高等量子力学

华东
版社

O4-2.1
X92

380039

高等量子力学

徐在新



华东师范大学出版社

(沪)新登字第[illegible]号



高等量子力学

徐在新

华东师范大学出版社出版发行
（上海中山北路3663号）
邮政编码：200062
新华书店上海发行所经销　　南汇中古轴上海印刷厂印刷
开本：850×1168　1/32　印张：12.25　字数：315千字
1994年12月第一版　　1994年12月第一次印刷
印数：001—1,000本

ISBN 7-5617-1195-6/N·087　　定　价：13.80元

导　言

一、本书以作者所编写的高等量子力学讲义为基础。该讲义自1985年以来为我系历届研究生及助教进修班作教材使用。与此同时，该讲义也多次被中国科学院上海技术物理研究所、上海冶金研究所及上海硅酸盐研究所等单位的研究生部以及在国家教委主持下，由我系开设的华东地区高等院校教师暑期理论物理硕士学位课程班采用作为教材。

本书内容可分为三部分：量子力学的一般描述(第一、二章)，二次量子化理论及其应用(第三、四章)以及相对论性量子力学(第五章)。

二、牛顿力学(Newton, 1687)反映了实物粒子的"粒子性"，即其能量、动量、角动量等在一定状态下具有确定的值；但却忽略了它的"(概率)波性"，即每个物理量通常按一定的概率分布取一系列可能值。经典力学所能反映的仅仅是在某种条件($\hbar\to 0$)下的一种近似情况：物理量取某个值的概率最大，而取其他可能值的概率可被忽略。实物粒子的波粒二象性(de Broglie, 1924)，或更一般地说，微观现象的概率性迄今已成为公认的实验事实而被确立。

经典物理学与量子力学的根本区别在于是否注意到波粒二象性或概率性。在"正则量子化"方案下，反映波粒二象性的办法是：令描述客体的广义坐标与相应的正则动量满足某种不对易性关系。例如对于一维粒子系统，有

$$[x, p] = i\hbar, \tag{1}$$

其中$\hbar$为普朗克常数，x和p分别为粒子的坐标和动量。正则量子化方案能够反映粒子波粒二象性的理由可简述如下：由数学中的施瓦兹(Schwarz)不等式可以证明，任意两个力学量A和B的

测量偏差之积与这两个量的对易子存在如下关系：

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

因此，令 $A=x$, $B=p$，则如果 x 和 p 满足不对易性关系(1)，我们便可得到 $\Delta x\Delta p\geqslant\hbar/2$。这就是海森伯不确定性关系(Heisenberg, 1927)。在初等量子力学(波动力学)教材中已通过许多例子说明，这种不确定关系是微观粒子波粒二象性的必然结果。

描写微观系统的力学量为了反映波粒二象性而应满足某种不对易性关系，所以在量子理论中人们不再可用带有量纲的经典的数(C 数)来"表示"力学量，而要用矩阵或作用于 C 数函数上的微分算符来"表示"量子理论中的力学量(Q 数)，因为矩阵和微分算符的代数满足一定的不对易性关系。力学量表示为带有量纲的算符，它就不能直接与物理学测量结果相比较。算符是一种"运算约定"，它只有作用在某个量上才有意义。因此量子理论中还需引进态矢量或波函数。由于这个缘故，量子力学与经典力学在描述客体的方式上存在根本差别。在量子力学中必须同时引进态矢量和力学量算符来描写一个粒子的特征。只有通过态矢量和力学量算符按一定方式的运算组合，才能算出对某力学量测量所得到的平均值、本征值，以及测得的可能值及其概率。而微观现象中的可测量(如能级、跃迁概率、散射截面、寿命等)都与这些量相联系。量子力学对单粒子系统的这种描述方式与经典统计物理学相似。经典统计学对系综的描述不仅要有力学量，而且还要有"统计分布"。从这个意义来说，微观单粒子系统就是一个统计系综。不过应当注意，在经典统计学中力学量是 C 数，不是 Q 数。

三、正则量子化方法可推广到经典场系统。以电磁场为例，若令电磁场的广义坐标(如矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},\ t)$)及其相应的正则动量 $\left(\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{4\pi c^2}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right)$满足如下不对易性关系

$$[A_i(\boldsymbol{x},\ t),\ \pi_j(\boldsymbol{x}',\ t)]=i\hbar\delta_{ij}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),\qquad(3)$$

则此时 $\boldsymbol{A}$ 以及由它所构造的电场 $\boldsymbol{E}$、磁场 $\boldsymbol{B}$、电磁场能量密度 H、动量密度 $\boldsymbol{p}$、角动量密度 $\boldsymbol{J}$ 等都变成了算符。这些算符是坐标 $\boldsymbol{x}$ 的函数，坐标 $\boldsymbol{x}$ 现在被看成与时间 t 一样都是参数。若将这些"坐标表象"中的力学量算符转化到"粒子数表象"，人们发现此时该场系统的能量、动量和角动量等算符的本征值均分别等于某个基本量的整数倍。因此说，该电磁场被"量子化"了。这种量子化电磁场理论能统一反映电磁场的波粒二象性(Einstein, 1905)。

在非相对论性量子力学中，坐标表象中的薛定谔方程可视为波场函数 $\psi(\boldsymbol{x}, t)$ 所满足的经典场方程，因为 ψ 现在并非算符而是经典量。于是上述使电磁场量子化的场的正则量子化方法也可应用于薛定谔波场，从而得到量子化薛定谔波场理论。量子化薛定谔波场的基本量子就是原来薛定谔方程所描写的粒子(如电子)。如果把通过不对易性关系使经典粒子的力学量转化为算符的量子力学理论称为"一次量子化理论"，则在此基础上通过令波场函数转化为算符从而建立起来的量子场理论便可称为"二次量子化理论"。从量子化水平上说，量子化薛定谔波场的理论与量子化电磁场理论相当，它们实质上都是全同多粒子理论。于是人们可从描写单粒子的一次量子化理论出发，通过再次量子化手续，得到一个描写全同多粒子系统的量子理论。大家知道，在一次量子化方案中，对 n 个全同多粒子系统的研究需求解一个 $3n+1$ 个变量的二阶微分方程，而其中 n 的数量级是阿伏伽德罗常数。因此求解这类方程根本不可能。但是若采用二次量子化方案，对全同粒子系统的描述便变得相当简单。由于二次量子化理论的建立，促进了自本世纪 40 年代末以来的固体理论、凝聚态理论以及量子光学的飞速发展。

四、薛定谔方程是非相对论性量子力学方程。以该理论为基础的二次量子化理论也只能描述低能情况下的全同粒子系统及其相互作用现象，如固体性质、超导、超流等。为了探索物质结构的奥秘及固体凝聚态现象中的精细部分，需要研究更深的微观领域

($<10^{-13}$cm)。在原子核及基本粒子线度上，物质粒子的结合能将变得愈来愈大，从而大大超过粒子本身的静质量。所以必须建立相对论性一次量子化理论，并在此基础上建立相对论性量子场理论。相对论性量子力学通常包括克莱因-戈登方程(Klein-Gordon)，狄拉克方程(Dirac, 1928)以及麦克斯韦电磁场理论(Maxwell, 1864)等。其中描写自旋为0的粒子的克莱因-戈登方程与描写自旋为$\frac{1}{2}$的粒子的狄拉克方程的非相对论极限都是薛定谔方程。本书并未介绍相对论性二次量子化理论，读者可进一步参阅其他关于量子场论方面的著作。在薛定谔方程基础上的二次量子化方法，与在相对论性量子力学方程基础上的二次量子化方法完全类似。不过由于相对论性效应，在薛定谔理论与相对论性量子力学之间，以及在非相对论性二次量子化理论与相对论性二次量子化理论之间，存在某些显著的、甚至是基本观念上的区别。

五、在编写本书的过程中，特别注意对基本观念、基本概念及基本方法的叙述。在介绍各部分内容时，力求通过对比，如矩阵力学及波动力学的对比；一次量子化理论与经典力学的对比；二次量子化理论与一次量子化理论的对比，以及相对论性量子力学与非相对论性量子力学的对比等，使读者对各类方法引进的目的，引进的方式及其基本特点有较深刻的了解。其次，作为本书的一个重点，在引进二次量子化方案时，作者并未按照历史的轨迹，而是从迄今已获公认的、看来反而非常直观的量子场的观点出发，较直接地引进二次量子化方法。然后安排较多篇幅介绍这种方法在固体理论、超导、超流、磁学及量子光学等诸多方面的应用。作者认为，这样的安排或许更有利于读者掌握二次量子化理论的基本方法及其特点；有利于扩大知识面；有利于读者更好更快地与进一步的研究工作和阅读专业论文及著作接轨。最后，本书在叙述过程中常常穿插一些例题，以利于读者对某些基本概念和基本方法的掌握。

本书各章还附有一定量的习题。

本书在编写及出版过程中可能存在某些疏漏或差错，欢迎读者批评指教。

徐 在 新

1994.1 于华东师范大学物理系

目　录

导　言 ……1

第一章　量子力学的一般描述 ……1

§1.1　态矢量和力学量的表示 ……2

§1.2　本征值问题的矩阵力学方法 ……13

§1.3　幺正变换的一般理论 ……27

§1.4　状态随时间改变的描述——三种绘景 ……36

§1.5　对称性和守恒定律 ……53

§1.6　密度算符 ……80

§1.7　量子力学的路径积分形式 ……95

习　题 ……108

第二章　散射的量子理论 ……114

§2.1　定态格林函数 ……115

§2.2　弹性散射的玻恩近似 ……121

§2.3　非弹性散射 ……129

*§2.4　重组散射，反应截面 ……134

§2.5　与时间有关的格林函数 ……139

§2.6　散射矩阵 ……144

§2.7　有心力场中的散射，分波法 ……151

*§2.8　存在两类相互作用时的散射，奇变波近似 ……155

*§2.9　程函近似 ……157

习　题 ……164

第三章　二次量子化理论 ……165

§3.1　粒子数表象，声子 ……166

§3.2　相干态 ……179

§3.3　场的量子化方法 ……195

§3.4　全同粒子系统的二次量子化理论 ……205

§3.5　电磁场的量子化 ……217

§3.6　存在相互作用的量子场理论 ……228

习　题 ……238

第四章　二次量子化理论的某些应用 ……241
§4.1　相互作用玻色子系统 ……241
§4.2　电子和晶格振动的相互作用 ……250
§4.3　超导的微观理论基础 ……266
§4.4　自旋系统的二次量子化理论 ……280
§4.5　辐射的量子理论 ……293
习　题 ……309
第五章　相对论性粒子的量子力学方程 ……312
§5.1　引言 ……312
§5.2　克莱因-戈登方程 ……317
§5.3　电磁场存在时的KG方程 ……328
§5.4　狄拉克方程 ……334
§5.5　狄拉克方程的协变形式 ……346
§5.6　电磁场中的电子 ……360
§5.7　克莱因-戈登场和狄拉克场的量子化 ……372
习　题 ……378

第一章　量子力学的一般描述

为了研究和把握微观现象，首先需要对微观系统的状态及其随时间的演化进行描述。但是由于波粒二象性，对微观系统的这种描述就不同于经典情况。例如对于经典粒子，人们可以通过坐标和速度或动量等"力学量"来描写它们的状态，因为对于确定的状态它们都具有确定的值；当状态随时间演化时，这些量都按确定的方式随时间变化。这些力学量在经典物理学中都是可以通过实验测量的量。在量子力学中，由于概率性，微观粒子的坐标和动量等力学量一般并不具有确定的值，这些力学量的值之间存在各种"不确定关系"；这些力学量之间存在各种"不对易性关系"。于是人们不再能够用满足乘法交换律的代数量来表示力学量，而需要用"算符"（矩阵或微分算符）来表示它们，以便能够满足不对易性关系，反映微观粒子系统的概率性或波粒二象性的实验事实。于是在量子力学中，这些力学量不再是直接可测量的量，而是作用于"态矢量"或"波函数"的算符。只有通过态矢量或波函数以及力学量两者的结合，人们才能借助于统计物理学方法算出在某个状态中测量某个物理量时所得到的各种可能值，以及出现某种可能值的概率，并算出平均值。在量子力学中，这种可能值及其出现的概率以及平均值，才是人们感兴趣的，因为这些量直接与实验上的可测量相联系。例如原子或固体的能谱与能量的"本征值"有关，而本征值是平均值的一种重要的特例。再如，实验中可以直接测量的散射截面、谱线强度等都是与"跃迁概率"有关的，而跃迁概率又涉及到在末态中测量某个或某几个力学量（如动量、角动量、能量等）所得到的各种可能值的概率。

量子理论最重要的是要讨论微观状态的描述及其随时间的演

化。从上述讨论可知，对于微观状态的描述应包括两个方面，即对态矢量的描述和对力学量的描述。对于微观状态及其随时间演化的描述又可采用不同的表述方式，或者不同的“表象”。在量子力学中，时间是一个参数，而不是力学量。所以为区别起见，对状态的表述方式称为表象；而对它随时间演化的表述方式称为“绘景”。

本章首先讨论微观粒子状态的描述(§1.1, §1.2)，以及状态的不同描述之间的变换关系(§1.3)。对状态随时间演化的描述将在§1.4中讨论。量子力学中对称性和守恒定律的关系则在§1.5中讨论。§1.6中讨论了状态的“密度矩阵”描述方式，用密度矩阵代替态矢量对微观系统进行描述，在某些情况下是方便的，或许也是必要的。最后，在§1.7中简要介绍了量子力学的路径积分形式，这是一种区别于“正则量子化”的量子力学描述方式，这种描述方式在统计物理以及现代量子场理论中已有广泛的应用。

§1.1 态矢量和力学量的表示

量子力学中描写微观粒子状态的量可以用“希尔伯空间”中的矢量来表示，故常称为态矢量；力学量则可用该空间中的“张量”来表示。在一般最简单的情况下，表示力学量算符的张量常常是二阶张量，这一类算符因此可表示为方矩阵的形式。

1.1.1 态矢量

从初等量子力学的学习中已经知道，描写微观粒子状态的态矢量ψ_α是一个复矢量。任一复矢量有两个独立部分，即它的实部和虚部，或ψ_α和ψ_α^+，其中ψ_α^+是ψ_α的厄米共轭矢量或称为“对偶矢量”。现在采用Dirac的记号方法，将ψ_α记为$|\alpha\rangle$，并称它为“右括号矢量”或“右矢”；ψ_α^+记为$\langle\alpha|$，并称它为“左括号矢量”或“左矢”。显然对于微观粒子状态的描述，右矢和左矢都是重要的。α在这里可称为“态指标”，它特征了微观粒子的状态。右矢左矢是互相独立的，但是存在如下简单关系

$$\langle\alpha| = (|\alpha\rangle)^{+}。 \tag{1.1.1}$$

态矢量的长度或它的模的平方并非右矢或左矢的平方，而是左矢和右矢的"标积"或"内积"：$\langle\alpha|\cdot|\alpha\rangle \equiv \langle\alpha|\alpha\rangle$，它是一个非负实数，即

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle^{*} \geqslant 0, \tag{1.1.2}$$

上式中的等号仅仅对于"零矢量"才成立。式(1.1.2)常常称为"正定性条件"。从物理上来说，正定性条件为概率性解释提供了保证，因为概率必须用非负的实数表示。由于$\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$是态矢量的模，所以对于任意非零态矢量$|\alpha\rangle$来说，总可以构造一个"归一化态矢量$|\tilde{\alpha}\rangle$：

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}|\alpha\rangle, \tag{1.1.3}$$

因此有

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1, \tag{1.1.4}$$

此结果称为归一化条件。在量子力学中，通常采用这种归一化的态矢量来描述微观粒子的状态。这表明对于态矢量，重要的是它们的方向。

对于任意两个态矢量$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$的内积，应区分两种情况：$\langle\beta|\alpha\rangle$和$\langle\alpha|\beta\rangle$。它们通常都是复数，且存在如下互为复共轭的关系：

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^{*}。 \tag{1.1.5}$$

显然，式(1.1.2)是上式的特例。如果两个矢量的内积为零，即

$$\langle\beta|\alpha\rangle = 0, \tag{1.1.6}$$

我们就说，这两个态矢量是"正交的"。

1.1.2 力学量算符

量子力学中的物理量，如坐标、动量、角动量、能量、自旋等，都采用作用于态矢量的算符表示。应当指出，在非相对论量子力学中，时间t是参数，不是算符；在相对论量子力学中，时间t和坐标x则都是参数。

算符就是一种运算，或一种操作。算符 A 作用于右矢 $|\alpha\rangle$，即 $A|\alpha\rangle$ 也是一右矢：

$$|\beta\rangle = A|\alpha\rangle, \tag{1.1.7}$$

通常 $|\beta\rangle$ 与 $|\alpha\rangle$ 不相等。如果对于任意右矢 $|\alpha\rangle$，上式中的 $|\beta\rangle = |\alpha\rangle$，则算符 A 便称为“单位算符”；若 $A|\alpha\rangle = B|\alpha\rangle$，则算符 A 和 B 相等，记为 $A = B$；若 $A|\alpha\rangle = 0$，则算符 A 称为“零算符”。如果对于算符 A 来说，下式成立：

$$A(c_1|\alpha_1\rangle + c_2|\alpha_2\rangle) = c_1A|\alpha_1\rangle + c_2A|\alpha_2\rangle, \tag{1.1.8}$$

其中 c_1 和 c_2 是任意复数，则称 A 为“线性算符”。

一个算符 A 从左边作用于一右矢 $|\alpha\rangle$ 通常将得到一个新的右矢，而这个新的右矢 $(A|\alpha\rangle)$ 的对偶态矢量，即左矢显然可表示为

$$(A|\alpha\rangle)^+ = (|\alpha\rangle)^+A^+ = \langle\alpha|A^+, \tag{1.1.9}$$

其中 A^+ 是算符 A 的厄米共轭算符。上述结果表明，右矢 $A|\alpha\rangle$ 与左矢 $\langle\alpha|A^+$ 是对偶的。若 $A^+ = A$，则称 A 为厄米算符。对于厄米算符，显然有

$$(A|\alpha\rangle)^+ = \langle\alpha|A, \ (A^+ = A)。 \tag{1.1.10}$$

算符的运算与通常代数量的运算有一个重要区别，即算符的乘法不满足交换律。即对于任意态矢量 $|\alpha\rangle$，

$$AB|\alpha\rangle \neq BA|\alpha\rangle。 \tag{1.1.11}$$

这种算符的不可对易性可用算符方程表示为

$$AB \neq BA, \tag{1.1.12}$$

或

$$[A, B] \equiv AB - BA \neq 0, \tag{1.1.13}$$

其中 $[A, B]$ 称为算符 A 和 B 的“对易子”。应当指出，算符的乘法虽然一般不满足交换律，但仍满足结合律，即

$$A(BC) = (AB)C = ABC。 \tag{1.1.14}$$

在上面的讨论中我们已从右矢、左矢和算符通过乘法构造了如下形式的量：$\langle\beta|\alpha\rangle$，$A|\alpha\rangle$，$\langle\alpha|A$，$AB$ 等，它们分别为数、右矢、左矢和算符。实际上，还可构造出其它乘积形式的量。例如

$$|\beta\rangle\langle\alpha|, \tag{1.1.15}$$

我们称这是$|\beta\rangle$和$\langle\alpha|$的"外积"。注意到这个外积作用于任一右矢$|\gamma\rangle$，有$|\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle$，由于$\langle\alpha|\gamma\rangle$是一个(复)数，所以$\langle\alpha|\gamma\rangle|\beta\rangle$是一个右矢。可见，式(1.1.15)表示的外积是一个算符，可表示为

$$A=|\beta\rangle\langle\alpha|。 \tag{1.1.16}$$

显然由式(1.1.16)，可得

$$A^{+}=|\alpha\rangle\langle\beta|。 \tag{1.1.17}$$

外积$|\alpha\rangle\langle\beta|$和$|\beta\rangle\langle\alpha|$一般并不相等，即它们不是同一算符。

最后，通过乘法还可构造出如下形式的量：

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle。 \tag{1.1.18}$$

这个量可以看作左矢$\langle\beta|$与右矢$A|\alpha\rangle$的内积，或左矢$\langle\beta|A$与右矢$|\alpha\rangle$的内积，即$\langle\beta|A|\alpha\rangle=\langle\beta|(A|\alpha\rangle)=(\langle\beta|A)|\alpha\rangle$，因此这个量是一个数。式(1.1.18)所表示的数的复共轭是

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle^{*}=\langle\alpha|A^{+}|\beta\rangle。 \tag{1.1.19}$$

如果A是厄米算符，则有$\langle\beta|A|\alpha\rangle^{*}=\langle\alpha|A|\beta\rangle$。因此对于厄米算符来说，有

$$\langle\alpha|A|\alpha\rangle=\langle\alpha|A|\alpha\rangle^{*}, \tag{1.1.20}$$

即$\langle\alpha|A|\alpha\rangle$为实数，并称它为算符$A$在状态$|\alpha\rangle$中的平均值。

1.1.3 态矢量的矩阵表示

设厄米算符A共有N个本征值。这里N的值可能是有限的，也可能是无限的；可能是分立值，也可能是连续值。现在将算符A的属于本征值a_i的本征矢记为$|a_i\rangle$。量子力学可以证明①，一个厄米算符的本征矢的全体(记为$\{|a_i\rangle\}$)构成一个正交归一化的完全集。于是可将$|a_i\rangle$作为"基矢"，构造一个"(复)正交坐标系"，它所张成的空间称为希尔伯空间。相应的描写微观粒子状态的态矢量$|\alpha\rangle$可看作该空间中的一个矢量。按照解析几何的方法，可利用该矢量在这些基矢上的投影(即分量)的全体来特征这个矢量，即特征该微观粒子系统的状态。

① 例如可参阅：曾谨言，《量子力学》，科学出版社(1981)。

厄米算符 A 的本征矢集$\{|a_i\rangle\}$作为基矢所张成的空间称为“A 表象空间”，或简称“A 表象”。于是，任一态矢量$|\alpha\rangle$在该表象中可表示为

$$|\alpha\rangle=\sum_i c_i|a_i\rangle, \tag{1.1.21}$$

其中 c_i 就是态矢量$|\alpha\rangle$在基矢$|a_i\rangle$上的分量，它的全体构成了态矢量$|\alpha\rangle$在 A 表象中的一个表示。或者说，在 A 表象中一个态矢量在各基矢上的分量的全体完全特征了该态矢量。

A 表象基矢的正交归一性可表示为

$$\langle a_j|a_i\rangle=\delta_{ij}。 \tag{1.1.22}$$

若将左矢$\langle a_j|$左乘式(1.1.21)，利用上述正交归一化条件可得

$$c_i=\langle a_i|\alpha\rangle, \tag{1.1.23}$$

这表明，内积$\langle a_i|\alpha\rangle$就是态矢量$|\alpha\rangle$在基矢$|a_i\rangle$方向上的分量。这也正是解析几何学的结果。我们可以将态矢量在 A 表象中的所有分量排成一个列矩阵：

$$\alpha^{(A)}=\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \langle a_1|\alpha\rangle \\ \langle a_2|\alpha\rangle \\ \vdots \\ \langle a_i|\alpha\rangle \\ \vdots \end{bmatrix}。 \tag{1.1.24}$$

所以，态矢量在任一表象中可表示为一个列矩阵，其矩阵元就是态矢量在该表象各基矢上的分量。从物理意义上说，态矢量$|\alpha\rangle$在 A 表象中的分量$\langle a_i|\alpha\rangle$ 也就是在该态矢量所描述的状态中测量力学量 A 时得到的值为 a_i 的概率幅。

将式(1.1.23)代入式(1.1.21)，有

$$|\alpha\rangle=\sum_i^N|a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle。 \tag{1.1.25}$$

由于上式对任意态矢量成立，所以有

$$\sum_i^N|a_i\rangle\langle a_i|=1, \tag{1.1.26}$$

这个结论称为 A 表象基矢集$\{|a_i\rangle\}$的"完全性条件"。应该注意，上式求和记号中的因子是算符，等式右边的1应理解为单位矩阵。令

$$P_i=|a_i\rangle\langle a_i|。\tag{1.1.27}$$

由于

$$P_i|\alpha\rangle=|a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle=c_i|a_i\rangle,$$

所以，算符 P_i 对右矢$|\alpha\rangle$作用的结果得到该态矢量沿基矢$|a_i\rangle$的分矢量，即投影，所以可称它为"投影算符"。完全性条件式(1.1.26)于是也可表示为

$$\sum_i^N P_i=1。\tag{1.1.28}$$

1.1.4 算符的矩阵表示

所谓算符，就是指某种特定的运算或操作，使一个态变为另一个态。设任一力学量 L 的作用使$|\alpha\rangle$变为$|\beta\rangle$，即

$$|\beta\rangle=L|\alpha\rangle。\tag{1.1.29}$$

上式仅代表抽象的运算，并未涉及到具体表象。现在我们来考察上式在 A 表象中的形式。将左矢$\langle a_i|$左乘上式，并利用完全性条件(1.1.26)，可得

$$\langle a_i|\beta\rangle=\langle a_i|L|\alpha\rangle=\sum_j^N\langle a_i|L|a_j\rangle\langle a_j|\alpha\rangle,\tag{1.1.30}$$

上式等号左侧的$\langle a_i|\beta\rangle$是态矢量$|\beta\rangle$在 A 表象中的表示，记为 $\beta_i^{(A)}$；等号右侧中的$\langle a_j|\alpha\rangle$是态矢量$|\alpha\rangle$在 A 表象中的表示，记为 $\alpha_j^{(A)}$；$\langle a_i|L|a_j\rangle$显然可理解为算符 L 在 A 表象中的表示，记为 $L_{ij}^{(A)}$，于是(1.1.30)式可记为

$$\beta_i^{(A)}=\sum_j^N L_{ij}^{(A)}\alpha_j^{(A)}。\tag{1.1.31}$$

上式可记为矩阵形式

$$\beta^{(A)}=L^{(A)}\alpha^{(A)},\tag{1.1.32}$$

其中

$$\beta^{(A)}=\begin{bmatrix}\beta_1^{(A)}\\ \beta_2^{(A)}\\ \vdots\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\langle a_1|\beta\rangle\\ \langle a_2|\beta\rangle\\ \vdots\end{bmatrix},\qquad \alpha^{(A)}=\begin{bmatrix}\alpha_1^{(A)}\\ \alpha_2^{(A)}\\ \vdots\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\langle a_1|\alpha\rangle\\ \langle a_2|\alpha\rangle\\ \vdots\end{bmatrix},$$

$$L^{(A)}=\begin{bmatrix}L_{11}^{(A)} & L_{12}^{(A)} & \cdots\\ L_{21}^{(A)} & L_{22}^{(A)} & \cdots\\ \cdots\cdots & & \end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\langle a_1|L|a_1\rangle & \langle a_1|L|a_2\rangle & \cdots\\ \langle a_2|L|a_1\rangle & \langle a_2|L|a_2\rangle & \cdots\\ \cdots\cdots & & \end{bmatrix}。$$

所以，在任一具体表象中，描写微观粒子系统状态的右矢可用列矩阵表示，而力学量则可用方矩阵表示。这些表示矩阵的维数也就是A表象的维数，即算符A的本征矢完全集中本征矢的数目。不同的表象有不同的维数。例如，描写电子自旋状态的算符的第三分量$s_z=\frac{\hbar}{2}\sigma_z$有两个本征值：$\pm\frac{\hbar}{2}$，相应地有两个本征矢，可分别记为$|+\rangle$和$|-\rangle$，即

$$s_z|+\rangle=\frac{\hbar}{2}|+\rangle,\ s_z|-\rangle=-\frac{\hbar}{2}|-\rangle,\qquad (1.1.33)$$

因此s_z表象或σ_z表象是二维表象。再如一维线性谐振子哈密顿算符$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$的本征值是$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$（$n=0$, 1, 2, …），相应的本征矢可记为$|n\rangle$，因此一维线性谐振子能量表象的维数为$\infty$，但仍然是分立表象。此外还存在连续表象，如坐标表象和动量表象。连续表象当然是无限维的。这里我们还要指出，上面讨论的所谓A表象中的力学量A，可能是指某一个力学量算符，也可能是指某几个力学量算符的集合，此时表象的基矢就是这些力学量算符的共同本征矢。

因为态矢量和力学量在一般表象中可表示为矩阵形式，所以量子力学中的许多公式可表示为矩阵代数公式。例如求力学量L在态$|\alpha\rangle$中的平均值公式现在在A表象中可表示为（略去表示A表象的上指标“(A)”）

$$\langle\alpha|L|\alpha\rangle=\sum_{ij}\langle\alpha|a_i\rangle\langle a_i|L|a_j\rangle\langle a_j|\alpha\rangle$$

$$-\sum_{ij}\alpha_i^* L_{ij}\alpha_j=\alpha^+ L\alpha, \tag{1.1.34}$$

其中将左矢在 A 表象中的表示$\langle\alpha|a_i\rangle$记为$\langle a_i|\alpha\rangle^*$，且

$$\begin{aligned}\alpha^+&=[\alpha_1^*,\ \alpha_2^*,\ \cdots]=[\langle a_1|\alpha\rangle^*,\ \langle a_2|\alpha\rangle^*,\ \cdots]\\&\equiv[\langle\alpha|a_1\rangle,\ \langle\alpha|a_2\rangle,\ \cdots]\end{aligned} \tag{1.1.35}$$

为行矩阵，是右矢$|\alpha\rangle$在 A 表象中的表示矩阵的厄米共轭矩阵。

现在来考察求本征值的公式。设算符 L 的相应于本征值为 λ 的本征矢为$|\alpha\rangle$，即

$$L|\alpha\rangle=\lambda|\alpha\rangle。 \tag{1.1.36}$$

为了将上式在 A 表象中表示出来，用左矢$\langle a_i|$左乘上式，并利用完全性条件，有

$$\sum_j\langle a_i|L|a_j\rangle\langle a_j|\alpha\rangle=\lambda\langle a_i|\alpha\rangle$$

如果将上式等号右边的因子记为 $\lambda\langle a_i|\alpha\rangle=\lambda\sum_j\langle a_j|\alpha\rangle\delta_{ij}$，则上式可化为

$$\sum_j(\langle a_i|L|a_j\rangle-\lambda\delta_{ij})\langle a_j|\alpha\rangle=0。 \tag{1.1.37}$$

若 A 表象是一个 N 维表象，则上式就是一个包含 N 个线性方程的联立方程组。该方程组有非零解的条件是它的系数行列式为零，即

$$\det(L-\lambda I)=0, \tag{1.1.38}$$

其中 L 是力学量在 A 表象中的矩阵表示，I 为单位矩阵。上式是一个 λ 其最高幂次为 N 的代数方程，它通常有 N 个根，这些根就构成算符 L 的本征值谱。如果再将每个根代入式(1.1.37)，便可求出相应的本征矢在 A 表象中的表示$\langle a_j|\alpha\rangle$。

最后我们指出任何力学量及其本征矢在"自身表象"中的表示。例如力学量 A 及其本征矢$|a_i\rangle$在自身表象中可表示为

$$\langle a_i|A|a_j\rangle=a_j\delta_{ij},\ \langle a_j|a_i\rangle=\delta_{ij}。 \tag{1.1.39}$$

因此力学量在自身表象中是一对角矩阵，且其对角元就是该力学量算符的本征值；力学量第 i 个本征矢列矩阵在自身表示中，只有第 i 个元素等于 1，其它元素均为零。

1.1.5 坐标表象和动量表象

作为例子，我们来讨论坐标表象和动量表象，以便与波动力学表述方法比较。在这一小节中，用上方带有脱字号"^"的字母表示算符，且限于一维情况。

坐标算符具有连续谱，可从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 之间取值。坐标算符 $\hat{x}$ 的属于本征值为 x 的本征矢记为 $|x\rangle$，因此有

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle。 \tag{1.1.40}$$

连续表象基矢的正交归一性和完全性条件可表示为

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \tag{1.1.41}$$

$$\int dx|x\rangle\langle x| = 1。 \tag{1.1.42}$$

式(1.1.41)也给出了坐标算符的属于本征值为 x' 的本征矢在坐标表象中的表示。任意态矢量 $|\alpha\rangle$ 在坐标表象中的表示可记为

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle, \tag{1.1.43}$$

常称为"波函数"，其中 α 和 x 可分别称为"态指标"和"表象指标"。波函数式(1.1.43)实际上就是态矢量 $|\alpha\rangle$ 在坐标表象基矢 $|x\rangle$ 上的分量，也就是态矢量用基矢集 $\{|x\rangle\}$ 展开时的展开系数：

$$|\alpha\rangle = \int dx|x\rangle\langle x|\alpha\rangle = \int dx\ \psi_\alpha(x)|x\rangle。 \tag{1.1.44}$$

上式可与式(1.1.25)相比较。两个态矢量的内积在坐标表象中可表示为

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \int dx\langle\beta|x\rangle\langle x|\alpha\rangle = \int dx\ \psi_\beta^*(x)\psi_\alpha(x)。 \tag{1.1.45}$$

上述讨论可推广到动量表象。动量算符 $\hat{p}$ 的本征方程为

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle。 \tag{1.1.46}$$

动量表象基矢 $|p\rangle$ 的正交归一性和完全性条件可表示为

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p'), \tag{1.1.47}$$

$$\int dp|p\rangle\langle p| = 1。 \tag{1.1.48}$$

任一态矢量 $|\alpha\rangle$ 在动量表象中的表示

$$\phi_\alpha(p)=\langle p|\alpha\rangle \tag{1.1.49}$$

称为动量表象中的波函数。两个态矢量的内积在动量表象中可表示为

$$\langle\beta|\alpha\rangle=\int dp\langle\beta|p\rangle\langle p|\alpha\rangle=\int dp\,\phi_\beta^*(p)\phi_\alpha(p)。$$

(1.1.50)

由于力学量在自身表象中是对角矩阵，所以坐标算符在坐标表象中的矩阵元和动量算符在动量表象中的矩阵元分别为

$$x_{xx'}=\langle x|\hat{x}|x'\rangle=x\delta(x-x'), \tag{1.1.51}$$

$$p_{pp'}=\langle p|\hat{p}|p'\rangle=p\delta(p-p')。 \tag{1.1.52}$$

下面的两个例子给出了连续情况下求不同表象中矩阵表示的方法。

[例 1] 求动量算符的本征矢在坐标表象中的形式。

解：由$|p\rangle$的正交归一性和$|x\rangle$的完全性条件可得

$$\langle p'|p\rangle=\int dx\langle p'|x\rangle\langle x|p\rangle=\delta(p-p')。$$

注意到 δ-函数的积分表示：$\delta(p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dx e^{ipx/\hbar}$，便可得

$$\langle x|p\rangle=\langle p|x\rangle^*=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}, \tag{1.1.53}$$

其中 $\hbar$ 的引入可认为是量纲的要求。

[例 2] 求动量算符在坐标表象中的表示。

解：根据定义并利用$|p\rangle$的完全性条件，可得

$$\begin{aligned}p_{xx'}&=\langle x|\hat{p}|x'\rangle=\int dp\,dp'\langle x|p\rangle\langle p|\hat{p}|p'\rangle\langle p'|x'\rangle\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\,pe^{ip(x-x')/\hbar}\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\left(-i\hbar\frac{d}{dx}e^{ip(x-x')/\hbar}\right),\end{aligned}$$

交换积分和微分顺序并利用 δ-函数的积分表示，便可得

$$p_{xx'}=\langle x|\hat{p}|x'\rangle=-i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x')。 \tag{1.1.54}$$

应当注意，上述结果表明 $p_{xx'}$ 并非是一个微分算符。实际上它是一个矩阵元，其行指标和列指标分别为 x 和 x'。算符的矩阵元是一个数。

现在来考察坐标算符和动量算符对任一态矢量的作用 ($\hat{x}|\alpha\rangle$ 和 $\hat{p}|\alpha\rangle$)在坐标表象和动量表象中的形式。在坐标表象中，动量算符的作用可表示为

$$\langle x|\hat{p}|\alpha\rangle=\int dx'\langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$

$$=\int dx'\left[-i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x')\right]\psi_\alpha(x')。\quad(1.1.55)$$

上述结果实质上是矩阵乘法，积分符号"$\int dx'$"的意义就是对指标 x' 求和。不过如果注意到 $-i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x')=i\hbar\frac{d}{dx'}\delta(x-x')$，并对上述全空间中的积分作一次分部积分，便有

$$\langle x|\hat{p}|\alpha\rangle=-i\hbar\frac{d}{dx}\psi_\alpha(x)。\quad(1.1.56)$$

此结果表明，在坐标表象中动量算符的作用又可表示为一个微分算符$\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)$对波函数的作用。与此相应，在坐标表象中坐标算符的作用具有简单的形式：

$$\langle x|\hat{x}|\alpha\rangle=\int dx'\langle x|\hat{x}|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle=x\psi_\alpha(x)。\quad(1.1.57)$$

对于坐标算符，可作类似的讨论。坐标算符在动量表象中的矩阵元为

$$x_{pp'}=\langle p|\hat{x}|p'\rangle=i\hbar\frac{d}{dp}\delta(p-p')。\quad(1.1.58)$$

坐标算符对态矢量的作用在动量表象中可表示为

$$\langle p|\hat{x}|\alpha\rangle=i\hbar\frac{d}{dp}\phi_\alpha(p)。\quad(1.1.59)$$

动量算符对态矢量的作用在动量表象中则可简单地表示为

$$\langle p|\hat{p}|\alpha\rangle=p\langle p|\alpha\rangle=p\phi_\alpha(p)。\quad(1.1.60)$$

以上的讨论很容易推广到三维情况。此外，由于其它力学量，如动能算符、角动量算符、势能算符、哈密顿算符等可通过坐标算符和动量算符构造，于是不难立即写出这些算符在坐标表象和动量表象中的形式。

由于坐标和动量算符具有连续谱，态矢量在这些表象中的表示是关于表象指标的连续函数(波函数)，所以力学量算符可设计为作用在这种波函数上的微分算符。反之，对于分立表象，如 σ_z 表象，一维谐振子能量表象或角动量平方及角动量第三分量的共同本征矢所构成的表象，力学量算符只能设计为矩阵形式，而不能设计为微分算符形式，因为在这些情况下表象指标不是连续变量。从这个意义上说，矩阵力学要比波动力学更为普遍。

§1.2 本征值问题的矩阵力学方法

本节将在矩阵力学方案下，作为例子讨论一维线性谐振子哈密顿算符和角动量算符的本征值问题。在经典力学中，坐标空间或坐标表象是一个很好的表象，人们常常采用这个表象来描述经典粒子的运动状态。在量子理论的波动力学方案中也常采用坐标表象，以便通过联想，使初学者容易理解。但是随着研究的深入，人们发现在对微观现象的描述中重要的恰恰不是坐标表象，而是能量表象、角动量表象(包括例如 σ_z 表象)，同位旋空间或同位旋表象等等分立表象。能量、角动量以及其它微观粒子的内禀物理量具有分立值才是微观现象的最重要的特征。除了动能和轨道角动量等不多的几个力学量算符外，描写微观粒子的大多数力学量算符都不能采用坐标表象来表示。因此，避开坐标表象求解本征值问题显然具有重要而普遍的意义。

1.2.1 一维线性谐振子的矩阵力学方法

一维线性谐振子哈密顿算符的本征值问题在量子力学中作为典型例子已有叙述，通常采用坐标表象。现在我们采用自身表象

在矩阵力学方案下求解同样的问题，而完全不必依赖于微分算符和薛定谔方程等知识。

线性谐振子哈密顿算符为

$$H=\frac{1}{2\mu}p^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2, \tag{1.2.1}$$

其中厄密算符 x 和 p 满足如下对易关系：

$$[x,\ p]=i\hbar。 \tag{1.2.2}$$

以上两个式子就是我们讨论问题的全部出发点。

定义两个非厄米算符 b 和 b^+：

$$\begin{aligned} b&=\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}\left(x+i\frac{1}{\mu\omega}p\right),\\ b^+&=\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}\left(x-i\frac{1}{\mu\omega}p\right)。\end{aligned} \tag{1.2.3}$$

利用式(1.2.2)不难证明，这两个非厄米算符满足如下基本对易关系：

$$[b,\ b^+]=1。 \tag{1.2.4}$$

式(1.2.3)的逆变换关系为

$$\begin{aligned} x&=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(b^++b),\\ p&=i\sqrt{\frac{\mu\omega\hbar}{2}}(b^+-b)。\end{aligned} \tag{1.2.5}$$

利用式(1.2.5)，并考虑到对易关系(1.2.4)，哈密顿算符式(1.2.1)可表示为

$$H=\hbar\omega\left(b^+b+\frac{1}{2}\right)。 \tag{1.2.6}$$

上述讨论并无任何实质性内容，我们仅仅从形式上改变了我们所讨论的量子力学问题，将由式(1.2.1)和(1.2.2)所描述的问题改变为由式(1.2.6)和(1.2.4)所描述的问题。而且由于 H 与算符 b^+b 仅仅相差一个常数矩阵，所以我们只须求解 b^+b 的本征值问题。设它的属于本征值为 λ 的本征矢为 $|\lambda\rangle$，即

$$b^+b|\lambda\rangle=\lambda|\lambda\rangle。 \tag{1.2.7}$$

首先，由于$\langle\lambda|b^+b|\lambda\rangle=(b|\lambda\rangle)^+(b|\lambda\rangle)=|b|\lambda\rangle|^2$是一个右矢$b|\lambda\rangle$的模的平方，是非负数，因此可得到如下结论：

$$\lambda\geqslant 0, \tag{1.2.8}$$

即b^+b的本征值为非负数。

其次，利用对易关系(1.2.4)不难证明

$$(b^+b)b^+|\lambda\rangle=b^+(b^+b+1)|\lambda\rangle=(\lambda+1)b^+|\lambda\rangle。 \tag{1.2.9}$$

这表明，若$|\lambda\rangle$是b^+b的一个本征矢，相应的本征值为λ，则$b^+|\lambda\rangle$也是它的一个本征矢，相应的本征值为$\lambda+1$。类似地将算符b^+b作用于本征矢$b|\lambda\rangle$，有

$$(b^+b)b|\lambda\rangle=(\lambda-1)b|\lambda\rangle。 \tag{1.2.10}$$

由此，我们可将b^+称为“上升算符”，b称为“下降算符”，如果$|\lambda\rangle$是b^+b的一个本征矢，则b^+和b对这个本征矢作用后所得到的新的右矢($b^+|\lambda\rangle$和$b|\lambda\rangle$)仍然是b^+b的本征矢，但其本征值增加或减小1。重复地使用这种作用，我们可以从某一给定的本征矢出发，得到具有不同本征值的所有本征矢。这种方法可称为“阶梯方法”。所得到的本征值谱λ显然是等间隔的，间隔为1。

最后，本征值取值条件(1.2.8)表明，本征值谱有一个下限。设下限为λ_0相应的本征矢为$|\lambda_0\rangle$，即

$$b^+b|\lambda_0\rangle=\lambda_0|\lambda_0\rangle \quad (\lambda>\lambda_0>0) \tag{1.2.11}$$

由于$|\lambda_0\rangle$是b^+b的属于最小本征值的本征矢，所以应满足如下条件：

$$b|\lambda_0\rangle=0。 \tag{1.2.12}$$

根据这个条件，由式(1.2.11)可得$\lambda_0=0$，这是唯一可能小于1的本征值。零本征值的态可记为$|0\rangle$，称为基态。条件(1.2.12)可记为

$$b|0\rangle=0。 \tag{1.2.13}$$

于是b^+b的本征值和本征矢可记为

$$\begin{aligned}&\lambda=n \quad (n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots),\\ &|n\rangle=A_n(b^+)^n|0\rangle,\end{aligned} \tag{1.2.14}$$

其中A_n是归一化系数，待定。由式(1.2.6)，(1.2.7)，(1.2.14)

可知

$$H|n\rangle=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle, \tag{1.2.15}$$

即一维线性谐振子能量本征值为 $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$，这与波动力学方法所得到的结果一致。

现在来考察基本算符 b 和 b^+ 对表象基矢 $|n\rangle$ 的作用。由式(1.2.9)的结果可知，$b^+|n\rangle$ 与 $|n+1\rangle$ 描写了同一个态，因此有

$$b^+|n\rangle=c_n|n+1\rangle, \tag{1.2.16}$$

其中 c_n 为常数。为了确定 c_n，对上式取模的平方，有

$$\begin{aligned}|c_n|^2&=|b^+|n\rangle|^2=\langle n|bb^+|n\rangle\\&=\langle n|(b^+b+1)|n\rangle=n+1,\end{aligned}$$

于是可得 $c_n=\sqrt{n+1}\,e^{i\delta_n}$。若取 $\delta_n=0$，则式(1.2.16)化为

$$b^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle。 \tag{1.2.17}$$

类似地可得

$$b|n\rangle=\sqrt{n}\,|n+1\rangle。 \tag{1.2.18}$$

由式(1.2.17)还可得到式(1.2.14)中的归一化系数，于是一维线性谐振子哈密顿算符的归一化的本征矢可表示为

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(b^+)^n|0\rangle。 \tag{1.2.19}$$

由式(1.2.17)和(1.2.18)，可以立即得到算符 b 和 b^+ 在能量表象中的矩阵元

$$b^+_{n'n}=\langle n'|b^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}, \tag{1.2.20}$$

$$b_{n'n}=\langle n'|b|n\rangle=\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}。 \tag{1.2.21}$$

利用算符 b^+，b 和 x，p 之间的变换关系(1.2.5)，以及上述式(1.2.20)和(1.2.21)，可得到坐标算符 x 和动量算符 p 在谐振子能量表象中的矩阵元：

$$x_{n'n}=\langle n'|x|n\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}+\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}), \tag{1.2.22}$$

$$p_{n'n}=\langle n'|p|n\rangle=i\sqrt{\frac{\mu\omega\hbar}{2}}(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}-\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1})。 \tag{1.2.23}$$

由式(1.2.20)和(1.2.21)还可立即得到算符 b^+b 的矩阵元：

$$\langle n'|b^+b|n\rangle=(b^+b)_{n'n}=\sum_m b^+_{n'm}b_{mn}$$

$$=\sum_m(\sqrt{m+1}\,\delta_{n',m+1})(\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1})=n\delta_{n'n},$$

(1.2.24)

此结果正是我们所期待的。上述结果也可表示为矩阵形式：

$$b^+=\begin{bmatrix}0&0&0&0&\cdots\\ \sqrt{1}&0&0&0&\cdots\\ 0&\sqrt{2}&0&0&\cdots\\ 0&0&\sqrt{3}&0&\cdots\\ &&\cdots\cdots&&\\ &&\cdots\cdots&&\end{bmatrix},$$

$$b=\begin{bmatrix}0&\sqrt{1}&0&0&\cdots\\ 0&0&\sqrt{2}&0&\cdots\\ 0&0&0&\sqrt{3}&\cdots\\ &&\cdots\cdots&&\\ &&\cdots\cdots&&\\ &&\cdots\cdots&&\end{bmatrix},$$

(1.2.25)

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\begin{bmatrix}0&\sqrt{1}&0&0&\cdots\\ \sqrt{1}&0&\sqrt{2}&0&\cdots\\ 0&\sqrt{2}&0&\sqrt{3}&\cdots\\ 0&0&\sqrt{3}&0&\cdots\\ &&\cdots\cdots&&\\ &&\cdots\cdots&&\end{bmatrix},$$

$$p=i\sqrt{\frac{\mu\omega\hbar}{2}}\begin{bmatrix}0&-\sqrt{1}&0&0&\cdots\\ \sqrt{1}&0&-\sqrt{2}&0&\cdots\\ 0&\sqrt{2}&0&-\sqrt{3}&\cdots\\ 0&0&\sqrt{3}&0&\cdots\\ &&\cdots\cdots&&\\ &&\cdots\cdots&&\end{bmatrix},$$

(1.2.26)

$$b^+b=\begin{bmatrix}0&0&0&0&\cdots\\0&1&0&0&\cdots\\0&0&2&0&\cdots\\0&0&0&3&\cdots\\&&\cdots\cdots&&\\&&\cdots\cdots&&\end{bmatrix}。\tag{1.2.27}$$

从上述结果可以看出，b^+ 和 b 是非厄米算符，而 x 和 p 是厄米算符。ω 是对称的实数矩阵；p 是反对称的纯虚数矩阵，这些特点保证了它们的厄米性。

[例1] 设系统的哈密顿算符为

$$H=\frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+\lambda x^4,$$

其中 $\lambda\ll\hbar\omega$。将非线性力的势能部分 λx^4 作为微扰，试计算该项对线性谐振子能级的一级微扰修正。

解：在一级近似下微扰能级为

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

其中 $\Delta_n=\langle n|\lambda x^4|n\rangle=\lambda\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^2\langle n|(b^++b)^4|n\rangle$。

$(b^++b)^4$ 展开式有 16 项，但由于现在计算的是平均值，所以仅仅包含两个上升算符和两个下降算符的项对平均值才有贡献，因此有

$$\begin{aligned}\langle n|(b^++b)^4|n\rangle&=\langle n|(b^+b^+bb+b^+bb^+b+b^+bbb^+\\&\quad+bb^+b^+b+bb^+bb^++bbb^+b^+)|n\rangle\\&=n(n-1)+n^2+n(n+1)+n(n+1)\\&\quad+(n+1)^2+(n+1)(n+2)\\&=6n^2+6n+3。\end{aligned}$$

于是可得 $$\Delta_n=3\lambda\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^2(2n^2+2n+1)。$$

1.2.2 转化到坐标表象

现在我们来讨论一维线性谐振子哈密顿算符的本征矢 $|n\rangle$ 在

坐标表象中的表示，以便与波动力学的结果比较。

首先来考察基态。谐振子基态可通过下式定义：

$$b|0\rangle=\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}\left(x+i\frac{1}{\mu\omega}p\right)|0\rangle=0。\qquad(1.2.28)$$

用左矢$\langle x|$左乘上式，利用式(1.1.56)和(1.1.57)，便得

$$\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{\hbar}{\mu\omega}\frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle=0,\qquad(1.2.29)$$

应当指出，上式不过是基态定义$(b|0\rangle=0)$在坐标表象中的一种形式，也可看作是谐振子基态波函数$\langle x|0\rangle$所满足的一个方程。式(1.2.29)的解为

$$\psi_0(x)=\langle x|0\rangle=A_0e^{-(\mu\omega/2\hbar)x^2},\qquad(1.2.30)$$

其中A_0由归一化条件确定：

$$1=\langle 0|0\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\langle 0|x\rangle\langle x|0\rangle=|A_0|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(\mu\omega/\hbar)x^2}dx$$

$$=|A_0|^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{\mu\omega}},$$

所以$A_0=\left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{i\theta}$。若取$\theta=0$，可得

$$\psi_0(x)=\langle x|0\rangle=\left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-(\mu\omega/2\hbar)x^2}。\qquad(1.2.31)$$

因此我们得到了线性谐振子基态在坐标表象中的表示。对于激发态，有

$$\psi_n(x)=\langle x|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(b^+)^n|0\rangle。\qquad(1.2.32)$$

因为

$$\langle x|(b^+)^n|0\rangle=\left(\frac{\mu\omega}{2\hbar}\right)^{n/2}\left\langle x\left|\left(x-\frac{i}{\mu\omega}p\right)^n\right|0\right\rangle$$

$$=\left(\frac{\mu\omega}{2\hbar}\right)^{n/2}\left(x-\frac{\hbar}{\mu\omega}\frac{d}{dx}\right)^n\langle x|0\rangle,$$

所以有

$$\langle x|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{\mu\omega}{2\hbar}\right)^{n/2}\left(x-\frac{\hbar}{\mu\omega}\frac{d}{dx}\right)^ne^{-(\mu\omega/2\hbar)x^2}。$$

(1.2.33)

若令$\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x=z$，并注意到$\left(\frac{d}{dz}-z\right)^n e^{-\frac{1}{2}z^2}=e^{\frac{1}{2}z^2}\frac{d}{dz^n}e^{-z^2}$（利用递推法不难证明这等式），则式(1.2.33)可化为

$$\psi_n(x)=\langle x|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-(\mu\omega/2\hbar)x^2}H_n\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x\right), \tag{1.2.34}$$

其中

$$H_n(z)=(-1)^n e^{z^2}\frac{d}{dz^n}e^{-z^2} \tag{1.2.35}$$

是厄米多项式。式(1.2.34)正是波动力学中求解薛定谔方程所得到的结果。

1.2.3 (J^2, J_z)表象

满足如下基本对易关系的算符称为角动量算符：

$$\begin{aligned}[J_x, J_y]&=i\hbar J_z,\\ [J_y, J_z]&=i\hbar J_x,\\ [J_z, J_x]&=i\hbar J_y。\end{aligned} \tag{1.2.36}$$

由于角动量平方算符$\boldsymbol{J}^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2$与角动量的任一直角坐标分量对易，即

$$[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}]=0, \tag{1.2.37}$$

所以存在例如$\boldsymbol{J}^2$和J_z算符的共同本征矢。由这些本征矢所构造的表象称为$(\boldsymbol{J}^2, J_z)$表象。

类似于线性谐振子的情况，我们通常构造两个非厄米角动量算符J_+和J_-，以代替J_x和J_y：

$$J_\pm=J_x\pm iJ_y。 \tag{1.2.38}$$

与此相应的逆变换关系是

$$\begin{aligned}J_x&=\frac{1}{2}(J_++J_-),\\ J_y&=\frac{1}{2i}(J_+-J_-)。\end{aligned} \tag{1.2.39}$$

$\boldsymbol{J}^2$, $J_\pm$和J_z之间的对易关系有

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z, \tag{1.2.40}$$

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm, \tag{1.2.41}$$

$$[\boldsymbol{J}^2, J_\pm] = 0。 \tag{1.2.42}$$

此外，一个常用的关系是

$$J_\pm J_\mp = \boldsymbol{J}^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z, \tag{1.2.43}$$

这表明，算符 J_+J_- 或 J_-J_+ 在 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 表象中是对角化的。

$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的共同本征矢记为 $|\lambda m\rangle$，相应的 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值为 $\lambda\hbar^2$；J_z 的本征值为 $m\hbar$，即

$$\boldsymbol{J}^2|\lambda m\rangle = \lambda\hbar^2|\lambda m\rangle, \tag{1.2.44}$$

$$J_z|\lambda m\rangle = m\hbar|\lambda m\rangle。 \tag{1.2.45}$$

现在来确定本征值谱 λ 和 m。首先注意到 J_+ 和 J_- 互为厄米共轭，即 $J_+ = J_-^\dagger$，$J_- = J_+^\dagger$，所以由式(1.2.43)可得

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

若取上式在态 $|\lambda m\rangle$ 中的平均值，由于上式等式右边的平均值为非负数，因而有

$$\langle\lambda m|(\boldsymbol{J}^2 - J_z^2)|\lambda m\rangle = \hbar^2(\lambda - m^2) \geqslant 0,$$

即

$$\lambda \geqslant m^2。 \tag{1.2.46}$$

以下讨论类似于线性谐振子本征值问题中的阶梯方法。利用式(1.2.44)和(1.2.45)以及对易关系(1.2.41)和(1.2.42)，可证明如下结果：

$$\boldsymbol{J}^2 J_\pm|\lambda m\rangle = \lambda\hbar^2 J_\pm|\lambda m\rangle, \tag{1.2.47}$$

$$J_z J_\pm|\lambda m\rangle = (m \pm 1)\hbar J_\pm|\lambda m\rangle, \tag{1.2.48}$$

这表明，如果 $|\lambda, m\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的一个共同本征矢，相应的本征值为 $\lambda\hbar^2$ 和 $m\hbar$，则 $J_\pm|\lambda m\rangle$ 也是它们的一个共同本征矢，相应的本征值为 $\lambda\hbar^2$ 和 $(m\pm1)\hbar$。从这个意义上说，可称 J_+ 为角动量上升算符；J_- 为角动量下降算符。

为了确定 λ，注意式(1.2.46)，它表明 m 的取值有两个限制。

对于给定的 λ，设 m 的上限为 j；下限为 j'，因此有

$$J_+|\lambda j\rangle=0, \tag{1.2.49}$$

$$J_-|\lambda j'\rangle=0。 \tag{1.2.50}$$

若将算符 J_- 左乘式(1.2.49)，并利用等式(1.2.43)，有

$$\begin{aligned} J_-J_+|\lambda j\rangle&=(J^2-J_z^2-\hbar J_z)|\lambda j\rangle \\ &=(\lambda-j^2-j)\hbar^2|\lambda j\rangle=0, \end{aligned}$$

因此有

$$\lambda=j(j+1)。 \tag{1.2.51}$$

类似地，将 J_+ 左乘式(1.2.50)，可得

$$\lambda=j'(j'-1)。 \tag{1.2.52}$$

联立式(1.2.51)和(1.2.52)，便得到一个关于 j' 的二次代数方程式，其解为

$$j'=-j,\ j'=j+1,$$

其中第二个解应被排除，因为我们已假定 j 是 m 可能取值的上限。于是，如果 m 取值的上限为 j，则下限为 $-j$，即

$$-j\leqslant m\leqslant j。 \tag{1.2.53}$$

由于式(1.2.51)，我们可将量子数 λ 改变为 j，于是算符 J^2 和 J_z 的共同本征矢记为 $|jm\rangle$，本征值方程(1.2.44)和(1.2.45)现在记为

$$J^2|jm\rangle=j(j+1)\hbar^2|jm\rangle, \tag{1.2.54}$$

$$J_z|jm\rangle=m\hbar|jm\rangle。 \tag{1.2.55}$$

根据式(1.2.53)和算符 J_+ 作用的阶梯性质，我们可进一步得到如下结论：j 值的给定应保证 $2j$ 的值为非负整数，因为 $2j$ 的值代表 J_+ 使本征矢从 $|j,-j\rangle$ 变到 $|jj\rangle$ 的作用次数。于是 j 可取非负整数或半整数：

$$j=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\cdots。 \tag{1.2.56}$$

对于轨道角动量，j 取整数，常用 l 表示；对于自旋角动量，j 可取正数(玻色子)或半整数(费米子)，常用 s 表示。由式(1.2.53)可

知，当 j 给定后，量子数 m 可取 $-j,\ -j+1,\cdots,\ -1, 0, 1,\ \cdots j-1,$ j 等 $2j+1$ 个可能的值。

现在来讨论角动量算符在 $(\boldsymbol{J}^2,\ J_z)$ 表象中的矩阵表示。由式 (1.2.48) 可知，右矢 $J_+|jm\rangle$ 和 $|j,m+1\rangle$ 应表示同样的态，所以有

$$J_+|jm\rangle = c_+|j, m+1\rangle。 \tag{1.2.57}$$

对上式取模的平方，有

$$\begin{aligned}|c_+|^2 &= \langle jm|J_+^{\dagger}J_+|jm\rangle = \langle jm|J_-J_+|jm\rangle \\ &= \langle jm|(\boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|jm\rangle \\ &= [j(j+1) - m^2 - m]\hbar^2。\end{aligned}$$

若取 c_+ 的位相因子为零，则式 (1.2.57) 可记为

$$J_+|jm\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar|j, m+1\rangle。 \tag{1.2.58}$$

类似地可得算符 J_- 对表象基矢的作用：

$$J_-|jm\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar|j, m-1\rangle。 \tag{1.2.59}$$

将左矢 $\langle j'm'|$ 左乘式 (1.2.58) 和 (1.2.59)，便得到 J_+ 和 J_- 在 $(\boldsymbol{J}^2,\ J_z)$ 表象中的矩阵元：

$$\langle j'm'|J_+|jm\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar\delta_{j'j}\delta_{m',m+1}, \tag{1.2.60}$$

$$\langle j'm'|J_-|jm\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar\delta_{j'j}\delta_{m',m-1}。 \tag{1.2.61}$$

利用算符 J_+ 和 J_- 与 J_x 和 J_y 的变换关系 (1.2.39)，由上述结果可得算符 J_x 和 J_y 的矩阵元，以及算符 $\boldsymbol{J}^2$ 的矩阵元。

作为例子，下面给出 $j=\frac{1}{2}$ 和 1 这两种情况下角动量算符在 $(\boldsymbol{J}^2,\ J_z)$ 表象中的矩阵形式。

$j=\frac{1}{2}$ 时，

$J_+ =$

m' \ m	$1/2$	$-1/2$
$1/2$	0	$\hbar$
$-1/2$	0	0

$$J_-=\begin{array}{c|cc} m'\backslash m & 1/2 & -1/2 \\ \hline 1/2 & 0 & 0 \\ -1/2 & \hbar & 0 \end{array}$$

$$J_x=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix} \qquad J_y=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix}$$

$$J_z=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix} \qquad J^2=\frac{3}{4}\hbar^2\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix} \tag{1.2.62}$$

$j=1$

$$J_+=\begin{array}{c|ccc} m'\backslash m & 1 & 0 & -1 \\ \hline 1 & 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{array}$$

$$J_-=\begin{array}{c|ccc} m'\backslash m & 1 & 0 & -1 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 & 0 \\ -1 & 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{array}$$

$$J_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix} \qquad J_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{bmatrix}$$

$$J_z=\hbar\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix} \qquad J^2=2\hbar^2\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix} \tag{1.2.63}$$

最后，当 j 给定时 $|j,-j\rangle$ 是 m 取最小值 $(-j)$ 的状态；$|jj\rangle$ 是 m 取最大值 (j) 的状态。可以证明，m 取任意值时的状态可通过算符 J_+ 或 J_- 对这两种边界状态作用而得到：

$$|jm\rangle=\sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}}\left(\frac{J_+}{\hbar}\right)^{j+m}|j,-j\rangle$$

$$=\sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}}\left(\frac{J_-}{\hbar}\right)^{j-m}|jj\rangle。\quad(1.2.64)$$

1.2.4 轨道角动量本征态

轨道角动量算符常用 $\boldsymbol{L}$ 表示；$\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的共同本征态右矢常表示为 $|lm\rangle$：

$$\boldsymbol{L}^2|lm\rangle=l(l+1)\hbar^2|lm\rangle,\quad(1.2.65)$$

$$L_z|lm\rangle=m\hbar|lm\rangle。\quad(1.2.66)$$

本征矢集$\{|lm\rangle\}$的正交归一化条件和完全性条件可表示为

$$\langle l'm'|lm\rangle=\delta_{l'l}\delta_{m'm},\quad(1.2.67)$$

$$\sum_{lm}|lm\rangle\langle lm|=1。\quad(1.2.68)$$

轨道角动量可用坐标算符和动量算符表示为

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}。\quad(1.2.69)$$

因为坐标算符和动量算符满足如下基本对易关系

$$[x_i,\ p_j]=i\hbar\delta_{ij},\quad(1.2.70)$$

所以可以证明由式(1.2.69)定义的算符满足角动量算符的基本对易关系(1.2.36)。于是，轨道角动量算符及其本征矢可采用坐标表象表示。右矢$|lm\rangle$在坐标表象中的表示为

$$\langle\boldsymbol{n}|lm\rangle=Y_{lm}(\boldsymbol{n}),\quad(1.2.71)$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 为矢径方向的单位矢量($\boldsymbol{x}=r\boldsymbol{n}$)，在球坐标系中它由矢径方向的极角 θ 和方位角 φ 确定，即 $\boldsymbol{n}=(\theta,\ \varphi)$。$Y_{lm}(\boldsymbol{n})$即为球谐函数，是三维空间中定义在以原点为圆心的球面上的周期性函数。形式上可写出如下表示：

$$\langle\boldsymbol{x}|r'lm\rangle=i^l\frac{\delta(r-r')}{r}Y_{lm}(\boldsymbol{n})。\quad(1.2.72)$$

此式的合理性可从下面所导出的公式的正确性看出。类似地，可写出如下有用的表式.

$$\langle\boldsymbol{n}_p|lm\rangle=Y_{lm}(\boldsymbol{n}_p),\quad(1.2.73)$$

$$\langle \boldsymbol{p}|p'lm\rangle = \frac{\delta(p-p')}{p} Y_{lm}(\boldsymbol{n}_p), \qquad (1.2.74)$$

$$\langle r l'm'|plm\rangle = 4\pi p r j_l(pr)\delta_{l'l}\delta_{m'm}, \qquad (1.2.75)$$

其中 $\boldsymbol{n}_p$ 为动量空间沿矢径方向的单位矢量（$\boldsymbol{p}=p\boldsymbol{n}_p$），$j_l(pr)$ 为球贝塞尔函数。式(1.2.75)的合理性也可从下面的结果看出。

由正交归一性(1.2.67)立即可得

$$\langle l'm'|lm\rangle = \int d\Omega \langle l'm'|\boldsymbol{n}\rangle\langle \boldsymbol{n}|lm\rangle$$

$$= \int d\Omega\, Y^*_{l'm'}(\boldsymbol{n}) Y_{lm}(\boldsymbol{n}) = \delta_{l'l}\delta_{m'm}, \qquad (1.2.76)$$

这正是球谐函数的正交归一性。此外，由完全性条件(1.2.68)及式(1.2.72)～(1.2.75)又可得到如下展开式：

$$\delta^2(\boldsymbol{n}'-\boldsymbol{n}) = \langle \boldsymbol{n}'|\boldsymbol{n}\rangle = \sum_{lm}\langle \boldsymbol{n}'|lm\rangle\langle lm|\boldsymbol{n}\rangle$$

$$= \frac{1}{4\pi}\sum_l (2l+1)P_l(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}'), \qquad (1.2.77)$$

$$\delta^3(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{x}'|\boldsymbol{x}\rangle = \sum_{lm}\int d\boldsymbol{x}''\langle \boldsymbol{x}'|\boldsymbol{x}''lm\rangle\langle \boldsymbol{x}''lm|\boldsymbol{x}\rangle$$

$$= \frac{\delta(r'-r)}{4\pi r^2}\sum_l (2l+1)P_l(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}'), \qquad (1.2.78)$$

$$e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} = \langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}\rangle$$

$$= \sum_{lm,l'm'}\iint d\boldsymbol{x}'\,d\boldsymbol{x}''\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'lm\rangle\langle \boldsymbol{x}'lm|\boldsymbol{x}''l'm'\rangle\cdot\langle \boldsymbol{x}''l'm'|\boldsymbol{p}\rangle$$

$$= \sum_l (2l+1) i^l j_l(pr) P_l(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}_p), \qquad (1.2.79)$$

其中 P_l 是拉让德多项式，$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}' = \cos\Theta = \cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi-\varphi')$，$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}_p$ 则是 $\boldsymbol{n}=(\theta,\varphi)$和动量 $\boldsymbol{p}$ 的方向之间夹角的余弦。式(1.2.77)可以利用完全性条件(1.2.68)以及展开式

$$\delta^2(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{n}') = \delta(\cos\theta-\cos\theta')\delta(\varphi-\varphi') = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}') \qquad (1.2.80)$$

得到。由(1.2.77)式还可立即得到关于球谐函数的求和公式：

$$\sum_m \langle \boldsymbol{n}' | lm \rangle \langle lm | \boldsymbol{n} \rangle = \sum_m Y_{lm}(\boldsymbol{n}') Y_{lm}^*(\boldsymbol{n})$$

$$= \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{n}')。 \quad (1.2.81)$$

如果注意到奇性和归一化条件而将三维 δ-函数在球坐标中的形式表示为

$$\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') = \frac{\delta(r-r')}{r^2}\delta(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{n}')$$

$$= \frac{\delta(r-r')}{r^2}\delta(\cos\theta-\cos\theta')\delta(\varphi-\varphi'), \quad (1.2.82)$$

则不难验证式(1.2.78)的正确性。式(1.2.79)的正确性则在数学物理方法中已有证明①。

§1.3 幺正变换的一般理论

前面的讨论中已经知道，为了给出某微观粒子状态的态矢量和力学量的具体形式，先要选择一个适当的表象。所谓表象，实际上就是一个复矢量空间，或希尔伯空间，该空间可由某个力学量的本征矢集或某几个力学量的共同本征矢集作为基矢而张成。在这种表象中，态矢量右矢$|\alpha\rangle$可用一列矩阵表示，其矩阵元从几何学上说，是该态矢量在表象基矢上的投影；从代数学上说，是将态矢量用基矢集(是一组正交归一完全态矢集)展开时的展开系数；从物理意义上说，是在该状态中以基矢状态出现的概率幅。在这种表象中，大多数力学量算符则可用二阶张量或方阵表示。态矢量和力学量矩阵的维数决定于表象的维数，即构成表象空间基矢的数目。

既然同一微观粒子状态可采用不同的表象表示，这些不同表示之间必然满足某种关系。狄拉克最早发现，态矢量在不同表象的表示之间存在"幺正变换"关系；而力学量则存在"相似变换"关

① 例如，参阅梁昆淼编，《数学物理方法》，高等教育出版社。

系。

1.3.1 态矢量表示的变换

首先来考察一个态矢量右矢 $|\alpha\rangle$ 在不同表象，例如 A 表象和 B 表象的表示之间的联系。A 表象的基矢记为 $|a_i\rangle$，B 表象的基矢记为 $|b_i\rangle$，A 表象和 B 表象的维数不一定相等。

利用 A 表象的完全性条件可得

$$\langle b_i|\alpha\rangle=\sum_j\langle b_i|a_j\rangle\langle a_j|\alpha\rangle。\tag{1.3.1}$$

上式等号左侧的 $\langle b_i|\alpha\rangle$ 即为态矢量 $|\alpha\rangle$ 在 B 表象中的表示，等号右侧求和记号中的 $\langle a_j|\alpha\rangle$ 是态矢量在 A 表象中的表示，两者间是通过矩阵元为

$$U_{ij}=\langle b_i|a_j\rangle\tag{1.3.2}$$

的变换矩阵相联系的。式(1.3.1)可记为矩阵形式：

$$\alpha^B=U\alpha^A,\tag{1.3.3}$$

其中从 A 到 B 表象的变换矩阵为

$$U=\begin{bmatrix}\langle b_1|a_1\rangle & \langle b_1|a_2\rangle & \cdots\\ \langle b_2|a_1\rangle & \langle b_2|a_2\rangle & \cdots\\ \cdots\cdots & & \\ \cdots\cdots & & \\ \cdots\cdots & & \end{bmatrix}。\tag{1.3.4}$$

现在来考察逆变换，即态矢量从 B 表象表示到 A 表象表示的变换。利用 B 表象基矢的完全性条件可得

$$\langle a_i|\alpha\rangle=\sum_j\langle a_i|b_j\rangle\langle b_j|\alpha\rangle。\tag{1.3.5}$$

因此从 B 到 A 表象变换，即逆变换矩阵的矩阵元为

$$U^{-1}_{ij}=\langle a_i|b_j\rangle。\tag{1.3.6}$$

由于 $\langle a_i|b_j\rangle=\langle b_j|a_i\rangle^*=U^*_{ji}=\tilde{U}^*_{ij}=U^+_{ij}$，式(1.3.6)可记为 $U^{-1}_{ij}=U^+_{ij}$，即

$$U^{-1}=U^+。\tag{1.3.7}$$

因此我们得到如下结论：态矢量在不同表象表示之间的变换是通过幺正变换实现的，而幺正变换矩阵元即为新表象基矢左矢和原

表象基矢右矢的内积。从式(1.3.4)还可以看出，变换矩阵 U 的第 i 列元素由原表象 A 的第 i 个基矢右矢 $|a_i\rangle$ 在新表象 B 中的列矩阵表示构成；第 i 行元素由新表象 B 的第 i 个基矢左矢 $\langle b_i|$ 在原表象 A 中的行矩阵表示构成[参见式(1.1.35)]。这些规律有助于求出变换矩阵。

1.3.2 力学量表示的变换

当态矢量变换时，力学量算符也将作相应的变换。设力学量 L 在 A 表象中的矩阵元为 $L^A_{ij}=\langle a_i|L|a_j\rangle$，在 B 表象中的矩阵元为 $L^B_{ij}=\langle b_i|L|b_j\rangle$。利用 A 表象基矢的完全性条件可得

$$\langle b_i|L|b_j\rangle=\sum_{kl}\langle b_i|a_k\rangle\langle a_k|L|a_l\rangle\langle a_l|b_j\rangle。\qquad(1.3.8)$$

上式可记为分量形式：

$$L^B_{ij}=\sum_{kl}U_{ik}L^A_{kl}U^{-1}_{lj},\qquad(1.3.9)$$

或矩阵形式

$$L^B=UL^AU^{-1},\qquad(1.3.10)$$

其中 U 是从 A 表象到 B 表象的幺正变换矩阵(1.3.4)。所以，与态矢量表示的变换(1.3.1)或(1.3.3)相应，力学量表示必须按式(1.3.8)或(1.3.10)作相应的变换。力学量算符的这种相应变换称为“相似变换”。

1.3.3 再论表象变换

前面我们讨论了不同表象的态矢量和力学量表示之间的变换关系，态矢量作幺正变换；力学量作相似变换。广义上说，$\langle \boldsymbol{n}|lm\rangle$，$\langle x|n\rangle$，$\langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{x}\rangle$等都代表了各种表象变换的矩阵元。

现在来讨论一类特殊的，但仍然具有相当普遍性的表象变换。在这类变换中所涉及的不同表象具有相同的维数，甚至是同一类表象。例如在讨论坐标平移变换或坐标转动变换的问题中就将出现这种情况。

仍然设 A 表象的基矢为 $|a_i\rangle$，B 表象的基矢为 $|b_i\rangle$。现在构造如下算符

$$U=\sum_k |a_k\rangle\langle b_k|。 \tag{1.3.11}$$

不难证明，这个算符是幺正算符，即

$$U^{-1}=U^+=\sum_k |b_k\rangle\langle a_k|。 \tag{1.3.12}$$

因为

$$|b_i\rangle=U^{-1}|a_i\rangle, \tag{1.3.13}$$

所以，原表象 A 的基矢到新表象 B 的基矢之间的变换是通过幺正变换算符 U^{-1} 实现的。利用式(1.3.13)，对于任意态矢量$|\alpha\rangle$可得

$$\langle b_i|\alpha\rangle=\langle a_i|U|\alpha\rangle。 \tag{1.3.14}$$

由于 $\langle a_i|U|\alpha\rangle=\sum_j \langle a_i|U|a_j\rangle\langle a_j|\alpha\rangle=\sum_j \langle b_i|a_j\rangle\langle a_j|\alpha\rangle$，所以式 (1.3.14) 完全等价于式 (1.3.1)。由此可以得出如下结论：态矢量作变换但基矢不变所得到的新表示 $\langle a_i|(U|\alpha\rangle)$ 与态矢量不变而基矢(右矢)作逆变换所得到的表示$\langle b_i|\alpha\rangle=(\langle a_i|U)|\alpha\rangle$完全等价。

[例1] 已知泡利矩阵在 σ_z-表象中的形式为

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

试求出它们在 σ_x 表象中的形式

解：σ_x 表象的基矢是 σ_x 的本征矢，它们在自身表象中的形式为

$$\alpha_1=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix},\quad \alpha_2=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix},$$

相应的本征值分别为 1 和 -1。σ_z 表象的基矢是 σ_z 的本征矢，它们在 σ_x 表象中的表示为

$$\beta_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix},\quad \beta_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0\\ -1\end{bmatrix},$$

相应的本征值也分别为 1 和 -1。由式(1.3.2)或(1.3.11)可知，从 σ_x-表象到 σ_z-表象的变换矩阵在 σ_x-表象的矩阵元为$\langle\alpha_i|U|\alpha_j\rangle=\langle\beta_i|\alpha_j\rangle$。变换矩阵的第 i 行元素为新表象(σ_z-表象) 的第 i 个

基矢左矢在原表象(σ_z-表象)中的表示。所以U的第一行元素为β_1^+,第二行元素为β_2^+。因此有

$$U=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}。$$

σ_x-表象中的泡利矩阵形式为

$$\sigma_x'=U\sigma_xU^{-1}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix},$$

$$\sigma_y'=U\sigma_yU^{-1}=\begin{bmatrix}0 & i\\ -i & 0\end{bmatrix},$$

$$\sigma_z'=U\sigma_zU^{-1}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}。$$

1.3.4 幺正变换的基本性质

幺正变换具有许多非常有用的性质。

(1) 在幺正变换下两个态矢量的内积不变。

设态矢量从不带撇表示转化到带撇表示:

$$|\alpha'\rangle=U|\alpha\rangle,\ |\beta'\rangle=U|\beta\rangle,$$

显然有

$$\langle\beta'|\alpha'\rangle=\langle\beta|U^+U|\alpha\rangle=\langle\beta|\alpha\rangle。\qquad(1.3.15)$$

上述性质的一个重要的推论是,任何态矢量的模,或者说它的归一化性质在幺正变换下保持不变。

(2) 在幺正变换下任何算符方程的形式保持不变。尤其是,在幺正变换下算符的对易关系保持不变。

设 $[A,\ B]=C$,且$A'=UAU^{-1}$, $B'=UBU^{-1}$, $C'=UCU^{-1}$,则有

$$[A',\ B']=U[A,\ B]U^{-1}=UCU^{-1}=C'。\qquad(1.3.16)$$

(3) 在幺正变换下任何力学量算符的平均值保持不变,或者更一般地说,算符矩阵元的形式保持不变。

这个性质很容易证明,因为

$$\langle\beta'|A'|\alpha'\rangle=\langle\beta|U^+UAU^{-1}U|\alpha\rangle=\langle\beta|A|\alpha\rangle。$$

(1.3.17)

(4) 在幺正变换下任何算符的行列式保持不变。

利用关于矩阵的行列式的公式：

$$\det(AB)=\det A\cdot\det B \tag{1.3.18}$$

可得 $\det A\cdot\det A^{-1}=\det(AA^{-1})=1$。所以有

$$\det A'=\det(UAU^{-1})=\det U\cdot\det A\cdot\det U^{-1}=\det A。 \tag{1.3.19}$$

(5) 在幺正变换下算符的本征值谱保持不变。

在矩阵力学中，确定算符本征值的方程是“久期方程”(亦称“特征方程”)：$\det(A-\lambda I)=0$。利用上述性质(4)，可得

$$0=\det(A-\lambda I)=\det[U(A-\lambda I)U^{-1}]=\det(A'-\lambda I),$$

可见变换后由新表象中的特征方程所确定的本征值谱仍然为 λ。

(6) 在幺正变换下任何算符的迹保持不变。

矩阵 A 的迹定义为它的对角元之和：

$$\mathrm{Tr}\,A=\sum_i A_{ii}。 \tag{1.3.20}$$

不难证明关于迹的如下公式：

$$\mathrm{Tr}(AB)=\mathrm{Tr}(BA), \tag{1.3.21}$$

$$\mathrm{Tr}(ABC)=\mathrm{Tr}(BCA)=\mathrm{Tr}(CAB)。 \tag{1.3.22}$$

于是有

$$\mathrm{Tr}A'=\mathrm{Tr}(UAU^{-1})=\mathrm{Tr}(AU^{-1}U)=\mathrm{Tr}A。 \tag{1.3.23}$$

任何力学量算符在自身表象中是一对角化矩阵，其对角元就是本征值谱；在一般表象中并非对角化矩阵。根据表象理论，原则上总可以找到一个幺正变换，通过它将算符从非对角化表象转化到对角化表象，即自身表象表示。另一方面，根据幺正变换的基本性质可知，在表象变换下，算符矩阵的行列式和迹保持不变，于是有

$$\mathrm{Tr}\,A=a_1+a_2+\cdots=\text{算符 }A\text{ 的本征值之和}, \tag{1.3.24}$$

$$\det A=a_1\cdot a_2\cdot\cdots=\text{算符 }A\text{ 的本征值之积}。 \tag{1.3.25}$$

由此，常常把一个算符矩阵的迹和行列式作为该算符的“特征量”。它们从整体上反映了算符的本征值谱。作为应用，我们来导出关

于指数算符函数的一个有用的公式。设

$$B=e^{A}, \tag{1.3.26}$$

其中指数算符函数通过如下展开式定义：

$$e^{A}=1+\frac{1}{1!}A+\frac{1}{2!}A^{2}+\cdots=\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{A}{n}\right)^{n}。 \tag{1.3.27}$$

因为在 A 表象中，式(1.3.26)中的算符 B 的第 i 个本征值为 $b_i=e^{a_i}$，其中 a_i 是算符 A 的第 i 个本征值，所以有

$$\det B=e^{\mathrm{Tr}A}。 \tag{1.3.28}$$

显然，式(1.3.28)在任何表象中也成立。

1.3.5 厄米算符和幺正算符

可以证明，若算符 R 是厄米的，即 $R^{+}=R$，则由它所生成的算符

$$U=e^{i\lambda R} \tag{1.3.29}$$

一定是幺正的，其中 λ 是实参数。厄米算符和幺正算符是量子理论中最重要的两类算符。厄米算符的本征值为实数，本征矢可满足正交归一化条件；描写微观状态的物理量常常用厄米算符表示；厄米算符的本征矢可用作基矢，来构造表象，从而对微观现象进行描述和计算。另一方面，描写状态在不同表象表示之间的变化，或者描写状态随时间、空间或其他力学量的变化而变化，则常常需要采用幺正算符。在§1.5的讨论中将会看到，现代量子理论的最重要的观念之一，即系统的对称性和过程中出现的守恒定律之间的联系，正是通过式(1.3.29)体现的。

任何幺正算符可表示为

$$U=\frac{1}{2}(U+U^{+})+\frac{1}{2}(U-U^{+})=A+iB, \tag{1.3.30}$$

其中

$$A=\frac{1}{2}(U^{+}+U),\quad B=\frac{i}{2}(U^{+}-U) \tag{1.3.31}$$

都是厄米算符。若将式(1.3.29)代入，有 $A=\cos(\lambda R)$，$B=\sin(\lambda R)$。

此外，还可通过其它形式由厄米算符生成幺正算符。如

$$U=\frac{1+iK}{1-iK}。\tag{1.3.32}$$

可以证明，若 K 为厄米算符，则 U 必然为幺正算符。且代入式(1.3.29)，可得 $K=\mathrm{tg}\left(\frac{1}{2}\lambda R\right)$。

在上述讨论中常常涉及到算符函数 $f(A)$。算符函数常常通过级数来定义，若 $f(x)$ 是数 x 的一个级数或多项式，则 $f(A)$ 便是算符 A 的同样形式的级数或多项式。我们因此可以得到如下结论：若算符矩阵 A 通过幺正变换转化为对角矩阵形式：$A'=UAU^{-1}$，则这个幺正矩阵 U 也可将 $f(A)$ 转化为对角化形式 $f(A')$，且 $f(A')$ 的第 i 个本征值简单地就是 $f(a_i)$，其中 a_i 就是算符 A(或 A')的第 i 个本征值。

最后我们列出如下关于算符函数的有用公式(习题)：

(1) $e^{A}Be^{-A}=B+\frac{1}{1!}[A,\ B]+\frac{1}{2!}[A,\ [A,\ B]]+\cdots$。

(1.3.33)

(2) 若 $[A,\ [A,\ B]]=0$，$[B,\ [A,\ B]]=0$，则有

$$e^{A+B}=e^{A}e^{B}e^{-\frac{1}{2}[A,\ B]}=e^{B}e^{A}e^{\frac{1}{2}[A',\ B]},\tag{1.3.34}$$

此式常称为贝克-豪斯多夫 (Bake-Hausdoff) 公式，或韦尔(Weyl)公式。

(3) 若 $[A,\ B]=1$，则有

$$[A,\ f(B)]=\frac{\partial}{\partial B}f(B),\ [B,\ f(A)]=-\frac{\partial}{\partial A}f(A)。\tag{1.3.35}$$

*1.3.6 反线性算符和反幺正算符

满足如下性质的算符 O 称为“线性算符”：

$$O(c_1|\alpha_1\rangle+c_2|\alpha_2\rangle)=c_1O|\alpha_1\rangle+c_2O|\alpha_2\rangle,\tag{1.3.36}$$

而满足如下性质的算符 θ 称为“反线性算符”：

$$\theta(c_1|\alpha_1\rangle+c_2|\alpha_2\rangle)=c_1^{*}\theta|\alpha_1\rangle+c_2^{*}\theta|\alpha_2\rangle\tag{1.3.37}$$

反线性算符可表示为一个线性算符和一个“复共轭算符”K之积。复共轭算符定义为

$$K c|\alpha\rangle = c^* K|\alpha\rangle。 \tag{1.3.38}$$

可见，复共轭算符是一类反线性算符。

最重要的一类反线性算符是由(线性)幺正算符U与复共轭算符构成：

$$T = UK, \tag{1.3.39}$$

称为“反幺正算符”。我们来考察反幺正算符对态矢量的作用。为此，我们先来考察复共轭算符的作用。在任一A表象中，复共轭算符对态矢量右矢的作用为

$$K|\alpha\rangle = K\sum_i \langle a_i|\alpha\rangle |a_i\rangle = \sum_i \langle a_i|\alpha\rangle^* K|a_i\rangle,$$

由于自身表象中基矢列矩阵是实数矩阵[见式(1.1.39)]，这时复共轭算符对它的作用相当于单位矩阵。所以有

$$K|\alpha\rangle = \sum_i \langle a_i|\alpha\rangle^* |a_i\rangle。 \tag{1.3.40}$$

反幺正算符对态矢量的作用于是可表示为

$$T|\alpha\rangle = UK|\alpha\rangle = \sum_i \langle a_i|\alpha\rangle^* U|a_i\rangle。 \tag{1.3.41}$$

利用上述结果可以讨论反幺正变换对两个态矢量标积的影响。设$|\alpha'\rangle = T|\alpha\rangle$，$|\beta'\rangle = T|\beta\rangle$。利用式(1.3.41)，可得

$$\begin{aligned}\langle\beta'|\alpha'\rangle &= \sum_{ij}\langle a_i|\beta\rangle\langle a_i|U^+U|a_j\rangle\langle a_j|\alpha\rangle^* \\ &= \sum_i \langle a_i|\beta\rangle\langle a_i|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*。\end{aligned} \tag{1.3.42}$$

这表明，在反幺正变换下两态矢量的内积将变为它的复共轭。这一结果显然区别于幺正变换情况，在幺正变换下两态矢量的内积不变。但是必须指出，无论在幺正变换还是反幺正变换下，两态矢量内积的模都保持不变，或者说，

$$|\langle\beta'|\alpha'\rangle|^2 = |\langle\beta|\alpha\rangle|^2。 \tag{1.3.43}$$

反幺正变换的概念最早由维格纳(E.P.Wigner)引进，用来讨论时间反演不变性的问题(见1.5.9)。

§1.4 状态随时间改变的描述
——三种绘景

上一节中讨论了状态的不同表述之间的联系，这种联系可通过不含时间的幺正变换来实现。现在进一步讨论量子动力学问题，即微观粒子系统的状态随时间演化的问题。人们建立量子理论不仅在于描述微观状态，而且还希望了解微观状态的变化过程以及决定变化过程的相互作用或动力学机制，从而达到控制、改造和利用微观现象的目的。

由于状态随时间的演化包括态矢量和力学量两个方面，所以有可能采用多种表述方式。例如，可将状态随时间的演化完全归因于态矢量的改变；也可完全归因于力学量的改变；当然也可根据方便，将状态随时间的改变部分归因于态矢量，部分归因于力学量。量子系统随时间演化的表达方式称为"绘景"。与上述三种方式相应，通常有三种绘景，即薛定谔绘景(S. P.)、海森伯绘景(H. P.)和相互作用绘景(I. P.)。

1.4.1 薛定谔绘景

薛定谔绘景将状态随时间的改变完全归因于态矢量，所以薛定谔绘景是由随时间改变的态矢量和不随时间改变的力学量构成。这种绘景通常适用于存在不随时间改变的相互作用的量子力学问题。

某时刻 t 的态矢量记为 $|\alpha, t\rangle$，其中 α 为态指标。本节主要讨论随时间的演化问题，所以在以下讨论中为简单起见常略去态指标，而将态矢量记为 $|t\rangle$。t 时刻态矢量与初始时刻态矢量之间的关系可记为

$$|t\rangle = \mathscr{U}(t, t_0)\,|t_0\rangle, \tag{1.4.1}$$

其中 $\mathscr{U}(t, t_0)$ 称为时间演化算符。因为现在将量子状态随时间的演化完全归因于态矢量，所以状态随时间改变的全部信息均包含

在这个时间演化算符之中。

时间演化算符具有如下基本性质。

(1) 初始条件：

$$\mathscr{U}(t_0,\ t_0)=1, \tag{1.4.2}$$

这是时间演化算符定义(1.4.1)的必然结果。

(2) 幺正性：

$$\mathscr{U}^+(t,\ t_0)\mathscr{U}(t,\ t_0)=\mathscr{U}(t,\ t_0)\mathscr{U}^+(t,\ t_0)=1。 \tag{1.4.3}$$

这个性质是概率守恒性的结果。概率守恒性要求态矢量的归一化条件在时间演化过程中保持不变，因此有

$$\langle t|t\rangle=\langle t_0|\mathscr{U}^+(t,\ t_0)\mathscr{U}(t,\ t_0)|t_0\rangle=\langle t_0|t_0\rangle,$$

由此可得式(1.4.3)。

(3) 因子化特性：

$$\mathscr{U}(t,\ t_0)=\mathscr{U}(t,\ t_1)\mathscr{U}(t_1,\ t_0)。 \tag{1.4.4}$$

这个性质也是时间演化算符定义(1.4.1)的必然结果。

(4) 时间反演特性：

$$\mathscr{U}^{-1}(t,\ t_0)=\mathscr{U}(t_0,\ t)。 \tag{1.4.5}$$

由上述性质(1)和(3)可得 $\mathscr{U}(t,\ t_0)\mathscr{U}(t_0,\ t)=1$，于是可得到式(1.4.5)。时间演化算符的反演特性是量子力学理论满足时间反演不变性的体现。

1.4.2 薛定谔绘景中的动力学方程

现在来讨论薛定谔绘景中的动力学方程，它可表达为时间演化算符或态矢量的关于时间的微分方程。

首先，将时间间隔为 dt 的时间演化算符表示为

$$\mathscr{U}(t+dt,\ t)=1-i\Omega\,dt, \tag{1.4.6}$$

其中 Ω 显然应为厄米算符，即 $\Omega^+=\Omega$。将 Ω 表示为

$$\Omega=H/\hbar, \tag{1.4.7}$$

其中 $\hbar$ 是普朗克常数，因此 H 是具有能量量纲的厄米算符，我们将它辨认为微观粒子系统的哈密顿算符。可以证明，式(1.4.6)所表示的算符满足§1.4.1中所列的关于时间演化算符的全部特

性。

利用因子化特性及表式(1.4.6),有

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

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

上述结果可写成微分方程形式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathscr{U}(t,\ t_0)=H\mathscr{U}(t,\ t_0)。\qquad(1.4.8)$$

这就是我们所要建立的薛定谔绘景中的动力学方程。辅以初始条件 $\mathscr{U}(t_0,\ t_0)=1$,若已知 H,就能解出 $\mathscr{U}(t,\ t_0)$,从而了解状态随时间演化的所有情况。式(1.4.8)具有薛定谔方程的形式,但实际上它是一个算符方程。不过,若将初态右矢$|t_0\rangle$右乘式(1.4.8),可得

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

即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle=H|t\rangle。\qquad(1.4.9)$$

这正是关于态矢量的薛定谔方程,它在坐标表象中的形式为(重新引入态指标 α)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\boldsymbol{x}|\alpha t\rangle=H(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{p}=-i\hbar\nabla)\langle\boldsymbol{x}|\alpha t\rangle。\qquad(1.4.10)$$

于是我们从某些最原始的观念"导出"了量子波动力学中的薛定谔方程。

当系统的哈密顿算符不显含时间,式(1.4.8)的满足初始条件的解为

$$\mathscr{U}(t,\ t_0)=e^{-iH(t-t_0)/\hbar}。\qquad(1.4.11)$$

这结果显然是一个由厄米算符 H 生成幺正算符的例子,幺正的时间演化算符是由厄米的哈密顿算符生成。这结果还表明,系统的哈密顿算符在量子力学中具有特殊地位,它不仅是一个力学量,而

且它还决定了系统状态随时间的演化。将式 (1.4.11) 代入式 (1.4.1),可得

$$|t\rangle = \mathscr{U}(t, t_0)|t_0\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}|t_0\rangle。 \qquad (1.4.12)$$

应当指出，若 H 显含时间，算符 U 不能表达为式(1.4.11)的形式。这时式(1.4.8)可采用迭代法求出其级数解(参见§1.4.6)。

应当注意，上述结果式(1.4.12)仅仅是一种形式解。为了得到最后结果,应当选择具体表象。显然现在取能量表象是方便的。能量表象的基矢表示为$|E_r\rangle$,其中 E 为 H 的本征值，r 为其它量子数。于是式(1.4.12)中在态矢量内加入态指标 α 后,可化为

$$\begin{aligned}\langle E, r|\alpha, t\rangle &= \langle E_r|e^{-iH(t-t_0)/\hbar}|\alpha, t_0\rangle \\ &= e^{-iE(t-t_0)/\hbar}\langle E_r|\alpha, t_0\rangle。\end{aligned} \qquad (1.4.13)$$

可见，在能量表象中态矢量随时间的演化具有最简单的形式。若取坐标表象,以一维系统为例,并取 $t_0=0$,于是有

$$\begin{aligned}\langle x|\alpha t\rangle &= \langle x|e^{-iHt/\hbar}|\alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_E \langle x|e^{-iHt/\hbar}|E\rangle\langle E|\alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_E e^{-iEt/\hbar}\langle x|E\rangle\langle E|\alpha, t_0\rangle。\end{aligned}$$

若记$\langle x|\alpha, t\rangle = \psi_\alpha(x, t)$, $\langle x|E\rangle = \varphi_E(x)$, $\langle E|\alpha, t_0=0\rangle = c_\alpha$,上式便可化为量子波动力学中常见的形式:

$$\psi_\alpha(x, t) = \sum_E c_\alpha e^{-iEt/\hbar}\varphi_E(x)。 \qquad (1.4.14)$$

上述讨论中可以看出,为了把握系统随时间的演化,需要知道系统哈密顿算符的本征矢集,或者说 H 表象。但在许多包含相互作用的实际问题中精确的 H 表象很难,甚至不可能找到。这时就需要发展许多方法，以便寻求近似的能量表象。量子力学中的微扰法、变分法,以及二次量子化理论中的一些方法都是为了这个目的而建立的。

最后我们来建立薛定谔绘景中力学量的平均值随时间演化的公式。薛定谔绘景中的力学量通常不随时间改变，所以其平均值随时间的变化完全起因于态矢量的改变。利用式(1.4.8),可得

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle t|A|t\rangle=i\hbar\frac{d}{at}\langle t_0|\mathscr{U}^+A\mathscr{U}|t_0\rangle$$
$$=i\hbar\left\langle t_0\left|\left(\frac{\partial\mathscr{U}^+}{\partial t}A\mathscr{U}+\mathscr{U}^+A\frac{\partial\mathscr{U}}{\partial t}\right)\right|t_0\right\rangle$$
$$=i\hbar\langle t_0|\mathscr{U}^+(-HA+AH)\mathscr{U}|t_0\rangle,$$

即

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle t|A|t\rangle=\langle t|[A,\ H]|t\rangle。\qquad(1.4.15)$$

这里我们应当指出，薛定谔绘景中力学量不随时间改变，这并不意味着力学量不能随时间改变。随时间改变的力学量通常出现在哈密顿算符的相互作用部分。不过在这种情况下，人们通常不采用薛定谔绘景，而采用相互作用绘景。

1.4.3 海森伯绘景

将量子系统随时间的演化归因于力学量，而态矢量不随时间变化，这种描述方式称为“海森伯绘景”。

通常令初始时刻 t_0 薛定谔绘景和海森伯绘景“重合”，于是有

$$|\rangle_H=|t_0\rangle_S,\ A_H(t_0)=A_S,\qquad(1.4.16)$$

其中对态矢量和力学量采用下指标“S”或“H”，以表明它们属于薛定谔绘景或海森伯绘景。由上式中关于态矢量的关系式立即可得

$$|\rangle_H=\mathscr{U}^{-1}(t,\ t_0)|t\rangle_S。\qquad(1.4.17)$$

可见，时间演化算符也是一个绘景变换算符，它使任意时刻的态矢量从海森伯绘景表示转化到薛定谔绘景表示。根据幺正变换理论，与态矢量的变换(1.4.17)相应，力学量算符将作如下相似变换：

$$A_H(t)=\mathscr{U}^{-1}(t,\ t_0)A_S\mathscr{U}(t,\ t_0)。\qquad(1.4.18)$$

这里我们应当指出，在讨论海森伯绘景和薛定谔绘景的相互转化时有两个特点非常有用。首先，系统的哈密顿算符在这两种绘景中完全相同。这一点由式(1.4.18)可以清楚地看出，因为算符 $\mathscr{U}$ 是由 H 生成的幺正算符，它当然与 H 对易。作为比较，对

于其它力学量，在薛定谔绘景中不随时间变化，所以在表象取定后其形式始终保持不变（如在坐标表象中，$\boldsymbol{p}=-i\hbar\nabla$）；但是在海森伯绘景中将随时间改变，在表象取定后力学量算符在不同时刻将具有不同的形式。另一个特点是关于对易关系。设薛定谔绘景中存在如下对易关系：

$$[A_S,\ B_S]=C_S, \tag{1.4.19}$$

则由于 $U^{-1}[A_S,\ B_S]U=[A_H(t),\ B_H(t)]$，$U^{-1}C_SU=C_H(t)$，于是立即可得

$$[A_H(t),\ B_H(t)]=C_H(t), \tag{1.4.20}$$

这涉及到海森伯绘景中同一时刻 t 不同力学量之间的对易关系，称为“同时性对易关系”。上述结果表明，海森伯绘景中力学量之间的同时性对易关系与薛定谔绘景中的形式相同。

在海森伯绘景中，人们将系统状态随时间的变化全部归因于力学量，因此力学量随时间演化的方程也就是系统的动力学方程。为了导出这个方程，可对式(1.4.18)取关于时间 t 的微商，于是有

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial A_H(t)}{\partial t}&=i\hbar\left(\frac{\partial \mathscr{U}^{-1}}{\partial t}A_S\mathscr{U}+\mathscr{U}^{-1}A_S\frac{\partial \mathscr{U}}{\partial t}\right)\\&=-H\mathscr{U}^{-1}A_S\mathscr{U}+\mathscr{U}^{-1}A_S\mathscr{U}H\\&=-HA_H(t)+A_H(t)H,\end{aligned}$$

即

$$i\hbar\frac{\partial A_H(t)}{\partial t}=[A_H(t),\ H], \tag{1.4.21}$$

这就是海森伯绘景中的动力学方程。与此相应，薛定谔绘景中的动力学方程是关于时间演化算符或态矢量的薛定谔方程。应当指出，式(1.4.21)与薛定谔绘景中的力学量平均值随时间变化的方程形式上类似，但实质上完全不同。一个是关于算符的方程，另一个是关于函数（平均值）的方程；而且它们属于不同的绘景。

[例 1] 试求海森伯绘景中一维自由粒子的坐标算符和动量算符。

解：这个问题可通过两种方法求解。

(1) 利用变换关系(1.4.18)。

对于一维自由粒子，其哈密顿算符为 $H=\frac{p^2}{2\mu}$，因此有（取 $t_0=0$）

$$q_H(t)=e^{iHt/\hbar}q_0e^{-iHt/\hbar}$$
$$=q_0+\frac{1}{1!}\left(\frac{it}{\hbar}\right)[H,\ q_0]+\frac{1}{2!}\left(\frac{it}{\hbar}\right)^2[H,\ [H,\ q_0]]+\cdots, \tag{1.4.22}$$

其中 $q_0=q_S=q_H(0)$。由于在薛定谔绘景中，

$$[H,\ q_0]=\frac{1}{2\mu}[p_0^2,\ q_0]=-\frac{i\hbar}{\mu}p_0,$$
$$[H,\ [H,\ q_0]]=0,$$

所以有

$$q_H(t)=q_0+\frac{t}{\mu}p_0。 \tag{1.4.23}$$

类似地可得

$$p_H(t)=p_0。 \tag{1.4.24}$$

(2) 利用求解动力学方程。

关于坐标和动量算符的动力学方程为

$$i\hbar\frac{\partial q_H(t)}{\partial t}=[q_H(t),\ H], \tag{1.4.25}$$

$$i\hbar\frac{\partial p_H(t)}{\partial t}=[p_H(t),\ H]。 \tag{1.4.26}$$

由于海森伯绘景中算符的同时性对易关系与薛定谔绘景中的对易关系形式相同，因此有

$$[q_H(t),\ p_H(t)]=i\hbar。 \tag{1.4.27}$$

由此可得，在海森伯绘景中有

$$[q_H(t),\ H]=\frac{1}{2\mu}[q_H(t),\ p_H(t)^2]=\frac{i\hbar}{\mu}p_H(t),$$
$$[p_H(t),\ H]=0。$$

于是有

$$\frac{\partial q_H(t)}{\partial t}=\frac{1}{\mu}p_H(t),$$

$$\frac{\partial p_H(t)}{\partial t}=0。$$

这两个算符方程满足初始条件：$q_H(0)=q_0$，$p_H(0)=p_0$ 的解即为式(1.4.23)和(1.4.24)。

[例 2] 试求海森伯绘景中一维线性谐振子的坐标算符和动量算符。

解：这个问题也可用两种方法求解。

(1) 利用变换关系(1.4.18)。

一维线性谐振子的哈密顿算符为 $H=\frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2q^2$，因此有

$$[H,\ q_0]=\frac{1}{2\mu}[p_0^2,\ q_0]=-\frac{i\hbar}{\mu}p_0,$$

$$[H,\ p_0]=\frac{1}{2}\mu\omega^2[q_0^2,\ p_0]=i\hbar\mu\omega^2q_0。$$

将上述结果代入式(1.4.22)，可得

$$q_H(t)=q_0+\frac{t}{\mu}p_0-\frac{t^2}{2!}\omega^2q_0-\frac{1}{3!}\left(\frac{t^3}{\mu}\right)\omega^2p_0+\cdots\cdots。$$

利用级数展开表式

$$\cos x=1-\frac{1}{2!}x^2+\frac{1}{4!}x^4-\cdots,$$

$$\sin x=x-\frac{1}{3!}x^3+\frac{1}{5!}x^5-\cdots,$$

可得一维线性谐振子的坐标算符在海森伯绘景中的形式为

$$q_H(t)=q_0\cos\omega t+\frac{p_0}{\mu\omega}\sin\omega t。\qquad(1.4.28)$$

类似地，动量算符为

$$p_H(t)=p_0\cos\omega t-\mu\omega q_0\sin\omega t。\qquad(1.4.29)$$

(2) 利用动力学方程

根据式(1.4.25)和(1.4.26)，并注意到对于线性谐振子，有

$$[q_H(t),\ H]=\frac{i\hbar}{\mu}p_H(t),$$

$$[p_H(t),\ H]=-i\hbar\mu\omega^2 q_H(t)。$$

所以关于坐标和动量算符的海森伯动力学方程可表示为

$$\frac{\partial q_H(t)}{\partial t}=\frac{1}{\mu}p_H(t),\ \frac{\partial p_H(t)}{\partial t}=-\mu\omega^2 q_H(t)。 \tag{1.4.30}$$

此结果完全类似于经典哈密顿方程，其解可表示为

$$q_H(t)=c_1\sin\omega t+c_2\cos\omega t,$$
$$p_H(t)=\mu\omega c_1\cos\omega t-\mu\omega c_2\sin\omega t,$$

其中待定常算符 c_1 和 c_2 可由初始条件：$q_H(0)=q_0=q_S$ 和 $p_H(0)=p_0=p_S$ 确定，为 $c_1=p_0/\mu\omega$，$c_2=q_0$。于是同样得到式(1.4.28)和(1.4.29)的结果。

从上述例题可以看出，海森伯绘景中力学量的形式非常类似于经典力学。但是应该注意，现在的所有结果都是算符形式。其次，量子力学和经典力学的根本差别还体现在下面计算的坐标算符的"均方差"值。任何物理量 A 的均方差为

$$(\Delta A)^2=\langle(A-\langle A\rangle)^2\rangle=\langle A^2\rangle-\langle A\rangle^2。 \tag{1.4.31}$$

因此，例如自由粒子坐标 $q_H(t)$ 的均方差为

$$\begin{aligned}(\Delta q_H(t))^2&=\langle q_H^2(t)\rangle-\langle q_H(t)\rangle^2\\&=\left\langle\left(q_0+\frac{t}{\mu}p_0\right)^2\right\rangle-\left(\left\langle\left(q_0+\frac{t}{\mu}p_0\right)\right\rangle\right)^2\\&=(\Delta q_0)^2+\frac{1}{\mu}[\langle(q_0p_0+p_0q_0)\rangle\\&\quad-2\langle p_0\rangle\langle q_0\rangle]t+\frac{1}{\mu^2}(\Delta p_0)^2t^2。\end{aligned}$$

可见，若初始时刻粒子具有确定的坐标值，$\Delta q_0=0$，则随着时间的进程，自由粒子位置的均方差将无限增大！这一结果对于经典力学是很难理解的。

从上面例题的结果中要指出的另一点是关于坐标和动量算符的对易关系。对于一维自由粒子，有

$$\begin{cases}[q_H(t),\ q_H(t')]=\dfrac{(t'-t)}{\mu}[q_0,\ p_0]=\dfrac{(t'-t)}{\mu}i\hbar,\\ [p_H(t),\ p_H(t')]=[p_0,\ p_0]=0,\\ [q_H(t),\ p_H(t')]=[q_0,\ p_0]=i\hbar,\end{cases}\tag{1.4.32}$$

对于一维线性谐振子，有

$$\begin{cases}[q_H(t),\ q_H(t')]=\dfrac{i\hbar}{\mu\omega}\sin\omega(t'-t),\\ [p_H(t),\ p_H(t')]=i\hbar\,\mu\omega\sin\omega(t'-t),\\ [q_H(t),\ p_H(t')]=i\hbar\cos\omega(t'-t)。\end{cases}\tag{1.4.33}$$

可见，在海森伯绘景中一般非同时性正则对易关系与时间差有关，比较复杂，但同时性对易关系仍保持薛定谔绘景中的形式。我们在第三章建立二次量子化理论时将要特别注意这一点。

最后我们要指出，海森伯绘景中自由粒子的正则坐标，谐振子的正则坐标和正则动量均随时间变化，但是由它们组合成的哈密顿算符却与时间无关，且与薛定谔绘景中的哈密顿算符相同。这正是我们所期待的。

1.4.4 海森伯绘景中的基矢

海森伯绘景中态矢量不随时间变化，现在我们要问，对于基矢或力学量的本征矢，情况怎样？

为此，我们写出薛定谔绘景中关于算符 A 的本征值方程：

$$A_S|a_i\rangle_S=a_i|a_i\rangle_S。\tag{1.4.34}$$

因为现在力学量不随时间变化，所以其本征矢，即 A 表象的基矢 $|a_i\rangle_S$ 也不依赖于时间变化。可见在薛定谔绘景中，态矢量随时间变化，但基矢不随时间变化。

让我们再来考察海森伯绘景中的情况，设 $t=0$ 时刻这两种绘景重合。将时间演化算符的厄米共轭 $\mathscr{U}^+(t,\ 0)$ 左乘式(1.4.34)，再利用它的幺正性，可得

$$\mathscr{U}^+A_S\mathscr{U}\mathscr{U}^+|a_i\rangle_S=a_i\mathscr{U}^+|a_i\rangle_S,$$

上式可以看作算符 $A_H(t)=\mathscr{U}^+(t,\ 0)A_S\mathscr{U}(t,\ 0)$ 的本征值方程，即

$$A_H(t)\,|a_i,\ t\rangle_H = a_i\,|a_i,\ t\rangle_H, \tag{1.4.35}$$

其中

$$|a_i,\ t\rangle_H = \mathscr{U}^+(t,\ 0)\,|a_i\rangle_S \tag{1.4.36}$$

是算符 A_H 的属于本征值 a_i 的本征矢，也就是海森伯绘景中 A 表象的基矢。可见在海森伯绘景中，态矢量不随时间变化，但基矢随时间变化。而且比较式(1.4.1)和式(1.4.36)可以看出，在薛定谔绘景中态矢量按 $\mathscr{U}$ 改变，基矢不变；在海森伯绘景中态矢量不变，基矢按逆变换 $\mathscr{U}^+=\mathscr{U}^{-1}$ 改变(注意，$|a_i\rangle_S = |a_i,\ 0\rangle_H$)。

讨论量子状态随时间的演化可以采用不同绘景，但由此计算的实验上可测量(如力学量的平均值、本征值，以及发现系统处于某个本征态的概率等)应与绘景选取无关。式(1.4.34)和式(1.4.35)已经表明，力学量的本征值谱与绘景选取无关。现在来考察态矢量按本征矢集展开的系数，即量子系统处于某个特殊态(本征态)的概率幅。设 $t=0$ 时刻的态矢量右矢为 $|\alpha,\ t_0=0\rangle$。在薛定谔绘景中，t 时刻的态矢量为 $\mathscr{U}|\alpha,\ t_0=0\rangle$，此时该系统处于力学量 A 的第 i 个本征态 $|a_i\rangle$ 的概率幅为

$$c_i = \langle a_i|\,(\mathscr{U}|\alpha,\ t_0=0\rangle)。\ (薛定谔绘景) \tag{1.4.37}$$

在海森伯绘景中，t 时刻的态矢量仍然为 $|\alpha,\ t_0=0\rangle$，但本征矢应为 $\mathscr{U}^+|a_i\rangle$，因此有

$$c_i = (\langle a_i|\,\mathscr{U})\,|\alpha,\ t_0=0\rangle。\ (海森伯绘景) \tag{1.4.38}$$

可见，计算结果与绘景选取无关。

1.4.5 相互作用绘景

当存在相互作用时，系统能量的本征值问题除谐振子和氢原子等少数几个例子外，往往不能精确求解。不过在实际问题中，系统的哈密顿算符常常可分解为两部份：

$$H_S = H_{0S} + V_S, \tag{1.4.39}$$

其中 H_{0S} 与时间无关，且其本征值问题可严格求解。因此我们现在的问题是：已知 H_{0S} 表象，需要求出态矢量和力学量随时间的演化。

这类问题采用"相互作用绘景"最方便。相互作用绘景是介于薛定谔绘景和海森伯绘景之间的一类中间绘景，在这种绘景中态矢量和力学量均随时间改变。相互作用绘景可通过要求其态矢量 $|t\rangle_I$ 与薛定谔绘景中的态矢量 $|t\rangle_S$ 存在如下幺正变换关系来定义：

$$|t\rangle_I=\mathscr{U}_0^{-1}(t,\ t_0)\,|t\rangle_S, \tag{1.4.40}$$

其中

$$\mathscr{U}_0(t,\ t_0)=e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}。 \tag{1.4.41}$$

应当注意，$\mathscr{U}_0$ 并非实际系统的时间演化算符，而是为了求解问题而引进的非微扰系统（H_{0S} 控制的系统）的时间演化算符。此外，在上述定义中已假定 $t=t_0$ 时刻相互作用绘景与薛定谔绘景重合，即

$$|t_0\rangle_I=|t_0\rangle_S。 \tag{1.4.42}$$

由定义(1.4.40)以及薛定谔绘景中态矢量随时间演化的关系立即可得

$$|t\rangle_I=\mathscr{U}_I(t,\ t_0)\,|t_0\rangle_I, \tag{1.4.43}$$

其中

$$\mathscr{U}_I(t,\ t_0)=\mathscr{U}_0^{-1}(t,\ t_0)\mathscr{U}(t,\ t_0), \tag{1.4.44}$$

$\mathscr{U}(t,\ t_0)$ 是薛定谔绘景中的时间演化算符：$|t\rangle_S=\mathscr{U}(t,\ t_0)\,|t_0\rangle_S$。

式(1.4.43)可推广到更一般情况：

$$|t\rangle_I=\mathscr{U}_I(t,\ t')\,|t'\rangle_I, \tag{1.4.45}$$

并不难证明这时式(1.4.44)应更一般地改写为

$$\begin{aligned}\mathscr{U}_I(t,\ t')&=\mathscr{U}_0^{-1}(t,\ t_0)\mathscr{U}(t,\ t')\mathscr{U}_0(t',\ t_0)\\&=\mathscr{U}_0(t_0,\ t)\mathscr{U}(t,\ t')\mathscr{U}_0(t',\ t_0)。\end{aligned} \tag{1.4.46}$$

由上式还可以证明如下性质：

$$\mathscr{U}_I(t,\ t)=1, \tag{1.4.47}$$

$$\mathscr{U}_I(t,\ t')=\mathscr{U}_I(t,\ t'')\mathscr{U}_I(t'',\ t'), \tag{1.4.48}$$

$$\mathscr{U}_I^{+}(t,\ t')=\mathscr{U}_I^{-1}(t,\ t')=\mathscr{U}_I(t',\ t)。 \tag{1.4.49}$$

这里应当指出，$\mathscr{U}_I$ 是相互作用绘景中确定态矢量随时间演化的算

符。由于现在力学量也要随时间变化，所以 $\mathscr{U}_I$ 并不包含状态随时间演化的全部信息。这一点与薛定谔绘景中的时间演化算符 $\mathscr{U}$ 的意义不同。$\mathscr{U}$ 决定于总哈密顿算符，它包含了状态随时间演化的全部信息。

如果我们进一步假定，在 t_0 时刻薛定谔绘景、相互作用绘景和海森伯绘景重合，即

$$|t_0\rangle_S = |t_0\rangle_I = |\rangle_H, \tag{1.4.50}$$

则由式(1.4.43)可知

$$|t\rangle_I = \mathscr{U}_I(t, t_0)|\rangle_H。 \tag{1.4.51}$$

这表明，$\mathscr{U}_I(t, t_0)$ 也就是相互作用绘景和海森伯绘景之间的幺正变换算符。

现在来建立相互作用绘景中的动力学方程。相互作用绘景中的动力学方程应当包括两部份，即关于力学量的运动方程和关于态矢量的运动方程。

由式(1.4.40)可得到薛定谔绘景中的力学量 A_S 和相互作用绘景中的力学量 $A_I(t)$ 之间的相似变换关系：

$$A_I(t) = \mathscr{U}_0^{-1}(t, t_0) A_S \mathscr{U}_0(t, t_0)。 \tag{1.4.52}$$

由于 $\mathscr{U}_0$ 与 H_0 对易，所以由上式可知 $H_{0I} = H_{0S}$。我们曾经在 §1.4.3 中指出，$H_H = H_S$。但是一般来说，$H_{0H} \neq H_{0S}$，$H_I \neq H_S$，且 V_S，V_H 和 V_I 并不相等。

相互作用绘景中力学量随时间演化的方程可由式(1.4.52)得到：

$$i\hbar \frac{\partial A_I(t)}{\partial t} = [A_I(t), H_0]。 \tag{1.4.53}$$

态矢量的演化方程可由定义(1.4.40)得到。因为

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|t\rangle_I &= i\hbar\left(\frac{\partial \mathscr{U}_0^{-1}}{\partial t}\right)|t\rangle_S + \mathscr{U}_0^{-1} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|t\rangle_S \\ &= -\mathscr{U}_0^{-1} H_0 |t\rangle_S + \mathscr{U}_0^{-1}(H_0 + V_S)|t\rangle_S \\ &= \mathscr{U}_0^{-1} V_S |t\rangle_S, \end{aligned}$$

所以有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle_I=V_I|t\rangle_I, \tag{1.4.54}$$

其中

$$V_I(t)=\mathscr{U}_0^{-1}(t,\ t_0)V_S(t)\mathscr{U}_0(t\ \ t_0) \tag{1.4.55}$$

是相互作用绘景中的相互作用哈密顿算符。这里我们有意记为 $V_S(t)$，这表明薛定谔方程中这类算符一般地可能与时间有关。

将式(1.4.45)代入式(1.4.54)，可得到算符 $\mathscr{U}_I(t,\ t')$ 的运动方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathscr{U}_I(t,\ t')=V_I(t)\mathscr{U}_I(t,\ t') \tag{1.4.56}$$

[例 3] 电荷为 e，质量为 m，频率为 ω 的一维线性谐振子，处在均匀外电场 ε 中，在相互作用绘景中写出其坐标和动量算符，以及确定其态矢量随时间演化的算符 $\mathscr{U}_I$。

解：系统的哈密顿算符可表示为

$$\begin{aligned}H_S&=H_0+V_S,\\ H_0&=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2,\\ V_S&=-e\varepsilon q_。\end{aligned} \tag{1.4.57}$$

在相互作用绘景中 p 和 q 随时间的变化与非微扰系统在海森伯绘景中的结果形式相同，因此有（取 $t_0=0$）

$$\begin{aligned}q_I(t)&=q\cos\omega t+\frac{p}{m\omega}\sin\omega t,\\ p_I(t)&=-m\omega q\sin\omega t+p\cos\omega t_。\end{aligned} \tag{1.4.58}$$

态矢量随时间的演化算符满足如下方程：

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\mathscr{U}_I}{\partial t}&=-e\varepsilon q_I\mathscr{U}_I\\ &=-e\varepsilon\left(q\cos\omega t+\frac{p}{m\omega}\sin\omega t\right)\mathscr{U}_I。\end{aligned}$$

其解为

$$\mathscr{U}_I(t,\ 0)=\exp\left[\frac{ie\varepsilon}{\hbar}\left(\frac{q}{\omega}\sin\omega t-\frac{p}{m\omega^2}\cos\omega t+\frac{p}{m\omega^2}\right)\right]。 \tag{1.4.59}$$

1.4.6 戴逊(Dyson)展开

相互作用绘景中确定态矢量随时间演化的算符 $\mathscr{U}_I$ 满足的方程是

$$i\hbar\frac{\partial\mathscr{U}_I(t,\ t')}{\partial t}=V_I(t)\mathscr{U}_I(t,\ t')。\qquad(1.4.60)$$

上述关于算符的方程与关于态矢量的方程(1.4.54)实际上是等价的，只要将初始时刻的态矢量 $|t'\rangle_I$ 右乘式(1.4.60)等号两边，便立即得到式(1.4.54)。

相互作用绘景中状态随时间的演化包括力学量和态矢量两个方面。力学量随时间的改变仅取决于 $H_0=H_{0S}=H_{0I}$，而我们认为 H_0 的本征值问题可严格求解，所以现在重要的是考察态矢量随时间演化。为此需求解式(1.4.54)，或等价地求解式(1.4.60)。但是由于 $V_I(t)$ 一般地可能与时间有关，所以式(1.4.60)的解通常不能表示为指数形式。

为了求解微分方程(1.4.60)，可先将它化为积分方程形式：

$$\mathscr{U}_I(t,\ t')-\mathscr{U}_I(t',\ t')=\frac{1}{i\hbar}\int_{t'}^{t}dt_1V_I(t_1)\mathscr{U}_I(t_1,\ t')。\qquad(1.4.61)$$

如果 $\mathscr{U}_I$ 是一普通函数，上式称为 Votterra 方程，在很宽的条件下可采用迭代法求解，且保证是收敛的。现在是算符方程，不能保证具有同样的性质。但是我们仍然采用迭代法求解。

设 V_I 是一小量，在零级近似下式(1.4.61)的解为

$$\mathscr{U}_I^{(0)}(t,\ t')=\mathscr{U}_I(t',\ t')=1;$$

在一级近似下，其解为

$$\mathscr{U}_I^{(1)}(t,\ t')=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{t'}^{t}dt_1V_I(t_1)\mathscr{U}_I^{(0)}(t,\ t')$$

$$=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{t'}^{t}dt_1V_I(t_1);$$

在二级近似下，其解为

$$\mathscr{U}_I^{(2)}(t,\ t')=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{t'}^{t}dt_1V_I(t_1)\mathscr{U}_I^{(1)}(t,\ t')$$

$$=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{t'}^{t}dt_1V_I(t_1)$$
$$+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t_1}dt_2V_I(t_1)V_I(t_2)+$$

等等，依此类推。所以式(1.4.60)的解可表示为

$$\mathscr{U}_I(t,\ t')=1+\sum_n\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t_1}dt_2$$
$$\cdots\int_{t'}^{t_{n-1}}dt_nV_I(t_1)V_I(t_2)\cdots V_I(t_n)。\quad(1.4.62)$$

这个级数常称为戴逊展开，它广泛应用于量子力学；若推广到四维形式，可应用于量子场论。

利用"编时算符"$\mathscr{P}$可将上述展开式写成更为紧致的形式。编时算符对几个算符乘积的作用，是使这些算符按时间顺序重新排列，时间较早的算符排在右边，较迟的算符排在左边。例如，若$t_3>t_1>t_2$，则有

$$\mathscr{P}[V(t_1)V(t_2)V(t_3)]=V(t_3)V(t_1)V(t_2)。\quad(1.4.63)$$

根据上述定义，编时算符作用于两个算符的乘积一般可表示为

$$\mathscr{P}[V(t_1)V(t_2)]=\theta(t_1-t_2)V(t_1)V(t_2)+\theta(t_2-t_1)V(t_2)V(t_1),\quad(1.4.64)$$

其中$\theta(t)$为阶跃函数。利用这个性质，可得

$$\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t}dt_2\mathscr{P}[V(t_1)V(t_2)]$$
$$=\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t}dt_2[\theta(t-t_2)V(t_1)V(t_2)+\theta(t_2-t_1)V(t_2)V(t_1)]$$
$$=\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t_1}dt_2V(t_1)V(t_2)+\int_{t'}^{t}dt_2\int_{t'}^{t_2}dt_1V(t_2)V(t_1)$$
$$=2!\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t_1}dt_2V(t_1)V(t_2)。$$

类似地可得

$$\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t}dt_2\int_{t'}^{t}dt_3\mathscr{P}[V(t_1)V(t_2)V(t_3)]$$
$$=3!\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t_1}dt_2\int_{t'}^{t_2}dt_3V(t_1)V(t_2)V(t_3)。$$

利用上述结果，戴逊展开于是可表示为

$$\mathscr{U}_I(t,\ t')=1+\sum_n \frac{1}{n!}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t}dt_2\cdots\int_{t'}^{t}dt_n$$
$$\mathscr{P}[V_I(t_1)V_I(t_2)\cdots V_I(t_n)]。 \qquad (1.4.65)$$

上式显然可表示为如下紧致形式：

$$\mathscr{U}_I(t,\ t')=\mathscr{P}\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_{t'}^{t}dt_1V_I(t_1)\right]。 \qquad (1.4.66)$$

1.4.7 跃迁幅和跃迁概率

微观系统受到扰动或发生相互作用时，其状态将发生跃变。人们感兴趣的是计算该系统从一种状态跃变到另一种状态的“跃迁概率”或“跃迁幅”。许多实验上的可测量，如粒子或状态的寿命，谱线强度，散射截面等都与跃迁概率有关。

在薛定谔绘景中设该系统初始时刻处于力学量 A 的一个本征态，其右矢为 $|a_i\rangle$，到 t 时刻它演化为 $|\psi(t)\rangle=\mathscr{U}(t,\ t')|a_i\rangle$。此时在该态中测量力学量 A 时一般不再具有确定的值。现在采用一组态矢量完全集，例如力学量 B 的本征矢集 $\{|b_f\rangle\}$，将该态作展开

$$|\psi(t)\rangle\equiv\mathscr{U}(t,\ t')|a_i\rangle=\sum_f c_{fi}(t)|b_f\rangle, \qquad (1.4.67)$$

其展开系数

$$c_{fi}(t)\equiv\langle b_f|\mathscr{U}(t,\ t')|a_i\rangle \qquad (1.4.68)$$

就是该系统由于存在相互作用而从初态 $|a_i\rangle$ 跃迁到末态 $|b_f\rangle$ 的跃迁幅。跃迁概率就是

$$\omega_{fi}=|c_{fi}(t)|^2=|\langle b_f|\mathscr{U}(t,\ t')|a_i\rangle|^2。 \qquad (1.4.69)$$

最简单也是最常见的一种情况是，初态和末态都取 H_0 的本征态，它们的右矢分别记为 $|i\rangle$ 和 $|f\rangle$，相应的本征值分别记为 E_i 和 E_f。于是，薛定谔绘景中时间演化算符在 H_0 表象中的（非对角）矩阵元的模的平方就是该系统由于相互作用而从初态 $|i\rangle$ 到末态 $|f\rangle$ 的跃迁概率：

$$\omega_{fi}=|c_{fi}(t)|^2=|\langle f|\mathscr{U}(t,\ t')|i\rangle|^2。 \qquad (1.4.70)$$

我们再来考察相互作用绘景中描写态矢量随时间演化的算符 $\mathscr{U}_I(t, t')$ 的矩阵元。注意到由式(1.4.46)可得

$$\begin{aligned}\langle f|\mathscr{U}_I(t, t')|i\rangle &= \langle f|e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\mathscr{U}(t, t')e^{-iH_0(t'-t_0)/\hbar}|i\rangle \\ &= e^{iE_f(t-t_0)/\hbar}\cdot e^{-iE_i(t'-t_0)/\hbar}\langle f|\mathscr{U}(t, t')|i\rangle,\end{aligned} \tag{1.4.71}$$

所以，$\mathscr{U}$ 和 $\mathscr{U}_I$ 在 H_0 表象中的矩阵元仅仅相差一位相因子，它们的模的平方相等，即

$$\omega_{fi} = |\langle f|\mathscr{U}(t, t')|i\rangle|^2 = |\langle f|\mathscr{U}_I(t, t')|i\rangle|^2。 \tag{1.4.72}$$

最后我们来考察海森伯绘景中跃迁概率的表示。海森伯绘景中态矢量不随时间改变，但作为表象基矢的本征矢将随时间而改变(因为力学量随时间改变)。利用海森伯绘景和薛定谔绘景中表象基矢的变换关系式(1.4.36)

$$\begin{aligned}|i, t\rangle_H &= \mathscr{U}^{-1}(t, t_0)|i\rangle, \\ |f, t\rangle_H &= \mathscr{U}^{-1}(t, t_0)|f\rangle,\end{aligned} \tag{1.4.73}$$

可得

$$\begin{aligned}\langle f|\mathscr{U}(t, t')|i\rangle &= \langle f|\mathscr{U}(t, t_0)\mathscr{U}^{-1}(t', t_0)|i\rangle \\ &= {}_H\langle f, t|i, t'\rangle_H\end{aligned} \tag{1.4.74}$$

于是最后我们有

$$\begin{aligned}\omega_{fi} &= |{}_H\langle f, t|i, t'\rangle_H|^2 = |\langle f|\mathscr{U}(t, t')|i\rangle|^2 \\ &= |\langle f|\mathscr{U}_I(t, t')|i\rangle|^2。\end{aligned} \tag{1.4.75}$$

§1.5 对称性和守恒定律

对称性是自然界许多现象的一种基本特性，这种特性使物理现象形成某些特有的规律。例如空间均匀性使动量守恒；时间均匀性使能量守恒；空间各向同性使角动量守恒。

守恒定律与时空对称性有关的这个见解最早来自经典力学[Jacobi(1842); Shutz(1897)]。以后这个见解又被推广到电动力

学，量子力学和量子场论。守恒定律与对称性密切有关的观点已经成为现代物理学的基本出发点之一。人们常常通过对称性及其相应的守恒定律和守恒量的研究来认识和研究物理现象特别是微观物理现象的主要特征。

本章仅仅讨论与时空有关的几何对称性及其相应的守恒定律。实际上现代物理学已经发现，除了与时空有关的对称性外还存在许多"内禀"对称性，如全同粒子交换对称性；同位旋对称性；强相互作用现象中"色空间"的 SU(3) 对称性等。对于这一类对称性及其相应的守恒定律的研究，使人类对微观领域的物理现象得到了更为深刻的认识。

1.5.1 空间均匀性与动量守恒

本节的讨论都是在薛定谔绘景中进行，并常常采用坐标表象。

一维空间平移变换的作用可定义为使整个物理系统沿 x-轴方向移动距离 ρ，即

$$\psi(x)\to\psi'(x)\equiv D_x(\rho)\psi(x)=\psi(x-\rho)。\qquad(1.5.1)$$

这表明，平移态的波函数在 x 点处的值就是平移前系统状态波函数在 $x-\rho$ 点处的值。使物理系统沿 x-轴正方向平移距离 ρ，相当于坐标系沿 x-轴负方向平移距离 ρ。这种定义可称为"主动观点"。另一种按照"被动观点"的定义是，平移变换的作用使坐标系沿 x-轴正方向移动距离 ρ；这相当于使物理系统沿 x-轴负方向移动同样距离。我们的讨论均采用主动观点。

为了确定平移变换算符 $D(\rho)$ 的形式，将 $\psi(x-\rho)$ 作台劳展开：

$$\psi(x-\rho)=\psi(x)-\rho\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)+\frac{1}{2!}\rho^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)+\cdots$$

$$=e^{-\rho\frac{\partial}{\partial x}}\psi(x)。\qquad(1.5.2)$$

若令 $p_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$，可得

$$D_x(\rho)=e^{-i\rho p_x/\hbar}。\qquad(1.5.3)$$

于是我们发现，空间平移变换算符与动量算符密切有关。平移变换的生成元就是动量算符；它是由厄米算符 p_x 生成的幺正算符。

对于无穷小平移变换，显然有

$$D_x(\delta\rho)=1-i\delta\rho p_x/\hbar。\tag{1.5.4}$$

上述讨论可推广到三维情况：

$$D(\boldsymbol{\rho})=e^{-i\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{p}/\hbar}。\tag{1.5.5}$$

算符 D 还满足如下性质：

$$D(\boldsymbol{a})D(\boldsymbol{b})=D(\boldsymbol{b})D(\boldsymbol{a})=D(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})。\tag{1.5.6}$$

这个性质显然与 p_x, p_y, p_z 相互对易有关。

与波函数的幺正变换

$$\psi'(\boldsymbol{x})=D(\boldsymbol{\rho})\psi(\boldsymbol{x})\tag{1.5.7}$$

相应，力学量 O 将作如下相似变换：

$$O'=D(\boldsymbol{\rho})OD^{-1}(\boldsymbol{\rho})。\tag{1.5.8}$$

例如对于坐标算符、动量算符和哈密顿算符，可证明：

$$\boldsymbol{x}\to\quad D(\boldsymbol{\rho})\boldsymbol{x}D^{-1}(\boldsymbol{\rho})=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\rho},\tag{1.5.9}$$

$$\boldsymbol{p}\to\quad D(\boldsymbol{\rho})\boldsymbol{p}D^{-1}(\boldsymbol{\rho})=\boldsymbol{p},\tag{1.5.10}$$

$$H\to\quad D(\boldsymbol{\rho})H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})D^{-1}(\boldsymbol{\rho})=H(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{p})。\tag{1.5.11}$$

由式(1.5.11)可以看出，在平移变换下系统的哈密顿算符通常会发生改变，因而系统的动力学规律也将反映出这种改变。

现在讨论一类情况，例如一个原子、分子或更复杂的孤立体系，其哈密顿量并不依赖于它的空间绝对位置，而仅依赖于其内部坐标，这时在空间平移变换下系统的哈密顿算符保持不变，即

$$DHD^{-1}=H,\tag{1.5.12}$$

或

$$[D,\ H]=0。\tag{1.5.13}$$

如果将动量算符生成 D 的具体形式(1.5.5)代入上式，可得

$$[\boldsymbol{p},\ H]=0。\tag{1.5.14}$$

我们知道，任何不显含时间的力学量如果与系统的哈密顿算符对

易，则该力学量是守恒量，因为该力学量在该系统状态中的平均值不随时间改变。所以式(1.5.14)就是动量守恒定律在量子力学中的一种表述。由于式(1.5.5)，我们有相互关联的式(1.5.12)和(1.5.14)。如果式(1.5.12)成立，我们就说该系统在空间平移变换下保持不变，该系统的空间是均匀的。所以一个系统动量保持恒定是该系统具有空间平移对称性或空间平移不变性的结果。这个见解也是显然的，因为一个系统在平移变换下哈密顿量不变意味着不受外力作用，在这种情况下动量当然是一个守恒量。一个自由电子具有空间平移对称性，而一个氢原子中的电子不具有这种对称性，所以对于后者来说动量并不是一个守恒量。

对称性会引起能级简并。设 $H|E\rangle=E|E\rangle$，即$|E\rangle$是能量的本征态。如果该系统具有空间平移不变性，则 $D(\rho)|E\rangle$也是属于能量 E 的一个本征态。如果$|E\rangle$和 $D(\rho)|E\rangle$互相线性独立，则该能量本征值就是简并的。

1.5.2 时间均匀性和能量守恒

时间平移变换算符 $U(\tau)$定义如下：

$$\psi(t)\to\psi'(t)\equiv U(\tau)\psi(t)=\psi(t-\tau)。\qquad(1.5.15)$$

将台劳展开

$$\psi(t-\tau)=\psi(t)-\tau\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)+\frac{1}{2!}\tau^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(t)+\cdots$$

$$=e^{-\tau\frac{\partial}{\partial t}}\psi(t)。$$

代入式(1.5.15)，有

$$U(\tau)=e^{i\tau\left(i\frac{\partial}{\partial t}\right)}。\qquad(1.5.16)$$

因为我们现在是在薛定谔绘景中讨论，波函数满足薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=H\psi(t),\qquad(1.5.17)$$

所以当 H 与时间无关时，$\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}H\psi(t)$，$\frac{\partial^2\psi(t)}{\partial t^2}=\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\cdot H^2\psi(t)$，…。这样式(1.5.16)中的指数算符就可化为

$$U(\tau)=e^{i\tau H/\hbar}, \tag{1.5.18}$$

这就是我们要寻求的时间平移算符的形式，它是由厄米的哈密顿算符所生成的幺正算符。当系统的哈密顿算符不显含时间时，显然有

$$U(\tau)HU(\tau)=H, \text{或} [U(\tau), H]=0, \tag{1.5.19}$$

此时能量是一个守恒物理量，能量守恒定律成立。当式(1.5.19)成立时，我们说该系统具有时间平移不变性。所以时间均匀性或系统的时间平移不变性与能量守恒定律密切有关，后者可以看作前者的必然结果。

有一点应当指出，当系统的哈密顿算符与时间有关时时间平移算符只能一般地由式(1.5.16)表示，此时它与 H 一般不对易，即

$$[U(\tau), H]\neq 0,\ U(\tau)=e^{-\tau\frac{\partial}{\partial t}}。 \tag{1.5.20}$$

此时系统的 H 不再是守恒量。在保守力场作用下，系统的哈密顿算符包括动能和势能两部份。H 与时间有关意味着势能 $V(t)$ 与时间有关，此时系统与外界存在能量交换。

另一点要指出的是，由式(1.5.18)可知，时间平移变换和时间演化算符 $\mathscr{U}(t)$ 之间存在如下关系：

$$U(\tau)=e^{i\tau H/\hbar}=\mathscr{U}^{+}(\tau)=\mathscr{U}(-\tau)。 \tag{1.5.21}$$

这表明，对于状态 $\psi(t)$ 来说，其时间平移态 $U(\tau)\psi(t)$ 也可以通过它沿时间反方向演化而得到：$\mathscr{U}(-\tau)\psi(t)$。

1.5.3 空间各向同性和角动量守恒

现在考察空间转动算符的形式，以便导出它的生成元。

先讨论一个物理系统绕 z-轴转过角度 θ 的情况。在这种情况下系统的波函数将作如下变换：

$$\psi(\varphi)\to\psi'(\varphi)\equiv R_z(\theta)\psi(\varphi)=\psi(\varphi-\theta)。 \tag{1.5.22}$$

利用台劳展开

$$\begin{aligned}\psi(\varphi-\theta)&=\psi(\varphi)-\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(\varphi)+\frac{1}{2!}\theta^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi(\varphi)+\cdots\\&=e^{-\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}}\psi(\varphi),\end{aligned} \tag{1.5.23}$$

由定义(1.5.22)可知，绕 z-轴方向的转动算符可表示为

$$R_z(\theta)=e^{-i\theta L_z/\hbar}, \tag{1.5.24}$$

其中 $L_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ 是轨道角动量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$ 的第三分量在(球)坐标表象中的形式。上述结果表明，沿 z-轴方向的转动算符的生成元就是角动量算符沿 z-轴方向的分量。

现在讨论沿任意方向的转动，并且为简单起见先考察无穷小转动。首先不难证明，任一矢量 $\boldsymbol{a}$ 绕沿着 $\boldsymbol{n}$ 方向的轴转过无穷小角度 $\delta\theta$ 时，该矢量将作如下变换：

$$\boldsymbol{a}\to\boldsymbol{a}'=\boldsymbol{a}+\delta\boldsymbol{a}=\boldsymbol{a}+\delta\theta\times\boldsymbol{a}, \tag{1.5.25}$$

其中 $\delta\boldsymbol{\theta}\equiv\delta\theta\,\boldsymbol{n}$。

对于一个物理系统，如果其波函数是标量波函数，则在这种空间转动下将作如下变换：

$$\psi(\boldsymbol{x})\to\psi'(\boldsymbol{x})\equiv R(\delta\boldsymbol{\theta})\psi(\boldsymbol{x})=\psi(\boldsymbol{x}-\delta\boldsymbol{x})。 \tag{1.5.26}$$

利用台劳展开

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x}-\delta\boldsymbol{x})&=\psi(\boldsymbol{x})-\delta\boldsymbol{x}\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{x})\\&=\left(1-\frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}\right)\psi(\boldsymbol{x}),\end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{p}=-i\hbar\nabla$ 是动量算符；再考虑到式(1.5.25)，$\delta\boldsymbol{x}=\delta\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{x}$，有

$$\delta\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}=(\delta\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{p}=\delta\boldsymbol{\theta}\cdot(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p})=\delta\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{L},$$

这里 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$ 是轨道角动量算符，于是沿任意方向 $\boldsymbol{n}$ 的轴作无穷小转动的操作可用如下算符表示：

$$R(\delta\boldsymbol{\theta})=1-i\delta\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar。 \tag{1.5.27}$$

沿固定轴的有限角度转动可通过一系列相继的无穷小转动实现，因此有限角度转动变换可表示为

$$\begin{aligned}R(\boldsymbol{\theta})&=\lim_{N\to\infty}\left[1-i\left(\frac{\boldsymbol{\theta}}{N}\right)\left(\frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}}{\hbar}\right)\right]^N=e^{-i\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar}\\&=1-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{L})-\frac{1}{2\hbar^2}(\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{L})^2+\cdots。\end{aligned} \tag{1.5.28}$$

可见转动算符的生成元就是角动量算符。如果系统在空间转动变换下其哈密顿算符保持不变，即

$$R(\theta)HR^{-1}(\theta)=H, \tag{1.5.29}$$

或

$$[R(\theta),\ H]=0, \tag{1.5.30}$$

则有

$$[\boldsymbol{L},\ H]=0。 \tag{1.5.31}$$

于是，如果系统具有空间转动不变性，角动量就是一个守恒量；角动量守恒定律成立。系统具有空间转动不变性也可以说该系统的空间是各向同性的。所以角动量守恒定律是空间各向同性的必然结果。

1.5.4 矢量粒子的自旋

现在讨论矢量波函数在作无穷小转动时的变换矩阵以及与此相对应的生成元。矢量波函数有三个分量，自旋为1的粒子需要用矢量波函数描写其状态。

考虑到一个矢量在空间中转过无穷小角度 $\delta\theta$ 时要作如下变换

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}'=R(\delta\theta)\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}+\delta\theta\times\boldsymbol{A} \tag{1.5.32}$$

因此矢量波函数将作如下变换

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})\to\boldsymbol{\psi}'(\boldsymbol{x})&\equiv R(\delta\theta)\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})\\&=\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}-\delta\theta\times\boldsymbol{x})+\delta\theta\times\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}-\delta\theta\times\boldsymbol{x})。\end{aligned} \tag{1.5.33}$$

利用台劳展开，上式可化为

$$R(\delta\theta)\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})-\frac{i}{\hbar}(\delta\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{L})\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})+\delta\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})。 \tag{1.5.34}$$

为了得到转动矩阵的形式，将上式等号右侧第三项的分量化为

$$(\delta\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{\psi})_i=\varepsilon_{ijk}\delta\theta_j\psi_k=-\varepsilon_{jik}\delta\theta_j\psi_k=-\frac{i}{\hbar}(\delta\theta_j S_j)_{ik}\psi_k,$$

其中

$$(S_j)_{ik}=i\hbar\varepsilon_{jik}。\tag{1.5.35}$$

于是有

$$(\delta\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{\psi})_i=-\frac{i}{\hbar}(\delta\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{S})_{ik}\psi_k。\tag{1.5.36}$$

将上式代入式(1.5.34)，可得关于矢量粒子系统的无穷小转动矩阵：

$$\boldsymbol{R}(\delta\boldsymbol{\theta})=1-\frac{i}{\hbar}\,\delta\boldsymbol{\theta}\cdot(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S})=1-\frac{i}{\hbar}\,\delta\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{J},\tag{1.5.37}$$

其中 $\boldsymbol{S}=(S_1, S_2, S_3)$，而 $S_i(i=1, 2, 3)$ 是 3×3 矩阵；轨道角动量项现在应理解为 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{I}$，其中 $\boldsymbol{I}$ 是 3×3 单位矩阵。由式(1.5.35)可写出 S_i 的形式：

$$S_1=i\hbar\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{bmatrix},\ S_2=i\hbar\begin{bmatrix}0&0&1\\0&0&0\\-1&0&0\end{bmatrix},$$

$$S_3=i\hbar\begin{bmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{bmatrix}。\tag{1.5.38}$$

可以证明，这些矩阵算符都是厄米算符；满足角动量对易关系：

$$[S_i, S_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k;\tag{1.5.39}$$

还可以证明，这些算符的本征值都是+1, 0, −1，且有

$$\boldsymbol{S}^2=S_1^2+S_2^2+S_3^2=2\hbar^2=1(1+1)\hbar^2。\tag{1.5.40}$$

所以上述结果表明，式(1.5.38)的算符是自旋算符，它所描写的粒子的自旋为1。

总角动量算符为

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S},\tag{1.5.41}$$

所以由式(1.5.37)可知，矢量粒子系统的空间转动变换是由总角动量算符生成的。对于有限角度的转动，有

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})=e^{-i\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{J}/\hbar}。\tag{1.5.42}$$

由式(1.5.38)给出的自旋为1的粒子的自旋算符与§1.1.2中的式(1.2.63)给出的 $j=1$ 的算符 J_x, J_y, J_z 形式上不一致，但

可以证明，两者仅仅相差一幺正变换。

[例 1] 由式 (1.5.38) 的 S_i 的表示导出 §1.1.2 中式 (1.2.63) 的 $J_i^{(j=1)}$ 的表示。

解：在导出式(1.2.63)时，我们采用了 J_z 表象，算符 J_z 用对角化矩阵表示，其本征值为 $+\hbar$, 0, $-\hbar$，相应的本征矢分别记为

$$\Phi_{+1}=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix},\ \Phi_0=\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix},\ \Phi_{-1}=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}。\tag{1.5.43}$$

式(1.5.38)是非 J_z 表象的形式。不难求出 S_3 的属于本征值 $+\hbar$, 0, $-\hbar$ 的本征矢：

$$\psi_{+1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\i\\0\end{bmatrix}e^{i\theta},\ \psi_0=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix},\ \psi_{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}i\\1\\0\end{bmatrix}e^{i\varphi},\tag{1.5.44}$$

其中引进了相对位相因子。上式本征矢的表示也可理解为 J_z 的本征矢(即 J_z 表象的基矢)在给出式(1.5.38)算符形式的那个"J_z 非对角化表象"中的表示。因此我们所需要的幺正变换矩阵为

$$U=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}e^{-i\theta}&-ie^{-i\theta}&0\\0&0&\sqrt{2}\\-ie^{-i\varphi}&e^{-i\varphi}&0\end{bmatrix}。\tag{1.5.45}$$

不难证明，有

$$\Phi_i=U\psi_i\quad(i=\pm1,\ 0)。$$

其次，由式(1.5.45)和式(1.5.38)可得

$$US_1U^{-1}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-e^{-i\theta}&0\\-e^{i\theta}&0&ie^{i\varphi}\\0&-ie^{-i\varphi}&0\end{bmatrix}。\tag{1.5.46}$$

比较上式与式(1.2.63)中的 $J_x^{(j=1)}$ 时，有

$$\theta=\pi,\ \varphi=-\frac{\pi}{2}。\tag{1.5.47}$$

于是

四七四四 二版

$$U=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-1 & i & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{2}\\ 1 & i & 0\end{bmatrix}。\tag{1.5.48}$$

且可证明

$$US_2U^{-1}=J_y^{(j=1)},\ US_3U^{-1}=J_z^{(j=1)}。\tag{1.5.49}$$

1.5.5 转动算符的矩阵元

原子物理和原子核物理学中很重要的一类微观现象常常涉及到处在有心势场或基本上处在有心势场中运动的粒子系统，此时采用(J^2, J_z)表象来描写系统角度方向或球面上的运动特征是方便的。为了在这一表象中进行讨论和计算，需要知道有关的重要力学量，如角动量以及由它们所生成的转动算符在该表象中的矩阵元或矩阵表示。角动量算符在(J^2, J_z)表象中的矩阵元已在本章1.2.3中讨论过，现在来研究转动算符的矩阵表示。

沿任意方向$\boldsymbol{n}$的轴转过角度θ的转动算符在(J^2, J_z)表象中的矩阵元常记为($\boldsymbol{\theta}=\theta\boldsymbol{n}$, j常定)

$$D^j_{m'm}(\boldsymbol{\theta})=\langle jm'|R(\boldsymbol{\theta})|jm\rangle=\langle jm'|e^{-i\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}/\hbar}|jm\rangle,\tag{1.5.50}$$

该矩阵元亦常称为维格纳函数。最简单情况是系统绕量子化轴本身的转动，此时$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}=J_z$，因此有

$$D^j_{m'm}(\theta\boldsymbol{e}_z)=\langle jm'|e^{-i\theta J_z/\hbar}|jm\rangle=e^{-i\theta m}\delta_{m'm}。\tag{1.5.51}$$

在任意转动变换下，态矢量$|jm\rangle$将变换为$R(\boldsymbol{\theta})|jm\rangle$。利用完全性条件$\sum_{jm}|jm\rangle\langle jm|=1$，有

$$R(\boldsymbol{\theta})|jm\rangle=\sum_{j'm'}|j'm'\rangle\langle j'm'|R(\boldsymbol{\theta})|jm\rangle。\tag{1.5.52}$$

由于

$$\begin{aligned}[J^2, R(\boldsymbol{\theta})]&=[J^2, e^{-i\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}/\hbar}]\\ &=\sum_k\frac{1}{k!}\left(-\frac{i\theta}{\hbar}\right)^k[J^2, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}]=0,\end{aligned}\tag{1.5.53}$$

即J^2与$R(\boldsymbol{\theta})$对易，因此转动态$R(\boldsymbol{\theta})|jm\rangle$仍然是$J^2$的本征态，

本征值为 $j(j+1)\hbar^2$。所以式(1.5.52)可简化为

$$R(\theta)|jm\rangle=\sum_{m'}\langle jm'|R(\theta)|jm\rangle|jm'\rangle$$
$$=\sum_{m'}D^{j}_{m'm}|jm'\rangle。\qquad(1.5.54)$$

这表明，转动态一般不再是 J_z 的本征态，而是 J_z 的本征态的叠加态。

欧拉转动

现在的问题是，如何一般地计算式(1.5.50)转动算符矩阵元。由于转动算符生成元中的 J_x，J_y，J_z 的不对易性，指数算符 $e^{-i\theta n\cdot J/\hbar}$ 不能简单地分解为 $e^{-i\theta n_x J_x}\cdot e^{-i\theta n_y J_y}\cdot e^{-i\theta n_z J_z}$。这里需借助经典力学中的方法。在经典力学中描写刚体的任意转动需要三个参数，这些参数可以是 $\theta\boldsymbol{n}$ 的三个分量，但最方便的是三个欧拉角

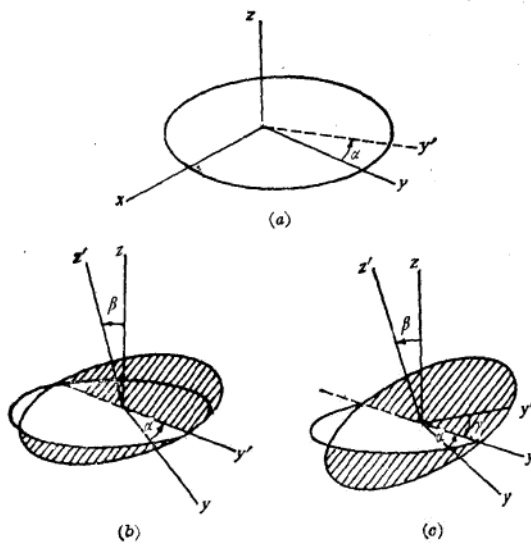

图 1.5.1 欧拉转动

α, β, γ。欧拉角方法将刚体的任意转动分三步实现，如图 1.5.1 所示 (a)先绕子轴转过角度 α，这一操作记为 $R_z(\alpha)$；(b)绕新轴 y' 转过角度 β，记为 $R_{y'}(\beta)$；(c)绕 z' 轴转过角度 γ，记为 $R_{z'}(\gamma)$。于是任意方向转动算符可表示为

$$e^{-i\theta n\cdot J/\hbar}=R(\theta)=R(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=R_{z'}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha)。 \tag{1.5.55}$$

在上述操作中第二步和第三步的转轴 y' 和 z' 可视为与刚体固定联结的坐标系的 y 轴和 z 轴。因此上述方法采用了动系坐标轴，这样处理问题在量子力学中是很不合适的。现在希望采用定系坐标轴来实现欧拉转动。为此，可利用如下关系式：

$$R_{y'}(\beta)=R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)。 \tag{1.5.56}$$

此式的正确性是明显的，由图 1.5.1(b)可以看出为了实现第二步欧拉转动，操作 $R_{y'}(\beta)R_z(\alpha)$ 和 $R_z(\alpha)R_y(\beta)$ 是等价的。类似地有

$$R_{z'}(\gamma)=R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)R_{y'}^{-1}(\beta)。 \tag{1.5.57}$$

将式(1.5 56)和(1.5.57)代入式(1.5.55)，并注意到沿同一轴的转动算符对易，便可得

$$R(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)。 \tag{1.5.58}$$

因此任意转动可通过上述相继的沿同一固定系的轴的转动来实现。

d^j 矩阵

利用式(1.5.58)，任意转动算符在(J^2, J_z)表象中的矩阵元的计算就变得简单了。我们有

$$\begin{aligned}D^j_{m'm}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)&\equiv\langle jm'|R(\alpha,\ \beta,\ \gamma)|jm\rangle\\&=\langle jm'|e^{-i\alpha J_z/\hbar}e^{-i\beta J_y/\hbar}e^{-i\gamma J_z/\hbar}|jm\rangle\\&=e^{-im'\alpha}\langle jm'|e^{-i\beta J_y/\hbar}|jm\rangle e^{-im\gamma},\end{aligned} \tag{1.5.59}$$

或

$$D^j_{m'm}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=e^{-im'\alpha}d^j_{m'm}(\beta)e^{-im\gamma}, \tag{1.5.60}$$

其中

$$d^j_{m'm}(\beta)\equiv\langle jm'|e^{-i\beta J_y/\hbar}|jm\rangle。 \tag{1.5.61}$$

可见，为了计算 D 函数，关键是要计算沿 y 轴方向的转动算符在 (J^2, J_z) 表象中的矩阵元。

[例 2] 导出 $d^{\frac{1}{2}}_{m',m}(\beta)$ 和 $d^{1}_{m',m}(\beta)$ 的形式。

解：(1) 求 $d^{\frac{1}{2}}_{m',m}$

因为 m'，$m=\pm\frac{1}{2}$，所以 $d^{\frac{1}{2}}$ 是 2×2 矩阵。注意到现在有 $J_y=\frac{\hbar}{2}\sigma_y$，其中 σ_y 为泡里矩阵，$\sigma_y^2=1$，因此对于 $j=\frac{1}{2}$ 来说，有

$$
\begin{aligned}
e^{-i\beta J_y/\hbar} &= e^{-i\beta\sigma_y/2} \\
&= 1-i\sigma_y\frac{\beta}{2}-\frac{1}{2!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^2+\frac{1}{3!}i\sigma_y\left(\frac{\beta}{2}\right)^3+\cdots \\
&= \left[1-\frac{1}{2!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^2+\frac{1}{4!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^4-\cdots\right] \\
&\quad -i\sigma_y\left[\frac{\beta}{2}-\frac{1}{3!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^3+\frac{1}{5!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^5-\cdots\right],
\end{aligned}
$$

所以有

$$
e^{-i\beta\sigma_y/2}=\cos\frac{\beta}{2}-i\sigma_y\sin\frac{\beta}{2}。 \tag{1.5.62}
$$

于是有

$$
\begin{aligned}
d^{\frac{1}{2}}_{m',m}(\beta) &= \left\langle\frac{1}{2}m'\left|e^{-i\beta\sigma_y/2}\right|\frac{1}{2}m\right\rangle \\
&= \cos\frac{\beta}{2}\delta_{m'm}-i\sin\frac{\beta}{2}\left\langle\frac{1}{2}m'\left|\sigma_y\right|\frac{1}{2}m\right\rangle。
\end{aligned}
$$

矩阵元 $\left\langle\frac{1}{2}m'\left|\sigma_y\right|\frac{1}{2}m\right\rangle=\frac{2}{\hbar}\left\langle\frac{1}{2}m'\left|J_y^{\left(j=\frac{1}{2}\right)}\right|\frac{1}{2}m\right\rangle$ 可利用 §1.2 中的式(1.2.62)得到。于是有

$$
d^{\frac{1}{2}}(\beta)=\begin{array}{c} m'\backslash m \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{array} \\ \begin{bmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix} \end{array}, \tag{1.5.63}
$$

而 $D^{\frac{1}{2}}(\alpha\ \beta\ \gamma)$矩阵为

$$D^{\frac{1}{2}}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=\begin{array}{c} m'\backslash m \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{array}\begin{array}{c} \quad\frac{1}{2}\qquad\qquad -\frac{1}{2} \\ \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}}\cos\frac{\beta}{2}e^{-i\frac{\gamma}{2}}, & -e^{-i\frac{\alpha}{2}}\sin\frac{\beta}{2}e^{i\frac{\gamma}{2}} \\ e^{i\frac{\alpha}{2}}\sin\frac{\beta}{2}e^{-i\frac{\gamma}{2}}, & e^{i\frac{\alpha}{2}}\cos\frac{\beta}{2}e^{i\frac{\gamma}{2}} \end{bmatrix}. \end{array} \tag{1.5.64}$$

(2) 求 $d^1_{m'm}$

与 $[J_y^{(j=\frac{1}{2})}]^2=\frac{\hbar^2}{4}\sigma_y^2=\frac{\hbar^2}{4}$ 是常数的情况不同，$[J_y^{(j=1)}]^2$ 不是常数算符。但是由§1.2中导出的 $j=1$ 时 J_y 的矩阵形式[见式(1.2.63)]可以证明，

$$\left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^3=\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}。 \tag{1.5.65}$$

因此对于 $j=1$ 的情况来说，可以证明在我们的计算中采用如下代换是合理的：

$$e^{-i\beta J_y/\hbar}\to 1-\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2(1-\cos\beta)-i\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)\sin\beta。 \tag{1.5.66}$$

利用这一结果可得

$$d^1(\beta)=\begin{array}{c} m'\backslash m \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{array}\begin{array}{c} \quad 1\qquad\qquad 0\qquad\qquad -1 \\ \begin{bmatrix} \frac{1+\cos\beta}{2}, & -\frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}, & \frac{1-\cos\beta}{2} \\ \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}, & \cos\beta, & -\frac{\sin\beta}{\sqrt{2}} \\ \frac{1-\cos\beta}{2}, & \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}, & \frac{1+\cos\beta}{2} \end{bmatrix}, \end{array} \tag{1.5.67}$$

D^1 矩阵为

$D^1(\alpha, \beta, \gamma)$

$$
\begin{array}{c|ccc}
m'\backslash m & 1 & 0 & -1 \\
1 & e^{-i\alpha}\dfrac{1+\cos\beta}{2}e^{-i\gamma}, & -e^{-i\alpha}\dfrac{\sin\beta}{\sqrt{2}}, & e^{-i\alpha}\dfrac{1-\cos\beta}{2}e^{i\gamma} \\
0 & \dfrac{\sin\beta}{\sqrt{2}}e^{-i\gamma}, & \cos\beta, & -\dfrac{\sin\beta}{\sqrt{2}}e^{i\gamma} \\
-1 & e^{i\alpha}\dfrac{1-\cos\beta}{2}e^{-i\gamma}, & e^{i\alpha}\dfrac{\sin\beta}{\sqrt{2}}, & e^{i\alpha}\dfrac{1+\cos\beta}{2}e^{i\gamma}
\end{array}
\tag{1.5.68}
$$

D 矩阵与 Y_{lm} 的关系

最后，我们给出转动算符的矩阵元与球谐函数的关系。态矢量$|lm\rangle$在坐标表象中的表示为球谐函数：

$$\langle \boldsymbol{n}|lm\rangle = Y_{lm}(\boldsymbol{n}), \tag{1.5.69}$$

其中$\boldsymbol{n}=(\theta, \varphi)$为矢径方向单位矢量。在$\theta=0$的特殊情况下，$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_z$，此时有

$$\langle \boldsymbol{e}_z|lm\rangle = Y_{lm}(\theta=0, \varphi \text{ 不确定})$$
$$= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)\Big|_{\theta=0} \delta_{m0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m0}。 \tag{1.5.70}$$

$|\boldsymbol{n}\rangle$和$|\boldsymbol{e}_z\rangle$之间显然可以通过转动算符$R(\alpha=\varphi, \beta=\theta, \gamma=0)$相联系：

$$|\boldsymbol{n}\rangle = R(\alpha=\varphi, \theta=\beta, \gamma=0)|\boldsymbol{e}_z\rangle$$
$$= e^{-i\varphi L_z/\hbar}\cdot e^{-i\theta L_y/\hbar}|\boldsymbol{e}_z\rangle。 \tag{1.5.71}$$

所以有

$$\langle lm|\boldsymbol{n}\rangle = \sum_{m'} D^l_{mm'}(\alpha=\varphi, \beta=\theta, \gamma=0)\langle lm'|\boldsymbol{e}_z\rangle。$$

将式(1.5.70)和(1.5.71)代入上式，可得

$$Y^*_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}D^l_{m0}(\alpha, \beta, \gamma)\Big|_{\substack{\alpha=\varphi\\ \beta=\theta\\ \gamma=0}}, \tag{1.5.72}$$

或

$$D^l_{m0}(\alpha,\ \beta,\ \gamma=0)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\,Y^*_{lm}(\theta,\ \varphi)\Big|_{\substack{\theta=\beta\\ \varphi=\alpha}}。$$

(1.5.73)

因为 $$D^l_{m0}(\alpha,\ \beta,\ \gamma=0)=e^{-im\alpha}d^l_{m0}(\beta),$$

所以有

$$d^l_{m0}(\beta)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\,Y^*_{lm}(\theta,\ \varphi)e^{im\varphi}\Big|_{\theta=\beta},\qquad(1.5.74)$$

$$d^l_{00}(\beta)=P_l(\cos\theta)\,|_{\theta=\beta}。\qquad(1.5.75)$$

*1.5.6 标量算符和矢量算符

在空间转动变换下，态矢量将作幺正变换：

$$|\alpha\rangle\rightarrow|\alpha'\rangle=R|\alpha\rangle。\qquad(1.5.76)$$

与此相应，力学量将作相似变换：

$$O\rightarrow O'=ROR^{-1}。\qquad(1.5.77)$$

上述变换规律保证了力学量的平均值在转动变换下保持不变：

$$\langle\alpha|O|\alpha\rangle=\langle\alpha'|R^+OR|\alpha'\rangle=\langle\alpha'|O'|\alpha'\rangle。\qquad(1.5.78)$$

在经典力学和经典电动力学中，常常将物理量按照其转动变换的性质区分为标量、矢量、张量等。类似的分类办法也存在于量子力学。满足如下变换性质的力学量算符称为标量算符：

$$S'\equiv RSR^{-1}=S。\qquad(1.5.79)$$

上式也可记为

$$[S,\ R]=0。\qquad(1.5.80)$$

这表明，标量算符对转动是不变的；标量算符与转动算符对易。例如，粒子的动能算符，粒子在有心力场中的势能算符等都是标量算符。

为了定义矢量算符，先来考察如下例子。

[例 3] 求角动量算符在沿 z 轴方向的空间转动变换下的改变。

解：当系统绕着沿 z 轴取向的轴转过角度 α 时，按照式(1.5.77)，角动量算符将改变为

$$J'_i = R_z(\alpha) J_i R_z^{-1}(\alpha) = e^{-i\alpha J_z/\hbar} J_i e^{i\alpha J_z/\hbar}。 \tag{1.5.81}$$

利用算符 $e^A B e^{-A}$ 的展开式，可得

$$J'_i = J_i - \left(\frac{i\alpha}{\hbar}\right)[J_z, J_i] + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^2 [J_z, [J_z, J_i]] + \frac{1}{3}\left(-\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^3 [J_z, [J_z, [J_z, J_i]]] + \cdots。 \tag{1.5.82}$$

再利用角动量算符的对易关系以及 $\cos\alpha$ 和 $\sin\alpha$ 的台劳展开式，由上式可得

$$\begin{aligned} J'_x &= \cos\alpha J_x + \sin\alpha J_y \\ J'_y &= -\sin\alpha J_x + \cos\alpha J_y \\ J'_z &= J_z。 \end{aligned} \tag{1.5.83}$$

根据上例结果，在量子力学中将在空间转动变换下满足如下变换的算符定义为矢量算符：

$$K'_i \equiv R K_i R^{-1} = M_{ij} K_j。 \tag{1.5.84}$$

如果将 K_1, K_2, K_3 表示为一列矩阵，并记为 K，则上式的矩阵形式为

$$K' \equiv RKR^{-1} = MK, \tag{1.5.85}$$

其中，对于绕 z-轴的转动来说，变换矩阵为

$$M(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}。 \tag{1.5.86}$$

该矩阵是解析几何学中描写矢量各分量转动变换性质的变换矩阵的逆矩阵。矩阵 M 的所有元素都是实数，且可以证明该矩阵满足如下基本性质：

$$M^{-1}(\alpha) = M(-\alpha) = \widetilde{M}(\alpha), \tag{1.5.87}$$

其中 $\widetilde{M}$ 是矩阵 M 的转置。由上式可得

$$\sum_i M_{ij} M_{ik} = \delta_{jk}; \quad \sum_j M_{ij} M_{kj} = \delta_{ik}。 \tag{1.5.88}$$

满足上述基本性质的矩阵称为正交矩阵。一个幺正矩阵若为实矩

阵，便必然满足式(1.5.87)或(1.5.88)。所以正交矩阵可以看作幺正矩阵的一种特例。

在无穷小变换下，

$$K'_i = RK_iR^{-1} = \left(1-\frac{i}{\hbar}\delta\alpha J_3\right)K_i\left(1+\frac{i}{\hbar}\delta\alpha J_3\right)$$

$$= K_i + \frac{i}{\hbar}\delta\alpha[K_i, J_3], \tag{1.5.89}$$

另一方面，矩阵 M 将近似为

$$M = \begin{bmatrix} 1 & \delta\alpha & 0 \\ -\delta\alpha & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \tag{1.5.90}$$

因此有

$$\begin{aligned} K_1 + \frac{i}{\hbar}\delta\alpha[K_1, J_3] &= K_1 + \delta\alpha K_2, \\ K_2 + \frac{i}{\hbar}\delta\alpha[K_2, J_3] &= K_2 - \delta\alpha K_1, \\ K_3 + \frac{i}{\hbar}\delta\alpha[K_3, J_3] &= K_3。 \end{aligned} \tag{1.5.91}$$

这意味着，K_i 必须满足如下对易关系：

$$[K_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijL}K_L。 \tag{1.5.92}$$

可以证明，上式对于有限转动依然成立。上式也可看作矢量算符的定义。

由式(1.5.92)可得

$$K_i = J_i \text{ 时，} [J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijl}J_l, \tag{1.5.93}$$

$$K_i = p_i \text{ 时，} [p_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijl}p_l, \tag{1.5.94}$$

$$K_i = x_i \text{ 时，} [x_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijl}x_l。 \tag{1.5.95}$$

上述对易关系也可利用基本对易关系得到。所以坐标算符、动量算符和角动量算符都是矢量算符。

*1.5.7 球张量

一个矢量 $\boldsymbol{K}$ 的三个分量 K_x、K_y 和 K_z 称为笛卡儿分量，是该矢量在笛卡儿坐标系或笛卡儿表象中的表示。可用一列矩阵将

矢量表示为

$$\begin{bmatrix} K_x \\ K_y \\ K_z \end{bmatrix} = K_x \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + K_y \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + K_z \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{1.5.96}$$

其中 $e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, $e_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, $e_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$,

就是笛卡儿表象中的三个基矢。

一个矢量的"球分量"$K_\mu(\mu = +1, 0, -1)$定义为

$$K_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(K_x + iK_y),\quad K_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(K_x - iK_y),\quad K_0 = K_z。 \tag{1.5.97}$$

这个定义起源于球谐函数的如下表式

$$Y_{1m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{1}{r}\begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy) & m=1 \\ z & m=0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy) & m=-1 \end{cases} \tag{1.5.98}$$

上述定义的球矢量分量可用矩阵表示为

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} K_1 \\ K_0 \\ K_{-1} \end{bmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} -(K_x + iK_y) \\ \sqrt{2}K_z \\ K_x - iK_y \end{bmatrix} \\ &= K_x \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} + K_y \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} -i \\ 0 \\ -i \end{bmatrix} + K_z \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} -1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & -i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} K_x \\ K_y \\ K_z \end{bmatrix}。 \end{aligned} \tag{1.5.99}$$

所以，算符

$$U=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-1 & -i & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{2}\\ 1 & -i & 0\end{bmatrix} \tag{1.5.100}$$

是笛卡儿表象到球表象的变换矩阵。不难证明，U 是幺正的，而且在 U 变换下矢量的长度保持不变，即 $K^2=K_x^2+K_y^2+K_z^2=|K_1|^2+|K_{-1}|^2+|K_0|^2$。

现在将上述结果应用于坐标算符。在上一小节关于矢量算符的讨论中都取笛卡儿分量，这时坐标矢量算符的定义是

$$X'=RXR^{-1}=MX。 \tag{1.5.101}$$

现在希望将它转化到球表象。将式(1.5.100)的 U 左乘上式，再乘以 U 变换下的不变量 $\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{1}{r}$，便可得

$$\begin{bmatrix}Y_{1,+1}(\theta',\varphi')\\ Y_{1,0}(\theta',\varphi')\\ Y_{1,-1}(\theta',\varphi')\end{bmatrix}=(UMU^{-1})\begin{bmatrix}Y_{1,+1}(\theta,\varphi)\\ Y_{1,0}(\theta,\varphi)\\ Y_{1,-1}(\theta,\varphi)\end{bmatrix}。 \tag{1.5.102}$$

上式可写为分量形式：

$$Y_{1m}(\theta',\varphi')=\sum_{m'}(UMU^{-1})_{mm'}Y_{1m'}(\theta,\varphi)。 \tag{1.5.103}$$

对于绕 z-轴的空间转动来说，$M=M(\alpha)$ 为

$$M(\alpha)=\begin{bmatrix}\cos\alpha & \sin\alpha & 0\\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}。 \tag{1.5.104}$$

类似地有

$$M(\beta)=\begin{bmatrix}\cos\beta & 0 & -\sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ \sin\beta & 0 & \cos\beta\end{bmatrix}, \tag{1.5.105}$$

$$M(\gamma)=\begin{bmatrix}\cos\gamma & \sin\gamma & 0\\ -\sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}。 \tag{1.5.106}$$

对于空间任意转动来说，$M(\alpha, \beta, \gamma)$可表示为

$$M(\alpha, \beta, \gamma) = M(\gamma)M(\beta)M(\alpha)。 \tag{1.5.107}$$

注意上式中三个表示转动的正交算符乘积的次序［与式(1.5.58)比较］。将式(1.5.104)、(1.5.105)和(1.5.106)代入上式，便得

$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \sin\alpha\sin\gamma, & \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \cos\alpha\sin\gamma, & -\sin\beta\cos\gamma \\ -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma - \sin\alpha\cos\gamma, & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma + \cos\alpha\cos\gamma, & \sin\beta\sin\gamma \\ \cos\alpha\sin\beta, & \sin\alpha\sin\beta, & \cos\beta \end{bmatrix}。 \tag{1.5.108}$$

于是，当转化到球表象后，有

$$UMU^{-1} = \begin{bmatrix} e^{-i\alpha}\frac{1+\cos\beta}{2}e^{-i\gamma}, & \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}e^{-i\gamma}, & e^{i\alpha}\frac{1-\cos\beta}{2}e^{-i\gamma} \\ -e^{-i\alpha}\frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}, & \cos\beta, & e^{i\alpha}\frac{\sin\beta}{\sqrt{2}} \\ e^{-i\alpha}\frac{1-\cos\beta}{2}e^{i\gamma}, & -\frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}e^{i\gamma}, & e^{i\alpha}\frac{1+\cos\beta}{2}e^{i\gamma} \end{bmatrix}。 \tag{1.5.109}$$

比较式(1.5.109)与式(1.5.68)可得

$$(UMU^{-1})_{mm'} = D^1_{m'm}(\alpha, \beta, \gamma)。 \tag{1.5.110}$$

再由式(1.5.103)可得

$$Y_{1m}(\theta', \varphi') = \sum_{m'} D^1_{m'm}(\alpha, \beta, \gamma) Y_{1m'}(\theta, \varphi)。 \tag{1.5.111}$$

于是通过一个特例($j=1$)，我们又得到了式(1.5.54)。这一结果进一步揭示了D矩阵的意义。这一结果还表明，Y_{1m}是一个球矢量。类似地，Y_{00}是球标量；Y_{2m}是二阶球张量，它有5个分量。一般地说，Y_{lm}是l阶球张量，它有$2l+1$个分量，在转动变换下它将

按如下规律改变

$$Y_{lm}(\theta', \varphi') \equiv RY_{lm}(\theta, \varphi) = \sum_{m'=-l}^{l} D^{l}_{m'm}(\alpha, \beta, \gamma) Y_{lm}(\theta, \varphi), \tag{1.5.112}$$

这实际上就是式(1.5.54)在(球)坐标表象中的形式。

现在可以引进球张量算符。满足如下转动变换规律的算符 T_{lm} 称为 l 阶球张量算符:

$$RT_{lm}R^{-1} = \sum_{m'=-l}^{l} D^{l}_{m'm}(\alpha, \beta, \gamma) T_{lm'}。 \tag{1.5.113}$$

球张量是不可约的。与此相比，笛卡儿张量是可约的。例如一个笛卡儿二阶张量 T_{ij} 有 9 个分量，因为

$$\begin{aligned} T_{ij} &= \frac{1}{3} T\delta_{ij} + \frac{1}{2}(T_{ij} - T_{ji}) + \frac{1}{2}\left(T_{ij} + T_{ji} - \frac{2}{3} T\delta_{ij}\right) \\ &\equiv \frac{1}{3} T\delta_{ij} + A_{ij} + S_{ij}, \end{aligned} \tag{1.5.114}$$

其中 $T \equiv \sum_i T_{ii} = T_{11} + T_{22} + T_{33}$ 是张量的迹，所以一个笛卡儿张量可分解为一个标量 $\frac{1}{3} T\delta_{ij}$，一个反对称张量 A_{ij} 和一个对称(其迹为零)张量。这些分张量的非零独立分量数目分别为 1、3 和 5。这种独立分量数的关系常记为

$$3 \times 3 = 1 + 3 + 5。 \tag{1.5.115}$$

注意到上式等号右边的三个数恰好是 $l=0, 1, 2$ 的球张量的分量数，笛卡儿张量于是可约化为不可约的球张量。

在无穷小变换下，关于球张量的定义(1.5.113)可化为

$$\begin{aligned} &\left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\right) T_{lm} \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\right) \\ &= \sum_{m'} \left\langle lm' \left| \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\right) \right| lm \right\rangle T_{lm'}, \end{aligned}$$

由此可得

$$[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L},\ T_{lm}] = \sum_{m'} \langle lm' | \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L} | lm \rangle T_{lm'}。 \tag{1.5.116}$$

若取 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{e}_z$，或 $\boldsymbol{e}_\pm = \boldsymbol{e}_x \pm i\boldsymbol{e}_y$，利用 L_z 和 $L_\pm = L_x \pm iL_y$ 的矩阵元

[见式(1.2.60)和(1.2.61)]可得

$$[L_z,\ T_{lm}]=m\hbar T_{lm}, \tag{1.5.117}$$

$$[L_\pm,\ T_{lm}]=\hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\,T_{lm}。 \tag{1.5.118}$$

注意到球矢量分量与笛卡儿分量的关系式(1.5.97)，有 $L_0=L_z$，$L_{+1}=-\frac{1}{\sqrt{2}}L_+$，$L_{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}L_-$，所以上两式也可用球矢量记为

$$[L_0,\ T_{lm}]=m\hbar T_{lm}, \tag{1.5.119}$$

$$[L_{+1},\ T_{lm}]=-\hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)/2}\ T_{lm}, \tag{1.5.120}$$

$$[L_{-1},\ T_{lm}]=\hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)/2}\ T_{lm}。 \tag{1.5.121}$$

这些对易关系也可看作球张量算符 T_{lm} 的定义，以替代式(1.5.113)。关于 D 矩阵的一般性质，$d^l_{m'm}$ 的一般计算公式，两角动量耦合等角动量的一般理论及其应用可参阅专门著作。①

1.5.8 空间反演变换

前面我们讨论了三类与时空有关的连续对称性变换，这些变换可以通过相继的无穷小变换得到。但是在微观领域中，还存在另一类或许更能显示出微观现象特征的对称性，即分立对称性。描写这种对称性的变换不是连续变换，不存在相应的无穷小变换。

首先讨论空间反演变换。在空间反演变换 P 作用下，

$$\psi(\boldsymbol{x})\to\psi'(\boldsymbol{x})\equiv P\psi(\boldsymbol{x})=\psi(-\boldsymbol{x})。 \tag{1.5.122}$$

空间反演变换算符常称为宇称算符，简称宇称。显然，$P^2\psi(\boldsymbol{x})=P\psi(-\boldsymbol{x})=\psi(\boldsymbol{x})$，所以有

$$P^2=1。 \tag{1.5.123}$$

P 当然也应当是厄米的。所以有

$$P^{-1}=P^+=P。 \tag{1.5.124}$$

由式(1.5.123)可以看出，P 的本征值是 $+1$ 和 -1。属于本征值

① 例如，M. E. 洛斯著，《角动量理论》，上海科学技术出版社(1963，万乙译)；A. R. Edmonds, "Angular Momentum in Quantum Mechanics", Princeton University Press (1957).

$+1$ 的 P 的本征态又称偶宇称态 ψ_+；属于本征值 -1 的 P 的本征态又称奇宇称态 ψ_-。一般量子系统的状态可分解为偶宇称态和奇宇称态的组合：

$$\psi=\psi_++\psi_-, \tag{1.5.125}$$

其中

$$\psi_\pm=\frac{1}{2}(1\pm P)\psi。$$

如果系统的哈密顿算符与空间反演算符 P 对易，即

$$[P, H]=0, \tag{1.5.126}$$

则我们说，该系统具有空间反演不变性。在这种情况下，可以找到 H 和 P 的共同本征态。例如谐振子具有空间反演不变性，它的能量本征态 $\psi_n(\boldsymbol{x})$ 就是宇称的本征态，本征值为 $(-1)^n$，即

$$P\psi_n(\boldsymbol{x})=\psi_n(-\boldsymbol{x})=(-1)^n\psi_n(\boldsymbol{x})。 \tag{1.5.127}$$

这一结果很容易从 $\psi_n(\boldsymbol{x})$ 的具体表式证明。所以谐振子本征态宇称的奇偶性由 n 确定。

与态函数的变换(1.5.122)相应，坐标、动量、轨道角动量和自旋等力学量在空间反演下将作如下相似变换：

$$\begin{aligned}
&P\boldsymbol{x}P^{-1}=-\boldsymbol{x}, \text{或}\{\boldsymbol{x}, P\}=0,\\
&P\boldsymbol{p}P^{-1}=-\boldsymbol{p}, \text{或}\{\boldsymbol{p}, P\}=0,\\
&P\boldsymbol{L}P^{-1}=\boldsymbol{L}, \quad \text{或}[\boldsymbol{L}, P]=0,\\
&P\boldsymbol{S}P^{-1}=\boldsymbol{S}, \quad \text{或}[\boldsymbol{S}, P]=0,
\end{aligned} \tag{1.5.128}$$

其中 $\{A, B\}=AB+BA$ 为反对易子；$[A, B]=AB-BA$ 为对易子。

我们知道，$\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{L}$、$\boldsymbol{S}$ 等力学量都是矢量算符，在空间转动变换下具有相同的变换规律。但是上式表明，它们在空间反演变换下具有不同的变换性质。$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 具有奇宇称，与 P 呈反对易关系；$\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 具有偶宇称，与 P 呈对易关系。量子理论中常把具有偶宇称的矢量算符称为赝矢量(pseudovector)算符，以区别于具有奇宇称的矢量算符。$\boldsymbol{L}$ 与 P 对易，意味着可以找到算符集($\boldsymbol{L}^2$,

L_z, P)的共同本征矢。实际上不难证明，$\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的本征态 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$在空间反演下具有如下变换规律：

$$PY_{lm}(\theta, \varphi)=Y_{lm}(\pi-\theta, \varphi+\pi)=(-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi)。 \tag{1.5.129}$$

这表明，$Y_{lm}(\theta, \varphi)$确实也是宇称算符的本征态，本征值为$(-1)^l$。

标量算符也可按照宇称变换性质分类。例如 $\boldsymbol{p}^2$、$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{S}$、$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{S}$等都是标量算符，但是 $\boldsymbol{p}^2$ 和 $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$ 具有偶宇称；$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{S}$和 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{S}$ 具有奇宇称。量子理论中常把具有奇宇称的标量算符称为赝标量(pseudoscalar)算符，以区别于具有偶宇称的标量算符。

迄今人们发现，宇称守恒定律并非普适的定律。在电磁相互作用和强相互作用中宇称守恒定律成立；但是在弱相互作用(如引起 β 衰变的作用)中宇称守恒定律并不成立(李政道和杨振宁，1956)。宇称守恒意味着$[P, H]=0$，即描述相互作用现象的哈密顿算符是标量算符；宇称不守恒意味着，$[P, H]\neq 0$，即哈密顿算符是标量和赝标量算符的混和。

*1.5.9 时间反演变换

时间反演变换算符记为 T。在 T 的作用下 $\psi(t)$ 将变换为 $\psi'(t)\equiv T\psi(t)$，这里将 $\psi(\boldsymbol{x}, t)$暂时简写为 $\psi(t)$。为了考察算符 T 的性质以及反演态 $T\psi(t)$与原来态 $\psi(t)$之间的关系，最好先来考察物理上较为直观的力学量在时间反演下的变换规律。

首先，在时间反演下坐标和动量应具有如下变换规律：

$$T\boldsymbol{x}T^{-1}=\boldsymbol{x}, \tag{1.5.130}$$

$$T\boldsymbol{p}T^{-1}=-\boldsymbol{p}。 \tag{1.5.131}$$

这意味着，在任何态中测得的粒子动量的平均值与在其时间反演态中测得的结果大小相等，方向相反。而坐标的平均值则相同。

现在来看基本对易关系$[x_i, p_j]=i\hbar\delta_{ij}$。在时间反演下，我们有 $T[x_i, p_j]T^{-1}=T(i\hbar\delta_{ij})T^{-1}$。如果 T 是线性算符，$T(i\hbar\delta_{ij})T^{-1}=i\hbar\delta_{ij}$，但等式左边 $T[x_i, p_j]T^{-1}=-[x_i, p_j]$，所以这个基本对易关系将改变其形式，这显然是不合理的。T 若是反线性算符，此时

有 $T(i\hbar\delta_{ij})T^{-1}=-i\hbar\delta_{ij}$，所以在 T 变换下基本对易关系保持不变。此外，T 当然也应是幺正的。所以 T 应是反(线性)幺正的。

反幺正算符可表示为一个(线性)幺正算符 U 和复共轭算符 K 之积：

$$T=UK。\tag{1.5.132}$$

注意到在坐标表象中 x 是实算符，p 是虚算符，所以为了满足式(1.5.130)和(1.5.131)，可取

$$U=1,\ T=K。\tag{1.5.133}$$

于是在时间反演下态函数的改变为

$$\psi(t)\to\psi'(t)\equiv T\psi(t)=\psi^*(t)。\tag{1.5.134}$$

应当指出，导出式(1.5.133)和(1.5.134)时取了坐标表象，所以这些结果与表象选取有关。

由式(1.5.130)和(1.5.131)还可得到轨道角动量算符 L 的变换规律：

$$TLT^{-1}=-L。\tag{1.5.135}$$

这个变换使角动量的基本对易关系 $[L_i,\ L_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ 保持不变。此外，T 的反幺正性也使它与各种空间变换(如平移 $D(\rho)$，转动 $R(\theta)$，空间反演 P)对易。

假定 T 变换下系统的哈密顿算符不变，即

$$THT^{-1}=H，\text{或}[T,\ H]=0,\tag{1.5.136}$$

则反幺正算符 T 作用于薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=H\psi(t)\tag{1.5.137}$$

等号两边，可得

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}T\psi(t)=THT^{-1}T\psi(t)。\tag{1.5.138}$$

这表明，$T\psi(t)$ 满足用 $-t$ 代替 t 的薛定谔方程；时间演化态 $T\psi(t)$ 与 $\psi(-t)$ 是同样的态(可相差一位相因子)。这就是量子动力学的时间可逆性。

这里要指出一点：由 T 与 H 对易的式(1.5.136)一般不能导

致 T 是守恒的这一结论。这是因为 T 的反线性性质，现在 $[T, \mathscr{U}(t)] \neq 0$，这里 $\mathscr{U}(t) = e^{-iHt/\hbar}$ 为时间演化算符。

非零自旋粒子的 T

应当指出，上面的讨论仅仅适用于自旋为零的粒子。为了将时间反演变换理论推广到一般情况，必须考虑自旋算符的时间反演变换。由于自旋是一种角动量，它的变换应类似于轨道角动量：

$$TST^{-1} = -S。 \tag{1.5.139}$$

当 $s \neq 0$ 时，除前面考虑的坐标表象外，还应考虑另一类自旋表象。从§1.2的讨论中可知，S_x 和 S_z 是实算符，而 S_y 是虚算符，所以现在不能简单地令 T 中的 $U=1$ 了。为了得到 U 的具体形式，首先注意到根据式(1.5.139)它应满足如下条件：

$$US_x = -S_xU,\ US_z = -S_zU, \tag{1.5.140}$$

且 U 可以是 S_y 的函数。

实际上我们已经有了一个 S_y 函数的幺正算符，即 $e^{-i\alpha S_y/\hbar}$，它是表示自旋态沿 y-轴转动的变换算符。尤其是 $e^{-i\pi S_y/\hbar}$ 使 S 绕 y-轴转过角度 π，因而使 S_x 变为 $-S_x$；S_z 变为 $-S_z$。因此我们可取

$$T = e^{-i\pi S_y/\hbar}K。 \tag{1.5.141}$$

对于自旋 $s=\frac{1}{2}$ 的粒子来说，$S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$，所以上式可简化为

$$T = -i\sigma_y K = \begin{pmatrix} 0 & -K \\ K & 0 \end{pmatrix}。 \tag{1.5.142}$$

这一结果表明，虽然对自旋为0的粒子来说，由式(1.5.133)可知，$T^2=1$；但对自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子来说，$T^2=-1$。

克拉默简并

时间反演不变性的一个重要结果是克拉默(Kramers)简并。若 H 和 T 对易，并设 $|n\rangle$ 是 H 的一个本征态，则反演态也是 H 的属于同一本征值 E_n 的本征态。现在要问：$|n\rangle$ 与 $T|n\rangle$ 是否是同样的态？如果是同样的态，则有 $T|n\rangle = e^{i\theta}|n\rangle$。若再次作用 T，

便得 $T^2|n\rangle=Te^{i\delta}|n\rangle=e^{-i\delta}T|n\rangle=e^{i\delta}e^{-i\delta}|n\rangle$，即有

$$T^2|n\rangle=+|n\rangle。\tag{1.5.143}$$

对于奇数个电子的系统来说，$T^2=(-1)^N=-1$。所以上式给出 $-|n\rangle=+|n\rangle=0$。这表明 $|n\rangle$ 和 $T|n\rangle$ 不可能是同样的态。而且还可以进一步证明，当 $T^2=-1$ 时，$T|n\rangle$ 与 $|n\rangle$ 正交。证明如下：令 $|\alpha\rangle=|n\rangle$，$|\beta\rangle=T|n\rangle$，它们的时间反演态分别是 $|\alpha'\rangle=T|n\rangle$ 和 $|\beta'\rangle=T^2|n\rangle=-|n\rangle$。由§1.3中的式(1.3.42)：$\langle\beta'|\alpha'\rangle=\langle\alpha|\beta\rangle$ 可知，$-\langle n|T|n\rangle=\langle n|T|0\rangle=0$。

上述结果表明，对于奇数个电子的系统来说，能量的每一本征值至少存在二重简并。某些系统除时间反演对称性外，不再具有别的对称性。例如处在不对称晶格中的原子就是这样的一个系统。其周围晶格对该原子的作用可用静电场作用等效，此时该原子系统的哈密顿算符是实算符。如果它有奇数个电子，它的所有能级便都是二重简并的。引入磁场可消除这种简并。

§1.6 密度算符

本节介绍用密度算符代替态矢量描写微观状态的方法。采用密度算符可统一描写纯系综和混合系综的状态。密度算符最早由纽曼(J. Von Neumann)于1927年引进。

1.6.1 纯系综和混合系综

可以用一个态矢量 $|\alpha\rangle$ 描写的状态称为"纯态"。在量子力学含意下，通过态矢量可以得到关于该系统的最完全的知识。对于这样的状态，可通过重复实验进行多次测量。由许多处于相同状态(都由相同的态矢量 $|\alpha\rangle$ 描写)的系统所组成的集合称为"纯系综"。

另一类称为"混合系综"。混合系综由许多不同态矢量 $|\alpha_i\rangle$ $(i=1,\ 2,\ \cdots N)$ 描写的子系统组成，由态矢量 $|\alpha_i\rangle$ 描写的子系统在该系综内以一定的概率出现。因此，我们需要用一系列态矢量

以及它们所出现的概率这两组集合

$$\begin{aligned}&\{|\alpha_i\rangle\}:\ |\alpha_1\rangle,\ |\alpha_2\rangle,\ \cdots,\ |\alpha_N\rangle,\\&\{P_i\}:\quad P_1,\quad P_2,\quad \cdots,P_N,\end{aligned}\tag{1.6.1}$$

来描写一个混合系综。应当指出，标记 i 可取分立的值，也可取连续值。

这里要注意纯系综和混合系综的区别。例如，若 N 个态矢 $|\alpha_i\rangle(i=1\sim N)$ 构成正交完全归一集，则由它们组成的叠加态矢量

$$|\alpha\rangle=\sum_{i=1}^{N}c_i|\alpha_i\rangle\tag{1.6.2}$$

所描写的是纯态而不是混合态。为了区分由上式叠加态 $|\alpha\rangle$ 与由式(1.6.1)两组集合所描写的状态之间的区别，我们来考察任一力学量 A 的平均值。在式(1.6.2)的叠加态中，力学量 A 的平均值为

$$\begin{aligned}\langle A\rangle\equiv\langle\alpha|A|\alpha\rangle&=\sum_{ij}c_i^*c_j\langle\alpha_i|A|\alpha_j\rangle\\&=\sum_i|c_i|^2\langle\alpha_i|A|\alpha_i\rangle+\sum_{i\neq j}c_i^*c_j\langle\alpha_i|A|\alpha_j\rangle,\end{aligned}\tag{1.6.3}$$

而在式(1.6.1)的混合态中，A 的平均值为

$$\langle\bar{A}\rangle\equiv\sum_{i=1}^{N}P_i\langle\alpha_i|A|\alpha_i\rangle。\tag{1.6.4}$$

可见，一个纯态可以看作某些组分态的叠加态，但这是一种“相干叠加”态。而混合态则是各组分态的非相干叠加。从上面的讨论中还可以看出，在混合态或混合系综内求力学量算符的平均值应通过两个步骤，首先对每个组分态求平均(量子力学平均)；然后再按各组分态在系综内出现的概率求平均(统计平均)。在许多涉及到极化效应，自旋取向，角关联，以及量子统计等问题中都会遇到混合系综。

1.6.2 密度算符

为了一般地描写混合系综，可采用如式(1.6.1)所示的两个集合，但这显然是不方便的。纽曼首先发现，可引入一个称为“密度算符”或“密度矩阵”的量，以替代这两列集合来描写混合系综的状

态。

纯态是混合态的一个最简单的特例。在式(1.6.1)的两列集合中，如果某一态矢量所描写的子系统以100% 的概率出现，这就是纯态。所以我们先来考察纯态的密度算符。在态矢量 $|\alpha\rangle$ 描写的纯态中，力学量 A 的平均值为

$$\langle A\rangle=\langle\alpha|A|\alpha\rangle。\tag{1.6.5}$$

为了计算这个平均值，需选取一个表象。取正交完全归一集$\{|n\rangle\}$作为表象基矢，利用完全性条件

$$\sum_n|n\rangle\langle n|=1\tag{1.6.6}$$

可得

$$\begin{aligned}\langle A\rangle=\langle\alpha|A|\alpha\rangle&=\sum_{mn}\langle\alpha|m\rangle\langle m|A|n\rangle\langle n|\alpha\rangle\\&=\sum_{nm}\langle n|\alpha\rangle\langle\alpha|m\rangle A_{mn},\end{aligned}\tag{1.6.7}$$

其中 $A_{mn}=\langle m|A|n\rangle$ 是力学量算符 A 在所取表象中的矩阵元。现在令

$$\rho\equiv|\alpha\rangle\langle\alpha|,\tag{1.6.8}$$

它显然是一个算符，称为纯态的密度算符，它在所取表象中的矩阵元为

$$\rho_{nm}=\langle n|\rho|m\rangle=\langle n|\alpha\rangle\langle\alpha|m\rangle,\tag{1.6.9}$$

于是式(1.6.7)可化为

$$\langle A\rangle=\sum_{nm}\rho_{nm}A_{mn},$$

即

$$\langle A\rangle=\mathrm{Tr}(\rho A)。\tag{1.6.10}$$

所以，若采用密度算符描写纯态，可利用式(1.6.10)计算任何力学量算符的平均值。

现在来讨论混合系综或混合态的密度算符。对于式(1.6.1)的混合态，力学量 A 的平均值可表示为

$$\overline{\langle A\rangle}=\sum_{i=1}^{N}P_i\langle\alpha_i|A|\alpha_i\rangle。\tag{1.6.11}$$

为了具体计算，同样取$|n\rangle$为基矢的表象。现在有

$$\langle\overline{A}\rangle=\sum_{i=1}^{N}\sum_{mn}P_i\langle\alpha_i|m\rangle\langle m|A|n\rangle\langle n|\alpha_i\rangle$$

若令

$$\rho=\sum_{i=1}^{N}|\alpha_i\rangle P_i\langle\alpha_i|, \tag{1.6.12}$$

并称它为混合态的密度算符，它在所选取表象中的矩阵元为

$$\rho_{nm}=\langle n|\rho|m\rangle=\sum_{i=1}^{N}\langle n|\alpha_i\rangle P_i\langle\alpha_i|m\rangle。 \tag{1.6.13}$$

于是，混合系综内力学量算符A的平均值也可表示为

$$\langle\overline{A}\rangle=\mathrm{Tr}(\rho A)。 \tag{1.6.14}$$

因此引进密度算符后，在纯态和混合态两种情况下具有同样的求平均值公式。尽管混合态不能用一个态矢量描写，但是却能够用一个密度算符表示。而且，当式(1.6.12)中的$P_i=\delta_{ik}(|\alpha_k\rangle\Rightarrow|\alpha\rangle)$时，式(1.6.12)便回到式(1.6.8)。

从采用态矢量描写状态的观点来看，用密度算符的描写或许不是"最完全的描写"。例如，我们不能从密度算符了解处于混合态的粒子的详细位置分布概率。但是在许多情况下，这种"不完全的描述"已经足够。这一情况类似于经典力学和统计物理学对粒子系统的描述。后者尽管不能给出粒子状态的详细情况，但是采用统计平均的方法已经足以把握系统的基本特征。

1.6.3 密度符算的基本性质

由式(1.6.12)定义的密度算符具有许多重要特性。首先是它的厄米性。由定义(1.6.12)可以看出，因为态$|\alpha_i\rangle$在系综内出现的概率P_i是实数，所以有

$$\rho^+=\rho。 \tag{1.6.15}$$

其次我们来考察密度算符的表示矩阵的迹。由式(1.6.13)可得

$$\mathrm{Tr}\rho=\sum_n\rho_{nn}=\sum_{i=1}^{N}\sum_n\langle n|\alpha_i\rangle P_i\langle\alpha_i|n\rangle,$$

利用基矢的完全性条件，子系统态矢量的归一化条件($\langle\alpha_i|\alpha_i\rangle=$

1)，以及统计力学意义上的归一化条件$\left(\sum_{i=1}^{N} P_i=1\right)$，可得

$$\mathrm{Tr}\rho=1。 \tag{1.6.16}$$

上式也可称为密度算符的归一化条件。

由定义可以看出，纯态的密度算符还满足如下性质（幂等性 idempotent）：

$$\rho^2=\rho。 \tag{1.6.17}$$

这意味着，对于纯态，有

$$\rho(\rho-1)=0, \tag{1.6.18}$$

$$\mathrm{Tr}\rho^2=1。 \tag{1.6.19}$$

式(1.6.18)表明，纯态密度算符的本征值只能取1和0，且由于归一性($\mathrm{Tr}\rho=1$)，它的本征值谱中只有一个取1，其它本征值均为零。

一般来说，在密度算符的定义(1.6.12)中不同子系统的态矢量$|\alpha_i\rangle$之间可以不正交，上述性质的讨论中并未用到正交性条件。不过，在实际应用中存在一类重要而普遍的情况，即$\{|\alpha_i\rangle\}$是一个正交归一完全矢量集(如能量本征矢集)。在这种情况下，还可得到如下两个重要性质。

首先来考察一般混合态密度算符平方的迹。因为

$$\mathrm{Tr}\rho^2=\sum_{ij} P_iP_j\mathrm{Tr}(|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|)=\sum_i P_i^2\leqslant 1,$$

对于纯态，上式最后取等号，这就是式(1.6.19)的结果。因此有

$$\mathrm{Tr}\,\rho^2<1(\text{混合态});\ \mathrm{Tr}\,\rho^2=1(\text{纯态})。 \tag{1.6.20}$$

所以$\mathrm{Tr}\rho^2$是否等于1可作为状态是否为纯态的判据。

若构成混合态的各组分纯态互相正交，则由密度算符的定义(1.6.12)立即可得

$$\rho|\alpha_j\rangle=\sum_i|\alpha_i\rangle P_i\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle=P_i|\alpha_j\rangle。 \tag{1.6.21}$$

这表明，密度矩阵的本征矢就是构成该混合系综的组分纯态态矢量，相应的本征值就是该组分态在系综内出现的概率。这是一个重要的结论，由此可通过密度矩阵了解混合系综的状态分布。从

这个意义上说，量子力学中的密度矩阵与统计物理学中的分布函数相对应。

1.6.4 密度算符的运动方程(刘维方程)

采用密度算符代替态矢量，可简单而统一地描写纯系综和混合系综。现在来考察密度算符随时间的演化方程，在薛定谔绘景中，这种方程就是在密度算符描述方案下系统的动力学方程。

为此，对式(1.6.12)取关于时间的微商。当 P_i 不随时间改变(平衡态)时，有

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}=\sum_i\left(\frac{\partial|\alpha_i\rangle}{\partial t}P_i\langle\alpha_i|+|\alpha_i\rangle P_i\frac{\partial\langle\alpha_i|}{\partial t}\right)$$

利用关于态矢量的薛定谔方程

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

$$-i\hbar\frac{\partial\langle\alpha_i|}{\partial t}=\langle\alpha_i|H,$$

便可得

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}=\sum_i(H|\alpha_i\rangle P_i\langle\alpha_i|-|\alpha_i\rangle P_i\langle\alpha_i|H)=H\rho-\rho H,$$

即

$$i\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}=[H,\ \rho(t)], \tag{1.6.22}$$

这就是薛定谔绘景中关于密度算符的运动方程。已知初始时刻的 $\rho(0)$，可求出 $\rho(t)$，从而可以确定任何力学量的平均值随时间的变化。应当注意，不要将式(1.6.22)与海森伯绘景中关于力学量算符的运动方程相混淆，无论从形式上还是从物理意义上来说都存在区别。

密度算符的运动方程(1.6.22)在能量表象中最容易求解。设

$$H|n\rangle=E_n|n\rangle,$$

则运动方程(1.6.22)在能量表象中的形式为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle n|\rho(t)|m\rangle=\langle n|[H\rho(t)-\rho(t)H]|m\rangle$$

$$= (E_n - E_m)\langle n|\rho(t)|m\rangle,$$

其解为

$$\rho_{nm}(t) \equiv \langle n|\rho(t)|m\rangle = \rho_{nm}(0)e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar}。$$

(1.6.23)

因为海森伯绘景中态矢量不随时间改变，因此在这个绘景中密度算符也不随时间改变(注意，力学量算符现在将随时间改变)。利用态矢量的变换关系

$$|\alpha_i, t\rangle_S = \mathscr{U}(t, 0)|\rho_i\rangle_H,$$

可得到密度算符的变换关系

$$\rho_S(t) = \sum_i |\alpha_i, t\rangle_S P_{iS}\langle\alpha_i, t|$$

$$= \sum_i \mathscr{U}(t, 0)|\alpha_i\rangle_H P_{iH}\langle\alpha_i|\mathscr{U}^{-1}(t, 0),$$

即

$$\rho_S(t) = \mathscr{U}(t, 0)\rho_H\mathscr{U}^{-1}(t, 0), \qquad (1.6.24)$$

其中 $\mathscr{U}(t, 0)$ 是时间演化算符。当系统的哈密顿算符不显含时间时，它可表示为 $\mathscr{U}(t, 0) = e^{-iHt/\hbar}$。显然，式(1.6.24)在能量表象中的矩阵形式就是式(1.6.23)。

最后我们来讨论相互作用绘景中关于密度算符的运动方程。设系统的哈密顿算符在薛定谔绘景中可分解为

$$H_S = H_{0S} + V_S(t)。 \qquad (1.6.25)$$

可以证明，密度算符在薛定谔绘景和相互作用绘景中的形式之间存在如下转换关系：

$$\rho_I(t) = e^{iH_{0S}t/\hbar}\rho_S(t)e^{-iH_{0S}t/\hbar}。 \qquad (1.6.26)$$

因此 $\rho_I(t)$ 将满足如下运动方程：

$$i\hbar\frac{\partial\rho_I(t)}{\partial t} = [V_I(t), \rho_I(t)], \qquad (1.6.27)$$

其中相互作用绘景中的相互作用哈密顿算符为

$$V_I(t) = e^{iH_{0S}t/\hbar}V_S(t)e^{-iH_{0S}t/\hbar}。$$

应当指出，在相互作用绘景中力学量算符也将随时间变化。所以在相互作用绘景中确定混合系综的状态随时间变化的动力学方程

应包括式(1.6.27)的关于密度算符的运动方程。关于力学量算符的运动方程：

$$i\hbar\frac{\partial A_I(t)}{\partial t}=[A_I(t),\ H_0], \tag{1.6.28}$$

其中 $H_0=H_{0S}=H_{0I}$。

[例 1] 利用密度算符求力学量平均值公式导出力学量平均值随时间变化的方程。

解：(1) 在薛定谔绘景中讨论。现在，密度算符随时间变化，但力学量不随时间变化，因此有

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle\overline{A}\rangle}{\partial t}&=\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{Tr}(\rho(t)A)=\mathrm{Tr}\left(\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}A\right)\\&=\frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}([H,\ \rho]A)=\frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}(H\rho A-\rho HA)\\&=\frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}(\rho AH-\rho HA)=\frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}(\rho[A,\ H]),\end{aligned}$$

因此可得 $$i\hbar\frac{\partial\langle\overline{A}\rangle}{\partial t}=\langle[A,\ H]\rangle。$$

(2) 在海森伯绘景中讨论。现在，密度算符不随时间变化，但力学量随时间变化，因此有

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle\overline{A}\rangle}{\partial t}&=\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{Tr}(\rho A(t))=\mathrm{Tr}\left(\rho\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right)\\&=\frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}(\rho[A,\ H])=\frac{1}{i\hbar}\langle[A,\ H]\rangle。\end{aligned}$$

此结果与薛定谔绘景中的形式相同。

(3) 在相互作用绘景中讨论。现在，密度算符和力学量都随时间变化，因此有

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle\overline{A}\rangle}{\partial t}&=\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{Tr}(\rho(t)A(t))\\&=\mathrm{Tr}\left(\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}A(t)+\rho(t)\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right)\\&=\frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}([V(t),\ \rho(t)]A(t)+\rho(t)[A(t),\ H_0])\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\,\mathrm{Tr}(V\rho A - \rho V A + \rho A H_0 - \rho H_0 A)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\,\mathrm{Tr}\{\rho A(V+H_0) - \rho(V+H_0)A\}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\,\mathrm{Tr}(\rho[A,\ H])。$$

此结果仍然具有相同形式。

1.6.5 电子极化密度算符

作为例子，我们来讨论描写粒子自旋状态的极化密度算符的表示矩阵。自旋为 s 的粒子纯态波函数是 $2s+1$ 个分量的列矩阵，所以该粒子极化状态的密度矩阵是 $(2s+1)\times(2s+1)$ 维方矩阵，有 $(2s+1)^2$ 个复元素。考虑到厄米性 $\rho^+=\rho$ 和归一性 $\mathrm{Tr}\rho=1$，这些复元素中包含有 $(2s+1)^2-1$ 个独立的实参数。现在考虑 $s=\frac{1}{2}$ 的情况，此时的极化密度矩阵是 2×2 方阵。我们知道，2×2 矩阵存在一个完全集，即三个泡利矩阵 σ_i 和一个单位矩阵。任何 2×2 矩阵可用这四个矩阵的线性组合来表示，即

$$\rho = a_0 + \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \tag{1.6.29}$$

其中 σ_i 为泡利矩阵，在 σ_z-表象中其形式为

$$\sigma_x=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\quad \sigma_y=\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix},\quad \sigma_z=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}, \tag{1.6.30}$$

它们满足如下关系：

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \tag{1.6.31}$$

$$\mathrm{Tr}\,\sigma_i = 0, \tag{1.6.32}$$

$$\mathrm{Tr}(\sigma_i\sigma_j) = 2\delta_{ij}。 \tag{1.6.33}$$

由 ρ 的厄米性可知，式(1.6.29)中的展开系数 a_0, a_1, a_2, a_3 为实数；由 ρ 的归一化条件可知，$a_0=\frac{1}{2}$。若令 $\boldsymbol{\xi}=2\boldsymbol{a}$，式(1.6.29)可记为

$$\rho = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\sigma}), \tag{1.6.34}$$

或利用式(1.6.30)表示，上式可记为

$$\rho=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1+\xi_3 & \xi_1-i\xi_2\\ \xi_1+i\xi_2 & 1-\xi_3\end{bmatrix}。\tag{1.6.35}$$

上式中确定电子极化密度矩阵的三个实参数$\xi_i(i=1,2,3)$常称为"斯托克斯参数"。现在来讨论由密度矩阵描写的混合态中自旋算符$\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$的平均值。因为(重复指标求和)

$$\langle S_i\rangle=\frac{\hbar}{2}\langle\sigma_i\rangle=\frac{\hbar}{2}\mathrm{Tr}(\rho\sigma_i)=\frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}[(1+\xi_j\sigma_j)\sigma_i]$$

$$=\frac{\hbar}{4}\xi_j\,\mathrm{Tr}(\sigma_j\sigma_i),$$

所以有

$$\langle\boldsymbol{S}\rangle=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\xi}。\tag{1.6.36}$$

可见，斯托克斯参数具有明显的物理意义，它们是自旋各分量平均值的量度。$\boldsymbol{\xi}=(\xi_1,\xi_2,\xi_3)$也称为"极化矢量"，$\xi=\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2}$称为"极化度"。

由于

$$\mathrm{Tr}\rho^2=\frac{1}{4}\mathrm{Tr}[(1+\xi_i\sigma_i)(1+\xi_j\sigma_j)]$$

$$=\frac{1}{4}\mathrm{Tr}(1+\xi_i\xi_j\sigma_i\sigma_j)$$

$$=\frac{1}{2}(1+\xi^2)\leqslant 1,$$

所以极化矢量应满足如下条件：

$$\xi^2\leqslant 1,\tag{1.6.37}$$

对于纯态，$\xi^2=1$；对于混合态，$\xi^2<1$。

极化密度矩阵(1.6.35)的本征值不难得到，结果为

$$\lambda_\pm=\frac{1}{2}(1\pm\xi)\tag{1.6.38}$$

下面给出几个特例：

1. $\xi_1=\xi_2=0$，$\xi_3=1$，此时有

$$\rho=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}。 \tag{1.6.39}$$

这个矩阵显然可化为

$$\rho=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}[1\quad 0]\doteq|\sigma_z=1\rangle\langle\sigma_z=1|, \tag{1.6.40}$$

其中$|\sigma_z=1\rangle\doteq\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$是算符$\sigma_z$的属于本征值为$+1$的本征矢在$\sigma_z$表象中的表示。每一电子的自旋方向均取$z$轴正方向的电子束系综可用式(1.6.39)的密度矩阵描写它的极化状态，这是一种纯系综。

2. $\xi_1=\xi_2=0$, $\xi_3=-1$, 此时有

$$\rho=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}[0\quad 1]=|\sigma_z=-1\rangle\langle\sigma_z=-1|。 \tag{1.6.41}$$

3. $\xi_1=\pm1$, $\xi_2=\xi_3=0$, 此时有

$$\rho=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \pm\frac{1}{2}\\ \pm\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ \pm1\end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}[1\quad \pm1]$$

$$=|\sigma_x=\pm1\rangle\langle\sigma_x=\pm1| \tag{1.6.42}$$

以上三个例子都涉及到纯系综。

4. $\xi_1=\xi_2=\xi_3=0$, 此时有

$$\rho_{非}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}。 \tag{1.6.43}$$

这是一种"非极化态"，或者说是一种完全混乱或"最无序"的状态。纯态和完全混乱(现在指电子自旋取向)状态是混合态的两种极端情况。由于

$$\rho_{非}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}+\frac{1}{2}\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}+\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix},$$

所以电子的非极化态可看作沿任何方向（如 x 方向，y 方向或 z 方向等）其自旋取正向和反向的两种纯态按相同权重（50%）的非相干叠加。

5. 作为部分极化态的一个例子，我们来考察其态矢量为 $|\sigma_z=1\rangle$ 和 $|\sigma_z=1\rangle$ 的两个纯系综分别按权重 0.25 和 0.75 所构成的混合系综。该系综的密度矩阵显然为

$$\rho=\frac{1}{4}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}+\frac{3}{4}\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{5}{8} & \frac{3}{8}\\ \frac{3}{8} & \frac{3}{8}\end{bmatrix}。\qquad (1.6.44)$$

由上式可知，自旋各分量的平均值为

$$\langle S_x\rangle=\frac{3}{4}\hbar,\ \langle S_y\rangle=0,\ \langle S_z\rangle=\frac{1}{8}\hbar。$$

应当指出，由式(1.6.44)所描写的混合态是纯态 $|\sigma_z=1\rangle$ 和 $|\sigma_z=1\rangle$ 分别按权重 0.25 和 0.75 的非相干叠加态，但在该态中出现这两个纯态的概率并不是 0.25 和 0.75。这是因为，在纯态 $|\sigma_z=1\rangle$ 中包含了纯态 $|\sigma_z=1\rangle$；反之，在纯态 $|\sigma_z=1\rangle$ 中也包含了纯态 $|\sigma_z=1\rangle$。这种复杂性起因如下：参与非相干混合的两个纯系综的态矢量并不正交。

1.6.6 统计物理学中的密度算符

由系综的密度算符 ρ 可定义一个量

$$\sigma=-\mathrm{Tr}(\rho\ln\rho)。\qquad (1.6.45)$$

在自身表象中，ρ 是对角矩阵，其对角元设为 ρ_k。于是上式可记为

$$\sigma=-\sum_{k=1}^{N}\rho_k\ln\rho_k。\qquad (1.6.46)$$

对于纯态，其密度矩阵对角元中只有一个元素等于 1，其它元素均为零；对于完全混乱态，$\rho_k=1/N$，其中 N 是系综所含状态的数目，

因此有

$$\sigma=0,\quad(\text{纯态})$$
$$\sigma=-\sum_{k=1}^{N}\frac{1}{N}\ln\frac{1}{N}=\ln N。\quad(\text{完全混乱态}) \tag{1.6.47}$$

纯态是最有序的态；完全混乱态是最无序的态，所以上述定义的量 σ 是系综无序程度的量度。于是可定义一个称为熵的物理量：

$$S=k\sigma, \tag{1.6.48}$$

其中 k 为玻耳兹曼常数。

现在来推导热平衡状态下系综密度算符的一般形式。首先，由于平衡态是一种稳定态，有

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=0。 \tag{1.6.49}$$

由 ρ 的运动方程可知，这意味着现在有 $[\rho,\ H]=0$，即 ρ 和系综的哈密顿算符可同时对角化。现在我们就在这个共同表象中进行讨论。注意到存在如下三个条件：

(1) 归一化条件：$\mathrm{Tr}\rho=\sum_k\rho_k=1$，因此有

$$\sum_k\delta\rho_k=1。$$

(2) σ 具有最大值，即 $\delta\sigma=0$，因此有

$$\sum_k\delta\rho_k(\ln\rho_k+1)=0。$$

(3) 系综的“内能” $\langle H\rangle=\mathrm{Tr}(\rho H)\equiv U$ 具有确定值，因此有

$$\delta U\equiv\delta\langle H\rangle=\sum_k\delta\rho_k E_k=0。$$

根据上述三个条件，并采用“拉格朗日乘子法”①便可得到如下关系

$$\sum_k\delta\rho_k[(\ln\rho_k+1)+\beta E_k+\gamma]=0,$$

由于 $\delta\rho_k$ 任意，因此有

$$(\ln\rho_k+1)+\beta E_k+\gamma=0。$$

由此可得

$$\rho_k=\exp(-\beta E_i-\gamma-1),$$

① 苏汝铿编著，《统计物理学》(复旦大学出版社，1990)，p.74。

其中 γ 由归一化条件 $\mathrm{Tr}\,\rho=\sum_k \rho_k=1$ 确定，最后可得

$$\rho_k=\frac{e^{-\beta E_k}}{Z}, \tag{1.6.50}$$

其中归一化系数

$$Z=\sum_{i=1}^{N} e^{-\beta E_i}=\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}, \tag{1.6.51}$$

称为"配分函数"。于是我们得到了玻耳兹曼最概然分布，ρ_k 就是系综处在态 $|k\rangle$ 的概率，$|k\rangle$ 是哈密顿算符 H 的属于本征值为 E_k 的本征右矢（$H|k\rangle=E_k|k\rangle$）。于是可将密度算符记为

$$\rho=\frac{1}{Z}\sum_k e^{-\beta H}|k\rangle\langle k|=\frac{e^{-\beta H}}{Z}, \tag{1.6.52}$$

$$e^{-\beta F}\equiv Z=\sum_i e^{-\beta E_i}=\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}, \tag{1.6.53}$$

其中 F 定义为"自由能"。β 与绝对温度的关系可通过将 ρ 应用于理想气体系综而得到，结果为 $\beta=1/kT$。从式(1.4.50)还可以看出，当 $\beta=0$（高温极限），$Z=N$，$\rho_k=1/N$，这就是完全混乱态的情况。这也相当于在上述讨论中放弃第三个条件，即系综内能为常数后所得到的结果。

1.6.7 坐标表象中的密度算符

密度算符

$$\rho=\sum_i P_i|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \tag{1.6.54}$$

在坐标表象中的矩阵元可表示为

$$\rho(x,\,x')=\sum_i P_i\psi_i(x)\psi_i^*(x')。 \tag{1.6.55}$$

对于玻耳兹曼统计，$\psi_i(x)$ 是哈密顿算符的属于本征值为 E_i 的本征矢在坐标表象中的表示，且

$$P_i=\rho_i=\frac{e^{-\beta E_i}}{Z}。 \tag{1.6.56}$$

对于纯态（$P_i=\delta_{ik}$，$\psi_k=\psi$），有

$$\rho(x,\,x')=\psi(x)\psi^*(x'), \tag{1.6.57}$$

其对角元 $\rho(x,x)=|\psi(x)|^2$。

力学量 A 的平均值可表示为

$$\langle A\rangle=\mathrm{Tr}(\rho A)=\int dx\langle x|\rho A|x\rangle。$$

由于

$$\begin{aligned}\langle x|\rho A|x\rangle&=\int dx'\langle x|\rho|x'\rangle\langle x'|A|x\rangle\\&=\int dx'\rho(x,x')A(x',x),\end{aligned}$$

所以有

$$\langle A\rangle=\iint dx\,dx'\rho(x,x')A(x',x)。\tag{1.6.58}$$

作为例子，在坐标表象中坐标算符和动量算符的矩阵元为

$$\begin{aligned}&\langle x|x|x'\rangle=x\delta(x-x'),\\&\langle x|p|x'\rangle=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')。\end{aligned}\tag{1.6.59}$$

由式(1.6.58)可得

$$\langle x\rangle=\iint dx\,dx'\rho(x,x')x\delta(x-x')=\int dx x\rho(x,x)。\tag{1.6.60}$$

如果注意到式(1.6.55)，上式可改写为更熟悉的公式：

$$\langle x\rangle=\sum_i P_i\int dx\,\psi_i^*(x)x\psi_i(x)。\tag{1.6.61}$$

类似地有

$$\langle p\rangle=i\hbar\int dx\left[\frac{\partial}{\partial x'}\rho(x,x')\right]_{x=x'}\tag{1.6.62}$$

[例 1] 导出处在体积为 V 的方箱中的 N 个自由粒子系统的密度矩阵。

解：利用式(1.6.55)，注意到自由粒子的能量为 $p^2/2m$，并利用如下求和变积分的代换关系(认为方箱体积 V 很大)：

$$\sum_i\to\int\frac{V\,d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3},\quad\psi_i(x)\to\psi_{\boldsymbol{p}}(x)=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar},$$

便可得(未归一化)

$$\rho(x,\ x';\beta)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int dp\, e^{-\beta p^2/2m}e^{ip\cdot(x-x')/\hbar}$$

$$=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3/2}e^{-m(x-x')^2/2\hbar^2\beta}。\qquad(1.6.63)$$

由此可得配分函数为

$$Z=\int dx\rho(x,\ x;\beta)=V(mkT/2\pi\hbar^2)^{3/2}\qquad(1.6.64)$$

N 个粒子的自由能为

$$F=-\frac{1}{\beta}\ln Z=-\frac{1}{\beta}\ln[V^N(mkT/2\pi\hbar^2)^{3N/2}]。$$

(1.6.65)

利用类似的方法可以讨论谐振子系统的配分函数。

最后我们要指出，当不考虑归一化条件时，ρ 作为参量 β 的函数可表示为

$$\rho(\beta)=e^{-\beta H}。\qquad(1.6.66)$$

它显然满足如下方程：

$$-\partial\rho/\partial\beta=H\rho,\qquad(1.6.67)$$

及初始条件

$$\rho(0)=1。\qquad(1.6.68)$$

与薛定谔方程或时间演化算符所满足的方程比较，可以看出作如下代换：

$$\frac{i}{\hbar}t\to\beta,\qquad(1.6.69)$$

薛定谔方程从形式上便化为式(1.6.67)。这个见解广泛应用于建立有限温度系统的量子理论。

§1.7 量子力学的路径积分形式

狄拉克-费曼路径积分形式可以看作与薛定谔的波动力学和海森伯的矩阵力学等价的第三种量子力学表述方式。这种表述方式利用路径积分方法建立起经典作用量与量子力学中的跃迁矩阵

元之间的联系，从而实现了从经典力学到量子力学的过渡。这种表述方式的原始思想最早由狄拉克(P. A. M. Dirac)于1933年提出，后来由费曼(R. P. Feynman)于1948年加以发展，并推广到量子场论。量子场论的路径积分形式对于本世纪60年代末70年代初规范场理论的发展起了很重要的作用。本章简要介绍量子力学的路径积分形式。

1.7.1 传播函数

时间演化算符 $\mathscr{U}(t, t')$ 完全确定了系统的动力学过程，或者说，该算符包含了量子系统随时间演化的全部信息。我们现在来考察该算符在坐标表象中的矩阵元$\langle q|\mathscr{U}(t, t')|q'\rangle$，其中$|q\rangle$是坐标算符的本征右矢。如果系统的哈密顿算符不显含时间，则有$\mathscr{U}(t, t')=e^{-iH(t-t')/\hbar}$，这时有

$$K(q, q'; t-t')\equiv\langle q|\mathscr{U}(t, t')|q'\rangle={}_H\langle qt|q't'\rangle_H$$
$$=\langle q|e^{-iH(t-t')/\hbar}|q'\rangle, \qquad (1.7.1)$$

其中$|q'\rangle_H$是海森伯绘景中坐标表象的基矢[参见式(1.4.73)]。上式的 K 也常称为费曼传播函数。

现在来考察 t 时刻的状态 $|\psi(t)\rangle$，它由初始时刻的状态 $|\psi(t')\rangle$由于相互作用演化而来：

$$|\psi(t)\rangle=\mathscr{U}(t, t')|\psi(t')\rangle。 \qquad (1.7.2)$$

在坐标表象中上式可记为

$$\langle q|\psi(t)\rangle=\int dq'\langle q|\mathscr{U}(t, t')|q'\rangle\langle q'|\psi(t')\rangle, \qquad (1.7.3)$$

或利用波函数符号 $\psi(q, t)\equiv\langle q|\psi(t)\rangle$，又可记为

$$\psi(q, t)=\int dq'K(q, q'; t-t')\psi(q', t')。 \qquad (1.7.4)$$

从数学上说，上式是一个确定波函数 $\psi(q, t)$ 的积分方程，K 就是积分方程的“核”(Kernel)。若已知 K，由系统的初态可以完全预言任意时刻该系统的状态。从物理意义上说，上式表明 t 时刻粒子在 q 点处出现的概率幅与 t' 时刻 q' 点处的概率幅是通过传播

函数相联系的。若取 $\psi(q', t')=\delta(q'-q_0)$，则有 $\psi(q, t)=K(q, q_0; t-t')$，这表明若初始时刻 t' 粒子位于 q_0 点处，则 $K(q, q_0; t-t')$ 就是在 t 时刻 q 点处发现该粒子的概率幅。

在具体计算传播函数时常常要用到如下性质：

$$K(q, q'; t-t')=\int_{-\infty}^{+\infty}K(q, q''; t-t'')K(q'', q'; t''-t')dq''。$$

$$(t>t''>t') \qquad (1.7.5)$$

这个性质称为组合律，它来源于时间演化算符 $\mathscr{U}(t, t')$ 的因子化特性。因为

$$\langle q|\mathscr{U}(t, t')|q'\rangle=\langle q|\mathscr{U}(t, t'')\mathscr{U}(t'', t')|q'\rangle$$

$$=\int dq''\langle q|\mathscr{U}(t, t'')|q''\rangle\langle q''|\mathscr{U}(t'', t')|q'\rangle,$$

于是便得到式(1.7.5)。

1.7.2 传播函数的运动方程

在讨论状态随时间演化的问题中，为了体现出因果性，传播函数应完整地表示为

$$K(q, q'; t-t')=\theta(t-t')\langle q|\mathscr{U}(t, t')|q'\rangle$$

$$=\begin{cases}0, & (t<t')\\ \langle q|\mathscr{U}(t, t')|q'\rangle, & (t>t')\end{cases} \qquad (1.7.6)$$

其中 $\theta(t)$ 为阶跃函数，可见 K 在 $t=t'$ 时有奇性。式(1.7.4)现在应表示为

$$\theta(t-t')\psi(q, t)=\int dq'K(q, q'; t-t')\psi(q', t')。$$

$$(1.7.7)$$

现在将算符 $H(q)-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ 作用于式(1.7.7)，其中 $H(q)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}+V(q)$ 是哈密顿算符，再考虑到 $\psi(q, t)$ 满足薛定谔方程，且 $\frac{\partial}{\partial t}\theta(t-t')=\delta(t-t')$，我们便可得

$$-i\hbar\delta(t-t')\psi(q,\ t)$$

$$=\int dq'\left[H(q)-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]K(q,\ q';\ t-t')\psi(q\ ,\ t')。$$

由此结果可以看出，传播函数应满足如下运动方程：

$$\left[H(q)-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]K(q,\ q';\ t-t')=-i\hbar\delta(q-q')\delta\ (t-t')。$$

(1.7.8)

此结果表明，传播函数 K 也就是与时间有关的薛定谔方程的格林函数(相差一常数因子，参见§2.5)。

[例1] 求一维自由粒子的传播函数

解：利用本征函数展开法，有

$$K(q,\ q',\ t-t')=\langle q|e^{-iH(t-t')/\hbar}|q'\rangle$$

$$=\int dpdp'\langle q|p\rangle\langle p|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\hat{p}^2/2m)(t-t')\right]|p'\rangle\langle p'|q'\rangle$$

$$=\int dp\langle q|p\rangle\langle p|q'\rangle\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(p^2/2m)(t-t')\right]$$

(1.7.9)

其中将动量算符记为 $\hat{p}$。利用 $\langle q|p\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipq/\hbar}$ 上式化为

$$K(q,\ q';t-t')$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dp\ \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p(q-q')-\frac{p^2}{2m}(t-t')\right]\right\}。$$

利用高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dx}{2\pi}\ e^{-ax^2+bx}=\frac{1}{\sqrt{4\pi a}}e^{b^2/4a},\qquad(1.7.10)$$

可得

$$K(q,\ q';t-t')=Ae^{iS_c/\hbar}\qquad(1.7.11)$$

其中

$$A(t-t')=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t')}},\qquad(1.7.12)$$

$$S_c=\frac{m(q-q')^2}{2(t-t')}。\tag{1 7.13}$$

注意，S_c正是一维自由粒子的经典作用量。

[例 2] 求一维谐振子的传播函数。

解：利用一维谐振子能量本征矢的完全性条件 $\sum_n |n\rangle\langle n| =1$ 可得

$$\begin{aligned}K(q,\ q',\ t-t')&=\langle q|e^{-iH(t-t')/\hbar}|q'\rangle\\&=\sum_n\langle q|n\rangle\langle n|q'\rangle e^{-iE_n(t-t')/\hbar},\end{aligned}\tag{1.7.14}$$

其中 $E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，且

$$\langle q|n\rangle e^{-iE_nt/\hbar}=\left(\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-m\omega q^2/2\hbar}$$

$$\cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,q\right)\exp\left[-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t\right]。$$

利用厄米多项式的关系式

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{1-\xi^2}}\exp\left[-\frac{(x^2+y^2-2xy\xi)}{(1-\xi^2)}\right]\\&=\exp[-(x^2+y^2)]\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\xi^n}{2^n n!}\right)H_n(x)H_n(y),\end{aligned}\tag{1.7.15}$$

可得

$$K(q,\ q',t-t')=Ae^{iS_c/\hbar},\tag{1.7.16}$$

其中

$$A(t-t')=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega(t-t')}},\tag{1.7.17}$$

$$S_c=\frac{m\omega}{2\sin\omega(t-t')}[(q^2+q'^2)\cos\omega(t-t')-2qq']。\tag{1.7.18}$$

注意，S_c是一维线性谐振子系统的经典作用量。

上述两个例子表明，量子理论中需要研究的重要的量，即跃迁矩阵元，可以通过经典作用量表示。其次，将上述例子中的式

(1.7.11)与上一节中的式(1.6.63)比较，可知传播函数与密度矩阵可以类比，因此以后我们建立的计算 K 的路径积分方法完全适用于统计物理学。

1.7.3 传播函数的路径积分公式

我们需要将前面的讨论推广到一般情况，在一般情况下，系统的哈密顿算符可能与时间有关，这时在整个时间间隔内不能将时间演化算符简单地表示为指数形式。现在我们一般地可将时间间隔 $t-t'$ 等分为 n 段，每一小间隔为 $\varepsilon=\frac{t-t'}{n}$。令 $t=t_n>t_{n-1}>t_{n-2}\cdots>t_2>t_1>t'$。利用时间演化算符的因子化特性，现在有

$$\mathscr{U}(t,t')=\mathscr{U}(t,t_{n-1})\mathscr{U}(t_{n-1},t_{n-2})\cdots\mathscr{U}(t_2,t_1)\mathscr{U}(t_1,t')。\tag{1.7.19}$$

当 n 足够大，ε 足够小时，在时间间隔 ε 内系统的哈密顿算符可认为不随时间改变。如果再利用坐标算符本征矢的完全性条件

$$\int dq\,|q\rangle\langle q|=1,\tag{1.7.20}$$

我们有

$$\begin{aligned}K(q,q';t-t')&=\langle q|\mathscr{U}(t,t')|q'\rangle\\&=\int\prod_{i=1}^{n-1}dq_i\langle q|e^{-iH\varepsilon/\hbar}|q_{n-1}\rangle\langle q_{n-1}|e^{-iH\varepsilon/\hbar}|q_{n-2}\rangle\\&\quad\cdots\langle q_1|e^{-iH\varepsilon/\hbar}|q'\rangle。\end{aligned}\tag{1.7.21}$$

上式中包含了 n 个矩阵元因子，$n-1$ 重积分。对于上式可以这样来理解，设系统(例如一个粒子)在初始时刻 t' 有坐标 q'；在时刻 t 有坐标 q。若系统是经典力学系统，则其间任何时刻 t_i 该系统有确定的坐标 q_i，如图 1.7.1(a)所示。但是对于量子力学系统，在时刻 t_i，该系统可能以一定概率分布处于各种位置，如图 1.7.1(b)～(d)所示，所以应通过积分将这样的各种可能性考虑在内。

设系统的哈密顿算符形式为

$$H(\hat{p},\hat{q},t)=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+V(\hat{q},t),\tag{1.7.22}$$

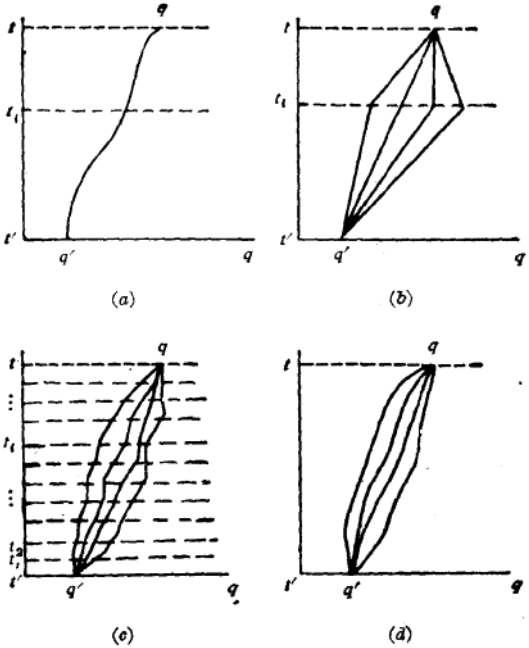

图 1.7.1 系统的可能轨迹

(a) 经典系统; (b)～(d) 量子系统

这里我们在坐标和动量算符上加以记号"∧"。现在有

$$\langle q_i|e^{-iH\varepsilon/\hbar}|q_{i-1}\rangle\simeq\langle q_i|1-i\hat{H}\varepsilon/\hbar|q_{i-1}\rangle。\qquad(1.7.23)$$

利用完全性条件$\int d\hat{p}\,|p\rangle\langle p|=1$, 以及$\langle q|p\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipq/\hbar}$, 有

$$\begin{aligned}\langle q_i|H|q_{i-1}\rangle&=\langle q_i|\frac{\hat{p}^2}{2m}|q_{i-1}\rangle+V(q_i,\,t)\langle q_i|q_{i-1}\rangle\\&=\int dp_i\langle q_i|p_i\rangle\langle p_i|q_{i-1}\rangle\Big[\frac{p_i^2}{2m}+V(q_i,\,t)\Big]\\&=\int\frac{dp_i}{2\pi\hbar}e^{ip_i(q_i-q_{i-1})/\hbar}\Big[\frac{p_i^2}{2m}+V(q_i,\,t)\Big],\end{aligned}$$

有时，也常将势函数内的坐标宗量写成对称形式$(q_i+q_{i-1})/2$。于是式(1.7.23)化为

$$\langle q_i|e^{-iH(\hat{p},\hat{q},t)\varepsilon/\hbar}|q_{i-1}\rangle = \int\frac{dp_i}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}[p_i(q_i-q_{i-1})-\varepsilon H(p_i,\ q_i,\ t)]\right\}, \tag{1.7.24}$$

其中$H(p_i,\ q_i,\ t)$是第i小段区间的经典哈密顿算符。于是传播函数或量子跃迁幅可表示为

$$K(q,\ q';\ t-t')=\lim_{n\to\infty}\int\prod_{i=1}^{n-1}dq_i\prod_{i=1}^{n}\frac{dp_i}{(2\pi\hbar)} \cdot\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}\varepsilon[p_i(q_i-q_{i-1})/\varepsilon-H(p_i,\ q_i,\ t)]\right\}。 \tag{1.7.25}$$

因为积分变量q_i和p_i是时间t的函数，所以上述对动量的n重积分，对坐标的$n-1$重积分都是泛函积分。上式常简单地记为

$$K(q,\ q';\ t-t')=\int\left[\frac{dq\,dp}{2\pi\hbar}\right]\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}dt[p\dot{q}-H(p,\ q,\ t)]\right\}。 \tag{1.7.26}$$

如果势能V与广义动量p无关，则式(1.7.25)中每一小段区间对动量的积分是高斯型积分：

$$\int\frac{dp_i}{(2\pi\hbar)}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p_i(q_i-q_{i-1})-\varepsilon\frac{p_i^2}{2m}\right]\right\} =\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m(q_i-q_{i-1})^2}{2\varepsilon}\right]。 \tag{1.7.27}$$

于是式(1.7.25)可化为

$$K(q,\ q';\ t-t')=\lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{n/2}\int\prod_{i=1}^{n-1}dq_i \cdot\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}\varepsilon\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_i-q_{i-1}}{\varepsilon}\right)^2-V(q_i,\ t)\right]\right\}。 \tag{1.7.28}$$

此结果常记为

$$K(q,\ q';\ t-t')=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2}\int[dq]$$
$$\cdot\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}d\tau\left[\frac{m}{2}\dot{q}^2-V(q,\ \tau)\right]\right\} \tag{1.7.29}$$

其中

$$[dq]=\prod_{i=1}^{n-1}\frac{dq_i}{(2\pi i\hbar\varepsilon/m)^{1/2}}。 \tag{1.7.30}$$

注意到上式指数积分号中的 $\frac{m}{2}\dot{q}^2-V=L$ 为拉氏量，$\int L\,d\tau=S$ 即为作用量。因此我们有

$$K=N\int[dq]e^{iS/\hbar}。 \tag{1.7.31}$$

从式(1.7.31)或者它的具体表式(1.7.28)可以看出，如图1.7.1所示，q_1，q_2，$\cdots q_{n-1}$ 共 $n-1$ 个积分变量的每一组值以及两端点值 $q'=q(t')$ 和 $q=q(t)$ 形成一条路径。这条路径对 K 的贡献取决于位相因子 $e^{iS/\hbar}$，其中 S 是沿这条路径的作用量。然后对各条路径的贡献求和(积分)。对于经典路径，作用量取极小值

$$\delta S=0,\ (\delta q(t')=\delta q(t)=0)。 \tag{1.7.32}$$

对于其他非经典路径，其作用量与 $\hbar$ 之比可能很大。各种非经典位相因子随不同路径急剧地改变正负号，积分或求和时对 K 的贡献强烈相消。所以重要的是经典路径及其邻近路径的贡献。

[例3] 利用路径积分公式求一维自由粒子的传播函数。

解：一维自由粒子传播子的路径积分公式为 $\left(\varepsilon=\delta t=\frac{t-t'}{n}\right)$

$$K(q,\ q';\ t-t')=\lim_{\varepsilon\to 0}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{n/2}\int dq_1dq_2\cdots dq_{n-1}$$
$$\cdot\exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\sum_{i=1}^{n}(q_i-q_{i-1})^2\right]。$$

因为

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}dq_1\exp\left\{\frac{im}{2\hbar\varepsilon}[(q_2-q_1)^2+(q_1-q')^2[\right\}$$

$$=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\cdot 2\varepsilon}\right)^{1/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot 2\varepsilon}(q_2-q')^2\right],$$

所以，若将此结果再乘以因子$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}(q_3-q_2)^2\right]$，并对$q_2$求积分，便得

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\cdot 3\varepsilon}\right)^{1/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot 3\varepsilon}(q_3-q')^2\right]。$$

以此类推，求出$n-1$重积分，最后有

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\cdot n\varepsilon}\right)^{1/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot n\varepsilon}(q_n-q')^2\right]。$$

由于$n\varepsilon=t-t'$，$q_n=q$，于是有

$$K(q,\ q';t-t')=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t')}\right)^{1/2}\exp\frac{im(q-q')^2}{2\hbar(t-t')}。$$

此结果与本节例1结果[见式(1.7.11)]相同。

1.7.4 高斯积分

为了得到更一般的结果，再一次以自由粒子为例。

[例4] 证明自由粒子传播函数的路径积分可化为如下形式：

$$K(q,\ q';t-t')=A(t-t')e^{iS_c/\hbar},\qquad(1.7.33)$$

其中S_c为经典作用量，A为与路径端点无关的函数。

解：本例将采用稳定路径，即经典路径方法。式(1.7.29)中的积分现在是

$$N\int[dq]\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}d\tau\,\frac{m}{2}\dot{q}^2\right]。\qquad(1.7.34)$$

设$q_c(\tau)$是经典路径，它是$q\sim\tau$平面上的一条直线。对于其他非经典路径，可引入一新变量$\xi(\tau)$：

$$q(\tau)=q_c(\tau)+\xi(\tau)。\qquad(1.7.35)$$

对于$\xi(\tau)$，存在如下边界条件：

$$\xi(t)=\xi(t')=0,\qquad(1.7.36)$$

且显然有$[dq]=[d\xi]$。于是式(1.7.34)可化为

$$N\int[d\xi]\exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\int_{t'}^{t}d\tau[\dot{q}_c(\tau)+\dot{\xi}(\tau)]^2\right\}。\qquad(1.7.37)$$

对于自由粒子，$q_c(\tau)=v$ 是常数，且由于

$$\int_{t'}^{t} d\tau \dot{q}_c(\tau)\dot{\xi}(\tau)=v\xi(\tau)\Big|_{t'}^{t}=0, \tag{1.7.38}$$

因此泛函积分(1.7.37)可化为

$$e^{iS_c/\hbar}N\int[d\xi]\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_{t'}^{t}d\tau\dot{\xi}^2\right], \tag{1.7.39}$$

其中 $S_c=\frac{m}{2}\dot{q}_c^2(t-t')$是自由粒子经典作用量。上述结果表明，传播函数的路径积分可分解为两个因子，一个因子与路径端点和 $t-t'$ 有关，且可表示为 $e^{iS_c/\hbar}$；另一因子与路径端点无关，仅与 $t-t'$ 有关，它可表示为

$$N\int_{\xi(t')=\xi(t)=0}[d\xi]\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_{t'}^{t}d\tau\,\dot{\xi}^2\right]\equiv A(t-t')。 \tag{1.7.40}$$

所以自由粒子传播函数的路径积分可表示为

$$K(q,\ q';t-t')=A(t-t')e^{iS_c/\hbar}, \tag{1.7.41}$$

其中归一化系数可利用组合定律式(1.7.5)求出。因为

$$\begin{aligned}A(t-t')&=K(0,\ 0,\ t-t')\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}K(0,\ q'';t-t'')K(q'',\ 0;t''-t')dq''\\&=A(t-t'')A(t''-t')\int_{-\infty}^{+\infty}dq''\\&\quad\cdot\exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\left[\frac{q''^2}{(t-t'')}+\frac{q''^2}{(t''-t')}\right]\right\},\end{aligned}$$

所以，完成积分后可得

$$A(t-t')=A(t-t'')A(t''-t')\left[i\frac{2\pi\hbar}{m}\frac{(t-t'')(t''-t')}{(t-t')}\right]^{1/2}。 \tag{1.7.42}$$

由上式可解出：

$$A(t-t')=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t')}\right)^{1/2}。 \tag{1.7.43}$$

于是我们又得到了熟知的结果。

作为更一般的情况，设拉氏量具有如下二次式形式：

$$L(q,\ \dot{q},\ t)=a(t)\dot{q}^2+b(t)q\dot{q}+c(t)q^2+d(t)\dot{q}+f(t)q+g(t)。 \tag{1.7.44}$$

相应的路径积分

$$K(q,\ q';\ t-t')=N\int[dq]\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}L(q,\ q,\ \tau)d\tau\right]$$

是高斯积分。可以证明它也具有式(1.7.41)的因子化特性。

设 $q_0(\tau)$ 是 q 和 q' 两点之间的经典路径，它满足拉氏方程

$$\frac{d}{d\tau}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\right)-\frac{\partial L}{\partial q}=0。 \tag{1.7.45}$$

相应的作用量记为 $S_0=S(q_0,\ q_0)$。作变量代换：

$$q(\tau)=q_0(\tau)+\xi(\tau)。 \tag{1.7.46}$$

因此有

$$\int L\,d\tau=S(q,\dot{q})=S(q_0+\xi,\ \dot{q}_0+\dot{\xi})$$

$$=S(q_0,\ \dot{q}_0)+\frac{1}{2}\left[\xi^2\frac{\delta^2S}{\delta q^2}+\xi\dot{\xi}\frac{\delta^2S}{\delta q\,\delta\dot{q}}+\dot{\xi}^2\frac{\delta^2S}{\delta\dot{q}^2}\right]_{\substack{q=q_0\\ \dot{q}=\dot{q}_0}} \tag{1.7.47}$$

这里因为 L 是 q 的二次式，所以台劳展开只到二次项。其次，由于对于 $q=q_0$ 和 $\dot{q}=\dot{q}_0$ 来说，S 是稳定点，所以不包含一次项。于是上述展开式中仅包含没有 ξ 和 $\dot{\xi}$ 的项以及包含 ξ^2，$\xi\dot{\xi}$ 和 $\dot{\xi}^2$ 的项，即有

$$\int_{t'}^{t}L\,d\tau=S_0+\int_{t'}^{t}d\tau[a(\tau)\dot{\xi}^2+b(\tau)\xi\dot{\xi}+c(\tau)\xi^2],$$

或

$$K(q,\ q';\ t-t')=e^{iS_0/\hbar}N\int_{\xi(t')=\xi(t)=0}[d\xi]$$

$$\cdot\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}[a(\tau)\dot{\xi}^2+b(\tau)\xi\dot{\xi}+c(\tau)\xi^2]d\tau\right\}。 \tag{1.7.48}$$

由于 $\xi(\tau)$ 路径的起点和终点相同，$\xi(t')=\xi(t)=0$，所以上式中的

路径积分因子只能是时刻 t' 和 t 的函数，或者说再由于平移不变性，它只能是 $t-t'$ 的函数。于是对于式(1.7.44)的系统，其传播函数具有如下因子化特性：

$$K(q,\ q';\ t-t')=A(t-t')e^{iS_c/\hbar}。\qquad (1.7.49)$$

[例 5] 利用式(1.7.49)求一维线性谐振子的传播函数。

解： 拉氏函数现在是

$$L=\frac{m}{2}(\dot{q}^2-\omega^2q^2)。\qquad (1.7.50)$$

其运动方程的解为

$$q_c(\tau)=c_1\cos\omega\tau+c_2\sin\omega\tau。$$

由条件 $q_c(t)=q;\ q_c(t')=q'$，可得($T\equiv t-t'$)

$$c_1=\frac{q'\sin\omega t-q\sin\omega t'}{\sin\omega T};\quad c_2=-\frac{q'\cos\omega t-q\cos\omega t'}{\sin\omega T},$$

代入 L 积分后得

$$S_c=\int_{t'}^{t}L_c\,d\tau=\frac{m\omega}{2\sin\omega T}[(q^2+q'^2)\cos\omega T-2qq'] \qquad (1.7.51)$$

因此传播函数可表示为

$$K(q,\ q';\ t-t')$$
$$=A(t-t')\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}[(q^2+q'^2)\cos\omega T-2qq']\right\}。\qquad (1.7.52)$$

由组合定律(1.7.5)并令 $q=q'=0$，可得

$$A(t-t')=A(t-t'')A(t''-t')\cdot\left[\frac{2\pi i\hbar}{m\omega}\,\frac{\sin\omega(t-t'')\sin\omega(t''-t')}{\sin\omega(t-t')}\right]^{1/2}。$$

由此可解出

$$A(t-t')=\left[\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega(t-t')}\right]^{1/2} \qquad (1.7.53)$$

此结果显然与例 2 相同。而且当 $\omega\to0$ 时便化为自由粒子情况。

利用路径积分方法精确求解传播函数相当于精确求解薛定谔方程，只有在少数情况下才能做到。在这些情况中系统的拉氏量是坐标和速度的二次函数，或者经过变换可化为二次型，从而可应用高斯积分公式。量子力学中的路径积分方法可进一步参考其他专门著作①。

习　题

1-1　导出坐标表象和动量表象中坐标算符和动量算符的(连续矩阵)矩阵元表示。

1-2　证明如下结果：

$$\langle x|\hat{x}|\alpha\rangle = x\langle x|\alpha\rangle; \qquad \langle x|\hat{p}|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\alpha\rangle;$$

$$\langle p|\hat{x}|\alpha\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\alpha\rangle; \quad \langle p|\hat{p}|\alpha\rangle = p\langle q|\alpha\rangle,$$

其中$|\alpha\rangle$为任意态矢量；$|x\rangle$为坐标算符$\hat{x}$的属于本征值为x的本征矢；$|p\rangle$为动量算符$\hat{p}$的属于本征值为p的本征矢。讨论上述结果的意义，并将上述结果推广到三维情况。

1-3　求算符$\sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$的本征值和本征矢。若电子处于自旋态$\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$，问测量$S_y=\frac{\hbar}{2}\sigma_y$时得到$\frac{\hbar}{2}$的概率是多少？

1-4　两个态矢量$|+\rangle$和$|-\rangle$形成完全集。在它们所构造的希尔伯空间中定义如下三个算符：

$$S_1=\frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-|+|-\rangle\langle+|); \quad S_2=i\frac{\hbar}{2}(-|+\rangle\langle-|+|-\rangle\langle+|);$$

$$S_3=\frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle+|-|-\rangle\langle-|)。$$

试证明它们将满足如下对易和反对易关系：

$$[S_i, S_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k; \{S_i, S_j\}=\frac{\hbar^2}{2}\delta_{ij}。$$

若定义如下两个算符：

$$S_+\equiv S_1+iS_2=\hbar|+\rangle\langle-|;$$

① 例如：R. P. Feynman and A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals", McGraw-Hill, Inc. (1965)；戴元本，《相互作用的规范理论》，科学出版社(1987)。

$$S_-\equiv S_1-iS_2=\hbar|-\rangle\langle+|,$$

问这两个算符有何特性？导出这两个算符与 S_i 的对易关系；求出算符 $S^2=S_1^2+S_2^2+S_3^2$ 的形式。

1-5 二能级系统的哈密顿算符一般可表示为

$$H=a|1\rangle\langle1|+b|2\rangle\langle2|+c|1\rangle\langle2|+d|2\rangle\langle1|,$$

其中$|1\rangle$和$|2\rangle$分别表示二能级的状态，形成正交归一集。问：H 的厄米性对系数 a、b、c、d 有何限制？求该系统的能量本征值及相应的本征矢（表示为$|1\rangle$和$|2\rangle$的线性叠加）。

1-6 计算 J_x^2 和 J_y^2 在态$|jm\rangle$中的平均值，并导出在这种状态中 J_x 和 J_y 的不确定性关系。

1-7 写出(J^2, J_z)表象中 $j=2$ 的角动量算符 J_+、J_-、J_x、J_y、J_z 和 J^2 的矩阵形式。

1-8 类似于§1.3中的例1，求泡利矩阵在 σ_y 表象中的表示。

1-9 考虑态矢量$|lm\rangle$空间中 $l=1$ 的子空间。

(1) 写出该表象中 L_x、L_y、L_z 的矩阵形式；求出相应的本征值和本征矢。

(2) 找出(L^2, L_z)表象和(L^2, L_x)表象之间的幺正变换矩阵。

(3) 求出(L^2, L_x)表象中 $\boldsymbol{L}$ 各分量及 L_+、L_- 的矩阵形式。

1-10 证明 BH 公式(1.3.34)。

1-11 证明式(1.3.35)。

1-12 化简下列关于角动量算符的乘积：

$\exp(-cJ_\pm)J_z\exp(cJ_\pm)$；　　$\exp(-cJ_z)J_\pm\exp(cJ_z)$；

$\exp(-cJ_\pm)J_\mp\exp(cJ_\pm)$，

其中 c 为实常数。

1-13 证明对于泡利矩阵 $\sigma_i(i=1、2、3)$，存在如下求积公式（$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 为任意实常数矢量）：

(1) $\mathrm{Tr}(\sigma_i\sigma_j)=2\delta_{ij}$；　$\mathrm{Tr}(\sigma_i\sigma_j\sigma_k)=2i\varepsilon_{ijk}$。

(2) $\mathrm{Tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})]=2\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}$；

$\mathrm{Tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})]=2i(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}$。

(3) $\mathrm{Tr}[\exp(i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\exp(i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})]=2\cos A\cos B-2\dfrac{\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}}{AB}\sin A\sin B$。

1-14 考虑如下定义的 2×2 矩阵：

$$U=\frac{a_0+i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{a_0-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}},$$

其中 a_0 是实常数，$\boldsymbol{a}$ 是实矢量。证明 U 是幺正、幺模(即 $\det U=1$)矩阵。

1-15 分别在薛定谔绘景和海森伯绘景中讨论下面的自旋进动问题：电子处在沿 z 轴方向的均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中，其哈密顿算符为 $H=-\frac{eB}{mc}S_z$。设 $t=0$ 时它沿正 z 轴方向极化，求 $t>0$ 时电子的自旋状态。

1-16 上题中若 $t=0$ 时电子处于 $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征值为 $\hbar/2$ 的本征态，其中 $\boldsymbol{n}$ 是 xz 平面上的一矢径方向单位矢量，该矢径与 z 轴夹角为 β。

(1) 求 $t>0$ 时该电子处于 $s_z=\hbar/2$ 态的概率。

(2) 求 S_x 的平均值与 t 的函数关系。

(3) 当 $\beta=0$ 和 $\beta=\pi/2$ 时考察上述结果。

1-17 设系统的哈密顿算符为 $H=H_0+H_1$，其中 $H_0=\hbar\omega a^+a$，

$$H_1=\frac{i}{2}\hbar\Gamma_0(e^{2i\omega t}a^2+e^{-2i\omega t}a^{+2}),$$

其中 a 和 a^+ 为玻色算符，满足对易关系 $[a,\ a^+]=1$；Γ_0 为实常数。试分别在海森伯绘景和相互作用绘景中求 t 时刻算符 $a(t)$ 的形式。

1-18 证明式(1.4.46)。

1-19 试导出海森伯绘景中的非同时性对易关系(1.4.32)和(1.4.33)。

1-20 对于任意势场中一个质量为 μ 的粒子系统，证明其坐标算符在能量表象中的矩阵元满足如下关系(Thomas-Reiche-Kuhn 求和规则)：

$$\sum_n{}'(E_n-E_m)|\langle n|x|m\rangle|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}。$$

(提示：利用基本对易关系 $[x,\ p]=i\hbar$，并采用海森伯绘景)

1-21 作为上题 TRK 求和规则的推广，试证明如下关系：

$$\sum_n{}'(E_n-E_m)|\langle n|e^{ik\cdot x}|m\rangle|^2=3\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}。$$

1-22 导出坐标算符 $\boldsymbol{x}$、动量算符 $\boldsymbol{p}$ 和角动量算符 $\boldsymbol{L}$ 在空间平移下的变换公式。

1-23 利用自旋算符 S 各分量之间的对易关系，证明算符 $U=e^{-i\alpha S_y/\hbar}$ 与 S_x 和 S_z 均反对易。

1-24 证明在沿 z-轴的转动变换下，自旋为 $1/2$ 系统的自旋算符 σ_x、σ_y 存在如下变换规律：

$$R\sigma_xR^{-1}=\sigma_x\cos\alpha+\sigma_y\sin\alpha,$$

$$R\sigma_yR^{-1}=-\sigma_x\sin\alpha+\sigma_y\cos\alpha,$$

其中 $R=e^{-i\alpha\sigma_z/2}$。

1-25 在 σ_z 表象中，σ_n 的属于本征值 $+1$ 的本征矢可表示为 $\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$。试通过适当的转动变换，导出算符 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}=\sigma_n$ 的属于本征值 $+1$ 和 -1 的本征矢矩阵形式，其中 $\boldsymbol{n}$ 是 (θ,φ) 方向的单位矢量。

1-26 $j=\frac{1}{2}$ 的欧拉转动表示为式(1.5.64)，它描写了沿某一方向 $\boldsymbol{n}$ 的轴转过角度 ϕ 的转动。求 ϕ 的值。

1-27 利用泡利矩阵特性证明：

(1) $R=\exp\left(-\frac{i}{2}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)=\cos\frac{\theta}{2}-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin\frac{\theta}{2}$,

(2) $R\boldsymbol{\sigma}R^{-1}=\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})-\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\cos\theta-\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\theta$。

1-28 对于任意角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 的系统来说，证明

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right)\boldsymbol{J}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right)$$
$$=\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J})-\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\cos\theta-(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\sin\theta。$$

(提示：对上式求二次关于 θ 的微分，建立简单的微分方程；求解；并应用无穷小变换确定积分常数)

1-29 设某系统的哈密顿算符为

$$H(t)=a_1(t)J_++a_2(t)J_0+a_3(t)J_-,$$

其中 $a_i(t)(i=1,2,3)$ 为任意时间 t 的函数；J_+、J_0、J_- 是算符，满足如下对易关系：

$$[J_+,\ J_-]=-2J_0,$$
$$[J_0,\ J_\pm]=\pm J_\pm,$$

(常称满足上述对易关系的算符 $J_\pm$ 和 J_0 为 SU(1, 1) 群生成元)。试证明该系统的时间演化算符可表示为

$$U(t,\ 0)=\exp(c_1(t)J_+)\exp(c_2(t)J_0)\exp(c_3(t)J_-),$$

并导出确定 $c_i(t)$ 的方程。

1-30 试证明关于矢量算符的式(1.5.92)对于有限转动情况依然成立。

1-31 证明任意两个矢量算符 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的标量积 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=A_xB_x+A_yB_y+A_zB_z$ 与总角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 的所有分量对易(这表明 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}$ 是标量算符)。

1-32 (1) 考虑一个由自旋为 $\frac{1}{2}$ 系统所构成的纯系综，设平均值 $\langle S_x\rangle$、$\langle S_z\rangle$ 以及 $\langle S_y\rangle$ 的符号已经知道。试证明该系综的态矢量完全确定。为什么 $\langle S_y\rangle$ 的值现在是不必要的。

(2) 考虑一个由自旋为 $\frac{1}{2}$ 系统所构成的混合系综，设系综平均 $\langle\overline{S}_x\rangle$、

$\langle \hat{S}_y \rangle$和$\langle \hat{S}_x \rangle$均已知，试构造出描写该系综的密度矩阵。

1-33 证明：一个纯系综不可能演化为一个混合系综。

1-34 证明：密度算符ρ和$1-\rho$都是正定算符(即对于任意态，它们的平均值均大于零)。

1-35 问：在由式(1 6 44)的密度矩阵所描写的状态中出现纯态$|\sigma_z=+1\rangle$和$|\sigma_z=+1\rangle$的概率各是多少？

1-36 一个处在均匀磁场$\boldsymbol{B}$中的自旋为$\frac{1}{2}$的粒子系统，温度为T。试写出该系统的密度矩阵，求出配分函数。然后求出自旋算符$\boldsymbol{S}$的平均值，并由此求出该系统的磁化率。

1-37 由方程(1 6.67)出发，求出一维自由粒子的密度算符和配分函数。

1-38 导出系统的费曼传播函数与能量本征值之间的简单关系。由一维谐振子的传播函数[式(1.7.52)]求出其能量本征值。

1-39 (1) 利用代换：$t\to -i\hbar\beta$，由路径积分计算结果(1.7 52)写出温度为$T=1/k\beta$时谐振子系统的密度矩阵$\rho(x,x')$的具体形式。

(2) 求出该系统的动能、势能和总能量平均值。

(3) 求出该系统的自由能。

(4) 讨论该系统的密度算符在高温极限和低温极限下的形式。

1-40 常力场中粒子系统的拉氏量为

$$L=\frac{m}{2}\dot{q}^2+fq。$$

试证明其传播函数为($T=t-t'$)

$$K=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2}\exp\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m(q-q')^2}{2T}+\frac{1}{2}fT(q+q')-\frac{fT^2}{24}\right]。$$

1-41 外力场$f(t)$中谐振子系统的拉氏量为

$$L=\frac{1}{2}m\dot{q}^2-\frac{1}{2}m\omega^2q^2+f(t)q。$$

试证明其传播函数为

$$K=\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2}e^{iS_c/\hbar},$$

$$\begin{aligned}S_c=\frac{m\omega}{2\sin\omega T}\Big[&(q^2+q'^2)\cos\omega T-2qq'+\frac{2q}{m\omega}\int_{t'}^{t}f(\tau)\sin\omega(\tau-t')d\tau\\&+\frac{2q'}{m\omega}\int_{t'}^{t}f(\tau)\sin\omega(t-\tau)d\tau\\&-\frac{2}{m^2\omega^2}\int_{t'}^{t}d\tau\int_{t'}^{\tau}d\tau' f(\tau)f(\tau')\sin\omega(t-\tau)\sin\omega(\tau'-t')\Big]。\end{aligned}$$

1-42 常磁场中粒子的拉氏量为

$$L=\frac{m}{2}(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)+\frac{eB}{2c}(x\dot{y}-y\dot{x})。$$

试证明其传播函数可表示为($\omega=eB/mc$)

$$K=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\left[\frac{(\omega T/2)}{\sin(\omega T/2)}\right]\exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar}\left\{\frac{(z-z')^2}{T}\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{\omega}{2}\operatorname{ctg}\frac{\omega T}{2}[(x-x')^2+(y-y')^2]+\omega(x'y-xy')\right\}\right)。$$

1-43 设系统由非线性拉氏量 $L=\frac{1}{2}f(q)\dot{q}^2$ 描述。试证明其传播函数为

$$K=N\int[dq]\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}L_{eff}\,d\tau\right),$$

其中 $L_{eff}=L+\frac{\hbar}{2i}\delta(0)\ln f(q)$，$\delta(0)\equiv 1/\varepsilon$。提示：该系统的哈密顿量可表示为 $H=\frac{1}{2}p^2[f(q)]^{-1}$，其中 $p=f(q)\dot{q}$]。

1-44 设 N 个粒子系统的拉氏量为

$$L=\frac{1}{2}\sum_{n,m}^{N}q_nM_{nm}q_m-V(q_1,\cdots,q_N)。$$

试证明其传播函数可表示为

$$K=N\int[dq]\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}L_{eff}\,d\tau\right),$$

其中 $$L_{eff}=L+\frac{\hbar}{2i}\delta(0)\ln(\det M)。$$

第二章　散射的量子理论

散射现象是自然界中的一类重要的物理现象。人们通过散射实验已经获得了许多关于微观相互作用的基本特征，以及微观粒子，如原子、原子核、质子和中子等粒子内部结构的知识。在散射过程中具有确定动量和能量的自由粒子射向靶粒子，在经历相互作用后发生偏转。相互作用常常发生在很小线度（$\sim 10^{-8}$ cm 或 10^{-13} cm）的区域，而实验中测量末态粒子的仪器又总是按放在远离这种区域之外，此时所探测的粒子也是自由粒子。所以在散射过程发生之前和之后被散射粒子都是自由粒子，散射过程实际上就是由于空间某一小区域中的相互作用而导致的被散射粒子从一种自由态到另一种自由态的跃迁过程。由于相互作用，末态粒子的动量，或许还有能量、极化状态，甚至内部组份将不同于初态，且由于量子性，这种改变具有概率性。量子散射理论的任务就是要建立起散射区相互作用的特征与末态粒子这些物理量的分布（如能谱、角分布、极化分布等）之间的联系，从而人们可以通过对这些分布的实验测量结果来推断出微观相互作用的特征或微观粒子的结构。反之，通过建立的相互作用模型可对这些分布作出预言。

本章内容主要包括：量子散射理论的格林函数法和 S 矩阵方法。这两类方法之间又密切有关。作为基础，§2.1 中介绍了定态薛定谔方程的格林函数以及戴逊展开。将这种方法应用于弹性散射，非弹性散射以及重组散射等问题分别在 §2.2、§2.3 和 §2.4 中讨论。§2.5 中介绍了一般的与时间有关的格林函数，它与定态格林函数之间存在傅里叶变换关系。§2.6 中讨论了 S 矩阵方法。作为特例，在 §2.7 中利用 S 矩阵在角动量表象中的表示导出了分波法。最后在 §2.8 中介绍了处理存在两类相互作用时的散射

问题以及奇变波近似，§2.9中介绍了应用较广的程函近似方法。

§2.1 定态格林函数

作为基础，本节先介绍定态薛定谔方程的两类格林算符 $G^{\pm}(E)=\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}$，以及它在坐标表象中的矩阵元 $G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';E)=\left\langle \boldsymbol{x}\left|\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}\right|\boldsymbol{x}'\right\rangle$，后者可视为变量 $\boldsymbol{x}$ 的函数，并称为定态格林函数。

1.1.1 李普曼-许温格方程

在薛定谔绘景中，确定状态随时间变化的动力学方程是关于态矢量 $|\psi(t)\rangle$ 的薛定谔方程。当势场 V 与时间 t 无关时，态矢量可记为

$$|\psi(t)\rangle=|\psi(0)\rangle e^{-iEt/\hbar}, \tag{2.1.1}$$

其中 $|\psi(0)\rangle\equiv|\psi\rangle$ 满足定态薛定谔方程

$$(H_0+V)|\psi\rangle=E|\psi\rangle。 \tag{2.1.2}$$

这里我们已经认为，系统的哈密顿算符可表示为

$$H=H_0+V, \tag{2.1.3}$$

且 H_0 的本征值问题可严格求解，并设它的本征值为 E_n 的本征矢为 $|\varphi_n\rangle$，即

$$H_0|\varphi_n\rangle=E_n|\varphi_n\rangle。 \tag{2.1.4}$$

现将定态薛定谔方程(2.1.2)记为

$$(E-H_0)|\psi\rangle=V|\psi\rangle, \tag{2.1.5}$$

并定义一个与此式相对应的算符 $G_0(E)$，它满足如下方程：

$$(E-H_0)G_0(E)=1。 \tag{2.1.6}$$

形式上由式(2.1.6)可得

$$G_0(E)=\frac{1}{E-H_0}。 \tag{2.1.7}$$

应当指出，由式(2.1.6)得到式(2.1.7)时必须要求算符 $E-H_0$ 没

有零点，或者说算符 $1/(E-H_0)$ 没有奇性。但是格林算符在能量实轴上其值等于 H_0 的本征值的那些点上确实存在奇性。为此，可采用解析延拓的方法将 E 延拓到整个复平面，然后将奇点从实轴上移去。这一手续相当于在式(2.1.7)的分母中增加或减去一个很小的虚数。因此有意义的格林算符是

$$G_0^{\pm}(E)=\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}。\tag{2.1.8}$$

当然，在全部问题求解后，应令 $\varepsilon\to 0$，因为任何物理系统的能量是实数。

利用上述具有确定意义的格林算符，可得到非齐次方程(2.1.5)的两类解：

$$\begin{aligned}|\psi^{\pm}\rangle&=|\varphi\rangle+G_0^{\pm}(E)V|\psi^{\pm}\rangle\\&=\left|\varphi\rangle+\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}V\right|\psi^{\pm}\rangle。\end{aligned}\tag{2.1.9}$$

其中 $|\varphi\rangle$ 是 $V=0$ 时薛定谔方程(2.1.4)的通解。这方程的正确性很容易看出：将算符 $E-H_0$ 作用于式(2.1.9)等号两边，利用式(2.1.4)和(2.1.6)，便得式(2.1.2)。式(2.1.9)常称为李普曼-许温格(Lippmann-Schwinger)方程，是我们以后讨论散射问题的出发点。

式(2.1.5)和(2.1.6)在坐标表象中的形式是

$$[E-H_0(\boldsymbol{x})]\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle=V(\boldsymbol{x})\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle,\tag{2.1.10}$$

$$[E-H_0(\boldsymbol{x})]G_0^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';E)=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),\tag{2.1.11}$$

其中 $\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle$ 由式(2.1.9)可表示为

$$\langle\boldsymbol{x}|\psi^{\pm}\rangle=\langle\boldsymbol{x}|\varphi\rangle+\int d\boldsymbol{x}'G_0^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';E)\langle\boldsymbol{x}'|V|\psi^{\pm}\rangle,\tag{2.1.12}$$

而

$$G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';E)=\left\langle\boldsymbol{x}\left|\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}\right|\boldsymbol{x}'\right\rangle\tag{2.1.13}$$

是格林算符 $G_0^{\pm}(E)$ 在坐标表象中的矩阵元，称为格林函数。其中 $\boldsymbol{x}$ 可视为变量，$\boldsymbol{x}'$ 和 E 为参量。式(2.1.10)和(2.1.11)中的

$\boldsymbol{H}_0(\boldsymbol{x})$是作用于变量$\boldsymbol{x}$的微分算符，例如，若$H_0$是自由粒子哈密顿算符，$H_0(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$。

如果把式(2.1.10)中右侧的量$V(\boldsymbol{x})\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle$看作“源”，则式(2.1.11)表明，相应的格林函数就是点源所激发的场，该点源位于$\boldsymbol{x}'$处，总荷为1个单位。人们也常把式(2.1.12)称为式(2.1.10)的“形式解”，因为这实际上并非一个“解”，而是一个积分方程，未知量$\langle\boldsymbol{x}|\psi^{\pm}\rangle$包含在积分算符内。所以上述手续表明，利用相应的格林函数可将微分方程转化为积分方程形式。以后将会看到，利用积分方程形式可方便地采用迭代法。

2.1.2 自由粒子格林函数

上节的讨论表明，求解存在V的薛定谔方程解的问题可转化为先求解格林函数的问题。为了求出格林函数，可采用本征函数展开法。利用H_0本征矢集的完全性条件：$\sum_n|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|=1$，式(2.1.13)可化为(暂略去$\pm i\varepsilon$)

$$G_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';E)=\sum_{n,m}\langle\boldsymbol{x}|\varphi_n\rangle\left\langle\varphi_n\left|\frac{1}{E-H_0}\right|\varphi_m\right\rangle\langle\varphi_m|\boldsymbol{x}'\rangle$$

$$=\sum_n\frac{\langle\boldsymbol{x}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\boldsymbol{x}'\rangle}{E-E_n}。\qquad(2.1.14)$$

对于自由粒子，量子数n就是波矢量$\boldsymbol{k}$，记$\langle\boldsymbol{x}|\varphi_k\rangle\equiv\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle$，则有

$$\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle\equiv\varphi_k(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}。\qquad(2.1.15)$$

在式(2.1.14)中代入式(2.1.15)，并记$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$，$E_n\to E_{k'}=\frac{\hbar^2k'^2}{2m}$，再将求和改为积分，便得

$$G_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';E)=\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{k}'\frac{e^{i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}}{k^2-k'^2}$$

$$=\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{\infty}k'^2dk'\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-1}^{+1}d(\cos\theta)\frac{e^{ik'|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|\cos\theta}}{k^2-k'^2}$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi^2 i|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k'dk'}{k^2-k'^2} \exp(ik'|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|)。 \quad (2.1.16)$$

上述被积函数存在奇点。为了进一步计算这个积分，采用解析延拓方法，将 k' 扩展到整个复平面，然后通过选取特定的积分路径，绕过极点，利用留数定理，求出积分。存在奇点的复变函数的积分与积分路径的选择有关，选择不同路径，有不同的结果。对于上式最后的积分，可选取两种独立的积分路径，如图 2.1.1 所示。当取路径 C_1 时，利用留数定理可得

$$G_0^+(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; E) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi^2 i|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \int_{C_1} \frac{k'dk'}{k^2-k'^2} e^{ik'|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}。 \quad (2.1.17)$$

当取 C_2 时，可得

$$G_0^-(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; E) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{-ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}。 \quad (2.1.18)$$

从上述结果可以看出，G_0^+ 与一个中心在 $\boldsymbol{x}'$ 处的出射球面波相联系；G_0^- 与入射球面波相联系。所以常称 G_0^+ 为“出射格林函

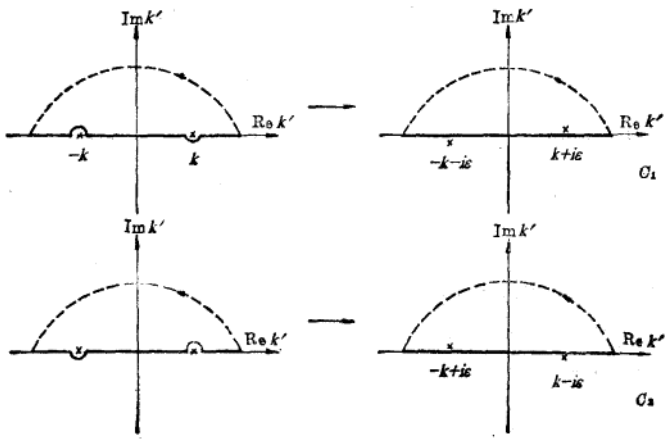

图 2.1.1

数"；G_0^- 为"入射格林函数"。究竟取何种解，应视具体情况。对于单个中心的势场所引起的散射问题，应取 G_0^+。

上面取不同路径绕开极点的办法与将极点从实轴上移去的手续等价。如图2.1.1中取 C_1 回路等价于如下代换：$k \to k + i\varepsilon$，或 $k^2 \to k^2 + i\varepsilon$（$\varepsilon$ 为无穷小正数）；取 C_2 回路则等价于作代换：$k \to k - i\varepsilon$ 或 $k^2 \to k^2 - i\varepsilon$。在这一见解下，有意义的格林函数为

$$G_0^{\pm}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', E) = \sum_n \frac{\langle \boldsymbol{x} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \boldsymbol{x}' \rangle}{E - E_n \pm i\varepsilon}$$

$$= \left\langle \boldsymbol{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \boldsymbol{x}' \right\rangle, \qquad (2.1.19)$$

这就是式(2.1.13)，或式(2.1.8)。

最后指出，由于 H_0 是厄米算符，两类格林算符存在如下关系：

$$G_0^+(E) = (G_0^-(E))^+。 \qquad (2.1.20)$$

两类格林函数存在如下关系

$$G_0^+(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; E) = G_0^{-*}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}; E) \qquad (2.1.21)$$

2.1.3 玻恩展开

由李普曼-许温格方程

$$|\psi^{\pm}\rangle = |\varphi\rangle + G_0^{\pm}|\psi^{\pm}\rangle, \qquad (2.1.22)$$

利用迭代法立即可以得到如下展开

$$|\psi^{\pm}\rangle = |\varphi\rangle + G_0^{\pm}V|\varphi\rangle + G_0^{\pm}VG_0^{\pm}V|\varphi\rangle + \cdots, \qquad (2.1.23)$$

这个展开常称为玻恩-戴逊展开(Born-Dyson expansion)，或玻恩展开。在坐标表象中，上述玻恩展开可表示为

$$\psi^{\pm}(\boldsymbol{x}) = \varphi(\boldsymbol{x}) + \int d\boldsymbol{x}' G_0^{\pm}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; E) V(\boldsymbol{x}') \varphi(\boldsymbol{x}')$$

$$+ \iint d\boldsymbol{x}' d\boldsymbol{x}'' G_0^{\pm}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; E) V(\boldsymbol{x}')$$

$$\cdot G_0^{\pm}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}''; E) V(\boldsymbol{x}'') \varphi(\boldsymbol{x}'') + \cdots, \qquad (2.1.24)$$

上式展开式等号右边的第二项将给出一级近似，第三项给出二级近似，等等。

最后不难证明，展开(2.1.23)也可记为

$$|\psi^{\pm}\rangle=\frac{1}{1-G_0^{\pm}(E)V}|\varphi\rangle。\qquad(2.1.25)$$

2.1.4 格林函数的戴逊方程

已知格林函数，在势场 V 作用下粒子状态的波函数可通过求解李普曼-许温格方程，或利用玻恩展开得到。所以在许多情况下，人们感兴趣的常常是格林函数。

设 G_0 和 G 分别满足如下方程：

$$(E-H_0)G_0(E)=1,\qquad(2.1.26)$$

$$(E-H)G(E)=1,\qquad(2.1.27)$$

且

$$H=H_0+V,\qquad(2.1.28)$$

则有

$$G_0(E)=\frac{1}{E-H_0},\quad G(E)=\frac{1}{E-H}。\qquad(2.1.29)$$

应该指出，上述式子中的 G_0 代表 G_0^+ 或 G_0^-；G 则代表 G^+ 或 G^-。式(2.1.29)的分母中均包含有小虚数项 $\pm i\varepsilon$，因此它们都是具有确定意义的算符。

可以证明：

$$G=G_0+G_0VG。\qquad(2.1.30)$$

只要将算符 $E-H_0$ 自左作用于上式等号两边，利用式(2.1.26)，便可得到式(2.1.27)。如果 H_0 是自由粒子哈密顿算符，G_0 就是自由粒子定态格林算符。所以式(2.1.30)就是已知 G_0 确定势场 V 中描述粒子的格林算符 G 的积分方程。戴逊方程(2.1.30)的展开为

$$G=G_0+G_0VG_0+G_0VG_0VG_0+\cdots。\qquad(2.1.31)$$

式(2.1.30)或(2.1.31)也可记为

$$G=\frac{1}{1-G_0V}G_0。\qquad(2.1.32)$$

读者可尝试写出上述所有算符公式在坐标表象中的形式。上述引进更一般的格林函数(严格来说，这里应说格林算符)是重要的。格

林函数法不仅可应用于以薛定谔方程为基础的非相对论性量子理论，而且还可应用于相对论性量子理论和量子场论，在这些情况下，坐标 $\boldsymbol{x}$ 不再是力学量，它与时间 t 一样是参量。这时不再存在坐标表象。

§2.2 弹性散射的玻恩近似

上一节中利用格林函数将薛定谔方程转化为李普曼-许温格积分方程，然后得到了玻恩展开。现在我们将这一理论应用于弹性散射。这里所说的弹性散射，是指粒子在被散射前后其能量和动量的值保持不变，仅改变了动量的方向。

2.2.1 散射幅

现在我们讨论与时间无关的势场所引起的散射。我们要解决的问题是：已知自由粒子的初态为 $\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$，计算经历势场作用后在无穷远处的末态。

将自由粒子出射格林函数式 (2.1.17) 代入李普曼-许温格方程(2.1.12)，有

$$\langle \boldsymbol{x}|\psi^+\rangle = \langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\int d\boldsymbol{x}' \frac{e^{ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\langle \boldsymbol{x}'|V|\psi^+\rangle, \tag{2.2.1}$$

其中积分遍及势场区域。由于我们总是在远离势场的区域($r \gg r'$，其中 $r \equiv |\boldsymbol{x}|$，$r' \equiv |\boldsymbol{x}'|$)对被散射粒子末态进行观察和分析，所以重要的是需要考察上式在 $r \gg r'$ 处的渐近行为。根据物理分析，在无穷远处，$r \to \infty$，$\psi^+(\boldsymbol{x})$ 中应包含两个部份：原来的入射波 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 以及出射球面波，即散射波 $\psi_{sc}(\boldsymbol{x})$：

$$\begin{aligned}\psi^+(\boldsymbol{x}) &\overset{r\gg r'}{=} \varphi(\boldsymbol{x}) + \psi_{sc}(\boldsymbol{x}) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left(e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}\right),\end{aligned} \tag{2.2.2}$$

其中 $f(\theta, \varphi)$ 为散射波振幅，称为散射幅。当取入射波方向为球坐标极轴 z 的方向时，如果势场是有心场，则整个系统具有轴对称性，此时 f 仅与极角 θ 有关，而与方位角 φ 无关。

现在来考察式(2.2.1)的渐近形式，然后与式(2.2.2)比较，得到散射幅 f 的计算公式。因为

$$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'| = (r^2+r'^2-2\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}')^{1/2} \simeq r\left(1-2\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}'}{r}\right)^{1/2}$$

$$\simeq r\left(1-\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}'}{r}\right) = r-\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{x}',$$

其中 $\boldsymbol{e}_r=\dfrac{\boldsymbol{x}}{r}$ 为径向单位矢量。于是当 $r\gg r'$ 时，有

$$\frac{e^{ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \simeq \frac{e^{ikr}}{r}e^{-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}'}, \tag{2.2.3}$$

其中 $\boldsymbol{k}'=k\boldsymbol{e}_r$。将此结果代入式(2.2.1)，有

$$\langle\boldsymbol{x}|\psi^+\rangle \overset{r\gg r'}{=} \langle\boldsymbol{x}|\varphi\rangle - \left(\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\int d\boldsymbol{x}'e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}'}\langle\boldsymbol{x}'|V|\psi^+\rangle\right)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{2.2.4}$$

比较式(2.2.2)与(2.2.4)，便得到确定散射幅的公式

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\int d\boldsymbol{x}'\frac{e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}'}}{(2\pi)^{3/2}}\langle\boldsymbol{x}'|V|\psi^+\rangle$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle\boldsymbol{k}'|V|\psi^+\rangle, \tag{2.2.5}$$

其中 $\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}'\rangle \equiv \dfrac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}}$。上述结果表明，散射幅决定于相互作用势能 V 在平面波态 $|\boldsymbol{k}'\rangle$ 与散射态 $|\psi^+\rangle$ 之间的矩阵元。不过应当指出，尽管式(2.2.5)是严格结果，但并不是显解，因为 $|\psi^+\rangle$ 并不知道，而且正是我们所要寻求的解。

在进一步讨论散射幅之前，我们先来考察散射幅与实验上的可测量——微分散射截面之间的关系。

2.2.2 微分散射截面

微分散射截面定义为：入射粒子流密度为一个单位时，在沿 (θ, φ) 方向的立体角元 $d\Omega$ 中，单位时间内出射的粒子数。这些入

射和出射粒子数可通过按置在各方向上的粒子计数器进行测量，所以微分截面是一种实验上可直接测量的量。根据上述定义，微分截面可记为

$$d\sigma=\frac{j_r r^2 d\Omega}{|\boldsymbol{j}_0|}, \tag{2.2.6}$$

其中 $\boldsymbol{j}_0$ 为入射粒子数密度；j_r 为沿径向方向出射的粒子流密度。利用量子力学流密度公式，有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}_0&=\frac{\hbar}{2i\mu}[\varphi_k^*(\boldsymbol{x})\nabla\varphi_k(\boldsymbol{x})-\varphi_k(\boldsymbol{x})\nabla\varphi_k^*(\boldsymbol{x})]\\&=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\hbar\boldsymbol{k}}{\mu},\end{aligned} \tag{2.2.7}$$

$$\begin{aligned}j_r&=\frac{\hbar}{2i\mu}\left(\psi_{sc}^*\frac{\partial\psi_{sc}}{\partial r}-\psi_{sc}\frac{\partial\psi_{sc}^*}{\partial r}\right)\\&=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\hbar k}{\mu r^2}|f(\theta,\varphi)|^2。\end{aligned} \tag{2.2.8}$$

将上述结果代入式(2.2.6)，可得

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta,\varphi)|^2, \tag{2.2.9}$$

这就是弹性散射情况下微分截面与散射幅的关系式。

最后指出，由定义式(2.2.6)可以看出微分截面的量纲为面积量纲，故名。

2.2.3 一级玻恩近似

在散射幅的公式(2.2.5)中，$|\psi^+\rangle$是未知态矢量。为了计算散射幅，需作进一步处理。

当相互作用 V 不很强时，式(2.2.5)中可取如下近似：

$$\langle\boldsymbol{x}|\psi^+\rangle\simeq\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}。 \tag{2.2.10}$$

这一近似称为一级玻恩近似，此时的散射幅为

$$\begin{aligned}f^{(1)}(\theta,\varphi)&=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle\boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle\\&=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d\boldsymbol{x}e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}V(\boldsymbol{x})。\end{aligned} \tag{2.2.11}$$

可见，一级玻恩近似下，散射幅决定于 V 在两个平面波态 $|\boldsymbol{k}\rangle$ 和 $|\boldsymbol{k}'\rangle$ 之间的矩阵元。由于 V 的作用，使初态平面波态 $|\boldsymbol{k}\rangle$ 改变为沿径向方向的平面波态 $|\boldsymbol{k}'\rangle\equiv|k\boldsymbol{e}_r\rangle$，即球面波态在 $r\to\infty$ 时的渐近态。在这种弹性散射过程中，粒子的动量方向有了改变($\boldsymbol{k}'\neq\boldsymbol{k}$)，但动量的值(或能量值)并未改变。

式(2.2.11)还可记为

$$f^{(1)}(\theta,\varphi)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}V(\boldsymbol{q}),$$

$$V(\boldsymbol{q})\equiv(2\pi)^3\langle\boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle=\int e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}V(\boldsymbol{x}),\qquad(2.2.12)$$

$$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}。$$

这表明，从数学上说，一级玻恩近似散射幅取决于相互作用势能的福里叶变换 $V(\boldsymbol{q})$，而其中的福里叶变量是粒子散射前后动量的改变量。

在球对称势情况下：$V(\boldsymbol{r})=V(r)$，有

$$V(\boldsymbol{q})=V(q)=\frac{4\pi}{q}\int_0^\infty dr\,rV(r)\sin(qr),\qquad(2.2.13)$$

且因

$$q=|\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}|=2k\sin\frac{\theta}{2},\qquad(2.2.14)$$

所以 $V(q)$ 仅仅是散射角 θ 的函数，与 φ 无关。因此在有心势情况下，微分截面可表示为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)|^2=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2|V(q)|^2。\qquad(2.2.15)$$

[例 1] 在一级玻恩近似下，求汤川势(即屏蔽库仑势)、高斯势、有限深球方阱势等情况下的散射截面。

解：(1) 汤川势 $V(r)=(\alpha/r)e^{-r/a}$

其福里叶变换为 $V(q)=\dfrac{4\pi a^2\alpha}{(q^2a^2+1)}$，所以有

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=4a^2\left(\frac{\alpha ma}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{(q^2a^2+1)^2},\qquad(2.2.16)$$

$$\sigma=16\pi a^2\left(\frac{\alpha m a}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{(4k^2a^2+1)}\text{。}\qquad(2.2.17)$$

当 $\frac{1}{a}\to 0$，汤川势便化为库仑势。若再令 $\alpha=Z_1Z_2e^2$，便得

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{Z_1Z_2e^2}{4E}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}},\qquad(2.2.18)$$

其中 $E=\frac{1}{2}mv^2$ 是电荷分别为 Z_1e 和 Z_2e 的两个粒子的相对动能。式(2.2.18)就是著名的卢瑟福公式。

(2) 高斯势 $V(r)=V_0e^{-r^2/a^2}$

因为 $V(q)=(2\pi)^{3/2}a^3V_0e^{-q^2a^2/4}$，所以

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{1}{4}\pi a^2\left(\frac{mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^2e^{-q^2a^2/2},\qquad(2.2.19)$$

$$\sigma=\frac{\pi^2}{2k^2}\left(\frac{mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^2(1-e^{-2k^2a^2})\text{。}\qquad(2.2.20)$$

(3) 球方阱势 $V=-V_0(r\ll a);\ V=0(r>a)$

$$V(q)=-\frac{4\pi V_0}{q^2}\left[\frac{\sin(qa)}{q}-a\cos(qa)\right],$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=4a^2\left(\frac{mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^2\frac{[\sin(qa)-qa\cos(qa)]^2}{(qa)^6},\qquad(2.2.21)$$

$$\sigma=\frac{2\pi}{k^2}\left(\frac{mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^2\left[1-\frac{1}{(2ka)^2}+\frac{\sin 4ka}{(2ka)^3}-\frac{\sin^2 2ka}{(2ka)^4}\right]\text{。}\qquad(2.2.22)$$

在极限情况下，有

$$\sigma=\frac{16\pi a^2}{9}\left(\frac{mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^2\quad\text{当 } ka\ll 1\text{ 时，}$$

$$\sigma=\frac{2\pi}{k^2}\left(\frac{mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^2\quad\text{当 } ka\gg 1\text{ 时。}$$

2.2.4 高次玻恩近似

将散射态 $|\psi^+\rangle$ 的玻恩展开式(2.1.23) 代入散射幅公式 (2.2.5)，便得到散射幅的各级玻恩展开($|\varphi\rangle\equiv|\boldsymbol{k}\rangle$)：

$$f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle \boldsymbol{k}'|(V+VG_0^+V+VG_0^+VG_0^+V+\cdots)|\boldsymbol{k}\rangle, \tag{2.2.23}$$

于是有

$$f^{(1)} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle \boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle, \tag{2.2.24}$$

$$f^{(2)} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle \boldsymbol{k}'|VG_0^+(E)V|\boldsymbol{k}\rangle, \tag{2.2.25}$$

$$\cdots\cdots,$$

式(2.2.24)就是一级玻恩近似散射幅。式(2.2.25)给出了二级玻恩近似结果,它在坐标表象中的形式为

$$\begin{aligned} f^{(2)}(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\int d\boldsymbol{x}'\int d\boldsymbol{x}\langle \boldsymbol{k}'|\boldsymbol{x}'\rangle \\ &\quad \cdot V(\boldsymbol{x}')\langle \boldsymbol{x}'|G_0^+(E)|\boldsymbol{x}\rangle V(\boldsymbol{x})\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\boldsymbol{x}'\int d\boldsymbol{x}e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}}V(\boldsymbol{x}') \\ &\quad \cdot G_0^+(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}; E)V(\boldsymbol{x})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}。 \end{aligned} \tag{2.2.26}$$

上述结果可这样来解释:$\boldsymbol{k}$ 方向的入射波在 $\boldsymbol{x}$ 点处受到势场 $V(\boldsymbol{x})$ 的作用,然后通过自由粒子格林函数传递到 $\boldsymbol{x}'$ 处,在该处又受到该处势场 $V(\boldsymbol{x}')$ 的作用,从而被散射到 $\boldsymbol{k}'$ 方向。所以,二级玻恩幅包含了二次散射过程的贡献。类似地,三级玻恩幅包含了三次散射过程的贡献。

*[例 1] 电子被屏蔽库仑势弹性散射,计算微分截面,精确至玻恩二级近似。

解:汤川势或屏蔽库仑势 $V(r)=(\alpha/r)e^{-r/a}$ 的动量表示为

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}}V(r)d\boldsymbol{x} \\ &= \frac{\alpha}{2\pi^2[a^{-2}+(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')^2]}。 \end{aligned} \tag{2.2.27}$$

一级玻恩近似散射幅为

$$f^{(1)}=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2(\alpha^{-2}+q^2)}。\qquad(2.2.28)$$

二级玻恩近似散射幅为

$$f^{(2)}(\boldsymbol{k}',\ \boldsymbol{k})=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\int d\boldsymbol{k}''d\boldsymbol{k}'''\langle\boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}''\rangle$$
$$\cdot\langle\boldsymbol{k}''|G_0^+|\boldsymbol{k}'''\rangle\langle\boldsymbol{k}'''|V|\boldsymbol{k}\rangle,$$

因为
$$\langle\boldsymbol{k}''|G_0^+|\boldsymbol{k}'''\rangle=\left\langle\boldsymbol{k}''\left|\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}\right|\boldsymbol{k}'''\right\rangle$$
$$=\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{k^2-k''^2+i\varepsilon}\delta_{\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{k}'''},$$

所以

$$f^{(2)}(\boldsymbol{k}',\ \boldsymbol{k})=-\frac{2m^2\alpha^2}{\pi^2\hbar^4}$$
$$\cdot\int\frac{d\boldsymbol{k}''}{[\alpha^{-2}+(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}'')^2][\alpha^{-2}+(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'')^2](k^2-k''^2+i\varepsilon)}。\qquad(2.2.29)$$

为了对 $\boldsymbol{k}''$ 空间角度积分，采用费曼(Feynman)积分公式：

$$\frac{1}{AB}=\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}d\mu\left[A\frac{(1+\mu)}{2}+B\frac{(1-\mu)}{2}\right]^{-2}。\qquad(2.2.30)$$

若令
$$A=\alpha^{-2}+(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}'')^2,\ B=\alpha^{-2}+(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'')^2,$$

则式(2.2.29)中的积分可化为($k=k'$)

$$I=\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}d\mu\int d\boldsymbol{k}''\frac{1}{(\alpha^{-2}+k^2+k''^2-2\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{P})^2(k^2-k''^2+i\varepsilon)},$$

其中
$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{k}\frac{(1-\mu)}{2}+\boldsymbol{k}'\frac{(1+\mu)}{2}。$$

上式对 $d\Omega_{\boldsymbol{k}''}$ 积分是平凡的，我们可得

$$I=\pi\int_{-1}^{+1}d\mu\int_{-\infty}^{+\infty}dk''$$
$$\cdot\frac{k''^2}{(k^2-k''^2+i\varepsilon)(k''^2+\alpha^{-2}+k^2-2k''P)(k''^2+\alpha^{-2}+k^2+2k''P)}$$
$$=-2i\pi^2k\int_0^1d\mu\frac{1}{(f^2-k^2q^2\mu^2)}$$

$$-2\pi^2 a^{-2}\int_0^1 d\mu\,\frac{1}{(f^2-k^2q^2\mu^2)(4a^{-2}+q^2-q^2\mu^2)^{1/2}},$$

其中

$$f^2=a^{-4}+4a^{-2}k^2+k^2q^2。\tag{2.2.31}$$

上式第二步推导中利用了留数定理，选取 k'' 复平面上环绕上半平面的围线作为积分回路。积分 I 中最后对 $d\mu$ 的积分又是平凡的。因此最后可得

$$f^{(2)}(\boldsymbol{k}',\ \boldsymbol{k})=\frac{2m^2\alpha^2}{\hbar^4 qf}\left[2\,\mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{q}{2fa}\right)+i\ln\left(\frac{f+kq}{f-kq}\right)\right]。\tag{2.2.32}$$

注意到 $f^{(1)}$ 为实数，因此微分截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f^{(1)}+f^{(2)}|^2=|f^{(1)}|^2+f^{(1)}\cdot 2\mathrm{Re}f^{(2)}$$

$$=\frac{4m^2\alpha^2}{\hbar^4(a^{-2}+q^2)^2}+\frac{16m^3\alpha^3}{\hbar^6 qf(a^{-2}+q^2)}\,\mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{q}{2fa}\right)。\tag{2.2.33}$$

2.2.5 玻恩近似的条件

现在对玻恩近似适用范围作简单的讨论。设 a 为势场的线度，并设波长与 a 相比很小，即 $ka\ll 1$，式(2.2.32)中反正切符号中的量因此可作小量处理。于是从数量级来看，二级玻恩幅与一级玻恩幅之比为

$$\frac{f^{(2)}}{f^{(1)}}\sim\frac{m\alpha}{\hbar^2 k^2 a}\cdot\frac{a^{-2}+q^2}{4a^{-2}+q^2}\sim\frac{\alpha}{aE},\tag{2.2.34}$$

一级玻恩近似的条件是 $f^{(2)}/f^{(1)}\ll 1$，即

$$\frac{\alpha}{aE}\ll 1。\tag{2.2.35}$$

由于 α/a 大致可视为汤川势 V 的强度的量度，式(2.2.35)于是可表示为

$$V\ll E。\tag{2.2.36}$$

这表明，即使 V 不很弱，但只要入射粒子的能量足够高，上式也可满足。所以，玻恩近似可应用于高能散射过程。入射粒子能量愈高，一级玻恩近似愈精确。

§2.3 非弹性散射

现在讨论一个粒子与一个复合系统(如一个原子)的非弹性散射，这时可能存在能量交换，入射粒子的动量 $\boldsymbol{k}_a$ 与散射粒子动量 $\boldsymbol{k}_b$ 不仅方向不同，而且数值也不相等。与此同时，复合系统内部状态可能发生变化，例如原子从基态跃迁到激发态。

2.3.1 非弹性散射的一般描述

描写复合系统 A 的哈密顿算符设为 $H(\xi)$；粒子与系统 A 之间的相互作用势能设为 $V(\boldsymbol{x}, \xi)$。粒子与系统 A 的总哈密顿算符的本征方程于是可表示为

$$\left(E_a - H(\xi) + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\langle \boldsymbol{x}\xi|\psi\rangle = V(\boldsymbol{x}, \xi)\langle \boldsymbol{x}\xi|\psi\rangle, \tag{2.3.1}$$

其中 E_a 为总能量，ξ 为系统 A 的内部坐标，$\boldsymbol{x}$ 为粒子与系统 A 的相对坐标。

设 $\varphi_b(\xi) \equiv \langle \xi|\varphi_b\rangle$ 和 ε_b 是 $H(\xi)$ 的本征函数和本征值，因此，算符

$$H_0 \equiv H(\xi) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \tag{2.3.2}$$

的本征值为

$$E_{bq} = \varepsilon_b + \frac{\hbar^2 q^2}{2m}, \tag{2.3.3}$$

其中 $\boldsymbol{q}$ 为粒子的相对动量。相应的本征函数是

$$\Phi_{bq}(\boldsymbol{x}, \xi) = \varphi_b(\xi)\frac{e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^{3/2}}。 \tag{2.3.4}$$

这里已经考虑到，由于 H_0 中不包含粒子和系统 A 之间的相互作用能，所以它的本征态简单地就是 $H(\xi)$ 的本征函数和 $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ 的本征函数之积。Φ_{bq} 的完全性条件为

$$\sum_b \int d\boldsymbol{q}\,|\Phi_{bq}\rangle\langle\Phi_{bq}| = 1。 \tag{2.3.5}$$

上式在$(\boldsymbol{x}, \xi)$表象中可表示为

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\sum_b \varphi_b(\xi)\varphi_b^*(\xi')\int d\boldsymbol{q}e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\delta(\xi-\xi')。 \tag{2.3.6}$$

现在来考察总系统从初态

$$\Phi_a\equiv\Phi_{ak_a}=\varphi_a(\xi)\frac{e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^{3/2}} \tag{2.3.7}$$

跃迁到末态

$$\Phi_b\equiv\Phi_{bk_b}=\varphi_b(\xi)\frac{e^{i\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^{3/2}} \tag{2.3.8}$$

的情况。我们的目的是要得到计算非弹性散射幅的公式。

在以后的讨论中，还应注意到能量守恒的要求。粒子和系统 A 的初态总能量为 $E_a=\varepsilon_a+\frac{\hbar^2k_a^2}{2m}$；末态总能量为 $E_b=\varepsilon_b+\frac{\hbar^2k_b^2}{2m}$，则能量守恒定律要求下式成立：

$$\frac{\hbar^2k_b^2}{2m}=\varepsilon_a-\varepsilon_b+\frac{\hbar^2k_a^2}{2m}。 \tag{2.3.9}$$

为了保证 k_b 为实数，要求 $\varepsilon_a-\varepsilon_b+\frac{\hbar^2k_a^2}{2m}\geqslant 0$。这是“非弹性道”开放的条件。否则非弹性道是关闭的，仅“弹性道”开放。这时只能发生弹性散射，被散射粒子在散射过程发生之前和之后的能量和动量的值保持不变；系统 A 仍处于初态。

2.3.2 确定末态的积分方程

从弹性散射的讨论中已经知道，为了得到散射幅公式，最好先将有关的薛定谔方程改写为李普曼-许温格方程。为此，可将式(2.3.1)右侧因子视为“源”，与该非齐次微分方程相应的格林函数所满足的方程为

$$(E_a-H_0)G^+(\boldsymbol{x}\xi,\ \boldsymbol{x}'\xi';E_a)=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\delta(\xi-\xi')。 \tag{2.3.10}$$

此式的形式解为

$$G^+=\frac{\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\delta(\xi-\xi')}{E_a-H_0+i\varepsilon}。\tag{2.3.11}$$

利用完全性条件(2.3.6),上式可记为

$$G^+=\sum_b g_b^+$$

$$g_b^+=\frac{1}{(2\pi)^3}\varphi_b(\xi)\varphi_b^*(\xi')\int\frac{e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}}{E_a-E_{bq}+i\varepsilon}\,d\boldsymbol{q}。\tag{2.3.12}$$

因为

$$E_a=\varepsilon_a+\frac{\hbar^2k_a^2}{2m},\quad E_{bq}=\varepsilon_b+\frac{\hbar^2q^2}{2m},\tag{2.3.13}$$

再由能量守恒定律(2.3.9),可得

$$E_a-E_{bq}=\frac{\hbar^2}{2m}(k_b^2-q^2)。\tag{2.3.14}$$

于是式(2.3.13)也可表示为

$$\begin{aligned}g_b^+&=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{2m}{\hbar^2}\varphi_b(\xi)\varphi_b^*(\xi')\int\frac{e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}}{k_b^2-q^2+i\varepsilon}\,d\boldsymbol{q}\\&=-\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\varphi_b(\xi)\varphi_b^*(\xi')\frac{e^{ik_b|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}。\end{aligned}\tag{2.3.15}$$

于是,在非弹性散射情况下,与薛定谔方程(2.3.1)相应的确定末态的积分方程为

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{x}\xi|\psi_a^+\rangle=\Phi_a-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\sum_b\varphi_b(\xi)\int\varphi_b^*(\xi')\frac{e^{ik_b|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\\\cdot\langle\xi'\boldsymbol{x}'|V|\psi_a^+\rangle d\boldsymbol{x}'d\xi'。\end{aligned}\tag{2.3.16}$$

这里的结果与弹性散射情况下的式(2.2.1)比较,可以看出这里出现了描写系统 A 内部状态的波函数 φ_b,且 k_b 不一定等于 k_a。

2.3.3 非弹性散射幅和散射截面

为了建立理论和实验之间的联系,需要计算散射幅和散射截面。从物理意义上说,发生散射后在远离散射中心处($r\gg r'$),末态应具有如下渐近形式:

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{x}\xi|\psi_a^+\rangle&\overset{r\gg r'}{=}\Phi_a+\psi_{sc}\\&=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[\varphi_a(\xi)e^{ik_a\cdot x}+\sum_b A_{ba}\varphi_b(\xi)\frac{e^{ik_br}}{r}\right],\end{aligned}\tag{2.3.17}$$

其中已注意到，原子系统 A 的末态可取各种可能态。注意到如下近似：

$$\frac{e^{ik_b|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \xrightarrow{r\gg r'} \frac{e^{ik_b r}}{r} e^{-ik_b\cdot\boldsymbol{x}'},$$

其中 $\boldsymbol{k}_b=k_b\boldsymbol{e}_r$，且 k_b 的值由式(2.3.9)确定，并比较式(2.3.16)和(2.3.17)，便可得到确定非弹性散射幅的公式

$$A_{ba}=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\int\varphi_b^*(\xi)\frac{e^{-ik_b\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^{3/2}}\langle\xi\boldsymbol{x}|V|\psi_a^+\rangle d\boldsymbol{x}\,d\xi$$

$$=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle\Phi_b|V|\psi_a^+\rangle。 \tag{2.3.18}$$

在计算微分截面时，需要入射粒子流密度和沿矢径方向的出射粒子流密度分量表式。现在它们分别是：

$$\boldsymbol{j}_a=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\hbar\boldsymbol{k}_a}{m},\quad j_r=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\hbar k_b}{mr^2}|A_{ba}|^2。 \tag{2.3.19}$$

于是最后得

$$\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega}=\frac{k_b}{k_a}|A_{ba}|^2=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\frac{k_b}{k_a}(2\pi)^3\langle\Phi_b|V|\Psi_a^+\rangle, \tag{2.3.20}$$

这里我们采用无穷大体积归一化，即平面波态为

$$\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle=\frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^{3/2}}。$$

在一级玻恩近似下，有

$$\frac{d\sigma_{ba}^{(B)}}{d\Omega}=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\frac{k_b}{k_a}|(2\pi)^3\langle\Phi_b|V|\Phi_a\rangle|^2。 \tag{2.3.21}$$

2.3.4 电子被原子的散射

作为例子，我们来讨论电子与原子的散射。设散射前电子的动量为 $\boldsymbol{k}$，原子处于基态$|0\rangle$，因此有$|\Phi_a\rangle\equiv|\boldsymbol{k},0\rangle$；散射后电子的动量设为 $\boldsymbol{k}'$，原子处于激发态$|n\rangle$，因此有$|\Phi_b\rangle\equiv|\boldsymbol{k}',n\rangle$。相互作用能现在包括被散射电子与原子核的相互作用能以及与原子内每个电子的相互作用能：

$$V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i)=-\frac{Ze^2}{r}+\sum_{i=1}^{Z}\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i|}。\qquad(2.3.22)$$

在一级玻恩近似下，散射截面为

$$\frac{d\sigma_{n0}^{(B)}}{d\Omega}=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\frac{k'}{k}|(2\pi)^3\langle\boldsymbol{k}'n|V|\boldsymbol{k}0\rangle|^2,\quad(2.3.23)$$

其中矩阵元为

$$\begin{aligned}(2\pi)^3\langle\boldsymbol{k}'n|V|\boldsymbol{k}0\rangle&=\int d\boldsymbol{x}e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\left\langle n\left|\left[-\frac{Ze^2}{r}+\sum_{i=1}^{Z}\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i|}\right]\right|0\right\rangle\\&=\int d\boldsymbol{x}e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\prod_{i=1}^{Z}\int d\boldsymbol{x}_i\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_Z)\\&\quad\cdot\left[-\frac{Ze^2}{r}+\sum_{i=1}^{Z}\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i|}\right]\varphi_0(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_Z),\end{aligned}\qquad(2.3.21)$$

其中 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}$，$\varphi_n$ 和 φ_0 为原子态波函数。利用如下积分公式：

$$\int d\boldsymbol{x}\frac{e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}}{r}=\lim_{\mu\to0}\int d\boldsymbol{x}\frac{e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}-\mu r}}{r}=\frac{4\pi}{q^2},\qquad(2.3.25)$$

$$\sum_i\int d\boldsymbol{x}\frac{e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i|}=\sum_i\int d\boldsymbol{x}\frac{e^{-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}_i)}}{r}=\frac{4\pi}{q^2}\sum_i e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}_i},\qquad(2.3.26)$$

并定义

$$\begin{aligned}ZF_n(\boldsymbol{q})&\equiv\prod_{i=1}\int d\boldsymbol{x}_i\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_Z)\left(\sum_i e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}_i}\right)\varphi_0(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_Z)\\&=\langle n|\sum_i e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}_i}|0\rangle,\end{aligned}\qquad(2.3.27)$$

其中 $F_n(\boldsymbol{q})$ 常称为原子的形状因子，于是式(2.3.24)可化为

$$(2\pi)^3\langle\boldsymbol{k}'n|V|\boldsymbol{k}0\rangle=\frac{4\pi Ze^2}{q^2}[-\delta_{n0}+F_n(\boldsymbol{q})]。\qquad(2.3.28)$$

微分截面因此为

$$\frac{d\sigma_{n0}^{(B)}}{d\Omega}=\left(\frac{2mZe^2}{\hbar^2q^2}\right)^2\frac{k'}{k}|-\delta_{n0}+F_n(\boldsymbol{q})|^2。\qquad(2.3.29)$$

对于非弹性散射，$n\neq0$，此时上式中的 $\delta_{n0}=0$，F_n 描写了原子的激发态与基态波函数的相干程度，且由于$|0\rangle$和$|n\rangle$的正交性，有 $F_n(\boldsymbol{q})|_{q\to0}=0$；对于弹性散射，$n=0$，且有 $F_0(\boldsymbol{q})|_{q\to0}=1$。在弹性

散射情况下，如果没有 $F_0(q)$ 的项，则式 (2.3.29) 便可化为式 (2.2.18)。

*§2.4 重组散射，反应截面

非弹性散射过程仅仅使被碰撞系统的内部激发，并不包含组份发生变化。组份发生变化，两相互碰撞系统组份重新组合的散射过程称为“重组散射”或“反应”。例如电子与原子碰撞后被该原子俘获，而原子内的一个电子被击出，这就是一个典型的重组碰撞过程。在原子碰撞以及化学反应和核反应中存在各种重组散射过程。

2.4.1 反应截面

为简单起见，我们仅考虑一个没有内部结构的粒子（如电子）与一个复合系统（如原子）A 之间的重组散射过程。

碰撞前，粒子与系统的相对坐标用 $\boldsymbol{x}_a$ 表示，系统 A 的内部坐标用 ξ_a 表示。因此入射粒子相对于系统 A 的动能算符表示为 $-\frac{\hbar^2}{2m_a}\nabla_a^2$，系统 A 的哈密顿算符为 $H_a(\xi_a)$，粒子与系统 A 的相互作用能为 V_a，并令

$$H_a \equiv H_a(\xi_a) - \frac{\hbar^2}{2m_a}\nabla_a^2 。 \tag{2.4.1}$$

碰撞后上述各量均用下标 b 标记，并令

$$H_b \equiv H_b(\xi_b) - \frac{\hbar^2}{2m_b}\nabla_b^2 。 \tag{2.4.2}$$

能量守恒定律还要求如下关系成立

$$H_a + V_a = H_b + V_b 。 \tag{2.4.3}$$

我们假设 H_a 的本征值为 $E_a = \varepsilon_a + \frac{\hbar^2 k_a^2}{2m_a}$，本征函数为 $\Phi_a = \varphi_a(\xi_a)\frac{e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{x}_a}}{(2\pi)^{3/2}}$；$H_b$ 的本征值为 $E_b = \varepsilon_b + \frac{\hbar^2 k_b^2}{2m_b}$，本征函数为 $\Phi_b =$

$\varphi_b(\xi_b)\frac{e^{i\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{x}_b}}{(2\pi)^{3/2}}$。现在我们需要求解的薛定谔方程是

$$(E_a-H_a)\psi_a^+=V_a\psi_a^+。 \tag{2.4.4}$$

与此相应的李普曼-许温格方程为

$$\psi_a^+=\Phi_a+(E_a-H_a+i\varepsilon)^{-1}V_a\psi_a^+。 \tag{2.4.5}$$

应当指出，上式一般地描写了所有散射过程，包括弹性散射、非弹性散射以及重组散射。然而，上式的表示对于讨论入射道的渐近行为是方便的，而对于讨论散射道的渐近行为并不合适。这一问题在不涉及到重组散射时并不存在。为此，根据能量守恒定律(2.4.3)，式(2.4.4)可记为

$$(E_a-H_b)\psi_a^+=V_b\psi_a^+, \tag{2.4.6}$$

且其形式上的一个特解可记为

$$\psi_a^+=(E_a-H_b+i\varepsilon)^{-1}V_b\psi_a^+。 \tag{2.4.7}$$

参照非弹性散射时的讨论，上式中的出射格林函数在坐标表象中的具体形式是

$$\begin{aligned}&\langle\boldsymbol{x}_b\xi_b|(E_a-H_b+i\varepsilon)^{-1}|\boldsymbol{x}'_b\xi'_b\rangle\\&\equiv G^+(\boldsymbol{x}_b\xi_b,\ \boldsymbol{x}'_b\xi'_b;\ E)=-\frac{m_b}{2\pi\hbar^2}\sum_b\varphi_b(\xi_b)\varphi_b(\xi'_b)\\&\cdot\frac{e^{ik_b|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}'_b|}}{|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}'_b|}\end{aligned} \tag{2.4.8}$$

于是式(2.4.7)化为

$$\begin{aligned}\psi_a^+(\boldsymbol{x}_b,\ \xi_b)=&-\frac{m_b}{2\pi\hbar^2}\sum_b\varphi_b(\xi_b)\int\varphi_b^*(\xi'_b)\frac{e^{ik_b|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}'_b|}}{|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}'_b|}\\&\cdot\langle\boldsymbol{x}'_b\xi'_b|V_b|\psi_a^+\rangle d\boldsymbol{x}'_b\,d\xi'_b\end{aligned} \tag{2.4.9}$$

另一方面，根据物理上的考虑，重组散射中当$t\to+\infty$时，在$r_b\gg r'_b$处末态波函数应具有如下渐近形式：

$$\psi_a^+\xrightarrow{r_b\gg r'_b}\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_b\varphi_b(\xi_b)A_{ba}\frac{e^{ik_br_b}}{r_b}, \tag{2.4.10}$$

其中A_{ba}为散射幅。比较式(2.4.9)在$r_b\gg r'_b$处的渐近形式与式(2.4.10)，可得

$$A_{ba}=-\frac{m_b}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\int\varphi_b^*(\xi_b)\frac{e^{-i\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{x}_b}}{(2\pi)^{3/2}}\langle\boldsymbol{x}_b\xi_b|V_b|\psi_a^+\rangle d\boldsymbol{x}_b d\xi_b$$

$$=-\frac{m_b}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle\Phi_b|V_b|\psi_a^+\rangle。\qquad(2.4.11)$$

反应截面于是为

$$\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega}=\frac{m_a m_b}{(2\pi\hbar^2)^2}\frac{k_b}{k_a}(2\pi)^3\langle\Phi_b|V_b|\psi_a^+\rangle|^2。\qquad(2.4.12)$$

显然，当 $m_a=m_b$，$\xi_b=\xi_a=\xi$ 时，上式便化为非弹性散射截面；进而当 $k_b=k_a$ 时，便化为弹性散射截面。

2.4.2 电子和原子散射——包括交换效应

在§2.3中讨论电子与原子的非弹性散射时并未考虑到这个电子与原子内部电子的交换效应，实际中这种交换效应是存在的。关于这种交换效应，我们分两步讨论。首先认为电子可以分辨；然后再考虑电子不可分辨时的全同粒子效应。

(1) 电子可分辨情况

现在有 $m_a=m_b=m$，m 为电子质量。设被散射电子的坐标为 $\boldsymbol{x}_1$，原子内电子的坐标为 $\boldsymbol{x}_2$。当这两个电子不交换时，$t\to+\infty$，$r_1\to\infty$ 处波函数的渐近形式为

$$\psi_a^+(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[\varphi_a(\boldsymbol{x}_2)e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{x}_1}+\sum_b\varphi_b(\boldsymbol{x}_2)A_{ba}\frac{e^{ik_b r_1}}{r_1}\right]$$

(r_1 很大)　　(2.4.13)

其中

$$A_{ba}=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle\Phi_b|V_a|\psi_a^+\rangle,\qquad(2.4.14)$$

$$\Phi_b=\varphi_b(\boldsymbol{x}_2)\frac{e^{i\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{x}_1}}{(2\pi)^{3/2}},\qquad(2.4.15)$$

$$V_a=\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}-\frac{Ze^2}{r_1}。\qquad(2.4.16)$$

对于存在电子交换的重组散射，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 有了交换，这时有

$$V_b(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)=\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1|}-\frac{Ze^2}{r_2},\qquad(2.4.17)$$

$$\Phi_b(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2)=\varphi_b(\boldsymbol{x}_1)\frac{e^{i\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{x}_2}}{(2\pi)^{3/2}},\qquad(2.4.18)$$

且为区别起见，将重组散射幅记为 B_{ba}，以表示存在电子交换，于是有

$$B_{ba}=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle\Phi_b|V_b|\psi_a^+\rangle。\qquad(2.4.19)$$

波函数在 $t\to\infty$，$r_2\to\infty$ 处的渐近形式为

$$\psi_a^+(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_b\varphi_b(\boldsymbol{x}_1)B_{ba}\frac{e^{ik_br_2}}{r_2}。\quad(r_2很大)\qquad(2.4.20)$$

这里，由于以 $\boldsymbol{x}_1$ 标记的入射电子被原子俘获，波函数中与式(2.4.13)相对应的第一项不再存在。

(2) 考虑电子不可分辨——全同粒子效应

当考虑全同粒子效应时，波函数满足一定的交换对称性。因此要将前面未考虑交换和考虑交换的两种结果适当组合。

两电子系统的自旋波函数部份可区别两种情况：自旋单态($s=0$)和自旋三重态($s=1$)，前者为反对称态，后者为对称者。由于电子是费米子，总波函数应是反对称的，所以对于自旋单态，总波函数的空间部份是对称的；对于三重态，空间部份是反对称的。下面我们将依据这一原则，构造具有确定对称性的散射态波函数，从而得到考虑了全同粒子效应后的散射幅和散射截面的公式。

先考虑单态情况，这时波函数的空间部份应是对称的，即

$$\psi_s=\psi_a^+(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2)+\psi_a^+(\boldsymbol{x}_2,\ \boldsymbol{x}_1)。\qquad(2.4.21)$$

现在设 $a=0$，$b=n$。利用式(2.4.13)和(2.4.20)来构造式(2.4.21)有两种可能：

$$(2\pi)^{3/2}\psi_s=\varphi_0(\boldsymbol{x}_2)e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}_1}+\sum_n\varphi_n(\boldsymbol{x}_2)[A_{n0}+B_{n0}]\frac{e^{ik_nr_1}}{r_1}$$

(若 r_1 很大)，$\qquad(2.4.22)$

或

$$(2\pi)^{3/2}\psi_s=\varphi_0(\boldsymbol{x}_1)e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}_2}+\sum_n\varphi_n(\boldsymbol{x}_1)[A_{n0}+B_{n0}]\frac{e^{ik_nr_2}}{r_2}$$

(若 r_2 很大)，$\qquad(2.4.23)$

由于全同粒子效应，实际上我们不知道究竟是否发生了交换，或者说，不知道正确的自旋单态波函数的空间部份究竟应取式(2.4.22)还是式(2.4.23)。但是无论何种情况，实验上的可测量，即自旋单态微分截面的形式相同，为

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega}=\frac{k_n}{k_0}|A_{n0}+B_{n0}|^2。\tag{2.4.24}$$

类似地，对于三重态，空间波函数是反对称的，即

$$\psi_t=\psi_a^+(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)-\psi_a^+(\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_1),\tag{2.4.25}$$

因此波函数的渐近形式为

$$(2\pi)^{3/2}\psi_t=\varphi_0(\boldsymbol{x}_2)e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}_1}+\sum_n\varphi_n(\boldsymbol{x}_2)[A_{n0}-B_{n0}]\frac{e^{ik_nr_1}}{r_1},$$

（若 r_1 很大）　　(2.4.26)

或

$$(2\pi)^{3/2}\psi_t=-\varphi_0(\boldsymbol{x}_1)e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}_2}-\sum_n\varphi_n(\boldsymbol{x}_1)[A_{n0}-B_{n0}]\frac{e^{ik_nr_2}}{r_2},$$

（若 r_2 很大）　　(2.4.27)

因此，自旋三重态微分截面为

$$\frac{d\sigma_t}{d\Omega}=\frac{k_n}{k_0}|A_{n0}-B_{n0}|^2。\tag{2.4.28}$$

如果测量时不分辨电子的极化情况，则微分截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{1}{4}\frac{d\sigma_s}{d\Omega}+\frac{3}{4}\frac{d\sigma_t}{d\Omega}$$

$$=\frac{k_n}{k_0}\left(\frac{1}{4}|A_{n0}+B_{n0}|^2+\frac{3}{4}|A_{n0}-B_{n0}|^2\right)。\tag{2.4.29}$$

在一级玻恩近似下

$$A_{n0}^{(B)}=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle\Phi_b|V_a|\Phi_a\rangle$$

$$=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i(\boldsymbol{k}_n-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{x}_1}W_{n0}(\boldsymbol{x}_1)d\boldsymbol{x}_1$$

其中　$W_{n0}(\boldsymbol{x}_2)=\int\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_2)\left[\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}-\frac{Ze^2}{r_1}\right]\varphi_0(\boldsymbol{x}_2)d\boldsymbol{x}_2$。

而　$B_{n0}^{(B)}=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle\Phi_b|V_b|\Phi_a\rangle=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\iint\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_1)e^{-i\boldsymbol{k}_n\cdot\boldsymbol{x}_1}$

$$\cdot\left[\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1|}-\frac{Ze^2}{r_2}\right]\rho_0(\boldsymbol{x}_2)e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}_1}d\boldsymbol{x}_1\,d\boldsymbol{x}_2。$$

§2.5 与时间有关的格林函数

前面我们将散射现象作为定态问题处理。从某种意义上说，这似乎过于理想化。在实际散射过程中，被散射粒子所经受的势场总有一个开启和关闭过程。在另一些情况中，例如电磁波对电子或原子的散射现象中，相互作用能随时间作周期性变化。所以有必要进一步考察与时间有关的势散射理论。

2.5.1 与时间有关的格林算符

在一般情况下，系统的哈密顿算符与时间有关，即

$$H(t)=H_0+V(t)。\tag{2.5.1}$$

这时量子理论要处理的动力学方程是如下薛定谔方程：

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H_0\right)|\psi(t)\rangle=V(t)|\psi(t)\rangle。\tag{2.5.2}$$

为了将上式转化为积分方程形式，以便采用玻恩展开，可通过如下方程引进与时间有关的格林算符 $G_0(t)$：

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H_0\right)G_0(t-t')=\hbar\delta(t-t')。\tag{2.5.3}$$

因为 $\delta(t)$ 具有时间倒数量纲，所以在上式等号右边引进 $\hbar$，从而使 G_0 无量纲。

如果 H_0 不显含时间，并注意到阶跃函数 $\theta(t)$ 关于时间 t 的导数是 δ-函数，即

$$\frac{d\theta(t)}{dt}=\delta(t),\tag{2.5.4}$$

则可以证明如下两个算符满足式(2.5.3)：

$$G_0^+(t-t')=-i\theta(t-t')e^{-iH_0(t-t')/\hbar},\tag{2.5.5}$$

$$G_0^-(t-t')=i\theta(t'-t)e^{-iH_0(t-t')/\hbar}。\tag{2.5.6}$$

算符 $G_0^+(t-t')$ 只有当 $t>t'$ 时不为零；$G_0^-(t-t')$ 只有当 $t<t'$ 时不为零，故常称 G_0^+ 为"推迟格林算符"，G_0^- 为"超前格林算符"。应当注意，上述公式中 $e^{-iH_0(t-t')/\hbar}=\mathscr{U}_0(t,\ t')$ 是非微扰系统的时间演化算符。

利用 $G_0^\pm$，可将薛定谔方程(2.5.2)转化为如下积分方程形式：

$$|\psi^\pm(t)\rangle=|\varphi(t)\rangle+\frac{1}{\hbar}\int G_0^\pm(t-t')V(t')|\psi^+(t)\rangle dt', \tag{2.5.7}$$

其中 $|\varphi(t)\rangle$ 是如下无微扰薛定谔方程的一般解：

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H_0\right)|\varphi(t)\rangle=0。 \tag{2.5.8}$$

式(2.5.7)的正确性可以这样看出：将算符 $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}-H_0$ 作用于式(2.5.7)，利用式(2.5.3)和(2.5.8)，便得到式(2.5.2)。

由式(2.5.5)和(2.5.6)可以证明，当 $t>0$ 时，有

$$G_0^-(-t)G_0^+(t)=1, \tag{2.5.9}$$

因此有

$$G_0^-(-t)=(G_0^+(t))^+=(G_0^+(t))^{-1}。 \tag{2.5.10}$$

类似地，当 $t<0$ 时，有

$$G_0^+(-t)G_0^-(t)=1, \tag{2.5.11}$$

因此有

$$G_0^+(-t)=(G_0^-(t))^+=(G_0^-(t))^{-1}。 \tag{2.5.12}$$

这表明，当 $t>0$ 时，$G_0^+(t)$ 是幺正算符；当 $t<0$ 时，$G_0^-(t)$ 是幺正算符。

2.5.2 坐标表象中的形式

推迟格林算符和超前格林算符可表示为

$$G_0^+(t-t')=-i\theta(t-t')\mathscr{U}_0(t,\ t'), \tag{2.5.13}$$

$$G_0^-(t-t')=i\theta(t'-t)\mathscr{U}_0(t,\ t'), \tag{2.5.14}$$

其中

$$\mathscr{U}_0(t,\ t')=e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}。 \tag{2.5.15}$$

格林算符在坐标表象中的矩阵元称为格林函数。所以推迟格林函数和超前格林函数分别可表示为

$$G_0^+(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}';\ t-t_0)=-i\theta(t-t')K(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}';\ t-t'),\tag{2.5.16}$$

$$G_0^-(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}';\ t-t_0)=i\theta(t'-t)K(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}';\ t-t'),\tag{2.5.17}$$

其中 K 为无微扰系统的时间演化算符 $\mathscr{U}_0$ 在坐标表象中的矩阵元：

$$\begin{aligned}K(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}';\ t-t')&\equiv\langle\boldsymbol{x}|\mathscr{U}_0(t-t')|\boldsymbol{x}'\rangle\\&=\langle\boldsymbol{x}|e^{-iH_0(t-t')/\hbar}|\boldsymbol{x}'\rangle,\end{aligned}\tag{2.5.18}$$

这也称为费曼传播子，我们曾经在§1.7中讨论了一维自由粒子和一维谐振子系统的费曼传播子的形式。

如果 H_0 不显含时间，便存在它的一个正交完全本征矢集 $\{|n\rangle\}$：

$$H_0|n\rangle=E_n|n\rangle,\tag{2.5.19}$$

于是式(2.5.18)可化为

$$\begin{aligned}K(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}';\ t-t')&=\sum_{n\,m}\langle\boldsymbol{x}|n\rangle\langle n|e^{-iH_0(t-t')/\hbar}|m\rangle\langle m|\boldsymbol{x}'\rangle\\&=\sum_n e^{-iE_n(t-t')/\hbar}\langle\boldsymbol{x}|n\rangle\langle n|\boldsymbol{x}'\rangle。\end{aligned}\tag{2.5.20}$$

这就是费曼传播子的本征函数展开式，权重函数 $e^{-iE_n(t-t')/\hbar}$ 可视为展开系数。于是有

$$G_0^+(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}';\ t-t')=-i\theta(t-t')\sum_n e^{-iE_n(t-t')/\hbar}\langle\boldsymbol{x}|n\rangle\langle n|\boldsymbol{x}'\rangle,\tag{2.5.21}$$

$$G_0^-(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}';\ t-t')=i\theta(t'-t)\sum_n e^{-iE_n(t-t')/\hbar}\langle\boldsymbol{x}|n\rangle\langle n|\boldsymbol{x}'\rangle。\tag{2.5.22}$$

推迟格林函数 G_0^+ 可反映散射现象中的因果性条件。与 G_0^+ 相应的积分方程[见式(2.5.7)]在坐标表象中的表示为

$$\begin{aligned}\psi^+(\boldsymbol{x},\ t)&=\varphi(\boldsymbol{x},\ t)\\&\quad+\frac{1}{\hbar}\iint G_0^+(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}';\ t-t')V(\boldsymbol{x}',\ t')\psi^+(\boldsymbol{x}',\ t')d\boldsymbol{x}'dt'。\end{aligned}\tag{2.5.23}$$

上式可这样解释：空间 $\boldsymbol{x}$ 点处 t 时刻的 $\psi^+(\boldsymbol{x},\ t)$ 是子波的叠加(积

分)，这些子波是由 x' 处较早时刻 t' 的子波源 $V(x',t')\psi^{+}(x',t')$ 激发通过 $G_0^{+}(x,x';t-t')$ 传递而来。这是惠更斯原理的一种表述。与时间有关的推迟格林函数因此也常称为"传播子"。

2.5.3 傅里叶变换

可以证明，与时间有关的格林算符的傅里叶变换就是相应的定态格林函数：

$$G_0^{\pm}(E)=\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}G_0^{\pm}(t)e^{iEt/\hbar}dt。\qquad(2.5.24)$$

为了证明上式的正确性，可利用阶跃函数 $\theta(t)$ 的积分表示：

$$\theta(t)=-\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}d\omega,\qquad(2.5.25)$$

此式的正确性证明如下：$t>0$ 时，上式被积函数在 ω 下半平面解析，积分回线应由实轴与下半圆构成，极点 $\omega=-i\varepsilon$ 在此回线内，对留数有贡献，计算结果 $\theta(t)=1$；$t<0$ 时，被积函数在 ω 的上半平面解析，极点此时落在由实轴与上半圆所构成的回线之外，因此积分为零。

将式(2.5.5)和(2.5.25)代入式(2.5.24)，可得

$$\begin{aligned}G_0^{+}(E)&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{\omega+i\varepsilon}\int e^{i[(E-E_0)/\hbar-\omega]t}dt\\&=\frac{1}{\hbar}\int\frac{d\omega}{\omega+i\varepsilon}\delta[(E-H_0)/\hbar-\omega]\\&=\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon\hbar}=\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon},\end{aligned}\qquad(2.5.26)$$

这就是§2.1中所讨论的定态(出射)格林函数。

2.5.4 与时间无关势的散射问题

现在我们来考察与时间无关势场的散射问题。设分布在空间某小区域中的势场与时间无关，但实际散射过程中被散射粒子所经受的势场作用会有一开启和关闭过程。在考虑这类问题时，人们常常采用"绝热近似"，令

$$V(t)=\lim_{\varepsilon\to 0^{+}}Ve^{-\varepsilon|t|},\qquad(2.5.27)$$

即认为在开启和关闭的暂态过程中，粒子所经受到的势的变化非常缓慢，因此作为自由粒子，其能量并不改变：

$$|\varphi(t)\rangle=|\varphi\rangle e^{-iEt/\hbar},\quad |\psi^{+}(t)\rangle=|\psi^{+}\rangle e^{-iEt/\hbar} \tag{2.5.28}$$

现在，我们来考察 $t=0$ 时刻确定散射区中散射态的公式。将式(2.5.5)、(2.5.27)和(2.5.28)代入式(2.5.7)，得

$$\begin{aligned}|\psi^{+}\rangle&=\left|\varphi\right\rangle-\frac{i}{\hbar}\lim_{t''\to-\infty}\int_{t''}^{0}e^{iH_0t'/\hbar}e^{\varepsilon t}e^{-iEt'/\hbar}V\left|\psi^{+}\right\rangle\\&=\left|\varphi\right\rangle+\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}\left[1-\lim_{t''\to-\infty}e^{\varepsilon t''}e^{-i(E-H_0)t''/\hbar}\right]V\left|\psi^{+}\right\rangle\\&=\left|\varphi\right\rangle+\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}V\left|\psi^{+}\right\rangle,\end{aligned} \tag{2.5.29}$$

这正是定态散射理论中的李普曼-许温格方程。

2.5.5 传播子的戴逊方程和玻恩展开

设与时间有关的格林算符 $G_0(t-t')$ 和 $G(t-t')$ 分别满足如下方程

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H_0\right]G_0(t-t')=\hbar\delta(t-t'), \tag{2.5.30}$$

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right]G(t-t')=\hbar\delta(t-t'), \tag{2.5.31}$$

则不难证明如下关系成立：

$$G(t-t')=G_0(t-t')+\frac{1}{\hbar}\int G_0(t-t'')V(t'')G(t''-t')dt''。 \tag{2.5.32}$$

上式是关于时间有关格林算符的戴逊方程。利用迭代法还可得到它的玻恩展开：

$$\begin{aligned}G(t-t')=&G_0(t-t')+\frac{1}{\hbar}\int G_0(t-t'')V(t'')G_0(t''-t')dt''\\&+\frac{1}{\hbar^2}\iint G_0(t-t'')V(t'')G_0(t''-t''')\\&\cdot V(t''')G_0(t'''-t')dt''\,dt'''+\cdots。\end{aligned} \tag{2.5.33}$$

如果 G_0 是自由粒子格林函数，则存在势场时的与时间有关的格林

函数可通过求解积分方程 (2.5.32) 或利用玻恩展开 (2.5.33) 得到。

§2.6 散射矩阵

本章前几节中，利用格林函数法建立了量子散射理论。本节介绍另一类处理散射问题的方法，即 S 矩阵方法。在更一般情况下，采用 S 矩阵讨论散射问题是方便的。

2.6.1 S 矩阵

S 算符，或者按照通常习惯称为 S 矩阵，定义为①

$$S=\lim_{\substack{t\to+\infty\\ t'\to-\infty}}\mathscr{U}_I(t,\ t'), \tag{2.6.1}$$

其中 $\mathscr{U}_I$ 是相互作用绘景中确定态矢量随时间演化的算符，它满足如下方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathscr{U}_I(t,\ t')=V_I(t)\mathscr{U}_I(t,\ t'), \tag{2.6.2}$$

其中

$$V_I(t)=e^{iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar}。 \tag{2.6.3}$$

$V(t)$ 是薛定谔绘景中的相互作用哈密顿算符，这里已经假定，系统的哈密顿算符在薛定谔绘景中可分解为两部份：

$$H(t)=H_0+V(t), \tag{2.6.4}$$

其中 H_0 的本征值问题可严格求解。

利用迭代法可得到式(2.6.2)的展开解，因此 S 矩阵可用戴逊展开表示为[参见 §1.4 的 1.4.6]

① 关于引进 S 矩阵的详细讨论可参阅如下著作：

J. Taylor: "Scattering Theory", John Wiley & Sons, Inc., 1972.

R. Newton: "Scattering Theory of Waves and Particles", Spring-Verlag New York, Inc., 1966, 1982.

P. Roman: "Advanced Quantum Theory", Addison-Wisley Publishing Company, Inc., 1965.

$$S=\mathscr{P}\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}V_I(t)dt\right]$$
$$=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dtV_I(t)+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{+\infty}dt\int_{-\infty}^{t}dt'V_I(t)V_I(t')$$
$$+\cdots。 \tag{2.6.5}$$

从上式可以看出，S 矩阵或散射算符仅与系统相互作用的特征有关，而与具体问题的初态和末态无关。所以对散射矩阵的讨论可把握散射过程的一般特征。此外可以证明，关于散射问题的 S 矩阵方法可方便地推广到相对论情况。

S 矩阵的一个重要特性就是它的幺正性，即

$$S^+S=SS^+=1。 \tag{2.6.6}$$

S 矩阵的幺正性证明如下：设$|a\rangle$和$|b\rangle$都是 H_0 的本征矢，则在 H_0 表象中，有

$$\sum_b(S^+)_{ab}S_{ba}=\sum_b S^*_{ba}S_{ba}=\sum_b|S_{ba}|^2,$$

而$|S_{ba}|^2=|\langle b|S|a\rangle|^2$是系统从初态$|a\rangle$跃迁到末态$|b\rangle$的跃迁概率。从初态跃迁到所有末态的总概率$\sum_b|S_{ba}|^2$应为1。于是式(2.6.6)得证。

2.6.2 能量面上的散射矩阵 T

利用展开(2.6.5)，S 矩阵在 H_0 表象中的矩阵元可表示为

$$\langle b|S|a\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}\langle b|S^{(n)}|a\rangle, \tag{2.6.7}$$

其中

$$\langle b|S^{(0)}|a\rangle=\langle b|a\rangle=\delta_{ba},$$
$$\langle b|S^{(1)}|a\rangle=\frac{1}{i\hbar}\left\langle b\left|\int_{-\infty}^{+\infty}dtV_I(t)\right|a\right\rangle, \tag{2.6.8}$$
$$\langle b|S^{(2)}|a\rangle=\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\left\langle b\left|\int_{-\infty}^{+\infty}dt\int_{-\infty}^{t}dt'V_I(t)V_I(t')\right|a\right\rangle,$$
$$\cdots\cdots。$$

上述结果可应用于一般情况，V 可以在有限时间间隔内与时间无关(常微扰)，也可以与时间有关(如周期性微扰)。作为例子，我们来讨论与时间无关的势所引起的跃迁。

将式(2.6.3)代入(2.6.5)，有

$$\langle b|S^{(1)}|a\rangle=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dt\langle b|e^{iH_0t}Ve^{-iH_0t}|a\rangle$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\langle b|V|a\rangle\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(E_b-E_a)t/\hbar}dt$$

$$=\frac{2\pi}{i}\delta(E_b-E_a)\langle b|V|a\rangle。\qquad(2.6.9)$$

类似地，再利用 H_0 本征矢集的完全性条件 $\sum_n|n\rangle\langle n|=1$，有

$$\langle b|S^{(2)}|a\rangle=\frac{1}{(i\hbar)^2}\sum_n\langle b|V|n\rangle\langle n|V|a\rangle$$

$$\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(E_b-E_n)t/\hbar}dt\int_{-\infty}^{t}e^{i(E_n-E_a)t'/\hbar}dt'。$$

为了求出对 t' 的积分，我们在被积函数中插入一阻尼因子 $e^{\varepsilon t'}$，其中 ε 为小正数，以便保证 $t'\to-\infty$ 时积分为零。于是

$$\int_{-\infty}^{t}e^{i(E_n-E_a)t'/\hbar}dt'\to\lim_{\varepsilon\to0}\int_{-\infty}^{t}e^{-i(E_a-E_n+i\varepsilon)t'/\hbar}dt'$$

$$=\lim_{\varepsilon\to0}(i\hbar)\frac{e^{-i(E_a-E_n+i\varepsilon)t/\hbar}}{E_a-E_n+i\varepsilon}。$$

所以有

$$\langle b|S^{(2)}|a\rangle=\frac{1}{i\hbar}\sum_n\frac{\langle b|V|n\rangle\langle n|V|a\rangle}{E_a-E_n+i\varepsilon}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(E_a-E_b)t/\hbar}dt$$

$$=\frac{2\pi}{i}\delta(E_a-E_b)\sum_n\frac{\langle b|V|n\rangle\langle n|V|a\rangle}{E_a-E_n+i\varepsilon}。$$

(2.6.10)

应当指出，上面处理积分时插入阻尼因子的手续等价于作如下代换：

$$V\to V(t)=Ve^{-\varepsilon|t|},\qquad(2.6.11)$$

这意味着，我们又采用了绝势近似。当 $t\to\pm\infty$ 时，$V(t)\to0$。相互作用是"缓慢地"开启和关闭的。

从上面的讨论中还可看出，各级矩阵元的表式中均包含了一个反映能量守恒的 δ-函数。因此可通过下式定义一个矩阵 T：

$$S_{ba}=\delta_{ba}-2\pi i\delta(E_b-E_a)T_{ba}, \tag{2.6.12}$$

并称它为"能量面上的散射矩阵"或"T 矩阵"。它在 H_0 表象中的矩阵元为

$$T_{ba}\equiv\langle b|T|a\rangle=\langle b|V|a\rangle+\sum_n\frac{\langle b|V|n\rangle\langle n|V|a\rangle}{E_a-E_n+i\varepsilon}$$
$$+\sum_{n,n'}\frac{\langle b|V|n\rangle\langle n|V|n'\rangle\langle n'|V|a\rangle}{(E_a-E_n+i\varepsilon)(E_a-E_{n'}+i\varepsilon)}+\cdots。 \tag{2.6.13}$$

上述结果与时间有关的微扰理论或量子跃迁理论的结果一致。初态$|a\rangle$、末态$|b\rangle$，以及中间态$|n\rangle$、$|n'\rangle$都是 H_0 的本征态。式(2.6.12)中的 δ 函数要求初态和末态能量守恒，但并不要求中间态满足能量守恒。但式子中的能量分母表明，能量偏离初态(或末态)越大的中间态对跃迁的贡献越小，只有那些能量接近初态或末态能量的中间态对高次项才有显著的贡献。已知 V，只要求出它在 H_0 表象中的矩阵元，就能得到任何级次近似下的 T 矩阵元，从而得到 S 矩阵元。应当指出，在最低次近似下，$T=V$。

由式(2.6.12)可知，S 矩阵可分解为两部份

$$S=I+R, \tag{2.6.14}$$

其中单位矩阵表示没有跃迁发生；R 表示确实发生了跃迁。因此常称 R 为反应矩阵。反应矩阵在 H_0 表象中的矩阵元即为

$$R_{ba}=-2\pi i\delta(E_b-E_a)\langle b|T|a\rangle。 \tag{2.6.15}$$

2.6.3 跃迁速率和截面

S 矩阵元模的平方就是量子系统从态 a 跃迁到态 b 的跃迁概率：

$$w_{ba}=|S_{ba}|^2=|\langle b|S|a\rangle|^2。 \tag{2.6.16}$$

当 $b\neq a$ 时，有

$$w_{ba}=|\langle b|S|a\rangle|^2=4\pi^2|\delta(E_b-E_a)|^2|\langle b|T|a\rangle|^2。 \tag{2.6.17}$$

因为

$$|\delta(E_b-E_a)|^2=\frac{\delta(E_b-E_a)}{2\pi\hbar}\lim_{\tau\to\infty}\int_{-\tau}^{\tau}dT, \tag{2.6.18}$$

所以，"跃迁速率"，即单位时间的跃迁概率为

$$\Gamma_{ba}=w_{ba}/\lim_{T\to\infty}\int_{-T}^{T}dT=\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_b-E_a)|\langle b|T|a\rangle|^2。\quad(2.6.19)$$

现在将上述一般结果应用于散射问题。记$E_a=\varepsilon_a+\frac{\hbar^2k_a^2}{2m_a}$, $E_b=\varepsilon_b+\frac{\hbar^2k_b^2}{2m_b}$,其中$\varepsilon_a$和$\varepsilon_b$分别为散射体(例如氩原子)的初态和末态能量；被散射粒子初末态动量分别为$\hbar\boldsymbol{k}_a$和$\hbar\boldsymbol{k}_b$、质量分别为m_a和m_b。由于被散射粒子的末态具有连续谱，所以自态a至态b的总跃迁速率为

$$\begin{aligned}\sum_b\Gamma_{ba}&=\frac{2\pi}{\hbar}\int\delta(E_b-E_a)|\langle b|T|a\rangle|^2d\boldsymbol{k}_b\\&=\frac{2\pi}{\hbar}\int\delta\Big(\frac{\hbar^2k_b^2}{2m_b}+\varepsilon_b-\frac{\hbar^2k_a^2}{2m_a}-\varepsilon_a\Big)|\langle b|T|a\rangle|^2k_b^2dk_b\,d\Omega\\&=\frac{2\pi m_bk_b}{\hbar^3}\int|\langle b|T|a\rangle|^2d\Omega。\end{aligned}\quad(2.6.20)$$

散射截面定义为

$$\sigma=\int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega=\frac{\sum_b\Gamma_{ba}}{j_a},\quad(2.6.21)$$

其中$\boldsymbol{j}_a=\frac{\hbar\boldsymbol{k}_a}{(2\pi)^3m_a}$为入射粒子流密度。于是有

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{m_am_b}{(2\pi\hbar^2)^2}\frac{k_b}{k_a}|(2\pi)^3\langle b|T|a\rangle|^2。\quad(2.6.22)$$

此结果适用于一般散射问题，包括弹性散射、非弹性散射以及重组散射。若$m_a=m_b=m$,有

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{k_b}{k_a}|f(\theta,\varphi)|^2\quad(2.6.23)$$

其中

$$f(\theta,\varphi)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle b|T|a\rangle\quad(2.6.24)$$

为散射幅。于是我们得到了与格林函数法类似的结果。对于弹性散射,$k_b=k_a$。

2.6.4 T矩阵的不同表述

上一小节中我们得到了用能量面上的散射矩阵T的矩阵元

表示散射截面的公式。微分截面正比于 T 矩阵在 H_0 表象中的矩阵元

$$T_{ba}=\langle\Phi_b|T|\Phi_a\rangle \tag{2.6.25}$$

的模的平方，这里我们记 $|a\rangle\equiv|\Phi_a\rangle$，$|b\rangle\equiv|\Phi_b\rangle$，它们分别是 $t=-\infty$ 和 $+\infty$ 时刻系统的态矢量。这些时刻系统不存在相互作用。

由 T 矩阵元的玻恩展开 (2.6.13) 立即可得 T 矩阵的玻恩展开：

$$\begin{aligned}T=&V+V(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}V\\&+V(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}V(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}V+\cdots,\end{aligned} \tag{2.6.26}$$

由上式展开立即可以看出，关于 T 矩阵的戴逊方程为

$$T=V+V(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}T。 \tag{2.6.27}$$

另一方面，量子散射理论的格林函数法表明，微分截面可用 V 的矩阵元 $\langle\Phi_b|V|\psi_a^+\rangle$ 表示，其中 ψ_a^+ 由如下积分方程表示：

$$|\psi_a^+\rangle=|\Phi_a\rangle+(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}V|\psi_a^+\rangle。 \tag{2.6.28}$$

$|\psi_a^+\rangle$ 的渐近解中包含有出射球面波部份，它代表散射波。关于微分截面的上述两种表示是等价的，如果忽略相因子差别，我们有

$$\langle\Phi_b|T|\Phi_a\rangle=\langle\Phi_b|V|\psi_a^+\rangle, \tag{2.6.29}$$

或

$$T|\Phi_a\rangle=V|\psi_a^+\rangle。 \tag{2.6.30}$$

由 §2.1 中式(2.1.23)给出的与入射格林算符相联系的解为

$$\begin{aligned}|\psi_b^-\rangle=&|\Phi_b\rangle+(E_a-H_0-i\varepsilon)^{-1}V|\Phi_b\rangle\\&+(E_a-H_0-i\varepsilon)^{-1}V(E_a-H_0-i\varepsilon)^{-1}V|\Phi_b\rangle+\cdots。\end{aligned} \tag{2.6.31}$$

与上式相应的积分方程显然是

$$|\psi_b^-\rangle=|\Phi_b\rangle+(E_a-H_0-i\varepsilon)^{-1}V|\psi_b^-\rangle。 \tag{2.6.32}$$

如果 V 为实数，将 V 左乘式(2.6.31)等号两边，然后再取厄米共轭，可得

$$\begin{aligned}\langle\psi_b^-|V=&\langle\Phi_b|(V+V(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}V\\&+V(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}V(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}V+\cdots),\end{aligned}$$

即

$$\langle\psi_b^-|V=\langle\Phi_b|T, \tag{2.6.33}$$

或

$$\langle\psi_b^-|V|\Phi_a\rangle=\langle\Phi_b|T|\Phi_a\rangle。 \tag{2.6.34}$$

所以，T 矩阵元可表示为如下不同形式：

$$\langle\Phi_b|T|\Phi_a\rangle=\langle\Phi_b|V|\psi_a^+\rangle=\langle\psi_b^-|V|\Phi_a\rangle, \tag{2.6.35}$$

其中 T 由式(2.6.27)确定；$|\psi_a^+\rangle$由式 (2.6.28) 确定；$|\psi_b^-\rangle$由式(2.6.32)确定。应当指出，这些积分方程都是精确公式。

最后，由关于 T 的积分方程(2.6.27)可得

$$(E_a-H+i\varepsilon)(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}T=V,$$

其中 $H=H_0+V$ 是总哈密顿算符。如果对上式等号两边左乘算符$(E_a-H_0+i\varepsilon)(E_a-H+i\varepsilon)^{-1}$，可得关于 T 的积分方程的另一种形式：

$$T=V+V(E_a-H+i\varepsilon)^{-1}V \tag{2.6.36}$$

2.6.5 幺正性和光学定理

概率守恒性这一公认的自然法则要求 S 矩阵具有幺正性：

$$SS^+=S^+S=1。 \tag{2.6.37}$$

因为 $S=1+R$，其中 R 为反应矩阵，所以由上式可得

$$R+R^+=-R^+R。 \tag{2.6.38}$$

注意到 $R_{ba}=-2\pi i\delta(E_{ba})T_{ba}$，其中 $E_{ba}=E_b-E_a$，则由上式可得

$$i\delta(E_{ba})[T_{ba}-T_{ab}^*]=2\pi\sum_n\delta(E_{bn})\delta(E_{na})T_{nb}^*T_{na},$$

再由于 $\delta(E_{bn})\delta(E_{na})=\delta(E_{ba})\delta(E_{na})$，于是有

$$i(T_{ba}-T_{ab}^*)=2\pi\sum_n\delta(E_n-E_a)T_{nb}^*T_{na}。 \tag{2.6.39}$$

此式也可视为 S 矩阵幺正性或量子散射过程概率守恒性的一种表述。

式 (2.6.39) 给出了散射幅应满足的一个普遍的非线性关系。现在我们将它应用于 $a=b$ 的情况。现在有

$$\mathrm{Im}T_{aa}=-\pi\sum_n\delta(E_n-E_a)|T_{na}|^2。 \tag{2.6.40}$$

再由式(2.6.21)可知，对于有心势引起的散射，散射幅仅与 θ 有

关。我们有

$$T_{aa}=-\frac{\hbar^2}{(2\pi)^2 m_a}f(0), \tag{2.6.41}$$

其中 $f(0)$是向前弹性散射幅。另一方面，由式(2.6.19)和(2.6.21)可知，式(2.6.40)等号右边与总截面 σ 有关。于是有($k_a=k$)

$$\mathrm{Im}f(0)=\frac{k}{4\pi}\sigma, \tag{2.6.42}$$

这就是光学定理。它表明，向前散射幅的虚部与散射总截面(包括弹性散射截面和非弹性散射截面)成正比。光学定理是 S 矩阵幺正性或概率守恒性的反映，因此它是自然界中一切散射现象应遵循的一个普遍关系。

§2.7 有心力场中的散射，分波法

在有心力场中，粒子系统的哈密顿算符与角动量算符 $\boldsymbol{L}$ 对易，所以 $\boldsymbol{L}^2$ 和 $\boldsymbol{L}$ 都是守恒量。因此在讨论有心力场中的散射问题时，采用(H_0, $\boldsymbol{L}^2$, L_z)表象是方便的。

2.7.1 T 矩阵的分波分析

上节的讨论表明，为了计算散射幅或散射截面，需计算 T 矩阵元。而 T 矩阵元 $\langle\Phi_b|T|\Phi_a\rangle$ 中的波函数 $\Phi_a=\varphi_a(\xi)\frac{e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^{3/2}}$ 是 H_0、被散射粒子的动量 $\boldsymbol{p}$ 以及描写散射系统状态的力学量"A"的共同本征态，其归一化条件为

$$\langle\Phi_a|\Phi_{a'}\rangle=\delta_{aa'}\delta(\boldsymbol{k}_a-\boldsymbol{k}_{a'})。 \tag{2.7.1}$$

现在定义如下态矢量：

$$|aE_a\boldsymbol{n}_a\rangle=\sqrt{\frac{m_a k_a}{\hbar^2}}|\Phi_a\rangle, \tag{2.7.2}$$

其中 E_a 为总能量，$\boldsymbol{n}_a=\boldsymbol{k}_a/k_a$ 为初态被散射粒子动量方向的单位矢量。上述所引进的态矢量的归一化条件为

$$\langle aE_a\boldsymbol{n}_a|a'E_{a'}\boldsymbol{n}_{a'}\rangle=\delta_{aa'}\delta(E_a-E_{a'})\delta(\boldsymbol{n}_a-\boldsymbol{n}_{a'})。 \tag{2.7.3}$$

对于Φ_b，可作完全类似的讨论。确定散射截面的公式于是可表示为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{(2\pi)^4}{k_a^2}|\langle bE_b\boldsymbol{n}_b|T|aE_a\boldsymbol{n}_a\rangle|^2。\tag{2.7.4}$$

现在我们将上式中的T矩阵元转化到(H_0, L^2, L_z)表象，这意味着要将原来的方向变量$\boldsymbol{n}_a$和$\boldsymbol{n}_b$用角动量变量l和m表示。这个手续称为“分波分析”。利用完全性条件

$$\sum_{lm}|lm\rangle\langle lm|=1\tag{2.7.5}$$

对初态和末态作分波分析，有

$$\langle bE_b\boldsymbol{n}_b|T|aE_a\boldsymbol{n}_a\rangle=\sum_{l'm'}\sum_{lm}\langle\boldsymbol{n}_b|l'm'\rangle\langle bE_bl'm'|T|aE_alm\rangle\cdot\langle lm|\boldsymbol{n}_a\rangle。\tag{2.7.6}$$

l和m确定的态在坐标表象中的表示就是球谐函数，即$\langle\boldsymbol{n}_a|lm\rangle=Y_{lm}(\boldsymbol{n}_a)$，并且为简单起见，可不失一般性地取$\boldsymbol{n}_a$沿$z$轴方向。因此有

$$\langle lm|\boldsymbol{n}_a\rangle=Y^*_{lm}(\boldsymbol{n}_a)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\delta_{0m}。\tag{2.7.7}$$

其次，再考虑到在有心力场作用下，l和m保持不变，因此式(2.7.6)可化为

$$\langle bE_b\boldsymbol{n}_b|T|aE_a\boldsymbol{n}_a\rangle=\sum_l\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,Y_{l0}(\boldsymbol{n}_b)\langle b|T_l|a\rangle\tag{2.7.8}$$

其中

$$\langle b|T_l|a\rangle\equiv\langle bE_bl0|T|aE_al0\rangle。\tag{2.7.9}$$

2.7.2 分波截面

将式(2.7.8)代入式(2.7.4)，我们便得到微分散射截面的分波展开：

$$\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega}=\frac{4\pi^3}{k_a^2}\Big|\sum_l\sqrt{2l+1}\,Y_{l0}(\boldsymbol{n}_b)\langle b|T_l|a\rangle\Big|^2。\tag{2.7.10}$$

利用球谐函数的正交性关系

$$\int Y^*_{l0}(\boldsymbol{n}_b)Y_{l'0}(\boldsymbol{n}_b)d\Omega=\delta_{ll'},\tag{2.7.11}$$

由式(2.7.10)可得总截面，为

$$\sigma_{ba}=\frac{4\pi^3}{k_a^2}\sum_l(2l+1)|\langle b|T_l|a\rangle|^2。\qquad(2.7.12)$$

由上述结果可以看出，散射过程的总截面可表示为各分波截面之和：

$$\sigma_{ba}=\sum_l\sigma_{ba}^{(l)}\qquad(2.7.13)$$

$$\sigma_{ba}^{(l)}=\frac{4\pi^3}{k_a^2}(2l+1)|\langle b|T_l|a\rangle|^2\qquad(2.7.14)$$

如果引入能量面上的散射矩阵 S^E：

$$\langle b|S|a\rangle=S_{ba}^E\delta(E_b-E_a),\qquad(2.7.15)$$

则由式(2.6.14)可得

$$S_{ba}^{El}=\delta_{ba}-2\pi i\langle b|T_l|a\rangle。\qquad(2.7.16)$$

将上式代入式(2.7.12)，有

$$\sigma_{ba}=\frac{\pi}{k_a^2}\sum_l(2l+1)|S_{ba}^{El}-\delta_{ba}|^2。\qquad(2.7.17)$$

微分截面为

$$\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega}=\frac{\pi}{k_a^2}|\sum_l\sqrt{(2l+1)}\ Y_{l0}(\boldsymbol{n}_b)(S_{ba}^{El}-\delta_{ba})|^2。\qquad(2.7.18)$$

应当指出，现在 a 代表了散射体(如原子)系统的内部量子数及被散射体(如电子)能量或动量的值。所以 $a=b$ 的含义是指“发生了弹性散射”。弹性散射截面因此为

$$\sigma_e=\sigma_{aa}=\frac{\pi}{k_a^2}\sum_l(2l+1)|S_{aa}^{El}-1|^2。\qquad(2.7.19)$$

设 $a\neq b$，并对 b 取和，便得到反应总截面

$$\sigma_r=\sum_{b\neq a}\sigma_{ba}=\frac{\pi}{k_a^2}\sum_{b\neq a}\sum_l(2l+1)^2|S_{ba}^{El}|^2。\qquad(2.7.20)$$

根据幺正性条件或概率守恒性，有

$$\sum_b|S_{ba}^{El}|^2=\sum_{b\neq a}|S_{ba}^{El}|^2+|S_{aa}^{El}|^2=1。\qquad(2.7.21)$$

因此反应总截面又可表示为

$$\sigma_r=\frac{\pi}{k_a^2}\sum_l(2l+1)(1-|S_{aa}^{El}|^2)\qquad(2.7.22)$$

2.7.3 散射相移

如果仅弹性道开放，由幺正条件(2.7.21)可得$|S_{aa}^{El}|^2=1$，或

$$S_{aa}^{El}=e^{2i\delta_l}, \tag{2.7.23}$$

其中δ_l为实数，称为分波相移。分波相移反映了分波散射矩阵对角元$\langle a|T_l|a\rangle$的性质。弹性散射过程中相互作用的效果于是可简单地归结为引起分波相位发生变化。

将式(2.7.23)代入式(2.7.19)和(2.7.22)，可得弹性散射情况下的结果：

$$\sigma_e=\frac{\pi}{k_a^2}\sum_l(2l+1)|e^{2i\delta_l}-1|^2$$

$$=\frac{4\pi}{k_a^2}\sum_l(2l+1)\sin^2\delta_l, \tag{2.7.24}$$

$$\sigma_r=0。 \tag{2.7.25}$$

再由式(2.7.18)，可得

$$\frac{d\sigma_e}{d\Omega}=\frac{4\pi}{k_a^2}\left|\sum_l\sqrt{2l+1}\,e^{i\delta_l}\sin\delta_l Y_{l0}(\boldsymbol{n}_b)\right|^2。 \tag{2.7.26}$$

在上述推导中应用了如下等式：$e^{2i\delta_l}-1=e^{i\delta_l}2i\sin\delta_l$。

现在来考察非弹性散射时的情况，这时有

$$|S_{aa}^{El}|<1。 \tag{2.7.27}$$

因此可令

$$S_{aa}^{El}=\eta_l e^{2i\delta_l}, \tag{2.7.28}$$

其中η_l和δ_l均为实数，且$\eta_l\leqslant 1$。式(2.7.28)意味着散射相移一般是复数。将式(2.7.28)代入式(2.7.19)和(2.7.22)，便得到包含非弹性散射情况的一般结果：

$$\sigma_e=\frac{\pi}{k_a^2}\sum_l(2l+1)(1+\eta_l^2-2\eta_l\cos 2\delta_l), \tag{2.7.29}$$

$$\sigma_r=\frac{\pi}{k_a^2}\sum_l(2l+1)(1-\eta_l^2)。 \tag{2.7.30}$$

从上面的结果可以看出，当$\eta_l=0$，即$S_{aa}^{El}=0$或$2\pi i\langle a|T_l|a\rangle=1$时，分波反应截面最大，为$(\sigma_r^l)_{\max}=(2l+1)\pi/k_a^2$，且分波弹性截面具有同样的值。当$\eta_l=1$时相应于弹性散射情况，此时$\sigma_r=0$。当

$\eta_l=1$，$\delta_l=\frac{\pi}{2}$，即 $S^{el}_{\alpha\alpha}=-1$，或 $2\pi i\langle\alpha|T_l|\alpha\rangle=2$ 时，分波弹性截面最大，为 $(\sigma^l_e)_{\max}=\frac{4\pi}{k_a^2}(2l+1)$。

*§ 2.8 存在两类相互作用时的散射，奇变波近似

在一些实际散射问题中，常常存在两种相互作用。例如，两个荷电核子相互作用时，不仅存在库仑势，还存在短程的强相互作用。再如核子与复核发生碰撞时，同时存在"有效光学势"和"剩余势"的作用。有效光学势确定了这类散射过程中占主导地位的弹性散射的特征。所以常常需要更一般地讨论存在两类相互作用时的散射问题。

2.8.1 T 矩阵元的计算

散射问题中重要的是计算 T 矩阵元。设系统的哈密顿算符为

$$H=H_0+V_A+V_B, \tag{2.8.1}$$

T 矩阵元为

$$T_{ba}=\langle\Phi_b|V_A+V_B|\psi_a^+\rangle, \tag{2.8.2}$$

其中 $|\psi_a^+\rangle$ 是如下积分方程的解：

$$|\psi_a^+\rangle=|\Phi_a\rangle+(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}(V_A+V_B)|\psi_a^+\rangle。 \tag{2.8.3}$$

与末态 $|\Phi_b\rangle$ 相应，我们引入一个态 $|\varphi_b^-\rangle$，在其渐近形式中包含有由于势场 V_B 的作用而引起的入射波。因此 $|\varphi_b^-\rangle$ 所满足的积分方程是

$$|\varphi_a^-\rangle=|\Phi_b\rangle+(E_a-H_0-i\varepsilon)V_B|\varphi_b^-\rangle。 \tag{2.8.4}$$

将式(2.8.4)代入式(2.8.2)，有

$$\begin{aligned}T_{ba}&=\langle\varphi_b^-|[1-V_B(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}](V_A+V_B)|\psi_a^+\rangle\\&=\langle\varphi_b^-|V_A|\psi_a^+\rangle+\langle\varphi_b^-|V_B|\psi_a^+\rangle\\&\quad-\langle\varphi_b^-|V_B(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}(V_A+V_B)|\psi_a^+\rangle。\end{aligned}$$

利用式(2.8.3)，上式最后第二项可化为

$$\langle\varphi_b^-|V_B|\psi_a^+\rangle=\langle\varphi_b^-|V_B|\Phi_a\rangle + \langle\varphi_b^-|V_B(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}(V_A+V_B)|\psi_a^+\rangle。$$

于是我们有

$$T_{ba}=\langle\varphi_b^-|V_A|\psi_a^+\rangle+\langle\varphi_b^-|V_B|\Phi_a\rangle。 \tag{2.8.5}$$

再利用式(2.6.35)，上式等号右边第二项又可化为$\langle\Phi_b|V_B|\varphi_a^+\rangle$，其中$|\varphi_a^+\rangle$由下面的积分方程确定：

$$|\varphi_a^+\rangle=|\Phi_a\rangle+(E_a-H_0+i\varepsilon)^{-1}V_B|\varphi_a^+\rangle。 \tag{2.8.6}$$

于是式(2.8.5)可化为

$$T_{ba}=\langle\varphi_b^-|V_A|\psi_a^+\rangle+\langle\Phi_b|V_B|\varphi_a^+\rangle \equiv T_{ba}(A)+T_{ba}(B)。 \tag{2.8.7}$$

为了阐明式(2.8.7)的矩阵元中第一项$T_{ba}(A)$的意义，我们将关于$|\psi_a^+\rangle$的积分方程(2.8.3)改写为如下等价式：

$$|\psi_a^+\rangle=|\varphi_a^+\rangle+(E_a-H_0-V_B+i\varepsilon)^{-1}V_A|\psi_a^+\rangle。 \tag{2.8.8}$$

上式的正确性证明如下：将算符$(E_a-H_0-V_B+i\varepsilon)$左乘此式等号两边，利用式(2.8.6)以及关于自由态的薛定谔方程，$(E_a-H_0)|\Phi_a\rangle=0$，便得到关于散射态的定态薛定谔方程，$(E_a-H_0-V_A-V_B)|\psi_a^+\rangle=0$。

式(2.8.8)表明，$|\psi_a^+\rangle$是$|\varphi_a^+\rangle$受势场V_A的作用而产生的散射态。$T_{ba}(A)=\langle\varphi_b^-|V_A|\psi_a^+\rangle$于是可解释为由式(2.8.6)确定的，已被势场$V_B$散射或"奇变"了的波再一次被势场$V_A$散射时的散射幅。

2.8.2 奇变波近似

所谓奇变波近似，就是由式(2.8.8)，近似地取$|\psi_a^+\rangle\simeq|\varphi_a^+\rangle$。于是确定$T$矩阵元的式(2.8.7)化为

$$T_{ba}^{\text{Mist}}=\langle\varphi_b^-|V_A|\varphi_a^+\rangle+\langle\Phi_b|V_B|\varphi_a^+\rangle。 \tag{2.8.9}$$

上式中第一项矩阵元中的初态$|\varphi_a^+\rangle$和末态$|\varphi_b^-\rangle$分别由式(2.8.6)和(2.8.4)确定，它们是由势场V_B引起的散射波或奇变波。在许多实际问题中，V_B是库仑势，这时积分方程(2.8.4)和(2.8.6)可

严格求解。因此在奇变波近似下这种散射幅的计算变得相当简单。

*§2.9 程函近似

程函近似是一种半经典近似，也可以说是一种改进的玻恩近似。它适用于高能小角度散射问题。

2.9.1 经典极限

一个粒子的量子态波函数可表示为

$$\psi(\boldsymbol{x}, t)=\sqrt{\rho(\boldsymbol{x}, t)}\, e^{iS(\boldsymbol{x}, t)/\hbar} \tag{2.9.1}$$

其中 S 为实数，$\rho>0$。ρ 的意义可由下式给出：

$$\rho(\boldsymbol{x}, t)=|\psi(\boldsymbol{x}, t)|^2。 \tag{2.9.2}$$

该式读者已很熟悉。根据玻恩的概率解释，ρ 就是在 t 时刻空间 $\boldsymbol{x}$ 点处发现该粒子的概率密度。

现在来考察 ψ 的位相因子 S 的意义。为此，将式(2.9.1)代入概率流密度公式：

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x}, t)=-\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi\right]=\frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}(\psi^*\nabla\psi), \tag{2.9.3}$$

可得

$$\boldsymbol{j}=\rho\frac{\nabla S}{m}。 \tag{2.9.4}$$

这表明，波函数的位相因子具有丰富的物理意义，它的空间梯度给出了流密度。如果在空间中某方向上量子态波函数的相位变化愈大，则该方向上的流密度也就愈大。应当注意，流密度这个量在讨论散射现象时是一个非常重要的量。作为例子，对于自由粒子，

$$\psi(\boldsymbol{x}, t)\sim e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)/\hbar}, \tag{2.9.5}$$

因此

$$\nabla S=\boldsymbol{p}。 \tag{2.9.6}$$

形式上我们可引进如下定义：

$$\boldsymbol{v}=\nabla S/m, \tag{2.9.7}$$

于是式(2.9.4)又可记为

$$\boldsymbol{j}=\rho\boldsymbol{v}。 \tag{2.9.8}$$

不过应当指出，上述将 $\boldsymbol{j}$ 定义为 ρ 和 $\boldsymbol{v}$ 之积仅是从形式上为了与经典流体力学类比。实际上在量子理论中，由于不确定性原理，空间某点处粒子的速度这样的概念是毫无意义的。

现在将式(2.9.1)代入薛定谔方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi(\boldsymbol{x},t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t), \tag{2.9.9}$$

可得

$$\begin{aligned}&-\frac{\hbar^2}{2m}\Big[\nabla^2\sqrt{\rho}+\left(\frac{2i}{\hbar}\right)(\nabla\sqrt{\rho})\cdot(\nabla S)\\&\quad-\frac{1}{\hbar^2}\sqrt{\rho}\,|\nabla S|^2+\left(\frac{i}{\hbar}\right)\sqrt{\rho}\,\nabla^2S\Big]+\sqrt{\rho}\,V\\&=i\hbar\Big[\frac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial t}+\left(\frac{i}{\hbar}\right)\sqrt{\rho}\,\frac{\partial S}{\partial t}\Big]。\end{aligned} \tag{2.9.10}$$

至此，所有公式都是精确的。现在设

$$|\nabla S|^2\gg\hbar^2|\nabla^2S|, \tag{2.9.11}$$

式(2.9.10)便可近似为

$$\frac{1}{2m}|\nabla S(\boldsymbol{x},t)|^2+V(\boldsymbol{x})+\frac{\partial S(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}=0。 \tag{2.9.12}$$

形式上此式就是经典力学中的哈密顿-雅可比方程(1836年)，其中 S 为作用量，$H\equiv\frac{1}{2m}|\nabla S|^2+V$ 为哈密顿量。这些结果并不奇怪，由式(2.9.9)近似为(2.9.12)，这相当于 $\hbar\to0$。在这一近似下，量子力学便近似为经典力学。不过我们这里仍然考虑式(2.9.1)波函数位相因子中的 $\hbar$，所以也可称为半经典近似。

对于定态情况，$\psi\sim e^{-iEt/\hbar}$，所以位相因子可表示为

$$S(\boldsymbol{x},t)=W(\boldsymbol{x})-Et, \tag{2.9.13}$$

式(2.9.12)于是可化为

$$\frac{1}{2m}|\nabla W(\boldsymbol{x})|^2+V(\boldsymbol{x})=E。 \tag{2.9.14}$$

这是能量为常数时确定哈密顿特征函数 W 的方程，有时也称为

程函方程，在经典极限下它确定了波函数的位相。

2.9.2 程函近似

散射态波函数记为

$$\psi^+(\boldsymbol{x})=\langle \boldsymbol{x}|\psi^+\rangle \sim e^{iW/\hbar}。 \tag{2.9.15}$$

在程函近似下，位相因子 W 满足式(2.9.14)。程函近似的条件(2.9.11)现在为

$$|\nabla W|^2 \gg \hbar^2|\nabla^2 W|。 \tag{2.9.16}$$

若考虑粒子沿 z 轴方向作一维运动，上式可化为

$$\frac{2(E-V)}{\partial V/\partial z|} \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}}\equiv \lambda, \tag{2.9.17}$$

这意味着要求粒子的能量很高，势的变化很小；或者也可以说，与势场发生明显变化的线度相比，粒子的德布罗意波长很短。这是一种短波极限，在这一近似下可采用经典轨道概念。

现在我们来计算被散射粒子运动到 z 点处的位相因子 $S/\hbar$。记 $E=\hbar^2k^2/2m$，由式(2.9.13)和(2.9.14)可得

$$\frac{S}{\hbar}=\int_{-\infty}^{z}\left[k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(\boldsymbol{b},z')\right]^{1/2}dz'+O, \tag{2.9.18}$$

其中，如图 2.9.1 所示，b 是碰撞参数，$\boldsymbol{b}$ 的方向取在垂直于 z-轴平面上。上式中的常数可通过如下条件确定：

$$\text{当 } V\to 0\text{时，}\ \frac{S}{\hbar}=kz。 \tag{2.9.19}$$

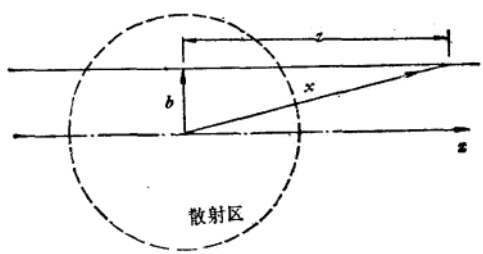

图 2.9.1

因此式(2.9.18)可化为

$$\frac{S}{\hbar}-kz+\int_{-\infty}^{z}\left(\sqrt{k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V}-k\right)dz'$$

$$\simeq kz-\frac{m}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z}V\,dz', \tag{2.9.20}$$

其中应用了条件 $E\gg V$，所以 $\sqrt{k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V}\simeq k-\frac{m}{\hbar^2 k}V$。因此在高能情况下散射态可表示为

$$\langle \boldsymbol{x}|\psi^+\rangle=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\boldsymbol{k}_t\cdot\boldsymbol{b}}e^{i\chi_I}, \tag{2.9.21}$$

其中

$$\chi_I=-\frac{m}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z}V(\boldsymbol{b},z')dz'。 \tag{2.9.22}$$

这表明，入射波从$-\infty$处到达相互作用点 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{b},z)$的过程中位相发生了改变，其值与行进的路程有关。将上述结果代入计算散射幅的公式(2.2.5)，便得程函近似下的基本公式：

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle \boldsymbol{k}'|V|\psi^+\rangle$$

$$=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\boldsymbol{x}e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}Ve^{i\chi_I} \tag{2.9.23}$$

其中 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}$，而 $\boldsymbol{k}'=k\boldsymbol{e}_r$。与弹性散射一级玻恩近似结果相比较，上述被积函数中多了一个程函位相因子。

为了作进一步讨论，采用柱坐标系，$d\boldsymbol{x}=d\boldsymbol{b}\,dz=b\,db\,d\varphi\,dz$。因为 $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{e}_z\sim O(\theta^2)$，所以在讨论小角度散射时，这种项可忽略，于是有

$$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}=\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{b}+z\boldsymbol{e}_z)\simeq\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{b}。 \tag{2.9.24}$$

再注意到 $\boldsymbol{k}\perp\boldsymbol{b}$，并不失一般性地取散射面为 xz-平面，则有

$$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{b}=\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{b}=kb\theta\cos\varphi。 \tag{2.9.25}$$

散射幅于是可化为

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\boldsymbol{b}e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{b}}\int_{-\infty}^{+\infty}dzV(\boldsymbol{b},z)$$

$$\cdot \exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} V(\boldsymbol{b}, z')dz'\right] \qquad (2.9.26)$$

利用如下结果：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz V \exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} V dz'\right]$$
$$= i\frac{\hbar^2 k}{m}\exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} V dz'\right]\Bigg|_{z=-\infty}^{z=+\infty},$$

我们可得程函近似散射幅公式：

$$f(\theta) = -i\frac{k}{2\pi}\int d\boldsymbol{b} e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{b}}[e^{i\chi(\boldsymbol{b})}-1], \qquad (2.9.27)$$

其中

$$\chi(\boldsymbol{b}) = -\frac{m}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{+\infty} V(\boldsymbol{b}, z)dz。 \qquad (2.9.28)$$

对于轴对称势，V 与 φ 无关，因此 χ 也与 φ 无关。这时，将式(2.9.25)代入式(2.9.27)，并利用如下关于贝塞耳函数的公式：

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{-ikb\theta\cos\varphi} = 2\pi J_0(kb\theta), \qquad (2.9.29)$$

可得

$$f(\theta) = -ik\int_0^{\infty} dbbJ_0(kb\theta)[e^{i\chi(b)}-1]。 \qquad (2.9.30)$$

这就是常用的计算程函近似散射幅的公式。这里主要的是应用式(2.9.28)计算位相因子 χ。

2.9.3 程函近似下计算截面公式

1．总截面 σ_{tot}

根据光学定理，散射总截面与向前散射幅 $f(\theta=0)$ 的虚部成正比，因此由式(2.9.27)立即可得

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\,f(0) = 2\int[1-\mathrm{Re}\,e^{i\chi(\boldsymbol{b})}]d\boldsymbol{b}。 \qquad (2.9.31)$$

2．散射截面 σ_s

因为 $\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$，所以

$$\sigma_s = \int |f(\theta)|^2 d\Omega \qquad (2.9.32)$$

其中 $d\Omega$ 为散射波矢量 $\boldsymbol{k}'$ 空间的立体角元。代入式(2.9.27)，有

$$\sigma_s=\left(\frac{k}{2\pi}\right)^2\int e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{b}')}[e^{i\chi(\boldsymbol{b})}-1][e^{-i\chi(\boldsymbol{b}')}-1]d\boldsymbol{b}\,d\boldsymbol{b}'\,d\Omega。\tag{2.9.33}$$

注意到 $k'=k$，且仅考虑小角度散射，因此 $k^2d\Omega=k'^2d\Omega$ 近似地就是与 z 轴相垂直的平面上的面积元。所以有

$$\int e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{b}')}k'^2d\Omega=(2\pi)^2\delta(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{b}')。\tag{2.9.34}$$

式(2.9.33)因此可化为

$$\sigma_s=\int|e^{i\chi(\boldsymbol{b})}-1|^2d\boldsymbol{b}。\tag{2.9.35}$$

当 $\chi(\boldsymbol{b})$ 为实数，即相互作用势能 V 为实数时，显然有 $\sigma_{tot}=\sigma_s$。

3．吸收截面 σ_a

总截面与散射截面之差即为吸收截面：

$$\sigma_a=\sigma_{tot}-\sigma_s=\int(1-|e^{i\chi(\boldsymbol{b})}|^2)d\boldsymbol{b}。\tag{2.9.36}$$

存在吸收的现象可利用复数势来描写，此时 $\chi(\boldsymbol{b})$ 为复数，$|e^{i\chi(\boldsymbol{b})}|^2$ 不等于 1，σ_a 便不等于零。

[例 1]　在程函近似下计算粒子对半径为 a 的不透明圆盘的散射幅、微分散射截面，以及散射截面、吸收截面和总截面。

解：势场现在为纯虚数场：

$$V=iV_0,\ V_0=\begin{cases}-\infty & (b\leqslant a),\\ 0 & (b>a)。\end{cases}\tag{2.9.37}$$

由式(2.9.28)可得

$$e^{i\chi(\boldsymbol{b})}=\begin{cases}0 & (b\leqslant a),\\ 1 & (b>a)。\end{cases}\tag{2.9.38}$$

于是由式(2.9.30)以及关于贝塞耳函数的公式

$$xJ_0(x)=\frac{d}{dx}(xJ_1(x))$$

可得

$$f(\theta)=ik\int_0^a db\,bJ_0(kb\theta)=ika^2\,\frac{J_1(ka\theta)}{ka\theta}\tag{2.9.39}$$

微分散射截面为

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega}=(ka^2)^2\left[\frac{J_1(ka\theta)}{ka\theta}\right]^2 \tag{2.9.40}$$

这正是光学中的夫朗和斐(Fraunhofer)衍射公式。

散射截面为

$$\sigma_s=\int|e^{i\chi(b)}-1|^2d\boldsymbol{b}=\int_0^a bdb\int_0^{2\pi}d\varphi=\pi a^2 \tag{2.9.41}$$

吸收截面为

$$\sigma_a=\int(1-|e^{i\chi(b)}|^2)d\boldsymbol{b}=\pi a^2, \tag{2.9.42}$$

总截面为

$$\sigma_{tot}=2\int(1-\mathrm{Re}e^{i\chi(b)})d\boldsymbol{b}=2\pi a^2。 \tag{2.9.43}$$

读者也可以利用如下关于贝塞耳函数的积分公式直接由式(2.9.40)得到式(2.9.41):

$$\int_0^\infty x^{-1}J_{\nu+2n+1}(x)J_{\nu+2m+1}(x)dx=(4n+2\nu+2)^{-1}\delta_{n,m}。 \tag{2.9.44}$$

最后我们简要地给出程函近似与分波分析之间的关系。在半经典考虑下，$kb=l+\frac{1}{2}$；当 $l\gg1$，θ 很小时，有

$$P_l(\cos\theta)\simeq(\cos\theta)^lJ_0\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\sin\theta\right]\simeq J_0(kb\theta), \tag{2.9.45}$$

这里 P_l 为勒让德多项式，它与球谐函数 Y_{l0} 的关系是：$Y_{l0}=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l$。如果令 $\chi(b)=2\delta_l$，则有 $e^{i\chi}-1=e^{i\delta_l}\cdot2i\sin\delta_l$。利用上述这些结果很容易看出，程函近似下的散射幅式(2.9.30)可化为

$$\begin{aligned}f(\theta)&=\frac{1}{2ik}\sum_l(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta)\\&=\frac{\sqrt{4\pi}}{k}\sum_l\sqrt{2l+1}\,e^{i\delta_l}\sin\delta_lY_{l0},\end{aligned} \tag{2.9.46}$$

并由此立即可得到分波分析关于微分散射截面的结果(2.7.26)。

习　题

2-1　证明式(2.1.9)。

2-2　证明式(2.5.9)和(2.5.11),并写出它们在坐标表象中的形式。

2-3　用玻恩近似法求快速电子被(a)基态氢原子，(b)基态氦原子弹性散射时的微分散射截面和总截面。

2-4　设均匀电场 $\varepsilon(t)=\varepsilon_0 e^{i\omega t}$ 作用在一氢原子上，该氢原子在 $t=0$ 时处于基态。用微扰法求每单位时间的电离概率。为简单起见，设末态电子为自由态。[提示：利用式(2.6.20)，氢原子电离能是 $\hbar\omega_0=me^4/2\hbar^2$。]

2-5　证明分波法满足光学定理。

2-6　试导出如下计算相移的公式：

$$\sin\delta_l=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty r j_l(kr)V(r)R_{k,l}(r)dr,$$

其中 j_l 为球贝塞耳函数 $R_{k,l}/r$ 为有心势场 $V(r)$ 中粒子 l 分波的径向波函数。

2-7　当势场有一变化 δV 时，求相移的改变量。根据所得结果讨论吸引势和排斥势所产生的相移的正负号。[提示：$V=0$ 时，$\delta_l=0$。]

2-8　利用程函近似方法计算下列势场引起散射的总截面；作出总截面与被散射粒子能量的函数关系(可利用计算机作数值计算)，并与一级玻恩近似结果比较。

(1) 复势：$V=-V_1+iV_2$　$(r<a)$；$V=0(r\geqslant a)$，其中 $V_1=80\ \mathrm{MeV}$，$V_2=50\ \mathrm{MeV}$，$a=10^{-11}\mathrm{cm}$。

(2) 高斯势：$V=-V_0e^{-r^2/a^2}$，其中 $V_0=120\ \mathrm{MeV}$，$a=10^{-11}\mathrm{cm}$。

第三章　二次量子化理论

在薛定谔量子力学中采用波函数和力学量算符描写微观粒子的状态，这种描述方案似乎不够对称，因为力学量用算符表示，但波函数是经典函数，或 C 数函数，它不是算符。波函数所满足的薛定谔方程可视为经典的薛定谔波场的运动方程，它的地位因此与麦克斯韦方程在电磁理论中的地位相当。由于量子力学这种表述方式中的不对称性，使它虽然能反映微观粒子的波动性，但并不能反映场的粒子性。为此，需要采用"二次量子化"手续，将薛定谔量子力学中的波函数及电磁场的波函数——电磁势或电磁场强度转化为算符，称为场算符。这时如果采用粒子数表象，就能体现出场的粒子性，即自由场的能量和动量等都表示为一份份基本量值的相加。在粒子数表象中，将粒子的产生算符和消灭算符作为基本力学量算符，以代替场算符，其他力学量可通过它们的适当乘积组合表示。这时系统的状态可通过粒子占有数表示，系统的态矢量可通过粒子产生算符作用于真空态的形式表示。

二次量子化方法是现代多体理论及场论的基础。本章§3.1中先以谐振子为例介绍了粒子数表象的主要内容。§3.2中讨论了相干态，相干态可定义为粒子消算符的本征态，它具有许多有趣的特征。薛定谔波场的量子化，以及全同玻色子和全同费米子系统的量子化理论是§3.3和§3.4的内容。§3.5中讨论了电磁场的量子化。电磁场是一种相对论性波场，而§3.4和§3.5中所讨论的是非相对论性波场，但是我们将会看到，对它们建立量子场理论的手续完全类同。存在相互作用的两种场的系统的二次量子化理论将在§3.6中讨论。

§3.1 粒子数表象，声子

所谓粒子数表象，就是将粒子的产生算符和消灭算符作为基本力学量，其他力学量，如坐标、动量以及动能、势能、哈密顿算符等都可用它们表示；态矢量用产生算符作用于真空态表示。粒子数表象已广泛应用于全同粒子的量子理论以及量子场理论。

3.1.1 经典力学的拉格朗日形式和哈密顿形式

量子力学通常采用正则量子化方案，这种方案以粒子系统的广义坐标和正则动量之间满足某种不对易性关系作为其出发点，以便反映出粒子的波粒二象性。而广义坐标和正则动量的概念是在经典力学的拉格朗日形式和哈密顿形式中定义的。

外场 V 中经典粒子系统的作用量定义为

$$S=\int_{t_1}^{t_2}L(q,\dot{q},t)dt, \tag{3.1.1}$$

其中

$$L=T-V(q,\dot{q},t) \tag{3.1.2}$$

称为系统的拉格朗日(Lagrangian)或拉氏量，它是系统的广义坐标 q 和广义速度 $\dot{q}=\frac{dq}{dt}$ 的函数，时间 t 在这里是参量。式(1.1.2)中，$T=\frac{1}{2}m\dot{q}^2$ 是系统的动能，V 为势能。

根据最小作用量原理，系统可能取的实际状态的作用量为极值，即

$$\delta S=0 \quad [\delta q(t_1)=\delta q(t_2)=0]。 \tag{3.1.3}$$

由这个条件可导出拉氏方案中的动力学方程。为此，将式(3.1.1)代入式(3.1.3)，有

$$\delta S=\int_{t_1}^{t_2}\delta L\,dt=\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q}\delta q+\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\delta q\right)dt$$
$$=\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\right)\delta q dt=0,$$

由于 δq 为任意，所以由上式可得

$$\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}=0, \tag{3.1.4}$$

这就是在拉氏描述方案中的动力学方程，常称为拉氏方程。在一种特殊的，但却具有相当普遍性的情况下，系统的势能与广义速度无关，即 $V(q, t)$，此时 $\frac{\partial L}{\partial q}=\frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}}=m\ddot{q}$，而 $\frac{\partial L}{\partial q}=-\frac{\partial V}{\partial q}\equiv F$，于是拉氏方程现在可化为 $F=m\ddot{q}$，这就是通常的牛顿第二定律。

在经典力学的哈密顿形式中，描写系统的最重要的量是系统的哈密顿量。这种情况同样存在于量子力学以及量子场理论中，不过在这些现代量子理论中，哈密顿量应改变为哈密顿算符。经典力学中的哈密顿量定义为

$$H(q, p, t)=p\dot{q}-L, \tag{3.1.5}$$

其中 p 为正则动量。与广义坐标 q 相对应的正则动量定义为

$$p=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}。 \tag{3.1.6}$$

应当注意，拉氏量 L 应理解为广义坐标 q 和广义速度 $\dot{q}$ 的函数；而哈密顿量 H 应理解为广义坐标 q 和正则动量 p 的函数。注意到这一点，可由式(3.1.5)和定义式(3.1.6)，得到哈密顿方案中的动力学方程：

$$\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p},\quad \dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial q}. \tag{3.1.7}$$

证明如下：

$$\frac{\partial H}{\partial p}=\dot{q}+p\frac{\partial \dot{q}}{\partial p}-\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}}{\partial p}=\dot{q},$$

这就是哈密顿方程(3.1.7)中的第一式。类似地有

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial q}&=p\frac{\partial \dot{q}}{\partial q}-\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}}{\partial q}\\&=p\frac{\partial \dot{q}}{\partial q}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}-p\frac{\partial \dot{q}}{\partial q}\\&=-\dot{p},\end{aligned}$$

这就是式(3.1.7)中的第二式。如果外场是保守场，$V(q, t)$仅仅是 q 的函数，则有

$$p=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}=\frac{\partial T}{\partial \dot{q}}=m\dot{q},$$

于是系统的哈密顿量可表示为

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(q, t)。\tag{3.1.8}$$

现在将上述讨论推广到 N 个粒子的系统，这时

$$T=\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}m_i\dot{q}_i^2,\ V=V(q_1, q_2, \cdots q_N, t)。$$

此时有 N 个拉氏方程：

$$\frac{\partial L}{\partial q_i}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=0。\tag{3.1.9}$$

对应于 N 个广义坐标 q_i，有 N 个正则动量：

$$p_i=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}。\tag{3.1.10}$$

系统的哈密顿量为

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m_i}+V。\tag{3.1.11}$$

此时的哈密顿方程包含 $2N$ 个一阶微分方程：

$$\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i},\quad \dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial \dot{q}_i}。\tag{3.1.12}$$

3.1.2 谐振子状态的粒子数表象描述

一维经典谐振子系统的哈密顿量为

$$H=\frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2。\tag{3.1.13}$$

其中粒子的质量记为 μ。当过渡到量子理论时，最根本的是应注意到原来经典概念中的粒子的波粒二象性。在量子力学中这一点是通过对它的正则坐标和正则动量附加如下不对易性关系而达到的：

$$[x, p]=i\hbar\tag{3.1.14}$$

根据概率和统计理论，任何两个量 A、B 的多次测量中所得到的根

方差(涨落)$\Delta A(\equiv\sqrt{\langle(\Delta A)^2\rangle})$和 ΔB 应满足如下不等式(许瓦茨不等式):

$$\Delta A\cdot\Delta B\geqslant\frac{1}{2}|[A,\ B]|。\tag{3.1.15}$$

所以,式(3.1.14)不对易性关系便意味着 Δx 和 Δp 不可能同时等于零,这正好符合波粒二象性的要求。

在量子力学中对系统状态的描述,包括对力学量和态矢量的描述,可以在任何表象中进行。但是正如我们曾经在§1.2中所做的那样,因为量子力学中的定态薛定谔方程就是哈密顿算符的本征方程,所以求解定态薛定谔方程的问题在能量表象中最方便。为此我们曾经引进两个非厄米算符,以替代 x 和 p 作为描写系统的基本力学量:

$$\begin{aligned}b&=\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{i}{\mu\omega}p\right),\\ b^+&=\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}\left(x-\frac{i}{\mu\omega}p\right)。\end{aligned}\tag{3.1.16}$$

其逆变换关系是

$$\begin{aligned}x&=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(b^++b),\\ p&=i\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega}{2}}(b^+-b)。\end{aligned}\tag{3.1.17}$$

b 和 b^+ 所满足的基本对易关系是

$$[b,\ b^+]=1。\tag{3.1.18}$$

采用 b 和 b^+ 作为基本力学量后,谐振子系统的哈密顿算符可表示为

$$H=\hbar\omega\left(b^+b+\frac{1}{2}\right)。\tag{3.1.19}$$

利用阶梯方法我们得到了谐振子系统的能量本征值为

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

本征态为

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(b^+)^n|0\rangle, \tag{3 1.20}$$

其中 $|0\rangle$ 为谐振子基态，可定义为

$$b|0\rangle=0。 \tag{3.1.21}$$

算符 b 和 b^+ 的所有性质可通过如下它们对谐振子能量表象基矢的作用而显示出来：

$$\begin{aligned} b|n\rangle&=\sqrt{n}\,|n-1\rangle,\\ b^+|n\rangle&=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \end{aligned} \tag{3.1.22}$$

因为由上式可立即得到 b 和 b^+ 在谐振子能量表象中的矩阵元。于是谐振子能量表象完全确立，任何涉及到一维谐振子的问题原则上可在这个表象中解决。

谐振子系统是物理学中的一个非常典型的系统。上述结果表明，任何谐振子系统的基本状态 $|n\rangle$ 的能量是量子化的，每份能量子的值为 $\hbar\omega$。在谐振子系统的讨论中人们常常将具有这个值的能量子称为“声子”(phonon)，并将 $n=1$ 的态 $|1\rangle$ 称为单声子激发态；$n=2$ 的态 $|2\rangle$ 称为两声子激发态。因此谐振子基态 $|0\rangle$ 就是不存在声子的状态，称为真空态。应当注意，真空态的能量并不为零。谐振子能量本征态也就是声子数确定的状态，声子数算符可定义为

$$n=b^+b。 \tag{3.1.23}$$

于是谐振子哈密顿算符可记为

$$H=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{3.1.24}$$

应当注意，其中 n 是算符。自由谐振子的能量表象也就是声子数表象，在这个表象中声子数算符当然是对角化矩阵：

$$n=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0\cdots \\ & & \cdots & & \end{bmatrix}。 \tag{3.1.25}$$

在声子数表象或更一般地说在粒子数表象(Occupation representation)中，基本算符是 b 和 b^+。由于式(3.1.22)，我们称 b 为消灭算符(Annihilation operator)，它的作用使状态的声子数减少 1；b^+ 为产生算符(Creation operator)，它的作用使状态的声子数增加 1。

应当指出，上述用粒子数表象对谐振子状态进行的描写并没有得到任何新的结果。不过，关于粒子数表象的概念可进一步推广到多粒子系统和量子场系统，那时我们将期望获得新的结果。

上面讨论并未涉及到状态随时间的演化问题，或者说我们仅仅讨论了初始时刻 $t=0$ 的状态的描述。状态随时间的演化可采用不同绘景。由于在粒子数表象中我们将状态记为产生算符作用在真空态的形式[式(3.1.20)]，所以方便的是使真空态不随时间改变，而使力学量随时间改变。所以常采用海森伯绘景。在海森伯绘景中，一维自由谐振子消灭算符 $b(t)$ 所满足的动力学方程是

$$\frac{\partial b(t)}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}[b(t),\ H]=-i\omega[b(t),\ b^+(t)b(t)]$$
$$=-i\omega b(t),$$

上式的满足初始条件 $b(t)|_{t=0}=b$ 的解为

$$b(t)=be^{-i\omega t}。\tag{3.1.26}$$

产生消符随时间的演化规律为

$$b^+(t)=b^+e^{i\omega t}。\tag{3.1.27}$$

将上述结果代入式(3.1.17)，可得谐振子的坐标和动量算符随时间的演化规律：

$$\begin{aligned}x(t)&=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(b^+e^{i\omega t}+be^{-i\omega t}),\\ p(t)&=i\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega}{2}}(b^+e^{i\omega t}-be^{-i\omega t})。\end{aligned}\tag{3.1.28}$$

显然谐振子的哈密顿算符并不随时间改变，这正是我们所期待的。

3.1.3 非耦合谐振子集合

N 个非耦合谐振子系统的哈密顿算符可简单地写为单粒子哈密顿算符之和：

$$H=\sum_{j=1}^{N}H_j=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2\mu_j}(p_j^2+m_j\omega_j^2x_j^2)。\tag{3.1.29}$$

为了转化到粒子数表象，需引进 N 个声子消灭算符和 N 个声子产生算符：

$$\begin{aligned}b_j&=\sqrt{\frac{\mu_j\omega_j}{2\hbar}}\left(x_j+i\frac{p_j}{\mu_j\omega_j}\right),\\ b_j^+&=\sqrt{\frac{\mu_j\omega_j}{2\hbar}}\left(x_j-i\frac{p_j}{\mu_j\omega_j}\right)。\end{aligned}\tag{3.1.30}$$

它们之间满足如下对易关系：

$$\begin{aligned}&[b_i,\ b_j]=0,\\ &[b_i^+,\ b_j^+]=0,\\ &[b_i,\ b_j^+]=\delta_{ij}。\end{aligned}\tag{3.1.31}$$

哈密顿算符现在表示为

$$H=\sum_{i=1}^{N}\hbar\omega_i\left(b_i^+b_i+\frac{1}{2}\right),\tag{3.1.32}$$

其中 $E_0=\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}\hbar\omega_i$ 为真空态能量，或零点能。利用基本对易关系(3.1.31)不难证明，哈密顿算符的本征态为

$$|n_1,\ n_2,\ \cdots n_i,\ \cdots n_N\rangle=\prod_{i=1}^{N}\frac{1}{\sqrt{n_i!}}(b_i^+)^{n_i}|0\rangle,\tag{3.1.33}$$

其中，真空态定义为

$$b_i|0\rangle=0\quad(i=1,\ 2,\ \cdots,\ N)\tag{3.1.34}$$

由式(3.1.32)的哈密顿算符所描写的量子系统也常称为包含 N 个独立振动模式的系统，每一种 ω_i 代表一种振动模式或简振模式。振动模 ω_i 的声子数算符为

$$n_i=b_i^+b_i,\tag{3.1.35}$$

这种振动模声子的能量为 $\hbar\omega_i$。系统的总声子数算符为

$$n=\sum_{i=1}^{N}n_i=\sum_{i=1}^{N}b_i^+b_i。\tag{3.1.36}$$

式(3.1.33)的状态就是能量为 $\hbar\omega_1$, $\hbar\omega_2$, …, $\hbar\omega_N$ 的振动模声子数分别为 n_1, n_2, …, n_N 的状态，它的能量显然为(不包括真空态能量)

$$E=\sum_i \hbar\omega_i n_i。 \tag{3.1.37}$$

最后要指出，上面的讨论中每种基本振动模声子的数目可以任意，所以声子是一种玻色子。此外，上述引进的声子纯粹指一种能量子，它并不是一种真实粒子。

3.1.4 线性原子链(经典处理)

前面的讨论表明，对于非耦合谐振子系统，可以方便地引进粒子数表象描述。现在我们来考察耦合谐振子系统。固体物理学中常用耦合谐振子系统来模拟晶体点阵结构。为简单起见，我们以一维谐振子链为例。这种系统的哈密顿量可表示为

$$H=\sum_n\left[\frac{1}{2\mu}p_n^2+\frac{f}{2}(x_n-x_{n+1})^2\right], \tag{3.1.38}$$

其中假定每一原子的质量相等，

$$V(x_n, x_{n+1})=\frac{f}{2}(x_n-x_{n+1})^2$$

是相邻原子间的相互作用势能，f 量度了其间的耦合强度。

该经典系统的哈密顿方程为

$$\dot{x}_n=\frac{\partial H}{\partial p_n}=\frac{p_n}{\mu},$$

$$\begin{aligned}\dot{p}_n&=-\frac{\partial H}{\partial x_n}=-f\sum_m(x_m-x_{m+1})\frac{\partial}{\partial x_n}(x_m-x_{m+1})\\&=-f\sum_m(x_m-x_{m+1})(\delta_{n,m}-\delta_{n,m+1})\\&=f(x_{n+1}+x_{n-1}-2x_n)。\end{aligned}$$

上两组方程联立，便得

$$\mu\ddot{x}_n=f(x_{n+1}+x_{n-1}-2x_n), \tag{3.1.39}$$

这是关于第 n 个原子的牛顿第二定律，其运动规律受到前后相邻原子的制约。上式应满足周期性边界条件：

$$x_n = x_{n+N}, \tag{3.1.40}$$

其中 N 为链的原子数，它的量级当然是阿伏伽德罗数。

上述用坐标作为变量的描述中，哈密顿量中出现耦合项。现在要问，能否通过某种手续使谐振子链切断，成为一个非耦合谐振子集合？因为，对于非耦合谐振子系统可方便地采用粒子数表象过渡到量子系统。回答是肯定的。

为此，作傅里叶变换：

$$x_n(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k (A_k(t) e^{ikna} + A_k^*(t) e^{-ikna})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k (A_k(t) + A_{-k}^*(t)) e^{ikna}, \tag{3.1.41}$$

其中 a 为相邻原子平衡位置之间的距离，称为格矩。由于周期性边界条件，$e^{ikna} = e^{ik(n+N)a}$，所以 kNa 应等于 2π 的整数倍，即 k 只能取分立值：

$$k = \frac{2\pi}{Na} l \quad (l = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)。 \tag{3.1.42}$$

在展开式(3.1.41)的求和记号中取互为复共轭的两项相加的形式，以便明显地保证 $x_n(t)$ 为实数，即

$$x_n^*(t) = x_n(t)。 \tag{3.1.43}$$

此外，在导出展开式(3.1.41)的第二步形式中，应用了求和变量 k 取值范围的对称性。展开式中，$\frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikna}$ 可理解为基矢，它满足如下的正交归一性：

$$\sum_{n=1}^{N} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikna}\right)^* \left(\frac{1}{\sqrt{N}} e^{ik'na}\right) = \delta_{kk'}。 \tag{3.1.44}$$

[例 1] 证明式(3.1.44)。

解：当 $k = k'$ 时，式(3.1.44)等号左边化为

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (e^{ikna})^* (e^{ikna}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} 1 = 1。$$

当 $k \neq k'$ 时，利用式(3.1.42)，式(3.1.44)左边化为

$$\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} e^{i(k'-k)na} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \exp\left[i(l'-l)\frac{2\pi n}{N}\right],$$

再利用数学等式

$$\sum_{n=1}^{N} d^n = \frac{1-d^n}{1-d}\, d,$$

我们有

$$\sum_{n=1}^{N} e^{i(k'-k)na} = \frac{1-\exp[i(l'-l)2\pi]}{1-\exp\left[i(l'-l)\frac{2\pi}{N}\right]} \cdot \exp\left[i(l'-l)\frac{2\pi}{N}\right]$$

$$= 0,$$

因为 $\exp[i(l'-l)2\pi] \equiv 1$。于是得证。

将展开式(3.1.41)代入动力学方程(3.1.39),有

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k [\ddot{A}_k(t) + \ddot{A}^*_{-k}(t)]e^{ikna} = \frac{f}{\mu}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k [A_k(t) + A^n_{-k}(t)] \cdot [e^{ik(n+1)a} + e^{ik(n-1)a} - 2e^{ikna}]。$$

上式等号两边乘以 $\frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ik'na}$,并对 n 求和,利用正交性条件(3.1.44),便可得到 $A_k(t)$ 所满足的方程:

$$\ddot{A}_k(t) = \frac{f}{\mu}(e^{ika} + e^{-ika} - 2)A_k(t)。 \qquad (3.1.45)$$

为了求解上式,令

$$A_k(t) = A_k e^{-i\omega_k t}。 \qquad (3.1.46)$$

将上式代入方程(3.1.45),便可得到频率 ω_k 与波数 k 之间的函数关系:

$$-\omega_k^2 = \frac{f}{\mu}(e^{ika} + e^{-ika} - 2) = \frac{2f}{\mu}(\cos ka - 1), \qquad (3.1.47)$$

或

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{f}{\mu}}\,|\sin(ka/2)|。 \qquad (3.1.48)$$

此结果还表明

$$\omega_k = \omega_{-k}。 \qquad (3.1.49)$$

如式(3.1.48)的频率和波数之间的关系常称为色散关系。色散关

系是由系统的动力学方程决定的，它包含了系统的相互作用的信息。在量子理论中，频率与能量相联系，波数与动量相联系，因此量子系统的色散关系也就是粒子的能量和动量之间的关系。显然，对于自由粒子、谐振子或其他势场中的粒子来说，它们的能量与动量关系，即色散关系是不一样的。所以对于量子系统的色散关系的研究是固体物理学和其他量子物理学的一个重要内容。

将式(3.1.46)代入(3.1.41)，得

$$x_n(t)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k(A_k e^{ikna-i\omega_k t}+A_k^* e^{-ikna+i\omega_k t})。\qquad(3.1.50)$$

如果令

$$q_k(t)=A_k(t)+A_{-k}^*(t),\qquad(3.1.51)$$

则 $x_n(t)$ 的傅里叶变换式也可记为

$$x_n(t)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k q_k(t)e^{ikna}。\qquad(3.1.52)$$

利用正交性条件(3.1.44)，上式的逆变换关系为

$$q_k(t)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n x_n(t)e^{-ikna}。\qquad(3.1.53)$$

由哈密顿方程[$\dot{x}_n(t)=p_k(t)/\mu$]，有

$$p_n(t)=\mu\dot{x}_n(t)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k p_k(t)e^{-ikna},\qquad(3.1.54)$$

其中

$$p_k(t)=i\mu\omega_k[A_k^*(t)-A_{-k}(t)]。\qquad(3.1.55)$$

式(3.1.54)的逆变换关系为

$$p_n(t)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_r p_n(t)e^{ikna}。\qquad(3.1.56)$$

利用傅里叶变换式(3.1.52)和(3.1.54)，线性谐振子链哈密顿量中的动能项可化为

$$\frac{1}{2\mu}\sum_n p_n p_n=\frac{1}{2\mu N}\sum_n\sum_{kk'}(p_k(t)e^{-ikna})(p_{k'}(t)e^{-ik'na})$$

$$=\frac{1}{2\mu}\sum_{kk'}p_k(t)p_{k'}(t)\delta_{k',-k}$$

$$=\frac{1}{2\mu}\sum_k p_k(t)p_{-k}(t),$$

而势能项中的坐标有关因子可化为

$$\begin{aligned}\sum_n (x_n-x_{n+1})^2 &= \frac{1}{N}\sum_n\sum_{kk'} q_k[e^{ikna}-e^{ik(n+1)a}]\\ &\quad\cdot q_{k'}[e^{ik'na}-e^{ik'(n+1)a}]\\ &=\sum_{kk'} q_k q_{k'}(1-e^{ika})(1-e^{ik'a})\sum_n\frac{1}{N}e^{i(k+k')na}\\ &=\sum_k q_k q_{-k}(2-e^{ika}-e^{-ika})\\ &=\frac{\mu}{2}\sum_k \omega_k^2 q_k q_{-k},\end{aligned}$$

上式最后一步推导中应用了色散关系(3.1.47),且 q_k 和 $q_{k'}$ 都是 t 的函数。此外在我们前面的表述中很容易看出,在普通空间中,有

$$x_n^*(t)=x_n(t),\ p_n^*(t)=p_n(t); \tag{3.1.57}$$

在 k 空间中,有

$$q_k^*(t)=q_{-k}(t),\ p_k^*(t)=p_{-k}(t)。 \tag{3.1.58}$$

于是谐振子链的哈密顿量在 k 空间中可表示为

$$H=\frac{1}{2\mu}\sum_k p_k^* p_k+\frac{1}{2}\mu\sum_k \omega_k^2 q_k^* q_k。 \tag{3.1.59}$$

这个结果表明,在 k 空间中看来,谐振子链退耦为非耦合谐振子集合。应当注意,现在的 ω_k 与 k 之间并不是简单线性关系,只有在 $ka\ll 1$ 的情况下才近似为线性关系。

3.1.5 线性原子链(量子力学处理)

采用正则量子化方案,由经典描述过渡到量子描述只需令正则坐标和正则动量之间满足同时性对易关系:

$$\begin{aligned}&[x_n(t),\ x_m(t)]=0,\\ &[p_n(t),\ p_m(t)]=0,\\ &[x_n(t),\ p_m(t)]=i\hbar\delta_{nm}。\end{aligned} \tag{3.1.60}$$

利用傅里叶变换(3.1.52)和(3.1.54)不难证明,在 k 空间上述对易关系化为

$$
\begin{aligned}
&[q_k(t),\ q_{k'}(t)]=0,\\
&[p_k(t),\ p_{k'}(t)]=0,\\
&[q_k(t),\ p_{k'}(t)]=i\hbar\delta_{kk'}。
\end{aligned}
\tag{3.1.61}
$$

这表明，对易关系在傅里叶变换下保持不变。过渡到量子力学后，力学量都是算符。式(3.1.57)、(3.1.58)和(3.1.59)应改写为

$$
x_n^-(t)=x_n(t),\ p_n^+(t)=p_n(t),
\tag{3.1.62}
$$

$$
q_k^+(t)=q_{-k}(t),\ p_k^+(t)=p_{-k}(t),
\tag{3.1.63}
$$

$$
H=\frac{1}{2\mu}\sum_k p_k^+p_k+\frac{1}{2}\mu\sum_k\omega_k^2q_k^+q_k。
\tag{3.1.64}
$$

式(3.1.62)和(3.1.64)保证了 x_n、p_n 和 H 的厄米性，这显然是我们所期待的。

从式(3.1.64)可以看出，我们已将坐标空间中的谐振子链耦合系统变换为 k 空间的包含各种简振模式的非耦合谐振子集合。因此在 k 空间中将这个量子力学问题纳入粒子数表象，并导出能量本征值问题的解便成为一件非常简单的事。

令

$$
\begin{aligned}
b_k(t)&=\sqrt{\frac{\mu\omega_k}{2\hbar}}\left[q_k(t)+\frac{\dot{q}}{\mu\omega_k}p_{-k}(t)\right]\\
b_k^+(t)&=\sqrt{\frac{\mu\omega_k}{2\hbar}}\left[q_{-k}(t)-\frac{\dot{q}}{\mu\omega_k}p_k(t)\right]。
\end{aligned}
\tag{3.1.65}
$$

相应的逆变换为

$$
\begin{aligned}
q_k(t)&=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_k}}[b_{-k}^+(t)+b_k(t)],\\
p_k(t)&=i\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega_k}{2}}[b_k^+(t)-b_{-k}(t)]。
\end{aligned}
\tag{3.1.66}
$$

可以证明，粒子数表象中的基本对易关系为

$$
\begin{aligned}
&[b_k(t),\ b_{k'}(t)]=0,\\
&[b_k^+(t),\ b_{k'}^+(t)]=0,\\
&[b_k(t),\ b_{k'}^+(t)]=\delta_{kk'}。
\end{aligned}
\tag{3.1.67}
$$

哈密顿算符式(3.1.64)化为

$$H=\sum_k \hbar\omega_k\left(b_k^+ b_k+\frac{1}{2}\right)。 \tag{3.1.68}$$

将式(3.1.51)、(3.1.55)代入式(3.1.66)，可得

$$b_k(t)=\sqrt{\frac{2\mu\omega_k}{\hbar}}\,A_k(t), \tag{3.1.69}$$

再注意到式(3.1.46)，显然有

$$b_k(t)=b_k e^{-i\omega_k t},\quad b_k=\sqrt{\frac{2\mu\omega_k}{\hbar}}\,A_k。 \tag{3.1.70}$$

上述 $b_k(t)$ 与 t 的函数关系当然也与海森伯动力学方程的结果一致。

我们于是可立即写出 H 的本征值问题的解。H 的本征值为

$$E=\sum_k \hbar\omega_k\left(n_k+\frac{1}{2}\right), \tag{3.1.71}$$

相应的本征矢为

$$|n_{k_1},\ n_{k_2},\ \cdots\rangle=\prod_k|n_k\rangle=\prod_k\frac{1}{\sqrt{n_k!}}(b_k^+)^{n_k}|0\rangle。 \tag{3.1.72}$$

最后应当指出，k 空间中的正则坐标 q_k（当然还有正则动量 p_k）并非仅仅与实际坐标空间谐振子链中的某个原子坐标有关，而与所有原子的坐标有关，q_k 是一种“集体坐标”，它所描写的是谐振子链的集体效应。所以我们实际上是用 k 空间的这个非耦合谐振子系统来描写耦合谐振子链的集体效应。在 k 空间的声子激发描写的是耦合系统的集体激发。于是我们采用粒子数表象找到了一种描述多体系统的有效方法。

§3.2 相 干 态

按照讨论的程序，这里我们应将上节中引进的粒子数表象立即应用于场的量子化和全同粒子系统的问题。但是我们这里还是插入关于相干态的内容。这样做有两点理由。首先，本世纪 60 年代初对相干态系统的研究发现了许多有趣的性质，并且发现它在

现代量子理论中有许多应用。人们发现，诸如激光、超流态和超导态等都是相干态。其次，在讨论相干态问题时会涉及到许多关于消灭算符和产生算符的运算方法，而这些方法对于我们进一步的学习是重要的。

3.2.1 相干态的定义

在1.5.1中曾经讨论了空间平移变换算符 $D(\rho)$，它是动量算符生成的一个幺正算符，描写了空间平移变换下量子系统的态矢量和力学量的变换规律。一维空间平移变换算符可表示为

$$D(\rho)=e^{-i\rho p/\hbar}。 \tag{3.2.1}$$

在此变换下，坐标和动量算符的变换规律是

$$D(\rho)xD^{-1}(\rho)=x-\rho, \tag{3.2.2}$$

$$D(\rho)pD^{-1}(\rho)=p。 \tag{3.2.3}$$

现在用声子消灭算符和产生算符表示上述结果。因为

$$\begin{aligned} x&=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(b^{+}+b),\\ p&=i\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega}{2}}(b^{+}-b), \end{aligned} \tag{3.2.4}$$

所以位移算符可表示为

$$D(\alpha)=e^{\alpha b^{+}-\alpha^{*}b}, \tag{3.2.5}$$

其中 $\alpha=\rho\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}$，这里 α 为实数，但我们以后将它推广为复数。$D(\alpha)$ 显然具有如下性质：

$$D^{-1}(\alpha)=D(-\alpha)=D^{+}(\alpha)。 \tag{3.2.6}$$

利用式(3.2.2)、(3.2.3)和(3.2.4)可得 b 和 b^{+} 在位移算符作用下的变换规律：

$$\begin{aligned} D(\alpha)bD^{-1}(\alpha)&=b-\alpha,\\ D(\alpha)b^{+}D^{-1}(\alpha)&=b-\alpha^{*}。 \end{aligned} \tag{3.2.7}$$

现在我们来考察声子真空态的位移态，记为 $|\alpha\rangle$，并称它为相干态：

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle。 \tag{3.2.8}$$

如果将 b 作用于上式，利用式(3.2.7)，并注意到 $b|0\rangle=0$，可得

$$b|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle。 \tag{3.2.9}$$

这个结果表明，相干态 $|\alpha\rangle$ 也是声子消灭算符的本征态，本征值为 α。式(3.2.8)和(3.2.9)常被看作相干态的两种等价的定义。

相干态的定义式(3.2.9)用坐标和动量算符可表示为

$$b|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{i}{\mu\omega}p\right)|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle。 \tag{3.2.10}$$

在坐标表象中，由上式可得

$$\frac{d}{dx}\langle x|\alpha\rangle = -2\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}x-\alpha\right)\langle x|\alpha\rangle。 \tag{3.2.11}$$

此式的满足归一化条件的解为(可相差一与 x 无关的位相因子)

$$\psi_\alpha(x)\equiv\langle x|\alpha\rangle = \left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left[-\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}x-\alpha\right)^2\right], \tag{3.2.12}$$

这是一个高斯波包在 $t=0$ 时刻的函数形式。

处在电场 $\mathscr{E}$ 中的荷电谐振子的基态是相干态的一个例子。该系统的哈密顿算符为

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2-e\mathscr{E}x \\ &= \frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(x-\frac{e\mathscr{E}}{\mu\omega^2}\right)^2-\frac{e^2\mathscr{E}^2}{2\mu\omega^2}。 \end{aligned} \tag{3.2.13}$$

这是一个平衡位置在 $\rho=e\mathscr{E}/\mu\omega^2$ 处的谐振子，它的基态在波动力学中已经得到，具有式(3.2.12)的形式。

相干态可表示为如下几种形式：

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= e^{ab^+-\alpha^*b}|0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}e^{ab^+}|0\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_n\frac{\alpha^n}{n!}(b^+)^n|0\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_n\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle, \end{aligned} \tag{3.2.14}$$

其中第二种形式的推导中应用了如下算符公式（称 Bake-Haus-

doff 公式或称 Wely 公式)：

$$e^{A+B}=e^{-\frac{1}{2}[A,B]}\cdot e^{A}\cdot e^{B}\quad([A,B]\text{与}A\text{和}B\text{对易}),\tag{3.2.15}$$

以及如下结果：

$$e^{-a^{*}b}|0\rangle=|0\rangle。\tag{3.2.16}$$

从式(3.2.14)可以看出，相干态不是声子数确定的状态，而是各种声子数状态的相干叠加态，其中处于声子真空态的概率幅为

$$\langle 0|\alpha\rangle=e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}}。\tag{3.2.17}$$

在进一步讨论相干态的性质之前，我们再来回答一个问题：声子产生算符 b^{+} 是否存在本征态？我们采用反证法。如果存在本征态，并设为 $|\beta\rangle$，则有

$$b^{+}|\beta\rangle=\beta|\beta\rangle。$$

现将声子数算符本征态左矢 $\langle n|$ 左乘上式，有

$$\langle n|b^{+}|\beta\rangle=\beta\langle n|\beta\rangle。$$

因为 $n=0$ 时，$\langle 0|b^{+}=(b|0\rangle)^{+}=0$；$n\neq 0$ 时，$\langle n|b^{+}=(b|n\rangle)^{+}=(\sqrt{n}\,|n-1\rangle)^{+}=\langle n-1|\sqrt{n}$，所以由上式可得

$$\beta\langle 0|\beta\rangle=0,\tag{3.2.18}$$

$$\langle n-1|\beta\rangle=(\beta/\sqrt{n})\langle n|\beta\rangle。\tag{3.2.19}$$

所以，若 $\beta=0$，则 $\langle n-1|\beta\rangle\equiv 0(n=1,2,\cdots)$，即 $\langle n|\beta\rangle\equiv 0(n=0,1,2,\cdots)$；若 $\beta\neq 0$，则 $\langle 0|\beta\rangle=0$，且再由式(3.2.19)相继可得，在任何情况下 $\langle n|\beta\rangle\equiv 0$。于是无论 β 是否为零，恒有 $|\beta\rangle=0$。这表明，b^{+} 不存在本征态。

3.2.2 相干态的基本性质

相干态有若干非常感兴趣的性质。

1. 声子数不确定，且呈泊松分布。

由式(3.2.14)可以看出，相干态中包含 n 个声子状态的概率幅为

$$A_{n}=\langle n|\alpha\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\alpha^{n}e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}},\tag{3.2.20}$$

所以$|\alpha\rangle$中出现n个声子状态的概率为

$$P_n=|\langle n|\alpha\rangle|^2=\frac{|\alpha|^{2n}}{n!}e^{-|\alpha|^2}。\tag{3.2.21}$$

注意到相干态的平均声子数为

$$\langle\alpha|n|\alpha\rangle=\langle\alpha|b^+b|n\rangle=|\alpha|^2,\tag{3.2.22}$$

于是有

$$P_n=|\langle n|\alpha\rangle|^2=\frac{|\langle n\rangle|^n}{n!}e^{-\langle n\rangle}。\tag{3.2.23}$$

这种分布在概率与统计理论中称为泊松(Poisson)分布，是一种典型的离散型分布。

2．具有最小不确定性。

由于

$$\langle\alpha|b|\alpha\rangle=\alpha;\ \langle\alpha|b^+|\alpha\rangle=\alpha^*,\tag{3.2.24}$$

所以有

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle&=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\langle\alpha|(b^++b)|\alpha\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(\alpha^*+\alpha)\\
&=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\,2\mathrm{Re}\alpha,\\
\langle p\rangle&=i\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega}{2}}\langle\alpha|(b^+-b)|\alpha\rangle=i\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega}{2}}(\alpha^*-\alpha)\\
&=\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega}{2}}\,2\,\mathrm{Im}\,\alpha,\\
\langle x^2\rangle&=\frac{\hbar}{2\mu\omega}[1+(\alpha^*+\alpha)^2]=\frac{\hbar}{2\mu\omega}[1+4(\mathrm{Re}\,\alpha)^2],\\
\langle p^2\rangle&=\frac{\mu\hbar\omega}{2}[1-(\alpha^*-\alpha)^2]=\frac{\mu\hbar\omega}{2}[1+4(\mathrm{Im}\,\alpha)^2]。
\end{aligned}\tag{3.2.25}$$

利用上述结果可以算出相干态中坐标和动量的方差：

$$\begin{aligned}
\langle(\Delta x)^2\rangle&\equiv\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2=\frac{\hbar}{2\mu\omega},\\
\langle(\Delta p)^2\rangle&\equiv\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2=\frac{\mu\hbar\omega}{2}。
\end{aligned}\tag{3.2.26}$$

所以有

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle=\frac{\hbar^2}{4}。\qquad(3.2.27)$$

可见，相干态是具有最小不确定性的量子态，或者说是最接近经典态的量子态。在相干态发现以前，人们所知道的唯一的具有最小不确定性的状态是谐振子基态$|0\rangle$。

3．不具有正交性，但仍可归一化。

相干态是粒子消灭算符b的本征态。由于b不是厄米算符，所以它的本征值不一定是实数，本征矢也不一定正交。为了说明相干态一般不正交的性质，设$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$为b的两个不同的本征矢，本征值分别为α和β。利用相干态表式(3.2.14)，有

$$\langle\beta|\alpha\rangle=e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)}\langle0|e^{\beta^*b}\cdot e^{\alpha b^+}|0\rangle。\qquad(3.2.28)$$

利用BH算符公式(3.2.15)可得如下算符公式

$$e^A\cdot e^B=e^{[A,B]}\cdot e^B\cdot e^A。\qquad(3.2.29)$$

利用这一公式可将(3.2.28)式化为

$$\langle\beta|\alpha\rangle=e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2-2\beta^*\alpha)},\qquad(3.2.30)$$

或

$$|\langle\beta|\alpha\rangle|^2=e^{-|\alpha-\beta|^2}。\qquad(3.2.31)$$

这表明，相干态一般并不正交，但仍然可归一化。$|\alpha-\beta|$的值量度了复平面上相干态$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$偏离正交性的程度。

4．具有完全性，形成完全集。

相干态虽然不具有正交性，但仍然具有完全性。相干态$|\alpha\rangle$的态指标α可连续取值，并一般定义在整个复平面上。令$\alpha=re^{i\varphi}$，所以$d^2\alpha=d(\mathrm{Re}\,\alpha)\cdot d(\mathrm{Im}\,\alpha)=r\,dr\,d\varphi$。利用相干态表式(3.2.14)可得

$$\frac{1}{\pi}\int d^2\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha|=\sum_{mn}\frac{|m\rangle\langle n|}{\sqrt{m!n!}}\frac{1}{\pi}\int_0^\infty dr\,e^{-r^2}r^{m+n+1}\cdot\int_0^{2\pi}d\varphi e^{i(m-n)\varphi},$$

利用如下积分式：

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-n)\varphi} = 2\pi\delta_{mn}, \quad \int_0^{\infty} dr^2 e^{-r^2} \cdot r^{2n} = n!,$$

以及本征矢集$\{|n\rangle\}$的完全性条件$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$，有

$$\frac{1}{\pi}\int d^2\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1。 \tag{3.2.32}$$

这就是相干态的完全性条件，因此相干态也形成一个完全集。这种不正交的完全集常称为过完全集(Overcomplete Set)。

*3.2.3 相干态表象

由于相干态具有完全性，因此可用它作为基矢来构造描写量子系统状态的希尔伯空间。

在粒子数表象中，任何振子的态矢量右矢$|f\rangle$总可表示为某个粒子产生算符的函数作用于真空态的形式：

$$|f\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \left[\sum_n \frac{c_n}{\sqrt{n!}}(b^+)^n\right]|0\rangle \equiv f(b^+)|0\rangle, \tag{3.2.33}$$

其中$f(b^+)$是一个b^+的幂级数。所以任一态矢量在相干态中的表示为

$$\begin{aligned}\langle\alpha|f\rangle &= \langle\alpha|f(b^+)|0\rangle = f(\alpha^*)\langle\alpha|0\rangle \\ &= f(\alpha^*)e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}。\end{aligned} \tag{3.2.34}$$

态矢量右矢$|f\rangle$可在相干态表象中展开为

$$|f\rangle = \frac{1}{\pi}\int |\alpha\rangle\langle\alpha|f\rangle d^2\alpha = \frac{1}{\pi}\int |\alpha\rangle f(\alpha^*) e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} d^2\alpha, \tag{3.2.35}$$

其中$\langle\alpha|f\rangle = f(\alpha^*)e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}$即为展开系数。态矢量左矢$\langle g|$和右矢$|f\rangle$的内积在相干态表象中可表示为

$$\begin{aligned}\langle g|f\rangle &= \frac{1}{\pi}\int \langle g|\alpha\rangle\langle\alpha|f\rangle d^2\alpha \\ &= \frac{1}{\pi}\int [g(\alpha^*)]^* f(\alpha^*) e^{-|\alpha|^2} d^2\alpha。\end{aligned} \tag{3.2.36}$$

作为特例，若$|f\rangle = |n\rangle$，则式(3.1.34)可化为

$$\langle\alpha|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle\alpha|(b^+)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\alpha^*)^n\langle\alpha|0\rangle,$$

即

$$\langle\alpha|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\alpha^*)^n e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}。\qquad(3.2.37)$$

这是声子数本征态$|n\rangle$在相干态中的表示。上式取复共轭，可得

$$\langle n|\alpha\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\alpha^n e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2},\qquad(3.2.38)$$

这是相干态在声子数表象中的表示，实际上我们已在式(3.2.20)对它进行了讨论。

应当指出，由于不存在正交性，相干态彼此并不线性独立。因此可引进某个相干态$|\alpha\rangle$在相干态表象中的表示。实际上，两相干态的内积公式(3.2.30)可理解为相干态$|\alpha\rangle$在相干态表象$\{|\beta\rangle\}$中的表示。相干态$|\alpha\rangle$因此在这个相干态表象中可展开为

$$\begin{aligned}|\alpha\rangle&=\frac{1}{\pi}\int|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle d^2\beta\\&=\frac{1}{\pi}\int|\beta\rangle e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2-2\beta^*\alpha)}d^2\beta。\end{aligned}\qquad(3.2.39)$$

上面讨论了相干态表象中态矢量的表示，现在讨论力学量的表示。任何力学量T在粒子数表象中可表示为

$$\begin{aligned}T&=\sum_{mn}|m\rangle\langle m|T|n\rangle\langle n|\\&=\sum_{mn}T_{mn}(m!n!)^{-1/2}(b^+)^m|0\rangle\langle 0|b^n,\end{aligned}\qquad(3.2.40)$$

其中$T_{mn}\equiv\langle m|T|n\rangle$是算符$T$在粒子数表象中的矩阵元。算符$T$在相干态表象中的矩阵元可表示为

$$\begin{aligned}\langle\alpha|T|\beta\rangle&=\sum_{mn}\langle\alpha|m\rangle\langle m|T|n\rangle\langle n|\beta\rangle\\&=\sum_{mn}T_{mn}(m!n!)^{-1/2}(\alpha^*)^m\beta^n e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)}\end{aligned}$$

即

$$\langle\alpha|T|\beta\rangle\equiv t(\alpha^*,\beta)e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)},\qquad(3.2.41)$$

其中函数$t(\alpha^*,\beta)$定义为

$$t(\alpha^*,\beta)=\sum_{mn}T_{mn}(m!n!)^{-1/2}(\alpha^*)^m\beta^n。\qquad(3.2.42)$$

类似于式(3.2.40)，任意算符T可以用相干态外积表示为

$$T=\frac{1}{\pi^2}\iint|\alpha\rangle\langle\alpha|T|\beta\rangle\langle\beta|d^2\alpha\,d^2\beta$$

$$=\frac{1}{\pi^2}\iint t(\alpha^*,\beta)e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)}|\alpha\rangle\langle\beta|d^2\alpha\,d^2\beta。\quad(3.2.43)$$

利用下面导出的公式不难由式(3.2.43)得到式(3.2.41)。由式(3.2.34),有

$$f(\alpha^*)e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}=\langle\alpha|f\rangle=\frac{1}{\pi}\int\langle\alpha|\beta\rangle\langle\beta|f\rangle d^2\beta$$

$$=\frac{1}{\pi}\int e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2-2\alpha^*\beta)}f(\beta^*)e^{-\frac{1}{2}|\beta|^2}d^2\beta,$$

于是可得到在讨论相干态表象时的一个非常有用的高斯积分公式:

$$\frac{1}{\pi}\int e^{\alpha^*\beta-|\beta|^2}f(\beta^*)d^2\beta=f(\alpha^*)\quad(3.2.44)$$

作为特例,令 $f(\beta^*)=(\beta^*)^n$,则有

$$\frac{1}{\pi}\int e^{\alpha^*\beta-|\beta|^2}(\beta^*)^n d^2\beta=(\alpha^*)^n。\quad(3.2.45)$$

最后还可导出关于算符乘积的定律。若 $T=T_1\cdot T_2$, 与 T、T_1 和 T_2 相应的由式(3.2.42)定义的函数分别为 t, t_1 和 t_2, 则可以证明如下关系式成立:

$$t(\alpha^*,\beta)=\frac{1}{\pi}\int t_1(\alpha^*,\gamma)t_2(\gamma^*,\beta)d^2\gamma。\quad(3.2.46)$$

*3.2.4 角动量相干态或 $SU(2)$ 相干态。

角动量满足如下 $SU(2)$ 群李代数关系:

$$[J_i,J_j]=i\varepsilon_{ijk}J_k,\quad(3.2.47)$$

为简单起见,本小节中取 $\hbar=1$。为了引进 $SU(2)$ 相干态, 首先要定义真空态$|0\rangle$ 根据 1.2.3 中的式(1.2.64), 取$|j,+j\rangle$作为真空态,记为$|0\rangle$,并令

$$p=j-m\quad(0<p<2j),\quad(3.2.48)$$

因此有

$$(J_-)^p|0\rangle=\left[\frac{(2j)!p!}{(2j-p)!}\right]^{1/2}|p\rangle。\quad(3.2.49)$$

角动量算符 J_+ 和 J_- 定义为

$$J_{+}=J_{x}\pm iJ_{y}。\tag{3.2.50}$$

在我们的记号方案下，有

$$J_{z}|0\rangle=j|0\rangle;\ J_{z}|p\rangle=(j-p)|p\rangle。\tag{3.2.51}$$

$SU(2)$相干态于是可定义为

$$|\mu\rangle=N\exp(\mu J_{-})|0\rangle=N\sum_{p=0}^{2j}\left[\frac{(2j)!}{p!(2j-p)!}\right]^{1/2}\mu^{p}|p\rangle,\tag{3.2.52}$$

其中 N 为归一化系数。由于

$$\langle\mu|\mu\rangle=N^{2}\sum_{p=0}^{2j}\frac{(2j)!}{p!(2j-p)!}|\mu|^{2p}=|N|^{2}(1+|\mu|^{2})^{2j}=1,$$

所以

$$N=(1+|\mu|^{2})^{-j}。\tag{3.2.53}$$

归一化的 $SU(2)$相干态因此可表示为

$$|\mu\rangle=(1+|\mu|^{2})^{-j}\exp(\mu J_{-})|0\rangle。\tag{3.2.54}$$

注意到$(J_{-})^{\dagger}=J_{+}$，所以有

$$[\exp(\mu J_{+})]^{\dagger}=\exp(\mu^{*}J_{-})。\tag{3.2.55}$$

利用这个结果可得到如下关于 $SU(2)$相干态的内积公式：

$$\langle\mu_{1}|\mu_{2}\rangle=\frac{(1+\mu_{1}^{*}\mu_{2})^{2j}}{(1+|\mu_{1}|^{2})^{j}(1+|\mu_{2}|^{2})^{j}}。\tag{3.2.56}$$

由此可见，$SU(2)$相干态一般也不正交，但仍然可归一化。此外还可以证明，$SU(2)$相干态满足如下完全性条件：

$$\frac{(2j+1)}{\pi}\int\frac{d^{2}\mu}{(1+|\mu|^{2})^{2}}|\mu\rangle\langle\mu|=\sum_{p=0}^{2j}|p\rangle\langle p|=1。\tag{3.2.57}$$

若令 $\mu=\mathrm{tg}\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi}$，可以证明 $J_{1}(=J_{x})$和 $J_{2}(=J_{y})$在$SU(2)$相干态中的方差为

$$\begin{aligned}\langle(\Delta J_{1})^{2}\rangle&=\frac{1}{2}j(1-\sin^{2}\theta\cos^{2}\varphi),\\ \langle(\Delta J_{2})^{2}\rangle&=\frac{1}{2}j(1-\sin^{2}\theta\sin^{2}\varphi),\end{aligned}\tag{3.2.58}$$

$J_{3}=J_{z}$的平均值为

$$\langle J_{z}\rangle=j\cos\theta。\tag{3.2.59}$$

根据许瓦茨不等式，J 各分量之间应满足如下不确定关系：

$$\langle(\Delta J_i)^2\rangle\langle(\Delta J_j)^2\rangle\geqslant\frac{1}{4}|\langle[J_i,\ J_j]\rangle|^2,\qquad(3.2.60)$$

因此对于 J_1 和 J_2 的方差的乘积来说，应满足如下不等式：

$$\langle(\Delta J_1)^2\rangle\langle\Delta J_2)^2\rangle\geqslant\frac{1}{4}|\langle J_3\rangle|^2。\qquad(3.2.61)$$

由式(3.2.58)可知，

$$\langle(\Delta J_1)^2\rangle\langle(\Delta J_2)^2\rangle=\frac{1}{4}j^2\left(\cos^2\theta+\frac{1}{4}\sin^4\theta\sin^2 2\varphi\right),$$

所以当 $2\varphi=n\pi$(n 为零和整数)时，

$$\langle(\Delta J_1)^2\rangle\langle(\Delta J_2)^2\rangle=\frac{1}{4}|\langle J_3\rangle|^2,$$

这表明，此时 $SU(2)$ 相干态是一种具有最小不确定性的状态。

[例 1]　证明式(3.2.58)和(3.2.59)。

解：首先，由 $SU(2)$ 相干态的定义(3.2.52)可得

$$e^{cJ_-}|\mu\rangle=\frac{(1+|\mu+c|^2)^j}{(1+|\mu|^2)^j}|\mu+c\rangle。\qquad(3.2.62)$$

由此可得

$$\langle\mu_1|e^{c_1J_+}\cdot e^{c_2J_-}|\mu_2\rangle=\frac{[1+(c_1+\mu_1^*)(c_2+\mu_2)]^{2j}}{(1+|\mu_1|^2)^j(1+|\mu_2|^2)^j}。\qquad(3.2.63)$$

利用上述结果可得

$$\langle\mu|J_-|\mu\rangle=\left[\frac{\partial}{\partial c_2}\langle\mu|e^{c_2J_-}|\nu\rangle\right]_{\substack{c_2=0\\ \mu=\nu}}=\frac{2j\mu^*}{1+|\mu|^2},$$

$$\langle\mu|J_+|\mu\rangle=\langle\mu|J_-|\mu\rangle^*=\frac{2j\mu}{1+|\mu|^2},$$

$$\langle\mu|J_-^2|\mu\rangle=\left[\frac{\partial^2}{\partial c_2^2}\langle\mu|e^{c_2J_-}|\nu\rangle\right]_{\substack{c_2=0\\ \mu=\nu}}=\frac{2j(2j-1)\mu^{*2}}{(1+|\mu|^2)^2}$$

$$\langle\mu|J_+^2|\mu\rangle=\frac{2j(2j-1)\mu^2}{1+|\mu|^2},$$

$$\langle\mu|J_+J_-|\mu\rangle=\left[\frac{\partial^2}{\partial c_1\partial c_2}\langle\mu|e^{c_1J_+}\cdot e^{c_2J_-}|\nu\rangle\right]_{\substack{c_1=c_2=0\\ \mu=\nu}}$$

$$=\frac{2j(2j-1)|\mu|^2}{(1+|\mu|^2)^2}+\frac{2j}{(1+|\mu|^2)}。$$

现在还要计算 J_z 在 $SU(2)$ 相干态中的平均值。因为

$$\langle\mu|J_z|\mu\rangle=\langle\mu|[j-(j-J_z)]|\mu\rangle$$
$$=j-\langle\mu|(j-J_z)|\mu\rangle,$$

且

$$(1+|\mu|^2)^{2j}\langle\mu|(j-J_z)|\mu\rangle=\sum_{p=0}^{2j}\frac{(2j)!}{p!(2j-p)!}|\mu|^{2p}p$$
$$=\frac{1}{2}|\mu|\frac{\partial}{\partial|\mu|}(1+|\mu|^2)^{2j}=2j(1+|\mu|^2)^{2j-1}|\mu|^2。$$

由此可得

$$\langle\mu|J_z|\mu\rangle=j-\frac{2j|\mu|^2}{(1+|\mu|^2)}=j\frac{(1-|\mu|^2)}{(1+|\mu|^2)}$$
$$=j\cos\theta。\qquad(3.2.64)$$

有了以上结果，再利用算符公式：

$$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-),\quad J_y=\frac{1}{2i}(J_+-J_-),$$
$$J_x^2=\frac{1}{4}(J_++J_-)^2=\frac{1}{4}(J_+^2+J_-^2+2J_+J_--2J_z),$$
$$J_y^2=-\frac{1}{4}(J_+-J_-)^2=-\frac{1}{4}(J_+^2+J_-^2-2J_+J_-+2J_z),$$

便可求出 J_x, J_x^2, J_y, J_y^2, 在 $SU(2)$ 相干态中的平均值，从而求出方差。

3.2.5 转动算符

在对相干态的讨论中，有三类重要的幺正变换算符，即转动算符、位移算符以及压缩算符①。位移算符已在开始引进相干态的定义时讨论过。现在来讨论转动算符，它是由粒子数算符所生成的一个幺正算符：

$$R(\theta)=\exp(-i\theta\hat{b}^+\hat{b})\qquad(3.2.65)$$

其中 θ 为参数，无量纲。转动算符存在如下特性：

$$R^{-1}(\theta)=R(-\theta)=R^+(\theta)。\qquad(3.2.66)$$

注意到指数算符由台劳展开定义的原则，可证明在转动算符作用

① 例如可参阅综述性论文：B.L.Schumaker, Phys. Reports **135**(1986)319。

下粒子的真空态保持不变：

$$R(\theta)|0\rangle=|0\rangle。\tag{3.2.67}$$

在转动算符作用下，粒子消灭算符和产生算符的变换规律为

$$\begin{aligned}R(\theta)bR^{-1}(\theta)&=be^{i\theta},\\R(\theta)b^{+}R^{-1}(\theta)&=b^{+}e^{-i\theta}。\end{aligned}\tag{3.2.68}$$

这表明，b 和 b^{+} 在转动算符作用下保持不变，仅仅多了一个位相因子。

[例 2] 证明式(3.2.68)。

解：可采用不同方法证明。

(1) 利用指数算符展开法：

因为

$$e^{-i\theta b^{+}b}be^{i\theta b^{+}b}=b-i\theta[b^{+}b,\ b]+\frac{1}{2!}(-i\theta)^{2}[b^{+}b,\ [b^{+}b,\ b]]+\cdots$$

$$=b+i\theta b+\frac{1}{2!}(i\theta)^{2}b+\cdots=be^{i\theta}。$$

(2) 利用参量微分方法：

令 $b(\theta)=e^{-i\theta b^{+}b}be^{i\theta b^{+}b}$，则有

$$\frac{\partial b(\theta)}{\partial\theta}=-i\theta e^{-i\theta b^{+}b}(b^{+}bb-bb^{+}b)e^{i\theta b^{+}b}。$$

由于 $b^{+}bb-bb^{+}b=b^{+}bb-(b^{+}b+1)b=-b$，所以有

$$\frac{\partial b(\theta)}{\partial\theta}=i\theta b(\theta)。$$

此式满足初始条件 $b(\theta=0)=b$ 的解为 $b(\theta)=be^{i\theta}$。

由式(3.2.68)可以得到坐标和动量算符在转动下的变换关系：

$$\begin{aligned}R(\theta)xR^{-1}(\theta)&=x\cos\theta-\frac{p}{\mu\omega}\sin\theta,\\R(\theta)pR^{-1}(\theta)&=x\sin\theta+\frac{p}{\mu\omega}\cos\theta,\end{aligned}\tag{3.2.69}$$

这也是我们称 $R(\theta)$ 为转动算符的理由。由于转动算符 $R(\theta)$ 是由粒子数算符 $b^{+}b$ 生成的，在转动下 $b^{+}b$ 当然保持不变：

$$R(\theta)b^+bR(\theta)=b^+b。 \tag{3.2.70}$$

这表明，转动算符的作用仅仅引起动能($\sim p^2$)和势能($\sim x^2$)之间的转换，总能量保持不变。

有了位移算符和转动算符，就可讨论它们相互引起的改变。可以证明，在转动算符作用下位移算符将作如下变换：

$$R(\theta)D(\alpha)R^{-1}(\theta)=D(\alpha e^{-i\theta}), \tag{3.2.71}$$

这表明，在转动变换下位移算符保持不变，仅仅使位移量多了一个位相因子。

[例 3] 证明式(3.2.71)。

解：位移算符可展开为

$$D(\alpha)=e^{\alpha b^+-\alpha^* b}=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}(\alpha b^+-\alpha^* b)^n。$$

利用式(3.2.68)可得

$$R(\theta)(\alpha b^+-\alpha^* b)R^{-1}(\theta)=\alpha e^{-i\theta}b^+-(\alpha e^{-i\theta})^* b。$$

由此立即可得式(3.2.71)的结果。

利用式(3.2.71)的性质可知，对于相干态$|\alpha\rangle$来说，有

$$\begin{aligned}R(\theta)|\alpha\rangle&=R(\theta)D(\alpha)|0\rangle=R(\theta)D(\alpha)R^{-1}(\theta)R(\theta)|0\rangle\\&=D(\alpha e^{-i\theta})|0\rangle=|\alpha e^{-i\theta}\rangle,\end{aligned} \tag{3.2.72}$$

这表明，在转动算符作用下相干态$|\alpha\rangle$保持为相干态，仅仅其本征值增加了一个位相因子$e^{-i\theta}$。

应当指出，转动算符中的θ仅仅是一个参数，不一定代表空间角度。若令$\theta=\omega t$，则

$$R(\theta=\omega t)=e^{-i\omega b^+bt} \tag{3.2.73}$$

就是谐振子势场中粒子系统的时间演化算符（相差一基态能引起的常数因子）。所以如果初态$|\alpha\rangle$是一个相干态，那么它在谐振子势场中随时间变化时始终保持为相干态$|\alpha e^{-i\omega t}\rangle$。从坐标表象中来看，一个相干态高斯波包在自由空间中会逐渐弥散消失，但是在谐振子势场中它将保持为高斯波包。一般来说，在如下形式哈密顿算符所确定的时间演化算符作用下，相干态在运动中能保持为

相干态：

$$H(t)=\hbar[\omega(t)b^+b+f(t)b^++f(t)^*b+\beta(t)], \qquad (3.2.74)$$

其证明可参阅专门文献。

3.2.6 压缩(Squeez)算符和压缩态

1971 年人们在研究相干态时发现可进一步引进压缩态的概念。定义如下压缩算符

$$S(z)=\exp\left[\frac{z^*}{2}b^2-\frac{z}{2}(b^+)^2\right], \qquad (3.2.75)$$

它具有如下性质：

$$S^{-1}(z)=S(-z)=S^+(z)。 \qquad (3.2.76)$$

可以证明，在压缩算符作用下，声子消灭算符和产生算符将作如下变换：

$$\begin{aligned} b(z)&\equiv S(z)bS^{-1}(z)=\mathrm{ch}|z|b+\frac{z}{|z|}\mathrm{sh}|z|b^+,\\ b^+(z)&\equiv S(z)b^+S^{-1}(z)=\mathrm{ch}|z|b^++\frac{z^*}{|z|}\mathrm{sh}|z|b, \end{aligned} \qquad (3.2.77)$$

$b(z)$和 $b^+(z)$分别称为压缩消灭算符和压缩产生算符。上述变换也是一种正则变换，在这种变换下算符的基本对易关系保持不变：

$$[b(z),\ b^+(z)]=[b,\ b^+]=1。 \qquad (3.2.78)$$

为了考察压缩算符的意义，我们来讨论坐标算符和动量算符在压缩变换下的改变。如果令 $z=r$ 为实数，则有

$$\begin{aligned} S(z)xS^{-1}(z)&=\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{1/2}[b^+(z)+b(z)]\\ &=\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{1/2}(\mathrm{ch}|z|+\mathrm{sh}|z|)(b^++b), \end{aligned}$$

即有($z=r$ 为实数)

$$S(z)xS^{-1}(z)=e^rx。 \qquad (3.2.79)$$

类似地有

$$S(z)pS^{-1}(z)=e^{-r}p。 \qquad (3.2.80)$$

上述结果表明，实参数压缩变换也是一种关于坐标和动量算符的“标度变换”。压缩变换后量度坐标的算符 x 扩大了 e^r 倍，这相当于坐标空间被压缩了 e^r 倍；与此相应，动量空间则扩大了 e^r 倍。

上述结论还可以从下面的讨论中看出。令 $z=re^{-2i\varphi}$，则在压缩真空态

$$|z\rangle\equiv S(z)|0\rangle \tag{3.2.81}$$

中，有

$$\begin{aligned}&\langle z|x|z\rangle=\langle z|p|z\rangle=0,\\&\langle z|x^2|z\rangle=\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)(\mathrm{ch}\,2r-\cos 2\varphi\,\mathrm{sh}\,2r),\\&\langle z|p^2|z\rangle=\frac{\mu\hbar\omega}{2}(\mathrm{ch}\,2r+\cos 2\varphi\,\mathrm{sh}\,2r)。\end{aligned} \tag{3.2.82}$$

当 $\varphi=0$，$z=r$ 为实数时，压缩真空态中坐标和动量的方差分别为

$$\begin{aligned}&\langle z|(\Delta x)^2|z\rangle=e^{-2r}\frac{\hbar}{2\mu\omega}<\frac{\hbar}{2\mu\omega},\\&\langle z|(\Delta p)^2|z\rangle=e^{2r}\frac{\mu\hbar\omega}{2}>\frac{\mu\hbar\omega}{2}。\end{aligned} \tag{3.2.83}$$

这表明，在压缩态中坐标的方差比相干态的还要小 e^{2r} 倍(设 $r>0$)。不过应当指出，与此同时，动量的方差将比相干态的大 e^{2r} 倍，且如下最小不确定关系依然成立：

$$\langle z|(\Delta x)^2|z\rangle\langle z|(\Delta p)^2|z\rangle=\hbar^2/4。 \tag{3.2.84}$$

最后，利用例 3 中的思路不难证明在转动算符作用下压缩算符的变换是：

$$R(\theta)S(z)R^{-1}(\theta)=S(ze^{-2i\theta}); \tag{3.2.85}$$

在压缩算符作用下位移算符的变换是：

$$S(z)D(\alpha)S^{-1}(z)=D[\alpha(z)], \tag{3.2.86}$$

其中

$$\alpha(z)\equiv\alpha\mathrm{ch}|z|-\alpha^*\frac{z}{|z|}\mathrm{sh}|z|。 \tag{3.2.87}$$

上述结果表明，在转动算符作用下压缩算符保持不变，仅仅其压缩量参数多了一个位相因子 $e^{-2i\theta}$；在压缩算符作用下位移算符保持不变，仅仅其位移量由 α 改变为 $\alpha(z)$。

利用式(3.2.85)可知

$$\begin{aligned}R(\theta)|z\rangle&\equiv R(\theta)S(z)|0\rangle=R(\theta)S(z)R^{-1}(\theta)|0\rangle\\&=S(ze^{-2i\theta})|0\rangle=|ze^{-2i\theta}\rangle,\end{aligned} \tag{3.2.88}$$

这表明，在转动变换下压缩态仍然保持为压缩态。而且不仅如此，对于压缩相干态

$$|z, \alpha\rangle \equiv S(z)D(\alpha)|0\rangle, \tag{3.2.89}$$

由式(3.2.85)和(3.2.86)可知

$$R(\theta)|z, \alpha\rangle = |ze^{-2i\theta}, \alpha e^{-i\theta}\rangle。 \tag{3.2.90}$$

这表明，压缩相干态在转动变换下仍保持为压缩相干态。

§3.3 场的量子化方法

在量子力学的薛定谔波动力学方案下，用波函数来描写粒子系统的状态。系统的波函数或波场可表示为坐标的连续函数

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = \langle \boldsymbol{x}|\psi(t)\rangle,$$

它不是算符，是经典 c 数。所以系统的运动方程——薛定谔方程可看作经典场的波动方程，这与描写经典电磁场的麦克斯韦方程相当。从这样的类比中可以看出，在量子力学中我们所采用的使力学量变成算符的量子化手续(令$[x, p] = i\hbar$)虽然能体现粒子(如原子中的电子)的波动性，但却不能体现出场(如电磁场)的粒子性。为此还需要对经典波场采取量子化手续。使力学量变成算符的量子化手续称为一次量子化；使波场量子化的手续称为二次量子化。量子化的波场称为量子场，它既能体现出粒子的波动性，又能体现场的粒子性。从量子场论的观点来看，可以用一个量子场来描写一个全同多粒子系统。本节先讨论薛定谔波场的量子化问题，然后在下一节中将它应用于全同粒子系统。薛定谔方程是一种非相对论性波动方程，在此基础上建立起来的量子场理论仅适用于非相对论情况。这种非相对论性量子场论已广泛应用于固体物理学、凝聚态物理(超导、超流等)、磁学等领域。建立在相对论性波动方程基础上的量子场论则广泛应用于粒子物理学等高能物理领域。

3.3.1 场的拉氏形式和哈密顿形式

为了对经典波场采用正则量子化手续，需要建立场的拉格朗日形式和哈密顿形式，以便确定描写场的广义坐标和正则动量。

对于一个实数波场，其广义坐标是它的场量 $\psi(\boldsymbol{x}, t)$，它是分布在空间中的一个场量，且同时随时间而变化。所以描写它的变化的量应包括两部份：一是表示它随时间变化的量，即广义速度 $\dot{\psi}(\boldsymbol{x}, t)$；另一类是表示它随空间变化的量，即它的梯度 $\nabla\psi(\boldsymbol{x}, t)$。此外，考虑到场在空间中的连续分布，我们可以引进拉格朗日密度 $\mathscr{L}$ 的概念。场的作用量于是可表示为

$$S=\int_{t_1}^{t_2} L dt=\int_{t_1}^{t_2} dt \int d\boldsymbol{x}\mathscr{L}(\psi, \dot{\psi}, \nabla\psi), \tag{3.3.1}$$

现在坐标 $\boldsymbol{x}$ 和时间 t 都是参数。

经典物理学的最小作用量原理预言，场的实际运动应满足如下极值条件：

$$\delta S=0, \ [\delta\psi(\boldsymbol{x}, t_1)=\delta\psi(\boldsymbol{x}, t_2)=0]。 \tag{3.3.2}$$

由此我们可导出场的动力学方程。将式 (3.3.1) 代入上述极值条件，可得

$$\delta S=\int_{t_1}^{t_2} dt \int d\boldsymbol{x}\delta\mathscr{L}。 \tag{3.3.3}$$

由于

$$\begin{aligned}\delta\mathscr{L}&=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\psi}\delta\psi+\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}\delta\dot{\psi}+\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\psi/\partial x_i)}\delta(\partial\psi/\partial x_i)\\&=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\psi}\delta\psi+\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}\frac{\partial}{\partial t}\delta\psi+\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\psi/\partial x_i)}\frac{\partial}{\partial x_i}\delta\psi,\end{aligned}$$

因此式(3.3.3)可化为

$$\begin{aligned}\delta S&=\int_{t_1}^{t_2} dt \int d\boldsymbol{x}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\psi}-\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}\right)-\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\psi/\partial x_i)}\right)\right]\delta\psi\\&=0。\end{aligned} \tag{3.3.4}$$

在上式推导中，积分式中的第二项和第三项已应用了分部积分，并且我们仅考察对 $\boldsymbol{x}$ 的积分遍及全空间的情况。由于 $\delta\psi$ 任意，因此由上式可得

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \psi}-\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\psi}}-\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\partial\psi/\partial x_i)}\right)=0, \quad (3.3.5)$$

这就是经典场的拉氏方程。应当指出，如果最小作用量原理式(3.3.3)中对 $\boldsymbol{x}$ 的积分并不遍及全部场空间，则必然存在考察区域外的场对区域内的场的相互作用，从而出现场的能量、动量，或许还有角动量通过考察区域边界面的交换。从数学上说，此时在式(3.3.4)中将会出现面积分项。如果同时要求它为零，便得到与时空相联系的守恒定律。

现在我们可以引进与场的广义坐标 $\psi(\boldsymbol{x}, t)$ 相联系的广义动量：

$$\pi(\boldsymbol{x}, t)=\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\psi}}。 \quad (3.3.6)$$

场的哈密顿量密度可定义为

$$\mathscr{H}(\psi, \pi, t)=\pi\dot{\psi}-\mathscr{L}, \quad (3.3.7)$$

总哈密顿量为

$$H=\int d\boldsymbol{x}\,\mathscr{H}。 \quad (3.3.8)$$

在场的哈密顿描述方案中，独立变量是 ψ, π 和 $\nabla\psi$；系统的动力学方程，即哈密顿方程为

$$\dot{\psi}=\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \pi},$$

$$\dot{\pi}=-\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \psi}+\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial(\partial\psi/\partial x_i)}\right)。 \quad (3.3.9)$$

3.3.2 薛定谔波场的量子化

从二次量子化的观点来看，薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}, t)+V(\boldsymbol{x}, t)\psi(\boldsymbol{x}, t)=i\hbar\dot{\psi}(\boldsymbol{x}, t) \quad (3.3.10)$$

是经典场 ψ 的波动方程，从这一点来说，它与电磁理论中的麦克斯韦方程相当。但是应当注意，薛定谔波场是一种概率波场，它应当是一种复数场。一个复数包含两个独立部份：它的实部($\mathrm{Re}\,\psi$)和虚部($\mathrm{Im}\,\psi$)；或 ψ 和它的复共轭场 ψ^*。ψ^* 所满足的方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi^*+V\psi^*=-i\hbar\dot{\psi}^*。\qquad(3.3.11)$$

这里假定 $V^*=V$，即外场势场为实数场。

薛定谔波场的拉氏密度和哈密顿密度

为了将薛定谔一次量子化理论纳入拉格朗日-哈密顿形式，首先需要写出波场的拉氏密度。给出拉氏密度的依据是将它代入拉氏方程(3.3.5)就能得到薛定谔方程(3.3 10)和(3.3.11)。试令薛定谔波场的拉氏密度为

$$\mathscr{L}=i\hbar\psi^*\dot{\psi}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi-V\psi^*\psi。\qquad(3.3.12)$$

这里应当指出，薛定谔波场的拉氏密度应是 ψ、$\dot{\psi}$、$\nabla\psi$；ψ^*、$\dot{\psi}^*$、$\nabla\psi^*$ 的函数。由于

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\psi}=-V\psi^*,\qquad\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\psi^*}=i\hbar\dot{\psi}-V\psi,$$

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}=i\hbar\psi^*,\qquad\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}^*}=0,$$

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\psi/\partial x_i)}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial\psi^*}{\partial x_i}\qquad\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\psi^*/\partial x_i)}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial\psi}{\partial x_i},$$

所以由场的拉氏方程(3.3.5)，对于 ψ，可得

$$-V\psi^*-i\hbar\dot{\psi}^*+\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi^*=0,$$

这就是式(3.3.11)；对于 ψ^*，有

$$i\hbar\dot{\psi}-V\psi+\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi=0,$$

这就是式(3.3.10)。因此式(3.3.12)正是我们所要寻找的薛定谔波场的拉氏密度。这一拉氏密度形式并不是唯一的，读者可以尝试写出另外形式的拉氏密度。构造拉氏密度还存在一些原则。首先，根据张量分析的观点，在非相对论性理论中它应当是三维标量，所以在式(3.3.12)中不会出现诸如 $\psi^*\nabla\psi$ 这样的项；其次，通常认为 $\mathscr{L}$ 中仅仅包含最低阶导数的项，这可称为“简单性原则”；最后，根据量纲原则，因为 ψ 的量纲是 $[\mathrm{L}]^{-\frac{3}{2}}$（[L]是长度量

纲)，而 $\mathscr{L}$ 的量纲是能量密度的量纲，即 $[E][L]^{-3}$，所以在式(3.3.12)的一些项中会出现由基本常数所构成的具有量纲的系数，如 $\hbar$, $\hbar^2/2\mu$ 等，以便保证有正确的量纲关系。

现在我们可以定义正则动量。与 ψ 相应的正则动量是

$$\pi_\psi=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}=i\hbar\psi^*, \tag{3.3.13}$$

而与 ψ^* 相应的正则动量 $\pi_{\psi^*}=0$。因此哈密顿量密度为

$$\mathscr{H}=\pi\dot{\psi}-\mathscr{L}=\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+V\psi^*\psi。 \tag{3.3.14}$$

场的总哈密顿量为

$$H=\int d\boldsymbol{x}\,\mathscr{H}=\int d\boldsymbol{x}\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V\right)\psi, \tag{3.3.15}$$

其中积分式中的第一项推导中已使用了一次分部积分。上述结果表明，场的总能量是一次量子化理论中哈密顿算符

$$H(\boldsymbol{x})=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V$$

的期待值。

薛定谔波场的量子化

现在可采用正则量子化方案对薛定谔波场进行量子化，这意味着应要求场的广义坐标 ψ 和正则动量 π_ψ 满足如下同时性对易关系：

$$\begin{aligned}&[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\ \hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)]=0,\\&[\hat{\pi}(\boldsymbol{x},t),\ \hat{\pi}_\psi(\boldsymbol{x}',t)]=0,\\&[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\ \hat{\pi}(\boldsymbol{x}',t)]=i\hbar\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')。\end{aligned} \tag{3.3.16}$$

于是广义坐标 $\hat{\psi}$ 和正则动量 $\hat{\pi}_\psi$ 现在已转化为算符，称为“场算符”。利用式(3.3.13)，上述对易关系通常记为

$$\begin{aligned}&[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\ \hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)]=0,\\&[\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x},t),\ \hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}',t)]=0,\\&[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\ \hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}',t)]=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),\end{aligned} \tag{3.3.17}$$

其中已将 ψ^* 改写为 $\hat{\psi}^+$。由于现在场量 ψ 已转化为算符，所以由

式(3.3.15)定义的场的总哈密度量也变成了算符，记为

$$\hat{H}=\int d\boldsymbol{x}\,\hat{\psi}^{+}\left(-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\nabla^{2}+V\right)\hat{\psi}$$
$$=\int d\boldsymbol{x}\,\hat{\psi}^{+}H(\boldsymbol{x})\hat{\psi}, \tag{3.3.18}$$

其中 $H(\boldsymbol{x})$ 代表对参量 $\boldsymbol{x}$ 作用的微分算符 $-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\nabla^{2}+V(\boldsymbol{x},\ t)$，也是一次量子化方案中粒子系统的哈密顿算符。为区别起见，我们暂时在本节和下一节中在二次量子化理论中的算符上方加脱字号"∧"。应当注意式(3.3.18)所定义的量子场的哈密顿算符 $\hat{H}$ 与等式右边积分号中的算符 $H(\boldsymbol{x})$ 含意之间的区别。$\hat{H}$ 的算符性来源于场量 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^{+}$ 的算符性，所以是二次量子化方案中的算符。

转化到粒子数表象

为了引进粒子数表象，取一组正交完全函数集 $\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x})$，将场算符展开为①：

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x},\ t)=\sum_{\alpha}\hat{b}_{\alpha}(t)\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x}),$$
$$\hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x},\ t)=\sum_{\alpha}\hat{b}_{\alpha}^{+}(t)\varphi_{\alpha}^{*}(\boldsymbol{x}), \tag{3.3.19}$$

其中 $\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x})$ 可取一次量子化理论中任一单粒子力学量算符的本征函数集，α 为态指标。例如取动量算符(或自由粒子哈密顿算符，即粒子动能算符 $E_{0}=-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\nabla^{2}$)的本征函数，则有

$$\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x})\equiv\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{3.3.20}$$

其中 Ω 为归一化体积。另一点要指出的是，式(3.3.19)中 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^{+}$ 是算符，所以展开系数 $\hat{b}_{\alpha}$ 和 $\hat{b}_{\alpha}^{+}$ 现在也是算符。

利用 φ_{α} 的正交归一性：

$$\int\varphi_{\alpha}^{*}(\boldsymbol{x})\varphi_{\beta}(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}=\delta_{\alpha\beta} \tag{3.3.21}$$

① 这里实际上包含了一个设假，由完全集$\{\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x})\}$张成的描述经典场$\psi(\boldsymbol{x},\ t)$的希尔伯空间同样可用来描述量子场 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x},\ t)$。

可得到场算符展开式(3.3.19)的逆变换关系：

$$\hat{b}_\alpha(t)=\int\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x},$$
$$\hat{b}_\alpha^+(t)=\int\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})\psi^+(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}。 \tag{3.3.22}$$

利用变换关系(3.3.22)及场算符的基本对易关系(3.3.17)可以导出算符 b_α^+ 和 b_α 之间的同时性对易关系，结果是

$$[b_\alpha(t),\ b_\beta(t)]=0,$$
$$[b_\alpha^+(t),\ b_\beta^+(t)]=0, \tag{3.3.23}$$
$$[b_\alpha(t),\ b_\beta^+(t)]=\delta_{\alpha\beta}。$$

量子化波场的哈密顿算符式(3.3.18)现在可化为

$$\hat{H}=\int d\boldsymbol{x}\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x},\ t)\Big[-\frac{\hbar}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{x},\ t)\Big]\hat{\psi}(\boldsymbol{x},\ t)$$
$$=\sum_{\alpha\beta}\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta\int d\boldsymbol{x}\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x})\Big[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V\Big]\varphi_\beta(\boldsymbol{x}),$$

或

$$\hat{H}(t)=\sum_{\alpha\beta}\hat{b}_\alpha^+(t)\hat{b}_\beta(t)H_{\alpha\beta}, \tag{3.3.24}$$

其中矩阵元为

$$H_{\alpha\beta}=\int d\boldsymbol{x}\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x})H(\boldsymbol{x})\varphi_\beta(\boldsymbol{x}), \tag{3.3.25}$$

如果 V 与时间有关，$H_{\alpha\beta}$ 当然也可能与时间有关。在特殊情况下，若 V 与时间无关，φ_α 可取一次量子化理论中的单粒子哈密顿算符 $H(\boldsymbol{x})$ 的本征态，相应的本征值为 E_α，于是有 $H_{\alpha\beta}=E_\alpha\delta_{\alpha\beta}$。这时，量子场哈密顿算符式(3.3.24)可简化为

$$\hat{H}=\sum_\alpha E_\alpha\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\alpha。 \tag{3.3.26}$$

应当记住，式(3.3.26)所给出的是量子化波场的哈密顿算符，求它的本征值和本征矢的问题是一个二次量子化方案中的问题。但是在采用了粒子数表象后我们发现，求解这个问题变得非常简单，我们可以照搬一次量子化方案中求解谐振子问题的每个步骤。我们可以说，$\hat{b}_\alpha$ 和 $\hat{b}_\alpha^+$ 是 α 态粒子的消灭算符和产生算符；$\hat{n}_\alpha=\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\alpha$ 是 α 态粒子数算符；$\hat{n}=\sum_\alpha\hat{n}_\alpha=\sum_\alpha\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\alpha$ 就是总粒子数算符。此外，能

级 E_α(设 α 可取 1, 2, 3, …)为 n_α 个粒子所占有的态可用如下归一化的态矢量表示:

$$\Phi=|n_1, n_2, \cdots, n_\alpha, \cdots\rangle=\prod_\alpha \frac{1}{\sqrt{n_\alpha!}}(\hat{b}_\alpha^+)^{n_\alpha}|0\rangle, \quad (3.3.27)$$

其中$|0\rangle$为粒子真空态,定义为

$$b_\alpha|0\rangle=0, \ (\alpha=1, 2, \cdots)。 \quad (3.3.28)$$

这里应当指出,本节开始是从单粒子薛定谔波场出发,通过二次量子化手续建立了量子化薛定谔波场。但是上述分析表明,这样建立起来的量子化波场不仅能够描写单粒子态,而且能够描写多粒子态。从量子场的观点来看,单粒子态和多粒子态并无本质区别,它们都是量子场的激发态。因此我们可以预期,与利用一次量子化理论相比,利用量子场或二次量子化理论来研究多粒子问题将会变得相当简单。

3.3.3 二次量子化理论中的力学量

在二次量子化理论中,原来的量子力学或一次量子化理论中的概率密度或粒子数密度,以及其它所有力学量的平均值都将变成算符,因为波函数变成了算符。这种算符就是二次量子化理论中的力学量。在其后的讨论中,读者应保持清醒的头脑,在计算和推导中分辨出这类二次量子化方案中的算符,从而采取正确的处理方法。

先来考察概率密度或粒子数密度。量子力学中在 $\boldsymbol{x}$ 点处出现由 ψ 表示的粒子的概率密度为

$$\rho(\boldsymbol{x})=\psi^*(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})=\int d\boldsymbol{x}\psi^*(\boldsymbol{x})\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}')。 \quad (3.3.29)$$

在二次量子化理论中它变成了算符:

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{x})=\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x})=\int d\boldsymbol{x}\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}')。 \quad (3.3.30)$$

利用场算符的展开式(3.3.19),在粒子数表象中上式可化为

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{x})=\sum_{\alpha\beta}\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta\rho_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}), \quad (3.3.31)$$

其中矩阵元为

$$\rho_{\alpha\beta}=\int d\boldsymbol{x}\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x})\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\varphi_\beta(\boldsymbol{x}')=\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x})\varphi_\beta(\boldsymbol{x})。\quad(3.3.32)$$

总概率或总粒子数为

$$\hat{n}=\int\hat{\rho}(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}=\sum_\alpha\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\alpha,\quad(3.3.33)$$

这正是我们所期望的。

在二次量子化理论中粒子数密度的期待值应为

$$\begin{aligned}\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle&\equiv\langle\Phi|\hat{\psi}^+\hat{\psi}|\Phi\rangle\\&=\sum_{\alpha\beta}\langle\Phi|\hat{b}_\alpha^+\rho_{\alpha\beta}\hat{b}_\beta|\Phi\rangle。\end{aligned}\quad(3.3.34)$$

作为例子，设 $|\Phi\rangle=\hat{b}_i^+|0\rangle$，这里仅有一个态指标为 i（波函数为 $\varphi_i(\boldsymbol{x})$）的粒子的态。由上式及基本对易关系(3.3.23)可得

$$\begin{aligned}\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle&=\sum_{\alpha\beta}\langle3|\hat{b}_i\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta\hat{b}_i^+|0\rangle\rho_{\alpha\beta}\\&=\sum_{\alpha\beta}\langle0|(\delta_{i\alpha}+\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_i)(\delta_{i\beta}+\hat{b}_i^+\hat{b}_\beta)|0\rangle\rho_{\alpha\beta},\end{aligned}$$

注意到 $\hat{b}_\beta|0\rangle=0$，$\langle0|\hat{b}_\alpha^+=0$，上式可化为

$$\begin{aligned}\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle&=\sum_{\alpha\beta}\langle0|0\rangle\delta_{i\alpha}\delta_{i\beta}\rho_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x})\\&=\rho_{ii}(\boldsymbol{x})=\varphi_i^*(\boldsymbol{x})\varphi_i(\boldsymbol{x})。\end{aligned}$$

这个结果显然与量子力学的结果一致。这也是我们所希望的，任何新的理论在特殊情况下应当回到原来的理论。

现在来考察坐标算符。二次量子化理论中的坐标算符由量子力学中的坐标算符的平均值转化而来：

$$\hat{x}=\int d\boldsymbol{x}\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})x\hat{\psi}(\boldsymbol{x}),\ (x\text{ 为 }\boldsymbol{x}\text{ 的任一分量})。\quad(3.3.35)$$

上式可通过粒子的产生算符和消灭算符表示为

$$\hat{x}=\sum_{\alpha\beta}\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta x_{\alpha\beta},\quad(3.3.36)$$

其中矩阵元为

$$x_{\alpha\beta}=\int d\boldsymbol{x}\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x})x\varphi_\beta(\boldsymbol{x})。\quad(3.3.37)$$

作为例子，我们来计算仅有一个态指标为 i 的粒子的态中坐标算

符的期待值，这时$|\Phi\rangle=\hat{b}_i^+|0\rangle$。我们有

$$\langle\Phi|\hat{x}|\Phi\rangle=\sum_{\alpha\beta}\langle 0|\hat{b}_i\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta\hat{b}_i^+|0\rangle x_{\alpha\beta}=x_{ii}$$

$$=\int\varphi_i^*(\boldsymbol{x})x\varphi_i(\boldsymbol{x})dx,$$

这也正是量子力学的结果。

最后，外场中量子化波场的势能算符也可由量子力学中单粒子系统的势能平均值转化而来：

$$\hat{V}=\int d\boldsymbol{x}\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})V\psi(\boldsymbol{x})=\sum_{\alpha\beta}\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta V_{\alpha\beta},\qquad(3.3.38)$$

其中矩阵元为

$$V_{\alpha\beta}=\int d\boldsymbol{x}\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x})V(\boldsymbol{x},t)\varphi_\beta(\boldsymbol{x})。\qquad(3.3.39)$$

从上面的讨论中可以看出，二次量子化理论中的力学量算符$\hat{F}$一般地可以通过一次量子化中的力学量F转化而来：

$$F\to\hat{F}=\int\hat{\psi}^+F\psi d\boldsymbol{x}\qquad(3.3.40)$$

3.3.4 动力学方程

由式(3.3.40)可知，二次量子化理论中的力学量是通过场算符构造的，所以如果在一次量子化理论中采用薛定谔绘景描述系统随时间的演化，那么在二次量子化后便"自然地"进入海森伯绘景：力学量随时间改变。所以，二次量子化理论中系统的动力学方程是力学量$\hat{F}$(包括场算符)的海森伯方程：

$$\frac{\partial\hat{F}(t)}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t),\hat{H}]。\qquad(3.3.41)$$

作为例子，我们来考察场算符的运动方程：

$$\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\hat{H}(t)],\qquad(3.3.42)$$

其中量子场的哈密顿算符为

$$\hat{H}(t)=\int d\boldsymbol{x}\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x},t)H(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)。\qquad(3\ 3.43)$$

上式被积函数中$H(\boldsymbol{x})=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{x},t)$是一次量子化理论，

即量子力学中单粒子哈密顿算符。将式(3.3.43)代入(3.3.42)，再应用场算符的基本对易关系，有

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t}=\int d\boldsymbol{x}'[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\ \hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x}',t)]H(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)$$

$$=\int d\boldsymbol{x}'\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')H(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t),$$

于是关于场算符的海森伯动力学方程(3.3.42)可化为

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}=H(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)。\qquad(3.3.44)$$

此结果与一次量子化理论中的薛定谔方程形式完全类似，而且其中的 $H(\boldsymbol{x})$ 也就是一次量子化理论中的哈密顿算符。不过应当注意，上式本质上又不同于薛定谔方程，它是一个算符方程，是二次量子化理论中关于场算符——力学量之一——的动力学方程。上述结果表明，把波函数看作算符是二次量子化理论的关键步骤。当把一次量子化理论中的波函数 ψ 转化为算符后，它原来所满足的薛定谔方程实际上已自然地转化为海森伯绘景中的一个算符运动方程。

§3.4 全同粒子系统的二次量子化理论

上节中我们建立了薛定谔波场的二次量子化理论，现在将它应用于全同粒子系统。

3.4.1 不存在相互作用的全同玻色子系统

首先来建立不存在相互作用的全同玻色子系统的二次量子化理论。量子力学中 N 个自旋为零的全同玻色子系统的哈密顿算符一般可表示为

$$H=\sum_{i=1}^{N}H(\boldsymbol{x}_i)+\sum_{i>j}V(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j),\qquad(3.4.1)$$

其中

$$H(\boldsymbol{x}_i)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_i^2+V(\boldsymbol{x}_i,t)\qquad(3.4.2)$$

是第 i 个单粒子的哈密顿算符。上述式子表明，全同粒子系统的

算符通常可区分为如下几种不同类型：(i) 单体算符，如式(3.4.1)中的第一部份和式 $\sum_{i=1}^{N} H(\boldsymbol{x}_i)$，这种和式中的每一项仅仅涉及到单个粒子的运动特征；(ii) 两体算符，如式(3.4.1)中的第二项和式 $\sum_{i<j}^{N} V(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$，这是多体系统中的两体相互作用能部份，和式中的每一项涉及到两个粒子的相对运动特征；此外还有(iii)多体算符，这类和式算符中的每一项涉及到三个粒子或更多粒子的运动特征，这类算符并不常见。两体算符或多体算符是多粒子系统所特有的，也是多体量子现象中最重要的部份。多粒子系统的相互作用能决定了固体的许多电学和磁学性质；这类作用在一定条件下会引起某些物质的铁磁性、超导性及超流性。多体量子理论的一个重要任务仍然是计算系统的能级，尤其是基态能级。因此需要讨论式(3.4.1)的哈密顿算符的本征值问题。但是在一次量子化理论中求解这类问题几乎不可能，因为这时我们所要求解的薛定谔方程是 $3N$ 个空间坐标：x_i, y_i, z_i $(i=1, \cdots, N)$，以及时间参数 t 的微分方程，而其中 N 的数量级是阿伏伽德罗常数。

然而如果采用二次量子化方案，特别是采用粒子数表象的描述方式，求解多粒子系统的能级这类问题将成为可能。在建立全同粒子系统的二次量子化理论时常常采用如下基本假设：由完全集 $\{\varphi_\alpha\}$ 作为基矢所张成的，用来描写单个粒子运动状态的表象空间同样适用于全同粒子系统，即使全同粒子系统存在两体或多体相互作用。这一假设的正确性取决于由此建立的理论是否自洽；根据这个理论所得到的结果是否与实际相符。

上述基本假设对于不存在相互作用的全同粒子系统显然是正确的。对于这样的系统，量子力学中的哈密顿算符是单体算符：

$$H = \sum_{i=1}^{N} H(\boldsymbol{x}_i)。 \tag{3.4.3}$$

① 按照历史的途径建立全同粒子量子理论的方法可参阅例如 R. Feynman, "Statistical Mechanics—A Set of Lectures", W. A. Benjamin, Inc.(1972), § 6.7。

无相互作用全同粒子系统中的每一粒子的能量状态总是取由如下单粒子定态薛定谔方程所确定的状态 $\varphi_\alpha(\alpha=1, 2, \cdots)$ 中的某一个状态：

$$[H(\boldsymbol{x})-E_\alpha]\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})=0。 \tag{3.4.4}$$

能量为 E_α 的态 $\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})$ 中的粒子居有数 n_α 确定了整个系统的能量状态。于是我们推断，在粒子数表象中我们可引进与式(3.4.3)相应的算符

$$\hat{H}=\sum_\alpha E_\alpha \hat{b}_\alpha^+ \hat{b}_\alpha, \tag{3.4.5}$$

其中 $\hat{b}_\alpha^+$ 和 $\hat{b}_\alpha$ 分别是 α 态（这里指能量为 E_α）粒子的产生算符和消灭算符，$\hat{n}_\alpha=\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\alpha$ 就是这种状态的粒子数算符，而总粒子数算符为

$$\hat{N}=\sum_\alpha \hat{n}_\alpha=\sum_\alpha \hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\alpha。 \tag{3.4.6}$$

基本算符 $\hat{b}_\alpha^+$ 和 $\hat{b}_\alpha$ 应满足如下对易关系：

$$\begin{aligned}&[\hat{b}_\alpha,\ \hat{b}_\beta]=0,\\ &[\hat{b}_\alpha^+,\ \hat{b}_\beta^+]=0,\\ &[\hat{b}_\alpha,\ \hat{b}_\beta^+]=\delta_{\alpha\beta}。\end{aligned} \tag{3.4.7}$$

于是哈密顿算符 $\hat{H}$ 的归一化本征矢可表示为

$$|n_1,\ n_2,\ \cdots,\ n_\alpha\cdots\rangle=\prod_\alpha \frac{1}{\sqrt{n_\alpha!}}(\hat{b}_\alpha^+)^{n_\alpha}|0_c\rangle \tag{3.4.8}$$

这里我们要指出，上述一系列公式几乎完全重复了上一节中在粒子数表象中描述量子化薛定谔波场的公式，这似乎表明，我们所建立的全同粒子系统的量子理论也就是一个量子场理论。这个见解还可以通过如下讨论得到进一步证实。

通过下式定义两个场算符（暂时略去时间参量）：

$$\begin{aligned}&\hat{\psi}(\boldsymbol{x})=\sum_\alpha \hat{b}_\alpha\varphi_\alpha(\boldsymbol{x}),\\ &\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})=\sum_\alpha \hat{b}_\alpha^+\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x})。\end{aligned} \tag{3.4.9}$$

利用 φ_α 的正交归一性及式(3.4.9)，可将全同粒子系统的哈密顿算符式(3.4.5)用场算符表示为

$$\hat{H}=\int\hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x})H(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}。\tag{3.4.10}$$

利用 $\hat{b}_{\alpha}^{+}$ 和 $\hat{b}_{\alpha}$ 的对易关系(3.4.7)以及场算符定义式(3.4.9)不难证明，场算符应满足如下对易关系：

$$\begin{aligned}&[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}),\ \hat{\psi}(\boldsymbol{x}')]=0,\\&[\hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x}),\ \hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x}')]=0,\\&[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}),\ \hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x}')]=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')。\end{aligned}\tag{3.4.11}$$

应当指出，一般来说由式(3.4.5)引进的粒子产生和消灭算符与时间有关，因此由式(3.4.9)定义的场算符也与时间有关，这时对易关系(3.4.7)和(3.4.11)应理解为同时性对易关系。

如果考虑到算符 $\hat{b}_{\alpha}$ 与 $\hat{\psi}$ 与时间有关，式(3.4.9)中的第一式应记为

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x},\ t)=\sum_{\alpha}\hat{b}_{\alpha}(t)\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x})。$$

关于算符 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x},\ t)$ 的海森伯动力学方程可化为

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x},\ t)}{\partial t}&=[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},\ t),\ \hat{H}(t)]\\&=\sum_{\alpha\beta}E_{\alpha}[\hat{b}_{\alpha}(t),\ \hat{b}_{\beta}^{+}(t)\hat{b}_{\beta}(t)]\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x})\\&=\sum_{\alpha\beta}E_{\alpha}[\hat{b}_{\alpha}(t),\ \hat{b}_{\beta}^{+}(t)]\hat{b}_{\beta}(t)\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x})\\&=\sum_{\alpha}E_{\alpha}\hat{b}_{\alpha}(t)\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x}),\end{aligned}$$

因为式(3.4.4)，

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha}E_{\alpha}\hat{b}_{\alpha}(t)\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x})&=\sum_{\alpha}\hat{b}_{\alpha}(t)H(\boldsymbol{x})\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x})\\&=H(\boldsymbol{x})\sum_{\alpha}\hat{b}_{\alpha}(t)\varphi_{\alpha}(\boldsymbol{x})\\&=H(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x},\ t),\end{aligned}$$

所以我们最后可得

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x},\ t)}{\partial t}=H(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x},\ t)。\tag{3.4.12}$$

上述结果表明，对于不存在相互作用的全同粒子系统确实可以用量子化薛定谔波场来描述。该系统的哈密顿算符从一次量子化理

论中的形式到二次量子化理论形式的转换可通过下式实现：

$$H(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N) = \sum_{i=1}^{N} H(\boldsymbol{x}_i)$$

$$\rightarrow \hat{H} = \int \hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}) H(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}。 \quad (3.4.13)$$

现在我们推广上述结果。如果前面所讨论的关于全同粒子的二次量子化手续中采用的完全集 φ_α 不是单粒子哈密顿算符 $H(\boldsymbol{x})$ 的本征态，这时若保留式(3.4.13)，则式(3.4.5)应改变为

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\beta} \hat{b}_\alpha^+ \hat{b}_\beta H_{\alpha\beta}, \quad (3.4.14)$$

其中矩阵元为

$$H_{\alpha\beta} = \int \varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x}) H(\boldsymbol{x}) \varphi_\beta(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}。 \quad (3.4.15)$$

在特殊情况下，若 φ_α 为 $H(\boldsymbol{x})$ 的本征态，本征值为 E_α，则式(3.4.15)将化为 $H_{\alpha\beta} = E_\alpha \delta_{\alpha\beta}$，于是全同粒子系统的哈密顿算符(3.4.14)便回到式(3.4.5)的形式。

现在将上述转化关系推广到任何可表示为单粒子算符之和的全同粒子的单体算符：

$$F(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots \boldsymbol{x}_N) = \sum_{i=1}^{N} F(\boldsymbol{x}_i)$$

$$\rightarrow \hat{F} = \int \hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}) F(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}。 \quad (3.4.16)$$

如果将场算符展开式(3.4.9)代入上式，便可得

$$\hat{F} = \sum_{\alpha\beta} \hat{b}_\alpha^+ \hat{b}_\beta F_{\alpha\beta}, \quad (3.4.17)$$

其中矩阵元为

$$F_{\alpha\beta} = \int \varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x}) F(\boldsymbol{x}) \varphi_\beta(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}, \quad (3.4.18)$$

其中 $F(\boldsymbol{x})$ 是量子力学中单粒子算符在坐标表象中的形式。

我们在讨论中通过引进场算符以及由场算符构造的力学量算符来描述全同多粒子系统。所以我们建立的多粒子系统的量子理论就是量子场理论或二次量子化理论。

3.4.2 相互作用能的二次量子化形式

相互作用能是一种多粒子系统所特有的力学量，这一类力学量在单粒子系统的量子力学中并不出现。为了建立这类力学量，如两体相互作用能 $\sum_{i>j} V(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$ 的二次量子化形式，作为例子我们来考察量子力学中两荷电粒子之间的静电相互作用能。荷电粒子在空间形成的电荷密度为 $\rho(\boldsymbol{x})=e\psi^*(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})$，因此相互作用能可表示为

$$V=\frac{1}{2}\int\frac{\rho(\boldsymbol{x})\rho(\boldsymbol{x}')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\,d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'$$
$$=\frac{1}{2}\int\psi^*(\boldsymbol{x})\psi^*(\boldsymbol{x}')\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\,\psi(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'。\tag{3.4.19}$$

在二次量子化理论中，场函数转化为场算符，相互作用能因此也将变成算符。我们假定全同粒子系统的两体相互作用能从量子力学形式到二次量子化形式的转化是通过下式实现的：

$$V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots\boldsymbol{x}_N)=\sum_{i>j}^{N}V(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$$
$$\to\hat{V}=\frac{1}{2}\int\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'。\tag{3.4.20}$$

现将场算符展开式(3.4.9)代入上式，我们可得

$$\hat{V}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\mu\nu}\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta^+\hat{b}_\mu\hat{b}_\nu V_{\alpha\beta,\mu\nu},\tag{3.4.21}$$

其中矩阵元为

$$V_{\alpha\beta,\mu\nu}=\int\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{x})\varphi_\beta^*(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\varphi_\mu(\boldsymbol{x}')\varphi_\nu(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'\tag{3.4.22}$$

应当指出，由式(3.4.19)转化而来的二次量子化理论中的二体相互作用能算符似乎还可记为

$$\hat{V}'=\frac{1}{2}\int\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x})V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}')。\tag{3.4.23}$$

为了考察式(3.4.21)与(3.4.23)的区别，利用场算符的对易关系，有

$$\begin{aligned}&\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}')\\&=\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})\{\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x})+\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\}\hat{\psi}(\boldsymbol{x}')\\&=\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x})+\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x}),\end{aligned}$$

将此结果代入式(3.4.23)，有

$$\hat{V}'=\hat{V}+\int V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})\hat{\rho}(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}。\qquad(3.4.24)$$

可见，$\hat{V}'$ 比 $\hat{V}$ 多了一项，这一项可解释为“自能”算符。对于许多理想势(如库仑势)，这种自能项将是无穷大。要正确处理这种项，必须考虑粒子的内部结构。在多体理论中常常将组份粒子看作基本单元，不再去探究其内部结构。于是这种自能项可简单地作为背景来处理。

3.4.3 全同玻色子系统的哈密顿算符

考虑到动能项、外场作用引起的势能项，以及二体相互作用项后，全同玻色子系统哈密顿算符的二次量子化形式一般可表示为

$$\hat{H}=\sum_{\alpha\beta}\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta H_{\alpha\beta}+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\mu\nu}\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta^+b_\mu b_\nu V_{\alpha\beta,\mu\nu},\quad(3.4.25)$$

其中矩阵元 $H_{\alpha\beta}$ 由式(3.4.15)确定，矩阵元 $V_{\alpha\beta,\mu\nu}$ 由式(3.4.22)确定。在计算这些矩阵元的表式中，φ_α 是量子力学中某一力学量算符的本征函数。

现在可不失一般性地取 φ_α 为自由粒子哈密顿算符或动量算符的本征函数，即

$$\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})\equiv\varphi_k(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}},$$

在这种情况下有

$$\begin{aligned}H_{\alpha\beta}\equiv H_{kk'}&=\int\varphi_k^*(\boldsymbol{x})\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\right]\varphi_{k'}(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}\\&=\varepsilon_k\delta_{kk'}+\frac{1}{\Omega}U(\boldsymbol{q}),\end{aligned}\qquad(3.4.26)$$

其中

$$\varepsilon_k=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu} \tag{3.4.27}$$

是系统中单个粒子的动能；而

$$U(\boldsymbol{q})=\int d\boldsymbol{x}e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}V(\boldsymbol{x}) \tag{3.4.28}$$

是系统中单个粒子在外场中势能 $V(\boldsymbol{x})$ 的傅里叶变换。式中 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$，$\Omega$ 为归一化体积。

对于两体相互作用能矩阵元，有

$$\begin{aligned}V_{\alpha\beta,\mu\nu}&\equiv\langle\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2|V|\boldsymbol{k}_4\boldsymbol{k}_3\rangle\\&=\iint d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'\varphi^*_{\boldsymbol{k}_1}(\boldsymbol{x})\varphi^*_{\boldsymbol{k}_2}(\boldsymbol{x}')V(|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|)\varphi_{\boldsymbol{k}_4}(\boldsymbol{x}')\varphi_{\boldsymbol{k}_3}(\boldsymbol{x})\\&=\frac{1}{\Omega}\iint d\boldsymbol{x}d\boldsymbol{x}'V(|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|)e^{-i(\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_4)\cdot\boldsymbol{x}-i(\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3)\cdot\boldsymbol{x}'},\end{aligned}$$

上式被积函数中作变量代换 $\boldsymbol{x}'=\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'=\boldsymbol{y}$，于是可化为

$$\begin{aligned}V_{k_1k_2,k_4k_3}&=\frac{1}{\Omega}\int d\boldsymbol{x}e^{-i(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_4-\boldsymbol{k}_3)\cdot\boldsymbol{x}}\int d\boldsymbol{y}e^{-i(\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_4)\cdot\boldsymbol{y}}V(|\boldsymbol{y}|)\\&=\frac{1}{\Omega}V(\boldsymbol{q})\delta_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3+\boldsymbol{k}_4},\end{aligned} \tag{3.4.29}$$

其中 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_3$，且

$$\begin{aligned}V(|\boldsymbol{q}|)&=\int d\boldsymbol{y}e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{y}}V(|\boldsymbol{y}|)\\&=\frac{4\pi}{q}\int yV(y)\sin qy\,dy\end{aligned} \tag{3.4.30}$$

是两体相互作用势 $V(y)=V(|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|)$ 的傅里叶变换。例如，对于屏蔽库仑势 $V(y)=\dfrac{e^{-\mu y}}{y}$，有 $V(|\boldsymbol{q}|)=\dfrac{4\pi}{q^2+\mu^2}$。将式(3.4.26)和(3.4.29)代入式(3.4.25)，则包含两体相互作用能的全同玻色子系统的哈密顿算符一般可记为

$$\begin{aligned}\hat{H}=&\sum_k\varepsilon_k\hat{b}_k^+\hat{b}_k+\sum_{\boldsymbol{q}}U(\boldsymbol{q})\hat{\rho}(-\boldsymbol{q})\\&+\frac{1}{2\Omega}\sum_{k_1k_2k_3k_4}V(\boldsymbol{q})\delta^+_{k_1}\hat{b}^+_{k_2}\hat{b}_{k_4}\hat{b}_{k_3}\delta_{k_1+k_2,k_3+k_4}。\end{aligned} \tag{3.4.31}$$

上式中第一部份为全同粒子系统的动能部份，是粒子数表象中的

对角化部份。上式中的第二部份是系统与外场的相互作用势能，在讨论固体的电学、磁学和光学特性时，这一项是重要的；在考察固体中的自由电子系统时，晶格原子对它的作用也可用这种外场势能项描写。这一项的推导如下。将式(3.4.26)代入(3.4.25)，注意到 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$，则系统在外场中的势能项可表示为

$$\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}U(\boldsymbol{q})\hat{b}_{\boldsymbol{k}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{k}'}=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{q}}U(\boldsymbol{q})\hat{b}_{\boldsymbol{k}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}=\sum_{\boldsymbol{q}}U(\boldsymbol{q})\hat{\rho}(-\boldsymbol{q}),$$

其中

$$\hat{\rho}(-\boldsymbol{q})\equiv\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} \tag{3.4.32}$$

是粒子数密度算符的傅里叶变换，这可通过下面的推导看出：

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\equiv\hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x})=\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{k}'}\varphi_{\boldsymbol{k}}^{*}(\boldsymbol{x})\varphi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{x})$$

$$=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{k}'}e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}$$

$$=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{q}}\left(\sum_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}\right)e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}。$$

最后，式(3.4.31)中的第三部份为两体相互作用能部份，δ-函数反映了动量守恒要求。可以证明，粒子数算符 $\hat{n}_{\boldsymbol{k}}=\hat{b}_{\boldsymbol{k}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}$ 与该项不对易，所以状态为 $\boldsymbol{k}$ 的粒子数由于两体相互作用的存在而不再守恒。但是可以证明，总粒子数 $\hat{n}=\sum_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}$ 与该项对易，所以系统的总粒子数是守恒的。这一性质与两体相互作用能项中产生和消灭算符成对出现的情况有关。这表明，某时刻处于某一状态的粒子数少一个单位，则另一状态的粒子数必定增加一个单位。此外，式(3.4.31)中的两体相互作用能算符项还可记为

$$\frac{1}{2\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{p}\boldsymbol{q}}V(\boldsymbol{q})\hat{b}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{p}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}, \tag{3.4.33}$$

其中已消去了 δ-函数，且令 $\boldsymbol{k}_3=\boldsymbol{k}$，$\boldsymbol{k}_4=\boldsymbol{p}$，因此有 $\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$，$\boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}$。

3.4.4 交换对称性与对易关系

前面我们在建立量子场理论和全同粒子系统的量子理论时，

简单地假定粒子的消灭算符和产生算符满足对易关系(3.4.7)。我们现在来考察在这种对易关系下，系统状态所存在的交换对称性。因为交换对称性是全同粒子系统区别于单粒子系统的一个最重要的特征。而我们在建立全同粒子系统的二次量子化理论时所引进的基本假设中，简单地将描写单粒子态的基矢完全集应用于全同粒子系统，因此我们必须特别考察这种推广所得到的结果是否与全同粒子系统所特有的交换对称性自洽。

为区别起见，以后我们用 $\hat{b}_\alpha$ 和 $\hat{b}_\alpha^+$ 表示玻色子算符，$\hat{a}_\alpha$ 和 $\hat{a}_\alpha^+$ 表示费米子算符。我们先来考察全同玻色子系统。作为例子，两个分别处于 α 态和 β 态的全同玻色子系统的状态现在可表示为 $\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta^+|0\rangle$ 或 $\hat{b}_\beta^+\hat{b}_\alpha^+|0\rangle$，且根据它们所满足的对易关系可知，这两种表述是等价的，且有

$$\psi_{\alpha\beta}\equiv\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta^+|0\rangle=\hat{b}_\beta^+\hat{b}_\alpha^+|0\rangle$$
$$=\frac{1}{2}(\hat{b}_\alpha^+\hat{b}_\beta^++\hat{b}_\beta^+\hat{b}_\alpha^+)|0\rangle。\qquad(3.4.34)$$

这表明，系统的状态对于这两个粒子的交换是对称的。可见，粒子的消灭和产生算符之间的对易关系保证了系统状态满足交换对称性。

现在来考察全同费米子系统，这种系统的状态对于两粒子的交换应是反对称的。这意味着，对于 α 态和 β 态费米子的产生算符 $\hat{a}_\alpha^+$ 和 $\hat{a}_\beta^+$ 来说，下式应当成立：

$$\hat{a}_\alpha^+\hat{a}_\beta^+|0\rangle=-\hat{a}_\beta^+\hat{a}_\alpha^+|0\rangle,\qquad(3.4.35)$$

即

$$(\hat{a}_\alpha^+\hat{a}_\beta^++\hat{a}_\beta^+\hat{a}_\alpha^+)|0\rangle=0。\qquad(3.4.36)$$

当 $\alpha=\beta$ 时，由式(3.4.35)可知，这种交换反对称性将导致如下结果：

$$(\hat{a}_\alpha^+)^2|0\rangle=0,\qquad(3.4.37)$$

这表明，两个费米子处于同一状态的情况不可能存在，这就是泡里不相容原理。

于是对于费米子算符 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^+$ 来说，只存在如下四种单个算符

对于可能的态矢量作用的形式：

$$\hat{a}|0\rangle=0,\ \hat{a}|1\rangle=|0\rangle,\ \hat{a}^{+}|0\rangle=|1\rangle,\ \hat{a}^{+}|1\rangle=0。\tag{3.4.38}$$

两个算符对于可能的态矢量的作用形式有八种：

$$\hat{a}^{2}|0\rangle=0,\ \hat{a}^{2}|1\rangle=0,\ \hat{a}\hat{a}^{+}|0\rangle=|0\rangle,\ \hat{a}\hat{a}^{+}|1\rangle=0,$$
$$\hat{a}^{+}\hat{a}|0\rangle=0,\ \hat{a}^{+}\hat{a}|1\rangle=|1\rangle,\ (\hat{a}^{+})^{2}|0\rangle=0,\ (\hat{a}^{+})^{2}|1\rangle=0。\tag{3.4.39}$$

因此无论对$|0\rangle$和$|1\rangle$都正确的作用形式有

$$\hat{a}^{2}|i\rangle=0,\ (\hat{a}^{+})^{2}|i\rangle=0,\ (\hat{a}\hat{a}^{+}+\hat{a}^{+}\hat{a})|i\rangle=|i\rangle,$$
$$(i=0,\ 1)。\tag{3.4.40}$$

由此可得如下关于费米子算符的公式：

$$\hat{a}^{2}=0,\ (\hat{a}^{+})^{2}=0,\ \{\hat{a},\ \hat{a}^{+}\}\equiv(\hat{a}\hat{a}^{+}+\hat{a}^{+}\hat{a})=1。\tag{3.4.41}$$

为了保证交换反对称性，全同费米子系统中不同状态的费米子算符应反对易。因此费米子算符的不对易性应由如下反对易关系表示：

$$\begin{aligned}&\{\hat{a}_{\alpha},\ \hat{a}_{\beta}\}=0,\\&\{\hat{a}_{\alpha}^{+},\ \hat{a}_{\beta}^{+}\}=0,\\&\{\hat{a}_{\alpha},\ \hat{a}_{\beta}^{+}\}=\delta_{\alpha\beta}。\end{aligned}\tag{3.4.42}$$

可见，在采用粒子数表象后，全同粒子系统的交换对称性或交换反对称性和泡里不相容原理可通过粒子产生和消灭算符之间的对易关系或反对易关系这种非常简洁的方式表述。

3.4.5 全同费米子系统的哈密顿算符

在二次量子化理论中，全同玻色子系统和全同费米子系统的区别仅仅表现在粒子的产生和消灭算符，并因此它们的场算符究竟满足对易关系还是反对易关系。因此，式(3.4.25)给出的哈密顿算符的一般形式也适用于全同费米子系统。于是我们有

$$\hat{H}=\sum_{\alpha\beta}\hat{a}_{\alpha}^{+}\hat{a}_{\beta}H_{\alpha\beta}+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\mu\nu}\hat{a}_{\alpha}^{+}\hat{a}_{\beta}^{+}\hat{a}_{\mu}\hat{a}_{\nu}V_{\alpha\beta,\mu\nu}。\tag{3.4.43}$$

现在取单粒子动量p和描写粒子自旋态的泡里矩阵σ_z的共

同本征态完全集

$$\varphi_\alpha(\xi)\equiv\varphi_{k\lambda}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\chi_\lambda \tag{3.4.44}$$

作为基矢构造的希尔伯空间来描写全同费米子系统的量子场算符，其中 χ_λ 为 σ_z 的本征矢，λ 为本征值($\lambda=\pm1$)。于是单体算符部份的矩阵元可化为

$$\begin{aligned}H_{\alpha\beta}\equiv H_{k\lambda,k'\lambda'}&=\int\varphi^*_{k\lambda}(\boldsymbol{x})\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\right]\varphi_{k'\lambda'}(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}\\&=\frac{1}{\Omega}\int e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\chi^+_\lambda\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\right]e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}}\chi_{\lambda'}d\boldsymbol{x}\\&=\delta_{\lambda\lambda'}\left[\varepsilon_{\boldsymbol{k}}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}+\frac{1}{\Omega}U(\boldsymbol{q})\right]。\end{aligned} \tag{3.4.45}$$

两体相互作用能算符部分的矩阵元可化为

$$\begin{aligned}V_{\alpha\beta,\mu\nu}\equiv&\langle\boldsymbol{k}_1\lambda_1,\ \boldsymbol{k}_2\lambda_2|\ V\ |\boldsymbol{k}_4\lambda_4,\ \boldsymbol{k}_3\lambda_3\rangle\\&=\frac{1}{\Omega^2}\iint d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'[e^{-i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{x}}\chi^+_{\lambda_2}(1)][e^{-i\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{x}'}\chi^+_{\lambda_3}(2)]\\&\cdot V(|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|)[e^{i\boldsymbol{k}_4\cdot\boldsymbol{x}'}\chi_{\lambda_4}(2)][e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{x}}\chi_{\lambda_1}(1)]。\end{aligned}$$

利用正交性关系：$\chi^+_{\lambda_2}(1)\chi_{\lambda_1}(1)=\delta_{\lambda_2\lambda_1}$，$\chi^+_{\lambda_3}(2)\chi_{\lambda_4}(2)=\delta_{\lambda_3\lambda_4}$，以及类似导出全同玻色子系统的式(3.4.29)的方法，我们有

$$V_{\alpha\beta,\mu\nu}=\frac{1}{\Omega}\delta_{\lambda_2\lambda_1}\cdot\delta_{\lambda_3\lambda_4}\cdot\delta_{k_1+k_2,k_3+k_4}V(\boldsymbol{q})。 \tag{3.4.46}$$

将式(3.4.45)和(3.4.46)代入(3.4.43)，可得

$$\begin{aligned}\hat{H}=&\sum_{k\lambda}\varepsilon_k\hat{a}^+_{k\lambda}\hat{a}_{k\lambda}+\sum_q U(\boldsymbol{q})\hat{\rho}(-\boldsymbol{q})\\&+\frac{1}{2\Omega}\sum_{\substack{k_1k_2k_3k_4\\\lambda_1\lambda_2}}V(\boldsymbol{q})\hat{a}^+_{k_1\lambda_1}\hat{a}^+_{k_2\lambda_2}\hat{a}_{k_4\lambda_2}\hat{a}_{k_3\lambda_1}\\&\cdot\delta_{k_1+k_2,k_3+k_4}。\end{aligned} \tag{3.4.47}$$

与全同玻色子系统的情况类似，上式中的两体相互作用能部份在消去关于动量守恒的 δ 函数后，还可表示为

$$\frac{1}{2\Omega}\sum_{\substack{kpq\\ \lambda_1\lambda_2}} V(q)\hat{a}^{+}_{k+q,\lambda_1}\hat{a}^{+}_{p-q,\lambda_2}\hat{a}_{p,\lambda_2}\hat{a}_{k,\lambda_1}。 \tag{3.4.48}$$

§3.5 电磁场的量子化

我们将二次量子化理论应用于电磁场，量子化电磁场会明显地反映出电磁场的粒子性，与电磁场相应的粒子就是光子，自旋为1。由于光子的质量为零，所以关于电磁场和光子的理论不存在非相对论情况。

3.5.1 电磁场的拉氏密度和哈密顿量密度

为了对电磁场采用正则量子化方案，需要找出它的拉氏密度和哈密顿量密度。场的拉氏密度和哈密顿密度都具有能量密度量纲。在经典理论中描写电磁场的基本物理量是它的电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和磁场强度 $\boldsymbol{B}$，由它们所构成的具有能量密度量纲的量是 $\boldsymbol{E}^2$ 和 $\boldsymbol{B}^2$（采用高斯单位制）。另一方面，拉氏密度应该是洛仑兹标量，以便使由它确定的电磁场运动规律满足爱因斯坦相对性原理。在电动力学的四维协变形式中，$\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是同一物理量——电磁场张量 F 的分量。一个张量可分为逆变张量和协变张量①。F 的逆变张量的分量 $F^{\mu\nu}(\mu,\ \nu=0\sim3)$ 为

$$F^{\mu\nu}=\begin{bmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{bmatrix}。 \tag{3.5.1}$$

F 的协变张量的分量 $F_{\mu\nu}$ 为

$$F_{\mu\nu}=g_{\mu\rho}g_{\nu\tau}F^{\rho\tau}, \tag{3.5.2}$$

其中 $g_{\mu\nu}=g^{\mu\nu}$ 为度规张量：

---

① 例如可参阅：J. D. Jackson, "Classical Electrodynamics", John Wiley & Sons, Inc., (1962, 1972).

蔡圣善，朱耘，《经典电动力学》，复旦大学出版社(1985)。

$$g^{\mu\nu}=g_{\mu\nu}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{bmatrix}。\tag{3.5.3}$$

由式(3.5.1)和(3.5.3)可知，F 的协变分量为

$$F_{\mu\nu}=\begin{bmatrix}0&E_x&E_y&E_z\\-E_x&0&-B_z&B_y\\-E_y&B_z&0&-B_x\\-E_z&-B_y&B_x&0\end{bmatrix}。\tag{3.5.4}$$

电磁场张量是一个四维反对称张量，有六个不等于零的分量，恰好分别代表 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的六个笛卡儿分量。

逆变张量和协变张量可缩并为标量(重复指标求和)：

$$F^{\nu\mu}F_{\mu\nu}=-2(\boldsymbol{E}^2-\boldsymbol{B}^2),\tag{3.5.5}$$

这个量在洛伦兹变换下保持不变，且也是唯一的由 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的二次型所构成的标量，具有能量密度量纲。

在经典电动力学中我们还知道，可引进电磁势(φ，$\boldsymbol{A}$)来表示电磁场强度：

$$\boldsymbol{E}=-\nabla\varphi-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t},\quad \boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}。\tag{3.5.6}$$

由于规范不变性，对于一定的电磁场来说选择电磁势有一定的随意性。就真空中的自由电磁场而言，可选择满足如下条件的电磁势：

$$\varphi=0,\ \nabla\cdot\boldsymbol{A}=0。\tag{3.5.7}$$

这一条件称为“库仑规范”，又称“横向规范”或“辐射规范”。这一规范的优点是只存在 $\boldsymbol{A}$ 的两个横向分量，它们恰好代表了辐射场的两个横向自由度。在库仑规范下，有

$$\boldsymbol{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t},\quad \boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}。\tag{3.5.8}$$

应当指出，在库仑规范中讨论问题时，其中间步骤会出现许多既不

是洛伦兹不变的，也不是规范不变的表达式，但最终的物理结果却是洛伦兹不变的，并且也是与规范无关的。

根据上述分析，可将自由电磁场的拉氏密度表示为

$$\mathscr{L}=\frac{1}{8\pi}(\boldsymbol{E}^2-\boldsymbol{B}^2)=\frac{1}{8\pi}\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}\right)^2-(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\right]。\quad (3.5.9)$$

电磁场系统的广义坐标现在可取为 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$，$\boldsymbol{x}$ 和 t 是参量。与此相应，正则动量为

$$\boldsymbol{P}=\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\boldsymbol{A}}}=\frac{1}{4\pi c^2}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}。\quad (3.5.10)$$

自由电磁场的哈密顿量密度为

$$\mathscr{H}=\boldsymbol{P}\cdot\dot{\boldsymbol{A}}-\mathscr{L}=2\pi c^2\boldsymbol{P}^2+\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\boldsymbol{A})^2。\quad (3.5.11)$$

由式(3.5.3)和(3.5.10)可知，上式也可表示为

$$\mathscr{H}=\frac{1}{8\pi}(\boldsymbol{E}^2+\boldsymbol{B}^2),\quad (3.5.12)$$

这正是经典电动力学中给出的电磁场能量密度在高斯单位制中的表式。场的总能量为

$$H=\int d\boldsymbol{x}\,\mathscr{H}=\int d\boldsymbol{x}\left[2\pi c^2\boldsymbol{P}^2+\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\right]。\quad (3.5.13)$$

应当指出，电磁场是矢量场，广义坐标现在取为矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$，所以描述它的变化，包括它随时间和随空间变化的量应包括它的广义速度 $\dot{\boldsymbol{A}}$ 以及它的散度 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}$ 和旋度 $\nabla\times\boldsymbol{A}$。所以电磁场的拉氏密度应一般地理解为 $\boldsymbol{A}$、$\dot{\boldsymbol{A}}$、$\nabla\cdot\boldsymbol{A}$ 和 $\nabla\times\boldsymbol{A}$ 的函数 即 $\mathscr{L}(\boldsymbol{A}, \dot{\boldsymbol{A}}, \nabla\cdot\boldsymbol{A}, \nabla\times\boldsymbol{A})$；哈密顿量密度应理解为 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{P}$、$\nabla\cdot\boldsymbol{A}$ 和 $\nabla\times\boldsymbol{A}$ 的函数，即 $\mathscr{H}(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{P}, \nabla\cdot\boldsymbol{A}, \nabla\times\boldsymbol{A})$。式(3.5.9)的拉氏密度和式(3.5.11)的哈密顿量密度的正确性还可以通过如下方式得到确认：如果将它们分别代入场的拉氏方程和哈密顿方程，便得到如下波动方程：

$$\nabla\times\boldsymbol{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2}=0。\quad (3.5.14)$$

[例 1] 由式(3.5.11)及场的哈密顿方程导出矢势的波动方

程(3.5.14)。

解: 因为①

$$\begin{aligned}(\nabla\times\boldsymbol{A})^2&=(\nabla\times\boldsymbol{A})_i(\nabla\times\boldsymbol{A})_i\\&=\varepsilon_{ijk}(\partial_jA_k)\varepsilon_{ilm}(\partial_lA_m)\\&=(\delta_{jl}\delta_{km}-\delta_{jm}\delta_{kl})(\partial_jA_k)(\partial_lA_m)\\&=(\partial_jA_k)(\partial_jA_k)-(\partial_jA_k)(\partial_kA_j),\end{aligned}$$

其中符号 $\partial_jA_k\equiv\partial A_k/\partial x_j$。所以自由电磁场的哈密顿量密度可表示为

$$\mathscr{H}=2\pi\sigma^2P_jP_j+\frac{1}{8\pi}[(\partial_jA_k)(\partial_jA_k)-(\partial_jA_k)(\partial_kA_j)]。$$

由于

$$\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial P_i}=4\pi\sigma^2P_i,$$

$$\begin{aligned}\partial_m\left[\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\partial_mA_j)}\right]&=\frac{1}{8\pi}\partial_m\left[2(\partial_jA_k)\frac{\partial(\partial_jA_k)}{\partial(\partial_mA_i)}\right.\\&\quad\left.-\frac{\partial(\partial_jA_k)}{\partial(\partial_mA_i)}(\partial_kA_j)-(\partial_jA_k)\frac{\partial(\partial_kA_j)}{\partial(\partial_mA_i)}\right]\\&=\frac{1}{8\pi}\partial_m[2(\partial_jA_k)\delta_{jm}\delta_{ki}-(\partial_kA_j)\delta_{jm}\delta_{ki}\\&\quad-(\partial_jA_k)\delta_{km}\delta_{ji}]\\&=\frac{1}{4\pi}(\partial_j\partial_jA_i-\partial_j\partial_iA_j)。\end{aligned}$$

考虑到库仑规范中，$\partial_jA_j=\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$，且 $\partial_j\partial_jA_i=\nabla^2A_i$，所以自由电磁场的哈密顿方程为

① 作为参考，这里列出三阶全反对称单位张量 $\varepsilon_{ijk}(i,\ j,\ k$ 可取值 1, 2, 3)的有关公式:

$$\varepsilon_{ijk}=\varepsilon_{jki}=\varepsilon_{kij}$$

$$\varepsilon_{ijk}=-\varepsilon_{jik}$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{imn}=\begin{vmatrix}\delta_{jl}&\delta_{jm}&\delta_{jn}\\\delta_{kl}&\delta_{km}&\delta_{kn}\end{vmatrix}$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ilm}=\delta_{jl}\delta_{km}-\delta_{jm}\delta_{kl}$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijl}=2\delta_{kl}$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijk}=6=3!。$$

$$\dot{A}_i=\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial P_i}=4\pi c^2 P_i,$$

$$\dot{P}_i=-\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial A_i}+\partial_m\left[\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial(\partial_m A_i)}\right]=\frac{1}{4\pi}\nabla^2 A_i。$$

上述分量式也可表示为矢量式:

$$\dot{\boldsymbol{A}}=4\pi c^2\boldsymbol{P},\ \dot{\boldsymbol{P}}=\frac{1}{4\pi}\nabla^2\boldsymbol{A}。\tag{3.5.15}$$

上式中的第一式即为式(3.5.10),可视为正则动量 $\boldsymbol{P}$ 的定义。将式(3.5.15)中的第一式代入第二式,便可得到波动方程(3.5.14)。

3.5.2 量子化电磁场

使经典电磁场转化为量子场的出发点是使广义坐标 $\boldsymbol{A}$ 与正则动量 $\boldsymbol{P}=\frac{1}{4\pi c^2}\dot{\boldsymbol{A}}$ 满足某种不对易性,从而转化为算符。考虑到光子是玻色子,所以要求存在如下同时性对易关系:

$$\begin{aligned}&[A_i(\boldsymbol{x},\ t),\ A_j(\boldsymbol{x}',\ t)]=0,\\&[P_i(\boldsymbol{x},\ t),\ P_j(\boldsymbol{x}',\ t)]=0,\\&[A_i(\boldsymbol{x},\ t),P_j(\boldsymbol{x}',\ t)]=i\hbar\delta_{ij}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),\end{aligned}\tag{3.5.16}$$

其中 $i,\ j=1,\ 2,\ 3$ 为空间分量指标。为简单起见,从本节起我们不再在量子场算符上方加脱字号"∧"。

场算符和动量算符的海森伯动力学方程为

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},\ t)}{\partial t}&=[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},\ t),\ H(t)],\\i\hbar\frac{\partial \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x},\ t)}{\partial t}&=[\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x},\ t),\ H(t)],\end{aligned}\tag{3.5.17}$$

其中量子场的哈密顿算符由式(3.5.13)给出,但由于现在 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 已转化为算符,所以 H 也转化为算符。可以证明,算符动力学方程(3.5.17)就是经典哈密顿方程的二次量子化形式。

[例 2] 证明量子化电磁场的动力学方程(3.5.17)就是经典电磁场哈密顿方程的二次量子化形式。

解:利用基本对易关系(3.5.16),可得

$$[\boldsymbol{A}_i(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{P}^2(\boldsymbol{x}', t)] = [A_i(\boldsymbol{x}, t), P_j(\boldsymbol{x}', t)P_j(\boldsymbol{x}', t)]$$
$$= 2i\hbar P_i(\boldsymbol{x}', t)\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')。$$

注意到哈密顿算符 H 中关于 $\nabla\times\boldsymbol{A}$ 的项与 $\boldsymbol{A}$ 对易，因此有

$$[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t), H] = 2\pi c^2\int d\boldsymbol{x}'[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{P}^2(\boldsymbol{x}', t)]$$
$$= i\hbar\cdot 4\pi c^2\int d\boldsymbol{x}'\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}', t)\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$
$$= i\hbar\cdot 4\pi c^2\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}, t)。$$

将此结果代入式(3.5.17)第一式，便得到算符方程

$$\frac{\partial\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} = 4\pi c^2\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}, t),$$

它显然与式(3.5.15)中的第一式形式一样。但应注意，现在 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 均为算符。类似地，可以证明式(3.5.17)中的第二式与式(3.5.15)中的第二式形式相同。

3.5.3 平面波展开

前面我们建立了自由电磁场的量子化理论，现在进一步将场算符分解为简正模式。为此将算符 $\boldsymbol{A}$ 表示为

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}^{+}(t)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}), \quad (3.5.18)$$

上式展开中取互为厄米共轭的两项之和，以便明显地体现出 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$ 的厄米性。这是因为经典电磁场是实数矢量场，所以矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$ 也应是实数矢量场，在二次量子化形式中它应转化为厄米算符：$\boldsymbol{A}^{+}(\boldsymbol{x}, t) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$。

将展开式(3.5.18)代入动力学方程(3.5.14)，并令 $\omega^2 = c^2\boldsymbol{k}^2$，可得

$$\ddot{\boldsymbol{A}}_{\boldsymbol{k}}(t) + \omega^2\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}(t) = 0。 \quad (3.5.19)$$

它的解为

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}(t) = \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}e^{-i\omega t}。 \quad (3.5.20)$$

现在令

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}(t) = \sum_{\lambda}\boldsymbol{e}_{\lambda}(\boldsymbol{k})A_{\boldsymbol{k}\lambda}(t) = \sum_{\lambda}\boldsymbol{e}_{\lambda}(\boldsymbol{k})A_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i\omega t}, \quad (3.5.21)$$

其中 $\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k})$ 是为了描写场算符 $\boldsymbol{k}$ 分量 $\boldsymbol{A}_k(t)$ 的方向性而引进的一组实正交基矢集。由于横波条件 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$，有

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k})=0。\tag{3.5.22}$$

所以 $\boldsymbol{e}_1$，$\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{k}/k$ 三个单位矢量可张成一右手直角坐标系，我们正是在这个空间中描述电磁场的极化性质。实基矢满足如下正交条件和完全性条件

$$\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'}(\boldsymbol{k})=\sum_{i=1}^{3}e_{\lambda i}(\boldsymbol{k})e_{\lambda' i}(\boldsymbol{k})=\delta_{\lambda\lambda'};\tag{3.5.23}$$

$$\sum_{\lambda=1}^{2}e_{\lambda i}(\boldsymbol{k})e_{\lambda j}(\boldsymbol{k})=\delta_{ij}。\tag{3.5.24}$$

此外，为了以后得到简洁的量子化电磁场的能量和动量表式，我们令

$$C_{k\lambda}(t)=\sqrt{\frac{\omega}{2\pi\hbar c^2}}\,A_{k\lambda}(t),\tag{3.5.25}$$

再注意到 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x},\,t)=\dfrac{1}{4\pi c^2}\dot{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x},\,t)$，场算符 $\boldsymbol{A}$ 和正则动量算符 $\boldsymbol{P}$ 的展开式可表示为

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},\,t)=\sum_{k\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega\Omega}}\,\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k})\left[C_{k\lambda}(t)e^{ik\cdot x}+C^{+}_{k\lambda}(t)e^{-ik\cdot x}\right],$$

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x},\,t)=-i\sum_{k\lambda}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{8\pi c^2\Omega}}\,\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k})\left[C_{k\lambda}(t)e^{ik\cdot x}-C^{+}_{k\lambda}(t)e^{-ik\cdot x}\right]。\tag{3.5.26}$$

与上述变换相应的逆变换为

$$C_{k\lambda}(t)=\sqrt{\frac{\omega}{8\pi\hbar c^2\Omega}}\int d\boldsymbol{x}\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k})\cdot\left[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},\,t)+i\,\frac{4\pi c^2}{\omega}\,\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x},\,t)\right]\cdot e^{-ik\cdot x},$$

$$C^{+}_{k\lambda}(t)=\sqrt{\frac{\omega}{8\pi\hbar c^2\Omega}}\int d\boldsymbol{x}\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k})\cdot\left[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},\,t)-i\,\frac{4\pi c^2}{\omega}\,\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x},\,t)\right]\cdot e^{ik\cdot x}。\tag{3.5.27}$$

利用 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},\ t)$和 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x},\ t)$的对易关系可导出关于 $C_{k\lambda}(t)$和 $C^{+}_{k\lambda}(t)$ 的同时性对易关系：

$$\begin{aligned}&[C_{k\lambda}(t),\ C_{k'\lambda'}(t)]=[C^{+}_{k\lambda}(t),\ C^{+}_{k'\lambda'}(t)]=0,\\&[C_{k\lambda}(t),\ C^{+}_{k'\lambda'}(t)]=\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}。\end{aligned}\tag{3.5.28}$$

电场强度和磁场强度算符的简正模式展开式可表示为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},\ t)&=-\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x},\ t)=-4\pi c\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x},\ t)\\&=i\sum_{k\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{\Omega}}\boldsymbol{e}_{\lambda}(\boldsymbol{k})[C_{k\lambda}(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-C^{+}_{k\lambda}(t)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}],\\\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\ t)&=\nabla\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},\ t)\\&=i\sum_{k\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^{2}}{\omega\Omega}}(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{e}_{\lambda}(\boldsymbol{k}))[C_{k\lambda}(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-C^{+}_{k\lambda}(t)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}]。\end{aligned}\tag{3.5.29}$$

将式(3.5.26)或(3.5.29)代入量子场哈密顿算符式(3.5.13)，可得

$$H=\sum_{k\lambda}\hbar\omega\left(C^{+}_{k\lambda}C_{k\lambda}+\frac{1}{2}\right)。\tag{3.5.30}$$

上述结果表明，量子化电磁场明显体现出电磁场的粒子性。与量子化电磁场相联系的基本粒子称为光子，动量为 $\boldsymbol{k}$ 的光子的能量为 $\hbar\omega=\hbar ck$。有两种极化状态的光子，它们分别对应于 $\lambda=1$ 和 2。$C^{+}_{k\lambda}C_{k\lambda}\equiv n_{k\lambda}$ 是动量为 $\boldsymbol{k}$，极化方向为 $\boldsymbol{e}_{\lambda}$ 的光子数算符，$C^{+}_{k\lambda}$ 和 $C_{k\lambda}$ 就是这种状态光子的产生算符和消灭算符。不存在光子的状态称为光子真空态。上述结果表明，光子真空态有能量，为

$$E_{0}=\frac{1}{2}\sum_{k\lambda}\hbar\omega。$$

由于电磁场的自由度为无穷大，所以 E_{0} 也为无穷大，可以认为关于电磁相互作用问题的讨论都是在这个背景上进行的。

现在来考虑电磁场的动量。经典电磁场的动量在高斯单位制中可表示为

$$\boldsymbol{p}=\frac{1}{4\pi c}\int d\boldsymbol{x}(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B})。\tag{3.5.31}$$

在二次量子化理论中，为了保证动量算符的厄米性，量子化电磁场的动量算符应表示为

$$\boldsymbol{p}=\frac{1}{8\pi c}\int d\boldsymbol{x}(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{E})。\tag{3.5.32}$$

将展开式(3.5.29)代入上式，便可得

$$\boldsymbol{p}=\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\hbar\boldsymbol{k}C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\lambda}C_{\boldsymbol{k}\lambda}。\tag{3.5.33}$$

上述结果表明，光子的动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$。在粒子数表象中电磁场的动量简单地就是各种状态光子的动量之和。在量子化电磁场动量的求和式中，并不出现常数项，因为 $\hbar\boldsymbol{k}$ 和 $-\hbar\boldsymbol{k}$ 的光子动量之和为零。电磁场的量子化理论以式(3.5.30)的哈密顿算符作为其出发点。应用这一理论讨论电磁相互作用现象的学科称为量子电动力学。

[例3] 导出式(3.5.30)。

解 由式(3.5.13)转化而来的量子化电磁场的哈密顿算符可表示为

$$H=H_1+H_2,$$

其中

$$H_1=2\pi c^2\int d\boldsymbol{x}\boldsymbol{P}^2=\frac{1}{8\pi}\int d\boldsymbol{x}\boldsymbol{E}^2$$

$$=-\frac{\hbar}{4\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}\lambda,\boldsymbol{k}'\lambda'}\sqrt{\omega_{\boldsymbol{k}}\omega_{\boldsymbol{k}'}}\,\boldsymbol{e}_{\lambda}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'}(\boldsymbol{k}')\int d\boldsymbol{x}(C_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

$$-C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}})\cdot(C_{\boldsymbol{k}'\lambda'}e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}}-C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}})。$$

注意到上述和式中的积分可化为

$$\int d\boldsymbol{x}(\cdots)(\cdots)=(C_{\boldsymbol{k}\lambda}C_{\boldsymbol{k}'\lambda'}+C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\lambda}C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'\lambda'})\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}$$

$$-(C_{\boldsymbol{k}\lambda}C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}+C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\lambda}C_{\boldsymbol{k}'\lambda'})\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'},$$

再注意到 $\boldsymbol{e}_{\lambda}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'}(\boldsymbol{k})=\delta_{\lambda\lambda'}$；$\omega_{\boldsymbol{k}}=\omega_{-\boldsymbol{k}}$，上式可化为

$$H_1=\frac{1}{4}\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}(C_{\boldsymbol{k}\lambda}C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\lambda}+C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\lambda}C_{\boldsymbol{k}\lambda})-\frac{1}{4}\sum_{\boldsymbol{k}\lambda,\boldsymbol{k}'\lambda'}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{e}_{\lambda}(\boldsymbol{k})$$

$$\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'}(\boldsymbol{k}')(C_{\boldsymbol{k}\lambda}C_{\boldsymbol{k}'\lambda'}+C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\lambda}C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'\lambda'})\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}。$$

类似地，对于 H_2 部份，有

$$
\begin{aligned}
H_2 &= \frac{1}{8\pi}\int d\boldsymbol{x}\boldsymbol{B}^2 = -\frac{\hbar c^2}{4\Omega}\sum_{k\lambda,k'\lambda'}\sqrt{\frac{1}{\omega_k\omega_{k'}}}\,(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k}))\\
&\quad\cdot(\boldsymbol{k}'\times\boldsymbol{e}_{\lambda'}(\boldsymbol{k}'))\int d\boldsymbol{x}(O_{k\lambda}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-O^+_{k\lambda}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}})\\
&\quad(O_{k'\lambda'}e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}}-O^+_{k'\lambda'}e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}})\\
&= -\frac{\hbar c^2}{4}\sum_{k\lambda,k'\lambda'}\sqrt{\frac{1}{\omega_k\omega_{k'}}}[(\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'}(\boldsymbol{k}'))(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}')\\
&\quad-(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k}))(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'}(\boldsymbol{k}'))][(O_{k\lambda}O_{k'\lambda'}\\
&\quad+O^+_{k\lambda}O^+_{k'\lambda'})\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}-(O_{k\lambda}O^+_{k'\lambda'}+O^+_{k\lambda}O_{k'\lambda'})\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}]\\
&= -\frac{1}{4}\sum_{k\lambda}\hbar\omega_k(O_{k\lambda}O^+_{k\lambda}+O^+_{k\lambda}O_{k\lambda})+\frac{1}{4}\sum_{k\lambda,k'\lambda'}\hbar\omega_k\boldsymbol{e}_\lambda(\boldsymbol{k})\\
&\quad\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'}(\boldsymbol{k}')(O_{k\lambda}O_{k'\lambda'}+O^+_{k\lambda}O^+_{k'\lambda'})\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}。
\end{aligned}
$$

于是有

$$
\begin{aligned}
H = H_1+H_2 &= \frac{1}{2}\sum_{k\lambda}\hbar\omega_k(O_{k\lambda}O^+_{k\lambda}+O^+_{k\lambda}O_{k\lambda})\\
&= \sum_{k\lambda}\hbar\omega_k\left(O^+_{k\lambda}O_{k\lambda}+\frac{1}{2}\right)
\end{aligned}
$$

3.5.4 电磁场强度的对易关系

利用如下算符关系式：

$$
\begin{aligned}
E_i &= -\frac{1}{c}\dot{A}_i = -4\pi cP_i,\\
B_i &= (\nabla\times\boldsymbol{A})_i = \varepsilon_{ijk}\partial_jA_k,
\end{aligned}
\tag{3.5.34}
$$

以及算符 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 各分量之间的对易关系(3.5.16)，可导出如下关于电磁场强度算符 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 各分量之间的对易关系：

$$
\begin{aligned}
&[E_i(\boldsymbol{x},t),\ E_j(\boldsymbol{x}',t)]=0,\\
&[B_i(\boldsymbol{x},t),\ B_j(\boldsymbol{x}',t)]=0,\\
&[E_i(\boldsymbol{x},t),\ B_j(\boldsymbol{x}',t)]=-i\hbar 4\pi c\varepsilon_{ijk}\partial_k\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')。
\end{aligned}
\tag{3.5.35}
$$

还可以证明，电场和磁场算符的散度与量子场的哈密顿算符

$$
H=\frac{1}{8\pi}\int d\boldsymbol{x}(\boldsymbol{E}^2+\boldsymbol{B}^2)
\tag{3.5.36}
$$

对易，即

$$[\nabla\cdot\boldsymbol{E},\ H]=0, \tag{3.5.37}$$

$$[\nabla\cdot\boldsymbol{B},\ H]=0。 \tag{3.5.38}$$

这表明，$\nabla\cdot\boldsymbol{E}$ 和 $\nabla\cdot\boldsymbol{B}$ 在空间各点处均是运动常数。或者说，若初始时刻空间各点处量子化电磁场的电场算符和磁场算符的散度为零，则其后任何时刻它们的散度恒为零。

算出 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 与哈密顿算符 H 的对易子，还可证明 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的海森伯动力学方程为

$$\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{E},\ H]=c\nabla\times\boldsymbol{B}, \tag{3.5.39}$$

$$\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{B},\ H]=-c\nabla\times\boldsymbol{E}。 \tag{3.5.40}$$

于是我们又得到了用 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 表示的量子化自由电磁场的表述方式。在这种表述方式中，哈密顿算符是式(3.5.36)；基本对易关系是式(3.5.35)；基本动力学方程是式(3.5.39)和(3.5.40)，以及由式(3.5.37)和(3.5.38)得到的 $\nabla\cdot\boldsymbol{E}=0$ 和 $\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$ 的公式。在这种描述方案下的四个关于 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的方程正是经典电动力学中自由电磁场麦克斯韦方程的量子化形式（其中 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 为算符）。用 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 表示的形式与前面给出的用矢势算符 $\boldsymbol{A}$ 给出的形式在库仑规范中是完全等价的。

[例 4]　证明式(3.5.37)。

解：考虑到 $\nabla\cdot\boldsymbol{E}$ 与哈密顿算符 H 中关于 $\boldsymbol{E}^2$ 的项对易，所以有

$$\begin{aligned}[\nabla\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},\ t),\ H]&=\frac{1}{8\pi}\partial_i\int d\boldsymbol{x}'[E_i(\boldsymbol{x},\ t),\ B_j(\boldsymbol{x}',\ t)B_j(\boldsymbol{x}',t)]\\&=\frac{1}{8\pi}\partial_i\int d\boldsymbol{x}'\{B_j(\boldsymbol{x}',\ t)[E_i(\boldsymbol{x},t),B_j(\boldsymbol{x}',t)]\\&\quad+[E_i(\boldsymbol{x},\ t),\ B_j(\boldsymbol{x}',\ t)]B_j(\boldsymbol{x}',\ t)\}\\&=-i\hbar c\varepsilon_{ijk}\int d\boldsymbol{x}'B_j(\boldsymbol{x}',\ t)\partial_i\partial_k\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')。\end{aligned}$$

由于算符 $\partial_i\partial_k\equiv\dfrac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_k}$ 和张量 ε_{ijk} 对于指标 i 和 k 分别是对称张

量和反对称张量，所以它们的缩并等于零。所以有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\nabla\cdot\boldsymbol{E})=[\nabla\cdot\boldsymbol{E},\ H]=0。$$

[例 5] 证明式(3.5.39)。

解：利用哈密顿算符表式(3.5.36)和对易关系(3.5.35)，可得

$$\begin{aligned}[E_i(\boldsymbol{x},\ t),\ H]&=\frac{1}{8\pi}\int d\boldsymbol{x}'[E_i(\boldsymbol{x},\ t),\ B_j(\boldsymbol{x}',\ t)B_j(\boldsymbol{x}',\ t)]\\&=-i\hbar c\varepsilon_{ijk}\int d\boldsymbol{x}'B_j(\boldsymbol{x}',\ t)\partial_k\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\\&=-i\hbar c\varepsilon_{ijk}\partial_k\int d\boldsymbol{x}'B_j(\boldsymbol{x}',\ t)\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\\&=-i\hbar c\varepsilon_{ijk}\partial_kB_j(\boldsymbol{x},\ t)。\end{aligned}$$

再注意到 $\varepsilon_{ijk}\partial_kB_j=-\varepsilon_{ikj}\partial_kB_j=-(\nabla\times\boldsymbol{B})_i$，

所以我们有 $[\boldsymbol{E},\ H]=i\hbar c\nabla\times\boldsymbol{B}$。

§3.6 存在相互作用的量子场理论

前面我们讨论了一种场的系统，如自旋为零的玻色子场，费米子场和电磁场等的量子化问题。实际中还存在不同量子场之间的相互作用问题，例如固体中的电子场与振动晶格场，或电子场与电磁场之间的相互作用问题。

为了建立存在相互作用的两种场所构成的系统的量子化理论，我们先来讨论一个非常简单的假想模型：一电子在一根弦上"跑动"的问题，电子由于存在质量而受到重力势场作用，反之又引起这根弦的受迫振动。这个例子涉及到两个一维场的相互作用，处理起来比较简单，但是所得到的结果却具有代表性，且可方便地推广到三维情况。

3.6.1 运动方程

自由振动弦的一维波动方程是

$$\rho\ddot{q}(x,\ t)-T\frac{\partial^2q(x,\ t)}{\partial t^2}=0 \qquad (3.6.1)$$

其中 ρ 为弦的质量密度，即单位长度的弦的质量，$q(x,\ t)$为 x 点处 t 时刻弦的横向位移，T 是弦张力。上式是一个一维波动方程，波在弦上的传播速度为

$$v=\sqrt{T/\rho}。\tag{3.6.2}$$

式(3.6.1)的定态解可设为

$$q(x,\ t)=q(x)e^{-i\omega t},\tag{3.6.3}$$

其中 $q(x)$ 所满足的定态方程为

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2}q(x)=k^2q(x)\tag{3.6.4}$$

$$k^2=\omega^2/v^2。\tag{3.6.5}$$

式(3.6.4)也可视为算符 $-\frac{\partial^2}{\partial x^2}$的本征方程，本征值为 k^2，相应的本征态函数为

$$q(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx},\tag{3.6.6}$$

L 为弦的长度。

现在考虑有一电子在这根弦上"行走"。该电子沿 x 的质量密度为 $\rho_e=m\psi^*(x,\ t)\psi(x,\ t)$，$\psi$ 为量子力学中电子的波函数，m 为电子质量。于是这根弦将受到密度为 $f=-G\psi^*\psi$ 的力场作用，$G=mg$ 为电子的重力。该弦的运动方程是

$$\rho\ddot{q}(x,\ t)-T\frac{\partial^2q(x,\ t)}{\partial x^2}=-G\psi^*(x,\ t)\psi(x,\ t),\tag{3.6.7}$$

这里忽略了弦所受到的重力作用。另一方面，由于弦的横向位移 $q(x,\ t)$，电子将具有相对处于平衡位置时的势能 $V=Gq(x,\ t)$，所以描写电子运动状态的薛定谔方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+Gq(x,\ t)\right]\psi(x,\ t)=i\hbar\dot{\psi}(x,\ t),\tag{3.6.8}$$

式(3.6.7)和(3.6.8)中出现了互相耦合的项，式(3.6.7)中出现了描写电子运动状态的场量 ψ；式(3.6.8)中出现了描写弦振动的场量 $q(x,\ t)$。这两个式子联立，描写了存在相互作用时两种场的

运动规律。不过应当指出，$q(x,\ t)$是实函数，而$\psi(x,\ t)$是复函数，所以联立方程中还应包括如下ψ^*所满足的方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+Gq(x,\ t)\right]\psi^*(x,\ t)=-i\hbar\dot{\psi}^*(x,\ t)。\quad(3.6.9)$$

3.6.2 场的拉氏密度和哈密顿量密度

上述振动弦场和电子场相互作用系统的拉氏密度可表示为

$$\mathscr{L}=i\hbar\psi^*\dot{\psi}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{1}{2}\rho\dot{q}^2-\frac{1}{2}T\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2-Gq\psi^*\psi,\quad(3.6.10)$$

上式实际上可分为两部份，一部份为自由场拉氏密度，包括自由电子场拉氏密度及自由振动弦场拉氏密度；另一部份，即最后一项是相互作用拉氏密度。上述拉氏密度应理解为如下各量的函数：ψ，$\dot{\psi}$，$\frac{\partial\psi}{\partial x}$；$\psi^*$，$\dot{\psi}^*$，$\frac{\partial\psi^*}{\partial x}$；$q$，$\dot{q}$，$\frac{\partial q}{\partial x}$，坐标和时间现在都是参数。不难证明，由上述拉氏密度给出的与广义坐标ψ，ψ^*和q相应的拉氏方程分别就是式(3.6.8)、(3.6.9)和(3.6.7)。

由拉氏密度可定义正则动量。与广义坐标ψ和q相应的正则动量分别为

$$\pi_\psi=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}=i\hbar\psi^*,\quad(3.6.11)$$

$$\pi_q=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{q}}=\rho\dot{q},\quad(3.6.12)$$

而与广义坐标ψ^*相对应的正则动量为零。于是系统的哈密顿量密度可表示为

$$\begin{aligned}\mathscr{H}&=\pi_\psi\dot{\psi}+\pi_q\dot{q}-\mathscr{L}\\&=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{1}{2}\rho\dot{q}^2+\frac{1}{2}T\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2\\&\quad+Gq\psi^*\psi。\end{aligned}\quad(3.6.13)$$

系统的总哈密顿量可表示为

$$H=H_0^{(\psi)}+H_0^{(T)}+H_I,\quad(3.6.14)$$

其中

$$H_0^{(\psi)}=\int\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi dx, \tag{3.6.15}$$

$$H_0^{(T)}=\int\frac{1}{2}\left[\rho\dot{q}^2+T\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2\right]dx, \tag{3.6.16}$$

$$H_1=G\int\psi^*q\psi dx。 \tag{3.6.17}$$

我们在导出式(3.6.15)时已作了一次分部积分。

3.6.3 量子化

在正则量子化方案中，场函数 ψ 和 q 及其相应的正则动量将转化为算符，并要求它们满足如下同时性对易关系或反对易关系：

$$\begin{aligned}&\{\psi(x,t),\pi_\psi(x',t)\}=\{\psi(x,t),i\hbar\psi^+(x',t)\}=i\hbar\delta(x-x'),\\&[q(x,t),\pi_q(x',t)]=[q(x,t),\rho\dot{q}(x',t)]=i\hbar\delta(x-x'),\end{aligned} \tag{3.6.18}$$

以及

$$\begin{aligned}&\{\psi(x,t),\psi(x',t)\}=\{\pi_\psi(x,t),\pi_\psi(x',t)\}=0,\\&[q(x,t),q(x',t)]=[\pi_q(x,t),\pi_q(x',t)]=0,\\&[q(x,t),\psi(x',t)]=[q(x,t),\pi_\psi(x',t)]\\&\qquad=[\psi(x,t),\pi_q(x',t)]\\&\qquad=[\pi_\psi(x,t),\pi_q(x',t)]=0。\end{aligned} \tag{3.6.19}$$

在上述算符关系中，由于电子场算符 ψ 和 $\pi_\psi=i\hbar\psi^+$ 是费米子算符，而振动弦场算符 q 和 $\pi_q=\rho\dot{q}$ 是玻色子算符，所以它们分别满足对易关系和反对易关系。费米子算符和玻色子算符之间假定是对易的。在采用了上述量子化步骤后，系统的哈密顿量也将转化为算符：

$$H=H_0^{(\psi)}+H_0^{(T)}+H_1, \tag{3.6.20}$$

其中

$$H_0^{(\psi)}=\int\psi^+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi dx, \tag{3.6.21}$$

$$H_0^{(T)}=\int\frac{1}{2}\left[\rho\dot{q}^2+T\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2\right]dx, \tag{3.6.22}$$

$$H_1=G\int\psi^+q\psi dx。 \tag{3.6.23}$$

为表示简单起见，这里我们已不再在二次量子化算符上方附加脱字号"∧"。

相互作用量子场系统的场算符和正则动量算符所满足的运动方程是

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=[\psi,\ H], \tag{3.6.24}$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t}=[\psi^+,\ H], \tag{3.6.25}$$

$$i\hbar\frac{\partial q}{\partial t}=[q,\ H], \tag{3.6.26}$$

$$i\hbar\frac{\partial\pi_q}{\partial t}=[\pi_q,\ H]。 \tag{3.6.27}$$

不难证明，式(3.6.24)和(3.6.25)分别就是薛定谔方程(3.6.8)和(3.6.9)的二次量子化形式(ψ 和 ψ^+ 为算符)；式(3.6.26)是正则动量 π_q 定义式(3.6.12)的二次量子化形式；而式(3.6.27)则是一维受迫振动弦方程(3.6.7)的二次量子化形式。

[例1] 证明式(3.6.26)和(3.6.27)分别是式(3.6.12)和(3.6.7)的二次量子化形式。

解：注意到 q 仅仅与式(3.6.20)～(3.6.23)哈密顿算符 H 中 $H_0^{(T)}$ 部份的第一项

$$\frac{1}{2}\int\rho\dot{q}^2dx=\frac{1}{2\rho}\int\pi_q^2dx$$

不对易，所以式(3.6.26)等号右边的对易子可化为

$$\begin{aligned}[q(x,\ t),\ H]&=\frac{1}{2\rho}\int dx'[q(x,\ t),\ \pi_q^2(x',\ t)]\\&=i\frac{\hbar}{\rho}\int dx'\pi_q(x',\ t)\delta(x-x')\\&=i\frac{\hbar}{\rho}\pi_q(x,\ t),\end{aligned}$$

因此式(3.6.26)可化为

$$\pi_q(x,\ t)=\rho\dot{q}(x,\ t)。$$

这就是式(3.6.12)的量子化形式。

类似地，注意到 $\pi_q=\rho\dot{q}$ 仅与哈密顿算符中 $H_0^{(T)}$ 部份的第二项及 H_i 存在不对易性，所以式(3.6.27)中等号右边的对易子可化为

$$[\pi_q(x,\ t),\ H]=\int dx'\Big[\pi_q(x,\ t),\ \frac{T}{2}\Big(\frac{\partial q(x',\ t)}{\partial x'}\Big)^2 + G\psi^+(x',\ t)q(x',\ t)\psi(x',\ t)\Big]。$$

由于

$$\Big[\pi_q(x,\ t),\ \Big(\frac{\partial q(x',\ t)}{\partial x'}\Big)^2\Big]=\frac{\partial q(x',\ t)}{\partial x'}\frac{\partial}{\partial x'}[\pi_q(x,\ t),\ q(x',\ t)] + \frac{\partial}{\partial x'}[\pi_q(x,\ t),\ q(x',\ t)]\frac{\partial q(x',\ t)}{\partial x'}$$

$$=-2i\hbar\frac{\partial q(x',\ t)}{\partial x'}\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x-x'),$$

所以

$$[\pi_q(x,\ t),\ H]=\int dx'\Big\{-i\hbar T\frac{\partial q(x',\ t)}{\partial x'}\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x-x') - i\hbar G\psi^+(x'\ t)\delta(x-x')\psi(x',\ t)\Big\}$$

$$=i\hbar T\frac{\partial^2 q(x,\ t)}{\partial x^2}-i\hbar G\psi^+(x,\ t)\psi(x,\ t)。$$

于是式(3.6.27)可化为

$$\rho\ddot{q}(x,\ t)=T\frac{\partial^2 q(x,\ t)}{\partial x^2}-G\psi^+(x,\ t)\psi(x,\ t)。$$

3.6.4 用本征函数展开

为了使前面所讨论的相互作用量子场理论明显地显示出粒子性，我们取如下两组本征函数完全集：

$$\varphi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ipx},\ \varphi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx},\qquad(3.6.28)$$

作为基矢集所张成的希尔伯空间的直积表象空间，将场算符作展

开：

$$\psi(x,\ t)=\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_p a_p(t)e^{ipx},$$

$$\psi^+(x,t)=\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_p a_p^+(t)e^{-ipx}, \tag{3.6.29}$$

$$q(x,\ t)=\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_k\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_k}}[b_k(t)e^{ikx}+b_k^+(t)e^{-ikx}],$$

其中用 $\hbar p$ 表示电子动量，$\hbar k$ 表示声子动量（$\omega_k^2=v^2k^2$）。在上式声子场算符 $q\ (x,\ t)$ 的展开式求和记号中取互为厄米共轭的两项之和，这是为了保证 q 的厄米性。式(3.6.29)的逆变换关系为

$$a_p(t)=\frac{1}{\sqrt{L}}\int\psi(x,\ t)e^{-ipx}dx,$$

$$a_p^+(t)=\frac{1}{\sqrt{L}}\int\psi^+(x,\ t)e^{ipx}dx, \tag{3.6.30}$$

$$b_k(t)=\sqrt{\frac{\rho\omega_k}{2\hbar L}}\int\left[q(x,\ t)+\frac{i}{\omega_k}\dot{q}(x,\ t)\right]e^{-ikx}dx。$$

在上述关于声子场算符的展开式中出现了较复杂的系数，这是为了以后导出的声子场哈密顿算符和声子数算符 $b_k^+b_k$ 之间存在简洁的关系。

利用场算符的对易和反对易关系式 (3.6.18) 和 (3.6.19) 以及展开式(3.6.30)，不难导出电子和声子的产生和消灭算符之间的同时性对易或反对易关系；结果如下：

$$\begin{aligned}
&\{a_p,\ a_{p'}\}=\{a_p^+,\ a_{p'}^+\}=0,\\
&\{a_p,\ a_{p'}^+\}=\delta_{pp'},\\
&[b_k,\ b_{k'}]=[b_k^+,\ b_{k'}^+]=0,\\
&[b_k,\ b_{k'}^+]=\delta_{kk'},\\
&[a_p,\ b_k]=[a_p,\ b_k^+]=[a_p^+,\ b_k]=[a_p^+,\ b_k^+]=0。
\end{aligned} \tag{3.6.31}$$

将场算符展开式（3.6.29）代入系统的哈密顿算符(3.6.20)～(3.6.23)，可得

$$H=H_0^{(e)}+H_0^{(T)}+H_t, \tag{3.6.32}$$

$$H_0^{(e)}=\sum_p \frac{\hbar^2 p^2}{2m} a_p^+ a_p, \tag{3.6.33}$$

$$H_0^{(T)}=\sum_k \hbar\omega_k \left(b_k^+ b_k+\frac{1}{2}\right), \tag{3.6.34}$$

$$H_i=\sum_{pk}(g_k a_{p+k}^+ a_p b_k+\text{H.C.}), \tag{3.6.35}$$

其中

$$g_k=\frac{1}{\sqrt{L}}\frac{1}{\sqrt{2\hbar\rho\omega_k}} \tag{3.6.36}$$

为电子和声子相互作用强度。注意，在相互作用哈密顿算符部份的求和式中包含两项，一项含有声子消灭算符 b_k，另一项，即厄米共轭项中含有声子产生算符 b_k^+。此外在这二项中，费米子算符总是成对出现的，这反映了费米子数守恒的要求。

[例 2] 导出式(3.6.34)。

解：将展开式(3.6.29)中的第三式代入式(3.6.22)，可得

$$\begin{aligned}H_0^{(T)}=&-\frac{\hbar}{4\rho L}\sum_{kk'}\int dx\left\{-\sqrt{\omega_k\omega_{k'}}\rho(b_k e^{ikx}-b_k^+ e^{-ikx})(b_{k'}e^{ik'x}\right.\\&-b^+_{k'}e^{-ik'x})-T\frac{kk'}{\sqrt{\omega_k\omega_{k'}}}(b_k e^{ikx}-b_k^+ e^{-ikx})\\&\left.(b_{k'}e^{ik'x}-b^+_{k'}e^{-ik'x})\right\}\\=&\frac{\hbar}{4\rho}\sum_k\left\{\rho\omega_k(b_k b_k^+ +b_k^+ b_k-b_k b_{-k}-b_k^+ b_{-k}^+)\right.\\&\left.+\frac{k^2T}{\omega_k}(b_k b_k^+ +b_k^+ b_k+b_k b_{-k}+b_k^+ b_{-k}^+)\right\},\end{aligned}$$

其中已应用了如下结果：$\omega_{-k}=\omega_k$。如果再注意到色散关系(3.6.5)，有

$$\frac{k^2T}{\omega_k}=\rho\omega_k,$$

于是上式可化为

$$\begin{aligned}H_0^{(T)}=&\frac{1}{2}\sum_k\hbar\omega_k(b_k b_k^+ +b_k^+ b_k)\\=&\sum_k\hbar\omega_k\left(b_k^+ b_k+\frac{1}{2}\right).\end{aligned}$$

式(3.6.32)～(3.6.35)给出的存在电子-声子相互作用的量子场系统具有典型性。电子和声子相互作用是金属电阻产生的原因,固体的许多性质如热学、声学、电学和光学性质都可利用这种类型的哈密顿算符在二次量子化方案中得到解释。此外,电子和光子相互作用量子场系统的哈密顿算符也具有这种完全类似的形式,而电磁作用是自然界的一种基本相互作用,对于这类相互作用及其所引起的电磁现象的研究是物理学的一个十分重要的课题。

3.6.5 不同绘景中量子场哈密顿算符的形式

式(3.6.32)～(3.6.35)的哈密顿算符应理解为海森伯绘景中的形式,所包含的费米子算符和玻色子算符都应理解为时间的函数,即 $a_p \equiv a_p(t)$, $b_k \equiv b_k(t)$, …。但是我们知道,海森伯绘景和薛定谔绘景之间的转化是通过总哈密顿算符所确定的一个幺正变换实现的,所以总哈密顿算符在这两种绘景中具有相同形式。于是式(3.6.32)～(3.6.35)中的电子和声子算符也可理解为与时间无关,即保持初始时刻的形式,这时这些式子所给出的也就是薛定谔绘景中的哈密顿算符形式。

在实际问题中当电子-声子耦合强度 g_k 很小时,可采用微扰方法,这时还需要引进相互作用绘景。由于相互作用绘景和薛定谔绘景之间是通过 H_0 所生成的幺正变换实现的,所以相互作用绘景中的 H_0 部份与薛定谔绘景中的形式相同(但应理解为时间的函数)。现在还需求出相互作用哈密顿算符在相互作用绘景中的形式。为此,让我们先来考察费米子算符在如下定义的幺正算符作用下的变换规律:

$$R(\theta) = e^{-i\theta a^+ a}。 \tag{3.6.37}$$

在讨论相干态问题时,对于玻色子算符我们曾经引入了完全类似的算符,并称为转动算符。在式(3.6.37)的算符作用下,费米子消灭算符将变换为

$$a(\theta) = R(\theta) a R^+(\theta)。$$

因为

$$\frac{\partial a(\theta)}{\partial\theta}=-i\theta R(\theta)(a^+aa-aa^+a)R^+(\theta)=i\theta a(\theta),$$

其中已注意到 $a^2=0$，$aa^+a=(1-a^+a)a=a$。上式满足初始条件 $a(\theta)|_{\theta=0}=a$ 的解为 $a(\theta)=e^{i\theta}a$，因此有

$$\begin{aligned}&e^{-i\theta a^+a}ae^{i\theta a^+a}=e^{i\theta}a,\\&e^{-i\theta a^+a}a^+e^{i\theta a^+a}=e^{-i\theta}a^+。\end{aligned}\tag{3.6.38}$$

对于玻色子算符，我们曾经在 3.2.5 中讨论过，结果为

$$\begin{aligned}&e^{-i\theta b^+b}be^{i\theta b^+b}=e^{i\theta}b,\\&e^{-i\theta b^+b}b^+e^{i\theta b^+b}=e^{-i\theta}b^+。\end{aligned}\tag{3.6.39}$$

现在我们回到寻求相互作用绘景中的相互作用哈密顿算符这个问题。从 1.4.5 的讨论中已经知道，相互作用哈密顿算符在相互作用绘景中的形式 $H_i^{(I)}$ 可以由它在薛定谔绘景中的形式 H_i [见式(3.6.35)]通过幺正变换实现：

$$H_i^{(I)}=U_0^{-1}(t)H_iU_0(t),\tag{3.6.40}$$

其中

$$U_0(t)=e^{-iH_0t/\hbar}\tag{3.6.41}$$

这里 $H_0=H_0^{(e)}+H_0^{(T)}$，由式(3.6.33)和(3.6.34)给出。作为例子，我们来考察 H_i 中与 b_k 有关的部份：$a_{p+k}^+a_pb_k$。由于

$$U_0^{-1}a_{p+k}^+a_pb_kU=(U_0^{-1}a_{p+k}^+U_0)(U_0^{-1}a_pU_0)(U_0^{-1}b_kU_0),$$

所以只须讨论每一个电子算符和声子算符在 U_0 变换下的结果。

作为例子，我们来考察 $U_0^{-1}a_pU_0$，其中(略去声子场真空态能量引起的常数因子)

$$U_0^{-1}=U_0^+=e^{iH_0t/\hbar}=\exp\{i(\sum_{p'}\varepsilon_{p'}a_{p'}^+a_{p'}+\sum_k\omega_kb_k^+b_k)t\},\tag{3.6.42}$$

式中 $\hbar\varepsilon_p=\hbar^2p^2/2m$ 是电子动能。U_0^{-1} 中与声子算符有关的所有项(这种项数有无穷多)均与电子算符 a_p 对易；与电子算符有关的项中除 $p'=p$ 的那一项与 a_p 存在不对易性外，其它所有项($p'\neq p$)也与 a_p 对易，因此我们有

$$\begin{aligned}U_0^{-1}a_pU_0&=e^{i\varepsilon_pa_p^+a_pt}a_pe^{-i\varepsilon_pa_p^+a_pt}\\&=e^{-i\varepsilon_pt}a_p。\end{aligned}\tag{3.6.43}$$

类似地可以证明，有

$$U_0^{-1}a_p^+U_0=e^{i\varepsilon_p t}a_p^+, \tag{3.6.44}$$

$$U_0^{-1}b_kU_0=e^{-i\omega_k t}b_k, \tag{3.6.45}$$

$$U_0^{-1}b_k^+U_0=e^{i\omega_k t}b_k^+。 \tag{3.6.46}$$

利用这些结果最后可得相互作用绘景中电子-声子相互作用哈密顿算符的形式为

$$H_I^{(I)}=\sum_{pk}\{g_k a_{p+k}^+ a_p b_k e^{i(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p-\omega_k)t}+\text{H.C.}\}。 \tag{3.6.47}$$

在1.4.5的讨论中我们已经知道，已知 $H_I^{(I)}$，就可在各级近似下计算 S 矩阵元，从而算出由于相互作用而引起的跃迁幅。

习　题

3-1　设一维非简谐振子系统的哈密顿算符为

$$H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2+\beta x^3+\gamma x^4,$$

其中 β 和 γ 为小的实参量。

(1) 用声子湮灭和产生算符表示 H（将各项化为正规乘积，即算符乘积中，所有产生算符位于左边；所有湮灭算符位于右边）。

(2) 用微扰法计算非简谐力作用所引起的对谐振子基态能级的一级修正。

(3) 计算 βx^3 项所引起的对谐振子基态能级的二级修正。

3-2　考虑包含非简谐相互作用的线性谐振子链，其哈密顿算符为

$$H=\sum_{n=1}^{N}\left[\frac{1}{2m}p_n^2+\frac{1}{2}f(x_n-x_{n-1})^2+\varepsilon(x_n-x_{n-1})^3\right],$$

其中 ε 为小参量。试导出其粒子数表象形式。在它的相互作用哈密顿算符部份包括哪些项，说明各项意义，并尝试采用费曼图表示。

3-3　一个包含两个质量和频率都相同的线性谐振子的系统，它们之间存在相互作用，其哈密顿算符为

$$H=H(x_1)+H(x_2)+\lambda x_1x_2,$$

$$H(x_i)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x_i^2 \qquad (i=1,2),$$

试证明该系统可表述为两个非耦合谐振子系统。(提示：引进正规坐标

$$\eta_1=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x_1+x_2),\quad \eta_2=\sqrt{\frac{m\omega_2}{2\hbar}}(x_1-x_2),$$

其中 $\omega_{1,2}^2=\omega^2\pm\lambda/m$。)

3-4 证明式(3.2.46)。

3-5 证明 $SU(2)$相干态满足完全性条件[式(3.2.57)]。

3-6 导出压缩算符变换下声子消灭算符和产生算符的变换公式(3.2.77)。

3-7 计算压缩真空态中坐标和动量的方差。

3-8 导出转动算符变换下压缩算符的变换式(3.2.85)。

3-9 导出压缩算符变换下位移算符的变换式(3.2.86)。

3-10 设$[x, y]=\kappa y$,其中 κ 为经典的数。试证明如下 BH 公式:

$$\exp(\alpha x+\beta y)=\exp(\alpha x)\exp\left[\frac{\beta}{\alpha\kappa}(1-e^{\alpha\kappa})y\right]。$$

3-11 设 $|\Phi\rangle=\alpha b_i^\dagger|0\rangle+\beta b_j^\dagger|0\rangle$,其中 $i\neq j$, $|\alpha|^2+|\beta|^2=1$。试求概率密度算符 $\hat{\rho}(x)$在该态中的平均值和总概率。

3-12 设经典场 $\varphi(x, t)$满足如下运动方程:

$$\nabla^2\varphi-\rho\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}=0,$$

试写出该系统的拉氏密度和哈密顿密度,并建立量子化 φ 场理论。

3-13 在二次量子化理论中,(1) 证明理想费米气体的概率密度和概率流密度可表示为

$$\rho(x, t)=\frac{1}{V}\sum_{k,q,\sigma}e^{-iq\cdot x}a_{k+q,\sigma}^\dagger(t)a_{k\sigma}(t),$$

$$j(x, t)=\frac{\hbar}{mV}\sum_{k,q,\sigma}e^{-iq\cdot x}\left(k+\frac{1}{2}q\right)a_{k+q,\sigma}^\dagger(t)a_{k\sigma}(t)。$$

(2) 证明上述 ρ 和 j 满足如下连续性方程:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot j=0。$$

3-14 包含单体和两体作用的最一般的全同粒子系统的哈密顿算符在二次量子化理论中可表示为

$$H=\sum_{ij}a_i^\dagger\langle i|H_0|j\rangle a_j+\frac{1}{2}\sum_{ijkl}a_i^\dagger a_j^\dagger\langle ij|V|kl\rangle a_k a_l,$$

其中 $a_i^\dagger$ 和 a_i 分别为费米子或玻色子的产生算符和湮灭算符。试导出它们的运动方程。

3-15 二次量子化理论中全同粒子系统的哈密顿算符可利用场算符表示为

$$H=\int\psi^+(x, t)H_0(x_1)\psi(x_1, t)dx_1$$

$$+\frac{1}{2}\int\psi^+(x_1, t)\psi^+(x_2, t)V(x_1, x_2)\psi(x_2, t)\psi(x_1, t)dx_1dx_2。$$

(1) 导出场算符 $\psi(x, t)$所满足的动力学方程。

(2) 二次量子化理论中量子场 ψ 的格林函数定义如下：

$$G(x, t; x', t') = -i\langle 0|\mathscr{P}[\psi(x, t)\psi^+(x', t')]|0\rangle。$$

试导出格林函数所满足的方程($\mathscr{P}$是编时算符)。

3-16 设产生算符 a^+ 生成的变换为 $S=e^{\alpha a^+}$. 其中 α 为实常数。试计算 SaS^{-1} 和变换真空态 $S|0\rangle$的模。考虑 a^+ 为玻色子算符和费米子算符两种情况。

3-17 设玻色子算符 a^+ 生成的变换为 $S=e^{\alpha(a^+ - a)}$, 试计算 SaS^{-1} 和变换真空态的模。

3-18 证明对于全同玻色子系统，无论是否存在两体相互作用，其总粒子数算符 $N=\sum_k n_k=\sum_k b_k^+ b_k$均是守恒量。对于粒子数算符 $n_k=b_k^+ b_k$, 你将得到什么结论？

3-19 证明量子化电磁场的电场算符 $\boldsymbol{E}(x, t)$和磁场算符 $\boldsymbol{B}(x, t)$所满足的海森伯运动方程就是经典电磁场麦克斯韦方程的二次量子化形式。

3-20 导出量子化自由电磁场的电场算符和磁场算符各分量之间所存在的对易关系(3.5.35)。

3-21 导出量子化自由电磁场总动量的表式(3.5.33)。

3-22 在固体理论中，自由电子系统的格林函数定义为

$$G(x, t; x', t') = -i\langle 0|\mathscr{P}[\psi(x, t)\psi^+(x', t')]|0\rangle.$$

其中 $|0\rangle$为系统基态：在费米动量 k 以下的单粒子态均被占有，在费米动量以上的单粒子态全部空缺。试导出这种格林函数在动量表象中的形式。

第四章　二次量子化理论的某些应用

上一章介绍了全同粒子系统的二次量子化理论。这种二次量子化理论在固体物理、超导和超流现象、磁学及量子光学等领域有非常广泛的应用。我们首先在§4.1中介绍超流的基本理论。存在弱的排斥力作用的玻色子系统在一定条件下会呈现出超流性。电子和振动晶格场即声子场的相互作用是量子固体理论的基础，我们将在§4.2中介绍其中某些基本内容。§4.3中我们将介绍超导电性的BCS理论，在费米面附近的两个电子在一定条件下由于电子-声子相互作用会结合成电子对，从而使某些金属和合金呈现出超导电性。自旋系统的二次量子化理论将在§4.4中介绍，对于存在自旋相互作用的系统的讨论无论在现代统计理论中还是在磁学中都是非常令人感兴趣的。最后在§4.5中，我们将介绍电子和量子化电磁场相互作用的某些知识，讨论了光的辐射和吸收现象以及光对原子的散射现象。限于本课程的特点与篇幅，对于上述问题的讨论仅仅涉及到某些最基本的方面，其目的是为了使读者通过这些应用实例，对二次量子化理论有更进一步的理解与掌握，为今后进入各领域的研究工作打好基础。

§4.1　相互作用玻色子系统

作为二次量子化理论的一个应用，我们先来讨论全同玻色子系统。不存在两体相互作用的全同粒子系统常称为"理想气体"，我们首先来讨论热平衡状态下这种理想气体中的粒子数分布，这是量子统计学的基础。然后我们再来讨论存在相互作用时的玻色子系统。

4.1.1 理想气体的粒子数分布

不存在相互作用的全同粒子系统称为理想气体。理想气体又可分为理想玻色气体和理想费米气体，前者由全同玻色子组成，后者由全同费米子组成。

理想气体的哈密顿算符为

$$H=\sum_i \varepsilon_i b_i^\dagger b_i, \tag{4.1.1}$$

其中 $\varepsilon_i=\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}$ 为单粒子动能；$b_k^\dagger$ 和 b_k 分别是动量为 $\boldsymbol{k}_i$ 的玻色子的产生算符和消灭算符，它们满足玻色子对易关系。

在统计力学中重要的是要计算平衡状态下力学量的平均值。统计系综一般是混合系综，在经典统计力学中描写统计系综状态的量是分布函数或密度函数 ρ。在量子理论中，密度函数改变为密度算符或密度矩阵。对于能量和粒子数均常定的处于热平衡态的系统来说，密度算符可表示为

$$\rho=e^{-\alpha N-\beta H}=e^{-\beta(H-\mu N)}, \tag{4.1.2}$$

其中 $\beta=1/kT$，T 为绝对温度，k 为玻耳兹曼常数；$\mu\equiv\alpha/\beta$ 为化学势；N 为粒子数算符

$$N=\sum_i b_i^\dagger b_i; \tag{4.1.3}$$

H 为哈密顿算符，对于理想气体来说，它由式(4.1.1)给出。式(4.1.2)常未归一化。密度算符的归一化条件是

$$\mathrm{Tr}\rho=1。 \tag{4.1.4}$$

由此归一化条件可得式(4.1.2)的归一化系数应为 $1/Z$，其中

$$Z=\mathrm{Tr}e^{-\beta(H-\mu N)} \tag{4.1.5}$$

称为配分函数。在统计理论中配分函数起到很重要的作用，它是一个特征函数，由它可以算出描写系统特征的所有其它宏观物理量，如自由能、熵、内能等。任何力学量 A 的平均值为

$$\langle A\rangle=\mathrm{Tr}(\rho A)。 \tag{4.1.6}$$

应当指出，上述讨论中应用了式(4.1.1)和(4.1.3)，这表明上述统

计理论实际上是在二次量子化理论中给出的。

作为例子，现在我们来计算理想玻色气体中的粒子数分布。粒子数算符的平均值：

$$\langle n_i\rangle=\langle b_i^+b_i\rangle=\mathrm{Tr}[e^{-\beta(H-\mu N)}b_i^+b_i/Z]。\qquad(4.1.7)$$

因为

$$\begin{aligned}e^{-\beta(H-\mu N)}b_i^+&=e^{-\beta\sum_j(\varepsilon_j-\mu)b_j^+b_j}b_i^+\\&=e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)b_i^+b_i}b_i^+e^{-\beta\sum_j'(\varepsilon_j-\mu)b_j^+b_j},\end{aligned}\qquad(4.1.8)$$

其中 $\sum_j'\equiv\sum_{j(\neq i)}$，即带撇求和式中不包括 $j=i$ 的项，因为这一项与 b_i^+ 有不对易性，应特别考虑。上式中这一项仍留在 b_i^+ 的左边。利用式(3.6.39)可知

$$e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)b_i^+b_i}b_i^+=e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}b_i^+e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)b_i^+b_i}。\qquad(4.1.9)$$

于是式(4.1.8)可化为

$$e^{-\beta(H-\mu N)}b_i^+=e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}b_i^+e^{-\beta(H-\mu N)}。\qquad(4.1.10)$$

利用上述结果以及求迹公式 $\mathrm{Tr}(ABC)=\mathrm{Tr}(CAB)$，式(4.1.7)可化为

$$\begin{aligned}Z\langle n_i\rangle&=\mathrm{Tr}[e^{-\beta(H-\mu N)}b_i^+b_i]=\mathrm{Tr}(b_ie^{-\beta(H-\mu N)}b_i^+)\\&=e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}\mathrm{Tr}[e^{-\beta(H-\mu N)}b_ib_i^+]。\end{aligned}$$

再考虑到基本对易关系

$$[b_i,\ b_i^+]=1,\qquad(4.1.11)$$

有

$$Z\langle n_i\rangle=e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}\mathrm{Tr}[e^{-\beta(H-\mu N)}(1+b_i^+b_i)],$$

即

$$\langle n_i\rangle=e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}(1+\langle n_i\rangle),$$

或

$$\langle n_i\rangle=\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}-1}\quad(\text{玻色气体})\qquad(4.1.12)$$

这就是玻色-爱因斯坦分布。对于理想费米气体，上述推导完全类似，所不同的仅仅在于对易关系(4.1.11)应改为反对易关系。因此对于理想费米气体，有

$$\langle n_i\rangle=\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}+1}\quad\text{（费米气体）。}\qquad(4.1.13)$$

1.2 超流的微观理论基础

超流现象最早由卡皮查于1938年发现。液氦(^{4}He)在接近绝对零度(~2.19 K)时粘滞性消失。苏联科学家兰道(L. D. Landau, 1941)和波格留波夫(N. N. Bogoliubov, 1947)最早建立了超流理论。^{4}He原子是玻色子，超流现象是存在弱排斥作用的全同玻色子系统在一定条件下发生的一种奇特的现象①。波格留波夫采用正则变换方法将相互作用玻色子系统转化到一个近似的无相互作用的粒子系统，这种粒子常称为"准粒子"或"元激发"。从而由元激发能谱结构及色散关系出发，对超流现象中的许多特性进行了研究并作出了定量解释。

存在两体相互作用的全同玻色子系统的哈密顿算符可表示为

$$H=\sum_k\varepsilon_k b_k^+b_k+\frac{1}{2\Omega}\sum_{k_1k_2k_3k_4}V(\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_3)b_{k_1}^+b_{k_2}^+b_{k_3}b_{k_4}\cdot\delta_{k_1+k_2,\,k_3+k_4},\qquad(4.1.14)$$

其中ε_k为粒子动能，Ω为归一化体积，V为两体相互作用势的富里叶变换。在绝对零度时，无相互作用玻色子系统的基态是所有粒子凝聚在$k=0$的最低能量状态，称为零动量状态或凝结态。当粒子间存在弱的相互作用时，大部分粒子仍然处于凝结态，但会有少量粒子"蒸发"到激发态。设系统的总粒子数为N，处于凝结态的粒子数为$N_0=b_0^+b_0$。因为

$$b_0b_0^+=1+b_0^+b_0=1+N_0\simeq N_0=b_0^+b_0,\qquad(4.1.15)$$

所以当温度极低，相互作用很弱，绝大多数粒子凝结在基态情况下，b_0和b_0^+互相对易，可视为经典的数，且$b_0\simeq b_0^+\simeq\sqrt{N_0}$($N_0$的数量级为$10^{23}$)。

由于玻色子算符b_0和b_0^+的数量级很大，我们可尝试将式

① 氦的另一种同位素^{3}He是费米子。1971年发现^{3}He在压强大约为34大气压，温度为2.7×10^{-3}K时也发生超流相变，会出现几种不同的超流相。这些超流相依赖于由两个^{3}He费米子组成的玻色子束缚对的取向。

(4.1.14)中的相互作用哈密顿算符按基态玻色子算符 b_0 或 b_0^+ 出现的次数展开，其中领头项显然是 $b_0^+b_0^+b_0b_0$，该项正比于 N_0^2，它描写了凝结在基态的玻色子之间的两体相互作用。由于 H 的第二项中 δ 函数的要求，下一重要的项应正比于 N_0，它们是($\times N_0/2\Omega$)

$$\begin{aligned}
&(\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}_2=0,\ \boldsymbol{k}_3=-\boldsymbol{k}_4) \quad &&\sum_{\boldsymbol{k}}{}' V(\boldsymbol{k})b_{\boldsymbol{k}}b_{-\boldsymbol{k}},\\
&(\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}_3=0,\ \boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{k}_4) \quad &&\sum_{\boldsymbol{k}}{}' V(0)b_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}},\\
&(\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}_4=0,\ \boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{k}_3) \quad &&\sum_{\boldsymbol{k}}{}' V(\boldsymbol{k})b_{-\boldsymbol{k}}^+b_{-\boldsymbol{k}},\\
&(\boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{k}_3=0,\ \boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}_4) \quad &&\sum_{\boldsymbol{k}}{}' V(\boldsymbol{k})b_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}},\\
&(\boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{k}_4=0,\ \boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}_3) \quad &&\sum_{\boldsymbol{k}}{}' V(0)b_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}},\\
&(\boldsymbol{k}_3=\boldsymbol{k}_4=0,\ \boldsymbol{k}_1=-\boldsymbol{k}_2) \quad &&\sum_{\boldsymbol{k}}{}' V(\boldsymbol{k})b_{\boldsymbol{k}}^+b_{-\boldsymbol{k}}^+,
\end{aligned} \tag{4.1.16}$$

其中 $\sum_{\boldsymbol{k}}{}'$ 表示不包括 $\boldsymbol{k}=0$ 的项。上述各项将给出激发态和基态粒子间的相互作用。于是相互作用哈密顿算符现在可近似地表示为

$$\begin{aligned}
H_i\simeq\frac{1}{2\Omega}[&V(0)N_0^2+2V(0)N_0\sum_{\boldsymbol{k}}{}' b_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}}\\
&+N_0\sum_{\boldsymbol{k}}{}' V(\boldsymbol{k})(b_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}}+b_{-\boldsymbol{k}}^+b_{-\boldsymbol{k}}+b_{\boldsymbol{k}}b_{-\boldsymbol{k}}+b_{\boldsymbol{k}}^+b_{-\boldsymbol{k}}^+)]
\end{aligned} \tag{4.1.17}$$

上述近似中忽略了激发态粒子间的相互作用。只要相互作用很弱，处于激发态的粒子数很小，或者说处于激发态的粒子气体很稀薄，这样的近似是可取的。由于

$$N=\sum_{\boldsymbol{k}}b_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}}=N_0+\sum_{\boldsymbol{k}}{}' b_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}},$$

所以有

$$N_0^2=(N-\sum_{\boldsymbol{k}}{}' b_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}})^2\simeq N^2-2N\sum_{\boldsymbol{k}}{}' b_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}}。 \tag{4.1.18}$$

由此结果，式(4.1.17)中的第一项和第二项可化为($N\simeq N_0$)

$$\frac{1}{2\Omega}[V(0)N_0^2+2V(0)N_0\sum_k{}' b_k^+b_k]$$

$$=\frac{1}{2\Omega}V(0)N^2=\frac{1}{2}\Omega n^2V(0), \qquad (4.1.19)$$

其中 $n=N/\Omega$ 为系统的粒子数密度。如果再考虑到处于基态的玻色子动能为零，

$$\sum_k \varepsilon_k b_k^+b_k=\sum_k{}' \varepsilon_k b_k^+b_k,$$

则存在微弱相互作用的玻色子系统的相互作用算符可近似地表示为

$$H\simeq\frac{1}{2}\Omega n^2V(0)+\frac{1}{2}\sum_k{}'[(\varepsilon_k+nV(\boldsymbol{k}))(b_k^+b_k+b_{-k}^+b_{-k})$$
$$+nV(\boldsymbol{k})(b_k^+b_{-k}^++b_kb_{-k})]。 \qquad (4.1.20)$$

在粒子数表象中，上式中的常数项及求和式中与激发态粒子数算符 $b_k^+b_k+b_{-k}^+b_{-k}$ 成正比的项是 H 中的对角项；而与算符 $b_k^+b_{-k}^++b_kb_{-k}$ 有关的项是非对角项。为了求哈密顿算符的本征值，须使它对角化。尝试作如下正则变换：

$$\begin{aligned} b_k&=u_k\alpha_k-v_k\alpha_{-k}^+,\\ b_k^+&=u_k\alpha_k^+-v_k\alpha_{-k}, \end{aligned} \qquad (4.1.21)$$

其中系数 u_k 和 v_k 为实数，且具有球对称性，即仅与 $\boldsymbol{k}$ 的值 k 有关。上式中的算符 α_k^+ 和 α_k 为新粒子(即准粒子或元激发)的产生算符和消灭算符。此外要求变换系数满足如下条件：

$$u_k^2-v_k^2=1。 \qquad (4.1.22)$$

此条件也可称为正则化条件，因为它保证了在式(4.1.21)的变换下基本对易关系不变。与式(4.1.21)相应的逆变换为

$$\begin{aligned} \alpha_k&=u_kb_k+v_kb_{-k}^+,\\ \alpha_k^+&=u_kb_k^++v_kb_{-k}。 \end{aligned} \qquad (4.1.23)$$

不难证明，在式(4.1.22)的条件下，准粒子算符满足同样的对易关系

$$[\alpha_k,\ \alpha_{k'}]=[\alpha_k^+\alpha_{k'}^+]=0,$$
$$[\alpha_k,\ \alpha_{k'}^+]=\delta_{kk'}。 \tag{4.1.24}$$

利用波格留波夫正则变换(4.1.21)，哈密顿算符(4.1.20)可化为

$$H=E_0+H_1+H_2, \tag{4.1.25}$$

其中

$$E_0=\frac{1}{2}\Omega n^2V(0)+\sum_k{}'[(\varepsilon_k+nV(\boldsymbol{k}))v_k^2-nV(\boldsymbol{k})u_kv_k], \tag{4.1.26}$$

$$H_1=\frac{1}{2}\sum_k{}'[(\varepsilon_k+nV(\boldsymbol{k}))(u_k^2+v_k^2)-2u_kv_knV(\boldsymbol{k})]\cdot(\alpha_k^+\alpha_k+\alpha_{-k}^+\alpha_{-k}), \tag{4.1.27}$$

$$H_2=\frac{1}{2}\sum_k{}'[nV(\boldsymbol{k})(u_k^2+v_k^2)-2u_kv_k(\varepsilon_k+nV(\boldsymbol{k}))]\cdot(\alpha_k^+\alpha_{-k}^++\alpha_k\alpha_{-k})。 \tag{4.1.28}$$

上述结果中 E_0 是常数项，它给出系统的基态能量；H_1 为对角部分，它给出了准粒子基本激发能或元激发谱。上述结果中 H_2 是非对角项，但是我们现在可设法消去这种项。因为正则变换决定于两个参数 u_k 和 v_k，但只有一个限制条件(4.1.22)，所以这两个参数的比仍然是任意的。为了使哈密顿算符完全对角化，现在令 $H_2=0$，这意味着要求下式成立：

$$2u_kv_k(\varepsilon_k+nV(\boldsymbol{k}))=nV(\boldsymbol{k})(u_k^2+v_k^2)。 \tag{4.1.29}$$

这样，波格留波夫变换也就完全确定了。

现在我们由式(4.1.22)和(4.1.29)来确定 u_k 和 v_k。为此，先由正则化条件(4.1.22)可知，我们可采用如下参数化表示：

$$u_k=\mathrm{ch}\,\varphi_k,\qquad v_k=\mathrm{sh}\,\varphi_k。 \tag{4.1.30}$$

由于
$$2u_kv_k=2\,\mathrm{ch}\,\varphi_k\cdot\mathrm{sh}\,\varphi_k=\mathrm{sh}\,2\varphi_k;$$
$$u_k^2+v_k^2=\mathrm{ch}\,2\varphi_k,$$

所以有
$$2u_kv_k/(u_k^2+v_k^2)=\mathrm{th}\,2\varphi_k。$$

这样，式(4.1.29)可表示为

$$\text{th}\,2\varphi_k=\frac{nV}{(\varepsilon_k+nV)}。\tag{4.1.31}$$

这样，我们有

$$u_k^2+v_k^2=\text{ch}\,2\varphi_k=\frac{1}{\sqrt{1-\text{th}^2\,2\varphi_k}},$$

即

$$u_k^2+v_k^2=\frac{\varepsilon_k+nV}{E_k},\tag{4.1.32}$$

其中

$$E_k=\sqrt{(\varepsilon_k+nV)^2-(nV)^2}=\sqrt{\varepsilon_k^2+2nV\varepsilon_k}。\tag{4.1.33}$$

将式(4.1.32)和正则条件(4.1.22)联立，可解出 u_k^2、v_k^2 以及 u_kv_k：

$$\begin{cases}u_k^2=\dfrac{1}{2}\left[\dfrac{\varepsilon_k+nV}{E_k}+1\right],\\ v_k^2=\dfrac{1}{2}\left[\dfrac{\varepsilon_k+nV}{E_k}-1\right],\\ u_kv_k=\dfrac{1}{2}\dfrac{nV}{E_k}。\end{cases}\tag{4.1.34}$$

将上述结果代入式(4.1.25)～(4.1.28)，便可得到完全对角化的哈密顿算符：

$$\begin{aligned}H&=E_0+H_1\\&=\frac{1}{2}[\Omega Vn^2-\sum_k{}'(\varepsilon_k+nV-E_k)]\\&\quad+\frac{1}{2}\sum_k{}'E_k(\alpha_k^+\alpha_k+\alpha_{-k}^+\alpha_{-k})。\end{aligned}\tag{4.1.35}$$

这样我们找到了一个无相互作用的准粒子系统，可用它来近似描写有微弱两体相互作用的真实的全同玻色子系统。式(4.1.35)哈密顿算符的基态 $|0\rangle$ 是准粒子真空态，可定义为 $\alpha_k|0\rangle=0$。系统的激发态对应于各种数目($\ll N$)的无相互作用准粒子态，激发一个准粒子的能量为 E_k。计算液氦超流相的热力学性质问题现在转化为计算这个准粒子理想气体的热力学性质的问题。而已知准粒子激发谱，就能求出这个系统的配分函数，从而计算出其他热力学

量。

4.1.3 临界速度

我们来考察存在微弱相互作用的全同玻色子系统在低温下激发态粒子的色散关系，即能量和动量之间的关系。由式(4.1.33)可知

$$E_k=\sqrt{\varepsilon_k^2+2nV\varepsilon_k}=\begin{cases}\left(\dfrac{nV}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\hbar k & (k\to 0)\\ nV+\varepsilon_k & (k\to\infty)\end{cases} \tag{4.1.36}$$

因此当 $k\to 0$ 时，准粒子的能量和动量的值成正比。这与无相互作用时的情况($E_k\sim k^2$)不同。准粒子的群速(亦称"声速")为

$$v_g=\left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_k}{\partial k}\right)_{k=0}=\left(\frac{nV}{m}\right)^{1/2}。 \tag{4.1.37}$$

上述结果表明，只有当 $V>0$，即两体相互作用为排斥势时群速 v_g 才是实数，从而存在稳定的激发态。另一方面，当 k 很大时，E_k 与动量平方成正比；且由于 $V|_{k\to\infty}=0$，所以这时准粒子的能量就等于原来实际玻色子的动能 ε_k。存在微弱两体排斥势的全同玻色子系统的色散关系可用图 4.1.1 的实线表示。

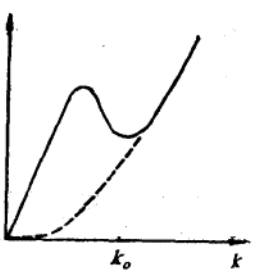

图 4.1.1

我们现在来说明上述全同玻色子非理想气体确实可以具有超流动性。设液氦系统相对于某固定参考系，例如容器的壁以速度 $\boldsymbol{v}$ 运动。如果存在粘滞性，则液氦的流动由于与管壁摩擦其速度会变慢，这时的速度设为 $\boldsymbol{v}'$。这一过程也相当于出现一个能量为 E_k，动量为 $\hbar\boldsymbol{k}=\boldsymbol{p}$ 的准粒子。设液氦的质量为 M，则动量守恒要求下式成立：

$$M\boldsymbol{v}=M\boldsymbol{v}'+\boldsymbol{p}。 \tag{4.1.38}$$

由上式可得

$$\frac{1}{2}M\boldsymbol{v}'^2=\frac{1}{2}M\boldsymbol{v}^2-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v}+\frac{p^2}{2M}。\tag{4.1.39}$$

另一方面，产生激发的能量条件是

$$\frac{1}{2}M\boldsymbol{v}^2\geqslant\frac{1}{2}M\boldsymbol{v}'^2+E_k。\tag{4.1.40}$$

由式(4.1.39)和(4.1.40)可得

$$E_k\leqslant\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v}-\frac{p^2}{2M}\simeq\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v},$$

当$\boldsymbol{v}\parallel\boldsymbol{p}$时上式最容易得到满足。所以使式(4.1.40)满足的最宽条件是

$$v\geqslant E_k/\hbar k。\tag{4.1.41}$$

令

$$v_c=\mathrm{Min}\frac{E_k}{\hbar k},\tag{4.1.42}$$

并称它为临界速度。所以当$v_c>0$，且$v<v_c$时，条件(4.1.40)将不满足，流体的速度不会变慢。这就是超流现象。由式(4.1.36)可知，若$V>0$，$v_c=\mathrm{Min}\frac{E_k}{\hbar k}=\left(\frac{nV}{m}\right)^{\frac{1}{2}}>0$，所以可以存在超流，且形成超流的条件可表示为

$$\begin{cases}V>0,\\ v<v_c。\end{cases}\tag{4.1.43}$$

作为比较，两体相互作用为吸引势的全同玻色子系统显然不可能出现超流现象。另一个不会出现超流现象的例子是理想气体。理想气体的色散关系是$E_k=\varepsilon_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$，所以$v_c=\mathrm{Min}\frac{E_k}{\hbar k}=0$，这时条件$v<v_c=0$不可能成立，因此不可能形成稳定的激发态，而又使流速不变。超流理论关于临界速度的结论可以通过实验验证。

§4.2 电子和晶格振动的相互作用

本节介绍电子与晶格振动的相互作用。根据二次量子化理

论，这也就是量子化电子场与量子化晶格振动场(即声子场)之间的相互作用。这些内容是固体量子理论的基础。

4.2.1 周期晶格中电子的有效质量(能带质量)

从上一章的讨论中我们知道，二次量子化理论是以单粒子量子力学为基础的。需要首先求出量子力学中单粒子力学量的本征函数完全集，以便对场算符作展开，从而引进粒子的产生算符和消灭算符，并由此构造出其他的二次量子化理论中的力学量算符。因此为了建立电子和振动晶格相互作用系统的二次量子化理论，先要讨论周期势场中单个电子量子力学状态的描述。

首先忽略晶格振动，考察固定晶格中电子的状态。现在的薛定谔方程是

$$H\varphi\equiv\left[-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\right]\varphi(\boldsymbol{x})=E\varphi(\boldsymbol{x}),\qquad(4.2.1)$$

其中 V 为周期势，满足如下周期性条件：

$$V(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{l})=V(\boldsymbol{x})。\qquad(4.2.2)$$

式中 $\boldsymbol{l}$ 为晶格矢量。于是我们可以引进一个晶格平移变换算符 $\tau(\boldsymbol{l})$，它定义为

$$\tau\ \boldsymbol{l})\varphi(\boldsymbol{x})\equiv\varphi(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{l})。\qquad(4.2.3)$$

晶格平移变换是一种分立对称性变换。由于势场的周期性条件(4.2.2)，显然有

$$\tau(\boldsymbol{l})H(\boldsymbol{x})\tau(\boldsymbol{l})^{-1}=H(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{l})=H(\boldsymbol{x}),\qquad(4.2.4)$$

所以有

$$[\tau(\boldsymbol{l}),\ H(\boldsymbol{x})]=0。\qquad(4.2.5)$$

这表明，存在晶格平移变换算符和 H 的共同本征态。设 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 也是 τ 的本征态，本征值为 λ：

$$\tau(\boldsymbol{l})\varphi(\boldsymbol{x})=\lambda\varphi(\boldsymbol{x})。\qquad(4.2.6)$$

我们现在来考察 λ。对于宏观样品，可认为有无限晶格。由于式(4.2.6)，有 $\tau\varphi(\boldsymbol{x})=\lambda^n\varphi(\boldsymbol{x})$；而根据定义(4.2.3)，又有

$$\tau^n\varphi(\boldsymbol{x})=\varphi(\boldsymbol{x}+n\boldsymbol{l})。$$

所以为了使 $\varphi(\boldsymbol{x}+n\boldsymbol{l})$有限，$|\lambda|$必须不大于1。另一方面，由式(4.2.6)，也有 $\tau^n(-\boldsymbol{l})\varphi(\boldsymbol{x}+n\boldsymbol{l})=\lambda^n\varphi(\boldsymbol{x}+n\boldsymbol{l})$；而根据定义，又有 $\tau^n(-\boldsymbol{l})\varphi(\boldsymbol{x}+n\boldsymbol{l})=\varphi(\boldsymbol{x})$。所以为了使 $\varphi(\boldsymbol{x}+n\boldsymbol{l})$有限，$|\lambda|$ 必须不小于1。这样便可得 $|\lambda|=1$，或记为

$$\lambda=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{l}}, \tag{4.2.7}$$

其中 $\boldsymbol{k}$ 是一个具有连续值的参量。再由式(4.2.6)可知，$\varphi(\boldsymbol{x})$具有如下特性：

$$\varphi(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{l})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{l}}\varphi(\boldsymbol{x})。$$

我们因此可把 φ 表示为

$$\varphi(\boldsymbol{x})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}), \tag{4.2.8}$$

其中函数 $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$应满足周期性条件：

$$u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{l})=u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})。 \tag{4.2.9}$$

上述结果表明，无限晶格中能量确定的电子状态可用由晶格周期函数调制的平面波表示(Boloch 定理)。

将式(4.2.8)代入薛定谔方程(4.2.1)，可得

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}(\boldsymbol{k}^2-2i\boldsymbol{k}\cdot\nabla-\nabla^2)+V(\boldsymbol{x})\right]u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})=E_{\boldsymbol{k},j}u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}), \tag{4.2.10}$$

由此可解出 $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$。由于现在出现了连续变量 $\boldsymbol{k}$，所以上式中的能量本征值除了依赖于某些分立变量 j 外还与该连续变量有关，故记为 $E_{\boldsymbol{k},j}$。这一结果表明，晶格中电子的能谱既具有分立性，又具有连续性，所以说具有“能带”结构。我们这里并不打算进一步具体讨论各种周期性势场中电子的能带结构。我们仅仅需要指出，在导带边缘的电子动量很小，因此可取如下近似：

$$E_{\boldsymbol{k},j}=E_{0j}+\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m^*}。 \tag{4.2.11}$$

这里我们已假定固体样品各向同性，因此除常数项外展开式中下一级非零项应该与 $\boldsymbol{k}^2$ 有关。此外我们已在上述展开式中将 $\boldsymbol{k}^2$的系数表示为自由电子动能的形式，其中参数 m^* 具有质量量纲，常称为“有效质量”或“能带质量”。于是我们可得到如下结论：固定

周期晶格势场中处于导带边缘的电子的行为与具有质量为 m^* 的自由电子相似。或者说，周期势场对电子的影响可简单地归结为引起了电子质量的改变。这一结果将使我们的进一步讨论大为简化。应当注意，有效质量完全不同于电子的质量，它实际上是周期势场对电子作用的一种描述。

4.2.2 电子与振动晶格的相互作用

以极化晶体为例。原子中的束缚电荷在其平衡位置的振荡形成极化场。描写极化场的物理量是极化强度 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}, t)$，它定义为单位体积中振荡的束缚电荷所引起的总电偶极矩，即 $ne^*\boldsymbol{q}$，这里 n 为原子数密度，e^* 为每个原子中的等效振荡电荷，$\boldsymbol{q}$ 为位移矢量。于是我们可类比谐振子动能和势能表式，将极化强度场的动能和势能表示为

$$T=\int \frac{1}{2}\gamma \dot{\boldsymbol{P}}^2 d\boldsymbol{x}, \quad U=\int \frac{1}{2}\gamma\omega^2\boldsymbol{P}^2 d\boldsymbol{x}, \quad (4.2.12)$$

其中 γ 为具有量纲的唯象参数，后面我们将会介绍怎样从实验可测量来确定它的值。

晶格中电子的哈密顿量利用有效质量方法可表示为

$$H_0^{(e)}=\int \psi^*(\boldsymbol{x}, t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\right]\psi(\boldsymbol{x}, t)d\boldsymbol{x}, \quad (4.2.13)$$

其中 m^* 为有效质量。由于采用了有效质量，上式被积函数中方括号内不再出现势。电子运动在空间形成的电荷密度为 $\rho(\boldsymbol{x}, t)=e\psi^*\psi$；由于晶格振动而形成的束缚电荷密度为 $\rho_s=-\nabla\cdot\boldsymbol{P}$，所以电子场和晶格振动场之间的相互作用能可表示为

$$H_{\mathrm{I}}=\iint \psi^*(\boldsymbol{x}, t)\psi(\boldsymbol{x}, t)\frac{e}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}[-\nabla'\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}', t)]d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'。$$

(4.2.14)

系统的广义坐标现在取为 $\boldsymbol{P}$ 和 ψ 及 ψ^*。为了建立二次量子化理论，需要导出相应的正则动量。不难看出，与 ψ 相应的正则动量为 $i\hbar\psi^*$；与 ψ^* 相应的正则动量为零。为了得到与 $\boldsymbol{P}$ 相应的正则动量，我们来考察与 $\boldsymbol{P}$ 有关的拉氏量，它们是

$$L=T-U-H_i\equiv\int\mathscr{L}\,d\boldsymbol{x},\qquad(4.2.15)$$

其中

$$\mathscr{L}=\frac{1}{2}\gamma\dot{\boldsymbol{P}}^2-\frac{1}{2}\gamma\omega^2\boldsymbol{P}^2+\nabla\cdot\boldsymbol{P}\int\frac{\rho(\boldsymbol{x}',\,t)}{|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}|}\,d\boldsymbol{x}',\qquad(4.2.16)$$

而 $\rho=e\psi^*\psi$。所以与 $\boldsymbol{P}$ 相应的正则动量应是

$$\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{x},\,t)=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\boldsymbol{P}}}=\gamma\dot{\boldsymbol{P}}。\qquad(4.2.17)$$

自由晶格振动场的哈密顿量于是可表示为

$$H_0^{(p)}=\int\left[\frac{1}{2\gamma}\boldsymbol{\pi}^2(\boldsymbol{x},\,t)+\frac{1}{2}\gamma\omega^2\boldsymbol{P}^2(\boldsymbol{x},\,t)\right]d\boldsymbol{x}。\qquad(4.2.18)$$

在进一步建立场的量子化理论之前，我们先来讨论唯象参数 γ 的一种确定方法。将式(4.2.16)代入拉氏方程

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial P_j}-\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{P}_j}-\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\left(\dfrac{\partial P_j}{\partial x_i}\right)}=0,\qquad(4.2.19)$$

我们便可得到极化强度矢量场的动力学方程：

$$\gamma[\ddot{\boldsymbol{P}}(\boldsymbol{x},\,t)+\omega^2\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x},\,t)]=\int\frac{(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})}{|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}|^3}\rho(\boldsymbol{x}',\,t)d\boldsymbol{x}'。\qquad(4.2.20)$$

按照电动力学的知识，上式等号右侧为电荷 ρ 所激发的场，对于离子晶格介质来说，这也就是介质中的电位移 $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{x},\,t)$。在静态情况下，上式化为

$$\gamma\omega^2\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{D}(\boldsymbol{x})。\qquad(4.2.21)$$

另一方面，由电动力学可知，在高斯单位制中电场的电位移 $\boldsymbol{D}$、电场强度 $\boldsymbol{E}$ 以及极化强度 $\boldsymbol{P}_{tot}$ 三者之间存在如下关系：

$$\boldsymbol{D}=\boldsymbol{E}+4\pi\boldsymbol{P}_{tot}=\varepsilon\boldsymbol{E},\qquad(4.2.22)$$

或

$$4\pi \boldsymbol{P}_{tot}=\left(1-\frac{1}{\varepsilon}\right)\boldsymbol{D}, \tag{4.2.23}$$

其中 ε 为介质的介电常数；$\boldsymbol{P}_{tot}$ 是静态介质极化强度，它包括晶格离子中的电子由于振荡而引起的极化强度 $\boldsymbol{P}_e$ 以及由于离子离开平衡位置振荡而引起的极化强度 $\boldsymbol{P}_o$。如果外加静电场，这两种极化效应都重要，所以式(4.2.23)中的 ε 应理解为静态介电常数。当外加电场的频率很高(如光频)时，仅仅 $\boldsymbol{P}_e$ 是重要的，此时有

$$4\pi \boldsymbol{P}_e=\left(1-\frac{1}{\varepsilon_\infty}\right)\boldsymbol{D}, \tag{4.2.24}$$

其中 ε_∞ 为高频介电常数。由式(4.2.23)和(4.2.24)可得

$$4\pi \boldsymbol{P}=4\pi(\boldsymbol{P}_{tot}-\boldsymbol{P}_e)=\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon}\right)\boldsymbol{D}。$$

将上式与式(4.2.21)比较，便可得

$$\gamma=\frac{4\pi}{\omega^2}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon}\right)^{-1}。 \tag{4.2.25}$$

此结果表明，可通过介质的 ε 和 ε_∞ 的实验值来确定唯象参数 γ。

现在我们可以建立电子和振动晶格相互作用系统的二次量子化理论了。二次量子化手续意味着，描写系统的广义坐标和正则动量转化为算符，并满足一定的对易或反对易关系。系统的哈密顿算符现在是

$$H=H_0^{(P)}+H_0^{(e)}+H_i \tag{4.2.26}$$

其中自由场部分为

$$H_0^{(P)}=\int\left[\frac{1}{2\gamma}\boldsymbol{\pi}^2(\boldsymbol{x})+\frac{1}{2}\gamma\omega^2\boldsymbol{P}^2(\boldsymbol{x})\right]d\boldsymbol{x}, \tag{4.2.27}$$

$$H_0^{(e)}=\int\psi^+(\boldsymbol{x})\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\right)\psi(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}, \tag{4.2.28}$$

相互作用哈密顿算符部分为

$$H_i=\iint\psi^+(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})\frac{e}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}[-\nabla'\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}')]d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'。 \tag{4.2.29}$$

在上述式子中，为表示简单起见，我们省略了各场算符的时间参

量。

为了转化到粒子数表象，将场算符作如下展开：

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{q}\sqrt{\frac{\hbar}{2\gamma\omega_q}}\,\frac{\boldsymbol{q}}{q}\,e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}(b_{\boldsymbol{q}}-b^{+}_{-\boldsymbol{q}}), \tag{4.2.30}$$

$$\psi(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{k}a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{4.2.31}$$

在式(4.2.30)中极化矢量方向取为 $\boldsymbol{q}$ 的方向，这表明 $\boldsymbol{P}$ 波是一种纵波。将式(4.2.30)和(4.2.31)代入式(4.2.26)～(4.2.29)，可得

$$H=H_0+H_i, \tag{4.2.32}$$

其中

$$H_0=\sum_{k}\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m^*}\,a^{+}_{k}a_{k}+\sum_{q}\hbar\omega_q b^{+}_{q}b_{q}, \tag{4.2.33}$$

$$H_i=\hbar\sum_{kq}(g_q a^{+}_{k+q}a_k b_q+g^{*}_{q}a^{+}_{k}a_{k+q}b^{+}_{q}), \tag{4.2.34}$$

其中电子-声子耦合强度为

$$\hbar g_q=-4\pi i\left(\frac{e^2\hbar}{2\gamma\omega_q\Omega}\right)^{1/2}\frac{1}{q}。 \tag{4.2.35}$$

[例1] 试导出式(4.2.34)。

解：将场算符展开式(4.2.30)和(4.2.31)代入式(4.2.29)，可得

$$H_i=\frac{1}{(\Omega)^{3/2}}\sum_{kk'q}(-ieq)\sqrt{\frac{\hbar}{2\gamma\omega_q}}\,a^{+}_{k}a_{k'}(b_q-b^{+}_{-q})$$
$$\cdot\iint\frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}e^{-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}+i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}'}\,d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'。$$

利用如下公式：

$$\int\frac{\exp[i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')]}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\,d\boldsymbol{x}'=\frac{4\pi}{q^2},$$

$$\frac{1}{\Omega}\int e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{x}}\,d\boldsymbol{x}=\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}},$$

上式中的积分可化为

$$\frac{1}{\Omega^{3/2}}\iint d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'\cdots$$
$$=\frac{1}{\Omega^{3/2}}\int d\boldsymbol{x}e^{-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{x}}\cdot\int d\boldsymbol{x}'\,\frac{\exp[-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')]}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$$
$$=\frac{1}{\Omega^{1/2}}\,\frac{4\pi}{q^2}\,\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}},$$

于是有

$$H_i=\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\boldsymbol{q}}\left[-4\pi i\left(\frac{e^2\hbar}{2\gamma\omega_q\Omega}\right)^{1/2}\frac{1}{q}\right]a_{\boldsymbol{k}}^{+}a_{\boldsymbol{k}'}(b_{\boldsymbol{q}}-b_{-\boldsymbol{q}}^{+})\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}}\,.$$

这就是式(4.2.34)。

4.2.3 声子的自发辐射，受激辐射和吸收

现在我们用微扰法来讨论电子-声子相互作用系统将发生的过程。式(4.2.32)中 H_i 作为微扰，H_0 的本征值问题已经解决。例如 $t=0$ 时刻存在一个动量为 $\boldsymbol{k}_0$ 电子的状态可用 $\Phi(0)=a_{\boldsymbol{k}_0}^{+}|0\rangle$ 表示，其中 $|0\rangle$ 为电子和声子真空态；该状态的能量为 $\hbar^2k_0^2/2m^*$。再如，一个动量为 $\boldsymbol{k}_0$ 的电子和 n 个动量为 $\boldsymbol{q}_0$ 的声子状态由 $\Phi(0)=a_{\boldsymbol{k}_0}^{+}\frac{1}{\sqrt{n!}}(b_{\boldsymbol{q}_0}^{+})^n|0\rangle$ 表示，其能量为 $\frac{\hbar^2k_0^2}{2m^*}+n\hbar\omega_{q_0}$。而且，由于粒子产生算符随时间的演化简单地由指数时间振荡因子表示，所以上述状态随时间的演化也完全确定。

现在考虑存在相互作用时的情况。如果采用相互作用绘景，则关键是要了解描述状态的态矢量随时间的演化，即需要求解如下方程：

$$i\hbar\frac{\partial\Phi(t)}{\partial t}=H_i^{(I)}\Phi(t),\qquad(4.2.36)$$

其中 $H_i^{(I)}$ 是由式(4.2.34)给出的相互作用哈密顿算符在相互作用绘景中的形式。这个问题我们曾经在3.6.5中讨论过，结果为

$$H_i^{(I)}(t)=\hbar\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{q}}[g_{\boldsymbol{q}}a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^{+}a_{\boldsymbol{k}}b_{\boldsymbol{q}}\exp[i(\varepsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\omega_{\boldsymbol{q}})t]$$
$$+g_{\boldsymbol{q}}^{*}a_{\boldsymbol{k}}^{+}a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}b_{\boldsymbol{q}}^{+}\exp[-i(\varepsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\omega_{\boldsymbol{q}})t]。\qquad(4.2.37)$$

其中 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}\equiv\frac{\hbar\boldsymbol{k}^2}{2m^*}$。式(4.2.36)可用迭代法求解，结果为

$$\Phi(t)=\Phi(0)+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1 H_i^{(I)}(t_1)\Phi(0)$$
$$+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t dt_2\int_0^{t_2} dt_1 H_i^{(I)}(t_2)H_i^{(I)}(t_1)\Phi(0)+\cdots。$$
(4.2.38)

作为例子，我们先来考察式(4.2.38)中一级玻恩近似下所反映的一些物理现象。

A．声子的自发辐射

设初态是一个电子的态，其动量为 k_0，态矢量可表示为 $\Phi(0)=a_{k_0}^+|0\rangle$。由于初态中不存在声子，所以有 $b_q\Phi(0)=0$。因此对于这种初态来说，相互作用哈密顿算符(4.2.37)中的第一部分($\sim b$)没有贡献，只要考察其中第二部分($\sim b^+$)的贡献。这时末态可记为

$$\Phi(t)=a_{k_0}^+|0\rangle-\sum_{kq}ig_q^*\Big[\int_0^t dt_1\exp[-i(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k-\omega_q)t_1]$$
$$\cdot a_k^+a_{k+q}b_q^+a_{k_0}^+|0\rangle。 \qquad (4.2.39)$$

现在将上式中的算符乘积部份“正规化”，即将这种乘积中的所有算符利用对易或反对易关系重新排成“正规”的形式：所有产生算符安排在乘积左侧，消灭算符则安排在右侧。由于上式中的算符乘积作用于真空态，所以算符乘积正规化手续的优点立即可从下面的推导中体现出来：

$$a_k^+a_{k+q}b_{q'}^+a_{k_0}^+|0\rangle=a_k^+b_{q'}^+a_{k+q}a_{k_0}^+|0\rangle$$
$$=a_k^+b_{q'}^+(\delta_{k+q,k_0}-a_{k_0}^+a_{k+q})|0\rangle$$
$$=\delta_{k+q,k_0}a_k^+b_{q'}^+|0\rangle。$$

所以有

$$\Phi(t)=a_{k_0}^+|0\rangle+\sum_{kq}C_{kq}^{(g)}(t)a_k^+b_q^+|0\rangle, \qquad (4.2.40)$$

其中展开系数

$$C_{kq}^{(g)}(t)=-ig_q^*\delta_{k+q,k_0}\int_0^t dt_1\exp[-i(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k-\omega_q)t_1]$$
$$=g_q^*\delta_{k+q,k_0}\frac{1-\exp(it\Delta)}{\Delta}, \qquad (4.2.41)$$

而

$$\Delta=\varepsilon_{k_0-q}-\varepsilon_{k_0}+\omega_q。\tag{4.2.42}$$

上述结果表明，由于电子-声子相互作用，单个 k_0 电子的初态会"自发地"演化为包含一个电子和一个声子的末态，这就是"声子自发辐射"。末态电子的动量 k 和声子动量 q 可取各种可能值，但应满足动量守恒条件 $k+q=k_0$。动量守恒条件体现为式中出现的 δ 符号。

声子自发辐射过程可用如图 4.2.1 所示的"费曼图"表示，时间轴自右向左取向。这费曼图由"入射电子线" k_0，"出射电子线" k，以及"出射声子线" q 组成，相互作用将发生在这些线的交点处，这种交点称为"顶点"。于是，电子自发辐射声子的物理过程可用代数形式(4.2.40)表示，也可用几何图形表示。这两种表示之间会有一定的对应关系，这种对应关系常称为"费曼规则"。读者可尝试从本节的几个例子中总结出电子-声子相互作用理论中的费曼规则。

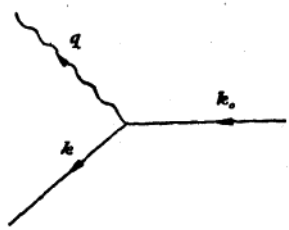

图 4.2.1 声子自发辐射

现在来讨论式(4.2.40)中第二项展开式中的系数 $C_{kq}^{(s)}(t)$。显然它就是系统由单个 k_0 电子态跃迁到一个 k 电子和一个 q 声子状态的跃迁幅，因此自发辐射的跃迁速率为

$$\Gamma^{(s)}=\frac{d}{dt}\left|C_{kq}^{(s)}(t)\right|^2=|g_q|^2\delta_{k+q,k_0}\frac{2\sin(t\Delta)}{\Delta}。\tag{4.2.43}$$

当 $t\to\infty$ 时，$\dfrac{1}{\pi}\dfrac{\sin(t\Delta)}{\Delta}=\delta(\Delta)$。因此自发辐射总跃迁速率为

$$\Gamma_{tot}^{(s)}=\sum_{kq}\Gamma^{(s)}=\sum_{q}|g_q|^2 2\pi\delta(\varepsilon_{k_0-q}-\varepsilon_{k_0}+\omega_q)。\tag{4.2.44}$$

利用求和变积分的代换：

$$\sum_{\boldsymbol{q}}\cdots=\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{q}\cdots, \tag{4.2.45}$$

可将式(4.2.44)记为

$$\Gamma_{i\to f}^{(n)}=\frac{\Omega}{(2\pi)^2}\int d\boldsymbol{q}|g_{\boldsymbol{q}}|^2\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{q}}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}_0}-\omega_{\boldsymbol{q}})。 \tag{4.2.46}$$

为了计算上述积分，需要知道电子和声子的色散关系和耦合常数 $g_{\boldsymbol{q}}$ 与 $\boldsymbol{q}$ 的依赖关系[见式(4.2.35)]。

B. 声子的受激辐射

设初态为 $\Phi(0)=a_{\boldsymbol{k}_0}^{+}\frac{1}{\sqrt{n!}}(b_{\boldsymbol{q}_0}^{+})^n|0\rangle$，现在来考察一级玻恩近似下由于相互作用哈密顿算符所引起的跃迁过程。分两种情况讨论。首先考察 $H_{\mathrm{I}}^{(I)}$ 和式(4.2.37)中 $\boldsymbol{q}\neq\boldsymbol{q}_0$ 的项所引起的效应。此时，末态为

$$\Phi(t)=\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}(\neq\boldsymbol{q}_0)}C_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}(t)a_{\boldsymbol{k}}^{+}b_{\boldsymbol{q}}^{+}\frac{1}{\sqrt{n!}}(b_{\boldsymbol{q}_0}^{+})^n|0\rangle。 \tag{4.2.47}$$

上式表明，相应的过程是：初态是一个 $\boldsymbol{k}_0$ 电子和 n 个 $\boldsymbol{q}_0$ 声子的态；末态是一个 $\boldsymbol{k}$ 电子、一个 $\boldsymbol{q}$ 声子以及 n 个 $\boldsymbol{q}_0$ 声子的态。这种跃迁过程可用图 4.2.2 的费曼图表示。该图可分为两个独立部份，一部份就是电子自发辐射声子的过程；第二部份是平凡过程。所以式(4.2.47)并不包含任何新的内容。

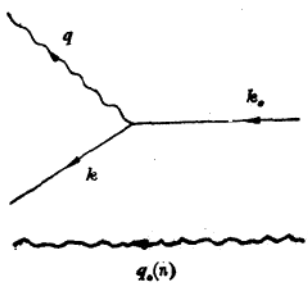

图 4.2.2

现在我们来考察相互作用哈密顿算符(4.2.37)中 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{q}_0$ 的项所引起的效应。式(4.2.37)中第一组和式中 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{q}_0$ 的项将使原来的态中减少一个 $\boldsymbol{q}_0$ 声子，这就是“声子吸收”过程；第二组和式中 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{q}_0$ 的项将使原来的态中增加

一个 q_0 声子，这就是"声子受激辐射"过程。先来讨论声子受激辐射。这时有

$$\Phi^{(e)}(t)=-i\sum_k g^*_{q_0}\left[\int_0^t dt_1\exp\left[i(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q_0}-\omega_{q_0})t_1\right]\right]$$

$$\cdot a^+_k a_{k+q_0} b^+_{q_0} a^+_{k_0}\frac{1}{\sqrt{n!}}(b^+_{q_0})^n|0\rangle。$$

将上式中的算符乘积正规化后可得

$$\Phi^{(e)}(t)=\sum_k C^{(e)}_{kq_0}(t)a^+_k\frac{1}{\sqrt{(n+1)!}}(b^+_{q_0})^{n+1}|0\rangle,\quad(4.2.48)$$

其中系数为

$$C^{(e)}_{kq_0}(t)=-ig^*_{q_0}\sqrt{n+1}\,\delta_{k_0,k+q_0}$$

$$\cdot\int_0^t dt_1\exp[i(\varepsilon_k+(n+1)\omega_{q_0}-\varepsilon_{k_0}-n\omega_q)t_1]。$$

(4.2.49)

在写出上式中被积函数的指数因子时，有意表明此过程初末态能量守恒的要求。式(4.2.48)描写了电子受激辐射声子的过程，这一过程可用图 4.2.3 的费曼图表示。

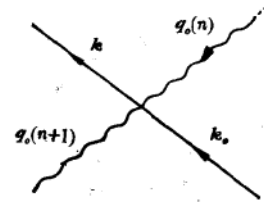

图 4.2.3 声子的受激辐射

电子受激辐射声子过程的跃迁速率为

$$\Gamma^{(e)}=|g_{q_0}|^2\delta_{k_0,k+q_0}$$

$$\cdot(n+1)2\pi\delta(\varepsilon_k-\varepsilon_{k_0}+\omega_{q_0})。$$

(4.2.50)

C. 声子(感应)吸收

现在来考察相互作用哈密顿算符(4.2.37)中第一组和式中 $q=q_0$ 项所引起的物理过程。设初态有一个 k_0 电子与 n 个 q_0 声子。类似推导可得

$$\Phi^{(a)}(t)=\sum_k C^{(a)}_{kq_0}(t)a^+_k\frac{1}{\sqrt{(n-1)!}}(b^+_{q_0})^{n-1}|0\rangle,$$

(4.2.51)

其中跃迁幅为

$$U^{(a)}_{kq_0}(t)=-ig_{q_0}\sqrt{n}\,\delta_{k_0,k-q_0}$$
$$\cdot\int_0^t dt_1\exp[i(\varepsilon_k+(n-1)\omega_{q_0}-\varepsilon_{k_0}-n\omega_{q_0})t_1]。\tag{4.2.52}$$

式(4.2.51)中，末态比初末少了一个 $\boldsymbol{q}_0$ 声子，而末态电子的动量变为 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0+\boldsymbol{q}_0$。所以该式描写了声子吸收过程。声子吸收过程的费曼图由图 4.2.4 给出。声子吸收过程的吸收率为

$$\Gamma^{(a)}=|g_{q_0}|^2\delta_{k_0,k-q_0}2\pi n\delta(\varepsilon_k-\varepsilon_{k_0}-\omega_{q_0})。\tag{4.2.53}$$

一般来说，如果初态为

$$\Phi(0)=a^+_{k_0}\frac{1}{\sqrt{n!}}(b^+_{q_0})^n|0\rangle,$$

则在一级玻恩近似下通过声子自发辐射、受激辐射以及声子吸收过程后其末态应为如下叠加态：

$$\Phi(t)=\Phi^{(s)}(t)+\Phi^{(e)}(t)+\Phi^{(a)}(t)+\Phi(0)。\tag{4.2.54}$$

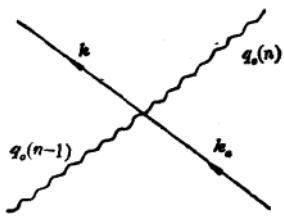

图 4.2.4　声子吸收过程

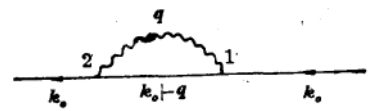

图 4.2.5　电子自能

4.2.4　电子自能和质量重正化

现在我们来讨论二级玻恩近似下电子-声子相互作用所引起的某些效应。作为例子，我们来讨论图 4.2.5 的费曼图所揭示的某些新的见解。该图表示，初态是一个 $\boldsymbol{k}_0$ 电子；末态仍然是这个 $\boldsymbol{k}_0$ 电子，但是该电子运动过程中，在顶角 1 处自发辐射出一个声子；而在顶角 2 处又吸收了这一声子，从而电子的动量恢复为 $\boldsymbol{k}_0$。从总体来看，该电子既没有发射声子，也没有吸收声子，所以图 4.2.5 这样的过程常称为“虚过程”。我们现在来讨论自由电子的这种虚过程是否会引起某些可观察效应。这显然是一个二级效

应，所以我们应考虑 $\Phi(t)$的展开式(4.2.38)中的第一项和第三项：

$$\Phi(t)=\Phi(0)+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t dt_2\int_0^{t_2}dt_1\,H_i^{(I)}(t_2)H_i^{(I)}(t_1)\Phi(0)。$$

(4.2.55)

先计算上式二重积分项中对 t_1 的积分，这个积分描写了电子在顶角1处自发辐射 q 声子的过程。我们有

$$\int_0^{t_2}dt_1H_i^{(I)}(t_1)\Phi(0)=\sum_q\hbar g_q^*\int_0^{t_2}dt_1$$
$$\exp[i(\varepsilon_{k_0-q}-\varepsilon_{k_0}+\omega_q)t_1]\cdot a^+_{k_0-q}b^+_q|0\rangle。$$

(4.2.56)

现在将上述结果代入式(4.2.55)，再考察对 t_2 的积分。由于我们现在所讨论的具体问题中，只须考虑发生在 t_2 时刻，顶角2处吸收较早时刻发生在顶角1处所发射的声子的过程，所以式(4.2.55)中的 $H_i^{(I)}(t_2)$ 只须考虑其中与声子消灭算符有关的项；并利用算符的对易或反对易关系，且消去 δ-符号，可得

$$\Phi(t)=C_{k_0}(t)a^+_{k_0}|0\rangle。\qquad(4.2.57)$$

其中 $C_{k_0}(t)$为

$$C_{k_0}(t)=-\sum_q|g_q|^2\int_0^t dt_2\exp[i(\varepsilon_{k_0}-\varepsilon_{k_0-q}-\omega_q)t_2]$$
$$\cdot\int_0^{t_2}dt_1\exp[i(\varepsilon_{k_0-q}-\varepsilon_{k_0}+\omega_q)t_1]$$
$$=\sum_q|g_q|^2\int_0^t dt_2\,\frac{1-\exp[it_2(\varepsilon_{k_0}-\varepsilon_{k_0-q}-\omega_q)]}{i(\varepsilon_{k_0}-\varepsilon_{k_0-q}-\omega_q)}。$$

(4.2.58)

上式被积函数中第一项积分后与 t 成正比；第二项是指数振荡项。当 $t\to\infty$ 时，第二项的贡献可以忽略，所以上式可化为

$$C_{k_0}(t)=-it\Delta(\varepsilon_{k_0}),\qquad(4.2.59)$$

其中

$$\hbar\Delta(\varepsilon_{k_0})=\hbar\sum_q\frac{|g_q|^2}{\varepsilon_{k_0}-\varepsilon_{k_0-q}-\omega_q}$$

$$=\sum_{k}\frac{|\hbar g_q|^2}{-\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}+\frac{\hbar^2}{m^*}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{q}-\hbar\omega_q}。 \tag{4.2.60}$$

在上式推导中已应用了如下关系：

$$\hbar\varepsilon_{k_0}=\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}_0^2}{2m^*},\qquad \hbar\varepsilon_{k_0-q}=\frac{\hbar^2}{2m^*}(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{q})^2。$$

于是在玻恩二级近似下，t 时刻动量为 $\boldsymbol{k}_0$ 的自由电子的波函数应为

$$\Phi(t)=[1-it\Delta(\varepsilon_{k_0})]a_{k_0}^+|0\rangle。 \tag{4.2.61}$$

类似地可考虑电子存在的历史上有二次虚声子、三次虚声子……等的发射和吸收过程。可以证明，考虑了这些过程后，任意 t 时刻自由电子的态矢量应表示为

$$\Phi(t)=\exp[-it\Delta(\varepsilon_{k_0})]a_{k_0}^+|0\rangle。 \tag{4.2.62}$$

上述讨论是在相互作用绘景中进行的。为了揭示出包含在上述结果中的新的见解，最好转化到薛定谔绘景。相互作用绘景中的态矢量 $\Phi(t)$ 到薛定谔绘景的态矢量 $\Phi_s(t)$ 的转化由下式表示：

$$\Phi_s(t)=e^{-iH_0t/\hbar}\Phi(t)=e^{-iH_0t/\hbar}e^{-it\Delta}a_{k_0}^+|0\rangle。 \tag{4.2.63}$$

利用变换算符 $e^{-iH_0t/\hbar}$ 的幺正性，上式可化为

$$\Phi_s(t)=e^{-it\Delta}\cdot e^{-iH_0t/\hbar}a_{k_0}^+e^{iH_0t/\hbar}\cdot e^{-iH_0t/\hbar}|0\rangle。$$

利用费米子算符的变换关系[第三章式(3.6.44)]，我们可得

$$e^{-iH_0t/\hbar}a_{k_0}^+e^{iH_0t/\hbar}=\exp[-i\varepsilon_{k_0}t]a_{k_0}^+, \tag{4.2.64}$$

其中 $\varepsilon_{k_0}=\frac{\hbar k_0^2}{2m^*}$。再考虑到

$$e^{-iH_0t/\hbar}|0\rangle=|0\rangle, \tag{4.2.65}$$

式(4.2.63)可化为

$$\Phi_s(t)=\exp[-i(\varepsilon_{k_0}+\Delta)t]a_{k_0}^+|0\rangle。 \tag{4.2.66}$$

因为我们所讨论的是动量为 $\hbar\boldsymbol{k}_0$ 的自由电子(质量为 m^*)，按照量子力学的结果，该粒子的态矢量与时间的依赖关系为

$$\Phi_s(t)=e^{-iEt/\hbar}\Phi(0), \tag{4.2.67}$$

其中 E 为自由电子能量。比较式(4.2.66)和(4.2.67)，我们立即可以得到如下结论：如果考虑了晶格中确实发生的电子的虚声子

发射吸收过程，则自由电子的能量不再是 $\hbar\varepsilon_{k_0}=\hbar^2\boldsymbol{k}_0^2/2m^*$，而是

$$E=\hbar(\varepsilon_{k_0}+\Delta(\varepsilon_{k_0}))。\tag{4.2.68}$$

这意味着，相对于 $\hbar\varepsilon_{k_0}$ 来说电子的能量发生了“位移”，位移值 $\hbar\Delta$ 由式(4.2.60)确定。尤其是，当 $\boldsymbol{k}_0=0$ 时，电子的能量不再为零，这时的能量 $E_0\equiv E|_{k_0=0}=\hbar\Delta|_{k_0=0}$ 称为“电子自能”。

现在我们再来考察自由电子的色散关系。当不考虑虚声子的过程时，晶格中电子的能量和动量之间的关系为

$$E_0=\frac{\hbar^2k_0^2}{2m^*},\tag{4.2.69}$$

其中 m^* 为有效质量。当考虑了虚过程，且 $\boldsymbol{k}_0$ 不很大时，电子的色散关系，即能量和动量关系(4.2.68)也可展开为 $\boldsymbol{k}_0$ 的幂级数。考虑到各向同性，有

$$E=E_0+\frac{\hbar^2k_0^2}{2m^{**}}。\tag{4.2.70}$$

由上式引进的具有质量量纲的量 m^{**} 称为“重正化有效质量”。这表明，由于晶格中电子-声子相互作用所引起的虚声子过程，电子的有效质量将会发生微小变化，由 m^* 改变为 m^{**}。

我们来计算极性晶体中电子的自能和重正化有效质量①。将式(4.2.60)代入(4.2.68)，可得极性晶体中动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$，质量为 m^* 的“自由”电子的能量为

$$E_k=\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m^*}-\sum_{\boldsymbol{q}}\frac{|\hbar g_q|^2}{\dfrac{\hbar^2\boldsymbol{q}^2}{2m^*}-\dfrac{\hbar^2}{m^*}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}+\hbar\omega},\tag{4.2.71}$$

其中耦合常数由式(4.2.25)和(4.2.35)给出，为

$$|\hbar g_q|=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\frac{e}{q}\left[2\pi\hbar\omega\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon}\right)\right]^{1/2}。\tag{4.2.72}$$

我们假定 ω 不依赖于 $\boldsymbol{q}$，令式(4.2.71)中的 $\boldsymbol{k}=0$，并将对 $\boldsymbol{q}$ 的求和改为求积分：

---

① 关于电子-声子相互作用的问题可进一步参阅其它专门著作：如 J. Callaway, “Quantum Theory of The Solid State”, Academic Press, New York, 1976 (杨顺华译，科学出版社，1984)。

$$\sum_{q} \to \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{q} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int_0^{\infty} q^2 dq \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi, \tag{4.2.73}$$

便可得到极性晶体中电子的自能：

$$E_0 = -\alpha\hbar\omega, \tag{4.2.74}$$

其中无量纲参数 α 定义为

$$\alpha = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon}\right)\frac{e^2}{\hbar\omega}\left(\frac{2m^*\omega}{\hbar}\right)^{1/2}。 \tag{4.2.75}$$

如果式(4.2.71)中的 $\boldsymbol{k}\neq 0$，但其值很小，即仅考虑缓慢运动电子情况，此时我们有

$$E_{\boldsymbol{k}} = -\alpha\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\left(1-\frac{\alpha}{6}\right) + O(\boldsymbol{k}^4)。 \tag{4.2.76}$$

由此可得，重正化有效质量为

$$m^{**} = \frac{m^*}{\left(1-\frac{\alpha}{6}\right)} \simeq m^*\left(1+\frac{\alpha}{6}\right)。 \tag{4.2.77}$$

注意到 $\alpha>0$，则上述结果表明，考虑了晶格振动的影响后，电子能量会降低；有效质量却增加。在相对论二次量子化理论中这种质量的改变将为无穷大；但在非相对论情况下质量的改变是有限的。

在极化晶体中电子由于不断发射和吸收虚声子，从而在其周围出现"声子云"或"极化云"。由于这个原因，晶格中两个电子之间的纯库仑作用(排斥作力)将会由于极化云的存在而发生偏离。可以证明，这种偏离相当于产生一附加的吸引势。

§4.3 超导的微观理论基础

在一定温度下具有零电阻性和完全抗磁性的材料称为超导体。1911年荷兰物理学家昂尼斯(L. Onnes)首先发现在4.2K附近水银的电阻消失，这种性质性为超导电性。1933年迈斯纳(W. Meissner)发现了超导体的另一个基本性质，即完全抗磁性。磁场

不会透入超导体内。迄今发现元素周期表中的大部份金属元素以及许多合金(如铌三锡 Nb_3Sn; 铌三锗 Nb_3Ge 等)当温度达到不同的某个值 T_c 时,便立即显示出超导性,温度 T_c 称为由正常态转变为超导态的"临界温度"或"转变温度"。

许多无序合金也能变成超导体,所以有序性在这一现象中并不重要。其次,许多金属都会呈现出超导性,这表明能带结构的细节只是次要因素。第三,1950 年发现"同位素效应",即在许多例子中由同样元素的不同同位素构成的金属样品的超导转变温度满足如下规律: $T_cM^{1/2}=$常数(其中 M 为原子质量)。这种同位素效应非常有力地表明,晶格振动在超导现象中是重要的,因为本征振动频率与 $M^{1/2}$ 成反比[参见式(3.1.48)]。超导的微观理论称为 BCS 理论,是由美国物理学家巴丁(J. Bardeen)、库柏(L. Cooper)和施里佛(J. Schrieffer)于 1956～1957 年间首先建立的。本节中我们将简要介绍这个理论的基础①。

4.3.1 电子间的弗罗利希(Fröhlich)相互作用

超导现象中正常态和超导态的能量差值很小,其量级约为 10^{-8}eV/原子。相对说来,一级电子-声子相互作用所涉及的能量大得多,所以引起超导现象的这种作用应当是二级效应。下面的讨论中将会看到,在二级效应中电子-声子相互作用确实会引起一种有效的电子-电子相互作用,而且在一定条件下这种作用是一种吸引作用,从而会使电子互相"吸引"而形成"电子对"或"库柏对"。电子对的形成是出现超导电性的关键。

存在相互作用的电子声子系统的哈密顿算符包括三部份:

$$H=H_0+H_1+U \tag{4.3.1}$$

其中第一部份为自由电子系统和自由声子系统的哈密顿算符:

① 1986 年以前发现的超导体主要是金属、合金或金属间的化合物,它们的转变温度 T_c 都很低,最高的只有 23.2K(Nb_3Ge, 1973)。1986 年,瑞士物理学家米勒(K. A. Miller)发现了高 T_c 金属氧化物超导体(如镧锶铜氧,钇钡铜氧),使超导现象的研究进入一个新时代。高温超导现象的机理目前尚不清楚。

$$H_0=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k a^+_{k\sigma}a_{k\sigma}+\sum_q\hbar\omega_q b^+_q b_q, \tag{4.3.2}$$

其中 ε_k 为电子的动能，$\hbar\omega_q$ 为声子的能量。H_1 为电子-声子相互作用哈密顿算符：

$$H_1=\sum_{kq\sigma}G_q a^+_{k+q,\sigma}a_{k\sigma}b_q+\text{H. C.}, \tag{4.3.3}$$

U 为电子之间两体库仑相互作用哈密顿算符：

$$U=\frac{1}{2\Omega}\sum_{\substack{kk'q\\ \sigma\sigma'}}V_q a^+_{k+q,\sigma}a^+_{k'-q,\sigma'}a_{k'\sigma'}a_{k\sigma}。 \tag{4.3.4}$$

上述式子中 σ 为电子自旋量子数，可取 $+1$ 或 -1。

为了揭示出电子-声子相互作用在二级效应中所包含的电子-电子作用，尝试作如下幺正变换：

$$\bar{H}=e^{-iS}He^{iS}, \tag{4.3.5}$$

其中 S 为某种由电子和声子算符所构成的厄米算符，且包含某一小参量。上式可作如下近似：

$$\begin{aligned}\bar{H}&\simeq\left(1-iS-\frac{1}{2}S^2\right)H\left(1+iS-\frac{1}{2}S^2\right)\\&\simeq H+i[H,\ S]-\frac{1}{2}[[H,\ S],\ S]。\end{aligned} \tag{4.3.6}$$

如果能够找到包含小参量的厄米算符 S 满足如下关系：

$$i[H_0,\ S]=-H_1, \tag{4.3.7}$$

则变换后的哈密顿算符可近似地化为

$$\bar{H}\simeq H_0+U+\frac{1}{2}i[H_1,\ S], \tag{4.3.8}$$

其中我们已忽略了对易子$[U,\ S]$的项，即忽略了电子-声子相互作用对电子-电子库仑作用的影响。

现在我们在 H_0 表象中进一步计算式(4.3.8)中第三项对易子算符的对角元。假定 H_0 的本征态已知，并记为$|m\rangle$，$|n\rangle$等。由式(4.3.7)可知，有

$$\langle m|S|n\rangle=i\langle m|H_1|n\rangle/(E_m-E_n)。 \tag{4.3.9}$$

设 n_q 是波矢量为 q 的声子数。由于 H_0 表象中声子消灭算符和

产生算符只有下列矩阵元不为零：

$$\langle n_q-1|b_q|n_q\rangle=\sqrt{n_q},\quad \langle n_q+1|b_q^+|n_q\rangle=\sqrt{1+n_q},\tag{4.3.10}$$

所以根据式(4.3.9)，H_1 以及 S 也只有在同样的诸声子态之间(n_q 改变 $+1$ 或 -1)的矩阵元不为零，且有

$$\langle n_q-1|S|n_q\rangle=i\sum_{k\sigma}G_q a^+_{k+q,\sigma}a_{k\sigma}\sqrt{n_q}/(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k-\hbar\omega_q),$$
$$\langle n_q+1|S|n_q\rangle=i\sum_{k\sigma}G^*_q a^+_{k-q,\sigma}a_{k\sigma}\sqrt{1+n_q}/(\varepsilon_{k-q}-\varepsilon_k+\hbar\omega_q)。\tag{4.3.11}$$

其中 $\varepsilon_k\equiv\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}$。于是式(4.3.8)第三部份算符在声子数表象中的对角元可化为

$$\langle n_q|\frac{1}{2}i[H_1,\ S]|n_q\rangle=\frac{1}{2}i\sum_{\pm}(\langle n_q|H_1|n_q\pm1\rangle\langle n_q\pm1|S|n_q\rangle$$
$$-\langle n_q|S|n_q\pm1\rangle\langle n_q\pm1|H_1|n_q\rangle),\tag{4.3.12}$$

这部份人们最感兴趣，因为其中包含了电子-电子相互作用。上式中的 S 的矩阵元由式(4.3.11)给出，再由式(4.3.9)便可给出 H_1 矩阵元，因此二者乘积很容易计算。例如

$$\frac{1}{2}i\langle n_q|H_1|n_q+1\rangle\langle n_q+1|S|n_q\rangle$$
$$=-\frac{1}{2}\sum_{k\sigma,k'\sigma'}\frac{|G_q|^2}{\varepsilon_{k-q}-\varepsilon_k+\hbar\omega_q}(1+n_q)a^+_{k'+q,\sigma'}a_{k'\sigma'}a^+_{k-q,\sigma}a_{k\sigma}。\tag{4.3.13}$$

在算出这些矩阵元乘积后，再对声子波矢量 $\boldsymbol{q}$ 求和，由此得到的式(4.3.8)中的第三项算符记为 H_I。在经过一些运算，包括改变求和指标，利用对易关系及下列关系：$G_{-q}=G^*_q$，$\omega_{-q}=\omega_q$ 之后，将得到如下结果：

$$H_I=\sum_{\substack{k\sigma\\k'\sigma'\\q}}\frac{|G_q|^2\hbar\omega_q}{(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)^2-(\hbar\omega_q)^2}a^+_{k+q,\sigma}a^+_{k'-q,\sigma'}a_{k'\sigma'}a_{k\sigma}。\tag{4.3.14}$$

此结果表明，电子-声子相互作用在二级效应中确实存在一种电子-电子二体相互作用，其作用强度与 $|G_q|^2$ 成正比。这种二体作用可能是吸引势，也可能是排斥势。如果 $\boldsymbol{k}$ 态电子和 $\boldsymbol{k}+q$ 态电子的能量差大于 $\hbar\omega_q$，是排斥势；反之，若小于 $\hbar\omega_q$，便会呈现出吸引势。

[例 1] 试证明，如下形式的算符 S 可满足条件(4.3.7)，并确定参量函数 Φ：

$$\begin{aligned} S &= S^+ = \sum_q S_q, \\ S_q &= \gamma_q b_q + \gamma_q^+ b_q^+, \\ \gamma_q &= \sum_k \Phi(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}) a_{k+q}^+ a_k 。 \end{aligned} \tag{4.3.15}$$

上式中为表示简单起见，我们暂时略去费米子算符的自旋指标 σ。

解：将电子-声子相互作用哈密顿算符(4.3.3)表示为

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_q H_q, \\ H_q &= G_q b_q \sum_k a_{k+q}^+ a_k + \text{H. C.}。 \end{aligned} \tag{4.3.16}$$

条件(4.3.7)现在可记为

$$i[H_0, S] + H_1 = \sum_q \{ i[H_0, S_q] + H_q \} = 0。 \tag{4.3.17}$$

利用费米子算符的反对易关系不难得到如下对易关系：

$$[a_k^+ a_l, a_m^+ a_n] = \delta_{lm} a_k^+ a_n - \delta_{kn} a_m^+ a_l 。 \tag{4.3.18}$$

由式(4.3.15)和(4.3.18)可得

$$[a_k^+ a_k, \gamma_q] = \Phi(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}, \boldsymbol{q}) a_k^+ a_{k-q} - \Phi(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}) a_{k+q}^+ a_k 。 \tag{4.3.19}$$

由此不难得到如下结果

$$\begin{aligned} i[H_0, S_q] + H_q = \sum_k \{ & i\Phi(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q})(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \hbar\omega_q) \\ & + G_q \} a_{k+q}^+ a_k b_q + \text{H. C.}。 \end{aligned}$$

为了满足条件(4.3.17)，显然只须要求

$$\Phi(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}) = \frac{iG_q}{\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \hbar\omega_q} 。 \tag{4.3.20}$$

4.3.2 对相互作用

式(4.3.14)给出的由交换声子产生的电子-电子耦合应与式(4.3.4)库仑相互作用能 U 合并而构成一个总的电子-电子相互作用。现在我们进一步引进一个假设：对于超导现象来说，电子-电子耦合项中 $k'=-k$ 的那些项是主要的。这样，由式(4.3.14)和(4.3.4)及上述假设可知，电子声子系统中我们感兴趣的电子两体相互作用能可表示为

$$\frac{1}{2\Omega}\sum_{kk'\sigma\sigma'}U_{kk'}a^{+}_{k\sigma}a^{+}_{-k\sigma'}a_{-k'\sigma'}a_{k'\sigma}, \tag{4.3.21}$$

其中耦合强度

$$U_{kk'}=\frac{2|G_q|^2\Omega\hbar\omega_q}{(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'})^2-(\hbar\omega_q)^2}+V_q \tag{4.3.22}$$

其中 $q=k-k'$，V_q 是电子间库仑相互作用能的傅里叶变换，Ω 为归一化体积。

对自旋态求和共有四项，其中两项($\sigma'=\sigma$)为三重态相互作用；另外两项($\sigma'=-\sigma$)为单态相互作用。因为超导理论似乎应与玻色子系统的凝聚现象类似，我们仅保留自旋单态作用。由于 $U_{kk'}=U_{-k,-k'}$，所以如果令 $k\equiv(k\uparrow)$，$-k\equiv(k\downarrow)$，其中箭头代表自旋取向，则讨论超导现象的哈密顿算符最后可表示为

$$H=2\sum_k(\varepsilon_k-\mu)a^{+}_k a_k+\frac{1}{\Omega}\sum_{kk'}U_{kk'}a^{+}_k a^{+}_{-k}a_{-k'}a_{k'}, \tag{4.3.23}$$

其中 $\varepsilon_k=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m^*}$ 为单电子动能，μ 为化学势。当不存在相互作用时，若所有比费米能 ε_F 低的能级被占有；而所有比 ε_F 高的能级为空置，则该无相互作用费米子系统的化学势等于费米能，即

$$\mu=\varepsilon_F。$$

式(4.3.23)是电子-声子相互作用哈密顿算符在电子对近似下的形式，是超导微观理论（即 BCS 理论）的基础。$a_{-k'}a_{k'}$ 和 $a^{+}_k a^{+}_{-k}$ 可分别看作动量和自旋等量反号的一对电子所构成的电子

对(或库柏对)的消灭算符和产生算符，所以式(4.3.23)中的相互作用项的效果是，使一个电子对由状态 $|k'\uparrow, -k'\downarrow\rangle$ 转化成为 $|k\uparrow, -k\downarrow\rangle$。如果在费米能附近，$U_{kk'}<0$，即为吸引势，便会导致超导电性。

4.3.3 超导态

现在我们从式(4.3.23)给出的哈密顿算符出发，讨论超导电性。应当指出，在导出这一哈密顿算符的过程中作了许多近似，所以它只能认为是一种模型理论。BCS 理论的正确性鉴于如下理由：它所得到的许多结果与金属和合金的超导电性实验事实相符。

为了求出电子对哈密顿算符本征问题的解，需要使它对角化。我们尝试引进如下正则变换(Valatin-Bogoliubov 变换)：

$$\begin{aligned} a_k &= u_k\alpha_k + v_k\beta_k^+, \\ a_{-k}^+ &= u_k\beta_k - v_k\alpha_k^+ 。 \end{aligned} \tag{4.3.24}$$

在电子对哈密顿算符(4.3.23)中，可认为 a_k、a_k^+ 以及 a_{-k}、a_{-k}^+ 是两类独立的算符，所以相应地上式变换中将出现两类准粒子算符 α_k、α_k^+ 和 β_k、β_k^+。上式变换中的变换系数为实数，且仅与 k 的值有关；这些系数还应满足如下正则化条件：

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 。 \tag{4.3.25}$$

与变换(4.3.24)相应的逆变换为

$$\begin{aligned} \alpha_k &= u_k a_k - v_k a_{-k}^+, \\ \beta_k &= u_k a_{-k} + v_k a_k^+ 。 \end{aligned} \tag{4.3.26}$$

可以证明，在条件(4.3.25)下新的两组准费米子算符满足同样的反对易关系。

将正则变换(4.3.24)代入哈密顿算符(4.3.23)，可发现其中动能项将化为

$$\begin{aligned} &\sum_k (\varepsilon_k - \mu)\,[2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(n_k^{(\alpha)} + n_k^{(\beta)}) \\ &\quad + 2u_k v_k(\alpha_k^+\beta_k^+ + \beta_k\alpha_k)]; \end{aligned} \tag{4.3.27}$$

相互作用项将化为

$$\frac{1}{\Omega}\sum_{kk'}U_{kk'}[u_kv_ku_{k'}v_{k'}(1-n_{k'}^{(\alpha)}-n_{k'}^{(\beta)})(1-n_k^{(\alpha)}-n_k^{(\beta)})$$
$$+u_{k'}v_{k'}(u_k^2-v_k^2)(1-n_{k'}^{(\alpha)}-n_{k'}^{(\beta)})(\alpha_k^+\beta_k^++\beta_k\alpha_k)+\text{四级项}],\tag{4.3.28}$$

其中

$$n_k^{(\alpha)}=\alpha_k^+\alpha_k,\quad n_k^{(\beta)}=\beta_k^+\beta_k\tag{4.3.29}$$

可分别称为动量为 k 的 α 类和 β 类准粒子数算符。由式(4.3.27)和(4.3.28)可以看出，在准粒子数表象中，电子对哈密顿算符包含了常数项、对角项($\sim\alpha_k^+\alpha_k$, $\beta_k^+\beta_k$)，二级非对角项($\sim\alpha_k^+\beta_k^+$, $\beta_k\alpha_k$)，以及四级非对角项等部份。忽略四级项(包括如 $n_k^{(\alpha)}\alpha_k^+\beta_k^+$ 这样的项)，二级非对角项为零的条件是

$$2(\varepsilon_k-\mu)u_kv_k+\frac{1}{\Omega}(u_k^2-v_k^2)\sum_{k'}U_{kk'}u_{k'}v_{k'}=0。\tag{4.3.30}$$

若令

$$\Delta_k=\frac{1}{\Omega}\sum_{k'}U_{kk'}u_{k'}v_{k'},\tag{4.3.31}$$

则对角化条件(4.3.30)可表示为

$$u_k^2-v_k^2=-\frac{2(\varepsilon_k-\mu)u_kv_k}{\Delta_k}。\tag{4.3.32}$$

于是忽略四级项时，在条件(4.3.30)下系统的哈密顿算符具有对角化形式：

$$H=E_0+H_1\tag{4.3.33}$$

$$E_0=2\sum_k(\varepsilon_k-\mu)v_k^2+\frac{1}{\Omega}\sum_{kk'}U_{kk'}u_kv_ku_{k'}v_{k'},\tag{4.3.34}$$

$$H_1=\sum_k\left[(\varepsilon_k-\mu)(u_k^2-v_k^2)-\frac{2u_kv_k}{\Omega}\sum_{k'}U_{kk'}u_{k'}v_{k'}\right]$$
$$\cdot(\alpha_k^+\alpha_k+\beta_k^+\beta_k),\tag{4.3.35}$$

其中 E_0 给出准粒子基态能，H_1 给出准粒子激发能或准粒子谱。而且根据式(4.3.34)以及正则变换条件(4.3.25)可以证明，对角化条件(4.3.30)也正是系统基态能 E_0 为最小的条件($\partial E_0/\partial v_k=0$)。

现在我们由正则变换条件(4.3.25)和对角化条件(4.3.32)来确定 u_k 和 v_k。首先由条件(4.3.25)引入如下参数化表示：

$$u_k=\cos\chi_k,\qquad v_k=\sin\chi_k。\tag{4.3.36}$$

对角化条件于是可表示为

$$\cos^2\chi_k-\sin^2\chi_k=-2(\varepsilon_k-\mu)\cos\chi_k\sin\chi_k/\Delta_k,$$

或

$$\operatorname{tg}2\chi_k=-\frac{\Delta_k}{(\varepsilon_k-\mu)}。\tag{4.3.37}$$

再由三角学公式可得

$$2u_kv_k=\sin 2\chi_k=\operatorname{tg}2\chi_k/\sqrt{1+\operatorname{tg}^2 2\chi_k},\tag{4.3.38}$$

$$u_k^2-v_k^2=\cos 2\chi_k=1/\sqrt{1+\operatorname{tg}^2 2\chi_k}。\tag{4.3.39}$$

将式(4.3.37)代入上式，再与正则化条件联立，便可得到如下结果：

$$\begin{cases} u_kv_k=-\Delta_k/2E_k,\\ u_k^2=\dfrac{1}{2}[1+(\varepsilon_k-\mu)/E_k],\\ v_k^2=\dfrac{1}{2}[1-(\varepsilon_k-\mu)/E_k], \end{cases}\tag{4.3.40}$$

其中

$$E_k=\sqrt{(\varepsilon_k-\mu)^2+\Delta_k^2}。\tag{4.3.41}$$

若将式(4.3.40)中的第一式代回到式(4.3.31)，可得

$$\Delta_k=-\frac{1}{2\Omega}\sum_{k'}\frac{U_{k,k'}\Delta_{k'}}{\sqrt{(\varepsilon_{k'}-\mu)^2+\Delta_{k'}^2}},\tag{4.3.42}$$

这是一个关于 Δ_k 的积分方程，它是 BCS 理论中的一个非常重要的公式。

将式(4.3.40)代入式(4.3.35)，可得

$$H_1=\sum_k E_k(\alpha_k^+\alpha_k+\beta_k^+\beta_k),\tag{4.3.43}$$

可见 E_k 就是准粒子激发能。注意到现在的能量是从费米能级 ε_F 量起。在费米能级处，$\varepsilon_k-\mu=0$。式(4.3.41)表明，激发能 E_k 始终不为零，激发谱包含一个“能隙”，这个能隙是超导态的特征。Δ_k

称为能隙参数，它由积分方程(4.3.42)确定。不过应当指出，由于准粒子成对激发，实验上观察到的能隙是 2Δ。

作为比较，$\Delta_k=0$ 显然是方程(4.3.42)的一个平凡解，它对应于正常态。此时式(4.3.40)化为

$$\begin{cases} u_k v_k = 0 \\ u_k^2 = \dfrac{1}{2}\left[1+\dfrac{(\varepsilon_k-\mu)}{|\varepsilon_k-\mu|}\right] = \theta(\varepsilon_k-\mu) \\ v_k^2 = \dfrac{1}{2}\left[1-\dfrac{(\varepsilon_k-\mu)}{|\varepsilon_k-\mu|}\right] = \theta(\mu-\varepsilon_k) \end{cases} \tag{4.3.44}$$

现在再来考察非平凡解，即超导解。为简单起见，设

$$U_{kk'} = -G\Omega\theta(\hbar\omega_D - |\varepsilon_k-\mu|), \tag{4.3.45}$$

其中 ω_D 为德拜频率。上式中的阶跃函数 θ 表明，相互作用仅仅存在于费米面附近的电子之间 $(\mu+\hbar\omega_D>\varepsilon_k>\mu-\hbar\omega_D)$，且为常数；负号表示吸引势。此时能隙方程(4.3.42)可化为

$$1=\frac{G}{2}\sum_k \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_k-\mu)^2+\Delta^2}}\theta(\hbar\omega_D-|\varepsilon_k-\mu|)。 \tag{4.3.46}$$

在费米面附近，能级很密，上式求和可化为积分：

$$\sum_k \to \int \rho(\varepsilon_k)d\varepsilon_k,$$

其中 $\rho(\varepsilon_k)$ 为态密度。再作变量代换：$\varepsilon_k-\mu=\varepsilon$，上式可化为

$$1=\frac{G}{2}\int d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon+\mu)}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2}}\theta(\hbar\omega_D-|\varepsilon|)$$

$$\simeq G\rho(\mu)\int_0^{\hbar\omega_D}\frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2}} = G\rho(\mu)\,\mathrm{arc\,sh}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right)。$$

上式推导中考虑到积分区域仅仅在费米面附近很小范围，所以将态密度近似为常数：$\rho(\mu+\varepsilon)\simeq\rho(\mu)$。于是我们便得到关于能隙的一个非平凡解：

$$\Delta=\hbar\omega_D/\mathrm{sh}\left(\frac{1}{G\rho}\right)\simeq 2\hbar\omega_D e^{-1/G\rho}。 \tag{4.3.47}$$

作为数值估计，取 $G\rho\sim0.2$，$\hbar\omega_D\sim0.03\,\mathrm{eV}$，则有 $\Delta\sim4\times10^{-4}\,\mathrm{eV}$

(或5K)。在实际中 $G\rho$ 约为 $1\sim1/10$，即小于1。当 G 很小时，$\Delta\to0$，但式(4.3.47)却不能展开为 G 的幂级数。所以我们这里所得到的是一种非微扰解。其次还应注意，只有当 $G>0$，为吸引势时，上述非平凡解才有意义。

4.3.4 超导基态

准粒子真空态即超导基态定义为 $|\Phi\rangle=\prod_k|\Phi_k\rangle$，其中 $|\Phi_k\rangle$ 定义为

$$\alpha_k|\Phi_k\rangle=0,\quad \beta_k|\Phi_k\rangle=0。\tag{4.3.48}$$

另一方面，电子真空态 $|0\rangle$ 定义为

$$a_k|0\rangle=a_{-k}|0\rangle=0。\tag{4.3.49}$$

注意到 $\alpha_k^2=\beta_k^2=0$，所以满足定义(4.3.48)的一个解可表示为

$$\begin{aligned}|\Phi_k\rangle&=N_k\alpha_k\beta_k|0\rangle\\&=N_k(u_ka_k-v_ka_{-k}^+)(u_ka_{-k}+v_ka_k^+)|0\rangle\\&=N_k(u_kv_k+v_k^2a_k^+a_{-k}^+)|0\rangle,\end{aligned}\tag{4.3.50}$$

其中 N_k 为归一化系数，由归一化条件 $\langle\Phi_k|\Phi_k\rangle=\delta_{kk}$ 确定，为 $N_k=1/v_k$。于是 $|\Phi_k\rangle$ 可表示为(明显标出自旋取向)

$$|\Phi_k\rangle=(u_k+v_ka_{k\uparrow}^+a_{-k\downarrow}^+)|0\rangle=u_k\exp[c_ka_{k\uparrow}^+a_{-k\downarrow}^+]|0\rangle,\tag{4.3.51}$$

其中 $c_k=v_k/u_k$，上式第二步写为指数算符形式的推导中利用了 $a_{k\uparrow}^+$ 和 $a_{-k\downarrow}^+$ 是费米子算符的性质。于是超导基态或BCS基态可表示为

$$|\Phi\rangle=\prod_k u_k\exp[c_ka_{k\uparrow}^+a_{-k\uparrow}^+]|0\rangle。\tag{4.3.52}$$

由此可以看出，超导基态具有相干态形式，是一种"费米子相干态"，它是由各种 k 值的库柏对构成。而且由式(4.3.51)可知，v_k^2 与BCS基态中出现动量为 k 的电子对的概率成正比。图4.3.1显示了由式(4.3.40)和(4.3.44)所给出的 v_k^2 从费米海深处的值(取为1)减小到零的变化曲线。在超导态情况下，其值的跃变发生在费米面附近量级为 Δ_k 的能量间隔内。

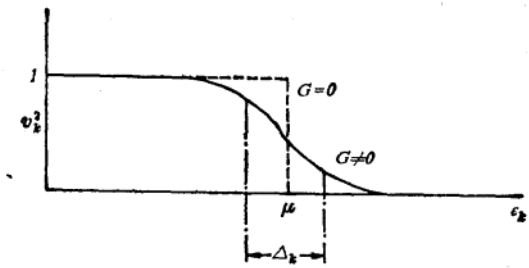

图 4.3.1 超导态和正常态的 v_k^2 随 ε_k 变化的函数曲线

超导基态的能量可通过将式(4.3.40)代入式(4.3.34)得到，结果为

$$E_0^{(\mathrm{BCS})}=\sum_k\left\{(\varepsilon_k-\mu)\left(1-\frac{\varepsilon_k-\mu}{\sqrt{(\varepsilon_k-\mu)^2+\Delta_k^2}}\right)-\frac{1}{2}\frac{\Delta_k^2}{\sqrt{(\varepsilon_k-\mu)^2+\Delta_k^2}}\right\}。\tag{4.3.53}$$

当 $\Delta_k=0$ 时，系统的单粒子态将被占据至 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_F$，此时正常基态能量是($\mu=\varepsilon_F$)

$$E_0^{(N)}=\sum_{k<k_F}(\varepsilon_k-\mu)\left(1-\frac{\varepsilon_k-\mu}{|\varepsilon_k-\mu|}\right),\tag{4.3.54}$$

它等于费米海内电子的总能量。超导基态与正常基态的能量差值为

$$\delta E_0=E_0^{(\mathrm{BCS})}-E_0^{(N)}=\sum_k\left(|\varepsilon_k-\mu|-\frac{2(\varepsilon_k-\mu)^2+\Delta_k^2}{2\sqrt{(\varepsilon_k-\mu)^2+\Delta_k^2}}\right)。\tag{4.3.55}$$

采用处理式(4.3.46)的类似步骤，可得

$$\delta E_0=2\rho\int_0^{\hbar\omega_D}\left[\varepsilon-\frac{2\varepsilon^2+\Delta^2}{2(\varepsilon^2+\Delta^2)^{1/2}}\right]d\varepsilon=(\hbar\omega_D)^2\rho[1-(1+\Delta^2/\hbar^2\omega_D^2)^{1/2}]\simeq-\frac{1}{2}\rho\Delta^2。\tag{4.3.56}$$

这是一种能量极小的改变。作为估计，取 $\rho\sim 0.2\mathrm{eV}^{-1}$，$\Delta\sim$

4×10^{-4}eV，因此$\delta E_0\sim1.6\times10^{-8}$eV。一个相互作用系统的如此小的能量变化会产生正常态与超导态之间的改变这样显著的宏观效应，确实令人感兴趣。而且由于$\delta E<0$，所以只要条件成立，超导基态是能量上优先允许的态。

当$\Delta\neq0$时的超导激发态可表示为

$$\begin{aligned}\alpha_k^+|\Phi\rangle&=(u_k a_{k\uparrow}-v_k a_{-k\downarrow}^+)|\Phi\rangle,\\ \beta_k^+|\Phi\rangle&=(u_k a_{k\uparrow}^+ + v_k a_{-k\downarrow})|\Phi\rangle,\end{aligned}\tag{4.3.57}$$

它们分别是$(-\boldsymbol{k}\downarrow)$态电子和$(\boldsymbol{k}\uparrow)$态空穴，或$(\boldsymbol{k}\uparrow)$态电子和$(-\boldsymbol{k}\downarrow)$态空穴的态。

准粒子的能量和动量的色散关系由式(4.3.41)给出。当单粒子能量远离费米面时$E_k\sim\varepsilon_k$，这是自由粒子的色散关系；当接近费米面时，$E_k\sim\Delta_k$，所以Δ_k也给出了超导基态和激发态之间的能量差值。

4.3.5 转变温度

非零温度下激发态居有数由费米函数表示：

$$\langle n_k\rangle=\frac{1}{e^{\beta E_k}+1},\tag{4.3.58}$$

其中$\beta=1/kT$，k为玻耳兹曼常数，T为绝对温度。在非零温度下讨论激发能时不应略去式(4.3.27)和(4.3.28)的哈密顿算符中$n_k^{(\alpha)}$和$n_k^{(\beta)}$的二次项，因为产生一个激发所需要的能量不仅与相互作用强度有关，而且还与已有的激发态粒子数有关，因此也就与温度有关。我们于是要将激发能E_k及能隙参数Δ_k作为温度的函数来考虑。

非零温下的激发能可定义为

$$E_k(T)=\partial\langle H\rangle/\partial\langle n_k^{(i)}\rangle,\tag{4.3.59}$$

其中$i=\alpha$或β。在计算哈密顿算符的平均值时，取如下近似：

$$\langle n_k^{(i)}n_k^{(j)}\rangle\simeq\langle n_k^{(i)}\rangle\langle n_k^{(j)}\rangle。\tag{4.3.60}$$

这近似相当于忽略激发态准粒子之间的相互作用，这实际上是多粒子理论中常用的"哈特里-福克近似"。将式(4.3.27)和(4.3.28)

的哈密顿算符代入式(4.3.59)，可得到如下结果：

$$E_k(T)=(\varepsilon_k-\mu)(u_k^2-v_k^2)-\frac{2u_kv_k}{\Omega}\sum_{k'}U_{kk'}u_{k'}v_{k'}$$
$$\cdot(1-\langle n_{k'}^{(\alpha)}\rangle-\langle n_{k'}^{(\beta)}\rangle)。\qquad(4.3.61)$$

利用式(4.3.58)，有

$$1-\langle n_k^{(\alpha)}\rangle-\langle n_k^{(\beta)}\rangle=1-\frac{2}{e^{\beta E_k}+1}=\mathrm{th}\left[\frac{1}{2}\beta E_k(T)\right]。$$
$$(4.3.62)$$

比较式(4.3.61)和式(4.3.35)中 H_1 的展开系数可以看出，现在可通过下式定义非零温度的能隙参数：

$$\Delta_k(T)=\frac{1}{\Omega}\sum_{k'}U_{kk'}u_{k'}v_{k'}\,\mathrm{th}\left[\frac{1}{2}\beta E_{k'}(T)\right]$$
$$=-\frac{1}{2\Omega}\sum_{k'}\frac{U_{kk'}\Delta_{k'}(T)}{\sqrt{(\varepsilon_{k'}-\mu)^2+\Delta_{k'}^2(T)}}$$
$$\cdot\mathrm{th}\left[\frac{1}{2}\beta E_{k'}(T)\right]。\qquad(4.3.63)$$

这一非零温下能隙参数的积分方程与零温下的方程(4.3.42)完全类似；而且当 $T\to0$，$\beta=1/kT\to\infty$ 时，$\mathrm{th}\left[\frac{1}{2}\beta E_k(T)\right]\to1$，于是式(4.3.63)便化为式(4.3.42)。类似于零温时的讨论，将式(4.3.63)中的求和式转化为积分，并近似取态密度为常数，便得

$$1=\rho G\int_0^{\hbar\omega_D}\frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2(T)}}\,\mathrm{th}\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2(T)}\right)。$$
$$(4.3.64)$$

由上式确定的能隙参数 $\Delta(T)$ 随温度的升高而减小，在转变温度 T_c 时为零。现在来确定 T_c。$\Delta(T)=0$ 时上式化为

$$\frac{1}{\rho G}=\int_0^{\hbar\omega_D}\frac{\mathrm{th}(\varepsilon/2kT_c)}{\varepsilon}d\varepsilon=\int_0^{\hbar\omega_D/2kT_c}\frac{\mathrm{th}\,x}{x}dx。$$

对上式作一次分部积分，有

$$\frac{1}{\rho G}=\ln(\hbar\omega_D/2kT_c)\,\mathrm{th}\,(\hbar\omega_D/2kT_c)$$

$$-\int_0^{\hbar\omega_D/2kT_c} \ln x \cdot \operatorname{sech}^2 x\, dx_。$$

上式最后一项积分上限可近似改变为 ∞，因为实际中 $\hbar\omega_D/2kT_c$ 很大。因此有

$$-\int_0^{\infty} \ln x \cdot \operatorname{sech}^2 x\, dx = \gamma + \ln(4/\pi),$$

其中 γ 为欧拉常数(0.5772)，于是最后可得

$$kT_c = 1.13\hbar\omega_D \exp(-1/\rho G)。 \qquad (4.3.65)$$

将此结果与零温时的能隙参数结果[参见式(4.3.47)]比较，可得

$$\frac{2\Delta(0)}{kT_c} = \frac{4}{1.13} = 3.52。 \qquad (4.3.66)$$

此结果应对所有超导体都成立，其中 $\Delta(0)$ 可通过电磁波吸收实验测定。实验表明上述关系是与实验合理地相符的。

利用 BCS 理论还可讨论迈斯纳效应，隧道贯穿和约瑟夫逊结(Josephson 结)效应等。本节所介绍的 BCS 理论称为弱耦合超导理论，这种理论对于诸如铝一类的超导材料其电子-声子相互作用不很强的超导体是适用的。对于铅一类材料，具有较强的电子-声子相互作用，这时需要应用强耦合理论(Eliashberg, 1960)。1986 年又发现了高温超导现象。某些金属氧化物陶瓷材料会呈现出超导电性，且其转变温度会高于液氮气化点(78 K)。这一发现又进一步促进了超导理论的研究工作。

§4.4 自旋系统的二次量子化理论

自旋系统的量子理论是磁学理论的基础。关于金属中磁有序的起因及其性质的研究或许是固体理论中最富于挑战性的课题之一。磁性可归因于电子相互作用，但是要对物质的铁磁性，反铁磁性等不同类型磁有序给出一个统一的理论是一个非常困难的问题。这里我们仅仅简单介绍自旋系统量子理论的某些基本问题，

作为二次量子化理论的一种应用。

4.4.1 自旋算符

第 l 格点上的自旋算符 $\boldsymbol{S}_l=(S_l^{(x)}, S_l^{(y)}, S_l^{(z)})$ 定义为满足如下对易关系的算符($\hbar=1$):

$$\begin{aligned}
&[S_l^{(x)}, S_m^{(y)}]=i\delta_{lm}S_l^{(z)},\\
&[S_l^{(y)}, S_m^{(z)}]=i\delta_{lm}S_l^{(x)},\\
&[S_l^{(z)}, S_m^{(x)}]=i\delta_{lm}S_l^{(y)},
\end{aligned}\tag{4.4.1}$$

其中 l, m 表示格点位置, (x)、(y)、(z) 表示空间分量。不同格点自旋算符之间是对易的。如果讨论中仅仅涉及到自旋为 1/2 的情况,则有

$$\begin{aligned}
S^{(x)}&=\frac{1}{2}\sigma_x=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\\
S^{(y)}&=\frac{1}{2}\sigma_y=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix},\\
S^{(z)}&=\frac{1}{2}\sigma_z=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}。
\end{aligned}\tag{4.4.2}$$

$S^{(z)}$ 的本征值有两个,为 $\pm\frac{1}{2}$;相应的本征矢可记为 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$,它们在 $S^{(z)}$ 表象中可分别用列矩阵 $\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ 和 $\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$ 表示。

定义如下两个算符:

$$\begin{aligned}
S_l^{(+)}&=S_l^{(x)}+iS_l^{(y)},\\
S_l^{(-)}&=S_l^{(x)}-iS_l^{(y)}。
\end{aligned}\tag{4.4.3}$$

在涉及到自旋算符的计算中 $S^{(+)}$ 和 $S^{(-)}$ 是重要的,因为这两个算符以及 $S^{(z)}$ 对表象基矢 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 的作用是简单而清楚的:

$$\begin{aligned}
&S^{(z)}|+\rangle=\frac{1}{2}|+\rangle, && S^{(z)}|-\rangle=-\frac{1}{2}|-\rangle,\\
&S^{(+)}|+\rangle=0, && S^{(+)}|-\rangle=|+\rangle,\\
&S^{(-)}|+\rangle=|-\rangle, && S^{(-)}|-\rangle=0。
\end{aligned}\tag{4.4.4}$$

如下公式表明,算符乘积 $S^{(+)}S^{(-)}$ 和 $S^{(-)}S^{(+)}$ 在 $(\boldsymbol{S}^2, S^{(z)})$ 表象中

也是对角化的：

$$S^{(+)}S^{(-)}=\boldsymbol{S}^2-(S^{(z)})^2+S^{(z)},$$
$$S^{(-)}S^{(+)}=\boldsymbol{S}^2-(S^{(z)})^2-S^{(z)}。\tag{4.4.5}$$

如下对易关系在以后的讨论中也很有用：

$$[S_l^{(+)},\ S_m^{(-)}]=2\delta_{lm}S_l^{(z)},$$
$$[S_l^{(z)},\ S_m^{(+)}]=\delta_{lm}S_l^{(+)},\tag{4.4.6}$$
$$[S_l^{(z)},\ S_m^{(-)}]=-\delta_{lm}S_l^{(-)}。$$

4.4.2 基本自旋模型

自旋系统的能量与自旋相对取向有关。例如，两个自旋为 1/2 的粒子系统，若粒子为电中性，则该系统的哈密顿算符为

$$H=-J\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2。\tag{4.4.7}$$

由于

$$\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{S}^2-\boldsymbol{S}_1^2-\boldsymbol{S}_2^2)=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{S}^2-\frac{3}{2}\right),\tag{4.4.8}$$

其中 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$ 为总自旋，所以当两个粒子自旋平行($s=1$)时，系统的能量为 $E_{\uparrow\uparrow}=-\frac{J}{4}$；反平行($s=0$)时，能量为 $E_{\uparrow\downarrow}=\frac{3}{4}J$。所以 J 的意义可从如下结果看出：$E_{\uparrow\downarrow}-E_{\uparrow\uparrow}=J$。

对于固定在格点上的自旋系统，其哈密顿算符可表示为

$$H=-\frac{J}{2}\sum_{lm}\boldsymbol{S}_l\cdot\boldsymbol{S}_m。\tag{4.4.9}$$

应当指出，我们整个讨论所采用的求和记号 $\sum_{lm}$ 中不包括 $l=m$ 的项。不难证明，总自旋算符

$$\boldsymbol{S}=\sum_l\boldsymbol{S}_l\tag{4.4.10}$$

与式(4.4.9)的 H 对易，即有

$$H\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}H。\tag{4.4.11}$$

式(4.4.9)的哈密顿算符也可表示为

$$H=-\frac{J}{2}\left(\sum_{lm}S_l^{(+)}S_m^{(-)}+S_l^{(z)}S_m^{(z)}\right)。\tag{4.4.12}$$

海森伯最早采用上式讨论铁磁性现象，故常称为"海森伯模型"。在一般情况下，海森伯模型只能近似求解。式(4.4.12)也称为各向同性海森伯模型，因为各个方向上的耦合强度 J 相同。$J>0$ 时，自旋趋于平行排列，所以可描写铁磁现象；$J<0$ 时，自旋趋于相间反平行排列，可描写反铁磁现象。

各向异性海森伯模型的哈密顿算符可表示为

$$H=-\frac{J_{\parallel}}{2}\sum_{lm}S_l^{(z)}S_m^{(z)}-\frac{J_{\perp}}{2}\sum_{lm}S_l^{(+)}S_m^{(-)}。\qquad(4.4.13)$$

当 $J_{\perp}=0$ 时，称为伊辛(Ising)模型：

$$H_I=-\frac{J_{\parallel}}{2}\sum_{lm}S_l^{(z)}S_m^{(z)}。\qquad(4.4.14)$$

外磁场(B_0)存在时的伊辛模型为

$$H_I=-\frac{J_{\parallel}}{2}\sum_{lm}S_l^{(z)}S_m^{(z)}-B_0\sum_l S_l^{(z)}。\qquad(4.4.15)$$

当式(4.4.13)中 $J_{\parallel}=0$ 时，称为 XY 模型：

$$H_{XY}=-\frac{J_{\perp}}{2}\sum_{lm}S_l^{(+)}S_m^{(-)}。\qquad(4.4.16)$$

一维伊辛模型即使存在外磁场时也可精确求解；二维伊辛模型当不存在外磁场时可精确求解(Onsager, 1944)；三维伊辛模型可用格林函数法(1966)和重正化群方法(1972～1977)得到非常精确的近似结果。

求解自旋系统问题的困难在于定义描写系统的集体算符。例如在一维情况下引进如下自旋算符的傅里叶变换：

$$\begin{aligned}S_l^{(+)}&=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k S_k^{(+)}e^{-ik\cdot x_l},\\ S_l^{(-)}&=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k S_k^{(-)}e^{ik\cdot x_l},\end{aligned}\qquad(4.4.17)$$

其逆变换可表示为

$$S_k^{(+)}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_l S_l^{(+)}e^{ik\cdot x_l},$$

$$S_k^{(-)}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_i S_i^{(-)}e^{-ik\cdot x_i}。\qquad(4.4.18)$$

与上述类似的变换我们已应用于全同玻色子系统和全同费米子系统。但是对于自旋算符来说，其 k 空间算符的对易关系是

$$[S_k^{(+)},\ S_{k'}^{(-)}]=\frac{1}{N}\sum_{ii'}e^{ik\cdot x_i-ik'\cdot x_{i'}}[S_i^{(+)},\ S_{i'}^{(-)}],$$

即

$$[S_k^{(+)},\ S_{k'}^{(-)}]=\frac{2}{N}\sum_i e^{i(k-k')\cdot x_i}S_i^{(z)}。\qquad(4.4.19)$$

此结果表明，算符 $S_k^{(+)}$ 和 $S_k^{(-)}$ 既不是玻色子算符，也不是费米子算符。人们有时将式(4.4.19)近似化为

$$[S_k^{(+)},\ S_{k'}^{(-)}]\simeq 2\delta_{kk'}\frac{1}{N}\sum_i S_i^{(z)}=2\langle S^{(z)}\rangle\delta_{kk'},\qquad(4.4.20)$$

从而可导出一个关于平均磁化 $\langle S^{(z)}\rangle$ 的自洽方程，并求出其解。但是这种方法是近似的。

对于自旋 1/2 的算符，由式(4.4.5)可知，同一格点上有

$$\{S_i^{(+)},\ S_i^{(-)}\}=2[S_i^2-(S_i^{(z)})^2]=1。\qquad(4.4.21)$$

这似乎表明，自旋算符是费米子算符。但是我们所遇到的麻烦是：不同格点上的算符 $S_i^{(+)}$ 和 $S_m^{(-)}$ 之间又应满足对易关系，而不是反对易关系。

所以对于自旋系统，人们常常考虑各种可能的特殊处理方法，将自旋算符表示为玻色子算符或费米子算符。

4.4.3 自旋算符的玻色表示

这里先介绍两种将自旋算符转变为玻色算符表示的例子。

霍尔史坦因-普利马柯夫(Holstein-Primakoff)表示

可以证明，若 b_i 和 b_i^+ 是玻色算符，则如下变换所定义的算符 $S^{(z)}$，$S^{(+)}$，$S^{(-)}$ 满足角动量对易关系：

$$\begin{aligned}S_i^{(z)}&=\frac{1}{2}-b_i^+b_i,\\ S_i^{(+)}&=(1-b_i^+b_i)^{1/2}b_i,\\ S_i^{(-)}&=b_i^+(1-b_i^+b_i)^{1/2}。\end{aligned}\qquad(4.4.22)$$

[例1] 若 b_l 和 b_l^+ 为玻色子算符，证明式(4.4.22)定义的 $S_l^{(+)}$ 和 $S_l^{(-)}$ 满足式(4.4.6)中的第一式。

解：由于不同格点上的玻色子算符对易，所以由定义(4.4.22)给出的不同格点上的算符 $S_l^{(+)}$ 和 $S_m^{(-)}$ 也对易：

$$[S_l^{(+)}, S_m^{(-)}]=0 \quad (l\neq m)。$$

现在来考察同一格点上算符的对易关系。注意到算符 $b_l^+b_l$ 与 $(1-b_l^+b_l)^{1/2}$ 对易，所以有

$$\begin{aligned}S_l^{(+)}S_l^{(-)}&=(1-b_l^+b_l)^{1/2}b_lb_l^+(1-b_l^+b_l)^{1/2}\\&=(1-b_l^+b_l)^{1/2}(1+b_l^+b_l)(1-b_l^+b_l)^{1/2}\\&=(1-b_l^+b_l)+b_l^+b_l(1-b_l^+b_l)\\&=1-b_l^+b_lb_l^+b_l=1-b_l^+b_l-b_l^+b_l^+b_lb_l。\end{aligned}$$

另一方面，有

$$S_l^{(-)}S_l^{(+)}=b_l^+(1-b_l^+b_l)b_l=b_l^+b_l-b_l^+b_l^+b_lb_l。$$

因此可得

$$[S_l^{(+)}, S_l^{(-)}]=S_l^{(+)}S_l^{(-)}-S_l^{(-)}S_l^{(+)}=1-2b_l^+b_l=2S_l^{(z)},$$

于是得证。类似地可以证明，由式(4.4.22)定义的算符也满足式(4.4.6)中其他角动量对易关系。

利用 HP 变换，海森伯模型哈密顿算符可表示为

$$\begin{aligned}H=-\frac{J}{2}\sum_{lm}\Big[&(1-b_l^+b_l)^{1/2}b_lb_m^+(1-b_m^+b_m)^{1/2}\\&+\Big(\frac{1}{2}-b_l^+b_l\Big)\Big(\frac{1}{2}-b_m^+b_m\Big)\Big]。\end{aligned}\tag{4.4.23}$$

注意到上式求和记号中不包括 $l=m$ 的项，同时认为当温度不高时激发粒子数平均值 $\langle b_l^+b_l\rangle$ 很小，所以可忽略上式展开中包含四个玻色算符或更多玻色算符乘积项。所以海森伯哈密顿算符可近似地化为

$$H=-\frac{J}{2}\Big(\sum_{lm}b_m^+b_l+\frac{1}{4}ZN-Z\sum_l b_l^+b_l\Big)。\tag{4.4.24}$$

其中 Z 为与 l 格点上的自旋存在相互作用的格点数，N 为总格点数。不难看出，式(4.4.24)的多体系统问题与上一章讨论的一维

原子链问题完全类似。于是，可采用完全类似的步骤将所讨论的问题转化到 K 空间。

引进如下变换

$$b_l^+=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \alpha_k^+ e^{ikl},$$
$$b_l=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \alpha_k e^{-ikl}。 \tag{4.4.25}$$

相应的逆变换为

$$\alpha_k^+=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_l b_l^+ e^{-ikl},$$
$$\alpha_k=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_l b_l e^{ikl}。 \tag{4.4.26}$$

上述变换是正则变换，对易关系保持不变：

$$[\alpha_k,\ \alpha_{k'}]=[\alpha_k^+,\ \alpha_{k'}^+]=0,$$
$$[\alpha_k,\ \alpha_{k'}^+]=\delta_{kk'}。 \tag{4.4.27}$$

将上述变换代入哈密顿算符(4.4.24)中的非对角化项，即第一项(表示相互作用的项)，有

$$\sum_{lm} b_m^+ b_l=\frac{1}{N}\sum_{lm}\sum_{kk'}\alpha_k^+\alpha_{k'}e^{ikm-ik'l}$$
$$=\sum_{kk'}\alpha_k^+\alpha_{k'}\frac{1}{N}\sum_m e^{i(k-k')m}\sum_l e^{ik'(m-l)},$$

设

$$\varphi(k')=\sum_l e^{ik'(m-l)}, \tag{4.4.28}$$

且它与m无关，因为我们现在讨论的是周期性格点系统。于是再考虑到正交性条件

$$\frac{1}{N}\sum_m e^{i(k-k')m}=\delta_{kk'}, \tag{4.4.29}$$

可得

$$\sum_{lm} b_m^+ b_l=\sum_k \varphi(k)\alpha_k^+\alpha_k。 \tag{4.4.30}$$

对于式(4.4.24)中的第三项，可证明有

$$\sum_l b_l^+ b_l=\sum_k \alpha_k^+\alpha_k。 \tag{4.4.31}$$

这样，海森伯模型的哈密顿算符在 K 空间(即准粒子表象)可化为完全对角化形式：

$$H=E_0+\sum_k E(k)\alpha_k^+\alpha_k, \tag{4.4.32}$$

其中 $E_0=-\frac{1}{8}JZN$ 是基态能量，而

$$E(k)=\frac{J}{2}[Z-\varphi(k)] \tag{4.4.33}$$

给出了准粒子(磁子)激发能或元激发谱，它与"位移量子数" k 有关。若 d 为格矩，k/d 就是波数；$p=\hbar k/d$ 就是准粒子线动量。式(4.4.33)也就是准粒子的色散关系。

许温格(Schwinger)模型

物理学家许温格最早发现，可用两组独立的玻色子算符来构造自旋算符。设两组玻色子算符分别为 b_1，b_1^+ 和 b_2、b_2^+；粒子数算符分别为

$$N_1=b_1^+b_1, \quad N_2=b_2^+b_2。 \tag{4.4.34}$$

这些算符满足如下对易关系：

$$\begin{aligned} &[b_1,\ b_1^+]=1, && [b_2,\ b_2^+]=1,\\ &[N_1,\ b_1]=-b_1, && [N_2,\ b_2]=-b_2,\\ &[N_1,\ b_1^+]=b_1^+, && [N_2,\ b_2^+]=b_2^+, \end{aligned} \tag{4.4.35}$$

而不同类型的产生和消灭算符之间是对易的：

$$[b_1,\ b_2^+]=[b_2,\ b_1^+]=0。 \tag{4.4.36}$$

由于 N_1 和 N_2 彼此对易，所以存在它们的共同本征态。本征值分别为 n_1 和 n_2 的本征态右矢记为 $|n_1,\ n_2\rangle$，因此有

$$\begin{aligned} &N_1|n_1,\ n_2\rangle=n_1|n_1,\ n_2\rangle,\\ &N_2|n_1,\ n_2\rangle=n_2|n_1,\ n_2\rangle。 \end{aligned} \tag{4.4.37}$$

算符 b_1，b_1^+ 和 b_2，b_2^+ 对这种共同本征矢的作用由 1.2.2 的讨论可知，为

$$
\begin{aligned}
b_1^+|n_1,\ n_2\rangle &= \sqrt{n_1+1}\ |n_1+1,\ n_2\rangle,\\
b_1|n_1,\ n_2\rangle &= \sqrt{n_1}\ |n_1-1,\ n_2\rangle,\\
b_2^+|n_1,\ n_2\rangle &= \sqrt{n_2+1}\ |n_1,\ n_2+1\rangle,\\
b_2|n_1,\ n_2\rangle &= \sqrt{n_2}\ |n_1,\ n_2-1\rangle。
\end{aligned}
\tag{4.4.38}
$$

真空态右矢记为 $|0,\ 0\rangle$，它定义为

$$
b_1|0,\ 0\rangle=0,\quad b_2|0,\ 0\rangle=0。
\tag{4.4.39}
$$

因此任意粒子数态可表示为

$$
|n_1,\ n_2\rangle=\frac{(b_1^+)^{n_1}(b_2^+)^{n_2}}{\sqrt{n_1!}\sqrt{n_2!}}|0,\ 0\rangle。
\tag{4.4.40}
$$

我们现在定义如下算符：

$$
\begin{aligned}
&J_+=\hbar b_1^+b_2,\qquad J_-=\hbar b_2^+b_1,\\
&J_z=\frac{\hbar}{2}(b_1^+b_1-b_2^+b_2)=\frac{\hbar}{2}(N_1-N_2)。
\end{aligned}
\tag{4.4.41}
$$

不难证明，上述定义的算符满足如下角动量对易关系：

$$
\begin{aligned}
&[J_+,\ J_-]=2\hbar J_z,\\
&[J_z,\ J_\pm]=\pm\hbar J_\pm。
\end{aligned}
\tag{4.4.42}
$$

例如，由于

$$
\begin{aligned}
\hbar^2[b_1^+b_2,\ b_2^+b_1]&=\hbar^2b_1^+b_2b_2^+b_1-\hbar^2b_2^+b_1b_1^+b_2\\
&=\hbar^2b_1^+(1+b_2^+b_2)b_1-\hbar^2b_2^+(1+b_1^+b_1)b_2\\
&=2\hbar^2(b_1^+b_1-b_2^+b_2)=2\hbar J_z,
\end{aligned}
$$

于是式(4.4.42)中的第一式得证。

若定义总粒子数算符为

$$
N\equiv N_1+N_2=b_1^+b_1+b_2^+b_2,
\tag{4.4.43}
$$

则还可得到如下结果：

$$
\boldsymbol{J}^2=J_z^2+\frac{1}{2}(J_+J_-+J_-J_+)=\hbar^2\frac{N}{2}\left(\frac{N}{2}+1\right)。
\tag{4.4.44}
$$

式(4.4.41)定义的算符对态 $|n_1,\ n_2\rangle$ 的作用为

$$
\begin{aligned}
J_+|n_1,\ n_2\rangle &= \hbar b_1^\dagger b_2 |n_1,\ n_2\rangle \\
&= \hbar\sqrt{n_2(n_1+1)}\ |n_1+1,\ n_2-1\rangle, \\
J_-|n_1,\ n_2\rangle &= \hbar b_2^\dagger b_1 |n_1,\ n_2\rangle \\
&= \hbar\sqrt{n_1(n_2+1)}\ |n_1-1,\ n_2+1\rangle, \\
J_z|n_1,\ n_2\rangle &= \frac{\hbar}{2}(N_1-N_2)|n_1,\ n_2\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2}(n_1-n_2)|n_1,\ n_2\rangle。
\end{aligned}
\tag{4.4.45}
$$

这些结果表明，如果对量子数作如下代换：

$$
n_1 \to j+m, \quad n_2 \to j-m, \tag{4.4.46}
$$

即

$$
\begin{aligned}
&\sqrt{n_2(n_1+1)} \to \sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \\
&\sqrt{n_1(n_2+1)} \to \sqrt{(j+m)(j-m+1)}, \\
&\frac{1}{2}(n_1-n_2) \to m, \\
&\frac{n}{2}\left(\frac{n}{2}+1\right) \to j(j+1),
\end{aligned}
\tag{4.4.47}
$$

则式(4.4.44)和(4.4.45)便化为熟悉的角动量算符对$(\boldsymbol{J}^2,\ J_z)$共同本征矢$|j,\ m\rangle$作用的公式。这些结果并不奇怪，因为通过式(4.4.41)定义的算符满足角动量基本对易关系。上述结果还可以这样来解释：如果认为b_1和$b_1^\dagger$是自旋向上$\left(m=\frac{1}{2}\right)$的粒子算符；$b_2$和$b_2^\dagger$是自旋向下$\left(m=-\frac{1}{2}\right)$的粒子算符，则本征值$n_1$和$n_2$分别就是自旋(沿$z$轴方向)向上和自旋向下的粒子数。因此$J_z$的本征值当然是$\frac{\hbar}{2}(n_1-n_2)$。从式(4.4.41)的定义还可看出，$J_+$的作用是消灭一个自旋向下的粒子，产生一个自旋向上的粒子；J_-的作用是消灭一个自旋向上的粒子，产生一个自旋向下的粒子。这些结果也显示在式(4.4.45)中。

由式(4.4.46)可得如下代换：

$$j=\frac{n_1+n_2}{2},\quad m=\frac{n_1-n_2}{2},\tag{4.4.48}$$

式(4.4.40)于是可记为

$$|j,\ m\rangle=\frac{(b_1^+)^{j+m}(b_2^+)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle,\tag{4.4.49}$$

其中已将真空态 $|0,\ 0\rangle$ 记为 $|0\rangle$。在特殊情况下，$j=m$，有

$$|j,\ j\rangle=\frac{(b_1^+)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle。\tag{4.4.50}$$

上述结果表明，高自旋态可设想为由自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的态构成。态 $|jm\rangle$ 是由 $j+m$ 个自旋向上，$j-m$ 个自旋向下的"基元粒子"构成的。在角动量理论中，利用这种类比可以方便地导出某些复杂的一般性结果。

将上述角动量算符的许温格表示应用于自旋系统，相应于每一格点上的自旋算符 $\boldsymbol{S}_i$ 需引进两组玻色子算符 b_{1i}、b_{1i}^+ 和 b_{2i}、b_{2i}^+。自旋系统这时就可作为一种全同玻色子系统进行求解。

4.4.4 约当-维格纳(Jordan-Wigner)变换

自旋算符可用玻色算符构造，也可用费米算符构造。约当-维格纳(JW)变换就是用费米子算符表示自旋算符的一个例子。JW变换是指如下位相因子变换：

$$\begin{aligned}a_i&=e^{i\varphi_i}S_i^{(-)},\\ a_i^+&=e^{-i\varphi_i}S_i^{(+)},\end{aligned}\tag{4.4.51}$$

式中的位相因子是一种"链算符"，它定义为

$$\varphi_i\equiv\pi\sum_{k=1}^{i-1}\left(\frac{1}{2}+S_k^{(z)}\right)=\pi\sum_{k=1}^{i-1}a_k^+a_k。\tag{4.4.52}$$

上式表明，第 i 格点上的位相 φ_i 与该格点前面所有格点上的自旋算符 $S_k^{(z)}(k=1,\ 2,\ \cdots,\ i-1)$有关。上式第二步等号的证明如下：$\varphi_i$ 仅与第 i 格点前的格点自旋算符有关，它当然与 i 格点上的自旋算符对易，因此有

$$a_i^+=e^{-i\varphi_i}S_i^{(+)}=S_i^{(+)}e^{-i\varphi_i},\tag{4.4.53}$$

由此可得($\hbar=1$)

$$a_l^+ a_l = S_l^{(+)} S_l^{(-)} = \boldsymbol{S}_l^2 - (S_l^{(z)})^2 + S_l^{(z)} = \frac{1}{2} + S_l^{(z)}。 \tag{4.4.54}$$

式(4.4.52)表明，如果 a_k 和 a_k^+ 是费米子算符，则 $\varphi_l = \pi \sum_{k=1}^{l-1} n_k$ 量度了格点 l 之前的费米子数。利用定义(4.4.51)以及角动量基本性质和对易关系可以证明，a_l 和 a_l^+ 满足如下反对易关系：

$$\begin{aligned} \{a_l,\ a_m\} &= \{a_l^+,\ a_m^+\} = 0, \\ \{a_l,\ a_m^+\} &= \delta_{lm}, \end{aligned} \tag{4.4.55}$$

因此它们确实是费米子算符。

[例 2]　证明式(4.4.55)中的第二式。

解：对于同一格点的算符来说，显然有

$$\{a_l,\ a_l^+\} = \{S_l^{(-)},\ S_l^{(+)}\} = 1。 \tag{4.4.56}$$

对于不同格点的算符来说，有

$$\{a_l,\ a_m^+\} = e^{i\varphi_l} S_l^{(-)} e^{-i\varphi_m} S_m^{(+)} + e^{-i\varphi_m} S_m^{(+)} e^{i\varphi_l} S_l^{(-)}。$$

区分两种情况：$l>m$ 及 $l<m$。先考察 $l>m$。此时 φ_m 中不包含 $S_l^{(z)}$，故与 $S_l^{(-)}$ 对易；同时可将 φ_l 表示为

$$\varphi_l = \pi a_m^+ a_m + \pi \sum_{\substack{k=1 \\ (k\neq m)}}^{l-1} a_k^+ a_k,$$

于是反对易关系可化为

$$\{a_l,\ a_m^+\} = e^{i(\varphi_l - \varphi_m)} [S_l^{(-)} S_m^{(+)} + e^{-i\pi a_m^+ a_m} S_m^{(+)} e^{i\pi a_m^+ a_m} S_l^{(-)}]。$$

注意到

$$\begin{aligned} & e^{-i\pi a^+ a} S^{(+)} e^{i\pi a^+ a} \\ &= e^{-i\pi\left(\frac{1}{2}+S^{(z)}\right)} S^{(+)} e^{i\pi\left(\frac{1}{2}+S^{(z)}\right)} = -S^{(+)}, \end{aligned}$$

这是因为

$$\begin{aligned} & e^{-i\pi S^{(z)}} S^{(+)} e^{i\pi S^{(z)}} \\ &= S^{(+)} - i\pi [S^{(z)},\ S^{(+)}] - \frac{\pi^2}{2!} [S^{(z)},\ [S^{(z)},\ S^{(+)}]] + \cdots \end{aligned}$$

$$=S^{(+)}-i\pi S^{(+)}-\frac{\pi^2}{2!}S^{(+)}+\cdots=e^{-i\pi}S^{(+)}=-S^{(+)}。$$

于是对于 $l>m$ 来说，有

$$\{a_l,\ a_m^+\}=e^{i(\varphi_l-\varphi_m)}[S_l^{(-)},\ S_m^{(+)}]=0。$$

类似地，对于 $l<m$，同样有 $\{a_l,\ a_m^+\}=0$。这些结果与式(4.4.56)一起，可一般地表示为

$$\{a_l,\ a_m^+\}=\delta_{lm}。$$

利用 JW 变换，可将一维自旋系统的 XY 模型转化为一个无相互作用的费米子系统。存在近邻相互作用的 XY 模型的哈密顿算符为

$$H_{XY}=-J\sum_j[S_j^{(+)}S_{j+1}^{(-)}+S_j^{(+)}S_{j-1}^{(-)}]。\qquad(4.4.57)$$

利用 JW 变换，上式可化为

$$H_{XY}=-J\sum_j(e^{i\varphi_j}a_j^+e^{-i\varphi_{j+1}}a_{j+1}+e^{i\varphi_j}a_j^+e^{-i\varphi_{j-1}}a_{j-1})$$

$$=-J\sum_j(a_j^+e^{-i\pi a_j^+a_j}a_{j+1}+a_j^+e^{i\pi a_{j-1}^+a_{j-1}}a_{j-1})。$$

注意到 $(a_j^+)^2=0$，$a_j^2=0$，所以例如上式求和记号中的第一项可化为

$$a_j^+e^{-i\pi a_j^+a_j}a_{j+1}=a_j^+\left[1-i\pi a_j^+a_j-\frac{1}{2}\pi^2(a_j^+a_j)^2+\cdots\right]a_{j+1}$$

$$=a_j^+a_{j+1}。$$

于是 XY 模型的哈密顿算符可化为

$$H_{XY}=-J\sum_j(a_j^+a_{j+1}+a_j^+a_{j-1})。\qquad(4.4.58)$$

这是一个紧束缚费米子系统。利用如下变换，引进集体算符或准粒子算符 α_k、α_k^+：

$$\begin{cases}a_j=\dfrac{1}{\sqrt{N}}\sum\limits_k\alpha_ke^{-ikx_j},\\ a_j^+=\dfrac{1}{\sqrt{N}}\sum\limits_k\alpha_k^+e^{ikx_j}。\end{cases}\qquad(4.4.59)$$

相应的逆变换为

$$\begin{cases} \alpha_k = \dfrac{1}{\sqrt{N}} \sum\limits_j a_j e^{ikx_j}, \\ \alpha_k^+ = \dfrac{1}{\sqrt{N}} \sum\limits_j a_j^+ e^{-ikx_j}。 \end{cases} \tag{4.4.60}$$

准粒子算符满足同样的费米子算符反对易关系，如

$$\{\alpha_k,\ \alpha_{k'}^+\} = \frac{1}{N} \sum_{jl} e^{ikx_j - ik'x_l} \{a_j,\ a_l^+\}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_j e^{i(k-k')x_j} = \delta_{kk'}。 \tag{4.4.61}$$

利用正则变换(4.4.59)，哈密顿算符(4.4.58)可化为

$$H_{XY} = -\frac{J}{N} \sum_j \sum_{kk'} (e^{ikx_j - ik'x_{j+1}} + e^{ikx_j - ik'x_{j-1}}) \alpha_k^+ \alpha_{k'}。$$

因为 $x_{j+1} = x_j + d$，$x_{j-1} = x_j - d$，其中 d 为格距，所以上式可化为

$$H_{XY} = -\frac{J}{N} \sum_j \sum_{kk'} e^{i(k-k')x_j} (e^{-ik'd} + e^{ik'd}) \alpha_k^+ \alpha_{k'}$$

$$= -2J \sum_{kk'} \delta_{kk'} \cos(k'd) \alpha_k^+ \alpha_{k'}$$

$$= -2J \sum_k \varphi_k \alpha_k^+ \alpha_k, \tag{4.4.62}$$

其中

$$\varphi_k = \cos kd。 \tag{4.4.63}$$

于是 H_{XY} 完全对角化了，并且得到了元激发谱。系统的精确的配分函数为

$$Z = \mathrm{Tr} e^{-\beta H} = \prod_k (1 + e^{2J\varphi_k \beta})。 \tag{4.4.64}$$

上述结果表明，一维半整数自旋链系统可精确地转化为一个费米子系统。这一结果对于高维情况并不正确。对于二维和三维自旋系统，尚未发现上述等价变换。许多近似分析表明，二维和三维自旋系统的行为接近于玻色子系统，而不是费米子系统。

§ 4.5 辐射的量子理论

本节中我们要讨论量子化电磁场与原子中电子的相互作用，

这是电磁场与物质相互作用的基本方面。在量子力学理论中，不能完整地建立光的发射和吸收理论，因为由于能级的稳定性，自发辐射在量子力学理论中是不可能发生的。完整的光的发射和吸收理论要借助于二次量子化方法。最后我们还简单介绍了电子对光的散射理论。

4.5.1 电子与电磁场相互作用系统的哈密顿算符

量子力学中电子与电磁场相互作用系统的哈密顿算符为

$$H=\frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)\right]^2+V(\boldsymbol{x}) \tag{4.5.1}$$

其中 $V(\boldsymbol{x})$ 为原子中的库仑场；$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ 为电磁场的矢势。从 3.5.1 的讨论中我们知道，辐射场的标势可取为零；对矢势可附加如下规范条件（横波条件）：

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0。 \tag{4.5.2}$$

式(4.5.1)中 $\boldsymbol{p}=-i\hbar\nabla$ 是单粒子动量算符，而 $\boldsymbol{A}$ 是坐标的函数，它本身并不是算符，因为在一次量子化理论中电磁场并没有量子化。利用横波条件，式(4.5.1)中的第一项可化为

$$\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}。 \tag{4.5.3}$$

式(4.5.1)表示的哈密顿算符在电子态 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 中的平均值为

$$\langle H\rangle=\int\psi^*(\boldsymbol{x},t)\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V(\boldsymbol{x})\right]\psi(\boldsymbol{x},t)d\boldsymbol{x} \tag{4.5.4}$$

电子和电磁场系统的总能量包括式(4.5.4)的项以及自由电磁场的能量项

$$\begin{aligned}H_0^{(R)}&=\frac{1}{8\pi}\int[\boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{x},t)+\boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{x},t)]d\boldsymbol{x}\\&=\frac{1}{8\pi}\int\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right)^2+(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\right]d\boldsymbol{x}。\end{aligned} \tag{4.5.5}$$

现在考虑二次量子化，这意味着描写电子波场的函数 ψ 和 ψ^*，

以及描写电磁场的函数 $\boldsymbol{A}$ 都变成了算符，因此式(4.5.4)定义的平均值以及式(4.5.5)的自由电磁场能量也都变为算符，并且它们也就是二次量子化理论中电子和电磁场系统的哈密顿算符。现在将这个二次量子化理论中的哈密顿算符表示为

$$H=H_0+H_1+H_2 \tag{4.5.6}$$

其中 H_0 包括原子中电子的哈密顿算符 $H_0^{(e)}$ 和自由电磁场的哈密顿算符 $H_0^{(R)}$ 两部分，其中 $H_0^{(R)}$ 的形式由式(4.5.5)给出，$H_0^{(e)}$ 的形式为

$$H_0^{(e)}=\int\psi^+(\boldsymbol{x},\ t)\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\Big]\psi(\boldsymbol{x},\ t)d\boldsymbol{x}。 \tag{4.5.7}$$

式(4.5.6)中 H_1 和 H_2 是相互作用哈密顿：

$$H_1=\int\psi^+(\boldsymbol{x},\ t)\Big(-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\Big)\psi(\boldsymbol{x},\ t)d\boldsymbol{x}, \tag{4.5.8}$$

$$H_2=\int\psi^+(\boldsymbol{x},\ t)\Big(\frac{e^2}{2mc^2}A^2\Big)\psi(\boldsymbol{x},\ t)d\boldsymbol{x}, \tag{4.5.9}$$

其中 H_1 与光子波场算符 $\boldsymbol{A}$ 呈线性关系，H_2 与 $\boldsymbol{A}^2$ 有关。在转化到粒子数表象后，H_1 中的基本项包含两个电子算符和一个光子算符；而 H_2 中的基本项包含两个电子算符和两个光子算符。

为了转化到粒子数表象，需要选择适当的单粒子算符本征函数完全集，以便用来展开场算符，从而展开哈密顿算符。现在取平面波态 $\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$ 作为基矢，展开量子化电磁场的场算符 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$；另一方面，取如下单粒子薛定谔方程的解 $\varphi_\mu(\boldsymbol{x})$ 作为基矢，展开电子波场算符 $\psi(\boldsymbol{x},\ t)$ 和 $\psi^+(\boldsymbol{x},\ t)$：

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\Big]\varphi_\mu=E_\mu\varphi_\mu。 \tag{4.5.10}$$

对于原子中的电子来说，$V(\boldsymbol{x})$ 是库仑势，所以上式中的 φ_μ 和 E_μ 均可严格求解。应该注意，这里采用的下标 μ 应理解为一组量子数集，如 n、l、m，或许还有 s。

场算符的展开式是

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},\ t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k}\right)^{1/2}\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda[c_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+c^+_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}], \tag{4.5.11}$$

$$\psi(\boldsymbol{x},\ t)=\sum_\mu a_\mu(t)\varphi_\mu(\boldsymbol{x}), \tag{4.5.12}$$

$$\psi^+(\boldsymbol{x},\ t)=\sum_\mu a^+_\mu(t)\varphi^*_\mu(\boldsymbol{x})。 \tag{4.5.13}$$

将上述展开式代入式(4.5.5)，(4.5.7)和(4.5.8)，可得

$$H_0=\sum_\mu E_\mu a^+_\mu a_\mu+\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}c^+_{\boldsymbol{k}\lambda}c_{\boldsymbol{k}\lambda} \tag{4.5.14}$$

$$H_1=\hbar\sum_{\mu\nu\boldsymbol{k}\lambda}[g_{\mu\nu\boldsymbol{k}\lambda}a^+_\mu a_\nu c_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i(E_\mu-E_\nu-\hbar\omega_k)t/\hbar}+g_{\nu\mu-\boldsymbol{k}\lambda}a^+_\nu a_\mu c^+_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i(E_\mu-E_\nu-\hbar\omega_k)t/\hbar}], \tag{4.5.15}$$

其中耦合系数为

$$g_{\mu\nu\boldsymbol{k}\lambda}=-\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi}{V\hbar\omega_k}}\int\varphi^*_\mu e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}[\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{p}\varphi_\nu(\boldsymbol{x})]d\boldsymbol{x}$$

$$=-\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi}{V\hbar\omega_k}}\langle\varphi_\mu|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{p}|\varphi_\nu\rangle, \tag{4.5.16}$$

其中$\boldsymbol{p}=-i\hbar\nabla$。现在我们暂不考虑相互作用哈密顿算符中与$\boldsymbol{A}^2$有关的部份，因为它在一级近似中对电子发射或吸收一个光子的过程没有贡献。另外，在写出式(4.5.14)和(4.5.15)时已应用了自由场算符随时间的指数函数关系，因此式(4.5.15)给出的也就是相互作用哈密顿算符H_1在相互作用绘景中的形式。将式(4.5.16)作一次分部积分，利用横波条件$\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{k}=0$和$\boldsymbol{\varepsilon}^*_\lambda=\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda$($\because\boldsymbol{A}^+=\boldsymbol{A}$)，不难证明

$$g^*_{\mu\nu\boldsymbol{k}\lambda}=g_{\nu\mu-\boldsymbol{k}\lambda}。 \tag{4.5.17}$$

因此，式(4.5.15)求和记号中的两项互为厄米共轭。

4.5.2 自发辐射

电子由于电子场-电磁场相互作用而自发辐射光子的过程与由于电子场-声子场(即晶格振动场)相互作用而自发辐射声子的过程完全类似。这类问题可以在一级玻恩近似下讨论。在一级玻

恩近似下，由于相互作用而使初态$|i\rangle$演化为

$$|\Phi\rangle=\left[1+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1 H_1(t_1)\right]|i\rangle。\qquad(4.5.18)$$

在这个态中出现态$|f\rangle$的概率幅为

$$c_{fi}=\langle f|\Phi\rangle=\left\langle f\left|\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1 H_1(t_1)\right|i\right\rangle,\qquad(4.5.19)$$

这里我们假定$|i\rangle$与$|f\rangle$不同。由于相互作用使系统由$|i\rangle$跃迁到$|f\rangle$的跃迁速率是

$$w_{fi}=\frac{d}{dt}|c_{fi}|^2=\frac{d}{dt}\left|\langle f|\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1 H_1(t_1)|i\rangle\right|^2。\qquad(4.5.20)$$

在量子理论中，系统状态的跃迁过程是一种基本的最常见的微观现象；跃迁速率是一个很重要的描写跃迁过程的物理量，由它可以算出许多可直接通过实验测量的量（如态的寿命，谱线的强度，散射截面等）。式(4.5.20)表明，为了计算跃迁速率，在一级近似下重要的是计算相互作用哈密顿算符在"非微扰态"$|i\rangle$和$|f\rangle$之间的非对角矩阵元。

自发辐射过程中，末态比初态多了一个光子。设初态中有一个（原子中的）i态电子，由于自发辐射一动量为$\boldsymbol{k}$，极化为ε_λ的光子而跃迁为f态电子，所以我们可将有关的初态和末态记为

$$|i\rangle=a_i^+|0\rangle,\quad |f\rangle=c_{k\lambda}^+a_f^+|0\rangle。\qquad(4.5.21)$$

有关的跃迁矩阵元可表示为

$$\langle f|H_1|i\rangle=\langle 0|a_f c_{k\lambda}(\hbar\sum_{\mu\nu k'\lambda'}g_{\nu\mu-k'\lambda'}a_\nu^+a_\mu c_{k'\lambda'}^+e^{-i(E_\mu-E_\nu-\hbar\omega_{k'})t/\hbar})a_i^+|0\rangle,\qquad(4.5.22)$$

其中H_1中与光子消灭算符$c_{k\lambda}$有关的项贡献为零。对于上式中的算符乘积采取正规化手续，可得

$$\langle 0|a_f c_{k\lambda}a_\nu^+a_\mu c_{k'\lambda'}^+a_i^+|0\rangle=\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{f\nu}\delta_{i\mu}。\qquad(4.5.23)$$

于是式(4.5.22)可简化为

$$\langle f|H_1|i\rangle=\hbar g_{fi-k\lambda}e^{-i(E_i-E_f-\hbar\omega_k)t/\hbar}。\qquad(4.5.24)$$

将此结果代入式(4.5.20)，可得

$$w_{fi}^{(s)}=2\pi\hbar|g_{fi-k\lambda}|^2\delta(E_i-E_f-\hbar\omega_k)\qquad(4.5.25)$$

其中已应用了如下结果：

$$\left|\int_0^t e^{-iEt_1/\hbar}dt_1\right|^2=2\pi\hbar\delta(E)\int_0^t dt_1\qquad(4.5.26)$$

此式中的δ-函数体现了过程中能量守恒的要求。如果初态和末态电子的能量确定，则辐射光子的能量，即动量的值也确定，但动量方向并不确定。此外光子的极化方向也应考虑各种可能性。因此在计算跃迁速率时还必须考虑对 $\boldsymbol{k}$ 和 λ 求和：

$$\Gamma_{fi}^{(s)}=\sum_{k\lambda}w_{fi}^{(s)}=2\pi\hbar\sum_{k\lambda}|g_{fi-k\lambda}|^2\delta(E_i-E_f-\hbar\omega_k)。\qquad(4.5.27)$$

将对 $\boldsymbol{k}$ 的求和改变为积分：

$$\sum_k\to\frac{V}{(2\pi)^3}\int dk=\frac{V}{(2\pi)^3}\int k^2\,dk\,d\Omega,\qquad(4.5.28)$$

再考虑到对末态光子，有 $\hbar\omega_k=c\hbar k$，因此有

$$k^2\,dk=\frac{\omega_k^2}{\hbar c^3}d(\hbar\omega_k),$$

于是式(4.5.27)可化为

$$\Gamma_{fi}^{(s)}=\frac{V\omega^2}{(2\pi)^2c^3}\int\sum_\lambda|g_{fi-k\lambda}|^2d\Omega\qquad(4.5.29)$$

4.5.3 电偶极近似

为了计算 $\Gamma_{fi}^{(s)}$，需要知道 $|g|^2$ 与 $\boldsymbol{k}$ 的方向性关系。由式(4.5.16)和(4.5.17)可知

$$\begin{aligned}g_{fi-k\lambda}&=-\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi}{V\hbar\omega}}\int\varphi_f^*(\boldsymbol{x})e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}[\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{p}\varphi_i(\boldsymbol{x})]d\boldsymbol{x}\\&=-\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi}{V\hbar\omega}}\langle\varphi_f|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{p}|\varphi_i\rangle\end{aligned}\qquad(4.5.30)$$

上式积分遍及原子中电子波函数的分布范围，即 $x\sim a_0$，其中 a_0 为

玻尔半径。作为估计，$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\sim ka_0=2\pi a_0/\lambda$，可见，只要 $\frac{a_0}{\lambda}\ll 1$，即辐射光的波长比原子线度大得多，就可取如下近似：

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\sim 1 \quad (\text{长波近似})。 \tag{4.5.31}$$

显然，即使对于辐射紫外光的过程，长波近似条件也可以满足。这时式(4.5.30)式可记为

$$g_{fi-k\lambda}=-\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi}{V\hbar\omega}}\langle\varphi_f|\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{p}|\cdot\varphi_i\rangle。 \tag{4.5.32}$$

注意到由相互作用绘景中坐标算符 $\boldsymbol{x}$ 的运动方程可得

$$\frac{\boldsymbol{p}}{m}=\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{x},\ H_0]=\frac{1}{i\hbar}(\boldsymbol{x}H_0-H_0\boldsymbol{x})。 \tag{4.5.33}$$

所以在 H_0 表象中动量算符和坐标算符的矩阵元之间存在如下关系：

$$\begin{aligned}\langle\varphi_f|\boldsymbol{p}|\varphi_i\rangle&=\frac{m}{i\hbar}(E_i-E_f)\langle\varphi_f|\boldsymbol{x}|\varphi_i\rangle\\&=-im\omega\langle\varphi_f|\boldsymbol{x}|\varphi_i\rangle,\quad [\omega=(E_i-E_f)/\hbar]。\end{aligned} \tag{4.5.34}$$

这样，自发辐射跃迁速率又可表示为

$$\Gamma_{fi}^{(s)}=\frac{e^2\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\int\sum_\lambda|\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{x}_{fi}|^2\,d\Omega, \tag{4.5.35}$$

其中 $\boldsymbol{x}_{fi}\equiv\langle\varphi_f|\boldsymbol{x}|\varphi_i\rangle$。注意到 $e\boldsymbol{x}_{fi}\equiv\boldsymbol{d}_{fi}$ 是原子的电偶极矩矩阵元，所以上述长波近似也称为电偶极近似。

式(4.5.35)中若不对 λ 求和，则可应用于一般极化光辐射的情况。现在来考虑非极化光辐射。设辐射光子的动量方向 $\boldsymbol{k}$ 取为 z-轴方向，极化矢量 $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}_2$ 的方向分别取为 x-轴和 y-轴方向，因此对于非极化光辐射来说，有

$$\begin{aligned}\sum_\lambda|\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{x}_{fi}|^2&=|\boldsymbol{x}_{fi}|^2(\sin^2\theta\cos^2\varphi+\sin^2\theta\sin^2\varphi)\\&=|\boldsymbol{x}_{fi}|^2\sin^2\theta。\end{aligned} \tag{4.5.36}$$

将此结果代入式(4.5.35)，对角度积分后可得

$$\Gamma_{fi}^{(S)}=\frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{x}_{fi}|^2。\qquad(4.5.37)$$

此式给出的跃迁速率的倒数就是 i 态原子由于"f道"自发跃迁的寿命 $\tau_{i\to f}$:

$$1/\tau_{i\to f}=\Gamma_{fi}^{(S)}。\qquad(4.5.38)$$

作为一个例子，我们来考察原子由量子数 $i\equiv(n,\ l,\ m)$ 的态通过电偶极跃迁而转化为量子数 $f\equiv(n',\ l',\ m')$ 的态的寿命。由量子力学可知，$x_{fi}\neq 0$ 要求 $m'=m,\ m\pm1$。由式(4.5.37)可得

$$\Gamma_{[(nlm)\to(n'l'm')]}=\frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}\begin{Bmatrix}(l+1)/(2l+1)\\ l/(2l+1)\end{Bmatrix}\left|\int_0^\infty R_{n'l'}(r)R_{nl}(r)r^3dr\right|^2$$

$$\left(l'=\begin{Bmatrix}l+1\\ l-1\end{Bmatrix}\right),\qquad(4.5.39)$$

其中 $R_{nl}(r)$ 是类氢原子归一化径向波函数。上述结果表明，原子的寿命与磁量子数 m 无关。所以现在应考虑对初态各种可能 m 值的态求平均，对末态各种可能 m' 值的态求和，即

$$\Gamma_{fi}^{(S)}\to\frac{1}{2l+1}\sum_m\sum_{m'}。\qquad(4.5.40)$$

作为数值例子，我们计算氢原子从2p态衰变到基态1s的寿命。径向波函数现在是

$$R_{nl}=\frac{1}{\sqrt{24a_0^5}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0},\qquad R_{n'l'}=\frac{2}{\sqrt{a_0^3}}e^{-r/a_0},$$

$$(4.5.41)$$

其中 a_0 是玻尔半径。计算结果是

$$\tau_{(2p\to1s)}=1.6\times10^{-9}\text{ 秒}。\qquad(4.5.42)$$

最后我们写出原子的电偶极辐射功率，为

$$P=\Gamma_{fi}^{(S)}\hbar\omega=\frac{4e^2\omega^4}{3c^3}|\boldsymbol{x}_{fi}|^2=\frac{4}{3c^3}|\ddot{\boldsymbol{d}}_{fi}|^2。$$

$$(4.5.43)$$

此结果类似于电动力学中的结果。

4.5.4 感应吸收与受激辐射

感应吸收

原子吸收光的现象可归结为如下问题：设初态是一个 i 态电子与 n 个$(\boldsymbol{k},\ \varepsilon_\lambda)$态光子的系统，由于感应作用该电子吸收了一个光子从而转化为 f 态电子。与这个过程相应的跃迁矩阵元可表示为

$$\begin{aligned}\langle f|H_1|i\rangle=&\langle 0|a_f\frac{1}{\sqrt{(n-1)!}}(c_{k\lambda})^{n-1}\\&\cdot(\hbar\sum_{\mu\nu\boldsymbol{k}'\lambda'}g_{\mu\nu k\lambda}a_\mu^+a_\nu c_{k'\lambda'}e^{i(E_\mu-E_\nu-\hbar\omega_{k'})t/\hbar})\\&\cdot\frac{1}{\sqrt{n!}}(c_{k\lambda}^+)^n a_i^+|0\rangle。\end{aligned}\tag{4.5.44}$$

先化简算符乘积因子。利用费米子反对易关系和下面的玻色子对易关系：

$$[c_{k'\lambda'},(c_{k\lambda}^+)^n]=n(c_{k\lambda}^+)^{n-1}\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}\tag{4.5.45}$$

式(4.5.44)中算符乘积在真空态中的平均值可化为

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{n!(n-1)!}}\langle 0|a_f(c_{k\lambda})^{n-1}a_\mu^+a_\nu c_{k'\lambda'}(c_{k\lambda}^+)^n a_i^+|0\rangle\\&=\sqrt{n}\,\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{f\mu}\delta_{i\nu}。\end{aligned}\tag{4.5.46}$$

在上述推导中曾应用了 $n-1$ 个光子系统态矢量的归一化条件：

$$\begin{aligned}&\left|\frac{1}{\sqrt{(n-1)!}}(c_{k\lambda}^+)^{n-1}|0\rangle\right|^2\\&=\frac{1}{\sqrt{(n-1)!}}\langle 0|(c_{k\lambda})^{n-1}(c_{k\lambda}^+)^{n-1}|0\rangle=1。\end{aligned}\tag{4.5.47}$$

式(4.5.44)于是可简化为

$$\langle f|H_1|i\rangle=\hbar\sqrt{n}\,g_{fik\lambda}e^{i(E_f-E_i-\hbar\omega_k)t/\hbar}。\tag{4.5.48}$$

于是原子中处于 i 态的电子由于电磁场的感应作用吸收一个光子，从而转化为 f 态电子的跃迁速率为

$$w_{fi}^{(a)}=2\pi\hbar n|g_{fik\lambda}|^2\delta(E_f-E_i-\hbar\omega_k),\tag{4.5.49}$$

其中 δ-函数正确地反映了电子吸收光子过程中能量守恒的要求。

与电子自发辐射光子的情况类似，需要考虑对末态光子动量和极化求和：

$$\Gamma_{fi}^{(a)}=\sum_{k\lambda}w_{fi}^{(a)}=2\pi\hbar n\sum_{k\lambda}|g_{fik\lambda}|^2\delta(E_f-E_i-\hbar\omega_k)。$$

(4.5.50)

此结果完全类似于电子自发辐射光子过程的式(4.5.27)。利用完全类似的方法可得，在电偶极近似下单位时间感应吸收几率为

$$\Gamma_{fi}^{(a)}=n\frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{x}_{fi}|^2,\qquad(4.5.51)$$

其中

$$\omega=(E_f-E_i)/\hbar。$$

受激辐射

当初态中存在光子时，电子辐射光子过程的矩阵元一般可表示为

$$\begin{aligned}\langle f|H_1|i\rangle=\langle 0|a_f&\frac{1}{\sqrt{(n+1)!}}(c_{k\lambda})^{n+1}\\&\cdot(\hbar\sum_{\mu\nu k'\lambda'}g_{\nu\mu-k\lambda}a_\nu^+a_\mu c_{k'\lambda}^+e^{-i(E_\mu-E_\nu-\hbar\omega_k)t/\hbar})\\&\cdot\frac{1}{\sqrt{n!}}(c_{k\lambda}^+)^n a_i^+|0\rangle。\end{aligned}\qquad(4.5.52)$$

利用算符乘积正规化手续，上式可简化为

$$\langle f|H_1|i\rangle=\hbar\sqrt{n+1}\,g_{fi-k\lambda}e^{-i(E_i-E_f-\hbar\omega_k)t/\hbar}。\qquad(4.5.53)$$

电子辐射光子过程的跃迁速率为

$$\begin{aligned}\Gamma_{fi}^{(e)}&=\sum_{k\lambda}w_{fi}^{(e)}\\&=2\pi\hbar\,(n+1)\sum_{k\lambda}|g_{fi-k\lambda}|^2\delta(E_i-E_f-\hbar\omega_k)。\end{aligned}\qquad(4.5.54)$$

在电偶极近似下，其结果为

$$\Gamma_{fi}^{(e)}=(n+1)\frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{x}_{fi}|^2,\qquad(4.5.55)$$

其中 $\omega=(E_i-E_f)/\hbar$。若 $n=0$，上式便化为式(4.5.37)，这相应于自发辐射过程。上式中与 n 成正比的项称为受激辐射。受激辐射是激光技术的基础。

应当指出，虽然用量子力学方案可讨论感应吸收和受激辐射过程，但却不能讨论自发辐射过程。而在这里的二次量子化方案中，我们可在一种统一的观点下方便地得到所有这些结果。

普朗克辐射公式

在辐射现象的二次量子化方案中，可以导出普朗克辐射定律。设 A 和 B 分别表示原子系统的高能态和低能态。若这种原子的系统与辐射场能按如下方式可逆地交换能量：

$$A \rightleftarrows B+\gamma, \tag{4.5.56}$$

我们就说总系统处于热平衡状态。处于 A 态和 B 态的原子数分别用 $N(A)$ 和 $N(B)$ 表示，则热平衡条件是

$$N(B)\Gamma^{(a)}_{AB}=N(A)\Gamma^{(e)}_{BA}; \tag{4.5.57}$$

$$\frac{N(B)}{N(A)}=\frac{e^{-E_B/kT}}{e^{-E_A/kT}}=e^{\hbar\omega/kT}, \tag{4.5.58}$$

其中 $\hbar\omega=E_A-E_B$，k 和 T 分别为玻耳兹曼常数和绝对温度，且 $\Gamma^{(e)}_{BA}$ 包含有自发辐射和受激辐射过程的贡献。将式(4.5.51)和(4.5.55)代入式(4.5.57)，并注意到 $|\boldsymbol{x}_{AB}|^2=|\boldsymbol{x}_{BA}|^2$，因此有

$$\frac{\Gamma^{(e)}_{BA}}{\Gamma^{(a)}_{AB}}=\frac{n+1}{n}=\frac{N(B)}{N(A)}=e^{\hbar\omega/kT},$$

即

$$n=\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1}。 \tag{4.5.59}$$

***4.5.5 光子被原子中电子的散射**

前面我们讨论了原子中的电子辐射或吸收光子的过程，现在来讨论光子被原子中电子散射的过程。设散射前原子处于 A 态，入射光子的状态由 $(\boldsymbol{k}, \varepsilon_\lambda)$ 表示；散射后原子处于 B 态，出射光子的状态用 $(\boldsymbol{k}', \varepsilon_{\lambda'})$ 表示。为简单起见，这里仅考虑单电子原子，且忽略自旋磁矩的作用。

由式(4.5.8)和(4.5.9)可知，相互作用哈密顿算符包括两部份：与 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$ 线性有关的 H_1 项和与 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}$ 有关的 H_2 项。$\boldsymbol{A}$ 的作用使光子数改变 1，所以在一级近似下 H_1 对光子数目没有改变

的散射过程并无贡献。另一方面，H_2 中包含的 c^+c 和 cc^+ 项的作用不改变光子数，如果 c 和 c^+ 的态指标分别为 $(\boldsymbol{k}, \lambda)$ 和 $(\boldsymbol{k}', \lambda')$，则对我们所讨论的散射过程就有贡献。在二级近似下 H_2 的跃迁矩阵元为

$$\begin{aligned}
&\langle B; \boldsymbol{k}', \varepsilon_{\lambda'} | H_2(t) | A; \boldsymbol{k}, \varepsilon_\lambda \rangle \\
&= \langle B; \boldsymbol{k}', \varepsilon_{\lambda'} \left| \frac{e^2}{2mc^2} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t) \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t) \right| A; \boldsymbol{k}, \varepsilon_\lambda \rangle \\
&= \langle B; \boldsymbol{k}', \varepsilon_{\lambda'} \left| \frac{e^2}{2mc^2} (c_{\boldsymbol{k}\lambda} c^+_{\boldsymbol{k}'\lambda'} + c^+_{\boldsymbol{k}'\lambda'} c_{\boldsymbol{k}\lambda}) \frac{2\pi\hbar c^2}{V\sqrt{\omega\omega'}} \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'} \right. \\
&\quad \times \exp[i(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \cdot \boldsymbol{x} - i(\omega - \omega')t] \, | A; \boldsymbol{k}, \varepsilon_\lambda \rangle \\
&= \frac{e^2}{2mc^2} \frac{2\pi\hbar c^2}{V\sqrt{\omega\omega'}} 2\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'} \exp[-i(\omega - \omega')t] \langle B | A \rangle,
\end{aligned} \tag{4.5.60}$$

其中最后一步推导中已用了长波近似，将 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$ 和 $e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}}$ 用 1 代替。对上式求积分，可得到 t 时刻出现态 $|B; \boldsymbol{k}', \varepsilon_{\lambda'}\rangle$ 的概率幅：

$$\begin{aligned}
c^{(1)}(t) &= \langle B; \boldsymbol{k}', \varepsilon_{\lambda'} \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H_2(t_1) \, dt_1 \right| A; \boldsymbol{k}, \varepsilon_\lambda \rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar} \frac{e^2}{2mc^2} \frac{2\pi\hbar c^2}{V\sqrt{\omega\omega'}} 2\delta_{AB} \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'} \\
&\quad \cdot \int_0^t \exp[i(E_B + \hbar\omega' - E_A - \hbar\omega)t_1/\hbar] dt_1 .
\end{aligned} \tag{4.5.61}$$

现在再来考察 H_1 的贡献。虽然 H_1 在一级近似下对散射过程没有贡献，但在二级近似下是有贡献的，且这种二级近似下的贡献与 H_2 在一级近似下的贡献具有同数量级。H_1 在二级近似下对跃迁幅的贡献可表示为

$$c^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \langle B; \boldsymbol{k}', \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'} \left| \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \, H_1(t_2) H_1(t_1) \right| A, \boldsymbol{k}, \varepsilon_\lambda \rangle . \tag{4.5.62}$$

有两种可能使 $c^{(2)}(t)$ 不为零：(1) $H_1(t_1)$ 中有一态指标为 $(\boldsymbol{k}, \varepsilon_\lambda)$ 的光子消灭算符且 $H_1(t_2)$ 中有一态指标为 $(\boldsymbol{k}', \varepsilon_{\lambda'})$ 的光子产生算

符，这种项表示处于 A 态的电子先在时刻 t_1 吸收初态光子而转变为中间态；然后在其后时刻 t_2 放出末态光子。(2) $H_1(t_1)$ 中有一态指标为 $(\boldsymbol{k}', \varepsilon_{\lambda'})$ 的光子产生算符且 $H_1(t_2)$ 中有一态指标为 $(\boldsymbol{k}, \varepsilon_\lambda)$ 的光子消灭算符，这种项表示 A 态电子先在时刻 t_1 放出末态光子；然后再在其后某时刻 t_2 吸收初态光子。这两种过程可分别用如图 5.1(a) 和 (b) 所示的费曼图表示，其中实线表示电子线；波纹线表示光子线。图 4.5.1(c) 表示由式(4.5.61)给出的由 H_2 引起的一级过程，这种费曼图也称为"海鸥(seagull)图"。

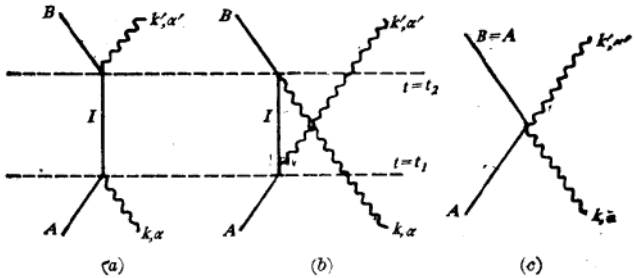

图 4.5.1 电子光子散射费曼(Feynman)图

将 H_1 的具体形式代入式 (4.5.62)，利用算符乘积正规化手续及中间态展开可得

$$
\begin{aligned}
c^{(2)}(t) = & \frac{1}{(i\hbar)^2}\frac{2\pi\hbar c^2}{V\sqrt{\omega\omega'}}\left(-\frac{e}{mc}\right)^2\int_0^t dt_2\int_0^{t_2} dt_1 \\
& \cdot\{\sum_I \langle B|\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}|I\rangle \exp[i(E_B-E_I+\hbar\omega')t_2/\hbar] \\
& \cdot\langle I|\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda|A\rangle \exp[i(E_I-E_A-\hbar\omega)t_1/\hbar] \\
& +\sum_I \langle B|\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda|I\rangle \exp[i(E_B-E_I-\hbar\omega)t_2/\hbar] \\
& \cdot\langle I|\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}|A\rangle \exp[i(E_I-E_A+\hbar\omega')t_1/\hbar]\} \\
= & -\frac{2\pi\hbar c^2}{i\hbar V\sqrt{\omega\omega'}}\left(\frac{e}{mc}\right)^2\sum_I\left[\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{BI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}}{E_I-E_A-\hbar\omega}\right. \\
& \left.+\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{BI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}}{E_I-E_A+\hbar\omega'}\right]
\end{aligned}
$$

$$\cdot\int_0^t dt_2 \exp[i(E_B-E_A+\hbar\omega'-\hbar\omega)t_2/\hbar], \tag{4.5.63}$$

其中已应用了长波近似，且在上式第二步推导中考虑了 $t\to\infty$，从而忽略了随 t 作周期性振荡的因子。

组合 $c^{(1)}$ 和 $c^{(2)}$，并对末态光子动量求和(积分)，可得到散射过程的跃迁速率：

$$\begin{aligned}\Gamma_{fi}&=\int\frac{d}{dt}|c^{(1)}(t)+c^{(2)}(t)|^2\frac{V}{(2\pi)^3}d\boldsymbol{k}'\\&=\frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\sqrt{\omega\omega'}}\right)^2\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{\omega'^2}{\hbar c^3}d\Omega\\&\times\left|\delta_{AB}\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}-\frac{1}{m}\sum_I\left[\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{BI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}}{E_I-E_A-\hbar\omega}\right.\right.\\&\left.\left.+\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{BI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}}{E_I-E_A+\hbar\omega'}\right]\right|^2。\end{aligned}\tag{4.5.64}$$

将上述结果除以入射光子流密度 c/V，便得微分散射截面：

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega}=r_0^2\left(\frac{\omega'}{\omega}\right)&\left|\delta_{AB}\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}-\frac{1}{m}\sum_I\left[\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{BI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}}{E_I-E_A-\hbar\omega}\right.\right.\\&\left.\left.+\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{BI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}}{E_I-E_A+\hbar\omega'}\right]\right|^2,\end{aligned}\tag{4.5.65}$$

其中 $$r_0=\frac{e^2}{mc^2}\simeq\frac{1}{137}\frac{\hbar}{mc}\simeq2.82\times10^{-13}\,\mathrm{cm}$$

是经典电子半径。上述结果最早由克拉默(H. A .Kramers)和海森伯(W. Heisenberg)于 1925 年利用对应原理得到。

4.5.6 瑞利散射、汤姆逊散射和赖曼效应

瑞利散射

光子电子的弹性散射称为瑞利散射，此时 $A=B$，$\hbar\omega=\hbar\omega'$。利用 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的对易关系，中间态 I 的完全性条件以及坐标和动量算符在 H_0 表象中矩阵元之间的关系(4.5.34)，可将 $\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}$ 写为

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}=\frac{1}{i\hbar}\sum_I[(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}-(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{AI}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}]$$

$$-\frac{1}{m\hbar}\sum_I\frac{1}{\omega_{IA}}[(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}+(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}], \tag{4.5.66}$$

其中$\omega_{IA}=(E_I-E_A)/\hbar$。因此式(4.5.65)中三项和式因子可化为

$$\begin{aligned}&\delta_{AA}\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}-\frac{1}{m\hbar}\sum_I\left[\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}}{\omega_{IA}-\omega}\right.\\&\left.+\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}}{\omega_{IA}+\omega}\right]\\&=-\frac{\omega}{m\hbar}\sum_I\left[\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}}{\omega_{IA}(\omega_{IA}-\omega)}-\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}}{\omega_{IA}(\omega_{IA}+\omega)}\right]。\end{aligned} \tag{4.5.67}$$

利用展开$\frac{1}{\omega_{IA}\mp\omega}\simeq\frac{1}{\omega_{IA}}\left(1\pm\frac{\omega}{\omega_{IA}}\right)$，且注意到

$$\begin{aligned}&\sum_I\frac{1}{\omega_{IA}^2}[(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}-(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}]\\&=m^2\sum_I[(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{AI}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{AI}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}]\\&=m^2([\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'},\ \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda])_{AA}=0,\end{aligned} \tag{4.5.68}$$

我们便可得到$\omega\ll\omega_{IA}$时的瑞利截面：

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega}&=\left(\frac{r_0}{m\hbar}\right)^2\omega^4\left|\sum_I\left(\frac{1}{\omega_{IA}}\right)^3\right.\\&\quad\left.\cdot[(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}-(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}]\right|^2\\&=\left(\frac{r_0m}{\hbar}\right)^2\omega^4\left|\sum_I\left(\frac{1}{\omega_{IA}}\right)\right.\\&\quad\left.\cdot[(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{AI}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{IA}-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda)_{AI}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{IA}]\right|^2。\end{aligned} \tag{4.5.69}$$

从上述结果可以看出，散射截面与光波波长四次方成反比，这就是著名的瑞利定律。通常大气原子的ω_{IA}落在紫外区，所以大气是无色的。天空呈现蓝色，日落时的天边呈现红色等都是光与原子散射的结果。这些现象可以利用瑞利定律得到说明。

汤姆逊散射

我们现在来讨论入射光子的能量比原子中电子的束缚能大得多时的情况，这相当于光子与自由电子的散射。在这种情况下，式(4.5.65)中第二和第三项可忽略，因为此时 $\hbar\omega(-\hbar\omega')$ 比 $(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'})_{AI}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda})_{IA}/m$ 大得多。于是便得

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=r_0^2|\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}|^2。\tag{4.5.70}$$

为了讨论汤姆逊截面与光子极化的依赖关系，我们取一个坐标系，在该坐标系中 $\boldsymbol{k}$ 沿 z-轴方向，入射光子的极化 $\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda$ 沿 x-轴方向，$\boldsymbol{k}'$ 由极角 θ 和方位角 φ 表示。出射光子的极化 $\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}$ 有两个分量 $\boldsymbol{\varepsilon}'_1$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}'_2$，它们与 $\boldsymbol{k}'$ 垂直。我们取 $\boldsymbol{\varepsilon}'_1$ 垂直于由 $\boldsymbol{k}$ 与 $\boldsymbol{k}'$ 所构成的平面；$\boldsymbol{\varepsilon}'_2$ 则在该平面上，如图 4.5.2 所示。于是有关矢量分量可表示为

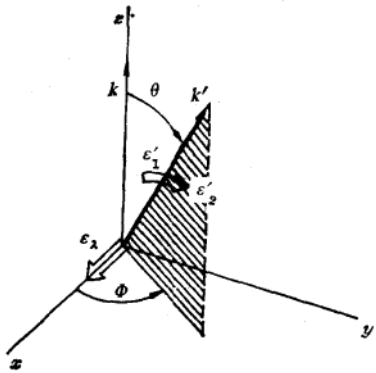

图 4.5.2

$$\boldsymbol{k}=k(0,\ 0,\ 1),$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda=(1,\ 0,\ 0),$$

$$\boldsymbol{k}'=k'(\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta),$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}'_1=(\sin\varphi,\ -\cos\varphi,\ 0),$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}'_2=(\cos\theta\cos\varphi,\ \cos\theta\sin\varphi,\ -\sin\theta)。$$

式(4.5.70)因此可化为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=r_0^2\begin{cases}\sin^2\varphi, & (\lambda'=1)\\ \cos^2\theta\cos^2\varphi。 & (\lambda'=2)\end{cases}\tag{4.5.71}$$

若实验中不分辨末态光子的极化，则散射截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=r_0^2(\sin^2\varphi+\cos^2\theta\cos^2\varphi)。\tag{4.5.72}$$

如果入射光子是非极化的，则有

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{1}{2}r_0^2(1+\cos^2\theta)。\qquad(4.5.73)$$

总截面于是为(汤姆逊截面)

$$\sigma=\int\frac{d\sigma}{d\Omega}\,d\Omega=\frac{8}{3}\pi r_0^2=6.65\times10^{-25}\,\mathrm{cm}^2。\qquad(4.5.74)$$

上述结果适用于光子能量比原子中电子的束缚能大得多时的情况。当光子能量很高，且可与电子静能(~0.5MeV)比较时，必须考虑电子运动的相对论效应。相对论性光子与电子的散射称为康普顿(Compton)散射。汤姆逊截面是康普顿散射截面的非相对论极限。

赖曼效应

克拉默-海森伯公式(4.5.65)也可应用于光对原子的非弹性散射，此时$\omega\neq\omega'$，$A\neq B$。在原子物理中这种非弹性散射现象称为赖曼效应。若初态原子处于基态，由于能量关系($\hbar\omega+E_A=\hbar\omega'+E_B$)，出射光子的能量将不会大于入射光子能量，因此在光谱中将会观察到比入射光更红的谱线(斯托克斯线)。反之，若初态原子处于激发态，则在光谱中会观察到比入射光更紫的谱线(反斯托克斯线)。

习　题

4-1　证明式(4.1.23)。

4-2　设多体系统的哈密顿算符为

$$H=\sum_i\varepsilon_i a_i^+a_i+\frac{1}{2}\sum_{ijkl}a_i^+a_j^+a_ka_l\langle ij|V|kl\rangle。$$

求一级微扰近似下系统能量$E_0=\sum_i\varepsilon_i a_i^+a_i$的修正，区分玻色子系统和费米子系统两种情况。

4-3　设系统的哈密顿算符为

$$H=\hbar\omega[b^+b-F(b^++b)],$$

利用(1)波格留波夫正则变换方法；(2)通过算符$U=\exp[\lambda(b^+-b)]$

施行的幺正变换方法，求系统哈密顿算符的本征值和本征矢。

4-4 设系统的哈密顿算符为

$$H=\hbar\omega\left[\left(b^{+}b+\frac{1}{2}\right)+a(b^{+2}+b^{2})\right],$$

其中 b 和 b^{+} 为玻色算符。求系统的准粒子谱。

4-5 设系统的哈密顿算符为

$$H=\alpha A^{+}A+\beta B^{+}B+\gamma(A^{+}B^{+}+AB),$$

其中 A 和 B 为互相独立的玻色子算符。求系统的基态能和激发能。

4-6 设 $\sigma_{+}=a^{+}$, $\sigma_{-}=a$, $\sigma_{z}=\frac{1}{2}(a^{+}a-aa^{+})$，其中 a 和 a^{+} 为费米算符。证明由此定义的 $\sigma_i(i=1,2,3;\sigma_{\pm}=\sigma_1\pm i\sigma_2)$ 满足角动量对易关系；导出用 a 和 a^{+} 表示的自旋 1/2 的粒子在外磁场 B 中的薛定谔方程的形式。

4-7 费米子真空态 $|0\rangle$ 作如下幺正变换：

$$|\Phi\rangle=e^{\alpha(A^{+}-A)}|0\rangle,$$

其中 α 为实参数，$A^{+}=a_1^{+}a_2^{+}$，$A=a_2a_1$，这里 a_1, a_1^{+} 和 a_2, a_2^{+} 是两组独立的费米子算符。

(1) 证明在这种情况下，幺正变换 $U=e^{\alpha(A^{+}-A)}$ 可表示为

$$U=u+va_1^{+}a_2^{+},$$

其中 $u=\cos\alpha$, $v=\sin\alpha$。

(2) 证明在上述幺正变换下费米子算符将作如下变换：

$$\tilde{a}_1=Ua_1U^{+}=ua_1-va_2^{+},$$

$$\tilde{a}_2=Ua_2U^{+}=ua_2+va_1^{+}。$$

(3) 证明上述变换是正则变换。

4-9 证明式(4.3.14)。

4-10 电子的湮灭和产生算符分别表示为 a_{ks} 和 a_{ks}^{+}，满足反对易关系：$\{a_{ks}, a_{k's'}\}=0$, $\{a_{ks}, a_{k's'}^{+}\}=\delta_{kk'}\delta_{ss'}$，其中 s 可取自旋向上态(↑)和自旋向下态(↓)。在超导现象的 BCS 理论中，电子对湮灭和产生算符定义为

$$c_k\equiv a_{-k\downarrow}a_{k\uparrow},\quad c_k^{+}\equiv a_{k\uparrow}^{+}a_{-k\downarrow}^{+}。$$

证明 $[c_k, c_{k'}]=0$, $[c_k^{+}, c_{k'}^{+}]=0$，并计算对易子 $[c_k, c_{k'}^{+}]$。

4-11 证明：式(4.3.30)也正是超导基态能量[见式(4.3.33)]取极小值，即 $\partial E_0/\partial v_k=0$，的条件。

4-12 设一个能量为 ε_0 的费米子与声子场相互作用系统的哈密顿算符为

$$H=a^{+}a[\varepsilon_{c}+\sum_{q}M_{q}(b_{q}+b_{q}^{+})]+\sum_{q}\omega_{q}b_{q}^{+}b_{q},$$

试求如下变换哈密顿算符:

$$H_{T}=e^{S}He^{-S},$$

其中

$$S=a^{+}a\sum_{q}\frac{M_{q}}{\omega_{q}}(b_{q}^{+}-b_{q}),$$

并讨论所得结果。

4-13 证明: 由式(4.4.22)定义的算符满足所有的角动量算符对易关系。

4-14 计算由于发射和吸收虚光子过程而产生的电子的自能和重正化质量。

4-15 金属或半导体的电阻起因如下: 在晶格场中运动的电子由于不断发射或吸收声子,其动量方向趋于混乱。试概要列出二次量子化理论中计算金属电阻的基本步序。

第五章　相对论性粒子的量子力学方程

§5.1　引　　言

5.1.1　相对论量子力学

建立在薛定谔方程基础上的量子力学以及二次量子化理论是非相对论性的量子理论，这类理论仅适用于低能现象。为了研究高能现象以及低能现象中的精细部份，必须采用相对论性量子理论。

在相对论情况下，许多非相对论量子力学中的基本概念必须重新考察。例如，我们必须放弃各别粒子坐标的概念。在非相对论量子力学中，原则上可任意精细地定域粒子的空间坐标和时间。于是可以把描述状态的波函数 $\psi(\boldsymbol{x}, t)$ 解释为某时刻 t 在空间点 $\boldsymbol{x}$ 处发现该粒子的概率幅。但是在相对论情况下，由于动能和质能(即静质量)之间可以互相转化，粒子数不一定守恒。或者说，为了保持单粒子概念并保持粒子数守恒，粒子的能量不能大于 $2mc^2$，否则将会导致新粒子的产生。如果粒子的动量不能大于 $2mc$，即 $p \lesssim 2mc$，则由海森伯不确定关系，有

$$\Delta x \gtrsim \frac{\hbar}{2p} \sim \frac{\hbar}{4mc}, \tag{5.1.1}$$

这意味着该粒子不能定域在线度小于 $\hbar/4mc$($\hbar/mc$ 为粒子的康普顿波长)的体积内。这表明，在任何情况下如果要保持单粒子概念，则必须放弃粒子坐标的概念。尤其当 $m=0$ 时，粒子坐标的概念完全没有意义。

由于位置不能完全确定（$\Delta x \gtrsim \hbar/mc$），时间也不能完全确定（$\Delta t = \frac{\Delta x}{c} \gtrsim \hbar/mc^2$），因此波函数 $\psi(\boldsymbol{x}, t)$不再能够与粒子出现的几率相联系。在非相对论情况下，光速 $c \to \infty$，因此 Δx 和 Δt 原则上可以等于零。

现在再来考察粒子的动量。在相对论情况下速度的不确定性不会大于光速 c，即 $\Delta x \lesssim c\Delta t$，因此有

$$\Delta p \gtrsim \frac{\hbar}{\Delta x} \gtrsim \frac{\hbar}{c\Delta t}。 \tag{5.1.2}$$

在定态情况下，$\Delta t \to \infty$，因此 Δp 原则上可取为零。这时动量空间中的几率密度 $\rho(\boldsymbol{p})$ 概念依然可以保留。所以在相对论量子理论中常采用动量表象。

5.1.2 符号与约定

为了与现代量子理论参考文献的表述方式一致，本章中将常常采用如下记号和约定。

单位

除特别指明外，本章公式常采用

$$\hbar = c = 1 \tag{5.1.3}$$

的单位制。在这种单位制中，时间与长度的量纲相同；能量、动量和质量的量纲相同，且等于长度量纲的倒数；电荷则是无量纲的常数（$e^2 = e^2/\hbar c \simeq 1/137$）。

坐标

我们常采用拉丁字母代表三维矢量的分量；希腊字母代表四维矢量的分量。因此一个粒子的空间坐标分量表示为

$$x^i \equiv (x^1, x^2, x^3) \equiv (x, y, z)。 \tag{5.1.4}$$

四维时空坐标分量常表示为

$$x^\mu \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (ct, x, y, z)。 \tag{5.1.5}$$

度规张量，逆变和协变指标

定义如下张量：

$$g^{\mu\nu}=g_{\mu\nu}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{bmatrix}, \tag{5.1.6}$$

并称它为度规张量，或更完全地称为“膺欧几里德度规”的度规张量。在这种度规下，对于一个矢量或张量来说，需要区分它的“逆变分量”和“协变分量”。按照约定，逆变指标记为上指标；协变指标记为下指标。例如式(5.1.5)表示的是四维坐标矢量的逆变分量。与之对应的协变分量是

$$x_\mu \equiv g_{\mu\nu}x^\nu, \tag{5.1.7}$$

其中重复指标求和。利用式(5.1.5)和(5.1.6)，不难由上式可得

$$\begin{aligned}x_\mu &\equiv (x_0,\ x_1,\ x_2,\ x_3)=(x^0,\ -x^1,\ -x^2,\ -x^3)\\&=(ct,\ -x,\ -y,\ -z)。\end{aligned} \tag{5.1.8}$$

式(5.1.5)和(5.1.8)也可简单地记为

$$x^\mu=(ct,\ \boldsymbol{x}),\ x_\mu=(ct,\ -\boldsymbol{x})。 \tag{5.1.9}$$

此外，由式(5.1.6)可知，$g^{\mu\nu}$ 和 $g_{\mu\nu}$ 都是对称张量。且有

$$g_{\mu\nu}g^{\nu\rho}=\delta_{\mu\rho},\ g^{\mu\nu}g_{\nu\rho}=\delta_{\mu\rho}。 \tag{5.1.10}$$

由上式可知，与式(5.1.7)相应的逆变换可表示为

$$x^\mu=g^{\mu\nu}x_\nu。 \tag{5.1.11}$$

四维动量矢量的逆变分量定义为

$$p^\mu \equiv mU^\mu \equiv m\frac{dx^\mu}{d\tau}=\left(\frac{E}{c},\ \boldsymbol{p}\right), \tag{5.1.12}$$

其中 U^μ 为四维速度，τ 为本征时。与式(5.1.12)相应的动量矢量的协变分量为

$$p_\mu=g_{\mu\nu}p^\nu=\left(\frac{E}{c},\ -\boldsymbol{p}\right)。 \tag{5.1.13}$$

标量积

两个四维矢量 a 和 b 的标量积由收缩其中一个矢量的逆变指标与另一个矢量的协变指标而得到，即 $a_\mu b^\mu$ 或 $a^\mu b_\mu$。由定义(5.1.9)，显然有

$$a_\mu b^\mu = a^\mu b_\mu = a^0 b^0 - \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}。 \tag{5.1.14}$$

两个四维矢量的标量积是一个四维标量。根据上式结果，相对论中的一个重要的不变量——四维间隔现在可表示为

$$S \equiv x_\mu x^\mu = (ct)^2 - \boldsymbol{x}^2 \tag{5.1.15}$$

另一个重要的与粒子的能量 E 和动量 $\boldsymbol{p}$ 有关的不变量由四维动量的协变分量和逆变分量收缩(或标积)而得到：

$$p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - \boldsymbol{p}^2 = m^2c^2, \tag{5.1.16}$$

其中 m 为粒子的静质量。上式最后一步是考虑到粒子静系而得到。由式(5.1.16)可得

$$E^2 = \boldsymbol{p}^2c^2 + m^2c^4。 \tag{5.1.17}$$

在 $\hbar = c = 1$ 的单位制中，上式粒子的能量-动量关系记为

$$E^2 = p^2 + m^2。 \tag{5.1.18}$$

可见，无论采用(赝)欧氏空间，还是如通常相对论中采用虚时间轴的闵可夫斯基(闵氏)空间，其结果是一样的。不过，在欧氏空间中时间轴为实轴，且要引进度规张量。

梯度，微分算符

三维梯度算符为 $\nabla \equiv (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$。利用式(5.1.7)，有

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x_\nu}{\partial x^\mu}\frac{\partial}{\partial x_\nu} = g_{\nu\rho}\frac{\partial x^\rho}{\partial x^\mu}\frac{\partial}{\partial x_\nu}$$

$$= g_{\nu\rho}\delta_{\rho\mu}\frac{\partial}{\partial x_\nu} = g_{\nu\mu}\frac{\partial}{\partial x_\nu},$$

即

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = g_{\mu\nu}\frac{\partial}{\partial x_\nu}, \tag{5.1.19}$$

其中已注意到 $g_{\mu\nu} = g_{\nu\mu}$。上述结果表明，$\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ 构成一矢量的协变分量；而 $\frac{\partial}{\partial x_\mu}$ 则为逆变分量。因此我们有

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right),$$
$$\partial^\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right)。 \tag{5.1.20}$$

达朗伯算符是协变梯度和逆变梯度的标积，是一个标量算符：

$$\Box \equiv \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 。 \tag{5.1.21}$$

电磁场张量；逆变张量、协变张量和混合张量

描写电磁场的电磁势是四维空间的一个矢量的分量。四维势矢量的逆变分量为

$$\boldsymbol{A}^\mu = (\varphi, \boldsymbol{A}) 。 \tag{5.1.22}$$

电磁场强度则由下列定义给出(高斯单位制)：

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}, \quad \boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} 。 \tag{5.1.23}$$

因此不难验证，电磁场强度是如下定义的一个四维反对称(逆变)张量的分量：

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu, \tag{5.1.24}$$

或记为方矩阵形式：

$$F^{\mu\nu} \doteq \begin{bmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{bmatrix} 。 \tag{5.1.25}$$

利用度规张量，可定义如下协变电磁场张量：

$$F_{\mu\nu} = g_{\mu\rho} g_{\nu\tau} F^{\rho\tau} = g_{\mu\rho} F^{\rho\tau} g_{\tau\nu}, \tag{5.1.26}$$

或

$$F_{\mu\nu} \doteq \begin{bmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3 \\ -E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ -E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ -E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{bmatrix} 。 \tag{5.1.27}$$

对于任意的二阶张量，在(赝)欧氏度规下还可定义混合张量：

$$F^\mu{}_\nu = g^{\mu\rho} F_{\rho\nu} = F^{\mu\rho} g_{\rho\nu}, \tag{5.1.28}$$

$$F_\mu{}^\nu = g_{\mu\rho} F^{\rho\nu} = F_{\mu\rho} g^{\rho\nu} 。 \tag{5.1.29}$$

两个张量或矢量之间，以及张量和矢量之间的标积可通过它们分量指标的缩并实现，且这种缩并过程总是发生在逆变指标和

协变指标之间。

最后，由电磁场强度所构成的二次型不变量显然是

$$F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}=\mathrm{Tr}(F_{协}\widetilde{F}_{逆})=2(\boldsymbol{E}^2-\boldsymbol{B}^2)。\qquad(5.1.30)$$

§5.2 克莱因-戈登方程

5.2.1 克莱因-戈登(KG)方程

我们先来讨论一个无自旋的相对论性自由粒子的量子力学方程。在非相对论情况下，质量为m的粒子的能量和动量之间的关系为$E=\boldsymbol{p}^2/2m$。量子力学中自由粒子的动力学方程可通过这个关系，并作如下代换：

$$E\to i\frac{\partial}{\partial t},\quad \boldsymbol{p}\to\hat{\boldsymbol{p}}=-i\nabla,\qquad(5.2.1)$$

然后再作用于波函数而得到，

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=-\frac{1}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x},t)。\qquad(5.2.2)$$

现在我们将上述由经典理论到量子力学的形式过渡程序推广到相对论性情况。在相对论力学中，经典粒子的能动量关系是

$$E^2=\boldsymbol{p}^2+m^2。\qquad(5.2.3)$$

由于在四维表示中，$p^2\equiv p_\mu p^\mu=E^2-\boldsymbol{p}^2$，所以上式也可记为

$$p^2-m^2=0。\qquad(5.2.4)$$

相应的量子力学方程由上式通过式(5.2.1)的代换

$$p^\mu\to\hat{p}^\mu=i\partial^\mu\qquad(5.2.5)$$

而得到，其形式为

$$(\hat{p}^2-m^2)\psi(x)=0,\qquad(5.2.6)$$

其中四维算符$\hat{p}^2=\hat{p}_\mu\hat{p}^\mu=-\partial_\mu\partial^\mu=-\Box$，因此上述算符方程也可记为

$$(\Box+m^2)\psi(x)=0,\qquad(5.2.7)$$

其中波函数内的宗量x是四维坐标。式(5.2.6)或(5.2.7)就是相

对论性粒子的量子力学方程，称为克莱因-戈登(Klein-Gordon)方程。

5.2.2 连续性方程

由 KG 方程可导出连续性方程。在薛定谔量子力学中通过连续性方程得到了概率密度和概率流密度表式。概率守恒定律是量子力学概率解释的一个重要依据；概率流密度表式则广泛应用于非定态问题(如一维势问题中反射系数和透射系数的计算，三维势散射问题中截面的计算等)。

为了得到 KG 理论中的连续性方程，将式(5.2.7)记为

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m^2)\psi = 0。 \tag{5.2.8}$$

ψ 的复共轭所满足的方程是

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m^2)\psi^* = 0。 \tag{5.2.9}$$

于是，以 ψ^* 乘式(5.2.8)，ψ 乘式(5.2.9)，然后将所得结果相减，可得

$$\psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* = 0。 \tag{5.2.10}$$

上式也可记为

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \tag{5.2.11}$$

其中四维流定义为

$$j^\mu = A(\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*)。 \tag{5.2.12}$$

其中 A 为任意常数。注意到四维流的逆变分量定义：$j^\mu = (\rho, \boldsymbol{j})$，以及 $\partial^\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right)$，则有

$$\rho \equiv j^0 = A\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi\right), \tag{5.2.13}$$

$$\boldsymbol{j} = -A[\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*)\psi]。 \tag{5.2.14}$$

为了确定式(5.2.12)或相应的三维表式(5.2.13)和(5.2.14)中的常数 A，我们需要作某些物理上的讨论，而不是仅仅通过形式逻辑的推导。这个问题我们将在下面两小节中讨论。

5.2.3 过渡到非相对论情况

利用如下变换

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = \varphi(\boldsymbol{x}, t) e^{-imt} \tag{5.2.15}$$

可将KG方程化为非相对论性粒子的动力学方程，即薛定谔方程。

粒子的能量等于动能E_k与静能m之和，即$E=E_k+m$。在非相对论近似下，动能远小于静能，即$E_k \ll m$。因此有

$$\left|i\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right| \sim E_k\varphi \ll m\varphi。 \tag{5.2.16}$$

利用这个结果，可得如下近似：

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}-im\varphi\right)e^{-imt}\simeq -im\varphi e^{-imt}, \tag{5.2.17}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}-2im\frac{\partial\varphi}{\partial t}-m^2\varphi\right)e^{-imt}$$

$$\simeq\left(-2im\frac{\partial\varphi}{\partial t}-m^2\varphi\right)e^{-imt}。 \tag{5.2.18}$$

将上述结果代入KG方程，便得

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{1}{2m}\nabla^2\varphi, \tag{5.2.19}$$

这就是薛定谔方程。

如果将式(5.2.17)和(5.2.18)代入式(5.2.13)和(5.2.14)，可得

$$\rho=A(-2im)\varphi^*\varphi, \tag{5.2.20}$$

$$\boldsymbol{j}=-A[\varphi^*\nabla\varphi-(\nabla\varphi^*)\varphi]。 \tag{5.2.21}$$

由此可见，为了在非相对论量子力学中赋予$\varphi^*\varphi$概率密度解释，应令$A=\frac{i}{2m}$。于是得到薛定谔理论中的概率密度和概率流密度表式：

$$\rho=\varphi^*\varphi, \tag{5.2.22}$$

$$\boldsymbol{j}=\frac{1}{2im}[\varphi^*\nabla\varphi-(\nabla\varphi^*)\varphi]。 \tag{5.2.23}$$

5.2.4 正解和负解

为了得到正确的非相对论近似结果，相对论情况下的式(5.2.13)中应取$A=\frac{i}{2m}$，因而有

$$\rho=\frac{i}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}-\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right)。\qquad(5.2.24)$$

但是应当指出，KG 方程是一个关于时间的二阶微分方程，因此初始条件包括 ψ 和它的一阶导数 $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 的值。由于 ψ 和 $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 在某一时刻可以任意给定，所以由式(5.2.24)所定义的 ρ 可取正值、负值或零，即它不是"正定的"。这个情况与薛定谔理论($\rho=\psi^*\psi\geqslant 0$)不同。因此现在我们不能再将式(5.2.24)表示的 ρ 解释为概率密度，因为概率密度必须是正定的。

上述问题同样发生在求平面波解的结果中。自由粒子平面波解是量子力学和二次量子化理论中很重要的解，它常常作为函数空间的基底构造表象，用来描述量子系统的状态。

引进一四维矢量 $p^\mu\equiv(\varepsilon,\ \boldsymbol{p})$，其中空间分量 $\boldsymbol{p}$ 为 KG 粒子的动量；时间分量设为 ε，具有能量量纲。应当注意，现在我们并不能断言 ε 就是 KG 粒子的能量。动量为 $\boldsymbol{p}$ 的 KG 粒子的波函数可设为

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},\ t)&=A\exp(-ip^\mu x_\mu)\\&=A\exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\varepsilon t)]。\end{aligned}\qquad(5.2.25)$$

将上式代入 KG 方程，可确定 ε。结果为

$$\varepsilon=\lambda E_p\quad(\lambda=\pm1),\qquad(5.2.26)$$

其中

$$E_p=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}。\qquad(5.2.27)$$

上述结果表明，对于动量确定的自由 KG 粒子，其平面波态有两种态：

$$\begin{aligned}\psi_+&=A_+\exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-E_pt)],\\\psi_-&=A_-\exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}+E_pt)]。\end{aligned}\qquad(5.2.28)$$

上述两种解可统一地记为

$$\psi_\lambda=A_\lambda\exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\lambda E_pt)]\quad(\lambda=\pm1)。\qquad(5.2.29)$$

若将式(5.2.29)代入式(5.2.24)，可得

$$\rho_\lambda=\lambda\frac{E_p}{m}\psi_\lambda^+\psi_\lambda。\qquad(5.2.30)$$

可见对于负解($\lambda=-1$)，$\rho_\lambda<0$。概率为负，这显然是不合理的。

泡利(Pauli)和韦斯柯夫(Weisskoft)1934年的解释解决了这个负概率困难。它们将式(5.2.12)记为

$$j^\mu=\frac{ie}{2m}(\psi^*\partial^\mu\psi-\psi\partial^\mu\psi^*), \tag{5.2.31}$$

其中 e 为粒子的电荷。上式的分量式(5.2.13)和(5.2.14)为

$$\rho=\frac{ie}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}-\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right), \tag{5.2.32}$$

$$\boldsymbol{j}=\frac{e}{2im}[\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi]。 \tag{5.2.33}$$

上述引进的 ρ 和 $\boldsymbol{j}$ 应解释为电荷密度和电流密度，式(5.2.11)则应解释为电荷守恒定律。式(5.2.28)正解和负解分别代表具有相反电荷的 KG 粒子状态。式(5.2.30)现在应记为

$$\rho_\lambda=\lambda\frac{eE_p}{m}\psi_\lambda^*\psi_\lambda。 \tag{5.2.34}$$

所以可以认为现在的理论只是单电荷理论，而不是单粒子理论。

5.2.5 KG 方程的薛定谔方程形式

在上面关于动量确定的波函数的讨论中，我们发现 KG 粒子的波函数中与 $\boldsymbol{p}$ 相联系的四维矢量 p^μ 的零分量 ε 可取 $\pm E_p$。因此显然不能像经典粒子理论中那样直接将 ε 解释为 KG 粒子的能量。因为自由粒子的能量应当是恒正的。

在薛定谔量子力学中，粒子的能量是它的哈密顿算符的平均值。为了得到相应的 KG 粒子的哈密顿算符。我们应设法将 KG 方程表示为薛定谔方程形式。为此，设

$$\psi=\varphi+\chi;\quad i\frac{\partial\psi}{\partial t}=m(\varphi-\chi)。 \tag{5.2.35}$$

上式的逆变换关系为

$$\begin{aligned}\varphi&=\frac{1}{2}\left(\psi+\frac{i}{m}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right),\\ \chi&=\frac{1}{2}\left(\psi-\frac{i}{m}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)。\end{aligned} \tag{5.2.36}$$

由上述关系及 KG 方程。可得

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{1}{2m}\nabla^2(\varphi+\chi)+m\varphi,$$
$$i\frac{\partial\chi}{\partial t}=\frac{1}{2m}\nabla^2(\varphi+\chi)-m\chi。 \tag{5.2.37}$$

令

$$\psi=\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix}, \tag{5.2.38}$$

同时引进四个与描写自旋的泡利矩阵完全类似的矩阵:

$$\tau_1=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\quad\tau_2=\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix}\quad\tau_3=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\quad I=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}, \tag{5.2.39}$$

它们满足如下关系式:

$$\tau_i\tau_j=\delta_{ij}+i\varepsilon_{ijk}\tau_k, \tag{5.2.40}$$
$$[\tau_i,\ \tau_j]=2i\varepsilon_{ijk}\tau_k, \tag{5.2.41}$$
$$[\tau_i,\ \tau_j]=2\delta_{ij}, \tag{5.2.42}$$

则式(5.2.37)便可统一地表示为

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t}=H\Psi, \tag{5.2.43}$$

其中算符 H 为

$$H=(\tau_3+i\tau_2)\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+m\tau_3, \tag{5.2.44}$$

或

$$H=\begin{bmatrix}1&1\\-1&-1\end{bmatrix}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}m。 \tag{5.2.45}$$

式(5.2.43)就是 KG 方程的薛定谔方程形式。但是应当指出，式中的哈密顿算符 H 并不是厄密的。所以还不能直接由它计算 KG 粒子的能量本征值；同时也不能简单地对 Ψ 赋予概率解释。为此，我们必须寻找一个表象，在这个表象中哈密顿算符是厄密的。

不过，在进一步推进我们的讨论之前先来考察 KG 粒子波函数的归一化条件。将式(5.2.35)代入式(5.2.32)和(5.2.33)，利

用式(5.2.38)和式(5.2.39),并注意到 $\tau_3(\tau_3+i\tau_2)=(1+\tau_1)$,可得

$$\rho=e(\varphi^*\varphi-\chi^*\chi)=e\Psi^+\tau_3\Psi, \tag{5.2.46}$$

$$\boldsymbol{j}=\frac{e}{2im}[\Psi^+(1+\tau_1)\nabla\Psi-(\nabla\Psi^+)(1+\tau_1)\Psi]。 \tag{5.2.47}$$

由式(5.2.46)可知,存在一个守恒量

$$Q\equiv\int\rho d\boldsymbol{x}=e\int\Psi^+\tau_3\Psi\,d\boldsymbol{x}。 \tag{5.2.48}$$

于是可得波函数的归一化条件,为

$$\int\Psi^+\tau_3\Psi\,d\boldsymbol{x}=\int(\varphi^*\varphi-\chi^*\chi)d\boldsymbol{x}=\pm1, \tag{5.2.49}$$

其中对于正解取1;对于负解取-1。应当注意,这里的归一化条件并非来自粒子的概率分布。

在体积V中自旋为0动量为$\boldsymbol{p}$的相对论性自由粒子波函数现在可设为

$$\Psi=\frac{1}{\sqrt{V}}\begin{bmatrix}\varphi_0\\ \chi_0\end{bmatrix}\exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\varepsilon t)]。 \tag{5.2.50}$$

将上式代入KG方程的薛定谔方程形式(5.2.43),可得

$$\begin{aligned}(\varepsilon-m)\varphi_0&=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}(\varphi_0+\chi_0),\\ (\varepsilon+m)\chi_0&=-\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}(\varphi_0+\chi_0)。\end{aligned} \tag{5.2.51}$$

这组关于φ_0和χ_0的线性方程组存在非零解的条件是系数行列式为零(久期方程):

$$\begin{vmatrix}\varepsilon-\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+m\right) & -\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\\ \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} & \varepsilon+\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+m\right)\end{vmatrix}=0。 \tag{5.2.52}$$

上式的解即为

$$\varepsilon=\pm E_p,\ E_p=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}。 \tag{5.2.53}$$

属于本征值 $\varepsilon=\pm E_p$ 的本征函数 Ψ_+ 和 Ψ_- 分别为

$$\Psi_+=\frac{1}{\sqrt{V}}\begin{bmatrix}\dfrac{m+E_p}{2\sqrt{mE_p}}\\ \dfrac{m-E_p}{2\sqrt{mE_p}}\end{bmatrix}e^{i(p\cdot x-E_pt)}. \tag{5.2.54}$$

$$\Psi_-=\frac{1}{\sqrt{V}}\begin{bmatrix}\dfrac{m-E_p}{2\sqrt{mE_p}}\\ \dfrac{m+E_p}{2\sqrt{mE_p}}\end{bmatrix}e^{i(p\cdot x+E_pt)}. \tag{5.2.55}$$

它们满足归一化条件(5.2.49)。Ψ_+ 描述了“正电荷态”的粒子的运动。称为 KG 方程的“正解”；Ψ_- 描述了“负电荷态”的粒子的运动，称为“负解”。由于历史原因，这两类解也常分别称为“正能解”和“负能解”。

在非相对论近似下，$E_p=E_k+m\simeq m$，因此 $\varphi_{0+}=\dfrac{m+E_p}{2\sqrt{mE_p}}\simeq 1$。$\chi_{0+}=\dfrac{m-E_p}{2\sqrt{mE_p}}\simeq 0$；$\varphi_{0-}\simeq 0$，$\chi_{0-}\simeq 1$。此结果表明，在非相对论近似下，对于正电荷态 $\varphi_{0+}\gg\chi_{0+}$；对于负电荷态 $\chi_{0-}\gg\varphi_{0-}$ 所以也常称 φ_{0+} 和 χ_{0-} 为“大分量”；而 χ_{0+} 和 φ_{0-} 为“小分量”。

5.2.6 Feshbach-Villas 表示

现在我们来寻找一个表象，在该表象中式(5.2.44)或(5.2.45)表示的哈密顿算符是厄密的。这个表示称为费希巴赫-维拉斯(Feshbach-Villars)表示或 Φ 表示。该表示可通过如下变换得到：

$$\Phi=U\Psi, \tag{5.2.56}$$

其中变换 U 为

$$U=\frac{(E_p+m)+\tau_1(E_p-m)}{2\sqrt{mE_p}}$$

$$=\frac{1}{2\sqrt{mE_p}}\begin{bmatrix}E_p+m & E_p-m\\ E_p-m & E_p+m\end{bmatrix} \tag{5.2.57}$$

其中 $E_p=\sqrt{p^2+m^2}$。这个变换可称为 FV 变换，它有如下特性：

$$U=U^+, \tag{5.2.58}$$

$$U^{-1}=\tau_3U^+\tau_3=\frac{(E_p+m)-\tau_1(E_p-m)}{2\sqrt{mE_p}}。\quad (5.2.59)$$

由于式(5.2.59)的特性，FV 变换并非通常意义下的幺正变换，而称它为 Φ 幺正或 τ_3 幺正变换。

在 Φ 表象中，式(5.2.44)所表示的哈密顿算符的形式化为

$$H_\Phi=UHU^{-1}=\tau_3E_p, \quad (5.2.60)$$

此结果表明，H_Φ 是厄密算符，且其本征值就是 $\pm E_p$。

在 Φ 表象中，不难证明式(5.2.54)和(5.2.55)所表示的自由 KG 粒子的正解和负解波函数可化为如下简单形式：

$$\Phi_+=U\Psi_+=\frac{1}{\sqrt{V}}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}e^{i(p\cdot x-E_pt)} \quad (5.2.61)$$

$$\Phi_-=U\Psi_-=\frac{1}{\sqrt{V}}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}e^{i(p\cdot x+E_pt)}。 \quad (5.2.62)$$

从上述讨论中可以看出，由于归一化条件(5.2.49)，KG 粒子的电荷为

$$Q=e\int\Psi^+\tau_3\Psi d\boldsymbol{x}, \quad (5.2.63)$$

能量为

$$E=\int\Psi^+\tau_3H\Psi d\boldsymbol{x}。 \quad (5.2.64)$$

所以在相对论性量子力学中应一般地引进“τ_3 平均”：力学量 L 在态 Ψ 中的平均值为

$$\langle L\rangle=\int\Psi^+\tau_3L\Psi d\boldsymbol{x}。 \quad (5.2.65)$$

不难证明，在 FV 变换下上述求 τ_3 平均值公式的形式不变：

$$\langle L\rangle=\int\Psi^+\tau_3L\Psi d\boldsymbol{x}=\int\Phi^+\tau_3L_\Phi\Phi d\boldsymbol{x}, \quad (5.2.66)$$

其中

$$L_\Phi=ULU^{-1} \quad (5.2.67)$$

为 Φ 表示中力学量 L 的形式。

最后我们指出，可以把式(5.2.57)的 FV 变换记为通常的用指数函数表示的幺正变换形式(Foldy–Wouthuysen 变换)：

$$U=e^{iS}$$

$$S=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\theta(\boldsymbol{p}) \tag{5.2.68}$$

$$\theta(\boldsymbol{p})=-\frac{i}{2}\operatorname{arc\,th}\frac{\boldsymbol{p}^2/2m}{m+\boldsymbol{p}^2/2m}。$$

[例1] 由(5.2.68)式导出(5.2.57)式。

解：(5.2.68)式可记为

$$U=e^{\beta\tau_1/2}$$

$$\operatorname{th}\beta=\frac{\boldsymbol{p}^2/2m}{m+\boldsymbol{p}^2/2m}=\frac{E_p^2-m^2}{E_p^2+m^2},$$

因为
$$U=e^{\beta\tau_1/2}=1+\frac{\beta}{2}\tau_1+\frac{1}{2!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^2+\frac{1}{3!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^3\tau_1+\cdots$$

$$=\operatorname{ch}\frac{\beta}{2}+\tau_1\operatorname{sh}\frac{\beta}{2},$$

$$\operatorname{ch}\frac{\beta}{2}=\sqrt{\frac{1}{2}(1+\operatorname{ch}\beta)},\quad \operatorname{sh}\frac{\beta}{2}=\sqrt{\operatorname{ch}^2\frac{\beta}{2}-1},$$

$$\operatorname{ch}\beta=\frac{1}{\sqrt{1-\operatorname{th}^2\beta}},$$

所以可得
$$\operatorname{ch}\frac{\beta}{2}=\frac{E_p+m}{2\sqrt{mE_p}},\quad \operatorname{sh}\frac{\beta}{2}=\frac{E_p-m}{2\sqrt{mE_p}}。$$

于是得到(5.2.57)式。

5.2.7 偶算符和奇算符

在非相对论性量子理论中，力学量之间的关系与经典量之间的关系相对应。在相对论性量子力学中这种对应关系似乎出现了问题。作为例子，我们来考察速度算符。在量子力学中，由式(5.2.44)可知，

$$\boldsymbol{v}=\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}=\frac{1}{i}[\boldsymbol{x},\ H]=(\tau_3+i\tau_3)\frac{\boldsymbol{p}}{m}。 \tag{5.2.69}$$

另一方面，我们知道在相对论经典力学中，有($c=1$)

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}=\frac{\boldsymbol{p}}{E}。 \tag{5.2.70}$$

由于矩阵 $\tau_3+i\tau_2=\begin{bmatrix}1 & 1\\ -1 & -1\end{bmatrix}$ 的本征值为零。所以由式(5.2.69)给出的粒子速度的本征值也为零。于是再一次看到，在相对论性量子理论中一个算符的本征值并不总对应于可能测量值。

从数学上说，如果算符的作用不会使正负电荷态产生混合，则在相对论性量子力学中可保持单粒子概念。以后我们将称这种算符为"单粒子算符"。如下算符称为"偶算符"(even operator)：

$$[F]\Psi_+=\Psi'_+,\quad [F]\Psi_-=\Psi'_-。\tag{5.2.71}$$

如下算符称为"奇算符"(odd operator)：

$$\{F\}\Psi_+=\Psi'_-\quad \{F\}\Psi_-=\Psi'_+。\tag{5.2.72}$$

可见，单粒子算符一定是偶算符。

任何算符可分解为偶算符和奇算符之和：

$$F=[F]+\{F\}\tag{5.2.73}$$

在 Φ 表象中讨论算符的奇偶性最方便。在 Φ 表象中，正负电荷态截然区分，因此可以断言在 Φ 表象中对角化矩阵表示的算符为偶算符；反对角化矩阵表示的算符为奇算符。任何算符在 Φ 表象中的形式显然可作如下分解：

$$\begin{aligned}F_\Phi&=\begin{bmatrix}F_{11} & F_{12}\\ F_{21} & F_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}F_{11} & 0\\ 0 & F_{22}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0 & F_{12}\\ F_{21} & 0\end{bmatrix}\\&=[F_\Phi]+\{F_\Phi\}。\end{aligned}\tag{5.2.74}$$

于是由式(5.2.60)可知，哈密顿算符 H_Φ 是偶算符；动量算符 $\boldsymbol{p}$ 与式(5.2.57)的算符 U 对易，因此有 $p_\Phi=UpU^{-1}=p=[p]$，所以也是偶算符。对于坐标算符，在动量表象中可表示为 $\boldsymbol{x}=i\nabla_p$，因此它在 Φ 表象中的表示为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_\Phi&=U\boldsymbol{x}U^{-1}=iU\nabla_pU^{-1}\\&=i\nabla_p-\frac{i\tau_1\boldsymbol{p}}{2E_p}。\end{aligned}\tag{5.2.75}$$

上式中第一项为对角化矩阵(每一非零元素为一微分算符)；第二项为反对角化矩阵(每一非零元素为 c 数)，因此坐标算符中的偶

算符或单粒子算符部分为

$$[\boldsymbol{x}_\Phi]=i\nabla_{\boldsymbol{p}}。\tag{5.2.76}$$

上述结果表明，在 Φ 表象中与动量算符 $\boldsymbol{p}_\Phi$ 存在正则共轭关系的算符是 $[\boldsymbol{x}_\Phi]=i\nabla_{\boldsymbol{p}}$。

现在再来考察 $\boldsymbol{p}$ 表象中坐标算符的偶算符部分关于时间的微商，结果为

$$\frac{d[\boldsymbol{x}_\Phi]}{dt}=[\nabla_{\boldsymbol{p}},\ H_\Phi]=\frac{\boldsymbol{p}}{E_{\boldsymbol{p}}}\tau_3。\tag{5.2.77}$$

该算符的本征值为 $\pm\frac{\boldsymbol{p}}{E_{\boldsymbol{p}}}$。这表明，$[\boldsymbol{x}_\Phi]$ 对于时间的微商与动量算符 $\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_\Phi$ 之间的联系与经典相对论力学中粒子的坐标和动量之间的联系[式(5.2.70)]相同。

§5.3 电磁场存在时的 KG 方程

5.3.1 基本方程

电磁场由电磁势 $A^\mu=(\varphi,\ \boldsymbol{A})$ 描写。当电磁场存在时，自旋为零的粒子的相对论性量子力学方程可由自由粒子的 KG 方程中的算符 p^μ 通过如下代换得到

$$p^\mu\to p^\mu-eA^\mu。\tag{5.3.1}$$

于是电磁场中 KG 粒子的量子力学方程为

$$[(p_\mu-eA_\mu)(p^\mu-eA^\mu)-m^2]\psi=0,\tag{5.3.2}$$

或

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-e\varphi\right)^2\psi=[(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})^2+m^2]\psi。\tag{5.3.3}$$

如果式(5.3.2)乘以 ψ^*，然后与 ψ^* 的方程乘以 ψ 后所得式子相减，便得到如下连续性方程：

$$\partial_\mu j^\mu=0,\tag{5.3.4}$$

$$j^\mu=i\frac{e}{2m}(\psi^*\partial^\mu\psi-\psi\partial^\mu\psi^*)-\frac{e^2}{m}A^\mu\psi^*\psi。\tag{5.3.5}$$

j^μ 的分量形式为

$$\rho=\frac{ie}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)-\frac{e^2}{m}\varphi\psi^*\psi$$

$$\boldsymbol{j}=\frac{e}{2im}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)-\frac{e^2}{m}\boldsymbol{A}\psi^*\psi \qquad (5.3.6)$$

5.3.2 规范不变性

按照规范场理论的观点，式(5.3.1)的代换规则来源于"定域规范不变性"的要求。下面的变换称为定域规范变换：

$$A^\mu\to A^{\mu\prime}=A^\mu+\frac{\partial G(x)}{\partial x_\mu}, \qquad (5.3.7)$$

$$\psi\to\psi'=e^{-ieG(x)}\psi。 \qquad (5.3.8)$$

在上述变换下，有

$$(p^\mu-eA^\mu)\psi\to(p^\mu-eA'^\mu)\psi'=\left(p^\mu-eA^\mu-e\frac{\partial G(x)}{\partial x_\mu}\right)\psi e^{-ieG(x)}$$
$$=e^{-ieG(x)}(p^\mu-eA^\mu)\psi。$$

由上述结果不难看出，在定域规范变换下存在电磁场时 KG 粒子的量子力学方程(5.3.2)保持不变。

5.3.3 非相对论近似

对满足式(5.3.2)或(5.3.3)的波函数作如下变换：

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\Phi(\boldsymbol{x},t)e^{-imt}。 \qquad (5.3.9)$$

当粒子的静能m远比该粒子的动能以及该粒子的电荷与外场的相互作用能都大，即

$$\left|i\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right|\ll|m\Phi|,\ |e\varphi\Phi|\ll|m\Phi|$$

时，我们可取如下近似

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-e\psi\right)^2\psi\simeq e^{-imt}\left(m^2-2me\varphi+2mi\frac{\partial}{\partial t}-ie\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)\Phi,$$

$$(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})^2\psi\simeq e^{-imt}(\boldsymbol{p}^2-2e\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}+e^2\boldsymbol{A}^2+ie\nabla\cdot\boldsymbol{A})\Phi。$$

将上述结果代入式(5.3.3)。在洛伦兹规范$\left(\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\frac{\partial\varphi}{\partial t}=0\right)$的条件下，我们得到如下方程：

$$i\frac{\partial\Phi}{\partial t}=\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{e}{m}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})+\frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}^2+e\varphi\right]\Phi。 \qquad (5.3.10)$$

此结果与非相对论性量子力学中的结果相同。不过应当指出，在非相对论性量子力学中采用的是库仑规范($\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$)。洛仑兹规范和库仑规范在静场情况下是相同的。

5.3.4 库仑势场中无自旋粒子能级的相对论性修正

我们来考察 KG 方程(5.3.3)的定态解。设

$$\psi(\boldsymbol{x},\ t)=\psi(\boldsymbol{x})e^{-i\varepsilon t}, \tag{5.3.11}$$

并将该式代入式(5.3.3)。可得

$$(\varepsilon-e\varphi)^2\psi(\boldsymbol{x})=[\boldsymbol{p}^2-2e(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})+e^2\boldsymbol{A}^2+m^2]\psi(\boldsymbol{x})。 \tag{5.3.12}$$

作为例子，我们来考察π介子原子(一个自旋为零的π^-介子绕点状原子核运动所构成的系统)的能级。此时

$$e\varphi=-\frac{Ze^2}{r},\quad \boldsymbol{A}=0。 \tag{5.3.13}$$

对于$\varepsilon=E>0$的情况，式(5.3.12)现在可化为

$$\left[\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)^2-m^2+\nabla^2\right]\psi(\boldsymbol{x})=0。 \tag{5.3.14}$$

设

$$\psi(\boldsymbol{x})=\frac{1}{r}R_l(r)Y_{lm}(\theta,\ \varphi), \tag{5.3.15}$$

其中Y_{lm}为球谐函数，$R_l(r)$为径向波函数。注意到球坐标中算符∇^2可表示为

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}, \tag{5.3.16}$$

其中$\boldsymbol{L}^2$为角动量平方算符，且有$\boldsymbol{L}^2Y_{lm}=l(l+1)Y_{lm}$，所以将式(5.3.15)代入式(5.3.14)便可得到如下径向波函数$R_l(r)$所满足的方程：

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)-Z^2\alpha^2}{r^2}+\frac{2Z\alpha E}{r}-m^2-E^2\right]R_l(r)=0, \tag{5.3.17}$$

其中$\alpha=e^2$(在普通单位制下，即$\alpha=e^2/\hbar c$)为精细结构常数，它给出了电磁相互作用强度。

现在我们需要求解径向波函数所满足的方程，并由该波函数的有限性条件得到关于能量 E 的可能值(即能级)。引入参量

$$\beta^2=4(m^2-E^2), \tag{5.3.18}$$

并采用新变量 $\rho=\beta r$，则径向方程(5.3.17)可化为

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{\lambda}{\rho}-\frac{l(l+1)-Z^2\alpha^2}{\rho^2}-\frac{1}{4}\right]R_l=0, \tag{5.3.19}$$

其中

$$\lambda=\frac{2Z\alpha E}{\beta}>0。 \tag{5.3.20}$$

我们先来考察式(5.3.19)的解的渐近行为。当 $\rho\to\infty$ 时，式(5.3.19)化为 $\left(\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{1}{4}\right)R_l=0$，其解为 $R_l\sim e^{-\rho/2}$；当 $\rho\to0$ 时，式(5.3.19)近似化为 $\left(\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{s(s+1)}{\rho^2}\right)R_l=0$，其中

$$s(s+1)=l(l+1)-Z^2\alpha^2, \tag{5.3.21}$$

这时的渐近解为 $R_l\sim\rho^{s+1}$。于是式(5.3.19)的解可表示为

$$R_l=\rho^{s+1}e^{-\rho/2}W(\rho)。 \tag{5.3.22}$$

将上述试解代入式(5.3.19)，可得到关于 $W(\rho)$ 满足的方程：

$$\rho\frac{d^2W}{d\rho^2}+(2s+2-\rho)\frac{dW}{d\rho}+(\lambda-s-1)W=0。 \tag{5.3.23}$$

现在需求解上式。此式是一类典型的微分方程，称为“合流超几何方程”(confluent hypergeometric equation)：

$$\rho\frac{d^2W}{d\rho^2}+(\gamma-\rho)\frac{dW}{d\rho}-\alpha W=0。 \tag{5.3.24}$$

上式在 $\rho=0$ 邻域有界的解称为“合流超几何函数”①

$$W=F(\alpha,\ \gamma;\rho)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\alpha)_k}{k!\,(\gamma)_k}\rho^k, \tag{5.3.25}$$

其中

$$(\alpha)_k\equiv\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+k-1), \tag{5.3.26}$$

① 例如，可参见《数学手册》，《数学手册》编写组编，人民教育出版社，(1979) p.620。

$$(\gamma)_k \equiv \gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+k-1)。$$

在 $\rho\to\infty$ 时，无穷级数解可表示为 $F(\alpha,\ \gamma;\rho)\approx e^{\rho}$，所以这样的解代入式(5.3.22)不能满足束缚态边界条件。为了得到物理上允许的解，无穷级数解 $F(\alpha,\ \gamma;\rho)=F(-\lambda+s+1,\ 2s+2;\rho)$ 必须中断为一个多项式。这个要求显然可通过令参数 α 等于零或负整数，即 $\alpha=-\lambda+s+1=-\nu(\nu=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$，或

$$\lambda=\nu+s+1 \tag{5.3.27}$$

而达到。此式相当于量子论中的量子化条件。

由式(5.3.21)解出 s，并选择能够保证式(5.3.27)中的 $\lambda>0$ 的根：

$$s=-\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2}。 \tag{5.3.28}$$

然后再代入式(5.3.27)，便可得

$$\lambda=\nu+\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2}, \tag{5.3.29}$$

$$\nu,\ l=0,\ 1,\ 2,\ \cdots。$$

由式(5.3.18)和(5.3.20)可知，λ 是确定 π 原子能量值的量子数，π 原子的能级为

$$E=\frac{mc^2}{\sqrt{1+\dfrac{Z^2\alpha^2}{\lambda^2}}}, \tag{5.3.30}$$

其中 c^2 是根据量纲分析而最后添加的因子，从而使上述最终结果由 $\hbar=c=1$ 的单位制转化到通常单位制形式。因为由式(5.3.29)确定的 λ 的值是分立的，所以由上式所确定的能级也是分立的。此外我们还要指出，式(5.3.30)是精确的相对论性量子力学结果。

考虑到 $\alpha\simeq 1/137\ll 1$，所以式(5.3.30)可展开为 $Z\alpha$ 的幂级数，结果为

$$E=mc^2\left[1-\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}-\frac{Z^4\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)+\cdots\right], \tag{5.3.31}$$

其中 $n=\nu+l+1$ 是主量子数。由于这个关系式的限制，l 的可取值为 0, 1, 2, …, $n-1$。

从式(5.3.31)可以看出。第一项 mc^2 为 π 介子的静能；第二项仅与主量子数 n 有关，为[$\alpha=e^2/\hbar c$]

$$E_n^0=-\frac{mc^2Z^2\alpha^2}{2n^2}=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}=-I\frac{1}{n^2}, \qquad (5.3.32)$$

其中 $I=\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}$ 为 π 原子的电离电势。所以式(5.3.32)是非相对论性薛定谔方程的结果。第三项为

$$E'_{nl}=E_n^0\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left[\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right], \qquad (5.3.33)$$

这一项反映了原子能级的相对论性修正。这一项修正不仅与主量子数 n 有关，而且与角量子数 l 有关，因此会引起薛定谔理论结果中关于 l 的简并的消除。例如在薛定谔理论中，np 态与 ns 态是简并的，但相对论性修正项将引起这两个能级的分裂，分裂差值为

$$\frac{|E_{np}-E_{ns}|}{E_n^0}=\frac{4(Z\alpha)^2}{3n}\sim(Z\alpha)^2。 \qquad (5.3.34)$$

上述结果表明，这两条简并能级相对论性分裂的间距将随 Z 的增加而增大；随 n 的增加而减小。

n 相同时系统能级的分裂称为“能级的精细结构”。由式(5.3.33)可知，n 确定时能级精细结构的总宽度为

$$D=E_{n,\,n-1}-E_{n0}=-E_n^0(Z\alpha)^2\frac{4(n-1)}{n(2n-1)}。 \qquad (5.3.35)$$

还可以讨论相对论性修正对波函数及 Bohr 半径的影响。例如，当 $(Z\alpha)^2\ll1$ 时，由式(5.3.28)可知

$$s\simeq l+\frac{(Z\alpha)^2}{2l+1}。$$

因此由式(5.3.15)和(5.3.22)可知，波函数在 $\rho=0$ 点处有很弱的奇性。这个结果与非相对论性结果($\rho=0$ 点处，$\psi=0$)不同。

§5.4 狄拉克方程

本节将讨论描写自旋为 $\frac{1}{2}$ 粒子运动状态的相对论性量子力学方程。这个方程是英国物理学家狄拉克(P.A.M.Dirac)于 1928 年首先提出的，它是一个关于时间和空间的线性微分方程，且不存在"负概率困难"。狄拉克方程在当时被认为是唯一正确的量子力学方程。直到 1934 年，泡利和韦斯柯夫对克莱因-戈登方程相应的连续性方程[参见式(5.2.11)]重新作出解释，认为它不是概率守恒定律，而是电荷守恒定律，从而解决了负概率困难。人们于是认识到克莱因-戈登方程也是一个正确的相对论性量子力学方程，不过它所描写的是自旋为零的粒子运动状态的方程，而狄拉克方程是自旋为 $\frac{1}{2}$ 粒子的量子力学方程。此外，自旋为 1 的零质量粒子的运动方程显然就是麦克斯韦方程。任意自旋 $s\geqslant\frac{1}{2}$ 的非零质量粒子的相对论性量子力学方程一般可通过旋量分析方法得到，这类方程常通称为柏格曼-维格纳 (Bargmann-Wigner) 方程。

5.4.1 狄拉克(Dirac)方程

在非相对论性理论中，描写自旋为 1/2 的粒子的波函数有两个分量，称为"旋量"(Spinor)。1928 年 Dirac 引进 $\psi_\nu(\boldsymbol{x},t)$, $\nu=1,2,3,\cdots$来描写相对论性电子的运动，以代替非相对论性量子理论中的二分量旋量波函数。ψ_ν 所满足的线性运动方程一般地可记为

$$i\frac{\partial\psi_\mu}{\partial t}+i\alpha_{\mu\nu}\cdot\nabla\psi_\nu-m\beta_{\mu\nu}\psi_\nu=0, \qquad (5.4.1)$$

其中引进了四个狄拉克矩阵 $\alpha_i(i=1,2,3)$和 β。这里希腊字母代表旋量指标；拉丁字母代表时空指标。上式也可记为自旋空间中的矩阵形式

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}+i\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\psi-m\beta\psi=0, \tag{5.4.2}$$

或

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}=H_D\psi, \tag{5.4.3}$$

其中

$$H_D=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+m\beta。 \tag{5.4.4}$$

进一步的工作当然是要确定矩阵 α_i 和 β，其条件是：(1) 存在连续性方程，且其中四维流密度的零分量形式为 $\rho=e\psi_\nu^*\psi_\nu$；(2) ψ_ν 必须满足克莱因-戈登方程，因为该方程在动量表象中反映了相对论性自由粒子的能量和动量的普遍关系式($E^2=\boldsymbol{p}^2+m^2$)。

函数 ψ 的厄米共轭 ψ^+ 所满足的方程是

$$-i\frac{\partial\psi^+}{\partial t}-i(\nabla\psi^+)\cdot\boldsymbol{\alpha}-m\psi^+\beta=0, \tag{5.4.5}$$

其中我们已经假定 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 是厄密算符，即

$$\boldsymbol{\alpha}^+=\boldsymbol{\alpha},\ \beta^+=\beta。 \tag{5.4.6}$$

若将 ψ^+ 左乘式(5.4.2)；将 ψ 右乘式(5.4.5)，然后将所得两式相加，便可得到连续性方程：

$$\nabla\cdot\boldsymbol{j}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0, \tag{5.4.7}$$

其中

$$\rho=e\psi^+\psi, \tag{5.4.8}$$

$$\boldsymbol{j}=e\psi^+\boldsymbol{\alpha}\psi。 \tag{5.4.9}$$

所以在狄拉克矩阵为厄密矩阵的条件下，前面所列的条件 (1) 自动满足。上述狄拉克方程 (5.4.3) 的形式不仅与薛定谔方程的形式相同，而且其中所出现的哈密顿算符 H_D 也是厄密的。

现在再由上述条件 (2) 来确定狄拉克矩阵应满足的基本对易关系。算符的基本性质都包含在它的基本对易关系之中。将算符 "$-i\frac{\partial}{\partial t}+i\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla-m\beta$" 左乘式(5.4.2)，可得

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2}-(\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla)(\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla)+m^2\beta^2-im(\boldsymbol{\alpha}\beta+\beta\boldsymbol{\alpha})\cdot\nabla\right]\psi=0。$$

上式在时空中的分量形式为

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{1}{2}(\alpha_i\alpha_j+\alpha_j\alpha_i)\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}+m^2\beta^2\right.$$
$$\left.-im(\alpha_i\beta+\beta\alpha_i)\frac{\partial}{\partial x_i}\right]\psi=0。$$

将上式与 KG 方程

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_i}+m^2\right)\psi=0$$

比较就可发现，狄拉克矩阵应满足如下反对易关系：

$$\begin{aligned}&\{\alpha_i,\ \alpha_j\}=\alpha_i\alpha_j+\alpha_j\alpha_i=2\delta_{ij},\\&\{\alpha_i,\ \beta\}=\alpha_i\beta+\beta\alpha_i=0,\\&\beta^2=1,\ \alpha_i^2=1。\end{aligned}\qquad(5.4.10)$$

应当注意，上式中的 1 是单位矩阵，其维数决定于自旋空间中ψ_n的分量数目。已知 Dirac 矩阵的对易关系，可确定它们的具体形式。

5.4.2 狄拉克矩阵的表示

可以证明，四个满足式(5.4.10)所示的基本关系的厄密矩阵α_i和β至少应是4×4矩阵。下面给出这些矩阵的一种表示形式，并称为“标准表示”或“泡利表示”：

$$\alpha_i=\begin{bmatrix}0&\sigma_i\\\sigma_i&0\end{bmatrix},\ \beta=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix},\qquad(5.4.11)$$

其中σ_i为2×2泡利矩阵。在上述表示中，β是对角化矩阵，所以这个表示也就是β表示。

狄拉克矩阵的另一种常用的表示称为“旋量表示”或“克莱默(Kramer)表示”：

$$\alpha_i=\begin{bmatrix}\sigma_i&0\\0&-\sigma_i\end{bmatrix},\ \beta=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}。\qquad(5.4.12)$$

在这类表示中，α_3是对角化矩阵，所以这个表示也就是α_3表示。

读者可以证明，无论是标准表示还是旋量表示，都满足基本对易关系(5.4.10)以及厄密条件(5.4.6)。而且还可以证明，这两种表示之间可通过一幺正变换相联系。实际上从任何一种表示出发，

通过幺正变换：

$$\alpha_i' = U\alpha_i U^{-1},\ \beta' = U\beta U^{-1} \tag{5.4.13}$$

所得到的新的表示满足同样的对易关系及厄密条件。所以原则上说，狄拉克矩阵有无穷多种表示。

5.4.3 狄拉克粒子的自旋

在非相对论量子力学中，自由粒子的哈密顿算符 $H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ 与轨道角动量算符 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 是对易的。但是在狄拉克理论中轨道角动量与自由粒子的哈密顿算符

$$H_D=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+m\beta \tag{5.4.14}$$

并不对易，因为对易子（重复指标求和）

$$\begin{aligned}[L_i,\ H_D] &= \varepsilon_{ijk}[x_j p_k,\ \alpha_l p_l + m\beta] \\ &= \varepsilon_{ijk}\alpha_l[x_j,\ p_l]p_k = i\varepsilon_{ijk}\alpha_j p_k \\ &= i(\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{p})_i\end{aligned} \tag{5.4.15}$$

并不为零。但是可以证明，算符

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma} \tag{5.4.16}$$

与 H_D 对易，其中算符 $\boldsymbol{\Sigma}$ 在标准表象中的形式为

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\end{bmatrix}。 \tag{5.4.17}$$

这很容易证明，因为在标准表示中

$$H_D=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+m\beta=\begin{bmatrix}m & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & -m\end{bmatrix} \tag{5.4.18}$$

所以对易子 $\left[\frac{1}{2}\Sigma_i,\ H_D\right]=\frac{1}{2}(\Sigma_i H_D - H_D\Sigma_i)$

$$=\frac{1}{2}\left\{\begin{bmatrix}\sigma_i & 0\\ 0 & \sigma_i\end{bmatrix}\begin{bmatrix}m & \sigma_j p_j\\ \sigma_j p_j & -m\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}m & \sigma_j p_j\\ \sigma_j p_j & -m\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma_i & 0\\ 0 & \sigma_i\end{bmatrix}\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i \\ \sigma_j\sigma_i - \sigma_i\sigma_j & 0 \end{bmatrix} p_j$$

$$= i\varepsilon_{ijk}\begin{bmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{bmatrix} p_j$$

$$= i\varepsilon_{ijk}\alpha_k p_j = i(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\alpha})_i。$$

上式结果恰巧与式(5.4.15)相消。因此在狄拉克理论中确实有

$$[\boldsymbol{J}, H_D] = 0。 \tag{5.4.19}$$

根据上述结果，我们可将算符

$$\boldsymbol{S} \equiv \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma} \tag{5.4.20}$$

解释为电子的自旋，其本征值为$\pm\frac{1}{2}$。故狄拉克理论是自旋为1/2的粒子的理论，在这个理论中自然地包含了对电子自旋状态的描写。

上述结果表明，在狄拉克理论中总角动量$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$是守恒量，但是轨道角动量$\boldsymbol{L}$及自旋角动量$\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}$都不是守恒量。不过，不难证明自旋沿动量方向$\boldsymbol{n}=\frac{\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|}$的投影

$$S_p = \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{n} \tag{5.4.21}$$

与H_D对易：

$$[S_p, H_D] = 0, \tag{5.4.22}$$

所以S_p是守恒量，并称它为螺旋性(helicity)算符。因为

$$S_p = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} \end{bmatrix}, \tag{5.4.23}$$

所以S_p的本征函数决定于$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$的本征函数，在量子力学中已经知道，如果取球坐标，$\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta)$，则算符$\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$的形式为

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \frac{1}{2}(\sigma_1 n_1 + \sigma_2 n_2 + \sigma_3 n_3)$$

$$= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix}。 \tag{5.4.24}$$

该算符的本征值为 $\sigma=\pm\frac{1}{2}$，相应的本征函数为

$$w_{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\varphi}\cos\dfrac{\theta}{2} \\ e^{\frac{1}{2}i\varphi}\sin\dfrac{\theta}{2} \end{bmatrix},\quad w_{-\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix} -e^{-\frac{1}{2}i\varphi}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ e^{\frac{1}{2}i\varphi}\cos\dfrac{\theta}{2} \end{bmatrix}。\tag{5.4.25}$$

在特殊情况下，当取动量方向为 z-轴正方向时，$\theta=\varphi=0$，此时有

$$w_{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\ w_{-\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}。\tag{5.4.26}$$

螺旋性算符的两个本征函数称为自旋函数[式(5.4.25)]，它们构成正交归一完全集。其正交归一化条件为

$$w_\sigma^+ w_{\sigma'}=\delta_{\sigma\sigma'},\tag{5.4.27}$$

完全性条件为

$$\sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} w_\sigma w_\sigma^+ = w_{\frac{1}{2}} w_{\frac{1}{2}}^+ + w_{-\frac{1}{2}} w_{-\frac{1}{2}}^+ = 1,\tag{5.4.28}$$

其中 1 为 2×2 单位矩阵。正交完全集(5.4.25)可用来构造一个二维表象空间(自旋空间)，以便描述电子的自旋状态。

5.4.4 自由电子狄拉克方程的定态解

现在讨论动量为 $\boldsymbol{p}$ 的自由电子狄拉克方程的定态解：

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x})e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t}=\psi e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\varepsilon t)}。\tag{5.4.29}$$

将上式代入狄拉克方程(5.4.3)，可得如下本征方程形式：

$$H_D\psi(\boldsymbol{x})=\varepsilon\psi(\boldsymbol{x})。\tag{5.4.30}$$

在旋量空间中将四分量波函数表示为两个二分量波函数的形式：

$$\psi=\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix},\tag{5.4.31}$$

其中 $\varphi=\begin{bmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{bmatrix}$，$\chi=\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}$ 为二分量波函数。在标准表示中四分量波函数 ψ 的狄拉克方程(5.4.30)可化为两个二分量波函数 φ 和 χ 的联立方程：

$$\begin{cases}(m-\varepsilon)\varphi+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\chi=0,\\ (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\varphi-(m+\varepsilon)\chi=0,\end{cases}\tag{5.4.32}$$

其中 $\boldsymbol{p}$ 已不是算符，为 c 数，因为我们现在讨论的是动量确定的态。式(5.4.32)存在非零解的条件是系数行列式为零：

$$\begin{vmatrix} m-\varepsilon & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ -\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & m+\varepsilon \end{vmatrix}=0。 \tag{5.4.33}$$

利用等式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{5.4.34}$$

式(5.4.33)可化为

$$m^2-\varepsilon^2+\boldsymbol{p}^2=0,$$

或

$$\varepsilon=\pm E_p=\lambda E_p,\quad E_p=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}。 \tag{5.4.35}$$

此结果表明，与克莱因-戈登方程类似，狄拉克方程的定态解也存在两种不同的解：正解，即 $\varepsilon=E_p$ 的解；负解，即 $\varepsilon=-E_p$ 的解。与非相对论量子力学明显区别的是，相对论性自由粒子哈密顿算符的本征值有两个：$\varepsilon=\pm E_p$，相应地存在两类本征态。上一章中我们已经指出在相对论性量子理论中本征值不一定对应于测量可能值。所以，自由狄拉克粒子的哈密顿算符 H_D 的属于本征值为 $-E_p$ 的态所具有的能量不能理解为 $-E_p$，恰恰相反，是 $+E_p$，历史上，这个混淆的观念曾经在一段时间内困惑了狄拉克以及许多其他科学家，并最终促使狄拉克提出了“空穴理论”。①不过，彻底解决这个问题还需要借助于后来建立的二次量子化理论(量子场论)。

为了描写 H_D 的本征值可取 E_p 和 $-E_p$ 这两个自由度，我们引进能量投影算符：

$$\Lambda=\frac{H_D}{\sqrt{H_D^2}}=\frac{\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+m\beta}{\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}}。 \tag{5.4.36}$$

上述算符显然与 H_D 对易，因此是守恒量。而且 Λ 是厄密算符，也是幺正算符，即

$$\Lambda=\Lambda^{+}=\Lambda^{-1} \tag{5.4.37}$$

因此有

$$\Lambda^2=1 \tag{5.4.38}$$

① 参阅《从法拉第到麦克斯韦》，佟在新、宓子宏著，科学出版社(1986,1992)，§6.4 狄拉克的预言。

所以能量投影算符的本征值为 $\lambda=\pm1$。

在狄拉克理论中，动量算符 $\boldsymbol{p}$，能量投影算符 Λ，以及螺旋性算符 S_p 之间，以及这些算符与哈密顿算符 H_D 之间都对易，因此可取这些算符构成力学量完全集来描写自由电子的运动状态。作为比较，在非相对论性理论中，不存在正解和负解，描写电子自旋的力学量也不是薛定谔方程所固有的，因此在非相对论性量子力学中描写自由粒子的力学量完全集仅包含 H 和 $\boldsymbol{p}$。

当 ε 一定时，由于式(5.4.32)，ψ 中的 φ 和 χ 不都是独立的，且存在如下关系：

$$\chi=\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{m+\varepsilon}\varphi, \tag{5.4.39}$$

在动量表象中，φ 的形式可记为

$$\varphi=Nw_\sigma\frac{e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}}{\sqrt{V}}, \tag{5.4.40}$$

其中 V 为归一化体积，N 的归一化系数，w_σ 为二分量自旋函数，是粒子的自旋在动量方向投影(即螺旋性算符)$\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征态。于是自由粒子狄拉克方程的定态解可表示为

$$\psi_{\boldsymbol{p}\lambda\sigma}=N\begin{bmatrix}w_\sigma\\ \dfrac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{m+\lambda E_p}w_\sigma\end{bmatrix}\frac{\exp(i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-i\lambda E_pt)}{\sqrt{V}}, \tag{5.4.41}$$

它是 H_D、$\boldsymbol{p}$、Λ，以及 S_p 的共同本征态。

归一化因子 N 可由如下条件得到：

$$\int\psi^+_{\boldsymbol{p}\lambda\sigma}\psi_{\boldsymbol{p}'\lambda'\sigma'}d\boldsymbol{x}=\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\sigma\sigma'}。 \tag{5.4.42}$$

将式(5.4.41)代入上式，得

$$N^2\left[1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{(m+\lambda E_p)(m+\lambda'E_p)}\right]=\delta_{\lambda\lambda'}。$$

当 $\lambda=-\lambda'$ 时，$N=0$；当 $\lambda=\lambda'$ 时，有

$$N^2=\frac{(m+\lambda E_p)^2}{(m+\lambda E_p)^2+\boldsymbol{p}^2}=\frac{(m+\lambda E_p)^2}{2E_p^2+2\lambda mE_p}\quad\frac{m+\lambda E_p}{2\lambda E_p},$$

所以归一化系数为

$$N=\sqrt{\frac{m+\lambda E_p}{2\lambda E_p}}=\sqrt{\frac{E_p+\lambda m}{2E_p}}, \tag{5.4.43}$$

可见对于正态和负态，归一化因子并不一样。

综上所述 狄拉克方程的定态解，即算符 H_D、$\boldsymbol{p}$、Λ 和 S_p 的共同本征态可表示为

$$\psi_{p\lambda\sigma}(\boldsymbol{x},\ t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\ u_{p\lambda\sigma}\exp(i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-i\lambda E_p t),$$

$$u_{p\lambda\sigma}=\sqrt{\frac{E_p+\lambda m}{2E_p}}\begin{bmatrix} w_\sigma \\ \dfrac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{m+\lambda E_p}w_\sigma \end{bmatrix}, \tag{5.4.44}$$

其中 w_σ 是二分量列矩阵，因此 ψ 在自旋空间中是一个有四个分量的列矩阵。式(5.4.44)表示的波函数中，$\boldsymbol{p}$ 可取连续值[此时 $V\to(2\pi)^3$]，λ 和 σ 均取分立值：$\lambda=\pm1$，$\sigma=\pm\frac{1}{2}$。所以，当 $\boldsymbol{p}$ 确定时，狄拉克方程有四个线性独立的平面波解。当动量 $\boldsymbol{p}$ 的方向取为 z-轴正方向时，这四个独立的解可表示为

$$\psi_1\equiv\psi_{p,+,\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{E_p+m}{2mV}}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{p}{E_p+m} \\ 0 \end{bmatrix}\exp(ipz-iE_p t), \tag{5.4.45}$$

$$\psi_2\equiv\psi_{p,+,-\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{E_p+m}{2mV}}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dfrac{-p}{E_p+m} \end{bmatrix}\exp(ipz-iE_p t), \tag{5.4.46}$$

$$\psi_3\equiv\psi_{p,-,\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{E_p-m}{2mV}}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{-p}{E_p-m} \\ 0 \end{bmatrix}\exp(ipz+iE_p t), \tag{5.4.47}$$

$$\psi_4 \equiv \psi_{p,-,-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{E_p - m}{2mV}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dfrac{p}{E_p - m} \end{bmatrix} \exp(ipz + iE_p t)。 \tag{5.4.48}$$

当 $\boldsymbol{p}$ 取任意方向时，请读者写出相应的四个状态波函数，并阐明它们所描写的粒子状态的特征。这四组函数满足正交归一化条件[式(5.4.42)]，且构成完全集。任何自旋为 $\frac{1}{2}$，质量为 m 的粒子的状态都可用这些函数的线性迭加表示。

最后，我们来考察式(5.4.45)～(5.4.48)的波函数的非相对论极限。在非相对论近似下，$E_p \sim m$；动能与静能之比为 $\sim p/m$。在这个近似下，$\psi_3 = \psi_4 = 0$，而 ψ_1 和 ψ_2 则约化为包含自旋部份和时空部份的自由粒子波函数形式。

5.4.5 Dirac 粒子的速度

能量投影算符 $\Lambda = \frac{H_D}{E_p}$ 的本征态一般可表示为

$$\psi_\lambda = \sum_\sigma \int c(\boldsymbol{p}) \psi_{\boldsymbol{p}\lambda\sigma} d\boldsymbol{p} \tag{5.4.49}$$

其中 $c(\boldsymbol{p})$ 为展开系数。因为 $H_D \psi_{\boldsymbol{p}\lambda\sigma} = \lambda E_p \psi_{\boldsymbol{p}\lambda\sigma}$，所以有

$$\Lambda\psi_\lambda = \sum_\sigma \int \frac{c(\boldsymbol{p})}{E_p} H_D \psi_{\boldsymbol{p}\lambda\sigma} d\boldsymbol{p} = \lambda\psi_\lambda。 \tag{5.4.50}$$

任何算符可分解为偶算符和奇算符之和。根据偶算符和奇算符的性质(见§5.2.7)，对于任何算符 a 有如下关系：

$$a\psi_+ = [a]\psi_+ + \{a\}\psi_+, \tag{5.4.51}$$

$$a\psi_- = [a]\psi_- + \{a\}\psi_-, \tag{5.4.52}$$

$$\Lambda a \Lambda\psi_+ = \Lambda a\psi_+ = [a]\psi_+ - \{a\}\psi_+, \tag{5.4.53}$$

$$\Lambda a \Lambda\psi_- = -\Lambda a\psi_- = [a]\psi_- - \{a\}\psi_-。 \tag{5.4.54}$$

由以上关系可知，任意算符 a 的偶部和奇部可利用能量投影算符

一般地表示为

$$[a]=\frac{1}{2}(a+\Lambda a\Lambda), \tag{5.4.55}$$

$$\{a\}=\frac{1}{2}(a-\Lambda a\Lambda)。 \tag{5.4.56}$$

由以上结果可以看出，任何与能量投影算符相对易的算符是偶算符；反对易的算符是奇算符。因此在狄拉克理论中 H_D，$\boldsymbol{p}$，以及 S_p 都是偶算符。还可以证明，狄拉克矩阵 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 的偶算符部分分别为

$$[\boldsymbol{\alpha}]=\frac{\boldsymbol{p}H_D}{E_p^2}=\frac{\boldsymbol{p}}{E_p}\Lambda \tag{5.4.57}$$

$$[\beta]=\frac{m}{E_p}\Lambda \tag{5.4.58}$$

[例 1] 证明式(5.4.57)

解：根据(5.4.55)，有

$$[\alpha_i]=\frac{1}{2}(\alpha_i+\Lambda\alpha_i\Lambda)。$$

因为

$$\begin{aligned}\Lambda\alpha_i\Lambda&=\frac{1}{E_p^2}H_D\alpha_iH_D=\frac{1}{E_p^2}\{(\alpha_jp_j+m\beta)\alpha_i(\alpha_kp_k+m\beta)\}\\&=\frac{1}{E_p^2}\{p_jp_k\alpha_j\alpha_i\alpha_k+m(p_j\alpha_j\alpha_i\beta+p_k\beta\alpha_i\alpha_k)+m^2\beta\alpha_i\beta\}\\&\equiv\frac{1}{E_p^2}(A+B+C),\end{aligned}$$

其中第一项可化为

$$\begin{aligned}A&\equiv p_jp_k\alpha_j\alpha_i\alpha_k=p_jp_k(2\delta_{ij}-\alpha_i\alpha_j)\alpha_k\\&=2\boldsymbol{p}_i(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p})-p_jp_k\alpha_i\alpha_j\alpha_k,\end{aligned}$$

由于 $p_jp_k\alpha_i\alpha_j\alpha_k=p_jp_k\alpha_i(2\delta_{jk}-\alpha_k\alpha_j)=2\boldsymbol{p}^2\alpha_i-p_kp_j\alpha_i\alpha_j\alpha_k$，

所以 $$p_jp_k\alpha_i\alpha_j\alpha_k=\boldsymbol{p}^2\alpha_i。$$

于是可得 $$A=2p_i(\boldsymbol{\alpha}\ \boldsymbol{p})-\boldsymbol{p}^2\alpha_i。$$

而 B 项可化为

$$\frac{1}{m}B=p_j\alpha_j\alpha_i\beta+p_k\beta\alpha_i\alpha_k=p_j(\alpha_j\alpha_i+\alpha_i\alpha_j)\beta=2p_i\beta。$$

C 项可化为 $$\frac{1}{m^2}C=\beta\alpha_i\beta=-\alpha_i。$$

于是有 $$\Lambda\alpha_i\Lambda=\frac{1}{E_p^2}(2p_iH_D-E_p^2\alpha_i)$$

最后可得 $$[\boldsymbol{a}]=\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}+\Lambda\boldsymbol{a}\Lambda)=\frac{\boldsymbol{p}H_D}{E_p^2}=\frac{\boldsymbol{p}}{E_p}\Lambda$$

现在我们讨论狄拉克电子的速度。因为

$$\frac{dx}{dt}=\frac{1}{i}[x_i,H_D]=\frac{1}{i}[x_i,\ \alpha_jp_j+m\beta]$$

$$=\frac{1}{i}\alpha_j[x_i,\ p_j]=\alpha_i,$$

因此狄拉克理论中粒子的速度算符为

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}=\boldsymbol{\alpha}。\tag{5.4.59}$$

因为狄拉克矩阵 $\boldsymbol{\alpha}$ 的本征值为 ±1，考虑到我们现在所取的单位制中 $c=1$，所以式(5.4.59)表明，如果在相对论性量子力学中仍然保持单粒子概念，则电子的速度便恒为光速 c。这显然是不合理的，这种不合理性起源于 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 H_D 不对易，速度不是运动常数。而且 $\boldsymbol{\alpha}$ 的各分量之间也不对易(实际上它们互相反对易)，速度的各分量不能同时测量。所以速度算符 $\boldsymbol{\alpha}$ 不对应于可观察量。而动量 $\boldsymbol{p}$ 则不同，它的各分量互相对易，且是运动常数。所以狄拉克粒子的动量是一个可观察量。

虽然狄拉克理论中的速度算符不对应于可观察量，但可以证明其偶部却是。由式(5.4.57)和(5.4.59)可知

$$\left[\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\right]=[\boldsymbol{\alpha}]=\frac{\boldsymbol{p}}{E_p}\Lambda,\tag{5.4.60}$$

此结果表明，$[\boldsymbol{\alpha}]$的各分量互相对易，且是运动常数。上述结果显然与经典的单粒子相对论力学中的结果一致。于是我们再一次看到，为了在相对论性量子力学中保留单粒子概念，应取算符的偶部。

下面我们再来考察速度算符的微商。由算符 $\boldsymbol{\alpha}$ 的运动方程可知

$$\frac{d\boldsymbol{\alpha}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{\alpha},\ H_D]=\frac{2}{i\hbar}(\boldsymbol{p}-H_D\boldsymbol{\alpha})。 \tag{5.4.61}$$

该方程的形式解为

$$\boldsymbol{\alpha}(t)=H_D^{-1}\boldsymbol{p}+e^{2iH_Dt}[\boldsymbol{\alpha}(0)-H_D^{-1}\boldsymbol{p}]。 \tag{5.4.62}$$

将上式代入式(5.4.59),积分后得

$$\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{x}(0)+\frac{\boldsymbol{p}}{H_D}t+\frac{1}{2iH_D}(e^{2iH_Dt}-1)\left[\boldsymbol{\alpha}(0)-\frac{\boldsymbol{p}}{H_D}\right]。 \tag{5.4.63}$$

上式等号右边第一和第二项描述自由粒子的匀速运动，完全可类比于经典力学的结果；最后一项反映相对论性量子力学固有的特征，它反映了粒子的高频振荡运动（常称为"Zitterbewegung"），频率为$\sim mc^2/\hbar$(对于电子$\sim 7.8\times10^{20}$/秒)；振幅为$\hbar/mc$，是粒子的 Compton 波长。可以证明，这种高速振荡运动来源于正解和负解的相干效应。如果波包仅仅由正解叠加构成，或者仅仅由负解叠加构成，则振荡运动将消失，然而在相对论情况下，这两种解是构成波包所必不可少的，因为无论哪一类解都不能单独组成正交完全集。

如果为了保持单粒子概念，而取式(5.4.63)所示的坐标的偶部，则由于算符$\boldsymbol{\alpha}(0)-\frac{\boldsymbol{p}}{H_D}$的偶部为零，我们便得到可与经典力学或非相对论量子力学相对应的结果，此时不存在高速振荡。

§5.5 狄拉克方程的协变形式

5.5.1 γ 矩阵

为了研究旋量波函数的重要性质，将狄拉克方程表示为明显的四维协变形式。为此，首先引进四个γ矩阵：$\gamma^\mu=(\gamma^0,\ \gamma^1,\ \gamma^2,\ \gamma^3)=(\gamma^0,\ \boldsymbol{\gamma})$，它们的定义如下：

$$\gamma^0=\beta;\quad \boldsymbol{\gamma}=\beta\boldsymbol{\alpha}。 \tag{5.5.1}$$

在标准表示中，γ矩阵有如下形式：

$$\gamma^0=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\gamma}=\begin{bmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ -\boldsymbol{\sigma} & 0\end{bmatrix}。\tag{5.5.2}$$

由狄拉克矩阵 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 所满足的关系式(5.4.10)可得到关于 γ 矩阵的 10 个等价关系式

$$\gamma^\mu\gamma^\nu+\gamma^\nu\gamma^\mu=2g^{\mu\nu}。\tag{5.5.3}$$

在这个简洁表式中，有 6 个独立的式子表示四个 γ 矩阵中任意两个不同的 γ 矩阵互相反对易；还有四个公式表示四个(逆变) γ 矩阵的平方等于单位矩阵：

$$(\gamma^\mu)^2=1。\tag{5.5.4}$$

由狄拉克矩阵 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 的厄密条件可知

$$(\gamma^0)^+=\gamma^0,\ (\gamma^i)^+=-\gamma^i。\tag{5.5.5}$$

上述性质也可记成简缩的形式

$$\gamma^{\mu+}=\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0。\tag{5.5.6}$$

可见，我们所引进的 γ 矩阵不是在普遍意义下的厄密矩阵，可称为“γ^0 厄密矩阵”。γ 矩阵的协变分量为

$$\gamma_\mu=g_{\mu\nu}\gamma^\nu。\tag{5.5.7}$$

由上式可得

$$\gamma_0=\gamma^0,\ \gamma_i=-\gamma^i,\tag{5.5.8}$$

$$\gamma^\mu=\gamma_\mu^+=\gamma_\mu^{-1}。\tag{5.5.9}$$

引进上述 γ 矩阵后，若将 β 左乘狄拉克方程(5.4.2)，并注意到 $p_\mu=i\partial_\mu=\left(i\frac{\partial}{\partial t},i\nabla\right)$ 以及 γ 矩阵的定义(5.5.1)，可得

$$(\gamma^\mu p_\mu-m)\psi=0。\tag{5.5.10}$$

为了得到 ψ^+ 所满足的方程，将上式表示为

$$\left(i\gamma^0\frac{\partial}{\partial t}+i\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla-m\right)\psi=0。$$

对上式取厄密共轭，并注意到式(5.5.5)，我们有

$$\psi^+\left(-i\gamma^0\frac{\partial}{\partial t}+i\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla-m\right)=0,\tag{5.5.11}$$

其中关于时空的算符应理解为向左作用。所以上式实际上应理解为

$$-i\frac{\partial\psi^+}{\partial t}\gamma^0+i(\nabla\psi^+)\cdot\boldsymbol{\gamma}-m\psi^+=0。$$

为了使式(5.5.11)具有类似于式(5.5.10)的四维形式，我们将 γ^0 右乘该式，得

$$\psi^+\gamma^0\left(i\gamma^0\frac{\partial}{\partial t}+i\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla+m\right)=0,$$

并定义 $\bar{\psi}$，并称它为 ψ 的伴随：

$$\bar{\psi}=\psi^+\gamma^0, \tag{5.5.12}$$

则我们可得

$$\bar{\psi}(\gamma^\mu p_\mu+m)=0。 \tag{5.5.13}$$

现在可以导出与狄拉克方程相联系的协变四维流守恒定律。将 $\bar{\psi}$ 左乘式(5.5.10)，ψ 右乘式(5.5.13)，然后将所得结果相加，于是得

$$\partial_\mu j^\mu=0, \tag{5.5.14}$$

其中

$$j^\mu=\bar{\psi}\gamma^\mu\psi, \tag{5.5.15}$$

它的分量形式为[$j^\mu=(\rho,\boldsymbol{j})$]：

$$\rho=\bar{\psi}\gamma^0\psi=\psi^+\psi, \tag{5.5.16}$$

$$\boldsymbol{j}=\bar{\psi}\boldsymbol{\gamma}\psi=\psi^+\boldsymbol{\alpha}\psi。 \tag{5.5.17}$$

可以看出，其中的 ρ 是正定的，即 $\rho\geqslant 0$。所以在 Dirac 理论中可以赋予概率解释。我们在上一节中已经指出。这种概率密度的正定性与狄拉克哈密顿算符 H_D 的厄密性是自洽的。不过，正如我们在前面所讨论的那样，对式(5.5.16)和(5.5.17)更合理的解释是：乘以电荷 e，从而分别解释为狄拉克粒子的电荷密度和电流密度：

$$\rho=e\bar{\psi}\gamma^0\psi=e\psi^+\psi, \tag{5.5.18}$$

$$\boldsymbol{j}=e\bar{\psi}\boldsymbol{\gamma}\psi=e\psi^+\boldsymbol{\alpha}\psi。 \tag{5.5.19}$$

5.5.2 正交变换

时空坐标的正交变换可表示为

$$x'^\mu=a^\mu{}_\nu x^\nu。 \tag{5.5.20}$$

正交变换的条件是四维间隔不变，即

$$ds^2\equiv g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu=x^\mu x_\mu \tag{5.5.21}$$

保持不变。这意味着，我们要求

$$a^{\mu}{}_{\rho}a_{\mu}{}^{\tau}=\delta_{\rho\tau}。\tag{5.5.22}$$

利用度规张量可得到关于变换矩阵的逆变分量 $a^{\mu\nu}$ 以及混合分量 $a^{\mu}{}_{\nu}$ 和 $a_{\mu}{}^{\nu}$ 的公式，例如

$$a^{\mu\nu}=g^{\mu\rho}a_{\rho}{}^{\nu},\tag{5.5.23}$$

$$a_{\mu\nu}=g_{\mu\rho}a^{\rho}{}_{\nu},\tag{5.5.24}$$

$$a_{\mu\nu}=g_{\mu\rho}g_{\nu\tau}a^{\rho\tau}。\tag{5.5.25}$$

变换 $a^{\mu}{}_{\nu}$ 可取各种不同的具体形式，以反映不同的时空变换。例如对于空间反演，显然有

$$a^{\mu}{}_{\nu}\doteq\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{bmatrix}\doteq g^{\mu\nu};\tag{5.5.26}$$

对于时间反演，有

$$a^{\mu}{}_{\nu}\doteq\begin{bmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{bmatrix};\tag{5.5.27}$$

对于绕 z 轴方向的空间转动变换。有

$$a^{\mu}{}_{\nu}\doteq\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&\cos\theta&\sin\theta&0\\0&-\sin\theta&\cos\theta&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}。\tag{5.5.28}$$

最后，对于坐标轴相互平行，并沿 z 轴方向以常定速度 V 作相对运动的两个惯性参考系之间的（特征）洛伦兹变换。我们有

$$a^{\mu}_{\nu}\doteq\begin{bmatrix}\gamma & 0 & 0 & -\beta\gamma\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ -\beta\gamma & 0 & 0 & \gamma\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathrm{ch}\phi & 0 & 0 & -\mathrm{sh}\phi\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ -\mathrm{sh}\phi & 0 & 0 & \mathrm{ch}\phi\end{bmatrix},\tag{5.5.29}$$

其中

$$\beta=V=\mathrm{th}\phi;\quad \gamma=\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}=\mathrm{ch}\phi。\tag{5.5.30}$$

从式(5.5.23)～(5.5.25)的表示中应注意两点：(1) 任何缩并(标积)均发生在逆变指标和协变指标之间。(2) 二级张量有两个指标，在表示为矩阵乘积关系时这些指标应有正确的位置，第一个矩阵的第二个指标应与第二个矩阵的第一个指标构成一对缩并指标。

[例 1] 导出与坐标变换(5.5.20)相应的逆变换表式。

解：因为

$$x'^{\mu}=a^{\mu}_{\nu}x^{\nu}。\tag{5.5.31}$$

由式(5.5.22)可知

$$x'^{\mu}a_{\mu}{}^{\rho}=a^{\mu}{}_{\nu}a_{\mu}{}^{\rho}x^{\nu}=x^{\rho},\tag{5.5.32}$$

因此与式(5.5.20)相应的逆变换可记为

$$x^{\mu}=a_{\nu}{}^{\mu}x'^{\nu}。\tag{5.5.33}$$

类似地，对于坐标的协变分量，有

$$x'_{\mu}=a_{\mu}{}^{\nu}x_{\nu},\tag{5.5.34}$$

$$x_{\mu}=a^{\nu}{}_{\mu}x'_{\nu}。\tag{5.5.35}$$

读者可以证明式(5.5.26)～(5.5.29)表示的变换都满足式(5.5.22)表示的正交条件。不过应当指出，这些虽然都是正交变换，但

存在某些本质区别。空间反演和时间反演是分立变换，变换行列式 $\det a=-1$；空间转动和洛伦兹变换(时空转动)是连续变换，变换行列式 $\det a=1$。分立变换不存在无穷小变换；而连续变换则可以通过无穷小变换实现。

5.5.3 连续时空变换下旋量的变换特性

现在考察在时空正交变换时狄拉克旋量的变换特性，了解波函数的变换特性对于考察状态的基本性质，构造系统的拉氏密度，分析相互作用项的可能形式等都是十分重要的。

设变换前狄拉克方程的形式为

$$(\gamma^\mu p_\mu - m)\psi(x)=0。 \tag{5.5.36}$$

考虑到 $$p_\mu = i\frac{\partial}{\partial x^\mu} = i\frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu}\frac{\partial}{\partial x'^\nu} = a^\nu{}_\mu i\frac{\partial}{\partial x'^\nu},$$

便可得到四维动量算符的变换性质：

$$p_\mu = a^\nu{}_\mu p'_\nu。 \tag{5.5.37}$$

设旋量的变换是通过矩阵 S 实现的：

$$\psi'(x')=S\psi(x), \tag{5.5.38}$$

于是狄拉克方程(5.5.36)变换后将化为

$$(\gamma^\mu a^\nu{}_\mu p'_\nu - m)S^{-1}\psi'(x')=0。 \tag{5.5.39}$$

将 S 左乘上式，得

$$(S\gamma^\mu S^{-1}a^\nu{}_\mu p'_\nu - m)\psi'(x')=0。 \tag{5.5.40}$$

上式结果表明，为了使狄拉克方程的形式在时空变换下保持不变，旋量的变换 S 应满足如下关系：

$$S\gamma^\mu S^{-1}a^\nu{}_\mu = \gamma^\nu$$

或

$$S^{-1}\gamma^\mu S = a^\mu{}_\nu \gamma^\nu \tag{5.5.41}$$

我们还需要进一步确定 S 的明显形式。连续变换可通过相继的无穷小变换得到，因此我们首先来确定时空作无穷小变换时矩阵 S 的显式。由式(5.5.28)和(5.5.29)可以看出，对于绕 z 轴转过 $\delta\theta$ 的无穷小转动，有

$$a^{\mu}{}_{\nu} \doteq \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \delta\theta & 0 \\ 0 & -\delta\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}; \tag{5.5.42}$$

对于沿 z 轴方向以常定速度 δV 作相对运动的两个惯性参考系之间的无穷小洛伦兹变换，有

$$a^{\mu}{}_{\nu} \doteq \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -\delta V \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\delta V & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \tag{5.5.43}$$

其中 $\delta V \simeq \text{th}\,\phi \simeq \text{sh}\,\phi$。利用关系式 $a^{\mu\nu} = a^{\mu}{}_{\rho} g^{\rho\nu}$，可得到关于无穷小变换逆变分量形式：

$$a^{\mu\nu} \doteq \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -\delta\theta & 0 \\ 0 & \delta\theta & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \text{(绕 } z \text{ 轴转动)}, \tag{5.5.44}$$

$$a^{\mu\nu} \doteq \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \delta V \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ -\delta V & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \text{(洛伦兹变换)。} \tag{5.5.45}$$

由此可以看出，无穷小变换一般可记为如下分量形式：

$$a^{\mu\nu} = g^{\mu\nu} + \varepsilon^{\mu\nu}, \tag{5.5.46}$$

其中无穷小变换是反对称的：

$$\varepsilon^{\mu\nu} = -\varepsilon^{\nu\mu}, \tag{5.5.47}$$

这一特性也可由正交条件得到。由式(5.5.44)和(5.5.45)可知

$$-\varepsilon^{12} = \varepsilon^{21} = \delta\theta, \quad \text{(空间转动)}, \tag{5.5.48}$$

$$\varepsilon^{03} = -\varepsilon^{30} = \delta V, \quad \text{(洛伦兹变换)。} \tag{5.5.49}$$

在无穷小变换下，设

$$S = 1 + T, \; S^{-1} = 1 - T, \tag{5.5.50}$$

其中 T 为无穷小算子。将上式代入式(5.5.41),得

$$(1-T^{\dagger})\gamma^{\mu}(1+T)=(g^{\mu}{}_{\nu}+\varepsilon^{\mu}{}_{\nu})\gamma^{\nu},$$

因此有

$$\gamma^{\mu}T-T\gamma^{\mu}=\varepsilon^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}。 \tag{5.5.51}$$

可以证明,上式的解可表示为

$$T=\frac{1}{4}\varepsilon^{\mu\nu}\gamma_{\mu}\gamma_{\nu}=\frac{1}{8}\varepsilon^{\mu\nu}(\gamma_{\mu}\gamma_{\nu}-\gamma_{\nu}\gamma_{\mu})。 \tag{5.5.52}$$

[例 2] 验证式(5.5.52)是式(5.5.51)的解。

解: 式(5.5.52)可表示为

$$T=\frac{1}{4}\varepsilon_{\mu\nu}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}$$

将上式代入式(5.5.51)等号左侧,得

$$\begin{aligned}\gamma^{\mu}T-T\gamma^{\mu}&=\frac{1}{4}\varepsilon_{\rho\tau}(\gamma^{\mu}\gamma^{\rho}\gamma^{\tau}-\gamma^{\rho}\gamma^{\tau}\gamma^{\mu})\\&=\frac{1}{4}\varepsilon_{\rho\tau}\{(2g^{\mu\rho}-\gamma^{\rho}\gamma^{\mu})\gamma^{\tau}-\gamma^{\rho}(2g^{\tau\mu}-\gamma^{\mu}\gamma^{\tau})\}\\&=\frac{1}{2}\varepsilon_{\rho\tau}(g^{\mu\rho}\gamma^{\tau}-g^{\tau\mu}\gamma^{\rho})\\&=\varepsilon^{\mu}{}_{\tau}\gamma^{\tau}。\end{aligned}$$

于是得证。

于是在无穷小时空变换下,狄拉克旋量的变换规律由下式给出:

$$\begin{aligned}&\psi'(x')=S\psi(x),\\&S=1+\frac{1}{4}\sigma_{\mu\nu}\varepsilon^{\mu\nu},\\&\sigma_{\mu\nu}\equiv\frac{1}{2}(\gamma_{\mu}\gamma_{\nu}-\gamma_{\nu}\gamma_{\mu})。\end{aligned} \tag{5.5.53}$$

$\varepsilon_{\mu\nu}$ 和 $\sigma_{\mu\nu}$ 都是四维时空中的反对称张量。而且可以证明 $\sigma_{\mu\nu}$ 的纯空间分量 σ_{ij} 与狄拉克粒子的自旋算符 $\frac{1}{2}\Sigma_k$ 有关。$\sigma_{\mu\nu}$ 的纯空间分量可表示为(i, $j=1$, 2, 3, 且 $i\neq j$)

$$\sigma_{ij}=\gamma_i\gamma_j=\gamma^i\gamma^j,$$

由式(5.5.1)，并采用γ矩阵的标准表示(5.5.2)以及关于泡利矩阵的乘积公式($\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$)，可得如下关系

$$\alpha_i\alpha_j=-\gamma^i\gamma^j=i\varepsilon_{ijk}\Sigma_k, \tag{5.5.54}$$

其中Σ_k由式(5.4.17)定义，是狄拉克粒子的自旋算符。由此不难得到($i\neq j$)

$$\sigma_{ij}=\gamma^i\gamma^j=-i\varepsilon_{ijk}\Sigma_k。 \tag{5.5.55}$$

此外，由式(5.5.54)不难证明如下关系：

$$\boldsymbol{\Sigma}=-\frac{i}{2}\,\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{\alpha}=\frac{i}{2}\,\boldsymbol{\gamma}\times\boldsymbol{\gamma}。 \tag{5.5.56}$$

现在将上述结果应用于无穷小洛伦兹变换和空间转动。对于无穷小洛伦兹变换。$\varepsilon^{03}=-\varepsilon^{30}=\delta V_3$，所以

$$\frac{1}{4}\,\sigma_{\mu\nu}\varepsilon^{\mu\nu}=\frac{1}{4}(\gamma_0\gamma_3\varepsilon^{03}+\gamma_3\gamma_0\varepsilon^{30})=-\frac{1}{2}\,\delta V_3\alpha_3。$$

推广到速度方向任意的情况，有

$$S_L=1-\frac{1}{2}(\delta\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{\alpha})。 \tag{5.5.57}$$

对于速度不是无穷小的情况，有

$$S_L=e^{-\frac{1}{2}\phi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\alpha}}=\mathrm{ch}\,\frac{\phi}{2}-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\alpha}\,\mathrm{sh}\,\frac{\phi}{2}, \tag{5.5.58}$$

其中$\boldsymbol{n}$为惯性系相对速度方向单位矢量，即$\boldsymbol{V}=V\boldsymbol{n}$，且$\mathrm{th}\phi=V$。当$V$很小时，$\mathrm{th}\phi\simeq\phi\simeq\delta V$。因为$\boldsymbol{\alpha}$是厄密矩阵，所以上述确定狄拉克旋量变换特性的矩阵$S$也是厄密的，$S^\dagger=S_L$。

对于沿z轴方向的空间转动，$\varepsilon^{12}=-\varepsilon^{21}=-\delta\theta_3$，所以有

$$\frac{1}{4}\,\sigma_{\mu\nu}\varepsilon^{\mu\nu}=\frac{1}{4}(\sigma_{12}\varepsilon^{12}+\sigma_{21}\varepsilon^{21})=\frac{1}{2}\,i\delta\theta_3\,\Sigma_3,$$

于是我们得

$$S_R=1+i\,\frac{1}{2}\,\delta\theta_3\Sigma_3。$$

对于沿任意方向$\boldsymbol{n}$的转动，有

$$S_R=1+i\,\frac{1}{2}(\delta\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\Sigma}), \tag{5.5.59}$$

其中$\boldsymbol{n}$为转动轴方向的单位矢量，$\delta\theta$为转动的角度。对于任意角度θ的转动，有

$$S_R=e^{i\frac{1}{2}\theta n\cdot\Sigma}$$

注意，这是一种幺正变换，即 $S_R^{+}=S_R^{-1}$。

现在我们讨论 $\bar{\psi}$ 的变换性质。因为 $\psi'(x')=S\psi(x)$，且由于 $(\gamma^0)^2=1$，所以可得

$$\bar{\psi}'(x')=\bar{\psi}(x)\gamma^0S^{+}\gamma^0。$$

我们来考察 $\gamma^0S^{+}\gamma^0$。对于无穷小洛伦兹变换，由式(5.5.57)可知

$$\gamma^0S_L^{+}\gamma^0=\gamma^0\left(1-\frac{1}{2}\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{\alpha}\right)\gamma^0。$$

注意到 $\boldsymbol{\alpha}=\gamma^0\boldsymbol{\gamma}$，$\gamma^0$ 和 $\boldsymbol{\gamma}$ 反对易，于是有

$$\gamma^0S_L^{+}\gamma^0=1+\frac{1}{2}\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{\alpha}=S_L^{-1}。$$

对于空间转动，由式(5.5.59)可得

$$\gamma^0S_R^{+}\gamma^0=\gamma^0\left(1-i\frac{1}{2}\delta\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{\Sigma}\right)\gamma^0。$$

考虑到 γ^0 与

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\sigma & 0\\ 0 & \sigma\end{bmatrix},\tag{5.5.60}$$

对易，于是对于空间转动也有

$$\gamma^0S_R^{+}\gamma^0=1-i\frac{1}{2}\delta\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{\Sigma}=S_R^{-1}。$$

总起来说，对于 $a^{00}>0$ 的正交变换(洛伦兹变换和空间转动)，有

$$\gamma^0S^{+}\gamma^0=S^{-1},\ (a^{00}>0)。\tag{5.5.61}$$

所以 $\bar{\psi}$ 的变换规律可表示为

$$\bar{\psi}'(x')=\bar{\psi}(x)S^{-1}。\tag{5.5.62}$$

5.5.4 空间反演下旋量的变换特性

描写空间反演($\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{x}'=-\boldsymbol{x}$，$t\to t'=t$)的变换矩阵为

$$a_{\nu}^{\mu}\doteq\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{bmatrix},\tag{5.5.63}$$

这也是正交矩阵。在这种变换下旋量的变换性质仍然由下式所确定的 S 给出：

$$S_p^{-1}\gamma^\mu S_p = a^\mu{}_\nu \gamma^\nu。 \tag{5.5.64}$$

利用式(5.5.63)，上式可表示为

$$S_p^{-1}\gamma^0 S_p = \gamma^0,\ S_p^{-1}\gamma^i S_p = -\gamma^i。 \tag{5.5.65}$$

满足上述条件的解是

$$S_p = e^{i\varphi}\gamma^0。 \tag{5.5.66}$$

旋量波函数在空间反演下的变换规律于是为

$$\psi'(x') = e^{i\varphi}\gamma^0\psi(x), \tag{5.5.67}$$

位相因子可以取 ± 1 和 $\pm i$。

5.5.5 由狄拉克旋量所构成的协变量

由四个 γ 矩阵 γ^0，γ^1，γ^2，γ^3 以及单位矩阵可以构造如下 16 个独立的 4×4 矩阵：

$$\Gamma^{(S)} = 1,\ \Gamma_\mu^{(V)} = \gamma_\mu,\ \Gamma_{\mu\nu}^{(T)} = \sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu)$$

$$\Gamma^{(P)} = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \equiv \gamma^5 \equiv \gamma_5,\ \Gamma_\mu^{(A)} = \gamma_5\gamma_\mu。 \tag{5.5.68}$$

还可以证明，这 16 个矩阵构成 4×4 矩阵的完全集。这就是说，任何 4×4 矩阵都可用这 16 个矩阵的线性叠加表示。

式(5.5.68)中引进的矩阵 γ_5 的定义是

$$\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3。 \tag{5.5.69}$$

不难证明，γ_5 是厄密的，即

$$\gamma_5^+ = \gamma_5, \tag{5.5.70}$$

且存在如下关系：

$$\gamma_5\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma_5 = 0, \tag{5.5.71}$$

$$\gamma_5\sigma^{\mu\nu} - \sigma^{\mu\nu}\gamma_5 = 0。 \tag{5.5.72}$$

利用上述性质不难证明，γ_5 与洛伦兹变换和空间转动($\det a = 1$)下确定旋量波函数变换性质的矩阵 S 存在如下对易关系：

$$\gamma_5 S - S\gamma_5 = 0, \tag{5.5.73}$$

即

$$S^{-1}\gamma_5 S=\gamma_5。\tag{5.5.74}$$

而对于空间反演变换($\det a=-1$)，因为 $S=e^{i\varphi}\gamma^0$，所以变换 S 与 γ_5 反对易；或 $S^{-1}\gamma_5 S=-\gamma_5$。总起来说，我们可得

$$S^{-1}\gamma_5 S=(\det a)\gamma_5。\tag{5.5.75}$$

下面我们来考察由 16 个 Γ 矩阵所构成的包含一对旋量波函数 ψ 及其伴随 $\bar{\psi}$ 的"双线型"协变量。因为实验发现，具有半整数自旋的粒子在任何相互作用过程中总是成对出现的，描写这种相互作用时它们的波函数因此也总是成对出现的。由式(5.5.68)可知，我们可以构成 16 个独立的双线型协变量的分量。它们分别属于标量，矢量，(反对称)张量，赝标量及赝矢量：

$$\begin{aligned}
&S=\bar{\psi}\Gamma^{(S)}\psi=\bar{\psi}\psi && (1)\\
&V_\mu=\bar{\psi}\Gamma^{(V)}_\mu\psi=\bar{\psi}\gamma_\mu\psi && (4)\\
&T_{\mu\nu}=\bar{\psi}\Gamma^{(T)}_{\mu\nu}\psi=\bar{\psi}\sigma_{\mu\nu}\psi && (6)\\
&P=\bar{\psi}\Gamma^{(A)}\psi=\bar{\psi}\gamma_5\psi && (1)\\
&A_\mu=\bar{\psi}\Gamma^{(A)}_\mu\psi=\bar{\psi}\gamma_5\gamma_\mu\psi && (4)
\end{aligned}\tag{5.5.76}$$

上式括号内的数代表独立分量数目。下面我们分别考察时空坐标作正交变换(包括洛伦兹变换和空间反演)时上述量的变换性质。

(1) $S=\bar{\psi}\psi$

因为

$$\bar{\psi}'(x')\psi'(x')=\bar{\psi}(x)SS^{-1}\psi(x)=\bar{\psi}(x)\psi(x),\tag{5.5.77}$$

所以无论在洛伦兹变换还是在空间反演变换下，$\bar{\psi}\psi$ 都保持不变。因此 $S=\bar{\psi}\psi$ 是标量。

(2) $V^\mu=\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$

因为

$$\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\psi'(x')=\bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^\mu S\psi(x)=a^\mu{}_\nu\bar{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x),\tag{5.5.78}$$

所以在洛伦兹变换下，V^μ 是四维矢量。在空间反演下，$S=e^{i\varphi}\gamma^0$，所以 V^μ 的各分量将存在如下变换规律：

$$\overline{\psi}'(x')\gamma^\mu\psi'(x')=\overline{\psi}(x)\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0\psi(x)$$
$$=\begin{cases}-\overline{\psi}\gamma^\mu\psi & (\mu=1,\ 2,\ 3),\\ \overline{\psi}\gamma^\mu\psi & (\mu=0)。\end{cases}\qquad(5.5.79)$$

(3) $T^{\mu\nu}=\overline{\psi}\sigma^{\mu\nu}\psi$

因为

$$\overline{\psi}'(x')\sigma^{\mu\nu}\psi'(x')=\psi(x)S^{-1}\sigma^{\mu\nu}S\psi(x)$$

所以当 $\mu\neq\nu$ 时，有

$$S^{-1}\sigma^{\mu\nu}S=S^{-1}\gamma^\mu\gamma^\nu S=(S^{-1}\gamma^\mu S)(S^{-1}\gamma^\nu S)$$
$$=a^\mu{}_\rho a^\nu{}_\tau\gamma^\rho\gamma^\tau,$$

即

$$T'^{\mu\nu}=a^\mu{}_\rho a^\nu{}_\tau T^{\rho\tau}。\qquad(5.5.80)$$

上述变换性质表明，$T^{\mu\nu}$ 是四维二阶张量，它的纯空间分量 T^{ij} 在空间反演下不变；而分量 T^{i0} 和 T^{0i} 在空间反演下将改变符号；而 $T^{00}=0$。

(4) $P=\overline{\psi}\gamma_5\psi$

由式(5.75)可知

$$\overline{\psi}'(x')\gamma_5\psi'(x')=\overline{\psi}(x)S^{-1}\gamma_5S\psi(x)=(\det a)\overline{\psi}\gamma_5\psi,\qquad(5.5.81)$$

所以在洛伦兹变换($\det a=1$)下，$P'=P$；在空间反演($\det a=-1$)下，$P'=-P$。具有这种变换性质的标量称为“赝标量”。

(5) $A^\mu=\overline{\psi}\gamma_5\gamma^\mu\psi$

因为

$$\overline{\psi}'(x')\gamma_5\gamma^\mu\psi'(x')=\overline{\psi}(x)S^{-1}\gamma_5\gamma^\mu S\psi(x),$$

且考虑到 $S^{-1}\gamma_5\gamma^\mu S=(S^{-1}\gamma_5S)(S^{-1}\gamma^\mu S)=(\det a)a^\mu{}_\nu\gamma_5\gamma^\nu$，

所以有

$$A'^\mu=(\det a)a^\mu{}_\nu A^\nu。\qquad(5.5.82)$$

在洛伦兹变换下，$A'_\mu=a^\mu{}_\nu A^\nu$，所以这是四维矢量。但是在空间反演变换($a^i{}_j=-\delta_{ij}$，$a^0{}_0=1$)下，$A'^0=-A^0$；$A'^i=A^i$。此结果恰巧与矢量 V^μ 相应分量的变换规律[见式(5.5.79)]相差一负号。这种量称为“赝矢量”。

5.6 零质量粒子的狄拉克方程，手征对称

在现实的能量标度上。电磁相互作用与弱相互作用是不对称的，其中表现之一是仅仅参与弱相互作用的中微子（包括电子型、μ子型以及重轻子型中微子 ν_e，ν_μ，ν_τ）以及反中微子的质量为零。另一方面，既参与弱作用又参与电磁作用的电子、μ子、重轻子以及相应的反粒子质量不为零。但是目前的规范理论认为，在更高能量标度上，这两种相互作用是对称的，是统一的。在哪个情况下。所有轻子及其相应的中微子的质量均为零。现实世界的不对称性是由于对称性"破缺"所致。

自旋 1/2 质量为零的粒子的运动方程为

$$\gamma^\mu p_\mu \psi = 0。 \tag{5.5.83}$$

因为 γ_5 与 γ^μ 反对易，上式在如下 γ_5 变换下保持不变：

$$\psi \to \pm \gamma_5 \psi。 \tag{5.5.84}$$

因此，如果 ψ 是方程(5.5.83)的一个解，则 $\pm\gamma_5\psi$ 也是该方程的一个解。运动方程(5.5.83)的这种不变性反映了一种新的对称性，这种对称性常称为"手征(chiral)对称"。

任何波函数总可分解为

$$\psi = \frac{1}{2}(1-\gamma_5)\psi + \frac{1}{2}(1+\gamma_5)\psi = \psi_L + \psi_R, \tag{5.5.85}$$

其中 ψ_L 称为"左手态"；ψ_R 称为"右手态"。因为

$$\gamma_5\psi_L = -\psi_L, \quad \gamma_5\psi_R = \psi_R, \tag{5.5.86}$$

所以左手态和右手态波函数在手征变换下具有不同的变换特性。

我们还可以证明，手征算符 γ_5 与螺旋性算符 $S_p = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{n}\left(\boldsymbol{n}=\frac{\boldsymbol{p}}{p}\right)$ 之间存在简单的关系，所以粒子状态的手征对称性与螺旋特性之间存在确定的关系。

利用 $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3) = (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma})$，$p_\mu = (\varepsilon, -\boldsymbol{p})$。可将式(5.5.83)表示为

$$\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{p}\psi = \gamma^0\varepsilon\psi$$

上式左乘 $\gamma_5\gamma^0$，注意到 $\boldsymbol{\Sigma} = \gamma_5\gamma^0\boldsymbol{\gamma}$，$\varepsilon = \lambda\overline{p} = \lambda p\,(c=1,\ m_0=0)$，于

是可得

$$\frac{\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{p}\psi=\lambda\gamma_5\psi, \tag{5.5.87}$$

或

$$S_p=\frac{1}{2}\lambda\gamma_5。 \tag{5.5.88}$$

现在讨论左手态的螺旋性。因为

$$S_p\psi_L=\frac{1}{2}\lambda\gamma_5\psi_L=-\frac{1}{2}\lambda\psi_L, \tag{5.5.89}$$

所以，对于粒子($\lambda=1$)，ψ_L 的螺旋度为负；对于反粒子($\lambda=-1$)。螺旋度为正。螺旋度为正意味着自旋沿动量方向取向。我们可形象地将这种粒子称为右旋粒子。反之，称为左旋粒子。因此 ψ_L 可用来描写左旋粒子和右旋反粒子。另一方面，因为

$$S_p\psi_R=\frac{1}{2}\lambda\gamma_5\psi_R=\frac{1}{2}\lambda\psi_R, \tag{5.5.90}$$

所以对于粒子($\lambda=1$)，ψ_R 的螺旋度为正；对于反粒子，ψ_R 的螺旋度为负，因此 ψ_R 可用来描写右旋粒子和左旋反粒子。

以上讨论表明，动量确定时零质量狄拉克粒子与反粒子具有相反的螺旋性。将上述这套理论应用于零质量中微子，便称为“二分量中微子理论”。自然界中的中微子和反中微子究竟应该用 ψ_R 描写还是用 ψ_L 描写，需由实验确定。迄今实验表明，自然界中只存在左旋中微子和右旋反中微子，所以应采用 ψ_L 来描写它们的状态。另一种情况，作为比较，对于有质量的自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子或反粒子，则必须用 ψ_L 和 ψ_R 的混合来描写它们的手征状态或螺旋性状态。

§5.6 电磁场中的电子

5.6.1 外场中电子的狄拉克方程

在通常单位制下，外场中电子的广义动量可通过下面的代换

得到(采用普通单位制):

$$p_\mu \to p_\mu - \frac{e}{c} A_\mu, \tag{5.6.1}$$

其中 $p_\mu = i\hbar\partial_\mu = \left(i\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}, i\hbar\nabla\right)$, $A_\mu = (\Phi, -\boldsymbol{A})$。狄拉克方程可表示为

$$\left[\gamma^\mu\left(p_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right) - mc\right]\psi = 0。 \tag{5.6.2}$$

如果将上式时空部分分开,可表示为

$$\left[\gamma^0\left(i\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{e}{c}\Phi\right) - \boldsymbol{\gamma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) - mc\right]\psi = 0。$$

再将 γ^0 左乘上式,注意到 $(\gamma^0)^2 = 1$, $\gamma^0\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\alpha}$, $\gamma^0 = \beta$,于是外场中电子的狄拉克方程也可表示为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi, \tag{5.6.3}$$

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) + mc^2\beta + e\Phi。 \tag{5.6.4}$$

现在考虑定态解。在定态情况下

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = \psi(\boldsymbol{x})e^{-iEt/\hbar}。$$

设 $\psi(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix}\varphi(\boldsymbol{x})\\ \chi(\boldsymbol{x})\end{bmatrix}$, 式(5.6.3)可化为(在标准表象中)

$$\begin{cases}(E - e\Phi - mc^2)\varphi = c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\chi,\\ (E - e\Phi + mc^2)\chi = c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi。\end{cases} \tag{5.6.5}$$

5.6.2 展开至 1/c 项,泡利(Pauli)方程

现在考察式(5.6.3)或式(5.6.5)在非相对论近似下的形式。当考虑正解时,由于 $E = \varepsilon_k + mc^2$, 其中 ε_k 为电子动能,所以非相对论近似的条件是

$$|E - e\Phi| \ll mc^2。 \tag{5.6.6}$$

在上述条件下,式(5.6.5)可化为

$$\varepsilon_k\varphi = c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\chi + e\Phi\varphi,$$

$$\chi=\frac{c\sigma\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)}{\varepsilon_k+2mc^2-e\Phi}\varphi\simeq\frac{1}{2mc}\sigma\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi。\tag{5.6.7}$$

将式(5.6.7)中的 χ 代入第一式,得

$$\varepsilon_k\varphi=\left\{\frac{\left[\sigma\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2}{2m}+e\Phi\right\}\varphi。\tag{5.6.8}$$

因为

$$\left[\sigma\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2=\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\frac{e\hbar}{c}\sigma\cdot(\nabla\times\boldsymbol{A}),$$

且 $\nabla\times\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$ 为电磁场的磁感应强度。式(5.6.8)于是可化为

$$\varepsilon_k\varphi=\left[\frac{\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2}{2m}+e\Phi-\frac{e\hbar}{2mc}\sigma\cdot\boldsymbol{B}\right]\varphi。\tag{5.6.9}$$

这就是薛定谔量子力学中的泡利方程 (1927 年)。这方程表明,电磁场中的电子在非相对论近似下其哈密顿算符 H 中有一附加项 $-\frac{e\hbar}{2mc}\sigma\cdot\boldsymbol{B}$,它相当于磁矩为

$$\boldsymbol{\mu}=\frac{e\hbar}{2mc}\sigma=\mu_B\sigma\tag{5.6.10}$$

的磁偶极子在外磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的势能。其中 $\mu_B=\frac{e\hbar}{2mc}$ 为玻尔磁子。应当指出,哈密顿算符中这一附加项现在是自动地出现的。

狄拉克电子的电流密度为

$$\boldsymbol{j}=ec\psi^+\boldsymbol{a}\psi=ec(\varphi^+\sigma\chi+\chi^+\sigma\varphi)。\tag{5.6.11}$$

将式(5.6.7)第二式 $\chi\simeq\frac{1}{2mc}\sigma\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi$,以及

$\chi^+=\frac{1}{2mc}\left[\left(-\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi^+\right]\cdot\sigma$ 代入上式,得

$$\boldsymbol{j}\simeq\frac{e}{2m}\{\varphi^+\sigma(\sigma\cdot\boldsymbol{p})\varphi-[(\boldsymbol{p}\varphi^+)\cdot\sigma]\sigma\varphi\}-\frac{e^2}{mc}\varphi^+\boldsymbol{A}\varphi,$$

再利用如下结果

$$[\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\varphi]_i=\sigma_i\sigma_j p_j\varphi=(\delta_{ij}+i\varepsilon_{ijk}\sigma_k)p_j\varphi$$
$$=p_i\varphi+i\varepsilon_{ijk}p_j\sigma_k\varphi,$$
$$[(\boldsymbol{p}\varphi^+)\cdot\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}]_i=p_j\varphi^+\sigma_j\sigma_i=p_j\varphi^+(\delta_{ij}+i\varepsilon_{jik}\sigma_k)$$
$$=p_i\varphi^+-i\varepsilon_{ijk}p_j\varphi^+\sigma_k,$$

我们可得

$$\boldsymbol{j}\simeq\frac{e\hbar}{2mi}[\varphi^+\nabla\varphi-(\nabla\varphi^+)\varphi]+c\nabla\times(\varphi^+\boldsymbol{\mu}\varphi)$$
$$-\frac{e^2}{mc}\varphi^+\boldsymbol{A}\varphi, \tag{5.6.12}$$

其中 $\boldsymbol{\mu}=\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}$ 为电子磁矩。上式中 $\boldsymbol{j}_M=c\nabla\times(\varphi^+\boldsymbol{\mu}\varphi)$ 来源于电子磁矩，称为"极化流"(类似于电动力学中的磁化电流，但相对论中磁化和极化现象是统一的)；式(5.6.12)中其他各项称为"传导流"。

精确的实验发现，电子磁矩要比1个玻尔磁子大千分之一多。量子电动力学发现这种"反常磁矩"来源于电子的电磁场与真空相互作用。

5.6.3 展开至 $1/c^2$ 项，$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 耦合①

由式(5.6.7)第二式，在 $1/c$ 近似下，狄拉克旋量中的小分量 χ 可近似为

$$\chi=\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi,$$
$$\chi^+=-\frac{1}{2mc}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi^+\cdot\boldsymbol{\sigma}。 \tag{5.6.13}$$

考虑到概率密度为

$$\rho=\psi^+\psi=[\varphi^+,\ \chi^+]\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix}=|\varphi|^2+|\chi|^2, \tag{5.6.14}$$

所以当仅仅保留到 $1/c$ 的项时，$\rho=|\varphi|^2$，这显然与非相对论薛定

① 建立 $1/c^2$ 近似下薛定谔哈密顿算符形式的另一种方法是"福尔第-胡苏逊(Foldy-Wouthuysen)变换"。参阅：J. D. Bjorken and S. D. Drell, «Relativistic Quantum Mechanics», Mc Graw-Hill Book Company (1964).

谓方程 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_{sch}=H\varphi_{sch}$ 的结果 $\rho=|\varphi_{sch}|^2$ 一致。所以可简单地取 $\varphi_{sch}=\varphi$。但是当我们在更进一步近似的讨论中考虑包含 $1/c^2$ 的项时，将式(5.6.13)代入式(5.6.14)可知

$$\rho=|\varphi|^2+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}|\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi|^2。\qquad(5.6.15)$$

在这种近似下，狄拉克理论的非相对论近似不能直接赋予单粒子概念，由此得到的 H 的本征值不能直接解释为可能测量值。为了找出在 $1/c^2$ 近似下相应的薛定谔波函数 φ_{sch}，应在 $1/c^2$ 近似下根据如下要求建立 φ 与 φ_{sch} 之间的转换关系：

$$\int\varphi^+{}_{sch}\varphi_{sch}d\boldsymbol{x}=\int\psi^+\psi d\boldsymbol{x}。$$

在 $1/c^2$ 近似下，由式(5.6.15)可知

$$\int\psi^+\psi d\boldsymbol{x}=\int\varphi^+\varphi d\boldsymbol{x}+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\int d\boldsymbol{x}(\nabla\varphi^+\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi)$$

其中第二项关于全空间的积分在作分部积分后可化为

$$\int d\boldsymbol{x}(\nabla\varphi^+\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi)=-\int\varphi^+\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi)d\boldsymbol{x}$$

$$=-\int\varphi^+\nabla^2\varphi d\boldsymbol{x}。$$

另一方面，这项关于全空间的积分也可化为

$$\int d\boldsymbol{x}(\nabla\varphi^+\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi)=-\int(\nabla^2\varphi^+)\varphi d\boldsymbol{x},$$

因此我们有(在 $1/c^2$ 近似下)

$$\int\varphi^+{}_{sch}\varphi_{sch}d\boldsymbol{x}=\int d\boldsymbol{x}\left\{\varphi^+\varphi-\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}[\varphi^+\nabla^2\varphi+(\nabla^2\varphi^+)\varphi]\right\}。$$

我们于是得到了狄拉克理论在 $1/c^2$ 近似下相对应的薛定谔波函数与大分量 φ 的关系，为

$$\varphi_{sch}=\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi,\qquad(5.6.16)$$

其中 $\boldsymbol{p}=-i\hbar\nabla$ 为算符。与上式相应的逆变换为

$$\varphi=\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi_{\mathrm{sch}} \tag{5.6.17}$$

现在来考察库仑场中狄拉克电子所满足的方程在精确到 $1/c^2$ 时的形式。由(5.6.7)第二式并考虑到 $\boldsymbol{A}=0$, 有

$$\chi=\frac{c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})}{2mc^2+\varepsilon_k-e\Phi}\approx\frac{1}{2mc}\left(1-\frac{\varepsilon_k-e\Phi}{2mc^2}\right)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\varphi。 \tag{5.6.18}$$

将上式代入式(5.6.7)中第一式,得

$$\begin{aligned}\varepsilon_k\varphi&=\left[e\Phi+\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\left(1-\frac{\varepsilon_k-e\Phi}{2mc^2}\right)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\right]\varphi\\&=\left[e\Phi+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{\varepsilon_k\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}+\frac{e}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\Phi(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\right]\varphi。\end{aligned}$$

这方程虽然也具有薛定谔方程的形式，但不能直接赋予它非相对论量子理论中薛定谔方程所包含的意义，因为上式不能给出概率的正确表达式。为了找出相应于薛定谔理论中的哈密顿算符 H, 必须将 φ 换为 φ_{sch}。为此，可在上式等号两侧乘以算符 $\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)$, 并利用变换关系(5.6.16)和(5.6.17), 于是我们得到

$$\begin{aligned}\varepsilon_k\varphi_{\mathrm{sch}}=&\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\left[e\Phi+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{\varepsilon_k\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right.\\&\left.+\frac{e}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\Phi(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\right]\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi_{\mathrm{sch}}。\end{aligned}$$

当保留至 $1/c^2$ 的项时, 上式可化为

$$\begin{aligned}\varepsilon_k\varphi_{\mathrm{sch}}=&\left[e\Phi+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{\varepsilon_k\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}+\frac{e}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\Phi(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\right.\\&\left.+\frac{e}{8m^2c^2}(\boldsymbol{p}^2\Phi-\Phi\boldsymbol{p}^2)\right]\varphi_{\mathrm{sch}}。\end{aligned}$$

将上式等号右边第三项移至左边,得

$$\begin{aligned}\varepsilon_k\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right)\varphi_{\mathrm{sch}}=&\left\{e\Phi+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+\frac{e}{4m^2c^2}\right.\\&\left.\cdot\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\Phi(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})+\frac{1}{2}(\boldsymbol{p}^2\Phi-\Phi\boldsymbol{p}^2)\right]\right\}\varphi_{\mathrm{sch}}。\end{aligned}$$

如果再将算符$\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right)$左乘上式。在取$1/c^2$近似时，便得到我们所需要的最后结果：

$$\varepsilon_k\varphi_{\text{sch}}=H\varphi_{\text{sch}} \tag{5.6.19}$$

其中

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+e\Phi-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{e}{4m^2c^2}\Big[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\Phi(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})-\frac{1}{2}(\boldsymbol{p}^2\Phi+\Phi\boldsymbol{p}^2)\Big]。 \tag{5.6.20}$$

已具有薛定谔理论中哈密顿算符的类似意义。注意到$\boldsymbol{E}=-\nabla\Phi$，有

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\Phi(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})&=\Phi(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\Phi)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\\&=\Phi\boldsymbol{p}^2+i\hbar(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{E})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\\&=\Phi\boldsymbol{p}^2+i\hbar\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{p}-\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p}),\\\boldsymbol{p}^2\Phi+\Phi\boldsymbol{p}^2&=\boldsymbol{p}\cdot[(\boldsymbol{p}\Phi)+\Phi\boldsymbol{p}]+\Phi\boldsymbol{p}^2\\&=(\boldsymbol{p}^2\Phi)+2(\boldsymbol{p}\Phi)\cdot\boldsymbol{p}+2\Phi\boldsymbol{p}^2\\&=-\hbar^2\nabla^2\Phi+2i\hbar\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{p}+2\Phi\boldsymbol{p}^2,\end{aligned}$$

于是最后得到

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+e\Phi-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}-\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\sigma\cdot\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p}+\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2\Phi。 \tag{5.6.21}$$

上式等号右边第一项和第二项显然是熟悉的，其后三项是$1/c^2$量级修正。其中第三项来自动能的相对论性修正：

$$E_k=c\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2c^2}-mc^2\approx\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2} \tag{5.6.22}$$

第五项称为“达尔文(Darwin)项”，因为对库仑势来说

$$\nabla^2\Phi=-4\pi Ze\delta(\boldsymbol{r}), \tag{5.6.23}$$

所以这一项除场源点处外均为零，式(5.6.21)右边第四项称为“托马斯(Thomas)项”。若电场是中心力场，则有

$$\boldsymbol{E}=-\nabla\Phi=-\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{d\Phi(\boldsymbol{r})}{dr}, \tag{5.6.24}$$

于是托马斯项可化为明显的自旋轨道耦合形式：

$$\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}\frac{d\Phi(r)}{dr}=\frac{1}{2m^2c^2r}\frac{du}{dr}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}, \qquad (5.6.25)$$

其中 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 为轨道角动量；$\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 为电子自旋；$u=e\Phi$ 为电子在场 Φ 中的势能。自旋轨道耦合项在解释碱金属元素光谱线双分裂以及外磁场中原子谱线的反常塞曼效应等现象中都是很重要的。

5.6.4 氢原子能级的精细结构

氢原子或类氢原子是一个电子在原子核库仑势场中运动的量子系统。因为电子运动速率 $v/c\sim\frac{e^2}{\hbar c}\sim\alpha\ll1$，所以可用 v^2/c^2 量级近似下的哈密顿算符(5.6.21)讨论相对论性修正。

我们先对(5.6.21)式中的各项作量级分析。其中第一、第二项

$$H_0\equiv\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+e\Phi \qquad (5.6.26)$$

可作为零级近似，其量级(绝对值)$\sim I=\frac{me^4}{2\hbar^2}$。式(5.6.21)等号右边第三项 $H_1\equiv-\frac{p^4}{8m^3c^2}$ 来源于电子动能的相对论性修正。相对于 H_0，H_1 的量级为 $\frac{p^2}{m^2c^2}\sim\frac{I}{mc^2}\sim\frac{e^4}{\hbar^2c^2}=\alpha^2$。式(5.6.21)等号右边第四项

$$H_2=-\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p}=\frac{1}{2m^2c^2r}\frac{du}{dr}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} \qquad (5.6.27)$$

是 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 耦合项，它起源于电子自旋磁矩与轨道磁矩之间的相互作用，其中 $U=e\Phi$ 为电子在场 Φ 中的势能。注意到 $U\sim I$，$r\sim a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$(玻尔半径)，$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\sim\hbar^2$，则 H_2 的量级为 $\frac{I\hbar^2}{m^2c^2a_0^2}$。或者说相对于 H_0，H_2 的量级为 $\sim\frac{\hbar^2}{m^2c^2a_0^2}=\frac{e^4}{\hbar^2c^2}=\alpha^2$。式(5.6.21)等号

注：为读者方便起见，这里列出关于玻尔半径 a_0、精细结构常数 α、类氢原子电离电势 I 的表式：$a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$，$\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}$，$I=\frac{Z^2e^2}{2a_0}=\frac{Zme^4}{2\hbar^2}$。

右边最后一项

$$H_3=\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2\Phi \tag{5.6.28}$$

为达尔文项。对于点状原子核的库仑势，$\nabla^2\Phi=-4\pi Ze\delta(\boldsymbol{r})$。考虑到电子电荷为负，所以 $H_3=\frac{\pi\hbar Ze^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r})$。这一项反映了电子分布于原点时所引起的相互作用。考虑到 $e\Phi\sim I$，所以这一项的数量级为 $\sim\frac{I\hbar^2}{m^2c^2a_0^2}$，或相对于 H_0 来说，其量级也是 $\sim\alpha^2$。

从上面的分析来看，式(5.6.21)哈密顿算符中来自相对论修正的三项的量级相对于 H_0 来说，都是 $\alpha^2\sim\left(\frac{1}{137}\right)^2$，所以可以看作微扰。因此在一级微扰近似下对氢或类氢原子能级的相对论性修正可归结为如下问题：计算式(5.6.21)中第3、4、5项(即 H_1、H_2、H_3)算符在非微扰哈密顿算符$\left(H_0=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+e\Phi\right)$本征态中的平均值。

对于类氢原子，$H_0=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+\frac{Ze^2}{r}$ 的本征值为 $E_n=-I\frac{1}{n^2}$，它仅仅决定于主量子数 n。但相应的本征态右矢可记为 $|nlm\rangle$，即它不仅取决于主量子数 n，而且还取决于角量子数 l，磁量子数 m。可见，在完全忽略相对论效应时，由于纯库仑场具有高度对称性，氢原子能级将具有高度的简并性，简并度为 $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$。

现在来讨论在 H_0 的解的基础上计算 $H'=H_1+H_2+H_3$ 所引起的能级的一级修正($\sim\alpha^2$)。为了这样的计算，需要利用如下关于矢径负指数幂在 H_0 本征态中的平均值公式：

$$\langle nlm|r^{-1}|nlm\rangle=\frac{Z}{a_0n^2}, \tag{5.6.29}$$

$$\langle nlm|r^{-2}|nlm\rangle=\frac{Z^2}{a_0^2n^3(l+1/2)}, \tag{5.6.30}$$

$$\langle nlm|r^{-3}|nlm\rangle=\frac{Z^3}{a_0^3n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)},\qquad(5.6.31)$$

其中 a_0 为玻尔半径。

(1) 由 $H_1=-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}$ 引起的一级修正

$$\Delta E_1=\langle nlm|H_1|nlm\rangle=-\frac{1}{2mc^2}\langle T^2\rangle,$$

其中 $T=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}=H_0+\frac{Ze^2}{r}$，因此

$$\begin{aligned}\Delta E_1&=-\frac{1}{2mc^2}\left\langle\left(H_0+\frac{Ze^2}{r}\right)^2\right\rangle\\&=-\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2+2E_nZe^2\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle+(Ze^2)^2\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle\right]\\&=-E_n\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left[\frac{3}{4}-\frac{n}{\left(l+\frac{1}{2}\right)}\right]\end{aligned}\qquad(5.6.32)$$

(2) 由 $H_2=\xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 引起的一级修正

在我们讨论的情况中

$$\xi(r)=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dU(r)}{dr}\qquad(5.6.33)$$

对于库仑势，$U(r)=-\frac{Ze^2}{r}$，因此有

$$\xi(r)=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{Ze^2}{r^3}$$

我们已经知道，轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 和自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 与 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 都不对易，因此当然也分别地与 H_0+H_2 不对易。但是我们又知道，总角动量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$ 与 H_0+H_2 对易。因此在讨论哈密顿算符中含有 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 耦合项时，应选取 $(H_0+H_2,\ \boldsymbol{L}^2,\ \boldsymbol{J}^2,\ J_z)$ 作为力学量完全集来描写具有四个自由度的电子(三个空间自由度，一个自旋自由度)的运动。

利用下式

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{S}^2), \tag{5.6.34}$$

可将 H_2 明显地用所取力学量完全集中的算符表示。于是 H_2 所引起的能级的一级修正为

$$\Delta E_2=\left\langle nljm_j\left|\frac{1}{2}\xi(r)(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{S}^2)\right|nljm_j\right\rangle$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2}\langle\xi(r)\rangle\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]。 \tag{5.6.35}$$

对于 $l\neq0$，有

$$\Delta E_2=\frac{\hbar^2}{2}\langle\xi(r)\rangle\times\begin{cases} l & \left(j=l+\frac{1}{2}\right), \\ -(l+1) & \left(j=l-\frac{1}{2}\right), \end{cases} \tag{5.6.36}$$

其中 $\xi(r)$ 在 $|nljm_j\rangle$ 中的平均值为

$$\langle\xi(r)\rangle=\frac{Ze^2}{2m^2c^2}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle$$
$$=\frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{Z^3}{n^3a_0^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}。 \tag{5.6.37}$$

将式(5.6.37)代入(5.6.36)，便可得($l\neq0$)

$$\Delta E_2=-E_n\frac{(Z\alpha)^2}{2nl\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\times\begin{cases} l & \left(j=l+\frac{1}{2}\right), \\ -(l+1) & \left(j=l-\frac{1}{2}\right)。 \end{cases} \tag{5.6.38}$$

对于 $l=0$ 的情况，有 $j=s$，因此有 $\Delta E_2=0$。这表明，$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 耦合项对于 s 态电子的能级不引起修正。

(3) 由 $H_3=\frac{\pi\hbar^2Ze^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r})$ 所引起的修正

因为只有 s 态电子的原点波函数不为零，因此这一项仅仅对于 s 态电子($L=0$)能级修正有贡献，且为

$$\Delta E_3=\frac{\pi\hbar^2Ze^2}{2m^2c^2}\langle n00|\delta(\boldsymbol{r})|n00\rangle=\frac{\pi\hbar^2Ze^2}{2m^2c^2}|\psi_{n00}(0)|^2。$$

s 态电子($l=0$)原点零级波函数由量子力学可知,为

$$\psi_{n00}(0)=2\left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2}Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2}$$

于是有

$$\Delta E_2=-E_n\frac{(Z\alpha)^2}{n},\ (l=0)。\qquad (5.6.39)$$

将式(5.6.32),(5.6.38),(5.6.39)相加,我们发现在精确到$(Z\alpha)^2$量级近似下,对于任意l的态来说,类氢原子的能级修正都可表示为

$$\Delta E_{nj}=E_n\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)。\qquad (5.6.40)$$

于是类氢原子的能级在精确到$(Z\alpha)^2E_n$近似下可表示为

$$E_{nj}=E_n\left[1+\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right]。\qquad (5.6.41)$$

由上式可知,在考虑了相对论性修正后氢原子的能级E_{nj}不仅与主量子数n有关,而且还与j有关,但是对l的依赖关系仍然是简并的。在j确定时。$l=j\pm\frac{1}{2}$这两条能级仍然简并。如图5.6.1所示。

在给定n的条件下,精细结构的总宽度由$j_1=n-\frac{1}{2}$和$j_2=\frac{1}{2}$能级的间隔确定:

$$D=\Delta E_{nj_1}-\Delta E_{nj_2}=-E_n(Z\alpha)^2\frac{(n-1)}{n^2}\qquad (5.6.42)$$

此值比无自旋粒子的精细结构总宽度小。

在库仑势场中相对论性电子的狄拉克方程可严格求解,其能级为

$$E_{nj}=mc^2\left[1+\left(\frac{Z\alpha}{n-(j+1/2)+\sqrt{(j+1/2)^2-Z^2\alpha^2}}\right)^2\right]^{-1/2}\qquad (5.6.43)$$

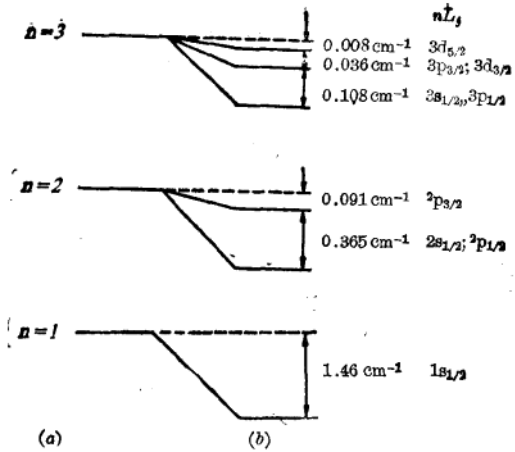

图 5.6.1 氢原子能级的精细结构。

(a) 零级(非相对论性)能量; (b) 相对论性分裂。

注: 由普朗克关系($E=h\nu=hc/\lambda$)可得能量、频率和波数单位之间的转换关系: $1eV=8065.48\,cm^{-1}=2.41797\times10^{14}\,Hz$。

将上式按 $Z\alpha$ 的幂次展开,在$(Z\alpha)^2$近似下便得到式(5.6.41)。$\alpha^2\sim(1/137)^2\sim0.5\times10^{-4}$是很小的值,所以相对论效应引起的能级分裂很小。如图 5.6.1 所示,例如 $2p_{3/2}$ 和 $2s_{1/2}$ 的分裂仅为 $\alpha^2/32\simeq0.365\,cm^{-1}$,其间自发辐射的光子波长为 0.365 cm,落在远红外并接近微波区。兰姆(W. Lamb, R. Retherford, 1947)采用微波技术的实验表明,在图 5.6.1 中仍然简并的 $2s_{1/2}$ 和 $2p_{1/2}$ 之间存在更精细的分裂($\Delta E=2.74\,cm^{-1}$ 或 10.949 GHz)。这种分裂称为"兰姆位移",可用量子电动力学对此作出解释。

§5.7 克莱因-戈登场和狄拉克场的量子化

5.7.1 克莱因-戈登场的量子化

本章§5.2中我们介绍了自旋为零的粒子所满足的相对论性

量子力学方程，即 KG 方程

$$(\partial_\mu\partial^\mu+m^2)\psi(\boldsymbol{x},\ t)=0。\tag{5.7.1}$$

该粒子系统的电荷密度和电流密度为

$$\rho=\frac{ie}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}-\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right),\tag{5.7.2}$$

$$\boldsymbol{j}=\frac{e}{2im}[\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi]。\tag{5.7.3}$$

实验发现，例如自旋为零的 π 介子有三类：π^+，π^-，π^0。我们可以尝试用复标量场($\psi^*\neq\psi$) 描写荷电 π 介子(即 π^- 和 π^+)，用实标量场($\psi^*=\psi$)描写中性 π 介子。

描写 KG 粒子的量子力学波函数 $\psi(\boldsymbol{x},\ t)$是一个经典场量，这个经典场的拉氏密度为

$$\mathscr{L}=\partial_\mu\psi^*\partial^\mu\psi-m^2\psi^*\psi。\tag{5.7.4}$$

与场的广义坐标 ψ 和 ψ^* 相应的正则共轭动量为

$$\begin{aligned}\pi_\psi&=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot\psi}=\dot\psi^*,\\ \pi_{\psi^*}&=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot\psi^*}=\dot\psi。\end{aligned}\tag{5.7.5}$$

于是场的哈密顿量密度为

$$\begin{aligned}\mathscr{H}&=\pi_\psi\dot\psi+\pi_{\psi^*}\dot\psi^*-\mathscr{L}\\ &=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial t}+(\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\psi)+m^2\psi^*\psi。\end{aligned}\tag{5.7.6}$$

场的量子化或二次量子化方法的关键性步骤是，令场的动力学变量 ψ 以及与它相对应的正则共轭动量 $\pi_\psi=\partial\psi^*/\partial t$ 转化为满足如下不对易性关系的算符($\hbar=1$)：

$$\left[\hat\psi(\boldsymbol{x},\ t),\ \frac{\partial\hat\psi^+(\boldsymbol{x},\ t)}{\partial t}\right]=i\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),\tag{5.7.7}$$

$\hat\psi$，$\hat{\dot\psi}^+$，$\hat\psi^+$ 和 $\hat{\dot\psi}$ 之间的其他对易子均等于零。在本节中为区别起见，我们在量子场理论中的算符上方加以脱字号“∧”。

在量子场理论中，式(5.7.6)给出的场的总哈密顿量也将转化为算符：

$$\hat{H}=\int\left[\frac{\partial\hat{\psi}^{+}}{\partial t}\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t}+(\nabla\hat{\psi}^{+})\cdot(\nabla\hat{\psi})+m^{2}\hat{\psi}^{+}\hat{\psi}\right]d\boldsymbol{x}。\quad(5.7.8)$$

为了明显体现出量子场的粒子性，我们将利用 KG 方程的定态平面波解(包括正解和负解，参见式(5.2.28))，并记为

$$\begin{aligned}\varphi_{p+}&=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Ept)},\\ \varphi_{p-}&=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}+Ept)},\end{aligned}\quad(5.7.9)$$

其中 $E_{\boldsymbol{p}}=\sqrt{\boldsymbol{p}^{2}+m^{2}}$，$V$ 为归一化体积。现在将场算符展开为

$$\begin{aligned}\hat{\psi}&=\sum_{\boldsymbol{p}}\sqrt{\frac{1}{2E_{\boldsymbol{p}}V}}(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}e^{-iEpt}+\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}e^{iEpt})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}},\\ \frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t}&=-i\sum_{\boldsymbol{p}}\sqrt{\frac{E_{\boldsymbol{p}}}{2V}}(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}e^{-iEpt}-\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}e^{iEpt})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}。\end{aligned}\quad(5.7.10)$$

利用对易关系(5.7.7)不难证明，粒子数表象中的算符 $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$ 满足如下玻色子算符对易性关系：

$$\begin{aligned}&[\hat{a}_{\boldsymbol{p}},\ \hat{a}_{\boldsymbol{p}'}^{+}]=[\hat{b}_{\boldsymbol{p}},\ \hat{b}_{\boldsymbol{p}'}^{+}]=\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'},\\ &[\hat{a}_{\boldsymbol{p}},\ \hat{a}_{\boldsymbol{p}'}]=[\hat{b}_{\boldsymbol{p}},\ \hat{b}_{\boldsymbol{p}'}]=[\hat{a}_{\boldsymbol{p}},\ \hat{b}_{\boldsymbol{p}'}]=\cdots=0。\end{aligned}\quad(5.7.11)$$

将展开式(5.7.10)代入量子场哈密顿算符式(5.7.8)，可得

$$\hat{H}=\sum_{\boldsymbol{p}}E_{\boldsymbol{p}}(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}+\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{p}}+1)\quad(5.7.12)$$

在量子场理论中，或(5.7.2)和(5.7.3)给出的 KG 场的电荷密度和电流密度也变成算符，如果将展开式(5.7.10)代入场的总电荷算符公式中，可得

$$\begin{aligned}\hat{Q}&=\int\hat{\rho}d\boldsymbol{x}=\frac{ie}{2m}\int\left(\hat{\psi}^{+}\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t}-\frac{\partial\hat{\psi}^{+}}{\partial t}\hat{\psi}\right)d\boldsymbol{x}\\ &=e\sum_{\boldsymbol{p}}(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}-\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{p}})。\end{aligned}\quad(5.7.13)$$

上述结果表明，对于量子化 KG 场来说，可以引进两类粒子数算符：

$$\hat{n}_{\boldsymbol{p}}^{(+)}=\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{p}},\ \hat{n}_{\boldsymbol{p}}^{(-)}=\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{p}},\quad(5.7.14)$$

它们的意义是：$\hat{n}_{\boldsymbol{p}}^{+}$ 是动量为 $\boldsymbol{p}$，电荷为 e 的粒子数算符；$\hat{n}_{\boldsymbol{p}}^{(-)}$ 是动

量为 $\boldsymbol{p}$，电荷为 $-e$ 的粒子数算符。如果将电荷为 e 的 KG 场量子称为粒子(为 π^- 介子)，则电荷为 $-e$ 的量子便称为反粒子(如 π^+ 介子)。粒子和相应的反粒子都是 KG 场的量子，它们的能量均为 $E_p=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$。

对于中性 KG 粒子场，有

$$\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x},t)=\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)。\tag{5.7.15}$$

因此由展开式(5.7.10)可知，两类算符 $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$ 不再是独立的，且有

$$\hat{b}_{\boldsymbol{p}}=\hat{a}_{-\boldsymbol{p}}。\tag{5.7.16}$$

于是，利用完全类似的方法可以建立中性标量场的二次量子化理论。

7.2 电子-正电子场的量子化

现在我们来讨论由狄拉克方程描写的场的量子化问题。狄拉克场的拉氏密度为

$$\mathscr{L}(x)=\bar{\psi}(x)(\gamma^\mu p_\mu-m)\psi(x),\tag{5.7.17}$$

其中 $\bar{\psi}\equiv\psi^+\gamma_0$，$p_\mu=i\partial_\mu=\left(i\dfrac{\partial}{\partial t},\ i\nabla\right)$，式(5.7.17)的正确性可通过如下方式得到验证：将它代入场的拉氏方程[见式(3.3.5)]可得到正确的狄拉克方程：

$$(\gamma^\mu p_\mu-m)\psi=0。\tag{5.7.18}$$

由场的拉氏密度可得到与场量 $\psi(x)$ 相应的正则共轭动量，为

$$\pi_\psi=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}=i\psi^+。\tag{5.7.19}$$

由于式(5.7.17)中不含 $\bar{\psi}$ 关于时间的导数，所以不存在与它相应的正则共轭动量；式(5.7.19)表明 $i\psi^+$ 本身是 ψ 的正则共轭动量。场的哈密顿量密度是

$$\mathscr{H}=\pi_\psi\dot{\psi}-\mathscr{L}=\psi^+(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+\beta m)\psi,\tag{5.7.20}$$

其中 $\boldsymbol{p}=-i\nabla$。在上式最后一步推导中已注意到 γ 矩阵与狄拉克矩阵 $\alpha_i(i=1,2,3)$ 和 β 的关系：$\gamma_0=\beta$，$\gamma^i=\beta\alpha_i$。由式(5.7.20)可知，场的总哈密顿量可表示为如下量子力学或一次量子化理论

中常见的求平均值的公式：

$$H=\int \psi^{+}H_{D}\psi d\boldsymbol{x}, \tag{5.7.21}$$

其中

$$H_{D}=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+m\beta \tag{5.7.22}$$

正是本章 5.4.1 中引进的狄拉克粒子的哈密顿算符，是一次(相对论性)量子化理论中的一个力学量算符。

按照费米子场系统量子化的一般规则，自由狄拉克粒子所对应的量子场的哈密顿算符由式(5.7.21)转化而来，为

$$\hat{H}=\int \hat{\psi}^{+}H_{D}\hat{\psi}d\boldsymbol{x}, \tag{5.7.23}$$

其中 $\hat{\psi}$ 为一列矩阵，有四个分量，是满足如下同时性反对易关系的场算符

$$\begin{aligned}&\{\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\ \hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x}',t)\}=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),\\&\{\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\ \hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)\}=\{\hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x},t),\ \hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x}',t)\}=0。\end{aligned} \tag{5.7.24}$$

为了转化到粒子数表象，我们可将坐标表象中的场算符 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$ 用 H_D 的本征函数正交完全集展开。H_D 的本征函数集[参见式(5.4.44)]现在表示为

$$\varphi_{p\lambda\sigma}=\frac{1}{\sqrt{V}}u_{p\lambda\sigma}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-i\lambda Ept}, \tag{5.7.25}$$

其中本征值 λ 可取 ±1；自旋沿动量方向分量，即螺旋性算符的本征值 σ 可取 $\pm\frac{1}{2}$。上式的解按 λ 的值可分为两组：$\lambda=+1$ 的解 $\varphi_{p,+,\sigma}$ 称为正解；$\lambda=-1$ 的解 $\varphi_{p,-,\sigma}$ 称为负解。式(5.7.25)给出的函数满足如下正交性条件：

$$\int \varphi^{+}_{p\lambda\sigma}\varphi_{p'\lambda'\sigma'}d\boldsymbol{x}=\delta_{pp'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\sigma\sigma'} \tag{5.7.26}$$

现在我们将狄拉克场算符展开为

$$\hat{\psi}=\sum_{p\lambda\sigma}\hat{a}_{p\lambda\sigma}\varphi_{p\lambda\sigma}。 \tag{5.7.27}$$

将此展开式代入场算符的反对易关系(5.7.24)可以发现，$\hat{a}_{p\lambda\sigma}$ 应

满足通常费米子算符的反对易关系。现在按 $\lambda=\pm1$，将 $\hat{a}_{p\lambda\sigma}$ 区分为两组算符：

$$\hat{a}_{p\sigma}\equiv\hat{a}_{p,+,\sigma},\quad \hat{b}^{+}_{p\sigma}\equiv\hat{a}_{-p,-,-\sigma}\ , \tag{5.7.28}$$

于是场算符展开式(5.7.27)可表示为

$$\hat{\psi}=\sum_{p\sigma}(\hat{a}_{p\sigma}\varphi_{p,+,\sigma}+\hat{b}^{+}_{p\sigma}\varphi_{-p,-,-\sigma})。 \tag{5.7.29}$$

可以证明，算符 $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$ 满足如下反对易关系：

$$\begin{aligned}&\{\hat{a}_{p\sigma},\ \hat{a}^{+}_{p'\sigma'}\}=\{\hat{b}_{p\sigma},\ \hat{b}^{+}_{p'\sigma'}\}=\delta_{pp'}\delta_{\sigma\sigma'},\\&\{\hat{a}_{p\sigma},\ \hat{a}_{p'\sigma'}\}=\{\hat{b}_{p\sigma},\ \hat{b}_{p'\sigma'}\}=\{\hat{a}_{p\sigma},\ \hat{b}_{p'\sigma'}\}\\&\qquad=\cdots=0。\end{aligned} \tag{5.7.30}$$

算符 $\hat{a}_{p\sigma}(\hat{a}^{+}_{p\sigma})$ 的作用是湮灭(产生)一个动量为 $\boldsymbol{p}$，自旋沿动量方向分量为 $\hbar\sigma$，$\lambda=1$ 的粒子；算符 $\hat{b}^{+}_{p\sigma}(\hat{b}_{p\sigma})$ 的作用是湮灭(产生)一个动量为 $-\boldsymbol{p}$，自旋沿动量方向分量为 $-\hbar\sigma$，$\lambda=-1$ 的粒子，或产生(湮灭)一个动量为 $\boldsymbol{p}$，自旋沿动量方向分量为 $\hbar\sigma$，$\lambda=1$ 的"反粒子"。例如，若 $\hat{a}_{p\sigma}$ 是关于电子的算符，则 $\hat{b}_{p\sigma}$ 就是关于正电子的算符。粒子和相应的反粒子是同一狄拉克场的量子。

将场算符展开式(5.7.29)代入场的哈密顿算符公式(5.7.23)，并利用正交性条件(5.7.26)和反对易关系(5.7.30)，可将量子化狄拉克场的哈密顿算符表示为

$$\hat{H}=\sum_{p\sigma}E_{p}(\hat{a}^{+}_{p\sigma}\hat{a}_{p\sigma}+\hat{b}^{+}_{p\sigma}\hat{b}_{p\sigma})+\varepsilon_{0}, \tag{5.7.31}$$

其中 $\varepsilon_{0}=-\sum_{p\sigma}E_{p}=-2\sum_{p}E_{p}$ 是真空态能量或零点能。利用§1.2中介绍的在粒子数表象(或能量表象)中求解谐振子系统的方法可知，若用 $|0\rangle$ 表示狄拉克场真空态右矢，则量子场的粒子和反粒子消灭算符满足下式定义：

$$\hat{a}_{p\sigma}|0\rangle=0,\ \hat{b}_{p\sigma}|0\rangle=0。 \tag{5.7.32}$$

狄拉克场的动量算符和电荷算符在粒子数表象中可表示为

$$\hat{\boldsymbol{P}}=\int\hat{\psi}^{+}(-i\hbar\nabla\hat{\psi})d\boldsymbol{x}=\sum_{p\sigma}\boldsymbol{p}(\hat{a}^{+}_{p\sigma}\hat{a}_{p\sigma}+\hat{b}^{+}_{p\sigma}\hat{b}_{p\sigma}), \tag{5.7.33}$$

$$\hat{Q}=e\int\hat{\psi}^{+}\hat{\psi}d\boldsymbol{x}=e\sum_{p\sigma}(\hat{a}^{+}_{p\sigma}\hat{a}_{p\sigma}-\hat{b}^{+}_{p\sigma}\hat{b}_{p\sigma})。 \tag{5.7.34}$$

上述结果表明，狄拉克场的能量、动量、电荷是它的一份份激发态粒子(包括电子和正电子)的能量、动量和电荷之代数和。算符 $\hat{n}_{p\sigma}^{(+)} \equiv \hat{a}_{p\sigma}^{+}\hat{a}_{p\sigma}$ 的本征值为 0 和 1，它是动量为 $\boldsymbol{p}$，电荷为 e 的粒子数算符；$\hat{n}_{p\sigma}^{(-)} \equiv \hat{b}_{p\sigma}^{+}\hat{b}_{p\sigma}$ 的本征值也是 0 和 1，它是动量为 $\boldsymbol{p}$，电荷为 $-e$ 的反粒子数算符。

建立在相对论性量子力学(KG 方程，狄拉克方程，以及麦克斯韦方程)基础上的二次量子化理论(常称为量子场论)与建立在非相对论性量子力学(薛定谔方程)基础上的二次量子化理论在观念、方法和结果上完全相似。不过应当指出，作为完整的理论，显然应当是相对论性二次量子化理论或量子场理论。而且也只有在相对论性二次量子化理论中，才出现反粒子的概念。

量子场论既能反映粒子的波动性，又能反映场的粒子性。自然界客体的波粒二象性已被迄今的大量直接和简接的实验事实所证实。量子场论能够反映这个基本事实，因此它能描写自然界，尤其是涉及到高能(高速)微观世界中的物理现象，并能对非深度微观现象(如固体和凝聚态物理、原子物理等)中的许多精细部分作出解释。

习　题

5-1　与电磁场张量 $F_{\alpha\beta}$ 相对偶的一个张量定义为 $G^{\mu\nu}=\frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta}F_{\alpha\beta}$，其中 $\varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta}$ 为四阶全反对称单位张量。试导出对偶张量 $G^{\mu\nu}$ 各分量的形式，并证明由电磁场强度所构成的另一个二次型不变量是 $F_{\mu\nu}G^{\mu\nu}=-4\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{B}$。

5-2　试导出式(5.2.46)和(5.2.47)。

5-3　试证明式(5.2.75)。

5-4　设 $H=B_1\sigma_1+B_3\sigma_3$，试找出一幺正变换 $U_F=e^{iS}$，从而使变换后的哈密顿算符为偶算符，即仅包含 1 和 σ_3 的项。

5-5　试导出电磁场中 KG 粒子的电荷和电流密度表式(5.3.6)。

5-6　证明式(5.4.28)。

5-7　狄拉克矩阵 α 和 β 的常用表示有·

(1) Pauli(或标准)表示:

$$\boldsymbol{\alpha}=\begin{bmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{bmatrix},\qquad \beta=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix};$$

(2) Kramer(或旋量)表示:

$$\boldsymbol{\alpha}^{(k)}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & -\boldsymbol{\sigma}\end{bmatrix},\quad \beta^{(k)}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix};$$

(3) Majorana 表示:

$$\alpha_1^{(M)}=\begin{bmatrix}\sigma_1 & 0\\ 0 & -\sigma_1\end{bmatrix},\quad \alpha_2^{(M)}=\begin{bmatrix}0 & -1\\ -1 & 0\end{bmatrix},$$

$$\alpha_3^{(M)}=\begin{bmatrix}\sigma_3 & 0\\ 0 & -\sigma_3\end{bmatrix},\ \beta^{(M)}=\begin{bmatrix}\sigma_2 & 0\\ 0 & -\sigma_2\end{bmatrix}.$$

试验证在这些表示下狄拉克矩阵均满足厄米条件及基本对易关系(5.4.10);并找出它们之间的幺正变换矩阵。

5-8 试证明

$$e^{iS}\equiv e^{\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}}=\cos|\boldsymbol{p}|+\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{n}\sin|\boldsymbol{p}|,$$

其中 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{p}/|\boldsymbol{p}|$, $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 为狄拉克矩阵。

5-9 引进一幺正变换 e^{iS}, 其中 $S=-i\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}\theta$, 这里 $\boldsymbol{\alpha}$, β 为狄拉克矩阵, θ 为待定参量。试证明,

(1) 只要选择适当的参量 θ, 便可使变换后的狄拉克哈密顿算符具有对角化形式:

$$H_D^{(F)}\equiv e^{iS}H_D e^{-iS}=\beta\sqrt{p^2+m^2};$$

(2) 变换后的狄拉克波函数具有如下形式:

$$\psi^{(F)}\equiv e^{iS}\psi=\psi_+^{(F)}+\psi_-^{(F)},$$

其中 $\psi_+^{(F)}$ 和 $\psi_-^{(F)}$ 分别是 $H_D^{(F)}$ 的具有本征值为 $\pm\sqrt{p^2+m^2}$ 的本征态, 且 $\psi_+^{(F)}$ 的第三、四分量为零; $\psi_-^{(F)}$ 的第一、二分量为零。此结果表明, 在新表象 (Foldy-Wouthuysen 表象) 中狄拉克旋量的大分量和小分量完全退耦。

5-10 在狄拉克理论中证明, 粒子坐标随时间改变表式中的 Zitterbewegun 项起源于正负态的相干效应, 即证明式(5.4.63)中的因子 $\boldsymbol{\alpha}-\frac{\boldsymbol{p}}{H_D}$ 仅仅在正负态之间的矩阵元才不为零。[可采用两种方法: (1) 引进投影算符 $\Gamma_\pm=\frac{1}{2}\left(1\pm\frac{H_D}{H_D}\right)$; (2) 一般地考察算符 $\boldsymbol{\alpha}-\frac{\boldsymbol{p}}{H_D}$ 在波包态 $\int d\boldsymbol{p}\, a_{\boldsymbol{p}\lambda\sigma}\psi_{\boldsymbol{p}\lambda\sigma}$ 中的平均值, 其中 $a_{\boldsymbol{p}\lambda\sigma}$ 为叠加系数。]

5-11 证明下列关于 γ 矩阵的公式：

$$\gamma_\mu\gamma^\mu=-2,\ \gamma_\mu\gamma_\nu\gamma^\mu=-2\gamma_\nu,$$

$$\gamma_\mu\gamma_\nu\gamma_\lambda\gamma^\mu=4g_{\nu\lambda},\ \gamma_\mu\gamma_\nu\gamma_\lambda\gamma_\rho\gamma^\mu=-2\gamma_\rho\gamma_\lambda\gamma_\nu。$$

5-12 试证明式(5.5.34)和(5.5.35)。

5-13 证明狄拉克电子的自旋算符[见式(5.4.17)]可表示为如下几种形式[与式(5.5.56)]比较：

$$\Sigma=\gamma_5\alpha=\gamma_5\gamma^0\gamma=\frac{1}{2i}\alpha\times\alpha。$$

5-14 写出狄拉克四分量定态波函数在电子静系中的形式，然后利用旋量的洛伦兹变换式(5.5.58)导出电子沿 z 轴方向运动时其定态波函数的形式。[注：结果应当与式(5.4.45)～(5.4.48)一致。]

5-15 能量为 $E=E_p$ 的相对论性电子沿 x 轴方向运动时遇到如下阶跃势：

$$V(x)=\begin{cases}0 & x<0\\ V & x\geqslant 0\end{cases}$$

试计算反射系数和透射系数。(注：这是一个二维问题。)

5-16 试求在下列情况下，上题中的反射系数 R 和透射系数 T：(i) $V=0$；(ii) $0<V<E_p-E_0$；(iii) $V=E_p-E_0$；(iv) $E_p-E_0<V<E_p+E_0$；(v) $V=E_p+E_0$；(vi) $E_p+E_0<V<\infty$；(vii) $V=\infty$，其中 $E_0=m$ ($c=1$) 为电子静能。将所得结果与从薛定谔方程得到的非相对论性结果比较。

5-17 求狄拉克电子在均匀磁场中精确的能量本征值和本征函数。