高等量子力学讲义

庄鹏飞

目　录

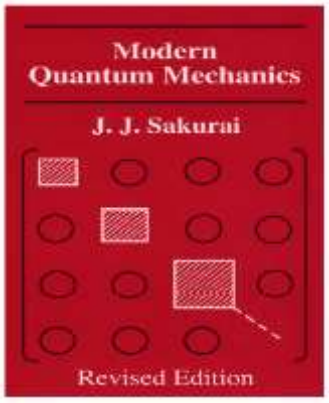
第一章、矩阵力学 **5**
1.1 复空间的矢量和算符 5
1.2 厄米算符 6
1.3 表象：矢量和算符的表示 8
1.4 量子力学基本假设：{力学量，态}与{算符，矢量}的关系 9
1.5 表象变换 10
1.6 坐标表象与动量表象 12
1.7 测量 16
1.8 不确定关系 20
第二章、量子动力学 **23**
2.1 时间演化和 Schroedinger 方程 23
2.2 Schroedinger 绘景与 Heisenberg 绘景 29
2.3 一维线性谐振子的代数解法 33
2.4 谐振子的相干态 43
2.5 坐标表象的 Schroedinger 方程 46
2.6 Feynman 路径积分量子化 49
2.7 规范变换 63
第三章、角动量理论 **75**
3.1 旋转与角动量 75
3.2 角动量的本征值和矩阵表示 78
3.3 自旋角动量 84
3.4 轨道角动量与多体 Schroedinger 方程 91
3.5 两个角动量的耦合 102
3.6 自旋关联与 Bell 不等式 108
3.7 系综与态密度算符 112
第四章、近似方法 **117**
4.1 定态微扰论 117
4.2 定态方程的 WKB 近似 129
4.3 变分法（非微扰方法） 132
4.4 强耦合微扰方法（大 $1/N$ 展开） 134

4.5 散射问.....137
4.6 Green 函数方法与 Born 级数.....139
4.7 Lippmann－Schwinger 方程.....146
4.8 分波法.....151
4.9 相互作用绘景与微扰论.....157
4.10 含时微扰论.....161
第五章、对称与守恒.....**170**
5.1 对称、守恒与简并.....170
5.1.1 分析力学中的对称性与守恒量.....170
5.1.2 量子力学中的对称性与守恒量.....170
5.1.3 守恒量的性质.....172
5.1.4 简并.....173
5.2 空间反演不变与宇称守恒.....173
5.3 时间反演变换.....178
5.3.1 反幺正变换.....178
5.3.2 时间反演变换.....179
5.4 全同粒子对称性.....182
5.4.1 全同性原理与交换对称性.....182
5.4.2 两全同粒子体系的态.....183
5.4.3 全同性原理的测量效应.....186
5.4.4 两全同费米子体系的自旋波函数.....188
5.5 简单全同粒子体系.....189
5.5.1 氦原子.....189
5.5.2 原子的角动量.....190
5.5.3 Pauli 不相容原理导致的量子压强.....191
5.5.4 全同粒子的散射.....192
第六章、二次量子化.....**194**
6.1 Fock 空间.....194
6.1.1 消灭产生算符.....194
6.1.2 表象变换.....195
6.1.3 由交换对称性计算对易关系.....196
6.1.4 确定单粒子态.....198

6.1.5 粒子数算符 199
6.2 用消灭产生算符表示力学量 201
6.2.1 可加性单粒子力学量 201
6.2.2 可加性两粒子力学量 202
6.2.3 单粒子连续谱情形 204
6.3 量子动力学与二次量子化 205
6.4 坐标表象中的力学量平均值 ..... 207(208)
6.4.1 动能算符 ..... 207(208)
6.4.2 费米气体的力学量平均值 208
6.4.3 玻色气体的力学量平均值 212
6.5 费米体系的 Hartree 平均场方法 214
第七章、Dirac 方程 218
7.1 准备 ..... 218(223)
7.1.1 自然单位制 ..... 218(223)
7.1.2 Minkowski 空间 ..... 219(224)
7.2 相对论运动方程 ..... 220(225)
7.2.1 Klein-Gordon 方程及其困难 ..... 220(225)
7.2.2 Dirac 方程及其困难 228
7.2.3 Dirac 方程的几率正定 230
7.2.4 Dirac 方程的自旋 231
7.2.5 无质量费米子的二分量理论 232
7.3. Dirac 方程的协变性 233
7.3.1 一般 Lorentz 变换 233
7.3.2 连续 Lorentz 变换 234
7.3.3 旋转与角动量 236
7.3.4 空间反演不变性（P 变换） 237
7.3.5 时间反演不变性（T 变换） 237
7.3.6 力学量的 Lorentz 结构 237
7.4 电磁场问题 239
7.4.1 局域规范不变性 239
7.4.2 非相对论极限与电子自旋 240
7.5 中心场问题 242

7.6 自由Dirac 方程的平面波解 244

《高等量子力学》参考教材



1） 评价标准

作业（~30 分）+期末考试（~70 分）

线下学习的交作业本，线上学习的交作业本的扫描或者拍照。

每次按时交作业 0.5 分，正确+0.5 分；补交作业 0 分，正确+0.5 分。

各位助教，作业评分必须严格按规矩办！

无期中考试，期末一锤子买卖，不要掉以轻心！

2） 助教负责作业评分与答疑（含线上同学）

黄国俊（hgj17@mails.tsinghua.edu.cn）

第 1 班：本科生学号 2017012061–2020013007，38 人。

陈诗乐（csl18@mails.tsinghua.edu.cn）

第 2 班：博士生学号 2019311452- 2021311327，35 人。

苏铂烨（sby20@mails.tsinghua.edu.cn）

第 3 班：博士生学号 2021311328-2021311375，35 人。

李荣浩（lrh20@mails.tsinghua.edu.cn）

第 4 班：博士生学号 2021311738-，14 人 + 线上线下教学技术工作

●作业全改。每小班选出 2 人,与助教保持联系,每周三按小班交作业至物理系作业箱,并取回上次作业,每人准备 2 个作业本。



●口头答疑，书面答疑。

●经常性的与学生联系。

●及时上载各种通知，讲义，作业，和答案（李荣浩）。

3） 教师（庄鹏飞，zhuangpf@mail.tsinghua.edu.cn)

工作：认真备课，认真上课（对不起，课间一般不休息，你可以自由进出）。

● 听课原则：姜太公钓鱼，愿者上钩。不要求一定要来教室听课，也可以迟到早退，不影响课程成绩。但强烈推荐来教室听课，因为关键之处只能现场体会，难以在讲义或书上看到。

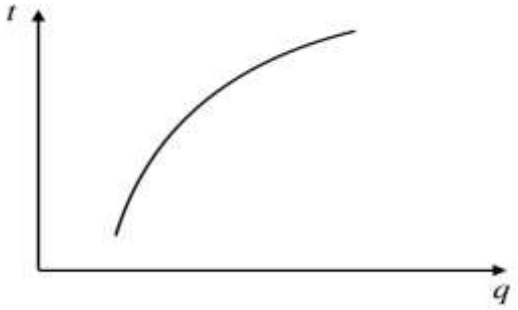
● 《高等量子力学》与《量子力学》并没有本质的差别，主要是系统性和深入理解。因此，基础好的同学不要太失望，毕竟量子力学的学习不是一朝一夕之功；基础稍差的同学也不要泄气，只要努力完全可以通过高量课程学好量子力学。

● 线上听课的同学有问题多联系助教和老师。

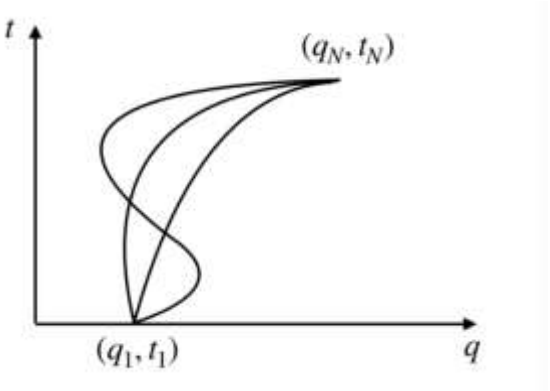
第 0 章：高量的内容

0.1 分析力学：力学量$A(q,p)$在任意时刻t的取值唯一，由 *Hamilton* 方程确定：

$$\begin{cases} Hamiltonian: \quad H(q,p)=\dfrac{p^2}{2m}+V(q) \\ \dfrac{\partial A}{\partial t}=\dfrac{\partial H}{\partial p}\dfrac{\partial A}{\partial q}-\dfrac{\partial H}{\partial q}\dfrac{\partial A}{\partial p} \\ Initial\ \ condition: \quad A(q(t_0),p(t_0)) \end{cases}$$



0.2 量子力学：力学量$A(q,p)$在任意时刻t的取值一般不确定，但取值几率确定。



0.3 高等量子力学内容与教学安排：

■量子力学的数学表述（Dirac 符号和线性空间）与物理意义

→ 第一章：矩阵力学

■量子力学的时间演化

→ 第二章：量子动力学

■量子力学的应用

→ 第四章：近似方法

以上是本科量子力学的系统化和深化。

以下是本科量子力学的提高和扩展，是新理论(量子统计和量子场论)的基础。

■量子力学对称性

→ 第三章：角动量理论

→ 第五章：对称与守恒

■量子多体理论

→ 第六章：二次量子化

■相对论量子力学

→ 第七章：*Dirac*方程

第 1 章：矩阵力学

力学量取值一般不确定

→ 不再能用一个函数来表示力学量，因为它是确定的。用算符表示力学量。

力学量在什么条件下有确定值？取值不确定时什么量确定？

→ 不能用抽象的算符本身来判断。引入体系所处的态来判断。

力学量和态是量子力学的基本物理量，先讨论它们的数学描述。

1.1 复空间的矢量和算符

考虑任意维数（分离维，连续维，有限维，无限维）的复变空间中的矢量，用 Dirac 符号$|\psi\rangle$表示（想象 3 维空间中的实矢量$\vec{A}$，下同）。

由于$|\psi\rangle$是一个复矢量，引入$|\psi\rangle$的厄米共轭矢量，即转置复共轭矢量$\langle\psi|$，（注意：1.与实矢量不同，2.考虑到进入表象后矢量是一列矩阵，$\langle\psi|$不是$|\psi\rangle$的简单复共轭，而是转置复共轭），分别称为右矢和左矢。左矢与右矢并不互相独立，而是互为厄米共轭：

$$|\psi\rangle^{\dagger} = \langle\psi|, \qquad {}^{\dagger}\langle\psi| = |\psi\rangle。$$

一个矢量既可以用右矢$|\psi\rangle$，也可以用左矢$\langle\psi|$表示。

矢量$|\psi\rangle$的模方，即长度，用$|\psi\rangle$与$\langle\psi|$的内积$\langle\psi|\psi\rangle$表示，是一个实数，

$$\langle\psi|\psi\rangle^{\dagger} = \langle\psi|\psi\rangle。$$

任意两个矢量$|\psi\rangle$和$|\varphi\rangle$的内积$\langle\psi|\varphi\rangle$是一个复数，

$$\langle\psi|\varphi\rangle^{\dagger} = \langle\varphi|\psi\rangle。$$

复常数α与矢量的乘积$\alpha|\psi\rangle$还是一个矢量，其厄米共轭为

$$(\alpha|\psi\rangle)^{\dagger} = \langle\psi|\alpha^{*}。$$

注意：一个复常数的厄米共轭就是复共轭，$\alpha^{\dagger} = \alpha^{*}$。

复变矢量空间中对矢量$|\psi\rangle$的运算（平移，旋转，反演，等等）$\hat{T}$一般是复算符，作用于矢量后仍然是一个矢量$\hat{T}|\psi\rangle$，其厄米共轭为

$$\left(\hat{T}|\psi\rangle\right)^{\dagger} = \langle\psi|\hat{T}^{\dagger},$$

$\hat{T}^{\dagger}$是$\hat{T}$的厄米共轭算符。$\hat{T}$作用于右矢，$\hat{T}^{\dagger}$作用在左矢。

$$\langle\psi|\hat{T}|\varphi\rangle^{\dagger}=\langle\varphi|\hat{T}^{\dagger}|\psi\rangle。$$

由于

$$\left(\hat{T}\hat{F}|\psi\rangle\right)^{\dagger}=\left((\hat{T}\hat{F})|\psi\rangle\right)^{\dagger}=\langle\psi|(\hat{T}\hat{F})^{\dagger}$$

$$\left(\hat{T}\hat{F}|\psi\rangle\right)^{\dagger}=\left(\hat{T}(\hat{F}|\psi\rangle)\right)^{\dagger}=\langle\psi|\hat{F}^{\dagger}\hat{T}^{\dagger},$$

故

$$(\hat{T}\hat{F})^{\dagger}=\hat{F}^{\dagger}\hat{T}^{\dagger}。$$

1.2 厄米算符

若$\hat{F}^{\dagger}=\hat{F}$，称$\hat{F}$为厄米算符。厄米算符的性质：

（1）对于任意态$|a\rangle$和$|b\rangle$,

$$\langle a|\hat{F}|b\rangle=\langle b|\hat{F}^{\dagger}|a\rangle^{*}=\langle b|\hat{F}|a\rangle^{*},$$

当$|b\rangle=|a\rangle$，有$\langle a|\hat{F}|a\rangle=\langle a|\hat{F}|a\rangle^{*}$，说明厄米算符的$\langle a|\hat{F}|a\rangle$是实数。

（2）算符的本征方程

$$\hat{F}|i\rangle=f_i|i\rangle,\qquad \hat{F}|j\rangle=f_j|j\rangle$$

由于

$$\langle j|\hat{F}|i\rangle=f_i\langle j|i\rangle,$$

$$\langle j|\hat{F}=\langle j|f_j^{*},\qquad \langle j|\hat{F}|i\rangle=f_j^{*}\langle j|i\rangle$$

有

$$\left(f_i-f_j^{*}\right)\langle j|i\rangle=0$$

当$j=i$, $\langle i|i\rangle\neq 0$, $f_i=f_i^{*}$，说明厄米算符的本征值为实数。

（3）当$j\neq i$，如果$f_i-f_j\neq 0$,有$\langle j|i\rangle=0$，说明厄米算符属于不同本征值的本征态正交。考虑到总可以归一化，有正交归一条件

$$\langle i|j\rangle=\delta_{ij}$$

问题：同一本征值的不同本征态是否正交？

若同一本征值对应多个本征态，即有简并，例如有g重简并（$g \geq 2$）：

$$\hat{F}|i,j\rangle = f_i|i,j\rangle, \quad j = 1,\dots g$$

这g个本征矢量是否正交？重新定义g个新态：

$$|i,n\rangle = \sum_{j=1}^{g} c_{nj}|i,j\rangle, \qquad n = 1,\dots g$$

$$\hat{F}|i,n\rangle = \sum_{j=1}^{g} c_{nj}\hat{F}|i,j\rangle = f_i \sum_{j=1}^{g} c_{nj}|i,j\rangle = f_i|i,n\rangle$$

所以$|i,n\rangle$仍然是$\hat{F}$的属于本征值f_i的本征态。

能否通过合适的选取系数c_{nj}，使得这g个新态正交归一？

$$\langle i,m|i,n\rangle = \delta_{mn},$$

共有g个归一化方程和$\frac{g^2-g}{2}$个正交方程，共$\frac{g(g+1)}{2}$个独立方程$< g^2$个待定系数c_{nj}，故有多种选择来满足正交归一化的系数c_{nj}，使得新态$|i,n\rangle$正交归一：

$$\langle i,m|j,n\rangle = \delta_{ij}\delta_{mn},$$

δ_{ij}来自于不同本征值的本征态的正交归一，δ_{mn}来自于线性叠加正交法。

结论：无论简并还是非简并，厄米算符的本征态正交归一。

（4）可以证明（不容易）：厄米算符的本征矢满足完备性条件，对于任意矢量$|\psi\rangle$有

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i|i\rangle$$

$$\langle j|\psi\rangle = \sum_i a_i\langle j|i\rangle = a_j$$

$$|\psi\rangle = \sum_i \langle i|\psi\rangle|i\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\psi\rangle$$

故完备性条件可以表示成

$$\boldsymbol{\sum_i |i\rangle\langle i| = 1}$$

【注意：两个矢量$|\psi\rangle$和$|\varphi\rangle$的内积$\langle\psi|\varphi\rangle$是一个复数，外积$|\psi\rangle\langle\varphi|$却是一个算符。这是因为将外积作用于一个矢量$(|\psi\rangle\langle\varphi|)|\chi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle|\psi\rangle$还是一个矢量，故外积$|\psi\rangle\langle\varphi|$是一个算符。】

总结（3）和（4）：厄米算符的本征矢可以构成一组正交归一和完备的线性矢量空间基矢，称为一个表象。任意的矢量和算符可以在该表象展开。

1.3 表象：矢量和算符的表示

矢量$|\psi\rangle$和算符$\hat{F}$只有进入一个表象，才有具体的表示。

力学量$\hat{A}$的本征方程

$$\hat{A}|i\rangle = a_i|i\rangle,$$

$\hat{A}$的本征矢$|i\rangle$构成的表象叫做A表象。

利用完备性条件，将任意的矢量$|\psi\rangle$进入A表象，

$$|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\psi\rangle$$

表明进入表象后，抽象的矢量$|\psi\rangle$表示为一列矩阵ψ，矩阵元为$\langle i|\psi\rangle$，

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 = \langle 1|\psi\rangle \\ \psi_2 = \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \psi_i = \langle i|\psi\rangle \\ \vdots \\ \psi_N = \langle N|\psi\rangle \end{pmatrix}。$$

将抽象的力学量$\hat{F}$进入A表象，

$$\hat{F} = \sum_{i,j} |i\rangle\langle i|\hat{F}|j\rangle\langle j| = \sum_{i,j} \langle i|\hat{F}|j\rangle|i\rangle\langle j|$$

外积$|i\rangle\langle j|$是一个算符，$F_{ij} = \langle i|\hat{F}|j\rangle$是一个数，是$\hat{F}$在算符$|i\rangle\langle j|$上的投影。表明进入表象后，力学量$\hat{F}$表示为一个方阵$F$，矩阵元为$F_{ij}$，

$$F = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1N} \\ F_{21} & F_{22} & \cdots & F_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ F_{N1} & F_{N2} & \cdots & F_{NN} \end{pmatrix}。$$

1.4 量子力学基本假设：{力学量，态}与{算符，矢量}的关系

（1）量子力学的态用矢量$|\psi\rangle$表示，力学量用厄米算符$\hat{F}$表示。

（2）力学量$\hat{F}$的取值：只能是本征方程$\hat{F}|i\rangle = f_i|i\rangle$的本征值$f_i$。厄米算符的本征值为实数，保证了力学量的取值必为实数。

（3）$\hat{F}$有确定值的条件：只有当体系处于力学量$\hat{F}$的本征态$|\psi\rangle = |i\rangle$，力学量$\hat{F}$才有确定值f_i。

（4）$\hat{F}$无确定值时的取值分布：当$|\psi\rangle \neq |i\rangle$，$\hat{F}$没有确定值，取值为$f_i$的几率由$|\psi\rangle$的展开式确定，

$$|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\psi\rangle$$

说明态$|\psi\rangle$处于本征态$|i\rangle$的几率$= |\langle i|\psi\rangle|^2$，即$\hat{F}$取值为$f_i$的几率$= |\langle i|\psi\rangle|^2$。

1.5 表象变换

在不同表象，态$|\psi\rangle$和力学量$\hat{F}$的表示不同。选取合适的表象可简化计算。例如，选取力学量$\hat{F}$的自身表象F，有矩阵元

$$F_{ij}=\langle i|\hat{F}|j\rangle=f_j\langle i|j\rangle=\delta_{ij}f_j$$

表明力学量矩阵是一个对角矩阵，对角矩阵元就是力学量的本征值。

已知一个力学量，例如哈密顿量$\hat{H}$在某一表象的矩阵，一般为非对角矩阵，如何求该力学量的取值？进行表象变换，将该矩阵对角化，其对角元就是力学量的取值。

不同表象之间的表象变换。

设有两个表象：

I表象： 基矢$|i\rangle$，本征方程$\hat{I}|i\rangle=I_i|i\rangle$，完备性条件$\sum_i|i\rangle\langle i|=1$

M表象：基矢$|m\rangle$，本征方程$\hat{M}|m\rangle=M_m|m\rangle$，完备性条件$\sum_m|m\rangle\langle m|=1$

从M表象进入I表象，

$$|m\rangle=\sum_i|i\rangle\langle i|\,m\rangle=\sum_i S_{im}\,|i\rangle$$

表象变换矩阵元$S_{im}=\langle i|m\rangle$。

（1）态的变换

$$|\psi\rangle=\sum_m|m\rangle\langle m|\,\psi\rangle$$

$$\langle m|\psi\rangle=\sum_i\langle m|i\rangle\langle i|\,\psi\rangle=\sum_i S_{im}^{*}\langle i|\,\psi\rangle=\sum_i S_{mi}^{\dagger}\langle i|\,\psi\rangle$$

写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix}\psi_1^M\\ \psi_2^M\\ \vdots\\ \vdots\\ \psi_N^M\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}S_{11}^{\dagger} & S_{12}^{\dagger} & \cdots & \cdots & S_{1N}^{\dagger}\\ S_{21}^{\dagger} & S_{22}^{\dagger} & \cdots & \cdots & S_{2N}^{\dagger}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ S_{N1}^{\dagger} & S_{N2}^{\dagger} & \cdots & \cdots & S_{NN}^{\dagger}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1^I\\ \psi_2^I\\ \vdots\\ \vdots\\ \psi_N^I\end{pmatrix}$$

$\psi_M=S^{\dagger}\psi_I$。

（2）力学量的变换

$$\hat{F}=\sum_{m,n}|m\rangle\langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|=\sum_{m,n}F_{mn}|m\rangle\langle n|$$

$$F_{mn}=\sum_{i,j}\langle m|i\rangle\langle i|\hat{F}|j\rangle\langle j|n\rangle=\sum_{i,j}S_{im}^{*}F_{ij}S_{jn}=\sum_{i,j}S_{mi}^{\dagger}F_{ij}S_{jn}$$

写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix}F_{11}^{M} & F_{12}^{M} & \cdots & \cdots & F_{1N}^{M}\\ F_{21}^{M} & F_{22}^{M} & \cdots & \cdots & F_{2N}^{M}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ F_{N1}^{M} & F_{N2}^{M} & \cdots & \cdots & F_{NN}^{M}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}S_{11}^{\dagger} & S_{12}^{\dagger} & \cdots & \cdots & S_{1N}^{\dagger}\\ S_{21}^{\dagger} & S_{22}^{\dagger} & \cdots & \cdots & S_{2N}^{\dagger}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ S_{N1}^{\dagger} & S_{N2}^{\dagger} & \cdots & \cdots & S_{NN}^{\dagger}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}F_{11}^{I} & F_{12}^{I} & \cdots & \cdots & F_{1N}^{I}\\ F_{21}^{I} & F_{22}^{I} & \cdots & \cdots & F_{2N}^{I}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ F_{N1}^{I} & F_{N2}^{I} & \cdots & \cdots & F_{NN}^{I}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}S_{11} & S_{12} & \cdots & \cdots & S_{1N}\\ S_{21} & S_{22} & \cdots & \cdots & S_{2N}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ S_{N1} & S_{N2} & \cdots & \cdots & S_{NN}\end{pmatrix}$$

$$F_{M}=S^{\dagger}F_{I}S$$

（3）表象变换矩阵是幺正矩阵

$$\left(SS^{\dagger}\right)_{ij}=\sum_{m}S_{im}S_{mj}^{\dagger}=\sum_{m}S_{im}S_{jm}^{*}$$

$$=\sum_{m}S_{im}S_{mj}=\sum_{m}\langle i|m\rangle\langle m|j\rangle=\langle i|j\rangle=\delta_{ij}$$

即

$$SS^{\dagger}=I,$$

同理可证

$$S^{\dagger}S=I,$$

故$S^{\dagger}=S^{-1}$，表象变换矩阵为幺正矩阵。注意：表象变换矩阵S不是厄米矩阵，$S^{\dagger}\neq S$。

例题：在任意态$|\psi\rangle$计算任意力学量$\hat{F}$的平均值$\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle$。

进入F的自身表象，

$$\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle=\sum_{m,n}\langle\psi|m\rangle\langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|\psi\rangle=\sum_{m,n}f_n\delta_{mn}\langle\psi|m\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$=\sum_{n}f_n\langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle=\sum_{n}f_n|\langle n|\psi\rangle|^2$$

（4）表象变换不改变算符的本征值

设在I表象有本征方程

$$F_I\psi_I=f_I\psi_I,$$

则在M表象有

$$F_M\psi_M=S^\dagger F_I SS^\dagger\psi_I=S^\dagger F_I\psi_I=S^+f_I\psi_I=f_I\psi_M,$$

说明：在M表象，本征值仍为f_I。

表象变换不改变力学量的取值，这正是我们可以取任意表象进行计算的基础。

（5）表象变换不改变对易关系

设在I表象，有

$$[A_I,\ B_I]=C_I,$$

则在M表象，

$$[A_M,B_M]=A_MB_M-B_MA_M=S^\dagger A_ISS^\dagger B_IS-S^\dagger B_ISS^\dagger A_IS,$$

$$=S^\dagger(A_IB_I-B_IA_I)S=S^\dagger C_IS=C_M,$$

虽然力学量的具体表示与表象有关，但力学量的性质由对易关系确定（或者说，力学量的定义是由对易关系给出的），不随表象而变化。

例如，坐标算符与动量算符是由基本对易关系定义的，

$$[\hat{x}_i,\hat{x}_j]=0,\quad [\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0,\quad [\hat{x}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij}。$$

1.6 坐标表象与动量表象

坐标算符$\hat{\vec{x}}$与动量算符$\hat{\vec{p}}$的取值连续，其本征态构成连续性表象。

本征方程：$\hat{\vec{x}}|\vec{x}\rangle=\vec{x}|\vec{x}\rangle,\quad \hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle=\vec{p}|\vec{p}\rangle,$

取值：$\vec{x},\quad \vec{p},$

基矢：$|\vec{x}\rangle$，　$|\vec{p}\rangle$，

正交归一化：$\langle\vec{x}|\vec{x}'\rangle=\delta(\vec{x}-\vec{x}')$，　$\langle\vec{p}|\vec{p}'\rangle=\delta(\vec{p}-\vec{p}')$，

完备性条件：$\int d^3\vec{x}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|=1$，　$\int d^3\vec{p}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|=1$，

将任意态$|\psi\rangle$和力学量$\hat{F}$进入坐标和动量表象：

$$|\psi\rangle=\int d^3\vec{x}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle=\int d^3\vec{x}\ \psi(\vec{x})|\vec{x}\rangle$$

$$|\psi\rangle=\int d^3\vec{p}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi\rangle=\int d^3\vec{p}\ \psi(\vec{p})|\vec{p}\rangle,$$

$$\hat{F}=\int d^3\vec{x}d^3\vec{x}'|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\hat{F}|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|=\int d^3\vec{x}d^3\vec{x}'F_{xx'}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}'|$$

$$\hat{F}=\int d^3\vec{p}d^3\vec{p}'|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\hat{F}|\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|=\int d^3\vec{p}d^3\vec{p}'F_{pp'}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}'|$$

态和力学量在坐标表象和动量表象的表示都是连续的矩阵。

（1）力学量在坐标表象的矩阵元

坐标算符的矩阵元（对角矩阵元）：

$$\langle x_1|\hat{x}|x_2\rangle=x_2\delta(x_1-x_2)=x_1\delta(x_1-x_2)$$

$$\langle\vec{x}_1|\hat{\vec{x}}|\vec{x}_2\rangle=\vec{x}_2\delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2)=\vec{x}_1\delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2)$$

动量算符的矩阵元：由定义坐标动量算符的对易关系

$$[\hat{x}_i,\hat{x}_j]=0,\quad [\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0,\quad [\hat{x}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij}$$

计算$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$的矩阵元

$$\langle x_1|[\hat{x},\hat{p}]|x_2\rangle=i\hbar\langle x_1|x_2\rangle$$

$$\langle x_1|\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}|x_2\rangle=i\hbar\delta(x_1-x_2)$$

$$(x_1-x_2)\langle x_1|\hat{p}|x_2\rangle=i\hbar\delta(x_1-x_2)$$

在积分$\int dx_1$意义上，矩阵元

$$\langle x_1|\hat{p}|x_2\rangle=-i\hbar\partial_1\delta(x_1-x_2)$$

满足上面方程。即

$$\langle\vec{x}_1|\hat{\vec{p}}|\vec{x}_2\rangle=-i\hbar\vec{\nabla}_1\delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2)$$

哈密顿算符的矩阵元：

$$\langle \vec{x}_1|\hat{H}|\vec{x}_2\rangle = \frac{1}{2m}\langle \vec{x}_1|\vec{p}^2|\vec{x}_2\rangle + \langle \vec{x}_1|V(\hat{\vec{x}})|\vec{x}_2\rangle$$

$$= \frac{1}{2m}\int d^3\vec{x}'\langle \vec{x}_1|\vec{p}|\vec{x}'\rangle\langle \vec{x}'|\vec{p}|\vec{x}_2\rangle + V(\vec{x}_1)\delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3\vec{x}'\left(\vec{\nabla}_1\delta(\vec{x}_1-\vec{x}')\right)\left(\vec{\nabla}'\delta(\vec{x}'-\vec{x}_2)\right) + V(\vec{x}_1)\delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2)$$

利用分部积分，有

$$\langle \vec{x}_1|\hat{H}|\vec{x}_2\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3\vec{x}'\left(\vec{\nabla}'\cdot\vec{\nabla}_1\delta(\vec{x}_1-\vec{x}')\right)\delta(\vec{x}'-\vec{x}_2) + V(\vec{x}_1)\delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_2\cdot\vec{\nabla}_1\delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2) + V(\vec{x}_1)\delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2)$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_1^2 + V(\vec{x}_1)\right]\ \delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2)$$

动量算符的本征方程：

$$\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$$

$$\langle \vec{x}|\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle$$

进入坐标表象

$$\int d^3\vec{x}'\langle \vec{x}|\hat{\vec{p}}|\vec{x}'\rangle\langle \vec{x}'|\vec{p}\rangle = \vec{p}\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle$$

$$\int d^3\vec{x}'\left(-i\hbar\vec{\nabla}\delta(\vec{x}-\vec{x}')\right)\langle \vec{x}'|\vec{p}\rangle = \vec{p}\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle$$

$$\int d^3\vec{x}'\left(i\hbar\vec{\nabla}'\delta(\vec{x}-\vec{x}')\right)\langle \vec{x}'|\vec{p}\rangle = \vec{p}\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle$$

$$\int d^3\vec{x}'\delta(\vec{x}-\vec{x}')\left(-i\hbar\vec{\nabla}'\langle \vec{x}'|\vec{p}\rangle\right) = \vec{p}\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle$$

$$-i\hbar\vec{\nabla}\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle = \vec{p}\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle$$

求解此一阶常微分方程，本征态是

$$\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$$

说明动量本征态在坐标表象的表示是平面波，是正交归一化的，

$$\langle \vec{p}'|\vec{p}\rangle = \int d^3\vec{x}\,\langle \vec{p}'|\vec{x}\rangle\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle = \int d^3\vec{x}\,\langle \vec{x}|\vec{p}'\rangle^*\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3\vec{x}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}} = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$$

（2）力学量在动量表象的矩阵元

动量算符的矩阵元（对角矩阵元）：

$$\langle \vec{p}_1|\hat{\vec{p}}|\vec{p}_2\rangle = \vec{p}_1\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2) = \vec{p}_2\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2)$$

坐标算符的矩阵元：

$$\langle \vec{p}_1|\hat{\vec{x}}|\vec{p}_2\rangle = i\hbar\vec{\nabla}_1\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2)$$

哈密顿算符的矩阵元：

$$\langle \vec{p}_1|\hat{H}|\vec{p}_2\rangle = \frac{\vec{p}_1^2}{2m}\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2) + \langle \vec{p}_1|V(\hat{\vec{x}})|\vec{p}_2\rangle$$

利用

$$V(\hat{\vec{x}}) = V(0) + \hat{\vec{x}}\cdot\vec{\nabla}V(0) + \frac{\hat{\vec{x}}^2}{2}\vec{\nabla}^2V(0) + \cdots,$$

$$\langle \vec{p}_1|\hat{H}|\vec{p}_2\rangle = \frac{\vec{p}_1^2}{2m}\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2) + \langle \vec{p}_1|V(0)|\vec{p}_2\rangle + \langle \vec{p}_1|\hat{\vec{x}}|\vec{p}_2\rangle\cdot\vec{\nabla}V(0)$$

$$+\frac{1}{2}\int d^3\vec{p}\,\langle \vec{p}_1|\hat{\vec{x}}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\hat{\vec{x}}|\vec{p}_2\rangle\vec{\nabla}^2V(0) + \cdots$$

$$= \frac{\vec{p}_1^2}{2m}\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2) + V(0)\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2) + i\hbar\vec{\nabla}_1\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2)\cdot\vec{\nabla}V(0)$$

$$+\frac{(i\hbar\vec{\nabla}_1)^2}{2}\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2)\vec{\nabla}^2V(0) + \cdots$$

$$= \left[\frac{\vec{p}_1^2}{2m} + V(i\hbar\vec{\nabla}_1)\right]\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2)$$

坐标算符的本征态：

$$\langle \vec{p}|\vec{x}\rangle = \langle \vec{x}|\vec{p}\rangle^* = \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}\right)^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$$

1.7 测量

在任意态$|\psi\rangle$，力学量$\hat{F}$没有确定的值，但是测量$\hat{F}$时都有确定的值。按照量子力学基本假设：只有在本征态$\hat{F}$才有确定值，说明在测量过程中体系的态从$|\psi\rangle$塌缩到了$\hat{F}$的本征态。

进入F表象，

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

按照几率解释，$|\langle n|\psi\rangle|^2$是态$|\psi\rangle$处于$\hat{F}$的本征态$|n\rangle$的几率，也是$\hat{F}$在态$|\psi\rangle$取值为$f_n$的几率，故从$|\psi\rangle$塌缩到$|n\rangle$的几率是$|\langle n|\psi\rangle|^2$，即测量取值为$f_n$的几率是$|\langle n|\psi\rangle|^2$。

测量使得体系的态塌缩到被测力学量的本征态，该力学量有确定值，粒子性质得以体现，或者可以说，测量产生了粒子。

注意：测量前，并不知道测量值是多少，因为态$|\psi\rangle$可以塌缩到任意本征态$|n\rangle$。

例题：在态$|\psi\rangle$测量$\hat{F}$，得值f_n，紧接着又测量$\hat{F}$，取值为多少？

第一次测量，$|\psi\rangle \to |n\rangle$

第二次测量前，体系已经处于本征态$|n\rangle$，测量结果必为f_n。

第一次测量前，并不知道测量值。但第二次测量前，已经知道测量值。

（1）多个力学量可同时测量的条件

先考虑两个力学量$\hat{A},\hat{B}$。

定理：若$\hat{A},\hat{B}$有完备的共同本征态，则$\hat{A},\hat{B}$一定对易。

证明：设完备的共同本征态为$|n\rangle$，

由

$$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle, \qquad \hat{B}|n\rangle = b_n|n\rangle$$

在由$|n\rangle$构成的表象，任意态

$$|\psi\rangle=\sum_n|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})|\psi\rangle=\sum_n(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})|n\rangle\langle n|\psi\rangle=\sum_n(\hat{A}b_n-\hat{B}a_n)|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$=\sum_n(a_nb_n-b_na_n)|n\rangle\langle n|\psi\rangle=0$$

因为$|\psi\rangle$是任意态，故$[\hat{A},\hat{B}]=0$。

逆定理：若$\hat{A},\hat{B}$对易，则$\hat{A},\hat{B}$一定有完备的共同本征态。

证明：设$|n\rangle$是$\hat{A}$的本征态，

$$\hat{A}|n\rangle=a_n|n\rangle,$$

由$[\hat{A},\hat{B}]=0$，有

$$\hat{A}\hat{B}|n\rangle=\hat{B}\hat{A}|n\rangle=a_n\hat{B}|n\rangle$$

说明$\hat{B}|n\rangle$也是$\hat{A}$的对应本征值a_n的本征态。若$\hat{A}$无简并，则$\hat{B}|n\rangle$与$|n\rangle$是同一个态，只能相差一个常数：

$$\hat{B}|n\rangle=b_n|n\rangle$$

故$|n\rangle$也是$\hat{B}$的本征态，即$\hat{A},\hat{B}$有共同的完备本征态。

若$\hat{A}$有简并，则可以用施密特方法来证明有同样的结果（作为习题）。

如果两个力学量对易，它们可以有共同的完备本征态。当体系处于共同本征态时，它们同时有确定的值。

对于多个力学量，如果两两对易时，它们可以有共同的完备本征态。当体系处于共同本征态时，它们同时有确定的值。

注意，$[\hat{A},\hat{B}]=0$，$[\hat{B},\hat{C}]=0$，并不能保证$[\hat{A},\hat{C}]=0$。例如，对于角动量$\hat{\vec{J}}$，有$[\hat{J}^2,\hat{J}_x]=[\hat{J}^2,\hat{J}_y]=0$，但$[\hat{J}_x,\hat{J}_y]\neq0$。说明$\hat{J}^2,\hat{J}_x$可以同时有确定值，$\hat{J}^2,\hat{J}_y$可以同时有确定值，但$\hat{J}_x,\hat{J}_y$一般不能同时有确定值。

（2）力学量完备组

可同时测量的力学量组提供了从物理上消除简并的方法。

当力学量的本征值与本征态有简并时，

$$\hat{F}|i,j\rangle = f_i|i,j\rangle, \quad j = 1,\ldots$$

数学上是用施密特方法来实现本征态的正交归一，而物理上是引入力学量完备组来实现正交归一。

一个力学量$\hat{F}$的本征值对应多个本征态说明该力学量不足以完全描述这些本征态，必须引入新的力学量来刻划这些本征态之间的差别。引入另一个与$\hat{F}$对易的力学量$\hat{G}$，$[\hat{F},\hat{G}]=0$，则$\hat{F},\hat{G}$有完备的共同本征态，如果$\hat{F}$的简并本征态对于$\hat{G}$不简并，

$$\hat{F}|i,j\rangle = f_i|i,j\rangle$$
$$\hat{G}|i,j\rangle = g_j|i,j\rangle$$

则对于力学量组$\{\hat{F},\hat{G}\}$，本征值$\{f_i,g_j\}$与本征态$|i,j\rangle$一一对应，无简并，满足正交归一条件：

$$\langle i,j|i',j'\rangle = \delta_{ii'}\delta_{jj'}。$$

故称$\{\hat{F},\hat{G}\}$构成力学量完备组。

例如轨道角动量$\hat{\vec{L}}^2$，本征方程

$$\hat{\vec{L}}^2|l,m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle, \qquad m = -l,\cdots,l$$

简并度为$2l+1$。但对于力学量组$\{\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_z\}$，$[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_z]=0$，有共同本征态$|l,m\rangle$：

$$\hat{\vec{L}}^2|l,m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle$$
$$\hat{L}_z|l,m\rangle = m\hbar|l,m\rangle$$

简并消除。说明力学量组$\{\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_z\}$完全描述状态$|l,m\rangle$，构成力学量完备组。

（3）级联测量

对一个体系的三个力学量$\hat{A},\hat{B},\hat{C}$分别进行如下两种测量。

第一种方法：先测$\hat{A}$，再测$\hat{B}$，再测量$\hat{C}$。



态：$|\psi\rangle$ $|a\rangle$ $|b\rangle$ $|c\rangle$

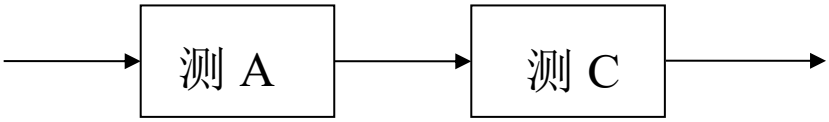
力学量取值： a b c

经过 3 次测量后，测得$\hat{C}$取值为c的几率是

$$P(c)=\sum_{a,b}|\langle a|\psi\rangle|^2|\langle b|a\rangle|^2\,|\langle c|b\rangle|^2$$

其中$|\langle a|\psi\rangle|^2$是从$|\psi\rangle$塌缩到$|a\rangle$的几率，$|\langle b|a\rangle|^2$是从$|a\rangle$塌缩到$|b\rangle$的几率，$|\langle c|b\rangle|^2$是从$|b\rangle$塌缩到$|c\rangle$的几率。由于塌缩到任意的$|a\rangle$和$|b\rangle$都能最后塌缩到$|c\rangle$，必须对$|a\rangle$和$|b\rangle$求和。

第二种方法：测了$\hat{A}$后直接测$\hat{C}$。



态： $|\psi\rangle$ $|a\rangle$ $|c\rangle$

力学量取值： a c

经过 2 次测量后，测得$\hat{C}$取值为c的几率是

$$P'(c)=\sum_{a}|\langle a|\psi\rangle|^2\,|\langle c|a\rangle|^2$$

显然，一般有

$$P(c)\neq P'(c)$$

不同的测量过程会改变最终测量结果。

但如果$[\hat{A},\hat{B}]=0$，$\hat{A},\hat{B}$有共同本征态，$\langle b|a\rangle=\delta_{ab}$，

$$P(c)=\sum_{a}|\langle a|\psi\rangle|^2\,|\langle c|a\rangle|^2=P'(c)$$

或$[\hat{B},\hat{C}]=0$，$\hat{B},\hat{C}$有共同本征态，$\langle c|b\rangle=\delta_{bc}$

$$P(c)=\sum_a |\langle a|\psi\rangle|^2\,|\langle c|a\rangle|^2 = P'(c)$$

两种测量结果相同。

1.8 不确定关系

当$[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$，$\hat{A},\hat{B}$不能同时有确定的值，那么它们的不确定度如何？

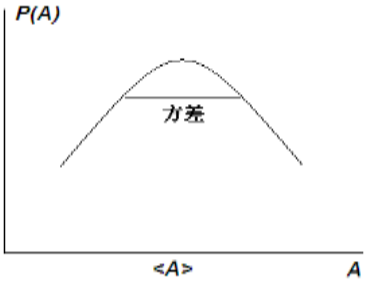
在任意态$|\psi\rangle\neq\hat{A}$的本征态$|A\rangle$，$\hat{A}$无确定值，取值几率分布

$$|\psi\rangle=\sum_A |A\rangle\langle A|\psi\rangle$$

$$P(A)=|\langle A|\psi\rangle|^2$$

平均值

$$\langle\hat{A}\rangle=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$



定义

$$\Delta\hat{A}=\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle$$

不确定度用方差表示：

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle=\langle(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)^2\rangle=\langle\hat{A}^2\rangle-\langle\hat{A}\rangle^2$$

对于两个不对易的力学量$\hat{A},\hat{B}$，用方差的乘积

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle$$

描述$\hat{A},\hat{B}$之间测量的相对不确定关系。

对于给定的态$|\psi\rangle$，可以直接计算方差。如何估计最小不确定度以及对应的态？

显然，对任意的态$|\alpha\rangle,|\beta\rangle$和任意的复数$\lambda$，线性组合态$|\alpha\rangle+\lambda|\beta\rangle$的内积

$$(\langle\alpha|+\langle\beta|\lambda^*)(|\alpha\rangle+\lambda|\beta\rangle)\geq 0$$

取$\lambda=-\frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}$，有

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle\geq|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \quad \text{(Schwarz 不等式)}$$

令$|\alpha\rangle=\Delta\hat{A}|\psi\rangle$，$|\beta\rangle=\Delta\hat{B}|\psi\rangle$，Schwarz 不等式变为

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle\geq|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle|^2$$

最小不确定度对应等号。右边

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

因为$\Delta\hat{A}$，$\Delta\hat{B}$均为厄密算符，

$$[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]^+=(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}-\Delta\hat{B}\Delta\hat{A})^+=\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}-\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}=-[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]$$

$$\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}^+=\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}$$

故$[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]$是反厄密算符，$\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}$是厄密算符。由于任意反厄密算符$\hat{F}^+=-\hat{F}$的平均值

$$\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{F}^+|\psi\rangle^*=-\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle^*$$

为虚数，厄密算符的平均值为实数，故

$$\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle=\frac{1}{2}\langle[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]\rangle(\text{虚数})+\frac{1}{2}\langle\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}\rangle(\text{实数})$$

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

由于

$$[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]=[\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle,\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle]=[\hat{A},\hat{B}]$$

故有不等式

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

说明：两个力学量的不确定度由它们的对易关系控制。

最小不确定度

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

对应的态$|\psi\rangle$必须满足条件

1）（第一个等式）Schwarz 不等式取等号：$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle=\left|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2$，

2）（第二个等式）$\langle\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}\rangle=0$

条件 1）的解是　　$\Delta\hat{B}|\psi\rangle=c\Delta\hat{A}|\psi\rangle$，$c$为常数；

条件 2）　　$\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle+\langle\psi|\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\psi\rangle=0$

结合两个条件　　$c\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2|\psi\rangle+c^*\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2|\psi\rangle=0$

c必为虚数，$c=ia$，a为实数。

故有

$$(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)|\psi\rangle=ia(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)|\psi\rangle$$

这就是等号对应的态，也是最小不确定度对应的态，满足的方程。

对于$\hat{x}$, $\hat{p}$，上面方程为

$$(\hat{p}-\langle\hat{p}\rangle)|\psi\rangle=ia(\hat{x}-\langle\hat{x}\rangle)|\psi\rangle$$

进入坐标表象，

$$\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\langle\hat{p}\rangle\right)\langle x|\psi\rangle=ia(x-\langle x\rangle)\langle x|\psi\rangle$$

一阶常微分方程的解为

$$\langle x|\psi\rangle=Ae^{-a\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{2\hbar}}e^{i\frac{\langle\hat{p}\rangle x}{\hbar}}$$

表明最小不确定度对应的态是坐标空间的 Gauss 波包。

第 2 章：量子动力学

动力学就是时间演化。

经典动力学就是力学量的时间演化，即拉格朗日方程或者哈密　方程。

量子力学　要用力学量和态一起来描述力学量的取值，因此量子动力学就是态和力学量的时间演化，有不同的演化形式。

在’相对论量子力学中，与其它力学量用算符表示不一样，时间只是一个参量，仍然是一个经典量，不是算符。

2.1 时间演化和 Schroedinger 方程

（1）态的时间平移算符

初始态$|\psi,t_0\rangle$，定义时间演化算符

$$|\psi,t\rangle=\hat{U}(t,t_0)|\psi,t_0\rangle$$

$$\langle\psi,t|=\langle\psi,t_0|\hat{U}^\dagger(t,t_0)$$

显然，

$$\hat{U}(t_0,t_0)=1。$$

由态的归一化条件

$$\langle\psi,t_0|\psi,t_0\rangle=1$$

$$\langle\psi,t|\psi,t\rangle=\langle\psi,t_0|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi,t_0\rangle=1$$

时间平移算符必是么正算符

$$\hat{U}^\dagger\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^\dagger=1$$

无限小时间平移算符可以按dt展开，忽略dt的　阶　，有

$$\hat{U}(t+dt,t)=1-i\hat{\Omega}(t)dt$$

$\hat{U}$的么正性

$$\hat{U}^\dagger\hat{U}=\left(1+i\hat{\Omega}^\dagger dt\right)\left(1-i\hat{\Omega}dt\right)=1+i\hat{\Omega}^\dagger dt-i\hat{\Omega}dt=1$$

要求生成元$\hat{\Omega}$是厄米算符，

$$\hat{\Omega}^\dagger=\hat{\Omega}$$

考虑到$\hat{\Omega}$具有　率ω的量纲，由能量　率关系$E=\hbar\omega$，可令

$$\hat{\Omega} = \frac{\hat{H}}{\hbar}$$

$$\hat{U}(t+dt,t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)dt$$

这与分析力学中力学量的时间演化由哈密　量生成是一致的。

（2）时间演化方程

怎样计算一般的（’无限小）时间平移算符？

由时间平移算符的因果律

$$\hat{U}(t_2,t_0) = \hat{U}(t_2,t_1)\hat{U}(t_1,t_0) \qquad t_2 > t_1 > t_0$$

有

$$\hat{U}(t+dt,t_0) = \hat{U}(t+dt,t)\hat{U}(t,t_0) = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)dt\right)\hat{U}(t,t_0)$$

$$i\hbar\frac{\hat{U}(t+dt,t_0) - \hat{U}(t,t_0)}{dt} = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$$

这就是量子力学中时间演化算符满足的方程，是量子力学的基本动力学方程。

将方程右乘初始状态$|\psi,t_0\rangle$，有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi,t\rangle = \hat{H}(t)|\psi,t\rangle$$

这就是态的时间演化方程，即 Schroedinger 方程。

下　讨论基本演化方程的解。如果哈密　算符不含时间（例如粒子在磁场中运动，且磁场的方向和大小均不随时间改变，磁相互作用$\hat{H}\sim\hat{\vec{J}}\cdot\vec{B} = \hat{J}_z B$），基本演化方程的解为

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$$

如果哈密　算符含时间，但不同时间的$\hat{H}$对易（例如磁场强度变化但方向不变时的磁相互作用$\hat{H}(t)\sim\hat{J}_z B(t)$），基本演化方程的解为

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt\prime\hat{H}(t')}$$

如果哈密 算符含时间，且不同时间的$\hat{H}$不对易（例如磁场强度和方向都变化时的磁相互作用$\hat{H}(t)\sim\hat{\vec{J}}\cdot\vec{B}(t)$），

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_n\,\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\cdots\hat{H}(t_n)$$

称为 *Dyson* 级数。证明如下：

将微分方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)=\hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$$

积分$\int_{t_0}^{t}dt_1$，并利用初始条件

$$\hat{U}(t_0,t_0)=1$$

有积分方程

$$\hat{U}(t,t_0)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t_1)\hat{U}(t_1,t_0)dt_1$$

与微分方程+初始条件完全等价。利用迭代法

$$\hat{U}(t,t_0)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t_1)\left[1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_1}\hat{H}(t_2)\hat{U}(t_2,t_0)dt_2\right]dt_1$$

$$=1+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t_1)dt_1+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\hat{U}(t_2,t_0)$$

$$=\cdots$$

$$=1+\sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_n\,\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\cdots\hat{H}(t_n)$$

$$t\geq t_1\geq t_2\geq\cdots$$

以下主要考虑哈密 算符不含时间的情形。

（3）定态

如果体系初始时处于哈密　算符$\hat{H}$的本征态，

$$|\psi,t_0\rangle=|E\rangle,\qquad \hat{H}|\psi,t_0\rangle=E|\psi,t_0\rangle$$

则任意时间都处于$\hat{H}$的本征态，

$$|\psi,t\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|\psi,t_0\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}|\psi,t_0\rangle$$

$$\hat{H}|\psi,t\rangle=E|\psi,t\rangle$$

如果体系初始时不处于$\hat{H}$的本征态，而是以几率$|\langle E|\psi,t_0\rangle|^2$处于本征态$|E\rangle$，则$t$时刻处于定态$|E\rangle$的几率幅

$$\langle E|\psi,t\rangle=\langle E|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\psi|,t_0\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}\langle E|\psi,t_0\rangle$$

$$|\langle E|\psi,t\rangle|^2=|\langle E|\psi,t_0\rangle|^2$$

有几率守恒。说明：任意态处于能量本征态的几率分布不随时间改变。

如果体系初始时处于能量本征态，则永远处于能量本征态，如果体系初始时不处于能量本征态，则永不处于能量本征态。故能量本征态称为定态。定态不是态不随时间改变，而是物理量的分布不随时间改变。

（4）电子自旋进动

考虑电子自旋与外磁场相互作用。设外磁场在z方向，在粒子自身坐标系，动量为　，

$$\hat{H}=-\left(\frac{e}{mc}\right)\hat{\vec{s}}\cdot\vec{B}=-\frac{eB}{mc}\hat{s}_z=\omega\hat{s}_z$$

$[\hat{s}_z,\hat{H}]=0$，有共同本征态$|s_z^{\pm}\rangle$，$s_z^{\pm}=\pm\hbar/2$，

$$\hat{s}_z|s_z^{\pm}\rangle=s_z^{\pm}|s_z^{\pm}\rangle$$

$$\hat{H}|s_z^{\pm}\rangle=\omega s_z^{\pm}|s_z^{\pm}\rangle$$

时间演化算符$(t_0=0)$

$$\hat{U}(t,0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=e^{-\frac{i}{\hbar}\omega\hat{s}_z t}$$

设体系初始时处于$\hat{s}_x$的本征态$|0\rangle=|s_x^{+}\rangle$，在任意时刻$t$，态

$$|t\rangle=\hat{U}(t,0)|s_x^{+}\rangle$$

由于$[\hat{s}_x,\hat{H}]\neq 0$，$|t\rangle$不再是$\hat{s}_x$的本征态，处于$|s_x^{+}\rangle$的几率为

$$|\langle s_x^+|t\rangle|^2 = \left|\langle s_x^+|\hat{U}(t,0)|s_x^+\rangle\right|^2$$

将$|s_x^+\rangle$进入H表象，

$$|s_x^+\rangle = \sum_{s_z}|s_z\rangle\langle s_z|s_x^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|s_z^+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|s_z^-\rangle$$

有

$$\begin{aligned}|\langle s_x^+|t\rangle|^2 &= \left|\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\langle s_z^+| + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle s_z^-|\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\omega\hat{s}_z t}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left|s_z^+\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\left|s_z^-\right\rangle\right)\right|^2 \\ &= \left|\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\langle s_z^+| + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle s_z^-|\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i}{2}\omega t}\left|s_z^+\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{i}{2}\omega t}\left|s_z^-\right\rangle\right)\right|^2 \\ &= cos^2\frac{\omega t}{2}\end{aligned}$$

由总的几率守恒，态$|t\rangle$处于态$|s_x^-\rangle$的几率

$$|\langle s_x^-|t\rangle|^2 = 1 - |\langle s_x^+|t\rangle|^2 = sin^2\frac{\omega t}{2}$$

$\hat{s}_x$的平均值

$$\begin{aligned}\langle t|\hat{s}_x|t\rangle &= \sum_{s_x} s_x|\langle s_x|t\rangle|^2 = \frac{\hbar}{2}|\langle s_x^+|t\rangle|^2 - \frac{\hbar}{2}|\langle s_x^-|t\rangle|^2 \\ &= \frac{\hbar}{2}\left(cos^2\frac{\omega t}{2} - sin^2\frac{\omega t}{2}\right) = \frac{\hbar}{2}cos\omega t\end{aligned}$$

同理，

$$\langle t|\hat{s}_y|t\rangle = \frac{\hbar}{2}sin\omega t, \qquad \langle t|\hat{s}_z|t\rangle = 0$$

（5）能量时间不确定关系

由

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[\hat{x},\hat{p}]\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

有

$$\Delta x\cdot\Delta p \geq \hbar/2, \qquad \Delta A \equiv \sqrt{\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\rangle}$$

由狭义相对论$x_\mu=(t,x)$，$p_\mu=(E,p)$，从协变性可猜想

$$\Delta t\cdot\Delta E\geq\frac{\hbar}{2}$$

即能量时间不确定关系。

可是，在经典力学→量子力学中，$x,p,E\to\hat{x},\hat{p},\hat{H}$，但$t$仍然是一个经典量。那么，$\Delta t$是什么意思？

$$\Delta E\equiv\sqrt{\langle(\Delta\hat{H})^2\rangle},\qquad\langle(\Delta\hat{H})^2\rangle=\langle(\hat{H}-\langle\hat{H}\rangle)^2\rangle,\qquad\Delta t=?$$

对于任意力学量$\hat{F}$，在t时刻的平均值

$$\langle\hat{F}\rangle=\langle t|\hat{F}|t\rangle$$

有

$$\frac{d\langle\hat{F}\rangle}{dt}=\left(\frac{\partial}{\partial t}\langle t|\right)\hat{F}|t\rangle+\langle t|\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}|t\rangle+\langle t|\hat{F}\left(\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle\right)$$

由

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle=\hat{H}|t\rangle,\qquad-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle t|=\langle t|\hat{H}$$

有

$$\frac{d\langle\hat{F}\rangle}{dt}=-\frac{1}{i\hbar}\langle t|\hat{H}\hat{F}|t\rangle+\langle t|\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}|t\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle t|\hat{F}\hat{H}|t\rangle$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\langle t|[\hat{F},\hat{H}]|t\rangle+\langle\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}\rangle$$

若力学量$\hat{F}$不显含时间（例如$\hat{x},\hat{p}$），

$$\frac{d\langle\hat{F}\rangle}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{F},\hat{H}]\rangle$$

那么，$\hat{F},\hat{H}$的不确定关系为

$$\langle(\Delta\hat{F})^2\rangle\langle(\Delta\hat{H})^2\rangle\geq\frac{1}{4}|\langle[\hat{F},\hat{H}]\rangle|^2=\frac{\hbar^2}{4}\left|\frac{d\langle\hat{F}\rangle}{dt}\right|^2$$

$$\Delta F\cdot\Delta E\geq\frac{\hbar}{2}\left|\frac{d\langle\hat{F}\rangle}{dt}\right|$$

$$\frac{\Delta F}{\left|\frac{d\langle\hat{F}\rangle}{dt}\right|}\cdot\Delta E\geq\frac{\hbar}{2}$$

与

$$\Delta t\cdot\Delta E\geq\hbar/2$$

比较，有

$$\Delta t=\frac{\Delta F}{\left|\frac{d\langle\hat{F}\rangle}{dt}\right|}$$

Δt的物理意义是：当我们测量力学量$\hat{F}$的平均值时，平均值变化一个标准方差ΔF所　的时间。

2.2 Schroedinger 绘景与 Heisenberg 绘景

描述时间演化的两种方式。

（1）时间平移变换的两种形式

以上时间平移变换$\hat{U}(t,t_0)$的定义是对态的作用，

$$|\alpha\rangle\to\hat{U}|\alpha\rangle$$

而力学量保持不变。与观测量相关的力学量矩阵元的变化

$$\langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle\to(\langle\beta|\hat{U}^\dagger)\hat{A}(\hat{U}|\alpha\rangle)$$

可以改写成

$$\langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle\to\langle\beta|(\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U})|\alpha\rangle$$

即，时间平移变换既可以看成

$$|\alpha\rangle\to\hat{U}|\alpha\rangle，\text{力学量保持不变，}$$

也可以看成

$$\hat{A}\to\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}，\text{态保持不变。}$$

两种形式完全等价，不影响力学量的矩阵元$\langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle$的时间变化，特别是不影响力学量的平均值$\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle$的时间演化。

事实上，还可以有其他的的变换形式，态和力学量都随时间发生变化，例

如下　将要讨论的相互作用绘景。

（2）时间演化的 *Schroedinger* 绘景与 *Heisenberg* 绘景

Schroedinger 绘景（取$t_0 = 0$）：

态的时间演化$|\psi, t\rangle_s = \hat{U}(t)|\psi, 0\rangle_s$，　$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

力学量$\hat{A}_s$不含时间

Heisenberg 绘景：

力学量的时间演化$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^+(t)\hat{A}_H(0)\hat{U}(t)$，

态不含时间$|\psi\rangle_H$。

具有相同的初始条件，

$$\hat{A}_H(0) = \hat{A}_s$$
$$|\psi, 0\rangle_s = |\psi\rangle_H$$

这就是两个绘景的联系。

绘景的性质：

■矢量内积与绘景无关：

$$_s\langle\psi, t|\psi, t\rangle_s = {}_s\langle\psi, 0|\hat{U}^+\hat{U}|\psi, 0\rangle_s = {}_s\langle\psi, 0|\psi, 0\rangle_s = {}_H\langle\psi|\psi\rangle_H$$

■对易关系与绘景无关：设在 *Schroedinger* 绘景有对易关系$[\hat{A}_s, \hat{B}_s] = \hat{C}_s$，即在 *Heisenberg* 绘景有初始对易关系$[\hat{A}_H(0), \hat{B}_H(0)] = \hat{C}_H(0)$。利用时间演化$\hat{A}_H(0) = \hat{U}(t)\hat{A}_H(t)\hat{U}^+(t)$，有等时对易关系$[\hat{A}_H(t), \hat{B}_H(t)] = \hat{C}_H(t)$。

■时间演化算符$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$中的哈密　算符是在 *Schroedinger* 绘景引入的，$\hat{H} = \hat{H}_s$，但是

$$\hat{H}_H = \hat{U}^+(t)\hat{H}_H(0)\hat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_s t}\hat{H}_s e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_s t} = \hat{H}_s \ (= \hat{H})$$

与绘景无关。

上　讨论了态和力学量的时间演化，力学量本征态的时间演化如何？

本征态随时间的演化由力学量确定。

在 *Schroedinger* 绘景：力学量$\hat{A}_s$不含时间，本征态$|a\rangle_s$也不随时间变化。

在 *Heisenberg* 绘景：因为$\hat{A}_H$依赖时间，故本征态$|a\rangle_H$必依赖于时间。设

$$\hat{A}_H(0)|a,0\rangle_H = a|a,0\rangle_H$$

$$\hat{U}(t)\hat{A}_H(t)\hat{U}^+(t)|a,0\rangle_H = a|a,0\rangle_H$$

$$\hat{A}_H(t)\hat{U}^+(t)|a,0\rangle_H = a\hat{U}^+(t)|a,0\rangle_H$$

故本征态的时间演化

$$|a,t\rangle_H = \hat{U}^+(t)|a,0\rangle_H。$$

总结：

	Schroedinger 绘景	*Heisenberg* 绘景
态：	$\|\psi,t\rangle_S = \hat{U}(t)\|\psi,0\rangle_S$，	$\|\psi\rangle_H$与时间无关
力学量	$\hat{A}_S$与时间无关，	$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^+(t)\hat{A}_H(0)\hat{U}(t)$
本征态：	$\|a\rangle_S$与时间无关，	$\|a,t\rangle_H = \hat{U}^+(t)\|a,0\rangle_H$

（3）Heisenberg 绘景中的运动方程

Heisenberg 绘景中力学量的时间演化更容易与经典力学比较。

对于

$$\hat{A}(t)=\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{A}(0)\hat{U}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

已经忽略下标H，求时间微分，得到 Heisenberg 绘景中算符的运动方程，

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}(t),\hat{H}\right]$$

其地位类似于 Schroedinger 绘景中态的运动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi,t\rangle=\hat{H}|\psi,t\rangle$$

已经忽略下标S。

（4）Ehrenfest 定律

对于自由粒子，

$$\hat{H}(t)=\frac{\hat{\vec{p}}^{2}(t)}{2m}$$

利用基本对易关系

$$\left[\hat{x}_i(t),\hat{x}_j(t)\right]=0,\qquad\left[\hat{p}_i(t),\hat{p}_j(t)\right]=0,\qquad\left[\hat{x}_i(t),\hat{p}_j(t)\right]=i\hbar\delta_{ij}$$

有 Heisenberg 运动方程

$$\frac{d\hat{\vec{p}}(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec{p}}(t),\hat{H}(t)\right]=0,\qquad\hat{\vec{p}}(t)=\hat{\vec{p}}(0)$$

$$\frac{d\hat{\vec{x}}(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec{x}}(t),\hat{H}(t)\right]=\frac{1}{2i\hbar m}\left[\hat{\vec{x}}(t),\hat{\vec{p}}^{2}(t)\right]=\frac{\hat{\vec{p}}(t)}{m}=\frac{\hat{\vec{p}}(0)}{m}$$

$$\hat{\vec{x}}(t)=\hat{\vec{x}}(0)+\frac{\hat{\vec{p}}(0)}{m}t$$

对于一般体系，

$$\hat{H}(t)=\frac{\hat{\vec{p}}^{2}(t)}{2m}+V\left(\hat{\vec{x}}(t)\right)$$

有 Heisenberg 运动方程

$$\frac{d\hat{\vec{p}}(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec{p}}(t),\hat{H}(t)\right]=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec{p}}(t),V\left(\hat{\vec{x}}(t)\right)\right]$$

把势场进行展开，

$$\left[\hat{\vec{p}}(t),V\left(\hat{\vec{x}}(t)\right)\right]=\left[\hat{\vec{p}}(t),V(0)+\hat{\vec{x}}(t)\cdot\vec{\nabla}V\left(\hat{\vec{x}}(t)\right)|_0+\frac{\hat{\vec{x}}^2(t)}{2}\cdot\vec{\nabla}^2V\left(\hat{\vec{x}}(t)\right)|_0+\cdots\right]$$

$$=-i\hbar\vec{\nabla}V\left(\hat{\vec{x}}(t)\right)$$

$$\frac{d\hat{\vec{p}}(t)}{dt}=-\vec{\nabla}V\left(\hat{\vec{x}}(t)\right)$$

$$\frac{d\hat{\vec{x}}(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec{x}}(t),\hat{H}(t)\right]=\frac{1}{2i\hbar m}\left[\hat{\vec{x}}(t),\hat{\vec{p}}^2(t)\right]=\frac{\hat{\vec{p}}(t)}{m}$$

$$m\frac{d^2\hat{\vec{x}}(t)}{dt^2}=\frac{d\hat{\vec{p}}(t)}{dt}=-\vec{\nabla}V\left(\hat{\vec{x}}(t)\right)$$

两边求平均，

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{\vec{x}}(t)\rangle=-\langle\vec{\nabla}V\left(\hat{\vec{x}}(t)\right)\rangle$$

此即 *Ehrenfest* 定律，对应经典力学中的牛顿定律。由于平均值与绘景无关，关于平均值的 *Ehrenfest* 定律与绘景无关：

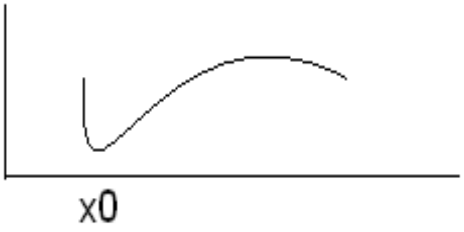
$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{\vec{x}}\rangle=-\langle\vec{\nabla}V\left(\hat{\vec{x}}\right)\rangle。$$

以下没有特殊说明，在 *Schroedinger* 绘景讨论问题。

2.3 一维线性谐振子的代数解法

对于任意势，在最小点x_0附近按 *Taylor* 展开

$$V(x)=V(x_0)+V'(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2}V''(x_0)(x-x_0)^2+\cdots$$



在能量本征方程中，哈密顿量的常数项$V(x_0)$可以归并到能量本征值中，而在势

能最小值点，有$V'(x_0)=0$。故略去高阶项，可取

$$V(x)=\frac{1}{2}V''(x_0)(x-x_0)^2$$

是谐振子势。故研究谐振子问题具有普遍意义。

正则量子化方案中的谐振子问题：

$$\begin{cases}\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\\ [\hat{x},\hat{p}]=i\hbar\end{cases}$$

可以在坐标表象求解能量本征方程(二阶常微分方程)$\hat{H}|E_n\rangle=E_n|E_n\rangle$。由于势能在无穷远处$\to\infty$，是一个束缚态问题。

（1）重写

$$\hat{H}=\frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{x}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\hbar\omega+\frac{1}{2}\hbar\omega$$

定义新算符

$$\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

$$\hat{a}^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

谐振子问题也可以表示为

$$\begin{cases}\hat{H}=\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega\\ [\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1\end{cases}$$

显然，$\hat{a}^\dagger\neq\hat{a}$，$\hat{a}$不是厄米算符，但$(\hat{a}^\dagger\hat{a})^\dagger=\hat{a}^\dagger\hat{a}$，$\hat{a}^\dagger\hat{a}$是厄米算符。

由于$\hat{a}^\dagger\hat{a}$与$\hat{H}$只差一个常数，故$\hat{H}$与$\hat{a}^\dagger\hat{a}$有共同本征态。假设共同本征态为$|n\rangle$，

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle=n|n\rangle$$

$$\hat{H}|n\rangle=E_n|n\rangle,\quad E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

问题：本征值$n=?$ 坐标表象本征态$\langle x|n\rangle=\psi_n(x)=?$

（2）设

$$\hat{a}|n\rangle = |b\rangle, \qquad \langle n|\hat{a}^{\dagger} = \langle b|$$

有

$$\langle n|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle = \langle b|b\rangle, \qquad n\langle n|n\rangle = \langle b|b\rangle$$

因为

$$\langle n|n\rangle \geq 0, \qquad \langle b|b\rangle \geq 0$$

故

$$n \geq 0$$

（3）因为

$$(\hat{a}^{\dagger}\hat{a})\hat{a}|n\rangle = (\hat{a}\hat{a}^{\dagger} - 1)\hat{a}|n\rangle = \hat{a}(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} - 1)|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle$$

$$(\hat{a}^{\dagger}\hat{a})\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \hat{a}^{\dagger}(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1)|n\rangle = (n+1)\hat{a}^{\dagger}|n\rangle$$

说明，如果$|n\rangle$是$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的本征态，则$\hat{a}|n\rangle$，$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle$也是$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的本征态：

$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的本征态	$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的本征值
⋮	⋮
$(\hat{a}^{\dagger})^2|n\rangle$	$n+2$
$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle$	$n+1$
$|n\rangle$	n
$\hat{a}|n\rangle$	$n-1$
$(\hat{a})^2|n\rangle$	$n-2$
⋮	⋮

故称$\hat{a}$为下降算符，使得$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的本征值减1，$\hat{a}^{\dagger}$为上升算符，使得$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的本征值加1。结合$n \geq 0$的结论，$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的本征值

$$n = n_0, n_0 + 1, n_0 + 2, \cdots, \qquad n_0 \geq 0$$

（4）对于本征态$|n_0\rangle$，由$\hat{a}|n_0\rangle$仍然是$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的本征态，对应的本征值为$n_0 - 1$，与n_0为最小本征值的假设矛盾，故必须有截断：

$$\hat{a}|n_0\rangle = 0$$

此时

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n_0\rangle = 0$$

即

$$n_0 = 0$$

而且

$$\hat{a}\hat{a}|0\rangle = 0$$

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a}|0\rangle = 0$$

说明$\hat{a}|0\rangle$仍然是$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的本征态，本征值仍为0。

结论：

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

注意:到此仅仅用到了对易关系，没有进入具体表象。

一个问题是：n除了上面的取值，是否还有其他的取值？假设$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$还有别的本征态，那么用$\hat{a}$多次作用这个本征态后成为最小本征态，设对应的本征值为n_0'。由于n_0'必须为零，以上本征值就是$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的本征值的全部。

(5) 由于$\hat{a}|n\rangle$与$|n-1\rangle$都是$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的对应本征值为$n-1$的本征态，如果无简并（可以证明：一维束搏态无简并），有

$$\hat{a}|n\rangle = a_n|n-1\rangle$$

$$\langle n|\hat{a}^{\dagger} = \langle n-1|a_n^*$$

故

$$\langle n|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle = |a_n|^2\langle n-1|n-1\rangle$$

$$n = |a_n|^2, \qquad |a_n| = \sqrt{n}$$

同理，有

$$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = b_n|n+1\rangle, \qquad |b_n| = \sqrt{n+1}$$

可取

$$\begin{cases}\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ \hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle\end{cases}$$

（6）$\hat{H}$与$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$的共同表象

进入共同表象，

$$\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\right)_{mn}=\langle m|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle=n\delta_{mn}$$

$$H_{mn}=\langle m|\hat{H}|n\rangle=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\delta_{mn}$$

在自身表象均为对角矩阵。

$$a_{mn}=\langle m|\hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}\langle m|n-1\rangle=\sqrt{n}\delta_{m,n-1}$$

$$a^{\dagger}{}_{mn}=\langle m|\hat{a}^{\dagger}|n\rangle=\sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle=\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}$$

不是对角矩阵。

因为

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}+\hat{a}^{\dagger}\right),\qquad\hat{p}=-i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a}-\hat{a}^{\dagger}\right)$$

则

$$x_{mn}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a_{mn}+a^{\dagger}{}_{mn}\right)=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1}+\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right)$$

$$p_{mn}=-i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1}-\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right)$$

均不是对角阵。

注意坐标和动量的平均值

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle=\langle n|\hat{p}|n\rangle=0。$$

（7）进入坐标表象

对于基态$|0\rangle$，

$$\hat{a}|0\rangle=0$$

$$\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)|0\rangle=0$$

$$\langle x|\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)|0\rangle=0$$

$$\int dx' \langle x| \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) |x'\rangle\langle x'|0\rangle = 0$$

代入

$$\langle x|\hat{x}|x'\rangle = x\delta(x-x')$$

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x') = i\hbar\frac{d}{dx'}\delta(x-x')$$

分部积分后有

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle = 0$$

归一化后，坐标表象的基态波函数

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

激发态

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\langle x|\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}\left\langle x\left|\left(\hat{a}^\dagger\right)^2\right|n-2\right\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left\langle x\left|\left(\hat{a}^\dagger\right)^n\right|0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{n}{2}}\left\langle x\left|\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)^n\right|0\right\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{n}{2}}\int dx_1\cdots dx_n \left\langle x\left|\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right|x_1\right\rangle\cdots\langle x_{n-1}|\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}|x_n\rangle\langle x_n|0\rangle$$

代入基本矩阵元并分部积分后有

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{n}{2}}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)^n \psi_0(x)$$

至此，一维谐振子问题全部解决。

（8）$\hat{a}^\dagger\hat{a}$的物理意义

谐振子的能量

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

基态能量$\hbar\omega/2$，其它激发态的能量是在基态的基础上再增加$\hbar\omega$的整数倍。

可以认为，体系中存在一种量子，能量为$\hbar\omega$，全部凝聚在基态。没有激发

时无观测意义。当有n个量子从基态被激发出来成为可观察粒子，则谐振子处于第n个激发态。

基态没有可观察效应的粒子，但激发态的粒子都是从基态中激发产生的。故称基态为真空态，激发态为粒子态。

存在具有能量但无粒子的真空态是量子力学的一般性质。

n：粒子数，

$\hat{n}=\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$是粒子数算符，$\hat{a}$是粒子消灭算符，$\hat{a}^{\dagger}$是粒子产生算符。

$\hat{H}$和$\hat{n}$的共同表象：粒子数表象。

总结代数解法的思路：

束缚态→分离谱→寻找分离量子数的下降、上升算符（角动量问题，氢原子问题都可以用代数解法）。

（9）Casimir 效应

基态能（真空能，　点能）没有粒子的贡献，一般认为无观测效应。如果把激发态的能量看成是相对于真空态的，则是纯粒子贡献。那么真空能量本身到底有无观测效应？

考虑电磁场，对应的粒子是光子，能量$\sqrt{m^2+\vec{k}^2}=|\vec{k}|$(已经取自然单位制$\hbar=c=1$)。相空间中真空能量密度为$\frac{1}{2}\times$光子能量$=\frac{1}{2}|\vec{k}|$，坐标空间中真空能量密度是

$$\epsilon(x)=2\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{2}|\vec{k}|$$

前　因子 2 来自于独立偏振（内部自由度）。

这个真空态的能量密度是否有可观测效应？

注意到上　的积分是发散的（真空发散）。要了解（无穷大）真空，只有考察它的变化。

在电磁场中放入两块平行的板，　积为L^2，L足够大，距离为$a\ll L$。边界条件使得在a方向的波数（动量）受到限制，$k_z=\frac{n\pi}{a}$，在横方向由于L很大，无限制。由于被积函数是k_z的偶函数，有

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk_z}{2\pi}=2\int_{0}^{\infty}\frac{dk_z}{2\pi}=\frac{1}{a}\sum_n$$

在两板之间的体积L^2a内的真空能量为

$$E(a)=2L^2\int\frac{d^2\vec{k}_\perp}{(2\pi)^2}\sum_n\frac{1}{2}|\vec{k}|,\qquad |\vec{k}|=\sqrt{k_\perp^2+\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2}$$

放入两块平行板前后真空能量的变化为

$$\Delta E(a)=2L^2\int\frac{d^2\vec{k}_\perp}{(2\pi)^2}\left(\sum_n-\int_0^\infty dn\right)\frac{1}{2}|\vec{k}|$$

这个变化产生两板之间单位　积上的力

$$F(a) = -\frac{1}{L^2}\frac{\partial \Delta E(a)}{\partial a}$$

虽然求和与积分都是发散的（真空发散），但其差$\Delta E(a)$是有限的。经过计算有

$$F(a) = -\frac{\pi^2}{240a^4}$$

这个插入平行板后由于真空能量的变化（涨落）导致的吸引力以及力与a的关系于 1958 年被实　观测到，称为 *Casimir* 效应，是真空能量的变化导致的可观测效应，说明了真空不空。

如果考虑热运动，热激发会产生光子，在相空间的光子数分布为 Bose-Einstein 分布。此时体系处于激发态，能量密度为

$$\epsilon(x) = 2\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left(\frac{1}{e^{|\vec{k}|/T}-1}+\frac{1}{2}\right)|\vec{k}|$$

注意，温度$T = 0$时回到真空态。

此时在两板之间的体积L^2a内的能量为

$$E(a) = 2L^2\int \frac{d^2\vec{k}_\perp}{(2\pi)^2}\sum_n\left(\frac{1}{e^{|\vec{k}|/T}-1}+\frac{1}{2}\right)|\vec{k}|, \qquad |\vec{k}| = \sqrt{k_\perp^2+\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2}$$

放入两块平行板前后真空能量的变化为

$$\Delta E(a) = 2L^2\int \frac{d^2\vec{k}_\perp}{(2\pi)^2}\left(\sum_n - \int_0^\infty dn\right)\left(\frac{1}{e^{|\vec{k}|/T}-1}+\frac{1}{2}\right)|\vec{k}|$$

这个变化产生两板之间单位　积上的吸引力

$$F(a) = -\frac{1}{L^2}\frac{\partial \Delta E(a)}{\partial a} = F_{vac}(a) + F_T(a)$$

真空部分

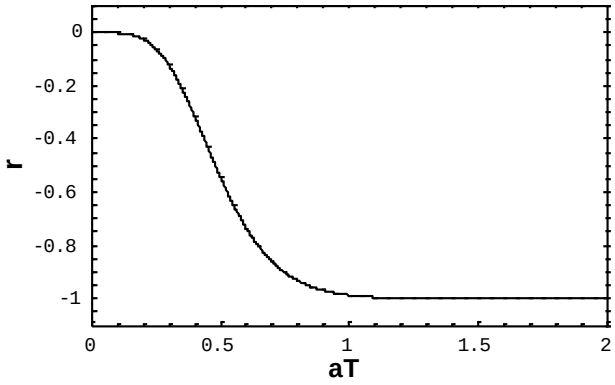
$$F_{vac}(a) = -\frac{\pi^2}{240a^4}$$

有限温度部分

$$F_T(a)=\frac{\pi^2}{15}T^4-\frac{\pi^2}{a^4}\sum_n\frac{n^3}{e^{\frac{n\pi}{aT}}-1}$$

定义有限温度与真空贡献的比值

$$r=\frac{F_T(a)}{F_{vac}(a)}$$



显然，热运动产生向外的排斥力，使得 Casimir 效应（吸引力）减弱。当温度 $T\to\infty$时，$r\to-1$，Casimir 效应完全被热运动抵消。

（10）Heisenberg 绘景中的上升下降算符

对于谐振子

$$\hat{H}=\left(\hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

由对易关系

$$[\hat{a},\hat{a}^{\dagger}]=1$$

有

$$\frac{d\hat{a}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{a},\hat{H}]=-i\omega\hat{a}$$

$$\frac{d\hat{a}^{\dagger}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{a}^{\dagger},\hat{H}]=i\omega\hat{a}^{\dagger}$$

解为

$$\hat{a}(t)=\hat{a}(0)e^{-i\omega t},\qquad \hat{a}^{\dagger}(t)=\hat{a}^{\dagger}(0)e^{i\omega t}$$

注意有

$$\hat{a}^{\dagger}(t)\hat{a}(t)=\hat{a}^{\dagger}(0)\hat{a}(0)$$

粒子数算符（哈密　算符）与时间无关，其本征矢$|n\rangle$与时间无关。*Heisenberg*绘景中一般算符的本征态是时间依赖的，但$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$就是$\hat{H}$，与绘景无关，故无时间演化。

由

$$\hat{x}(t)=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}(t)+\hat{a}^{\dagger}(t)\right)=\hat{x}(0)cos\omega t+\frac{1}{m\omega}\hat{p}(0)sin\omega t,$$

$$\hat{p}(t)=-i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a}(t)-\hat{a}^{\dagger}(t)\right)=\hat{p}(0)cos\omega t-m\omega\hat{x}(0)sin\omega t$$

虽然$\hat{x}(t),\ \hat{p}(t)$有振荡形式，它们的平均值与绘景无关，

$$\langle n|\hat{x}(t)|n\rangle=0,\qquad \langle n|\hat{p}(t)|n\rangle=0$$

不随时间振荡。

2.4 谐振子的相干态

在谐振子的能量本征态$|n\rangle$，

$\langle n|\hat{x}|n\rangle=\langle n|\hat{p}|n\rangle=0$

$$\langle n|\hat{x}^2|n\rangle=\sum_{n'}\langle n|\hat{x}|n'\rangle\langle n'|\hat{x}|n\rangle=\sum_{n'}x_{nn'}x_{n'n}=\frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

$$\langle n|\hat{p}^2|n\rangle=\sum_{n'}\langle n|\hat{p}|n'\rangle\langle n'|\hat{p}|n\rangle=\sum_{n'}p_{nn'}p_{n'n}=\frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1)$$

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle=(\langle\hat{x}^2\rangle-\langle\hat{x}\rangle^2)(\langle\hat{p}^2\rangle-\langle\hat{p}\rangle^2)=\langle\hat{x}^2\rangle\langle\hat{p}^2\rangle=\frac{\hbar^2}{4}(2n+1)^2$$

对于基态，

$$\langle 0|(\Delta x)^2|0\rangle\langle 0|(\Delta p)^2|0\rangle=\frac{\hbar^2}{4}$$

不确定度最小，是一个最接近经典的态。

还有没有其它最接近经典的态（准经典态，相干态）？

考虑下降算符的本征态$|\alpha\rangle$,

$$\hat{a}|\alpha\rangle=\alpha|\alpha\rangle\qquad\qquad \langle\alpha|\hat{a}^{+}=\langle\alpha|\alpha^{*}$$

注意：下降算符$\hat{a}$不是厄米算符，本征值α一般是复数。

下　考察态$|\alpha\rangle$的性质。

（1）$|\alpha\rangle$在粒子数表象的表示

将相干态$|\alpha\rangle$按能量本征态展开，

$$|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\alpha\rangle$$

由

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle, \qquad \langle n| = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle 0|(\hat{a})^n,$$

几率幅

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle 0|(\hat{a})^n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\langle 0|\alpha\rangle$$

由几率的归一化，

$$1 = \sum_n |\langle n|\alpha\rangle|^2 = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 e^{|\alpha|^2}$$

取

$$\langle 0|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}$$

有

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-|\alpha|^2/2}$$

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

（2）$|\alpha\rangle$归一但不正交

令

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \qquad \hat{a}|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle$$

代入粒子数表象的展开式，

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{-\frac{(|\alpha|^2+|\beta|^2)}{2}}\sum_{n,m}\frac{(\alpha^*)^n\beta^m}{\sqrt{n!\,m!}}\langle n|m\rangle$$

$$= e^{-\frac{(|\alpha|^2+|\beta|^2)}{2}} \sum_n \frac{(\alpha^*\beta)^n}{n!} = e^{\alpha^*\beta-(|\alpha|^2+|\beta|^2)/2}$$

故$|\alpha\rangle$与$|\beta\rangle$不正交。当$|\alpha\rangle = |\beta\rangle$，有归一化

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$$

（3）$|\alpha\rangle$是最小不确定态

$$\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\alpha|\hat{a}+\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha+\alpha^*)$$

$$\langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\langle\alpha|\hat{a}-\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\alpha-\alpha^*)$$

$$\langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle\alpha\left|\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)^2\right|\alpha\right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle\alpha\left|(\hat{a})^2+\left(\hat{a}^\dagger\right)^2+2\hat{a}^\dagger\hat{a}+1\right|\alpha\right\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega}(1+(\alpha+\alpha^*)^2)$$

$$\langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(1-(\alpha-\alpha^*)^2)$$

$$\langle\alpha|(\Delta x)^2|\alpha\rangle\langle\alpha|(\Delta p)^2|\alpha\rangle = (\langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle-\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle^2)(\langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle-\langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle^2) = \frac{\hbar^2}{4}$$

故相干态$|\alpha\rangle$满足最小不确定关系，是一个准经典态。

（4）$|\alpha\rangle$的完备性

由于$\hat{a}$的本征值α为复数，令

$$\alpha = |\alpha|e^{i\varphi}$$

完备性为

$$\int d^2\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| = \int|\alpha|d|\alpha|d\varphi|\alpha\rangle\langle\alpha| = \int|\alpha|d|\alpha|d\varphi e^{-|\alpha|^2}\sum_{n,m}\frac{\alpha^n(\alpha^*)^m}{\sqrt{n!\,m!}}|n\rangle\langle m|$$

$$= \sum_{n,m}|n\rangle\langle m|\int|\alpha|d|\alpha|d\varphi e^{-|\alpha|^2}\frac{|\alpha|^{n+m}e^{i(n-m)\varphi}}{\sqrt{n!\,m!}}$$

$$= 2\pi\sum_n|n\rangle\langle n|\int|\alpha|d|\alpha|e^{-|\alpha|^2}\frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = \pi\sum_n|n\rangle\langle n| = \pi$$

此处用到积分

$$\int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\varphi} d\varphi = 2\pi\delta_{nm}$$

$$\int_0^{\infty} e^{-r^2} r^{2n+1} dr = \frac{n!}{2}$$

有

$$\frac{1}{\pi}\int d^2\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1$$

故任意一个态都可以用相干态进行展开

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\pi}\int d^2\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle \text{。}$$

不正交但完备称为超完备。

（5）谐振子的基态是相干态

对于基态$|0\rangle$，有

$$\hat{a}|0\rangle = 0$$

故基态$|0\rangle$是下降算符的本征态，本征值为0。

2.5 坐标表象的 Schroedinger 方程

Schroedinger 绘景的态$|\psi,t\rangle$满足 Schroedinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi,t\rangle = \hat{H}|\psi,t\rangle$$

左乘以坐标算符$\hat{\vec{x}}$的本征矢$\langle\vec{x}|$，由于本征态在 Schroedinger 绘景中与时间无关，

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\vec{x}|\psi,t\rangle &= \langle\vec{x}|\hat{H}|\psi,t\rangle \\ &= \int d^3\vec{x}\,'\langle\vec{x}|\hat{H}|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\psi,t\rangle \\ &= \int d^3\vec{x}\,'\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})\right)\delta(\vec{x}-\vec{x}')\langle\vec{x}'|\psi,t\rangle \\ &= \int d^3\vec{x}\,'\delta(\vec{x}-\vec{x}')\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}'^2 + V(\vec{x})\right)\langle\vec{x}'|\psi,t\rangle \end{aligned}$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})\right)\langle \vec{x}|\psi, t\rangle$$

以上用到两次分部积分。故

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\psi(x)$$

$\psi(x) = \langle \vec{x}|\psi, t\rangle$称为波函数，这就是坐标表象的 *Schroedinger* 方程。

（1）定态 *Schroedinger* 方程

如果$\hat{H}$不含时间，*Schroedinger* 方程可以用分离变量法求解。令

$$\psi(x) = \varphi(\vec{x})T(t)$$

代入 *Schroedinger* 方程，有

$$\begin{cases} T(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\varphi_E(\vec{x}) = E\varphi_E(\vec{x}) \end{cases}$$

能量本征值E，定态

$$\psi_E(x) = \varphi_E(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

对于束缚态，束缚条件

$$\lim_{|\vec{x}\to\infty|}\varphi_E(\vec{x}) \to 0$$

导致E为分离值。

定态是$\hat{H}$不含时间时 *Schroedinger* 方程的特解，一般解是定态的线性迭加

$$\psi(x) = \sum_E c_E\,\psi_E(x)$$

（2）波函数的几率解释

当$V(\vec{x})$是实函数时，*Schroedinger* 方程可以写成连续性方程的形式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x) + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(x) = 0$$

几率密度和几率流密度

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$$

$$\vec{j}(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*(x)\vec{\nabla}\psi(x) - \psi(x)\vec{\nabla}\psi^*(x)\right)$$

对全空间积分：

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{x}\,\rho(x) = -\int_{\infty} d\vec{s}\cdot\vec{j}(x) = 0$$

故$\int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{x}\,\rho(x)$与时间无关，是一常数。意味着’相对论量子力学总几率守恒，无粒子的产生与消灭。

若势V是复函数，没有连续性方程，几率不守恒，可以用 *Schroedinger* 方程等效地描述粒子的衰变。

设

$$V = V_R - iV_I$$

V_R, V_I均为$\vec{x}$的实函数。由复势的 Schroedinger 方程，有连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x) + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(x) = -\frac{2}{\hbar}V_I(\vec{x})\rho(x)$$

对全空间积分，

$$\frac{d}{dt}\int d^3\vec{x}\,\rho(x) = -\frac{2}{\hbar}\int d^3\vec{x}\;\; V_I(\vec{x})\rho(x)$$

当$V_I > 0$，总几率减少，单位时间内减少的几率

$$R = \frac{2}{\hbar}\int d^3\vec{x}\;\; V_I(\vec{x})\rho(x)$$

当$V_I < 0$，总几率增加，$-R$为单位时间内增加的几率。

2.6 Feynman 路径积分量子化

常用的力学系统量子化是正则量子化。以分析力学为基础，将广义坐标$\vec{x}$与广义动量$\vec{p}$改为算符$\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}}$，并将$\vec{x}$与$\vec{p}$的泊松括号改为$\hat{\vec{x}}$与$\hat{\vec{p}}$的对易关系。

可否不使用算符（只使用一般函数）来将力学系统量子化？

（1）Schroedinger 绘景中的传播子

将态的时间演化

$$|\psi,t\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi,t_0\rangle$$

进入坐标表象

$$\begin{aligned}\langle\vec{x}|\psi,t\rangle &= \langle\vec{x}|\hat{U}(t,t_0)|\psi,t_0\rangle \\ &= \int d^3\vec{x}_0\,\langle\vec{x}|\hat{U}(t,t_0)|\vec{x}_0\rangle\langle\vec{x}_0|\psi,t_0\rangle\end{aligned}$$

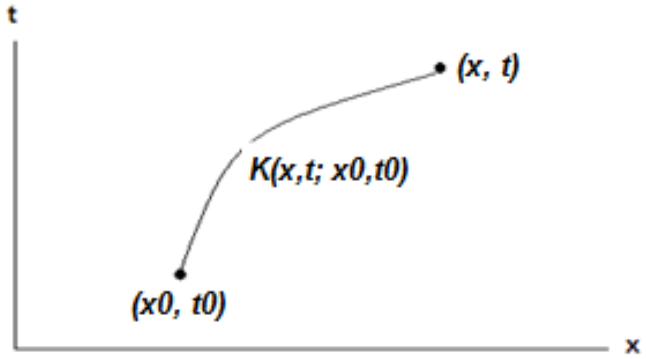
时间演化算符$\hat{U}(t,t_0)$进入坐标表象后成为时空演化矩阵

$$K(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0) = \langle\vec{x}|\hat{U}(t,t_0)|\vec{x}_0\rangle$$

有波函数的时空演化

$$\psi(\vec{x},t) = \int d^3\vec{x}_0\,K(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)\psi(\vec{x}_0,t_0)$$

说明$K(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)$是时空中波函数的传播子，将时空点$(\vec{x}_0,t_0)$的初态波函数$\psi(\vec{x}_0,t_0)$传播到时空点$(\vec{x},t)$的末态波函数$\psi(\vec{x},t)$。



$K(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)$也可以看成是从初态$\psi(\vec{x}_0,t_0)$跃迁到末态$\psi(\vec{x},t)$的几率幅。

Schroedinger 绘景中时间演化算符$\hat{U}(t,t_0)$满足方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)=\hat{H}\hat{U}(t,t_0)$$

左乘$\langle\vec{x}|$，右乘$|\vec{x}_0\rangle$，进入坐标表象，由于坐标本征态$|\vec{x}\rangle$, $|\vec{x}_0\rangle$与时间无关，有

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)&=\langle\vec{x}|\hat{H}\hat{U}(t,t_0)|\vec{x}_0\rangle\\&=\int d^3\vec{x}'\,\langle\vec{x}|\hat{H}|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\hat{U}(t,t_0)|\vec{x}_0\rangle\\&=\int d^3\vec{x}'\,\hat{H}\left(\vec{x},-i\hbar\vec{\nabla}\right)\delta(\vec{x}-\vec{x}')K(\vec{x}',t;\vec{x}_0,t_0)\\&=\int d^3\vec{x}'\,\hat{H}\left(\vec{x},i\hbar\vec{\nabla}'\right)\delta(\vec{x}-\vec{x}')K(\vec{x}',t;\vec{x}_0,t_0)\\&=\int d^3\vec{x}'\delta(\vec{x}-\vec{x}')\,\hat{H}\left(\vec{x},-i\hbar\vec{\nabla}'\right)K(\vec{x}',t;\vec{x}_0,t_0)\\&=\hat{H}\left(\vec{x},-i\hbar\vec{\nabla}\right)K(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)\end{aligned}$$

表明时空传播子满足 *Schroedinger* 方程。

例：求一维自由粒子的传播子。

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$$

由于$\hat{H}$不显含时间，

$$\hat{U}(t,t_0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$$

$$\begin{aligned}K(x,t;x_0,t_0)&=\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|x_0\rangle\\&=\int dp\,\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|p\rangle\langle p|x_0\rangle=\int dp\,\langle x|p\rangle\langle p|\vec{x}_0\rangle e^{-\frac{i}{2m\hbar}p^2(t-t_0)}\\&=\int dp\,e^{\frac{i}{\hbar}\left[p(x-x_0)-\frac{p^2}{2m}(t-t_0)\right]}=\sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t-t_0)}}e^{\frac{im(x-x_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}}\end{aligned}$$

如果初始时刻为平　波，是一个定态，

$$\psi(x_0,t_0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}(px_0-Et_0)}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}\left(px_0-\frac{p^2}{2m}t_0\right)}$$

则

$$\psi(x,t)=\int dx_0\,K(x,t;x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)$$

是一个可积的　斯积分，结果为波包。

例：求一维线性谐振子的传播子。

$$\hat{H}=\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

由于$\hat{H}$不显含时间，

$$\begin{aligned}K(x,t;x_0,t_0)&=\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|x_0\rangle\\&=\sum_n\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|n\rangle\langle n|x_0\rangle\\&=\sum_n\langle x|n\rangle\langle n|x_0\rangle\,e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega(t-t_0)}\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\psi_n(x)\psi_n^*(x_0)e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega(t-t_0)}\end{aligned}$$

$\psi_n(x)=\langle\vec{x}|n\rangle$是谐振子在坐标表象的波函数。

传播子的几个重要性质：

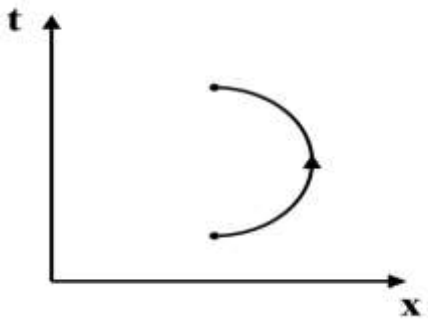
■等时传播子满足正交归一化条件

$$K(\vec{x},t;\vec{x}_0,t)=\langle\vec{x}|\hat{U}(t,t)|\vec{x}_0\rangle=\langle\vec{x}|\vec{x}_0\rangle=\delta(\vec{x}-\vec{x}_0)$$

等时传播子在时间和空间上都没有传播。

■封闭传播子与热力学的关系

$K(\vec{x},t;\vec{x},t_0)$在空间是一个封闭的传播子。



如果$\hat{H}$不显含时间，考虑所有的封闭传播子的集合，

$$\int d^3\vec{x}\,K(\vec{x},t;\vec{x},0)=\int d^3\vec{x}\,\langle\vec{x}|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\vec{x}\rangle$$

$$=\sum_E\int d^3\vec{x}\,\langle\vec{x}|E\rangle\langle E|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\vec{x}\rangle$$

$$=\sum_E\int d^3\vec{x}\,\langle E|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|E\rangle\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$=\sum_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\ \xrightarrow{\frac{i}{\hbar}t\to\frac{1}{T}}\ \sum_E e^{-\frac{E}{T}}=Z$$

所有封闭传播子的集合是统计力学中的配分函数，提供了用虚时动力学方法计算热力学的途径。

（2）*Heisenberg* 绘景中的跃迁几率幅

$$\hat{U}(t,0)=\hat{U}(t,t_0)\hat{U}(t_0,0)$$

$$\hat{U}(t,0)\hat{U}^\dagger(t_0,0)=\hat{U}(t,t_0)$$

有

$$K(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)\equiv\ {}_S\langle\vec{x}|\hat{U}(t,t_0)|\vec{x}_0\rangle_S$$

$$=\ {}_H\langle\vec{x},0|\hat{U}(t,0)\hat{U}^\dagger(t_0,0)|\vec{x}_0,0\rangle_H=\ {}_H\langle\vec{x},t|\vec{x}_0,t_0\rangle_H$$

故 *Schroedinger* 绘景中态的传播子（跃迁几率幅）在 *Heisenberg* 绘景是坐标算符本征态的跃迁几率幅。

（3）从传播子到路径积分

由时间演化算符的相乘性，

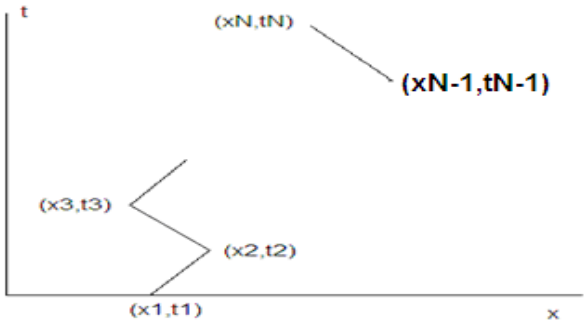
$$K(\vec{x}_3,t_3;\vec{x}_1,t_1)=\langle\vec{x}_3|\hat{U}(t_3,t_1)|\vec{x}_1\rangle=\langle\vec{x}_3|\hat{U}(t_3,t_2)\hat{U}(t_2,t_1)|\vec{x}_1\rangle$$

$$=\int d^3\vec{x}_2\,\langle\vec{x}_3|\hat{U}(t_3,t_2)|\vec{x}_2\rangle\langle\vec{x}_2|\hat{U}(t_2,t_1)|\vec{x}_1\rangle$$

$$=\int d^3\vec{x}_2\,K(\vec{x}_3,t_3;\vec{x}_2,t_2)K(\vec{x}_2,t_2;\vec{x}_1,t_1),\qquad t_3>t_2>t_1$$

这是传播子的相乘性：从$(\vec{x}_1,t_1)$传播到$(\vec{x}_3,t_3)$等价于先从$(\vec{x}_1,t_1)$传播到$(\vec{x}_2,t_2)$再传播到$(\vec{x}_3,t_3)$。

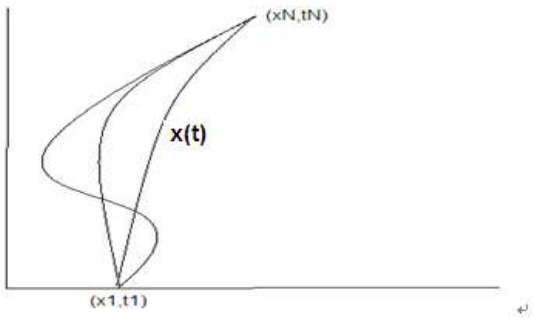
考虑波函数从$(\vec{x}_1,t_1)$到$(\vec{x}_N,t_N)$的传播。将时间t_N-t_1进行N等分$dt=\frac{t_N-t_1}{N-1}$，



$$K(\vec{x}_N,t_N;\vec{x}_1,t_1)$$

$$=\int d\vec{x}_{N-1}d\vec{x}_{N-2}\cdots d\vec{x}_2\,K(\vec{x}_N,t_N;\vec{x}_{N-1},t_{N-1})K(\vec{x}_{N-1},t_{N-1};\vec{x}_{N-2},t_{N-2})\cdots K(\vec{x}_2,t_2;\vec{x}_1,t_1)$$

当$N\to\infty$时，即$dt\to 0$时，多重积分转变成对路径的积分，



$$K(\vec{x}_N,t_N;\vec{x}_1,t_1)=\int_{(\vec{x}_1,t_1)}^{(\vec{x}_N,t_N)}[d\vec{x}]\,P[\vec{x}]$$

$P[\vec{x}]$是通过一条具体路径$\vec{x}(t)$把态从$(\vec{x}_1,t_1)$传播到$(\vec{x}_N,t_N)$的传播子（几率幅），$K(\vec{x}_N,t_N;\vec{x}_1,t_1)$是通过所有路径把态从$(\vec{x}_1,t_1)$传播到$(\vec{x}_N,t_N)$的传播子（几率幅）。

路径积分表明量子力学中所有路径都对态的时空演化有贡献。

以上是在正则量子化方案中讨论。

（4）*Feynman* 路径积分量子化

Feynman 不考虑波函数的演化，而是直接考虑粒子的运动。

假设粒子可以通过所有的路径从(x_A,t_A)运动到(x_B,t_B)。其中通过路径$x(t)$的几率幅是

$$P[x]=Ce^{\frac{i}{\hbar}S[x]}$$

其中

$$S[x]=\int_{t_A}^{t_B}\mathcal{L}(x)dt$$

是路径$x(t)$对应的作用量，$\mathcal{L}$是体系拉氏量

$$\mathcal{L}(x)=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x),$$

假设粒子从(x_A,t_A)运动到(x_B,t_B)的总的几率幅是所有几率幅相加，即路径积分，

$$K(x_B,t_B;x_A,t_A)=C\int_{x_A}^{x_B}[dx]e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}。$$

讨论：

■ 粒子走每一条路径的几率是相同的，但是几率幅不同。几率幅相加（而不是几率相加）导致不同路径之间的相干控制总的几率。

■ $K(x,t;x_0,t_0)$在正则量子化的 *Schroedinger* 绘景是态的跃迁几率幅，在 *Heisenberg* 绘景是坐标算符本征态的跃迁几率幅。在 *Feynman* 路径积分量子化：是粒子从初始时空点(x_0,t_0)运动到时空点(x,t)的几率幅。*Feynman* 不把

几率幅与粒子的态联系，也不与坐标算符联系，而是直接把它和粒子的经典坐标联系起来，求和是对粒子运动的所有路径进行。

注意，经典力学中的时空演化只有一条唯一的路径，由最小作用量确定。例如，对于 度为h，重力加速度为g的自由落体运动，唯一的路径就是垂直下降，

$$x(t) = h - \frac{1}{2}gt^2$$

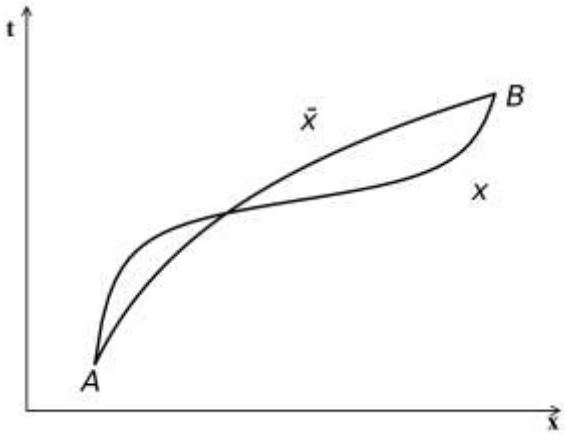
■ 路径积分量子化是经典力学的自然推广，容易理解，不用引入算符等Q数，完全在C数范围内计算。路径积分在量子规范场论中有重要应用。

（5）*Feynman* 路径积分的计算

一般的路径积分很复杂，但当$\mathcal{L}$是路径x的二次型时，路径积分为 斯型，严格可积。

$$\mathcal{L}(x) = a\dot{x}^2 + bx\dot{x} + cx^2 + d\dot{x} + ex + f$$

其中系数$a(t), b(t), c(t), d(t), e(t), f(t)$都是时间$t$的函数。



设从时空点A到B的经典路径是$\bar{x}(t)$，一般路径为$x(t)$。令

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t), \qquad y(t_A) = y(t_B) = 0$$

对路径$x(t)$的积分变成对量子路径$y(t)$的积分：

$$\mathcal{L}(x) = \mathcal{L}_c(\bar{x}) + \mathcal{L}_m(\bar{x}, y) + \mathcal{L}_q(y)$$

$$\mathcal{L}_c(\bar{x}) = a\dot{\bar{x}}^2 + b\bar{x}\dot{\bar{x}} + c\bar{x}^2 + d\dot{\bar{x}} + e\bar{x} + f \qquad \text{(经典部分)}$$

$$\mathcal{L}_m(\bar{x}, y) = 2a\dot{\bar{x}}\dot{y} + b\bar{x}\dot{y} + b\dot{\bar{x}}y + 2c\bar{x}y + d\dot{y} + ey \qquad \text{（混合部分）}$$

$$\mathcal{L}_q(y) = a\dot{y}^2 + by\dot{y} + cy^2 \qquad \text{（量子部分）}$$

作用量

$$S[x] = \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{L}(x)dt = S_c[\bar{x}] + S_m[\bar{x}, y] + S_q[y]$$

对应经典部分的作用量

$$S_c[\bar{x}] = \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{L}_c(\bar{x})dt$$

对应混合部分的作用量

$$\begin{aligned}
S_m[\bar{x}, y] &= \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{L}_m(\bar{x}, y)dt \\
&= \int_{t_A}^{t_B} (2a\dot{\bar{x}}\dot{y} + b\bar{x}\dot{y} + b\dot{\bar{x}}y + 2c\bar{x}y + d\dot{y} + ey)dt \\
&= \int_{t_A}^{t_B} [\dot{y}(2a\dot{\bar{x}} + b\bar{x} + d) + y(b\dot{\bar{x}} + 2c\bar{x} + e)]dt \\
&= -\int_{t_A}^{t_B} y\left[\frac{d(2a\dot{\bar{x}} + b\bar{x} + d)}{dt} - (b\dot{\bar{x}} + 2c\bar{x} + e)\right]dt \\
&= -\int_{t_A}^{t_B} y\left[\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}_c}{\partial \dot{\bar{x}}} - \frac{\partial \mathcal{L}_c}{\partial \bar{x}}\right]dt \\
&= 0
\end{aligned}$$

在第 4 个等式用到了边界条件$y(t_A) = y(t_B) = 0$，最后一步用到了经典运动方程（最小作用量原理）

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}_c}{\partial \dot{\bar{x}}} - \frac{\partial \mathcal{L}_c}{\partial \bar{x}} = 0$$

对应量子部分的作用量

$$S_q[y]=\int_{t_A}^{t_B}\mathcal{L}_q(y)dt=\int_{t_A}^{t_B}(a\dot{y}^2+by\dot{y}+cy^2)dt$$

故

$$K(x_B,t_B;x_A,t_A)=C\int_{x_A}^{x_B}[dx]e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}$$

$$=Ce^{\frac{i}{\hbar}S_c[\bar{x}]}\int_0^0[dy]e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_A}^{t_B}(a\dot{y}^2+by\dot{y}+cy^2)dt}$$

$$=F(t_A,t_B)e^{\frac{i}{\hbar}S_c[\bar{x}]}$$

对量子路径的积分只是两个时间端点t_A,t_B的函数。

路径的量子涨落的贡献相当于一个归一化因子$F(t_A,t_B)$。但是这个因子'常重要，决定了粒子在(x_B,t_B)出现的几率

$$P(x_B,t_B;x_A,t_A)=|K(x_B,t_B;x_A,t_A)|^2=|F(t_A,t_B)|^2$$

Feynman 路径积分量子化：

对于 斯二次型的拉氏量，粒子从(t_A, x_A)运动到(t_A, x_B)的总几率幅

$$K(x_B, t_B; x_A, t_A) = F(t_A, t_B)\ e^{\frac{i}{\hbar}S_c[\bar{x}]}$$

量子路径 经典路径

例：求自由粒子的总几率幅。

$$\mathcal{L}(x) = \frac{m}{2}\dot{x}^2$$

先求经典作用量。经典路径满足

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0$$

$$\ddot{x} = 0$$

有

$$x(t) = C_1 t + C_2$$

由边界条件

$$x_A = C_1 t_A + C_2$$

$$x_B = C_1 t_B + C_2$$

有

$$C_1 = \frac{x_B - x_A}{t_B - t_A}$$

经典拉氏量

$$\mathcal{L}_c(x) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 = \frac{m}{2}\left(\frac{x_B - x_A}{t_B - t_A}\right)^2$$

经典作用量

$$S_c[x] = \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{L}_c(x)dt = \frac{m}{2}\frac{(x_B - x_A)^2}{t_B - t_A}$$

总几率幅

$$K(x_B,t_B;x_A,t_A)=F(t_A,t_B)e^{\frac{im(x_B-x_A)^2}{2\hbar(t_B-t_A)}}$$

再求量子涨落的贡献，即归一化因子$F(t_A,t_B)$，我们不直接由它的定义计算，而是由传播子的相乘性决定。

$$K(x_B,t_B;x_A,t_A)=\int dx_C\,K(x_B,t_B;x_C,t_C)K(x_C,t_C;x_A,t_A),\quad t_B>t_C>t_A$$

由于$F(t_A,t_B)$不依赖于x_B,x_A，可取$x_B=x_A=0$，

$$K(0,t_B;0,t_A)=\int dx_C\,K(0,t_B;x_C,t_C)K(x_C,t_C;0,t_A)$$

$$F(t_A,t_B)=F(t_A,t_C)F(t_C,t_B)\int_{-\infty}^{\infty}dx_C\,e^{\frac{imx_C^2}{2\hbar(t_B-t_C)}}e^{\frac{imx_C^2}{2\hbar(t_C-t_A)}}$$

$$=F(t_A,t_C)F(t_C,t_B)\left[\frac{2i\pi\hbar(t_B-t_C)(t_C-t_A)}{m(t_B-t_A)}\right]^{1/2}$$

由于$F(t_A,t_B)$，$F(t_A,t_C)$，$F(t_C,t_B)$的函数形式相同，只是变量不同而已，有

$$F(t_A,t_B)=\left[\frac{m}{2i\pi\hbar(t_B-t_A)}\right]^{1/2}$$

只是时间长度t_B-t_A的函数。

故自由粒子的总几率幅

$$K(x_B,t_B;x_A,t_A)=\left[\frac{m}{2i\pi\hbar(t_B-t_A)}\right]^{1/2}e^{\frac{im(x_B-x_A)^2}{2\hbar(t_B-t_A)}}$$

与在正则量子化的 *Schroedinger* 绘景计算得到的结果一样。

如果体系具有时间平移不变性，$K(x_B,t_B;x_A,t_A)$只依赖于t_B-t_A，即$K(x_B,t_B;x_A,t_A)=K(x_B,x_A,t_B-t_A)$，$F(t_A,t_B)=F(t_B-t_A)$。由此可由$t_B-t_A\to 0$的极限来确定$F(t_B-t_A)$，即由等时传播子的归一化

$$\lim_{t_B-t_A\to 0}K(x_B,x_A,t_B-t_A)=\delta(x_B-x_A)$$

来确定$F(t_B-t_A)$。

由

$$\delta(x_B-x_A)=\lim_{t_B-t_A\to 0}F(t_B-t_A)e^{\frac{im(x_B-x_A)^2}{2\hbar(t_B-t_A)}}$$

$$=\lim_{t_B-t_A\to 0}F(t_B-t_A)e^{-\frac{(x_B-x_A)^2}{2i\hbar(t_B-t_A)/m}}$$

$$=\lim_{t_B-t_A\to 0}F(t_B-t_A)\left[\frac{2i\pi\hbar(t_B-t_A)}{m}\right]^{1/2}\delta(x_B-x_A)$$

这里用到了δ函数的表示

$$\delta(x)=\lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}}e^{-\frac{x^2}{\alpha}}$$

于是

$$F(t_B-t_A)=\left[\frac{m}{2i\pi\hbar(t_B-t_A)}\right]^{1/2}$$

例：求谐振子的总几率幅。

$$\mathcal{L}(x)=\frac{m}{2}\dot{x}^2-\frac{m}{2}\omega^2x^2$$

先求经典作用量。经典路径满足

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{x}}-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x}=0$$

$$\ddot{x}+\omega^2x=0$$

有

$$x(t)=C_1cos(\omega t)+C_2sin(\omega t)$$

由边界条件

$$x_A=C_1cos(\omega t_A)+C_2sin(\omega t_A)$$

$$x_B=C_1cos(\omega t_B)+C_2sin(\omega t_B)$$

有

$$C_1 = \frac{x_A sin(\omega t_B) - x_B sin(\omega t_A)}{sin(\omega(t_B - t_A))}$$

$$C_2 = -\frac{x_A cos(\omega t_B) - x_B cos(\omega t_A)}{sin(\omega(t_B - t_A))}$$

经典拉氏量

$$\mathcal{L}_c(x) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m}{2}\omega^2 x^2$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}[-(C_1^2 - C_2^2)cos(2\omega t) - 2C_1 C_2 sin(2\omega t)]$$

经典作用量

$$S_c[x] = \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{L}_c(x)dt$$

$$= \frac{m\omega}{2sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)}\big[(x_A^2 + x_B^2)cos\big(\omega(t_B - t_A)\big) - 2x_A x_B\big]$$

总的几率幅

$$K(x_B, x_A, t_B - t_A) = F(t_B - t_A)e^{\frac{im\omega}{2\hbar sin(\omega(t_B - t_A))}[(x_A^2 + x_B^2)cos(\omega(t_B - t_A)) - 2x_A x_B]}$$

再求量子涨落的贡献，即因子$F(t_B - t_A)$，可以由等时传播子的归一化决定。

$$\lim_{t_B - t_A \to 0} K(x_B, x_A, t_B - t_A) = \delta(x_B - x_A)$$

仍然利用

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \to 0} \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} e^{-\frac{x^2}{\alpha}}$$

有

$$\delta(x_B - x_A) = \lim_{t_B - t_A \to 0} F(t_B - t_A)\, e^{\frac{im\omega}{2\hbar sin(\omega(t_B - t_A))}[(x_A^2 + x_B^2)cos(\omega(t_B - t_A)) - 2x_A x_B]}$$

$$= \lim_{t_B - t_A \to 0} F(t_B - t_A)\, e^{-\frac{(x_B - x_A)^2}{2i\hbar sin(\omega(t_B - t_A))/(m\omega)}}$$

$$= \lim_{t_B - t_A \to 0} F(t_B - t_A) \left[\frac{2i\pi\hbar sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)}{m\omega}\right]^{1/2} \delta(x_B - x_A)$$

即

$$F(t_B - t_A) = \left[\frac{m\omega}{2i\pi\hbar sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)}\right]^{1/2}$$

总几率幅

$$K(x_B, x_A, t_B - t_A)$$

$$= \left[\frac{m\omega}{2i\pi\hbar sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)}\right]^{1/2} e^{\frac{im\omega}{2\hbar sin(\omega(t_B - t_A))}\left[(x_A^2 + x_B^2)cos(\omega(t_B - t_A)) - 2x_A x_B\right]}$$

（6）经典近似

当势能$V(x)$不是x的二次式时，路径积分一般不可积。

设有两条　近的路径$x_1(t)$和$x_2(t) = x_1(t) + \delta x(t)$。当粒子的尺度和质量很大，作用量$S$随路径的变化$\delta S \gg \hbar$，几率幅的变化$e^{\frac{i}{\hbar}\delta S}$随路径的变化会引起剧烈　荡，路径积分的结果使得路径之间互相抵消。只有经典路径$\bar{x}(t)$，作用量S_c是S的极小值，在$\bar{x}(t)$附近路径的微小变化不会引起S的剧烈　荡。于是对于$e^{\frac{i}{\hbar}S}$的路径积分只　考虑$\bar{x}(t)$邻近的路径。令

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t), \qquad y(t_A) = y(t_B) = 0$$

$$V(x) \approx V(\bar{x}) + V'(\bar{x})y$$

$$\mathcal{L}(x) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x) = \mathcal{L}_c(\bar{x}) + \mathcal{L}_m(\bar{x}, y) + \mathcal{L}_q(y)$$

$$\mathcal{L}_c(\bar{x}) = \frac{m}{2}\dot{\bar{x}}^2 - V(\bar{x}) \qquad \text{（经典部分）}$$

$$\mathcal{L}_m(\bar{x}, y) = m\dot{\bar{x}}\dot{y} - \mathrm{V}'(\bar{x})y \qquad \text{（混合部分）}$$

$$\mathcal{L}_q(y) = \frac{m}{2}\dot{y}^2 \qquad \text{（量子部分）}$$

对应经典部分的作用量

$$S_c[\bar{x}] = \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{L}_c(\bar{x})dt = \int_{t_A}^{t_B} \left(\frac{m}{2}\dot{\bar{x}}^2 - V(\bar{x})\right)dt$$

对应混合部分的作用量

$$\begin{aligned} S_m[\bar{x},y] &= \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{L}_m(\bar{x},y)dt \\ &= \int_{t_A}^{t_B} (m\dot{\bar{x}}\dot{y} - \mathrm{V}'(\bar{x})y)dt \\ &= -\int_{t_A}^{t_B} y\left[\frac{d(m\dot{\bar{x}})}{dt} + \mathrm{V}'(\bar{x})\right]dt \\ &= -\int_{t_A}^{t_B} y\left[\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}_c}{\partial \dot{\bar{x}}} - \frac{\partial \mathcal{L}_c}{\partial \bar{x}}\right]dt \\ &= 0 \end{aligned}$$

对应量子部分的作用量

$$S_q[y] = \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{L}_q(y)dt = \int_{t_A}^{t_B} \frac{m}{2}\dot{y}^2 dt$$

总几率幅

$$K(x_B,t_B;x_A,t_A) = Ce^{\frac{i}{\hbar}S_c[\bar{x}]}\int_0^0 [dy]e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_A}^{t_B}\frac{m}{2}\dot{y}^2 dt} = F(t_A,t_B)e^{\frac{i}{\hbar}S_c[\bar{x}]}$$

表明：对于半经典体系，路径积分转化成 斯型的可积系统。

2.7 规范变换

（1）常数势差导致的量子相干性

经典力学中，力$\vec{F} = -\vec{\nabla}V$，将势V加上一个与空间无关的常数后不带来任何力学效用。在量子力学中，设粒子在势场$\hat{V}$中运动，初态$|t_0\rangle$的演化为

$$|t\rangle_1 = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|t_0\rangle$$

如果粒子在势场$\hat{V}+\Delta V(t)$中运动，ΔV与空间无关（是一个可对易的C数），初态$|t_0\rangle$的演化为

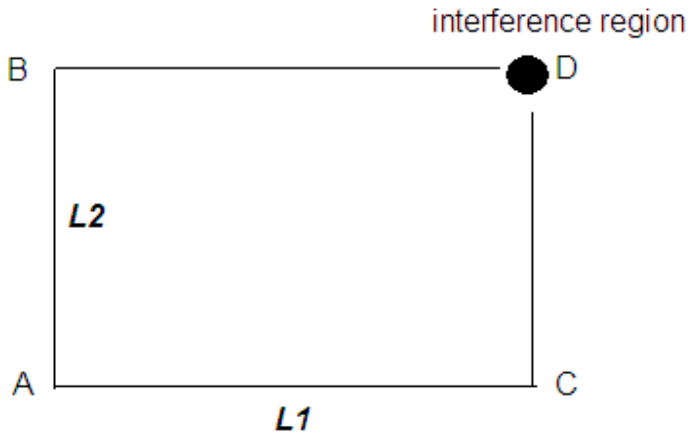
$$|t\rangle_2 = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt\prime \Delta V(t')}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|t_0\rangle\right)$$

两个态之间的差别是一个相因子$e^{i\Delta\varphi}$，

$$\Delta\varphi = -\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\Delta V(t') \xrightarrow{\text{势差与时间无关}} -\frac{\Delta V}{\hbar}(t-t_0)$$

这个相位差$\Delta\varphi$会导致两个波函数的相干，产生可观测性。

（2）重力势差导致的量子相干性



考虑热中子（不带电）在重力场中的运动。金属框 ABCD 平行于地　。在A处把中子分成两束，一束经AC和CD到达点D，另一束经AB和BD到达点D。由于中子在两条路径上感受到的重力势相同，在D处无相干现象。但是，如果以AC为轴将框向上翘起一角度δ，则粒子在BD部分相比AC部分有一常数势差

$$\Delta V = mgl_2 sin\delta$$

虽然粒子在AB和CD部分相比于AC部分也有势差，而且与空间位置有关，但对两条路径有相同的的势差，对相位差无贡献。设粒子从B到D的时间是Δt，则粒子经过两条路径的势差导致在D处产生相位差

$$\Delta\varphi = -\frac{\Delta V}{\hbar}\Delta t = -\frac{m}{\hbar}gl_2 sin\delta\Delta t$$

由于$\Delta t = l_1/v$, v是粒子（波包）速度，$mv = p = h/\lambda$, λ是中子的 de Broglie 波长，$\Delta t = l_1 m\lambda/h$,

$$\Delta\varphi = -\left(\frac{m}{\hbar}\right)^2 g l_2 l_1 sin\delta$$

当角度δ变化时，相干条纹会随之产生振荡。实　发现了这种振荡。

（3）电磁场中的 Heisenberg 运动方程

电磁场既可以用势$A_0(\vec{x})$, $\vec{A}(\vec{x})$，也可以用场强$\vec{E}=-\vec{\nabla}A_0$, $\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}$来描述，二者的关系类似于力学中势$V$和力$\vec{F}$的关系。

由经典电动力学，带电粒子在电磁场中运动由势场（而不是直接由电场和磁场）控制，

$$H=\frac{\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m}+eA_0$$

对于量子力学，只需将$A_0(\vec{x})$, $\vec{A}(\vec{x})$中的$\vec{x}$和$\vec{p}$,$H\to\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}},\hat{H}$。

利用基本对易关系

$$[\hat{x}_i,\hat{x}_j]=0,\qquad [\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0,\qquad [\hat{x}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij}$$

将$\hat{A}_0(\hat{\vec{x}})$, $\hat{\vec{A}}(\hat{\vec{x}})$对$\hat{\vec{x}}$进行展开，并利用$\hat{\vec{E}}(\hat{\vec{x}})=-\vec{\nabla}\hat{A}_0(\hat{\vec{x}})$, $\hat{\vec{B}}(\hat{\vec{x}})=\vec{\nabla}\times\hat{\vec{A}}(\hat{\vec{x}})$，得到机械动量$\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\hat{\vec{A}}$（正则动量$\hat{\vec{p}}$）各个分量之间的对易关系

$$\left[\hat{p}_i-\frac{e}{c}\hat{A}_i,\hat{p}_j-\frac{e}{c}\hat{A}_j\right]=\frac{ie\hbar}{c}\varepsilon_{ijk}\hat{B}_k$$

有 Heisenberg 绘景的运动方程

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i,\hat{H}]=\frac{1}{2im\hbar}\left[\hat{x}_i,\left(\hat{p}_j-\frac{e}{c}\hat{A}_j\right)\left(\hat{p}_j-\frac{e}{c}\hat{A}_j\right)\right]$$

$$=\frac{1}{m}\left(\hat{p}_i-\frac{e}{c}\hat{A}_i\right)$$

$$m\frac{d^2\hat{x}_i}{dt^2}=\frac{d}{dt}\left(\hat{p}_i-\frac{e}{c}\hat{A}_i\right)=\frac{1}{i\hbar}\left[\left(\hat{p}_i-\frac{e}{c}\hat{A}_i\right),\hat{H}\right]$$

$$=\frac{e}{2mc}\varepsilon_{ijk}\left(\hat{p}_j-\frac{e}{c}\hat{A}_j\right)\hat{B}_k-\frac{e}{2mc}\varepsilon_{ijk}\hat{B}_j\left(\hat{p}_k-\frac{e}{c}\hat{A}_k\right)-e\frac{\partial\hat{A}_0}{\partial\hat{x}_i}$$

$$m\frac{d^2\hat{\vec{x}}}{dt^2}=e\left[\hat{\vec{E}}+\frac{1}{2c}\left(\frac{d\hat{\vec{x}}}{dt}\times\hat{\vec{B}}-\hat{\vec{B}}\times\frac{d\hat{\vec{x}}}{dt}\right)\right]$$

注意 1）$\frac{d\hat{\vec{x}}}{dt}=\frac{1}{m}\left(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\hat{\vec{A}}\right)$与$\hat{\vec{B}}(\hat{\vec{x}})$不对易，2）运动方程仍然与电磁势有关。

以上为 *Heisenberg* 绘景中运动方程。

（4）电磁场中的规范变换

将电磁势进行变换：

$$A_0(\vec{x})\text{不变，}$$

$$\vec{A}(\vec{x}) \to \vec{A}(\vec{x}) + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{x})$$

其中$\Lambda(\vec{x})$为任意标量函数。显然，场强$\vec{E} = -\vec{\nabla}A_0$，$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$保持不变。这类势变化而场强不变的变换称为规范变换，不同的$\Lambda(\vec{x})$称为不同的规范。

显然，*Heisenberg* 绘景中的运动方程在规范变换下发生了变化。

现在来看 *Schroedinger* 绘景中运动方程的变化。设规范变换前后的态为$\psi(\vec{x},t)$和$\psi'(\vec{x},t)$，各自满足 *Schroedinger* 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \left[\frac{\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x})\right)^2}{2m} + eA_0(\vec{x})\right]\psi(\vec{x},t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'(\vec{x},t) = \left[\frac{\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\left(\vec{A}(\vec{x}) + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{x})\right)\right)^2}{2m} + eA_0(\vec{x})\right]\psi'(\vec{x},t)$$

将第二个方程左乘$e^{-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x})}$，并利用

$$e^{-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x})}\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\left(\vec{A}(\vec{x}) + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{x})\right)\right)e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x})} = -i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x})$$

第二个方程变为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x})}\psi'(\vec{x},t)\right) = \left[\frac{\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x})\right)^2}{2m} + eA_0(\vec{x})\right]\left(e^{-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x})}\psi'(\vec{x},t)\right)$$

故有

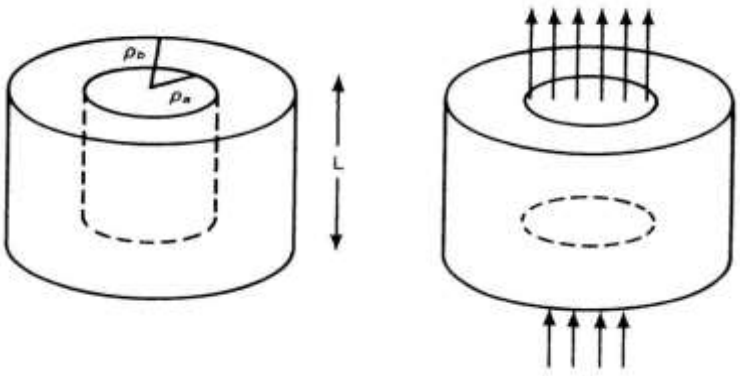
$$\psi'(\vec{x},t) = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x})}\psi(\vec{x},t)$$

表明，规范变化前后的态只相差一个定域相因子，与前面重力势结果类似。

下面讨论规范变换带来的可观测效应。

（5）AB 效应(*Aharonov-Bohm*)

先看束缚态问题。



如图，半径分别为ρ_a，ρ_b，长（沿z轴方向）为L的两个同轴空心圆柱桶，两端（$z=0$，$z=L$）盖上盖子。质量为μ的粒子在$\rho_a<\rho<\rho_b$，$0<z<L$的壳中运动，不能运动到$\rho<\rho_a$，$\rho>\rho_b$，$z<0$，$z>L$的区间，是一个束缚态问题。

先考虑没有电磁场的情形，$\hat{H}$只包含动能项，柱坐标系中的波函数$\psi(\rho,\varphi,z)$满足 *Schroedinger* 方程

$$-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2\mu}\psi=E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi=E\psi,$$

$$\rho_a<\rho<\rho_b,\qquad 0<z<L$$

由于没有ρ,φ,z的交叉微分项，可以用分离变量法求解，

$$\psi(\rho,\varphi,z)=R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z)$$

利用束缚态条件

$$\psi(\rho_a,\varphi,z)=\psi(\rho_b,\varphi,z)=\psi(\rho,\varphi,0)=\psi(\rho,\varphi,L)=0$$

得到体系能量（见 *J.Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Problem 25 of chapter 2*）

$$E_{lmn}=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[k_{mn}^2+\left(\frac{l\pi}{L}\right)^2\right]$$

$l=1,2,3,\dots$，$m=0,1,2,\dots$，$n=1,2,3\cdots$分别是径向，角向和纵向的约束条件导致的量子数，k_{mn}是超越方程

$$J_m(k_{mn}\rho_b)N_m(k_{mn}\rho_a)-J_m(k_{mn}\rho_a)N_m(k_{mn}\rho_b)=0$$

的第n个解，$J_m(x)$和$N_m(x)$是第一和第二类m阶 *Bessel* 函数。

现在考虑有电磁场的情形。在中间空心处放一个长的螺线管，使得产生的磁场限制在管内，保证管外的磁场为零，即

$$\vec{B}=\begin{cases}0, & \rho>\rho_a\\ B\vec{e}_z, & \rho<\rho_a\end{cases}$$

考虑到$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}$，有

$$\vec{A}=\begin{cases}\dfrac{B\rho_a^2}{2\rho}\vec{e}_\varphi, & \rho>\rho_a\\ \dfrac{B\rho}{2}\vec{e}_\varphi, & \rho<\rho_a\end{cases}$$

如果在$\rho<\rho_a$的区间改变磁场，在粒子运动区间$\rho_a<\rho<\rho_b$会改变势场但不改变磁场$\vec{B}=0$，这一现象也可以反过来用规范变换来理解：在$\rho_a<\rho<\rho_b$区间，进行一个规范变换来改变势场

$$\vec{A}=0\ \rightarrow\ \vec{A}=\vec{\nabla}\Lambda=\vec{\nabla}\left(\frac{B\rho_a^2}{2}\varphi\right)=\frac{B\rho_a^2}{2\rho}\vec{e}_\varphi$$

而该区间的磁场$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}=\vec{\nabla}\times\vec{\nabla}\Lambda=0$，没变化。

规范变换后的波函数

$$\psi'(\rho,\varphi,z)=e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda}\psi(\rho,\varphi,z)=R(\rho)e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda}\Phi(\varphi)Z(z)$$

利用束缚态条件来确定能量。束缚态条件

$$\psi'(\rho_a,\varphi,z)=\psi'(\rho_b,\varphi,z)=\psi'(\rho,\varphi,0)=\psi'(\rho,\varphi,L)=0$$

导致体系能量

$$E'_{l\gamma n}=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[k_{\gamma n}^2+\left(\frac{l\pi}{L}\right)^2\right]$$

$l = 1,2,3,\ldots$，$\gamma^2 = m^2 - \left(\frac{eB\rho_a^2}{2\hbar c}\right)^2$，$m = 01,2,\cdots$，$n = 1,2,3,\cdots$ 分别是径向，角向和纵向的约束条件导致的量子数，注意：只有角向的量子数发生了改变，γ不要求是整数。$k_{\gamma n}$是超越方程

$$J_\gamma(k_{\gamma n}\rho_b)N_\gamma(k_{\gamma n}\rho_a) - J_\gamma(k_{\gamma n}\rho_a)N_\gamma(k_{\gamma n}\rho_b) = 0$$

的第n个解，$J_\gamma(x)$和$N_\gamma(x)$是第一和第二类γ阶 *Bessel* 函数。

显然，规范变换前后的束缚态能量发生了改变，$E'_{l\gamma n}$与磁场有关，尽管在粒子运动的区间并没有磁场产生！

加入磁场前后的基态$(l = 1, m = 0, n = 1)$能量为E_{101}和E'_{101}。如果要求基态能量保持不变，

$$E'_{101} = E_{101}$$

$$\gamma^2 = m^2 - \left(\frac{eB\rho_a^2}{2\hbar c}\right)^2 = 0$$

有条件

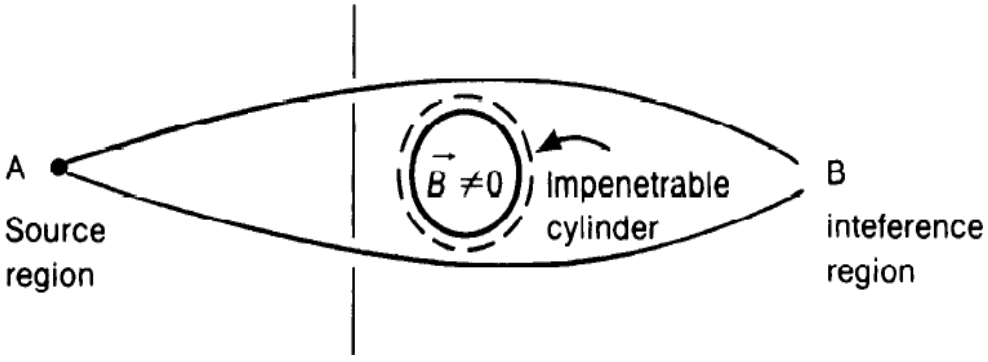
$$\frac{eB\rho_a^2}{2\hbar c} = \pm m, \qquad m = 0,1,2,\ldots$$

称为通量量子化，对内圆筒的半径有要求。

现在讨论干涉。

规范变换带来的波函数相因子一般会改变体系的干涉效应。

带电粒子从A出发经屏上两个缝到达B。在屏后两缝之间有一平行于屏的长螺线管，半径为R，管内有磁场$\vec{B}$，管外无磁场但势$\vec{A} \neq 0$。



现考虑在B处发生的干涉现象，用路径积分计算粒子从A到B的几率幅。近似到势场$\vec{A}$的线性项，

$$H(\vec{x},\vec{p})=\frac{\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m}\approx\frac{\vec{p}^2}{2m}-\frac{e}{cm}\vec{p}\cdot\vec{A}$$

$$\mathcal{L}(\vec{x},\dot{\vec{x}})=\vec{p}\cdot\dot{\vec{x}}-H=\frac{m}{2}\dot{\vec{x}}^2+\frac{e}{c}\dot{\vec{x}}\cdot\vec{A}=\mathcal{L}_{free}+\frac{e}{c}\dot{\vec{x}}\cdot\vec{A}$$

对于任意一条从A到B的路径，其作用量

$$S[x]=\int_{t_A}^{t_B}\mathcal{L}(x)dt=S_{free}[x]+\frac{e}{c}\int_A^B\vec{A}\cdot d\vec{x}$$

$S_{free}[x]$是自由粒子的作用量。对于任意一条螺线管以上的路径和任意一条螺线管以下的路径，几率幅分别是

$$e^{\frac{i}{\hbar}S_{free}[x]}e^{\frac{ie}{\hbar c}\left[\int_A^B\vec{A}\cdot d\vec{x}\right]_{above}}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}S_{free}[x]}e^{\frac{ie}{\hbar c}\left[\int_A^B\vec{A}\cdot d\vec{x}\right]_{below}}$$

存在一个影响干涉条纹的相对相因子

$$\begin{aligned}\Delta\varphi&=\frac{e}{\hbar c}\left(\left[\int_A^B\vec{A}\cdot d\vec{x}\right]_{above}-\left[\int_A^B\vec{A}\cdot d\vec{x}\right]_{below}\right)\\&=\frac{e}{\hbar c}\left(\left[\int_A^B\vec{A}\cdot d\vec{x}\right]_{above}+\left[\int_B^A\vec{A}\cdot d\vec{x}\right]_{below}\right)\\&=\frac{e}{\hbar c}\oint\vec{A}\cdot d\vec{x}\\&=\frac{e}{\hbar c}\int(\vec{\nabla}\times\vec{A})\cdot d\vec{s}\\&=\frac{e}{\hbar c}\int\vec{B}\cdot d\vec{s}=\frac{e}{\hbar c}B\pi R^2\end{aligned}$$

与路径的具体选取无关。因此规范变换虽然在螺线管外不产生电磁场，但变化的势导致在B处的干涉效应，称为 AB 效应。

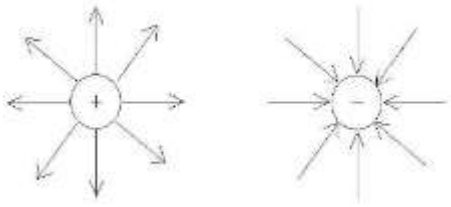
结论：电磁势是比电磁场强更基本的物理量。

（6）磁单极

在经典电磁场中，静磁场与静电场不对称。静电场有源无旋，满足

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{E}=4\pi\rho_e,\qquad \vec{\nabla}\times\vec{E}=0$$

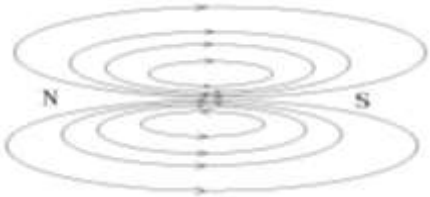
电力线分布（单电荷结构）：



静磁场无源有旋，满足

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{B}=0,\qquad \vec{\nabla}\times\vec{B}=\frac{4\pi}{c}\vec{J}$$

磁力线分布（Dipole 结构）：



问题：是否也存在单独的磁荷，即磁单极（Monopole 结构）？

如果在原点存在单个的磁荷e_m，则它所产生的静磁场满足

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{B}=-4\pi e_m\delta(\vec{r})$$

其解为

$$\vec{B}(\vec{r})=\frac{e_m}{r^2}\vec{e}_r$$

但是，这个磁场不能由势$\vec{A}(\vec{r})$通过$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}$产生，因为$\vec{\nabla}\cdot\vec{B}=\vec{\nabla}\cdot\left(\vec{\nabla}\times\vec{A}\right)=0$，即$\vec{\nabla}\cdot\vec{B}\neq 0$与$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}$是矛盾的。故不可能存在一个矢势$\vec{A}$，使得产生的磁场$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}$有源（磁单极）。

如果在球坐标系中设

$$\vec{A}(\vec{r})=e_m\frac{1-cos\theta}{rsin\theta}\vec{e}_\varphi$$

在$0\leq\theta<\pi$的区间产生的磁场

$$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}=\frac{e_m}{r^2}\vec{e}_r$$

是有源的，$\vec{\nabla}\cdot\vec{B}=-4\pi e_m\delta(\vec{r})$。但在$\theta=\pi$时，$\vec{A}$发散。即在负$z$轴上存在一条奇异弦，称为 *Dirac 弦*。我们没有在全空间找到满足$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}=\frac{e_m}{r^2}\vec{e}_r$的矢势$\vec{A}$。

如果取

$$\vec{A}=\begin{cases}\vec{A}_I=e_m\dfrac{1-cos\theta}{rsin\theta}\vec{e}_\varphi, & 0\le\theta<\pi\\ \vec{A}_{II}=-e_m\dfrac{1+cos\theta}{rsin\theta}\vec{e}_\varphi, & 0<\theta\le\pi\end{cases}$$

$\vec{A}_I$在$\theta=\pi$发散，$\vec{A}_{II}$在$\theta=0$发散。对于这样的$\vec{A}$，在两个势的重叠区域$0<\theta<\pi$，有$\vec{A}_{II}\neq\vec{A}_I$，但是

$$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}=\frac{e_m}{r^2}\vec{e}_r$$

两个势导致相同的磁场$\vec{B}$，由磁单极产生，既满足$\vec{\nabla}\cdot\vec{B}=-4\pi e_m\delta(\vec{r})$，又满足$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}$。注意，这只是在$0<\theta<\pi$的区间。在整个区间，我们无法既满足$\vec{\nabla}\cdot\vec{B}=-4\pi e_m\delta(\vec{r})$又满足$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}$。

在$0<\theta<\pi$，两个势导致相同的磁场$\vec{B}$，必能通过一个规范变换Λ连接，

$$\vec{A}_{II}-\vec{A}_I=-2e_m\frac{1}{rsin\theta}\vec{e}_\varphi=\vec{\nabla}\Lambda$$

$$\Lambda(\vec{r})=-2e_m\varphi$$

考虑一个带电荷e的粒子在上述势场$\vec{A}_I$, $\vec{A}_{II}$中运动，波函数ψ_I, ψ_{II}有关系

$$\psi_{II}=e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda}\psi_I=e^{\frac{2iee_m\varphi}{\hbar c}}\psi_I$$

由于波函数的单值性，ψ_I, ψ_{II}在重叠区域必须满足单值条件，

$$\psi_I(r,\theta,\varphi=0)=\psi_I(r,\theta,\varphi=2\pi)$$

$$\psi_{II}(r,\theta,\varphi=0)=\psi_{II}(r,\theta,\varphi=2\pi)$$

即电荷量子化，

$$\frac{2ee_m}{\hbar c}=\pm n,\qquad n=0,\pm1,\pm2.\cdots$$

存在最小电荷单元

$$e = \pm\frac{\hbar c}{2e_m}$$

没有找到磁单极。

但是如果有磁单极，必有电荷量子化，存在最小电荷单元。

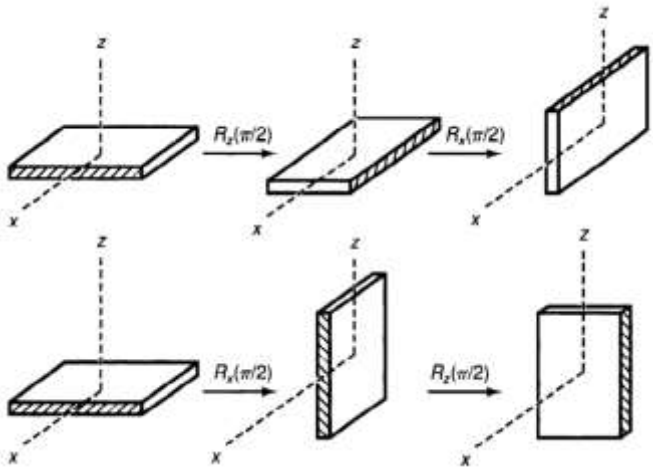
第 3 章：角动量理论

3.1 旋转与角动量

旋转与角动量在量子力学中具有独特的地位，主要体现在 1）经典转动不对易和 2） 言内禀角动量。

（1）经典转动不对易

绕同一轴的两个转动是对易的。例如绕Z轴先转 30 度再转 60 度和先转 60 度再转 30 度是完全相同的。但是，绕不同轴的两个转动是不对易的。如图所示，先绕Z轴逆时钟转动 90 度再绕X轴转动 90 度，与先绕X轴转动 90 度再绕Z轴转动 90 度的结果不相同。



设在直角坐标系有矢量$\vec{V} = V_x\vec{e}_x + V_y\vec{e}_y + V_z\vec{e}_z$，将其绕轴$\vec{e}_n$转动角度$\varphi$后变为$\vec{V}' = \mathcal{R}_n(\varphi)\vec{V} = V_x'\vec{e}_x + V_y'\vec{e}_y + V_z'\vec{e}_z$，写成矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} V_x' \\ V_y' \\ V_z' \end{pmatrix} = R_n(\varphi)\begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$$

$R_n(\varphi)$是一个3×3的转动矩阵。

对于绕x, y, z轴转动角度φ，转动矩阵为

$$R_x(\varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & cos\varphi & -sin\varphi \\ 0 & sin\varphi & cos\varphi \end{pmatrix}$$

$$R_y(\varphi)=\begin{pmatrix} cos\varphi & 0 & sin\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -sin\varphi & 0 & cos\varphi \end{pmatrix} \qquad R_z(\varphi)=\begin{pmatrix} cos\varphi & -sin\varphi & 0 \\ sin\varphi & cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

对于无限小转动$\varphi=\varepsilon$,

$$R_x(\varepsilon)=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1-\varepsilon^2/2 \end{pmatrix}$$

$$R_y(\varepsilon)=\begin{pmatrix} 1-\varepsilon^2/2 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1-\varepsilon^2/2 \end{pmatrix} \qquad R_z(\varepsilon)=\begin{pmatrix} 1-\varepsilon^2/2 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1-\varepsilon^2/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

只保留了ε^2阶。

有对易关系

$$\begin{aligned}\left[R_x(\varepsilon),R_y(\varepsilon)\right] &= R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon)-R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\varepsilon^2)-I\end{aligned}$$

保留到ε^2阶,

$$R_z(\varepsilon^2)=\begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

这就是绕x轴和y轴的经典转动的对易关系。

（2）量子转动

对于时间平移运算,生成元是哈密　算符(也可以看成是能量算符的定义：时间平移运算的生成元，时间平移不变对应的守恒量),

$$\hat{U}(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

类似，对于空间平移运算，由$\hat{U}(d\vec{x})$的对易关系$\left[\hat{\vec{x}},\hat{U}\right]=d\vec{x}$，其生成元是动量算符（动量的定义：空间平移运算的生成元，空间平移不变对应的守恒量),

$$\hat{U}(\vec{x})=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot\vec{x}}$$

以上表明，一个对态的运算可以由对应的守恒量来生成。

定义量子转动算符$\hat{\mathcal{R}}_n(\varphi)$，

$$|\beta\rangle = \hat{\mathcal{R}}_n(\varphi)|\alpha\rangle$$

由对应的守恒量—角动量算符$\hat{\vec{J}}$生成（角动量的定义：空间转动的生成元，转动不变对应的守恒量）：

$$\hat{\mathcal{R}}_n(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{J}}\cdot\vec{e}_n\varphi}。$$

下　分析角动量算符的对易关系。由于角动量算符$\hat{\vec{J}}$的定义与转动角度φ的大小没有关系，考虑无穷小转动。设量子转动与经典转动有相同的对易关系，

$$\left[\hat{\mathcal{R}}_x(\varepsilon), \hat{\mathcal{R}}_y(\varepsilon)\right] = \hat{\mathcal{R}}_z(\varepsilon^2) - I$$

$$\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_x\varepsilon}, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\varepsilon}\right] = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varepsilon^2} - I$$

展开并保留到ε^2　，有

$$\left[\left(I - \frac{i}{\hbar}\hat{J}_x\varepsilon - \frac{\hat{J}_x^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right), \left(I - \frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\varepsilon - \frac{\hat{J}_y^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right)\right] = \left(I - \frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varepsilon^2\right) - I$$

有

$$\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_z$$

类似，

$$\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k, \qquad \hat{\vec{J}} \times \hat{\vec{J}} = i\hbar\hat{\vec{J}}$$

这就是量子力学中角动量的对易关系，或者是角动量的定义。

（3）角动量平均值在转动前后的变化

设绕z轴转动φ，态的改变

$$|\alpha\rangle \to |\beta\rangle = \hat{\mathcal{R}}_z(\varphi)|\alpha\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}|\alpha\rangle$$

$\hat{J}_x$的平均值的改变

$$\langle\alpha||\hat{J}_x|\alpha\rangle \to \langle\beta|\hat{J}_x|\beta\rangle = \langle\alpha|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}\hat{J}_x e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}|\alpha\rangle$$

将$e^{\pm\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}$按级数展开，并利用对易关系

$$[\hat{J}_z,\hat{J}_x]=i\hbar\hat{J}_y$$

有

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}\hat{J}_x e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}=\hat{J}_x cos\varphi-\hat{J}_y sin\varphi$$

故转动后$\hat{J}_x$的平均值为

$$\langle\beta|\hat{J}_x|\beta\rangle=\langle\alpha|\hat{J}_x|\alpha\rangle cos\varphi-\langle\alpha|\hat{J}_y|\alpha\rangle sin\varphi$$

类似，转动后$\hat{J}_y$, $\hat{J}_z$的平均值为

$$\langle\beta|\hat{J}_y|\beta\rangle=\langle\alpha|\hat{J}_y|\alpha\rangle cos\varphi+\langle\alpha|\hat{J}_x|\alpha\rangle sin\varphi$$

$$\langle\beta|\hat{J}_z|\beta\rangle=\langle\alpha|\hat{J}_z|\alpha\rangle$$

写成矢量形式，

$$\langle\alpha|\hat{\vec{J}}|\alpha\rangle\rightarrow\langle\beta|\hat{\vec{J}}|\beta\rangle=\begin{pmatrix}cos\varphi & -sin\varphi & 0\\ sin\varphi & cos\varphi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\langle\alpha|\hat{\vec{J}}|\alpha\rangle=R_z(\varphi)\langle\alpha|\hat{\vec{J}}|\alpha\rangle$$

量子力学中角动量平均值的变化与经典力学中矢量的变化关系相同。

3.2 角动量的本征值和矩阵表示

角动量$\hat{\vec{J}}$的性质由对易关系确定：

$$[\hat{J}_i,\hat{J}_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k$$

由于$\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$, $\hat{J}_z$互不对易，不可能同时有确定值。

定义角动量平方

$$\hat{\vec{J}}^2=\hat{J}_x^2+\hat{J}_y^2+\hat{J}_z^2=\hat{J}_i\hat{J}_i$$

描述角动量的大小。由于

$$\left[\hat{\vec{J}}^2,\hat{J}_j\right]=\hat{J}_i[\hat{J}_i,\hat{J}_j]+[\hat{J}_i,\hat{J}_j]\hat{J}_i=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_i\hat{J}_k+i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k\hat{J}_i$$

$$=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_i\hat{J}_k+i\hbar\varepsilon_{kji}\hat{J}_i\hat{J}_k=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_i\hat{J}_k-i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_i\hat{J}_k=0$$

（此处用到了反对称性质$\varepsilon_{ijk}=-\varepsilon_{jik}$），$\hat{\vec{J}}^2$与任意$\hat{J}_i$可以同时有确定值。

以下用类似于求解谐振子本征值的代数方法来求解$\hat{\vec{J}}^2$, $\hat{J}_z$的本征值。考虑到

$\hat{\vec{J}}^2$不仅仅依赖于$\hat{J}_z$，是独立的，我们用两个无量纲的量子数λ和m来分别描述$\hat{\vec{J}}^2$和$\hat{J}_z$的本征值，共同本征态记为$|\lambda,m\rangle$。考虑到$\hat{\vec{J}}^2$和J_z的量纲$[\hat{\vec{J}}^2]=\hbar^2,[J_z]=\hbar$，有

$$\hat{\vec{J}}^2|\lambda,m\rangle=\lambda\hbar^2|\lambda,m\rangle$$
$$\hat{J}_z|\lambda,m\rangle=m\hbar|\lambda,m\rangle$$

问 ：$\lambda=?,m=?$

（1）引入新的算符

$$\hat{J}_x,\hat{J}_y\rightarrow\hat{J}_+=\hat{J}_x+i\hat{J}_y,\hat{J}_-=\hat{J}_x-i\hat{J}_y=\hat{J}_+^+$$
$$\hat{\vec{J}}^2=\hat{J}_z^2+(\hat{J}_+\hat{J}_-+\hat{J}_-\hat{J}_+)/2$$

$\hat{J}_+,\hat{J}_-$本身不是厄米算符，但互为厄米共厄。

$\hat{J}_+,\hat{J}_-,\hat{J}_z,\hat{\vec{J}}^2$的对易关系

$$[\hat{J}_+,\hat{J}_-]=2\hbar\hat{J}_z,\qquad[\hat{J}_+,\hat{J}_z]=-\hbar\hat{J}_+,\qquad[\hat{J}_-,\hat{J}_z]=\hbar\hat{J}_-$$
$$[\hat{J}^2,\hat{J}_+]=[\hat{J}^2,\hat{J}_-]=[\hat{J}^2,\hat{J}_z]=0$$

（2）

$$\langle\lambda,m|\hat{\vec{J}}^2-\hat{J}_z^2|\lambda,m\rangle=\langle\lambda,m|(\hat{J}_+\hat{J}_-+\hat{J}_-\hat{J}_+)/2|\lambda,m\rangle$$
$$(\lambda-m^2)\hbar^2\langle\lambda,m|\lambda,m\rangle=\langle\lambda,m|\hat{J}_-^+\hat{J}_-|\lambda,m\rangle/2+\langle\lambda,m|\hat{J}_+^+\hat{J}_+|\lambda,m\rangle/2$$

故有

$$\lambda\geq m^2。$$

（3）

$$\begin{cases}\hat{J}^2(\hat{J}_+|\lambda,m\rangle)=\hat{J}_+\hat{J}^2|\lambda,m\rangle=\lambda\hbar^2(\hat{J}_+|\lambda,m\rangle)\\ \hat{J}_z(\hat{J}_+|\lambda,m\rangle)=(\hbar\hat{J}_++\hat{J}_+\hat{J}_z)|\lambda,m\rangle=(m+1)\hbar(\hat{J}_+|\lambda,m\rangle)\end{cases}$$
$$\begin{cases}\hat{J}^2(\hat{J}_-|\lambda,m\rangle)=\hat{J}_-\hat{J}^2|\lambda,m\rangle=\lambda\hbar^2(\hat{J}_-|\lambda,m\rangle)\\ \hat{J}_z(\hat{J}_-|\lambda,m\rangle)=(-\hbar\hat{J}_-+\hat{J}_-\hat{J}_z)|\lambda,m\rangle=(m-1)\hbar(\hat{J}_-|\lambda,m\rangle)\end{cases}$$

说明：若$|\lambda,m\rangle$是$\hat{J}^2,\hat{J}_z$的共同本征态，则$\hat{J}_+|\lambda,m\rangle$，$\hat{J}_-|\lambda,m\rangle$也是它们的共同本征态。这些本征值和本征态的关系为：

共同本征态, , , , , , , , , , , , $\hat{J}_z$本征值, , , , , , , , , , , , , $\hat{\vec{J}}^2$本征值
⋮	⋮	⋮
$\hat{J}_+^2\|\lambda,m\rangle$	$(m+2)\hbar$	$\lambda\hbar^2$
$\hat{J}_+\|\lambda,m\rangle$	$(m+1)\hbar$	$\lambda\hbar^2$
$\|\lambda,m\rangle$	$m\hbar$	$\lambda\hbar^2$
$\hat{J}_-\|\lambda,m\rangle$	$(m-1)\hbar$	$\lambda\hbar^2$
$\hat{J}_-^2\|\lambda,m\rangle$	$(m-2)\hbar$	$\lambda\hbar^2$
⋮	⋮	⋮

故称$\hat{J}_-$为下降算符，$\hat{J}_+$为上升算符,使$\hat{J}_z$的本征值减少或者增加$\hbar$。结合上　的结论，有

$\hat{\vec{J}}^2$的本征值为$\lambda\hbar^2$

$\hat{J}_z$的本征值为$m\hbar$,　　$m=j',j'+1,\dots,j-1,j$

$\hat{J}_z$的本征值有最大值与最小值的原因是限制条件$\lambda\geq m^2$。

（4）对于最大值 j 对应的态$|\lambda,j\rangle$，由于

$$\hat{J}_z\hat{J}_+|\lambda,j\rangle=(j+1)\hbar\hat{J}_+|\lambda,j\rangle$$

与j是$\hat{J}_z$最大量子数的假设相矛盾。故必　有截断

$$\hat{J}_+|\lambda,j\rangle=0$$

此时

$$\hat{J}_z\hat{J}_+|\lambda,j\rangle=0$$

不会出现矛盾。由

$$0=\hat{J}_-\hat{J}_+|\lambda,j\rangle=\left(\hat{\vec{J}}^2-\hat{J}_z^2-\hbar\hat{J}_z\right)|\lambda,j\rangle=(\lambda-j^2-j)\hbar^2|\lambda,j\rangle$$

有

$$\lambda=j(j+1)$$

对于最小值j'对应的态$|\lambda,j'\rangle$，同理，必　有截断

$$\hat{J}_-|\lambda,j'\rangle=0$$

否则

$$\hat{J}_z\hat{J}_-|\lambda,j'\rangle=(j'-1)\hbar\hat{J}_-|\lambda,j'\rangle$$

与$j'\hbar$是$\hat{J}_z$最小本征值的假设相矛盾。由

$$0=\hat{J}_+\hat{J}_-|\lambda,j'\rangle=\left(\hat{\vec{J}}^2-\hat{J}_z^2+\hbar\hat{J}_z\right)|\lambda,j'\rangle=\left(\lambda-j'^2+j'\right)\hbar^2|\lambda,j'\rangle$$

有

$$\lambda=j'(j'-1)$$

故

$$j(j+1)=j'(j'-1)$$

有

$$j'=\begin{cases}j+1\\-j\end{cases}$$

而$j'=j+1$与j为最大值，j'为最小值的假设不符，故取

$$j'=-j。$$

故

$\hat{\vec{J}}^2$的本征值为$\lambda\hbar^2$，　　$\lambda=j(j+1)$

$\hat{J}_z$的本征值为$m\hbar$，　　$m=-j,-j+1,\dots,j-1,j$共$2j+1$个值

共同本征态$|\lambda,m\rangle\rightarrow|j,m\rangle$

剩下的问　是：$j=?$

（5）由态$|j,-j\rangle$到态$|j,j\rangle$应由上升算符$\hat{J}_+$作用$2j$次，即$2j$必为　或者正整数，故j为　，正整数和半正整数。

总结：

$\hat{\vec{J}}^2|j,m\rangle=j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle$，　j可为　，正整数，和半正整数

$\hat{J}_z|j,m\rangle=m\hbar|j,m\rangle$，　$m=-j,-j+1,\dots j-1,j$共$2j+1$个值

j为　和正整数时，$\hat{\vec{J}}$可用轨道角动量$\hat{\vec{L}}$来解释。而j为半正整数时，$\hat{\vec{J}}$的物理意义是什么？由角动量的定义，即对易关系出发，可以存在一种新的与空间无关的角动量。

以上讨论的是$\hat{J}^2,\hat{J}_z$的本征值。

（6）在$\hat{J}^2,\hat{J}_z$的共同表象中$\hat{J}^2,\hat{J}_z,\hat{J}_x,\hat{J}_y$的矩阵形式

由于态$\hat{J}_+|j,m\rangle$与$|j,m+1\rangle$具有相同的本征值$J^2=j(j+1)\hbar^2$，$J_z=m\hbar$，如果无简并，则为同一个态，

$$\hat{J}_+|j,m\rangle=a_{jm}|j,m+1\rangle,\qquad \langle j,m|\hat{J}_-=\langle j,m+1|a_{jm}^*$$

类似，

$$\hat{J}_-|j,m\rangle=b_{jm}|j,m-1\rangle,\qquad \langle j,m|\hat{J}_+=\langle j,m-1|b_{jm}^*$$

故有

$$\begin{aligned}|a_{jm}|^2\langle j,m+1|j,m+1\rangle&=\langle j,m|\hat{J}_-\hat{J}_+|j,m\rangle\\&=\left\langle j,m\left|\hat{J}^2-\hat{J}_z^2-\hbar\hat{J}_z\right|j,m\right\rangle\\&=(j(j+1)-m^2-m)\hbar^2\langle j,m|j,m\rangle\end{aligned}$$

由本征态的归一化，有

$$|a_{jm}|^2=(j(j+1)-m(m+1))\hbar^2$$

可取

$$a_{jm}=\sqrt{(j(j+1)-m(m+1)}\hbar=\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar$$

类似可取

$$b_{jm}=\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar$$

即

$$\begin{cases}\hat{J}_+\left|j,m\right\rangle=\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar\left|j,m+1\right\rangle\\ \hat{J}_-\left|j,m\right\rangle=\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar\left|j,m-1\right\rangle\end{cases}$$

由$\hat{J}_\pm=\hat{J}_x\pm i\hat{J}_y$,有

$$\begin{cases}\hat{J}_x|j,m\rangle=\dfrac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j,m+1\rangle+\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j,m-1\rangle\right]\\ \hat{J}_y|j,m\rangle=\dfrac{\hbar}{2i}\left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j,m+1\rangle-\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j,m-1\rangle\right]\end{cases}$$

总结：在$\hat{J}^2,\hat{J}_z$的共同表象（无限维空间，因为量子数j可取零和所有正整数

和半正整数），当j确定时，即$\hat{J}^2$的本征值确定时，由$\hat{J}_z$的本征态构成一个子空间，维数$D=2j+1$，在这个子空间中的矩阵元

$$\langle j,n|\hat{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\delta_{nm}$$

$$\langle j,n|\hat{J}_z|j,m\rangle = m\hbar\delta_{nm}$$

$$\langle j,n|\hat{J}_x|j,m\rangle = \frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{n,m+1}+\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{n,m-1}\right]$$

$$\langle j,n|\hat{J}_y|j,m\rangle = \frac{\hbar}{2i}\left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{n,m+1}-\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{n,m-1}\right]$$

例题 1：求$j=1/2$（电子自旋）角动量的矩阵。

$$\vec{J}^2 = j(j+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2, \qquad J_z = m\hbar, \qquad m = j,\cdots,-j = \frac{1}{2},-\frac{1}{2}$$

$$D = 2j+1 = 2$$

m的次序给定后就确定了基矢的次序：第一个基矢为$|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$，第二个基矢为$|\frac{1}{2},\frac{-1}{2}\rangle$。由上面矩阵元公式有

$$\vec{J}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 I, \qquad J_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

$$J_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \qquad J_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$$

$\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$为三个 *Pauli* 矩阵。

例题 2：求$j=1$（光子自旋）角动量的矩阵。

$$\vec{J}^2 = j(j+1)\hbar^2 = 2\hbar^2, \qquad J_z = m\hbar, \qquad m = 1,0,-1, \qquad D = 3$$

第一个基矢为$|1,1\rangle$，第二个基矢为$|1,0\rangle$，第三个基矢为$|1,-1\rangle$。

由上面矩阵元公式有

$$\vec{J}^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}, \qquad J_z = \hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}, \qquad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix}$$

（7）转动矩阵

转动算符

$$\hat{\mathcal{R}}_n(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{J}}\cdot\vec{e}_n\varphi}$$

由于

$$\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{\vec{J}}\right] = 0, \qquad \left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{\mathcal{R}}_n(\varphi)\right] = 0$$

表明转动算符$\hat{\mathcal{R}}_n(\varphi)$与角动量算符$\hat{\vec{J}}^2$有共同本征态，$\hat{\mathcal{R}}_n(\varphi)$在$\vec{J}^2$表象中是对角矩阵。又由

$$\left[\hat{J}_z, \hat{\mathcal{R}}_n(\varphi)\right] \neq 0$$

在$\vec{J}^2$与J_z的共同表象的j固定的子空间，转动矩阵R_n有非对角元。于是，R_n在$\vec{J}^2$与J_z的共同表象是一个分块对角的矩阵：

$$R^{jj'}_{mm'} = \langle j, m|\hat{\mathcal{R}}_n(\varphi)|j', m'\rangle = \delta_{jj'} R^{jj}_{mm'}$$

$$R^{jj}_{mm'} = \langle j, m|\hat{\mathcal{R}}_n(\varphi)|j, m'\rangle$$

见 *Sakurai* 书的封面图。

由分析力学，任意一个转动可以用绕y, z轴转动 3 次的乘积，即用 3 个 *Euler* 角来描述：

$$R_n(\varphi) = R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma)$$

相应的量子力学转动算符是

$$\hat{\mathcal{R}}_n(\varphi) = \hat{\mathcal{R}}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{\mathcal{R}}_z(\alpha)\hat{\mathcal{R}}_y(\beta)\hat{\mathcal{R}}_z(\gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\gamma}。$$

故

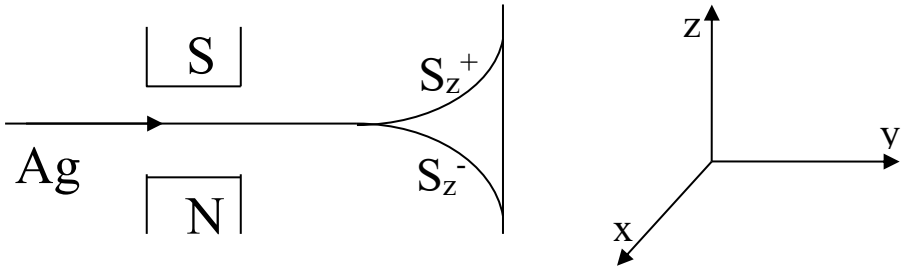
$$\begin{aligned} R^{jj}_{mm'} &= \langle j, m|\hat{\mathcal{R}}_n(\varphi)|j, m'\rangle \\ &= \left\langle j, m\left| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\gamma}\right| j, m'\right\rangle \\ &= e^{-i(m\alpha + m'\gamma)} \left\langle j, m\left| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta}\right| j, m'\right\rangle \end{aligned}$$

归结为计算$\hat{J}_y^n$ $(n = 0, 1, \ldots\ldots)$的矩阵元。

3.3 自旋角动量

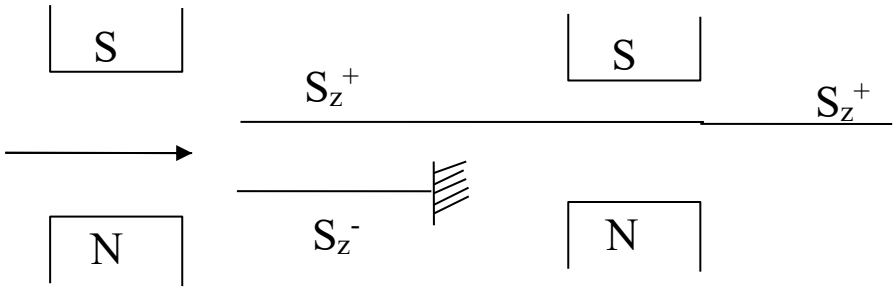
一般角动量理论预言了内禀角动量的存在，现在看实验的预言。

（1）*Stern—Gerlach* 与级联 *Stern—Gerlach* 实验



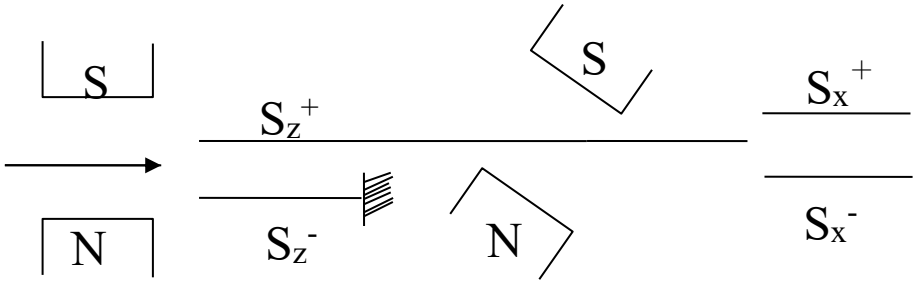
实验：加热的银原子束通过z方向的不均匀磁场后，在z方向分裂为两束。

分析：银原子通过价电子与磁场相互作用，势$V=-\vec{M}\cdot\vec{B}\sim-\vec{J}\cdot\vec{B}$，力$\vec{F}=-\vec{\nabla}V\sim J_z\frac{\partial B}{\partial z}\vec{e}_z$。在$z$方向分裂为对称的强度相等的两束→在 z 方向的力有两个分量，大小相等，方向相反→电子角动量J_z有两个值，大小相等，方向相反→有$j=1/2$的内禀角动量（$j=1/2$不可能是轨道角动量）。



实验：让入射原子束经过两个z方向的磁场，在第二个磁场之前挡住一束原子，最后在z方向无分裂。

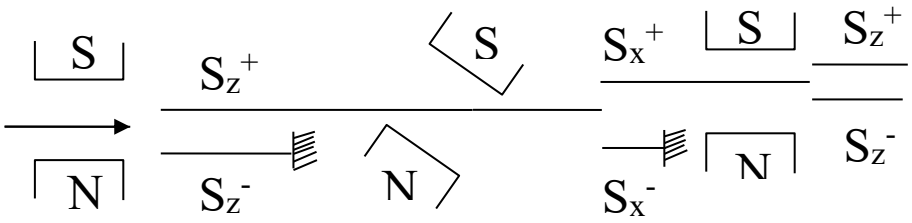
分析：在第二个磁场中的力$\vec{F}\sim s_z\frac{\partial B}{\partial z}\vec{e}_z$。$s_z$固定，只有朝上的力，无分裂。



实验：让入射原子束经过z和x方向的两个磁场，在第二个磁场之前挡住一束原

子，最后在x方向观察到分裂。

分析：在x方向的磁场中，力$\vec{F}\sim s_x\frac{\partial B}{\partial x}\vec{e}_x$。最后的分裂说明：虽然$s_z$固定，但$s_x$仍然有两个可能的值$s_x^+$和$s_x^-$，导致在$x$方向的分裂。



实验：让入射原子束经过z，x和z方向的三个磁场，在第二个和第三个磁场之前都挡住一束原子，最后在z方向观察到原子束分裂。

分析：在第三个z方向磁场中，力$\vec{F}\sim s_z\frac{\partial B}{\partial z}\vec{e}_z$。最后的分裂说明：虽然$s_x$固定，但$s_z$仍然有两个可能的值$s_z^+$和$s_z^-$，导致在$z$方向的分裂。

上述级联 *Stern—Gerlach* 实验说明：$\hat{s}_x$，$\hat{s}_z$不能同时有确定值。

（2）自旋角动量

上面 *Stern-Gelach* 实验和级联 *Stern-Gelach* 实验说明存在$j=1/2$的内禀角动量，满足一般角动量的性质。引入自旋角动量$\hat{\vec{s}}(\hat{s}_x,\hat{s}_y,\hat{s}_z)$，满足对易关系

$$[\hat{s}_i,\hat{s}_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{s}_k,\qquad \hat{\vec{s}}\times\hat{\vec{s}}=i\hbar\hat{\vec{s}}$$

本征方程

$$\hat{\vec{s}}^2|s,m\rangle=s(s+1)\hbar^2|s,m\rangle=\frac{3}{4}\hbar^2|s,m\rangle,\quad s=\frac{1}{2}$$

$$\hat{s}_z|s,m\rangle=m\hbar|s,m\rangle,\quad m=-\frac{1}{2},\frac{1}{2}$$

在哈密顿量中唯象的引入自旋与轨道，自旋与外磁场的相互作用，

$$H'=-\frac{q}{m}\vec{s}\cdot\vec{B}+V(r)\vec{s}\cdot\vec{l}$$

实际上，所有自旋引起的修正都是相对论修正，都将在相对论量子力学中自洽考虑。

定义 *Pauli* 算符$\hat{\vec{\sigma}}$:

$$\hat{\vec{s}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$$

对易关系与反对易关系

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k, \qquad \{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}$$

本征值

$$\sigma_i = \pm 1, \qquad \sigma_i^2 = 1, \qquad \vec{\sigma}^2 = 3$$

自旋的特征：容易体现与经典力学的根本差别（经典无自旋），二能级系统是最量子的体系（最小分离值）。

（3）自旋转动与时间演化的关系

如果能量只由角动量确定，转动与时间平移就有关系，角动量既生成了转动算符，也生成了时间演化算符。考虑自旋为 1/2 的粒子在外磁场中，设磁场在Z方向。在粒子自身坐标系，哈密顿算符只有自旋与外磁场的相互作用

$$\hat{H} = \omega\hat{s}_z, \qquad \omega = -\frac{eB}{mc}$$

比较时间演化算符

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega\hat{s}_z t}$$

与绕Z轴的转动算符

$$\hat{\mathcal{R}}_z(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{s}_z\varphi}。$$

得到转动变量与时间变量的对应关系

$$\hat{U}(t) = \hat{\mathcal{R}}_z(\omega t)$$

即φ与t一一对应。由旋转前后的自旋角动量平均值关系

$$\langle\beta|\hat{\vec{s}}|\beta\rangle = \hat{\mathcal{R}}_z(\varphi)\langle\alpha|\hat{\vec{s}}|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} cos\varphi & -sin\varphi & 0 \\ sin\varphi & cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\langle\alpha|\hat{\vec{s}}|\alpha\rangle$$

得到时间演化前后的自旋角动量平均值关系

$$\langle t|\hat{\vec{s}}|t\rangle = \hat{U}(t)\langle 0|\hat{\vec{s}}|0\rangle = \hat{\mathcal{R}}_z(\omega t)\langle 0|\hat{\vec{s}}|0\rangle = \begin{pmatrix} cos\omega t & -sin\omega t & 0 \\ sin\omega t & cos\omega t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\langle 0|\hat{\vec{s}}|0\rangle$$

当取$t = 2\pi/\omega$时，有

$$\langle t|\hat{\vec{s}}|t\rangle = \langle 0|\hat{\vec{s}}|0\rangle$$

故$t = 2\pi/\omega$为平均值的周期。

再看态的演化周期。将初始态按$\hat{s}_z$的本征态$|s_z^{\pm}\rangle$进行展开，

$$|0\rangle = |s_z^+\rangle\langle s_z^+|0\rangle + |s_z^-\rangle\langle s_z^-|0\rangle$$

在时间t，

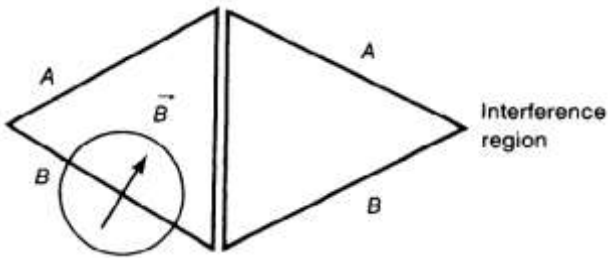
$$|t\rangle = \hat{U}(t)|0\rangle = \hat{\mathcal{R}}_z(\omega t)|0\rangle$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\omega\hat{s}_z t}|0\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t}|s_z^+\rangle\langle s_z^+|0\rangle + e^{\frac{i}{2}\omega t}|s_z^-\rangle\langle s_z^-|0\rangle$$

当$t = 2\pi/\omega$，$|t\rangle = -|0\rangle$，没有回到初始态！只有$t = 4\pi/\omega$才能回到初始态。与平均值的时间演化周期$t = 2\pi/\omega$不同，态的时间演化周期是$t = 4\pi/\omega$。

（4）中子干涉实验（自旋进动的实验验证）

将基态（轨道角动量为零）中子分成两束，分别经路径A, B到达干涉区域。在B束路径上设置一个Z方向磁场不等于零的区间，见图。



B束中子经过磁场产生的附加时间演化算符

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\hat{H}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega\hat{s}_z\Delta t}$$

其中Δt是中子经过磁场的时间。经过磁场后的自旋向上或向下的态会有一个额

外的相因子$e^{\mp\frac{i}{2}\omega\Delta t}$，则在干涉区域会有干涉产生。当调控外磁场的强度使频率ω变化时，干涉强度会呈现周期性变化。实验上证实了这一磁场变化引起的干涉强度变化。

（5）自旋空间的转动矩阵

转动矩阵的计算归结为计算$\left\langle j,m\left|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta}\right|j,m'\right\rangle$。对于电子自旋$j=1/2$，

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{s}_y\beta}=e^{-i\hat{\sigma}_y\frac{\beta}{2}}=1+\left(-i\hat{\sigma}_y\frac{\beta}{2}\right)+\frac{1}{2!}\left(-i\hat{\sigma}_y\frac{\beta}{2}\right)^2+\cdots$$

利用

$$\hat{\sigma}_i^n=\begin{cases}1 & n\ even\\ \hat{\sigma}_i & n\ odd\end{cases}$$

有

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{s}_i\beta}=cos\frac{\beta}{2}-i\hat{\sigma}_i sin\frac{\beta}{2}$$

$$R^{\frac{11}{22}}_{mm'}=e^{-i(m\alpha+m'\gamma)}\left\langle\frac{1}{2},m\left|cos\frac{\beta}{2}-i\hat{\sigma}_y sin\frac{\beta}{2}\right|\frac{1}{2},m'\right\rangle$$

由

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

有转动矩阵

$$R^{\frac{11}{22}}=\begin{pmatrix}e^{-i(\alpha+\gamma)/2}cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}sin\frac{\beta}{2}\\ e^{-i(-\alpha+\gamma)/2}sin\frac{\beta}{2} & e^{i(\alpha+\gamma)/2}cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}。$$

对于光子自旋$j=1$，在$\vec{J}^2$与J_z的共同表象的j固定的子空间，

$$R^{11}_{mm'}=e^{-i(m\alpha+m\prime\gamma)}\left\langle 1,m\left|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta}\right|1,m'\right\rangle$$

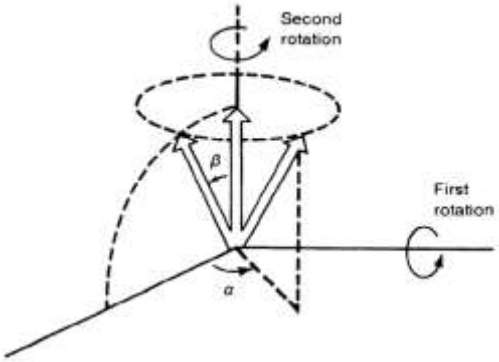
$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta}=1-\frac{i}{\hbar}sin\beta\hat{J}_y+\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2(1-cos\beta)\hat{J}_y^2$$

$$J_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{pmatrix}$$

转动矩阵

$$R^{11}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)}(1+cos\beta) & -\sqrt{2}e^{-i\alpha}sin\beta & e^{i(\alpha+\gamma)}(1-cos\beta) \\ \sqrt{2}e^{-i\gamma}sin\beta & 2cos\beta & -\sqrt{2}e^{i\gamma}sin\beta \\ e^{i(\alpha-\gamma)}(1-cos\beta) & \sqrt{2}e^{i\alpha}sin\beta & e^{i(\alpha+\gamma)}(1+cos\beta) \end{pmatrix}。$$

例题 3：任意自旋态可以由$\hat{s}_z$的本征态转动生成。



设任意自旋态χ的方向是$\vec{e}_n$，方位角是α,β，见图。χ可以看成是$\hat{s}_z$的本征态χ_+先绕y转动β，再绕z转动α而生成，

$$\begin{aligned}\chi&=\hat{\mathcal{R}}_z(\alpha)\hat{\mathcal{R}}_y(\beta)\chi_+\\&=e^{-\frac{i}{2}\hat{\sigma}_z\alpha}e^{-\frac{i}{2}\hat{\sigma}_y\beta}\chi_+\\&=\left(cos\frac{\alpha}{2}-i\hat{\sigma}_z sin\frac{\alpha}{2}\right)\left(cos\frac{\beta}{2}-i\hat{\sigma}_y sin\frac{\beta}{2}\right)\chi_+\end{aligned}$$

在$\vec{s}^2,s_z$表象有

$$\chi=\begin{pmatrix} cos\frac{\alpha}{2}-isin\frac{\alpha}{2} & 0 \\ 0 & cos\frac{\alpha}{2}+isin\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} cos\frac{\beta}{2} & -sin\frac{\beta}{2} \\ sin\frac{\beta}{2} & cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}}cos\frac{\beta}{2} \\ e^{i\frac{\alpha}{2}}sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

$$=e^{-i\frac{\alpha}{2}}cos\frac{\beta}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+e^{i\frac{\alpha}{2}}sin\frac{\beta}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$=e^{-i\frac{\alpha}{2}}cos\frac{\beta}{2}\chi_+ + e^{i\frac{\alpha}{2}}sin\frac{\beta}{2}\chi_-$$

3.4 轨道角动量与多体 Schroedinger 方程

（1）轨道角动量的本征值与本征态

由经典定义，

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

有轨道角动量算符

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}, \qquad \hat{L}_i = \varepsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{p}_k, \qquad i,j,k = 1,2,3$$

由坐标动量对易关系

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \qquad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

可以证明

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$$

表明轨道角动量算符满足一般角动量的定义。

转动问题适合于采用球坐标系，

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg\theta cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - ctg\theta sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

$\hat{\vec{L}}$只与角度θ,φ有关。

由

$$\left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z\right] = 0$$

$\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z$有共同的本征态。

先看$\hat{L}_z$的本征方程。由于$\hat{L}_z$与θ无关，

$$\hat{L}_z\Phi(\varphi) = -i\hbar\frac{d}{d\varphi}\Phi(\varphi) = L_z\Phi(\varphi)$$

考虑波函数的单值性条件$\Phi(0)=\Phi(2\pi)$和归一化，有本征值和本征态

$$L_z=m\hbar,\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots\pm\infty,\quad \Phi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}。$$

再看$\hat{\vec{L}}^2$的本征方程。由于$\hat{\vec{L}}^2$与θ和φ有关，

$$\hat{\vec{L}}^2Y(\theta,\varphi)=-\hbar^2\left(\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)Y(\theta,\varphi)=L^2Y(\theta,\varphi)$$

由于$\hat{\vec{L}}^2$对θ,φ的微分没有交叉项，用分离变量法求解（参考一般量子力学教材）。由φ方向的约束条件：$Y(\theta,0)=Y(\theta,2\pi)$和$\theta$方向的约束条件：$Y(0,\varphi)$和$Y(\pi,\varphi)$有限，得到本征值和本征态

$$L^2=l(l+1)\hbar^2,\quad l=0,1,2,\cdots\infty$$

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(l-|m|)!\,(2l+1)}{(l+|m|)!\,4\pi}}P_l^m(cos\varphi)e^{im\varphi},\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots\pm l$$

$P_l^m(x)$为连带 *Legendre* 多项式，磁量子数m可取$2l+1$个值。本征值L^2只与角量子数l有关，但本征态还与磁量子数有关，简并度$g=2l+1$。

由于$\hat{\vec{L}}^2$的本征态$Y_{lm}(\theta,\varphi)$中与φ有关的部分就是$\hat{L}_z$的本征态，故$Y_{lm}(\theta,\varphi)$就是$\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_z$共同本征态：

$$\hat{\vec{L}}^2Y_{lm}(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}(\theta,\varphi),\quad l=0,1,2,\cdots,\infty,$$
$$\hat{L}_zY_{lm}(\theta,\varphi)=m\hbar Y(\theta,\varphi),\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots\pm l$$

由上面的计算，轨道角动量是一般角动量理论在坐标空间的实现，它是角动量的一部分，它的l取值只能是零和正整数，不能取半正整数。

（2）本征态之间的关系

利用上升下降算符来得到$\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_z$的本征态之间的关系。

$$\hat{L}_\pm=\hat{L}_x\pm i\hat{L}_y=i\hbar e^{\pm i\varphi}\left(\mp i\frac{\partial}{\partial\theta}+ctg\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

利用约束条件

$$\hat{L}_+Y_{ll}(\theta,\varphi)=0$$

$$\left(-i\frac{1}{ctg\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)Y_{ll}(\theta,\varphi)=0$$

分离变量法，求解两个一阶常微分方程得到

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

利用球谐函数的归一化条件

$$\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d(cos\theta)\,Y_{lm}^*(\theta,\varphi)Y_{l'm'}(\theta,\varphi)=\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

有

$$Y_{ll}(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}}e^{il\varphi}sin^l\theta$$

再由关系

$$Y_{l,m-1}(\theta,\varphi)=\frac{\hat{L}_-Y_{lm}(\theta,\varphi)}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar}$$

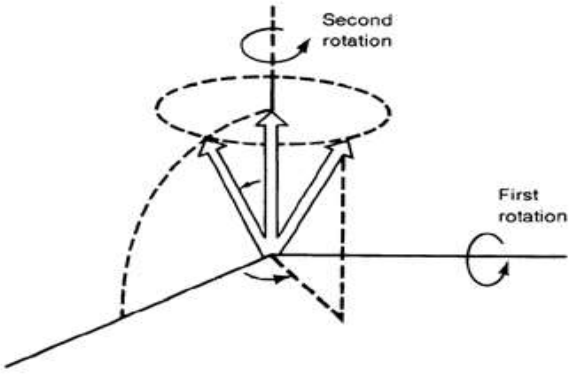
得到

$$Y_{l,l-1}(\theta,\varphi)=\frac{\hat{L}_-Y_{ll}(\theta,\varphi)}{\sqrt{2l}\hbar}=\frac{i}{\sqrt{2l}}e^{-i\varphi}\left(i\frac{\partial}{\partial\theta}+ctg\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)Y_{ll}(\theta,\varphi)$$

多次利用下降算符就可以得到$Y_{lm}(\theta,\varphi)$。

上面是用上升下降算符把不同量子数的本征态联系起来。也可以类似于自旋空间的转动，得到本征态的角度依赖性。由两个任意矢量$|0,\varphi\rangle$与$|\theta,\varphi\rangle$的转动关系

$$|\theta,\varphi\rangle=\hat{\mathcal{R}}_z(\varphi)\hat{\mathcal{R}}_y(\theta)|0,\varphi\rangle。$$



轨道角动量本征态

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\langle\theta,\varphi|l,m\rangle$$

和

$$Y_{lm}(0,\varphi)=\langle 0,\varphi|l,m\rangle$$

有关系

$$\begin{aligned}Y_{lm}^{*}(\theta,\varphi)&=\langle l,m|\theta,\varphi\rangle\\&=\left\langle l,m\middle|\hat{\mathcal{R}}_z(\varphi)\hat{\mathcal{R}}_y(\theta)\middle|0,\varphi\right\rangle\\&=\sum_{m'}\left\langle l,m\middle|\hat{\mathcal{R}}_z(\varphi)\hat{\mathcal{R}}_y(\theta)|l,m'\right\rangle\langle l,m'|0,\varphi\rangle\\&=\sum_{m'}\left\langle l,m\left|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\varphi}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_y\theta}\right|l,m'\right\rangle Y_{lm'}^{*}(0,\varphi)\\&=\sum_{m'}e^{-im\varphi}\left\langle l,m\left|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_y\theta}\right|l,m'\right\rangle Y_{lm'}^{*}(0,\varphi)\end{aligned}$$

利用

$$Y_{lm}(0,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m0}$$

有

$$Y_{lm}^{*}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}e^{-im\varphi}\left\langle l,m|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_y\theta}|l,0\right\rangle$$

（3）二体 Schroedinger 方程

两体问题在高能物理（重夸克偶素），核物理（氘核），与原子物理（氢原子）等领域有重要应用。

两粒子体系，质量分别为m_1,m_2，位置分别为$\vec{r}_1,\vec{r}_2$，相互作用势为$V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$，其总能量E_t和总的波函数$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$由两体 Schroedinger 方程描述，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\vec{\nabla}_1^2-\frac{\hbar^2}{2m_2}\vec{\nabla}_2^2+V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=E_t\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$$

引入质心坐标$\vec{R}$，相对坐标$\vec{r}$，总质量M，和约化质量m

$$\vec{R}=\frac{m_1\vec{r}_1+m_1\vec{r}_1}{m_1+m_2},\qquad \vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2,\qquad M=m_1+m_2,\qquad m=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$$

两体 *Schroedinger* 方程变为描述质心运动和相对运动的方程，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}_R^2-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_r^2+V(\vec{R},\vec{r})\right]\Psi(\vec{R},\vec{r})=E_t\Psi(\vec{R},\vec{r})。$$

如果势只与相对运动有关，

$$V(\vec{R},\vec{r})=V(\vec{r})$$

则可由分离变量法分离质心运动和相对运动，

$$\Psi(\vec{R},\vec{r})=\Phi(\vec{R})\psi(\vec{r})$$

质心运动波函数$\Phi(\vec{R})$和质心能量E满足

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}^2\Phi(\vec{R})=E\Phi(\vec{R})\quad\rightarrow\quad\Phi(\vec{R})\sim e^{i\vec{P}\cdot\vec{R}},\qquad E=\frac{\vec{P}^2}{2M}$$

$\vec{P}$是质心动量。相对运动波函数$\psi(\vec{r})$和结合能ε满足

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}),\qquad E_t=E+\varepsilon$$

质心方程确定两体的总体运动，相对方程确定两体的内部结构。

如果势只与两粒子相对距离有关，

$$V(\vec{r})=V(r)$$

再次使用分离变量法分离相对运动的径向和角向，

$$\psi(\vec{r})=R(r)Y(\theta,\varphi)$$

角向波函数$Y_{lm}(\theta,\varphi)$是轨道角动量的本征态，径向波函数$R_{nl}(r)$与相对运动能量（束缚能）ε由径向方程控制，

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{nl}}{dr}\right)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{nl}=0。$$

（4）电磁场中的二体 *Schroedinger* 方程

由最小电磁耦合，常数外电磁场中质量相同（m）电荷相反（q）的一对粒子体系的总哈密顿量

$$\hat{H}=\frac{\left(\hat{\vec{p}}_1-q\vec{A}(\vec{r}_1)\right)^2}{2m}+\frac{\left(\hat{\vec{p}}_2+q\vec{A}(\vec{r}_2)\right)^2}{2m}-qA_0(\vec{r}_1)+qA_0(\vec{r}_2)+V(\vec{r}_1-\vec{r}_2)-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

最后一项来自于 Dirac 方程的非相对论极限，见最后一章的讨论。自旋磁矩$\vec{\mu}=\frac{q}{m}(\vec{s}_1-\vec{s}_2)$.

通过$\vec{E}=-\vec{\nabla}A_0$, $\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}$可由电磁场$\vec{E}$和$\vec{B}$反解出势场$A_0$和$\vec{A}$,但解不唯一。选取对称规范

$$\vec{A}(\vec{r}_i)=\frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}_i,\qquad A_0(\vec{r}_i)=\vec{E}\cdot\vec{r}_i,\qquad i=1,2$$

引入相对与质心坐标以及相对动量与总动量，

$$\vec{R}=\frac{1}{2}(\vec{r}_1+\vec{r}_2),\qquad \vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2,\qquad \hat{\vec{P}}=\vec{p}_1+\vec{p}_2,\qquad \hat{\vec{p}}=\frac{1}{2}(\vec{p}_1-\vec{p}_2)$$

有

$$\frac{\left(\hat{\vec{p}}_1-q\vec{A}(\vec{r}_1)\right)^2}{2m}+\frac{\left(\hat{\vec{p}}_2+q\vec{A}(\vec{r}_2)\right)^2}{2m}=\frac{\hat{\vec{P}}_{kin}^2}{4m}+\frac{\hat{\vec{p}}'^2}{m}$$

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{P}}_{kin}^2}{4m}+\frac{\hat{\vec{p}}'^2}{m}-q\vec{E}\cdot\vec{r}+V(\vec{r})-\frac{q}{m}(\vec{s}_1-\vec{s}_2)\cdot\vec{B}$$

其中

$$\hat{\vec{P}}_{kin}=\ \hat{\vec{P}}-\frac{q}{2}\vec{B}\times\vec{r},\qquad \hat{\vec{p}}'=\hat{\vec{p}}-\frac{q}{2}\vec{B}\times\vec{R}$$

注意：机械动量$\hat{\vec{P}}_{kin}$不是守恒量，而赝动量

$$\hat{\vec{P}}_{ps}=\hat{\vec{P}}+\frac{q}{2}\vec{B}\times\vec{r}$$

是守恒量，

$$\left[\hat{\vec{P}}_{kin},\hat{H}\right]\neq 0,\qquad \left[\hat{\vec{P}}_{ps},\hat{H}\right]=0$$

尝试分离波函数$\Psi(\vec{R},\vec{r})$，并用守恒动量$\vec{P}_{ps}$表示，

$$\Psi(\vec{R},\vec{r})=e^{i\left(\vec{P}_{ps}-\frac{q}{2}\vec{B}\times\vec{r}\right)\cdot\vec{R}}\psi(\vec{r})$$

得到$\psi(\vec{r})$满足的方程

$$\left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{m}+\frac{q^2\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)^2-2q\vec{P}_{ps}\cdot\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)}{4m}-q\vec{E}\cdot\vec{r}+V(\vec{r})-\frac{q}{m}(\vec{s}_1-\vec{s}_2)\cdot\vec{B}\right]\psi(\vec{r})$$

$$=\varepsilon\psi(\vec{r})$$

注意：由于外电磁场$\vec{E},\vec{B}$破坏了空间转动不变性，不能再用分离变量法求解$\psi(\vec{r})$。$\psi(\vec{r})$应该是不同轨道角动量以及不同自旋态（单态和三重态）的线性叠加。

（5）*N*体 *Schroedinger* 方程

多体 Schroedinger 方程

$$\left[\sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{\vec{p}}_i^2}{2m_i}+V(\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N)\right]\Psi(\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N)=E\Psi(\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N)$$

相互作用势能

$$V(\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N)=\sum_{i\neq j}^{N}V(\vec{r}_i,\vec{r}_j)$$

这里忽略了直接三体以及更高阶相互作用，只考虑所有可能的对相互作用。

进行 Jacobi 坐标变换，$\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N$ → 质心坐标$\vec{R}$和相对坐标$\vec{x}_1,\cdots\vec{x}_{N-1}$，

$$\vec{R}=\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{N}m_i\vec{r}_i$$

$$\vec{x}_j=\sqrt{\frac{M_jm_{j+1}}{M_{j+1}\mu}}\left(\vec{r}_{j+1}-\frac{1}{M_j}\sum_{i=1}^{j}m_i\vec{r}_i\right)$$

$$M_j=\sum_{i=1}^{j}m_i,\qquad M=M_N$$

μ为具有质量量纲的参数，可以证明计算结果不依赖于μ的取值。

利用分离变量法，变换后的总波函数

$$\Psi(\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N)=\Theta\left(\vec{R}\right)\Phi(\vec{x}_1,\cdots,\vec{x}_{N-1})$$

相对运动波函数$\Phi(\vec{x}_1,\cdots,\vec{x}_{N-1})$决定$N$体束缚态的性质。

用超球函数展开方法求解相对运动波函数。引入超球坐标

$$\vec{x}_1,\cdots,\vec{x}_{N-1}\rightarrow\ \ \rho=\sqrt{\vec{x}_1^2+\cdots+\vec{x}_{N-1}^2},$$

Ω包含$3(N-1)-1$个角度，

$$\Omega=(\alpha_2,\cdots,\alpha_{N-1},\theta_1,\cdots,\theta_{N-1},\varphi_1,\cdots,\varphi_{N-1}),\qquad sin\alpha_i=\frac{x_i}{\sqrt{\sum_{j=1}^{i}\vec{x}_j^2}}$$

有相对运动方程

$$\left[\frac{1}{2\mu}\left(-\frac{1}{\rho^{3N-4}}\frac{d}{d\rho}\rho^{3N-4}\frac{d}{d\rho}+\frac{\widehat{K}_{N-1}^2}{\rho^2}\right)+V(\rho,\Omega)\right]\Phi(\rho,\Omega)=\varepsilon\Phi(\rho,\Omega)$$

其中结合能ε，超角动量算符

$$\widehat{K}_{N-1}^2=-\frac{\partial^2}{\partial\alpha_{N-1}^2}+\frac{(3N-9)-(3N-5)\cos(2\alpha_{N-1})}{\sin(2\alpha_{N-1})}\frac{\partial}{\partial\alpha_{N-1}}$$
$$+\frac{1}{cos^2\alpha_{N-1}}\widehat{K}_{N-2}^2+\frac{1}{sin^2\alpha_{N-1}}\hat{l}_{N-1}^2$$

其中$\widehat{K}_1^2=\hat{l}_1^2$（粒子角动量）。超角动量本征方程

$$\widehat{K}_{N-1}^2Y_\varkappa(\Omega)=K(K+3N-5)Y_\varkappa(\Omega),$$

K是超角量子数，确定超角动量的大小，$\varkappa$是所有角度量子数的集合，确定超球函数$Y_\varkappa(\Omega)$，$Y_\varkappa(\Omega)$构成正交完备的基。

由于$V(\rho,\Omega)$是角度Ω的函数，不能用分离变量法来分离相对运动方程。将相对波函数用超球函数展开，

$$\Phi(\rho,\Omega)=\sum_{\varkappa}R_\varkappa(\rho)Y_\varkappa(\Omega)$$

代入相对运动方程，得到径向方程组

$$\left[\frac{1}{2\mu}\left(\frac{1}{\rho^{3N-4}}\frac{d}{d\rho}\rho^{3N-4}\frac{d}{d\rho}-\frac{K(K+3N-5)}{\rho^2}\right)+\varepsilon\right]R_\varkappa=\sum_{\varkappa'}V_{\varkappa\varkappa'}R_{\varkappa'}$$

其中势能矩阵元

$$V_{\varkappa\varkappa'}(\rho)=\int Y_\varkappa^*(\Omega)V(\rho,\Omega)\,Y_\varkappa(\Omega)d\Omega。$$

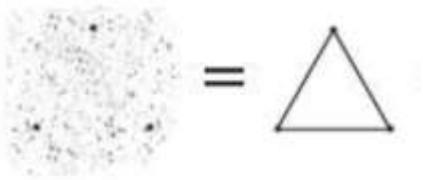
（6）三体 Schroedinger 方程

三体问题在粒子物理（重味重子），核物理（氚核），和原子分子物理等领域有重要应用，并且导致奇特量子态。下面把以上N体 Schroedinger 方程的方法应用到三体问题。

考虑三个同质量粒子(m)的三体问题，总哈密顿量

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\hat{\vec{p}}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$$

忽略直接三体相互作用，只考虑所有可能的对相互作用，



$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = \sum_{i<j} U\left(\left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right|\right)$$

尝试用分离变量法将三体运动分离成质心运动和相对运动。定义质心坐标$\vec{R}$与相对坐标$\vec{r}_x, \vec{r}_y$（对应前面N体 Schroedinger 方程的一般变换关系取$\mu = m$），

$$\begin{pmatrix} \vec{R} \\ \vec{r}_x \\ \vec{r}_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ \sqrt{1/2} & -\sqrt{1/2} & 0 \\ \sqrt{1/6} & \sqrt{1/6} & -\sqrt{2/3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{r}_1 \\ \vec{r}_2 \\ \vec{r}_3 \end{pmatrix}$$

由于

$$\vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \sqrt{2}\vec{r}_x, \qquad \vec{r}_1 - \vec{r}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\vec{r}_x + \sqrt{3}\vec{r}_y\right), \qquad \vec{r}_2 - \vec{r}_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\vec{r}_x - \sqrt{3}\vec{r}_y\right)$$

相互作用势只与相对坐标有关$V(\vec{r}_x, \vec{r}_x)$，可以分离变量，

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) \to \Psi\left(\vec{R}, \vec{r}_x, \vec{r}_y\right) = \Phi(\vec{R})\psi(\vec{r}_x, \vec{r}_y)$$

在相对运动部分引入超球坐标，

$$\left(\vec{r}_x, \vec{r}_y\right) \to \left(r = \sqrt{r_x^2 + r_y^2}, \qquad sin\alpha = \frac{r_y}{r}, \qquad \Omega\left(\alpha, \theta_x, \varphi_x, \theta_y, \varphi_y\right)\right)$$

其中$\theta_x,\varphi_x,\theta_y,\varphi_y$分别为矢量$\vec{r}_x,\vec{r}_y$对应的角度。$0<r_x,r_y<r,\ 0<\alpha<\pi/2,\ 0<\theta_x,\theta_y<\pi,\ 0<\varphi_x,\varphi_y<2\pi$。积分元

$$d^3\vec{r}_x d^3\vec{r}_y = r^5 sin^2\alpha cos^2\alpha sin\theta_x sin\theta_y dr d\alpha d\theta_x d\theta_y d\varphi_x d\varphi_y$$

相对运动的哈密顿量

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{5}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{r^2}\right) + V(r,\Omega)$$

$$\hat{L}^2 = -\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - 4ctg(2\alpha)\frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{\hat{l}_x^2}{sin^2\alpha} + \frac{\hat{l}_y^2}{cos^2\alpha}$$

其中$\hat{l}_x,\hat{l}_y$是矢量$\vec{r}_x,\vec{r}_y$对应的两体角动量算符，是θ_x,φ_x和θ_y,φ_y的函数，$\hat{L}(\alpha,\theta_x,\varphi_x,\theta_y,\varphi_y)$是三体的超角动量算符，其本征方程

$$\hat{L}^2 Y_\kappa(\Omega) = K(K+4)Y_\kappa(\Omega)$$

角量子数$\kappa(K,m,l_x,l_y)$，其中K描述角动量大小，m,l_x,l_y描述角动量的方向，超球谐函数$Y_\kappa(\Omega)$是简并的。

由于相互作用势$V(r,\Omega)$依赖于角度Ω，不能把相对运动方程

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{5}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{r^2}\right) + V(r,\Omega)\right]\psi(r,\Omega) = \varepsilon\psi(r,\Omega)$$

中的径向与角向分离。一种方法是用超球函数$Y_\kappa(\Omega)$展开，如前所述。另外，也可以采用近似方法：用角度平均势代替真实的相互作用势。对于基态，无转动，$K=0$，势的角度依赖只有α，平均势场为

$$\bar{V}(r) = 3\frac{16}{\pi}\int_0^{\pi/2} U(\sqrt{2}rsin\alpha)sin^2\alpha cos^2\alpha d\alpha$$

其中因子3来自于3个对势U，

$$V(r,\alpha) = 3U(\sqrt{2}r_x) = 3U(\sqrt{2}r_y) = 3U(\sqrt{2}rsin\alpha)$$

因子$16/\pi$来自于角度α的归一化

$$\int_0^{\pi/2} sin^2\alpha cos^2\alpha d\alpha = \frac{\pi}{16}$$

用角度平均势代替真实的相互作用势后就可以分离变量了，

$$\psi(r,\Omega)=R(r)Y(\Omega)$$

径向波函数$R(r)$与相对运动能量ε由径向方程确定。对于基态，

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-\frac{d^2}{dr^2}-\frac{5}{r}\frac{d}{dr}\right)+\bar{V}(r)\right]R(r)=\varepsilon R(r)。$$

（7）量子奇特态

有些现象只有在量子力学中才有，例如熟悉的隧道贯穿效应和电子跃迁。对于多体 *Schroedinger* 方程，也存在一些奇特的量子力学态。

Borromean State:



任意两个环都不相连（束缚），但三个环相连（束缚）。

用量子力学的语言，就是两体 *Schroedinger* 方程

$$\left[\sum_{i=1}^{2}\frac{\hat{\vec{p}}_i^2}{2m}+U(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=E_t\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$$

无束缚态解，但三体 *Schroedinger* 方程

$$\left[\sum_{i=1}^{3}\frac{\hat{\vec{p}}_i^2}{2m}+\sum_{i<j}U(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3)=E_t\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3)$$

的束缚态仍然存在。此时，三体束缚态不能看成为二体束缚态和单体的结合。

如果粒子Ω_{ccc}处于$Borromean$态，则其构成是(ccc)，而不是$(cc)c$。

在量子力学中是否存在这样的 *Borromean State*?

Efimov State:



套娃之间存在空间大小的标度不变性。

量子力学束缚态的基态和激发态之间是否存在标度不变性？

计算发现，如果两体势$U(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)$是一个短程势，三体 *Schroedinger* 方程的弱束缚态解存在 *Borromean State*，基态与激发态之间也有标度律

$$E_n = E_0 e^{-\frac{2\pi n}{s_0}}$$

即有 *Efimov state*。

思想提出（核物理）：*V.Efimov, Phys. Lett. B33, 563(1970)*

冷原子实验中实现：*Nature 440, 315(2006)*

高温夸克体系：*J.Zhao et al, Phys. Lett. B775, 84(2017).*

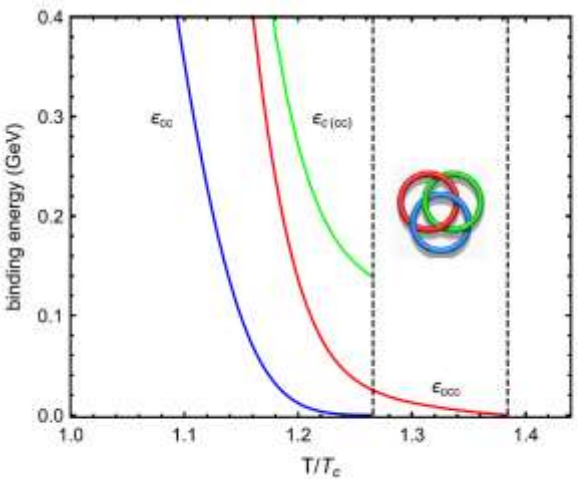


Fig. 2. The binding energies ϵ_{cc}, ϵ_{ccc} and $\epsilon_{c(cc)}$ for the diquark, three-quark and quark–diquark states, calculated through hyperspherical method.

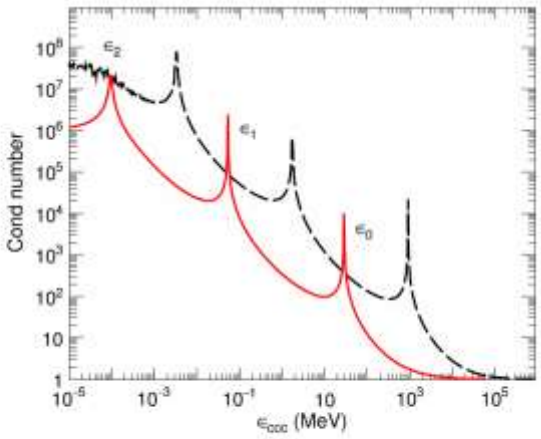


Fig. 3. The binding energy ϵ_{ccc} for a three-particle system with contact interaction (dashed line) and triply charmed baryons with internal energy $U(r, T_d)$ as the two-quark potential in resonance limit (solid line).

3.5 两个角动量的耦合

物理问题中常常考虑两个角动量的耦合，例如自旋轨道耦合。

考虑任意两个独立角动量$\hat{\vec{J}}_1, \hat{\vec{J}}_2$，

$$[\hat{J}_{1i}, \hat{J}_{1j}] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_{1k}, \qquad [\hat{J}_{2i}, \hat{J}_{2j}] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_{2k}, \qquad [\hat{J}_{1i}, \hat{J}_{2j}] = 0$$

$$J_1^2 = j_1(j_1+1)\hbar^2, \quad J_{1z} = m_1\hbar, \quad m_1 = -j_1, \cdots, j_1$$

$$J_2^2 = j_2(j_2+1)\hbar^2, \quad J_{2z} = m_2\hbar, \quad m_2 = -j_2, \cdots, j_2$$

两个角动量之和

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}_1 + \hat{\vec{J}}_2$$

是否还是一个角动量？容易证明

$$[\hat{J}_i,\hat{J}_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k$$

故$\hat{\vec{J}}$仍是一个角动量算符，称为总角动量。$\hat{J}^2,\hat{J}_z$的本征值

$$J^2=j(j+1)\hbar^2,\quad J_z=m\hbar,\quad m=-j,\cdots,j$$

问题是：j,m与j_1,m_1,j_2,m_2的关系如何？

（1）两个表象

$\hat{J}_1^2,\hat{J}_{1z},\hat{J}_2^2,\hat{J}_{2z}$相互两两对易，有共同本征矢$|j_1m_1j_2m_2\rangle$，构成无耦合表象，

$$\hat{J}_1^2|j_1m_1j_2m_2\rangle=j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1m_1j_2m_2\rangle$$
$$\hat{J}_{1z}|j_1m_1j_2m_2\rangle=m_1\hbar|j_1m_1j_2m_2\rangle$$
$$\hat{J}_2^2|j_1m_1j_2m_2\rangle=j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1m_1j_2m_2\rangle$$
$$\hat{J}_{1z}|j_1m_1j_2m_2\rangle=m_2\hbar|j_1m_1j_2m_2\rangle$$

$\hat{J}_1^2,\hat{J}_2^2,\hat{J}^2,\hat{J}_z$也相互两两对易，

$$[\hat{J}^2,\hat{J}_1^2]=[\hat{J}^2,\hat{J}_2^2]=[\hat{J}^2,\hat{J}_z]=[\hat{J}_z,\hat{J}_1^2]=[\hat{J}_z,\hat{J}_2^2]=[\hat{J}_1^2,\hat{J}_2^2]=0$$

它们有共同本征矢$|j_1j_2jm\rangle$，构成有耦合表象，

$$\hat{J}_1^2|j_1j_2jm\rangle=j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1j_2jm\rangle$$
$$\hat{J}_2^2|j_1j_2jm\rangle=j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1j_2jm\rangle$$
$$\hat{J}^2|j_1j_2jm\rangle=j(j+1)\hbar^2|j_1j_2jm\rangle$$
$$\hat{J}_z|j_1j_2jm\rangle=m\hbar|j_1j_2jm\rangle$$

需要联系两个表象，以求得j,m与j_1,m_1,j_2,m_2的关系。方法是表象变换。将两个表象的j_1,j_2固定，由无耦合表象的完备性条件，

$$\sum_{m_1,m_2}|j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|=I$$

有表象变换

$$|j_1j_2jm\rangle=\sum_{m_1,m_2}|j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle$$

展开系数$\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle$称为 *Clebsch-Gordon* 系数。

（2）总角动量的本征值(j,m)

将上式用$\hat{J}_z$作用，

$$\hat{J}_z|j_1j_2jm\rangle=\sum_{m_1,m_2}\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle(\hat{J}_{1z}+\hat{J}_{2z})|j_1m_1j_2m_2\rangle$$

$$m|j_1j_2jm\rangle=\sum_{m_1,m_2}(m_1+m_2)\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle|j_1m_1j_2m_2\rangle$$

$$\sum_{m_1,m_2}(m-m_1-m_2)\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle|j_1m_1j_2m_2\rangle=0$$

在无耦合表象中，不同m_1,m_2的基矢$|j_1m_1j_2m_2\rangle$是相互独立的，故上式存立的条件是每个基矢前的系数都必须等于零。即要么CG系数$\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle=0$，要么$m-m_1-m_2=0$。我们要求的就是不等于零的CG系数，因此

$$m=m_1+m_2$$

再考虑j的取值。当J_1^2，J_2^2固定时，即j_1，j_2固定时，总角动量应该有限制。设j有最大值和最小值，

$$j=j_{min},j_{min}+1,\cdots,j_{max}-1,j_{max}$$

由$m=-j,\cdots,j$，$m_1=-j_1,\cdots,j_1$，$m_2=-j_2,\cdots,j_2$，有

$$j_{max}=m_{max}=(m_1)_{max}+(m_2)_{max}=j_1+j_2$$

再由无耦合表象$|j_1m_1j_2m_2\rangle$维数

$$D=(2j_1+1)(2j_2+1)$$

与有耦合表象$|j_1j_2jm\rangle$维数

$$D=\sum_{j=j_{min}}^{j_{max}}(2j+1)=j_{max}^2-j_{min}^2+2j_{max}+1$$

相等，

$$\begin{aligned}(2j_1+1)(2j_2+1)&=j_{max}^2-j_{min}^2+2j_{max}+1\\&=(j_1+j_2)^2-j_{min}^2+2(j_1+j_2)+1\end{aligned}$$

$$j_{min}^2=(j_1-j_2)^2,\qquad j_{min}=|j_1-j_2|$$

故当j_1,j_2,m_1,m_2确定时，总角动量$\hat{J}^2,\hat{J}_z$的取值为

$$J^2 = j(j+1)\hbar^2, \quad j = |j_1 - j_2|, \cdots, j_1 + j_2$$
$$J_z = m\hbar, \quad m = m_1 + m_2$$

（3）总角动量的本征态$|j_1 j_2 jm\rangle$

关键是如何求不为零的 CG 系数。不做一般讨论，有专门表可查。

例题 4：自旋轨道耦合。

$$\hat{\vec{J}}_1 = \hat{\vec{L}}, \quad \hat{\vec{J}}_2 = \hat{\vec{s}}, \quad \hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{s}}$$

有耦合表象基矢$|j_1 j_2 jm\rangle = |l, 1/2, j, m\rangle$

无耦合表象基矢$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |l, m_l, 1/2, m_s\rangle$

表象变换：

$$|l, 1/2, j, m\rangle = \sum_{m_l, m_s} C_{m_l, m_s} |l, m_l, 1/2, m_s\rangle$$
$$= \sum_{m_l} \left[A_{m_l} |l, m_l, 1/2, 1/2\rangle + B_{m_l} |l, m_l, 1/2, -1/2\rangle\right]$$

由于$m = m_l + m_s$，有

$$|l, 1/2, j, m\rangle = A|l, m - 1/2, 1/2, 1/2\rangle + B|l, m + 1/2, 1/2, -1/2\rangle$$

以下确定系数A, B。

考虑$\hat{J}^2$的本征方程

$$\hat{J}^2 |l, 1/2, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |l, 1/2, j, m\rangle,$$
$$\left(\hat{\vec{L}}^2 + \hat{\vec{s}}^2 + 2\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{s}}\right)\left(A|l, m - 1/2, 1/2, 1/2\rangle + B|l, m + 1/2, 1/2, -1/2\rangle\right)$$
$$= j(j+1)\hbar^2 \left(A|l, m - 1/2, 1/2, 1/2\rangle + B|l, m + 1/2, 1/2, -1/2\rangle\right)$$

进入s_z表象，算符

$$\hat{L}^2 + \hat{s}^2 + 2\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{s}} = \begin{pmatrix} \hat{L}^2 + 3\hbar^2/4 + \hbar\hat{L}_z & \hbar\hat{L}_- \\ \hbar\hat{L}_+ & \hat{L}^2 + 3\hbar^2/4 - \hbar\hat{L}_z \end{pmatrix}$$

其中$\hat{L}_+, \hat{L}_-$为轨道角动量上升下降算符，无耦合表象的基矢在s_z表象

$$|l, m - 1/2, 1/2, 1/2\rangle = |l, m - 1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle = \begin{pmatrix} |l, m - 1/2\rangle \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|l, m + 1/2, 1/2, -1/2\rangle = |l, m + 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |l, m + 1/2\rangle \end{pmatrix}$$

将它们代入$\hat{J}^2$的本征方程，有

$$\begin{cases} A\left[\left(\hat{L}^2+\frac{3}{4}\hbar^2+\hbar\hat{L}_z\right)-j(j+1)\hbar^2\right]\left|l,m-\frac{1}{2}\right\rangle+B\hbar\hat{L}_-\left|l,m+\frac{1}{2}\right\rangle=0 \\ A\hbar\hat{L}_+\left|l,m-\frac{1}{2}\right\rangle+B\left[\left(\hat{L}^2+\frac{3}{4}\hbar^2-\hbar\hat{L}_z\right)-j(j+1)\hbar^2\right]\left|l,m+\frac{1}{2}\right\rangle=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \left\{\left[\left(l(l+1)+\frac{3}{4}+m-\frac{1}{2}\right)-j(j+1)\right]A+\sqrt{\left(l-m+\frac{1}{2}\right)\left(l+m+\frac{1}{2}\right)}B\right\}\left|l,m-\frac{1}{2}\right\rangle=0 \\ \left\{\sqrt{\left(l+m-\frac{1}{2}\right)\left(l-m+\frac{3}{2}\right)}A+\left[\left(l(l+1)+\frac{3}{4}-m-\frac{1}{2}\right)-j(j+1)\right]B\right\}\left|l,m+\frac{1}{2}\right\rangle=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \left[\left(l(l+1)+\frac{3}{4}+m-\frac{1}{2}\right)-j(j+1)\right]A+\sqrt{\left(l-m+\frac{1}{2}\right)\left(l+m+\frac{1}{2}\right)}B=0 \\ \sqrt{\left(l+m-\frac{1}{2}\right)\left(l-m+\frac{3}{2}\right)}A+\left[\left(l(l+1)+\frac{3}{4}-m-\frac{1}{2}\right)-j(j+1)\right]B=0 \end{cases}$$

结合归一化确定A,B。

例题 5：两个电子的自旋耦合。

$$\hat{\vec{s}}=\hat{\vec{s}}_1+\hat{\vec{s}}_2,\qquad s_1=s_2=1/2,\qquad s_{1z}=s_{2z}=-1/2,1/2$$

$$s=|s_1-s_2|,\cdots,s_1+s_2=\begin{cases}0, & s_z=0\\ 1, & s_z=1,0,-1\end{cases}$$

无耦合表象的基矢

$$\left|\frac{1}{2},s_{1z},\frac{1}{2},s_{2z}\right\rangle=|1/2,s_{1z}\rangle|1/2,s_{2z}\rangle=\begin{cases}|1/2,1/2\rangle|1/2,1/2\rangle\\ |1/2,1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle\\ |1/2,-1/2\rangle|1/2,1/2\rangle\\ |1/2,-1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle\end{cases}$$

有耦合表象的基矢

$$|1/2,1/2,s,s_z\rangle=\begin{cases}|1/2,1/2,1,1\rangle\\ |1/2,1/2,1,0\rangle\\ |1/2,1/2,1,-1\rangle\\ |1/2,1/2,0,0\rangle\end{cases}$$

由类似于例题 4 的方法，可将有耦合表象的基矢用无耦合表象表示。对于

$s=1$，自旋三重态

$$|1/2,1/2,1,1\rangle = |1/2,1/2\rangle|1/2,1/2\rangle$$

$$|1/2,1/2,1,0\rangle = (|1/2,1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle + |1/2,-1/2\rangle|1/2,1/2\rangle)/\sqrt{2}$$

$$|1/2,1/2,1,-1\rangle = |1/2,-1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle$$

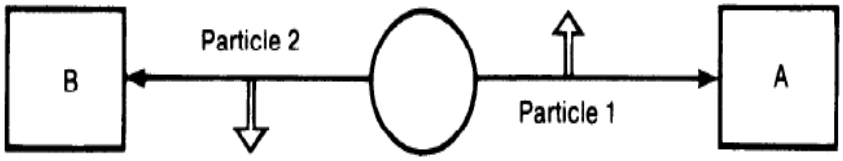
对于$s=0$，自旋单态

$$|1/2,1/2,0,0\rangle = (|1/2,1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle - |1/2,-1/2\rangle|1/2,1/2\rangle)/\sqrt{2}$$

3.6 自旋关联与 *Bell* 不等式

（1）量子力学的两粒子自旋测量关联

如图，设处于总自旋单态的两个电子从中心分别向两边探测器A和B运动。如果保持轨道角动量为零，那么总角动量守恒使两粒子体系始终处于自旋单态，即两个粒子的自旋朝向相反。设先在A测量电子 1 的自旋，紧接着在B测量电子 2 的自旋。



1）在A测量电子 1 的自旋s_{1z}，在B测量电子 2 的自旋s_{2x}。由于总角动量守恒，电子 2 的s_{2z}确定：当电子 1 处于$|s_{1z}^{+}\rangle$，则电子 2 处于$|s_{2z}^{-}\rangle$，而当电子 1 处于$|s_{1z}^{-}\rangle$，则电子 2 处于$|s_{2z}^{+}\rangle$。但在两种情形，由

$$|s_{2z}^{\pm}\rangle = (|s_{2x}^{+}\rangle \pm |s_{2x}^{-}\rangle)/\sqrt{2}$$

$\hat{s}_{2x}$取$|s_{2x}^{+}\rangle$和$|s_{2x}^{-}\rangle$的几率都为$1/2$。表明在B的测量与在A的测量结果无关联。

2）在A测量电子 1 的自旋s_{1x}，在B测量电子 2 的自旋s_{2x}。由于总角动量守恒，此时电子 2 的自旋态确定：当电子 1 处于$|s_{1x}^{+}\rangle$，则电子 2 处于$|s_{2x}^{-}\rangle$，而当电子 1 处于$|s_{1x}^{-}\rangle$，则电子 2 处于$|s_{2x}^{+}\rangle$。表明在B的测量与在A的测量结果有关联。

上面自旋测量的关联说明，只对 B 处的粒子进行测量（s_x），就知道 A 处测了什么（s_x不确定，A 处测的是s_z；s_x确定，A 处测的是s_x），尽管 A，B 可能相距很远。

（2）定域原理与 Bell 不等式



许多物理学家对这种长程量子力学关联很困惑。他们提出定域原理：一个粒子的状态应该不依赖于远处另一个粒子的状态（EPR 佯谬, *Einstein, Podolsky, Rosen, 1935*）。

问题：在保证角动量守恒的前提下，定域原理与量子力学相容吗？

还是考虑上面的两粒子系统。假设测量满足定域原理。对于其中一个粒子，一测s_z就有确定值，例如s_z^+，一测s_x也有确定值，例如s_x^+，标记为(s_z^+, s_x^+)。注意：1）并不是说可以同时测量s_z和s_x，2）这个测量不受另一个粒子状态的约束，没考虑两粒子的量子力学关联。

由于要求整个系统的自旋为单态（角动量守恒），另一个粒子必处于类型(s_z^-, s_x^-)。依此类推，两粒子测量的结果及其几率是

粒子 1	粒子 2	几率
(s_{1z}^+, s_{1x}^+)	(s_{2z}^-, s_{2x}^-)	1/4
(s_{1z}^+, s_{1x}^-)	(s_{2z}^-, s_{2x}^+)	1/4
(s_{1z}^-, s_{1x}^+)	(s_{2z}^+, s_{2x}^-)	1/4
(s_{1z}^-, s_{1x}^-)	(s_{2z}^+, s_{2x}^+)	1/4

这个结果与上面的量子力学关联测量结果是一致的。例如在A处测第 1 个粒子的s_{1z}结果为s_{1z}^+，在B处测第 2 个粒子的s_{2x}为s_{2x}^+的几率=1/4，为s_{2x}^-的几率=1/4，取值几率相等；当在A处测第 1 个粒子的s_{1x}为s_{1x}^+，在B处测第 2 个粒子的s_{2x}必为s_{2x}^-，取值确定。说明此时两粒子量子力学关联就是总角动量守恒，定域原理与量子力学相容。

现在测量 3 个方向的自旋$s_a = \vec{s}\cdot\vec{e}_a$，$s_b = \vec{s}\cdot\vec{e}_b$，$s_c = \vec{s}\cdot\vec{e}_c$（$\vec{e}_a, \vec{e}_b, \vec{e}_c$不必相互正交）。由定域原理，对于其中一个粒子，一测s_a就有确定值s_a^+，一测s_b就有确定值s_b^+，一测s_c就有确定值s_c^+，标记为(s_a^+, s_b^+, s_c^+)。由于角动量守恒，两粒子系统处于自旋单态，另一个粒子必处于类型(s_a^-, s_b^-, s_c^-)。依此类推，两粒子测量的结果及其几率是

粒子 1	粒子 2	几率

(s_a^+, s_b^+, s_c^+)	(s_a^-, s_b^-, s_c^-)	N_1
(s_a^+, s_b^+, s_c^-)	(s_a^-, s_b^-, s_c^+)	N_2
(s_a^+, s_b^-, s_c^+)	(s_a^-, s_b^+, s_c^-)	N_3
(s_a^+, s_b^-, s_c^-)	(s_a^-, s_b^+, s_c^+)	N_4
(s_a^-, s_b^+, s_c^+)	(s_a^+, s_b^-, s_c^-)	N_5
(s_a^-, s_b^+, s_c^-)	(s_a^+, s_b^-, s_c^+)	N_6
(s_a^-, s_b^-, s_c^+)	(s_a^+, s_b^+, s_c^-)	N_7
(s_a^-, s_b^-, s_c^-)	(s_a^+, s_b^+, s_c^+)	N_8

$$\sum_{i=1}^{8} N_i = 1$$

第 1 个粒子处于$|s_{1a}^+\rangle$而第 2 个粒子处于$|s_{2b}^+\rangle$的几率是

$$P(s_{1a}^+, s_{2b}^+) = N_3 + N_4$$

第 1 个粒子处于$|s_{1a}^+\rangle$而第 2 个粒子处于$|s_{2c}^+\rangle$的几率是

$$P(s_{1a}^+, s_{2c}^+) = N_2 + N_4$$

第 1 个粒子处于$|s_{1c}^+\rangle$而第 2 个粒子处于$|s_{2b}^+\rangle$的几率是

$$P(s_{1c}^+, s_{2b}^+) = N_3 + N_7$$

由于

$$N_3 + N_4 \le (N_3 + N_7) + (N_2 + N_4)$$

有

$$P(s_{1a}^+, s_{2b}^+) \le P(s_{1a}^+, s_{2c}^+) + P(s_{1c}^+, s_{2b}^+)$$

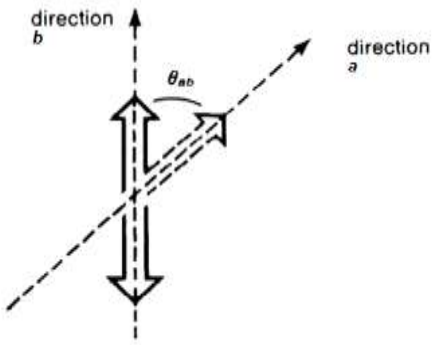
这就是 *Bell* 不等式，它反映了定域原理对两粒子测量的影响。

（3）用量子力学计算几率

上面的 *Bell* 不等式与两粒子量子力学关联有何不同？下面用量子力学计算 Bell 不等式中的 3 个几率。

先计算$P(s_{1a}^+, s_{2b}^+)$。由角动量守恒，第 1 个粒子的$\hat{s}_{1a}$处于$|s_{1a}^+\rangle$，第 2 个粒子的$\hat{s}_{2a}$必处于$|s_{2a}^-\rangle$。要计算$P(s_{1a}^+, s_{2b}^+)$（不同粒子）就是要计算$P(s_{2a}^-, s_{2b}^+)$（同一粒子）。由两个不同方向的自旋态之间的转动联系，$|s_{2a}^-\rangle$与$|s_{2b}^+\rangle$之间可以通过

转动联系起来。设$\vec{e}_b$与$\vec{e}_a$的夹角为θ_{ab}，方位角为α_{ab}。对于第 2 个粒子，有



$$|s_{2a}^{-}\rangle = e^{-\frac{i\alpha_{ab}}{2}} cos\frac{\pi-\theta_{ab}}{2}|s_{2b}^{+}\rangle + e^{\frac{i\alpha_{ab}}{2}} sin\frac{\pi-\theta_{ab}}{2}|s_{2b}^{-}\rangle$$

故当第 2 个粒子的$\hat{s}_{2a}$处于$|s_{2a}^{-}\rangle$时$\hat{s}_{2b}$处于$|s_{2b}^{+}\rangle$的几率是

$$\left|e^{-\frac{i\alpha_{ab}}{2}} cos\frac{\pi-\theta_{ab}}{2}\right|^2 = cos^2\frac{\pi-\theta_{ab}}{2} = sin^2\frac{\theta_{ab}}{2}$$

考虑到第 1 个粒子处于$|s_{1a}^{+}\rangle$的几率是$\frac{1}{2}$，有

$$P(s_{1a}^{+}, s_{2b}^{+}) = \frac{1}{2} sin^2\frac{\theta_{ab}}{2}$$

同理，有

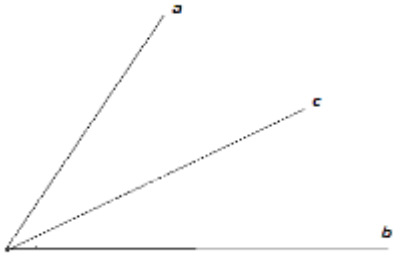
$$P(s_{1a}^{+}, s_{2c}^{+}) = \frac{1}{2} sin^2\frac{\theta_{ac}}{2}$$

$$P(s_{1c}^{+}, s_{2b}^{+}) = \frac{1}{2} sin^2\frac{\theta_{cb}}{2}$$

如果 *Bell* 不等式在量子力学中成立，对于任意的$\vec{e}_a, \vec{e}_b, \vec{e}_c$应该有

$$sin^2\frac{\theta_{ab}}{2} \leq sin^2\frac{\theta_{ac}}{2} + sin^2\frac{\theta_{cb}}{2}$$

如果取$\vec{e}_a, \vec{e}_b, \vec{e}_c$在同一个平面，$\theta_{ac} = \theta_{cb} = \theta$，$\theta_{ab} = 2\theta$，如图



Bell 不等式导致

$$sin^2\theta \leq 2sin^2\frac{\theta}{2}$$

取$\theta = \frac{\pi}{4}$，*Bell* 不等式导致$0.5 \leq 0.292$。表明：如果量子力学计算与定域原理相容，将产生荒谬的结果。故量子力学的计算与定域原理（Bell 不等式）不一致。

（4）实验结果

许多精确实验结果【包括近年荷兰 *Ronald Hanson* 团队发表在 *Nature* 的文章《*Loophole-free Bell inequality violation using electron spins separated by 1.3 kilometers*》，*doi:10.1038/nature15759*，*2015* 年 *10* 月 *21* 日在线发表】，表明 *Bell* 不等式被破坏，并且结果在误差范围内与量子力学的预言一致。

如何理解量子力学，特别是测量，仍然是一个没有完全解决的问题。

3.7 系综与态密度算符

以自旋为例引入量子统计的基本思想。

（1）纯系综和混合系综

相同的物理系统构成系综。例如所有自旋相同的粒子（系统）构成一个系综。

量子力学系统可以有不同的态。如果所有系统处于同一状态，例如粒子自旋取相同方向，则称构成的系综是纯系综（极化）。如果不同系统处于不同的状态，例如自旋不在同一方向，则构成的系综叫混合系综（没极化）。例如自旋向上的粒子数占 70%，自旋向下的粒子数占 30%，系综处于部分混合系综（部分极化，）。一个自旋方向完全随机的系综，系统的粒子自旋向上，向下的几率各有 50%，处于完全混合系综（完全没极化）。

（2）系综平均与态密度算符

先求固定系统中力学量的平均值。设系统处于态$|\alpha\rangle$，

$$\langle A\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle$$

$\langle\ \ \rangle$是量子平均（对应一个系统）。进入任意表象B，

$$\langle A\rangle_\alpha = \sum_{b,b'}\langle\alpha|b'\rangle\langle b'|\hat{A}|b\rangle\langle b|\alpha\rangle$$

再求系综内力学量的平均值

$$[A]=\sum_{\alpha} w_{\alpha}\langle A\rangle_{\alpha}$$

这里w_{α}是系综中的系统处于态$|\alpha\rangle$的几率，满足归一化条件

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha}=1$$

[ ]是统计平均（对应一个系综）。

由

$$\begin{aligned}[A]&=\sum_{\alpha,b,b'} w_{\alpha}\langle\alpha|b'\rangle\langle b'|\hat{A}|b\rangle\langle b|\alpha\rangle\\&=\sum_{b,b'}\left(\sum_{\alpha} w_{\alpha}\langle b|\alpha\rangle\langle\alpha|b'\rangle\right)\langle b'|\hat{A}|b\rangle\\&=\sum_{b,b'}\langle b|\left(\sum_{\alpha} w_{\alpha}|\alpha\rangle\langle\alpha|\right)|b'\rangle\langle b'|\hat{A}|b\rangle\\&=\sum_{b}\langle b|\left(\sum_{\alpha} w_{\alpha}|\alpha\rangle\langle\alpha|\right)\hat{A}|b\rangle\end{aligned}$$

定义态密度算符

$$\hat{\rho}=\sum_{\alpha} w_{\alpha}|\alpha\rangle\langle\alpha|$$

有

$$[A]=\sum_{b}\langle b|\hat{\rho}\hat{A}|b\rangle=Tr(\rho A)$$

这是量子统计中求任意力学量平均值的基本公式，包含了量子平均（Tr）与统计平均（$\hat{\rho}$）。注意：表象变换不改变矩阵的求迹，统计平均值不依赖于表象的选取。在连续表象，例如坐标表象，

$$[A]=\int d^3\vec{x}\,\langle\vec{x}|\hat{\rho}\hat{A}|\vec{x}\rangle。$$

统计平均$[A]=Tr(\rho A)$说明态密度矩阵满足归一化条件:

$$\mathrm{Tr}\rho = \sum_b \langle b|\hat{\rho}|b\rangle = \sum_{b,\alpha} w_\alpha \langle b|\alpha\rangle\langle\alpha|b\rangle = \sum_{b,\alpha} w_\alpha \langle\alpha|b\rangle\langle b|\alpha\rangle$$

$$= \sum_\alpha w_\alpha \langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_\alpha w_\alpha = 1$$

这里用到了表象的完备性条件，态的归一化条件，和几率的归一化条件。

对于纯系综，所有系统都取同一个态$|n\rangle$，

$$w_\alpha = \delta_{\alpha n}, \qquad \hat{\rho} = \sum_\alpha w_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = |n\rangle\langle n|$$

如果态$|n\rangle$是某个力学量的本征态，进入这个力学量表象，态密度矩阵元

$$\rho_{mm'} = \langle m|\hat{\rho}|m'\rangle = \langle m|n\rangle\langle n|m'\rangle = \delta_{mn}\delta_{nm'}$$

只有一个不为零的矩阵元$= 1$ $(m = m' = n)$，其它矩阵元$= 0$。

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & \cdots & & \\ & & 1 & \\ & & & \cdots \\ & & & & 0 \end{pmatrix}$$

对于完全混合系综，设系统共有N个态，由于取各个态的几率相同，

$$w_\alpha = 1/N$$

则在任意表象B有态密度矩阵元

$$\rho_{bb'} = \langle b|\hat{\rho}|b'\rangle = \sum_\alpha w_\alpha \langle b|\alpha\rangle\langle\alpha|b'\rangle = \frac{1}{N}\sum_\alpha \langle b|\alpha\rangle\langle\alpha|b'\rangle = \frac{1}{N}\langle b|b'\rangle = \frac{1}{N}\delta_{bb'}$$

是一个单位矩阵。

$$\rho = \frac{1}{N}\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \cdots & & \\ & & 1 & \\ & & & \cdots \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

这里已经假设了态$|\alpha\rangle$是某个力学量的本征态，有完备性条件，也用到了B表象的正交归一化条件。

例题 6：自旋为 1/2 粒子构成的纯系综。

设每个粒子（系统）的态$|\alpha\rangle = |s_z^+\rangle$，

$$\hat{\rho} = \sum_\alpha w_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = |s_z^+\rangle\langle s_z^+|$$

进入s_z表象，ρ是一个2×2的矩阵，

$$\rho_{++} = \langle s_z^+|\hat{\rho}|s_z^+\rangle = \langle s_z^+|s_z^+\rangle\langle s_z^+|s_z^+\rangle = 1$$
$$\rho_{+-} = \langle s_z^+|\hat{\rho}|s_z^-\rangle = \langle s_z^+|s_z^+\rangle\langle s_z^+|s_z^-\rangle = 0$$
$$\rho_{-+} = \langle s_z^-|\hat{\rho}|s_z^+\rangle = \langle s_z^-|s_z^+\rangle\langle s_z^+|s_z^+\rangle = 0$$
$$\rho_{--} = \langle s_z^-|\hat{\rho}|s_z^-\rangle = \langle s_z^-|s_z^+\rangle\langle s_z^+|s_z^-\rangle = 0$$

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

如果每个粒子都处于$\hat{s}_x$的本征态$|s_x^+\rangle$，

$$\hat{\rho} = |s_x^+\rangle\langle s_x^+|$$

利用

$$|s_x^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s_z^+\rangle + |s_z^-\rangle)$$

在s_z表象，

$$\rho_{++} = \langle s_z^+|s_x^+\rangle\langle s_x^+|s_z^+\rangle = 1/2, \quad \rho_{+-} = \langle s_z^+|s_x^+\rangle\langle s_x^+|s_z^-\rangle = 1/2$$
$$\rho_{-+} = \langle s_z^-|s_x^+\rangle\langle s_x^+|s_z^+\rangle = 1/2, \quad \rho_{--} = \langle s_z^-|s_x^+\rangle\langle s_x^+|s_z^-\rangle = 1/2$$

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

例题 7：自旋为 1/2 粒子构成的完全混合系综。

$$\hat{\rho} = \sum_\alpha w_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = (|s_z^+\rangle\langle s_z^+| + |s_z^-\rangle\langle s_z^-|)/2$$

在s_z表象，

$$\rho_{++} = 1/2, \quad \rho_{+-} = 0, \quad \rho_{-+} = 0, \quad \rho_{--} = 1/2$$

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

表明在完全混合系综中态密度矩阵是一个单位矩阵。

统计平均值

$$[s_i] = Tr(\rho s_i) = \frac{1}{2} Trs_i$$

代入s_z表象的自旋矩阵s_x, s_y, s_z，有$[s_i] = 0$。实际上，在完全混合系综中的平均值显然相互抵销，为零。

例题 8：自旋为 1/2 粒子构成的部分混合系综。

设

$$\hat{\rho} = \sum_\alpha w_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \frac{3}{4}|s_z^+\rangle\langle s_z^+| + \frac{1}{4}|s_x^+\rangle\langle s_x^+|$$

在s_z表象，

$$\rho_{++} = \frac{3}{4}\langle s_z^+|s_z^+\rangle\langle s_z^+|s_z^+\rangle + \frac{1}{4}\langle s_z^+|s_x^+\rangle\langle s_x^+|s_z^+\rangle = \frac{3}{4} + \frac{1}{4}\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{7}{8}$$

$$\rho_{+-} = \rho_{-+} = \rho_{--} = \frac{1}{8} \qquad \rho = \frac{1}{8}\begin{pmatrix} 7 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[s_x] = Tr(\rho s_x) = \hbar/8, \quad [s_y] = 0, \quad [s_z] = 3\hbar/8$$

（3）态密度算符的时间演化

如果系综的（统计）性质不随时间变化，即态的几率分布w_α不随时间变化，

$$\hat{\rho}(t) = \sum_\alpha w_\alpha |\alpha, t\rangle\langle\alpha, t|$$

由态的时间演化

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t\rangle = \hat{H}|\alpha, t\rangle$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\alpha, t| = \langle\alpha, t|\hat{H}$$

有

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = \sum_\alpha w_\alpha\left(\hat{H}|\alpha, t\rangle\langle\alpha, t| - |\alpha, t\rangle\langle\alpha, t|\hat{H}\right) = \hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H} = -\left[\hat{\rho}, \hat{H}\right]$$

这就是态密度算符的时间演化。类似于 *Heisenberg* 绘景中力学量的运动方程，但差一个负号。注意：$\hat{\rho} = \sum_\alpha w_\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha|$是定义在 *Schroedinger* 绘景中的统计算符。

第 4 章：近似方法

含时 *Schroedinger* 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi,t\rangle=\hat{H}|\psi,t\rangle$$

和定态 *Schroedinger* 方程

$$\hat{H}|\psi\rangle=E|\psi\rangle$$

可以精确求解的物理问题太少，例如类氢原子问题和谐振子问题，大部分实际问题由于$\hat{H}$太复杂，不能严格求解，只能用近似方法。

不同的物理问题有不同的近似方法。物理学家常用的系统的成熟的近似方法是微扰论，前提是耦合常数即相互作用较弱，用以解决

$$\begin{cases}\text{定态方程}\begin{cases}\text{束缚态问题}\begin{cases}\text{定态微扰论}\begin{cases}\text{不简并}\\\text{简并}\end{cases}\\\text{半经典展开}(\hbar\text{展开，}WKB\text{方法})\end{cases}\\\text{散射态问题}\begin{cases}\text{格林函数方法}(\text{迭代法})\\\text{分波法}(\text{用于中心场问题})\end{cases}\end{cases}\\\text{含时方程：含时微扰论}\end{cases}$$

量子力学中的非微扰方法，即相互作用很强，还不成熟，包含

$$\begin{cases}\text{变分法，求解束缚态基态}\\\text{强耦合展开}(1/N\text{展开})\text{，求解束缚态基态}\end{cases}$$

本章将分别讨论。

4.1 定态微扰论

束缚态（分离能谱）的 *Schroedinger* 方程

$$\hat{H}|n\rangle=E_n|n\rangle$$

令

$$\hat{H}=\hat{H}^{(0)}+\hat{H}'$$

要求：1）$\hat{H}^{(0)}$包含$\hat{H}$的主要部分，即$\hat{H}'$很小。由于$\hat{H}^{(0)}$与$\hat{H}'$均为算符，比较大小可从经典对应来理解。严格来说，是比较两个算符的矩阵元，见下面讨论。

2）要求$\hat{H}^{(0)}$的定态方程

$$\hat{H}^{(0)}|n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)}|n\rangle^{(0)}$$

可严格求解。

将E_n和$|n\rangle$展开：

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots$$

$$|n\rangle = |n\rangle^{(0)} + |n\rangle^{(1)} + |n\rangle^{(2)} + \cdots$$

代入定态 *Schroedinger* 方程

$$\left(\hat{H}^{(0)} + \hat{H}'\right)\left(|n\rangle^{(0)} + |n\rangle^{(1)} + |n\rangle^{(2)} + \cdots\right)$$
$$= \left(E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots\right)\left(|n\rangle^{(0)} + |n\rangle^{(1)} + |n\rangle^{(2)} + \cdots\right)$$

然后，逐级近似求解该方程。

零级近似：

$$\hat{H}^{(0)}|n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)}|n\rangle^{(0)} \quad \rightarrow \quad E_n^{(0)}, |n\rangle^{(0)}$$

一级近似：

$$\hat{H}^{(0)}|n\rangle^{(1)} + \hat{H}'|n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)}|n\rangle^{(1)} + E_n^{(1)}|n\rangle^{(0)}$$
$$\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)|n\rangle^{(1)} = -\left(\hat{H}' - E_n^{(1)}\right)|n\rangle^{(0)} \quad \rightarrow \quad E_n^{(1)}, |n\rangle^{(1)}$$

二级近似：

$$\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)|n\rangle^{(2)} = -\left(\hat{H}' - E_n^{(1)}\right)|n\rangle^{(1)} + E_n^{(2)}|n\rangle^{(0)} \quad \rightarrow \quad E_n^{(2)}, |n\rangle^{(2)}$$

一般情形，只求到第一个不为零的修正项。

微扰论的基础是$\hat{H}^{(0)}$的本征值和本征态。求修正要考虑$\hat{H}^{(0)}$是否有简并。无简并时零级波函数知道，有简并时零级波函数取哪一个？

（1）$\hat{H}^{(0)}$无简并

利用$H^{(0)}$表象的完备性条件，将$|n\rangle^{(1)}, |n\rangle^{(2)}$进入$H^{(0)}$表象，

$$|n\rangle^{(1)} = \sum_i |i\rangle^{(0)(0)}\langle i|n\rangle^{(1)}$$

$$|n\rangle^{(2)} = \sum_i |i\rangle^{(0)(0)}\langle i|n\rangle^{(2)}$$

代入上面的一级近似方程和二级近似方程，有（复习本科量子力学，自己进行推导）

$$\begin{cases} E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_{i\neq n} \dfrac{|H'_{in}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} + \cdots \\ |n\rangle = |n\rangle^{(0)} + |n\rangle^{(1)} + \cdots = |n\rangle^{(0)} + \sum_{i\neq n} \dfrac{H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} |i\rangle^{(0)} + \cdots \end{cases}$$

其中$H'_{in} = {}^{(0)}\langle i|\hat{H}'|n\rangle^{(0)}$是$\hat{H}'$在$H^{(0)}$表象的矩阵元，$H'_{nn}$是对角矩阵元。

微扰论能实际应用的条件是收敛性。如果

$$\left|\frac{H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}\right| \ll 1$$

即

$$|H'_{in}| \ll \left|E_n^{(0)} - E_i^{(0)}\right|$$

则可能收敛，这就是$\hat{H}'$远小于$\hat{H}^{(0)}$的意义： 在$H^{(0)}$表象，$\hat{H}'$的矩阵元远小于两个对应能级之差。由此可知：

（1）上述方法只适用于$\hat{H}^{(0)}$有分离谱。对于连续谱，$\left|E_n^{(0)} - E_i^{(0)}\right| \to 0$，上述不等式不可能存立。

（2）$\hat{H}^{(0)}$有简并时也不能用。有简并时，对态求和$\sum_i$包含了与$|n\rangle^{(0)}$有相同能量的简并态，此时$\left|E_n^{(0)} - E_i^{(0)}\right| = 0$，上述不等式也不可能存立。

例题 1：一维带电谐振子在外电场中的运动。

谐振子带电荷q，外电场ε，

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2-q\varepsilon\hat{x}$$

对于弱电场ε，取

$$\hat{H}=\hat{H}^{(0)}+\hat{H}',\qquad \hat{H}^{(0)}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2,\qquad \hat{H}'=-q\varepsilon\hat{x}$$

零级近似：

$$\hat{H}^{(0)}|n\rangle^{(0)}=E_n^{(0)}|n\rangle^{(0)}\quad\rightarrow\quad E_n^{(0)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\qquad \langle x|n\rangle^{(0)}=\psi_n^{(0)}(x)$$

由于零级能量无简并，又是分离谱，可以用上面的微扰论。

一级近似：

$$E_n^{(1)}=H'_{nn}=-q\varepsilon x_{nn}$$

由$H^{(0)}$表象的矩阵元

$$x_{in}={}^{(0)}\langle i|\hat{x}|n\rangle^{(0)}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{i,n+1}+\sqrt{n}\delta_{i,n-1}\right)$$

有

$$x_{nn}=0,\qquad E_n^{(1)}=0$$

$$\begin{aligned}|n\rangle^{(1)}&=\sum_{i\neq n}\frac{H'_{in}}{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}}|i\rangle^{(0)}\\&=-q\varepsilon\sum_{i\neq n}\frac{x_{in}}{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}}|i\rangle^{(0)}\\&=-q\varepsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\frac{\sqrt{n+1}}{E_n^{(0)}-E_{n+1}^{(0)}}|n+1\rangle^{(0)}+\frac{\sqrt{n}}{E_n^{(0)}-E_{n-1}^{(0)}}|n-1\rangle^{(0)}\right)\\&=\frac{q\varepsilon}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left(\sqrt{n+1}|n+1\rangle^{(0)}-\sqrt{n}|n-1\rangle^{(0)}\right)\end{aligned}$$

进入坐标表象：

$$\psi_n^{(1)}(x) = \langle x|n\rangle^{(1)}$$

$$= \frac{q\varepsilon}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left(\sqrt{n+1}\langle x|n+1\rangle^{(0)} - \sqrt{n}\langle x|n-1\rangle^{(0)}\right)$$

$$= \frac{q\varepsilon}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left(\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}(x) - \sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}(x)\right)$$

二级近似：

$$E_n^{(2)} = \sum_{i\neq n}\frac{|H'_{in}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}$$

$$= \frac{\varepsilon^2 q^2\hbar}{m\omega}\sum_{i\neq n}\frac{\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{i,n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{i,n-1}\right)^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} = -\frac{\varepsilon^2 q^2}{2m\omega^2}$$

故有

$$\begin{cases} E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\varepsilon^2 q^2}{2m\omega^2} + \cdots \\ \psi_n(x) = \psi_n^{(0)}(x) + \psi_n^{(1)}(x) + \cdots = \psi_n^{(0)}(x) + \frac{q\varepsilon}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left(\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}(x) - \sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}(x)\right) \end{cases}$$

能否有精确解？

$$\hat{H}(\hat{x},\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 - q\varepsilon\hat{x}$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x} - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}'^2 - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

$$= \hat{H}^{(0)}(\hat{x}',\hat{p}) - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}, \qquad \hat{x}' = \hat{x} - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}$$

由于

$$[\hat{x}',\hat{p}] = i\hbar$$

$\hat{H}^{(0)}(\hat{x}',\hat{p})$的本征值仍为$(n+1/2)\hbar\omega$，坐标表象的本征态为$\psi_n^{(0)}(x')$。故 *Schroedinger* 方程

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$\hat{H}^{(0)}|n\rangle = \left(E_n + \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}\right)|n\rangle$$

的精确解

$$\begin{cases} E_n + \dfrac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} = \left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega, & E_n = \left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega - \dfrac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} \\ \langle x'|n\rangle = \psi_n(x') = \psi_n\left(x - \dfrac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right) \end{cases}$$

与微扰论结果相比，能量近似到二级已是精确解。

微扰论并不总是越到高阶越好。

（2）$\hat{H}^{(0)}$有简并

$$\hat{H}^{(0)}|n,i\rangle^{(0)} = E_n^{(0)}|n,i\rangle^{(0)} \qquad i = 1,\cdots,g$$

零级能量有g重简并，通过 *Schmidt* 方法或引入力学量完备组可以保证他们的正交归一化，

$${}^{(0)}\langle n,i|n,j\rangle^{(0)} = \delta_{ij}$$

问题：如何选取正确的零级波函数？

取一般形式，

$$|n\rangle^{(0)} = \sum_i c_i|n,i\rangle^{(0)}$$

仍是$\hat{H}^{(0)}$的属于$E_n^{(0)}$的本征态。问题：c_i怎样取？

将$|n\rangle^{(0)}$代入一级近似方程：

$$\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)|n\rangle^{(1)} = -\left(\hat{H}' - E_n^{(1)}\right)|n\rangle^{(0)}$$

有

$$\left(\hat{H}^{(0)}-E_n^{(0)}\right)|n\rangle^{(1)}=-\sum_i c_i\left(\hat{H}'-E_n^{(1)}\right)|n,i\rangle^{(0)}$$

左乘${}^{(0)}\langle n,j|$,

$$0=\sum_i c_i\left(H'_{ji}-E_n^{(1)}\delta_{ji}\right)$$

其中$H'_{ji}={}^{(0)}\langle n,j|\hat{H}'|n,i\rangle^{(0)}$是$\hat{H}'$在$H^{(0)}$的简并子空间的矩阵元。

这是关于系数c_i的齐次方程组，共有g个方程（$j=1,\cdots,g$），确定g个系数$c_i(i=1,\cdots,g)$。c_i不全为零的条件是系数行列式等于零（久期方程）：

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E_n^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1g} \\ H'_{21} & H'_{22}-E_n^{(1)} & \cdots & H'_{2g} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H'_{g1} & H'_{g2} & \cdots & H'_{gg}-E_n^{(1)} \end{vmatrix}=0$$

这是关于能量一级修正$E_n^{(1)}$的g阶代数方程，决定$E_n^{(1)}$的g个根$E_{ni}^{(1)}$，$i=1,\cdots,g$，

$$E_n^{(0)}\ \rightarrow\ E_{ni}=E_n^{(0)}+E_{ni}^{(1)}$$

如果久期方程的g个根互不相等，简并完全消去，如果有重根，简并部分消去。将每一个$E_{ni}^{(1)}$代回齐次方程组，可以得到一组系数c_{ij} $(c_{i1},\cdots,c_{ig})$。这样就得到了一级能量修正和与之配合的零级波函数：

$$E_{ni}=E_n^{(0)}+E_{ni}^{(1)},\qquad |n\rangle_i^{(0)}=\sum_{j=1}^{g}c_{ij}|n,j\rangle^{(0)}$$

注意：$\hat{H}^{(0)}$有简并，可以引入不同的力学量完备组来消除简并，得到$|n,j\rangle^{(0)}$。如果选取得当，使得$\hat{H}'$在$\hat{H}^{(0)}$的简并子空间中是对角矩阵，则系数行列式是对角的，一级能量修正$E_{ni}^{(1)}=H'_{ii}$。

例题 2：二重简并体系。

$E^{(0)}$对应两个态$|1\rangle^{(0)},|2\rangle^{(0)}$。在 2 维简并子空间中的久期方程为

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E^{(1)} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22}-E^{(1)} \end{vmatrix}=0$$

即

$$\left(E^{(1)}\right)^2-(H'_{11}+H'_{22})E^{(1)}+H'_{11}H'_{22}-|H'_{12}|^2=0$$

$$E^{(1)}_{\pm}=\frac{1}{2}\left[(H'_{11}+H'_{22})\pm\sqrt{\left((H'_{11}-H'_{22})\right)^2+4|H'_{12}|^2}\right]$$

若H'是对角矩阵，$H'_{12}=H'_{21}=0$，则

$$E^{(1)}_{+}=H'_{11},\qquad E^{(1)}_{-}=H'_{22}$$

例题 3：外电场中的氢原子（*Stark effect*）

外电场$\vec{\varepsilon}$的方向为z轴，坐标表象中电子相对于原子核的相对运动能量

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2-\frac{e^2}{r}+e\varepsilon r\cos\theta$$

μ为约化质量，r为相对距离。对于弱电场ε，取

$$\hat{H}^{(0)}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2-\frac{e^2}{r}$$

$$\hat{H}'=e\varepsilon r\cos\theta$$

零级近似是标准氢原子问题：

$$E^{(0)}_n=-\frac{\mu e^4}{2n^2\hbar^2},\qquad \psi_{nlm}(\vec{r}),\qquad l=0,\cdots,n-1,\qquad m=-l,\cdots,l$$

简并度

$$g=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$$

考虑零级能量$E^{(0)}_2$，$g=4$，有 4 重简并态：

$$\psi_{200},\qquad \psi_{210},\qquad \psi_{211},\qquad \psi_{21-1}$$

选取这个次序为简并空间基矢的次序。为求解久期方程，先计算简并子空间中

的 16 个微扰矩阵元

$$H'_{2lm,2l'm'} = \langle 2lm|\hat{H}'|2l'm'\rangle$$

$$= \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{r}' \langle 2lm|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\hat{H}'|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|2l'm'\rangle$$

$$= \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{r}' \psi^*_{2lm}(\vec{r})\hat{H}'(\vec{r})\delta(\vec{r}-\vec{r}')\psi_{2l'm'}(\vec{r}')$$

$$= \int dr d\Omega\, r^2 R^*_2(r) Y^*_{lm}(\theta,\varphi)(e\varepsilon r\cos\theta) R_2(r) Y_{l'm'}(\theta,\varphi)$$

有

$$H'_{200,210} = H'_{210,200} = -3e\epsilon a_0$$

其他矩阵元都为零。在 4 维简并子空间中的久期方程为

$$\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & -3e\epsilon a_0 & 0 & 0 \\ -3e\epsilon a_0 & -E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

能量一级修正的 4 个解为

$$E_{21}^{(1)} = 3e\epsilon a_0, \qquad E_{22}^{(1)} = -3e\epsilon a_0, \qquad E_{23}^{(1)} = E_{24}^{(1)} = 0$$

$$E_2^{(0)}\ (\text{四重简并}) \quad \rightarrow \quad \begin{cases} E_2^{(0)} + 3e\epsilon a_0 \\ E_2^{(0)}\ (\text{二重简并}) \\ E_2^{(0)} - 3e\epsilon a_0 \end{cases}$$

零级能量$E_2^{(0)}$的四重简并被部分消除。

例题 4：氢原子的相对论修正

将相对论动能进行非相对论展开，

$$T = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2} - m = m\sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{m^2}} - m = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3} + \cdots$$

只保留$\vec{p}^4$项，有相对哈密顿量

$$\hat{H}=\sqrt{\hat{\vec{p}}^2+m^2}-m-\frac{e^2}{r}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}-\frac{e^2}{r}-\frac{\hat{\vec{p}}^4}{8m^3}$$

取

$$\hat{H}^{(0)}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}-\frac{e^2}{r},\qquad \hat{H}'=-\frac{\hat{\vec{p}}^4}{8m^3}$$

零级近似

$$\left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}-\frac{e^2}{r}\right)|nlm\rangle=E_n^{(0)}|nlm\rangle$$

为标准氢原子问题，能量$E_n^{(0)}$，n^2重简并态$\langle\vec{r}|nlm\rangle=\psi_{nlm}(\vec{r})=R_n(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$。

先计算n^2维简并子空间中的微扰矩阵元

$$H'_{nlm,nl'm'}=\langle nlm|\hat{H}'|nl'm'\rangle=-\frac{1}{8m^3}\langle nlm|\hat{\vec{p}}^4|nl'm'\rangle$$

由$\hat{H}^{(0)}$的定态方程，有

$$\hat{\vec{p}}^2|nlm\rangle=2m\left(E_n^{(0)}+\frac{e^2}{r}\right)|nlm\rangle,\qquad \langle nlm|\hat{\vec{p}}^2=2m\langle nlm|\left(E_n^{(0)}+\frac{e^2}{r}\right)$$

$$H'_{nlm,nl'm'}=-\frac{1}{2m}\left\langle nlm\left|\left(E_n^{(0)}+\frac{e^2}{r}\right)^2\right|nl'm'\right\rangle$$

由于$\frac{e^2}{r}$与θ,φ无关，考虑到球谐函数$Y_{lm}(\theta,\varphi)$的正交归一化，矩阵元$H^{(1)}_{nlm,nl'm'}$在简并子空间中是对角的，

$$H'_{nlm,nl'm'}=H'_{nlm,nlm}\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

$$H'_{nlm,nlm}=-\frac{1}{2m}\left[\left(E_n^{(0)}\right)^2+2E_n^{(0)}\left\langle nlm\left|\frac{e^2}{r}\right|nlm\right\rangle+\left\langle nlm\left|\left(\frac{e^2}{r}\right)^2\right|nlm\right\rangle\right]$$

$$\left\langle nlm\left|\frac{e^2}{r}\right|nlm\right\rangle=\int drr^2R_n(r)\frac{e^2}{r}R_n(r)=\frac{e^2}{n^2a}$$

$$\left\langle nlm\left|\left(\frac{e^2}{r}\right)^2\right|nlm\right\rangle=\int drr^2R_n(r)\left(\frac{e^2}{r}\right)^2R_n(r)=\frac{e^4}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n^3a^2}$$

故

$$H'_{nlm,nlm}=-\frac{1}{2m}\left[\left(E_n^{(0)}\right)^2+\frac{2e^2}{n^2a}E_n^{(0)}+\frac{e^4}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n^3a^2}\right]$$

与m无关，

$$H'_{nlm,nlm}=H'_{nl,nl}$$

由久期方程，能量的一级修正是

$$E_{nlm}^{(1)}=H'_{nlm,nlm}=H'_{nl,nl}\qquad E_{nl}=E_n^{(0)}+H'_{nl,nl}$$

仍然有（$2l+1$）重简并。

例题 5：氢原子的自旋-轨道耦合

电子相对于原子核的运动能量

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}'$$

$$\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2 + V(r), \qquad \hat{H}' = -\frac{1}{2\mu^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{s}} = \xi(r)\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{s}}$$

$\hat{H}'$的形式将在相对论量子力学一章讨论。

零级近似：本征值$E_n^{(0)}$，只与主量子数n有关，态$|nlm_l sm_s\rangle$与 5 个量子数有关，$2n^2$重简并。

简并子空间可用无耦合力学量组$\left\{\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{\vec{s}}^2, \hat{s}_z\right\}$的本征态$|lm_l sm_s\rangle$构成，也可用有耦合力学量组$\left\{\hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{s}}^2, \hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_z\right\}\left(\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{s}}\right)$的本征态$|lsjm_j\rangle$构成。若在无耦合表象考虑久期方程，由于$\left[\hat{H}', \hat{L}_z\right] \neq 0, \left[\hat{H}', \hat{s}_z\right] \neq 0$，态$|lm_l sm_s\rangle$不是$\hat{H}'$的本征态，矩阵$H'$在简并子空间有非对角元$\langle lm_l sm_s|\hat{H}'|lm_l' sm_s'\rangle$，久期方程结构会很复杂。若在有耦合表象考虑久期方程，由于$\left[\hat{H}', \hat{\vec{J}}^2\right] = \left[\hat{H}', \hat{J}_z\right] = \left[\hat{H}', \hat{\vec{L}}^2\right] = \left[\hat{H}', \hat{\vec{s}}^2\right] = 0$，$|lsjm_j\rangle$是$\hat{H}'$的本征态，故$\hat{H}'$矩阵是对角矩阵，能量的一级修正就是对角元。

$$\begin{aligned}
E^{(1)}_{nlsjm_j} &= \langle nlsjm_j|\hat{H}'|nlsjm_j\rangle \\
&= \left\langle nlsjm_j\left|\xi(r)\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{s}}\right|nlsjm_j\right\rangle \\
&= \left\langle nlsjm_j\left|\frac{\xi(r)}{2}\left(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{s}}^2\right)\right|nlsjm_j\right\rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\langle nlsjm_j|\xi(r)|nlsjm_j\rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\int R_n^2(r)\xi(r)r^2 dr \\
&= E^{(1)}_{nlsj}
\end{aligned}$$

与量子数m_j无关，仍然有$2j+1$重简并。例如取$n = 2$ $(l = 0,1,\ s = \frac{1}{2},\ j = |l - 1/2|, l + 1/2)$，

$$E_2^{(0)}\ (\text{简并}g=2n^2=8)\quad\rightarrow\quad\begin{cases}E_2^{(0)}+E^{(1)}_{21\frac{13}{22}} & (\text{简并}g=2j+1=4)\\ E_2^{(0)}+E^{(1)}_{21\frac{11}{22}} & (\text{简并}g=2j+1=2)\\ E_2^{(0)}+E^{(1)}_{20\frac{11}{22}} & (\text{简并}g=2j+1=2)\end{cases}$$

4.2 定态方程的 WKB 近似

微扰论的思想是：H与$H^{(0)}$差别不大，可以把$H^{(0)}$的解作为零级近似，按照$H'=H-H^{(0)}$展开进行逐级近似计算。

如果一个量子力学系统与经典力学系统差别不大，则可以将 *Schroedinger* 方程按照$\hbar$进行展开，逐级近似求解。这个半经典展开方法称为 *WKB* 近似（*Wentzel*，*Kramers*，*Brillouin*）。

（1）方法

一维定态问题

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\varphi(x)=E\varphi(x)$$

令波函数

$$\varphi(x)=e^{\frac{i}{\hbar}S(x)}$$

有

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS(x)}{dx}\right)^2+V(x)-E-\frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2S(x)}{dx^2}=0$$

将$S(x)$按照$\frac{\hbar}{i}$展开（半经典展开），

$$S(x)=S_0(x)+\frac{\hbar}{i}S_1(x)+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2S_2(x)+\cdots$$

代入方程，在方程两边取$\hbar$的相同幂次，有

$$\hbar^0:\qquad\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2+2m(V(x)-E)=0$$

$$\hbar^1: \qquad \frac{dS_1}{dx}\frac{dS_0}{dx}+\frac{1}{2}\frac{d^2S_0}{dx^2}=0$$

……

令

$$\hbar k(x)=\sqrt{2m(E-V(x))}$$

为粒子的动量，方程组的解为

$$S_0(x)=\pm\hbar\int^x k(x')dx'+C$$

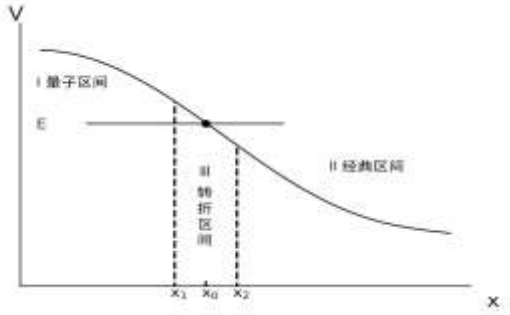
$$S_1(x)=-ln\sqrt{\hbar k(x)}+\bar{C}$$

……

精确到$\hbar$，定态波函数的一般形式

$$\varphi(x)=e^{\frac{i}{\hbar}\left(S_0(x)+\frac{\hbar}{i}S_1(x)\right)}=\frac{1}{\sqrt{\hbar k(x)}}\left(C_1e^{i\int^x k(x')dx'}+C_2e^{-i\int^x k(x')dx'}\right)$$

显然，在由$E-V(x)=0$确定的x_i附近，上述解是发散的。因此，对于给定的势能$V(x)$，将粒子运动区间分为$E>V$（总能量大于势能）的经典区间，$E<V$的量子区间，和$E\sim V$的转折区间，见图。上面的解只在经典区间和量子区间才成立。



在经典区间II：$E>V$，

$$\varphi_{II}(x)=\frac{1}{\sqrt{\hbar k(x)}}\left(C_1e^{i\int_{x_2}^x k(x')dx'}+C_2e^{-i\int_{x_2}^x k(x')dx'}\right)$$

在量子区间I：$E<V$，

$$\hbar k(x)=\sqrt{2m(E-V(x))}=i\sqrt{2m(V(x)-E)}=i\hbar\varkappa(x)$$

$$\varphi_I(x)=\frac{1}{\sqrt{\hbar\varkappa(x)}}\left(C_3e^{-\int_{x_1}^{x}\varkappa(x')dx'}+C_4e^{\int_{x_1}^{x}\varkappa(x')dx'}\right)$$

在转折区间III：由$E-V(x_0)=0$确定经典转折点x_0。在x_0附件将$V(x)$展开至线性项，

$$V(x)=V(x_0)+\left|\frac{dV}{dx}\right|_{x=x_0}(x-x_0)$$

代入定态 *Schroedinger* 方程，有

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}-\frac{2m}{\hbar^2}\left|\frac{dV}{dx}\right|_{x=x_0}(x-x_0)\right]\varphi_{III}(x)=0$$

得到解$\varphi_{III}(x)$。

考虑$\varphi_{III}(x)$与量子解$\varphi_I(x)$在x_1的连续性，$\varphi_{III}(x)$与经典解$\varphi_{II}(x)$在x_2的连续性，可以把经典解和量子解中的常数C_1,C_2,C_3,C_4确定下来。

微扰论：围绕H_0的解展开；*WKB* 近似：围绕经典解展开

（2）适应范围

由方程

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS(x)}{dx}\right)^2+V(x)-E-\frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2S(x)}{dx^2}=0$$

$\hbar$展开收敛的条件是

$$\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2\gg\hbar\left|\frac{d^2S_0}{dx^2}\right|$$

代入$S_0(x)=\pm\hbar\int^x k(x')dx'+C$，有

$$\left(2m\big(E-V(x)\big)\right)^{\frac{3}{2}}\gg m\hbar\left|\frac{dV}{dx}\right|$$

$$p^3 \gg m\hbar \left|\frac{dV}{dx}\right|$$

说明：WKB 展开的使用条件是大动量，势场变化缓慢的情形。

4.3 变分法（非微扰方法）

求解定态 *Schroedinger* 方程

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

的基态

$$\hat{H}|0\rangle = E_0|0\rangle。$$

在任意态

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$$

其能量平均值

$$\langle E\rangle = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \langle m|\hat{H}|n\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n E_n \delta_{mn} = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0$$

任意态的能量平均值都大于或等于基态能量。

变分法思想：取不同的态$|\psi\rangle$，计算$\langle E\rangle = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$，其中最小的$\langle E\rangle$最接近$E_0$，可近似看成基态能$E_0$。

具体方法：由体系的物理性质猜测含参量λ的尝试波函数$|\psi(\lambda)\rangle$，计算

$$\langle E\rangle(\lambda) = \langle\psi(\lambda)|\hat{H}|\psi(\lambda)\rangle$$

由能量最小值条件

$$\frac{d\langle E\rangle(\lambda)}{d\lambda} = 0, \qquad \frac{d^2\langle E\rangle(\lambda)}{d\lambda^2} > 0 \quad \rightarrow \quad \lambda_0, \text{能量最小值} \langle E\rangle(\lambda_0)$$

关键是猜测合适的波函数。

例题 6：氦原子。

核外有两个电子。体系的相对运动能量

$$\widehat{H}=\left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}_1^2}{2\mu}-\frac{2e^2}{r_1}\right)+\left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}_2^2}{2\mu}-\frac{2e^2}{r_2}\right)+\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}$$

$$=\widehat{H}^{(0)}+\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}$$

对于$\widehat{H}^{(0)}$，每个电子与一个$z=2$的原子核相互作用，其基态为

$$E_0^{(0)}=2\left(-2\frac{e^2}{a_0}\right)=-4\frac{e^2}{a_0}$$

$$\Psi_0(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{100}(\vec{r}_2),\quad \psi_{100}(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{a_0}\right)^{3/2}e^{-\frac{2}{a_0}r}$$

对于$\widehat{H}$，两电子间的排斥相互作用等效于削弱了电子与原子核之间的吸引相互作用，每个电子等价于与一个$z<2$的核相互作用。故取z为参数的尝试波函数

$$\Psi_0(\vec{r}_1,\vec{r}_2;z)=\psi_{100}(\vec{r}_1;z)\psi_{100}(\vec{r}_2;z),\quad \psi_{100}(\vec{r};z)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2}e^{-\frac{z}{a_0}r}$$

$$\langle E\rangle(z)=\int\Psi_0^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2;z)\,\widehat{H}\Psi_0(\vec{r}_1,\vec{r}_2;z)d^3\vec{r}_1d^3\vec{r}_2=\left(-2z^2+\frac{27}{4}z\right)\frac{-e^2}{2a_0}$$

由

$$\frac{d\langle E\rangle(z)}{dz}=0,\qquad \frac{d^2\langle E\rangle(z)}{dz^2}>0,\qquad z_0=\frac{27}{16}<2$$

基态能量与基态波函数

$$E_0=\langle E\rangle(z_0)=-2.85\frac{e^2}{a_0},\qquad \Psi_0(\vec{r}_1,\vec{r}_2;z_0)$$

也可用微扰论的方法来求解基态能量修正。取

$$\widehat{H}'=\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}$$

基态不简并，用非简并微扰论，得

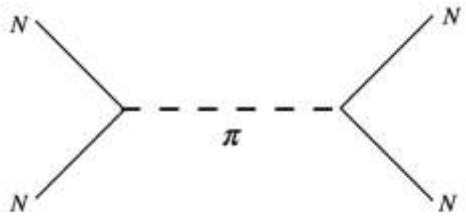
$$E_0^{(1)} = \int \Psi_0^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\Psi_0(\vec{r}_1,\vec{r}_2)d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 = \frac{5}{4}\frac{e^2}{a_0}$$

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -4\frac{e^2}{a_0} + \frac{5}{4}\frac{e^2}{a_0} = -2.75\frac{e^2}{a_0}$$

基态能实验值为$-2.904\frac{e^2}{a_0}$。可见，变分（非微扰）的结果更接近实验值。

4.4 强耦合微扰方法（大$1/N$展开）

1999 年，李政道等提出了一种求解强耦合 *Schroedinger* 方程的方法，以下用强相互作用的 *Yukawa* 势为例来简单介绍。核子之间的相互作用通过π介子传递，



$$V(r) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}G(k_0=0,\vec{k}) = -g^2\frac{e^{-\alpha r}}{r}$$

$G(k_0,\vec{k})$为π介子传播子，其中k是π介子动量，g是强相互作用的耦合常数$g>1$，α是π介子质量。$\alpha\to 0$时，由无质量的光子传递电磁相互作用，退化为电磁相互作用的 *Coulomb* 势。

粒子的定态 *Schroedinger* 方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - g^2\frac{e^{-\alpha r}}{r}\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

无严格解析解，也难以分解成两部分用微扰论求解，但$g>1$启示可以尝试$1/g$展开方法。

以下令$\hbar = 1$(自然单位制)，以简化书写，并考虑基态波函数，只与径向有关，无角度依赖性。令

$$\psi(r) = e^{-S(r)}$$

将本征值E和本征态$S(r)$用g^{-2}来展开：

$$E = g^4 E_0 + g^2 E_1 + E_2 + \cdots$$

$$S = g^2 S_0 + S_1 + g^{-2} S_2 + \cdots$$

E和$S(r)$的初始项有不同的g的幂次，目的是使相互作用$V(r)$不出现在E_0与S_0的方程中。代入定态 *Schroedinger* 方程，并比较g的相同幂次，得到

零级方程(g^4)：　　$\left(\frac{dS_0}{dr}\right)^2 = -2mE_0$　　（不出现V）

一级方程(g^2)：　　$\frac{dS_0}{dr}\frac{dS_1}{dr} = \frac{1}{2}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dS_0}{dr}\right) - m\left(\frac{e^{-\alpha r}}{r} + E_1\right)$

二级方程(g^0)：　　$\frac{dS_0}{dr}\frac{dS_2}{dr} = -\frac{1}{2}\left(\frac{dS_1}{dr}\right)^2 + \frac{1}{2}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dS_1}{dr}\right) - mE_2$

……

零级方程的解

$$S_0(r) = \pm\int_0^r \sqrt{-2mE_0}\, dr' = \pm\sqrt{-2mE_0}\, r$$

考虑到$\psi_0(r) = e^{-S_0(r)}$在$r \to \infty$时有限的约束条件，取

$$S_0(r) = \sqrt{-2mE_0}\, r$$

将$S_0(r)$代入一级方程有

$$\sqrt{-2mE_0}\frac{dS_1}{dr} = \frac{\sqrt{-2mE_0} - me^{-\alpha r}}{r} - mE_1$$

波函数的有限条件要求ψ_1和一阶级导数在任意r有限，即S_1和它的一阶导数在任意r有限。在$r = 0$的$\frac{dS_1}{dr}$有限导致

$$\lim_{r\to 0}\frac{\sqrt{-2mE_0} - me^{-\alpha r}}{r}\ \text{有限}$$

故

$$E_0 = -\frac{m}{2}$$

$$S_0(r) = mr$$

$$S_1(r) = \int_0^r dr' \left[\frac{1 - e^{-\alpha r'}}{r'} - E_1\right]$$

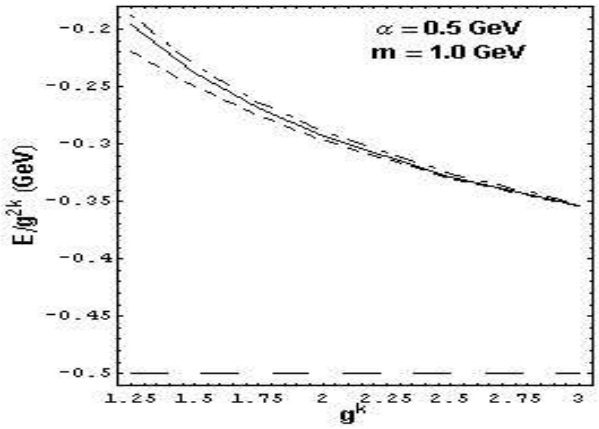
代入二级方程，要求$\frac{dS_2}{dr}$在$r = 0$有限，有

$$E_1 = \alpha$$

如此逐级求解，基态能

$$E = -\frac{m}{2}g^4 + \alpha g^2 - \frac{3\alpha^2}{4m} + \frac{\alpha^2}{2m^2}g^{-2} + \cdots$$

与数值方法精确求解 *Yukawa* 势得到的基态能量作比较，如图。可以看到精确到g^4（长虚线），g^0（短虚线）和g^{-2}（点划线）的解析解是如何逐渐逼近数值解（实线）的。



当g较大，即相互作用很强时，近似解析结果与精确求解的结果趋于一致，这表明上述近似方法适用于求解强耦合 *Schroedinger* 方程。

若取$\alpha = 0$，*Yukawa* 势退化为库仑势，此时基态

$$E = -\frac{m}{2}g^4, \quad \psi(r) = e^{-S_0(r)} = e^{-mg^2 r}$$

与氢原子问题的基态严格解完全相同。

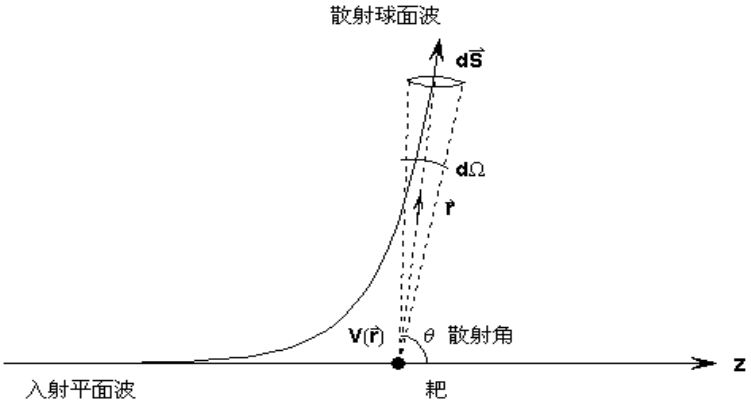
4.5 散射问

讨论连续谱的定态微扰论。连续谱对应的物理问　是散射，粒子可以运动到无穷远处。

（1）微分散射截

考虑两粒子系统。

由无穷远处入射的粒子，与　粒子无相互作用，是自由粒子（平　波）。在　近　时，开始与　有相互作用。如果相互作用强，会改变粒子的性质，例如能量发生改变，甚至产生新粒子，称为’弹性散射。如果相互作用前后只改变粒子运动的方向，能量不发生改变，称为弹性散射。在’相对论量子力学中只讨论弹性散射。



将两体问　分解成质心运动和相对运动，相对运动描述的就是散射问　。以　粒子为中心建立球坐标系，并以入射方向为z轴。

入射平　波和对应的入射几率流密度（单位时间内穿过单位　积的几率）

$$\psi_1(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = Ae^{ikz}, \qquad A = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}$$

$$J_z = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_1\frac{\partial\psi_1^*}{\partial z} - \psi_1^*\frac{\partial\psi_1}{\partial z}\right) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

单位时间内散射到$d\Omega$方向的粒子数正比于射几率流密度，也正比于立体角的大

小$d\Omega$，

$$dN(\Omega) = \sigma(\Omega) J_z d\Omega$$

$\sigma(\Omega)$是比例系数。由量纲分析，

$$[dN] = \frac{1}{T}, \quad [J_z] = \frac{1}{L^2 T}, \quad [d\Omega] = 1 \quad \rightarrow \quad [\sigma] = L^2$$

$\sigma(\Omega)$为 积量纲，故称为微分散射截 。

通过理论计算和实 测量微分散射截 的比较来研究 粒子的结构和相互作用的性质。

（2）计算$\sigma(\theta,\varphi)$的一般方法

当$r \to \infty$, $V(\vec{r}) \to 0$, $\psi(\vec{r})$包含两部分：没受相互作用影响沿z方向传播的入射平 波$\psi_1(\vec{r})$和沿$\vec{r}$方向向外传播的散射球 波$\psi_2(\vec{r})$，

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow[r\to\infty]{} \psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + Af(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}$$

这是散射问 的标准解。

（1）球 波与Ω有关，体现在$f(\Omega)$中，可调节$f(\Omega)$使得ψ_2与ψ_1有相同常数A。$f(\Omega)$的具体形式由相互作用决定，即由 *Schroedinger* 方程决定。

（2）弹性散射，散射前后能量不变，波矢k大小不变，但方向变化，从z方向到r方向。

散射几率流密度

$$J_r = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_2 \frac{\partial \psi_2^*}{\partial r} - \psi_2^* \frac{\partial \psi_2}{\partial r}\right) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 \frac{|f(\Omega)|^2}{r^2} = J_z \frac{|f(\Omega)|^2}{r^2}$$

单位时间内散射到$d\Omega$内的粒子数为

$$dN = J_r dS = J_r r^2 d\Omega = J_z |f(\Omega)|^2 d\Omega$$

与微分散射截 的定义式

$$dN = \sigma(\Omega) J_z d\Omega$$

比较，得

$$\sigma(\Omega) = |f(\Omega)|^2$$

$f(\Omega)$称为微分散射振幅。

结论：计算$\sigma(\Omega)$的一般方法：

■求解具体的势$V(\vec{r})$对应的相对 *Schroedinger* 方程得到$\psi(\vec{r})$；

■将其渐进解$(r \to \infty)$与标准渐进解$\psi(r \to \infty) = Ae^{ikz} + Af(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}$比较，得到$f(\Omega)$，$\sigma(\Omega) = |f(\Omega)|^2$。

以下讨论如何求解 *Schroedinger* 方程，得到渐近解。

4.6 *Green* 函数方法与 *Born* 级数

（1）积分方程

定态 *Schroedinger* 方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

弹性散射问　中，能量E是已知的。令

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad U(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r})$$

有

$$\left(\vec{\nabla}^2 + k^2\right)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

Green 函数方法的思想是把连续的相互作用　$U(\vec{r})\psi(\vec{r})$变成分离的点相互作用之和。先求解只在固定点$\vec{r}'$有相互作用的定态方程

$$\left(\vec{\nabla}_r^2 + k^2\right)G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

得到 *Green* 函数$G_0(\vec{r}, \vec{r}')$，再求解定态方程

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

$$= \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$= \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')(\vec{\nabla}_r^2 + k^2)G_0(\vec{r}, \vec{r}')$$

$$= (\vec{\nabla}^2 + k^2)\int d^3\vec{r}' U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')G_0(\vec{r}, \vec{r}')$$

所以上 ’ 次方程的一个特解是

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')G_0(\vec{r}, \vec{r}')$$

考虑到 次方程

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = 0$$

的解是

$$\psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

故’ 次方程的通解为

$$\psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')G_0(\vec{r}, \vec{r}')$$

这是一个关于$\psi(\vec{r})$的积分方程，与定态方程的微分形式完全等价。

积分方程有其优点：

- 边界条件已包含在方程中；
- 可用迭代法求解。

（2）*Green* 函数

Green 函数方程

$$(\vec{\nabla}_r^2 + k^2)G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

将$G_0(\vec{r}, \vec{r}')$的 *Fourier* 变换（从坐标变量$\vec{r}$到动量变量$\vec{k}'$）与δ函数的积分形式

$$G_0(\vec{r},\vec{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3} g_0(\vec{k}',\vec{r}')\, e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}$$

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}$$

代入方程得到

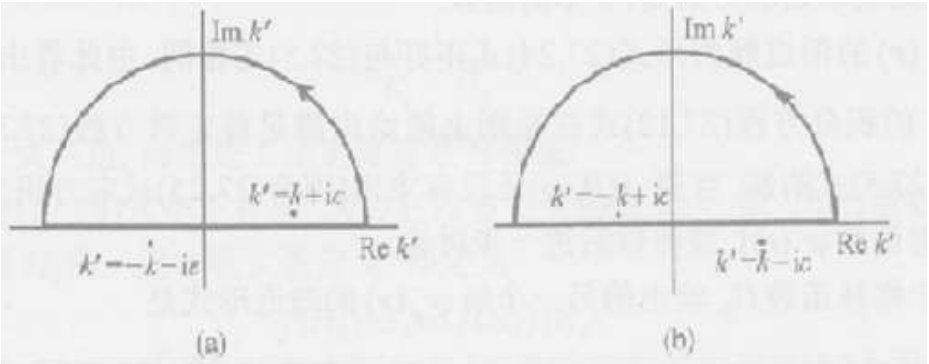
$$g_0(\vec{k}',\vec{r}') = \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{k^2-k'^2}$$

$$G_0(\vec{r},\vec{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2-k'^2} = G_0(\vec{r}-\vec{r}')$$

只与$\vec{r}-\vec{r}'$有关。对角度积分后有

$$\begin{aligned} G_0(\vec{r}-\vec{r}') &= \frac{1}{2\pi^2}\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_0^{\infty} dk' \frac{k'}{k^2-k'^2} sin(k'|\vec{r}-\vec{r}'|) \\ &= \frac{1}{4\pi^2}\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_{-\infty}^{\infty} dk' \frac{k'}{k^2-k'^2} sin(k'|\vec{r}-\vec{r}'|) \\ &= \frac{1}{4i\pi^2}\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_{-\infty}^{\infty} dk' \frac{k'}{k^2-k'^2} e^{ik'|\vec{r}-\vec{r}'|} \\ &= -\frac{1}{4i\pi^2}\frac{1}{2|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_{-\infty}^{\infty} dk' \left(\frac{1}{k'-k}+\frac{1}{k'+k}\right) e^{ik'|\vec{r}-\vec{r}'|} \end{aligned}$$

第二个等式考虑到了被积函数是k'的偶函数，第三个等式考虑到了被积函数中含$\cos(k'|\vec{r}-\vec{r}'|)$的部分是$k'$的奇函数，积分为　。上　积分有两个奇点$k'=\pm k$，可以利用$k'$复平　上的围路积分来处理。



如果考虑左边的围路，只有奇点$k'=k$对积分有贡献。在半园上，$e^{ik'|\vec{r}-\vec{r}'|}=$

$e^{i\mathrm{Re}k'|\vec{r}-\vec{r}'|}e^{-\mathrm{Im}k'|\vec{r}-\vec{r}'|}$，因为在上半平　$\mathrm{Im}k'>0$，故被积函数在无穷远处的半园上$\to 0$，其积分结果为　。利用留数定理，有

$$G_0^+(\vec{r}-\vec{r}') = -\frac{1}{4i\pi^2}\frac{1}{2|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_{-\infty}^{\infty}dk'\frac{1}{k'-(k+i\epsilon)}e^{ik'|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

称为推迟 *Green* 函数。

如果考虑右边的围路，只有奇点$k'=-k$对积分有贡献。

$$G_0^-(\vec{r}-\vec{r}') = -\frac{1}{4i\pi^2}\frac{1}{2|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_{-\infty}^{\infty}dk'\frac{1}{k'+(k-i\epsilon)}e^{ik'|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{-ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

称为超前 *Green* 函数。

如果考虑把两个奇点都包含的围路，则得到因果 *Green* 函数。

以上 Green 函数都是方程

$$\left(\vec{\nabla}_r^2+k^2\right)G_0(\vec{r},\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

的解，具体取哪一条回路由物理问　来决定。例如，考虑到散射问　中散射球波向外传播，选择推迟 *Green* 函数，

$$G_0^+(\vec{r}-\vec{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

$\psi(\vec{r})$的积分方程

$$\psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi}\int d^3\vec{r}'U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

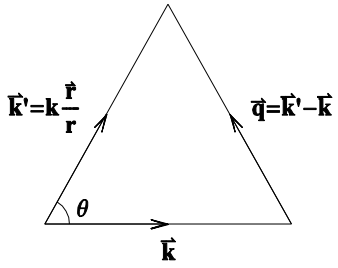
（3）散射振幅

为了求得微分散射振幅，考虑以上积分方程的渐进形式（$r\to\infty$）。由于

$U(\vec{r}')$的有效区域有限，在积分不为　的区间有$r'/r \to 0$，

$$|\vec{r}-\vec{r}'| = \sqrt{(\vec{r}-\vec{r}')^2} \approx r - \vec{r}\cdot\frac{\vec{r}'}{r}$$

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{r\to\infty} Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')$$



$\vec{k}' = k\frac{\vec{r}}{r}$是散射波矢，沿$\vec{r}$方向，其大小$k' = k$。相位中$|\vec{r}-\vec{r}'|$保留到一级近似，分母中$|\vec{r}-\vec{r}'|$只保持到　级。

与标准渐进解

$$\psi(r\to\infty) = Ae^{ikz} + Af(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}$$

比较，得散射振幅

$$f(\Omega) = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi}\int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')$$

（4）一级 Born 近似

积分方程

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi}\int d^3\vec{r}' U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

散射振幅

$$f(\Omega) = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi}\int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}')\,\psi(\vec{r}')$$

若势能$V(\vec{r})$相较于入射能量是一个弱势（$\hat{V} < \hat{H}_0 = \hat{T}$），则可以把$V$看成微扰，用迭代法求解积分方程。

零级近似，无相互作用，

$$\psi^{(0)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

代入散射振幅，得到一级散射振幅

$$f^{(1)}(\Omega) = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi}\int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}')\psi^{(0)}(\vec{r}')$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\int d^3\vec{r}' e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}')$$

在弱势的前提下，如果是低能散射，k很小，

$$|\vec{k}-\vec{k}'| = \sqrt{(\vec{k}-\vec{k}')^2} = \sqrt{k^2+k'^2-2kk'cos\theta} = \sqrt{4k^2 sin^2\frac{\theta}{2}} = 2ksin\frac{\theta}{2}$$

很小，相位在有效相互作用范围内是一个缓变函数，可看成一个常数，提到$f^{(1)}(\Omega)$的积分号外，对σ无贡献，

$$f^{(1)}(\Omega) = -\frac{1}{4\pi}\int d^3\vec{r}' U(\vec{r}')$$

例题 7：考虑低能弱散射问题

$$V(r)=\begin{cases}V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases}$$

$$f^{(1)}(\Omega)=-\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2}\int_{r<a}d^3\vec{r}=-\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2}\frac{4}{3}\pi a^3$$

$$\sigma(\Omega)\approx\left|f^{(1)}(\Omega)\right|^2=\left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}\right)^2$$

总截面

$$\sigma_{tot}=\int\sigma(\Omega)d\Omega=4\pi\left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}\right)^2$$

注意：使用 Born 近似的条件是弱势散射。

对于一般非低能散射，如果为中心势场$V(\vec{r})=V(r)$，有

$$f^{(1)}(\Omega)=-\frac{1}{4\pi}\int d^3\vec{r}'e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}'}U(\vec{r}')$$

$$=-\frac{1}{4\pi}\int_0^\infty dr'r'^2U(r')\int_0^\pi d\theta'sin\theta'\int_0^{2\pi}d\varphi'\,e^{-i|\vec{k}-\vec{k}'|r'cos\theta'}$$

$$=-\frac{1}{|\vec{k}-\vec{k}'|}\int_0^\infty dr'U(r')r'sin\left(|\vec{k}-\vec{k}'|r'\right)$$

(5）Born 级数

用迭代法求解积分方程

$$\psi(\vec{r})=Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}+\int d^3\vec{r}'\psi(\vec{r}')U(\vec{r}')G_0(\vec{r}-\vec{r}')$$

零级近似波函数

$$\psi^{(0)}(\vec{r})=Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

得到一级散射振幅$f^{(1)}(\Omega)$。一级近似波函数

$$\psi^{(1)}(\vec{r})=\psi^{(0)}(\vec{r})+\int d^3\vec{r}'\psi^{(0)}(\vec{r}')U(\vec{r}')G_0(\vec{r}-\vec{r}')$$

得到二级散射振幅$f^{(2)}(\Omega)$。二级近似波函数

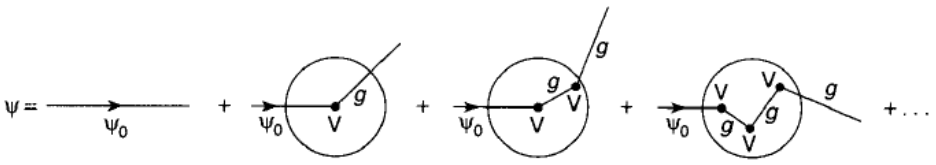
$$\psi^{(2)}(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}'\psi^{(1)}(\vec{r}')U(\vec{r}')G_0(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$= \psi^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}'\psi^{(0)}(\vec{r}')U(\vec{r}')G_0(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$+ \int d^3\vec{r}'d^3\vec{r}"\psi^{(0)}(\vec{r}')U(\vec{r}')G_0(\vec{r}"-\vec{r}')U(\vec{r}")G_0(\vec{r}-\vec{r}")$$

得到三级散射振幅$f^{(3)}(\Omega)$。

上面级数展开可以用下面的图形来表示，



表明：*Green* 函数方法的思想是把连续的相互作用变成分离的点相互作用之和。

Green 函数是传播两点之间相互作用的函数。

4.7 *Lippmann—Schwinger* 方程

不进入表象讨论以上积分方程。

（1）*Lippmann—Schwinger* 方程

定态方程

$$\hat{H}|\psi\rangle = \left(\hat{H}^{(0)} + \hat{V}\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\left(E - \hat{H}^{(0)}\right)|\psi\rangle = \hat{V}|\psi\rangle$$

用算符$\left(E - \hat{H}^{(0)}\right)^{-1}$作用两边，满足散射问题的边界条件

$$\lim_{V\to 0}|\psi\rangle = |\vec{k}\rangle$$

的形式解是

$$|\psi\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}^{(0)}}\hat{V}|\psi\rangle$$

尝试将能量扩展到复平面$E \to E \pm i\eta$，把形式解写成

$$|\psi^{\pm}\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}^{(0)} \pm i\eta}\hat{V}|\psi^{\pm}\rangle$$

称为 *Lippmann—Schwinger* 方程。

为了看出方程的意义，进入坐标表象，

$$\langle\vec{r}|\psi^{\pm}\rangle = \langle\vec{r}|\vec{k}\rangle + \int d^3\vec{r}'d^3\vec{r}''\langle\vec{r}|\frac{1}{E - \hat{H}^{(0)} \pm i\eta}|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\hat{V}|\vec{r}''\rangle\langle\vec{r}''|\psi^{\pm}\rangle$$

由

$$\langle\vec{r}'|\hat{V}|\vec{r}''\rangle = V(\vec{r}')\delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

有

$$\psi^{\pm}(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}'\langle\vec{r}|\frac{1}{E - \hat{H}^{(0)} \pm i\eta}|\vec{r}'\rangle V(\vec{r}')\psi^{\pm}(\vec{r}')$$

关键是求坐标表象的矩阵元

$$\langle\vec{r}|\frac{1}{E - \hat{H}^{(0)} \pm i\eta}|\vec{r}'\rangle = \int d^3\vec{p}'d^3\vec{p}''\langle\vec{r}|\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|\frac{1}{E - \hat{H}^{(0)} \pm i\eta}|\vec{p}''\rangle\langle\vec{p}''|\vec{r}'\rangle$$

由

$$\langle\vec{r}|\vec{p}'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}}, \qquad \langle\vec{p}''|\vec{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}''\cdot\vec{r}'}$$

$$\langle\vec{p}'|\frac{1}{E - \hat{H}^{(0)} \pm i\eta}|\vec{p}''\rangle = \frac{1}{E - E' \pm i\eta}\delta(\vec{p}' - \vec{p}''), \qquad E = \frac{p^2}{2m}, \qquad E' = \frac{p'^2}{2m}$$

有

$$\langle\vec{r}|\frac{1}{E - \hat{H}^{(0)} \pm i\eta}|\vec{r}'\rangle = \int \frac{d^3\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{E - E' \pm i\eta} = \int \frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{E - E' \pm i\eta}$$

与推迟和超前 *Green* 函数

$$G_0^{\pm}(\vec{r} - \vec{r}') = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{(k \pm i\epsilon)^2 - k'^2} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2 - k'^2 \pm 2ik\epsilon}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{E-E'\pm i\eta}$$

相比，有

$$\langle\vec{r}|\frac{1}{E-\hat{H}^{(0)}\pm i\eta}|\vec{r}'\rangle = \frac{2m}{\hbar^2}G_0^{\pm}(\vec{r}-\vec{r}')$$

则在坐标表象的 *Lippmann-Schwinger* 方程为

$$\psi^{\pm}(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}'G_0^{\pm}(\vec{r}-\vec{r}')U(\vec{r}')\psi^{\pm}(\vec{r}')$$

正是我们前面得到的在坐标表象的积分方程。说明 *Lippmann-Schwinger* 方程是坐标表象积分方程的一般形式。

（2）*Dyson* 方程

由算符$\left(E-\hat{H}^{(0)}\pm i\eta\right)^{-1}$在坐标表象的矩阵元为 *Green* 函数，

$$\langle\vec{r}|\frac{1}{E-\hat{H}^{(0)}\pm i\eta}|\vec{r}'\rangle = \frac{2m}{\hbar^2}G_0^{\pm}(\vec{r}-\vec{r}')$$

定义相应的自由 *Green* 算符（与$\hat{H}^{(0)}$有关）和完全 *Green* 算符（与$\hat{H}$相关），

$$\hat{G}_0^{\pm} = \left[E-\hat{H}^{(0)}\pm i\eta\right]^{-1}$$

$$\hat{G}^{\pm} = \left[E-\hat{H}\pm i\eta\right]^{-1}$$

由

$$\left(E-\hat{H}\pm i\eta\right)\hat{G}^{\pm} = 1$$

$$\left(E-\hat{H}^{(0)}\pm i\eta\right)\hat{G}^{\pm} - V\hat{G}^{\pm} = 1$$

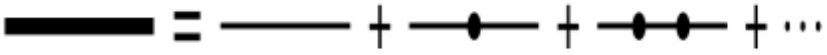
$$\left(\hat{G}_0^{\pm}\right)^{-1}\hat{G}^{\pm} - V\hat{G}^{\pm} = 1$$

两边用$\hat{G}_0^{\pm}$作用，有

$$\hat{G}^{\pm} = \hat{G}_0^{\pm} + \hat{G}_0^{\pm}V\hat{G}^{\pm}$$

称为 *Dyson* 方程，其迭代解

$$\hat{G}^{\pm} = \hat{G}_0^{\pm} + \hat{G}_0^{\pm} V \hat{G}_0^{\pm} + \hat{G}_0^{\pm} V \hat{G}_0^{\pm} V \hat{G}_0^{\pm} + \cdots$$



描述完全 *Green* 算符（完全传播子）如何由自由 *Green* 算符（自由传播子）和相互作用V构造，是量子力学，量子统计和量子场论微扰论的基本公式。

（3）光学定理

如何简单计算总的散射截面。

考虑势能算符$\hat{U}$在散射前后态的矩阵元

$$\langle \vec{k}' | \hat{U} | \psi \rangle = \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{r}'' \langle \vec{k}' | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{U} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \psi \rangle = \int d^3\vec{r}' \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')$$

故散射振幅

$$f(\Omega) = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}')\psi(\vec{r}') = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \langle \vec{k}' | \hat{U} | \psi \rangle$$

现在考虑向前散射振幅（$\theta = 0,\ \vec{k}' = \vec{k},\ f(0,\varphi)$）的虚部

$$\mathrm{Im} f(0,\varphi) = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \mathrm{Im} \langle \vec{k} | \hat{U} | \psi \rangle$$

由 *Lippmann—Schwinger* 方程

$$|\psi^{\pm}\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}^{(0)} \pm i\eta} \hat{V} |\psi^{\pm}\rangle$$

取$|\psi\rangle = |\psi^{+}\rangle$，有

$$\langle \vec{k}| = \langle \psi| - \langle \psi| \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}^{(0)} - i\eta}$$

右乘$\hat{V}|\psi\rangle$，

$$\langle \vec{k} | \hat{V} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}^{(0)} - i\eta} \hat{V} | \psi \rangle$$

利用柯西公式

$$\frac{1}{E-\hat{H}^{(0)}-i\eta}=\mathrm{Pr.}\frac{1}{E-\hat{H}^{(0)}}+i\pi\delta\left(E-\hat{H}^{(0)}\right)$$

并注意到$\hat{V}$和$\hat{V}\left(\mathrm{Pr.}\frac{1}{E-\hat{H}^{(0)}}\right)\hat{V}$都是厄米算符，其平均值为实数，有

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\langle\vec{k}|\hat{V}|\psi\rangle&=-\pi\langle\psi|\hat{V}\delta\left(E-\hat{H}^{(0)}\right)\hat{V}|\psi\rangle\\&=-\pi\int d^3\vec{k}'\,\langle\psi|\hat{V}|\vec{k}'\rangle\langle\vec{k}'|\delta\left(E-\hat{H}^{(0)}\right)\hat{V}|\psi\rangle\\&=-\pi\int d^3\vec{k}'\,\left|\langle\vec{k}'|\hat{V}|\psi\rangle\right|^2\delta\left(E-\frac{\hbar^2k'^2}{2m}\right)\\&=-\frac{\pi\hbar^2}{2m}\int d\Omega'\,dk'k'^2\left|\langle\vec{k}'|\hat{V}|\psi\rangle\right|^2\delta(k^2-k'^2)\\&=-\frac{\pi k\hbar^2}{4m}\int d\Omega'\left|\langle\vec{k}'|\hat{V}|\psi\rangle\right|^2\end{aligned}$$

利用

$$f(\Omega)=-\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\langle\vec{k}'|\hat{U}|\psi\rangle$$

有

$$\mathrm{Im}\langle\vec{k}|\hat{V}|\psi\rangle=-\frac{\hbar^2k}{4^2\pi^3m}\int d\Omega\,|f(\Omega)|^2=-\frac{\hbar^2k}{4^2\pi^3m}\int d\Omega\,\sigma(\Omega)=-\frac{\hbar^2k}{4^2\pi^3m}\sigma_{tot}$$

故向前散射振幅的虚部

$$\mathrm{Im}f(0,\varphi)=-\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\mathrm{Im}\langle\vec{k}|\hat{U}|\psi\rangle=\frac{k}{4\pi}\sigma_{tot}$$

这就是光学定理，描述向前散射振幅与总截面的关系。

4.8 分波法

通过守恒力学量分析求散射问题。散射前后守恒力学量的量子数不变。

（1）思想

无相互作用的入射平面波Ae^{ikz}是能量算符$\hat{H}_0=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$，动量算符$\hat{\vec{p}}=\hat{p}_z\vec{e}_z$和角动量分量算符$\hat{L}_z$的本征态，本征值为$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$，$p_z=\hbar k$，$L_z=m\hbar=0$）。

有相互作用时，在中心场中H_0和L_z守恒，$\vec{p}$不守恒，但角动量L^2守恒。

分波法：将不守恒力学量$\hat{\vec{p}}$的本征态Ae^{ikz}按照守恒力学量$\hat{L}^2$的本征态$Y_{lm}(\theta,\varphi)$中$m=0$的部分$Y_{l0}(\theta)\sim P_l(cos\theta)$进行展开（分波$l$展开。注意：$L_z=0$导致波函数与方位角φ无关）。将不守恒力学量本征态的散射变成守恒力学量本征态的散射之和。

（2）标准渐进解的分波展开

入射平面波的分波展开

$$e^{ikz}=e^{ikrcos\theta}=\sum_l(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(cos\theta)$$

利用球 *Bessel* 函数的渐进形式

$$j_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)$$

标准渐进解的分波展开形式为

$$\begin{aligned}\lim_{r\to\infty}\psi(\vec{r})&=Ae^{ikz}+Af(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\\&=A\sum_l\frac{(2l+1)i^l}{kr}sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)P_l(cos\theta)+Af(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\end{aligned}$$

下面求解 *Schroedinger* 方程，与上面分波形式的标准渐近解比较得到散射振幅。

（3）Schroedinger 方程的分波展开

中心场中 Schroedinger 方程满足H_0和L_z守恒（能量固定,角量子数$m=0$固定）的一般解

$$\psi(r,\theta)=\sum_l B_l R_l(r)P_l(cos\theta)$$

$R_l(r)$满足径向方程

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR_l)+\left(k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)(rR_l)=0$$

当$r\to\infty$时，$V(r)\to 0$，径向方程为

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR_l)+k^2(rR_l)=0$$

$$R_l(r\to\infty)=\frac{C_l}{kr}sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right)$$

两个待定常数C_l和δ_l，与具体中心场$V(r)$有关。为了方便与标准渐进解相比较，故意增加了$-\frac{l}{2}\pi$项。故渐进解可以表示为

$$\lim_{r\to\infty}\psi(r,\theta)=A\sum_l A_l\frac{(2l+1)i^l}{kr}sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right)P_l(cos\theta)$$

为了与标准渐进解相比较，已令$B_lC_l=AA_l(2l+1)i^l$。与标准渐进解比较，有

$$A\sum_l\frac{(2l+1)i^l}{kr}sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)P_l(cos\theta)+Af(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

$$=A\sum_l A_l\frac{(2l+1)i^l}{kr}sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right)P_l(cos\theta)$$

利用

$$sin\,x=\frac{e^{ix}-e^{-ix}}{2i}$$

有

$$\left[2kif(\theta)+\sum_l(2l+1)i^l e^{-i\frac{l}{2}\pi}\left(1-A_l e^{i\delta_l}\right)P_l(cos\theta)\right]e^{ikr}$$
$$-\left[\sum_l(2l+1)i^l e^{i\frac{l}{2}\pi}\left(1-A_l e^{-i\delta_l}\right)P_l(cos\theta)\right]e^{-ikr}=0$$

径向依赖性体现在两个指数函数中。考虑到向外和向内传播的球面波e^{ikr}和e^{-ikr}的独立性，有如下两个独立的方程，

$$2kif(\theta)+\sum_l(2l+1)i^l e^{-i\frac{l}{2}\pi}\left(1-A_l e^{i\delta_l}\right)P_l(cos\theta)=0$$

$$\sum_l(2l+1)i^l e^{i\frac{l}{2}\pi}\left(1-A_l e^{-i\delta_l}\right)P_l(cos\theta)=0$$

第二个方程的解为

$$A_l=e^{i\delta_l}$$

代入第一个方程，有

$$f(\theta)=\sum_l\frac{1}{k}(2l+1)P_l(cos\theta)e^{i\delta_l}sin\delta_l$$

只与δ_l有关，而δ_l由求解具体势场对应的径向方程的渐进解决定。如果定义分波散射振幅

$$f_l(\theta)=\frac{1}{k}(2l+1)P_l(cos\theta)e^{i\delta_l}sin\delta_l$$

则总散射振幅是分波散射振幅之和

$$f(\theta)=\sum_l f_l(\theta)$$

微分散射截面

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\left|\sum_l f_l(\theta)\right|^2=\sum_{l,l'}f_l^*(\theta)f_{l'}(\theta)$$

总散射截面

$$\sigma_{tot}=\int\sigma(\theta)d\Omega=\sum_{l,l'}\int f_l^*(\theta)f_{l'}(\theta)d\Omega$$

$$=\sum_{l,l'}\int\frac{1}{k^2}(2l+1)(2l'+1)P_l(cos\theta)P_{l'}(cos\theta)e^{-i\delta_l}e^{i\delta_{l'}}sin\delta_l sin\delta_{l'}d\Omega$$

利用球谐函数的正交归一化，

$$\int P_l(cos\theta)P_{l'}(cos\theta)d\Omega=\frac{4\pi}{2l+1}\delta_{ll'}$$

有

$$\sigma_{tot}=\sum_l\frac{4\pi}{k^2}(2l+1)sin^2\delta_l$$

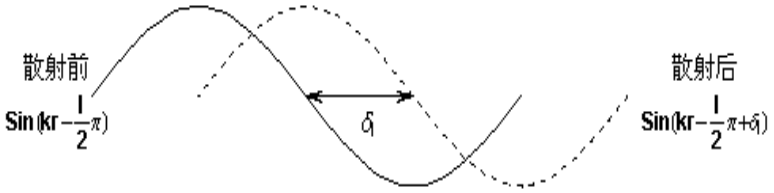
总结分波法：

■ 将$V(r)$代入径向方程，得到$R_l(r)$，

■ 将$R_l(r)$的渐进解与δ_l的定义即渐进解$\frac{C_l}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right)$相比得到$\delta_l$，$f_l(\theta)$，$f(\theta)$，$\sigma(\theta)$。

δ_l的物理意义：

散射前分波的径向波函数$\frac{1}{kr}sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)$，散射后分波的径向波函数$\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right)$，两者的相位之差为$\delta_l$。



可见，散射前后是同一分波（角动量L^2守恒），只是有一总体的相移δ_l。

（4）收敛性

分波求和收敛性的半经典估计：设势场$V(r)$的有效半经为a，动量为p的入射粒子的角动量$L<pa$才有散射，即$\sqrt{l(l+1)}\hbar<pa$，$\sqrt{l(l+1)}<ka$。当入射

能量$E(k)$低，可只取低次分波的贡献，例如s分波。

低能散射适合用分波法来处理。

（5）低能散射的形状无关近似

由不确定关系$\Delta x\cdot\Delta p\sim\hbar$ $(\Delta x\cdot\Delta k\sim 1)$，对于低能散射，$\Delta k$小，探测的区间$\Delta x$大，不能探测到小区间$V(r)$的细节，称为低能散射的形状无关近似。要看清楚物质结构的细节，就必须用高能散射实验。

因此，低能时我们关心的就是能看清楚多大半径的范围。低能时$k\to 0$，只考虑s分波。径向方程的渐进解

$$\frac{d^2(rR_0)}{dr^2}=0$$

$$R_0(r\to\infty)=\frac{b_0}{r}\left(1-\frac{r}{a_0}\right)$$

常数a_0，b_0由r有限时的径向方程的解确定。与标准渐进解（δ_0的定义）比较

$$\begin{aligned}\frac{b_0}{r}\left(1-\frac{r}{a_0}\right)&=\frac{c_0}{kr}sin(kr+\delta_0)\\&=\frac{c_0}{kr}sin\,\delta_0\,(\cos(kr)+ctg\delta_0\sin(kr))\\&\xrightarrow{k\to 0}\frac{c_0}{kr}sin\,\delta_0(1+krctg\delta_0)\end{aligned}$$

这里已经考虑了$k\to 0$比$r\to\infty$更快。故有

$$b_0=\frac{c_0}{k}sin\delta_0\qquad -\frac{1}{a_0}=kctg\delta_0$$

$$f_0(\theta)=\frac{1}{k}e^{i\delta_0}sin\delta_0P_0(cos\theta)=\frac{1}{k}e^{i\delta_0}sin\delta_0=-\frac{a_0}{1+ika_0}\to -a_0$$

$$\sigma_0(\theta)\approx a_0^2,\qquad \sigma_{tot}\approx 4\pi a_0^2$$

即低能散射类似于一个半径为a_0的经典硬球散射（经典散射截面是πa_0^2，差一个因子4）。a_0称为散射长度，比相移更物理的刻画了低能散射的范围。

例题 8：考虑低能粒子被球对称势阱

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases}$$

散射。

只考虑s分波的径向方程

$$\begin{cases}\dfrac{d^2}{dr^2}(rR_0)+(k^2+k_0^2)(rR_0)=0, & k_0^2=\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}, \quad r<a\\ \dfrac{d^2}{dr^2}(rR_0)+k^2(rR_0)=0, & r>a\end{cases}$$

$k\to 0$时的解

$$R_0(r)=\begin{cases}\dfrac{d_0}{k_0 r}sin(k_0 r+e_0) & r<a\\ \dfrac{b_0}{r}\left(1-\dfrac{r}{a_0}\right) & r>a\end{cases}$$

要求$r=0$时$R_0(r)$有限，有$e_0=0$，

$$R_0(r)=\begin{cases}\dfrac{d_0}{k_0 r}sin(k_0 r) & r<a\\ \dfrac{b_0}{r}\left(1-\dfrac{r}{a_0}\right) & r>a\end{cases}$$

要求$r=a$时$R_0(r)$，$\frac{dR_0(r)}{dr}$连续，有散射长度

$$a_0=-\frac{a(tank_0 a-k_0 a)}{k_0 a}$$

散射截面

$$\sigma_0(\theta)\approx a_0^2, \qquad \sigma_{tot}\approx 4\pi a_0^2$$

散射长度由势阱的深度V_0和宽度a控制，

- 如果势阱的深度V_0和宽度a满足$tank_0 a-k_0 a=0$，有$a_0=0$，低能时无散射。
- 如果势阱又深又宽，$k_0 a\gg 1$而 $tank_0 a$ 不大，$a_0=a$，散射为刚球散射。
- 如果势阱又浅又窄，$k_0 a\ll 1$，$tank_0 a=k_0 a+\frac{1}{3}(k_0 a)^3$。

4.9 相互作用绘景与微扰论

（1）相互作用绘景

先回顾 *Schroedinger* 绘景与 *Heisenberg* 绘景。

Schroedinger 绘景：态与时间有关，而力学量与时间无关

$$|\alpha,t\rangle_s=\hat{U}(t)|\alpha,0\rangle_s,\qquad \hat{O}_s,\qquad \hat{U}(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

动力学方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle_s=\hat{H}|\alpha,t\rangle_s$$

Heisenberg 绘景：态与时间无关，而力学量与时间有关

$$|\alpha\rangle_H,\qquad \hat{O}_H(t)=\hat{U}^+(t)\hat{O}_H(0)\hat{U}(t)$$

动力学方程

$$\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{O}_H(t),\hat{H}\right]$$

现在引入相互作用绘景。将$\hat{H}$分成两部分，

$$\hat{H}=\hat{H}^{(0)}+\hat{H}'$$

注意这里的$\hat{H}^{(0)}$并不一定是自由的部分。

相互作用绘景的定义是态

$$|\alpha,t\rangle_I=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}|\alpha,t\rangle_s$$

由于任意力学量$\hat{O}$在相互作用绘景的平均值与 *Schroedinger* 绘景的平均值应该相同，

$${}_s\langle\alpha,t|\hat{O}_S|\alpha,t\rangle_S={}_I\langle\alpha,t|\hat{O}_I|\alpha,t\rangle_I={}_s\langle\alpha,t|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{O}_Ie^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}|\alpha,t\rangle_s$$

有

$$\hat{O}_s=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{O}_Ie^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t},\qquad \hat{O}_I(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{O}_se^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}$$

显然，有

$$\hat{H}_I^{(0)}=\hat{H}_s^{(0)}=\hat{H}^{(0)}$$

相互作用绘景中态和力学量都与时间有关。态的运动方程

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle_I &= -\hat{H}^{(0)}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}|\alpha,t\rangle_s + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle_s \\ &= -e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{H}^{(0)}|\alpha,t\rangle_s + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{H}_s|\alpha,t\rangle_s \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{H}'_s|\alpha,t\rangle_s \qquad (\hat{H}_s = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}_s^{(I)}) \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{H}'_I e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}|\alpha,t\rangle_s \\ &= \hat{H}'_I|\alpha,t\rangle_I \end{aligned}$$

力学量的运动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_I = -\hat{H}^{(0)}\hat{O}_I + \hat{O}_I\hat{H}^{(0)} = \left[\hat{O}_I,\hat{H}^{(0)}\right]$$

相互作用绘景中态和力学量都与时间有关。态演化的 *Schroedinger* 方程只与$\hat{H}'$有关，力学量演化的 *Heisenberg* 方程只与$\hat{H}^{(0)}$有关。

（2）微扰展开

设相互作用绘景中的态的时间演化

$$|\alpha,t\rangle_I = \hat{U}(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle_I$$

由相互作用绘景中的态的运动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle_I = \hat{H}'_I|\alpha,t\rangle_I$$

得到时间演化算符的运动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}'_I\hat{U}(t,t_0)$$

满足初始条件

$$\hat{U}(t_0,t_0) = 1$$

的形式解是积分方程

$$\hat{U}(t,t_0) = 1 + \frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}'_I(t_1)\hat{U}(t_1,t_0)$$

如果$\hat{H}'$相对于$\hat{H}^{(0)}$是一个微扰，则可以用迭代方法来求解积分方程。零级

近似（忽略$\hat{H}_I'$）

$$\hat{U}(t,t_0)=1$$

一级近似（考虑到$\hat{H}_I'$的线性项）

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_1\,\hat{H}_I'(t_1)$$

二级近似（考虑到$\hat{H}_I'$的平方项）

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_1\,\hat{H}_I'(t_1)+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\,\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)$$

由于

$$\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\,\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)$$

$$=\frac{1}{2!}\left(\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\,\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)+\int_{t_0}^{t}dt_2\int_{t_0}^{t_2}dt_1\,\hat{H}_I'(t_2)\hat{H}_I'(t_1)\right)\qquad t_1\leftrightarrow t_2$$

$$=\frac{1}{2!}\int_{t_0}^{t}dt_1dt_2\left(\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)\theta(t_1-t_2)+\hat{H}_I'(t_2)\hat{H}_I'(t_1)\theta(t_2-t_1)\right)$$

$$=\frac{1}{2!}\int_{t_0}^{t}dt_1dt_2\,T\left(\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)\right)$$

时序乘积的定义是

$$T\left(\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)\right)=\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)\theta(t_1-t_2)+\hat{H}_I'(t_2)\hat{H}_I'(t_1)\theta(t_2-t_1)$$

时间变量中，谁大谁在前头。

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_1\,\hat{H}_I'(t_1)+\frac{1}{2!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt_1dt_2\,T\left(\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)\right)$$

以此类推，时间演化算符的解可以写成

$$\hat{U}(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\cdots\cdots dt_n\,T\left(\hat{H}_I'(t_1)\cdots\cdots\hat{H}_I'(t_n)\right)$$

例如，时序乘积

$$\begin{aligned}T\left(\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)\hat{H}_I'(t_3)\right)=&\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)\hat{H}_I'(t_3)\theta(t_1-t_2)\theta(t_2-t_3)\\&+\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_3)\hat{H}_I'(t_2)\theta(t_1-t_3)\theta(t_3-t_2)\\&+\hat{H}_I'(t_2)\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_3)\theta(t_2-t_1)\theta(t_1-t_3)\\&+\hat{H}_I'(t_2)\hat{H}_I'(t_3)\hat{H}_I'(t_1)\theta(t_2-t_3)\theta(t_3-t_1)\\&+\hat{H}_I'(t_3)\hat{H}_I'(t_1)\hat{H}_I'(t_2)\theta(t_3-t_1)\theta(t_1-t_2)\\&+\hat{H}_I'(t_3)\hat{H}_I'(t_2)\hat{H}_I'(t_1)\theta(t_3-t_2)\theta(t_2-t_1)\end{aligned}$$

这就是在相互作用绘景中态的演化算符的微扰展开。

4.10 含时微扰论

设体系的哈密顿量

$$\hat{H}=\begin{cases}\hat{H}^{(0)}, & t\le t_0 \qquad \hat{H}^{(0)}|m\rangle=\varepsilon_m|m\rangle,\\ \hat{H}^{(0)}+\hat{H}'(t), & t>t_0 \qquad i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\left(\hat{H}^{(0)}+\hat{H}'(t)\right)|\psi(t)\rangle,\end{cases}$$

问题：系统在$t=t_0$时$\hat{H}=\hat{H}^{(0)}$不含时，处于定态$|n\rangle$。当$t>t_0$时，加入了一个微扰，$\hat{H}(t)=\hat{H}^{(0)}+\hat{H}'(t)$含时，系统处于态$|\psi(t)\rangle$，一般不再处于定态$|n\rangle$，由$\hat{H}^{(0)}$的完备性条件，

$$|\psi(t)\rangle=\sum_m a_m(t)|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}$$

处于定态$|m\rangle$的几率为$|a_m(t)|^2$。

对于含时微扰问题，就是要求系统受到含时微扰后从初始定态$|n\rangle$跃迁到另一个定态$|m\rangle$的跃迁几率$|a_m(t)|^2$。

（1）跃迁方程

将$|\psi(t)\rangle$的展开式代入$t>t_0$时的 *Schroedinger* 方程：

$$i\hbar\sum_m \dot{a}_m|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}+\sum_m a_m\varepsilon_m|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}$$

$$=\sum_m a_m\hat{H}^{(0)}|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}+\sum_m a_m\hat{H}'(t)|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}$$

左边第二项与右边第一项消去。

左乘$\hat{H}^{(0)}$的本征态$\langle k|$，利用正交归一化$\langle k|m\rangle=\delta_{km}$，有

$$i\hbar\dot{a}_k e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t}=\sum_m a_m H'_{km}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}$$

其中H'_{km}是含时微扰在$H^{(0)}$表象的矩阵元

$$H'_{km}(t)=\langle k|\hat{H}'(t)|m\rangle$$

$$\begin{cases} i\hbar\dot{a}_k = \sum_m a_m H'_{km}(t) e^{i\omega_{km}t}, & \omega_{km} = \dfrac{\varepsilon_k - \varepsilon_m}{\hbar} \\ \text{初始条件} a_k(t_0) = \delta_{kn} \end{cases}$$

（2）微扰求解

$$a_k(t) = a_k^{(0)}(t) + a_k^{(1)}(t) + \cdots$$

代入跃迁方程，得

$$i\hbar\left(\dot{a}_k^{(0)}(t) + \dot{a}_k^{(1)}(t) + \cdots\right) = \sum_m \left(a_m^{(0)}(t) + a_m^{(1)}(t) + \cdots\right) H'_{km}(t) e^{i\omega_{km}t}$$

零级方程（忽略微扰$\hat{H}'$）

$$\begin{cases} i\hbar\dot{a}_k^{(0)}(t) = 0 \\ \text{初始条件 } a_k^{(0)}(t_0) = \delta_{kn} \end{cases}$$

$$a_k^{(0)}(t) = \delta_{kn}$$

表明保持在定态$|n\rangle$，无跃迁。

一级方程（保留$\hat{H}'$的线性项）

$$i\hbar\dot{a}_k^{(1)}(t) = \sum_m a_m^{(0)}(t) H'_{km}(t) e^{i\omega_{km}t} = H'_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t}$$

$$a_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} H'_{kn}(t') e^{i\omega_{kn}t'} dt'$$

近似到一级，由$|n\rangle$跃迁到$|k\rangle$的跃迁几率为$\left|a_k^{(1)}(t)\right|^2$。

下面举例说明几种特殊的含时微扰引起的跃迁。

（3）脉冲微扰

微扰只在某一个瞬间存在。

例题：$t = 0$时氢原子处于基态$|nlm\rangle = |100\rangle$，在$t = 0^+$时受到脉冲电场的微扰

$$\hat{H}'(t) = e\epsilon_0 \hat{z}\delta(t - 0^+)$$

求跃迁到所有激发态的几率。

时间t从基态$|100\rangle$跃迁到激发态$|nlm\rangle$的一级跃迁几率幅

$$a_{nlm}^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{nlm,100}(t')e^{i\omega_{nlm,100}t'}dt'$$
$$=\frac{e\epsilon_0 z_{nlm,100}}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{nlm,100}t'}\delta(t'-0^+)dt'$$
$$=\frac{e\epsilon_0 z_{nlm,100}}{i\hbar},$$
$$z_{nlm,100}=\langle nlm|\hat{z}|100\rangle$$

跃迁到所有激发态的几率为

$$\sum_{nlm}{}'\left|a_{nlm}^{(1)}(t)\right|^2=\sum_{nlm}{}'\left(\frac{e\epsilon_0}{\hbar}\right)^2|\langle nlm|\hat{z}|100\rangle|^2$$

其中$\sum'_{nlm}$表示求和不含基态$|100\rangle$。

在坐标表象计算矩阵元

$$\langle nlm|\hat{z}|100\rangle=\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{r}'\langle nlm|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\hat{z}|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|100\rangle$$
$$=\int d^3\vec{r}d^3\vec{r}'R_n^*(r)Y_{lm}^*(\theta,\varphi)rcos\theta\delta(\vec{r}-\vec{r}')R_1(r')Y_{00}(\theta',\varphi')$$
$$=\int d^3\vec{r}rR_n^*(r)R_1(r)Y_{lm}^*(\theta,\varphi)cos\theta Y_{00}(\theta,\varphi)$$

因为

$$cos\theta Y_{00}(\theta,\varphi)\sim Y_{10}(\theta,\varphi)$$

考虑到球谐函数的正交归一化，矩阵元

$$\langle 100|\hat{z}|100\rangle=0$$

故从基态$|100\rangle$跃迁到所有激发态的几率为

$$\sum_{nlm}{}' \left|a_{nlm}^{(1)}(t)\right|^2 = \sum_{nlm} \left|a_{nlm}^{(1)}(t)\right|^2 = \sum_{nlm} \left(\frac{e\epsilon_0}{\hbar}\right)^2 |\langle nlm|\hat{z}|100\rangle|^2$$
$$= \left(\frac{e\epsilon_0}{\hbar}\right)^2 \sum_{nlm} \langle 100|\hat{z}|nlm\rangle\langle nlm|\hat{z}|100\rangle = \left(\frac{e\epsilon_0}{\hbar}\right)^2 \langle 100|\hat{z}^2|100\rangle$$

因为

$$\langle 100|\hat{z}^2|100\rangle = a_0^2$$

其中a_0为 *Bohr* 半径，所以从基态$|100\rangle$跃迁到所有激发态的几率为

$$\left(\frac{e\epsilon_0 a_0}{\hbar}\right)^2$$

氢原子仍处在基态的几率为

$$1 - \left(\frac{e\epsilon_0 a_0}{\hbar}\right)^2$$

（4）绝热近似微扰

加入微扰的时间充分长，非常缓慢的加入微扰。

$$\hat{H}'(t) = \hat{F}e^{\frac{t}{\tau}}, \qquad -\infty \le t \le 0$$

其中算符$\hat{F}$不含时，τ为一常数。系统在初始时间$t = -\infty$时$\hat{H}'(-\infty) = 0$，慢慢增加微扰，到最后$t = 0$ 时$\hat{H}'(0) = \hat{F}$。常数τ控制微扰加入的缓慢程度。

最后从态$|n\rangle$跃迁到$|m\rangle$的一级跃迁几率幅

$$a_m^{(1)}(0) = \frac{F_{mn}}{i\hbar}\int_{-\infty}^{0} e^{\frac{t}{\tau}+i\omega_{mn}t}dt = \frac{F_{mn}}{i\hbar(1/\tau + i\omega_{mn})} \qquad F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle$$

当$\tau \to \infty$时，即极其缓慢加入微扰时，

$$a_m^{(1)}(0) = \frac{F_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}$$

（5）常微扰

微扰加入后就不随时间变化，是个常数。

设微扰在$t=0^+$时加入，

$$\hat{H}'(t)=\hat{F}$$

从态$|n\rangle$跃迁到$|m\rangle$的一级跃迁几率幅

$$a_m^{(1)}(t)=\frac{F_{mn}}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{mn}t'}dt'=-\frac{F_{mn}\left(e^{i\omega_{mn}t}-1\right)}{\hbar\omega_{mn}}$$

跃迁几率为

$$\left|a_m^{(1)}(t)\right|^2=2\frac{|F_{mn}|^2}{\hbar^2\omega_{mn}^2}(1-cos\omega_{mn}t)=\frac{|F_{mn}|^2}{\hbar^2}\frac{sin^2\left(\frac{\omega_{mn}t}{2}\right)}{\left(\frac{\omega_{mn}}{2}\right)^2}$$

利用

$$\lim_{t\to\infty}\frac{sin^2xt}{\pi tx^2}=\delta(x),\qquad \delta(ax)=\frac{1}{a}\delta(x)$$

有

$$\lim_{t\to\infty}\left|a_m^{(1)}(t)\right|^2=2\pi t\frac{|F_{mn}|^2}{\hbar^2}\delta(\omega_{mn})=2\pi t\frac{|F_{mn}|^2}{\hbar}\delta(\varepsilon_m-\varepsilon_n)$$

跃迁速率为

$$\frac{d}{dt}\lim_{t\to\infty}\left|a_m^{(1)}(t)\right|^2=2\pi\frac{|F_{mn}|^2}{\hbar}\delta(\varepsilon_m-\varepsilon_n)$$

对于常微扰，经过足够长时间后，跃迁速率为一常数，跃迁过程能量守恒。如果$\hat{H}^{(0)}$不简并，能量守恒意味着体系维持在原态$|n\rangle$。如果$\hat{H}^{(0)}$有简并，能量守恒并不意味着初末态相等，可以在$\hat{H}^{(0)}$的简并子空间发生跃迁。例如弹性散射问题中$\varepsilon_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$，从平面波到球面波的散射就是跃迁，保持能量守恒。

如果考虑连续能谱，从初态$|n\rangle$跃迁到态密度为$\rho(\varepsilon_m)$的连续末态$|m\rangle$的速率密度是

$$2\pi\frac{|F_{mn}|^2}{\hbar}\rho(\varepsilon_m)\delta(\varepsilon_m-\varepsilon_n)$$

称为费米黄金规则。

（6）周期性微扰

微扰加入后一直存在，且随时间振荡。

设微扰在$t=0^+$时加入，

$$\hat{H}'(t)=\hat{F}cos\omega t=\frac{\hat{F}}{2}\left(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}\right)$$

一级跃迁振幅为

$$a_m^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mn}(t')e^{i\omega_{mn}t'}dt'$$

$$=\frac{F_{mn}}{2i\hbar}\int_0^t\left(e^{i(\omega_{mn}+\omega)t'}+e^{i(\omega_{mn}-\omega)t'}\right)dt'$$

其中ω_{mn}为跃迁频率，ω为外场频率。积分得

$$a_m^{(1)}(t)=-\frac{F_{mn}}{2\hbar}\left(\frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t}-1}{\omega_{mn}+\omega}+\frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}-1}{\omega_{mn}-\omega}\right)$$

当$\omega\neq\pm\omega_{mn}$时，$a_m^{(1)}(t)$是t的震荡函数，不随时间t单调增长，跃迁几率不大。

但当$\omega\to\pm\omega_{mn}$时，

$$a_m^{(1)}(t)=-\frac{F_{mn}}{2\hbar}\frac{e^{i(\omega_{mn}\mp\omega)t}-1}{\omega_{mn}\mp\omega}$$

由初始的$|n\rangle$跃迁到$|m\rangle$的几率为

$$\left|a_m^{(1)}(t)\right|^2=\frac{|F_{mn}|^2}{\hbar^2}\frac{sin^2\left((\omega_{mn}\mp\omega)\frac{t}{2}\right)}{(\omega_{mn}\mp\omega)^2}$$

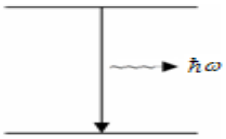
利用

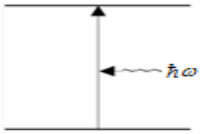
$$\lim_{t\to\infty}\frac{sin^2xt}{\pi tx^2}=\delta(x),\qquad\delta(ax)=\frac{1}{a}\delta(x)$$

有

$$\lim_{t\to\infty}\left|a_m^{(1)}(t)\right|^2=\pi t\frac{|F_{mn}|^2}{2\hbar^2}\delta(\omega_{mn}\mp\omega)=\pi t\frac{|F_{mn}|^2}{2\hbar}\delta(\varepsilon_m-\varepsilon_n\mp\hbar\omega)$$

随着t线性增长。其中δ函数意味着能量守恒，





跃迁速率为

$$\frac{d\left|a_m^{(1)}(t)\right|^2}{dt}=\pi\frac{|F_{mn}|^2}{2\hbar^2}\delta(\omega_{mn}\mp\omega)$$

设微扰频率范围为$\Delta\omega$，跃迁速率

$$\frac{d\left|a_m^{(1)}(t)\right|^2}{dt}=\begin{cases}\pi\dfrac{|F_{mn}|^2}{2\hbar^2} & \text{如果}\Delta\omega\text{包含}\omega_{mn}\\ 0 & \text{如果}\Delta\omega\text{不包含}\omega_{mn}\end{cases}$$

（7）含时微扰与定态微扰的关系

考虑无简并体系。

定态微扰论：

$$\hat{H}=\hat{H}^{(0)}+\hat{H}'$$

$\hat{H}^{(0)}$与$\hat{H}'$同时存在，无微扰的加入过程。至一级修正的态

$$|\psi(t)\rangle=\left(|n\rangle+\sum_{m\neq n}\frac{H'_{mn}}{\varepsilon_n-\varepsilon_m}|m\rangle\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}$$

含时微扰论：

有微扰加入的过程。设时间变量为t'，观测时间为t。微扰在$t'=0^+$时加入，影响观测的微扰为

$$\hat{H}'(t')=\begin{cases}\hat{H}', & 0<t'\le t\\ 0, & \text{其它}\end{cases}$$

$$=\hat{H}'[\Theta(t')-\Theta(t'-t)]$$

至一级修正的态

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m a_m(t)|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}$$
$$= \sum_m \left(a_m^{(0)}(t) + a_m^{(1)}(t)\right)|m\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}$$
$$= |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t} + \sum_{m\neq n} a_m^{(1)}(t)|m\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}$$
$$a_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mn}(t')e^{i\omega_{mn}t'}dt'$$

注意：对于无简并情形，$a_n^{(0)}(t) = 1$，有$a_n^{(1)}(t) = 0$。

将$a_m^{(1)}(t)$分部积分，并利用

$$\frac{d\Theta(x-a)}{dx} = \delta(x-a)$$

有

$$a_m^{(1)}(t) = -\frac{1}{\hbar\omega_{mn}}\int_0^t H'_{mn}(t')de^{i\omega_{mn}t'}$$
$$= -\frac{1}{\hbar\omega_{mn}}\left(H'_{mn}(t')e^{i\omega_{mn}t'}\right)_0^t + \frac{1}{\hbar\omega_{mn}}\int_0^t \frac{\partial H'_{mn}(t')}{\partial t'}e^{i\omega_{mn}t'}dt'$$
$$= -\frac{1}{\hbar\omega_{mn}}H'_{mn}e^{i\omega_{mn}t} + \frac{H'_{mn}}{\hbar\omega_{mn}}\int_0^t [\delta(t') - \delta(t'-t)]e^{i\omega_{mn}t'}dt'$$
$$= -\frac{1}{\hbar\omega_{mn}}H'_{mn}e^{i\omega_{mn}t} + \frac{H'_{mn}}{\hbar\omega_{mn}}\left(1 - e^{i\omega_{mn}t}\right)$$

这里用到了微扰在0^+时引入，$\widehat{H}'(0) = 0$的条件。

代入含时微扰论中至一级修正的态

$$|\psi(t)\rangle = |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t} + \sum_{m\neq n} a_m^{(1)}(t)|m\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}$$
$$= \left[|n\rangle + \sum_{m\neq n}\frac{H'_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}|m\rangle\right]e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t} + \sum_{m\neq n}\left[\frac{H'_{mn}}{\hbar\omega_{mn}}\left(1 - e^{i\omega_{mn}t}\right)\right]|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_m t}$$

第一部分的系数与时间无关，就是定态微扰论的结果（不考虑微扰的加入过程）。

第二部分的系数与时间相关，就是前面计算的常微扰的跃迁几率幅（考虑微扰加入的时间依赖性）。

定态微扰论只是一种近似，任何微扰的加入都有一个过程。

第 5 章：对称性

对称是什么？不变，有些性质不可观察。例如具有中心对称性的体系，通过能量E_n观察不到角分布$Y_{lm}(\theta,\varphi)$。

为什么研究对称性？一是对体系的约束，例如全同粒子体系的波函数要满足交换对称性。二是化简计算，例如由对称性得到跃迁选择定则。

对称性是一个体系最重要的性质。

5.1 对称、守恒与简并

5.1.1 分析力学中的对称性与守恒量

体系的性质由 Lagrangian 量$\mathcal{L}$控制。

$\mathcal{L}(q,\dot{q})$，广义坐标q，广义速度$\dot{q}$。如果对q进行空间平移变换，

$$q \rightarrow q+\delta q$$

$\mathcal{L}$保持不变（例如当$\mathcal{L}$不含q），

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q}=0$$

称变换为对称变换，体系有空间平移不变性。

由 *Lagrangian* 方程

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}\right)-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q}=0$$

空间平移不变导致

$$p=\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}=const.$$

说明：空间平移不变性导致动量守恒。

5.1.2 量子力学中的对称性与守恒量

体系的性质由 *Hamiltonian* 量$\hat{H}$控制。

对哈密顿量进行变换$\hat{T}$：

$$\hat{H}\rightarrow \hat{T}^{\dagger}\hat{H}\hat{T}$$

如果$\hat{H}$在变换$\hat{T}$保持不变，

$$\hat{T}^{\dagger}\hat{H}\hat{T}=\hat{H}$$

称$\hat{T}$为对称变换，或者体系具有对称性T。

考虑幺正变换$\hat{U}$，$\hat{U}^{\dagger}=\hat{U}^{-1}$，有

$$\hat{U}^{\dagger}\hat{H}\hat{U}=\hat{H},\qquad \hat{U}\hat{U}^{\dagger}\hat{H}\hat{U}=\hat{U}\hat{H},\qquad \hat{H}\hat{U}=\hat{U}\hat{H},\qquad [\hat{U},\hat{H}]=0$$

如果幺正变换算符$\hat{U}$又是厄米算符$(\hat{U}^{\dagger}=\hat{U})$，由 *Heisenberg* 运动方程

$$\frac{d\hat{U}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{U},\hat{H}]=0$$

$\hat{U}$为守恒力学量，且$\hat{U}$和$\hat{H}$有共同本征态。

如果$\hat{U}$本身不是厄米算符，而是由厄米算符$\hat{G}$生成，

$$\hat{U}=1-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{G}$$

$$[\hat{U},\hat{H}]=0,\qquad [\hat{G},\hat{H}]=0,\qquad \frac{d\hat{G}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{G},\hat{H}]=0$$

$\hat{G}$为守恒力学量。

说明：*Hamiltonian* 量在幺正变换下的不变性导致守恒力学量（变换算符本身或者变换的生成元）。

■自由粒子体系，

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^{2}}{2m}$$

在空间平移变换（动量$\hat{\vec{p}}$为生成元）

$$\hat{U}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot d\vec{x}}=1-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot d\vec{x}$$

时具有不变性，$[\hat{U},\hat{H}]=0\ \rightarrow\ [\hat{p},\hat{H}]=0$，$\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}=0$，动量守恒。

■一般体系，

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^{2}}{2m}+V(\vec{r})$$

没有空间平移变换不变性，$[\hat{U},\hat{H}]\neq 0\ \rightarrow\ [\hat{p},\hat{H}]\neq 0$，$\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}=0$，动量不守恒。

■中心场，

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+V(r)$$

在空间旋转变换（角动量$\hat{\vec{L}}$为生成元）

$$\hat{U}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{L}}\cdot d\varphi\vec{e}_n}=1-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{L}}\cdot\vec{e}_n d\varphi$$

时具有不变性，$[\hat{U},\hat{H}]=0\ \rightarrow\ \left[\hat{\vec{L}},\hat{H}\right]=0,\quad \left[\hat{\vec{L}}^2,\hat{H}\right]=0$，轨道角动量平方与任意分量都守恒，$\frac{d\hat{\vec{L}}^2}{dt}=0,\ \frac{d\hat{\vec{L}}}{dt}=0$。

5.1.3 守恒量的性质

■守恒力学量$\hat{U}(\hat{G})$在任意态的平均值与时间无关

在 *Heisenberg* 绘景，

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{U}|\psi\rangle=\left\langle\psi\left|\frac{d\hat{U}}{dt}\right|\psi\right\rangle=0。$$

由于平均值与绘景无关，这个结论是一般的，在其它绘景也存立。

■守恒力学量$\hat{U}(\hat{G})$在任意态的取值几率与时间无关

守恒力学量与$\hat{H}$对易，

$$[\hat{U},\hat{H}]=0$$

$\hat{U},\hat{H}$有共同本征态$|a\rangle$,

$$\hat{U}|a\rangle=u_a|a\rangle,\qquad \hat{H}|a\rangle=\varepsilon_a|a\rangle$$

在 *Schroedinger* 绘景的任意态

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n c_a(t)|a\rangle,$$

$c_a(t)$是$\hat{U}$在态$|\psi(t)\rangle$取值为u_a的几率幅。

$$c_a=\langle a|\psi\rangle$$

$$\frac{dc_a}{dt}=\left\langle a\left|\frac{\partial}{\partial t}\right|\psi\right\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle a|\hat{H}|\psi\rangle=\frac{\varepsilon_a}{i\hbar}c_a$$

$$c_a(t)=c_a(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_a t}$$

故力学量$\hat{U}$在态$|\psi(t)\rangle$取值为u_a的几率

$$|c_a(t)|^2 = |c_a(0)|^2 = const.$$

对于不守恒力学量，若体系初始时处于它的本征态，在演化以后一般不再处于该本征态。但对于守恒力学量，若体系初始时处于它的本征态，则演化以后还处于该本征态。故应该用守恒力学量的量子数（好量子数）来描述状态（这是用分波法求解中心场中散射问题的基础）。

5.1.4 简并

对于幺正对称变换$\hat{U}$对应的力学量$\hat{U}(\hat{G})$,

$$[\hat{U}, \hat{H}] = 0$$

有共同本征态$|a\rangle$。如果$\hat{U}$和$\hat{H}$是相互独立的，它们的本征值至少要用两个量子数来描述，其共同本征态可以写为$|a\rangle = |n, \lambda\rangle$,

$$\hat{H}|n, \lambda\rangle = \varepsilon_n |n, \lambda\rangle, \qquad \hat{U}|n, \lambda\rangle = u_\lambda |n, \lambda\rangle$$

表明$\hat{U}$和$\hat{H}$都是简并的。

注意：本征态的线性组合态$\sum_\lambda c_\lambda |n, \lambda\rangle$还是是$\hat{H}$的本征态，$\hat{H}$有确定的值$\varepsilon_n$，但$\hat{U}$不再有确定的值，态已经没有对称性$U$。这种体系的 *Hamiltonian* 量具有对称性，而态没有这种对称性（由于简并引起的），称为态的对称性自发破缺。

例如中心场问题

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

有空间旋转不变性，轨道角动量与任意分量守恒，$\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z$的共同本征态为$|nlm\rangle$，$\hat{H}$具有$n^2$重简并。态$|nlm\rangle$是旋转不变的，但是在这些本征态的线性组合态$\sum_{l,m} c_{lm} |nlm\rangle$已经没有空间旋转不变性，$\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z$已经没有确定值了，对称性已经自发破缺了。

5.2 空间反演不变与宇称守恒

空间平移，空间旋转和时间平移变换都是幺正变换$\hat{U}$，但本身不是厄米算

符，而是由厄米算符$\hat{G}=\hat{\vec{p}},\hat{\vec{L}},\hat{H}$生成。现在讨论是厄米算符的对称变换。

（在坐标表象）定义空间反演变换$\hat{I}$：

$$\text{算符：}\ \vec{r}\to\hat{I}^{\dagger}\vec{r}\hat{I}=-\vec{r},$$

$$\text{或者态：}\ \psi(\vec{r})\to\hat{I}\psi(\vec{r})=\psi(-\vec{r})$$

是空间突变（不是180°旋转），没有经典对应。

对于任意态$\psi(\vec{r})$和$\varphi(\vec{r})$，有

$$\int d^3\vec{r}\psi^*(\vec{r})\left(\hat{I}\varphi(\vec{r})\right)=\int d^3\vec{r}\psi^*(\vec{r})\varphi(-\vec{r})$$

$$=\int d^3\vec{r}\psi^*(-\vec{r})\varphi(\vec{r})=\int d^3\vec{r}\left(\hat{I}\psi^*(\vec{r})\right)\varphi(\vec{r})$$

宇称算符作用在右矢$\varphi(\vec{r})$和左矢$\psi^*(\vec{r})$上一致，说明$\hat{I}$为厄米算符$\hat{I}^{\dagger}=\hat{I}$，本身表示一力学量，称为宇称。因此，如果体系有空间反演不变性，$[\hat{I},\hat{H}]=0$，有宇称守恒，宇称$\hat{I}$与$\hat{H}$有共同本征态。

下面求宇称算符的本征值。由

$$\hat{I}\psi(\vec{r})=\psi(-\vec{r})$$

$$\hat{I}^2\psi(\vec{r})=\hat{I}\psi(-\vec{r})=\psi(\vec{r})$$

故$\hat{I}^2$的本征值为 1，宇称算符$\hat{I}$的本征值为±1。

当本征值$=1$，设本征态$\psi_s(\vec{r})$，本征方程$\hat{I}\psi_s(\vec{r})=\psi_s(\vec{r})=\psi_s(-\vec{r})$，称为对称态。

当本征值$=-1$，设本征态$\psi_a(\vec{r})$，本征方程$\hat{I}\psi_a(\vec{r})=-\psi_a(\vec{r})=\psi_a(-\vec{r})$，称为反对称态。

例如：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+V(r),$$

体系具有空间反演不变性

$$\hat{I}^{\dagger}\hat{H}\hat{I}=\hat{H},\qquad[\hat{I},\hat{H}]=0$$

宇称守恒。由于$[\hat{I},\hat{H}]=0$，在$\hat{H}$的本征态$|nlm\rangle$，$\hat{H}$的本征值ε_{nl}，问题是$|nlm\rangle$是

否是$\hat{I}$的本征态？$\hat{I}$的本征值？

例题：求在坐标$\hat{\vec{r}}$，动量$\hat{\vec{p}}$，和轨道角动量$\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}$的本征态的宇称。

■ $\hat{\vec{r}}$：$\hat{I}^{\dagger}\hat{\vec{r}}\hat{I}=-\hat{\vec{r}}$，　　$\left[\hat{I},\hat{\vec{r}}\right]\neq 0$

$\hat{I}$与$\hat{\vec{r}}$无共同本征态，在$\hat{\vec{r}}$的本征态无确定宇称。

■ $\hat{\vec{p}}=-i\hbar\vec{\nabla}$：　$\hat{I}^{\dagger}\hat{\vec{p}}\hat{I}=-\hat{\vec{p}}$，　　$\left[\hat{I},\hat{\vec{p}}\right]\neq 0$

$\hat{I}$与$\hat{\vec{p}}$无共同本征态，在$\hat{\vec{p}}$的本征态无确定宇称。

■ $\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}$：　$\hat{I}^{\dagger}\hat{\vec{L}}\hat{I}=\hat{I}^{\dagger}\hat{\vec{r}}\hat{I}\times\hat{I}^{\dagger}\hat{\vec{p}}\hat{I}=\left(-\hat{\vec{r}}\right)\times\left(-\hat{\vec{p}}\right)=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}=\hat{\vec{L}}$，　$\left[\hat{I},\hat{\vec{L}}\right]=0$

$$\hat{I}^{\dagger}\hat{\vec{L}}^{2}\hat{I}=\hat{I}^{\dagger}\hat{\vec{L}}\hat{I}\cdot\hat{I}^{\dagger}\hat{\vec{L}}\hat{I}=\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{L}}^{2},\qquad\left[\hat{I},\hat{\vec{L}}^{2}\right]=0$$

$\hat{I}$与$\hat{\vec{L}}^{2}$，$\hat{L}_z$有共同本征态。已知$\hat{\vec{L}}^{2}$，$\hat{L}_z$的共同本征态是球谐函数

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=N_{lm}P_l^{|m|}(cos\theta)e^{im\varphi}$$

$$P_l^{|m|}(cos\theta)=\frac{1}{2^l l!}(1-cos^2\theta)^{|m|/2}\left(\frac{d}{dcos\theta}\right)^{l+|m|}(cos^2\theta-1)^l$$

在$\hat{I}$变换下，$\vec{r}\to-\vec{r}$，在球坐标系，

$$r\to r,\qquad\theta\to\pi-\theta\ \ (cos\theta\to-cos\theta),\qquad\varphi\to\pi+\varphi$$

$$P_l^{|m|}(cos\theta)\to(-1)^{l+|m|}P_l^{|m|}(cos\theta),$$

$$e^{im\varphi}\to(-1)^m e^{im\varphi}=(-1)^{|m|}e^{im\varphi}$$

$$\hat{I}Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^{l+2|m|}Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^l Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

故$\hat{I}$与$\hat{\vec{L}}^{2}$，$\hat{L}_z$的共同本征态就是球谐函数$Y_{lm}(\theta,\varphi)$，$\hat{I}$的本征值为$I=(-1)^l$，由角动量量子数l决定。由于宇称变换不改变r，在中心场中$\hat{H}$和$\hat{I}$的共同本征态为$|nlm\rangle$，$\hat{I}$的本征值为$I=(-1)^l$。

例题：求在谐振子本征态的宇称。

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

$$\left[\hat{I},\hat{H}\right]=0$$

体系宇称守恒，$\hat{I},\hat{H}$有共同的本征态。谐振子基态

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

也是$\hat{I}$的本征态

$$\hat{I}\psi_0(x)=\psi_0(x)$$

宇称$I=1$。激发态

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{n}{2}}\left(x-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)^n\psi_0(x)$$

的宇称

$$\hat{I}\psi_n(x)=(-1)^n\psi_n(x)$$

宇称$I=(-1)^n$。

例题：宇称选择定则。

设有两个宇称本征态

$$\hat{I}|\alpha\rangle=I_\alpha|\alpha\rangle,\qquad \hat{I}|\beta\rangle=I_\beta|\beta\rangle$$

因为

$$\langle\beta|\vec{r}|\alpha\rangle=\langle\beta|\hat{I}\hat{I}^\dagger\vec{r}\hat{I}^\dagger\hat{I}|\alpha\rangle=\langle\beta|\hat{I}^\dagger\hat{I}^\dagger\vec{r}\hat{I}\hat{I}|\alpha\rangle=-I_\alpha I_\beta\langle\beta|\vec{r}|\alpha\rangle$$

因为

$$I_\alpha I_\beta=1,-1$$

只有当

$$I_\alpha I_\beta=-1$$

时才可能有非零的矩阵元

$$\langle\beta|\vec{r}|\alpha\rangle\neq0$$

即坐标算符的矩阵元只有在两个相反宇称的态之间才可能不等于零。

例如谐振子问题。$\hat{x}$只有在两个相邻的粒子态$|n\rangle$和$|n-1\rangle$，或者$|n\rangle$和$|n+1\rangle$之间的矩阵元不为零，

$$\langle m|x|n\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1}+\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right)$$

由于谐振子态$|n\rangle$具有确定的宇称$I=(-1)^n$，上面的宇称选择定则可以很容易理解这一结果。

又例如外电场中的氢原子 Stark 效应。氢原子态$|nlm\rangle$，$\vec{r}$只有在相邻角动量量子数之间的矩阵元才可能不等于零。由于氢原子态$|nlm\rangle$具有确定的宇称$(-1)^l$，上面的宇称选择定则可以很容易理解这一结果。

例题：无限深方势阱问题。

$$V(x)=\begin{cases}0 & |x|<a\\ \infty & |x|\geq a\end{cases}$$

由波函数的有限性，

$$\psi(x)=0 \qquad |x|\geq a$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0 \qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad |x|<a$$

由于宇称守恒，$[\hat{I},\hat{H}]=0$，$\hat{I},\hat{H}$有共同本征态，

$$\psi(x)=\begin{cases}Acos(kx), & I=1\\ Bsin(kx), & I=-1\end{cases} \qquad |x|<a$$

不能有cos和sin的混合态。由$x=\pm a$处的连续性条件和归一化条件，

$$\psi(x)=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{a}}cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right), & E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad n=1,2,3,\cdots, \quad I=1\\ \frac{1}{\sqrt{a}}sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), & E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}, \quad n=1,3,5,\cdots, \quad I=-1\end{cases}$$

5.3 时间反演变换

5.3.1 反幺正变换

幺正变换$\hat{U}$： $\hat{U}^{\dagger}=\hat{U}^{-1}$

对于任意态$|\alpha\rangle,|\beta\rangle$，$|\tilde{\alpha}\rangle=\hat{U}|\alpha\rangle$，$|\tilde{\beta}\rangle=\hat{U}|\beta\rangle$，有

$$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle=\langle\beta|\hat{U}^{\dagger}\hat{U}|\alpha\rangle=\langle\beta|\alpha\rangle$$

变换前后内积不变。

定义反幺正变换$\hat{\theta}$：$|\tilde{\alpha}\rangle=\hat{\theta}|\alpha\rangle$，$|\tilde{\beta}\rangle=\hat{\theta}|\beta\rangle$，$\hat{\theta}$满足

$$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle=\langle\beta|\alpha\rangle^{*}$$

下面证明：反幺正变换$\hat{\theta}$可以用复共厄变换$\hat{K}$和幺正变换$\hat{U}$表示：$\hat{\theta}=\hat{U}\hat{K}$

复共厄变换$\hat{K}$：

$$\hat{K}(c|\alpha\rangle)=c^{*}\hat{K}|\alpha\rangle$$

显然，$\hat{K}$是非线性算符（线性算符满足$\hat{K}(c|\alpha\rangle)=c\hat{K}|\alpha\rangle$）。

选择正交归一的基矢

$$|n\rangle=\begin{pmatrix}0\\ \vdots\\ 1\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}$$

只有第n个元素为 1，其它为 0。显然有

$$\hat{K}|n\rangle=|n\rangle$$

对于任意的态$|\alpha\rangle,|\beta\rangle$，

$$|\alpha\rangle=\sum_{n}\langle n|\alpha\rangle|n\rangle,\qquad |\beta\rangle=\sum_{m}\langle m|\beta\rangle|m\rangle$$

在$\hat{U}\hat{K}$变换下，

$$|\tilde{\alpha}\rangle=\hat{U}\hat{K}|\alpha\rangle=\hat{U}\sum_{n}\langle n|\alpha\rangle^{*}\hat{K}|n\rangle=\hat{U}\sum_{n}\langle n|\alpha\rangle^{*}|n\rangle==\sum_{n}\langle\alpha|n\rangle\hat{U}|n\rangle$$

$$|\tilde{\beta}\rangle=\hat{U}\hat{K}|\beta\rangle=\sum_{m}\langle\beta|m\rangle\hat{U}|m\rangle$$

$$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle=\sum_{n,m}\langle m|\hat{U}^{\dagger}\hat{U}|n\rangle\langle\alpha|n\rangle\langle m|\beta\rangle=\sum_{n,m}\langle m|n\rangle\langle\alpha|n\rangle\langle m|\beta\rangle$$

$$=\sum_{n}\langle\alpha|n\rangle\langle n|\beta\rangle=\langle\alpha|\beta\rangle=\langle\beta|\alpha\rangle^{*}$$

故$\hat{U}\hat{K}$满足反幺正算符的性质，可以令$\hat{\theta}=\hat{U}\hat{K}$。

5.3.2 时间反演变换

时间反演：在同一时空坐标系描述互为时间逆过程的两种运动，即一个坐标系描述两个相反的运动。准确的说，应该是运动反演。

■时间反演算符是反幺正算符

先考虑经典运动。定义时间反演变换θ为

$$\vec{x}\to\vec{x},\quad \vec{p}=m\vec{v}=m\frac{d\vec{x}}{dt}\to-\vec{p}$$

设粒子在初始时的坐标动量为$(\vec{x},\vec{p})$，经过时间δt后变成$\left(\vec{x}'=\vec{x}-\frac{\vec{p}}{m}\delta t,-\vec{p}\right)$。有两种等效的方式描述这一运动过程。1）先进行时间反演，$(\vec{x},\vec{p})\to(\vec{x},-\vec{p})$，再时间平移$\delta t$，此时速度已为$\vec{v}=-\frac{\vec{p}}{m}$，$(\vec{x},-\vec{p})\to\left(\vec{x}'=\vec{x}-\frac{\vec{p}}{m}\delta t,-\vec{p}\right)$；2）先时间平移$-\delta t$（穿越），此时速度为$\vec{v}=\frac{\vec{p}}{m}$，$(\vec{x},\vec{p})\to\left(\vec{x}+\frac{\vec{p}}{m}(-\delta t),\vec{p}\right)$，再时间反演$\left(\vec{x}-\frac{\vec{p}}{m}\delta t,\vec{p}\right)\to\left(\vec{x}-\frac{\vec{p}}{m}\delta t,-\vec{p}\right)$。

扩展到量子力学：时间反演算符$\hat{\theta}$，时间平移算符$1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t$。要求对任意态$|\alpha\rangle$进行上述两种变换等价，即先时间反演再时间平移$\delta t$的方式和先时间平移$-\delta t$再时间反演的方式等价，

$$\left(1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t\right)\hat{\theta}|\alpha\rangle=\hat{\theta}\left(1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(-\delta t)\right)|\alpha\rangle$$

要求时间反演算符$\hat{\theta}$满足

$$-i\hat{H}\hat{\theta}|\alpha\rangle=\hat{\theta}i\hat{H}|\alpha\rangle$$

如果$\hat{\theta}$是幺正算符，有$\hat{\theta}i\hat{H}|\alpha\rangle=i\hat{\theta}\hat{H}|\alpha\rangle$，导致

$$\hat{H}\hat{\theta}=-\hat{\theta}\hat{H}$$

作用于能量本征态$|n\rangle$,

$$\hat{H}\hat{\theta}|n\rangle = -\hat{\theta}\hat{H}|n\rangle = -\varepsilon_n\hat{\theta}|n\rangle$$

说明能量本征态的时间反演态是负能态，在非相对论量子力学中无意义【非相对论$E=\frac{p^2}{2m}$，相对论$E=\pm\sqrt{p^2+m^2}$】。

如果$\hat{\theta}$是反幺正算符，有

$$-i\hat{H}\hat{\theta}|\alpha\rangle = \hat{\theta}i\hat{H}|\alpha\rangle = -i\hat{\theta}\hat{H}|\alpha\rangle$$

$$\hat{H}\hat{\theta} = \hat{\theta}\hat{H}$$

$$\hat{H}\hat{\theta}|n\rangle = \hat{\theta}\hat{H}|n\rangle = \varepsilon_n\hat{\theta}|n\rangle$$

能量本征态的时间反演态仍然是能量本征态，无负能问题。故时间反演算符是反幺正算符。

■态与力学量的时间反演

态的时间反演：

$$|\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle = \hat{\theta}|\alpha\rangle$$

力学量$\hat{F}$的矩阵元的时间反演

$$\langle\beta|\hat{F}|\alpha\rangle = \left(\langle\beta|\hat{F}\right)|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\hat{\theta}\hat{F}|\beta\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\hat{\theta}\hat{F}\hat{\theta}^{-1}\hat{\theta}|\beta\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\hat{\theta}\hat{F}\hat{\theta}^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$$

已经令$\langle\beta|\hat{F} = \langle\gamma|$，并用到反幺正算符性质$\langle\gamma|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\tilde{\gamma}\rangle$。故有力学量时间反演：

$$\hat{F} \to \hat{\theta}\hat{F}\hat{\theta}^{-1}$$

如果体系 *Hamiltonian* 量满足

$$\hat{H} \to \hat{\theta}\hat{H}\hat{\theta}^{-1} = \hat{H}, \qquad \text{即 } [\hat{\theta},\hat{H}] = 0$$

说明体系具有时间反演不变性。注意：由于时间反演算符$\hat{\theta}$不是幺正算符，也不是厄密算符，无对应的守恒量。

按照时间反演的定义

$$\hat{\theta}\hat{x}\hat{\theta}^{-1} = \hat{x}, \qquad \hat{\theta}\hat{p}\hat{\theta}^{-1} = -\hat{p}$$

如果力学量满足

$$\hat{\theta}\hat{F}\hat{\theta}^{-1} = \pm\hat{F}$$

其矩阵元

$$\langle\beta|\hat{F}|\alpha\rangle=\langle\tilde{\alpha}|\hat{\theta}\hat{F}\hat{\theta}^{-1}|\tilde{\beta}\rangle=\pm\langle\tilde{\alpha}|\hat{F}|\tilde{\beta}\rangle$$

取$|\beta\rangle=|\alpha\rangle$，有力学量平均值的时间反演：

$$\langle\alpha|\hat{F}|\alpha\rangle=\pm\langle\tilde{\alpha}|\hat{F}|\tilde{\alpha}\rangle$$

说明：时间反演前后力学量的平均值相同或者差一个负号。例如$\langle\alpha|\hat{\vec{x}}|\alpha\rangle=\langle\tilde{\alpha}|\hat{\vec{x}}|\tilde{\alpha}\rangle$，$\langle\alpha|\hat{\vec{p}}|\alpha\rangle=-\langle\tilde{\alpha}|\hat{\vec{p}}|\tilde{\alpha}\rangle$。

力学量本征态的时间反演：

对于动量算符，$\hat{\theta}\hat{\vec{p}}\hat{\theta}^{-1}=-\hat{\vec{p}}$，$\hat{\theta}\hat{\vec{p}}=-\hat{\vec{p}}\hat{\theta}$

$$\hat{\vec{p}}\hat{\theta}|\vec{p}\rangle=-\hat{\theta}\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle=-\vec{p}\hat{\theta}|\vec{p}\rangle,$$

说明$\hat{\theta}|\vec{p}\rangle$与$|-\vec{p}\rangle$是同一个态，只差一个相因子，平面波在时间反演后成为反方向的平面波。

对于坐标算符，$\hat{\theta}\hat{\vec{x}}\hat{\theta}^{-1}=\hat{\vec{x}}$，$\hat{\theta}\hat{\vec{x}}=\hat{\vec{x}}\hat{\theta}$

$$\hat{\vec{x}}\hat{\theta}|\vec{x}\rangle=\hat{\theta}\hat{\vec{x}}|\vec{x}\rangle=\vec{x}\hat{\theta}|\vec{x}\rangle,$$

说明$\hat{\theta}|\vec{x}\rangle$与$|\vec{x}\rangle$是同一个态，只差一个相因子。

对于任意态$|\alpha\rangle$，进入坐标表象

$$|\alpha\rangle=\int d^3\vec{x}\,\langle\vec{x}|\alpha\rangle|\vec{x}\rangle,\qquad|\tilde{\alpha}\rangle=\int d^3\vec{x}\,\langle\vec{x}|\tilde{\alpha}\rangle|\vec{x}\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}\rangle=\hat{\theta}|\alpha\rangle=\int d^3\vec{x}\,\langle\vec{x}|\alpha\rangle^*\hat{\theta}|\vec{x}\rangle=\int d^3\vec{x}\,\langle\vec{x}|\alpha\rangle^*|\vec{x}\rangle$$

已经取$\hat{\theta}|\vec{x}\rangle=|\vec{x}\rangle$。比较$|\tilde{\alpha}\rangle$，得到时间反演前后坐标表象的态之间的关系：

$$\langle\vec{x}|\alpha\rangle\rightarrow\langle\vec{x}|\tilde{\alpha}\rangle=\langle\vec{x}|\alpha\rangle^*$$

即

$$\psi(\vec{x})\rightarrow\psi^*(\vec{x})$$

■时间反演不改变对易关系

对于对易关系

$$[\hat{x}_i,\hat{p}_j]|\alpha\rangle=i\hbar\delta_{ij}|\alpha\rangle$$

进行时间反演变换，

$$\hat{\theta}[\hat{x}_i, \hat{p}_j]\hat{\theta}^{-1}\hat{\theta}|\alpha\rangle = \hat{\theta} i\hbar\delta_{ij}|\alpha\rangle$$

$$[\hat{x}_i, -\hat{p}_j]\hat{\theta}|\alpha\rangle = -i\hbar\delta_{ij}\hat{\theta}|\alpha\rangle$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j]\hat{\theta}|\alpha\rangle = i\hbar\delta_{ij}\hat{\theta}|\alpha\rangle$$

说明：时间反演不改变对易关系。

5.4 全同粒子对称性

全同粒子：内禀性质（质量，电荷，自旋等）完全相同的粒子。

经典力学中粒子的内禀力学量是连续变化的，例如两个粒子的质量可以无限接近，但不会全同，总是可以区分的。故在经典力学中无全同粒子的概念。

量子力学中内禀物理量的取值是分离的，两个粒子要么完全相同，要么完全不同。因此有全同粒子体系。

5.4.1 全同性原理与交换对称性

在经典力学中即使有“全同”粒子，也可以通过给每个粒子的轨道编号，在运动过程中可以依据轨道区分“全同”粒子。但在量子力学中，无轨道，状态在坐标表象用波函数描述，弥漫在全空间，因此有全同性原理（全同粒子对称性）：全同粒子不可区分。

全同性原理对态有什么限制？

对于包含N个粒子的体系，用i标记第i个粒子的所有量子数，体系的态记为$|\cdots i\cdots j\cdots\rangle$。定义粒子交换算符$\hat{P}_{ij}$：

$$\hat{P}_{ij}|\cdots i\cdots j\cdots\rangle = |\cdots j\cdots i\cdots\rangle$$

由于

$$\hat{P}_{ij}^2|\cdots i\cdots j\cdots\rangle = \hat{P}_{ij}|\cdots j\cdots i\cdots\rangle = |\cdots i\cdots j\cdots\rangle$$

所以$\hat{P}_{ij}^2$的本征值为1，$\hat{P}_{ij}$的本征值为± 1。

如果是全同粒子体系，由于全同粒子不可区分，交换前后的态应为同一状态，只差一个常数，

$$\hat{P}_{ij}|\cdots i\cdots j\cdots\rangle = |\cdots j\cdots i\cdots\rangle = \lambda|\cdots i\cdots j\cdots\rangle = \pm|\cdots i\cdots j\cdots\rangle$$

说明$|\cdots i\cdots j\cdots\rangle$是$\hat{P}_{ij}$的本征态，本征值$\lambda = \pm 1$。

交换对称性：全同粒子体系的态是交换算符$\hat{P}_{ij}$的本征态，本征值为± 1。全同粒子体系的波函数在交换任意两个粒子时必须是对称或者是反对称的。

由全同粒子对称性，

$$\hat{P}_{ij}\hat{H}\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{H}, \qquad [\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = 0, \qquad \frac{d\hat{P}_{ij}}{dt} = 0$$

说明$\hat{P}_{ij}$是守恒量。若体系在初始时处于$\hat{P}_{ij}$的本征态（对称态或者反对称态），则恒处于该本征态。即全同粒子体系波函数的对称性不随时间改变（不在对称与反对称之间改变）。

到底是对称还是反对称？

实验表明，交换对称性由全同粒子的自旋决定：对于玻色子（自旋为整数的粒子）组成的全同粒子系统，状态是交换对称的，对于费米子（自旋为半整数的粒子）组成的全同粒子系统，状态是交换反对称的。

问题：全同粒子系统的状态一方面要满足交换对称性，另一方面要满足 *Schroedinger* 方程，怎样构造满足二者的态？

5.4.2 两全同粒子体系的态

设$\psi(1,2)$是两粒子体系的态，

$$\hat{H}(1,2)\psi(1,2) = E\psi(1,2)$$

两边用交换算符$\hat{P}_{12}$作用，

$$\hat{P}_{12}\hat{H}(1,2)\hat{P}_{12}^{-1}\hat{P}_{12}\psi(1,2) = E\hat{P}_{12}\psi(1,2)$$

$$\hat{H}(2,1)\psi(2,1) = E\psi(2,1)$$

由全同粒子对称性，

$$\hat{H}(1,2) = \hat{H}(2,1)$$

$$\hat{H}(1,2)\psi(2,1) = E\psi(2,1)$$

所以，如果$\psi(1,2)$是全同粒子体系$\hat{H}$的本征态，那么$\psi(2,1)$也是全同粒子体系$\hat{H}$

的属于同一本征值的态。

若 *Schroedinger* 方程的解$\psi(1,2)$不满足交换对称性，可以构造对称或反对称波函数：

对称态（玻色子系统）：　　$\psi_+(1,2)=\psi(1,2)+\psi(2,1)$

反对称态（费米子系统）：　　$\psi_-(1,2)=\psi(1,2)-\psi(2,1)$

它们仍然是$\hat{H}$的属于同一本征值的本征态

$$\hat{H}(1,2)\psi_\pm(1,2)=E\psi_\pm(1,2)$$

并且满足交换对称或者反对称。

例如：若不考虑两粒子的相互作用

$$\hat{H}(1,2)=\hat{H}_0(1)+\hat{H}_0(2)$$

$$\hat{H}(1,2)\psi(1,2)=E\psi(1,2)$$

$\hat{H}_0$是单粒子哈密顿量。设单粒子态满足

$$\hat{H}_0\varphi_n(i)=\varepsilon_n\varphi_n(i),\qquad i=1,2$$

则两粒子 *Schroedinger* 方程的解是

$$E=\varepsilon_n+\varepsilon_m\qquad\qquad \psi(1,2)=\varphi_n(1)\varphi_m(2)$$

显然，一般情况下$\psi(1,2)$不满足交换对称性。

构造交换对称态：对于玻色子系统，

$$\psi_+(1,2)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\psi(1,2)+\psi(2,1)]=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_n(1)\varphi_m(2)+\varphi_n(2)\varphi_m(1)] & n\neq m\\ \varphi_n(1)\varphi_m(2) & n=m\end{cases}$$

对于费米子系统，

$$\psi_-(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(1,2)-\psi(2,1)]=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_n(1)\varphi_m(2)-\varphi_n(2)\varphi_m(1)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}\varphi_n(1) & \varphi_n(2)\\ \varphi_m(1) & \varphi_m(2)\end{vmatrix}$$

对于费米子系统，两粒子若处于同一状态，具有相同量子数$n=m$，不可能满足交换反对称性。*Pauli* 不相容原理：两个全同费米子不能处于同一单粒子态。

需要强调指出的是：交换对称化以前的波函数给出的是哪个粒子处于哪个单粒子态，交换对称化以后的波函数给出的是有几个粒子处于某个单粒子态，而不再关心每个粒子处于什么状态。

关于波函数对称性的讨论可推广到多个全同粒子体系 → 二次量子化。

5.4.3 全同性原理的测量效应

要求全同粒子体系的波函数满足交换对称性，对力学量的测量结果有什么影响？

例题：两个全同自由粒子的波函数。

显然，体系的哈密顿量具有交换对称性。

先不考虑交换对称性。自由 *Schroedinger* 方程的解

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\varphi_{k_1}(\vec{r}_1)\varphi_{k_2}(\vec{r}_2)=Ae^{i(\vec{k}_1\cdot\vec{r}_1+\vec{k}_2\cdot\vec{r}_2)}$$

引入

$$\text{质心坐标}\vec{R}=(\vec{r}_1+\vec{r}_2)/2\text{和相对坐标}\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2,$$

$$\text{总波矢}\vec{K}=\vec{k}_1+\vec{k}_2\text{和相对波矢}\vec{k}=(\vec{k}_1-\vec{k}_2)/2,$$

波函数分离成质心部分和相对运动部分，

$$\psi(\vec{R},\vec{r})=Ae^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

在以一个粒子为中心，半径为r的单位球壳厚度内找到另一个粒子的几率为

$$P(r)=\int|\psi(\vec{R},\vec{r})|^2d^3\vec{R}r^2d\Omega=Br^2 \qquad B=A^2\int d^3\vec{R}d\Omega$$

现在考虑全同 *Bose* 子系统。交换两个粒子时，$\vec{r}_1\leftrightarrow\vec{r}_2$：$\vec{R}\to\vec{R}$, $\vec{r}\to-\vec{r}$，对称态表示为

$$\psi_+(\vec{R},\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(\vec{R},\vec{r})+\psi(\vec{R},-\vec{r})]=\frac{A}{\sqrt{2}}e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}+e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right)$$

$$=\sqrt{2}Ae^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}cos(\vec{k}\cdot\vec{r})$$

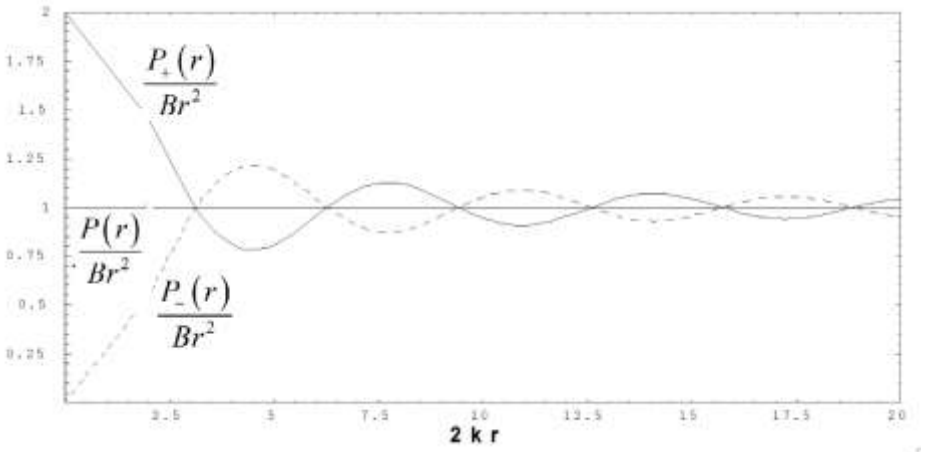
$$P_+(\mathrm{r})=\int|\psi_+(\vec{R},\vec{r})|^2d^3\vec{R}r^2d\Omega=Br^2\left(1+\frac{sin(2kr)}{2kr}\right)$$

再考虑全同 *Fermi* 子系统。反对称态表示为

$$\psi_-(\vec{R},\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(\vec{R},\vec{r})-\psi(\vec{R},-\vec{r})]$$

$$=\frac{A}{\sqrt{2}}e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}-e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right)=\sqrt{2}iAe^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}sin(\vec{k}\cdot\vec{r})$$

$$P_{-}(\mathrm{r}) = \int \left|\psi_{-}(\vec{R},\vec{r})\right|^2 d^3\vec{R} r^2 d\Omega = Br^2\left(1 - \frac{sin(2kr)}{2kr}\right)$$



说明：Bose 子，对称空间波函数 → 两粒子靠近的几率增大

Fermi 子，反对称空间波函数 → 两粒子靠近的几率减小

似乎在全同粒子间存在一种作用力，玻色子是吸引力，费米子是排斥力。这种力称为交换力，是全同性原理要求波函数交换对称导致的，并不是真正的力。在$r \to \infty$时，交换力消失。

例题：两粒子体系的力学量平均值。

设力学量$\hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$。先不考虑全同性。设 *Schroedinger* 方程的解是$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$，

$$\langle\hat{F}\rangle = \int \psi^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

考虑全同粒子体系。

$$\langle\hat{F}\rangle_{\pm} = \int \psi_{\pm}^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\psi_{\pm}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

$$= \frac{1}{2}\int [\psi^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \pm \psi^*(\vec{r}_2,\vec{r}_1)]\hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)[\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \pm \psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)]d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

$$= \frac{1}{2}\int [\psi^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) + \psi^*(\vec{r}_2,\vec{r}_1)\hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$$

$$\pm\psi^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1) \pm \psi^*(\vec{r}_2,\vec{r}_1)\hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)]d\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

$$= \langle\hat{F}\rangle \pm \int \psi^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

上面用到了算符$\hat{F}$的交换对称性$\hat{F}(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)=\hat{F}(|\vec{r}_2-\vec{r}_1|)$。

5.4.4 两全同费米子体系的自旋波函数

波函数的交换对称是针对总的波函数，是交换两个粒子的所有内禀及外在自由度。

两粒子的波函数$\psi(\vec{r}_1,s_{1z},\vec{r}_2,s_{2z})$。

若忽略坐标空间和自旋空间的耦合，例如$\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{s}}$耦合，则

$$\psi(\vec{r}_1,s_{1z},\vec{r}_2,s_{2z})=\varphi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\chi(s_{1z},s_{2z})$$

对于两全同费米子体系，总波函数的交换反对称性要求

空间对称$\varphi_+(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$，自旋反对称$\chi_-(s_{1z},s_{2z})$

或者空间反对称$\varphi_-(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$，自旋对称$\chi_+(s_{1z},s_{2z})$

若进一步忽略$\hat{\vec{s}}_1\cdot\hat{\vec{s}}_2$耦合，自旋波函数是单粒子自旋波函数的直积

$$\chi(s_{1z},s_{2z})=\chi(s_{1z})\chi(s_{2z})=\begin{cases}\chi_{\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}}(2)\\ \chi_{\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2)\\ \chi_{-\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}}(2)\\ \chi_{-\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2)\end{cases}$$

这 4 个态并不都满足交换对称性，但可以由它们构成 4 个独立的对称或反对称自旋态：

$$\chi_+(s_{1z},s_{2z})=\begin{cases}\chi_+^1(s_{1z},s_{2z})=\chi_{\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}}(2)\\ \chi_+^2(s_{1z},s_{2z})=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2)+\chi_{\frac{1}{2}}(2)\chi_{-\frac{1}{2}}(1)\right]\\ \chi_+^3(s_{1z},s_{2z})=\chi_{-\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2)\end{cases}$$

$$\chi_-(s_{1z},s_{2z})=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2)-\chi_{\frac{1}{2}}(2)\chi_{-\frac{1}{2}}(1)\right]$$

容易证明，它们是总自旋角动量

$$\hat{\vec{s}}^2=\left(\hat{\vec{s}}_1+\hat{\vec{s}}_2\right)^2=\frac{3}{2}\hbar^2+2\left(\hat{s}_{1x}\hat{s}_{2x}+\hat{s}_{1y}\hat{s}_{2y}+\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z}\right)$$

$$\hat{s}_z=\hat{s}_{1z}+\hat{s}_{1z}$$

的本征态

$$\hat{\vec{s}}^2\chi_+^1 = 2\hbar^2\chi_+^1, \qquad \hat{s}_z\chi_+^1 = \hbar\chi_+^1$$
$$\hat{\vec{s}}^2\chi_+^2 = 2\hbar^2\chi_+^2, \qquad \hat{s}_z\chi_+^2 = 0$$
$$\hat{\vec{s}}^2\chi_+^3 = 2\hbar^2\chi_+^3, \qquad \hat{s}_z\chi_+^3 = -\hbar\chi_+^3$$
$$\hat{\vec{s}}^2\chi_- = 0, \qquad \hat{s}_z\chi_- = 0$$

形成对称三重态和反对称单态：

$$\text{对称三重态}\begin{cases}\chi_+^1, & s=1, m_s=1\\ \chi_+^2, & s=1, m_s=0\\ \chi_+^3, & s=1, m_s=-1\end{cases}$$
$$\text{反对称单态}\chi_-, \qquad s=0, m_s=0$$

问题：两全同费米子体系的自旋波函数是否一定是上述 4 个态之一呢？

回答：若体系空间波函数对称，自旋反对称态必为χ_-；若空间波函数反称，自旋对称态可以是χ_+^1，χ_+^2，χ_+^3的线形组合，不再是自旋的本征态。

5.5 简单全同粒子体系

5.5.1 氦原子

忽略原子核的运动（太重），氦原子是一个两全同电子体系。哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$$
$$\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2}, \qquad \hat{H}^{(1)} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$\hat{H}^{(0)}$包含电子动能和电子—原子核相互作用，$\hat{H}^{(1)}$是两电子之间相互作用。显然，体系$\hat{H}^{(0)}$和$\hat{H}$都具有交换对称性。

由于不考虑$\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{s}}$耦合，氦原子态为$\psi(\vec{r}_1, s_{1z}, \vec{r}_2, s_{2z}) = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi(s_{1z}, s_{2z})$。又由于没有$\hat{\vec{s}}_1\cdot\hat{\vec{s}}_2$耦合，对称或反对称的自旋态上面已给出。下面考虑空间波函数。

若不考虑两电子之间相互作用$\hat{H}^{(1)}$，两个电子分别围绕原子核作类氢原子运动，体系 *Schroedinger* 方程的零级解为

$$\varphi^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{nlm}(\vec{r}_1)\varphi_{n'l'm'}(\vec{r}_2)$$

$$E^{(0)} = \varepsilon_n + \varepsilon_{n'} \qquad \varepsilon_n = -\frac{m(2e^2)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

$\varphi_{nlm}(\vec{r})$，ε_n是$z=2$的类氢原子解。对称或反对称的电子空间波函数为

$$\varphi_{\pm}^{(0)}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi^{(0)}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \pm \varphi^{(0)}(\vec{r}_2,\vec{r}_1)\right]$$

全反对称的总波函数为

$$\psi_{-}^{(0)}(\vec{r}_1,s_{1z},\vec{r}_2,s_{2z}) = \varphi_{\pm}^{(0)}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\chi_{\mp}(s_{1z},s_{2z})$$

体系的基态就是两个电子都处于基态，由 Pauli 不相容原理，基态的空间波函数只能是对称的，

$$\varphi_{+}^{(0)}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \varphi_{100}(\vec{r}_1)\varphi_{100}(\vec{r}_2)$$

由于基态不简并，可用不简并微扰论求解$\hat{H}^{(1)}$引起的能量修正，

$$E_{+}^{(1)} = \int \left(\varphi_{+}^{(0)}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\right)^* \frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\varphi_{+}^{(0)}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

也可用变分法求解。

激发态的空间波函数可以是对称的或者反对称的。例如第一激发态，

$$\varphi_{\pm}^{(0)}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{200}(\vec{r}_1)\varphi_{100}(\vec{r}_2) \pm \varphi_{200}(\vec{r}_2)\varphi_{100}(\vec{r}_1)]$$

5.5.2 原子的角动量

全同性原理对于角动量量子数的取值有什么限制？

考虑有两个价电子的原子的角动量。

先考虑空间波函数。将空间波函数分成质心与相对两部分，$\Psi(\vec{R},\vec{r}) = \varphi(\vec{R})\psi(\vec{r})$。质心部分$\varphi(\vec{R})$，相对部分$\psi(\vec{r}) = R_{NL}(r)Y_{LM}(\theta,\varphi)$。交换两个电子时，，$\vec{R}\to\vec{R}$，$\vec{r}\to-\vec{r}$，交换算符等价于宇称算符，故

$$\hat{P}_{12}Y_{LM}(\theta,\varphi) = \hat{I}Y_{LM}(\theta,\varphi) = (-1)^L Y_{LM}(\theta,\varphi)$$

$$\hat{P}_{12}\Psi(\vec{R},\vec{r}) = (-1)^L\Psi(\vec{R},\vec{r})$$

说明：相对运动轨道角动量量子数L为偶数时，空间波函数是交换对称的，L为

奇数时，空间波函数是交换反对称的。

再考虑自旋波函数。总的自旋角动量量子数$s=0$时，自旋波函数是反对称的，而$s=1$时，自旋波函数是对称的。

由于总的波函数是交换反对称的，要求

空间对称自旋反对称，此时L为偶数，$s=0$；

或空间反对称自旋对称，此时L为奇数，$s=1$。

表明受波函数交换对称性的限制，空间和自旋关联在一起，L和s不再是相互对立的，不能任意组合。

5.5.3 *Pauli* 不相容原理导致的量子压强

固体中的电子可近似看成是自由费米气体。电子的相空间分布

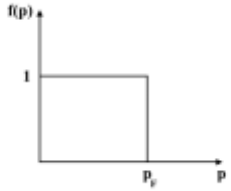
$$f(p)=\frac{1}{e^{(E-\mu)/T}+1}$$

$T=0$时，

$$f(p)=\theta(\mu-E)$$

电子的动量受到限制，

$$\mu>E=\frac{p^2}{2m},\quad p<p_F=\sqrt{2m\mu}\quad (\text{费米动量})$$



坐标空间中电子数密度

$$n=2\int\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3}f(p)=\frac{1}{\pi^2}\int_0^{p_F}p^2dp=\frac{p_F^3}{3\pi^2}$$

因子2来源于电子有两个自旋态。

能量密度

$$\varepsilon=2\int\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3}Ef(p)=\frac{p_F^5}{10m\pi^2}$$

由热力学关系

$$\varepsilon = -P + \mu n$$

压强

$$P = \frac{2}{3}\varepsilon$$

注意：经典系统的压强在$T = 0$时$P = 0$。自由量子系统的压强不是由于电子间的相互作用引起的，也不是由于热运动引起的，而完全是由于全同粒子效应，即 *Pauli* 不相容原理引起的，是量子效应。

5.5.4 全同粒子的散射

对于非全同性粒子的散射，波函数的渐近形式为

$$\psi(\vec{r}) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} Ae^{ikz} + Af(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

微分散射截面

$$\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2$$

考虑全同粒子的交换对称性，例如两个电子的散射。由于交换两个粒子时，

$$\vec{r} \to -\vec{r}, \qquad r \to r, \qquad \theta \to \pi - \theta, \qquad \varphi \to \pi + \varphi$$

对称或者反对称的渐近波函数和微分散射截面为

$$\psi_{\pm}(\vec{r}) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} A\left(e^{ikz} \pm e^{-ikz}\right) + A\left(f(\theta,\varphi) \pm f(\pi-\theta,\pi+\varphi)\right)\frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{\pm}(\theta,\varphi) &= |f(\theta,\varphi) \pm f(\pi-\theta,\pi+\varphi)|^2 \\
&= |f(\theta,\varphi)|^2 + |f(\pi-\theta,\pi+\varphi)|^2 \\
&\quad \pm f(\theta,\varphi)f^*(\pi-\theta,\pi+\varphi) \pm f^*(\theta,\varphi)f(\pi-\theta,\pi+\varphi) \\
&= |f(\theta,\varphi)|^2 + |f(\pi-\theta,\pi+\varphi)|^2 \\
&\quad \pm\left[\left(f^*(\theta,\varphi)f(\pi-\theta,\pi+\varphi)\right)^* + f^*(\theta,\varphi)f(\pi-\theta,\pi+\varphi)\right] \\
&= |f(\theta,\varphi)|^2 + |f(\pi-\theta,\pi+\varphi)|^2 \pm 2\mathrm{Re}[f^*(\theta,\varphi)f(\pi-\theta,\pi+\varphi)]
\end{aligned}$$

再考虑全同费米子散射的自旋效应。总的波函数

$$\Psi_{-}(\vec{r},s_z) = \psi_{\pm}(\vec{r})\chi_{\mp}(s_z)$$

如果入射粒子和靶粒子均处于极化态，则自旋反对称态（单态）的散射截面为$\sigma_{+}(\theta,\varphi)$，自旋对称态（三重态）的散射截面为$\sigma_{-}(\theta,\varphi)$。

如果两个电子均不极化，自旋取向无规则。平均来说，取自旋反对称态（单态）的几率为$1/4$，取自旋对称态（三重态）的几率为$3/4$。这时的散射截面为

$$\sigma(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sigma_{+}(\theta,\varphi) + \frac{3}{4}\sigma_{-}(\theta,\varphi)。$$

第 6 章 二次量子化

上面求解全同粒子体系的方法是先给全同粒子编号，以便求解 *Schroedinger* 方程得到波函数和能谱，再对波函数进行交换对称化。由于全同粒子的不可区分，编号只是一个中间过程，对计算结果无影响，而且粒子数较大时交换对称化将是非常繁琐的。事实上，对于全同粒子体系，没必要先编号，确定哪个粒子处于哪个态，然后再将态交换对称化。我们关心的只是有几个粒子处于相同的单粒子态，而不是哪几个粒子处于这个态。因此，直接的方法是：用单粒子本征态上的粒子数分布来描述全同粒子体系的状态。

6.1 *Fock* 空间

设单粒子力学量$\hat{A}$的本征方程

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$$

本征值a_i，本征态$|a_i\rangle$。

用单粒子本征态的粒子数分布来描述全同粒子体系的状态

$$|n_1 \dots n_i \dots\rangle \equiv |a_1; n_1\rangle \dots |a_i; n_i\rangle \dots$$

n_i是处于第i个单粒子本征态$|a_i\rangle$的粒子数。由$|n_1 \dots n_i \dots\rangle$构成的矢量空间称为 *Fock* 空间。

显然，真空态和单粒子态可以写成

$$|0 \dots 0 \dots 0\rangle = |0\rangle$$

$$|0 \dots 1 \dots 0\rangle = |a_i\rangle$$

6.1.1 消灭产生算符

既然全同粒子的态用粒子数分布表示，则作用在态上的算符就是改变粒子数分布的消灭产生算符。定义单粒子态的消灭产生算符$\hat{a}_i$和$\hat{a}_i^\dagger$：

$$\hat{a}_i|n_1 \dots n_i \dots\rangle \sim |n_1 \dots n_i - 1 \dots\rangle$$

$$\hat{a}_i^\dagger|n_1 \dots n_i \dots\rangle \sim |n_1 \dots n_i + 1 \dots\rangle$$

$\hat{a}_i$使得第i个单粒子态$|a_i\rangle$上的粒子数减少 1 个，称为消灭算符，$\hat{a}_i^\dagger$使得第i个单粒子态$|a_i\rangle$上的粒子数增加 1 个，称为产生算符。

显然，对于真空态和单粒子态有

$$\hat{a}_i|0\rangle = 0$$

$$\hat{a}_i^\dagger|0\rangle = |a_i\rangle$$

$$\hat{a}_i|a_j\rangle = \delta_{ij}|0\rangle$$

6.1.2 表象变换

全同粒子体系的态可以按单粒子力学量$\hat{A}$的本征态上的粒子数分布来表示，也可以按单粒子力学量$\hat{B}$的本征态上的粒子数分布来表示：

$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$,

Fock 空间：$|n_1 \dots n_i \dots\rangle \equiv |a_1; n_1\rangle \dots |a_i; n_i\rangle \dots$，消灭与产生算符$\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$

$\hat{B}|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle$,

Fock 空间：$|m_1 \dots m_i \dots\rangle \equiv |b_1; n_1\rangle \dots |b_i; n_i\rangle \dots$，消灭与产生算符$\hat{b}_i, \hat{b}_i^\dagger$

单粒子态的表象变换：

$$|a_i\rangle = \sum_j |b_j\rangle\langle b_j|a_i\rangle = \sum_j S_{ji}|b_j\rangle, \qquad S_{ji} = \langle b_j|a_i\rangle$$

算符的表象变换：由表象变换矩阵S的么正性，

$$\left(S^\dagger S\right)_{ij} = \left(SS^\dagger\right)_{ij} = \delta_{ij}$$

有

$$\hat{a}_i|a_j\rangle = \delta_{ij}|0\rangle = \sum_k S_{ik}^\dagger S_{kj}|0\rangle = \sum_{k,l} S_{ik}^\dagger S_{lj}\delta_{kl}|0\rangle$$

$$= \sum_{k,l} S_{ik}^{\dagger} S_{lj} \hat{b}_k |b_l\rangle = \sum_k S_{ik}^{\dagger} \hat{b}_k \left(\sum_l S_{lj} |b_l\rangle \right) = \sum_k S_{ik}^{\dagger} \hat{b}_k |a_j\rangle$$

由于$|a_j\rangle$是任意的单粒子态，有

$$\hat{a}_i = \sum_k S_{ik}^{\dagger} \hat{b}_k \qquad \hat{a}_i^{\dagger} = \sum_k \hat{b}_k^{\dagger} S_{ki}$$

6.1.3 由交换对称性计算对易关系

■ 任意两个产生算符（消灭算符）的对易关系

对于全同粒子体系，态

$$\hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j^{\dagger} |n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle$$

与态

$$\hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_i^{\dagger} |n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle$$

应该是同一个态，具有交换对称性，

$$\hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j^{\dagger} |n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle = \pm \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_i^{\dagger} |n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle$$

$$\left(\hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j^{\dagger} \mp \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_i^{\dagger} \right) |n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle = 0$$

由于$|n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle$是任意的 *Fock* 态，有

$$\hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j^{\dagger} \mp \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_i^{\dagger} = 0$$

$$\hat{a}_i \hat{a}_j \mp \hat{a}_j \hat{a}_i = 0$$

■ 不同单粒子态上消灭产生算符的对易关系

由全同性原理，$i \neq j$时，$\hat{a}_i \hat{a}_j^{\dagger} |n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle$与$\hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_i |n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle$是同一个态。注意：$i = j$时两者有可能不同，例如取$|n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle = |0\rangle$时，

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^{\dagger} |0\rangle = \hat{a}_i |a_i\rangle = |0\rangle$$

$$\hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i |0\rangle = 0$$

由全同粒子体系的交换对称性

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger|n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle = \pm\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i|n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle \qquad i \neq j$$

$$(\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger \mp \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i)|n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle = 0 \qquad i \neq j$$

由于态$|n_1 \dots n_i \dots n_j \cdots\rangle$是任意的 *Fock* 态，有

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger \mp \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i = 0 \qquad i \neq j$$

■ 任意消灭产生算符的对易关系

由表象变换有

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger \mp \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i = \sum_{k,l} S_{ik}^\dagger S_{lj}\left(\hat{b}_k\hat{b}_l^\dagger \mp \hat{b}_l^\dagger\hat{b}_k\right)$$

由不同单粒子态上消灭产生算符的对易关系

$$\hat{b}_k\hat{b}_l^\dagger \mp \hat{b}_l^\dagger\hat{b}_k = 0 \qquad k \neq l$$

有

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger \mp \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i = \sum_{k} S_{ik}^\dagger S_{kj}\left(\hat{b}_k\hat{b}_k^\dagger \mp \hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k\right)$$

只有当

$$\hat{b}_k\hat{b}_k^\dagger \mp \hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k = \hat{A}$$

是一与指标k无关的算符，由表象变换算符的幺正性，有$\hat{a}_i$与$\hat{a}_j^\dagger$的对易关系

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger \mp \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i = \hat{A}\sum_{k} S_{ik}^\dagger S_{kj} = \hat{A}\delta_{ij}$$

才能保证

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger \mp \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i = 0 \qquad (i \neq j)$$

■ 确定$\hat{A}$

将

$$\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger \mp \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i = \hat{A}$$

两边作用于真空态

$$(\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger \mp \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i)|0\rangle = \hat{A}|0\rangle$$

注意到

$$\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i|0\rangle = 0, \qquad \hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger|0\rangle = \hat{a}_i|a_i\rangle = |0\rangle$$

有

$$|0\rangle = \hat{A}|0\rangle, \qquad \hat{A} = 1$$

故

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger \mp \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i = \delta_{ij}$$

■ 全同粒子体系的波函数交换对称性导致对易关系：

$$\text{玻色子体系}\begin{cases}[\hat{a}_i,\hat{a}_j]=0\\ [\hat{a}_i^\dagger,\hat{a}_j^\dagger]=0\\ [\hat{a}_i,\hat{a}_j^\dagger]=\delta_{ij}\end{cases} \qquad \text{费米子体系}\begin{cases}\{\hat{a}_i,\hat{a}_j\}=0\\ \{\hat{a}_i^\dagger,\hat{a}_j^\dagger\}=0\\ \{\hat{a}_i,\hat{a}_j^\dagger\}=\delta_{ij}\end{cases}$$

6.1.4 确定单粒子态

由对易关系（$i=j$）

$$\text{玻色子体系}\begin{cases}[\hat{a}_i,\hat{a}_i]=0\\ [\hat{a}_i^\dagger,\hat{a}_i^\dagger]=0\\ [\hat{a}_i,\hat{a}_i^\dagger]=1\end{cases} \qquad \text{费米子体系}\begin{cases}\{\hat{a}_i,\hat{a}_i\}=0\\ \{\hat{a}_i^\dagger,\hat{a}_i^\dagger\}=0\\ \{\hat{a}_i,\hat{a}_i^\dagger\}=1\end{cases}$$

用类似于谐振子的代数解法，无论玻色子或者费米子都有

$$\hat{a}_i|a_i;n_i\rangle = \sqrt{n_i}|a_i;n_i-1\rangle$$

$$\hat{a}_i^\dagger|a_i;n_i\rangle = \sqrt{n_i+1}|a_i;n_i+1\rangle$$

对于费米子系统，反对易关系导致

$$\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i^\dagger = 0$$

$$\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i^\dagger|0\rangle = \hat{a}_i^\dagger|a_i,1\rangle = \sqrt{2}|a_i,2\rangle = 0$$

Pauli 不相容原理：不可能有两个或两个以上的费米子占据同一个单粒子态。对于费米子，任意单粒子态上的粒子数$n_i = 0,1$。

6.1.5 粒子数算符

$$|n_1 \dots n_i \dots\rangle = |a_1; n_1\rangle \dots |a_i; n_i\rangle \dots$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} |a_1; 0\rangle \dots |a_i; n_i\rangle \dots$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_1! \dots n_{i-1}!}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{n_2} \dots \left(\hat{a}_{i-1}^\dagger\right)^{n_{i-1}} |a_1; 0\rangle \dots |a_{i-1}; 0\rangle |a_i; n_i\rangle \dots$$

对于玻色子，由对易关系，有

$$\hat{a}_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_1! \dots n_{i-1}!}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{n_2} \dots \left(\hat{a}_{i-1}^\dagger\right)^{n_{i-1}} |a_1; 0\rangle \dots |a_{i-1}; 0\rangle \hat{a}_i |a_i; n_i\rangle \dots$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_1! \dots n_{i-1}!}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{n_2} \dots \left(\hat{a}_{i-1}^\dagger\right)^{n_{i-1}} \sqrt{n_i} |a_1; 0\rangle \dots |a_{i-1}; 0\rangle |a_i; n_i - 1\rangle \dots$$

$$= \sqrt{n_i} |n_1 \dots n_i - 1 \dots\rangle$$

类似，

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1 \dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1 \dots n_i + 1 \dots\rangle$$

对于费米子，由反对易关系，有

$$\hat{a}_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle$$

$$= \frac{(-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j}}{\sqrt{n_1! \dots n_{i-1}!}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{n_2} \dots \left(\hat{a}_{i-1}^\dagger\right)^{n_{i-1}} |a_1; 0\rangle \dots |a_{i-1}; 0\rangle \hat{a}_i |a_i; n_i\rangle \dots$$

$$= \frac{(-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j}}{\sqrt{n_1! \dots n_{i-1}!}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{n_2} \dots \left(\hat{a}_{i-1}^\dagger\right)^{n_{i-1}} \sqrt{n_i} |a_1; 0\rangle \dots |a_{i-1}; 0\rangle |a_i; n_i - 1\rangle \dots$$

$$= (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} \sqrt{n_i} |n_1 \dots n_i - 1 \dots\rangle$$

类似，

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1 \dots n_i \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} \sqrt{n_i + 1} |n_1 \dots n_i + 1 \dots\rangle$$

虽然$\hat{a}_i$和$\hat{a}_i^\dagger$不是厄密算符，但$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$和$\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger$是厄密算符，可以用来构造力学

量。无论是玻色子还是费米子，都有

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle = n_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle$$

故

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$$

为粒子数算符，任意 *Fock* 态$|n_1 \dots n_i \dots\rangle$是它的本征态，本征值为$n_i$。

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i$$

为总粒子数算符。注意，总粒子数算符与表象无关。

$$\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_{ilk} S_{ki} S_{il}^\dagger \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l = \sum_{kl} \delta_{kl} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l = \sum_l \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l$$

6.2 用消灭产生算符表示力学量

对于一个多粒子体系，其相互作用是非常复杂的。一个粒子与其它所有粒子都有相互作用，而且其形式和强度都可能不同。常用的近似处理这些复杂相互作用的方法是：

第一步，平均场近似。将其它所有粒子对某个粒子的不同相互作用抹平，近似处理为一个平均势场。这样多体问题就变成了一个单粒子问题，但是这个单粒子不是一个自由粒子，而是一个准粒子（相互作用改变了自由粒子的性质）。这时，体系的力学量是单粒子算符之和，是所有准粒子的贡献之和。所以，平均场近似又叫做准粒子近似。这也是我们建立 Fock 空间，用单粒子（准粒子）态上的粒子数分布来描述多粒子态的基础。

第二步，超出平均场近似（势近似，长程关联近似），考虑短程关联中的两粒子关联，例如配对相互作用。这是超导超流理论的基础。这时，体系的力学量是两粒子算符之和。

第三步，考虑三体相互作用及其它。

6.2.1 可加性单粒子力学量

如果 *Fock* 空间的态$|n_1 \dots n_i \dots\rangle$是按照单粒子力学量$\hat{A}$的本征值$a_i$的分布，

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$$

说明每个粒子的$\hat{A}$都有确定值，与$\hat{A}$对应的体系力学量$\hat{\mathcal{A}}$在自身表象为

$$\hat{\mathcal{A}} = \sum_i a_i \hat{n}_i = \sum_i a_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$$

如果 *Fock* 空间的态$|m_1 \dots m_i \dots\rangle$是按照单粒子力学量$\hat{B}$的本征值$b_i$的分布，

$$\hat{B}|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle$$

则单粒子的$\hat{A}$一般没有确定值（除非$\hat{A}$和$\hat{B}$对易）。由单粒子力学量的表象变换

$$\hat{a}_i = \sum_k S_{ik}^{\dagger} \hat{b}_k, \qquad \hat{a}_i^{\dagger} = \sum_j \hat{b}_j^{\dagger} S_{ji}$$

体系力学量$\hat{\mathcal{A}}$在任意（B）表象为

$$\hat{\mathcal{A}} = \sum_i a_i \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i = \sum_{ijk} a_i S_{ji} S_{ik}^{\dagger} \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_k = \sum_{ijk} a_i \langle b_j | a_i \rangle \langle a_i | b_k \rangle \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_k$$

$$= \sum_{ijk} \langle b_j | \hat{A} | a_i \rangle \langle a_i | b_k \rangle \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_k = \sum_{jk} \langle b_j | \hat{A} | b_k \rangle \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_k = \sum_{jk} A_{jk} \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_k$$

单粒子力学量$\hat{A}$在B表象的矩阵元$A_{jk} = \langle b_j | \hat{A} | b_k \rangle$，退化到自身表象（$A$表象）变成对角矩阵$A_{jk} = a_k \delta_{jk}$。注意，虽然求和里面每一项都不是厄密的，但是整个求和是厄密的，保证了$\hat{\mathcal{A}}$的厄密性质。

6.2.2 可加性两粒子力学量

设在A表象，两粒子关联算符$\hat{V}$有确定值，

$$\hat{V} |a_i\rangle |a_j\rangle = V_{ij} |a_i\rangle |a_j\rangle$$

例如，两粒子势能算符在坐标表象有确定值

$$\hat{V} |\vec{x}\rangle |\vec{x}'\rangle = V(|\vec{x} - \vec{x}'|) |\vec{x}\rangle |\vec{x}'\rangle$$

在按照a_i分布的 Fock 空间$|n_1 \dots n_i \dots\rangle$，每两个粒子的关联力学量$\hat{V}$都有确定值。考虑到两个粒子可处于不同单粒子态，也可处于同一单粒子态，与$\hat{V}$对应的体系力学量算符$\hat{\mathcal{V}}$在自身表象为

$$\hat{\mathcal{V}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j + \frac{1}{2} \sum_i V_{ii} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} \left(\hat{n}_i \hat{n}_j - \hat{n}_i \delta_{ij} \right)$$

由 Bose 子对易关系和 Fermi 子反对易关系，$j \neq i$时，有

$$\hat{n}_i \hat{n}_j - \hat{n}_i \delta_{ij} = \hat{n}_i \hat{n}_j = \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_j = \pm \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_i \hat{a}_j = \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_j \hat{a}_i$$

$j = i$时，有

$$\hat{n}_i \hat{n}_j - \hat{n}_i \delta_{ij} = \hat{n}_i \hat{n}_i - \hat{n}_i = \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i - \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i$$

$$= \hat{a}_i^{\dagger} \left(1 \pm \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i \right) \hat{a}_i - \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i = \pm \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i \hat{a}_i = \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i \hat{a}_i$$

最后一步把两个消灭算符（或者产生算符）进行了对易。结合$j \neq i$和$j = i$两种

情况，都有

$$\hat{n}_i\hat{n}_j - \hat{n}_i\delta_{ij} = \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j\hat{a}_i$$

故在自身表象有

$$\hat{\mathcal{V}} = \frac{1}{2}\sum_{ij} V_{ij}\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j\hat{a}_i$$

在任意表象B，$\hat{B}|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle$，在按照$b_i$分布的 Fock 空间$|m_1 \dots m_i \dots\rangle$，两粒子关联$\hat{V}$一般没有确定值。由表象变换，与$\hat{V}$对应的体系力学量算符$\hat{\mathcal{V}}$在任意（$B$）表象为

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{V}} &= \frac{1}{2}\sum_{ij} V_{ij}\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j\hat{a}_i \\
&= \frac{1}{2}\sum_{ijklmn} V_{ij}S_{ki}S_{lj}S_{jm}^\dagger S_{in}^\dagger\,\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_l^\dagger\hat{b}_m\hat{b}_n \\
&= \frac{1}{2}\sum_{ijklmn} V_{ij}\langle b_k|a_i\rangle\langle b_l|a_j\rangle\langle a_j|b_m\rangle\langle a_i|b_n\rangle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_l^\dagger\hat{b}_m\hat{b}_n \\
&= \frac{1}{2}\sum_{ijklmn} V_{ij}\langle b_k|\langle b_l|a_j\rangle|a_i\rangle\langle a_j|b_m\rangle\langle a_i|b_n\rangle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_l^\dagger\hat{b}_m\hat{b}_n \\
&= \frac{1}{2}\sum_{ijklmn} \langle b_k|\langle b_l|\hat{V}|a_j\rangle|a_i\rangle\langle a_i|b_n\rangle\langle a_j|b_m\rangle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_l^\dagger\hat{b}_m\hat{b}_n \\
&= \frac{1}{2}\sum_{jklmn} \langle b_k|\langle b_l|\hat{V}|a_j\rangle\langle a_j|b_m\rangle|b_n\rangle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_l^\dagger\hat{b}_m\hat{b}_n \\
&= \frac{1}{2}\sum_{klmn} \langle b_k|\langle b_l|\hat{V}|b_m\rangle|b_n\rangle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_l^\dagger\hat{b}_m\hat{b}_n \\
&= \frac{1}{2}\sum_{klmn} V_{klmn}\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_l^\dagger\hat{b}_m\hat{b}_n
\end{aligned}$$

两粒子力学量算符$\hat{V}$在任意表象的矩阵元

$$V_{klmn} = \langle b_k|\langle b_l|\hat{V}|b_m\rangle|b_n\rangle = \langle 0|\hat{b}_k\hat{b}_l\hat{V}\hat{b}_m^\dagger\hat{b}_n^\dagger|0\rangle$$

表明可加性两粒子关联算符在自身表象是二阶张量，在任意表象是四阶张量。

6.2.3 单粒子连续谱情形

对于有分离谱的单粒子力学量，$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$，正交归一化$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$和完备性条件$\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = 1$，产生和消灭算符$\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$满足

$$\begin{cases} [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \\ [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \end{cases} \quad \text{或者} \quad \begin{cases} \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0 \\ \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0 \\ \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij} \end{cases}$$

粒子数算符定义为$\hat{n}_i = \hat{a}_i\ \hat{a}_i$。

如果单粒子的态由一个量子数描述不够，例如，包含粒子的自旋自由度时，坐标表象的单粒子态应该由坐标与自旋的力学量组$\{\hat{\vec{r}}, \hat{\sigma}\}$的本征态$|\vec{r}, \sigma\rangle$来描述，本征态满足如下本征方程，正交归一化条件和完备性条件，

$$\hat{\vec{r}}|\vec{r}, \sigma\rangle = \vec{r}|\vec{r}, \sigma\rangle, \qquad \hat{\sigma}|\vec{r}, \sigma\rangle = \sigma|\vec{r}, \sigma\rangle$$

$$\langle \vec{r}', \sigma'|\vec{r}'', \sigma''\rangle = \delta(\vec{r}' - \vec{r}'')\delta_{\sigma'\sigma''}$$

$$\int d^3\vec{r} \sum_\sigma |\vec{r}, \sigma\rangle\langle \vec{r}, \sigma| = 1$$

消灭产生算符$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$, $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})$满足对易关系

$$\begin{cases} [\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}(\vec{r}'')] = 0 \\ [\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}^\dagger(\vec{r}'')] = 0 \\ [\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}^\dagger(\vec{r}'')] = \delta(\vec{r}' - \vec{r}'')\delta_{\sigma'\sigma''} \end{cases}$$

或者

$$\begin{cases} \{\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}(\vec{r}'')\} = 0 \\ \{\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}^\dagger(\vec{r}'')\} = 0 \\ \{\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}^\dagger(\vec{r}'')\} = \delta(\vec{r}' - \vec{r}'')\delta_{\sigma'\sigma''} \end{cases}$$

坐标自旋空间和坐标空间的粒子数密度算符

$$\hat{n}_\sigma(\vec{r}) = \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$$

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_\sigma \hat{n}_\sigma(\vec{r})$$

总的粒子数算符

$$\hat{N} = \int d^3\vec{r}\,\hat{\rho}(\vec{r})$$

可加性单粒子算符在任意表象的形式

$$\hat{\mathcal{A}} = \sum_{jk}\langle b_j|\hat{A}|b_k\rangle \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k \Longrightarrow \int d^3\vec{r}'d^3\vec{r}'' \sum_{\sigma'\sigma''}\langle \vec{r}',\sigma'|\hat{A}|\vec{r}'',\sigma''\rangle \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\hat{\psi}_{\sigma''}(\vec{r}'')$$

可加性两粒子关联算符在任意表象的形式

$$\hat{\mathcal{V}} = \frac{1}{2}\sum_{klmn}\langle b_k|\langle b_l|\hat{V}|b_m\rangle|b_n\rangle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_m \hat{b}_n$$

$$\Longrightarrow \frac{1}{2}\int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 d^3\vec{r}_3 d^3\vec{r}_4 \sum_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}\langle \vec{r}_1,\sigma_1|\langle \vec{r}_2,\sigma_2|\hat{V}|\vec{r}_3,\sigma_3\rangle|\vec{r}_4,\sigma_4\rangle$$

$$\times \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1)\hat{\psi}_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2)\hat{\psi}_{\sigma_3}(\vec{r}_3)\hat{\psi}_{\sigma_4}(\vec{r}_4)$$

6.3 量子动力学与二次量子化

在 *Heisenberg* 绘景讨论消灭算符的运动方程

$$i\hbar\frac{d\hat{a}_i}{dt} = [\hat{a}_i, \hat{\mathcal{H}}]$$

忽略三体及以上相互作用，只考虑单粒子与两粒子相互作用，在任意的单粒子分离表象，

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}$$

$$= \sum_{kl}\langle a_k|\hat{H}_0|a_l\rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l + \frac{1}{2}\sum_{klmn}\langle a_k|\langle a_l|\hat{V}|a_m\rangle|a_n\rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n$$

这里单粒子为准粒子，哈密顿量$\hat{H}_0$包含了单粒子的动能和在外场中的势能。

由

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l] = \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_i = \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \mp \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_l$$
$$= \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l - (\hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger - \delta_{ik})\hat{a}_l = \delta_{ik}\hat{a}_l$$
$$[\hat{a}_i, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n] = \delta_{ik}\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n + \delta_{il}\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m$$

有

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_i}{dt} = [\hat{a}_i, \hat{\mathcal{H}}]$$
$$= \sum_l \langle a_i | \hat{H}_0 | a_l \rangle \hat{a}_l + \sum_{lmn} \langle a_i | \langle a_l | \hat{V} | a_m \rangle | a_n \rangle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n$$

如果选择表象为$\hat{V}$有确定值的表象，即

$$\hat{V}|a_m\rangle|a_n\rangle = V_{mn}|a_m\rangle|a_n\rangle$$

由$|a_i\rangle$的正交归一化，有

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_i}{dt} = \sum_l \langle a_i | \hat{H}_0 | a_l \rangle \hat{a}_l + \sum_{lmn} V_{mn} \langle a_i | \langle a_l | a_m \rangle | a_n \rangle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n$$
$$= \sum_l \langle a_i | \hat{H}_0 | a_l \rangle \hat{a}_l + \sum_l V_{li} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_i$$

对于势能算符$\hat{V}$，其自身表象为坐标表象，有

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) = \int d^3\vec{r}' \sum_{\sigma'} \langle \vec{r}, \sigma | \hat{H}_0 | \vec{r}', \sigma' \rangle \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}', t)$$
$$+ \int d^3\vec{r}' \sum_{\sigma'} V(\vec{r}, \vec{r}')\, \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}', t) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)$$

如果$\hat{H}_0$只是坐标和动量的函数，与自旋无关，

$$\langle \vec{r}, \sigma | \hat{H}_0 | \vec{r}', \sigma' \rangle = \hat{H}_0(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma\sigma'}$$

有

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) = \hat{H}_0(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)$$
$$+ \int d^3\vec{r}' \sum_{\sigma'} V(\vec{r}, \vec{r}')\, \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}', t) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)$$

如果忽略两粒子关联$\hat{V}$，*Heisenberg* 绘景中平均场近似下的单粒子消灭算

符$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r},t)$满足的运动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}_\sigma(\vec{r},t)=\hat{H}_0\left(\vec{r},-i\hbar\vec{\nabla}\right)\hat{\psi}_\sigma(\vec{r},t)$$

与 *Schroedinger* 绘景中单粒子波函数$\psi_\sigma(\vec{r},t)$满足的波动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_\sigma(\vec{r},t)=\hat{H}_0\left(\vec{r},-i\hbar\vec{\nabla}\right)\psi_\sigma(\vec{r},t)$$

一致。

可将上面引入 *Fock* 空间处理多体问题的步骤看成是二次量子化：量子力学将力学量量子化，变成算符，但波函数仍然是经典的函数，进入粒子数表象后，等价于把波函数也量子化了，也变成了算符。

6.4 坐标表象中的力学量平均值

坐标表象中的消灭产生算符为$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$, $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})$。

6.4.1 动能算符

动能是可加性算符，在坐标表象（不是动能自身表象）是一个二阶张量，

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{T}}&=\sum_{\sigma\sigma'}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{r}'\langle\vec{r},\sigma|\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}|\vec{r}',\sigma'\rangle\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\sigma\sigma'}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{r}'\left(\vec{\nabla}_r^2\delta(\vec{r}-\vec{r}')\delta_{\sigma\sigma'}\right)\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\\&\xrightarrow[\text{两次分部积分}]{}-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\sigma\sigma'}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{r}'(\delta(\vec{r}-\vec{r}')\delta_{\sigma\sigma'})\left(\vec{\nabla}^2\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\right)\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\sigma}\int d^3\vec{r}\left(\vec{\nabla}^2\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\right)\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})\\&\xrightarrow[\text{分部积分}]{}\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\sigma}\int d^3\vec{r}\left(\vec{\nabla}\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})\right)\end{aligned}$$

6.4 坐标表象中的力学量平均值

为下面如何进行平均场近似作准备。

坐标表象中的消灭产生算符为$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$, $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})$。

6.4.1 体系动能算符的表示

动能是可加性算符，在坐标表象（不是动能自身表象）是一个二阶张量，

$$\hat{\mathcal{T}} = \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{r}' \langle \vec{r}, \sigma | \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} | \vec{r}', \sigma' \rangle \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{r}' \left(\vec{\nabla}_r^2 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma\sigma'} \right) \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')$$

$$\xrightarrow[\text{两次分部积分}]{} -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{r}' (\delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma\sigma'}) \left(\vec{\nabla}^2 \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \right) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \int d^3\vec{r} \left(\vec{\nabla}^2 \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \right) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$$

$$\xrightarrow[\text{分部积分}]{} \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \int d^3\vec{r} \left(\vec{\nabla} \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \right) \cdot \left(\vec{\nabla} \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \right)$$

6.4.2 费米气体的力学量平均值

先考虑粒子数密度算符

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_\sigma \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$$

在动量表象计算平均值。设全同费米子基态为

$$|\Phi_0\rangle = |1 \ldots 1_f, 0 \ldots\rangle$$

即某个单粒子态以下的态全部占满，以上的态全空。这个态对应的动量为p_f。

如果有粒子跃迁到p_f以上的态，则为激发态。粒子数密度算符在基态的平均值

$$\bar{\rho}(\vec{r}) = \langle \Phi_0 | \hat{\rho}(\vec{r}) | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \sum_\sigma \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) | \Phi_0 \rangle$$

把消灭产生算符从坐标表象到动量表象进行表象变换，

$$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) = \int d^3\vec{p}\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle\hat{\psi}_\sigma(\vec{p}) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})$$

$$\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) = \int d^3\vec{p}\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p}) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})$$

$$\bar{\rho}(\vec{r}) = \sum_\sigma \int \frac{d^3\vec{p}d^3\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} \langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^+(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p}')|\Phi_0\rangle$$

由 *Fock* 空间态的正交归一化

$$\langle\cdots n_i'\cdots n_1'|n_1\cdots n_i\cdots\rangle = \delta_{n_1n_1'}\cdots\delta_{n_in_i'}\cdots$$

只有$\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p}')$是粒子数算符时上面积分中的矩阵元才不为零，即必须$\vec{p}' = \vec{p}$，

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p}')|\Phi_0\rangle &= \langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})|\Phi_0\rangle\delta(\vec{p}-\vec{p}') \\ &= \langle\Phi_0|\hat{n}_\sigma(\vec{p})|\Phi_0\rangle\delta(\vec{p}-\vec{p}') \\ &= n_\sigma(\vec{p})\delta(\vec{p}-\vec{p}')\end{aligned}$$

由于

$$n_\sigma(\vec{p}) = \begin{cases}1 & p < p_f \\ 0 & p > p_f\end{cases} = \Theta(p_f - p)$$

有

$$\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p}')|\Phi_0\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}')\Theta(p_f-p)$$

故

$$\begin{aligned}\bar{\rho}(\vec{r}) &= \sum_\sigma \int \frac{d^3\vec{p}d^3\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} \delta(\vec{p}-\vec{p}')\Theta(p_f-p) \\ &= \sum_\sigma \int_{p<p_f} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{p_f^3}{3\pi^2\hbar^3}\end{aligned}$$

这里对自旋的求和贡献了一个因子 2。注意：$\bar{\rho}(\vec{r})$与$\vec{r}$无关，在坐标空间是一个常数。

再考虑单粒子关联算符

$$\hat{\rho}(\vec{r},\vec{r}') = \sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\vec{r})\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}')$$

在动量表象基态$|\Phi_0\rangle$的平均值。通过表象变换并利用费米子粒子数$n_\sigma(\vec{p}) = \Theta(p_f - p)$，有

$$\begin{aligned}
\bar{\rho}(\vec{r},\vec{r}') &= \langle\Phi_0|\hat{\rho}(\vec{r},\vec{r}')|\Phi_0\rangle \\
&= \langle\Phi_0|\sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}')\,|\Phi_0\rangle \\
&= \sum_{\sigma}\int \frac{d^3\vec{p}d^3\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-\vec{p}'\cdot\vec{r}')} \langle\Phi_0|\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{p})\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{p}')|\Phi_0\rangle \\
&= \sum_{\sigma}\int_{p<p_f} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \\
&= 3\bar{\rho}(\vec{r}) \frac{sin(p_f|\vec{r}-\vec{r}'|/\hbar) - (p_f|\vec{r}-\vec{r}'|/\hbar)cos(p_f|\vec{r}-\vec{r}'|/\hbar)}{(p_f|\vec{r}-\vec{r}'|/\hbar)^3}
\end{aligned}$$

注意：$\bar{\rho}(\vec{r},\vec{r}')$在坐标空间不再是一个常数。

当$\vec{r}-\vec{r}' \to 0$时，有

$$\lim_{\vec{r}\to\vec{r}'} \bar{\rho}(\vec{r},\vec{r}') = \bar{\rho}(\vec{r})$$

现在考虑两粒子关联算符

$$\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})\hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}')\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r})$$

在动量表象基态$|\Phi_0\rangle$的平均值。通过表象变换到动量表象，两粒子关联函数

$$\begin{aligned}
&\langle\Phi_0|\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})\hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}')\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r})|\Phi_0\rangle \\
&= \int \frac{d^3\vec{p}d^3\vec{p}'d^3\vec{q}d^3\vec{q}'}{(2\pi\hbar)^6} e^{-\frac{i}{\hbar}[(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}+(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}']} \langle\Phi_0|\hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\vec{p})\hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\vec{q})\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{q}')\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{p}')|\Phi_0\rangle
\end{aligned}$$

考虑到$|\Phi_0\rangle$的正交归一化，只有当$\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{p})\hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{q})\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{q}')\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{p}')$是两个粒子数算符的乘积时矩阵元不为零。分两种情形考虑。

■$\sigma \neq \sigma'$：必须$\vec{p}' = \vec{p}$, $\vec{q}' = \vec{q}$,

$$\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{q}')\hat{\psi}_\sigma(\vec{p}')|\Phi_0\rangle$$

$$=\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{q})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})|\Phi_0\rangle\delta(\vec{p}-\vec{p}')\delta(\vec{q}-\vec{q}')$$

$$\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})|\Phi_0\rangle$$

$$=\int\frac{d^3\vec{p}d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^6}\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{q})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})|\Phi_0\rangle$$

利用$\sigma\neq\sigma'$时的费米子反对易关系

$$\begin{cases}\{\hat{\psi}_\sigma(\vec{p}),\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{q})\}=0\\ \{\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p}),\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{q})\}=0\\ \{\hat{\psi}_\sigma(\vec{p}),\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{q})\}=0\end{cases}$$

$$\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})|\Phi_0\rangle$$

$$=\int\frac{d^3\vec{p}d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^6}\langle\Phi_0|\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{q})\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})|\Phi_0\rangle$$

$$=\int\frac{d^3\vec{p}d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^6}n_\sigma(\vec{p})n_{\sigma'}(\vec{q})=\left(\frac{\bar{\rho}(\vec{r})}{2}\right)^2$$

注意，这里没有考虑对自旋的求和，故有因子 1/2。

■$\sigma=\sigma'$：可以$\vec{p}'=\vec{p},\ \vec{q}'=\vec{q}$或$\vec{p}'=\vec{q},\ \vec{q}'=\vec{p}$，但两种情形都应该有$\vec{p}\neq\vec{q}$，否则由于 *Pauli* 不相容原理，4 个动量均相等$\vec{p}'=\vec{q}'=\vec{q}=\vec{p}$时，两个消灭算符作用于同一个费米子态（$n_\sigma(p)=0,1$）必等于零，

$$\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})|\Phi_0\rangle=0。$$

$$\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}')\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}')\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})|\Phi_0\rangle$$

$$=\int\frac{d^3\vec{p}d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^6}[\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}_\sigma(\vec{q})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})|\Phi_0\rangle$$

$$+e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{q})\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{q})|\Phi_0\rangle]$$

利用$\vec{p}\neq\vec{q}$时的费米子反对易关系，

$$\begin{cases}\{\hat{\psi}_\sigma(\vec{p}),\hat{\psi}_\sigma(\vec{q})\}=0\\ \{\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p}),\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{q})\}=0\\ \{\hat{\psi}_\sigma(\vec{p}),\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{q})\}=0\end{cases}$$

有

$$\begin{aligned}&\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}')\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}')\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})|\Phi_0\rangle\\ =&\int\frac{d^3\vec{p}d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^6}[\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}_\sigma(\vec{q})|\Phi_0\rangle\\ &-e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{q})\cdot(\vec{r}-\vec{r}\prime)}\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma(\vec{p})\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}_\sigma(\vec{q})|\Phi_0\rangle]\\ =&\int\frac{d^3\vec{p}d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^6}\left(1-e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{q})\cdot(\vec{r}-\vec{r}\prime)}\right)n_\sigma(\vec{p})n_\sigma(\vec{q})\\ =&\left(\frac{\bar{\rho}(\vec{r})}{2}\right)^2+\left(\frac{\bar{\rho}(\vec{r},\vec{r}')}{2}\right)^2\end{aligned}$$

6.4.3 玻色气体的力学量平均值

考虑自旋为零的玻色气体。对于动量空间的任意 *Fock* 态$|\Phi\rangle=|n_1\ldots n_i\ldots\rangle$（没有费米面的限制），两粒子关联函数（没有自旋指标）

$$\begin{aligned}&\langle\Phi|\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r})|\Phi\rangle\\ =&\int\frac{d^3\vec{p}d^3\vec{p}'d^3\vec{q}d^3\vec{q}'}{(2\pi\hbar)^6}e^{-\frac{i}{\hbar}[(\vec{p}-\vec{p}\prime)\cdot\vec{r}+(\vec{q}-\vec{q}\prime)\cdot\vec{r}\prime]}\langle\Phi|\hat{\psi}^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}(\vec{q}')\hat{\psi}(\vec{p}')|\Phi\rangle\end{aligned}$$

考虑到态$|\Phi\rangle$的正交归一化，只有当$\hat{\psi}^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}(\vec{q}')\hat{\psi}(\vec{p}')$是两个粒子数算符的乘积时矩阵元不为零。对于玻色子体系，由于没有 *Pauli* 不相容原理的限制，可以有 3 种情形：1）$\vec{p}'=\vec{p},\ \vec{q}'=\vec{q}$，但$\vec{p}\neq\vec{q}$，2）$\vec{p}'=\vec{q},\ \vec{q}'=\vec{p}$，但$\vec{p}\neq\vec{q}$，3）$\vec{p}'=\vec{q}'=\vec{q}=\vec{p}$，故

$$\begin{aligned}&\langle\Phi|\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r})|\Phi\rangle\\ =&\int\frac{d^3\vec{p}d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^6}\left(1-\delta(\vec{p}-\vec{q})\right)[\langle\Phi|\hat{\psi}^\dagger(\vec{p})\hat{\psi}^\dagger(\vec{q})\hat{\psi}(\vec{q})\hat{\psi}(\vec{p})|\Phi\rangle\end{aligned}$$

$$+e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{q})\cdot(\vec{r}-\vec{r}\prime)}\langle\Phi|\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{p})\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{q})\hat{\psi}(\vec{p})\hat{\psi}(\vec{q})|\Phi\rangle]$$

$$+\int\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^6}\langle\Phi|\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{p})\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{p})\hat{\psi}(\vec{p})\hat{\psi}(\vec{p})|\Phi\rangle$$

这里1)：因子$\big(1-\delta(\vec{p}-\vec{q})\big)$的作用是保证$\vec{p}\neq\vec{q}$，用到了δ函数的积分定义；2)：对于费米子体系，4 个动量全相等时动量空间的矩阵元自动为零，不必引入因子$\big(1-\delta(\vec{p}-\vec{q})\big)$，也没有第三项$\langle\Phi|\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{p})\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{p})\hat{\psi}(\vec{p})\hat{\psi}(\vec{p})|\Phi\rangle$。

利用$\vec{p}\neq\vec{q}$时的玻色子对易关系，

$$\begin{cases}\big[\hat{\psi}(\vec{p}),\hat{\psi}(\vec{q})\big]=0\\ \big[\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{p}),\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{q})\big]=0\\ \big[\hat{\psi}(\vec{p}),\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{q})\big]=0\end{cases}$$

和$\vec{p}=\vec{q}$时的玻色子对易关系

$$\begin{cases}\big[\hat{\psi}(\vec{p}),\hat{\psi}(\vec{p})\big]=0\\ \big[\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{p}),\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{p})\big]=0\\ \big[\hat{\psi}(\vec{p}),\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{p})\big]=1\end{cases}$$

$$\langle\Phi|\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r})\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}\prime)\hat{\psi}(\vec{r}\prime)\hat{\psi}(\vec{r})|\Phi\rangle$$

$$=\int\frac{d^3\vec{p}d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^6}\big(1-\delta(\vec{p}-\vec{q})\big)\left(1+e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{q})\cdot(\vec{r}-\vec{r}\prime)}\right)n(\vec{p})n(\vec{q})$$

$$+\int\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^6}n(\vec{p})(n(\vec{p})-1)$$

$$=\left(\int\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}n(\vec{p})\right)^2+\left|\int\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}n(\vec{p})e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\prime)}\right|^2-\int\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^6}n(\vec{p})(n(\vec{p})+1)$$

6.5 费米体系的 Hartree 平均场方法

设全同费米子体系的能量包含动能和两体相互作用部分，忽略其它多体相互作用，体系的哈密顿量

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{ij} T_{ij}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2}\sum_{ijmn} V_{ijmn}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n$$

$$T_{ij} = \langle a_i|\hat{T}|a_j\rangle, \qquad V_{ijmn} = \langle a_i|\langle a_j|\hat{V}|a_m\rangle|a_n\rangle$$

下面用近似方法处理两粒子关联算符$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n$。将两粒子关联分解成所有可能的单粒子关联的乘积，

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n \to (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n)(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m) - (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m)(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n) + \delta_{mj}(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n) - \delta_{nj}(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m)$$

再将单粒子关联算符$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$分成它的平均（经典）部分和量子涨落部分，

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j = \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j\rangle + \delta(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j)$$

$\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j\rangle = \langle\Phi|\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j|\Phi\rangle$是单粒子关联算符在 *Fock* 空间基态$|\Phi\rangle = |1,\cdots 1,0,\cdots 0\rangle$的平均值。于是两粒子关联包含有三部分：完全经典部分，经典与量子涨落混合部分，和完全量子涨落部分。忽略完全量子涨落部分，有

$$\begin{aligned}&\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n \\ \to\ &\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n\rangle\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m\rangle - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle \\ &+\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n\rangle\delta(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m) + \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m\rangle\delta(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n) - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle\delta(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n) - \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle\delta(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m)\end{aligned}$$

再代回$\delta(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j) = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j\rangle$，有

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n \to\ &\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n\rangle\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m\rangle \\ &+\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n\rangle\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m + \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m\rangle\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n - \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\end{aligned}$$

上述近似的思想是将两粒子关联因子化为单粒子关联的乘积，再将其中一个单粒子关联取平均值。这样，把两粒子关联问题近似为单粒子关联问题。在

量子统计或者量子场论中，用 *Wick* 转动实现上述思想。

注意，上面的 *Fock* 空间基态$|\Phi\rangle = |1,\cdots 1,0,\cdots 0\rangle$还没有定义是按照哪个单粒子算符$A$的本征值来分布粒子数，即表象$A$还没有确定。

将上面两体关联的近似处理代入体系的哈密顿量，

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{ij} T_{ij}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2}\sum_{ijmn} V_{ijmn}\left[\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n\rangle\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m\rangle\right.$$
$$\left. + \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n\rangle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m + \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n - \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\right]$$

■对于$\hat{\mathcal{H}}$中的经典量子混合部分，重新安排求和指标，有

$$\sum_{ijmn} V_{ijmn}\left[\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n\rangle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m + \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n - \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\right]$$
$$= \sum_{ijmn}\left[+V_{mijn} + V_{imnj} - V_{minj} - V_{imjn}\right]\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n\rangle \hat{a}_i^+ \hat{a}_j$$
$$= 4\sum_{ijmn} V_{mijn}\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n\rangle \hat{a}_i^+ \hat{a}_j$$

最后一个等式利用了V_{ijmn}的定义

$$V_{ijmn} = \langle a_i|\langle a_j|\hat{V}|a_m\rangle|a_n\rangle = \langle 0|\hat{a}_i\hat{a}_j\hat{V}\hat{a}_m^+\hat{a}_n^+|0\rangle$$

和费米子消灭产生算符的反对易关系导致的

$$V_{ijmn} = -V_{jimn} = -V_{ijnm} = V_{jinm}$$

■对于$\hat{\mathcal{H}}$中的完全经典部分，重新安排求和指标，有

$$\sum_{ijmn} V_{ijmn}\left[\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n\rangle\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m\rangle\right] = 2\sum_{ijmn} V_{ijmn}\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle$$

故体系的哈密顿量

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{ijmn} V_{ijmn}\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle + \sum_{ij}\left[T_{ij} + 2\sum_{mn} V_{mijn}\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n\rangle\right]\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$$

第一项是一个常数，平均场使得体系的能量产生了一个平移；如果能将第二项

的单粒子关联算符$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$退化成单粒子密度算符$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$，即将矩阵对角化，

$$T_{ij} + 2\sum_{mn} V_{mijn}\langle\Phi|\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n|\Phi\rangle = \varepsilon_i \delta_{ij}$$

则第二项为体系的准粒子能量之和$\sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i$，包括动能和势能两部分。

注意：这个使得矩阵对角化的表象A不对应一个裸粒子的力学量算符$\hat{A}$。这是一个有效的单体相互作用，已经包含二体相互作用势的贡献，因此表象A对应的是一个准粒子的哈密顿算符。如何找到这个准粒子表象，就是通过矩阵$T_{ij} + 2\sum_{mn} V_{mijn}\langle\Phi|\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n|\Phi\rangle$的对角化来确定准粒子的能级$\varepsilon_i$。

在这个按照准粒子能量分布的 *Fock* 空间态$|\Phi\rangle = |1 \dots 1, 0 \dots\rangle$，考虑到$|\Phi\rangle$的正交归一化性质，有

$$\langle\Phi|\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n|\Phi\rangle = \langle\Phi|\hat{n}_n|\Phi\rangle\delta_{mn} = \delta_{mn}$$

哈密顿算符$\hat{\mathcal{H}}$中的常数项

$$\sum_{ijmn} V_{ijmn}\langle\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m\rangle\langle\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n\rangle = \sum_{ij} V_{ijij}$$

故有

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{ij} V_{ijij} + \sum_i \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_{ij} V_{ijij} + \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i$$

对于体系的基态，

$$\hat{\mathcal{H}}|\Phi\rangle = E_0|\Phi\rangle, \qquad E_0 = \sum_{ij} V_{ijij} + \sum_{i(p<p_f)} \varepsilon_i$$

对于单粒子-空穴态$\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n|\Phi\rangle$（即在$p < p_f$消灭一个粒子而在$p > p_f$产生一个粒子的激发态），是否为能量的本征态？

由于

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}_n] = \sum_i \varepsilon_i [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i, \hat{a}_n] = \sum_i \varepsilon_i (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_n - \hat{a}_n \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i)$$

$$= -\sum_i \varepsilon_i \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_i + \hat{a}_n \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i\right) = -\sum_i \varepsilon_i \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_n\} \hat{a}_i = -\varepsilon_n \hat{a}_n$$

$$\left[\widehat{\mathcal{H}}, \hat{a}_m^\dagger\right] = \varepsilon_m \hat{a}_m^\dagger$$

$$\widehat{\mathcal{H}} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n |\Phi\rangle = \left(\hat{a}_m^\dagger \widehat{\mathcal{H}} + \varepsilon_m \hat{a}_m^\dagger\right) \hat{a}_n |\Phi\rangle$$

$$= \left[\varepsilon_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n + \hat{a}_m^\dagger \left(-\varepsilon_n \hat{a}_n + \hat{a}_n \widehat{\mathcal{H}}\right)\right] |\Phi\rangle$$

$$= (E_0 + \varepsilon_m - \varepsilon_n) \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n |\Phi\rangle,$$

激发态能量为$E_0 + \varepsilon_m - \varepsilon_n$。

第 7 章 相对论量子力学

非相对论量子力学的困难：

1)无相对论协变性。动量能量不对称：$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$，空间时间不对称：$\hat{\vec{x}}$是算符而$t$是经典量。

2)理论上不能自洽引入自旋。非相对论量子力学中的自旋是通过相对论量子力学的非相对论极限引入的。

3)非相对论量子力学几率守恒，无粒子的产生与湮灭。例如在多粒子体系引入粒子产生与消灭算符，可以改变粒子数的分布，但总的粒子数守恒。

相对论量子力学的建立：不是一个简单的运动学推广

$$E=\frac{\vec{p}^2}{2m}\rightarrow E^2=\vec{p}^2c^2+m^2c^4$$

在发展的过程中建立了相对论量子力学，最后有了处理粒子产生与消灭的相对论量子场论。

相对论量子力学的应用：一方面是研究一些相对论量子力学系统【不考虑粒子的产生与消灭，例如凝聚态物理，原子精细结构，核物理，重夸克物理】的重要工具，另一方面是建立量子场论的基础。

7.1 准备

7.1.1 自然单位制

物理学中一共有三个独立的量纲，一般选取长度量纲【L】，时间量纲【T】，和能量量纲【E】。在相对论量子力学，特别是由此发展的量子场论，由于高速和微观的特点，取速度的单位为c，取作用量的单位为$\hbar$，另外一个独立的量纲单位取为能量量纲【E】。

自然单位制：取$\hbar=c=1$，$\hbar,c$便不在计算中明显出现了，所有物理量的量

纲都是【E】的函数。如果取能量量纲为GeV，则长度量纲为GeV^{-1}~fm，时间为GeV^{-1}~fm，等等。当然，在计算的最后，要根据量纲分析把$\hbar, c$再包含进来。

7.1.2 *Minkowski* 空间

三维空间矢量的定义：如果A_i（$i=1,2,3$）在两个坐标系通过 *Galileo* 变换矩阵Λ（平移，旋转，等等）联系

$$A_i \to \Lambda_i{}^j A_j$$

（相同上下指标表示求和），则A_i构成的$\vec{A}$为三维空间的矢量。

两个矢量$\vec{A}$，$\vec{B}$点积的定义：

$$\vec{A}\cdot\vec{B} \equiv A_i \delta^{ij} A_j$$

δ^{ij}为三维空间的度规张量

$$\delta_{ij} = \delta^{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

令$A^i = \delta^{ij} A_j$【$= A_i$】，有

$$\vec{A}\cdot\vec{B} = A_i B^i = A_1 B_1 + A_2 B_2 + A_3 B_3 \ \ (= A^i B_i)$$

例如坐标矢量$\vec{x}$的模方$\vec{x}\cdot\vec{x} = x_i x^i = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$，动量矢量$\vec{p}$的模方$\vec{p}\cdot\vec{p} = p_i p^i = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$，坐标动量的点积$\vec{x}\cdot\vec{p} = x_i p^i = x_1 p_1 + x_2 p_2 + x_3 p_3$。

四维空间矢量的定义：如果A_μ（$\mu=0,1,2,3$）在两个坐标系通过 *Lorentz* 变换矩阵Λ（平移，旋转，等等）联系

$$A_\mu \to \Lambda_\mu{}^\nu A_\nu$$

（相同上下指标表示求和），则A_μ构成的A为四维空间的矢量。

两个矢量A, B点积的定义：

$$A\cdot B \equiv A_\mu g^{\mu\nu} A_\nu$$

$g^{\mu\nu}$为四维空间的度规张量

$$g_{\mu\nu}=g^{\mu\nu}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}$$

令$A^\mu=g^{\mu\nu}A_\nu$【注意：如果取$A_\mu=(A_0,\vec{A})$，则$A^\mu=g^{\mu\nu}A_\nu=(A_0,-\vec{A})\neq A_\mu$】，有

$$A\cdot B=A_\mu B^\mu=A_0B_0-A_1B_1-A_2B_2-A_3B_3=A_0^2-\vec{A}\cdot\vec{B}\ \ (=A^\mu B_\mu)$$

例如坐标矢量$x_\mu=(t,\vec{x})$，$x^\mu=g^{\mu\nu}x_\nu=(t,-\vec{x})$，$x^2=x_\mu x^\mu=t^2-\vec{x}^2$，动量矢量$p_\mu=(E,\vec{p})$，$p^\mu=g^{\mu\nu}p_\nu=(E,-\vec{p})$，$p^2=p_\mu p^\mu=E^2-\vec{p}^2$，坐标和动量的点积$x\cdot p=x_\mu p^\mu=tE-\vec{x}\cdot\vec{p}=x_\mu p^\mu$。

注意，由于

$$\partial_\mu\equiv\frac{\partial}{\partial x^\mu}=(\partial_t,-\vec{\nabla}),\qquad \partial^\mu\equiv\frac{\partial}{\partial x_\mu}=(\partial_t,\vec{\nabla})$$

有$x^\mu\partial_\mu=t\partial_t+\vec{x}\cdot\vec{\nabla}$，$\partial_\mu j^\mu=\partial_t j_0+\vec{\nabla}\cdot\vec{j}$，$\partial^\mu\partial_\mu=\partial_t^2-\vec{\nabla}^2$。

7.2 相对论运动方程

7.2.1 *Klein-Gordon* 方程及其困难

考虑自由粒子的波动方程。直接的想法是用相对论能量替换非相对论能量

$$E=\frac{\vec{p}^2}{2m}\rightarrow E^2=\vec{p}^2+m^2$$

坐标表象的量子化（自然单位制）

$$\hat{E}=i\partial_t,\qquad \hat{\vec{p}}=-i\vec{\nabla}$$

从 *Schroedinger* 方程过渡到相对论 *Klein-Gordon* 方程

$$i\partial_t\varphi(x)=-\frac{\vec{\nabla}^2}{2m}\varphi(x)\quad\rightarrow\quad -\partial_t^2\varphi(x)=\left(-\vec{\nabla}^2+m^2\right)\varphi(x)$$

写成相对论协变形式

$$\left(\partial_\mu\partial^\mu+m^2\right)\varphi(x)=0$$

用φ^*左乘 *Klein-Gordon* 方程，

$$\varphi^*\left(\partial_\mu\partial^\mu + m^2\right)\varphi = 0$$

再用φ右乘 *Klein-Gordon* 方程的复共轭，

$$\left[\left(\partial_\mu\partial^\mu + m^2\right)\varphi^*\right]\varphi = 0$$

然后两式相减，有几率流守恒方程（连续性方程）

$$\partial^\mu j_\mu = 0, \qquad j_\mu = \varphi^*\left(\partial_\mu\varphi\right) - \left(\partial_\mu\varphi^*\right)\varphi$$

即

$$\partial_t\rho + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0$$

几率密度和几率流密度为

$$\rho = j_0 = \frac{i}{2m}\left(\varphi^*\partial_t\varphi - \varphi\partial_t\varphi^*\right)$$

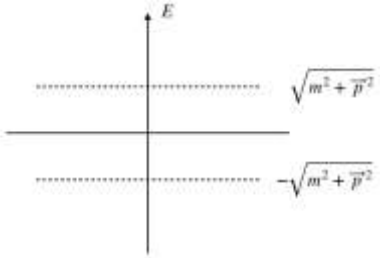
$$\vec{j} = \frac{i}{2m}\left(\varphi^*\vec{\nabla}\varphi - \varphi\vec{\nabla}\varphi^*\right)$$

因为 *Klein*—*Gordon* 方程是一个时间的二阶微分方程，φ和$\partial_t\varphi$都是独立的初始条件，导致上式中的几率密度ρ有可能为负。这就是 *Klein-Gordon* 方程的几率不正定困难。注意，*Schroedinger* 方程是时间的一阶微分方程，几率密度$\rho = \varphi^*\varphi$正定。

自由粒子的 Klein—Gordon 方程$\left(\partial_\mu\partial^\mu + m^2\right)\varphi(x) = 0$的平面波解

$$\varphi(x) = e^{-ip^\mu x_\mu} = e^{-i(Et - \vec{p}\cdot\vec{x})}$$

四动量满足$E^2 = \vec{p}^2 + m^2$，有$E = \pm\sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$，*Klein-Gordon* 方程有负能困难。



在相对论经典力学中，只要粒子初始时处在正能态，由于没有跃迁，不可能进入负能态，故无负能困难。而在量子力学中有跃迁，可以从正能态跃迁到负能态。注意，在 *Schroedinger* 方程中，$E = \vec{p}^2/(2m)$，无负能困难。

看来，仅仅考虑相对论运动学修正不行。

第 7 章 相对论量子力学

非相对论量子力学的困难：

1)无相对论协变性。动量能量不对称：$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$，空间时间不对称：$\hat{\vec{x}}$是算符而$t$是经典量。

2)理论上不能自洽引入自旋。非相对论量子力学中的自旋是通过相对论量子力学的非相对论极限引入的。

3)非相对论量子力学几率守恒，无粒子的产生与湮灭。例如在多粒子体系引入粒子产生与消灭算符，可以改变粒子数的分布，但总的粒子数守恒。

相对论量子力学的建立：不是一个简单的运动学推广

$$E=\frac{\vec{p}^2}{2m}\rightarrow E^2=\vec{p}^2c^2+m^2c^4$$

在发展的过程中建立了相对论量子力学，最后有了处理粒子产生与消灭的相对论量子场论。

相对论量子力学的应用：一方面是研究一些相对论量子力学系统【不考虑粒子的产生与消灭，例如凝聚态物理，原子精细结构，核物理，重夸克物理】的重要工具，另一方面是建立量子场论的基础。

7.1 准备

7.1.1 自然单位制

物理学中一共有三个独立的量纲，一般选取长度量纲【L】，时间量纲【T】，和能量量纲【E】。在相对论量子力学，特别是由此发展的量子场论，由于高速和微观的特点，取速度的单位为c，取作用量的单位为$\hbar$，另外一个独立的量纲单位取为能量量纲【E】。

自然单位制：取$\hbar=c=1$，$\hbar,c$便不在计算中明显出现了，所有物理量的量

纲都是【E】的函数。如果取能量量纲为GeV，则长度量纲为GeV^{-1}~fm，时间为GeV^{-1}~fm，等等。当然，在计算的最后，要根据量纲分析把$\hbar, c$再包含进来。

7.1.2 *Minkowski* 空间

三维空间矢量的定义：如果A_i（$i=1,2,3$）在两个坐标系通过 *Galileo* 变换矩阵Λ（平移，旋转，等等）联系

$$A_i \to \Lambda_i{}^j A_j$$

（相同上下指标表示求和），则A_i构成的$\vec{A}$为三维空间的矢量。

两个矢量$\vec{A}$，$\vec{B}$点积的定义：

$$\vec{A}\cdot\vec{B} \equiv A_i \delta^{ij} A_j$$

δ^{ij}为三维空间的度规张量

$$\delta_{ij} = \delta^{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

令$A^i = \delta^{ij} A_j$【$= A_i$】，有

$$\vec{A}\cdot\vec{B} = A_i B^i = A_1 B_1 + A_2 B_2 + A_3 B_3 \ \ (= A^i B_i)$$

例如坐标矢量$\vec{x}$的模方$\vec{x}\cdot\vec{x} = x_i x^i = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$，动量矢量$\vec{p}$的模方$\vec{p}\cdot\vec{p} = p_i p^i = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$，坐标动量的点积$\vec{x}\cdot\vec{p} = x_i p^i = x_1 p_1 + x_2 p_2 + x_3 p_3$。

四维空间矢量的定义：如果A_μ（$\mu=0,1,2,3$）在两个坐标系通过 *Lorentz* 变换矩阵Λ（平移，旋转，等等）联系

$$A_\mu \to \Lambda_\mu{}^\nu A_\nu$$

（相同上下指标表示求和），则A_μ构成的A为四维空间的矢量。

两个矢量A, B点积的定义：

$$A\cdot B \equiv A_\mu g^{\mu\nu} A_\nu$$

$g^{\mu\nu}$为四维空间的度规张量

$$g_{\mu\nu}=g^{\mu\nu}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}$$

令$A^\mu=g^{\mu\nu}A_\nu$【注意：如果取$A_\mu=(A_0,\vec{A})$，则$A^\mu=g^{\mu\nu}A_\nu=(A_0,-\vec{A})\neq A_\mu$】，有

$$A\cdot B=A_\mu B^\mu=A_0B_0-A_1B_1-A_2B_2-A_3B_3=A_0^2-\vec{A}\cdot\vec{B}\ \ (=A^\mu B_\mu)$$

例如坐标矢量$x_\mu=(t,\vec{x})$，$x^\mu=g^{\mu\nu}x_\nu=(t,-\vec{x})$，$x^2=x_\mu x^\mu=t^2-\vec{x}^2$，动量矢量$p_\mu=(E,\vec{p})$，$p^\mu=g^{\mu\nu}p_\nu=(E,-\vec{p})$，$p^2=p_\mu p^\mu=E^2-\vec{p}^2$，坐标和动量的点积$x\cdot p=x_\mu p^\mu=tE-\vec{x}\cdot\vec{p}=x_\mu p^\mu$。

注意，由于

$$\partial_\mu\equiv\frac{\partial}{\partial x^\mu}=(\partial_t,-\vec{\nabla}),\qquad \partial^\mu\equiv\frac{\partial}{\partial x_\mu}=(\partial_t,\vec{\nabla})$$

有$x^\mu\partial_\mu=t\partial_t+\vec{x}\cdot\vec{\nabla}$，$\partial_\mu j^\mu=\partial_t j_0+\vec{\nabla}\cdot\vec{j}$，$\partial^\mu\partial_\mu=\partial_t^2-\vec{\nabla}^2$。

7.2 相对论运动方程

7.2.1 *Klein-Gordon* 方程及其困难

考虑自由粒子的波动方程。直接的想法是用相对论能量替换非相对论能量

$$E=\frac{\vec{p}^2}{2m}\rightarrow E^2=\vec{p}^2+m^2$$

坐标表象的量子化（自然单位制）

$$\hat{E}=i\partial_t,\qquad \hat{\vec{p}}=-i\vec{\nabla}$$

从 *Schroedinger* 方程过渡到相对论 *Klein-Gordon* 方程

$$i\partial_t\varphi(x)=-\frac{\vec{\nabla}^2}{2m}\varphi(x)\quad\rightarrow\quad -\partial_t^2\varphi(x)=\left(-\vec{\nabla}^2+m^2\right)\varphi(x)$$

写成相对论协变形式

$$\left(\partial_\mu\partial^\mu+m^2\right)\varphi(x)=0$$

用φ^*左乘 *Klein-Gordon* 方程，

$$\varphi^*\left(\partial_\mu\partial^\mu + m^2\right)\varphi = 0$$

再用φ右乘 *Klein-Gordon* 方程的复共轭，

$$\left[\left(\partial_\mu\partial^\mu + m^2\right)\varphi^*\right]\varphi = 0$$

然后两式相减，有几率流守恒方程（连续性方程）

$$\partial^\mu j_\mu = 0, \qquad j_\mu = \varphi^*\left(\partial_\mu\varphi\right) - \left(\partial_\mu\varphi^*\right)\varphi$$

即

$$\partial_t\rho + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0$$

几率密度和几率流密度为

$$\rho = j_0 = \frac{i}{2m}\left(\varphi^*\partial_t\varphi - \varphi\partial_t\varphi^*\right)$$

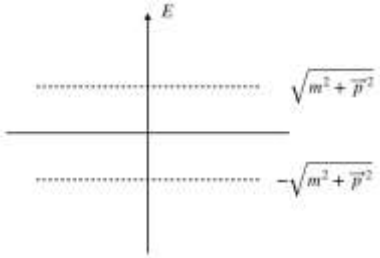
$$\vec{j} = \frac{i}{2m}\left(\varphi^*\vec{\nabla}\varphi - \varphi\vec{\nabla}\varphi^*\right)$$

因为 *Klein*—*Gordon* 方程是一个时间的二阶微分方程，φ和$\partial_t\varphi$都是独立的初始条件，导致上式中的几率密度ρ有可能为负。这就是 *Klein-Gordon* 方程的几率不正定困难。注意，*Schroedinger* 方程是时间的一阶微分方程，几率密度$\rho = \varphi^*\varphi$正定。

自由粒子的 Klein—Gordon 方程$\left(\partial_\mu\partial^\mu + m^2\right)\varphi(x) = 0$的平面波解

$$\varphi(x) = e^{-ip^\mu x_\mu} = e^{-i(Et - \vec{p}\cdot\vec{x})}$$

四动量满足$E^2 = \vec{p}^2 + m^2$，有$E = \pm\sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$，*Klein-Gordon* 方程有负能困难。



在相对论经典力学中，只要粒子初始时处在正能态，由于没有跃迁，不可能进入负能态，故无负能困难。而在量子力学中有跃迁，可以从正能态跃迁到负能态。注意，在 *Schroedinger* 方程中，$E = \vec{p}^2/(2m)$，无负能困难。

看来，仅仅考虑相对论运动学修正不行。

7.2.2 Dirac 方程及其困难

为了解决由时间二次微分引起的负几率困难，似乎只能有时间的一次微分。又由于相对论协变性，空间也只能有一次微分，即方程中只能包含E和$\vec{p}$的线性项。考虑到自由粒子的E只是粒子动量$\vec{p}$和质量m的函数，

$$E = \vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m$$

为了满足$E^2 = \vec{p}^2 + m^2$的相对论关系，标量β和矢量$\vec{\alpha}$不能是简单的常数，只可能是矩阵。

量子化（$E \to i\partial_t,\ \vec{p} \to -i\vec{\nabla}$）后的运动方程为

$$\left(i\partial_t + i\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} - \beta m\right)\psi = 0$$

波函数ψ也是一列矩阵，称为旋量波函数。左乘矩阵β

$$\left(i\beta\partial_t + i\beta\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} - \beta^2 m\right)\psi = 0$$

定义 4 个γ矩阵，

$$\gamma_\mu = (\gamma_0, \vec{\gamma}) = (\beta, \beta\vec{\alpha})$$

且设

$$\gamma_0^2 = 1$$

则运动方程变成 *Dirac 方程*

$$\left(i\gamma_\mu\partial^\mu - m\right)\psi = 0$$

下面讨论 4 个γ矩阵的性质。

1）用算符$\left(i\gamma_\mu\partial^\mu + m\right)$作用 *Dirac* 方程，

$$\left(i\gamma_\mu\partial^\mu + m\right)\left(i\gamma_\nu\partial^\nu - m\right)\psi = 0$$

$$\left(\gamma_\mu\gamma_\nu\partial^\mu\partial^\nu + m^2\right)\psi = 0$$

$$\left(\frac{1}{2}\left(\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu\right)\partial^\mu\partial^\nu + m^2\right)\psi = 0$$

当 4 个γ矩阵满足对易关系

$$\{\gamma_\mu,\gamma_\nu\}=2g_{\mu\nu}$$

有（$\partial_\mu=g_{\mu\nu}\partial^\nu$）

$$\left(\partial_\mu\partial^\mu+m^2\right)\psi=0$$

此时作用于旋量ψ的矩阵消失，说明 *Dirac* 旋量ψ的每个分量均满足 *Klein-Gordon* 方程，保证了平面波解$\psi(x)=Ae^{-ip^\mu x_\mu}$（注意$A$是一列矩阵！）以及质能关系式$E^2=\vec{p}^2+m^2$。这也说明正负能平面波解都是 *Dirac* 方程的解，表明 *Dirac* 方程仍然有负能困难。

注意：ψ的每个分量满足 *Klein-Gordon* 方程，但总个旋量波函数的矩阵结构由 *Dirac* 方程决定。另外，基本性质$\{\gamma_\mu,\gamma_\nu\}=2g_{\mu\nu}$导致$\{\gamma_0,\gamma_0\}=2$，保证了$\gamma_0^2=1$的要求。

2）为了保证哈密顿量是厄米算符，

$$\hat{H}=\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}}+\beta m=\gamma_0\vec{\gamma}\cdot\hat{\vec{p}}+\gamma_0 m$$

$$\hat{H}^\dagger=\vec{\gamma}^\dagger\gamma_0^\dagger\cdot\hat{\vec{p}}+\gamma_0^\dagger m$$

只有

$$\gamma_\mu^\dagger=\gamma_0\gamma_\mu\gamma_0$$

即$\gamma_0^\dagger=\gamma_0$，$\vec{\gamma}^\dagger=\gamma_0\vec{\gamma}\gamma_0$，才能保证$\hat{H}^\dagger=\hat{H}$。

3）结论：$\gamma_\mu=(\gamma_0,\vec{\gamma})$的每一个分量是内禀（*Dirac*）空间的矩阵。满足基本性质$\gamma_\mu^\dagger=\gamma_0\gamma_\mu\gamma_0$和$\{\gamma_\mu,\gamma_\nu\}=2g_{\mu\nu}$。由这两个基本性质还可以导出

$$\gamma_0^2=1,\qquad \gamma_1^2=\gamma_2^2=\gamma_3^2=-1,\qquad \gamma^\mu\gamma_\mu=\gamma_0^2-\vec{\gamma}^2=4$$

$$\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma_\mu=-2\gamma^\nu,\qquad \gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma_\mu=4g^{\nu\rho},\qquad \gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma\gamma_\mu=-2\gamma^\sigma\gamma^\rho\gamma^\nu$$

等等关系式。

4）满足以上性质的γ矩阵可取为 4X4 的表示（手征表象）

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \qquad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

I是 2×2 的单位矩阵，$\vec{\sigma}$是 *Pauli* 矩阵。容易验证，这种具体形式的γ矩阵满足基本性质$\gamma_\mu^\dagger = \gamma_0\gamma_\mu\gamma_0$和$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}$。与此对应，波函数是一个 4 维旋量，

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

7.2.3 *Dirac* 方程的几率正定

将 *Dirac* 方程

$$(i\gamma_\mu\partial^\mu - m)\psi = 0$$

两边取厄米共轭

$$\psi^\dagger(-i\gamma_0\gamma_\mu\gamma_0\overleftarrow{\partial}^\mu - m) = 0$$

定义$\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma_0$，有

$$\bar{\psi}(i\gamma_\mu\overleftarrow{\partial}^\mu\gamma^0 + m\gamma^0) = 0$$

右乘γ_0，有

$$\bar{\psi}(i\gamma_\mu\overleftarrow{\partial}^\mu + m) = 0$$

将这个方程右乘ψ，得到

$$\bar{\psi}(i\gamma_\mu\overleftarrow{\partial}^\mu + m)\psi = 0$$

再将 *Dirac* 方程左乘$\bar{\psi}$，得到

$$\bar{\psi}(i\gamma_\mu\partial^\mu - m)\psi = 0$$

上面两个 *Dirac* 方程相加，有几率流守恒方程

$$\partial^\mu j_\mu = 0, \qquad j_\mu = \bar{\psi}\gamma_\mu\psi$$

或

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

几率密度和几率流密度为

$$\rho = j_0 = \bar{\psi}\gamma_0\psi = \psi^\dagger\psi \geq 0$$

$$\vec{j} = \bar{\psi}\vec{\gamma}\psi$$

7.2.4 Dirac 方程的自旋

$$\hat{H} = \gamma_0\vec{\gamma} \cdot \hat{\vec{p}} + \gamma_0 m$$

对于轨道角动量$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$，由于

$$\left[\hat{\vec{L}}, \hat{H}\right] = i\gamma_0\vec{\gamma} \times \hat{\vec{p}}$$

轨道角动量不守恒。在手征表象定义矩阵

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} = \vec{\sigma} I$$

利用手征表象中 *Pauli* 矩阵$\vec{\sigma}$的对易关系，有

$$\left[\vec{\Sigma}, \hat{H}\right] = -2i\gamma_0\vec{\gamma} \times \hat{\vec{p}}$$

故

$$\left[\hat{\vec{L}} + \frac{\vec{\Sigma}}{2}, \hat{H}\right] = 0$$

说明

$$\vec{s} = \frac{1}{2}\vec{\Sigma}$$

为自旋角动量，与时空无关，

$$\vec{J} = \frac{1}{2}\vec{\Sigma} + \vec{L}$$

为总角动量。虽然轨道角动量和自旋角动量都不守恒，但总角动量守恒。

以上分析说明 Dirac 方程的内禀空间就是自旋空间，Dirac 方程自动包含自旋结构。

7.2.5 无质量费米子的二分量理论

在 *Dirac* 方程

$$(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m)\psi=0$$

中取质量$m=0$（手征对称性），

$$\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi=0$$

左乘γ_0，

$$\partial_t\psi+\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}\psi=0$$

只出现 3 个矩阵$\vec{\alpha}$。由

$$\gamma^i\gamma^j+\gamma^j\gamma^i=-2\delta_{ij}$$

$$\gamma^0\gamma^i\gamma^j\gamma^0+\gamma^0\gamma^j\gamma^i\gamma^0=-2\delta_{ij}$$

$$\gamma^0\gamma^i\gamma^0\gamma^j+\gamma^0\gamma^j\gamma^0\gamma^i=2\delta_{ij}$$

$$\alpha^i\alpha^j+\alpha^j\alpha^i=2\delta_{ij}$$

与自旋 *Pauli* 矩阵$\vec{\sigma}$的对易关系一样。说明$\vec{\alpha}$可以取为 2 维的 Pauli 矩阵$\vec{\sigma}$，ψ退化为二分量的波函数，满足

$$(\partial_t+\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})\psi=0$$

无质量费米子的守恒量：

（1）无质量时，$\hat{H}=\vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}$，有$[\hat{\vec{p}},\hat{H}]=0$，动量守恒。

（2）定义手征算符

$$\frac{\vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}}{|\vec{p}|}$$

由于

$$\left[\frac{\vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}}{|\vec{p}|},\hat{H}\right]=0$$

虽然自旋角动量$\vec{s}=\frac{1}{2}\vec{\Sigma}=\frac{1}{2}\vec{\sigma}$不守恒，但自旋在动量方向的投影$\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{|\vec{p}|}$守恒，本征值为$\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{|\vec{p}|}$，由$\left(\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{|\vec{p}|}\right)^2=1$，故本征值$\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{|\vec{p}|}=\pm1$，对应右手费米子和左手费米子。

（3）显然，宇称算符满足$[\hat{P},\hat{H}]\neq 0$，宇称不守恒。

7.3. *Dirac* 方程的协变性

7.3.1 一般 *Lorentz* 变换

相对论矢量的 *Lorentz* 变换

$$x'=\Lambda x \qquad (x'^{\mu}=\Lambda^{\mu}{}_{\nu}x^{\nu}, \qquad x'_{\mu}=\Lambda_{\mu}{}^{\nu}x_{\nu})$$

Λ是 4X4 矩阵。由x^2（*Lorentz* 标量）在变换下保持不变，

$$x_{\mu}x^{\mu}=x'_{\mu}x'^{\mu}=\Lambda_{\mu}{}^{\nu}\Lambda^{\mu}{}_{\sigma}x_{\nu}x^{\sigma}=(\Lambda^{T})^{\nu}{}_{\mu}\Lambda^{\mu}{}_{\sigma}x_{\nu}x^{\sigma}=x_{\nu}(\Lambda^{T}\Lambda)^{\nu}{}_{\sigma}x^{\sigma}$$

必须$\Lambda^{T}\Lambda$为单位矩阵，即

$$(\Lambda^{T}\Lambda)^{\nu}{}_{\sigma}=\delta^{\nu}{}_{\sigma}, \qquad \Lambda^{T}\Lambda=1$$

两边求行列式，

$$1=det(\Lambda^{T}\Lambda)=det(\Lambda^{T})det(\Lambda)=det(\Lambda)det(\Lambda)$$

$$det(\Lambda)=\pm1$$

满足$det(\Lambda)=1$的变换称为正 *Lorentz* 变换，满足$det(\Lambda)=-1$的变换称为非正 *Lorentz* 变换。

现在考虑 *Dirac* 方程的 *Lorentz* 协变性。在 *Dirac* 方程

$$(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m)\psi=0$$

中，有两个空间：时空与内禀（*Dirac*）空间。∂_{μ}是时空中的 *Lorentz* 矢量，$\psi(x)$是内禀空间的旋量，又是时空的函数，每个γ矩阵是内禀空间的矩阵，与时空无关。当进行时空 *Lorentz* 变换Λ，

$$x_{\mu}\rightarrow x'_{\mu}=\Lambda_{\mu}{}^{\nu}x_{\nu}$$

γ矩阵不变，∂_μ与$\psi(x)$怎样变换才能保证 *Dirac* 方程的协变性？

先考虑∂_μ的变换。由

$$\Lambda^T\Lambda = \mathrm{I}, \qquad \Lambda^{-1}\Lambda = \mathrm{I}$$

有

$$\Lambda^{-1} = \Lambda^T$$

$$(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu = (\Lambda^T)^\nu{}_\mu = \Lambda_\mu{}^\nu$$

$$\partial'_\mu = \Lambda_\mu{}^\nu \partial_\nu = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu \partial_\nu$$

再考虑$\psi(x)$的变换。令

$$\psi(x) \to \psi'(x') = S\psi(x)$$

$S(\Lambda)$是内禀空间的变换，但又与 Λ 有关，具体形式由保证 *Dirac* 方程的协变性确定。在上述Λ, S变换下，*Dirac* 方程变为

$$\left(i\gamma^\mu(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu\partial_\nu - m\right)S\psi = 0$$

左乘S^{-1}，

$$\left(iS^{-1}\gamma^\mu S(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu\partial_\nu - m\right)\psi = 0$$

要保证 *Dirac* 方程的相对论协变性，应该有

$$S^{-1}\gamma^\mu S(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu = \gamma^\nu$$

即

$$S\gamma^\nu S^{-1} = \gamma^\mu(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu$$

这就是对变换S的约束条件。下面考虑对于一个具体的 *Lorentz* 变换Λ，由上式确定S的形式。

7.3.2 连续 *Lorentz* 变换

取无穷小 *Lorentz* 变换

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu} x^{\nu}, \quad \Lambda^{\mu}{}_{\nu} = \delta^{\mu}{}_{\nu} + \omega^{\mu}{}_{\nu}$$

$\omega^{\mu}{}_{\nu}$是一无穷小量。条件$\Lambda^T \Lambda = 1$，即$\Lambda_{\mu}{}^{\nu} \Lambda^{\mu}{}_{\sigma} = \delta^{\nu}{}_{\sigma}$要求

$$\omega^{\mu}{}_{\nu} = -\omega_{\nu}{}^{\mu}$$

说明$\omega^{\mu}{}_{\nu}$是一个全反对称矩阵。条件$\Lambda\Lambda^{-1} = 1$要求

$$(\Lambda^{-1})^{\mu}{}_{\nu} = \delta^{\mu}{}_{\nu} - \omega^{\mu}{}_{\nu}$$

设与无穷小 *Lorentz* 变换对应的S变换为

$$S = I - \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}, \qquad S^{-1} = I + \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}$$

$\sigma_{\mu\nu}$是 *Lorentz* 张量，每个分量是 *Dirac* 空间的 4X4 矩阵，由S应该满足的条件$S\gamma^{\nu}S^{-1} = \gamma^{\mu}(\Lambda^{-1})^{\nu}{}_{\mu}$确定，

$$\left(I - \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}\right)\gamma^{\rho}\left(I + \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}\right) = \gamma^{\nu}\left(\delta^{\rho}{}_{\nu} - \omega^{\rho}{}_{\nu}\right)$$

$$\gamma^{\rho} + \frac{i}{4}\left(\gamma^{\rho}\sigma_{\mu\nu} - \sigma_{\mu\nu}\gamma^{\rho}\right)\omega^{\mu\nu} = \gamma^{\rho} - \omega^{\rho\nu}\gamma_{\nu}$$

$$\frac{i}{4}\left[\gamma^{\rho}, \sigma_{\mu\nu}\right]\omega^{\mu\nu} = -\frac{1}{2}\left(\gamma_{\nu}\omega^{\rho\nu} + \gamma_{\mu}\omega^{\rho\mu}\right)$$

$$= -\frac{1}{2}\left(\gamma_{\nu}\delta^{\rho}{}_{\mu}\omega^{\mu\nu} + \gamma_{\mu}\delta^{\rho}{}_{\nu}\omega^{\nu\mu}\right) = -\frac{1}{2}\left(\gamma_{\nu}\delta^{\rho}{}_{\mu} - \gamma_{\mu}\delta^{\rho}{}_{\nu}\right)\omega^{\mu\nu}$$

考虑到$\omega^{\mu\nu}$的独立性，有

$$\left[\gamma^{\rho}, \sigma_{\mu\nu}\right] = 2i\left(\gamma_{\nu}\delta^{\rho}{}_{\mu} - \gamma_{\mu}\delta^{\rho}{}_{\nu}\right)$$

这就是$\sigma_{\mu\nu}$在 *Dirac* 空间应该满足的条件。满足此条件的$\sigma_{\mu\nu}$可以取为

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}\left[\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}\right]$$

显然，$\sigma_{\mu\nu} = -\sigma_{\nu\mu}$，是全反对称矩阵。

7.3.3 旋转与角动量

对于无限小 *Lorentz* 变换，*Dirac* 旋量

$$\psi'(x') = \psi'(\Lambda x) = \psi'(x + \omega x)$$

$$= (1 + \omega^{\nu\mu} x_\mu \partial_\nu)\psi'(x) = (1 - \omega^{\mu\nu} x_\mu \partial_\nu)\psi'(x)$$

两边左乘以$(1 + \omega^{\mu\nu} x_\mu \partial_\nu)$，有

$$\psi'(x) = (1 + \omega^{\mu\nu} x_\mu \partial_\nu)\psi'(x') = (1 + \omega^{\mu\nu} x_\mu \partial_\nu)\left(I - \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}\right)\psi(x)$$

$$= \left(I - \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu} + \omega^{\mu\nu} x_\mu \partial_\nu\right)\psi(x)$$

$$= \left(I - \frac{i}{2}\left(\frac{1}{2}\sigma_{\mu\nu} + i(x_\mu\partial_\nu - x_\nu\partial_\mu)\right)\omega^{\mu\nu}\right)\psi(x)$$

如果取Λ为无限小旋转，则上面从$\psi(x)$经过内禀空间的变换S和坐标空间的变换Λ到$\psi'(x)$的过程就是一个由角动量生成的无限小转动过程。转动算符写成张量的形式就是

$$\psi'(x) = e^{-\frac{i}{2}J_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}}\psi(x) = \left(I - \frac{i}{2}J_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}\right)\psi(x)$$

其中$\omega^{\mu\nu}$是无限小 *Lorentz* 转动张量元，$J_{\mu\nu}$是角动量张量矩阵。

比较上面二式,有

$$J_{\mu\nu} = \sigma_{\mu\nu}/2 + i(x_\mu\partial_\nu - x_\nu\partial_\mu)$$

取$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$，并考虑$\gamma$矩阵的手征表象，$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$，$\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$，总角动量$\vec{J}$ $(J_1 = J_{23},\ J_2 = J_{31},\ J_3 = J_{12})$为

$$\vec{J} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} - i\vec{r} \times \vec{\nabla} = \frac{1}{2}\vec{\Sigma} + \vec{L}$$

说明守恒的角动量$\vec{J}$包含轨道角动量$\vec{L}$和自旋角动量$\vec{s} = \frac{1}{2}\vec{\Sigma}$。

自旋是相对论效应，*Dirac* 方程自动包含自旋。

7.3.4 空间反演不变性（P 变换）

对于突变，例如宇称变换

$$x' = \Lambda x, \quad \Lambda = \mathrm{diag}(1,-1,-1,-1) = \Lambda^{-1}$$

如果取

$$S = \gamma_0$$

由$\gamma_0\gamma_0 = 1$，有$S^{-1} = S$，再由$\gamma_0\vec{\gamma} + \vec{\gamma}\gamma_0 = 0$，容易证明$\Lambda$和$S$满足

$$S\gamma^\nu S^{-1} = \gamma^\mu (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu$$

说明 *Dirac* 方程是空间反演不变的。

7.3.5 时间反演不变性（T 变换）

对于时间反演变换

$$x' = \Lambda x, \quad \Lambda = \mathrm{diag}(-1,1,1,1) = \Lambda^{-1}$$

如果取

$$S = \gamma_1\gamma_2\gamma_3$$

因为

$$SS = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_1\gamma_2\gamma_3 = -\gamma_1\gamma_2\gamma_1\gamma_3\gamma_2\gamma_3 = \gamma_1\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_2\gamma_3 = -\gamma_1\gamma_1\gamma_2\gamma_2\gamma_3\gamma_3 = I$$

故$S^{-1} = S$，有

$$S\gamma^\mu S^{-1} = S\gamma^\mu S = S\gamma^\mu\gamma_1\gamma_2\gamma_3 = \delta^\mu{}_\nu S\gamma^\nu\gamma_1\gamma_2\gamma_3$$

$$= \Lambda^\mu{}_\nu S\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma^\nu = \Lambda^\mu{}_\nu SS\gamma^\nu = \Lambda^\mu{}_\nu\gamma^\nu = (\Lambda^{-1})^\mu{}_\nu\gamma^\nu$$

说明 *Dirac* 方程是时间反演不变的。

7.3.6 力学量的 *Lorentz* 结构

力学量$\hat{F}$在坐标空间+内禀空间的平均值

$$\int d^4x\,\bar{\psi}(x)\hat{F}\psi(x)$$

其中$\bar{\psi}(x)\hat{F}\psi(x)$是$\hat{F}$在内禀空间的平均值，波函数

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix},\qquad \bar{\psi}=\psi^{\dagger}\gamma_0=(\psi_1^{*}\quad \psi_2^{*}\quad \psi_3^{*}\quad \psi_4^{*}\ )\gamma_0$$

力学量$\hat{F}$是内禀空间的矩阵。【注意：比较关于$\psi,\psi^{\dagger},\bar{\psi}$的运动方程：$(i\gamma_\mu\partial^\mu-m)\psi=0,\ \psi^{\dagger}(i\gamma_0\gamma_\mu\gamma_0\overleftarrow{\partial}^\mu+m)=0,\ \bar{\psi}(i\gamma_\mu\overleftarrow{\partial}^\mu+m)=0$,使用$\bar{\psi}$比$\psi^{\dagger}$更合适】

下面讨论力学量在内禀空间的结构。内禀空间独立的4X4的矩阵有16个，可以取为由γ矩阵构造的16个矩阵

$$\Gamma=I,\gamma_\mu,\sigma_{\mu\nu},\gamma_5,\gamma_5\gamma_\mu$$

其中γ_5矩阵定义为

$$\gamma_5=i\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3$$

有性质

$$\{\gamma_5,\gamma_\mu\}=0,\qquad \gamma_5^2=1$$

任意力学量$\hat{F}$都可以由这16个矩阵来线性组合。

力学量在内禀空间的平均值$\bar{\psi}(x)\hat{F}\psi(x)$就是$\bar{\psi}(x)\Gamma\psi(x)$的线性组合。那么这16个内禀空间平均值的*Lorentz*变换性质如何？由

$$\psi'(x')=S\psi(x),\quad \psi'^{\dagger}(x')=\psi^{\dagger}(x)S^{\dagger}$$

$$S=I-\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu},\qquad \sigma_{\mu\nu}=\frac{i}{2}[\gamma_\mu,\gamma_\nu],\qquad S^{\dagger}=I+\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}^{\dagger}\omega^{\mu\nu}$$

$$\gamma_\mu^{\dagger}=\gamma_0\gamma_\mu\gamma_0,\qquad \sigma_{\mu\nu}^{\dagger}=\gamma_0\sigma_{\mu\nu}\gamma_0$$

有

$$\bar{\psi}'(x')=\psi'^{\dagger}(x')\gamma_0=\psi^{\dagger}(x)S^{\dagger}\gamma_0=\bar{\psi}(x)\gamma_0S^{\dagger}\gamma_0$$

$$=\bar{\psi}(x)\left(I+\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}\right)=\bar{\psi}(x)S^{-1}$$

由于γ矩阵在 Lorentz 变换下保持不变，有

$$\bar{\psi}(x)I\psi(x) \to \bar{\psi}'(x')I\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}IS\psi(x)$$
$$\bar{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x) \to \bar{\psi}'(x')\gamma^{\mu}\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^{\mu}S\psi(x)$$
$$\bar{\psi}(x)\sigma^{\mu\nu}\psi(x) \to \bar{\psi}'(x')\sigma^{\mu\nu}\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\sigma^{\mu\nu}S\psi(x)$$
$$\bar{\psi}(x)\gamma^{5}\psi(x) \to \bar{\psi}'(x')\gamma^{5}\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^{5}S\psi(x)$$
$$\bar{\psi}(x)\gamma^{5}\gamma^{\mu}\psi(x) \to \bar{\psi}'(x')\gamma^{5}\gamma^{\mu}\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^{5}\gamma^{\mu}S\psi(x)$$

由变换S应该满足的性质$S\gamma^{\nu}S^{-1} = \gamma^{\mu}(\Lambda^{-1})^{\nu}{}_{\mu}$，容易证明

$$S^{-1}IS = I$$
$$S^{-1}\gamma_{\mu}S = \Lambda_{\mu}{}^{\nu}\gamma_{\nu}$$
$$S^{-1}\sigma_{\mu\nu}S = \Lambda_{\mu}{}^{\sigma}\Lambda_{\nu}{}^{\rho}\sigma_{\sigma\rho}$$
$$S^{-1}\gamma_{5}S = \gamma_{5}$$
$$S^{-1}\gamma_{5}\gamma_{\mu}S = \Lambda_{\mu}{}^{\nu}\gamma_{5}\gamma_{\nu}$$

有

$$\bar{\psi}(x)I\psi(x) \to \bar{\psi}'(x')I\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}IS\psi(x) = \bar{\psi}(x)I\psi(x)$$
$$\bar{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x) \to \bar{\psi}'(x')\gamma^{\mu}\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^{\mu}S\psi(x) = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}\bar{\psi}(x)\gamma^{\nu}\psi(x)$$
$$\bar{\psi}(x)\sigma^{\mu\nu}\psi(x) \to \bar{\psi}'(x')\sigma^{\mu\nu}\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\sigma^{\mu\nu}S\psi(x) = \Lambda^{\mu}{}_{\rho}\Lambda^{\nu}{}_{\sigma}\bar{\psi}(x)\sigma^{\rho\sigma}\psi(x)$$
$$\bar{\psi}(x)\gamma^{5}\psi(x) \to \bar{\psi}'(x')\gamma^{5}\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^{5}S\psi(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^{5}\psi(x)$$
$$\bar{\psi}(x)\gamma^{5}\gamma^{\mu}\psi(x) \to \bar{\psi}'(x')\gamma^{5}\gamma^{\mu}\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^{5}\gamma^{\mu}S\psi(x) = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}\bar{\psi}(x)\gamma^{5}\gamma^{\nu}\psi(x)$$

由此称$\bar{\psi}(x)I\psi(x), \bar{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x), \bar{\psi}(x)\sigma^{\mu\nu}\psi(x), \bar{\psi}(x)\gamma^{5}\psi(x), \bar{\psi}(x)\gamma^{5}\gamma^{\mu}\psi(x)$为 *Lorentz* 标量，矢量，张量，（赝）标量，（赝）矢量。这也是我们为什么选取$\Gamma = I, \gamma_{\mu}, \sigma_{\mu\nu}, \gamma_{5}, \gamma_{5}\gamma_{\mu}$为 16 个内禀空间独立矩阵的原因。

7.4 电磁场问题

将自由 Dirac 方程$(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m)\psi = 0$包含电磁相互作用。

7.4.1 局域规范不变性

引入 4 维电磁势$A_{\mu} = (A_0, \vec{A})$，与电磁场强的关系是

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}A_0 - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \qquad \vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$$

引入相互作用的原则：保证局域规范不变性。由最小耦合引入电磁相互作用：将 *Dirac* 方程中的

$$\text{偏微分}\partial_\mu \to \text{协变微分} D_\mu = \partial_\mu + ieA_\mu,$$

$$\left(i\gamma^\mu D_\mu - m\right)\psi = 0$$

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - e\gamma^\mu A_\mu - m\right)\psi = 0$$

其中$-e\gamma^\mu A_\mu \psi$是费米场（物质场）与电磁场（规范场）的相互作用。

最小耦合保证了在$U(1)$局域变换

$$\psi(x) \to e^{ie\alpha(x)}\psi(x)$$

$$A_\mu(x) \to A_\mu(x) - \partial_\mu \alpha(x)$$ （非相对论规范变换$\vec{A} \to \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda$ 的推广）

时 1）*Dirac* 方程保持不变(自己证明)，

2）电磁场强$\vec{E} = -\vec{\nabla}A_0 - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$，$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$保持不变（电磁势变化但电磁场强不变化），故称为局域规范变换。最小耦合保证了体系具有局域规范对称性。

7.4.2 非相对论极限与电子自旋

电子（带电荷$-e$）满足运动方程

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu + e\gamma^\mu A_\mu - m\right)\psi(x) = 0$$

左乘γ_0，利用$\hat{\vec{p}} = -i\vec{\nabla}$，有

$$\left(i\partial_t - \gamma_o \vec{\gamma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}\right) + eA_0 - m\gamma_0\right)\psi(x) = 0$$

对于定态波函数$\psi(x) = \psi(\vec{x})e^{-iEt}$，有

$$\left(\gamma_0 \vec{\gamma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}\right) - eA_0 + m\gamma_0\right)\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

为了便于过渡到非相对论，将总能量分成动能和静能（质量）两部分

$$E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2} = E' + m$$

并将 4 分量波函数写成两分量形式

$$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}) \\ \chi(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

当然$\varphi(\vec{x})$和$\chi(\vec{x})$都是 2 分量。γ^μ的性质由对易关系完全确定，但其矩阵表示并不唯一。前面提到的$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$, $\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$是手征表示，而在过渡到非相对论时常用的是 *Pauli-Dirac* 表示

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \qquad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

于是在 *Pauli-Dirac* 表示的定态 *Dirac* 方程变为

$$\vec{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}\right)\chi - eA_0\varphi = E'\varphi$$

$$\vec{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}\right)\varphi - eA_0\chi - 2m\chi = E'\chi$$

第二个方程

$$\chi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}\right)}{2m + E' + eA_0}\varphi$$

在非相对论极限$2m \gg |E' + eA_0|$，保留到$1/m$阶为

$$\chi \cong \frac{\vec{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}\right)}{2m}\varphi$$

可以看出，二分量中的φ是主要分量，χ是小分量。将χ代入φ的方程，有

$$\left(\frac{1}{2m}\left(\vec{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}\right)\right)^2 - eA_0\right)\varphi = E'\varphi$$

利用

$$\left[\hat{p}_i - eA_i, \hat{p}_j - eA_j\right] = ie\varepsilon_{ijk}B_k$$

得到电磁场中电子 *Dirac* 方程的非相对论极限，即电磁场中 *Schroedinger* 方程

$$\left(\frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}\right)^2 - \vec{\mu} \cdot \vec{B} - eA_0\right)\varphi = E'\varphi$$

其中$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{\sigma}$是电子内禀磁矩。这样自洽得到了非相对论情形时自旋-磁场相互作用的形式。

7.5 中心场问题

自由粒子的哈密顿量

$$\hat{H} = \gamma_0 \vec{\gamma} \cdot \hat{\vec{p}} + m\gamma_0$$

有相互作用时，

$$\hat{H} = \gamma_0 \vec{\gamma} \cdot \hat{\vec{p}} + m\gamma_0 + V(\vec{r})$$

定态波函数$\psi(x) = \psi(\vec{x})e^{-iEt}$满足的相对论方程

$$\left(\gamma_0 \vec{\gamma} \cdot \hat{\vec{p}} + m\gamma_0 + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

考虑非相对论极限。令$E = E' + m$，$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}) \\ \chi(\vec{x}) \end{pmatrix}$，在 *Pauli-Dirac* 表示 $\gamma_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$，$\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$，定态方程的二分量形式为

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}\chi = (E' - V)\varphi$$

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}\varphi = (2m + E' - V)\chi$$

在非相对论极限$2m \gg |E' - V|$，保留到$1/m$阶，

$$\chi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}}{2m}\varphi$$

$$\frac{1}{2m}\left(\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}\right)^2 \varphi = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\varphi = (E' - V)\varphi$$

这就是$1/m$阶的定态 *Schroedinger* 方程。

保留到$1/m^2$阶，

$$\chi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}}{2m + E' - V}\varphi = \frac{1}{2m}\left(1 - \frac{E' - V}{2m}\right)\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}\varphi$$

$$\frac{1}{2m}\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}\left(1 - \frac{E' - V}{2m}\right)\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}\varphi = (E' - V)\varphi$$

这就是$1/m^2$阶的定态 *Schroedinger* 方程。

考虑$\hat{\vec{p}}$与$V(\vec{r})$的对易关系，

$$\left[\hat{\vec{p}}, V(\vec{r})\right] = -i\vec{\nabla}V(\vec{r})$$

对于中心势$V(r)$，在球坐标系化简后，

$$\left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V - \frac{\hat{\vec{p}}^2}{4m^2}(E' - V) + \frac{1}{4m^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{L}} + \frac{1}{4m^2}\left(\vec{\nabla}^2 V + \frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]\varphi = E'\varphi$$

将$1/m$阶近似解代入左边第三项，为动能的相对论修正

$$\left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V - \frac{\hat{\vec{p}}^4}{8m^3} + \frac{1}{4m^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{L}} + \frac{1}{4m^2}\left(\vec{\nabla}^2 V + \frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]\varphi = E'\varphi$$

分析上面各项的物理意义：左边第一项为动能，第二项为势能，第三项为动能的相对论修正，第四项$\frac{1}{4m^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{L}}$是自旋-轨道相互作用的非相对论形式（自动包含在 Dirac 方程中），主要是第五项的意义？

问题：把总波函数ψ归结为大分量φ后，改变了波函数的归一化:

$$\begin{aligned}
1 &= \langle\psi|\psi\rangle \\
&= \langle\varphi|\varphi\rangle + \langle\chi|\chi\rangle \\
&\cong \langle\varphi|\varphi\rangle + \langle\varphi|\frac{\vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}}{2m}\frac{\vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}}{2m}|\varphi\rangle \\
&= \left(1 + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{4m^2}\right)\langle\varphi|\varphi\rangle \\
&\cong \langle\varphi|\left(1 + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{8m^2}\right)\left(1 + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{8m^2}\right)|\varphi\rangle
\end{aligned}$$

说明大分量φ是不归一的，只有$\psi = \left(1 + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{8m^2}\right)\varphi$才是归一的。故取

$$\varphi = \left(1 - \frac{\hat{\vec{p}}^2}{8m^2}\right)\psi$$

代入上面 Schroedinger 方程，化简后得到

$$\left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V - \frac{\hat{\vec{p}}^4}{8m^3} + \frac{1}{4m^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{L}} + \frac{1}{8m^2}\vec{\nabla}^2 V\right]\psi = E'\psi$$

最后一项是相对论修正的 Darwin 项。这就是中心场中的非相对论方程，包含了

相对论动能修正，自旋-轨道耦合，和 *Dawin* 修正。

7.6 自由 *Dirac* 方程的平面波解

自由粒子的 *Dirac* 方程

$$(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m)\psi(x)=0$$

由于旋量$\psi(x)$的每一个分量都满足 *Klein-Gordon* 方程，有正负能平面波解，设

$$\psi_{+}(x)=u(p)e^{-ip^{\mu}x_{\mu}},$$

$$\psi_{-}(x)=v(p)e^{ip^{\mu}x_{\mu}}$$

其中能量$p_0=\sqrt{\vec{p}^2+m^2}$，自旋结构包含在旋量$u(p)$与$v(p)$中。将平面波解代入 *Dirac* 方程，得到内禀空间中矩阵$u(p)$与$v(p)$满足的方程

$$(\gamma^{\mu}p_{\mu}-m)u(p)=0,$$

$$(\gamma^{\mu}p_{\mu}+m)v(p)=0$$

先考虑在粒子静止系，即$p=(m,\vec{0})$的解，

$$(\gamma_0-1)u(m,\vec{0})=0,$$

$$(\gamma_0+1)v(m,\vec{0})=0$$

在 *Pauli-Dirac* 表象，$\gamma_0=\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix}$，$\vec{\gamma}=\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\\ -\vec{\sigma} & 0\end{pmatrix}$，$u(m,\vec{0}),v(m,\vec{0})$分别有两个独立的解

$$u_{\uparrow}(m,\vec{0})=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix},\qquad u_{\downarrow}(m,\vec{0})=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix},$$

$$v_{\uparrow}(m,\vec{0})=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix},\qquad v_{\downarrow}(m,\vec{0})=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

设从粒子静止系到运动系的 *Lorentz* 变换为

$$u_{\alpha}(p)=Uu_{\alpha}(m,\vec{0}),\qquad v_{\alpha}(p)=Vv_{\alpha}(m,\vec{0}),\qquad \alpha=\uparrow,\downarrow$$

代入$u(p), v(p)$满足的方程

$$(\gamma^\mu p_\mu - m)Uu_\alpha(m, \vec{0}) = 0,$$

$$(\gamma^\mu p_\mu + m)Vv_\alpha(m, \vec{0}) = 0$$

注意到

$$(\gamma^\mu p_\mu - m)(\gamma^\mu p_\mu + m) = (\gamma^\mu p_\mu + m)(\gamma^\mu p_\mu - m) = p^2 - m^2 = 0$$

有

$$U = A(\gamma^\mu p_\mu + m),$$

$$V = B(\gamma^\mu p_\mu - m)$$

其中A, B为常数，即

$$u_\alpha(p) = A(\gamma^\mu p_\mu + m)u_\alpha(m, \vec{0})$$

$$v_\alpha(p) = B(\gamma^\mu p_\mu - m)v_\alpha(m, \vec{0})$$

要求正交归一化条件

$$\bar{u}_\alpha(p)u_\beta(p) = \delta_{\alpha\beta}$$

$$\bar{v}_\alpha(p)v_\beta(p) = -\delta_{\alpha\beta}$$

$$\bar{u}_\alpha(p)v_\beta(p) = 0$$

$$\bar{v}_\alpha(p)u_\beta(p) = 0$$

其中

$$\bar{u}_\alpha(p) = u_\alpha^\dagger(p)\gamma_0 = Au_\alpha^\dagger(m, \vec{0})(\gamma_\mu^\dagger p^\mu + m)\gamma_0 = A\bar{u}_\alpha(m, \vec{0})(\gamma^\mu p_\mu + m)$$

$$\bar{v}_\alpha(p) = v_\alpha^\dagger(p)\gamma_0 = Bv_\alpha^\dagger(m, \vec{0})(\gamma_\mu^\dagger p^\mu - m)\gamma_0 = B\bar{v}_\alpha(m, \vec{0})(\gamma^\mu p_\mu - m)$$

有

$$A = -B = \frac{1}{\sqrt{2m(m+E)}}$$