_\mu^h(x)\overline{\psi}_\beta^h(z)\psi_\alpha^h(y) \\
&\qquad\quad +\theta(y_0-x_0)\theta(x_0-z_0)\psi_\alpha^h(y)j_\mu^h(x)\overline{\psi}_\beta^h(z) \\
&\qquad\quad +\theta(y_0-z_0)\theta(z_0-x_0)\psi_\alpha^h(y)\overline{\psi}_\beta^h(z)j_\mu^h(x) \\
&\qquad\quad -\theta(z_0-x_0)\theta(x_0-y_0)\overline{\psi}_\beta^h(z)j_\mu^h(x)\psi_\alpha^h(y) \\
&\qquad\quad -\theta(z_0-y_0)\theta(y_0-x_0)\overline{\psi}_\beta^h(z)\psi_\alpha^h(y)j_\mu^h(x)\,.
\end{aligned}$$

故由 $\partial^\mu j_\mu^h(x)=0$ 得到

$$\begin{aligned}
&\partial^\mu\mathcal{T}\{j_\mu^h(x)\psi_\alpha^h(y)\overline{\psi}_\beta^h(z)\} \\
&\qquad = \delta(x_0-y_0)\theta(y_0-z_0)[j_0(x),\psi_\alpha(y)]^h\overline{\psi}_\beta^h(z) \\
&\qquad\quad +\delta(x_0-z_0)\theta(y_0-z_0)\psi_\alpha^h(y)[j_0(x),\overline{\psi}_\beta(z)]^h \\
&\qquad\quad +\delta(x_0-z_0)\theta(x_0-y_0)[\overline{\psi}_\beta(z),j_0(x)]^h\psi_\alpha^h(y) \\
&\qquad\quad +\delta(x_0-y_0)\theta(z_0-y_0)\overline{\psi}_\beta^h(z)[\psi_\alpha(y),j_0(x)]^h\,,
\end{aligned}$$

其中，出现在对易关系式内的 $j_0,\psi_\alpha,\overline{\psi}_\beta$ 是相互作用绘景的算符.

类似地有

$$\partial^\mu\mathcal{T}\{j_\mu^h(x)A_\rho^h(z)\}=\delta(x_0-z_0)[j_0(x),A_\rho(z)]\,.$$

利用 $j_0(x)=:\psi_\alpha^\dagger(x)\psi_\alpha(x):$ 以及

$$\begin{aligned}
&\delta(x_0-y_0)[j_0(x),\psi_\alpha(y)]=-\delta^4(x-y)\psi_\alpha(y)\,, \\
&\delta(x_0-y_0)[j_0(x),\overline{\psi}_\beta(y)]=\delta^4(x-y)\overline{\psi}_\beta(y)\,, \\
&\delta(x_0-y_0)[j_0(x),A_\rho(z)]=0\,.
\end{aligned}$$

可得

$$\partial^\mu T\{j_\mu^h(x)\psi_\alpha^h(y)\overline{\psi}_\beta^h(z)\}$$
$$= \{-\delta^4(x-y)+\delta^4(x-z)\}T\{\psi_\alpha^h(y)\overline{\psi}_\beta^h(z)\}\,,$$
$$\partial^\mu T\{j_\mu^h(x)A_\rho^h(z)\}=0\,.$$

这给出特殊形式的 W-T 恒等式：

$$\partial^\mu\langle\langle 0|T\{j_\mu^h(x)\psi_\alpha^h(y)\overline{\psi}_\beta^h(z)\}|0\rangle\rangle$$
$$= \{-\delta^4(x-y)+\delta^4(x-z)\}\mathrm{i}\,\overline{S}_{\alpha\beta}(y-z)\,, \quad (142)$$
$$\partial^\mu\langle\langle 0|T\{j_\mu^h(x)A_\rho^h(z)\}|0\rangle\rangle=0\,. \quad (143)$$

更普遍的恒等式是

$$\partial^\mu\langle\langle 0|T\{j_\mu^h(x)\psi_{\alpha_1}^h(x_1)\psi_{\alpha_2}^h(x_2)\cdots$$
$$\times\overline{\psi}_{\beta_1}^h(y_1)\overline{\psi}_{\beta_2}^h(y_2)\cdots A_{\rho_1}^h(z_1)A_{\rho_2}^h(z_2)\cdots\}|0\rangle\rangle$$
$$=\langle\langle 0|T\{\psi_{\alpha_1}^h(x_1)\cdots\overline{\psi}_{\beta_1}^h(y_1)\cdots A_{\rho_1}^h(z_1)\cdots\}|0\rangle\rangle$$
$$\times\sum_n\{-\delta^4(x-x_n)+\delta^4(x-y_n)\}\,. \quad (144)$$

现在来证明真空极化张量是横向的. 由光子完全传播函数的表达式，有

$$\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu\nu}(x-y)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\langle 0|T\{A_\mu(x)A_\nu(y)\left(\int\mathrm{d}^4z(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(z)\right)^n\}|0\rangle}{n!\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,,$$

当 $A_\mu(x)$ 与 $A_\mu(y)$ 收缩时，右边给出 $\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\,\overset{\bullet}{A}_\nu(y)$，当 $A_\mu(x)$ 与 $\left(\int\mathrm{d}^4z(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(z)\right)^n$ 内的电磁场收缩时，则给出

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{n!}\langle 0|T\{\,\overset{\bullet}{A}_\mu(x)\int\mathrm{d}^4z\,\overset{\bullet}{A}_\rho(z)\overline{\psi}(z)(-\mathrm{ie})\gamma^\rho\psi(z)$$
$$\times A_\nu(y)\left(\int\mathrm{d}^4z'(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(z')\right)^{n-1}\}|0\rangle\frac{1}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}$$
$$=\int\mathrm{d}^4z iD_{\mu\rho}(x-z)(-\mathrm{ie})\frac{\langle 0|T\{U(\infty,-\infty)j^\rho(z)A_\nu(y)\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,.$$

故

$$\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu\nu}(x-y)-\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(x-y)=\int \mathrm{d}^4z\mathrm{i}\,D_{\mu\rho}(x-z)$$
$$\times(-\mathrm{i}e)\frac{\langle 0|T\{U(\infty,-\infty)j^{\rho}(z)A_{\nu}(y)\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,. \tag{145}$$

可见

$$\langle\!\langle 0|T\{j^{\rho h}(x)A^{h}_{\nu}(z)\}|0\rangle\!\rangle=(-e)\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-z)}\;\Pi^{\rho\lambda}(k)\,\mathrm{i}\,\overline{D}_{\lambda\nu}(k)\,. \tag{146}$$

因此 (143) 式表明

$$k_{\rho}\Pi^{\rho\lambda}(k)=0\,, \tag{147}$$

这即是真空极化张量满足的横向性条件. 由此以及 $\Pi^{\rho\lambda}(k)$ 关于 (ρ,λ) 的对称性可将它写成

$$\Pi^{\rho\lambda}(k)=\left(k^{\rho}\,k^{\lambda}-k^2g^{\rho\lambda}\right)\Pi(k)\,, \tag{148}$$

又由于 $k^{\mu}D_{\mu\rho}(k)$ 正比于 k_{ρ}, 故

$$k^{\mu}\,\overline{D}_{\mu\nu}(k)=k^{\mu}\,D_{\mu\nu}(k)\,. \tag{149}$$

其次, 推导通常的 Ward 等式. $\langle\!\langle 0|T\{\psi^{h}_{\alpha}(y)\overline{\psi}^{h}_{\beta}(z)A^{h}_{\nu}(x_1)\}|0\rangle\!\rangle$ 可以表示为

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{n!}\int \mathrm{d}^4x\;\dot{A}_{\nu}(x_1)\;\dot{A}_{\mu}(x)\langle 0|T\{\psi_{\alpha}(y)\overline{\psi}_{\beta}(z)(-\mathrm{i}e)j^{\mu}(x)$$
$$\times\Big(\int \mathrm{d}^4x'(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x')\Big)^{n-1}\}|0\rangle\times\frac{1}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}$$
$$=\int \mathrm{d}^4x\,\mathrm{i}\,D_{\nu\mu}(x_1-x)\langle\!\langle 0|T\{(-\mathrm{i}e)j^{\mu h}(x)\psi^{h}_{\alpha}(y)\overline{\psi}^{h}_{\beta}(z)\}|0\rangle\!\rangle\,.$$

故

$$\iiint \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4p'}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\,\mathrm{i}\,\overline{S}_{\alpha\alpha'}(p)\Gamma^{\mu}_{\alpha'\beta'}(p,p')\,\mathrm{i}\,\overline{S}_{\beta'\beta}(p')\,\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu\nu}(k)$$
$$\times(2\pi)^4\delta^4(p-p'+k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}py+\mathrm{i}p'z-\mathrm{i}kx_1}$$
$$=\int \mathrm{d}^4x\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x_1-x)}\,\mathrm{i}D_{\nu\mu}(k)\langle\langle 0|T\{j^{\mu h}(x)\psi^h_\alpha(y)\overline{\psi}^h_\beta(z)\}|0\rangle\rangle\,.$$

注意 $k^\nu\,\overline{D}_{\mu\nu}(k)$ 等于 $k^\nu\,D_{\mu\nu}(k)$ 并且正比于 k_μ, 得

$$\iint \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4p'}{(2\pi)^4}\,\mathrm{i}\,\overline{S}_{\alpha\alpha'}(p)\,k_\mu\Gamma^{\mu}_{\alpha'\beta'}(p,p')\,\mathrm{i}\,\overline{S}_{\beta'\beta}(p')$$
$$\times(2\pi)^4\delta^4(p-p'+k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}py+\mathrm{i}p'z}$$
$$=\int \mathrm{d}^4x\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\{\delta^4(x-y)-\delta^4(x-z)\}\overline{S}_{\alpha\beta}(y-z)\,.$$

或

$$\iint \mathrm{d}^4p\,\mathrm{d}^4p'\overline{S}(p)\,k_\mu\Gamma^{\mu}(p,p')\,\overline{S}\,\delta^4(p-p'+k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}py+\mathrm{i}p'z}$$
$$=\iint \mathrm{d}^4p\,\mathrm{d}^4p'\{\overline{S}(p)-\overline{S}(p')\}\delta^4(p-p'+k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}py+\mathrm{i}p'z}\,.$$

可见

$$\overline{S}(p)\,k_\mu\Gamma^{\mu}(p,p+k)\,\overline{S}(p+k)=\overline{S}(p)-\overline{S}(p+k)\,,$$

即

$$k_\mu\Gamma^{\mu}(p,p+k)=[\overline{S}(p+k)]^{-1}-[\overline{S}(p)]^{-1}\,. \tag{150}$$

这是略为推广了的 Ward 等式. 当 k_μ 趋于零时, 即得 Ward 最初给出的公式:

$$\frac{\partial}{\partial p_\mu}\Sigma(p)=-\Lambda^{\mu}(p,p)\,. \tag{151}$$

最后推导四光子顶角函数满足的横向性条件. 四光子格林函数 $\langle\langle 0|T\{A^h_{\mu_1}(x_1)A^h_{\mu_2}(x_2)A^h_{\mu_3}(x_3)A^h_{\mu_4}(x_4)\}|0\rangle\rangle$ 可以表示为

$$\begin{aligned}
&\frac{\langle 0|T\{\overset{\bullet}{A}_{\mu_1}(x_1)\overset{\bullet}{A}_{\mu_2}(x_2)A_{\mu_3}(x_3)A_{\mu_4}(x_4)U(\infty,-\infty)\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\\
&+\frac{\langle 0|T\{\overset{\bullet}{A}_{\mu_1}(x_1)\overset{\bullet}{A}_{\mu_3}(x_3)A_{\mu_2}(x_2)A_{\mu_4}(x_4)U(\infty,-\infty)\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\\
&+\frac{\langle 0|T\{\overset{\bullet}{A}_{\mu_1}(x_1)\overset{\bullet}{A}_{\mu_3}(x_3)A_{\mu_2}(x_2)A_{\mu_4}(x_4)U(\infty,-\infty)\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\\
&+\int \mathrm{d}^4x\,\overset{\bullet}{A}_{\mu_1}(x_1)\overset{\bullet}{A}_{\nu}(x)\langle 0|T\{(-\mathrm{i}e)j^{\nu}(x)A_{\mu_2}(x_2)A_{\mu_3}(x_3)\\
&\qquad\times A_{\mu_4}(x_4)U(\infty,-\infty)\}|0\rangle\frac{1}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,.
\end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned}
&\langle\langle 0|T\{A^h_{\mu_1}(x_1)A^h_{\mu_2}(x_2)A^h_{\mu_3}(x_3)A^h_{\mu_4}(x_4)\}|0\rangle\rangle\\
&=\mathrm{i}D_{\mu_1\mu_2}(x_1-x_2)\,\mathrm{i}\overline{D}_{\mu_3\mu_4}(x_3-x_4)\\
&\quad+\mathrm{i}D_{\mu_1\mu_3}(x_1-x_3)\,\mathrm{i}\overline{D}_{\mu_2\mu_4}(x_2-x_4)\\
&\quad+\mathrm{i}D_{\mu_1\mu_4}(x_1-x_4)\,\mathrm{i}\overline{D}_{\mu_2\mu_3}(x_2-x_3)\\
&\quad+\int \mathrm{d}^4x\,\mathrm{i}D_{\mu_1\nu}(x_1-x)\langle\langle 0|T\{(-\mathrm{i}e)j^{\nu h}(x)\\
&\qquad\times A^h_{\mu_2}(x_2)A^h_{\mu_3}(x_3)A^h_{\mu_4}(x_4)\}|0\rangle\rangle\,.
\end{aligned}$$

这个格林函数又可表示为

$$\begin{aligned}
&\langle\langle 0|T\{A^h_{\mu_1}(x_1)A^h_{\mu_2}(x_2)A^h_{\mu_3}(x_3)A^h_{\mu_4}(x_4)\}|0\rangle\rangle^{(C)}\\
&\quad+\mathrm{i}\overline{D}_{\mu_1\mu_2}(x_1-x_2)\,\mathrm{i}\overline{D}_{\mu_3\mu_4}(x_3-x_4)\\
&\quad+\mathrm{i}\overline{D}_{\mu_1\mu_3}(x_1-x_3)\,\mathrm{i}\overline{D}_{\mu_2\mu_4}(x_2-x_4)\\
&\quad+\mathrm{i}\overline{D}_{\mu_1\mu_4}(x_1-x_4)\,\mathrm{i}\overline{D}_{\mu_2\mu_3}(x_2-x_3)\,,
\end{aligned}$$

其中 $\langle\langle 0|T\{A^h_{\mu_1}(x_1)A^h_{\mu_2}(x_2)A^h_{\mu_3}(x_3)A^h_{\mu_4}(x_4)\}|0\rangle\rangle^{(C)}$ 是相应的四光子

连接格林函数. 由此以及 (144) 式，并注意

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}\overline{D}_{\mu\nu}(x-y)=\frac{\partial}{\partial x_\mu}D_{\mu\nu}(x-y)\,,$$

得出

$$\frac{\partial}{\partial x_{1\mu}}\langle\!\langle 0|T\{A^h_{\mu_1}(x_1)A^h_{\mu_2}(x_2)\cdots A^h_{\mu_4}(x_4)\}|0\rangle\!\rangle^{(C)}=0\,. \quad (152)$$

由 Furry 定理知道，四光子连接格林函数是单粒子不可约的，因此按照下式确定的截腿函数 $G^{[C,\,\mathrm{trunc}]\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)$ 即是在动量空间的四光子正规顶角函数：

$$\begin{aligned}&\langle\!\langle 0|T\{A^h_{\mu_1}(x_1)A^h_{\mu_2}(x_2)A^h_{\mu_3}(x_3)A^h_{\mu_4}(x_4)\}|0\rangle\!\rangle^{(C)}\\&=\iiiint\frac{\mathrm{d}^4k_i}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4k_1}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4k_1}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4k_1}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x_1-\mathrm{i}k_2x_2-\mathrm{i}k_3x_3-\mathrm{i}k_4x_4}\\&\quad\times\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu_1\nu_1}(k_1)\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu_2\nu_2}(k_2)\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu_3\nu_3}(k_3)\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu_4\nu_4}(k_4)(2\pi)^4\\&\quad\times\delta^4(k_1+k_2+k_3+k_4)G^{[C,\,\mathrm{trunc}]\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)\,,\end{aligned}$$

而 (152) 式表明

$$k_{1\nu_1}G^{[C,\,\mathrm{trunc}]\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)=0\,. \quad (153)$$

对于 k_2,k_3 和 k_4 也有类似的横向性条件.

§6 重 整 化

6.1 重整化参量、重整化场函数. 由拉氏函数分解出的抵消项

重整化理论所要对付的发散，是对内线动量的积分在上限趋于无穷大时的“紫外”发散. 粗略地说，重整化的想法是对于有些特定类型的场论，采用适当地定义的正比于原始场函数的重整化场函数作为新基本变量，以及定义所谓重整化参量，使得用

这种新基本变量确定的格林函数在微扰展开的任何一级，紫外发散都自相抵消，并且在此基础上构造散射矩阵. 对于规范理论而言，还要求重整化后仍然具有规范理论的结构. 消除紫外发散的方法并不是唯一的，相应地有各种不同的重整化方案. 重整化的参量的意义也随着重整化方案的不同而改变，在特定的方案下直接代表可观察的质量和耦合常数等，在其他情形可用来表达这些可观察的参量.

以后用记号 $\psi(x),\overline{\psi}(x)$ 和 $A_\mu(x)$ 表示重整化的场函数，未重整化的原始场函数，则用记号 $\psi^{[b]}(x),\overline{\psi}^{[b]}(x)$ 和 $A_\mu^{[b]}(x)$ 表示. 原始的参量 (裸参量) 也特别地记为 m_b, e_b, ξ_b. 将这两类场函数的比例关系表示为

$$\psi^{[b]}(x) = \sqrt{Z_2}\,\psi(x)\,, \quad \overline{\psi}^{[b]}(x) = \sqrt{Z_2}\,\overline{\psi}(x)\,, \tag{154}$$

$$A_\mu^{[b]}(x) = \sqrt{Z_3}A_\mu(x)\,, \tag{155}$$

则有效拉氏函数 $\mathcal{L}(x)$ 可以写成:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(x) = {} & Z_2\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m + \delta m)\psi(x) - Z_1\, e\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x) \\ & -Z_3\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - Z_\xi\frac{1}{2\xi}(\partial^\mu A_\mu(x))^2\,,\end{aligned} \tag{156}$$

其中无量纲的常数 Z_1, Z_2, Z_3 和 Z_ξ 称为重整化常数. m, e 和 ξ 是用来取代 m_b, e_b, ξ_b 的重整化参量，这两类参量的关系是:

$$m_b = m - \delta m\,, \quad e_b = \frac{Z_1}{Z_2}\frac{1}{\sqrt{Z_3}}\,e\,, \quad \xi_b = \frac{Z_3}{Z_\xi}\,\xi\,. \tag{157}$$

在这种以重整化场函数和重整化参量表示的理论形式下，无微扰的拉氏函数是

$$\mathcal{L}^{(00)}(x) = \overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{2\xi}(\partial^\mu A_\mu(x))^2\,, \tag{158}$$

而微扰项则包含基本的耦合项 $-e\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x)A_{\mu}(x)$ 以及各种抵消项. 故抵消项的总和是

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{L}(x) = &\left(Z_2-1\right)\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m)\psi(x)+Z_2\,\delta m\,\overline{\psi}(x)\psi(x)\\ &-\left(Z_1-1\right)e\,\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x)A_{\mu}(x)-\left(Z_3-1\right)\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\\ &-\left(Z_{\xi}-1\right)\frac{1}{2\xi}\left(\partial^{\mu}A_{\mu}(x)\right)^2 .\end{aligned}\tag{159}$$

各重整化常数是按照消除微扰展开中的发散的要求逐级地确定的.

这样, $\Delta\mathcal{L}(x)$ 就被分解为基本项 $\mathcal{L}^{[0]}$ 与抵消项的和:

$$\mathcal{L}=\mathcal{L}^{[0]}+\Delta\mathcal{L},\tag{160}$$

其中 $\mathcal{L}^{[0]}$ 是在原始拉氏函数中将裸参量和场函数换成重整化的参量和重整化场函数的结果, 即

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{[0]} = &\overline{\psi}(\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m)\psi-e\overline{\psi}\gamma^{\mu}\psi A_{\mu}\\ &-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}-\frac{1}{2\xi}(\partial^{\mu}A_{\mu})^2 .\end{aligned}\tag{161}$$

对于更复杂的场论, 只要知道了用于定义格林函数的生成泛函的有效拉氏函数, 也可按同样的方法定义 $\mathcal{L}^{[0]}$ 和 $\Delta\mathcal{L}$. 由于在这样的分解中, $\mathcal{L}^{[0]}$ 保持着最初的有效拉氏函数的结构, 可以认为, 完全的有效拉氏函数是在最初的有效拉氏函数中外加了上述特殊形式的抵消项而成的, 但是所有参量都理解为重整化参量. 这在效果上正好是维持着最初的拉氏函数而实行了基本变量的转换.

以重整化场函数为基本变量来定义的格林函数称为“重整化”格林函数. 它们只是在完成重整化之后才是真正的重整化格林函数. 所谓可重整的场论, 首先意味着能够借助于从拉氏函数分解出来的抵消项消除“重整化”格林函数的紫外发散. 或者

说，能够借助这样的抵消项保证，“重整化”的格林函数在准至任一级别时，都没有紫外发散. 而且，如上所述，对于规范理论而言，还要求重整化后仍然具有规范理论的结构. 我们约定，以后用普通的记号代表以重整化场函数为基本变量来定义的“重整化”格林函数. 原来的未重整化格林函数则带有附加的指标 b. 例如，用 $\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\beta}, \mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}$ 代表“重整化”的完全传播函数，而相应的未重整化传播函数记作 $\mathrm{i}\overline{S}^{[b]}_{\alpha\beta}$, $\mathrm{i}\overline{D}^{[b]}_{\mu\nu}$. $\mathrm{i}S_{\alpha\beta}, \mathrm{i}D_{\mu\nu}$ 则代表“重整化”的自由传播函数，即是以重整化场函数为基本变量而以 $\mathcal{L}^{[0]}$ 的自由项为拉氏函数来定义的传播函数. 还约定，在格林函数的微扰展开的 Feynman 中的线段代表“重整化”的自由传播函数，顶点中的 e, m 等都是重整化参量 (关于抵消项的顶点，参看后面).

既然拉氏函数只是在形式上被改写了，而 $\psi(x), \overline{\psi}(x), A_\mu(x)$ 用原来的变量表示时是 $Z_2{}^{-1/2}\psi^{[b]}(x), Z_2{}^{-1/2}\overline{\psi}^{[b]}(x)$, $Z_3{}^{-1/2}A^{[b]}_\mu(x)$, 显然有

$$\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\beta}(x-y) = Z_2{}^{-1}\mathrm{i}\overline{S}^{[b]}_{\alpha\beta}(x-y),$$

$$\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(x-y) = Z_3{}^{-1}\mathrm{i}\overline{D}^{[b]}_{\mu\nu}(x-y).$$

一般地，$G^{[b]}_{\alpha_1\cdots\alpha_m\beta_1\cdots\beta_m\nu_1\cdots\nu_n}(x_1,\cdots,y_1,\cdots,z_1,\cdots)$ 被 $Z_2{}^m Z_3{}^{n/2}$ 除后，等于相应的“重整化”格林函数. 至于“重整化”格林函数的生成泛函 (记作 $\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J]$), 则等于在未重整化格林函数的生成泛函中将源 $\overline{\eta}$,η,J 换成 $Z_2{}^{-1/2}\overline{\eta}$, $Z_2{}^{-1/2}\eta$, $Z_3{}^{-1/2}J$ 的结果. 由此容易证实

$$\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J] = \frac{1}{\mathcal{N}}\int \mathcal{D}[\overline{\psi},\psi,A]\exp\Big\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\big(\mathcal{L}^{[0]}(x) + \Delta\mathcal{L}(x) + \overline{\eta}\psi + \overline{\psi}\eta + J^\mu A_\mu\big)\Big\}. \quad (162)$$

记住，只是当重整化完成之后，由这样的生成泛函产生的格林函数才是真正的重整化格林函数.

6.2 以重整化的场函数为基本变量的算符描述

现在借助上述“重整化”格林函数生成泛函的路径积分表示，建立以重整化的场函数为基本变量的算符描述. 设 $\Delta\mathcal{L}\left(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}(z)},\cdots\right)$ 表示在拉氏函数的抵消项 $\Delta\mathcal{L}$ 中将 $\psi_\alpha(z),\overline{\psi}_\beta(z)$, $A_\nu(z)$ 分别换成 $\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(z)},\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\beta(z)}$, $\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^\nu(z)}$ 的结果，而 $\mathcal{L}_{A\psi}\left(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}(z)},\cdots\right)$ 是由 $\mathcal{L}^{[0]}$ 中的耦合项 $\mathcal{L}_{A\psi}$ 按照同样的方法定义的微商算子，于是有

$$\begin{aligned}&\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J]\\&\quad\propto\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4z\mathcal{L}_{A\psi}\left(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}(z)},\cdots\right)\right\}\\&\qquad\times\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4z\Delta\mathcal{L}\left(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}(z)},\cdots\right)\right\}\mathcal{Z}_0^R[\overline{\eta},\eta,J],\end{aligned}\quad(163)$$

其中比例系数是与源无关的常数，并保证 $\mathcal{Z}^R[0,0,0]=1$. $\mathcal{Z}_0^R[\overline{\eta},\eta,J]$ 是自由格林函数的生成泛函.

假定 $\psi(x),\overline{\psi}(x),A_\mu(x)$ 和 H_0 是根据 (158) 式中的自由拉氏函数进行量子化而得出的场算符以及自由哈密顿量算符 (不要因为这种场算符的记号将其误解为经典场函数). 这些场算符当然满足通常的等时对易 - 反对易关系，其时间演化由 H_0 决定：

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t},\quad(164)$$

$$\overline{\psi}(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}\overline{\psi}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t},\quad(165)$$

$$A_\mu(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}A_\mu(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t}.\quad(166)$$

再设 $|0\rangle$ 是 H_0 的真空态，约定已从 H_0 中减去在此状态的值. 根据以前做过的计算知道

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_0^R[\overline{\eta},\eta,J]=\langle0|T\exp\Big\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x\Big(&\overline{\eta}_\alpha(x)\psi_\alpha(x)\\&+\overline{\psi}_\beta(x)\eta_\beta(x)+J^\mu(x)A_\mu(x)\Big)\Big\}|0\rangle.\end{aligned}\quad(167)$$

以此代入 (163) 式右边，完成对于源的微商，即可以将 $\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J]$ 表示为

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J]=&\frac{1}{\langle 0|\mathcal{T}\Big(\exp\Big\{\int \mathrm{d}^4x(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x)\Big\}\Big)|0\rangle}\\&\times\langle 0|\mathcal{T}\Big(\exp\Big\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4z\big(\overline{\eta}(z)\psi(z)+\overline{\psi}(z)\eta(z)+J^\mu(z)A_\mu(z)\big)\Big\}\\&\times\exp\Big\{\int \mathrm{d}^4x(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x)\Big\}\Big)|0\rangle\,,\end{aligned}\tag{168}$$

此式分子中的 $\exp\Big\{\int d^4x(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x)\Big\}$ 可以换成时序积．$-\mathcal{H}_I(x)$ 是从经典量 $\mathcal{L}_{A\psi}+\Delta\mathcal{L}$ 中将场函数换成算符 $\psi(x)$,$\overline{\psi}(x)$, $A_\mu(x)$ 的结果，包括写成厄米形式并且对于 H_0 的真空态 $|0\rangle$ 取正规积部分．例如，$\Delta\mathcal{L}$ 中的 $\overline{\psi}(x)\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)$ 应过渡到

$$\frac{1}{2}:\overline{\psi}(x)\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x):-\frac{1}{2}:\big(\partial_\mu\overline{\psi}(x)\big)\mathrm{i}\gamma^\mu\psi(x):,$$

因此

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_I(x)&=e:\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x):+\Delta\mathcal{H}_I(x)\,,\\\Delta\mathcal{H}_I(x)&=-\big(Z_2-1\big)\frac{1}{2}:\overline{\psi}(x)\big(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m\big)\psi(x):\\&\quad+\big(Z_2-1\big)\frac{1}{2}\big\{:\big(\partial_\mu\overline{\psi}(x)\big)\mathrm{i}\gamma^\mu\psi(x):+:\overline{\psi}(x)m\psi(x):\big\}\\&\quad-Z_2\,\delta m:\overline{\psi}(x)\psi(x):+\big(Z_1-1\big)e:\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x):\\&\quad+\big(Z_3-1\big)\frac{1}{4}:F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}:+\big(Z_\xi-1\big)\frac{1}{2\xi}:\big(\partial^\mu A_\mu(x)\big)^2:\,.\end{aligned}\tag{169}$$

这样就构成了我们所说的以重整化的场函数为基本变量的算符描述，其中 $\psi(x)$,$\overline{\psi}(x)$, $A_\mu(x)$ 是以 H_0 为自由哈密顿量而总哈密顿量 H 等于 $H_0+\int \mathrm{d}^3x\big\{\mathcal{H}_I(x)\big\}_{t=0}$ 的相互作用绘景的场算符．或者说，$\mathcal{T}\Big(\exp\Big\{\int \mathrm{d}^4x(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x)\Big\}\Big)$ 是这种绘景的时间演化算符

$U(t,t_0)$ 的极限 $U(\infty,-\infty)$, 而海森伯绘景的场算符是

$$\psi^h(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\,, \tag{170}$$

$$\overline{\psi}^h(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}\overline{\psi}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\,, \tag{171}$$

$$A^h_\mu(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}A_\mu(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\,. \tag{172}$$

显然这种场算符也满足通常的等时对易 - 反对易关系. 所以 $\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J]$ 的上述表达式即是

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J]=&\frac{1}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\\&\times\langle 0|\mathcal{T}\Big(U(\infty,-\infty)\exp\Big\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4z\big(\overline{\eta}(z)\psi(z)\\&+\overline{\psi}(z)\eta(z)+J^\mu(z)A_\mu(z)\big)\Big\}\Big)|0\rangle\,,\end{aligned} \tag{173}$$

或者

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J]=&\frac{1}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\\&\times\langle 0|U(\infty,0)\mathcal{T}\Big(\exp\Big\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x\big(\overline{\eta}\psi^h\\&+\overline{\psi}^h\eta+J^\mu A^h_\mu\big)\Big\}\Big)U(0,-\infty)|0\rangle\,.\end{aligned} \tag{174}$$

即是说, 在这种算符描述下, 重整化场函数的海森伯算符的时序积在真空态的平均值代表“重整化”的格林函数. 既然如此, 用这样的平均值表示“重整化”格林函数的公式, 当然与以前表示“未重整化”格林函数的公式具有相同的形式, 例如, “重整化”的完全传播函数可以表示为

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\beta}(x-y)&=\langle\!\langle 0|\mathcal{T}\big(\psi^h_\alpha(x)\overline{\psi}^h_\beta(y)\big)|0\rangle\!\rangle\\&=\frac{\langle 0|\mathcal{T}\big\{U(\infty,-\infty)\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\beta(y)\big\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,,\\\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(x-y)&=\langle\!\langle 0|\mathcal{T}\big(A^h_\mu(x)A^h_\nu(y)\big)|0\rangle\!\rangle\\&=\frac{\langle 0|\mathcal{T}\big\{U(\infty,-\infty)A_\mu(x)A_\nu(y)\big\}|0\rangle}{\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,.\end{aligned}$$

扼要地说，本小节的方法相当于首先根据 (158) 式中的自由拉氏函数完成正则量子化，确定自由场的算符 $\psi(x),\overline{\psi}(x),A_\mu(x)$ 以及自由哈密顿量算符 H_0. 然后将这样的场算符的自由演化看成在相互作用绘景的演化，并用它们代替耦合项和抵消项中的经典量以得出在该绘景的相互作用项 $\int \mathrm{d}^3x\{\mathcal{H}_I(x)\}$. 需要特别提醒一下，虽然在路径积分中可以用经典场函数之间的关系 (154),(155) 式实现基本变量的转换，但是不可以认定原来的以未重整化的场函数为基本变量的算符描述中的场算符与现在的场算符之间也存在这样的关系 (这两类描述中的算符作用于不同的态矢量空间).

如以前所说，记住所有参量都是重整化参量，就可以认为算符 $\Delta\mathcal{H}_I$ 中的抵消项是外加的. 加入这种特殊形式的抵消项的结果，正好维持着最初的拉氏函数，只是场算符变成了重整化场函数的算符.

6.3 Feynman 积分的表观发散度. Bogoliubov-Parasiuk 定理

一个正规 Feynman 图 G 在动量空间的表达式，归结为对于独立的内线动量的积分 (独立内线动量的数目亦即独立圈的数目)，这种积分撇开外线因子后称为 G 的 Feynman 积分. 一个不连接的，或者虽然连接但是单粒子可约的图形，在动量空间的表达式则包含若干 Feynman 积分因子，每个因子都来自一个正规子图. 某图形的子图是指由该图形的一部分顶点和它的所有两端都连接着这些顶点的内线构成的图形. 现在针对不含抵消项顶点的正规 Feynman 图 (可以是正规子图) 定义表观发散度，在一般叙述中也不限制于量子电动力学. 假定拉氏函数的基本部分含有若干类耦合项，其中第 j 类耦合项包含 F_j 个费米场和 B_j 个玻色场以及 Δ_j 次时空微商. 在正规 Feynman 图 G 的 Feynman 积分 $F(G)$ 中，用一个共同因子 λ 乘所有内线动量，则当 λ 趋向无穷大时有 $F(G)\sim\lambda^D$. 这个总幂次 D 称为 $F(G)$ 的表观发散度，也说是图 G

的表观发散度. 当 D 不是负数时, 积分一般是紫外发散的. 当 D 是负数时, 仍然可以有某些子积分发散.

在 $\hbar = c = 1$ 的单位下, 质量和长度的量纲分别是 1 和 -1, 故 $\mathcal{L}$ 的量纲是 4. 因此在 $\mathcal{L}$ 的自由部分 (约定其中不含质量以外的有量纲的系数), 其时空微商出现一次的场函数的量纲是 $\frac{3}{2}$, 其微商出现两次的场函数的量纲是 1. 在通常的情形, 费米场的量纲是 $\frac{3}{2}$, 玻色场的量纲是 1. 不过在规范理论中的 Faddeev-Popov 鬼场本来属于费米场, 但量纲是 1. 为了方便, 就说这种鬼场在幂次计算中当作"玻色场"看待. 在动量空间的费米场传播函数和玻色场传播函数的量纲分别是 -2 和 -1, 这正是两类自由传播函数在动量趋向无穷大时的动量幂次. 设连接图 G 的独立内线动量数是 L, 内玻色子线和内费米子线的数目分别是 I_B 和 I_F, 外玻色子线和外费米子线的数目分别是 E_B 和 E_F. 既然每根内玻色子线贡献幂次 λ^{-2}, 每根内费米子线贡献幂次 λ^{-1}, 每个独立动量的积分元贡献幂次 λ^4, 应有

$$D(G) = 4L - I_F - 2I_B + D_V\,,$$

其中 D_V 来自图形的顶点的时空微商. 设代表第 j 类耦合项的顶点在图 G 中出现的次数是 v_j, 则

$$D_V = \sum_j v_j \Delta_j\,,$$

$$E_F + 2I_F = \sum_j v_j F_j\,,$$

$$E_B + 2I_B = \sum_j v_j B_j\,.$$

其次, 相应于 $\sum_j v_j$ 个顶点的动量守恒条件除一个归结为外线动量的守恒条件外, 即是对于 $I_F + I_B$ 个内线动量的限制. 因此独

立内线动量的数目是

$$L = I_F + I_B - \left(\sum_j v_j - 1\right).$$

由此消去 L 以及利用 $3I_F = \frac{3}{2}\sum_j v_j F_j - \frac{3}{2}E_F$ 和 $2I_B = \sum_j v_j B_j - E_B$，得

$$D(G) = 4 - \frac{3}{2}E_F - E_B + \sum_j v_j(d_j - 4), \tag{175}$$

$$d_j = \frac{3}{2}F_j + B_j + \Delta_j . \tag{176}$$

所以，只要外线颇多，而所有 d_j 都不大于 4，$D(G)$ 就是负数. 为了方便，将 d_j 称为第 j 类顶点的 d 值. 注意一个顶点的 d 值即是 $\mathcal{L}$ 中产生该顶点的项在未计及其系数时的量纲. 因此，只有 $\mathcal{L}$ 中所有微扰项的系数都具有非负的量纲，才能使所有图形的每个顶点的 d 值都不大于 4.

一种场论，在 $\mathcal{L}$ 的自由项中不含质量以外的有量纲系数的情况下，如果自由传播函数当动量趋向无穷大时具有通常的动量幂次，而耦合项的系数都具有非负的量纲，就说它是数幂可重整的理论 (这是区分理论的类型，不是代替可重整性的证明). 在这种表述中没有提到抵消项，实际上，只要在原始拉氏函数中的耦合项的系数都具有非负的量纲，那么按照上一小节的方法分离出基本部分和抵消项之后，抵消项的系数也具有非负的量纲. 显然，量子电动力学是数幂可重整的. 如果一种场论中所有的微扰项的系数都具有正的量纲，就称为超可重整的，不过这种理论没有显示出有什么实际意义. 如果理论中有的耦合项的系数具有负的量纲，就说是数幂不可重整的. 在这种情况下，不管图形的外线数目如何，D 值总是随着这类耦合项的顶点的增多而增大，因此任何顶角函数都包含 D 值任意大的图形的贡献. 这种理论的发散无法借助从原来的有效拉氏函数的分解得出的极为有限的几类抵消项来消除.

对于数幂可重整的场论，由 (175) 式有

$$D(G) \leq 4 - \frac{3}{2}E_F - E_B\,. \tag{177}$$

注意 $(4 - \frac{3}{2}E_F - E_B)$ 被外线决定，而且此式表明，不管没有外线的情形，能够有非负 D 值的正规图 Feynman 图只有少数几类：

$$(E_F, E_B) = (0,1),\ (2,0),\ (0,2),\ (2,1),\ (0,3),\ (0,4)\,.$$

Bogoliubov 等人阐明了，从数学方法上看，场论的微扰展开中出现紫外发散，是由于场算符的编时积在时空点相同时缺乏适当的定义，而按 Bogoliubov 和 Parasiuk 在 1957 年建立的 Bogoliubov-Parasiuk 定理，能够在相互作用中加入适当的抵消项来弥补这种缺陷以及实现一种 R 减除运算而消除发散 [1]. 这一定理的完整证明是由 K.Hepp 在 1966 年完成的 [3], 也称为 Bogoliubov-Parasiuk-Hepp 定理. 原来的减除运算是对经过正规化的 Feynman 积分进行的，后来由 Zimmerman 改变成对于 Feynman 积分的被积函数进行减除的运算 [4], 又称 BPHZ 减除运算. 设 G 是不包含抵消项顶点的正规 Feynman 图， I_G 是它的 Feynman 积分的被积函数. 再设 g 是图 G 的正规子图，其 Feynman 积分的被积函数是 I_g. 如果它是表观发散的 ($D(g)$ 非负), 就说这个子图是 G 的一个重整化部分. 两个正规子图如果没有共同的顶点和线段就说是互不相交的. 当 $g_1, g_2, \cdots, g_s$ 是 G 的 s 个互不相交的重整化部分时，就用记号 $\{g_1, g_2, \cdots, g_s\}$ 表示，而 $I_{G/\{g_1,g_2,\cdots,g_s\}}$ 则表示在 I_G 的表达式中将 $g_1, g_2, \cdots, g_s$ 所贡献的因子都换成 1(图形上是让这些子图都缩成一点), 于是有

$$I_g I_{G/\{g\}} = I_G\,,$$
$$I_{g_1} I_{g_2} \cdots I_{g_s} I_{G/\{g_1,g_2,\cdots,g_s\}} = I_G\,.$$

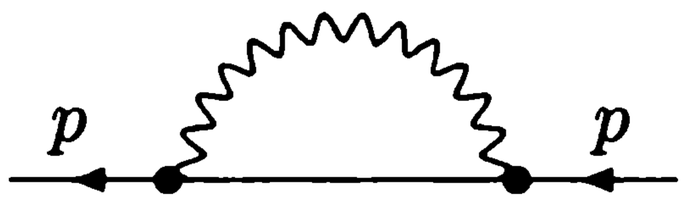
此外，按下式定义 $\overline{R}_G$:

$$\overline{R}_G = I_G + \widetilde{\sum}_{\{g_1,g_2,\cdots,g_s\}} I_{G/\{g_1,g_2,\cdots,g_s\}}\big(-t^{g_1}\overline{R}_{g_1}\big) \times\big(-t^{g_2}\overline{R}_{g_2}\big)\cdots\big(-t^{g_s}\overline{R}_{g_s}\big)\,. \tag{178}$$

其中求和遍及构成 G 的互不相交的重整化部分 $\{g_1,g_2,\cdots,g_s\}$ 的所有不同方式，s 是 1 的情形也包括在内，但是不包括以 G 本身作为重整化部分的项. $t^g\overline{R}_g$ 代表 $\overline{R}_g$ 作为独立外动量的函数围绕一个减除点作泰勒展开，取到 $D(g)$ 阶微商项. 例如按照原来的定义，在所有粒子的质量都大于零的情形，将 $\overline{R}_g$ 当作它的独立外动量的函数作 Maclaurin 展开，取到 $D(g)$ 阶微商项，就是 $t^g\overline{R}_g$. (178) 式是一种递推公式，出现在它右方的 $\overline{R}_{g_i}$ 也是借助 g_i 的 Feynman 积分的被积函数按同样的公式来定义. 既然 $g_1,g_2,\cdots,g_s$ 中没有 G，按照这样的公式进行递推，确是可以求出 $\overline{R}_G$(以及各个 $\overline{R}_{g_i}$). 对 G 的 Feynman 积分进行 R 减除运算的意思是：当表观发散度 $D(G)$ 为负时，用 $\overline{R}_G$ 替换 I_G 作为被积函数，而当 $D(G)$ 为非负时，则用 $(1-t^G)\overline{R}_G$ 作为被积函数. 对不包含抵消项顶点的单粒子可约的或者不连接 Feynman 图的发散表达式施行 R 减除运算，即是对它的每一个 Feynman 积分因子都进行减除. 所谓 Bogoliubov-Parasiuk 定理，简要地说即是：将适当的抵消项加入相互作用中，能够保证计算任一种格林函数准至任一级别时，结果等于对不含抵消项贡献的每一发散项都施行 R 减除运算，经过这样的减除之后，紫外发散即被消去.

例题 1 设

G =

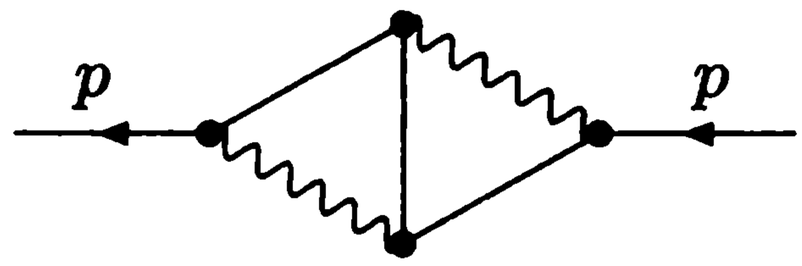


在它的内部，不存在重整化部分，故

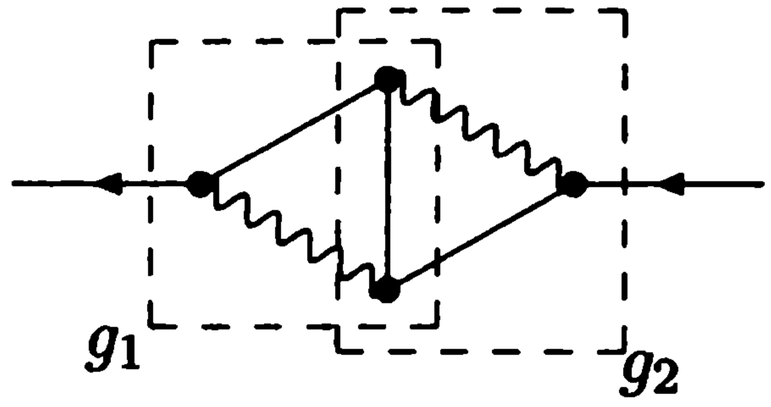
$$\overline{R}_G = I_G\,,$$

用 $(1-t^G)\overline{R}_G$ 作为新的被积函数就不再发散.

例题 2 设



它含有两个重整化部分 g_1 和 g_2, 如虚线方框所示:



g_1 和 g_2 是相交的, 故

$$\overline{R}_G = I_G + I_{G/\{g_1\}}\big(-t^{g_1}\overline{R}_{g_1}\big) + I_{G/\{g_2\}}\big(-t^{g_2}\overline{R}_{g_2}\big)\,.$$

在其中代入

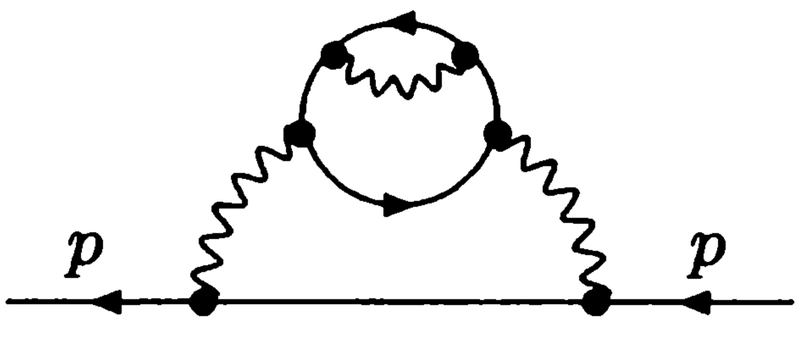
$$\overline{R}_{g_1} = I_{g_1}\,, \qquad \overline{R}_{g_2} = I_{g_2}\,,$$
$$I_{g_1} I_{G/\{g_1\}} = I_G\,, \qquad I_{g_2} I_{G/\{g_2\}} = I_G\,,$$

有

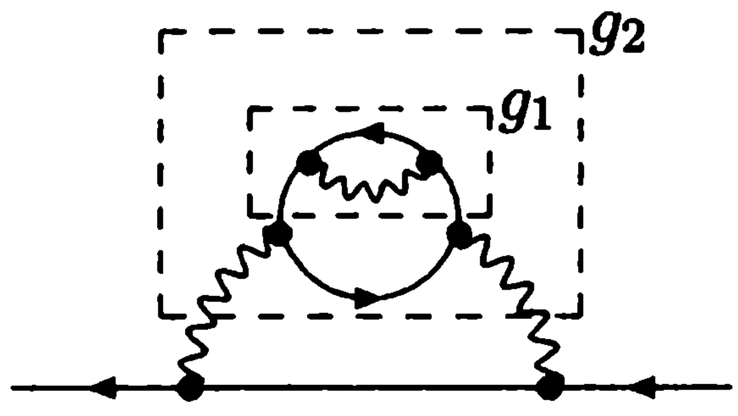
$$\begin{aligned}\overline{R}_G &= I_G + I_{G/\{g_1\}}\big(-t^{g_1} I_{g_1}\big) + I_{G/\{g_2\}}\big(-t^{g_2} I_{g_2}\big)\,,\\ &= \big(1 - t^{g_1} - t^{g_2}\big) I_G\,.\end{aligned}$$

用 $(1-t^G)\overline{R}_G$ 作为被积函数就不再发散.

例题 3 设



它含有两个重整化部分 g_1 和 g_2, 如下面的虚线方框所示:



由于 g_2 包含 g_1, 有

$$\overline{R}_G = I_G + I_{G/\{g_1\}}\big(-t^{g_1}\overline{R}_{g_1}\big) + I_{G/\{g_2\}}\big(-t^{g_2}\overline{R}_{g_2}\big)\,.$$

在其中代入

$$\begin{aligned}
\overline{R}_{g_1} &= I_{g_1}\,,\\
\overline{R}_{g_2} &= I_{g_2} + I_{g_2/\{g_1\}}\big(-t^{g_1}\overline{R}_{g_1}\big)\,,\\
&= I_{g_2} + I_{g_2/\{g_1\}}\big(-t^{g_1}I_{g_1}\big) = \big(1-t^{g_1}\big)I_{g_2}\,,
\end{aligned}$$

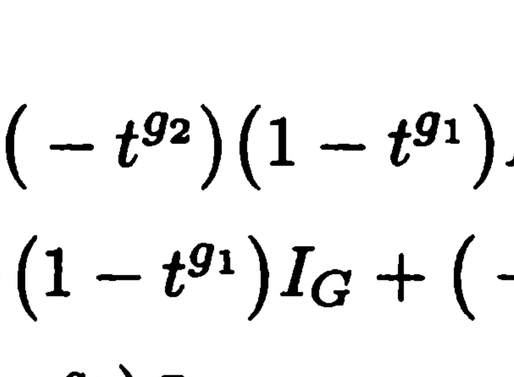
有

$$\begin{aligned}
\overline{R}_G &= I_G + I_{G/\{g_2\}}\big(-t^{g_2}\big)\big(1-t^{g_1}\big)I_{g_2} + \big(-t^{g_1}\big)I_G\,,\\
&= I_G + \big(-t^{g_2}\big)\big(1-t^{g_1}\big)I_G + \big(-t^{g_1}\big)I_G\,,\\
&= \big(1-t^{g_2}\big)\big(1-t^{g_1}\big)I_G\,.
\end{aligned}$$

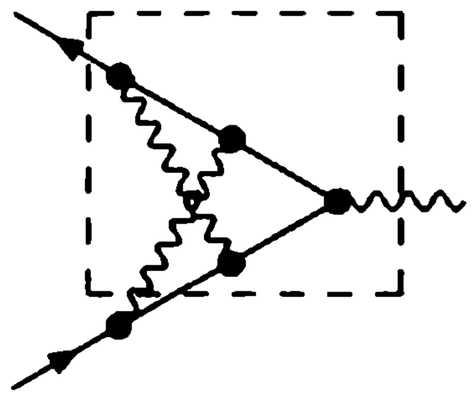
用 $(1-t^G)\overline{R}_G$ 作为被积函数就不再发散.

例题 4 设

G =



在它的内部不存在重整化部分. 例如, 在下面由虚线方框所示的正规子图, 表观发散度是负的:



其他正规子图也是如此. 故 $\overline{R}_G = I_G$. 用 $(1-t^G)\overline{R}_G$ 作为被积函数就不再发散.

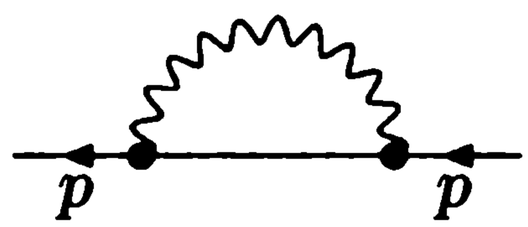
6.4 量子电动力学的可重整性. 在质壳上减除的重整化方案

根据 Bogoliubov-Parasiuk 定理和 R 减除的规则, 在借助抵消项进行 R 减除时, 从不含抵消项顶点的正规图形 G 的 Feynman 积分的被积函数函 I_G 决定 $\overline{R}_G$ 的步骤, 是由级别低于 G 的独立圈数的抵消项完成的. 例如, 出现在 $\overline{R}_G$ 的表达式中的 $(-t^{g_1})\overline{R}_{g_1}$ 是由级别等于重整化部分 g_1 的独立圈数的抵消项贡献的. 如果 G 不是表观发散的, $\overline{R}_G$ 就是新的被积函数. 反之, 如果 G 是表观发散的, 则还有由级别等于 G 的独立圈数的抵消项贡献的附加项 $(-t^G)\overline{R}_G$, 从而使新被积函数成为 $(1-t^G)\overline{R}_G$. 如前所述, 量子电动力学的正规 Feynman 图的表观发散度由外线的数目 E_F 和 E_B 决定, 而表观发散的正规图形只可能是在上一小节列出的少数几类. 相应地, 也就只有这几类正规顶角函数能够含有由表观发散正规图代表的项. 其次, 由 Furry 定理知道, $(2n+1)-$ 光子正规图形对于任何格林函数都没有贡献. 既然如此, 就只有电子自能, 光子自能, 电子光子顶角函数和四光子顶角函数能够含有由表观发散正规图代表的项. 而且在任何格林函数实际存在的项中包含的重整化部分也只可能有 (E_F, E_B) 值为 $(2,0)$,$(0,2)$,$(2,1)$ 或 $(0,4)$ 的类型.

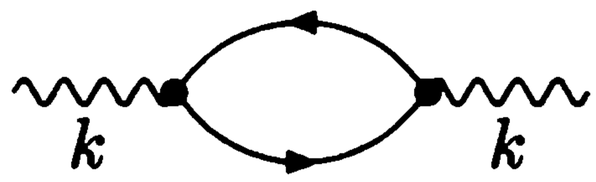
我们将要运用数学归纳法来证实, 能够借助从原始拉氏函数分解出来的而且是规范不变的抵消项实现 R 减除, 从而消除紫外发散和阐明理论的可重整性. 从方法上说, 围绕外线动量的零

点作 Maclaurin 展开和进行 R 减除，而阐明可重整性比较自然，不过在量子电动力学中通常采用在独立外动量质壳上作减除的重整化方案，也说是以外动量的质壳值作为重整化点. 这种方案由重整化完全传播函数和完全的电子光子三点顶角函数在质壳上的特定的归一条件来定义，使得参量 m,e 代表电子质量和电荷的实验值，光子没有质量. 考虑到这一点，在本节中，将通过在外电子线动量的 $\not{p}=m$ 和外光子线动量的 $k=0$ 处进行 R 减除来证实可重整性，然后说明在质壳上作减除的重整化方案的归一条件和实施步骤. 关于消除红外发散问题，会在以后另行讨论. 现在从推断一圈级抵消项 $\Delta\mathcal{H}_{I,1}(x)$ 的形式开始. 假定略去抵消项而计算 $-\mathrm{i}\,\Sigma(p)$,$\mathrm{i}e^2\Pi^{\rho\lambda}(k)$, $-\mathrm{i}e\Lambda^{\mu}(p_1,p_2)$ 和四光子顶角函数，准至一圈级时是

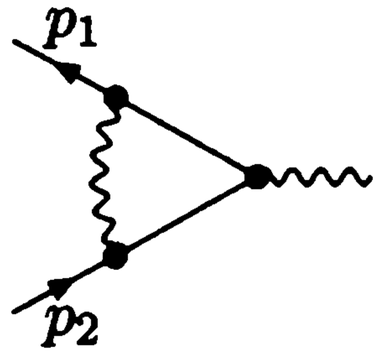
$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)=\int I^{(1)}_{\Sigma}\quad=$$



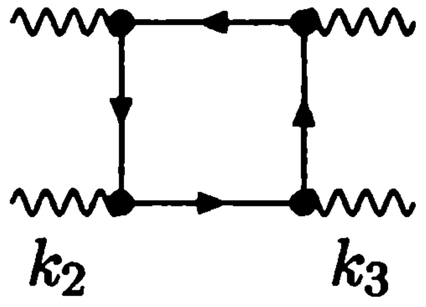
$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)=\int I^{(1)}_{\Pi}\quad=$$



$$-\mathrm{i}e\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2)=\int I^{(1)}_{\Lambda}\quad=$$



$$\square^{(1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[0]}(k_1,k_2,k_3,k_4)=\int I^{(1)}_{\square}\quad=$$



其中 $\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$ 等的上指标“ (1) ”表示属于一圈级，下指标“ [0] ”表示未计入抵消项的贡献. 简单的积分记号代表对于独立内动量的积分. 于是当在 $\mathcal{H}_I(x)$ 中加入一圈级抵消项而实现了 R 减除

时，准至一圈级的结果为

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_R(p)\approx-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[1]}(p)=\int(1-t^{\Sigma})I^{(1)}_{\Sigma}\,,$$

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{\rho\lambda}_R(k)\approx\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[1]}(k)=\int(1-t^{\Pi})I^{(1)}_{\Pi}\,,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda^{\mu}_R(p_1,p_2)\approx-\mathrm{i}e\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)=\int(1-t^{\Lambda})I^{(1)}_{\Lambda}\,,$$

$$\square^{\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_R(k_1,k_2,k_3,k_4)$$

$$\approx\square^{(1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)=\int(1-t^{\square})I^{(1)}_{\square}\,,$$

其中左边各个量的指标“ R ”表示进行了减除. $\Sigma^{(1)}_{[1]}(p)$ 等的上指标“ (1) ”表示属于一圈级，下指标“ [1] ”表示计入了一圈级抵消项的贡献，$-t^{\Sigma}$ 等表示在外线动量的质壳值作泰勒展开而只取到 D 次微商项 (D 是表观发散度). 注意 $(-t^{\Sigma})I^{(1)}_{\Sigma}$, $(-t^{\Pi})I^{(1)}_{\Pi}$,$(-t^{\Lambda})I^{(1)}_{\Lambda}$ 和 $\int(-t^{\square})I^{(1)}_{\square}$ 是外动量的 D 次多项式，它们只可能来自一圈级抵消项 $\Delta\mathcal{H}_{I,1}(x)$ 中如下的成分：

$$:\overline{\psi}(x)\psi(x):,\ :\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x)A_{\mu}(x):,\ :\overline{\psi}(x)\mathrm{i}\gamma^{\mu}\big(\partial_{\mu}-\overleftarrow{\partial}_{\mu}\big)\psi(x):,$$

$$:AA:,\quad :A\delta A:,\quad :(\delta A)(\delta A):,\quad :AAAA:.$$

其中 $\overleftarrow{\partial}_{\mu}$ 表示被微商的量是其左边的 $\overline{\psi}(x)$.

将 $\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$ 等含有紫外发散的积分正规化，把 $(1-t^{\Sigma})$ 等理解为对于这些积分的减除运算，有

$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[1]}(p)=(1-t^{\Sigma})\big\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\big\}\,,$$

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[1]}(k)=(1-t^{\Pi})\big\{\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)\big\}\,,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)=(1-t^{\Lambda})\big\{-\mathrm{i}e\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2)\big\}\,,$$

$$\square^{(1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)=(1-t^{\square})\big\{\square^{(1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[0]}(k_1,k_2,k_3,k_4)\big\}\,.$$

由于不含抵消项的拉氏函数具有原始拉氏函数的形式，可以约定

正规化方法保持 $\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$ 等满足各个 W-T 恒等式，特别是

$$\frac{\partial}{p_\mu}\Sigma^{(1)}_{[0]}(p) = -\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p,p)\,, \tag{179}$$

以及横向性条件

$$k_\rho \Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k) = 0\,, \tag{180}$$

$$k_{\nu_1} \square^{(1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[0]}(k_1,k_2,k_3,k_4) = 0\,, \tag{181}$$

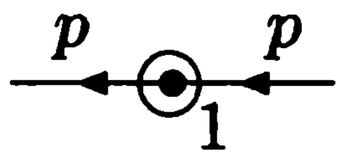
$(-t^{\Sigma})\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\}$ 和 $(-t^{\Lambda})\{-\mathrm{ie}\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2)\}$ 分别是

$$\begin{aligned}(-t^{\Sigma})&\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\}\\ &= \{\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\}_{\not p=m} + \mathrm{i}(\not p - m)\Big(\frac{\partial}{\partial \not p}\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\Big)_{\not p=m}\,,\\ (-t^{\Lambda})&\{-\mathrm{ie}\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2)\} = \mathrm{ie}\Big(\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p,p)\Big)_{\not p=m}\,.\end{aligned}$$

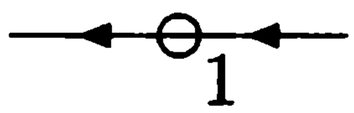
因此来自 $\Delta\mathcal{H}_{I,1}(x)$ 中的

$$\begin{aligned}-b_1 &: \overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) : - \delta_1 : \overline{\psi}(x)\psi(x) :\\ &+e\,c_1 : \overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x) :\,,\end{aligned}$$

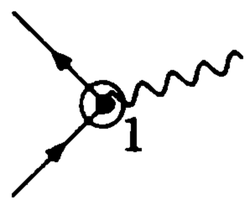
其中约定用 $:\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x):$ 代表其厄米形式，b_1, δ_1 和 c_1 是一圈级常数. 这些抵消项的顶点为 (见本小节习题)：



$$= \mathrm{i}\,b_1\,(\not p - m)\,,$$



$$= \mathrm{i}\,\delta_1\,,$$



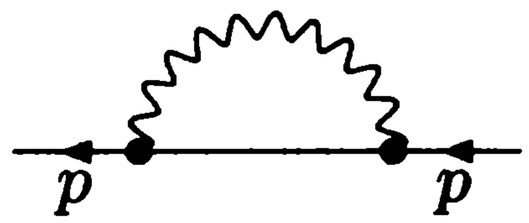
$$= -\mathrm{i}\,e\,c_1\gamma^\mu\,.$$

(和通常一样，在以上的图形表示中不计外腿的贡献.) 即是说

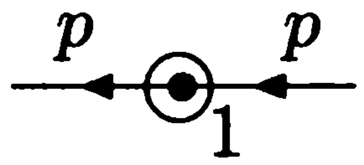
$$\begin{aligned}-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[1]}(p) &= -\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p) + \mathrm{i}\,b_1\,(\not p - m) + \mathrm{i}\,\delta_1\,,\\ -\mathrm{ie}\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p_1,p_2) &= -\mathrm{ie}\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2) - \mathrm{ie}\,c_1\gamma^\mu\,.\end{aligned}$$

或者

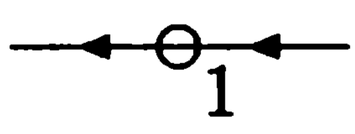
$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[1]}(p) \quad = \quad$$



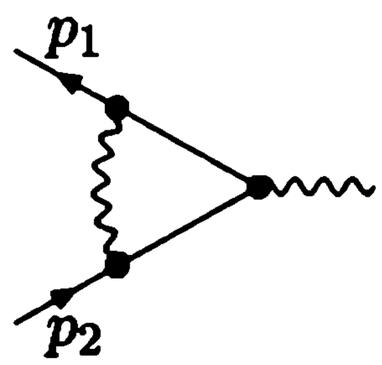
$$+$$



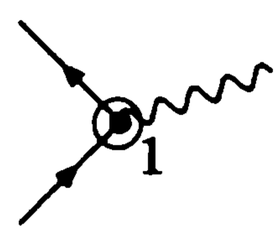
$$+$$



$$-\mathrm{ie}\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p_1,p_2) \quad = \quad$$



$$+$$



记住，在这种写法中，$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$,$-\mathrm{ie}\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2)$ 和它们的图形的表达式都理解为正规化形式. 至于 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[1]}(p)$ 和 $-\mathrm{ie}\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)$, 最终是与用于进行正规化的参量无关的. 由

$$\mathrm{i}\,b_1\,(\not{p}-m)+\mathrm{i}\,\delta_1=(-t^{\Sigma})\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\}\,,$$
$$-\mathrm{ie}\,c_1\gamma^{\mu}=(-t^{\Lambda})\{-\mathrm{ie}\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2)\}\,,$$

得

$$b_1=\Big(\frac{\partial}{\partial\not{p}}\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\Big)_{\not{p}=m}\,,$$
$$\delta_1=\{\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\}_{\not{p}=m}\,,$$
$$c_1\gamma^{\mu}=-\Big(\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p,p)\Big)_{\not{p}=m}\,.$$

由 (179) 式并注意

$$\Big(\frac{\partial}{\partial p_{\mu}}\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\Big)_{\not{p}=m}=\gamma^{\mu}\Big(\frac{\partial}{\partial\not{p}}\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\Big)_{\not{p}=m}\,,$$

可知

$$c_1=b_1\,,$$

以及

$$\frac{\partial}{p_{\mu}}\Sigma^{(1)}_{[1]}(p)=-\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p,p)\,.$$

其次，由条件 (180) 有

$$\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k) = \Pi^{(1)}_{[0]}(k)\big(k^\rho k^\lambda - k^2 g^{\rho\lambda}\big)\,.$$

它在 k 的零点的泰勒展开只包含二次和更高次的项，故

$$\begin{aligned}(-t^{\Pi})\{\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)\} &= -\frac{1}{2}k^\mu k^\nu\Big\{\frac{\partial^2}{\partial k^\mu \partial k^\nu}\big(\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)\big)\Big\}_0 \\ &= -\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)}_{[0]}(0)\big(k^\rho k^\lambda - k^2 g^{\rho\lambda}\big)\,.\end{aligned}$$

可见 $\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[1]}(k)$ 也满足横向性条件，而 $(-t^{\Pi})\{\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)\}$ 来自 $\Delta\mathcal{H}_{I,1}(x)$ 中的

$$\frac{1}{4}f_1 : F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x) :,$$

其中 f_1 是一圈级常数. 这种抵消项的顶点为 (也见本小节习题)：



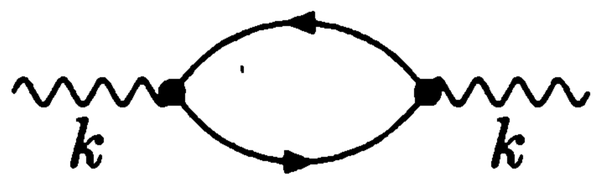
$$= \mathrm{i}\,f_1\,(k^\rho k^\lambda - k^2\,g^{\rho\lambda})\,.$$

亦即

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[1]}(k) = \mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k) + \mathrm{i}\,f_1\,(k^\rho k^\lambda - k^2\,g^{\rho\lambda})\,,$$

或者

$\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[1]}(k)$ =



+



这里的 $\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)$ 及其图形的表达式当然也理解为正规化形式. 由

$$-\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)}_{[0]}(0)\big(k^\rho k^\lambda - k^2 g^{\rho\lambda}\big) = \mathrm{i}\,f_1\,(k^\rho k^\lambda - k^2\,g^{\rho\lambda})\,,$$

得

$$f_1 = -e^2\Pi^{(1)}_{[0]}(0)\,.$$

再由 (181) 式对动量分量求微商后令独立的动量等于零，得

$$\square^{(1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[0]}(0,0,0,0) = 0\,,$$

故

$$(-t^{\square})\{\square_{[0]}^{(1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)\}=0\,.$$

可见 $\Delta\mathcal{H}_{I,1}(x)$ 不含 $:AAAA:$ 项，$\square_{[1]}^{(1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)$ 等于 $\square_{[0]}^{(1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)$ 因而也满足横向性条件.

根据以上所述, 约定正规化方法保持 (179),(180) 和 (181) 式, 则一圈级抵消项的形式为

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{H}_{I,1}(x)=&-b_1:\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi(x):\\&-\delta_1:\overline{\psi}(x)\psi(x):+e\,c_1:\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x):\\&+\frac{1}{4}f_1:F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x):,\end{aligned}\tag{182}$$

而

$$\begin{aligned}b_1&=c_1\,,\\c_1\gamma^\mu&=-\Big(\Lambda_{[0]}^{(1)\mu}(p,p)\Big)_{\not p=m}\,,\\\delta_1&=\big\{\Sigma_{[0]}^{(1)}(p)\big\}_{\not p=m}\,,\\f_1&=-\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)}(0)\,.\end{aligned}$$

这保证 W-T 恒等式在准至一圈级时仍然成立. 由 6.2 小节的结果或者直接从路径积分的观点知道, 与 (182) 式相应的在拉氏函数中的抵消项是

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{L}_1(x)=&\,b_1\,\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi(x)\;+\;\delta_1\,\overline{\psi}(x)\psi(x)\\&-e\,c_1\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x)\;-\;\frac{1}{4}f_1\,F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)\,.\end{aligned}$$

再来推断二圈级抵消项 $\Delta\mathcal{H}_{I,2}(x)$ 的形式. 假定在 $\mathcal{H}_I(x)$ 中加入一圈级和二圈级抵消项 $\Delta\mathcal{H}_{I,1}(x)$ 和 $\Delta\mathcal{H}_{I,2}(x)$ 而完成了直至二圈级的 R 减除，于是在准至这一级时有

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_R(p)\approx-\mathrm{i}\,\Sigma_{[1]}^{(1)}(p)-\mathrm{i}\,\Sigma_{[2]}^{(2)}(p)\,,$$

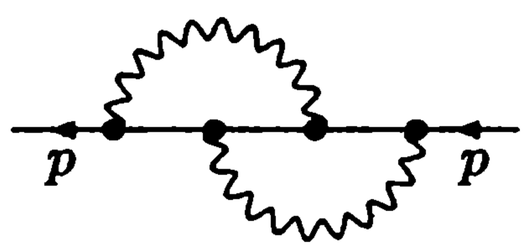
$$\mathrm{i}e^2\Pi_R^{\rho\lambda}(k)\approx\mathrm{i}e^2\Pi_{[1]}^{(1)\rho\lambda}(k)+\mathrm{i}e^2\Pi_{[2]}^{(2)\rho\lambda}(k)\,,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda_R^{\mu}(p_1,p_2)\approx-\mathrm{i}e\Lambda_{[1]}^{(1)\mu}(p_1,p_2)-\mathrm{i}e\Lambda_{[2]}^{(2)\mu}(p_1,p_2)\,,$$

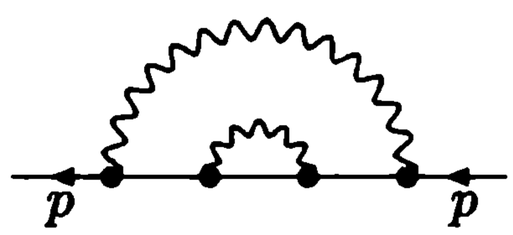
$$\begin{aligned}&\square_R^{\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)\\&\quad\approx\square_{[1]}^{(1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)+\square_{[2]}^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)\,.\end{aligned}$$

其中各式右边第一项的意义已在上面说明，$\Sigma_{[2]}^{(2)}(p)$ 等的上指标“(2)”表示属于二圈级，下指标“[2]”表示计入了直到二圈级抵消项的贡献. 用 $-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(2)}(p)$ 等代表未经减除的二圈级的量，例如

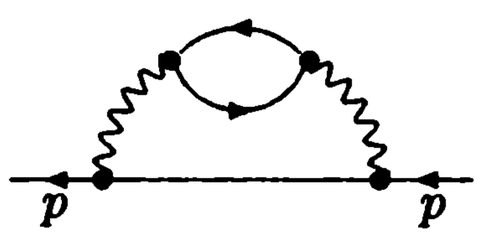
$-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(2)}(p)$ =



+



+



将其简写成

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(2)}(p)=\int I_{\Sigma,1}^{(2)}+\int I_{\Sigma,2}^{(2)}+\int I_{\Sigma,3}^{(2)}\,,$$

类似地

$$\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(2)\rho\lambda}(k)=\int I_{\Pi,1}^{(2)}+\int I_{\Pi,2}^{(2)}+\cdots\,,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda_{[0]}^{(2)\mu}(p_1,p_2)=\int I_{\Lambda,1}^{(2)}+\int I_{\Lambda,2}^{(2)}+\cdots\,,$$

$$\square_{[0]}^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)=\int I_{\square,1}^{(2)}+\int I_{\square,2}^{(2)}+\cdots\,.$$

于是有

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_{[2]}^{(2)}(p)=\int(1-t^{\Sigma})\overline{R}_{\Sigma,1}^{(2)}+\int(1-t^{\Sigma})\overline{R}_{\Sigma,2}^{(2)}+\int(1-t^{\Sigma})\overline{R}_{\Sigma,3}^{(2)}\,,$$

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[2]}(k)=\int(1-t^{\Pi})\overline{R}^{(2)}_{\Pi,1}+\int(1-t^{\Pi})\overline{R}^{(2)}_{\Pi,2}+\cdots,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[2]}(p_1,p_2)=\int(1-t^{\Lambda})\overline{R}^{(2)}_{\Lambda,1}+\int(1-t^{\Lambda})\overline{R}^{(2)}_{\Lambda,2}+\cdots,$$

$$\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[2]}(k_1,k_2,k_3,k_4)=\int(1-t^{\square})\overline{R}^{(2)}_{\square,1}+\int(1-t^{\square})\overline{R}^{(2)}_{\square,2}+\cdots,$$

其中 $\overline{R}^{(2)}_{\Sigma,1}$ 等是计及了一圈级抵消项而未计及二圈级抵消项的贡献的被积函数，即是说，$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[2]}(p)$ 等在不计 $\Delta\mathcal{H}_{I,2}(x)$ 的贡献时就是如下的量：

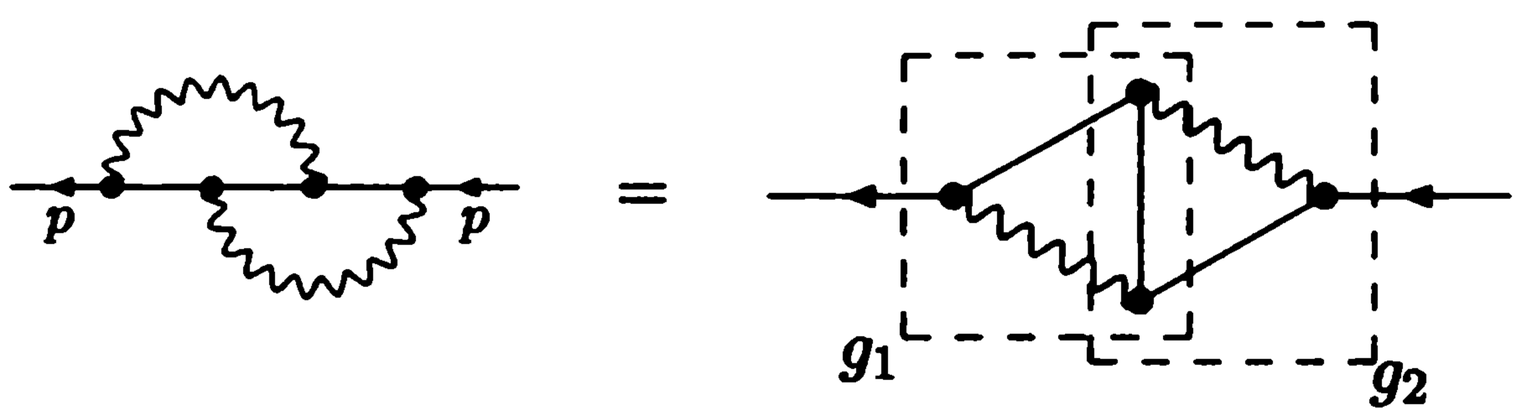
$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)=\int\overline{R}^{(2)}_{\Sigma,1}+\int\overline{R}^{(2)}_{\Sigma,2}+\int\overline{R}^{(2)}_{\Sigma,3},$$

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[1]}(k)=\int\overline{R}^{(2)}_{\Pi,1}+\int\overline{R}^{(2)}_{\Pi,2}+\cdots,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)=\int\overline{R}^{(2)}_{\Lambda,1}+\int\overline{R}^{(2)}_{\Lambda,2}+\cdots,$$

$$\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)=\int\overline{R}^{(2)}_{\square,1}+\int\overline{R}^{(2)}_{\square,2}+\cdots.$$

例如，按照第 6.3 小节所述，用虚线方框标明图形的所谓重整化部分，有



而

$$\overline{R}^{(2)}_{\Sigma,1}=\left(1-t^{g_1}-t^{g_2}\right)I^{(2)}_{\Sigma,1}.$$

由 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[2]}(p)$ 等的上述公式可知，将 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)$,$\mathrm{i}e^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[1]}(k)$ 等积分正规化，把 $(1-t^{\Sigma})$ 等理解为对于积分结果的减除运算，有

$$
\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[2]}(p)=(1-t^{\Sigma})\big\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)\big\}\,,\\
&\mathrm{i}e^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[2]}(k)=(1-t^{\Pi})\big\{\mathrm{i}e^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[1]}(k)\big\}\,,\\
&-\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[2]}(p_1,p_2)=(1-t^{\Lambda})\big\{-\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)\big\}\,,\\
&\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[2]}(k_1,k_2,k_3,k_4)\\
&\qquad=(1-t^{\square})\big\{\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)\big\}\,.
\end{aligned}
$$

因此，$\Delta\mathcal{H}_{I,2}(x)$ 对于 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[2]}(p)$ 等的贡献可表示为

$$
\begin{gathered}
(-t^{\Sigma})\big\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)\big\}\,,\\
(-t^{\Pi})\big\{\mathrm{i}e^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[1]}(k)\big\}\,,\\
(-t^{\Lambda})\big\{-\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)\big\}\,,\\
(-t^{\square})\big\{\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)\big\}\,.
\end{gathered}
$$

既然 $\Delta\mathcal{L}_1(x)$ 是规范不变的，可以约定正规化方法保持 $\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)$ 等满足

$$
\frac{\partial}{p_\mu}\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)=-\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p,p)\,, \tag{183}
$$

$$
k_\rho\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[1]}(k)=0\,, \tag{184}
$$

$$
k_{\nu_1}\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)=0\,, \tag{185}
$$

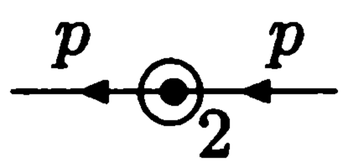
$(-t^{\Sigma})\big\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)\big\}$ 和 $(-t^{\Lambda})\big\{-\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)\big\}$ 分别是

$$
\begin{aligned}
&(-t^{\Sigma})\big\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)\big\}\\
&\qquad=\big\{\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)\big\}_{\not p=m}+\mathrm{i}(\not p-m)\Big(\frac{\partial}{\partial\not p}\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)\Big)_{\not p=m}\,,\\
&(-t^{\Lambda})\big\{-\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)\big\}=\mathrm{i}e\Big(\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p,p)\Big)_{\not p=m}\,.
\end{aligned}
$$

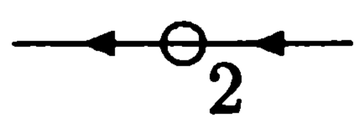
可见它们来自 $\Delta\mathcal{H}_{I,2}(x)$ 中的

$$-b_2 : \overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) : -\delta_2 : \overline{\psi}(x)\psi(x) :$$
$$+e\,c_2 : \overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x) : .$$

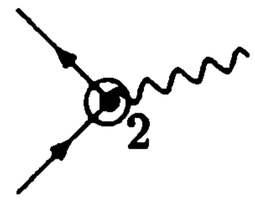
其中 b_2, δ_2 和 c_2 是二圈级常数. 这三种抵消项的顶点为:



$$= \mathrm{i}\,b_2\,(\not{p} - m)\,,$$



$$= \mathrm{i}\,\delta_2\,,$$



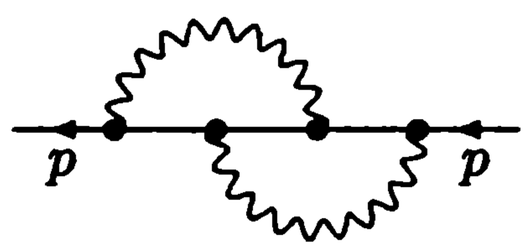
$$= -\mathrm{i}e\,c_2\gamma^\mu\,.$$

即是说

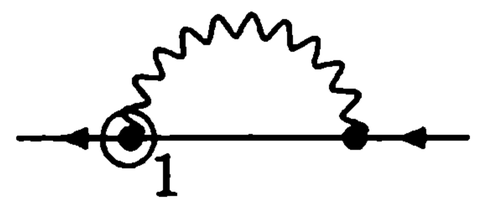
$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[2]}(p) = -\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p) + \mathrm{i}\,b_2\,(\not{p} - m) + \mathrm{i}\,\delta_2\,,$$
$$-\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[2]}(p_1,p_2) = -\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p_1,p_2) - \mathrm{i}e\,c_2\gamma^\mu\,.$$

作为示例, 也给出 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)$ 的图形表示:

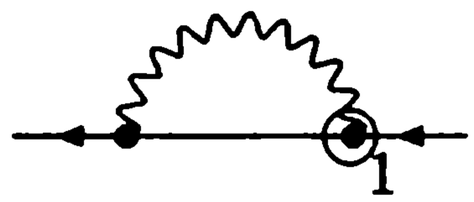
$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)$ =



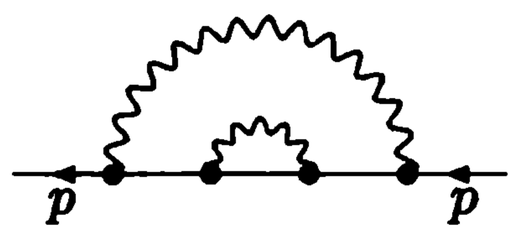
+



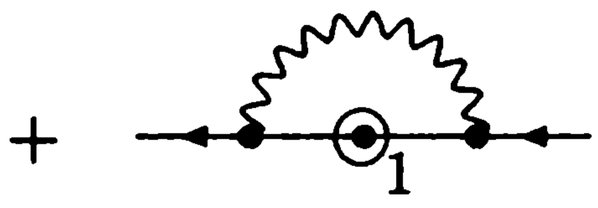
+



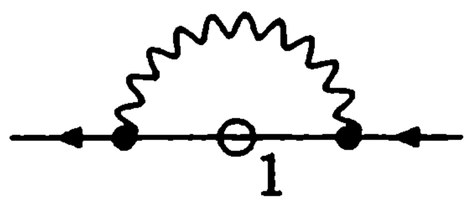
+



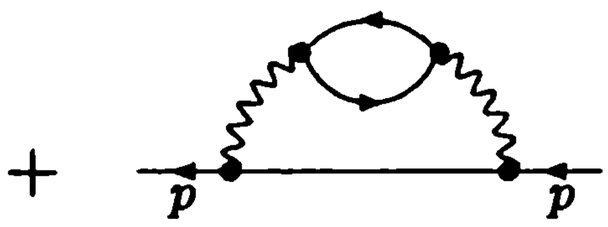
+



+



+



+



这里 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)$,$-\mathrm{ie}\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)$ 以及它们的图形的表达式都理解为正规化形式 (后面将省略类似的说明). 由

$$\mathrm{i}\,b_2\,(\not{p}-m)+\mathrm{i}\,\delta_2=(-t^{\Sigma})\big\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)\big\}\,,$$
$$-\mathrm{ie}\,c_2\gamma^{\mu}=(-t^{\Lambda})\big\{-\mathrm{ie}\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)\big\}\,,$$

得

$$b_2\gamma^{\mu}=\left(\frac{\partial}{p_{\mu}}\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)\right)_{\not{p}=m}\,,$$
$$c_2\gamma^{\mu}=-\left(\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p,p)\right)_{\not{p}=m}\,,$$
$$\delta_2=\left\{\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)\right\}_{\not{p}=m}\,.$$

由此及 (183) 式有

$$c_2=b_2\,,$$

以及

$$\frac{\partial}{p_{\mu}}\Sigma^{(2)}_{[2]}(p)=-\Lambda^{(2)\mu}_{[2]}(p,p)\,.$$

再由条件 (184),(185) 式有

$$\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[1]}(k)=\Pi^{(2)}_{[1]}(k)\big(k^{\rho}k^{\lambda}-k^2g^{\rho\lambda}\big)\,,$$
$$(-t^{\Pi})\big\{\mathrm{ie}^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[1]}(k)\big\}=-\mathrm{ie}^2\Pi^{(2)}_{[1]}(0)\big(k^{\rho}k^{\lambda}-k^2g^{\rho\lambda}\big)\,.$$

以及

$$\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[0]}(0,0,0,0)=0\,,$$
$$(-t^{\square})\big\{\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)\big\}=0\,.$$

可见 $\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[2]}(k)$,$\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[2]}(k_1,\cdots,k_4)$ 也满足横向性条件. $\Delta\mathcal{H}_{I,2}(x)$ 不含 $:AAAA:$ 项, $\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[2]}(k_1,\cdots)$ 等于 $\square^{(2)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[1]}(k_1,\cdots)$, 而 $(-t^{\Pi})\big\{\mathrm{ie}^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[1]}(k)\big\}$ 则来自 $\Delta\mathcal{H}_{I,2}(x)$ 中的

$$\frac{1}{4}f_2:F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x):\,,$$

其中 f_2 是二圈级常数. 这种抵消项的顶点为:

$$\mathrm{i}\, f_2 \left(k^\rho k^\lambda - k^2\, g^{\rho\lambda}\right),$$

故

$$f_2 = -e^2 \Pi^{(2)}_{[1]}(0)\,.$$

根据以上所述, 约定正规化方法保持 (183),(184) 和 (185) 式, 则二圈级抵消项的形式为

$$\begin{aligned}
&\Delta\mathcal{H}_{I,2}(x) \\
&\quad = -b_2 : \overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) : - \delta_2 : \overline{\psi}(x)\psi(x) : \\
&\qquad + e\, c_2 : \overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x) : + \frac{1}{4} f_2 : F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x) :,
\end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned}
b_2 &= c_2\,, \\
c_2\gamma^\mu &= -\left(\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p,p)\right)_{\not{p}=m}, \\
\delta_2 &= \left\{\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)\right\}_{\not{p}=m}, \\
f_2 &= -e^2 \Pi^{(2)}_{[1]}(0)\,.
\end{aligned}$$

这保证 W-T 恒等式在准至二圈级时仍然成立. 相应地

$$\begin{aligned}
\Delta\mathcal{L}_2(x) \;=\; & b_2\, \overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) \;+\; \delta_2\, \overline{\psi}(x)\psi(x) \\
& - e\, c_2\, \overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x) \;-\; \frac{1}{4} f_2\, F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)\,.
\end{aligned}$$

经过上面的论述, 已经很清楚如何运用数学归纳法. 假定正规化方法逐级保持 W-T 恒等式, 借助于抵消项 $\Delta\mathcal{H}_{I,1} + \cdots + \Delta\mathcal{H}_{I,n}$

实现了直到 n 圈的 R 减除，而

$$\begin{aligned}
&\Delta\mathcal{H}_{I,l}(x)\\
&\quad=-b_l:\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi(x):-\delta_l:\overline{\psi}(x)\psi(x):\\
&\qquad+e\,c_l:\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x):+\frac{1}{4}f_l:F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x):,
\end{aligned}\tag{186}$$

其中 b_l,δ_l,c_l 和 f_l 是 l 圈级常数，而且 $b_l=c_l$. 我们可以重复前面的论述来推断抵消项的一般公式.

既然完成了直到 n 圈的 R 减除，按量级展开准至 n 圈级时有

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_R(p)\approx\sum_{l=1}^{n}(-\mathrm{i})\Sigma_{[l]}^{(l)}(p)\,,$$

$$\mathrm{i}e^2\Pi_R^{\rho\lambda}(k)\approx\sum_{l=1}^{n}\mathrm{i}e^2\Pi_{[l]}^{(l)\rho\lambda}(k)\,,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda_R^\mu(p_1,p_2)\approx\sum_{l=1}^{n}(-\mathrm{i}e)\Lambda_{[l]}^{(l)\mu}(p_1,p_2)\,,$$

$$\square_R^{\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)\approx\sum_{l=1}^{n}\square_{[l]}^{(l)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)\,,$$

右边各项的上指标“ (l) ”表示属于 l 圈级，下指标“ $[l]$ ”表示计入了从一圈级到 l 圈级抵消项的贡献. 按照 R 减除方法有

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_{[l]}^{(l)}(p)=\int(1-t^\Sigma)\overline{R}_{\Sigma,1}^{(l)}+\int(1-t^\Sigma)\overline{R}_{\Sigma,2}^{(l)}+\cdots\,,$$

$$\mathrm{i}e^2\Pi_{[l]}^{(l)\rho\lambda}(k)=\int(1-t^\Pi)\overline{R}_{\Pi,1}^{(l)}+\int(1-t^\Pi)\overline{R}_{\Pi,2}^{(l)}+\cdots\,,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda_{[l]}^{(l)\mu}(p_1,p_2)=\int(1-t^\Lambda)\overline{R}_{\Lambda,1}^{(l)}+\int(1-t^\Lambda)\overline{R}_{\Lambda,2}^{(l)}+\cdots\,,$$

$$\square_{[l]}^{(l)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)=\int(1-t^\square)\overline{R}_{\square,1}^{(l)}+\int(1-t^\square)\overline{R}_{\square,2}^{(l)}+\cdots\,.$$

当只计及一圈级至 $l-1$ 圈级抵消项而不计 l 圈级抵消项的贡献时，这些量即是

$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(l)}_{[l-1]}(p)=\int\overline{R}^{(l)}_{\Sigma,1}+\int\overline{R}^{(l)}_{\Sigma,2}+\cdots,$$

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(l)\rho\lambda}_{[l-1]}(k)=\int\overline{R}^{(l)}_{\Pi,1}+\int\overline{R}^{(l)}_{\Pi,2}+\cdots,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda^{(l)\mu}_{[l-1]}(p_1,p_2)=\int\overline{R}^{(l)}_{\Lambda,1}+\int\overline{R}^{(l)}_{\Lambda,2}+\cdots,$$

$$\square^{(l)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[l-1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)=\int\overline{R}^{(l)}_{\square,1}+\int\overline{R}^{(l)}_{\square,2}+\cdots.$$

将这些发散的积分正规化，则可把 (t^{Σ}) 等理解为对于这些积分的运算，于是 $\Delta\mathcal{H}_{I,l}(x)$ 对于 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(l)}_{[l]}(p)$ 等的贡献可表示为

$$(-t^{\Sigma})\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(l)}_{[l-1]}(p)\},$$

$$(-t^{\Pi})\{\mathrm{i}e^2\Pi^{(l)\rho\lambda}_{[l-1]}(k)\},$$

$$(-t^{\Lambda})\{-\mathrm{i}e\Lambda^{(l)\mu}_{[l-1]}(p_1,p_2)\},$$

$$(-t^{\square})\{\square^{(l)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[l-1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)\}.$$

由此以及 $\Delta\mathcal{H}_{I,l}$ 的表达式知道

$$(-t^{\Sigma})\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(l)}_{[l-1]}(p)\}=\mathrm{i}\,b_l\,(\not{p}-m)+\mathrm{i}\,\delta_l,$$

$$(-t^{\Pi})\{\mathrm{i}e^2\Pi^{(l)\rho\lambda}_{[l-1]}(k)\}=\mathrm{i}\,f_l\,(k^{\rho}k^{\lambda}-k^2\,g^{\rho\lambda}),$$

$$(-t^{\Lambda})\{-\mathrm{i}e\Lambda^{(l)\mu}_{[l-1]}(p_1,p_2)\}=-\mathrm{i}e\,c_l\gamma^{\mu},$$

$$(-t^{\square})\{\square^{(l)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[l-1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)\}=0.$$

由于 W-T 恒等式逐级成立 (与 $\Delta\mathcal{L}_l$ 的规范不变性相适应)，故

$$b_l=c_l,$$

$$c_l\gamma^\mu = -\left(\Lambda^{(l)\mu}_{[l-1]}(p,p)\right)_{\not p=m},$$

$$\delta_l = \left\{\Sigma^{(l)}_{[l-1]}(p)\right\}_{\not p=m},$$

$$f_l = -e^2\Pi^{(l)}_{[l-1]}(0).$$

在进一步借助 $n+1$ 圈级抵消项 $\Delta\mathcal{H}_{I,n+1}(x)$ 完成了 $n+1$ 圈 R 减除后，准到这一级时有

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_R(p) \approx \sum_{l=1}^{n+1}(-\mathrm{i}\,)\Sigma^{(l)}_{[l]}(p),$$

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{\rho\lambda}_R(k) \approx \sum_{l=1}^{n+1}\mathrm{i}e^2\Pi^{(l)\rho\lambda}_{[l]}(k),$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda^\mu_R(p_1,p_2) \approx \sum_{l=1}^{n+1}(-\mathrm{i}e)\Lambda^{(l)\mu}_{[l]}(p_1,p_2),$$

$$\square^{\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_R(k_1,k_2,k_3,k_4) \approx \sum_{l=1}^{n}\square^{(l)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[l]}(k_1,k_2,k_3,k_4).$$

而

$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(n+1)}_{[n+1]}(p) = \int(1-t^\Sigma)\overline{R}^{(n+1)}_{\Sigma,1} + \int(1-t^\Sigma)\overline{R}^{(n+1)}_{\Sigma,2} + \cdots,$$

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(n+1)\rho\lambda}_{[n+1]}(k) = \int(1-t^\Pi)\overline{R}^{(n+1)}_{\Pi,1} + \int(1-t^\Pi)\overline{R}^{(n+1)}_{\Pi,2} + \cdots,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda^{(n+1)\mu}_{[n+1]}(p_1,p_2)$$
$$= \int(1-t^\Lambda)\overline{R}^{(n+1)}_{\Lambda,1} + \int(1-t^\Lambda)\overline{R}^{(n+1)}_{\Lambda,2} + \cdots,$$

$$\square^{(n+1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}_{[n+1]}(k_1,k_2,k_3,k_4)$$
$$= \int(1-t^\square)\overline{R}^{(n+1)}_{\square,1} + \int(1-t^\square)\overline{R}^{(n+1)}_{\square,2} + \cdots,$$

当只计及一圈至 n 圈级抵消项而不计 $\Delta\mathcal{H}_{I,n+1}(x)$ 的贡献时，这些量即是

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_{[n]}^{(n+1)}(p)=\int\overline{R}_{\Sigma,1}^{(n+1)}+\int\overline{R}_{\Sigma,2}^{(n+1)}+\cdots,$$

$$\mathrm{i}e^2\Pi_{[n]}^{(n+1)\rho\lambda}(k)=\int\overline{R}_{\Pi,1}^{(n+1)}+\int\overline{R}_{\Pi,2}^{(n+1)}+\cdots,$$

$$-\mathrm{i}e\Lambda_{[n]}^{(n+1)\mu}(p_1,p_2)=\int\overline{R}_{\Lambda,1}^{(n+1)}+\int\overline{R}_{\Lambda,2}^{(n+1)}+\cdots,$$

$$\square_{[n]}^{(n+1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)=\int\overline{R}_{\square,1}^{(n+1)}+\int\overline{R}_{\square,2}^{(n+1)}+\cdots.$$

把这些发散的积分正规化后，可将 $\Delta\mathcal{H}_{I,n+1}(x)$ 对于 $-\mathrm{i}\,\Sigma_{[l]}^{(l)}(p)$ 等的贡献表示为

$$(-t^{\Sigma})\{-\mathrm{i}\,\Sigma_{[l-1]}^{(l)}(p)\},$$

$$(-t^{\Pi})\{\mathrm{i}e^2\Pi_{[l-1]}^{(l)\rho\lambda}(k)\},$$

$$(-t^{\Lambda})\{-\mathrm{i}e\Lambda_{[l-1]}^{(l)\mu}(p_1,p_2)\},$$

$$(-t^{\square})\{\square_{[l-1]}^{(l)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)\},$$

其中 $(t^{\Sigma}),\cdots$ 理解为对于 $\{-\mathrm{i}\,\Sigma_{[n]}^{(n+1)}(p)\},\cdots$ 的运算. 因为拉氏函数中的一圈级至 n 圈级抵消项是规范不变的，可以约定正规化方法保持 $\Sigma_{[n]}^{(n+1)}(p)$ 等满足

$$\frac{\partial}{p_\mu}\Sigma_{[n]}^{(n+1)}(p)=-\Lambda_{[n]}^{(n+1)\mu}(p,p),\tag{187}$$

$$k_\rho\Pi_{[n]}^{(n+1)\rho\lambda}(k)=0,\tag{188}$$

$$k_{\nu_1}\square_{[n]}^{(n+1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)=0,\tag{189}$$

$(-t^{\Sigma})\{-\mathrm{i}\,\Sigma_{[n]}^{(n+1)}(p)\}$ 和 $(-t^{\Lambda})\{-\mathrm{i}e\Lambda_{[n]}^{(n+1)\mu}(p_1,p_2)\}$ 分别是

$$(-t^{\Sigma})\{-\mathrm{i}\,\Sigma_{[n]}^{(n+1)}(p)\}$$

$$=\{\mathrm{i}\,\Sigma_{[n]}^{(n+1)}(p)\}_{\not p=m}+\mathrm{i}(\not p-m)\Big(\frac{\partial}{\partial\not p}\Sigma_{[n]}^{(n+1)}(p)\Big)_{\not p=m},$$

$$(-t^{\Lambda})\{-\mathrm{i}e\Lambda^{(n+1)\mu}_{[n]}(p_1,p_2)\}=\mathrm{i}e\Big(\Lambda^{(n+1)\mu}_{[n]}(p,p)\Big)_{\not p=m}.$$

可见它们来自 $\Delta\mathcal{H}_{I,n+1}(x)$ 中的

$$-b_{n+1}:\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m)\psi(x):-\delta_{n+1}:\overline{\psi}(x)\psi(x):$$
$$+e\,c_{n+1}:\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x)A_{\mu}(x):,$$

其中 b_{n+1},δ_{n+1} 和 c_{n+1} 是 $n+1$ 圈级常数. 这种抵消项的顶点为:

$$\mathrm{i}\,b_{n+1}(\not p-m),\quad \mathrm{i}\,\delta_{n+1},\quad -\mathrm{i}e\,c_{n+1}\gamma^{\mu}.$$

故

$$\mathrm{i}\,b_{n+1}(\not p-m)+\mathrm{i}\,\delta_{n+1}=(-t^{\Sigma})\{-\mathrm{i}\,\Sigma^{(n+1)}_{[n]}(p)\},$$
$$-\mathrm{i}e\,c_{n+1}\gamma^{\mu}=(-t^{\Lambda})\{-\mathrm{i}e\Lambda^{(n+1)\mu}_{[n]}(p_1,p_2)\}.$$

即

$$b_{n+1}\gamma^{\mu}=\Big(\frac{\partial}{p_{\mu}}\Sigma^{(n+1)}_{[n]}(p)\Big)_{\not p=m},$$
$$c_{n+1}\gamma^{\mu}=-\Big(\Lambda^{(n+1)\mu}_{[n]}(p,p)\Big)_{\not p=m},$$
$$\delta_{n+1}=\big\{\Sigma^{(n+1)}_{[n]}(p)\big\}_{\not p=m}.$$

由此及 (187) 式有

$$c_{n+1}=b_{n+1},$$

以及

$$\frac{\partial}{p_{\mu}}\Sigma^{(n+1)}_{[n+1]}(p)=-\Lambda^{(n+1)\mu}_{[n+1]}(p,p).$$

由 (188),(189) 式有

$$\Pi^{(n+1)\rho\lambda}_{[n]}(k)=\Pi^{(n+1)}_{[n]}(k)\big(k^{\rho}k^{\lambda}-k^2g^{\rho\lambda}\big),$$
$$(-t^{\Pi})\{\mathrm{i}e^2\Pi^{(n+1)\rho\lambda}_{[n]}(k)\}=-\mathrm{i}e^2\Pi^{(n+1)}_{[n]}(0)\big(k^{\rho}k^{\lambda}-k^2g^{\rho\lambda}\big),$$

以及

$$\square_{[n]}^{(n+1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(0,0,0,0)=0\,,$$

$$(-t^{\square})\{\square_{[n}^{(n+1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}(k_1,k_2,k_3,k_4)\}=0\,.$$

可见 $\Pi_{[n+1](k)}^{(n+1)\rho\lambda}$ 与 $\square_{[n+1]}^{(n+1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}$ 也是横向的. $\Delta\mathcal{H}_{I,n+1}$ 不含 A_μ 的四次项, $\square_{[n+1]}^{(n+1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}$ 等于 $\square_{[n]}^{(n+1)\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}$, 而

$$(-t^{\Pi})\{\mathrm{i}e^2\Pi_{[n]}^{(n+1)\rho\lambda}(k)\}$$

来自 $\Delta\mathcal{H}_{I,n+1}(x)$ 中如下的成分:

$$\frac{1}{4}f_{n+1}:F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x):,$$

其中 f_{n+1} 是 $n+1$ 圈级常数. 这种抵消项的顶点为:

$$\mathrm{i}\,f_{n+1}\,(k^\rho k^\lambda-k^2\,g^{\rho\lambda})\,,$$

故

$$f_{n+1}=-e^2\Pi_{[n]}^{(n+1)}(0)\,.$$

由于这种结果在一圈级以及二圈级情形是正确的, 归纳法论证至此已经完成. 这样就证明了, 能够借助从原始拉氏函数分解出来的而且是规范不变的抵消项 $\Delta\mathcal{L}_n$ 完成至任意圈的 R 减除, 从而消除重整化格林函数的紫外发散以及保证理论在重整化后仍然具有规范理论的结构. 当 n 趋于无穷大时, 总的抵消项为

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{H}_I(x)=&-\big(Z_2-1\big):\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi(x):\\&-Z_2:\delta m\,\overline{\psi}(x)\psi(x):+\big(Z_1-1\big)\,e:\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\,A_\mu(x):\\&+\big(Z_3-1\big)\frac{1}{4}:F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}:,\end{aligned}\tag{190}$$

亦即

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{L}=&\big(Z_2-1\big)\,\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi(x)\\&+Z_2\,\delta m\,\overline{\psi}(x)\psi(x)-\big(Z_1-1\big)\,e\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\,A_\mu(x)\\&-\big(Z_3-1\big)\frac{1}{4}\,F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\,,\end{aligned}\tag{191}$$

其中

$$Z_1 - 1 = c_1 + c_2 + c_3 + \cdots , \tag{192}$$

$$Z_2 - 1 = b_1 + b_2 + b_3 + \cdots , \tag{193}$$

$$Z_2\,\delta m \ = \delta_1 + \delta_2 + \delta_3 + \cdots , \tag{194}$$

$$Z_3 - 1 = f_1 + f_2 + f_3 + \cdots , \tag{195}$$

$$Z_1 = Z_2 . \tag{196}$$

再提醒一下，$\Delta\mathcal{H}_I$ 中的 $:\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x):$ 代表其厄米形式.

下面扼要说明在质壳上减除的重整化方案的含义和实施步骤. 这种方案要求，$\mathrm{i}e^2\Pi_R^{\rho\lambda}(k)$ 和准至任一级别的重整化完全传播函数以及完全的电子光子三点顶角函数在外动量趋于质壳值时都符合如下的归一条件：

$$\mathrm{i}\,\overline{S}(p)\big|_{\not{p}\to m} = \frac{\mathrm{i}}{\not{p} - m + \mathrm{i}\epsilon} , \tag{197}$$

$$\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu\nu}(k)\big|_{k\to 0} = \frac{1}{k^2 - \Delta^2 + \mathrm{i}\epsilon} \times\Big\{ - g_{\mu\nu} + (1-\xi)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2 - \xi\Delta^2 + \mathrm{i}\epsilon}\Big\} , \tag{198}$$

$$-\mathrm{i}e\Gamma^\mu(p,p)\big|_{\not{p}\to m} = -\mathrm{i}e\gamma^\mu . \tag{199}$$

这称为在质壳上减除的重整化的归一条件，Δ 是假想的光子质量. 引入假想的光子质量是将红外发散正规化的方法之一 (见后面), 这等于假想 H_0 含有质量项 $-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\Delta^2\, A^\mu(\boldsymbol{x})A_\mu(\boldsymbol{x})$, 当没有必要保留 Δ 时就认为它等于零. 另外，在采用所谓维数正规化方法时，除了将紫外发散正规化之外，也会将红外发散正规化 (不求助于光子的假想的质量). 这种归一条件表示当 $\not{p} \to m$ 而 $k \to 0$ 时，$\mathrm{i}\overline{S}(p)$ 和 $\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(k)$ 的行为与自由场的情形一样，$-\mathrm{i}e\Gamma^\mu(p,p)$ 等于微扰展开最低级的结果. 这与如下的解释相符：参量 m 代表电子的物理质量，光子没有质量，参量 e 是电子电荷的实验值.

以上依据 Bogoliubov-Parasiuk 定理的论证表明，在质壳上减除的重整化可以按照如下的步骤进行：

(1) 不要抵消项而计算 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p), \mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k), -\mathrm{i}e\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2)$，将其正规化并且保证它们满足 W-T 恒等式. 再将这些量在外电子线动量的 $\not{p}=m$ 和外光子线动量的 $k=0$ 处作 R 减除，亦即减去它们的泰勒展开的 D 次微商项及其前面的项，即得到 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[1]}(p), \mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[1]}(k)$ 和 $-\mathrm{i}e\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)$. 被舍弃的部分正好可以用来决定一圈级抵消项. 按照下式定义 $\Pi^{(1)}_{[0]}(k)$：

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)=(k^\rho k^\lambda-g^{\rho\lambda})\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)}_{[0]}(k),$$

则一圈级抵消项的形式如 (182) 式或者相应的 $\Delta\mathcal{L}_1$ 所示， W-T 恒等式在准至一圈级时仍然成立.

(2) 在考虑一圈级抵消项而不要更高级抵消项的情况下计算二圈级的量 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[1]}(p)$, $\mathrm{i}e^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[1]}(k)$ 和 $-\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[1]}(p_1,p_2)$, 将其正规化并且保证它们满足 W-T 恒等式. 再将这些量在外电子线动量的 $\not{p}=m$ 和外光子线动量的 $k=0$ 处作 R 减除，即减去它们的泰勒展开的 D 次微商项及其前面的项，即得到 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(2)}_{[2]}(p), \mathrm{i}e^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[2]}(k)$ 和 $-\mathrm{i}e\Lambda^{(2)\mu}_{[2]}(p_1,p_2)$. 被舍弃的部分正好可以用来决定二圈级抵消项. 按照下式定义 $\Pi^{(2)}_{[1]}(k)$：

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(2)\rho\lambda}_{[1]}(k)=(k^\rho k^\lambda-g^{\rho\lambda})\mathrm{i}e^2\Pi^{(2)}_{[1]}(k),$$

则二圈级抵消项的形式见 $\Delta\mathcal{H}_{I,2}$ 或者相应的 $\Delta\mathcal{L}_2$, W-T 恒等式在准至二圈级时仍然成立.

(3) 照这样逐圈地进行下去，可以完成对于 $-\mathrm{i}\,\Sigma(p), \mathrm{i}e^2\Pi^{\rho\lambda}(k)$ 和 $-\mathrm{i}e\Lambda^{\mu}(p_1,p_2)$ 的直至任意圈的减除以及确定各级抵消项. 上面的归一条件显然会被满足. 现将 n 圈级抵消项重抄如下：

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{H}_{I,n}(x)=&-b_n:\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi(x):-\delta_n:\overline{\psi}(x)\psi(x):\\&+e\,c_n:\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x):+\frac{1}{4}f_n:F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x):,\end{aligned}$$

$$\Delta\mathcal{L}_n(x) = b_n\,\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) + \delta_n\,\overline{\psi}(x)\psi(x)$$
$$- e\,c_n\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x) - \frac{1}{4}f_n\,F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)\,,$$

其中

$$b_n = c_n\,,$$
$$c_n\gamma^\mu = -\left(\Lambda^{(n)\mu}_{[n-1]}(p,p)\right)_{\not p=m}\,,$$
$$\delta_n = \left\{\Sigma^{(n)}_{[n-1]}(p)\right\}_{\not p=m}\,,$$
$$f_n = -\mathrm{i}e^2\Pi^{(n)}_{[n-1]}(0)\,,$$

而 $\Pi^{(n)}_{[n-1]}(k)$ 按照下式定义：

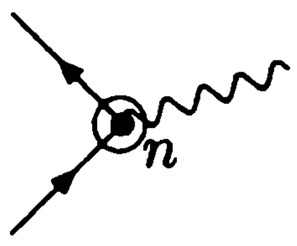
$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(n)\rho\lambda}_{[n-1]}(k) = (k^\rho k^\lambda - g^{\rho\lambda})\mathrm{i}e^2\Pi^{(n)}_{[n-1]}(k)\,.$$

W-T 恒等式在准至 n 圈级时保持成立. 可以注意一下，$\Pi^{(n)}_{[n-1]}(k)$ 是通过 k^2 而依赖 k 的，所以 $\Pi^{(n)}_{[n-1]}(0)$ 与 $\left\{\Pi^{(n)}_{[n-1]}(k)\right\}_{k^2=0}$ 没有差别. 借助这样确定的一圈至 n 圈级抵消项和与之配合的正规化方法去计算各种重整化格林函数，准至 n 级时不含紫外发散.

关于在实现质壳上减除的重整化的基础上定义散射过程的初末态和构造散射矩阵的方法，见 §8. 可以采用其他方案进行格林函数的重整化，但是重整化参量的含义有所不同. 理论的物理内容当然不能受重整化方案的影响，与此相关的重整化群的概念以后也会提到.

习题 求 n 圈级抵消项的顶点.

解 n 圈级抵消项的 c_n 部分与原来的耦合项相似，所以它的顶点的表达式是



$$= \quad -\mathrm{i}e\,c_n\gamma^\mu\,.$$

(在这种图形表示中不计外腿的贡献.) 其他的抵消项具有 $\overline{\psi}\psi$, $\overline{\psi}\partial\psi$,$(\partial\overline{\psi})\psi$,$(\partial A)(\partial A)$ 的形式, 因此根据传播函数中线性地依赖于这些抵消项的部分, 可看出它们的顶点的表达式. 例如, 用算符方法计算, 由

$$\mathrm{i}\,\overline{S}_{\alpha\beta}(x-y) \approx \mathrm{i}\,S_{\alpha\beta}(x-y) + \langle 0|T\{\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\beta(y)\int \mathrm{d}^4z(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(z)\}|0\rangle + \cdots,$$

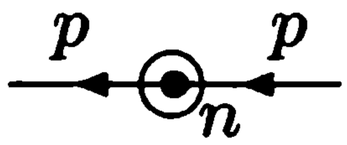
$$\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu\nu}(x-y) \approx \mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(x-y) + \langle 0|T\{A_\mu(x)A_\nu(y)\int \mathrm{d}^4z(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(z)\}|0\rangle + \cdots,$$

得

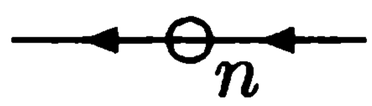
$$\mathrm{i}\,\overline{S}(p) \approx \mathrm{i}\,S(p) + \mathrm{i}\,S(p)\{\mathrm{i}(Z_2-1)(\not{p}-m) + \mathrm{i}Z_2\,\delta m\}\mathrm{i}\,S(p) + \cdots,$$

$$\mathrm{i}\,\overline{D}_{\mu\nu}(k) \approx \mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(k) + \mathrm{i}\,D_{\mu\rho}(k)\{\mathrm{i}(Z_3-1)(k^\rho k^\lambda - k^2\,g^{\rho\lambda})\}\mathrm{i}\,D_{\lambda\nu}(k) + \cdots,$$

所以, 所求的顶点是



$$= \mathrm{i}b_n(\not{p}-m),$$



$$= \mathrm{i}\delta_n,$$



$$= \mathrm{i}f_n(k^\rho k^\lambda - k^2\,g^{\rho\lambda}).$$

§7 Pauli-Villars 正规化和维数正规化

7.1 Pauli-Villars 正规化方法. 单圈重整化常数

所谓正规化, 即是将发散的 Feynman 积分定义成有限表达式的极限, 而将这种有限的表达式看成该发散积分的正规化形式,

以便于进行减除运算. 在完成减除和取极限的手续之后，用来进行正规化的参量也就消失了. 为了实际的方便，通常希望正规化方法尽可能顾及理论原有的对称性，Pauli-Villars 正规化方法 [11] 能够保持量子电动力学的 Ward-Takahashi 恒等式真正成立，它也是量子电动力学中采用的传统方法. 这一方法包含两项独立的内容，即电子闭合圈的正规化以及光子传播函数的替换. 例如电子圈

$$\int \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\,\mathrm{tr}\left(\frac{1}{\not p-m+\mathrm{i}\epsilon}\gamma^{\mu_1}\frac{1}{\not p-\not q_1-m+\mathrm{i}\epsilon}\cdots\gamma^{\mu_{2n}}\right),$$

被换成相当于最小耦合到电磁流的质量为 M_s 若干种旋量场的贡献之和

$$I=\sum_{s=0}^{S}C_s\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\,\mathrm{tr}\left(\frac{1}{\not p-M_s+\mathrm{i}\epsilon}\gamma^{\mu_1}\frac{1}{\not p-\not q_1-M_s+\mathrm{i}\epsilon}\cdots\gamma^{\mu_{2n}}\right),$$

其中 $q_1,q_2,\cdots$ 是进入圈图的动量，$s=0$ 代表原来的项，因此 $C_0=1, M_0=m$, 而 $M_1,M_2,\cdots$ 是一些辅助质量，约定它们和 C_s 满足

$$\sum_{s=0}^{S}C_s=0,\quad \sum_{s=0}^{S}C_sM_s^2=0.$$

这样就能够使得 I 不含紫外发散，而附加的项会随辅助质量趋于无穷大而消失. 关于 C_s 和 M_s 的条件实际上可以用归结为一个截断参量 $\overline{\Lambda}$ 的两个辅助质量来实现，例如：

$$M_1^2=m^2+4\overline{\Lambda}^2,\quad M_2^2=m^2+2\overline{\Lambda}^2,$$

$$C_1=1,\quad C_2=-2.$$

当 $\overline{\Lambda}^2$ 充分大时，I 就是原来的表达式的正规化形式. 在完成减除后，最终当然令 $\overline{\Lambda}^2$ 趋于无穷大.

光子自由传播函数

$$\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(k,\Delta)=\frac{-\mathrm{i}}{k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}\left\{g_{\mu\nu}+(\xi-1)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}\right\},$$

则被换为：

$$\begin{aligned}
&\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(k,\Delta)-\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(k,\Lambda_1)\\
&\quad=\frac{-\mathrm{i}}{k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}\left\{g_{\mu\nu}+(\xi-1)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}\right\}\\
&\qquad+\frac{\mathrm{i}}{k^2-\Lambda_1^2+\mathrm{i}\epsilon}\left\{g_{\mu\nu}+(\xi-1)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2-\xi\Lambda_1^2+\mathrm{i}\epsilon}\right\}.
\end{aligned}$$

其中光子的假想质量用于红外发散的正规化，在不需要时就令其趋于 0^+，Λ_1 是最终趋于无穷大的辅助质量．以上方案也可以用一种所谓正规化的拉氏函数来陈述，例如见文献 [6].

于是 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$,$\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)$ 和 $\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2)$ 的正规化形式可以写成

$$\begin{aligned}
-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)&=\frac{e^2}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}^4k\frac{\gamma^\mu(\not{p}-\not{k}+m)\gamma^\nu}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]}\\
&\quad\times\left\{D_{\mu\nu}(k,\Delta)-D_{\mu\nu}(k,\Lambda_1)\right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)&=-\frac{e^2}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}^4p\\
&\quad\times\mathrm{tr}\left\{\frac{\gamma^\rho(\not{p}+\not{k}+m)\gamma^\lambda}{[(p+k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]}\frac{(\not{p}+m)}{(p^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon)}\right\}\\
&\quad-\frac{e^2}{(2\pi)^4}\sum_{s=1}^{S}C_s\int \mathrm{d}^4p\\
&\quad\times\mathrm{tr}\left\{\frac{\gamma^\rho(\not{p}+\not{k}+M_s)\gamma^\lambda}{[(p+k)^2-M_s^2+\mathrm{i}\epsilon]}\frac{(\not{p}+M_s)}{(p^2-M_s^2+\mathrm{i}\epsilon)}\right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2)&=\frac{e^2}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}^4l\frac{\gamma^\sigma(\not{p}_1-\not{l}+m)\gamma^\mu}{[(p_1-l)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]}\\
&\quad\times\frac{(\not{p}_2-\not{l}+m)\gamma^\lambda}{[(p_2-l)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]}\left\{D_{\sigma\lambda}(l,\Delta)-D_{\sigma\lambda}(l,\Lambda_1)\right\}.
\end{aligned}$$

按照以前的约定，这些量的上指标 (1) 表示准至一圈级，下指标 [0] 表示未计及抵消项的贡献．下面以 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$,$\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)$ 为例进

行一些练习性的演算，并求出在这种正规化方法下的单圈重整化常数. 由 $\gamma^\mu \not{p} \gamma_\mu = -2\not{p}$ 和 $\not{k}\not{p}\not{k} = 2kp\not{k} - \not{p}k^2$, 可将 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$ 表示为

$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p) = -\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p) - \mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(\xi,p)\,, \tag{200}$$

其中 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)$ 代表 $\xi = 1$ 的部分，$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(\xi,p)$ 是含有因子 $(1-\xi)$ 的部分，而

$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p) = \frac{e^2}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}^4k \frac{2(\not{p}-\not{k}) - 4m}{[(p-k)^2 - m^2 + \mathrm{i}\epsilon](k^2 - \Delta^2 + \mathrm{i}\epsilon)} - \{\Delta \to \Lambda_1\}\,, \tag{201}$$

$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(\xi,p) = (1-\xi)\frac{e^2}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}^4k \frac{2pk\not{k} + (m - \not{p} - \not{k})k^2}{[(p-k)^2 - m^2 + \mathrm{i}\epsilon]} \times \frac{1}{(k^2 - \Delta^2 + \mathrm{i}\epsilon)(k^2 - \xi\Delta^2 + \mathrm{i}\epsilon)} - \{\Delta \to \Lambda_1\}\,, \tag{202}$$

将 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)$ 中的分母表示为积分

$$\frac{\mathrm{i}}{[(p-k)^2 - m^2 + \mathrm{i}\epsilon]} = \int_0^\infty \mathrm{d}\alpha_1 \exp\left\{\mathrm{i}\alpha_1[(p-k)^2 - m^2 + \mathrm{i}\epsilon]\right\},$$
$$\frac{\mathrm{i}}{(k^2 - \Delta^2 + \mathrm{i}\epsilon)} = \int_0^\infty \mathrm{d}\alpha_2 \exp\left\{\mathrm{i}\alpha_2[k^2 - \Delta^2 + \mathrm{i}\epsilon]\right\},$$

可得

$$\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p) \\
&= -\frac{e^2}{(2\pi)^4}\int_0^\infty\int_0^\infty \mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2 \int \mathrm{d}^4k (2\not{p} - 4m - 2\not{k}) \\
&\quad \times \exp\left\{\mathrm{i}\alpha_1[(p-k)^2 - m^2 + \mathrm{i}\epsilon] + \mathrm{i}\alpha_2[k^2 - \Delta^2 + \mathrm{i}\epsilon]\right\} \\
&\quad - \left\{\Delta^2 \to \Lambda_1^2\right\},
\end{aligned}$$

再引用辅助的四分量矢量 z, 以便通过对它的分量的微商表示出 $\not{k}$, 可将此式写成

$$
\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)\\
&\quad=-\frac{e^2}{(2\pi)^4}\int_0^\infty\int_0^\infty \mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2\int \mathrm{d}^4k\Big(2\not{p}-4m+2\gamma^\mu \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial z^\mu}\Big)\\
&\qquad\times\exp\left\{\mathrm{i}\alpha_1[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]+\mathrm{i}\alpha_2[k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon]+\mathrm{i}kz\right\}\Big|_{z=0}\\
&\qquad-\{\Delta\to\Lambda_1\},
\end{aligned}
$$

完成对 k 的积分，注意

$$
\int \mathrm{d}^4k\exp\left\{\mathrm{i}(\alpha_1+\alpha_2)k^2\right\}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4}\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\}^3\Big(\frac{\pi}{\alpha_1+\alpha_2}\Big)^2,
$$

得到

$$
\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)\\
&\quad=-\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\int_0^\infty\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2}{(\alpha_1+\alpha_2)^2}(2m-\frac{\alpha_2}{\alpha_1+\alpha_2}\not{p})\\
&\qquad\times\Big[\exp\left\{\mathrm{i}\frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1+\alpha_2}p^2-\mathrm{i}\alpha_1m^2-\mathrm{i}\alpha_2\Delta^2-\epsilon(\alpha_1+\alpha_2)\right\}\\
&\qquad-\exp\left\{\mathrm{i}\frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1+\alpha_2}p^2-\mathrm{i}\alpha_1m^2-\mathrm{i}\alpha_2\Lambda_1^2-\epsilon(\alpha_1+\alpha_2)\right\}\Big],
\end{aligned}
$$

在被积函数中引入因子 $1=\int_0^\infty \mathrm{d}y\delta(y-\alpha_1-\alpha_2)$, 再将 α_1, α_2 换成 $x_1=\alpha_1/y$ 和 $x_2=\alpha_2/y$ 可将此式改写成

$$
\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)\\
&\quad=-\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\int_0^1\mathrm{d}x_1\int_0^1\mathrm{d}x_2\delta(1-x_1-x_2)(2m-x_2\not{p})\\
&\qquad\times\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}y}{y}\Big[\exp\left\{\mathrm{i}y(x_1x_2p^2-x_1m^2-x_2\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)\right\}\\
&\qquad-\exp\left\{\mathrm{i}y(x_1x_2p^2-x_1m^2-x_2\Lambda_1^2+\mathrm{i}\epsilon)\right\}\Big],
\end{aligned}
$$

在其中代入

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}y}{y}\Big[\exp\left\{\mathrm{i}y(z_1+\mathrm{i}\epsilon)\right\}-\exp\left\{\mathrm{i}y(z_2+\mathrm{i}\epsilon)\right\}=\ln\frac{z_2}{z_1}\,,$$

得到

$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)=-\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}x[2m+(x-1)\not{p}]$$
$$\times\ln\left(\frac{(1-x)\Lambda_1^2+x^2p^2+x(m^2-p^2)}{(1-x)\Delta^2+x^2p^2+x(m^2-p^2)}\right).$$

当 Λ_1 充分大时变成

$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)=-\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}x[2m+(x-1)\not{p}]$$
$$\times\ln\left(\frac{(1-x)\Lambda_1^2}{(1-x)\Delta^2+x^2p^2+x(m^2-p^2)}\right).$$

在质壳减除方案下，这个量被减去的首项是

$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)\big|_{\not{p}=m}$$
$$=-\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}x(1+x)m\,\ln\left(\frac{(1-x)\Lambda_1^2}{(1-x)\Delta^2+x^2m^2}\right).$$

其中不含红外发散，Δ 无须保留，令它为零即得

$$-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)\big|_{\not{p}=m}=-\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\left(\frac{3m}{2}\right)\left(\ln\frac{\Lambda_1^2}{m^2}+\frac{1}{2}\right). \tag{203}$$

应该被减去的下一项是 $(\not{p}-m)$ 与 $-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\not{p}}\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)\big|_{\not{p}=m}$ 的积，而

$$-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\not{p}}\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)$$
$$=\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}x\,(1-x)\,\ln\left(\frac{(1-x)\Lambda_1^2}{(1-x)\Delta^2+x^2p^2+x(m^2-p^2)}\right)$$
$$-\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}x\left(\frac{2x(1-x)\not{p}[2m+(x-1)\not{p}]}{(1-x)\Delta^2+x^2p^2+x(m^2-p^2)}\right).$$

由此得

$$
\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \not{p}}\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)\big|_{\not{p}=m} \\
&\quad=\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}x\,(1-x)\,\ln\Big(\frac{(1-x)\Lambda_1^2}{(1-x)\Delta^2+x^2m^2}\Big) \\
&\qquad-\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}x\Big(\frac{2x(1-x)(1+x)m^2}{(1-x)\Delta^2+x^2m^2}\Big)\,.
\end{aligned}
$$

其中第一项只含紫外发散，第二项只含红外发散，它们分别等于

$$
\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\Big(\frac{1}{2}\ln\frac{\Lambda_1^2}{m^2}+\frac{5}{4}\Big),\qquad \frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\Big(\ln\frac{\Delta^2}{m^2}+1\Big),
$$

故

$$
-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \not{p}}\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)\big|_{\not{p}=m}=\frac{\mathrm{i}e^2}{8\pi^2}\Big(\frac{1}{2}\ln\frac{\Lambda_1^2}{m^2}+\ln\frac{\Delta^2}{m^2}+\frac{9}{4}\Big)\,. \tag{204}
$$

在 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(\xi,p)$ 的表达式 (202) 中，利用

$$
\frac{2pk\not{k}+(m-\not{p}-\not{k})k^2}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]}=\frac{(p^2-m^2)\not{k}-(\not{p}-m)k^2}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]}-\not{k}\,,
$$

抛弃对 k 的积分没有贡献的末项得

$$
\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(\xi,p) \\
&\quad=-(1-\xi)\frac{e^2}{(2\pi)^4}(\not{p}-m)\int \mathrm{d}^4k\frac{k^2}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]} \\
&\qquad\times\frac{1}{(k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)(k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)}-\{\Delta^2\to\Lambda_1^2\} \\
&\qquad+(1-\xi)\frac{e^2}{(2\pi)^4}(p^2-m^2)\int \mathrm{d}^4k\frac{\not{k}}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]} \\
&\qquad\times\frac{1}{(k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)(k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)}\,,
\end{aligned}
$$

其中后一部分只含红外发散，相应的 Δ^2 项不起作用．对此式被积函数中的因子作如下的改写：

$$\begin{aligned}
&\frac{k^2}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)(k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)} \\
&\quad=\frac{1}{1-\xi}\frac{1}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)} \\
&\quad\quad-\frac{\xi}{1-\xi}\frac{1}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)},
\end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)(k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)} \\
&\quad=\frac{1}{(1-\xi)\Delta^2}\frac{1}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)} \\
&\quad\quad-\frac{1}{(1-\xi)\Delta^2}\frac{1}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)}.
\end{aligned}$$

利用参量 α_1,α_2 改写其中的分母，经过和前面相似的处置可得

$$\begin{aligned}
&\int \mathrm{d}^4k\frac{k^2}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)(k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)} \\
&\qquad-\{\Delta^2\to\Lambda_1^2\} \\
&\quad=\frac{1}{1-\xi}\mathrm{i}\pi^2\int_0^1\mathrm{d}x\ \ln\left[\frac{(1-x)\Lambda_1^2}{(1-x)\Delta^2+x^2p^2+x(m^2-p^2)}\right] \\
&\quad\quad-\frac{\xi}{1-\xi}\mathrm{i}\pi^2\int_0^1\mathrm{d}x\ \ln\left[\frac{(1-x)\xi\Lambda_1^2}{(1-x)\xi\Delta^2+x^2p^2+x(m^2-p^2)}\right],
\end{aligned}$$

和

$$\begin{aligned}
&\int \mathrm{d}^4k\frac{\not{k}}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)(k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)} \\
&\quad=\frac{\mathrm{i}\pi^2\not{p}}{(1-\xi)\Delta^2}\int_0^1\mathrm{d}x\,(1-x) \\
&\qquad\times\ln\left[\frac{(1-x)\xi\Delta^2+x^2p^2+x(m^2-p^2)}{(1-x)\Delta^2+x^2p^2+x(m^2-p^2)}\right].
\end{aligned}$$

这两个等式的右边对于 ξ 的依赖关系当然是来源于未正规化的表达式对于 Δ^2 与 $\xi\Delta^2$ 互换的不变性 ($1/(1-\xi), \xi/(1-\xi)$ 代表 $\Delta^2/(\Delta^2-\xi\Delta^2), \xi\Delta^2/(\Delta^2-\xi\Delta^2)$), 这也使附加的 Λ_1^2 部分对于 Λ_1^2 与 $\xi\Lambda_1^2$ 互换保持不变 (其中的 $1/(1-\xi), \xi/(1-\xi)$ 代表 $\Lambda_1^2/(\Lambda_1^2-\xi\Lambda_1^2)$, $\xi\Lambda_1^2/(\Lambda_1^2-\xi\Lambda_1^2)$). 另外, 第二个等式右边的因子 $1/\{(1-\xi)\Delta^2\}$ 可以经过分部积分消去.

$-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(\xi,p)$ 在质壳上等于零, 至于 $-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \not{p}}\Sigma_{[0]}^{(1)}(\xi,p)\big|_{\not{p}=m}$, 来自上述两部分的贡献分别是

$$-(1-\xi)\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}\left\{\frac{1}{1-\xi}\ln\frac{\Lambda_1^2}{m^2}-\frac{\xi}{1-\xi}\ln\frac{\xi\Lambda_1^2}{m^2}+1\right\},$$

$$(1-\xi)\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}\left\{\frac{1}{2}\ln\frac{\Delta^2}{m^2}+\frac{1}{2}\ln\frac{\xi\Delta^2}{m^2}+1\right\},$$

即

$$-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \not{p}}\Sigma_{[0]}^{(1)}(\xi,p)\big|_{\not{p}=m}=\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}\left\{\xi\ln\frac{\xi\Lambda_1^2}{m^2}-\ln\frac{\Lambda_1^2}{m^2}\right\}$$
$$+(1-\xi)\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}\left\{\frac{1}{2}\ln\frac{\Delta^2}{m^2}+\frac{1}{2}\ln\frac{\xi\Delta^2}{m^2}\right\}. \tag{205}$$

$\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)$ 的正规化表达式可以写成

$$\begin{aligned}
&\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)\\
&=\frac{4e^2}{(2\pi)^4}\int_0^\infty\int_0^\infty \mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2\int\mathrm{d}^4p\left\{p^\rho(p^\lambda+k^\lambda)\right.\\
&\qquad\left.+(p^\rho+k^\rho)p^\lambda-g^{\rho\lambda}(p^2+kp-m^2)\right\}\\
&\qquad\times\exp\left\{\mathrm{i}\alpha_1[p^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]+\mathrm{i}\alpha_2[(p+k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]\right\}\\
&\quad+\sum_{s=1}^{S}C_s\{m\to M_s\}.
\end{aligned}$$

故

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)\\
&\quad=-\frac{4e^2}{(2\pi)^4}\int_0^\infty\int_0^\infty \mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2\int \mathrm{d}^4p\Big\{\frac{\partial}{\partial z_{1\rho}}\frac{\partial}{\partial z_{2\lambda}}\\
&\qquad+\frac{\partial}{\partial z_{1\lambda}}\frac{\partial}{\partial z_{2\rho}}-g^{\rho\lambda}\Big(\frac{\partial}{\partial z_1}\cdot\frac{\partial}{\partial z_2}+m^2\Big)\Big\}\\
&\qquad\times\exp\left\{\mathrm{i}\alpha_1[p^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]\right\}\\
&\qquad\times\exp\left\{\mathrm{i}\alpha_2[(p+k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]+\mathrm{i}z_1p+\mathrm{i}z_2p\right\}\Big|_{(z_1,z_2)=0}\\
&+\sum_{s=1}^{S}C_s\{m\to M_s\}\,.
\end{aligned}
$$

其中 z_1 和 z_2 是辅助的四分量矢量. 完成对 k 的积分以及对 z_1,z_2 的微商，作适当的整理可得

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)\\
&\quad=\frac{\mathrm{i}e^2}{4\pi^2}\int_0^\infty\int_0^\infty \mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2\frac{2\alpha_1\alpha_2}{(\alpha_1+\alpha_2)^4}\Big(k^\rho k^\lambda-k^2g^{\rho\lambda}\Big)\\
&\qquad\times\sum_{s=0}^{S}C_s\,\exp\Big\{-\mathrm{i}(\alpha_1+\alpha_2)(M_s^2-\mathrm{i}\epsilon)+\mathrm{i}\frac{\alpha_1\alpha_2k^2}{(\alpha_1+\alpha_2)}\Big\}\\
&\qquad+\frac{e^2}{4\pi^2}\,g^{\rho\lambda}\int_0^\infty\int_0^\infty \mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2\frac{\mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2}{(\alpha_1+\alpha_2)^3}\beta\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{\beta}\\
&\qquad\times\sum_{s=0}^{S}C_s\,\exp\Big\{\mathrm{i}\beta\Big[-(\alpha_1+\alpha_2)(M_s^2-\mathrm{i}\epsilon)+\frac{\alpha_1\alpha_2k^2}{(\alpha_1+\alpha_2)}\Big]\Big\}\,,
\end{aligned}
$$

其中 $C_0=1\,,M_0=m.$ 由于规定 $\sum_{s=0}^{S}C_s$ 和 $\sum_{s=0}^{S}C_s\,M^2$ 都等于零，紫外发散已被正规化，即是避免了积分在 α_1,α_2 趋于零时的发散. 基于同样的理由，可以将此式第二部分的 $\beta\frac{\partial}{\partial\beta}$ 移到积分号

外，但是这时被微商的量不依赖于 β, 因此微商后等于零. 故

$$\begin{aligned}
&\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)\\
&\quad=\frac{\mathrm{i}e^2}{4\pi^2}\int_0^\infty\int_0^\infty \mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2\frac{2\alpha_1\alpha_2}{(\alpha_1+\alpha_2)^4}\left(k^\rho k^\lambda-k^2g^{\rho\lambda}\right)\\
&\qquad\times\sum_{s=0}^{S}C_s\,\exp\left\{-\mathrm{i}(\alpha_1+\alpha_2)(M_s^2-\mathrm{i}\epsilon)+\mathrm{i}\frac{\alpha_1\alpha_2k^2}{(\alpha_1+\alpha_2)}\right\}.
\end{aligned}$$

与前面类似，在被积函数中引入因子 $1=\int_0^\infty \mathrm{d}y\delta(y-\alpha_1-\alpha_2)$, 再将 α_1,α_2 换成 $x_1=\alpha_1/y$ 和 $x_2=\alpha_2/y$ 可将此式写成

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)&=\frac{\mathrm{i}e^2}{2\pi^2}\left(k^\rho k^\lambda-k^2g^{\rho\lambda}\right)\\
&\times\int_0^1\int_0^1\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\,\delta(1-x_1-x_2)\,x_1x_2\\
&\times\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}y}{y}\sum_{s=0}^{S}C_s\,\exp\left\{\mathrm{i}y[-M_s^2+x_1x_2k^2+\mathrm{i}\epsilon]\right\},
\end{aligned}$$

即

$$\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)=\left(k^\rho k^\lambda-k^2g^{\rho\lambda}\right)\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)}(k)\,,\qquad(206)$$

而

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)}(k)&=\frac{\mathrm{i}e^2}{2\pi^2}\int_0^1\mathrm{d}x\,x(1-x)\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}y}{y}\sum_{s=0}^{S}C_s\\
&\times\exp\left\{\mathrm{i}y[-M_s^2+x(1-x)\,k^2+\mathrm{i}\epsilon]\right\}.\qquad(207)
\end{aligned}$$

现在利用前面所说的截断参量 $\overline{\Lambda}$ 来表示 M_1^2,M_2^2 以及令 $S=2$, 而

C_1 和 C_2 分别为 1 和 -2, 于是有

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}y}{y} \sum_{s=0}^{2} C_s \exp\left\{\mathrm{i}y[-M_s^2 + x(1-x)\,k^2 + \mathrm{i}\epsilon]\right\}$$

$$= \ln\left[\frac{m^2 + 2\overline{\Lambda}^2 - x(1-x)\,k^2 - \mathrm{i}\epsilon}{m^2 - x(1-x)\,k^2 - \mathrm{i}\epsilon}\right]$$

$$+ \ln\left[\frac{m^2 + 2\overline{\Lambda}^2 - x(1-x)\,k^2 - \mathrm{i}\epsilon}{m^2 + 4\overline{\Lambda}^2 - x(1-x)\,k^2 - \mathrm{i}\epsilon}\right],$$

当 $\overline{\Lambda}^2$ 充分大时，变为

$$\ln\frac{\overline{\Lambda}^2}{m^2} + \ln\left[\frac{m^2}{m^2 - x(1-x)\,k^2 - \mathrm{i}\epsilon}\right],$$

故

$$\mathrm{i}e^2 \Pi_{[0]}^{(1)}(k) = \frac{\mathrm{i}e^2}{2\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}x\, x(1-x)\ln\left[\frac{m^2}{m^2 - x(1-x)\,k^2 - \mathrm{i}\epsilon}\right]$$

$$+ \frac{\mathrm{i}e^2}{12\pi^2}\ln\frac{\overline{\Lambda}^2}{m^2}. \tag{208}$$

在质壳减除方案下，$\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)$ 被减去的量是

$$\left(k^\rho k^\lambda - k^2 g^{\rho\lambda}\right)\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)}(0),$$

上式给出

$$\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)}(0) = \frac{\mathrm{i}e^2}{12\pi^2}\ln\frac{\overline{\Lambda}^2}{m^2}. \tag{209}$$

关于 $\Lambda_{[0]}^{(1)\mu}(p_1, p_2)$, 在后面计算电子的反常磁矩时将在 p_1, p_2 的质壳值上求出它的近似表达式. 这里特别看一下正规化的 $\Lambda_{[0]}^{(1)\mu}(p,p)$ 与 $\frac{\partial}{\partial p_\mu}\Sigma_{[0]}^{(1)}(p)$ 的关系. 由

$$-\mathrm{i}\,\Lambda_{[0]}^{(1)\mu}(p,p) = \frac{e^2}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}^4 l \frac{\gamma^\sigma(\not{p} - \not{l} + m)\gamma^\mu(\not{p} - \not{l} + m)\gamma^\lambda}{[(p-l)^2 - m^2 + \mathrm{i}\epsilon]^2}$$

$$\times\left\{D_{\sigma\lambda}(l, \Delta) - D_{\sigma\lambda}(l, \Lambda_1)\right\},$$

利用

$$\frac{\gamma^\sigma(\not p-\not l+m)\gamma^\mu(\not p-\not l+m)\gamma^\lambda}{[(p-l)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]^2}=-\frac{\partial}{\partial p_\mu}\frac{\gamma^\sigma(\not p-\not l+m)\gamma^\lambda}{[(p-l)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]}\,,$$

得到

$$-\mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p,p)=-\frac{e^2}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}^4 l\frac{\partial}{\partial p_\mu}\frac{\gamma^\sigma(\not p-\not l+m)\gamma^\lambda}{[(p-l)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]}$$
$$\times\left\{D_{\sigma\lambda}(l,\Delta)-D_{\sigma\lambda}(l,\Lambda_1)\right\}.$$

这是对于正规化形式的 $\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$ 的被积函数求微商，允许将 $\frac{\partial}{\partial p_\mu}$ 移到积分号的外面，故

$$\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p,p)=-\frac{\partial}{\partial p_\mu}\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)\,. \tag{210}$$

根据 $\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$, $\frac{\partial}{\partial \not p}\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$ 等在外动量的质壳上的值得出，在质壳减除方案下的单圈重整化常数和抵消项的表达式如下：

$$Z_1=Z_2\approx 1+b_1\,, \tag{211}$$

$$Z_3\approx 1+f_1\,, \tag{212}$$

$$Z_2\,\delta m\approx \delta_1\,, \tag{213}$$

$$\Delta\mathcal{L}_1(x)=b_1\,\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi(x)\;+\;\delta_1\,\overline{\psi}(x)\psi(x)$$
$$-\,e\,b_1\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x)\;-\;\frac{1}{4}f_1\,F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)\,, \tag{214}$$

其中

$$b_1=-\frac{e^2}{16\pi^2}\left\{\ln\frac{\Lambda_1^2}{m^2}+2\ln\frac{\Delta^2}{m^2}+\frac{9}{2}\right\}-\frac{e^2}{32\pi^2}(1+\xi)\ln\xi$$
$$+(1-\xi)\frac{e^2}{16\pi^2}\left\{\ln\frac{\Lambda_1^2}{m^2}-\ln\frac{\Delta^2}{m^2}\right\}, \tag{215}$$

$$\delta_1=\frac{e^2 m}{16\pi^2}\left\{3\ln\frac{\Lambda_1^2}{m^2}+\frac{3}{2}\right\}, \tag{216}$$

$$f_1=-\frac{e^2}{12\pi^2}\left\{\ln\frac{\Lambda^2}{m^2}\right\}. \tag{217}$$

7.2 维数正规化

由 't Hooft 等人发展的维数正规化方法 [12,13] 是在规范理论中 (包括非阿贝尔规范理论) 被广泛采用的方法. 由于物理的时空是 4 维的, 即一个时间维度和三个空间维度, 在 Feynman 积分中对于每个独立内动量的积分都是四重的. 如果用一个参量 D 代表时空的维度 (不要与表观发散度混淆), 其中包含一个时间维度和 $D-1$ 个空间维度, 从而将对于每个独立内动量的积分表示为 D 重的, 就能够使积分的性质随 D 值的变化而有所改变. 在维数正规化方法中, 首先将 D 看成正整数, 在假定 Feynman 积分满足收敛条件时求出积分的表达式 (D 保持为参量), 然后将得到的表达式延拓至 D 的复平面, 以构造原来的 Feynman 积分的正规化形式, 从而将它在 D 趋于 4 时的极限当作原来的 Feynman 积分的定义. 如果原来的 Feynman 积分并不发散, 则这样的极限当然就代表原来的积分. 这里要注意, 当 D 保持为时空维数时, 坐标、动量、A_ν 和 γ^ν 等的指标 ν 的值是 $0,1,2,\cdots,D-1$, 度规张量有 D^2 个分量, 其中非零的分量是

$$g_{00}=1,\quad g_{11}=g_{22}=\cdots=g_{D-1D-1}=-1 \tag{218}$$

$$g^{00}=1,\quad g^{11}=g^{22}=\cdots=g^{D-1D-1}=-1\,. \tag{219}$$

并且规定

$$\gamma^\mu\gamma^\nu+\gamma^\nu\gamma^\mu=2g^{\mu\nu}\,. \tag{220}$$

因此又有

$$g_{\mu\nu}\gamma^\mu\gamma^\nu=\gamma_\mu\gamma^\nu=D\,. \tag{221}$$

关于 γ^ν 的形式和阶数, 不必做明确的规定. 它们的奇数重积仍然是无迹矩阵, 二重积的迹则直接取最终的值. 即

$$\mathrm{tr}\{\gamma^\mu\gamma^\nu\}=4g^{\mu\nu}\,. \tag{222}$$

对于包含轴矢流的理论，需要有特别的规则处理 γ_5, 这里从略.

坐标和动量的质量量纲仍然是 -1 和 1. 拉氏函数 (密度) 的量纲当然是 D, 可见 A_ν 和 ψ 的量纲分别是 $(D-2)/2$ 和 $(D-1)/2$. 由此又知道， $\overline{\psi}\gamma^\nu\psi A_\nu$ 的量纲是 $D-\varepsilon$, 其中 $\varepsilon \equiv 2 - D/2$. 所以电子的电荷应该换成量纲为 ε 的常数，通常写作 $e\mu^\varepsilon$. 原来的电荷 e 没有量纲，μ 是维数正规化方法中引进的量纲为 1 的参量.

维数正规化方法不破坏理论的规范不变性，原来形式地求出的 Ward-Takahashi 恒等式能够真正成立. 例如 $-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)$,$\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)$ 和 $-\mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2)$, 当时空的维数是 $1+(D-1)$ 时被表示成

$$
\begin{aligned}
-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(p) &= e^2\mu^{2\varepsilon}\int\frac{\mathrm{d}^Dk}{(2\pi)^D}(-\mathrm{i}\gamma^\mu)\mathrm{i}\,S(p-k)(-\mathrm{i}\gamma^\nu)\mathrm{i}\,D_{\nu\mu}(k)\\
&= \frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}\int\mathrm{d}^Dk\frac{\gamma^\mu(\not{p}-\not{k}+m)\gamma^\nu}{[(p-k)^2-(m-\mathrm{i}\epsilon)^2](k^2+\mathrm{i}\epsilon)}\\
&\qquad\times\Big[-g_{\mu\nu}+(1-\xi)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big]\,, \qquad (223)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k) &= -e^2\mu^{2\varepsilon}\int\frac{\mathrm{d}^Dp}{(2\pi)^D}\,\mathrm{tr}\Big\{(-\mathrm{i}\gamma^\rho)\mathrm{i}\,S(p+k)(-\mathrm{i}\gamma^\lambda)\mathrm{i}\,S(p)\Big\}\\
&= -\frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}\int\mathrm{d}^Dp\,\mathrm{tr}\Big\{\frac{\gamma^\rho(\not{p}+\not{k}+m)\gamma^\lambda(\not{p}+m)}{[(p+k)^2-(m-\mathrm{i}\epsilon)^2]}\Big\}\\
&\qquad\times\frac{1}{(p^2-(m-\mathrm{i}\epsilon)^2)}\,, \qquad (224)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
-\mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2) &= e^2\mu^{2\varepsilon}\int\frac{\mathrm{d}^Dl}{(2\pi)^D}(-\mathrm{i}\gamma^\sigma)\mathrm{i}\,S(p_1-l)\\
&\qquad\times(-\mathrm{i}\gamma^\mu)\mathrm{i}\,S(p_2-l)(-\mathrm{i}\gamma^\lambda)\mathrm{i}\,D_{\sigma\lambda}(l)\\
&= \frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}\int\mathrm{d}^Dl\frac{\gamma^\sigma(\not{p}_1-\not{l}+m)\gamma^\mu}{[(p_1-l)^2-(m-\mathrm{i}\epsilon)^2]}\frac{(\not{p}_2-\not{l}+m)\gamma^\lambda}{[(p_2-l)^2-(m-\mathrm{i}\epsilon)^2]}\\
&\qquad\times\frac{1}{l^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big[-g_{\sigma\lambda}+(1-\xi)\frac{l_\sigma l_\lambda}{l^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big]\,. \qquad (225)
\end{aligned}
$$

在按照维数正规化的观点理解这些积分时，可以直接对它们求微商以及在积分号内移动积分变量．因此

$$-\mathrm{i}\frac{\partial\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)}{\partial p_\mu} = \frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}\int \mathrm{d}^D k \frac{\gamma^\sigma\gamma^\mu[(p-k)^2-m^2]\gamma^\lambda}{[(p-k)^2-(m-\mathrm{i}\epsilon)^2]^2(k^2+\mathrm{i}\epsilon)}$$
$$\times\Big[-g_{\sigma\lambda}+(1-\xi)\frac{k_\sigma k_\lambda}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big]$$
$$-\frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}\int \mathrm{d}^D k \frac{\gamma^\sigma(\not{p}-\not{k}+m)2(p^\mu-k^\mu)\gamma^\lambda}{[(p-k)^2-(m-\mathrm{i}\epsilon)^2]^2(k^2+\mathrm{i}\epsilon)}$$
$$\times\Big[-g_{\sigma\lambda}+(1-\xi)\frac{k_\sigma k_\lambda}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big],$$

注意 $2(p^\mu-k^\mu)=(\not{p}-\not{k}-m)\gamma^\mu+\gamma^\mu(\not{p}-\not{k}+m)$，得出

$$\frac{\partial\Sigma^{(1)}_{[0]}(p)}{\partial p_\mu} = -\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p,p)\,.$$

再由

$$\mathrm{i}e^2k_\rho\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)$$
$$=-\frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}\int \mathrm{d}^D p\ \mathrm{tr}\left\{\not{k}\frac{1}{\not{p}+\not{k}-m+\mathrm{i}\epsilon}\gamma^\lambda\frac{1}{\not{p}-m+\mathrm{i}\epsilon}\right\},$$

$$\mathrm{tr}\left\{\not{k}\frac{1}{\not{p}+\not{k}-m+\mathrm{i}\epsilon}\gamma^\lambda\frac{1}{\not{p}-m+\mathrm{i}\epsilon}\right\}$$
$$=\mathrm{tr}\left\{\gamma^\lambda\frac{1}{\not{p}-m+\mathrm{i}\epsilon}-\gamma^\lambda\frac{1}{\not{p}+\not{k}-m+\mathrm{i}\epsilon}\right\},$$

得

$$k_\rho\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)=0\,. \tag{226}$$

在 Feynman 积分的计算中，经常利用如下的公式：

$$\frac{1}{A^{n_1}B^{n_2}}=\frac{\Gamma(n_1+n_2)}{\Gamma(n_1)\Gamma(n_2)}\int_0^1 \mathrm{d}x\frac{x^{n_1-1}(1-x)^{n_2-1}}{[Ax+B(1-x)]^{n_1+n_2}}\,,$$

又如：

$$\frac{1}{A^{n_1}B^{n_2}C^{n_3}}=\frac{\Gamma(n_1+n_2+n_3)}{\Gamma(n_1)\Gamma(n_2)\Gamma(n_3)}$$
$$\times\int_0^1\mathrm{d}x\int_0^1 y\mathrm{d}y\frac{(xy)^{n_1-1}[(1-x)y]^{n_2-1}(1-y)^{n_3-1}}{\{[Ax+B(1-x)]y+C(1-y)\}^{n_1+n_2+n_3}}\,.$$

更加普遍的公式是：

$$\frac{1}{A_1^{n_1}\cdots A_k^{n_k}}=\frac{\Gamma(n_1+\cdots+n_k)}{\Gamma(n_1)\cdots\Gamma(n_k)}\int_0^1\mathrm{d}x_1\int_0^{x_1}\mathrm{d}x_2\cdots\int_0^{x_{k-2}}\mathrm{d}x_{k-1}$$
$$\times\frac{[x_{k-1}^{n_1-1}(x_{k-2}-x_{k-1})^{n_2-1}\cdots(1-x_1)^{n_k-1}]}{\{A_1x_{k-1}+A_2(x_{k-2}-x_{k-1})+\cdots+A_k(1-x_1)\}^{n_1+\cdots+n_k}}\,.$$

下面以 $-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(p)$ 等为例，进一步说明单圈 Feynman 积分的正规化方法的要点和若干技巧，并且求出单圈重整化常数的表达式. 关于多圈 Feynman 积分的正规化，可参看例如文献 [12], 一些附加的约定也可查阅有关文献. 由 $\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma_\mu=(2-D)\gamma^\nu$, 以及 $\not{k}\gamma^\nu\not{k}=2k^\nu\not{k}-\gamma^\nu k^2$, 可将 $-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(p)$ 表示为

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(p)=-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(F,p)-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(\xi,p)\,,\tag{227}$$

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(F,p)$$
$$=\frac{e^2\mu^{2\epsilon}}{(2\pi)^D}\int\mathrm{d}^Dk\frac{2(1-\varepsilon)(\not{p}-\not{k})-2m(2-\varepsilon)}{[(p-k)^2-(m-\mathrm{i}\epsilon)^2](k^2+\mathrm{i}\epsilon)}\,,\tag{228}$$

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(\xi,p)$$
$$=(1-\xi)\frac{e^2\mu^{2\epsilon}}{(2\pi)^D}\int\mathrm{d}^Dk\frac{2pk\not{k}+(m-\not{p}-\not{k})k^2}{[(p-k)^2-(m-\mathrm{i}\epsilon)^2](k^2+\mathrm{i}\epsilon)^2}\,.\tag{229}$$

利用

$$\frac{2pk\not{k}+(m-\not{p}-\not{k})k^2}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2+\mathrm{i}\epsilon)^2}=\frac{(m-\not{p})}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2+\mathrm{i}\epsilon)}$$
$$+\frac{(p^2-m^2)\not{k}}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2+\mathrm{i}\epsilon)^2}-\frac{\not{k}}{(k^2+\mathrm{i}\epsilon)^2}\,,$$

抛弃对 k 的积分没有贡献的末项得

$$
\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(\xi,p)\\
&\quad=(1-\xi)\frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}(m-\not{p})\int \mathrm{d}^D k\frac{1}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon](k^2+\mathrm{i}\epsilon)}\\
&\quad+(1-\xi)\frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}(p^2-m^2)\int \mathrm{d}^D k\frac{\not{k}}{[(p-k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon]}\frac{1}{(k^2+\mathrm{i}\epsilon)^2}\,,
\end{aligned}
\tag{230}
$$

将各项的分母改写后得到

$$
-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)=\frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}\int_0^1 \mathrm{d}x\int \mathrm{d}^D k\frac{2(1-\varepsilon)(\not{p}-\not{k})-2m(2-\varepsilon)}{(k^2-2kP_\Sigma-Q_\Sigma+\mathrm{i}\epsilon)^2}\,,
\tag{231}
$$

以及

$$
\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(\xi,p)\\
&\quad=(1-\xi)\frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}((m-\not{p})\int_0^1 \mathrm{d}x\int \mathrm{d}^D k\frac{1}{(k^2-2kP_\Sigma-Q_\Sigma+\mathrm{i}\epsilon)^2}\\
&\quad+(1-\xi)\frac{e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}\int_0^1 \mathrm{d}x\int \mathrm{d}^D k\frac{2(1-x)\,\not{k}}{(k^2-2kP_\Sigma-Q_\Sigma+\mathrm{i}\epsilon)^3}\,,
\end{aligned}
\tag{232}
$$

其中

$$
P_\Sigma=px\,,
\tag{233}
$$

$$
Q_\Sigma=(m^2-p^2)x\,.
\tag{234}
$$

再由

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{tr}\left(\gamma^\rho\gamma^\mu\gamma^\lambda\gamma^\nu\right)=4g^{\rho\mu}g^{\lambda\nu}-4g^{\rho\lambda}g^{\mu\nu}+4g^{\rho\nu}g^{\mu\lambda}\,,\\
&\mathrm{tr}\left\{\gamma^\rho(\not{p}+\not{k}+m)\gamma^\lambda(\not{p}+m)\right\}\\
&\qquad=4g^{\rho\lambda}(m^2-p^2-kp)+8p^\rho p^\lambda+4p^\rho k^\lambda+4k^\rho p^\lambda\,,
\end{aligned}
$$

可将 $\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k)$ 写成

$$\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k) = -\frac{4e^2\mu^{2\varepsilon}}{(2\pi)^D}\int_0^1 \mathrm{d}x \int \mathrm{d}^D p \times \frac{2p^\rho p^\lambda + p^\rho k^\lambda + k^\rho p^\lambda - g^{\rho\lambda}(-m^2 + p^2 + kp)}{(p^2 - 2pK_\Pi - Q_\Pi + \mathrm{i}\epsilon)^2}\,, \quad (235)$$

其中

$$K_\Pi = -kx\,, \quad (236)$$

$$Q_\Pi = m^2 - k^2 x\,. \quad (237)$$

类似地，由

$$\begin{aligned}(\not p_1 - \not l + m)\gamma^\mu(\not p_2 - \not l + m) &= \not l\gamma^\mu\not l - (\not p_1 + m)\gamma^\mu\not l \\ &\quad -\not l\gamma^\mu(\not p_2 + m) + (\not p_1 + m)\gamma^\mu(\not p_2 + m)\,, \\ \not l(\not p_1 - \not l + m)\gamma^\mu(\not p_2 - \not l + m)\not l &= l^4\gamma^\mu - \not l(\not p_1 + m)\gamma^\mu l^2 \\ &\quad -\gamma^\mu(\not p_2 + m)\not l l^2 + \not l(\not p_1 + m)\gamma^\mu(\not p_2 + m)\not l\,,\end{aligned}$$

可将 $-\mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1, p_2)$ 写成

$$\begin{aligned}-\mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1, p_2) = \frac{e^2\mu^{2\epsilon}}{(2\pi)^D}\int_0^1 \mathrm{d}x \int_0^1 2y\mathrm{d}y \int \mathrm{d}^D l \\ \left\{\frac{-\gamma_\lambda\{\not l\gamma^\mu\not l - (\not p_1 + m)\gamma^\mu\not l - \not l\gamma^\mu(\not p_2 + m)\}\gamma^\lambda}{(l^2 - 2lP_\Lambda - Q_\Lambda + \mathrm{i}\epsilon)^3}\right. \\ + \frac{-\gamma_\lambda\{(\not p_1 + m)\gamma^\mu(\not p_2 + m)\}\gamma^\lambda}{(l^2 - 2lP_\Lambda - Q_\Lambda + \mathrm{i}\epsilon)^3} \\ + (1-\xi)\frac{l^2\gamma^\mu - \not l\not p_1\gamma^\mu - \gamma^\mu\not p_2\not l - 2ml^\mu}{(l^2 - 2lP_\Lambda - Q_\Lambda + \mathrm{i}\epsilon)^3} \\ \left. + 3(1-\xi)(1-y)\frac{\not l(\not p_1 + m)\gamma^\mu(\not p_2 + m)\not l}{(l^2 - 2lP_\Lambda - Q_\Lambda + \mathrm{i}\epsilon)^4}\right\}, \quad (238)\end{aligned}$$

其中

$$P_\Lambda = p_1 xy + p_2(1-x)y\,, \quad (239)$$

$$Q_\Lambda = m^2 y - p_1^2 xy - p_2^2(1-x)y\,. \quad (240)$$

现在考察如下形式的收敛积分

$$J=\int \mathrm{d}^D l\,\frac{l_0^{\lambda_0} l_1^{\lambda_1}\cdots l_{D-1}^{\lambda_{D-1}}}{[l^2-2lP-Q+\mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\,, \tag{241}$$

并说明如何将积分的结果用于 Feynman 积分的正规化. 记号 $l_0,l_1,\cdots,l_{D-1}$ 代表矢量 l 的 D 个分量, Q 以及矢量 P 的分量是任意的实常数. 此积分收敛的条件是

$$\begin{aligned}&\lambda_0>-1\,,\lambda_1>-1\,,\cdots\,,\lambda_{D-1}>-1\,,\\&D+\Lambda-2\alpha<0\,,\\&\Lambda\equiv\lambda_0+\Lambda_1+\cdots+\lambda_{D-1}\,.\end{aligned}$$

在这样的条件下对 l 的各分量作分部积分，注意

$$\frac{\partial}{\partial l_0}l_0+\frac{\partial}{\partial l_1}l_1+\cdots+\frac{\partial}{\partial l_{D-1}}l_{D-1}=1\,,$$

有

$$\begin{aligned}J&=\int \mathrm{d}^D l\frac{l}{D}\sum_{k=0}^{D-1}\left(\frac{\partial}{\partial l_k}l_k\right)\frac{l_0^{\lambda_0} l_1^{\lambda_1}\cdots l_{D-1}^{\lambda_{D-1}}}{[l^2-2lP-Q+\mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\\&=-\int \mathrm{d}^D l\frac{l}{D}\sum_{k=0}^{D-1}l_k\frac{\partial}{\partial l_k}\left\{\frac{l_0^{\lambda_0} l_1^{\lambda_1}\cdots l_{D-1}^{\lambda_{D-1}}}{[l^2-2lP-Q+\mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\right\}.\end{aligned}$$

算子 $\sum_{k=0}^{D-1}l_k\frac{\partial}{\partial l_k}$ 作用于 $l_0^{\lambda_0} l_1^{\lambda_1}\cdots l_{D-1}^{\lambda_{D-1}}$ 时等于后者乘常数 Λ，而作用于 $(l^2-2lP-Q+\mathrm{i}\epsilon)$ 时得到 $(2l^2-2lP)$, 由此可得

$$J=\frac{2\alpha}{D+\Lambda-2\alpha}\int \mathrm{d}^D l\frac{l_0^{\lambda_0} l_1^{\lambda_1}\cdots l_{D-1}^{\lambda_{D-1}}(Q+lP)}{[l^2-2lP-Q+\mathrm{i}\epsilon]^{\alpha+1}}\,, \tag{242}$$

右边的积分的收敛条件变成

$$\begin{aligned}&\lambda_0>-1\,,\lambda_1>-1\,,\cdots\,,\lambda_{D-1}>-1\,,\\&D+\Lambda-2\alpha<1\,.\end{aligned}$$

即是说，新的表达式除了 $D+\Lambda-2\alpha$ 等于零的极点，收敛域被扩大了．像这样通过分部积分而使原来收敛的积分扩大其收敛域的操作被称为“偏 p”操作．继续进行这一操作，可以使 J 的新表达式对于任意的 α 和大于 -1 的 $\lambda_0,\cdots,\lambda_{D-1}$ 都有意义，只是 $D+\Lambda-2\alpha$ 等于 $0,1,2,\cdots$ 的极点除外．既然如此，如果在 D,α 以及 $\lambda_0,\cdots,\lambda_{D-1}$ 保持为参量而假定收敛条件被满足时求出 J 的明显表达式，那么可以将这种表达式看成是定义在 D 的复平面上的半纯函数，即除了在正整数 $D=2\alpha-\Lambda,\ 2\alpha-\Lambda+1,2\alpha-\Lambda+2,\cdots$ 处有极点之外，是解析函数．下面求一种最基本的积分的明显表达式，即是：

$$J(D,\alpha)=\int \mathrm{d}^D l\,\frac{1}{[l^2-2lP-Q+\mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\,. \tag{243}$$

然后又可以推出其他积分的达式，例如可以方便地表达如下的量：

$$J_\mu(D,\alpha)=\int \mathrm{d}^D l\,\frac{l_\mu}{[l^2-2lP-Q+\mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\,, \tag{244}$$

$$J_{\mu\nu}(D,\alpha)=\int \mathrm{d}^D l\,\frac{l_\mu l_\nu}{[l^2-2lP-Q+\mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\,, \tag{245}$$

$$J_{\mu\nu\rho}(D,\alpha)=\int \mathrm{d}^D l\,\frac{l_\mu l_\nu l_\rho}{[l^2-2lP-Q+\mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\,, \tag{246}$$

$$J_{\mu\nu\rho\sigma}(4,\alpha)=\int \mathrm{d}^D l\,\frac{l_\mu l_\nu l_\rho l_\sigma}{[l^2-2lP-Q+\mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\,. \tag{247}$$

由于这些积分被假定是收敛的，对积分变量作平移或者在积分号下对 P^μ 求微商等操作都是允许的．由积分变量的平移得

$$J(D,\alpha)=\int \mathrm{d}^D l\,\frac{1}{[l^2-P^2-Q+\mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\,. \tag{248}$$

对 P 的分量求微商可得

$$J_\mu(D,\alpha)=P_\mu J(0,\alpha)\,, \tag{249}$$

$$J_{\mu\nu}(D,\alpha)=P_\mu P_\nu J(0,\alpha)+\frac{g_{\mu\nu}}{2(\alpha-1)}J(0,\alpha-1)\,, \tag{250}$$

以及

$$J_{\mu\nu\rho}(D,\alpha) = P_\mu P_\nu P_\rho J(0,\alpha) + \frac{(P_\mu g_{\nu\rho} + P_\nu g_{\rho\mu} + P_\rho g_{\mu\nu})}{2(\alpha-1)} J(0,\alpha-1)\,, \quad (251)$$

$$J_{\mu\nu\rho\sigma}(D,\alpha) = P_\mu P_\nu P_\rho P_\sigma J(0,\alpha) + \frac{G_{\mu\nu\rho\sigma}}{2(\alpha-1)} J(0,\alpha-1) + \frac{(g_{\mu\nu}g_{\rho\sigma} + g_{\mu\rho}g_{\nu\sigma} + g_{\mu\sigma}g_{\nu\rho})}{4(\alpha-1)(\alpha-2)} J(0,\alpha-2)\,, \quad (252)$$

$$G_{\mu\nu\rho\sigma} = (g_{\mu\nu}P_\rho + g_{\mu\rho}P_\nu + g_{\nu\rho}P_\mu)P_\sigma + g_{\mu\sigma}P_\nu P_\rho + g_{\nu\sigma}P_\mu P_\rho + g_{\rho\sigma}P_\mu P_\nu\,. \quad (253)$$

为了方便，改写一下 $J(D,\alpha)$ 中对于 l_0 的积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}l_0 \frac{1}{[l_0^2 - \boldsymbol{l}^2 - P^2 - Q + \mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\,,$$

其中已经将 l^2 写成 $l_0^2 - \boldsymbol{l}^2$. 当 ϵ 保持为正数时，不论 $\boldsymbol{l}^2 - P^2 - Q$ 是正的或是负的，被积函数在 l_0 平面的第一和第三象限以及实轴和虚轴上是解析的，因为它的极点总是在第二和第四象限的内部. 因此有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}l_0 \frac{1}{[l_0^2 - \boldsymbol{l}^2 - P^2 - Q + \mathrm{i}\epsilon]^\alpha} = \int_{-\mathrm{i}\infty}^{\mathrm{i}\infty} \mathrm{d}l_0 \frac{1}{[l_0^2 - \boldsymbol{l}^2 - P^2 - Q + \mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\,.$$

这样就把沿着 l_0 平面实轴的积分改写为沿着虚轴的积分，这种改写被说成施行 Wick 转动. 在此式右边用实变量 $L_0 = -\mathrm{i}l_0$ 作为新的积分变量，得到

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}l_0 \frac{1}{[l_0^2 - \boldsymbol{l}^2 - P^2 - Q + \mathrm{i}\epsilon]^\alpha} = \mathrm{i}(-1)^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}L_0 \frac{1}{[L^2 + P^2 + Q - \mathrm{i}\epsilon]^\alpha}\,, \quad (254)$$

其中

$$L^2 = L_0^2 + l^2 = L_0^2 + l_1^2 + \cdots + l_{D-1}^2 \,. \tag{255}$$

因此 $J(D,\alpha)$ 被表示成在 D 维欧氏空间的积分：

$$J(D,\alpha) = \mathrm{i}(-1)^\alpha \int \mathrm{d}^D L \, \frac{1}{[L^2 + P^2 + Q - \mathrm{i}\epsilon]^\alpha} \,. \tag{256}$$

在 D 维欧氏空间的积分体元 $\mathrm{d}^D L$ 可以用极坐标 $(L, \theta_1, \cdots, \theta_{D-1})$ 表示为

$$\mathrm{d}^D L = L^{D-1} \mathrm{d}L \mathrm{d}\Omega \,. \tag{257}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\Omega = {} & (\sin\theta_{D-1})^{D-2} \mathrm{d}\theta_{D-1} \\ & \times (\sin\theta_{D-2})^{D-3} \mathrm{d}\theta_{D-2} \cdots \sin\theta_2 \mathrm{d}\theta_2 \mathrm{d}\theta_1 \,, \end{aligned} \tag{258}$$

对各坐标积分的范围是：

$$0 \le L \,, \quad 0 \le (\theta_2, \cdots, \theta_{D-1}) < \pi \,, \quad 0 \le \theta_1 < 2\pi \,.$$

改写后的 $J(D,\alpha)$ 的被积函数与 $\theta_1, \cdots, \theta_{D-1}$ 无关，对这些角度以及对 L 的积分可以分别用以下的公式完成：

$$\int_0^\pi (\sin\theta)^n \mathrm{d}\theta = \sqrt{\pi} \, \frac{\Gamma([n+1]/2)}{\Gamma([n+2]/2)} \,,$$

$$\int \mathrm{d}\Omega = \frac{2(\sqrt{\pi})^D}{\Gamma(D/2)} \,,$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}t \frac{t^\beta}{(t^2 + C)^\alpha} = \frac{\Gamma([\beta+1]/2)\Gamma(\alpha - [\beta+1]/2)}{2\Gamma(\alpha)} \frac{1}{C^{(\alpha - [\beta+1]/2)}} \,,$$

故

$$J(D,\alpha) = \mathrm{i}(-1)^\alpha (\sqrt{\pi})^D \frac{\Gamma(\alpha - D/2)}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{(P^2 + Q - \mathrm{i}\epsilon)^{\alpha - D/2}} \,. \tag{259}$$

由此并注意 Γ 函数满足 $z\Gamma(z)=\Gamma(z+1)$, 又得到

$$J_\mu(D,\alpha)=\mathrm{i}(-1)^\alpha(\sqrt{\pi})^D\frac{\Gamma(\alpha-D/2)}{\Gamma(\alpha)}\frac{P_\mu}{(P^2+Q-\mathrm{i}\epsilon)^{\alpha-D/2}}\,, \tag{260}$$

$$\begin{aligned}J_{\mu\nu}(D,\alpha)=&\mathrm{i}(-1)^\alpha(\sqrt{\pi})^D\frac{\Gamma(\alpha-D/2)}{\Gamma(\alpha)}\frac{P_\mu P_\nu}{(P^2+Q-\mathrm{i}\epsilon)^{\alpha-D/2}}\\&+\mathrm{i}(-1)^{\alpha-1}(\sqrt{\pi})^D\frac{\Gamma(\alpha-1-D/2)}{2\Gamma(\alpha)}\frac{g_{\mu\nu}}{(P^2+Q-\mathrm{i}\epsilon)^{\alpha-1-D/2}}\,,\end{aligned} \tag{261}$$

$$\begin{aligned}J_{\mu\nu\rho}(D,\alpha)=&\mathrm{i}(-1)^\alpha(\sqrt{\pi})^D\frac{\Gamma(\alpha-D/2)}{\Gamma(\alpha)}\frac{P_\mu P_\mu P_\lambda}{(P^2+Q-\mathrm{i}\epsilon)^{\alpha-D/2}}\\&+\mathrm{i}(-1)^{\alpha-1}(\sqrt{\pi})^D\frac{\Gamma(\alpha-1-D/2)}{2\Gamma(\alpha)}\frac{(P_\mu g_{\nu\lambda}+P_\nu g_{\lambda\mu}+P_\lambda g_{\mu\nu})}{(P^2+Q-\mathrm{i}\epsilon)^{\alpha-1-D/2}}\,,\end{aligned} \tag{262}$$

以及

$$\begin{aligned}J_{\mu\nu\rho\sigma}(D,\alpha)=&\mathrm{i}(-1)^\alpha(\sqrt{\pi})^D\frac{\Gamma(\alpha-D/2)}{\Gamma(\alpha)}\frac{P_\mu P_\nu P_\rho P_\sigma}{(P^2+Q-\mathrm{i}\epsilon)^{\alpha-D/2}}\\&+\mathrm{i}(-1)^{\alpha-1}(\sqrt{\pi})^D\frac{\Gamma(\alpha-1-D/2)}{\Gamma(2\alpha)}\frac{G_{\mu\nu\rho\sigma}}{(P^2+Q-\mathrm{i}\epsilon)^{\alpha-1-D/2}}\\&+\mathrm{i}(-1)^{\alpha}(\sqrt{\pi})^D\frac{\Gamma(\alpha-2-D/2)}{\Gamma(4\alpha)}\frac{(g_{\mu\nu}g_{\rho\sigma}+g_{\mu\rho}g_{\nu\sigma}+g_{\mu\sigma}g_{\nu\rho})}{(P^2+Q-\mathrm{i}\epsilon)^{\alpha-2-D/2}}\,.\end{aligned} \tag{263}$$

将这样的表达式延拓至 D 的复平面就成为半纯函数，即除了一些孤立极点之外是解析函数，因此可以在 D 充分接近于 4 时用于构造单圈 Feynman 积分的正规化形式.

由上述方法得到

$$\begin{aligned}-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(F,p)=&\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}(4\pi\mu^2)^\epsilon\,\Gamma(\varepsilon)\\&\times\int_0^1\mathrm{d}x\frac{2(1-\varepsilon)(1-x)\not{p}-2m(2-\varepsilon)}{[x^2p^2+x(m^2-p^2)-\mathrm{i}\epsilon]^\epsilon}\,,\end{aligned} \tag{264}$$

$$
\begin{aligned}
-\mathrm{i}\,\Sigma^{(1)}_{[0]}(\xi,p) \;=\; & (1-\xi)\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}(4\pi\mu^2)^{\epsilon}\,\Gamma(\varepsilon) \\
& \times\int_0^1 \mathrm{d}x \frac{(m-\not{p})}{[x^2p^2+x(m^2-p^2)-\mathrm{i}\epsilon]^{\varepsilon}} \\
& -(1-\xi)\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}(4\pi\mu^2)^{\epsilon}\,\Gamma(1+\varepsilon) \\
& \times\int_0^1 \mathrm{d}x \frac{x(1-x)(p^2-m^2)\not{p}}{[x^2p^2+x(m^2-p^2)-\mathrm{i}\epsilon]^{\varepsilon+1}}\,, \qquad (265)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)\rho\lambda}_{[0]}(k) \;=\; & (k^\rho k^\lambda - k^2 g^{\rho\lambda})\mathrm{i}e^2\Pi^{(1)}_{[0]}(k) \\
=\; & (k^\rho k^\lambda - k^2 g^{\rho\lambda})\frac{\mathrm{i}e^2}{2\pi^2}(4\pi\mu^2)^{\epsilon}\,\Gamma(\varepsilon) \\
& \times\int_0^1 \mathrm{d}x \frac{x(1-x)}{[m^2-x(1-x)k^2-\mathrm{i}\epsilon]^{\varepsilon}}\,, \qquad (266)
\end{aligned}
$$

以及

$$
-\mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p_1,p_2) = -\mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]F}(p_1,p_2) - \mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]\xi}(p_1,p_2)\,, \quad (267)
$$

其中

$$
\begin{aligned}
& -\mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]F}(p_1,p_2) \\
& \quad = -\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}(4\pi\mu^2)^{\epsilon}\,\Gamma(\varepsilon)\frac{1}{2}\int_0^1 \mathrm{d}x\int_0^1 \mathrm{d}y\, y \frac{\gamma_\sigma\gamma_\rho\gamma^\mu\gamma^\rho\gamma^\sigma}{(P^2_\Lambda+Q_\Lambda-\mathrm{i}\epsilon)^{\varepsilon}} \\
& \qquad +\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}(4\pi\mu^2)^{\epsilon}\,\Gamma(1+\varepsilon)\int_0^1 \mathrm{d}x\int_0^1 \mathrm{d}y\, y \\
& \qquad \times\frac{\gamma_\rho\{\not{P}_\Lambda\gamma^\mu\not{P}_\Lambda-(\not{p}_1+m)\gamma^\mu\not{P}_\Lambda-\not{P}_\Lambda\gamma^\mu(\not{p}_2+m)\}\gamma^\rho}{(P^2_\Lambda+Q_\Lambda-\mathrm{i}\epsilon)^{\varepsilon+1}} \\
& \qquad +\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}(4\pi\mu^2)^{\epsilon}\,\Gamma(1+\varepsilon)\int_0^1 \mathrm{d}x\int_0^1 \mathrm{d}y\, y \\
& \qquad \times\frac{\gamma_\rho(\not{p}_1+m)\gamma^\mu(\not{p}_2+m)\gamma^\rho}{(P^2_\Lambda+Q_\Lambda-\mathrm{i}\epsilon)^{\varepsilon+1}}\,,
\end{aligned}
$$

而

$$
\begin{aligned}
-\mathrm{i}\,\Lambda^{(1)\mu}_{[0]\xi}(p_1,p_2) &= \frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}(4\pi\mu^2)^{\epsilon}(1-\xi)\,\Gamma(\epsilon) \\
&\quad\times\int_0^1 \mathrm{d}x\int_0^1 \mathrm{d}y\, y\frac{(2-\varepsilon)\gamma^\mu}{(P_\Lambda^2+Q_\Lambda-\mathrm{i}\epsilon)^{\epsilon}} \\
&\quad+\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}(4\pi\mu^2)^{\epsilon}(1-\xi)\,\Gamma(1+\varepsilon) \\
&\quad\times\int_0^1 \mathrm{d}x\int_0^1 \mathrm{d}y\, y\frac{\not{P}_\Lambda\not{p}_1\gamma^\mu+\gamma^\mu\not{p}_2\not{P}_\Lambda+2mP_\Lambda^\mu-P_\Lambda^2\gamma^\mu}{(P_\Lambda^2+Q_\Lambda-\mathrm{i}\epsilon)^{\epsilon+1}} \\
&\quad-\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}(4\pi\mu^2)^{\epsilon}(1-\xi)\,\Gamma(1+\varepsilon) \\
&\quad\times\frac{1}{2}\int_0^1 \mathrm{d}x\int_0^1 \mathrm{d}y\, y(1-y)\frac{\gamma_\rho(\not{p}_1+m)\gamma^\mu(\not{p}_2+m)\gamma^\rho}{(P_\Lambda^2+Q_\Lambda-\mathrm{i}\epsilon)^{\epsilon+1}} \\
&\quad+\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}(4\pi\mu^2)^{\epsilon}(1-\xi)\,\Gamma(2+\varepsilon) \\
&\quad\times\int_0^1 \mathrm{d}x\int_0^1 \mathrm{d}y\, y(1-y)\frac{\not{P}_\Lambda(\not{p}_1+m)\gamma^\mu(\not{p}_2+m)\not{P}_\Lambda}{(P_\Lambda^2+Q_\Lambda-\mathrm{i}\epsilon)^{\epsilon+2}}\,,
\end{aligned}
$$

这些表达式在 ε 保持有限而充分接近于 0 时即是维数正规化形式. 这时有

$$\Gamma(\varepsilon)\approx\frac{1}{\varepsilon}-\gamma\,, \tag{268}$$

$$\Gamma(1+\varepsilon)\approx 1-\gamma\varepsilon\,, \tag{269}$$

$$\Gamma(2+\varepsilon)=(1+\varepsilon)\Gamma(1+\varepsilon)\approx 1-\gamma\varepsilon+\varepsilon\,, \tag{270}$$

$$(4\pi\mu^2)^{\epsilon}\approx 1+\varepsilon\ln(4\pi\mu^2)\,. \tag{271}$$

其中 $\gamma\approx 0.57721\cdots$ 是 Euler 常数. 紫外发散是由 $\Gamma(\varepsilon)$ 在 ε 趋于零时的极点显示的, 可借助于 R 减除运算来消除. 另一方面, 当减除点处在外动量的“质壳”上时, 那些含有红外发散的项会由于合成分母的过高幂次产生如下的因子:

$$\int_0^1 \mathrm{d}x\,\frac{1}{x^{2\epsilon+1}}=-\frac{1}{2\epsilon_L}\,, \tag{272}$$

这时特别地约定 ε 是接近于 0 的负数，并且将它记为 ε_L，以便标记红外发散.

将 $\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)$ 的上述表达式化简可得

$$\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)}(k)=\frac{\mathrm{i}e^2}{2\pi^2}\int_0^1\mathrm{d}x\,x(1-x)\ln\left[\frac{m^2}{m^2-x(1-x)\,k^2-\mathrm{i}\epsilon}\right]$$
$$+\frac{\mathrm{i}e^2}{12\pi^2}\left\{\frac{1}{\varepsilon}-\gamma-\ln\frac{m^2}{4\pi\mu^2}\right\}. \tag{273}$$

这等于用 $1/\varepsilon-\gamma-\ln(m^2/4\pi\mu^2)$ 代替相应的 Pauli-Villars 正规化公式中的 $\ln(\overline{\Lambda}^2/m^2)$. 在质壳减除方案下，$\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)$ 被减去的量是

$$\left(k^\rho k^\lambda-k^2g^{\rho\lambda}\right)\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)}(0)\,,$$

而

$$\mathrm{i}e^2\Pi_{[0]}^{(1)}(0)=\frac{\mathrm{i}e^2}{12\pi^2}\left\{\frac{1}{\varepsilon}-\gamma-\ln\frac{m^2}{4\pi\mu^2}\right\}. \tag{274}$$

在 p 的“质壳”值计算 $-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(p)$ 和它的微商得

$$-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(p)\Big|_{\not p=m}=-\mathrm{i}\,\Sigma_{[0]}^{(1)}(F,p)\Big|_{\not p=m}$$
$$=-\frac{\mathrm{i}e^2m}{16\pi^2}\left\{\frac{3}{\varepsilon}-3\gamma-3\,\ln\frac{m^2}{4\pi\mu^2}+4\right\}, \tag{275}$$

$$-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\not p}\Sigma_{[0]}^{(1)}(F,p)\Big|_{\not p=m}$$
$$=\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}\left\{\frac{1}{\varepsilon}+\frac{2}{\varepsilon_L}-3\gamma-3\,\ln\frac{m^2}{4\pi\mu^2}+4\right\}, \tag{276}$$

以及

$$-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\not p}\Sigma_{[0]}^{(1)}(\xi,p)\Big|_{\not p=m}=(1-\xi)\frac{\mathrm{i}e^2}{16\pi^2}\left\{\frac{1}{\varepsilon_L}-\frac{1}{\varepsilon}\right\}. \tag{277}$$

此外，直接计算 $-\mathrm{i}\,\Lambda_{[0]}^{(1)\mu}(p,p)\Big|_{\not p=m}$，也可以求得

$$\Lambda_{[0]}^{(1)\mu}(p,p)\Big|_{\not p=m}=-\frac{\partial}{\partial p_\mu}\Sigma_{[0]}^{(1)}(p)\Big|_{\not p=m}. \tag{278}$$

根据以上结果，在“质壳”减除方案下的单圈重整化常数和抵消项的表达式如下：

$$Z_1 = Z_2 \approx 1 + b_1\,, \tag{279}$$

$$Z_3 \approx 1 + f_1\,, \tag{280}$$

$$Z_2\,\delta m \approx \delta_1\,, \tag{281}$$

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{L}_1(x) = {} & b_1\,\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) \;+\; \delta_1\,\overline{\psi}(x)\psi(x) \\ & - e\,b_1\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x) \;-\; \frac{1}{4}f_1\,F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)\,,\end{aligned} \tag{282}$$

其中

$$\begin{aligned}b_1 = {} & -\frac{e^2}{16\pi^2}\left\{\frac{1}{\varepsilon} + \frac{2}{\varepsilon_L} - 3\gamma - 3\,\ln\frac{m^2}{4\pi\mu^2} + 4\right\} \\ & +(1-\xi)\frac{e^2}{16\pi^2}\left\{\frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon_L}\right\},\end{aligned} \tag{283}$$

$$\delta_1 = \frac{e^2 m}{16\pi^2}\left\{\frac{3}{\varepsilon} - 3\gamma - 3\,\ln\frac{m^2}{4\pi\mu^2} + 4\right\}, \tag{284}$$

$$f_1 = -\frac{e^2}{12\pi^2}\left\{\frac{1}{\varepsilon} - \gamma - \ln\frac{m^2}{4\pi\mu^2}\right\}. \tag{285}$$

§8 散 射 矩 阵

在按照质壳减除的方案完成重整化时，相应的重整化场函数随着确定下来，重整化参量 m,e 代表电子质量和电荷的实验值，光子没有质量. 在以这种重整化场函数为基本变量的算符描述下，场算符满足通常的等时对易 − 反对易关系式，由总哈密顿量 H 和自由哈密顿量 H_0 定义的格林函数分别是这种方案下的重整化的完全格林函数和自由格林函数. 既然如此，就可以用 H_0 描述散射过程的初 − 末态中的物理粒子的自由运动，而散射

矩阵实质上是 H 和 H_0 所决定的相互作用绘景的时间演化算符 $U(\infty,-\infty)$ 在 H_0 的物理本征态所形成的基下的矩阵. 这正是我们实际采用的构造散射矩阵的方法.

为了便于表达 H_0 的物理本征态，还是假想其中的电磁场部分含有光子质量项，因此按照我们的符号规定，与第八章以及本章 3.2 小节一样，可将 H_0 表示成如下的对角形式：

$$H_0 = H_\psi + H_A\,,$$

$$H_\psi = \int \mathrm{d}^3p(m^2+p^2)^{1/2}\sum_\lambda\left\{b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})b_{1\lambda}(\boldsymbol{p}) + b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})b_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\right\},$$

$$H_A = \int \mathrm{d}^3k\left\{\omega(k)\sum_\Lambda a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)a(\boldsymbol{k}\Lambda) - \omega_0(k)\beta^\dagger(\boldsymbol{k})\beta(\boldsymbol{k})\right\}.$$

电子场的产生、消灭算符满足通常的反对易关系，m 现在代表电子的物理质量，$b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})$ 和 $b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})$ 分别产生动量为 $\boldsymbol{p}$, 螺旋性为 λ 的电子和正电子 ($\lambda=\pm1$). 相应的消灭算符和裸真空态 $|0\rangle$ 满足

$$\langle 0|0\rangle = 1\,,\quad b_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle = 0\,,\quad b_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle = 0\,. \tag{286}$$

其他说明见第八章. 电磁场有非物理自由度问题，这里再提一下有关的公式和记号. 光子的极化态用 Λ 代表，由于设想光子有 (虚假的) 质量 Δ, 它也具有 $\Lambda=3$ 代表的纵极化态. $\omega(k)$, $\omega_0(k)$ 的定义是

$$\omega(k) = \sqrt{\Delta^2+\boldsymbol{k}^2}\,,\quad \omega_0(k) = \sqrt{\xi\Delta^2+\boldsymbol{k}^2}\,. \tag{287}$$

产生、消灭算符 $a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)$ 等满足

$$\left[a(\boldsymbol{k}\Lambda), a^\dagger(\boldsymbol{k}'\Lambda')\right] = \delta_{\Lambda\Lambda'}\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,,$$

$$\left[a(\boldsymbol{k}\Lambda), a(\boldsymbol{k}'\Lambda')\right] = \left[a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda), a^\dagger(\boldsymbol{k}'\Lambda')\right] = 0\,,$$

$$\left[\beta(\boldsymbol{k}),\beta^{\dagger}(\boldsymbol{k}')\right]=-\delta^{3}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,,$$
$$\left[\beta(\boldsymbol{k}),\beta(\boldsymbol{k}')\right]=0\,,$$
$$\left[a(\boldsymbol{k}\Lambda),\beta(\boldsymbol{k}')\right]=\left[a(\boldsymbol{k}\Lambda),\beta^{\dagger}(\boldsymbol{k}')\right]=0\,,$$

并且

$$a(\boldsymbol{k}\Lambda)|0\rangle=0\,,\quad \beta(\boldsymbol{k})|0\rangle=0\,.$$

在薛定谔绘景中的 A_μ,Π_ν 可以用这些产生、消灭算符表示为

$$\begin{aligned}A_\mu(\boldsymbol{x})=&\int\frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega_0(2\pi)^3}}\frac{k_\mu(0)}{\Delta}\left\{\beta(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+\beta^{\dagger}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right\}\\&+\int\frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\Big(\sum_{\Lambda}\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\Big)\\&+\int\frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\Big(\sum_{\Lambda}\varepsilon^{*}_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a^{\dagger}(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\Big)\,,\end{aligned}\tag{288}$$

$$\begin{aligned}\Pi_\mu(\boldsymbol{x})=&\int\frac{\mathrm{i}\mathrm{d}^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}}\frac{\omega}{\sqrt{2\omega_0}}\frac{k_\mu(0)}{\Delta}\left\{\beta(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-\beta^{\dagger}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right\}\\&+\int\frac{\mathrm{i}\mathrm{d}^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}}\sqrt{\frac{\omega}{2}}\Big(\sum_{\Lambda}\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\Big)\\&-\int\frac{\mathrm{i}\mathrm{d}^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}}\sqrt{\frac{\omega}{2}}\Big(\sum_{\Lambda}\varepsilon^{*}_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a^{\dagger}(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\Big)\,,\end{aligned}\tag{289}$$

其中 $k_\mu(0)$ 是在 k_μ 中将 k_0 换成 ω_0 的结果，极化矢量 $\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)$ $(\Lambda=1,2,3)$ 满足

$$k^{\mu}\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)=0\,,\tag{290}$$
$$g^{\mu\nu}\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\varepsilon_\nu(\boldsymbol{k}\Lambda')=-\delta_{\Lambda\Lambda'}\,,\tag{291}$$
$$\sum_{\Lambda}\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\varepsilon_\nu(\boldsymbol{k}\Lambda)=-g_{\mu\nu}+\frac{k_\mu k_\nu}{\Delta^2}\qquad(k^0=\omega(k))\,.\tag{292}$$

后面还要用到相互作用绘景的 $A_\mu(x)$, 即

$$A_\mu(x) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega_0(2\pi)^3}} \frac{k_\mu(0)}{\Delta} \Big\{ \beta(\boldsymbol{k}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(0)x} + \beta^\dagger(\boldsymbol{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(0)x} \Big\}$$
$$+ \int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \Big(\sum_{\Lambda} \varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda) a(\boldsymbol{k}\Lambda) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \Big)$$
$$+ \int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \Big(\sum_{\Lambda} \varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda) a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \Big) . \tag{293}$$

真实的光子没有质量因而没有纵向极化态，此外 β 与 $\beta^\dagger$ 的对易关系表明，由 $\beta^\dagger$ 产生的粒子也不是真实的. 所以 H_0 的物理本征态即是只包含电子、正电子和横极化光子的本征态. 由 H_0 的全部独立物理本征态张成的子空间即是散射过程的初 – 末态子空间.

设 $\{\Phi_\alpha\}$ 代表 H_0 的全部独立的物理本征态，满足标准的正交归一条件

$$\langle \Phi_\alpha | \Phi_\alpha \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} . \tag{294}$$

将散射矩阵的元素定义如下

$$S_{fi} = \frac{\langle f | U(\infty, -\infty) | i \rangle}{\langle 0 | U(\infty, -\infty) | 0 \rangle} , \tag{295}$$

其中 $|i\rangle, |f\rangle$ 即是 $|\Phi_i\rangle, |\Phi_f\rangle$.

下面推导散射矩阵元通过截腿重整化格林函数表示的一般公式. 参照重整化格林函数的生成泛函

$$\mathcal{Z}^R[\overline{\eta}, \eta, J] = \frac{1}{\langle 0 | \mathcal{T}\Big(\exp\Big\{ \int \mathrm{d}^4x(-\mathrm{i}) \mathcal{H}_I(x) \Big\} \Big) | 0 \rangle}$$
$$\times \langle 0 | \mathcal{T}\Big(\exp\Big\{ \mathrm{i} \int \mathrm{d}^4z \big(\overline{\eta}(z)\psi(z) + \overline{\psi}(z)\eta(z) + J^\mu(z) A_\mu(z) \big) \Big\}$$
$$\times \exp\Big\{ \int \mathrm{d}^4x(-\mathrm{i}) \mathcal{H}_I(x) \Big\} \Big) | 0 \rangle ,$$

定义算符

$$U(\overline{\eta},\eta,J)=\mathcal{T}\Big(\exp\Big\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4z\big(\overline{\eta}(z)\psi(z)+\overline{\psi}(z)\eta(z)+J^{\mu}(z)A_{\mu}(z)\big)\Big\}$$
$$\times\exp\Big\{\int \mathrm{d}^4x(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x)\Big\}\Big)\,. \tag{296}$$

于是

$$\langle 0|U(\overline{\eta},\eta,J)|0\rangle/\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle=\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J]\,. \tag{297}$$

而

$$U(0,0,0)=U(\infty,-\infty)$$
$$=\mathcal{T}\Big(\exp\Big\{\int \mathrm{d}^4x(-\mathrm{i})\mathcal{H}_I(x)\Big\}\Big)\,, \tag{298}$$

虽然 $\mathcal{H}_I$ 含有抵消项，仍然可以将 (296) 式写成类似于 §3 (64) 式的形式：

$$U(\overline{\eta},\eta,J)=\exp\Big\{-\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\mathcal{H}_I\Big(\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}(x)},\cdots\Big)\Big\}U^{(0)}(\overline{\eta},\eta,J)\,, \tag{299}$$

其中

$$U^{(0)}(\overline{\eta},\eta,J)=\mathcal{T}\exp\Big\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\big[\overline{\eta}(x)\psi(x)$$
$$+\overline{\psi}(x)\eta(x)+J^{\mu}(x)A_{\mu}(x)\big]\Big\}\,. \tag{300}$$

$\langle 0|U^{(0)}(\overline{\eta},\eta,J)|0\rangle$ 即是重整化的自由格林函数生成泛函，并且仍然可表示为

$$\mathcal{Z}_0^R[\overline{\eta},\eta,J]=\exp\Big\{-\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\int \mathrm{d}^4y\overline{\eta}(x)S(x-y)\eta(y)\Big\}$$
$$\times\exp\Big\{-\frac{\mathrm{i}}{2}\int \mathrm{d}^4x\int \mathrm{d}^4yJ^{\mu}(x)D_{\mu\nu}(x-y)J^{\nu}(y)\Big\}\,, \tag{301}$$

其中 $\mathrm{i}S(x-y)$ 和 $\mathrm{i}D_{\mu\nu}(x-y)$ 是重整化的自由传播函数，特别是

$$D_{\mu\nu}(k)=\frac{-1}{k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big\{g_{\mu\nu}+(\xi-1)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2-\xi\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big\},$$

以及

$$[D(k)^{-1}]^{\mu\nu}=\Big\{-(k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)g^{\mu\nu}+\big(1-\tfrac{1}{\xi}\big)k^\mu k^\nu\Big\}.$$

其次，算符 $U^{(0)}(\overline{\eta},\eta,J)$ 可表示为

$$\begin{aligned}U^{(0)}(\overline{\eta},\eta,J)=:\exp\Big\{\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x\big[&\overline{\eta}_\alpha(x)\psi_\alpha(x)\\&+\overline{\psi}_\alpha(x)\eta_\alpha(x)+J^\mu(x)A_\mu(x)\big]\Big\}:\mathcal{Z}_0^R[\overline{\eta},\eta,J]\,,\end{aligned}\tag{302}$$

因此又可写成

$$\begin{aligned}U^{(0)}(\overline{\eta},\eta,J)=:\exp\Big\{-\int\mathrm{d}^4x\int\mathrm{d}^4y\Big(&\overline{\psi}_\beta(x)\\&\times\big[S(x-y)^{-1}\big]_{\beta,\alpha}\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}_\alpha(y)}+\big[S(x-y)^{-1}\big]_{\beta,\alpha}\psi_\alpha(y)\frac{\delta}{\delta\eta_\beta(x)}\\&+A_\mu(x)\big[D(x-y)^{-1}\big]^{\mu\nu}\frac{\delta}{\delta J^\nu(y)}\Big)\Big\}:\mathcal{Z}_0^R[\overline{\eta},\eta,J]\,.\end{aligned}\tag{303}$$

将此式代入 (299) 式得

$$\begin{aligned}U(\overline{\eta},\eta,J)/\big(\langle0|U(\infty,-\infty)|0\rangle\big)=:\exp\Big\{-\int\mathrm{d}^4x\int\mathrm{d}^4y\Big(&\overline{\psi}_\beta(x)\\&\times\big[S(x-y)^{-1}\big]_{\beta\alpha}\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}_\alpha(y)}+\big[S(x-y)^{-1}\big]_{\beta\alpha}\psi_\alpha(y)\frac{\delta}{\delta\eta_\beta(x)}\\&+A_\mu(x)\big[D(x-y)^{-1}\big]^{\mu\nu}\frac{\delta}{\delta J^\nu(y)}\Big)\Big\}:\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J]\,.\end{aligned}\tag{304}$$

定义新的源如下：

$$\begin{aligned}\overline{\eta}'_\alpha(x)&=-\int\mathrm{d}^4x'\,\overline{\eta}_{\alpha'}(x')\,\mathrm{i}\,[\overline{S}(x'-x)^{-1}]_{\alpha'\alpha}\,,\\\eta'_\alpha(x)&=-\int\mathrm{d}^4x'\,\mathrm{i}\,[\overline{S}(x-x')^{-1}]_{\alpha\alpha'}\,\eta_{\alpha'}(x')\,,\\J'^\nu(x)&=-\int\mathrm{d}^4x'\,J_\mu(x')\,\mathrm{i}\,[\overline{D}(x'-x)^{-1}]^{\mu\nu}\,,\end{aligned}$$

其中 $\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\alpha'}(x-y)$ 等是重整化的完全传播函数. 注意

$$\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}'_\alpha(y)} = -\int \mathrm{d}^4x\,\mathrm{i}\overline{S}_{\alpha\beta}(y-x)\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}_\beta(x)}\,,$$

$$\frac{\delta}{\delta\eta'_\alpha(y)} = -\int \mathrm{d}^4x\,\mathrm{i}\overline{S}_{\beta,\alpha}(x-y)\frac{\delta}{\delta\eta_\beta(x)}\,,$$

$$\frac{\delta}{\delta J'^\mu(y)} = \int \mathrm{d}^4x\,\mathrm{i}\overline{D}_{\mu\nu}(y-x)\frac{\delta}{\delta J_\nu(x)}\,,$$

由 (304) 式有

$$\begin{aligned} &U(\overline{\eta'},\eta',J')/\big(\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle\big) \\ &\quad =: \exp\Big\{-\int \mathrm{d}^4x\int \mathrm{d}^4y\Big(\overline{\psi}_\beta(x)\big[S^{-1}\overline{S}\big]_{\beta\alpha}(x-y)\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(y)} \\ &\qquad -\big[\overline{S}S^{-1}\big]_{\beta\alpha}(y-x)\psi_\alpha(x)\frac{\delta}{-\mathrm{i}\delta\eta_\beta(y)} \\ &\qquad +A_\mu(x)\big[D^{-1}\overline{D}\big]^\mu_\nu(x-y)\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J_\nu(y)}\Big)\Big\} :\, X^R[\overline{\eta},\eta,J]\,. \end{aligned} \tag{305}$$

其中 $X^R[\overline{\eta},\eta,J]$ 是截腿重整化格林函数的生成泛函, 即是说, 把它设想为 $\mathcal{Z}^R[\overline{\eta},\eta,J]$ 而求得的格林函数是截腿的. $\big[S^{-1}\overline{S}\big]_{\beta\alpha}(x-y)$ 等代表

$$\big[S^{-1}\overline{S}\big]_{\beta\alpha}(x-y) \equiv -\int \mathrm{d}^4x'\big[S(x-x')^{-1}\big]_{\beta\beta'}\overline{S}_{\beta'\alpha}(x'-y)\,,$$

$$\big[\overline{S}S^{-1}\big]_{\beta\alpha}(y-x) \equiv -\int \mathrm{d}^4x'\overline{S}_{\beta\beta'}(y-x')\big[S(x'-x)^{-1}\big]_{\beta'\alpha}\,,$$

$$\big[D^{-1}\overline{D}\big]^\mu_\nu(x-y) \equiv -\int \mathrm{d}^4x'\big[D(x-x')^{-1}\big]^{\mu\sigma}\,\overline{D}_{\sigma\nu}(x'-y)\,.$$

由于初末态的粒子是物理粒子, 而在基于质壳减除的重整化方案下, 当动量取质壳值时, 重整化的完全传播函数变成自由传播函数, 因此

$$\begin{aligned} S_{fi} = \langle f| :\, \exp\Big\{\int \mathrm{d}^4x\Big(&\overline{\psi}_\alpha(x)\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x)} - \psi_\alpha(x)\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\alpha(x)} \\ &-A_\mu(x)\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J_\mu(x)}\Big)\Big\} :\, |i\rangle\, X^R[\overline{\eta},\eta,J]\,|_{(J,\overline{\eta},\eta)=0}\,. \end{aligned} \tag{306}$$

也是由于初末态的粒子是物理粒子，此公式可再简化为

$$S_{fi}=\langle f|:\exp\Big\{\int \mathrm{d}^4x\Big(\overline{\psi}_\alpha(x)\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x)}-\psi_\alpha(x)\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\alpha(x)}$$
$$-\widetilde{A}_\mu(x)\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J_\mu(x)}\Big)\Big\}:|i\rangle\, X^R[\overline{\eta},\eta,J]\,|_{(J,\overline{\eta},\eta)=0}\ , \quad (307)$$

其中 $\widetilde{A}_\mu(x)$ 代表 $A_\mu(x)$ 的 $\Lambda=1,2$ 部分：

$$\widetilde{A}_\mu(x)=\int\frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\sum_{\Lambda=1,2}\Big(\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\Big)$$
$$+\int\frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\sum_{\Lambda=1,2}\Big(\varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\Big)\,, \quad (308)$$

而 ω 应理解为 $\{\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\Delta^2}\}_{\Delta\to0}$. 关于散射矩阵的规范不变性和幺正性，参看文献 [2] 和 [5] 的论述.

§ 9 表示散射矩阵元的 Feynman 图

按照上节的说明，散射矩阵元的一般定义如下

$$S_{fi}=\frac{\langle f|U(\infty,-\infty)|i\rangle}{\langle0|U(\infty,-\infty)|0\rangle}\,.$$

其中 $|i\rangle,|f\rangle$ 代表散射过程的初态和末态. $|0\rangle$ 代表 H_0 的真空态，满足 $\langle0|0\rangle=1$ 以及

$$b_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle=0\,,\quad b_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle=0\,,$$
$$a(\boldsymbol{k}\Lambda)|0\rangle=0\,,\quad \beta(\boldsymbol{k})|0\rangle=0\,.$$

$b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})$ 和 $b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})$ 分别产生动量为 $\boldsymbol{p}$, 螺旋性为 λ 的电子和正电子 ($\lambda=\pm1$). 在散射过程的初态和末态的光子只具有 $\Lambda=1,2$ 的两种极化态，其能量 $\omega(k)$ 是

$$\omega(k)=\sqrt{\Delta^2+\boldsymbol{k}^2}\quad(\Delta^2\to0)\,.$$

以前也提到，在 $U(\infty,-\infty)$ 的微扰展开式的正规积中，只保留零级项以及图形的任何部分至少与一根外线连通的项，就得到算符

$$U(\infty,-\infty)/\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle$$

的微扰展开．不过要记住，各种记号 (包括算符 $U(\infty,-\infty)$) 现在都是在质壳减除的重整化方案下采用的，特别是场算符代表重整化的场函数，$\mathcal{H}_I$ 含有抵消项．这里限于考虑不存在外场的情形，于是理论是时空平移不变的 (包含外场的例子见后面)．在具有确定动量的初态和末态下，S_{fi} 含有代表总的动量守恒的 δ 函数因子：

$$S_{fi}=\langle f|1|i\rangle-(2\pi)^4(i)\delta^4(P_f-P_i)R_{fi}\,, \tag{309}$$

其中 P_i 是初态粒子的动量之和，P_f 是末态粒子的动量之和．此式右边第一部分表示没有发生相互作用，第二部分的模平方代表从 $|i\rangle$ 到 $|f\rangle$ 的相对跃迁概率：

$$\left|-(2\pi)^4(\mathrm{i})\delta^4(P_f-P_i)R_{fi}\right|^2=(2\pi)^4\delta^4(0)(2\pi)^4\delta^4(P_f-P_i)|R_{fi}|^2\,,$$

R_{fi} 称为跃迁振幅矩阵元，因子 $(2\pi)^4\delta^4(0)$ 可理解为

$$(2\pi)^4\delta^4(0)=\int \mathrm{d}^4x=VT\,.$$

出现无限大时间 T 是由于从 $t=-\infty$ 到 ∞ 经历了无限长的时间，而单位时间的跃迁概率当初末态趋于 H_0 的本征态时不依赖于时间．所以不需要经过求时间微商的步骤就可以求得单位时间的相对跃迁概率的表达式：

$$\Delta w_{i,f}=(2\pi)^4\delta^4(P_f-P_i)V|R_{fi}|^2\,. \tag{310}$$

这样的跃迁概率的相对性质可以归因于极限形式的初态不能真正归一，在表示观察量时，会给出与初态的归一方法无关的

结果. 例如, 考虑初态为 $|i\rangle = a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle$ 的散射, 注意 $a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)|0\rangle, b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle$ 的模平方都是 $V^2/(2\pi)^6$, 所以 $[(2\pi)^6/V^2]\,\Delta w_{i,f}$ 是相应于初态的另一种归一方法的单位时间的相对跃迁概率 $\Delta w'_{i,f}$, 即是保证在体积 V 内发现初态光子的概率是 1, 在 V 内发现初态电子的概率也是 1. 或者说, 保证初态光子的概率密度以及初态电子的概率密度都是 $1/V$. $\Delta w'_{i,f}$ 当然正比于入射光子的概率流密度 J. 在电子的动量为零的坐标系中, 由 $J=1/V$(记住光速 c 等于 1), 得出散射到在给定范围的末态的截面是

$$\Delta\sigma = \sum (2\pi)^4\delta^4(P_f - P_i)|R_{fi}|^2(2\pi)^6\,, \tag{311}$$

其中的求和记号也包括对于所涉及的连续变量的积分. 通常还对于初态粒子的 Λ, λ 求平均. 关于由散射矩阵元表示散射截面的方法, 可参看 [5] 的更加详细的说明.

在上节也求出了用重整化的截腿格林函数表示散射矩阵元的一般公式, 即:

$$S_{fi} = \langle f| : \exp\Big\{ \int \mathrm{d}^4x \Big(\overline{\psi}_\alpha(x) \frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x)} - \psi_\alpha(x) \frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\alpha(x)} - \widetilde{A}_\mu(x) \frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J_\mu(x)} \Big) \Big\} : |i\rangle\, X^R[\overline{\eta}, \eta, J]\,|_{(J\overline{\eta}\eta)=0}\,,$$

以康普顿散射为例, $|i\rangle = a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle$, $|f\rangle = a^\dagger(\boldsymbol{k}'\Lambda')b^\dagger_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')|0\rangle$, 在基于质壳减除的重整化方案下, 重整化的两点截腿格林函数在外动量的质壳值处等于零, 故

$$S_{fi} - \langle f|i\rangle = \frac{1}{4!}\langle f| : \Big\{ \int \mathrm{d}^4x \Big(\overline{\psi}_\alpha(x) \frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x)} - \psi_\alpha(x) \frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\alpha(x)} - \widetilde{A}_\mu(x) \frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J_\mu(x)} \Big) \Big\}^4 : |i\rangle \times X^R[\overline{\eta}, \eta, J]\,|_{(J,\overline{\eta},\eta)=0}\,,$$

化简后得

$$S_{fi}-\langle f|i\rangle=\int\int\int\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4y\mathrm{d}^4z_1\mathrm{d}^4z_2\langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}_\alpha(x)|0\rangle$$
$$\times\langle 0|\psi_\beta(y)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle\langle 0|a(\boldsymbol{k}'\Lambda')\widetilde{A}_{\mu_1}(z_1)|0\rangle\langle 0|\widetilde{A}_{\mu_2}(z_2)a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)|0\rangle$$
$$\times\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x)}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\beta(y)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_1}(z_1)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_2}(z_2)}X^R[\overline{\eta},\eta,J]\mid_{(J,\overline{\eta},\eta)=0},$$

其中

$$\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_\alpha(x)}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_\beta(y)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_1}(z_1)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta J^{\mu_2}(z_2)}X^R[\overline{\eta},\eta,J]\big|_{(J,\overline{\eta},\eta)=0}$$

即是重整化格林函数

$$\langle\langle 0|T\{\psi^h_{\alpha_1}\overline{\psi}^h_{\beta_1}A^h_{\nu_1}A^h_{\nu_2}\}|0\rangle\rangle$$

的截腿函数 $G^{[\mathrm{trunc}]\mu_1\mu_2}_{\alpha\beta}(x,y,z_1,z_2)$.

又如电子正电子散射，由 $|i\rangle=b^\dagger_{1\lambda_1}(\boldsymbol{p}_1)b^\dagger_{-1\lambda_2}(\boldsymbol{p}_2)|0\rangle$, $|f\rangle=b^\dagger_{1\lambda'_1}(\boldsymbol{p}'_1)b^\dagger_{-1\lambda'_2}(\boldsymbol{p}'_2)|0\rangle$, 可求得

$$S_{fi}-\langle f|i\rangle=\int\int\int\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\mathrm{d}^4y_1\mathrm{d}^4y_2\langle 0|b_{1\lambda'_1}(\boldsymbol{p}'_1)\overline{\psi}_{\alpha_1}(x_1)|0\rangle$$
$$\times\langle 0|\psi_{\beta_1}(y_1)b^\dagger_{1\lambda_1}(\boldsymbol{p}_1)|0\rangle\langle 0|\overline{\psi}_{\alpha_2}(x_2)b^\dagger_{-1\lambda_2}(\boldsymbol{p}_2)|0\rangle$$
$$\times\langle 0|b_{-1\lambda'_2}(\boldsymbol{p}'_2)\psi_{\beta_2}(y_2)|0\rangle\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha_1}(x_1)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha_2}(x_2)}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\beta_1}(y_1)}$$
$$\times\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\beta_2}(y_2)}X^R[\overline{\eta},\eta,J]\mid_{(J,\overline{\eta},\eta)=0}.$$

其中

$$\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha_1}(x_1)}\frac{\delta}{\mathrm{i}\delta\overline{\eta}_{\alpha_2}(x_2)}\frac{\delta}{(-\mathrm{i})\delta\eta_{\beta_1}(y_1)}$$
$$\times\frac{\delta}{(-i)\delta\eta_{\beta_2}(y_2)}X^R[\overline{\eta},\eta,J]\big|_{(J,\overline{\eta},\eta)=0}$$

是重整化格林函数

$$\langle\langle 0|T\{\psi^h_{\alpha_1}\psi^h_{\alpha_2}\overline{\psi}^h_{\beta_1}\overline{\psi}^h_{\beta_2}\}|0\rangle\rangle$$

的截腿函数 $G^{[\mathrm{trunc}]}_{\alpha_1\alpha_2\beta_1\beta_2}(x_1,x_2,y_1,y_2)$.

我们知道截腿格林函数的微扰展开可以用截腿 Feynman 图来表示，而在 S_{fi} 的上述公式中的算符 $\psi,\overline{\psi}$ 和 $\widetilde{A}_\mu$ 只能与初末态粒子缩并. 从上面的例子看到，由这样的缩并得出的 $\langle 0|\psi b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle$, $\langle 0|a(\boldsymbol{k}\Lambda)\widetilde{A}_\mu|0\rangle$ 等，正好可以看成一种新的外线的贡献，所以散射矩阵元的微扰展开可以用重整化的截腿格林函数的图形装配上这种新的外线所成的图形来表示. 计算算符 $U(\infty,-\infty)/\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle$ 的微扰展开的各种正规积在初末态的矩阵元，当然会直接得出这样的结果. 这种计算即是将有贡献的正规积中的场算符与初末态粒子缩并成所说的新外线，其余的初末态粒子的算符则相互缩并，从而形成表示散射矩阵元的微扰展开的 Feynman 图. 按照基于质壳减除的重整化方案的含义，有贡献的图形正是由截腿 Feynman 图安装上这类新外线而成的. 在规定外线的定义时，要使每一根实外线在与它连接的顶点遇到的另一实线段具有一致的方向. 内线和顶点的意义以及由图形写表达式的方法，都保持和从前一样. 此外，表示散射矩阵元的图形要结合时间的流向来理解. 初态和末态的时间当然是最早 (无限的过去) 和最晚 (无限的未来). 例如设时间的流向为自下而上，则在坐标空间的图形可以包含的外线有如下几类：

(1) $\langle 0|\psi(x)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle$ 被表示为从下方连接到图形中 x 点、方向与时间的流向一致 (朝上) 的有向实线段，在其下端标明相应的初态电子的 λ 和 p, 其中 p^0 理解为 $\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$, 记为 E(现在不再需要写成 $|E|$). 通常也说这样的外线描述散射过程中初态电子的消失.

(2) $\langle 0|\overline{\psi}(x)b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle$ 被表示为从下方连接到图形中 x 点、方向与时间的流向相反 (朝下) 的有向实线段，在其下端标明相应

的初态正电子的 λ 和 p, 其中 p^0 理解为 $E=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$. 它描述散射过程中初态正电子的消失.

(3) $\langle 0|\widetilde{A}_\mu(x)a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)|0\rangle$ 被表示为从下方连接到图形中 x 点的波浪线段, 它描述散射过程中初态光子的消失. 指标 μ 与 x 处顶点的指标缩并. 在线段下端标明相应的初态光子的 Λ 和 k, 其中 k^0 理解为 $\omega(k)$.

(4) $\langle 0|b_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\overline{\psi}(x)|0\rangle$ 被表示为从上方连接到图形中 x 点、方向与时间的流向一致的有向实线段, 描述散射过程中末态电子的产生. 在其上端标明相应的末态电子的 λ 和 p, p^0 理解为 $E=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$.

(5) $\langle 0|b_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\psi(x)|0\rangle$ 被表示为从上方连接到图形中 x 点、方向与时间的流向相反的有向实线段, 描述散射过程中末态正电子的产生. 在其上端标明相应的末态找电子的 λ 和 p, p^0 理解为 $E=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$.

(6) $\langle 0|a(\boldsymbol{k}\Lambda)\widetilde{A}_\mu(x)|0\rangle$ 被表示为从上方连接到图形中 x 点的波浪线段, 描述散射过程中末态光子的产生. 指标 μ 与 x 处顶点的指标缩并. 在线段上端标明相应的末态光子的 Λ 和 k, k^0 理解为 $\omega(k)$.

根据第八章给出的算符 $\psi(\boldsymbol{x})$ 的表达式, 在现在的记号下有:

$$\psi(x)=\int\frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}}\sum_\lambda\left\{b_{1\lambda}(\boldsymbol{p})U_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}+b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})V_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}\right\},\tag{312}$$

$$\overline{\psi}(x)=\int\frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}}\sum_\lambda\left\{b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\overline{U}_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}+b_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\overline{V}_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}\right\},\tag{313}$$

其中

$$U_\lambda(\boldsymbol{p})=\frac{1}{\sqrt{2E(E+m)}}\begin{pmatrix}(E+m)\chi_\lambda(\boldsymbol{p})\\(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\chi_\lambda(\boldsymbol{p})\end{pmatrix},\tag{314}$$

$$V_\lambda(\boldsymbol{p})=\frac{1}{\sqrt{2E(E+m)}}\begin{pmatrix}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\,\mathrm{i}\,\chi_{-\lambda}(\boldsymbol{p})\\(E+m)\,\mathrm{i}\,\chi_{-\lambda}(\boldsymbol{p})\end{pmatrix}, \tag{315}$$

而

$$\overline{U}_\lambda(\boldsymbol{p})=\left(\widetilde{U}_\lambda(\boldsymbol{p})\right)^*\gamma^0,\quad \overline{V}_\lambda(\boldsymbol{p})=\left(\widetilde{V}_\lambda(\boldsymbol{p})\right)^*\gamma^0. \tag{316}$$

由此以及

$$\begin{aligned}\widetilde{A}_\mu(x)=&\int\frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\sum_{\Lambda=1,2}\left(\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right)\\&+\int\frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\sum_{\Lambda=1,2}\left(\varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right),\end{aligned}$$

得

$$\langle 0|\psi(x)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}U_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}, \tag{317}$$

$$\langle 0|\overline{\psi}(x)b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}\overline{V}_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}, \tag{318}$$

$$\langle 0|\widetilde{A}_\mu(x)a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \tag{319}$$

$$\langle 0|b_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\overline{\psi}(x)|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}\overline{U}_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}, \tag{320}$$

$$\langle 0|b_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\psi(x)|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}V_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}, \tag{321}$$

$$\langle 0|a(\boldsymbol{k}\Lambda)\widetilde{A}_\mu(x)|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}. \tag{322}$$

所以，由坐标空间的重整化的截腿格林函数和外线因子表达的散射矩阵元在对各外线因子的时空坐标积分之后，正好使原来的重整化的截腿格林函数变换到动量空间，并使外线缺少了依赖时空坐标的指数因子．即是说，散射矩阵元的微扰展开可以用动量空间的重整化的截腿格林函数的图形装配上适当定义的外线来表

示. 为此, 应当使外线也具有其线段动量, 以保证在图形中与外线连接的顶点也符合通常形式的动量守恒条件, 即离开一个顶点的线段的动量之和等于进入该顶点的线段的动量之和. 由此以及参考坐标空间的外线的定义, 将动量空间图形的外线的确切含义规定如下 (仍然设时间的流向为自下而上) :

(1) 线段动量是 p 的、从下方顺着时间的流向连接到图形中的有向实外线代表 $U_\lambda(\boldsymbol{p})$, 描述散射过程中一个螺旋度为 λ、动量为 p 的初态电子的消失. 通常在其下端标出 λ. p^0 理解为 $E=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$.

(2) 线段动量是 $-p$ 的、从下方逆着时间的流向连接到图形中的有向实外线代表 $\overline{V}_\lambda(\boldsymbol{p})$, 描述一个螺旋度为 λ、动量为 p 的初态正电子的消失. 通常在其下端标出 λ. p^0 理解为 $E=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$.

(3) 线段动量是 k 的、从下方顺着时间的流向连接到图形中的波浪外线代表 $\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)$, 描述具有确定 Λ 而动量为 k 的初态光子的消失. k^0 理解为 $\omega(k)$. 指标 μ 与所连接顶点的指标缩并. 通常在线段下端标出 Λ.

(4) 线段动量是 p 的、从上方顺着时间的流向连接到图形中的有向实外线代表 $\overline{U}_\lambda(\boldsymbol{p})$, 描述一个螺旋度为 λ、动量为 p 的末态电子的产生. 通常在其下端标出 λ. p^0 理解为 $E=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$.

(5) 线段动量是 $-p$ 的、从上方逆着时间的流向连接到图形中的有向实外线代表 $V_\lambda(\boldsymbol{p})$, 描述一个螺旋度为 λ、动量为 p 的末态正电子的产生. 通常在其下端标出 λ. p^0 理解为 $E=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$.

(6) 线段动量是 k 的、从上方顺着时间的流向连接到图形中的波浪外线代表 $\varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)$, 描述具有确定 Λ 而动量为 k 的末态光子的产生. k^0 理解为 $\omega(k)$. 指标 μ 与所连接顶点的指标缩并. 通常在线段下端标出 Λ.

按照这样的规定, 在用动量空间的图形表示散射矩阵元时, 也可以不标出光子外线 (波浪外线) 的方向, 只需要记住它们的方向总是与时间的流向一致.

在康普顿散射的例子中，基于质壳减除的重整化格林函数

$$\langle\langle 0|T\{\psi^h_{\alpha_1}\overline{\psi}^h_{\beta_1}A^h_{\nu_1}A^h_{\nu_2}\}|0\rangle\rangle$$

是连接的．因此，在准至树图级时它包括两种简单的图形，在截腿后都变成一根连接着两个顶点的实线段．或者说，在树图级近似下，$S_{fi}-\langle f|1|i\rangle$ 来自算符

$$U(\infty,-\infty)/\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle$$

的微扰展开中如下的正规积：

$$\iint \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2 : A_\mu(x_1)A_\nu(x_2) : \times : \overline{\psi}(x_1)(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\mathrm{i}\,S(x_1-x_2)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)\psi(x_2) :,$$

故

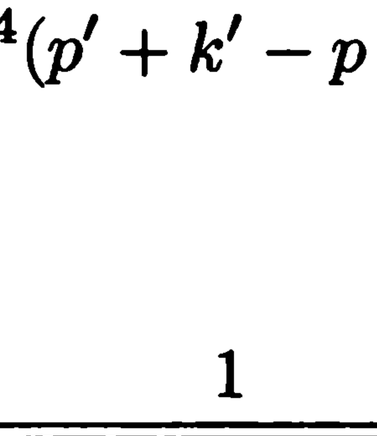
$$S_{fi}-\langle f|1|i\rangle \approx (2\pi)^4\delta^4(p'+k'-p-k)B_C\{C_1+C_2\}\,, \tag{323}$$

其中

$$B_C=\frac{1}{\sqrt{(2\omega)(2\omega')(2\pi)^{12}}}\,, \tag{324}$$

$$C_1=\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\mathrm{i}\,S(l)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)U_\lambda(\boldsymbol{p})\varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}'\Lambda')\varepsilon_\nu(\boldsymbol{k}\Lambda)$$

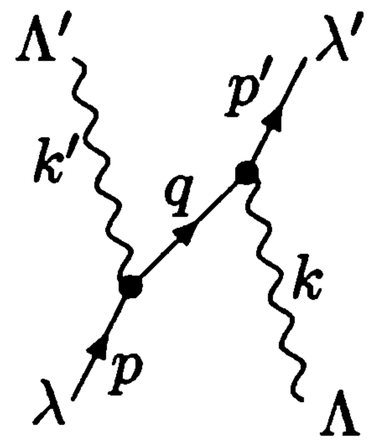
$=$



而

$$C_2=\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\mathrm{i}\,S(q)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)U_\lambda(\boldsymbol{p})\varepsilon^*_\nu(\boldsymbol{k}'\Lambda')\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)$$

$=$



这两个图形中的 l 和 q 不是独立内动量，它们分别为

$$l = p + k = p' + k', \quad q = p - k' = p' - k.$$

在电子 - 正电子散射的例子中，准至树图级时，来自算符

$$U(\infty, -\infty)/\langle 0|U(\infty, -\infty)|0\rangle$$

的微扰展开的有贡献的正规积是

$$\frac{1}{2}\int\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\,\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(x_1 - x_2)$$
$$\times :\overline{\psi}(x_1)(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\psi(x_1)\overline{\psi}(x_2)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)\psi(x_2):,$$

故

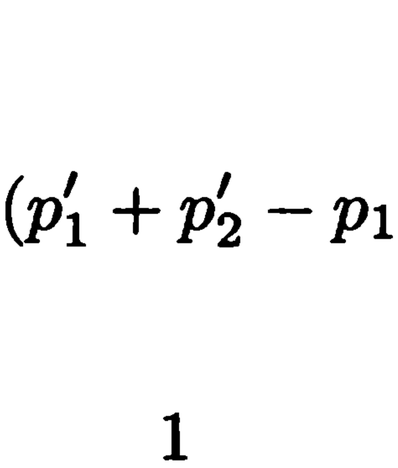
$$S_{fi} - \langle f|1|i\rangle \approx (2\pi)^4\delta^4(p_1' + p_2' - p_1 - p_2)B_F\{F_1 - F_2\},$$

其中

$$B_F = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{12}}},$$

$$F_1 = \overline{U}_{\lambda_1'}(\boldsymbol{p}_1')(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)V_{\lambda_2'}(\boldsymbol{p}_2')\overline{V}_{\lambda_2}(\boldsymbol{p}_2)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)U_{\lambda_1}(\boldsymbol{p}_1)\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(k)$$

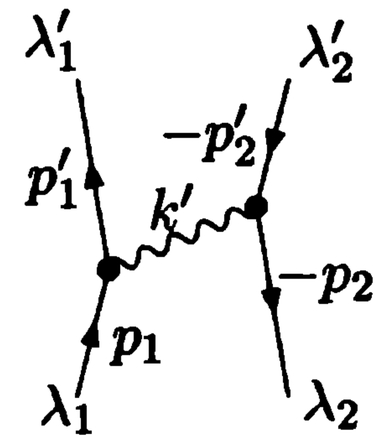
$=$



而

$$F_2 = \overline{U}_{\lambda_1'}(\boldsymbol{p}_1')(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)U_{\lambda_1}(\boldsymbol{p}_1)\overline{V}_{\lambda_2}(\boldsymbol{p}_2)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)V_{\lambda_2'}(\boldsymbol{p}_2')\mathrm{i}\,D_{\mu\nu}(k')$$

$=$



这两个图形中光子内线可以 (随意地) 指定为向下的，于是动量守恒条件给出

$$k = -p_1 - p_2 = -p_1' - p_2', \quad k' = p_1' - p_1 = p_2 - p_2'.$$

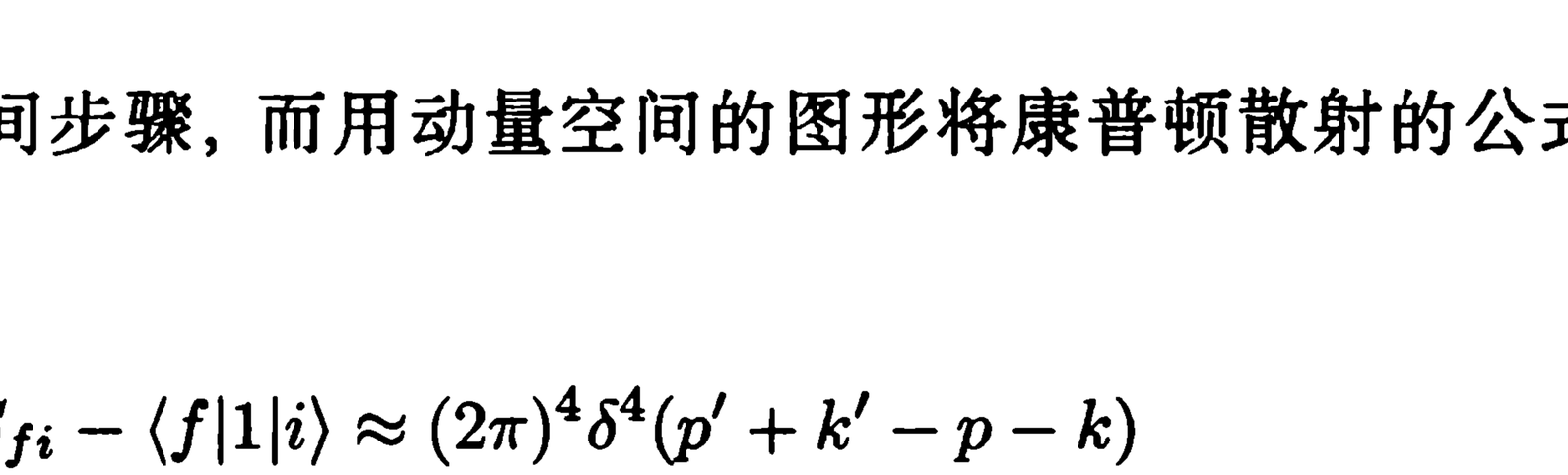
在下一级近似中，当然要在基于质壳减除的重整化方案下将所需的截腿格林函数确定至一圈级. 为此，可借助含有一圈级抵消项的 $\mathcal{H}_I$ 由 $\langle f|U(\infty,-\infty)|\mathrm{i}\rangle/\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle$ 直接计算，这种抵消项即是如 §6 (182) 式所示的 $\Delta\mathcal{H}_{I,1}$:

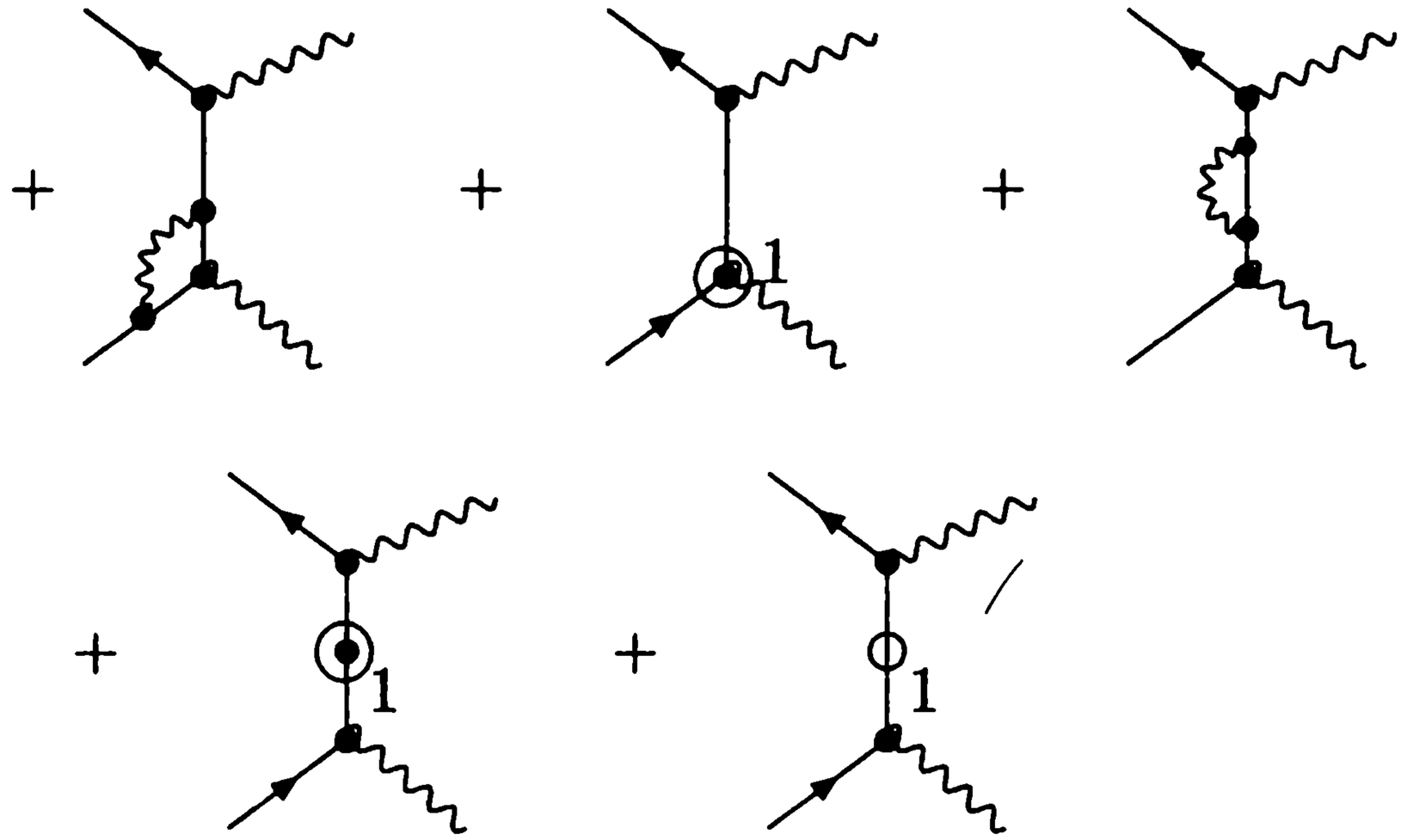
$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{H}_{I,1}(x) = -b_1 :\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x): - \delta_1 :\overline{\psi}(x)\psi(x): \\ + e\,c_1 :\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x): . + \frac{1}{4}f_1 : F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x): .\end{aligned}$$

这里不写出中间步骤，而用动量空间的图形将康普顿散射的公式表示为:

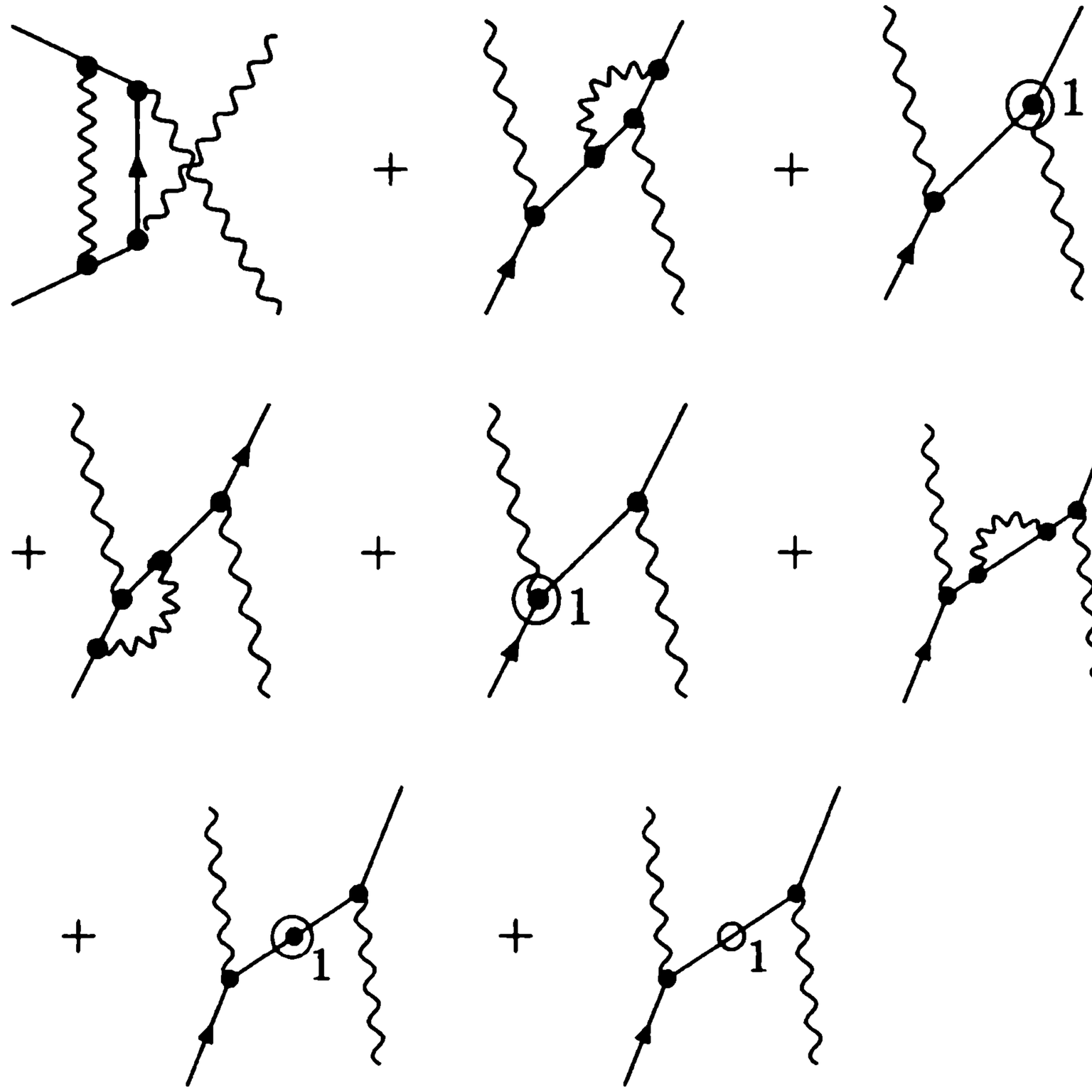
$$\begin{aligned}S_{fi} - \langle f|1|i\rangle \approx (2\pi)^4\delta^4(p' + k' - p - k) \\ \times B_C\{C_1 + C_2 + \delta C_1 + \delta C_2\}, \qquad (325)\end{aligned}$$

其中 δC_1 是:





而 δC_2 是：



这样的表达式几乎是自明的，省去的记号可以从 C_1 和 C_2 的图形看出. 发散的 Feynman 积分应理解为适当的正规化形式，独立的内动量是积分变量，相应的 4 维积分体元带有因子 $(2\pi)^{-4}$.

式中每个不含抵消项顶点的紫外发散的图形与随后的含抵消项顶点的图形相加的结果都是紫外有限的.

§10 场算符和态矢量的 $\mathscr{C}$, $\mathscr{P}$, $\mathscr{T}$ 变换

在第八章和本章§1给出的 $\psi, \overline{\psi}$ 和 A_μ 的正反粒子共轭和空间反射变换的表达式, 能够方便地过渡到量子场论的算符形式, 时间反演变换则不是这样. 为了便于对比, 这里重写一下这些旧变换式.

正反粒子共轭 由 $\psi(x), \overline{\psi}(x)$ 和 $A_\mu(x)$ 随 t 的变化描写的运动过程在正反粒子共轭下变为 $\psi^C(x), \overline{\psi}^C(x)$ 和 $A_\mu^C(x)$ 描写的运动过程, 而

$$\psi^C(x) = \eta_c C \widetilde{\overline{\psi}}(x)\,,$$
$$\overline{\psi}^C(x) = -\eta_c^* \widetilde{\psi}(x) C^{-1}\,,$$
$$A_\mu^C(x) = -A_\mu(x)\,.$$

其中系数 η_c 可以限制为相因子: $\eta_c^* \eta_c = 1$, 而

$$C = \mathrm{i}\gamma^2\gamma^0\,.$$

空间反射 参考系 K 的 XYZ 轴反向变成参考系 K' 的 $X'Y'Z'$ 轴, 使得在 K 中坐标为 x 的点在 K' 中坐标为

$$x'^0 = x^0,\quad x'^k = -x^k\,.$$

假设在 K 中由 $\psi, \overline{\psi}$ 和 A_μ 描写的运动过程在 K' 中由 $\psi', \overline{\psi'}$ 和 A'_ν 描写, 则在相同时空点的变换式为

$$\psi'(x') = \eta_p \gamma^0 \psi(x)\,,$$

$$\overline{\psi'}(x') = \overline{\psi}(x)\gamma^0 \eta_p^*\,,$$

$$A'_\mu(x') = A^\mu(x)\,.$$

其中系数 η_p 也可以限制为相因子：$\eta_p^*\eta_p = 1$.

时间反演　参考系 K 中坐标为 x 的点在时间反演形成的参考系 K' 中坐标为

$$x'^0 = -x^0,\quad x'^k = x^k\,.$$

设在 K 中由 $\psi, \overline{\psi}$ 和 A_μ 描写的运动过程在 K' 中由 ψ', $\overline{\psi'}$ 和 A'_ν 描写，则

$$\psi'(x') = U^*\psi^*(x)\,,\quad \overline{\psi'}(x') = \widetilde{\psi}(x)\widetilde{U}\gamma^0\,,$$

$$A'_\mu(x') = A^\mu(x)\,,$$

其中

$$U = \lambda_u\gamma^1\gamma^3,\quad \lambda_u^*\lambda_u = 1\,.$$

为了简便，上面没有给函数 $\psi(x)$ 等附加特别的记号，只要不和相互作用绘景的场算符混淆即可.

在量子场论的情形，由于在本书中是采用质壳减除重整化方案的重整化场函数作为基本变量来定义散射过程的初末态和构造散射矩阵的，这里要确定代表这种重整化场函数的算符的变换式. 沿用以前的记号，海森伯绘景的场算符记为 $\psi^h(x), \overline{\psi}^h(x)$ 和 $A^h_\mu(x)$, 其中 $\overline{\psi}^h(x)$ 代表 $\{\psi^h(x)\}^\dagger\gamma^0$. 不带指标 h 时是相互作用绘景的场算符，而 $\psi(\boldsymbol{x})$, $\overline{\psi}(\boldsymbol{x})$ 和 $A_\mu(\boldsymbol{x})$ 则是薛定谔绘景的的算符.

故

$$\begin{aligned}
\psi^h(x) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{H}t}\psi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{H}t}\,,\\
\overline{\psi}^h(x) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{H}t}\overline{\psi}(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{H}t}\,,\\
A^h_\mu(x) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{H}t}A_\mu(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{H}t}\,.
\end{aligned}$$

以及

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t}\psi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t}\,,$$
$$\overline{\psi}(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t}\overline{\psi}(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t}\,,$$
$$A_\mu(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t}A_\mu(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t}\,.$$

其中 H 是总哈密顿量算符，H_0 即是用于描述散射过程的初末态的自由粒子的哈密顿量算符.

首先考虑相互作用绘景. 正反粒子共轭和空间反射都是分立的幺正变换，将态矢量的变换算符分别记为 $\mathscr{C}$ 和 $\mathscr{P}$，则

$$\mathscr{C}^\dagger = \mathscr{C}^{-1} = \mathscr{C}\,, \tag{326}$$
$$\mathscr{C}\psi(x)\mathscr{C}^{-1} = \eta_c C\widetilde{\overline{\psi}}(x) = \eta_c C\widetilde{\gamma^0}\ \widetilde{\psi}^\dagger(x)\,, \tag{327}$$
$$\mathscr{C}\overline{\psi}(x)\mathscr{C}^{-1} = -\eta_c^*\widetilde{\psi}(x)C^{-1}\,, \tag{328}$$
$$\mathscr{C}A_\mu(x)\mathscr{C}^{-1} = -A_\mu(x)\,. \tag{329}$$

以及

$$\mathscr{P}^\dagger = \mathscr{P}^{-1} = \mathscr{P}\,, \tag{330}$$
$$\mathscr{P}\,\psi(x')\mathscr{P}^{-1} = \eta_p\gamma^0\psi(x)\,, \tag{331}$$
$$\mathscr{P}\,\overline{\psi}(x')\mathscr{P}^{-1} = \overline{\psi}(x)\gamma^0\eta_p^*\,, \tag{332}$$
$$\mathscr{P}\,A_\mu(x')\mathscr{P}^{-1} = A^\mu(x)\,. \tag{333}$$
$$(x'^0 = x^0,\quad x'^k = -x^k)$$

时间反演变换是反幺正的，态矢量的变换可以按照 Wigner 或者 Schwinger 的方法来定义，这里采用 Wigner 的方法，即是右矢量 $|\Psi\rangle$ 在时间反演下变成的 $\mathscr{T}|\Psi\rangle$ 仍然是右矢量. 考虑到 A_μ 和 $:\overline{\psi}\gamma^\mu\psi:$ 应当像经典电磁势、电磁流那样变换，$\mathscr{T}$ 被规定为如

下的反幺正算符 (参看文献 [7] 和其中所引文献)

$$\mathscr{T}\,\mathrm{i} = -\mathrm{i}\,\mathscr{T}\,, \tag{334}$$

$$\overline{\mathscr{T}|\Psi_1\rangle}\cdot\mathscr{T}|\Psi_2\rangle = \langle\Psi_2|\Psi_1\rangle = \left\{\overline{|\Psi_1\rangle}\cdot|\Psi_2\rangle\right\}^*, \tag{335}$$

$$\mathscr{T}\,\psi(x')\,\mathscr{T}^{-1} = T\,\psi(x)\,, \tag{336}$$

$$\mathscr{T}\,\overline{\psi}(x')\,\mathscr{T}^{-1} = \overline{\psi}(x)T^\dagger\,, \tag{337}$$

$$\mathscr{T}\,A_\mu(x')\mathscr{T}^{-1} = A^\mu(x)\,, \tag{338}$$

$$(x'^0 = -x^0,\quad x'^k = x^k\,)$$

其中

$$T = \mathrm{i}\gamma^1\gamma^3\,. \tag{339}$$

虽然 $\mathscr{T}$ 是反幺正算符，下式仍然对于作用于态矢量空间的任意线性算符 $\mathcal{Q}$ 都成立 (也见第五章)

$$\left\{\mathscr{T}\,\mathcal{Q}\mathscr{T}^{-1}\right\}^\dagger = \mathscr{T}\,\mathcal{Q}^\dagger\mathscr{T}^{-1}\,.$$

实际上，任意矩阵元 $\langle\Psi_1|\left\{\mathscr{T}\,\mathcal{Q}\mathscr{T}^{-1}\right\}^\dagger|\Psi_2\rangle$ 可表示为

$$\begin{aligned}\overline{\mathscr{T}\,\mathcal{Q}\mathscr{T}^{-1}|\Psi_1\rangle}\cdot|\Psi_2\rangle &= \left\{\overline{\mathcal{Q}\mathscr{T}^{-1}|\Psi_1\rangle}\cdot\mathscr{T}^{-1}|\Psi_2\rangle\right\}^* \\ &= \left\{\overline{\mathscr{T}^{-1}|\Psi_1\rangle}\cdot\mathcal{Q}^\dagger\,\mathscr{T}^{-1}|\Psi_2\rangle\right\}^* = \langle\Psi_1|\,\mathscr{T}\mathcal{Q}^\dagger\,\mathscr{T}^{-1}|\Psi_2\rangle\,.\end{aligned}$$

由于 H_0,$\psi(x)$,$\overline{\psi}(x)$ 和 $A_\mu(x)$ 是以 $\mathcal{L}^{(00)}$ 为拉氏函数经过正则量子化确定的哈密顿量算符和场算符，不妨认定 H_0 是与 $\mathscr{C}$,$\mathscr{P}$,$\mathscr{T}$ 对易的 (可以验证，也见文献 [7])，于是 $\mathscr{C}$,$\mathscr{P}$,$\mathscr{T}$ 也即是薛定谔绘景中的变换算符.

现在来求出总哈密顿量 H 的耦合项和抵消项所包含的以下几种厄米算符的变换式：

$$\begin{aligned}&\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x)\,,\qquad \overline{\psi}(x)\psi(x)\,,\\ &\overline{\psi}(x)\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x) - \left\{\partial_\mu\overline{\psi}(x)\right\}\mathrm{i}\gamma^\mu\psi(x)\,,\\ &F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\,,\qquad \left(\partial^\mu A_\mu(x)\right)^2\,.\end{aligned}$$

如 §6 所述，H 的耦合项和抵消项是用这些算符的正规积在 $t=0$ 时经过空间坐标积分来构成的.

在 $\mathscr{C}$ 变换下，有

$$\begin{aligned}\mathscr{C}\,\overline{\psi}(x)\psi(x)\,\mathscr{C}^{-1} &= -\psi_\alpha(x)\overline{\psi}_\alpha(x)\\ &=: \overline{\psi}(x)\psi(x): + \langle 0|\mathscr{C}\,\overline{\psi}(x)\psi(x)\,\mathscr{C}^{-1}|0\rangle\,,\end{aligned}$$

而 $|0\rangle$ 代表没有粒子的初态或末态，当然是 $\mathscr{C}$ 不变的 (也是 $\mathscr{P}$,$\mathscr{T}$ 不变的), 可见

$$\mathscr{C}\,\overline{\psi}(x)\psi(x)\,\mathscr{C}^{-1} = \overline{\psi}(x)\psi(x)\,.$$

其次，借助 $C^{-1}\gamma^\mu C = -\widetilde{\gamma^\mu}$, 有

$$\begin{aligned}\mathscr{C}\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\,\mathscr{C}^{-1} &= \psi_\beta(x)\gamma^\mu_{\alpha\beta}\overline{\psi}_\alpha(x)\,,\\ &= -:\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x): + \langle 0|\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\,|0\rangle\,,\end{aligned}$$

故

$$\mathscr{C}\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\mathscr{C}^{-1} = \overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x) - 2:\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x):\,.$$

类似地，由

$$\begin{aligned}\mathscr{C}\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)\,\mathscr{C}^{-1} &= \psi_\alpha(x)\gamma^\mu_{\beta\alpha}\partial_\mu\overline{\psi}_\beta(x)\,,\\ \mathscr{C}\,\{\partial_\mu\overline{\psi}(x)\}\gamma^\mu\psi(x)\,\mathscr{C}^{-1} &= \partial_\mu\psi_\alpha(x)\gamma^\mu_{\beta\alpha}\overline{\psi}_\beta(x)(x)\,,\end{aligned}$$

改写为

$$\begin{aligned}&\mathscr{C}\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)\,\mathscr{C}^{-1}\\ &\qquad = -:\{\partial_\mu\overline{\psi}(x)\}\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x):+\langle 0|\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)\,|0\rangle\,,\\ &\mathscr{C}\,\{\partial_\mu\overline{\psi}(x)\}\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)\,\mathscr{C}^{-1}\\ &\qquad = -:\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x):+\langle 0|\,\{\partial_\mu\overline{\psi}(x)\}\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)|0\rangle\,,\end{aligned}$$

可看出

$$\begin{aligned}&\mathscr{C}\,\overline{\psi}(x)\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)\,\mathscr{C}^{-1} - \mathscr{C}\,\{\partial_\mu\overline{\psi}(x)\}\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)\,\mathscr{C}^{-1}\\ &\qquad = \overline{\psi}(x)\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x) \;-\; \{\partial_\mu\overline{\psi}(x)\}\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)\,,\end{aligned}$$

这样也就知道：

$$\mathscr{C}:\overline{\psi}(x)\psi(x):\mathscr{C}^{-1}=:\overline{\psi}(x)\psi(x):,$$

$$\mathscr{C}:\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x):\mathscr{C}^{-1}=-:\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x):,$$

$$\begin{aligned}\mathscr{C}:\overline{\psi}(x)\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x):\mathscr{C}^{-1}&-\mathscr{C}:\{\partial_{\mu}\overline{\psi}(x)\}\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x):\mathscr{C}^{-1}\\&=:\overline{\psi}(x)\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x):-:\{\partial_{\mu}\overline{\psi}(x)\}\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x):,\end{aligned}$$

$$\mathscr{C}:\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x):A_{\mu}(x)\mathscr{C}^{-1}=:\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x):A_{\mu}(x).$$

至于 $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ 和 $\left(\partial^{\mu}A_{\mu}(x)\right)^{2}$，显然是 $\mathscr{C}$ 不变的．在 $\mathscr{P}$ 变换下，可求得

$$\mathscr{P}\,\overline{\psi}(x)\psi(x)\,\mathscr{P}^{-1}=\overline{\psi}(x)\psi(x)\big|_{\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}},$$

$$\mathscr{P}\,\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x)\,\mathscr{P}^{-1}=\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x)\big|_{\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}},$$

$$\mathscr{P}\,\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x)\,\mathscr{P}^{-1}=\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x)\big|_{\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}},$$

$$\mathscr{P}\,\{\partial_{\mu}\overline{\psi}(x)\}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x)\,\mathscr{P}^{-1}=\{\partial_{\mu}\overline{\psi}(x)\}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x)\big|_{\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}},$$

$$\mathscr{P}\,F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)\,\mathscr{P}^{-1}=F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)\big|_{\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}},$$

$$\mathscr{P}\left(\partial^{\mu}A_{\mu}(x)\right)^{2}\mathscr{P}^{-1}=\left(\partial^{\mu}A_{\mu}(x)\right)^{2}\big|_{\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}}.$$

在 $\mathscr{T}$ 变换下，注意 $\mathscr{T}\mathrm{i}\gamma^{\mu}\mathscr{T}^{-1}=-\mathrm{i}(\gamma^{\mu})^{*}$, $T^{\dagger}(\gamma^{\mu})^{*}T=\gamma^{0}\gamma^{\mu}\gamma^{0}$, 有

$$\mathscr{T}\,\overline{\psi}(x)\psi(x)\,\mathscr{T}^{-1}=\overline{\psi}(x)\psi(x)\big|_{t\to-t},$$

$$\mathscr{T}\,\overline{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x)\,\mathscr{T}^{-1}=\overline{\psi}(x)\gamma_{\mu}\psi(x)\big|_{t\to-t},$$

$$\mathscr{T}\,\overline{\psi}(x)\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x)\,\mathscr{T}^{-1}=\overline{\psi}(x)\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x)\big|_{t\to-t},$$

$$\mathscr{T}\,\{\partial_{\mu}\overline{\psi}(x)\}\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x)\,\mathscr{T}^{-1}=\{\partial_{\mu}\overline{\psi}(x)\}\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x)\big|_{t\to-t},$$

$$\mathscr{T}:F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)\,\mathscr{T}^{-1}=F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)\big|_{t\to-t},$$

$$\mathscr{T}\left(\partial^{\mu}A_{\mu}(x)\right)^{2}\mathscr{T}^{-1}=\left(\partial^{\mu}A_{\mu}(x)\right)^{2}\big|_{t\to-t}.$$

根据 §6 所示的 H 的一般形式和以上结果可证实 $\mathscr{C},\mathscr{P},\mathscr{T}$ 与

H 对易：

$$\mathscr{C} H \mathscr{C}^{-1} = H , \tag{340}$$

$$\mathscr{P} H \mathscr{P}^{-1} = H , \tag{341}$$

$$\mathscr{T} H \mathscr{T}^{-1} = H . \tag{342}$$

可见它们也是海森伯绘景中表示反粒子共轭、空间反射和时间反演变换的算符，即

$$\mathscr{T} \psi^h(x') \mathscr{T}^{-1} = T \psi^h(x) , \tag{343}$$

$$\mathscr{T} \overline{\psi}^h(x') \mathscr{T}^{-1} = \overline{\psi}^h(x) T^\dagger , \tag{344}$$

$$\mathscr{T} A_\mu^h(x') \mathscr{T}^{-1} = A^{\mu h}(x) . \tag{345}$$

$$(x'^0 = -x^0, \quad x'^k = x^k)$$

由此又知道，$\mathscr{C}$,$\mathscr{P}$,$\mathscr{T}$ 与 H 对易表明量子电动力学理论在正反粒子共轭、空间反射和时间反演下保持不变.

再看算符 $U(t,t_0)$ 的变换，由 $U(t,t_0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-t_0)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht_0}$ 看出，它与 $\mathscr{C}$，$\mathscr{C}$ 是可对易的，但是 $\mathscr{T} U(t,t_0)\mathscr{T}^{-1}$ 等于 $U(-t,-t_0)$，特别是 $\mathscr{T} U(\infty,-\infty)\mathscr{T}^{-1} = U(-\infty,\infty) = \{U(\infty,-\infty)\}^\dagger$.

下面说明初末态粒子的产生和消灭算符的 $\mathscr{C}$,$\mathscr{P}$,$\mathscr{T}$ 变换. 由变换式 (328), (330) 和场函数的平面波展开式得

$$\begin{aligned}
&\int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda \mathscr{C} b_{1\lambda}(\boldsymbol{p}) \mathscr{C}^{-1} U_\lambda(\boldsymbol{p}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px} \\
&\quad + \int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda \mathscr{C} b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p}) \mathscr{C}^{-1} V_\lambda(\boldsymbol{p}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}px} \\
&= \eta_c C \int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p}) \gamma^0 U^*_\lambda(\boldsymbol{p}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}px} \\
&\quad + \eta_c C \int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda b_{-1\lambda}(\boldsymbol{p}) \gamma^0 V^*_\lambda(\boldsymbol{p}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px} ,
\end{aligned}$$

$$\int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{C}\, a(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{C}^{-1}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

$$+ \int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{C}\, a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{C}^{-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

$$= -\int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

$$- \int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,,$$

注意 $C\gamma^0 U^*_\lambda(\boldsymbol{p}) = -\mathrm{i}\lambda\, V_\lambda(\boldsymbol{p})$, $C\gamma^0 V^*_\lambda(\boldsymbol{p}) = -\mathrm{i}\lambda\, U_\lambda(\boldsymbol{p})$, 即得

$$\mathscr{C}\, b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\mathscr{C}^{-1} = -\mathrm{i}\,\eta_c\lambda\, b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\,,$$

$$\mathscr{C}\, b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\mathscr{C}^{-1} = \mathrm{i}\,\eta^*_c\lambda\, b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\,,$$

$$\mathscr{C}\, a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{C}^{-1} = -\,a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\,,$$

$$\mathscr{C}\, b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle = -\mathrm{i}\,\eta_c\lambda\, b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle\,,$$

$$\mathscr{C}\, b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle = \mathrm{i}\,\eta^*_c\lambda\, b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle\,,$$

$$\mathscr{C}\, a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)|0\rangle = -\,a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)|0\rangle\,.$$

所以 $\mathscr{C}$ 使电子、正电子互相变换而 $\boldsymbol{p}$ 和 λ 保持不变. 单光子态是 $\mathscr{C}$ 的奇本征态 (本征值为 -1), 也说光子具有奇的 $\mathscr{C}$ 宇称, 没有正反粒子的差别.

再将 (332) 式写成

$$\int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda \mathscr{P}\, b_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\mathscr{P}^{-1}U_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}$$

$$+ \int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda \mathscr{P}\, b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\mathscr{P}^{-1}V_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}$$

$$= \eta_p \int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda b_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\gamma^0 U_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}\big|_{\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}}$$

$$+ \eta_p \int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\gamma^0 V_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}\big|_{\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}}\,,$$

记住 $\chi_\lambda(-\boldsymbol{p})$ 理解为 $\mathrm{i}\chi_{-\lambda}(\boldsymbol{p})$(第八章), 可将此式右边改为

$$\begin{aligned}
&\eta_p \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda b_{1\lambda}(-\boldsymbol{p})\gamma^0 U_\lambda(-\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px} \\
&\qquad + \eta_p \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda b^\dagger_{-1\lambda}(-\boldsymbol{p})\gamma^0 V_\lambda(-\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}px} \\
&= \mathrm{i}\eta_p \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda b_{1\lambda}(-\boldsymbol{p}) U_{-\lambda}(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px} \\
&\qquad - \mathrm{i}\eta_p \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda b^\dagger_{-1\lambda}(-\boldsymbol{p}) V_{-\lambda}(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}\,,
\end{aligned}$$

这里用到

$$\gamma^0 U_\lambda(-\boldsymbol{p}) = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2E(E+m)}} \begin{pmatrix} (E+m)\chi_{-\lambda}(\boldsymbol{p}) \\ (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\chi_{-\lambda}(\boldsymbol{p}) \end{pmatrix} = \mathrm{i}U_{-\lambda}(\boldsymbol{p})\,,$$

以及

$$\gamma^0 V_\lambda(-\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\sqrt{2E(E+m)}} \begin{pmatrix} (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\chi_\lambda(\boldsymbol{p}) \\ (E+m)\chi_\lambda(\boldsymbol{p}) \end{pmatrix} = -\mathrm{i}V_{-\lambda}(\boldsymbol{p})\,,$$

可见

$$\begin{aligned}
\mathscr{P} b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\mathscr{P}^{-1} &= -\mathrm{i}\eta_p^* b^\dagger_{1-\lambda}(-\boldsymbol{p})\,, \\
\mathscr{P} b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\mathscr{P}^{-1} &= -\mathrm{i}\eta_p b^\dagger_{-1-\lambda}(-\boldsymbol{p})\,.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathscr{P} b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle &= -\mathrm{i}\eta_p^* b^\dagger_{1-\lambda}(-\boldsymbol{p})|0\rangle\,, \\
\mathscr{P} b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle &= -\mathrm{i}\eta_p b^\dagger_{-1-\lambda}(-\boldsymbol{p})|0\rangle\,, \\
\mathscr{P} b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\, b^\dagger_{-1\lambda'}(\boldsymbol{p}')|0\rangle &= -b^\dagger_{1-\lambda}(-\boldsymbol{p})\, b^\dagger_{-1-\lambda}(-\boldsymbol{p}')|0\rangle\,,
\end{aligned}$$

所以在空间反射下，电子、正电子的 $\lambda, \boldsymbol{p}$ 都反号. 至于电子或正电子的内禀宇称并无确切的含义, 但是可以说正负电子对的内禀宇称是奇的.

其次 (334) 式给出

$$\int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{P}\, a(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{P}^{-1}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

$$+ \int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{P}\, a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{P}^{-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

$$= \int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon^\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\big|_{\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}}$$

$$+ \int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon^{\mu*}(\boldsymbol{k}\Lambda)a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\big|_{\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}}\,,$$

按照前面的约定 (§ 3), 有 $\varepsilon^\mu(-\boldsymbol{k}\Lambda) = (-1)^{\Lambda-1}\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)$, 可将此式右边改为

$$\int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} (-1)^{\Lambda-1}\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a(-\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

$$+ \int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} (-1)^{\Lambda-1}\varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)a^\dagger(-\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,,$$

故

$$\mathscr{P}\, a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{P}^{-1} = (-1)^{\Lambda-1}a^\dagger(-\boldsymbol{k}\Lambda)\,,$$

$$\mathscr{P}\, a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)|0\rangle = (-1)^{\Lambda-1}a^\dagger(-\boldsymbol{k}\Lambda)|0\rangle\,.$$

再看 $\mathscr{T}$ 变换的情形. 由 (337),(339) 式得

$$\int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda \mathscr{T}\, b_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\mathscr{T}^{-1}U^*_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}$$

$$+ \int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda \mathscr{T}\, b^\dagger_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\mathscr{T}^{-1}V^*_\lambda(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}$$

$$= \int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda b_{1\lambda}(-\boldsymbol{p})T\, U_\lambda(-\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}$$

$$+ \int \frac{\mathrm{d}^3p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_\lambda b^\dagger_{-1\lambda}(-\boldsymbol{p})T\, V_\lambda(-\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}\,,$$

$$\int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon_\mu^*(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{T}\, a(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{T}^{-1}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

$$+\int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{T}\, a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{T}^{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

$$=\int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)(-1)^{\Lambda-1}a(-\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

$$+\int \frac{\mathrm{d}^3k}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}} \sum_{\Lambda=1,2} \varepsilon_\mu^*(\boldsymbol{k}\Lambda)(-1)^{\Lambda-1}a^\dagger(-\boldsymbol{k}\Lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\ ,$$

实际上 $\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)$ 是实的，注意 $T U_\lambda(-\boldsymbol{p}) = \mathrm{i}T\gamma^0 U_{-\lambda}(\boldsymbol{p}) = \lambda U_\lambda^*(\boldsymbol{p})$，$T V_\lambda(-\boldsymbol{p}) = -\mathrm{i}T\gamma^0 V_{-\lambda}(\boldsymbol{p}) = \lambda V_\lambda^*(\boldsymbol{p})$，得

$$\mathscr{T}\, b_{1\lambda}(\boldsymbol{p})\mathscr{T}^{-1} = \lambda\, b_{1\lambda}(-\boldsymbol{p})\,,$$

$$\mathscr{T}\, b_{-1\lambda}^\dagger(\boldsymbol{p})\mathscr{T}^{-1} = \lambda\, b_{-1\lambda}^\dagger(-\boldsymbol{p})\,,$$

$$\mathscr{T}\, a(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{T}^{-1} = (-1)^{\Lambda-1}a(-\boldsymbol{k}\Lambda)\,,$$

$$\mathscr{T}\, a^\dagger(\boldsymbol{k}\Lambda)\mathscr{T}^{-1} = (-1)^{\Lambda-1}a^\dagger(-\boldsymbol{k}\Lambda)\,,$$

由 $b_{1\lambda}(\boldsymbol{p})$, $b_{-1\lambda}^\dagger(\boldsymbol{p})$ 的变换式取厄米共轭得

$$\mathscr{T}\, b_{1\lambda}^\dagger(\boldsymbol{p})\mathscr{T}^{-1} = \lambda\, b_{1\lambda}^\dagger(-\boldsymbol{p})\,,$$

$$\mathscr{T}\, b_{-1\lambda}(\boldsymbol{p})\mathscr{T}^{-1} = \lambda\, b_{-1\lambda}(-\boldsymbol{p})\,.$$

对于 $\mathscr{C}$,$\mathscr{P}$,$\mathscr{T}$ 分别保持不变是量子电动力学理论的特性，而 $\mathscr{C}\mathscr{P}\mathscr{T}$ 不变性则是在相对论局域场论中的一个普遍定理.

§11 电子的反常磁矩

在第八章已经说明，Dirac 方程能够正确地解释电子的自旋，而且预言电子的固有磁矩等于一个玻尔磁子，其他遵从 Dirac 方程的带电粒子也是如此. 实验结果表明，电子的固有磁矩与一个

玻尔磁子有微小的差别 (称为反常磁矩). 在量子电动力学中，考虑电子被经典弱外场 A^c_μ 的散射，而用微扰论计算散射矩阵元. 于是在线性地依赖于外场的项中，近似地将包含圈图和抵消项的部分归结为对于单电子 Dirac 方程的辐射修正，就可以辨认出反常磁矩，由此能够对实验结果作出非常精确的解释. 所谓辐射修正是指在重整化基础上求得的来源于量子化电磁场 – 电子场的耦合的贡献，本节计算由单圈辐射修正贡献的反常磁矩.

在算符 $U(\infty,-\infty)$ 的 $:\overline{\psi}\gamma^\mu\psi A_\mu:$ 中加入 A^c 项 $:\overline{\psi}\gamma^\mu\psi:A^c_\mu$，由 $|i\rangle = b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle$, $|f\rangle = b^\dagger_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')|0\rangle$, 根据 $U(\infty,-\infty)/\langle 0|U(\infty,-\infty)|0\rangle$ 的微扰展开直接计算 $S_{fi}-\langle f|i\rangle$, 不管抵消项而算至一圈级时，线性依赖于外场的部分是

$$
\begin{aligned}
&\int \mathrm{d}^4x\langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(x)|0\rangle(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)A^c_\mu(x)\langle 0|\psi(x)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle \\
&+\int\int\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\mathrm{d}^4x_3\langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(x_2)|0\rangle(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu_2}) \\
&\quad\times \mathrm{i}S(x_2-x_3)(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu_3})\mathrm{i}S(x_3-x_1)(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu_1}) \\
&\quad\times\langle 0|\psi(x_1)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle \mathrm{i}D_{\mu_2\mu_1}(x_2-x_1)A^c_{\mu_3}(x_3) \\
&-\int\int\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\mathrm{d}^4x_3\langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(x_1)|0\rangle(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu_1}) \\
&\quad\times\langle 0|\psi(x_1)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle \mathrm{i}D_{\mu_1\mu_2}(x_1-x_2)A^c_{\mu_3}(x_3) \\
&\quad\times \mathrm{tr}\left[(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu_2})\mathrm{i}S(x_2-x_3)(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu_3})\mathrm{i}S(x_3-x_2)\right]. \qquad (346)
\end{aligned}
$$

其中 Feynman 积分理解为适当的正规化形式. 令

$$
A^c_\mu(x) = \int \frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}A^c_\mu(q)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,qx}, \qquad (347)
$$

以及注意

$$
\begin{aligned}
\langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(x)|0\rangle &= \langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(0)|0\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,p'x}, \\
\langle 0|\psi(x)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle &= \langle 0|\psi(0)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,px},
\end{aligned}
$$

由 (346) 式的各项对坐标积分并且完成在质壳上的减除后，得出

$$
\begin{aligned}
S_{fi}-\langle f|i\rangle \approx{}& \langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(0)|0\rangle(-\mathrm{i}e\gamma^{\mu})A^{c}_{\mu}(p'-p)\langle 0|\psi(0)b^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle \\
&+\langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(0)|0\rangle\big(-\mathrm{i}e\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p',p)\big)A^{c}_{\mu}(p'-p)\langle 0|\psi(0)b^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle \\
&+\langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(0)|0\rangle(-\mathrm{i}e\gamma^{\nu})\langle 0|\psi(0)b^{\dagger}_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle \\
&\times \mathrm{i}D_{\nu\rho}(p'-p)(\mathrm{i}e^{2})\Pi^{(1)\rho\mu}_{[1]}(p'-p)A^{c}_{\mu}(p'-p)\,. \qquad (348)
\end{aligned}
$$

其中第二项的贡献等于在第一项的简单顶点 $-\mathrm{i}e\gamma^{\mu}$ 中加入 $-\mathrm{i}e\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}$，第三项的效果则是在其中加入 $-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}\,\mathrm{i}\,D_{\nu\rho}(p'-p)(\mathrm{i}e^{2})\Pi^{(1)\rho\mu}_{[1]}(p'-p)$. 由 §7 知道 $\Pi^{(1)\rho\mu}_{[1]}(q)=\left(q^{\rho}q^{\mu}-q^{2}g^{\rho\mu}\right)\Pi^{(1)}_{[1]}(q)$，而

$$
\Pi^{(1)}_{[1]}(q)=\frac{1}{2\pi^{2}}\int_{0}^{1}\mathrm{d}x\,x(1-x)\ln\left[\frac{m^{2}}{m^{2}-x(1-x)\,q^{2}}\right].
$$

由于 A^{c}_{μ} 随时空坐标的变化很缓慢，$A^{c}_{\mu}(q)$ 只当 q 接近于零时不显著为零. 这时有

$$
\Pi^{(1)}_{[1]}(q)\approx\frac{1}{2\pi^{2}}\int_{0}^{1}\mathrm{d}x\,x^{2}(1-x)^{2}\frac{q^{2}}{m^{2}}=\frac{1}{60\pi^{2}}\frac{q^{2}}{m^{2}}\,.
$$

在积分区间内 $x(1-x)$ 不超过 $1/4$, 此式在 q^{2} 远小于 $4m^{2}$ 时成立. 因此当 $(p'-p)^{2}$ 远小于 $4m^{2}$ 时，有

$$
\Pi^{(1)}_{[1]}(p'-p)\approx\frac{1}{60\pi^{2}}\frac{(p'-p)^{2}}{m^{2}}\,. \qquad (349)
$$

由此以及 $\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(\not{p}'-\not{q})U_{\lambda}(\boldsymbol{p})=0$，可在 (348) 式第三项中作如下的改写：

$$
-\mathrm{i}e\gamma^{\nu}\,\mathrm{i}\,D_{\nu\rho}(p'-p)(-\mathrm{i}e^{2})\Pi^{(1)\rho\mu}_{[1]}(p'-p)\to\mathrm{i}e\gamma^{\mu}\frac{e^{2}}{60\pi^{2}}\frac{(p'-p)^{2}}{m^{2}}\,.
$$

(348) 式第二项中的 $\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p',p)$ 是 $\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p',p)$ 减去其质壳值

的结果，而 $\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p',p)$ 的 $(1-\xi)$ 部分正比于

$$\int \mathrm{d}^4k \frac{(1-\xi)}{(k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)(\xi\, k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon)}$$
$$\times\Big(\not{k}\frac{1}{\not{p}'-\not{k}-m+\mathrm{i}\epsilon}\gamma^\mu\frac{1}{\not{p}-\not{k}-m+\mathrm{i}\epsilon}\not{k}\Big)\,.$$

其中右边的 $\not{k}$ 作用于 $U_\lambda(\boldsymbol{p})$，因而可以换成 $\not{k}-\not{p}+m$. 类似地，左边的 $\not{k}$ 向左作用于 $\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')$，因而可以换成 $\not{k}-\not{p}'+m$. 可见，这个 $(1-\xi)$ 部分的贡献与 $\not{p}',\not{p}$ 无关，在减除后就消失了，$\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(p',p)$ 的其余部分的正规化表达式，在 $p^2=(p')^2=m^2$ 时可以写成

$$\Lambda^{(1)\mu}_{[0]}(F,p',p)=-\frac{\mathrm{i}e^2}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}^4k\frac{\gamma^\sigma(\not{p}'-\not{k}+m)\gamma^\mu(\not{p}-\not{k}+m)\gamma_\sigma}{(k^2-2p'k+\mathrm{i}\epsilon)(k^2-2p\,k+\mathrm{i}\epsilon)}$$
$$\times\Big(\frac{1}{k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}-\frac{1}{k^2-\Lambda_1^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big),$$

其中被积函数的第二个因子可以表示为

$$\frac{1}{k^2-\Delta^2+\mathrm{i}\epsilon}-\frac{1}{k^2-\Lambda_1^2+\mathrm{i}\epsilon}=\int_{\Delta^2}^{\Lambda_1^2}\frac{\mathrm{d}L}{k^2-L+\mathrm{i}\epsilon}.$$

这里只给出当 $(p'-p)^2$ 远小于 $4m^2$ 时的计算结果，完成减除后得到：

$$\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p',p)\approx\gamma^\mu\frac{e^2}{12\pi^2}\frac{(p'-p)^2}{m^2}\Big(\ln\frac{m}{\Delta}-\frac{3}{8}\Big)$$
$$+\frac{e^2}{32\pi^2 m}(p'-p)_\nu\big(\gamma^\nu\gamma^\mu-\gamma^\mu\gamma^\nu\big)\,. \qquad (350)$$

其中的红外发散项在本节可以暂且不管.

为了进一步改写所得的结果，利用

$$A^{\mathrm{c}}_\mu(p'-p)=\int \mathrm{d}^4x\, A^{\mathrm{c}}_\mu(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(p'-p)x}\,,$$
$$(p'-p)_\nu\, A^{\mathrm{c}}_\mu(p'-p)=\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x\,\big(\partial_\nu A^{\mathrm{c}}_\mu(x)\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(p'-p)x}\,,$$
$$(p'-p)^2\, A^{\mathrm{c}}_\mu(p'-p)=-\int \mathrm{d}^4x\,\big(\partial_\nu\partial^\nu A^{\mathrm{c}}_\mu(x)\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(p'-p)x}\,,$$

于是

$$S_{fi}-\langle f|i\rangle \approx \int \mathrm{d}^4x\langle f|:\overline{\psi}(x)(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\psi(x):|i\rangle A^c_\mu(x)$$
$$+\int \mathrm{d}^4x\langle f|:\overline{\psi}(x)e(\gamma^\nu\gamma^\mu-\gamma^\mu\gamma^\nu)\psi(x):|i\rangle\frac{e^2}{32\pi^2m}\big(\partial_\nu A^c_\mu(x)\big)$$
$$-\int \mathrm{d}^4x\langle f|:\overline{\psi}(x)(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\psi(x):|i\rangle\partial_\nu\partial^\nu A^c_\mu(x)$$
$$\times\frac{e^2}{12\pi^2m^2}\Big(\ln\frac{m}{\Delta}-\frac{3}{8}-\frac{1}{5}\Big). \tag{351}$$

这又可以理解为遵守 Dirac 方程的单电子运动的贡献，只是在单电子的 Dirac 哈密顿量中包含一些新的耦合项，总的耦合项变成：

$$\gamma^0(e\gamma^\mu)A^c_\mu(x)$$
$$+\mathrm{i}\gamma^0e(\gamma^\nu\gamma^\mu-\gamma^\mu\gamma^\nu)\frac{e^2}{32\pi^2m}\big(\partial_\nu A^c_\mu(x)\big)$$
$$-\gamma^0(e\gamma^\mu)\frac{e^2}{12\pi^2m^2}\big(\ln\frac{m}{\Delta}-\frac{3}{8}-\frac{1}{5}\big)\partial_\nu\partial^\nu A^c_\mu(x)\,, \tag{352}$$

第一行导致泡利方程包含一项来自固有磁矩的作用能 (第八章)，第三行与当前的问题没有关系．第二行即是

$$+\mathrm{i}\gamma^0e(\gamma^\nu\gamma^\mu-\gamma^\mu\gamma^\nu)\frac{e^2}{64\pi^2m}F^c_{\nu\mu}(x)\,,$$

对于固有磁矩有影响的是其中只含 A^c_μ 的空间微商的部分，即

$$+\mathrm{i}\gamma^0e(\gamma^j\gamma^k-\gamma^k\gamma^j)\frac{e^2}{64\pi^2m}F^c_{jk}(x)=-\Big(\frac{e^2}{8\pi^2}\Big)\frac{e}{2m}\gamma^0\vec{\Sigma}\cdot\vec{\mathcal{H}}\,,$$

$\vec{\mathcal{H}}$ 代表外磁场强度．这会使泡利方程中来自固有磁矩的作用能发生如下的改变：

$$-\frac{e}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\vec{\mathcal{H}}\to-(1+a)\frac{e}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\vec{\mathcal{H}}\,, \tag{353}$$

其中 $a=e^2/(8\pi^2)=\alpha/(2\pi)\approx 11614\times10^{-7}$，而 $\alpha=\frac{e^2}{4\pi}$．即是说，由单圈辐射修正给出的反常磁矩值是 $ae/(2m)$，这个结果最初是

由 Schwinger 在 1948 年求出的，它被精确的实验结果所证实. 包括更高级的修正后，还能够使符合实验的程度获得很大的提高 (参看文献 [6] 中的说明).

§ 12　红外发散的消除

量子电动力学中的红外发散，并不造成实质性困难，这里将用简单的例子说明这一点. 由于光子没有质量，重整化的格林函数和散射矩阵含有来自动量甚低的虚光子的发散. 另一方面，当电子被散射时，总是伴随着光子的发射，也是由于光子没有质量，还能够发射探测不到的所谓软光子 (能量、动量近乎零). 考虑到实验误差的限制，能量不超过某个值的光子都是探测不到的. 所以，只是软光子的能量或数目不同的状态，并不能从实验上区分开来. 理论上可以计算包含发射软光子的散射过程的概率，例如，问不发射光子而散射的概率，不发射硬光子但是发射一个能量不超过 ω_m 的软光子而散射电子的概率，不发射硬光子但是发射两个或者更多这样的软光子而散射的概率等，分别看待时属于没有实际意义的提问，在计算中会出现由虚光子和软的实光子引起的红外发散 (借助于光子的假想质量或者其他办法使得计算能够进行). 重要的是整个事件系列的概率的总和 (代表不发射能量超过 ω_m 的光子而散射电子的概率) 在 ω_m 不为零时并不发散，即是说，发散项互相抵消了，所以没有造成真正的“红外灾难”. 如果这些发散项没有互相抵消，那将是严重问题. 因为问不发射可探测的光子而散射电子的概率多大是有意义的提问，而上述概率的总和在约定能量超过 ω_m 的光子不再是软光子时正是有意义的量. 类似地，考虑某一不发射软光子的散射过程，以及差别只在于发射不同数目的能量不超过 ω_m 的软光子的事件所形成的系列，则系列中所有事件的概率的总和不发散.

下面分析电子被点电荷为 $Z|e|$ 的固定原子核的库仑场散射

的例子，$A^c_\mu(x)$ 只有 μ 为零的分量，而 e 代表电子的电荷 (负数)，假定 Z 充分小. 采用使原子核处在原点的坐标系，引入只在中间步骤使用的屏蔽因子 $\mathrm{e}^{-\delta r}$ 后，有

$$A^c_0(x) = \frac{Z|e|}{4\pi r}\mathrm{e}^{-\delta r} = -\frac{Ze}{4\pi r}\mathrm{e}^{-\delta r} \qquad (\delta \to 0^+)\,. \tag{354}$$

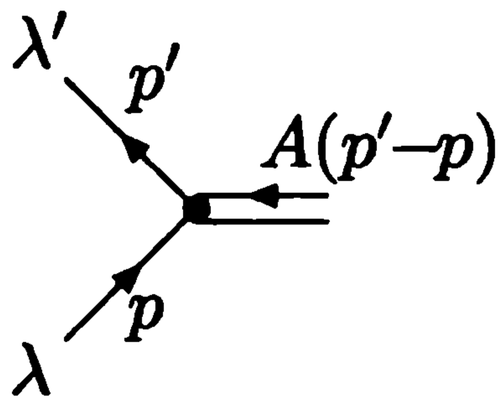
其中 $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$. 如上节所述，电子在外场 $A^c_\mu(x)$ 作用下从 $(\lambda, \boldsymbol{p})$ 散射到 $(\lambda', \boldsymbol{p}')$ 的最低级 $S_{fi} - \langle f|i\rangle$ (第一级玻恩近似) 是

$$\begin{aligned} S_{fi}(B1) &= \int \mathrm{d}^4x \langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(x)|0\rangle(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\langle 0|\psi(x)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle A^c_\mu(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^6}}\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\,U_\lambda(\boldsymbol{p})A^c_\mu(p'-p)\,, \end{aligned} \tag{355}$$

而

$$A^c_\mu(q) = \int \mathrm{d}^4x\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,q\,x}\,A^c_\mu(x)\,,$$

在已有的规则下，可以采用如下的图形表示：



$$= \overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\,U_\lambda(\boldsymbol{p})A^c_\mu(p'-p)\,,$$

其中用指向顶点的双重线段代表 A^c_μ，指标 μ 与该顶点的指标缩并. 双重线段的方向又用于表示 $A^c_\mu(q)$ 的宗量所满足的动量守恒条件 (现在是 $(p'-p)+p=p'$).

由

$$A^c_0(p'-p) = -2\pi\delta(E-E')\frac{Ze}{\boldsymbol{q}^2+\delta^2} \qquad (\boldsymbol{q} = \boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\,, \tag{356}$$

$$S_{fi} - \langle f|i\rangle \approx \frac{\mathrm{i}}{\pi}\delta(E-E')\frac{Z\alpha}{\boldsymbol{q}^2}\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\gamma^0\,U_\lambda(\boldsymbol{p})\,, \tag{357}$$

有

$$\begin{aligned}&\left|S_{fi}-\langle f|i\rangle\right|^2\\&\quad\approx\frac{4}{(2\pi)^3}[2\pi\delta(0)]\,\delta(E-E')\Big(\frac{Z\alpha}{\boldsymbol{q}^2}\Big)^2\left|\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\gamma^0\,U_{\lambda}(\boldsymbol{p})\right|^2,\end{aligned}\tag{358}$$

可知在这一级近似下，每单位时间散射到 $(\lambda',\boldsymbol{p}')$ 而动量值处于 $\mathrm{d}\boldsymbol{p}'$ 内的相对概率是

$$\mathcal{W}_{\boldsymbol{p}'\lambda'}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}'=\frac{4}{(2\pi)^3}\delta(E-E')\Big(\frac{Z\alpha}{\boldsymbol{q}^2}\Big)^2\left|\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\gamma^0\,U_{\lambda}(\boldsymbol{p})\right|^2\mathrm{d}\boldsymbol{p}'\,.\tag{359}$$

入射电子的概率流密度是 $v/(2\pi)^3$，故电子散射到 λ' 和一定方位的微分截面为

$$\mathrm{d}\sigma_{\lambda\lambda'}(B1)=\frac{(2\pi)^3}{v}\mathrm{d}\Omega\int_0^{\infty}\mathcal{W}_{\boldsymbol{p}'\lambda'}\,|\boldsymbol{p}'|^2\mathrm{d}|\boldsymbol{p}'|\,.\tag{360}$$

这与第七章的截面公式相似，但是速度 v 满足 $\boldsymbol{p}^2=v^2m^2/(1-v^2)=v^2E^2$，故

$$v=\frac{|\boldsymbol{p}|}{E}\,.\tag{361}$$

由此以及 $|\boldsymbol{p}'|\mathrm{d}|\boldsymbol{p}'|=E'\mathrm{d}E'$，完成对 E' 的积分得出

$$\mathrm{d}\sigma_{\lambda\lambda'}(B1)=\mathrm{d}\Omega\Big(\frac{4E^2Z^2\alpha^2}{\boldsymbol{q}^4}\Big)\left|\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\gamma^0\,U_{\lambda}(\boldsymbol{p})\right|^2,\tag{362}$$

其中 $|\boldsymbol{p}'|$ 被能量守恒条件限定为 $|\boldsymbol{p}|$，$\mathrm{d}\Omega$ 即是在以散射中心为原点的大球面上而位置矢量平行于 $\boldsymbol{p}'$ 的小面元相对于该中心的立体角．再将 $\mathrm{d}\sigma_{\lambda\lambda'}(B1)$ 对 λ 求平均以及对 λ' 求和，就得到 Mott 截面公式：

$$\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}=\mathrm{d}\Omega\Big(\frac{4E^2Z^2\alpha^2}{\boldsymbol{q}^4}\Big)\frac{1}{2}\sum_{\lambda\lambda'}\left|\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\gamma^0\,U_{\lambda}(\boldsymbol{p})\right|^2.\tag{363}$$

用 θ 代表散射角，于是

$$\boldsymbol{p}' \cdot \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}^2 \cos\theta\,, \tag{364}$$

$$|\boldsymbol{q}| = 2|\boldsymbol{p}| \sin\frac{\theta}{2}\,, \tag{365}$$

$$\frac{1}{2}\sum_{\lambda\lambda'} \left|\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\gamma^0 U_{\lambda}(\boldsymbol{p})\right|^2 = 1 - v^2 \sin^2\frac{\theta}{2}\,. \tag{366}$$

因此

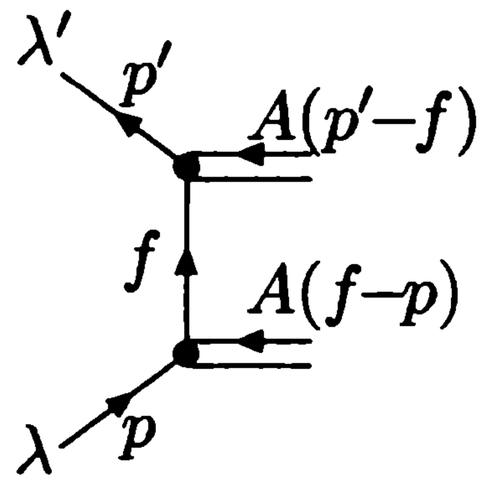
$$\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}} = \mathrm{d}\Omega\left(\frac{Z^2\alpha^2}{4|\boldsymbol{p}|^2 v^2 \sin^4\frac{\theta}{2}}\right)\left(1 - v^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right). \tag{367}$$

这是不发射光子而散射电子的最低级截面，在这一级计算中，辐射修正没有贡献. 至于软光子发射，当然也没有 α^2 级贡献.

当计算准至下一级的不发射光子而散射的截面时，散射矩阵元要计算到 α^2 级，这包括第二级玻恩近似 $S_{fi}(B2)$ 以及单圈辐射修正 $S_{fi}(L1)$ 的贡献，即

$$S_{fi} - \langle f|i\rangle \approx S_{fi}(B1) + S_{fi}(B2) + S_{fi}(L1)\,. \tag{368}$$

$\sqrt{(2\pi)^6}\, S_{fi}(B2)$ 可表示为



这即是

$$\begin{aligned}
&\int \frac{\mathrm{d}^4 f}{(2\pi)^4}\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\,\mathrm{i}\,S(f)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)\,U_{\lambda}(\boldsymbol{p})A^c_\mu(p'-f)A^c_\nu(f-p)\\
&\quad = -4\mathrm{i}\delta(E-E')(Z^2\,\alpha^2)\\
&\qquad \times \int \mathrm{d}^3 f \frac{\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(\gamma^0 E - \gamma^j f_j + m)\,U_{\lambda}(\boldsymbol{p})}{[(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{f})^2+\delta^2][(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{f})^2+\delta^2][\boldsymbol{p}^2-\boldsymbol{f}^2+\mathrm{i}\epsilon]}\,.
\end{aligned} \tag{369}$$

定义如下的 I_1 和 I_2：

$$\int \mathrm{d}^3 f \frac{1}{[(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{f})^2+\delta^2][(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{f})^2+\delta^2][\boldsymbol{p}^2-\boldsymbol{f}^2+\mathrm{i}\epsilon]} = I_1\,, \tag{370}$$

$$\int \mathrm{d}^3 f \frac{\boldsymbol{f}}{[(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{f})^2+\delta^2][(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{f})^2+\delta^2][\boldsymbol{p}^2-\boldsymbol{f}^2+\mathrm{i}\epsilon]} = \frac{1}{2} I_2(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\,, \tag{371}$$

第二个式子的左边是三维空间的矢量，而且对称地包含 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{p}'$，因而能够表示成右边的形式. 这样 $S_{fi}(B2)$ 可表示为

$$\begin{aligned} S_{fi}(B2) = -4\mathrm{i}\delta(E-E')\frac{Z^2\alpha^2}{(2\pi)^3} \\ \times \overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\left[E\gamma^0(I_1+I_2)+m(I_1-I_2)\right]U_{\lambda}(\boldsymbol{p})\,. \end{aligned} \tag{372}$$

$S_{fi}(L1)$ 的一般公式是 (见上节 (348) 式)：

$$\begin{aligned} S_{fi}(L1) \;=\; & \frac{1}{(2\pi)^3}\Big\{\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(-\mathrm{ie})\Lambda^{(1)\mu}_{[1]}(p',p)\,U_{\lambda}(\boldsymbol{p})A^{c}_{\mu}(q) \\ & +\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(-\mathrm{ie}\gamma^{\nu})\,U_{\lambda}(\boldsymbol{p})\mathrm{i}\,D_{\nu\rho}(q)(\mathrm{ie}^2)\Pi^{(1)\rho\mu}_{[1]}(q)A^{c}_{\mu}(q)\Big\}\,. \end{aligned}$$

其中 $q=p'-p$. 为了简便，也和上节一样限于考虑 $|(p'-p)^2| << 4m^2$ 的情形，由于能量守恒，也即是非相对论条件 $|\boldsymbol{p}|^2 << m^2$. 这时有

$$\begin{aligned} S_{fi}(L1) \approx\; & \frac{\mathrm{i}}{\pi}\delta(E-E')\frac{Z\alpha}{\boldsymbol{q}^2}\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\gamma^0\,U_{\lambda}(\boldsymbol{p}) \\ & \times\Big(-\frac{\alpha\boldsymbol{q}^2}{3\pi m^2}\Big)\Big(\ln\frac{m}{\Delta}-\frac{3}{8}-\frac{1}{5}\Big) \\ & +\frac{\mathrm{i}}{\pi}\delta(E-E')\frac{Z\alpha}{\boldsymbol{q}^2}\Big\{\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\frac{\alpha}{2\pi m}(m\gamma^0-E)\,U_{\lambda}(\boldsymbol{p})\Big\}\,. \end{aligned} \tag{373}$$

将 $S_{fi}(B2)$,$S_{fi}(L1)$ 也写成和 $S_{fi}(B1)$ 相似的形式，得到

$$S_{fi} - \langle f|i\rangle \approx \frac{\mathrm{i}}{\pi}\delta(E-E')\frac{Z\alpha}{\boldsymbol{q}^2}\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\gamma^0\, M\, U_{\lambda}(\boldsymbol{p})\,. \quad (374)$$

其中

$$M = 1 - \left(\frac{\alpha \boldsymbol{q}^2}{3\pi m^2}\right)\left(\ln\frac{m}{\Delta} - \frac{3}{8} - \frac{1}{5}\right) + \frac{\alpha}{2\pi m}(m - E\gamma^0)$$
$$+ \text{ 第二级玻恩近似的贡献}. \quad (375)$$

和上面一样，由 $\left|S_{fi} - \langle f|i\rangle\right|^2$ 去掉因子 $2\pi\delta(0)$ 乘以 $\mathrm{d}\boldsymbol{p}'$ 即是每单位时间散射到 $(\lambda', \boldsymbol{p}') - (\lambda', \boldsymbol{p}' + \mathrm{d}\boldsymbol{p}')$ 的相对概率，再乘 $(2\pi)^3/v$, 并在 $\delta(E-E')$ 的限制下完成对 $|\boldsymbol{p}'|$ 的积分，就得到微分截面公式，结果当然等于在 $\mathrm{d}\sigma_{\lambda\lambda'}(B1)$ 的公式 (363) 中将 γ^0 换成 $\gamma^0 M$, 即：

$$\mathrm{d}\sigma_{\lambda\lambda'} = \mathrm{d}\Omega\left(\frac{4E^2Z^2\alpha^2}{\boldsymbol{q}^4}\right)\left|\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\gamma^0\, M\, U_{\lambda}(\boldsymbol{p})\right|^2, \quad (376)$$

其中右边只保留到 α^3 项，所以在这一级近似下，截面中只是由第一级玻恩近似和单圈辐射修正交叉贡献的部分 $\mathrm{d}\sigma_{B1L1}$ 包含红外发散. 将 $\mathrm{d}\sigma_{\lambda\lambda'}$ 对 λ 求平均以及对 λ' 求和，取出这一部分得：

$$\mathrm{d}\sigma_{B1L1} = \mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}\left\{-\left(\frac{2\alpha \boldsymbol{q}^2}{3\pi m^2}\right)\left(\ln\frac{m}{\Delta} - \frac{3}{8} - \frac{1}{5}\right)\right\}$$
$$+ \text{ 不含 } \Delta \text{ 的项}. \quad (377)$$

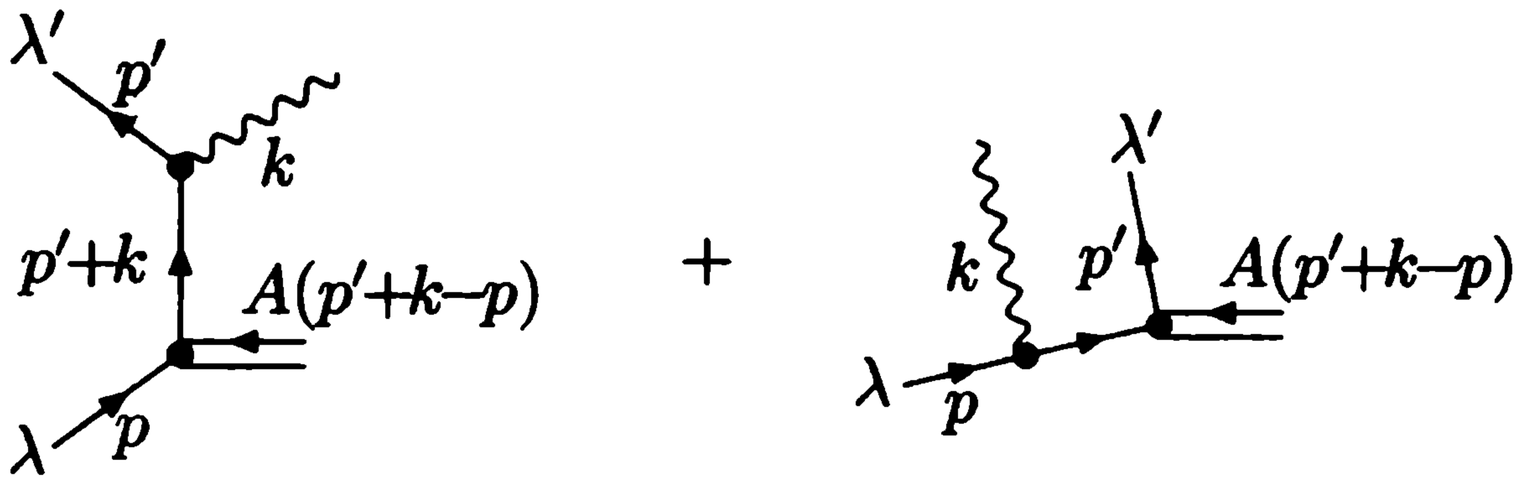
我们要看看在考虑了软光子发射的同级贡献之后，发散是否互相抵消.

电子从 $|i\rangle$ 散射到 (λ', p') 而发射一个动量为 k, 极化为 $\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k}, \Lambda)$

的光子的最低级散射矩阵元是：

$$
\begin{aligned}
S_{f'i} \approx & \int\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\langle 0|a_\Lambda(\boldsymbol{k})\widetilde{A}_\mu(x_2)|0\rangle\langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(x_2)|0\rangle \\
& \times(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\mathrm{i}\,S(x_2-x_1)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)A^c_\nu(x_1)\langle 0|\psi(x_1)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle \\
& + \int\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\langle 0|a_\Lambda(\boldsymbol{k})\widetilde{A}_\mu(x_1)|0\rangle\langle 0|b_{1\lambda'}(\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(x_2)|0\rangle \\
& \times(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)\mathrm{i}\,S(x_2-x_1)(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)A^c_\nu(x_2)\langle 0|\psi(x_1)b^\dagger_{1\lambda}(\boldsymbol{p})|0\rangle\,.
\end{aligned}
\tag{378}
$$

于是 $\sqrt{2\omega(2\pi)^9}S_{f'i}$ 可表示为



这即是

$$
\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\,\mathrm{i}\,S(p'+k)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)\,U_\lambda(\boldsymbol{p})\varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda)A^c_\nu(p'+k-p)
$$

$$
+\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\,\mathrm{i}\,S(p-k)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)\,U_\lambda(\boldsymbol{p})A^c_\mu(p'+k-p)\varepsilon^*_\nu(\boldsymbol{k}\Lambda)\,.
$$

现在感兴趣的是发射软光子 $(k\approx 0)$ 的情形. 这时也是在中间步骤假想光子具有很小的质量 Δ,k^0 理解为 $\omega=\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\Delta^2}$, 而

$$
S(p'+k)=\frac{\not{p}'+\not{k}+m}{(p'+k)^2-m^2+\mathrm{i}\epsilon}\approx\frac{\not{p}'+m}{2p'k+\Delta^2}\,,
$$

$$
S(p-k)\approx-\frac{\not{p}+m}{2pk-\Delta^2}\,.
$$

由于

$$
\begin{aligned}
&\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')(-\mathrm{i}e\gamma^\mu)\,\mathrm{i}\,S(p'+k)\varepsilon^*_\mu(\boldsymbol{k}\Lambda) \\
&=\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\frac{e}{2p'k+\Delta^2}\not{\varepsilon}^*(\boldsymbol{k}\Lambda)(\not{p}'+m)=\overline{U}_{\lambda'}(\boldsymbol{p}')\frac{e\,p'\varepsilon^*(\boldsymbol{k}\Lambda)}{p'k+\Delta^2/2}\,,
\end{aligned}
$$

上页第一个图简化为 $\sqrt{(2\pi)^6}S_{fi}(B1)$ 的图形乘 $ep'\varepsilon^*(\boldsymbol{k}\Lambda)/(p'k+\Delta^2/2)$. 类似地，由于

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}S(p-k)(-\mathrm{i}e\gamma^\nu)U_\lambda(\boldsymbol{p})\varepsilon_\nu^*(\boldsymbol{k}\Lambda)\\&=-\frac{e}{2pk-\Delta^2}(\not{p}+m)\not{\varepsilon}^*(\boldsymbol{k}\Lambda)U_\lambda(\boldsymbol{p})=-\frac{ep\varepsilon^*(\boldsymbol{k}\Lambda)}{pk-\Delta^2/2}U_\lambda(\boldsymbol{p}),\end{aligned}$$

上页第二个图简化为 $\sqrt{(2\pi)^6}S_{fi}(B1)$ 的图形乘 $-ep\varepsilon^*(\boldsymbol{k}\Lambda)/(pk-\Delta^2/2)$. 因此

$$S_{f'i}\Rightarrow S_{fi}(B1)\frac{1}{\sqrt{2\omega(2\pi)^3}}\left(\frac{ep'\varepsilon^*(\boldsymbol{k}\Lambda)}{p'k+\Delta^2/2}-\frac{ep\varepsilon^*(\boldsymbol{k}\Lambda)}{pk-\Delta^2/2}\right). \tag{379}$$

在分母中与 $p'k$,pk 相加的 $\pm\Delta^2/2$ 可以略去 (例如参看文献 [5]), 所以电子从 $(\lambda,\boldsymbol{p})$ 散射到 $(\lambda',\boldsymbol{p}',\mathrm{d}\Omega)$ 而发射一个能量不超过 ω_m 的软光子的截面是

$$\mathrm{d}\sigma_{\lambda\lambda'}(\mathrm{soft})=\beta\,\mathrm{d}\sigma_{\lambda\lambda'}(B1), \tag{380}$$

其中

$$\beta=\sum_{\Lambda}\int_{|\boldsymbol{k}|\le\omega_m}\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\frac{e^2}{2\omega}\left|\left(\frac{p'\varepsilon^*(\boldsymbol{k}\Lambda)}{p'k}-\frac{p\varepsilon^*(\boldsymbol{k}\Lambda)}{pk}\right)\right|^2,$$

对 λ 求平均以及对 λ' 求和后变成：

$$\mathrm{d}\sigma(\mathrm{soft})=\beta\,\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}. \tag{381}$$

其次，既然假想软光子具有质量 Δ, 就应该认为它也有纵极化，而

$$\sum_{\Lambda}\varepsilon_\mu^*(\boldsymbol{k}\Lambda)\varepsilon_\nu(\boldsymbol{k}\Lambda)=-g_{\mu\nu}+\frac{k_\mu k_\nu}{\Delta^2}.$$

由此完成对 Λ 的求和得到：

$$\mathrm{d}\sigma(\mathrm{soft})=-\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}\int_{|\boldsymbol{k}|\le\omega_m}\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\frac{e^2}{2\omega}\left(\frac{p'}{p'k}-\frac{p}{pk}\right)^2. \tag{382}$$

下面求出在非相对论近似下的明显表达式. 由

$$\frac{p'}{p'k}-\frac{p}{pk}=\frac{q}{p'k}+p\frac{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}}{(p'k)(pk)},$$

有

$$\left(\frac{p'}{p'k}-\frac{p}{pk}\right)^2=-\frac{\boldsymbol{q}^2}{(p'k)^2}+\frac{m^2(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k})^2}{(p'k)^2(pk)^2}+2pq\frac{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}}{(p'k)^2(pk)},$$

这时可在右边的分母中令 $(p'k),(pk)$ 等于最低级近似值 $m\omega$, 即

$$\left(\frac{p'}{p'k}-\frac{p}{pk}\right)^2\Rightarrow-\frac{\boldsymbol{q}^2}{m^2\omega^2}+\frac{(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k})^2}{m^2\omega^4}-\frac{2(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q})(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k})}{m^3\omega^3},$$

在对 $\boldsymbol{k}$ 的方向积分时, $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}$ 的一次项没有贡献, 结果为

$$-\frac{4\pi\boldsymbol{q}^2}{m^2\omega^2}\left(1-\frac{\boldsymbol{k}^2}{3\omega^2}\right),$$

故

$$\mathrm{d}\sigma(\mathrm{soft})=\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}\left(\frac{\alpha\boldsymbol{q}^2}{3\pi m^2}\right)\int_0^{\omega_m}\mathrm{d}|\boldsymbol{k}|\left(\frac{2}{\omega}-\frac{\Delta^2}{\omega^3}-\frac{\Delta^4}{\omega^5}\right).$$

ω_m 是有限的正数, 而 Δ 在适当时候就趋于零. 注意

$$\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1+x^2}}=\mathrm{d}\ln\left(x+\sqrt{1+x^2}\right),$$

$$\frac{\mathrm{d}x}{(1+x^2)^{3/2}}=\mathrm{d}\left(\frac{x}{\sqrt{1+x^2}}\right),$$

$$\frac{\mathrm{d}x}{(1+x^2)^{5/2}}=\frac{1}{3}\mathrm{d}\left(\frac{x}{(1+x^2)^{3/2}}\right)+\frac{2}{3}\frac{\mathrm{d}x}{(1+x^2)^{3/2}},$$

当 $\Delta<<\omega_m$ 时得到

$$\int_0^{\omega_m}\mathrm{d}|\boldsymbol{k}|\left(\frac{2}{\omega}-\frac{\Delta^2}{\omega^3}-\frac{\Delta^4}{\omega^5}\right)=2\ln\frac{2\omega_m}{\Delta}-1-\frac{2}{3},$$

$$\mathrm{d}\sigma(\mathrm{soft})=\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}\left(\frac{2\alpha\boldsymbol{q}^2}{3\pi m^2}\right)\left(\ln\frac{2\omega_m}{\Delta}-\frac{5}{6}\right). \tag{383}$$

由此可见，一并顾及来自动量甚低的虚光子和实的软光子的贡献，则红外发散互相抵消. 在准至 α^3 级时，应该将电子弹性散射的观察截面理解为上述玻恩第一、第二级近似以及单圈辐射修正、软光子发射的贡献的和，这时软光子发射截面的参量 ω_m 根据实验的精度选定.

关于消除红外发散的一般论述，见文献 [14]—[16]. 另外，就量子电动力学而言，将散射过程的初末态的定义加以修改，使其以适当的方式包含一切数目的软光子，能够让“有实际意义”的散射矩阵元不含红外发散，见文献 [17], [18] 中采用的相干态方法.

§ 13 类氢原子能级的 Lamb 移位

由 W.E.Lamb 等人在 1947—1953 年间进行的实验表明，氢原子的 $2\mathrm{P}_{1/2}$ 能级比 $2\mathrm{S}_{1/2}$ 能级略低，而不是像 Dirac 方程预言那样完全重合，被称为 Lamb 移位，这一发现对于量子电动力学的发展起着重要作用. Dayhoff, Triebwasse 和 Lamb 在 1953 年测得的能级差是 [19]

$$\Delta E = 1057.8 \pm 0.1\,\mathrm{MHz}\,.$$

1976 年由 D.A.Andrews 和 G.Newton 测得的值是 [20]

$$\Delta E = 1057.862 \pm 0.020\,\mathrm{MHz}\,.$$

H.A.Bethe 在 1947 年首次成功地将 Lamb 移位解释为受核场束缚的电子与量子化的电磁场相互作用的结果 [21], 后来又有不少研究者改进计算方法并且考虑了高次修正，使得理论值很精确地与实验结果相符 (参看文献 [6] 中的说明). 在这里将扼要说明计算低次修正的方法和结果.

按照上节的记号，类氢原子的核库仑场为

$$A_0^c(x) = A_0^c(\boldsymbol{x}) = -\frac{Ze}{4\pi r}\mathrm{e}^{-\delta r} \qquad (\delta \to 0^+)\,.$$

用 $W(nj)$ 代表电子能级 (nj) 的能量值 (不含电子的静止能量), 也将 $W(nj)$ 简写为 W_S, 而且下标 S 除了代表 (nj), 必要时也用来表示电子的确定状态. 假定 Z 充分小, 设 $\delta W_S^{(\mathrm{I})}$ 表示由于电子与 $|\boldsymbol{k}|$ 值大于 K 的虚光子的相互作用引起的 W_S 的改变, 而 K 甚大于电子在原子中的束缚能, 但是甚小于电子的静止质量, 即:

$$mZ^2\alpha^2 << K << m\,, \tag{384}$$

再设 $\delta W_S^{(\mathrm{II})}$ 是由电子与 $|\boldsymbol{k}|$ 值不大于 K 的虚光子的相互作用引起的改变. 于是总的改变量为

$$\delta W_S = \delta W_S^{(\mathrm{I})} + \delta W_S^{(\mathrm{II})}\,, \tag{385}$$

参量 K 允许在适当的区间内改变, 如果两部分的计算方法都是合理的, 则它们具有相交的有效范围, $\delta W(nlj)$ 当然与 K 无关. 电子在与 $|\boldsymbol{k}|$ 值大于 K 的虚光子相互作用时, 微弱的束缚能没有什么影响, 而且在光子被放出接着被吸收的过程中, 电子被库仑场散射两次或更多次的可能性不大, 在前一节求得的描述自由电子被外场散射的等效势经过适当的修改, 可以用来决定 Dirac 方程的微扰项从而计算 $\delta W_S^{(\mathrm{I})}$. 在计算 $\delta W_S^{(\mathrm{II})}$ 时, 不能忽略束缚能的影响, 也不能忽略 $A_0^c(x)$ 的高次贡献, 后面再作说明.

前一节考虑电子被外场散射的单圈辐射修正而散射矩阵准至外场的线性项时得到的等效势, 在现在的库仑场以及非相对论近似下, 可以表示为:

$$\begin{aligned} A_0^{\mathrm{eff}}(x) \;=\; & A_0^c(x) + \frac{\alpha}{3\pi m^2}\Big(\ln\frac{m}{\Delta} - \frac{3}{8} - \frac{1}{5}\Big)\Delta A_0^c(x) \\ & -\frac{\mathrm{i}\,\alpha}{4\pi m}\gamma^j\,\partial_j A_0^c(x)\,. \end{aligned} \tag{386}$$

其中 $\Delta A_0^c(x)$ 代表 $-\partial^j\partial_j A_0^c(x)$. 这一等效势包含着电子与 $|\boldsymbol{k}|$ 值甚低的虚光子的相互作用并且因此导致红外发散, 为了用于计算 $\delta W^{(\mathrm{I})}$, 需要剔除 $|\boldsymbol{k}| \le k$ 的虚光子的贡献. 这样处置的结果 (例如

见文献 [5]) 相当于将 $A_0^{\rm eff}(\boldsymbol{x})$ 换成一个新的等效势:

$$\begin{aligned}\widetilde{A}_0^{\rm eff}(x) \;&=\; A_0^{\rm c}(x)+\frac{\alpha}{3\pi m^2}\Big(\ln\frac{m}{2K}+\frac{11}{24}-\frac{1}{5}\Big)\Delta A_0^{\rm c}(x)\\ &\quad -\frac{\mathrm{i}\,\alpha}{4\pi m}\gamma^j\,\partial_j A_0^{\rm c}(x)\,.\end{aligned}\tag{387}$$

这即是我们说的修改. 应该注意, 如果用这一新的等效势进行一级微扰计算准至 α^3 的散射截面, 那么从上节可知, 在计算伴随地发射一个实的软光子的截面时, 也要剔除 $|\boldsymbol{k}|\le K$ 的贡献, 即只计 $|\boldsymbol{k}|>K$ 的贡献 (这时当然不让 K 超过软光子的最大能量). 也可以认为剔除 $|\boldsymbol{k}|\le K$ 的虚光子和实光子的贡献是另外一种红外截断方法, 而采用不同的截断方法不应改变有观察意义的截面的计算结果, 按照这样的论据也能够借助原来的等效势确定新的等效势.

从 $\widetilde{A}_0^{\rm eff}(x)$ 得出的在 Dirac 方程中的微扰哈密顿量是

$$\begin{aligned}\delta V \;&=\; e\,\widetilde{A}_0^{\rm eff}(x)-e\,A_0^{\rm c}(x)\\ &=\; \frac{e\,\alpha}{3\pi m^2}\Big(\ln\frac{m}{2K}+\frac{11}{24}-\frac{1}{5}\Big)\Delta A_0^{\rm c}(x)-\frac{\mathrm{i}e\,\alpha}{4\pi m}\gamma^j\,\partial_j A_0^{\rm c}(x)\,.\end{aligned}\tag{388}$$

因此

$$\delta W_S^{(\rm I)}\approx\int \mathrm{d}^3x\;\widetilde{\psi}_S^*(\boldsymbol{x})\,\delta V(\boldsymbol{x})\,\psi_S(\boldsymbol{x})\,,\tag{389}$$

其中 $\psi_S(\boldsymbol{x})$ 是四分量 Dirac 波函数. 用 Ψ 和 χ 分别代表 Dirac 波函数在非相对论近似下的大分量和小分量, 从量级的考虑得出

$$\begin{aligned}\delta W_S^{(\rm I)}\approx\;&\frac{e\,\alpha}{3\pi m^2}\Big(\ln\frac{m}{2K}+\frac{11}{24}-\frac{1}{5}\Big)\\ &\times\int \mathrm{d}^3x\;\widetilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x})\,\big\{\Delta A_0^{\rm c}(\boldsymbol{x})\big\}\,\Psi_S(\boldsymbol{x})\\ &+\frac{e\,\alpha}{4\pi m}\int \mathrm{d}^3x\;\widetilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\big\{-\mathrm{i}\,\nabla A_0^{\rm c}(\boldsymbol{x})\big\}\,\chi_S(\boldsymbol{x})\\ &+\frac{e\,\alpha}{4\pi m}\int \mathrm{d}^3x\;\widetilde{\chi}_S^*(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\big\{\mathrm{i}\,\nabla A_0^{\rm c}(\boldsymbol{x})\big\}\,\Psi_S(\boldsymbol{x})\,,\end{aligned}\tag{390}$$

记住花括号内的算子 Δ 和 ∇ 只是作用于 $A_0^c(\boldsymbol{x})$. 现在 χ_S 只需要取最低级近似:

$$\chi_S = \frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot(-\mathrm{i}\nabla)\Psi_S(\boldsymbol{x}),$$

这里的 $-\mathrm{i}\nabla$ 则代表电子的动量算符. 于是 (390) 式后面两项变成

$$\begin{aligned}
&\frac{e\alpha}{8\pi m^2}\int \mathrm{d}^3x\,\tilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\left\{-\mathrm{i}\nabla A_0^c(\boldsymbol{x})\right\}\boldsymbol{\sigma}\cdot(-\mathrm{i}\nabla)\Psi_S(\boldsymbol{x})\\
&+\frac{e\alpha}{8\pi m^2}\int \mathrm{d}^3x\,\tilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{\sigma}\cdot(-\mathrm{i}\nabla)\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\left\{\mathrm{i}\nabla A_0^c(\boldsymbol{x})\right\}\Psi_S(\boldsymbol{x})\\
&=\frac{e\alpha}{8\pi m^2}\int \mathrm{d}^3x\,\tilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x})\,\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\,,\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\left\{\nabla A_0^c(\boldsymbol{x})\right\}\right]\Psi_S(\boldsymbol{x}),
\end{aligned}$$

将其中的对易关系式化简得

$$\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\,,\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\left\{\nabla A_0^c(\boldsymbol{x})\right\}\right]=\Delta A_0^c(\boldsymbol{x})+\frac{2}{r}\frac{\partial A_0^c}{\partial r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l},$$

故

$$\begin{aligned}
\delta W_S^{(\mathrm{I})} \approx\ & \frac{e\alpha}{3\pi m^2}\left(\ln\frac{m}{2K}+\frac{19}{30}\right)\int \mathrm{d}^3x\,\tilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x})\left\{\Delta A_0^c(\boldsymbol{x})\right\}\Psi_S(\boldsymbol{x})\\
&+\frac{e\alpha}{4\pi m^2}\int \mathrm{d}^3x\,\tilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x})\left(\frac{1}{r}\frac{\partial A_0^c}{\partial r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\right)\Psi_S(\boldsymbol{x}). \qquad (391)
\end{aligned}$$

关于 $\delta W_S^{(\mathrm{II})}$, 考虑到它来自电子与 $|\boldsymbol{k}|$ 值不大于 K 的虚光子的相互作用, 而 K 甚小于电子的静止能量, 因此可以按照非相对论方法描述电子的状态, 并且在中间态光子的 $|\boldsymbol{k}|$ 值不大于 K 的限制下进行微扰计算. 现在省略中间步骤直接写出二级微扰计算的如下表达式 (例如参看文献 [6]):

$$\begin{aligned}
\delta W_S^{(\mathrm{II})} \approx\ & \frac{2\alpha}{3\pi m^2}\sum_{S'}(W_{S'}-W_S)\left|\langle\Psi_S|\boldsymbol{p}_{\mathrm{op}}|\Psi_{S'}\rangle\right|^2\\
&\times\ln\frac{K}{|W_S-W_{S'}|}, \qquad (392)
\end{aligned}$$

这也正是 H.A.Bethe 最初针对氢原子给出的公式 [21], $\boldsymbol{p}_{\mathrm{op}}$ 是电子的动量算符，即

$$\langle \Psi_S | \boldsymbol{p}_{\mathrm{op}} | \Psi_{S'} \rangle = \int \mathrm{d}^3 x \, \widetilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x}) \left\{ -\mathrm{i} \nabla \right\} \Psi_{S'}(\boldsymbol{x}) \, .$$

其次，在非相对论近似下，$\sum_{S'} (W_{S'} - W_S) \left| \langle \Psi_S | \boldsymbol{p}_{\mathrm{op}} | \Psi_{S'} \rangle \right|^2$ 被化简为 (也见文献 [6])：

$$\begin{aligned} \sum_{S'} (W_{S'} - W_S) \left| \langle \Psi_S | \boldsymbol{p}_{\mathrm{op}} | \Psi_{S'} \rangle \right|^2 \\ \rightarrow \frac{e}{2} \int \mathrm{d}^3 x \, \widetilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x}) \left\{ \Delta A_0^{\mathrm{c}}(\boldsymbol{x}) \right\} \Psi_S(\boldsymbol{x}) \, , \end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned} \delta W_S^{(\mathrm{II})} \approx & \frac{e\alpha}{3\pi m^2} \left(\ln \frac{2K}{m} \right) \int \mathrm{d}^3 x \, \widetilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x}) \left\{ \Delta A_0^{\mathrm{c}}(\boldsymbol{x}) \right\} \Psi_S(\boldsymbol{x}) \\ & + \frac{2\alpha}{3\pi m^2} \sum_{S'} (W_{S'} - W_S) \left| \langle \Psi_S | \boldsymbol{p}_{\mathrm{op}} | \Psi_{S'} \rangle \right|^2 \\ & \times \ln \frac{m}{2|W_S - W_{S'}|} \, . \end{aligned} \tag{393}$$

可见，在 $\delta W_S^{(\mathrm{I})} + \delta W_S^{(\mathrm{II})}$ 中，参量 K 消失了，最后得到

$$\begin{aligned} \delta W_S \approx & \frac{19}{30} \left(\frac{e\alpha}{3\pi m^2} \right) \int \mathrm{d}^3 x \, \widetilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x}) \left\{ \Delta A_0^{\mathrm{c}}(\boldsymbol{x}) \right\} \Psi_S(\boldsymbol{x}) \\ & + \frac{e\alpha}{4\pi m^2} \int \mathrm{d}^3 x \, \widetilde{\Psi}_S^*(\boldsymbol{x}) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial A_0^{\mathrm{c}}}{\partial r} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} \right) \Psi_S(\boldsymbol{x}) \\ & + \frac{2\alpha}{3\pi m^2} \sum_{S'} (W_{S'} - W_S) \left| \langle \Psi_S | \boldsymbol{p}_{\mathrm{op}} | \Psi_{S'} \rangle \right|^2 \\ & \times \ln \frac{m}{2|W_S - W_{S'}|} \, . \end{aligned} \tag{394}$$

值得指出，按照这样的公式计算氢原子的 $2\mathrm{P}_{1/2}$ 与 $2\mathrm{S}_{1/2}$ 的能级间隔，结果也只比实验值小几个 MHz. 更为精确的计算方法和结果见文献 [22], [23] 以及其中所引文献.

§14 重整化群简述

一种可重整的场论，可以按照不同的方案进行重整化，例如可以在独立外动量的质壳值之外选取重整化点和给出适当的归一条件. 在量子电动力学中通常采用的是在质壳上减除的方案，因此重整化的 m, e 代表实验值. 所谓动量减除方案也经常涉及，即是重整化点处在外动量的欧氏区上 (外动量的平方取负值), 相应的重整化参量 m, e 不再代表实验值. 在非阿贝尔规范理论的情形 (结合维数正规化), 动量减除方案还可以采用，在质壳上减除的方案无法实施了. 最常用的则是最小减除方案和修正的最小减除方案，它们也可用于量子电动力学. 在所谓最小减除方案中，减除紫外发散的规则在形式上和想法上与 Bogoliubov-Parasiuk 的 R 减除运算相似，但不是给定减除点和重整化归一条件，而是将 R 减除运算中的 t^g 换成对于经过维数正规化的 Feynman 积分抽取紫外极点项，逐圈引入拉氏函数中的抵消项正好抵消维数正规化顶角中的紫外极点项. 重整化的质量和耦合常数当然也不代表实验值. 修正的最小减除方案只有很小的改变. 这类重整化方案的有效性不能直接用 Bogoliubov-Parasiuk-Hepp 定理来说明，独立的论证是需要的，参看文献 [13]. 原则上可以有无穷多种重整化方案，对于给定的可重整场论，两种重整化方案效果上只差一个有限的重整化.

设想在量子电动力学中, 从 ξ 规范的原始拉氏函数出发, 采用两种基于不同重整化点的方案 R 和 R' 进行重整化. 按照以前的说明, 未重整化的原始场函数用记号 $\psi^{[b]}(x), \overline{\psi}^{[b]}(x)$ 和 $A_\mu^{[b]}(x)$ 表示, 原始的参量 (裸参量) 记为 m_b, e_b, ξ_b. 再将两种方案下的重整化场函数分别记为 $\psi^{[R]}(x), \overline{\psi}^{[R]}(x), A_\mu^{[R]}(x)$ 和 $\psi^{[R']}(x), \overline{\psi}^{[R']}(x), A_\mu^{[R']}(x)$, 重整化参量记为 m_R, e_R, ξ_R 和 $m_{R'}, e_{R'}, \xi_{R'}$. 设 $Z_1(R) = Z_2(R)$ 和 $Z_1(R') = Z_2(R')$ 已被满足，于是

$$\psi^{[b]}(x) = \sqrt{Z_2(R)}\,\psi^{[R]}(x) = \sqrt{Z_2(R')}\,\psi^{[R']}(x)\,,$$
$$\overline{\psi}^{[b]}(x) = \sqrt{Z_2(R)}\,\overline{\psi}^{[R]}(x) = \sqrt{Z_2(R')}\,\overline{\psi}^{[R']}(x)\,,$$

$$A_\mu^{[b]}(x) = \sqrt{Z_3(R)}A_\mu^{[R]}(x) = \sqrt{Z_3(R')}A_\mu^{[R']}(x)\,,$$

$$m_b = m_R - \delta m_R = m_{R'} - \delta m_{R'}\,,$$
$$e_b = \frac{1}{\sqrt{Z_3(R)}}\,e_R = \frac{1}{\sqrt{Z_3(R')}}\,e_{R'}\,,$$
$$\xi_b = Z_3(R)\,\xi_R = Z_3(R')\,\xi_{R'}\,.$$

因此有

$$\psi^{[R']}(x) = \frac{\sqrt{Z_2(R)}}{\sqrt{Z_2(R')}}\,\psi^{[R]}(x)\,, \tag{395}$$
$$\overline{\psi}^{[R']}(x) = \frac{\sqrt{Z_2(R)}}{\sqrt{Z_2(R')}}\,\overline{\psi}^{[R]}(x)\,, \tag{396}$$
$$A_\mu^{[R']}(x) = \frac{\sqrt{Z_3(R)}}{\sqrt{Z_3(R')}}A_\mu^{[R]}(x)\,, \tag{397}$$
$$m_{R'} = m_R + (\delta m_{R'} - \delta m_R)\,, \tag{398}$$
$$e_{R'} = \frac{\sqrt{Z_3(R')}}{\sqrt{Z_3(R)}}\,e_R\,, \tag{399}$$
$$\xi_{R'} = \frac{Z_3(R)}{Z_3(R')}\,\xi_R\,. \tag{400}$$

由此也能够确定重整化格林函数随重整化方案的改变. 应当注意, 由重整化场函数定义的格林函数是 (紫外) 有限的, 所以联系不同重整化方案下的重整化场函数的常数 $\sqrt{Z_2(R)/Z_2(R')}$, $\sqrt{Z_3(R)/Z_3(R')}$ 是有限的. 同样, $(\delta m_{R'} - \delta m_R)$ 和各重整化参量也是有限的. 由重整化方案的改变引起的重整化场函数以及重整化参量的变换的集合具有群的性质, 这种群被称为重整化群. 描述重整化格林函数 (或顶角函数) 和重整化参量随重整化点的演化的方程式称为重整化群方程. 动量减除方案随着重整化点而连

续地改变，最小减除方案 (其中起着重整化点作用的是由维数正规化方法引进的所谓质量标度参量 μ) 也随 μ 的值连续地改变，这些方案都有相应的表示为微分方程的重整化群方程. 在量子电动力学以及非阿贝尔规范理论中，已经研究过几种不同类型的重整化群方程，而且作出了一些非常重要的推论. 这里只拟对某些方面作粗略的说明，在必要时会不加证明地引用若干已知的计算结果.

首先看看光子传播函数随重整化点的演化，以及说明不变荷的概念. 用 $\overline{D}^{[R]}_{\mu\nu}(k)$ 代表在重整化方案 R 下的光子重整化完全传播函数，于是 $Z_3(R)\overline{D}^{[R]}_{\mu\nu}(k)$ 是相应的未重整化传播函数 $\overline{D}^{[b]}_{\mu\nu}(k)$. 由此以及 $Z_3(R)e_b^2 = e_R^2$ 看出，$e_R^2\overline{D}^{[R]}_{\mu\nu}(k)$ 在重整化群变换下保持不变. 其次，由真空极化张量的横向性以及如下的方程式

$$\overline{D}^{[R]}_{\mu\nu}(k) = D_{\mu\nu}(k) + D_{\mu\rho}(k)\{-e_R^2\Pi^{[R]\rho\lambda}(k)\}\overline{D}^{[R]}_{\lambda\nu}(k)\,,$$

得

$$\overline{D}^{[R]}_{\mu\nu}(k) = \overline{D}^{[R]\mathrm{tr}}_{\mu\nu}(k) - \xi_R\frac{k_\mu k_\nu}{(k^2+\mathrm{i}\epsilon)^2}\,, \tag{401}$$

而

$$\overline{D}^{[R]\mathrm{tr}}_{\mu\nu}(k) = D^{\mathrm{tr}}_{\mu\nu}(k) + D^{[R]\mathrm{tr}}_{\mu\rho}(k)\{-e_R^2\Pi^{[R]\rho\lambda}(k)\}\overline{D}^{\mathrm{tr}}_{\lambda\nu}(k)\,, \tag{402}$$

上标中的 “ tr ” 表示横向部分. 在此式中代入

$$D^{\mathrm{tr}}_{\mu\nu}(k) = \frac{-1}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big)\,,$$
$$\Pi^{[R]\rho\lambda}(k) = \Pi^{[R]}(k^2)\big(k^\rho k^\lambda - k^2 g^{\rho\lambda}\big)\,,$$

变为

$$\overline{D}^{[R]\mathrm{tr}}_{\mu\nu}(k) = \Big(\frac{-1}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big)\frac{1}{1+e_R^2\Pi^{[R]}(k^2)}\Big(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big)\,, \tag{403}$$

因此

$$e_R^2\overline{D}_{\mu\nu}^{[R]}(k)=-\frac{d(k^2)}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\left(g_{\mu\nu}-\frac{k_\mu k_\nu}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\right)-\xi_R e_R^2\frac{k_\mu k_\nu}{(k^2+\mathrm{i}\epsilon)^2}\,, \tag{404}$$

其中

$$d(k^2)=\frac{e_R^2}{1+e_R^2\Pi^{[R]}(k^2)}\,. \tag{405}$$

这个重整化群不变量称为不变荷，在给定的重整化方案下，它作为动量的函数也称为流动耦合常数 (平方). 在下面的叙述中，必要时将针对特定的重整化方案用更特别的记号代表相应的重整化参量，如果不涉及不同重整化方案的比较，除了记为 m_R, e_R, ξ_R, 也常常和以前一样简写成 m, e, ξ.

在进行下一步的讨论之前，我们举出微扰论计算的一圈结果作一对照. 按照以前的记号，在未计入抵消项而计算光子传播函数准至一圈级时有

$$\overline{D}_{[0]\mu\nu}^{tr(1)}(k)=D_{\mu\nu}^{\mathrm{tr}}(k)+D_{\mu\rho}^{\mathrm{tr}}(k)\{-e^2\Pi_{[0]}^{(1)\rho\lambda}(k)\}\overline{D}_{[0]\lambda\nu}^{tr(1)}(k), \tag{406}$$

即

$$\overline{D}_{[0]\mu\nu}^{tr(1)}(k)=\left(\frac{-1}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\right)\frac{1}{1+e^2\Pi_{[0]}^{(1)}(k^2)}\left(g_{\mu\nu}-\frac{k_\mu k_\nu}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\right). \tag{407}$$

在所采用的重整化方案下将 $e^2\Pi_{[0]}^{(1)}$ 减去一个常数而变成 $e^2\Pi_{[1]}^{(1)}$ 后，即得到一圈重整化的结果：

$$\overline{D}_{[1]\mu\nu}^{tr(1)}(k)=\left(\frac{-1}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\right)\frac{1}{1+e^2\Pi_{[1]}^{(1)}(k^2)}\left(g_{\mu\nu}-\frac{k_\mu k_\nu}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\right), \tag{408}$$

故

$$d_{[1]}^{(1)}(k^2)=\frac{e^2}{1+e^2\Pi_{[1]}^{(1)}(k^2)}\,. \tag{409}$$

另一方面，未重整化的 $\overline{D}^{[b]}_{\mu\nu}(k)$ 的横向部分满足

$$\overline{D}^{[b]tr}_{\mu\nu}(k) = D^{\rm tr}_{\mu\nu}(k) + D^{\rm tr}_{\mu\rho}(k)\{-e_b^2 \Pi^{[b]\rho\lambda}(k)\}\overline{D}^{[b]tr}_{\lambda\nu}(k)\,,$$

代入 $\Pi^{[b]\rho\lambda}(k) = \Pi^{[b]}(k^2)\Big(k^\rho k^\lambda - k^2 g^{\rho\lambda}\Big)$，得出

$$\overline{D}^{[b]tr}_{\mu\nu}(k) = \Big(\frac{-1}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big)\frac{1}{1+e_b^2\Pi^{[b]}(k^2)}\Big(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2+\mathrm{i}\epsilon}\Big)\,.$$

故

$$d(k^2) = \frac{e_b^2}{1+e_b^2\Pi^{[b]}(k^2)} = \frac{e^2}{Z_3 + e^2\Pi^{[b]}(k^2)}\,,$$

$\Pi^{[b]}(k^2)$ 用重整化参量表示时，其一圈部分是 $\Pi^{(0)}_{[1]}(k^2)$，因此又有：

$$d^{(1)}_{[1]}(k^2) \approx \frac{e^2}{Z_3 + e^2\,\Pi^{(0)}_{[1]}(k^2)}\,. \tag{410}$$

所以当 $e^2\,\Pi^{(0)}_{[1]}$ 减去常数 C 而变成 $e^2\,\Pi^{(1)}_{[1]}$ 时，则 $Z_3 = 1 - C$.

在 §7 求得 $e^2\Pi^{(1)}_{[0]}(k^2)$ 的如下的表达式：

$$e^2\Pi^{(1)}_{[0]}(k^2) = \frac{e^2}{12\pi^2}\ln\frac{\overline{\Lambda}^2}{m^2} + \frac{e^2}{2\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}y\, y(1-y)\ln\left[\frac{m^2}{m^2 - y(1-y)\,k^2 - \mathrm{i}\epsilon}\right].$$

在质壳减除方案下，$d(k^2)$ 满足 $d(0) = e^2$，在前面说过，这时 $e^2\Pi^{(1)}_{[0]}(k^2)$ 被减去的项是

$$e^2\Pi^{(1)}_{[0]}(0) = \frac{e^2}{12\pi^2}\ln\frac{\overline{\Lambda}^2}{m^2}\,,$$

而

$$e^2\Pi^{(1)}_{[1]}(k^2) = \frac{e^2}{2\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}y\, y(1-y)\ln\left[\frac{m^2}{m^2 - y(1-y)\,k^2 - \mathrm{i}\epsilon}\right],$$

$$Z_3 \approx 1 - e^2\Pi^{(1)}_{[0]}(0)\,.$$

在重整化点的 k^2 值是 M^2 的动量减除方案下 $(M^2<0)$,$d(k^2)$ 满足 $d(M^2)=e_M^2$, 所以 $e_M^2\Pi_{[0]}^{(1)}(k^2)$ 被减去的项是

$$e_M^2\Pi_{[0]}^{(1)}(M^2)=\frac{e_M^2}{12\pi^2}\ln\frac{\overline{\Lambda}^2}{m_M^2}$$
$$+\frac{e_R^2}{2\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}y\, y(1-y)\ln\left[\frac{m_M^2}{m_M^2-y(1-y)M^2-\mathrm{i}\epsilon}\right],$$

而

$$e_M^2\Pi_{[1]}^{(1)}(k^2)=\frac{e_M^2}{2\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}y\, y(1-y)\ln\left[\frac{m_M^2-y(1-y)M^2-\mathrm{i}\epsilon}{m_M^2-y(1-y)\,k^2-\mathrm{i}\epsilon}\right],$$

$$Z_3\approx 1-e_M^2\Pi_{[0]}^{(1)}(M^2)\,.$$

在最小减除的重整化点方案下，需要采用在 7.2 小节求得的如下结果：

$$e_R^2\Pi_{[0]}^{(1)}(k^2)=\frac{e_R^2}{12\pi^2}\left(\frac{1}{\varepsilon}-\gamma-\ln\frac{m_R^2}{4\pi\mu^2}\right)$$
$$+\frac{e_R^2}{2\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}y\, y(1-y)\ln\left[\frac{m_R^2}{m_R^2-y(1-y)\,k^2-\mathrm{i}\epsilon}\right].$$

这里的 m_R, e_R 是 $m_R(\mu)$ 和 $e_R(\mu)$ 的简略记号. 由 $e_R^2\Pi_{[0]}^{(1)}(k^2)$ 减去 $e_R^2/(12\pi^2\varepsilon)$ 得到

$$e_R^2\Pi_{[1]}^{(1)}(k^2)=-\frac{e_R^2}{12\pi^2}\left(\gamma+\ln\frac{m_R^2}{4\pi\mu^2}\right)$$
$$+\frac{e_R^2}{2\pi^2}\int_0^1 \mathrm{d}y\, y(1-y)\ln\left[\frac{m_R^2}{m_R^2-y(1-y)\,k^2-\mathrm{i}\epsilon}\right].$$

而

$$Z_3\approx 1-\frac{e_R^2}{12\pi^2}\frac{1}{\varepsilon}\,.$$

将各方案下的 $e^2\Pi_{[1]}^{(1)}(k^2)$ 代入 (391) 式，即得 $d_{[1]}^{(1)}(k^2)$ 的相应公式.

再说明一下如何用重整化群方法研究动量减除方案的 $d(k^2)$ 在 k^2 的深欧氏区的渐近行为. 在顾及重整化点的 M^2 值的变化时, $d(k^2)$ 是 k^2, M^2, m_M^2 和 e_M^2 的函数, 由于没有量纲, 这个函数将被记为 $d_{MO}(k^2/M^2, m_M^2/M^2, e_M^2)$. 于是归一条件和不变性条件为

$$d_{MO}\left(1, \frac{m_M^2}{M^2}, e_M^2\right) = e_M^2\,, \tag{411}$$

$$d_{MO}\left(\frac{k^2}{M^2}, \frac{m_M^2}{M^2}, e_M^2\right) = d_{MO}\left(\frac{k^2}{M_1^2}, \frac{m_1^2}{M_1^2}, e_1^2\right), \tag{412}$$

其中 M_1^2 是另一个重整化点的 k^2 值, e_1 和 m_1 代表相应的 e_R, m_R, 即

$$e_1^2 = d_{MO}\left(1, \frac{m_1^2}{M_1^2}, e_1^2\right). \tag{413}$$

对于深欧氏区, $-k^2/m^2 >> 1$, 通常假定重整化点满足 $m^2 << -M^2 \leq -k^2$ 和 $m^2 << -M_1^2 \leq -k^2$ 时, 可以令 m_M^2/M^2,m_1^2/M_1^2 为零 (见文献 [7]), 在极限情况下, $d_{MO}(k^2/M^2, m_M^2/M^2, e_M^2)$ 被其渐近形式 $d_{MO}(k^2/M^2, e_M^2)$ 代替, 故以上公式表明

$$d_{MO}\left(\frac{k^2}{M^2}, e_M^2\right) = d_{MO}\left(\frac{k^2}{M_1^2}, e_1^2\right), \tag{414}$$

$$e_M^2 = d_{MO}\left(1, e_M^2\right) = d_{MO}\left(\frac{M^2}{M_1^2}, e_1^2\right), \tag{415}$$

$$e_1^2 = d_{MO}\left(1, e_1^2\right) = d_{MO}\left(\frac{M_1^2}{M^2}, e_M^2\right). \tag{416}$$

由 $d_{MO}(k^2/M_1^2, e_1^2)$ 对 k^2 微商然后令 $k^2 = M_1^2$ 得

$$\frac{1}{M_1^2}\frac{\partial}{\partial x} d_{MO}(x, e_1^2)\Big|_{x=1} = \frac{\partial}{\partial M_1^2} d_{MO}\left(\frac{M_1^2}{M^2}, e_M^2\right) = \frac{\partial}{\partial M_1^2}(e_1^2)\,. \tag{417}$$

定义

$$\Phi(z) = \frac{\partial}{\partial x} d_{MO}(x, z)\Big|_{x=1}, \tag{418}$$

由 (417) 式看到，当 $\Phi(z)$ 已知时，得到 e_1^2 满足的微分方程：

$$M_1^2 \frac{\partial}{\partial M_1^2}(e_1^2) = \Phi(e_1^2)\,, \tag{419}$$

边条件是

$$e_1^2\Big|_{M_1^2=M^2} = e_M^2\,. \tag{420}$$

在方程式 (419) 两边乘 $\mathrm{d}M_1^2$ 变成：

$$\frac{\mathrm{d}e_1^2}{\Phi(e_1^2)} = \frac{\mathrm{d}M_1^2}{M_1^2}\,,$$

由于 M_1^2 是负的，右边是 $\mathrm{d}\ln(-M_1^2)$. 注意

$$e_M^2\Big|_{M^2=k^2} = d_{MO}\Big(\frac{k^2}{M_1^2}, e_1^2\Big) = d_{MO}\Big(\frac{k^2}{M^2}, e_M^2\Big)\,,$$

由此微分方程积分，取 M_1^2 的下限为 M^2, 上限为 k^2, 得到

$$\ln\Big(\frac{k^2}{M^2}\Big) = \int_{e_M^2}^{d_{MO}(k^2/M^2,e_M^2)} \frac{\mathrm{d}z}{\Phi(z)}\,. \tag{421}$$

借此可改进求不变荷的渐近式的方法.假设只知道 $d_{MO}(k^2/M^2, e_M^2)$ 按 e_M^2 展开的头两项的形式如下

$$d_{MO}(x, e_M^2) = e_M^2 + e_M^4 f(x) + \cdots\,.$$

而对于函数 $f(x)$ 毫无所知. 于是

$$\Phi(z) \approx \frac{\partial}{\partial x}\Big\{z^2\, f(x)\Big\}_{x=1} = z^2 f'(1)\,,$$

故

$$\ln\Big(\frac{k^2}{M^2}\Big) = \int_{e_M^2}^{d_{MO}(k^2/M^2,e_M^2)} \frac{\mathrm{d}z}{z^2 f'(1)} - \frac{1}{f'(1)}\frac{1}{d_{MO}(k^2/M^2, e_M^2)} + \frac{1}{f'(1)}\frac{1}{e_M^2}\,,$$

由此得出

$$d_{MO}\Big(\frac{k^2}{M^2},e_M^2\Big)\approx\frac{e_M^2}{1-e_M^2f'(1)\ln\left(k^2/M^2\right)},$$

其中只有常数 $f'(1)$ 是未知的. 又如, 由微扰论计算准至二圈的结果:

$$\begin{aligned}&d_{MO}\Big(\frac{k^2}{M^2},e_M^2\Big)\\&\approx\frac{e_M^2}{1-(e_M^2/12\pi^2)\ln\left(k^2/M^2\right)-(e_M^4/64\pi^4)\ln\left(k^2/M^2\right)},\end{aligned}\tag{422}$$

求出

$$\Phi(z)\approx\frac{z^2}{12\pi^2}+\frac{z^4}{64\pi^4},\tag{423}$$

按照同样的办法改进之后, 得到

$$\begin{aligned}&d_{MO}(x,e_M^2)\\&\approx\frac{e_M^2}{1-(e_M^2/12\pi^2)\ln x+(3e_M^4/16\pi^2)\ln\left(1-(e_M^2/12\pi^2)\ln x\right)},\end{aligned}\tag{424}$$

当 $(e_M^2/12\pi^2)\ln x<<1$ 时,

$$\begin{aligned}&d_{MO}(x,e_M^2)\\&\approx\frac{e_M^2}{1-(e_M^2/12\pi^2)\ln x-(e_M^4/64\pi^4)\ln x-(e_M^6/1536\pi^6)\ln^2 x},\end{aligned}\tag{425}$$

这样, 只是借助重整化群方程, 就决定了直至 e_M^6 的主导项.

还要注意, 在质壳减除的重整化方案下, 不变荷是 k^2/m^2 的函数, 将它在深欧氏区的渐近形式记作 $d_0(-k^2/m^2,e^2)$, 其中 m 和

e 代表实验值，于是

$$d_0\Big(-\frac{k^2}{m^2}, e^2\Big) = d_{MO}\Big(\frac{k^2}{M^2}, e_M^2\Big)\,, \tag{426}$$

$$e_M^2 = d_0\Big(-\frac{M^2}{m^2}, e^2\Big)\,. \tag{427}$$

其中第二式表示出 e_M^2 与 e^2 的关系. 其他方面在此不作更多的说明. 关于用重整化群方法究传播函数和三点顶角函数在紫外和红外区的渐近行为的详细论述，参看 Bogoliubov 等人的著作 [2].

下面推导在最小减除方案下一般正规顶角函数满足的重整化群方程，并对于相应的有效耦合常数作简单的讨论. 如前所述，在定义维数正规化方法的 D 维时空中，坐标和动量的质量量纲仍然是 -1 和 1. 拉氏函数 (密度) 的量纲是 D. 于是电磁场和电子场的场函数的量纲分别是 $(D-2)/2$ 和 $(D-1)/2$, 未重整化耦合常数 e_b 的量纲是 $D-\varepsilon$, 其中 ε 代表 $2-D/2$. 在最小减除的重整化方案下，保持重整化耦合常数 e_R, 重整化规范参量 ξ_R 以及各重整化常数都没有量纲. 因此，在 e_b 与 e_R 的关系中出现参量 μ. 而且也引用重整化常数 Z_m 表示 m_b 与 m_R 的乘法关系：

$$e_b = \frac{1}{\sqrt{Z_3}}\, e_R\, \mu^{\varepsilon}\,, \tag{428}$$

$$m_b = Z_m m_R\,. \tag{429}$$

ξ_b 仍然等于 $Z_3\,\xi_R$, 裸场仍然等于重整化场与 $\sqrt{Z_2}$ 或 $\sqrt{Z_3}$ 的积，故原始的有效拉氏函数用重整化场函数和重整化参量表示时可以写成：

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(x) = {} & Z_2\overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - Z_m\, m_R)\psi(x) - Z_3\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \\ & -Z_1\, e_R\, \mu^{\varepsilon}\, \overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)A_\mu(x) - \frac{1}{2\xi_R}\big(\partial^\mu A_\mu(x)\big)^2\,,\end{aligned} \tag{430}$$

其中 $Z_1 = Z_2$. 所以 $\mathcal{L}$ 的基本项是

$$\mathcal{L}^{[b]} = \overline{\psi}(\mathrm{i}\gamma^\mu \partial_\mu - m_R)\psi - e_R \mu^\varepsilon \overline{\psi}\gamma^\mu \psi A_\mu - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \frac{1}{2\xi_R}(\partial^\mu A_\mu)^2 . \tag{431}$$

$\mathcal{L}$ 的其余部分代表重整化抵消项的一般结构. 前面已经给出由微扰论计算的准至一圈的 Z_3 的表达式, 其他重整化常数为

$$Z_1 = Z_2 \approx 1 - \frac{e_R^2}{16\pi^2} \frac{\xi_R}{\varepsilon} , \tag{432}$$

$$Z_m \approx 1 - \frac{e_R^2}{16\pi^2}(3 + 2\xi_R) \frac{1}{\varepsilon} , \tag{433}$$

准至二圈的 Z_3 是

$$Z_3 \approx 1 - \left(\frac{e_R^2}{12\pi^2} + \frac{e_R^4}{128\pi^4} \right) \frac{1}{\varepsilon} , \tag{434}$$

各个重整化常数都与 m_R 无关, 这是最小减除重整化方案 (以及修正的最小减除方案) 的重要特点.

设 $\Gamma(p_1, p_2, \cdots, p_n, e_R, m_R, \xi_R, \mu)$ 是重整化的 n 点正规顶角函数, p_1 至 p_n 是外动量, 简记为 p_j, $\Gamma(p_j, e_R, m_R, \xi_R, \mu)$ 既明显地依赖于 μ, 又通过重整化参量 e_R, m_R, ξ_R 依赖于 μ. 再用 $\Gamma_b(p_j, e_b, m_b, \xi_b, \varepsilon)$ 代表相应的未重整化的顶角函数, 于是有

$$\Gamma(p_j, e_R, m_R, \xi_R, \mu) = Z_\Gamma \, \Gamma_b(p_j, e_b, m_b, \xi_b, \varepsilon) . \tag{435}$$

而

$$Z_\Gamma = (Z_2)^{E_F/2} (Z_3)^{E_B/2} , \tag{436}$$

其中 E_F 和 E_B 分别是 Γ 的 (已截去) 电子外腿和光子外腿的数目, 它们的和即是 n. 因此在 μ 的无穷小改变下有

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mu}\Gamma(p_j, e_R, m_R, \xi_R, \mu) &= \frac{\mathrm{d}Z_\Gamma}{\mathrm{d}\mu} \Gamma_b(p_j, e_b, m_b, \xi_b, \varepsilon) \\ &= \frac{\partial \ln Z_\Gamma}{\partial \mu} \Gamma(p_j, e_R, m_R, \xi_R, \mu) , \end{aligned}$$

即

$$\Big(\mu\frac{\partial}{\partial\mu} + \mu\frac{\partial e_R}{\partial\mu}\frac{\partial}{\partial e_R} + \mu\frac{\partial m_R}{\partial\mu}\frac{\partial}{\partial m_R} + \mu\frac{\partial\xi_R}{\partial\mu}\frac{\partial}{\partial\xi_R}\Big)\,\Gamma(p_j, e_R, m_R, \xi_R, \mu) = \mu\frac{\partial\,\ln Z_\Gamma}{\partial\mu}\,\Gamma(p_j, e_R, m_R, \xi_R, \mu)\,.$$

定义

$$\beta(e_R) = \mu\frac{\partial e_R}{\partial\mu}\,, \tag{437}$$

$$\gamma_\psi(e_R) = \mu\frac{\partial\,\ln Z_2}{\partial\mu}\,, \tag{438}$$

$$\gamma_A(e_R) = \mu\frac{\partial\,\ln Z_3}{\partial\mu}\,, \tag{439}$$

$$\gamma_m(e_R) = \mu\frac{\partial\,\ln Z_m}{\partial\mu}\,, \tag{440}$$

$$\gamma_\Gamma(e_R) = \mu\frac{\partial\,\ln Z_\Gamma}{\partial\mu} = \frac{1}{2}\Big(E_F\,\gamma_\psi(e_R) + E_A\,\gamma_A(e_R)\Big)\,. \tag{441}$$

$\beta(e_R)$ 称为 β 函数, $\gamma_\psi(e_R)$ 和 $\gamma_A(e_R)$ 分别称为电子场和电磁的反常量纲. 再由 $Z_3\xi_R = \xi_b$ 和 $Z_m\,m_R = m_b$, 有

$$\mu\frac{\partial\xi_R}{\partial\mu} = -\gamma_A(e_R)\,\xi_R\,, \tag{442}$$

$$\mu\frac{\partial m_R}{\partial\mu} = -\gamma_m(e_R)\,m_R\,. \tag{443}$$

这样, 可将 $\Gamma(p_j, e_R, m_R, \xi_R, \mu)$ 的上述微分方程写成

$$\Big(\mu\frac{\partial}{\partial\mu} + \beta(e_R)\frac{\partial}{\partial e_R} - \gamma_m(e_R)\,m_R\frac{\partial}{\partial m_R} - \gamma_\Gamma(e_R) - \gamma_A(e_R)\,\xi_R\frac{\partial}{\partial\xi_R}\Big)\,\Gamma(p_j, e_R, m_R, \xi_R, \mu) = 0\,. \tag{444}$$

这属于 't Hooft-Weinberg 重整化群方程的类型. 借助上面给出的重整化常数的低次表达式可以求出相应级别的 $\beta(y)$,$\gamma_\psi(y)$,$\gamma_A(y)$ 和 $\gamma_m(y)$, 结果是:

$$\beta(e_R) = \frac{e_R^3}{12\pi^2} + \frac{e_R^5}{64\pi^4} + \cdots , \tag{445}$$

$$\gamma_\psi(e_R) = \frac{e_R^2}{8\pi^2}\,\xi_R + \cdots , \tag{446}$$

$$\gamma_A(e_R) = \frac{e_R^2}{6\pi^2} + \frac{e_R^4}{32\pi^4} + \cdots , \tag{447}$$

$$\gamma_m(e_R) = -\frac{e_R^2}{8\pi^2}(3 + 2\xi_R) + \cdots . \tag{448}$$

例如, 由

$$e_R = \sqrt{Z_3}\,\mu^{-\varepsilon}\, e_b\,, \tag{449}$$

有

$$\mu\frac{\partial e_R}{\partial \mu} = -\varepsilon\, e_R + \mu^{-\varepsilon}\, e_b\, \mu\frac{\partial \sqrt{Z_3}}{\partial \mu} = -\varepsilon\, e_R + e_R\, \mu\frac{\partial \ln \sqrt{Z_3}}{\partial \mu}\,, \tag{449'}$$

在其中代入 $\ln \sqrt{Z_3} \approx -\left(\frac{e_R^2}{24\pi^2} + \frac{e_R^4}{256\pi^4}\right)\frac{1}{\varepsilon}$, 得

$$\begin{aligned}\beta(e_R) &\approx -\varepsilon\, e_R - \left(\frac{e_R^2}{12\pi^2} + \frac{e_R^4}{64\pi^4}\right)\left(\mu\frac{\partial e_R}{\partial \mu}\right)\frac{1}{\varepsilon} \\ &\approx \left(\frac{e_R^3}{12\pi^3} + \frac{e_R^5}{64\pi^4}\right).\end{aligned} \tag{450}$$

其次, $\Gamma(p_j, e_R, m_R, \xi_R, \mu)$ 的质量量纲是

$$D_\Gamma = 4 - E_B - \frac{3}{2}E_F\,,$$

这即是相应的未重整化顶角函数的表观发散度. 设 $p_1^{(0)}$ 至 $p_n^{(0)}$ 是一组给定的外动量, 假定它们不在质壳上. 设 λ 是正参量, 注意 e_R 和 ξ_R 没有量纲, 故

$$\Gamma(\lambda p_j^{(0)}, e_R, m_R, \xi_R, \mu) = \lambda^{D_\Gamma}\Gamma(p_j^{(0)}, e_R, m_R/\lambda, \xi_R, \mu/\lambda)\,. \tag{451}$$

以 $\lambda\frac{\partial}{\partial\lambda}$ 作用于此式，可得

$$\Big(\lambda\frac{\partial}{\partial\lambda}+\mu\frac{\partial}{\partial\mu}+m_R\frac{\partial}{\partial m_R}-D_\Gamma\Big)\Gamma(\lambda p_j^{(0)},e_R,m_R,\xi_R,\mu)=0\,. \quad (452)$$

由此可将上面的重整化群方程改写成如下的形式

$$\Big(\lambda\frac{\partial}{\partial\lambda}-\beta(e_R)\frac{\partial}{\partial e_R}+\big(1+\gamma_m(e_R)\big)\,m_R\frac{\partial}{\partial m_R}$$

$$+\gamma_\Gamma(e_R)-D_\Gamma+\gamma_A(e_R)\,\xi_R\frac{\partial}{\partial\xi_R}\Big)\,\Gamma(\lambda p_j^{(0)},e_R,m_R,\xi_R,\mu)=0\,. \quad (453)$$

这种重整化群方程的解可以表示为 (例如，见文献 [9] 中的说明)：

$$\Gamma(\lambda p_j^{(0)},e_R,m_R,\xi_R,\mu)=\lambda^{D_\Gamma}\,\Gamma(p_j^{(0)},\bar{e}(\lambda),\overline{m}(\lambda),\bar{\xi}(\lambda),\mu)$$

$$\times\exp\Big\{-\int_1^\lambda\gamma_\Gamma(\bar{e}(\lambda'))\frac{\mathrm{d}\lambda'}{\lambda'}\Big\}\,. \quad (454)$$

其中 $\bar{e}(\lambda)$ 称为有效耦合常数或者流动耦合常数，$\overline{m}(\lambda)$，$\bar{\xi}(\lambda)$ 分别称为有效质量和有效规范参量. 它们由如下的微分方程和边条件来定义：

$$\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\bar{e}(\lambda)=\beta\big(\bar{e}(\lambda)\big)\,,\quad \bar{e}(1)=e_R\,, \quad (455)$$

$$\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\overline{m}(\lambda)=-\big\{1+\gamma_m\big(\bar{e}(\lambda)\big)\big\}\overline{m}(\lambda)\,,\quad \overline{m}(1)=m_R\,, \quad (456)$$

$$\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\bar{\xi}(\lambda)=-\gamma_A\big(\bar{e}(\lambda)\big)\,\bar{\xi}(\lambda)\,,\quad \bar{\xi}(1)=\xi_R\,. \quad (457)$$

(454) 式表明，质壳外的 $\Gamma(\lambda p_j^{(0)},e_R,m_R,\xi_R,\mu)$ 等于同一顶角函数在固定动量 $p_j^{(0)}$ 和有效参量下的值与量纲因子 λ^{D_Γ} 以及反常量纲因子 $\exp\Big\{-\int_1^\lambda\gamma_\Gamma(\bar{e}(\lambda'))\frac{\mathrm{d}\lambda'}{\lambda'}\Big\}$ 的积.

从 $\bar{e}(\lambda)$ 的方程式和边条件可以看出

$$\bar{e}(\lambda)=e_R(\lambda\mu)\,, \quad (458)$$

即是说，$\bar{e}(\lambda)$ 正是以积 $\lambda\mu$ 作为新的 μ 时的重整化耦合常数. 也等于说，将 $e_R(\mu)$ 中的 μ 换成 $\lambda\mu$, 就得到有效耦合常数 $\bar{e}(\lambda)$. $\bar{e}(\lambda)$ 的微分方程可写成：

$$\frac{\mathrm{d}\,\bar{e}(\lambda)}{\beta(\bar{e}(\lambda))} = \mathrm{d}\ln\lambda\,, \tag{459}$$

故

$$\int_{e_R}^{\bar{e}(\lambda)} \frac{\mathrm{d}y}{\beta(y)} = \ln\lambda\,, \tag{460}$$

当 $\lambda\to\infty$ 或 $\lambda\to 0$ 时，积分发散. 函数 $\beta(y)$ 的零点称为重整化群的不动点. 设 $y=e_f$ 是一个不动点，于是 $\bar{e}(\lambda)$ 在 e_f 处不随 λ 而改变. 如果 $\beta(y)$ 在这点附近是单调下降的，那么接近于 e_f 的 $\bar{e}(\lambda)$ 随 $\lambda\to\infty$ 而趋于 e_f, 这种不动点称为紫外稳定的. 反之，如果 $\beta(y)$ 在这点附近是单调上升的，则接近于 e_f 的 $\bar{e}(\lambda)$ 随 $\lambda\to 0$ 而趋于 e_f, 这种不动点称为红外稳定的. 详细的讨论，可参看文献 [6], [9], [10] 或者其中所引的原始文献. 由 (449) 式及 (449′) 式可知，$y=0$ 是一个不动点，实际上不只是量子电动力学理论具有这种显然的不动点，而有效耦合常数在接近于零处是否随 $\lambda\to\infty$ 而趋于零总是特别受到关注.

现在利用微扰论给出的近似 β 函数，求有效耦合常数的表达式. 在非阿贝尔规范理论中，β 函数的微扰展开的头两项也是重整化耦合常数的三次和五次项，但是三次项的系数通常是负的. 为了稍兼顾这一点，暂且保持三次和五次项的系数为 b_0 和 b_1, 即

$$\beta(y) = b_0\,y^3 + b_1\,y^5\,, \tag{461}$$

于是方程式 (460) 简化为 $\int_{e_R}^{\bar{e}(\lambda)} \frac{\mathrm{d}y}{b_0\,y^3+b_1\,y^5} = \ln\lambda$. 用 z 代表 y^2, 略去 b_1 的高次项得

$$\ln\lambda = \int_{e_R^2}^{\left(\bar{e}(\lambda)\right)^2} \frac{\mathrm{d}z}{2b_0\,z^2}\left(1-\frac{b_1}{b_0}\,z\right), \tag{462}$$

故

$$\ln(\lambda\mu) + \frac{1}{2b_0(\bar{e}(\lambda))^2} + \frac{b_1}{2b_0^2}\ln\left(\bar{e}(\lambda)\right)^2$$

$$= \ln(\mu) + \frac{1}{2b_0\, e_R^2} + \frac{b_1}{2b_0^2}\ln e_R^2, \quad (463)$$

注意 $\bar{e}(\lambda)$ 是积 $\lambda\mu$ 的函数，而右边的量是 μ 的函数. 此式表明，右边与 μ 无关，左边与 λ, μ 无关. 由此也知道，存在如下的与 λ, μ 无关的常数 Λ：

$$\ln(\Lambda) = \ln(\mu) + \frac{1}{2b_0\, e_R^2} + \frac{b_1}{2b_0^2}\ln e_R^2, \quad (464)$$

这表示出 e_R 与 μ 的关系. 再由 (463) 式解出 $\bar{e}(\lambda)$ 得到

$$(\bar{e}(\lambda))^2 \approx \frac{e_R^2}{1 - 2b_0 e_R^2 \ln\lambda + (b_1/b_0)e_R^2 \ln\{1 - 2b_0 e_R^2 \ln\lambda\}}$$

$$\approx \frac{e_R^2}{1 - 2b_0 e_R^2 \ln\lambda - 2b_1 e_R^4 \ln\lambda}. \quad (465)$$

由于 b_0 是正的，当 λ 从 1 增大时，$(\bar{e}(\lambda))^2$ 从 e_R^2 增大. 如果在分母中只保留到 e_R^2 项，会遇到现在形式下的 Landau 鬼问题：分母随 $(2b_0 e_R^2)\ln\lambda$ 趋于 1 而趋于零. 但是这一公式只在 $(2b_0 e_R^2)\ln\lambda << 1$ 时成立，因此与前面的类似公式一样，无助于研究这种问题，这是在有关著作中常被提到的. 另一方面，对于像量子色动力学一类的非阿贝尔规范理论，b_0 是负的，而且在保持相应的公式可用的条件下，有效耦合常数会随 λ 的增大缓慢地趋于零. 这种理论称为是渐近自由的. 量子电动力学没有渐近自由的性质.

参 考 文 献

[1] Bogoliubov N N, Parasiuk O S. Acta Math., 1957, 97: 227.

[2] Bogoliubov N N, Shirkov D V. Introduction to the Theory of Quantized Fields. New York: Interscience, 1959.

[3] Hepp H. Comm. Math. Phys., 1966, 2: 301.

[4] Zimmerman W. Lectures on Elementary Particles and Quantum Field Theory, ed. Deser S, Grisarn M, Pendleton H. Cambridge: MIT Press, 1970.

[5] Lifshitz E M, Pitaevskii L P. Relativistic Quantum Theory (part 2). Oxford: Pergamon Press, 1974.

[6] Itzykson C, Zuber J-B. Quantum Field Theory. New York: McGraw-Hill, 1980.

[7] Bjorken J D, Drell S D. Relativistic Quantum Field. New York: McGraw-Hill, 1965.

[8] 朱洪元. 量子场论. 北京：科学出版社， 1960.

[9] 杨炳麟. 量子场论导引. 北京：科学出版社， 1987.

[10] 戴元本. 相互作用的规范理论 (第二版). 北京：科学出版社， 2005.

[11] Pauli W, Villars F. Rev. Mod. Phys., 1949, 21: 434.

[12] 't Hooft G, Veltman M. Nucl. Phys., 1972, B44: 189.

[13] 't Hooft G. Nucl. Phys., 1973, B61: 455.

[14] Bloch F, Nordsieck A. Phys. Rev.,1937, 52: 54.

[15] Yennie D R, Frantschi S C, Suura H. Ann. Phys.(N.Y.),1961, 13: 379.

[16] Grammer G, Yennie D R. Phys. Rev., 1973,D8: 4332.

[17] Chung V. Phys. Rev., 1965, 140B:1110.

[18] Kibble T W B. Phys. Rev., 1968, 175: 1624.

[19] Triebwasser S, Dayoff E S, Lamb W E. Phys. Rev., 1953, 89: 98.

[20] Andrews D A, Newton G. Phys. Rev. Lett., 1976, 37: 1254.

[21] Bethe H A. Phys. Rev., 1947, 72: 339.

[22] Erickson G W. Phys. Rev. Lett., 1971, 27: 780.

[23] Mohr J. Phys. Rev. Lett., 1975, 34: 1050.